



HAL
open science

Magnétisme orbital et aspects géométriques de la théorie des bandes

Arnaud Raoux

► **To cite this version:**

Arnaud Raoux. Magnétisme orbital et aspects géométriques de la théorie des bandes. Systèmes mésoscopiques et effet Hall quantique [cond-mat.mes-hall]. Université Paris Saclay (COMUE), 2017. Français. NNT : 2017SACLS041 . tel-01480954

HAL Id: tel-01480954

<https://theses.hal.science/tel-01480954v1>

Submitted on 2 Mar 2017

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.

NNT : 2017SACLS041

THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY
PRÉPARÉE À L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD

École doctorale n°564
Physique en Île-de-France
Spécialité de doctorat : Physique
par

M. ARNAUD RAOUX

Magnétisme orbital et aspects géométriques de la théorie des bandes

Thèse présentée et soutenue à Orsay, le 9 février 2017.

Composition du Jury :

M.	BENOÎT DOUÇOT	Directeur de recherche Université Pierre et Marie Curie	(Président du jury)
Mme	HÉLÈNE BOUCHIAT	Directrice de recherche Université Paris-Sud	(Examinatrice)
M.	PHILIPPE LECHEMINANT	Professeur des universités Université de Cergy-Pontoise	(Examineur)
M.	NATHAN GOLDMAN	Professeur Université libre de Bruxelles	(Rapporteur)
M.	DAVID CARPENTIER	Directeur de recherche École normale supérieure de Lyon	(Rapporteur)
M.	GILLES MONTAMBAUX	Directeur de recherche Université Paris-Sud	(Directeur de thèse)
M.	FRÉDÉRIC PIÉCHON	Chargé de recherche Université Paris-Sud	(Invité)
M.	JEAN-NOËL FUCHS	Chargé de recherche Université Pierre et Marie Curie	(Invité)

Remerciements

Je commence par remercier chaleureusement le laboratoire de physique des solides pour m'avoir accueilli pendant quatre années, et ce sentiment est je pense induit par la bienveillance de l'équipe administrative dont Sabine, Marie-France, Sophie, Véronique, et Christophe font partie. C'est au détour d'un couloir que l'on réalise la chance d'avoir un laboratoire aussi diversifié, et je remercie Frédéric R., André et Julien pour des discussions qui m'ont permis de dépasser mon sujet de recherche, ainsi que Sophie et Hélène de l'équipe mésoscopique qui ont pris le temps d'expliquer à un théoricien novice en supraconductivité, comment fonctionnent leurs expériences, leurs méthodes de détection, à quoi pouvait servir un SQUID dans la mesure d'une aimantation, etc. J'ai hâte de voir leurs futurs résultats sur le magnétisme orbital.

Je remercie doublement Hélène puisqu'elle a accepté de faire partie de mon jury de thèse, avec Benoît et Philippe ainsi que les courageux Nathan et David qui ont accepté le difficile rôle de rapporteur et en raccourcissant de fait leurs vacances de Noël.

Je remercie les thésards du labo pour la (trop?) bonne ambiance et l'animation qui y règne, en particulier Anaïs, Stéphanie, Émilie, Sergueï, Manali, Frédéric, sans oublier ceux qui sont déjà partis vers de nouvelles aventures, Raphaëlle, Sébastien et Nicolas. Une pensée également pour Mark et ses cours de cuisine du lundi midi, dont la jovialité illumine le groupe théo, et qui ne manquera pas de double-tamponner mon manuscrit pendant le pot (15min plus tôt le jeudi).

J'ai eu le luxe d'avoir non pas un, ni deux, mais trois directeurs de thèse! Je vous remercie sincèrement tous les trois, je pense avoir beaucoup appris à vos côtés; sur le magnétisme orbital, sur la physique du solide, sur la physique statistique, sur les mille et une façons de faire léviter un objet (ma carrière de prestidigitateur est toute tracée), sur la physique en général. J'essaierai autant que possible de mettre en application vos enseignements, que ce soit la curiosité de Gilles, la persévérance de Frédéric, ou la réflexion constante de Jean-Noël.

L'année d'agrégation qui a précédé la thèse n'a pas été évidente, mais c'est grâce à elle que j'ai pu mieux connaître Guillaume, Emmanuel, Manuel et Paul, qui m'ont suivi pendant ces années de recherche. Je remercie en particulier Guillaume, qui est devenu mon binôme attitré d'enseignement, et sans qui je ne saurais toujours pas à l'heure actuelle ce qu'est un Wollaston.

Durant ces quatre années, j'ai passé du temps à Montrouge pour mon enseignement, et je remercie Nicolas, Anne-Sophie pour leur merveilleux accueil à l'étage des chimistes. Merci à Éric pour l'aide qu'il m'aura fourni pour les manips de coin de table que j'ai montées (ou du moins tentées).

Montrouge est un lieu où on peut parler physique classique, mais aussi physique actuelle. C'est un vrai plaisir de travailler avec des scientifiques aussi accomplis et curieux que Jean-Michel, Jean ou Emmanuel, véritables puits de connaissances, d'ordres de grandeur et d'anecdotes. Je tiens également à remercier Frédéric avec qui j'ai entraîné durant trois années l'équipe de l'ENS au tournoi de physique, et dont l'intuition physique ne cesse de m'impressionner.

Au-delà de la partie académique, j'ai dédié une partie de mon temps à des actions de la société française de physique : rencontres de jeunes physiciens, French Physicists' Tournament, la mise en place de la nouvelle revue *Emergent Scientist*, etc. et j'ai à chaque fois rencontré des physiciens passionnés, avec qui l'organisation de ces projets a été un plaisir : Clément, Sarah, Ileyk, Cyrille, Charlie, Erwan, et bien sûr Maxime. Sans oublier l'instigateur de plusieurs de ces projets : Daniel, physicien et geek passionné, avec qui j'espère partager encore de nombreuses idées.

Les soirées n'ont pas toutes été studieuses, et les orgas du club œno y sont pour quelque chose ! Merci à Antoine, Adrien, Tony, Florian, Judith, et avec une pensée particulière pour Julia (aux délicieuses gougères) et David (aux blagues qui passent très bien après un excellent Pichon-Baron 1988).

Merci également au C6 d'être resté de fidèles amis. Non Jack, il n'y a pas d'arnaque dans la thèse, c'est promis. Quant à Catherine et Silvain on arrivera probablement à prendre un thé bientôt ! Une pensée particulière pour les trois (nouveaux) profs Nicolas, Delphine et Julien.

Bien sûr, détour obligatoire par la Triade. Notre amitié grandit chaque année qui passe, et c'est toujours un plaisir de vous retrouver autour d'un indien ou d'un jap. Merci à Laurent, Maud, Audrey, Lucie, Raphaël, Mathieu pour votre soutien et bonne humeur ; merci à Constance, qui parmi pleins d'autres choses s'assure que nous puissions partir en vacances chaque année ! Je suis très heureux qu'Erwan ait accepté le rôle difficile qui va lui incomber le 1er juillet, et je t'en remercie. Enfin, Clément, j'ai envie de te dire *Amitus fluctuat quid meliora*. Ça ne veut rien dire, mais c'est ce que j'ai trouvé de mieux pour te montrer ma reconnaissance.

Je remercie sincèrement ma famille, et en particulier mes parents Guy et Rosanna pour l'aide et le soutien qu'ils m'ont apporté durant mes longues années d'étude. Ils ont toujours su être à mes côtés dans les moments importants, et me soutenir lorsque le besoin se faisait sentir. Merci à Guillaume, en particulier pour l'organisation des quasi-légendaires *Francis*. Je suis très heureux que tu te plaises dans ton nouveau job, et on discutera LED ou transfert thermique quand tu veux !

Cela fait six ans que nous nous sommes rencontrés Léa et moi. Ensemble, nous avons traversé l'Atlantique et l'Agreg, nous avons profité de la thèse pour écumer les opéras, les concerts, nous avons adopté Waffle, Spathi, et nous allons partir ensemble pour un fantastique périple en Amérique du sud. Tous les jours, je me félicite de ce 20 décembre 2015, et il m'est impossible d'imaginer ce qu'auraient été ces six années sans toi. Merci pour ton soutien pendant cette dernière ligne droite ; si la page de la thèse va se tourner, j'ai hâte d'en entamer de nouvelles avec toi.

Table des matières

Introduction	ix
1 Magnétisme localisé et magnétisme itinérant d'électrons libres	1
1.1 Définitions et cadre d'étude	1
1.2 Le magnétisme : propriété quantique	3
1.3 Magnétisme localisé	5
1.4 Magnétisme itinérant d'électrons libres	8
2 Introduction à la théorie géométrique des bandes	15
2.1 Théorème de Bloch et bandes d'énergies	15
2.2 Approximation de liaisons fortes	18
2.3 Théorie géométrique des bandes	22
2.4 Symétries discrètes	29
3 Magnétisme dans un modèle de liaisons fortes	33
3.1 Approche à la <i>Peierls</i> du magnétisme dans l'approximation de liaisons fortes	33
3.2 Limites de la substitution de Peierls	36
3.3 Calcul de la susceptibilité <i>via</i> le papillon de Hofstadter	38
3.4 Règle de somme pour un hamiltonien de liaisons fortes	45
4 État de l'art du magnétisme orbital	49
4.1 Historique des travaux théoriques concernant la susceptibilité orbitale	49
4.2 Approches expérimentales du magnétisme orbital	52
5 Formule de Peierls et modèles à une bande	59
5.1 Dérivation de la formule de Peierls	59
5.2 Application au réseau carré	62
5.3 Existence du paramagnétisme orbital	64
5.4 Commentaires et limites de la susceptibilité de Peierls	66
5.5 Lien avec la conductivité de Hall σ_{xy} à une bande	67
5.6 Comparaison avec les formules de susceptibilité postérieures aux travaux de Peierls	68
6 Théorie de perturbation invariante de jauge	73
6.1 Hamiltonien et phases	74
6.2 Théorie de perturbation	74

TABLE DES MATIÈRES

6.3	Définitions et propriétés	76
6.4	Aimantation spontanée	77
6.5	Susceptibilité orbitale	78
7	Magnétisme orbital des modèles à deux bandes	83
7.1	Position du problème	83
7.2	Susceptibilité orbitale géométrique à deux bandes	84
7.3	Applications à des modèles avec symétrie particule-trou	86
7.4	Conclusions sur les modèles à symétrie particule-trou	107
7.5	Cas des systèmes à bandes plates	108
8	Systèmes à trois bandes	121
8.1	Modèle \mathcal{T}_3	122
8.2	Généralisation au modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$	126
	Conclusion	133
A	Formules d'intégration de la fonction de Fermi	135
B	Expression de l'aimantation orbitale	137
B.1	Position du problème	137
B.2	Calcul de la trace	138
C	Dérivation de la formule à 2 bandes	139
C.1	Quelques éléments de matrice	139
C.2	Dérivation de la formule géométrique à deux bandes	140
C.3	Expressions explicites des contributions dans la susceptibilité à deux bandes	141
D	Magnétisme semi-classique et effets géométriques	143
D.1	Court historique des approches semi-classiques	143
D.2	Définitions	144
D.3	Énergie d'un paquet d'ondes dans un champ électromagnétique	144
D.4	Lagrangien effectif du paquet d'ondes	145
D.5	Équations du mouvement semi-classiques à l'ordre 1	146
D.6	Densité d'états effective et aimantation spontanée	147
D.7	Approche semi-classique de la susceptibilité orbitale	147

Table des figures

1.1	Spectre et niveaux de Landau d'électrons non-relativistes	9
1.2	Spectre et niveaux de Landau d'électrons de Dirac	12
3.1	Schéma et spectre du modèle ppv à une bande sur réseau carré	39
3.2	Papillon de Hofstadter du modèle ppv à une bande sur réseau carré	42
3.3	Susceptibilité numérique du modèle ppv à une bande sur réseau carré	44
4.1	Lévitiation d'un morceau de graphite	52
4.2	Susceptibilités magnétiques massiques de formes allotropiques du graphite	54
4.3	Aimantation du graphène en fonction du champ magnétique	56
5.1	Densité d'états du modèle à une bande sur réseau carré	63
5.2	Susceptibilité orbitale du modèle à une bande sur réseau carré	64
5.3	Paramagnétisme orbital à un point selle	65
5.4	Corrections à la susceptibilité orbitale <i>via</i> la substitution de Peierls	67
5.5	Réseau et spectre du modèle à une bande sur réseau triangulaire	71
5.6	Susceptibilité orbitale du modèle à une bande sur réseau triangulaire	72
6.1	Définitions des phases de la théorie de perturbation	74
7.1	Réseau de briques et spectre du modèle à deux bandes sur réseau carré	87
7.2	Susceptibilité orbitale de modèles sur réseau de briques	88
7.3	Tenseur métrique et courbure de Berry du réseau de briques	90
7.4	Réseau nid d'abeille	91
7.5	Spectres du graphène et du nitrure de bore	92
7.6	Susceptibilité orbitale du graphène	94
7.7	Évolution de la susceptibilité orbitale du graphène à potentiel chimique nul	95
7.8	Répartition du spectre en niveaux de Landau du graphène	97
7.9	Papillon de Hofstadter-Rammal du graphène	98
7.10	Susceptibilité orbitale du nitrure de bore	101
7.11	Susceptibilité de Fukuyama pour le graphène	102
7.12	Susceptibilité orbitale d'électrons semi-Dirac	103
7.13	Spectres d'électrons semi-Dirac	104
7.14	Susceptibilité orbitale d'un modèle simulant le graphène bicouche	106
7.15	Réseau carré décoré et spectre du modèle à deux bandes sur réseau échiquier	110

TABLE DES FIGURES

7.16	Susceptibilité orbitale du modèle à deux bandes sur réseau échiquier	112
7.17	Papillon de Hofstadter du modèle deux bandes sur réseau échiquier	113
7.18	Zoom sur le papillon de Hofstadter près du champ magnétique nul	114
7.19	Réseau et spectre du modèle de Tasaki	116
7.20	Susceptibilité orbitale du modèle de Tasaki	117
7.21	Spectre du modèle sur réseau nid d'abeille avec bande plate	118
7.22	Susceptibilité orbitale du modèle à bande plate sur réseau nid d'abeille	119
8.1	Réseau et spectre du modèle \mathcal{T}_3	122
8.2	Papillon de Hofstadter du modèle \mathcal{T}_3	125
8.3	Susceptibilité orbitale du modèle \mathcal{T}_3 obtenue par méthode numérique	126
8.4	Susceptibilité orbitale du $\alpha - \mathcal{T}_3$	128
8.5	Évolution des niveaux de Landau du réseau $\alpha - \mathcal{T}_3$ en fonction de α	130
8.6	Répartition des états en niveaux de Landau du modèle \mathcal{T}_3	131
D.1	Susceptibilité de Gao et Niu du nitrure de bore	152

Introduction

If the electrons move in a periodic potential [...], the analysis becomes quite complicated, but again results in a diamagnetic susceptibility of the same order of magnitude as the paramagnetic [Pauli] susceptibility.

Voici une citation du célèbre « Ashcroft et Mermin » [6], l'un des livres de référence de la physique des solides. Cet ouvrage fut l'un des premiers à réaliser le tour de force de présenter un grand nombre d'aspects de la physique des solides, chacun étant traité avec profondeur. Cependant, si l'on devait résumer en quelques mots les travaux de cette thèse, on pourrait dire qu'il s'agit de montrer à quel point le magnétisme orbital dans les cristaux est plus riche que ce que les auteurs peuvent le laisser penser dans cette citation. Avant de détailler les surprises que celui-ci recèle, faisons un détour par la notion de magnétisme en général et l'histoire de la théorie des bandes des cristaux.

L'étude du magnétisme sous toutes ses formes est un sujet ancien dont la compréhension progressive a contribué à l'émergence de plusieurs théories considérées comme des piliers de la physique à l'heure actuelle. La compréhension à l'échelle macroscopique du magnétisme des aimants a débouché sur l'unification de l'électricité et du magnétisme au XIX^e siècle résultant en les équations de Maxwell; puis la recherche d'une interprétation microscopique a fortement contribué à l'apparition d'une nouvelle théorie capable de décrire les phénomènes atomiques et dépassant la mécanique classique; enfin, la compréhension de l'origine du moment cinétique propre (le *spin*) a nécessité la combinaison de la mécanique quantique et de la relativité restreinte au début du XX^e siècle à travers l'équation de Dirac. Si le magnétisme a mis du temps à être appréhendé de façon globale, c'est probablement parce qu'il en existe de nombreuses manifestations, provenant de sources microscopiques différentes.

Une première manifestation est associée aux noms de Curie, Langevin et Brillouin, c'est le magnétisme localisé : des moments magnétiques indépendants réagissent de façon paramagnétique à l'excitation extérieure d'un champ magnétique. Cet aspect a été compris à la fin du XIX^e siècle, et a été complété par la théorie de Langevin du diamagnétisme d'atomes isolés (également dénommée magnétisme de Larmor) qui explique la présence d'une faible contribution négative supplémentaire dans la susceptibilité, indépendante de la température (contrairement au paramagnétisme qui suit la loi de Curie).

Le développement de la théorie quantique des solides notamment par Bloch pose de nouvelles questions sur le magnétisme, en particulier sur la possibilité d'un magnétisme itinérant produit par les électrons de conduction d'un métal. [65] Pauli montra en 1927 que l'existence du spin et le couplage Zeeman avec le champ magnétique impliquaient une réponse paramagnétique des électrons itinérants au niveau de Fermi, que l'on appelle maintenant *paramagnétisme de Pauli*. En ajoutant

INTRODUCTION

le magnétisme des électrons de cœur, sa formule permettait d'expliquer les susceptibilités mesurées du rubidium et du césium, et sous-estimait étonnamment la réponse paramagnétique d'alcalins (maintenant expliquée par des effets d'interactions). Seuls les résultats sur le fort diamagnétisme du bismuth et de l'antimoine pouvaient suggérer l'existence d'une contribution diamagnétique au magnétisme itinérant.

En 1930, Landau [78] calcula les niveaux d'énergie de particules libres placées dans un champ magnétique, qui portent maintenant son nom. Les niveaux de Landau constituent le pendant quantique des orbites circulaires d'électrons classiques dans un champ magnétique dites *orbites cyclotrons*. Si la description semi-classique d'orbites circulaires reste valide, une hypothèse fondamentale apparaît : l'électron étant confiné sur une orbite fermée, les niveaux accessibles sont quantifiés, et l'état fondamental a une énergie strictement positive. Alors que le diamagnétisme ne peut se comprendre en mécanique classique car la force de Lorentz ne travaille pas, cet argument montre que l'origine du magnétisme est dans l'existence d'une énergie minimale strictement positive sous champ magnétique liée au confinement des électrons dans des états localisés. À partir de ces niveaux, Landau définit deux régimes distincts en comparant l'énergie thermique $k_B T$ et l'énergie magnétique $\epsilon_B = \hbar \omega_c$ où $\omega_c \propto B$ est la pulsation cyclotron :

- (i) $\epsilon_B \ll k_B T$: la grande énergie thermique permet aux électrons de passer facilement d'un niveau de Landau à l'autre. Lorsque le potentiel chimique μ traverse l'énergie d'un niveau de Landau, toutes les grandeurs physiques évoluent continûment avec μ . Dans ce régime correspondant à la théorie de perturbation, Landau met en avant une contribution purement orbitale pour la susceptibilité itinérante et qui vaut (dans le cas d'électrons libres) $-1/3$ de la susceptibilité de Pauli. C'est le *diamagnétisme de Landau*.
- (ii) $\epsilon_B \gg k_B T$: dans ce cas, la traversée de l'énergie d'un niveau de Landau par le potentiel chimique est spéciale : la conductivité augmente lorsque μ est dans le voisinage direct de l'énergie d'un niveau de Landau. Landau prévoit dans ce régime un effet auquel lui-même ne croît pas [65] : les oscillations de de Haas–van Alphen. Ces oscillations quantiques de grandeurs thermodynamiques (telles que l'aimantation) ont été mises en évidence sans connexion avec le résultat théorique de Landau la même année [25].

La découverte de Landau a ouvert la voie à l'étude de nouveaux phénomènes dont l'effet Hall quantique entier et fractionnaire dans le régime dominé par l'énergie magnétique.

Ces deux sources du magnétisme (orbitale et de spin) peuvent interagir pour donner une réponse croisée, appelée *couplage spin-orbite*. Comme celles-ci, le couplage spin-orbite a des effets localisés (structure hyperfine de l'atome par exemple) et itinérants (couplage Rashba, couplage spin-orbite intrinsèque, etc.). Il suscite une forte attention dans la recherche de nouvelles phases de la matière : les isolants topologiques ont récemment été mis en évidence grâce à un fort couplage spin-orbite. Il a de plus relancé la recherche de particules initialement introduites en physique des hautes énergies : les fermions de Majorana.

Dans notre exposé, nous ne considérerons pas ce couplage spin-orbite (qui est d'ailleurs négligeable dans le graphène, système que nous considérerons avec une attention particulière). Dans cette approximation, la susceptibilité magnétique totale s'écrit simplement comme la somme d'une contribution orbitale et d'une contribution de spin. De plus, comme nous nous intéressons à l'effet du potentiel périodique du cristal sur la susceptibilité magnétique, tous les effets localisés ne seront pas traités explicitement. Enfin, la contribution de spin étant facilement calculée à partir de

la susceptibilité de Pauli¹, nous la mettrons de côté, et nous considérerons des électrons sans spin dans l'ensemble du manuscrit.

À partir de la théorie de Bloch centrée sur la notion de relation de dispersion E_{nk} , Peierls comprit que le résultat de Landau était forcément restreint soit aux électrons libres, soit aux électrons presque libres où l'effet du réseau est essentiellement de leur associer une masse effective liée à la courbure du potentiel périodique. En 1933, il développa une théorie pour un modèle cristallin à une bande dans l'approximation des liaisons fortes, prenant en compte l'intégralité de la relation de dispersion. [114] Son résultat, fortement sous-évalué à son époque, met en avant des résultats très surprenants : la susceptibilité orbitale dépend d'une fonction des dérivées de la relation de dispersion, prise au niveau de Fermi. En particulier, cette formule est compatible avec une susceptibilité orbitale qui change de signe, et devient paramagnétique, phénomène jamais évoqué dans la littérature jusque-là !

Un demi-siècle après les travaux fondateurs de Bloch, la théorie des bandes a connu dans les années 80 une renaissance basée sur le concept de géométrie. Le travail théorique pionnier de Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs [147], puis ceux de Avron [7], Thouless [146], Berry [14] et Simon [135] mettent sur le devant de la scène scientifique une théorie géométrique des bandes : il n'y a pas que la relation de dispersion E_{nk} qui importe, les fonctions propres $u_{nk}(r)$ contiennent également une information physique mesurable. Apparaissent alors les notions de tenseur métrique, courbure, connexion et phase de Berry, déjà anticipées par Blount [16] mais sans donner d'interprétation géométrique. L'effet de projeter le hamiltonien sur une bande précise n'est pas une opération anodine, et nous verrons par exemple que la réponse magnétique orbitale d'un modèle de cristal à plusieurs bandes n'est pas la somme des réponses de chacune des bandes ; à l'inverse de la réponse de spin qui ne dépend que de la densité d'états à champ nul, et s'écrit donc comme la somme des susceptibilités de chaque bande.

Avec la géométrie des bandes (comprendre géométrie différentielle sur le fibré de Bloch), apparaît aussi la notion d'invariant topologique dont le nombre de Chern. Cette approche a permis de réinterpréter des résultats expérimentaux comme l'effet Hall quantique ou de reformuler des grandeurs physiques comme l'aimantation spontanée d'un cristal, et a motivé des recherches théoriques et expérimentales qui ont débouché sur la découverte des isolants topologiques. [12, 68, 71]

Dans ce manuscrit, nous nous concentrons sur les aspects géométriques, c'est-à-dire l'influence du couplage entre bandes, contrôlé par des quantités géométriques (courbure de Berry, tenseur métrique). En l'absence de champ magnétique, nous ne considérerons que des phases non-topologiques (*i.e.* de nombre de Chern nul), situation déjà riche. Dans le CHAP. 3, nous présenterons une méthode numérique originale pour obtenir la susceptibilité orbitale, utilisant le papillon de Hofstadter et c'est à cette seule occasion qu'apparaîtra la topologie : les bandes magnétiques peuvent posséder des nombres de Chern non nuls. C'est d'ailleurs le papillon de Hofstadter qui a établi historiquement le lien entre effet Hall quantique et topologie.

Malgré toutes les hypothèses déjà évoquées (électrons sans spin et modèle de liaisons fortes) auxquelles on peut rajouter l'absence d'interaction coulombienne et de désordre, l'étude du magnétisme orbital cristallin dévoile un certain nombre de résultats surprenants dus à la structure de bandes et au couplage interbandes. Mais revenons à la citation initiale : en quoi Ashcroft et Mermin ont-ils pu sous-estimer l'intérêt du magnétisme orbital cristallin ?

1. Dans le cas d'un cristal, cette susceptibilité reste proportionnelle à la densité d'états à champ nul.

INTRODUCTION

- Tout d'abord, nous remonterons que le magnétisme orbital n'est pas nécessairement diamagnétique, et qu'il existe du paramagnétisme orbital (CHAP. 5). C'est un effet spectaculaire, déjà connu (ou deviné) par Peierls en 1933. Après avoir rappelé la démonstration de sa susceptibilité orbitale pour un modèle à une bande, nous mettrons en évidence ce paramagnétisme avec un modèle très simple à une bande sur réseau carré dans le CHAP. 5. Mieux, le paramagnétisme peut devenir très fort à très basse température près d'une singularité de Van Hove de la densité d'états. D'ailleurs, nous montrerons que la susceptibilité doit *nécessairement* devenir positive dans tout modèle de liaisons fortes, parce que celle-ci doit respecter une règle de somme contraignante (CHAP. 3).
- En faisant référence au diamagnétisme, et donc à la susceptibilité de Landau, Ashcroft et Mermin sous-entendent que le magnétisme orbital est une propriété ne dépendant que du niveau de Fermi, comme la susceptibilité de Pauli. Or dans le CHAP. 7, nous mettrons en évidence qu'il a également des contributions importantes de la mer de Fermi, c'est-à-dire de tous les électrons des bandes remplies —comme la comparaison avec le diamagnétisme d'un atome dont les couches sont remplies pourrait le laisser penser d'ailleurs.
- Contrairement au paramagnétisme de Pauli, il ne suffit pas de sommer les contributions de chacune des bandes pour obtenir la réponse totale d'un cristal. Des effets interbandes sont présents, et peuvent même dominer la réponse magnétique. Cette notion, centrale dans le manuscrit, sera démontrée de façon flagrante sur le cas du graphène (CHAP. 7) qui présente une susceptibilité négative divergente (à dopage nul), et sur le nitrure de bore : un isolant de bandes qui possède une susceptibilité orbitale diamagnétique dans la bande interdite.
- « Effets interbandes » sont aujourd'hui synonymes d'« effets géométriques ». Le CHAP. 2 permettra de définir des quantités fondamentales comme la courbure de Berry et le tenseur métrique. À part un terme dépendant du spectre (la susceptibilité de Landau-Peierls), nous montrerons que la susceptibilité d'un modèle à deux bandes est donné par trois termes très fortement dépendant de ces grandeurs géométriques (CHAP. 7).
- Un modèle illustre de façon spectaculaire l'importance des effets géométriques : le modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$ introduit dans le CHAP. 8 possède un paramètre libre α , dont le spectre à champ nul est totalement indépendant, et qui extrapole entre le graphène et le modèle dit \mathcal{T}_3 . Si l'on peut naïvement croire que la susceptibilité devrait rester inchangée puisque le spectre l'est, nous verrons qu'elle subit en réalité des changements surprenants, en passant d'une réponse diamagnétique à paramagnétique à dopage nul lorsque le paramètre α varie de 0 (graphène) à 1 (modèle \mathcal{T}_3).
- Il faut également insister sur deux points : d'abord, parler de géométrie sur le fibré de Bloch ne veut pas nécessairement dire étudier des systèmes topologiques. En effet, tous les systèmes que nous regardons dans ce travail sont des systèmes « triviaux » (sans nombre de Chern, sans états de bords dans la bande interdite), mais présentant pourtant des contributions géométriques intéressantes. Deuxièmement, il est fréquent de lire que les effets géométriques sont décrits essentiellement par la courbure de Berry ; mais cette affirmation oublie le rôle du tenseur métrique. Nous exhiberons un cas très simple dans le CHAP. 7 où la courbure de Berry est identiquement nulle, mais où les effets géométriques (caractérisés par ce tenseur métrique) sont dominants !

Afin d'appréhender tous ces résultats, les premiers chapitres rappelleront les résultats et définitions importantes : le CHAP. 1 posera les bases du magnétisme localisé mais surtout itinérant (celui qui nous intéressera dans ce travail), et le CHAP. 2 introduira la théorie géométrique des bandes d'un système cristallin ; en passant, on clarifiera l'importance du choix de la base dans le calcul de ces quantités géométriques, et on y définira l'approximation de liaisons fortes dans laquelle on se placera par la suite. Le CHAP. 3 permettra quant à lui de faire le pont entre les deux premiers chapitres en reliant magnétisme et modèle de liaisons fortes, et on introduira une méthode numérique originale de calcul de la susceptibilité orbitale basée sur le papillon de Hofstadter. Cette approche permettra de tester les calculs analytiques qui suivront. Tous les résultats énoncés dans les paragraphes précédents sont basés sur les deux résultats-clés de ce manuscrit : une théorie de perturbation invariante de jauge dans le CHAP. 6, et une expression géométrique pour les systèmes à deux bandes dans le CHAP. 7.

L'annexe D contient une introduction à l'étude semi-classique du magnétisme orbital *via* la dynamique d'un paquet d'ondes électronique. Si aucun résultat nouveau n'y sera présenté, cette approche donnera un éclairage complémentaire intéressant sur le magnétisme orbital. On y rappellera entre autres les équations semi-classiques pour un paquet d'ondes en prenant en compte les effets géométriques à l'ordre 1 en champ magnétique.

Par défaut, « magnétisme » signifiera dans ce manuscrit « magnétisme orbital », et plus précisément aimantation orbitale spontanée ou susceptibilité orbitale à champ nul. De même, « géométrie » fera référence à la géométrie des états de Bloch.

INTRODUCTION

Chapitre 1

Magnétisme localisé et magnétisme itinérant d'électrons libres

Dans ce chapitre introductif nous allons rappeler les notions connues de magnétisme orbital, qu'il soit localisé ou itinérant. On reviendra aussi brièvement sur un théorème célèbre du début du XX^e siècle, le théorème de Bohr-Van Leeuwen. Si le magnétisme de spin sera évoqué ici, il sera par la suite laissé de côté dans tout le manuscrit, en considérant des électrons sans spin.

1.1 Définitions et cadre d'étude

Commençons par introduire les notions bien connues mais centrales concernant le magnétisme et son traitement dans l'ensemble grand-canonique.

Excitation magnétique

De façon très générale, un système physique est sensible à la présence d'un champ magnétique, et répond en présentant une aimantation M correspondant à une densité volumique de moments magnétiques. Cette aimantation participe rétroactivement au champ magnétique à l'intérieur et à l'extérieur du matériau. Afin de séparer l'effet du champ d'origine « externe » de celui dû à l'aimantation, on introduit un second champ vectoriel : l'*excitation magnétique* H ¹ définie par

$$H = \frac{B}{\mu_0} - M. \quad (1.1)$$

Ce champ peut être vu comme le champ magnétique dû aux causes « externes », c'est-à-dire où l'on a retiré les effets rétroactifs de l'aimantation M .²

Tout système possède une *équation constitutive* (ou équation d'état) qui relie les champs M et H , que l'on notera $M(H)$, et que l'on écrit

$$M(H) = M_0 + \chi_{\text{orb}} H. \quad (1.2)$$

1. Bien que la terminologie officielle veuille que B soit appelé *densité de flux magnétique* et H *champ magnétique*.

2. Cela s'observe en particulier en réécrivant l'équation de Maxwell-Ampère : $\text{rot } H = j_{\text{libres}} + \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}$ où $j_{\text{lié}} = \text{rot } M$ a été absorbé dans le membre de gauche. Cette interprétation a cependant des limites, puisque $\text{div } H$ dépend de M .

Si l'on suppose la réponse du matériau linéaire, alors χ_{orb} est un tenseur indépendant de H . Dans le cas bidimensionnel, B et M sont colinéaires à l'axe (Oz) perpendiculaire au système et χ_{orb} est simplement scalaire. C'est dans cette situation que l'on se placera dans la suite du manuscrit. Si nous nous focalisons sur la partie orbitale de la susceptibilité, ces arguments sont bien sûr très génériques et s'appliquent également au magnétisme de spin.

Aimantation orbitale spontanée

Dans l'équation (1.2), $M_0 = M_0 e_z$ est l'aimantation orbitale spontanée, c'est-à-dire l'aimantation du système en l'absence d'excitation magnétique. Les systèmes où M_0 est non nulle sont rares³, car cela nécessite de briser spontanément la symétrie de renversement du temps. Par exemple le modèle de Haldane sur réseau hexagonal [60] qui brise explicitement la symétrie de renversement du temps, présente une aimantation spontanée. Si dans la suite de ce manuscrit nous ne considérerons que des systèmes symétriques par renversement du temps, nous dériverons de notre théorie l'expression générale de l'aimantation spontanée orbitale quelles que soient les symétries du système.

Susceptibilité orbitale

La susceptibilité orbitale χ_{orb} est la fonction de réponse linéaire reliée à l'aimantation induite du système. D'après (1.2), la susceptibilité peut s'écrire

$$\chi_{\text{orb}} = \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (1.3)$$

Il existe cependant une autre définition de la susceptibilité notée $\tilde{\chi}_{\text{orb}}$, à partir du champ magnétique :

$$\tilde{\chi}_{\text{orb}} = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B}. \quad (1.4)$$

Bien que ces deux définitions soient différentes, elles sont reliées par une relation que l'on trouve à partir de (1.1) et (1.2) :

$$\tilde{\chi}_{\text{orb}} = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = \mu_0 \frac{\partial H}{\partial B} \frac{\partial M}{\partial H} = \mu_0 \left(\frac{1}{\mu_0} - \frac{\tilde{\chi}_{\text{orb}}}{\mu_0} \right) \chi_{\text{orb}} = (1 - \tilde{\chi}_{\text{orb}}) \chi_{\text{orb}}. \quad (1.5)$$

Ainsi

$$\tilde{\chi}_{\text{orb}} = \frac{\chi_{\text{orb}}}{1 + \chi_{\text{orb}}}. \quad (1.6)$$

La susceptibilité étant généralement petite devant 1 en module (les susceptibilités diamagnétiques ou paramagnétiques étant typiquement de l'ordre de 10^{-7} à 10^{-4} en valeur absolue), ces deux définitions peuvent être expérimentalement confondues. Les rares cas où la susceptibilité $\tilde{\chi}_{\text{orb}}$ diverge théoriquement sont toujours éliminés expérimentalement par une limitation physique (la température, le désordre, les interactions, etc.). Le contre-exemple célèbre où la susceptibilité n'est pas petite devant 1 est bien sûr la supraconductivité (de type 1). Dans ce cas $\chi_{\text{orb}} = -1$, le champ magnétique est totalement expulsé : à l'intérieur du matériau $B = 0$, et $\tilde{\chi}_{\text{orb}} = -\infty$: il faut un champ H infini pour créer un champ B non nul dans le matériau. Par la suite, en écartant les supraconducteurs, nous assimilerons les deux susceptibilités que nous noterons χ_{orb} , en gardant en mémoire que « divergence » signifie plutôt « valeur anormalement grande », mais toujours $\ll 1$.

3. L'équivalent dans le magnétisme de spin est plus fréquent, et donne en particulier le ferromagnétisme.

1.2. LE MAGNÉTISME : PROPRIÉTÉ QUANTIQUE

En particulier, lorsque M_0 est nulle, les deux champs B et H sont directement proportionnels :

$$B \approx \mu_0 H, \quad (1.7)$$

approximation que nous utiliserons par la suite, et nous ne considérerons plus que B .

Ensemble statistique

Le magnétisme orbital est une propriété statistique reliée à la réponse magnétique d'une assemblée de particules chargées. On fait le choix de se placer dans l'ensemble grand-canonique où l'énergie totale et le nombre de particules du système ne sont fixés qu'en moyenne, et où sont imposés une température T et un potentiel chimique μ par des réservoirs d'énergie et de particules. Le potentiel thermodynamique adapté est appelé grand potentiel, et noté Ξ . Ce potentiel et ses dépendances vis-à-vis des différents paramètres du problème (T , μ , champ magnétique, etc.) contiennent toute l'information nécessaire sur le système. Le choix de l'ensemble statistique (canonique, grand-canonique, etc.) n'est pas important pour les grands systèmes car il a été montré [128] que les aimantations et les susceptibilités tendent vers la même valeur dans une limite thermodynamique.

On se focalise sur les systèmes bidimensionnels, sur lesquels on applique un champ magnétique perpendiculaire $B = B e_z$. Cette limitation n'est pas une restriction en soi puisque les effets dus au champ B sont essentiellement dans le plan perpendiculaire, et des travaux donnent la réponse magnétique de systèmes tridimensionnels [49], mais cela permettra de simplifier les calculs à suivre, afin de faire ressortir de façon plus éclatante les interprétations physiques essentielles de nos résultats.

Les deux fonctions-clés de la réponse magnétique orbitale, l'*aimantation spontanée orbitale* et la *susceptibilité orbitale*, sont des dérivées du grand potentiel. On peut écrire

$$M_0^{3D} = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial \Xi}{\partial B} \right|_{B=0} \quad \text{et} \quad \chi_{\text{orb}}^{3D} = -\frac{\mu_0}{V} \left. \frac{\partial^2 \Xi}{\partial B^2} \right|_{B=0}. \quad (1.8)$$

Les systèmes que nous considérerons étant bidimensionnels, nous diviserons plutôt par l'aire de la surface du système (χ_{orb} étant alors dimensionnée à une longueur), ainsi les définitions pour la suite du manuscrit (excepté pour les rappels sur les résultats connus de ce chapitre) seront

$$\boxed{M_0 = -\frac{1}{S} \left. \frac{\partial \Xi}{\partial B} \right|_{B=0}} \quad (1.9)$$

et

$$\boxed{\chi_{\text{orb}} = -\frac{\mu_0}{S} \left. \frac{\partial^2 \Xi}{\partial B^2} \right|_{B=0}}. \quad (1.10)$$

Dans le Système International d'unités, χ_{orb}^{3D} est sans dimension, et χ_{orb} est homogène à une longueur. Souvent, les articles expérimentaux utilisent plus volontiers le système cgs avec une susceptibilité adimensionnée (sans unité ou en emu/cm³) que l'on multiplie par 4π pour obtenir la valeur dans le S.I.

1.2 Le magnétisme : propriété quantique

Le magnétisme est une propriété fondamentale de la matière que l'on peut observer de façon quotidienne : la majorité des disques durs utilise le spin pour stocker l'information sous forme de

CHAPITRE 1. MAGNÉTISME LOCALISÉ ET MAGNÉTISME ITINÉRANT D'ÉLECTRONS LIBRES

domaines de Weiss, la force magnétique d'un aimant peut être utilisée pour sceller magnétiquement une porte ou porter des objets, la robustesse de l'orientation permet au géologue de remonter aux inversions du champ magnétique terrestre, la précession des moments magnétiques est à la base du fonctionnement de l'imagerie par résonance magnétique, etc.

Comme la supraconductivité, le magnétisme est une preuve éclatante de la mécanique quantique : elles font partie de ces propriétés purement quantiques observables à l'échelle macroscopique. En effet, après les travaux de Langevin au tout début du XX^e siècle sur une théorie microscopique classique du magnétisme dont les hypothèses furent très débattues, c'est Bohr qui le premier donna un argument dans ses travaux de thèse de 1911 montrant que le magnétisme n'était pas explicable par une théorie purement classique. Van Vleck, lors de la remise de son prix Nobel [150] a assuré que la publication de Bohr a été « *perhaps the most deflationary publication of all time in Physics* », ce qui n'est pas peu dire ! Ce théorème a très certainement motivé Bohr à présenter peu de temps après son modèle de l'atome, date de naissance de la « théorie des quanta ».

Van Leeuwen [149] a démontré cette impossibilité classique dans ses travaux de thèse de façon indépendante. Sa preuve repose sur le fait que la fonction de partition d'un système classique ne dépend pas du champ magnétique appliqué. En effet, considérons un gaz classique de particules ponctuelles (classiques) délimité par un domaine Ω , et soit \mathcal{H} le hamiltonien du système, de forme très générale $\sum_i \mathbf{P}_i/2m + V(\{\mathbf{r}_i\})$. Dans l'ensemble canonique, la fonction de partition Z s'écrit

$$Z(T, N, \mathbf{B}) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int_{\Omega} d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{P}_1 \cdots d\mathbf{P}_N e^{-\beta\mathcal{H}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_N)}. \quad (1.11)$$

En présence d'un champ magnétique, seules les impulsions sont modifiées *via* le couplage minimal $\mathbf{p}_j \rightarrow \mathbf{P}_j - q\mathbf{A}_j(\mathbf{r}_i)$. On peut faire un changement de variables

$$\begin{cases} \mathbf{r}'_j = \mathbf{r}_j \\ \mathbf{P}'_j = \mathbf{P}_j - q\mathbf{A}_j(\mathbf{r}_i) \end{cases} \quad (1.12)$$

de jacobien unité (puisque la matrice jacobienne est triangulaire avec des 1 sur la diagonale). La fonction de partition en présence d'un champ magnétique est donc égale à la fonction de partition sans champ, et sa dérivée —l'aimantation— est nulle :

$$\mathbf{M} = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{B}} = \frac{k_B T}{V} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mathbf{B}} = \mathbf{0}. \quad (1.13)$$

Cette élégante démonstration a un caractère général puisque le hamiltonien n'a pas été spécifié : il peut par exemple contenir un potentiel de confinement, l'argument resterait le même puisque les bornes de l'intégrale des impulsions ne sont pas modifiées. Ce résultat peut s'appliquer à un gaz de Drude-Lorentz classique (sphères dures) où V contiendrait un terme d'interaction entre électrons qui ne dépend que des positions. Ainsi, à l'équilibre thermodynamique, il n'existerait qu'un état d'équilibre à savoir un état d'aimantation nulle, quel que soit le champ magnétique extérieur.⁴ En mécanique quantique, cette démonstration n'est plus valide, et ce à cause de la présence d'opérateurs ne commutant pas dans le hamiltonien, qui interdisent le changement de variables (1.12), ce dont on pourrait conclure que le magnétisme provient de la non-commutation d'opérateurs en mécanique quantique ; Peierls développe ce point de vue que l'on reverra au CHAP. 5.

4. D'un point de vue qualitatif, on peut aussi dire qu'un champ magnétique transfère une énergie nulle aux particules puisqu'il ne travaille pas. Les propriétés statistiques ne dépendant que de l'énergie, les particules ont les mêmes propriétés statistiques avec ou sans champ magnétique ; d'où une aimantation nulle. Cet argument peut être trouvé dans les cours de Feynman.

Le théorème de Larmor vient cependant porter ombrage à la généralité du résultat précédent, puisque celui-ci assure que tout système de particules chargées classiques peut se mettre en rotation sous l'action d'un champ magnétique constant et uniforme, et produit un champ opposé au champ extérieur, preuve de l'existence d'un diamagnétisme classique. [80] Nous sommes alors obligés de limiter la portée du théorème de façon péremptoire aux systèmes ne pouvant entrer en rotation globale comme le note Feynman dans ses cours de physique.⁵

Bien que d'aspect très général, ce théorème cache une hypothèse réductrice importante : il suppose que le potentiel vecteur ne dépend que des positions des particules. Et si cela est exact pour une description non-relativiste, Darwin [24] montra qu'à l'ordre v^2/c^2 , on peut inclure des corrections relativistes au lagrangien classique faisant apparaître un potentiel vecteur dû au champ créé par les particules, et qui dépend explicitement de leur vitesse. Cette correction, dont on peut montrer qu'elle cherche à écranter le champ extérieur [33, 34] soutiendrait l'existence d'un diamagnétisme non-quantique.

1.3 Magnétisme localisé

Avant de s'attaquer au magnétisme orbital dû à des électrons délocalisés (le *magnétisme itinérant*), rappelons les différentes contributions de la réponse d'une assemblée d'atomes isolés à l'établissement d'un champ magnétique : le *magnétisme localisé*.

Hamiltonien d'un électron localisé

Confiné dans un atome, le hamiltonien d'un électron (dont on considère le spin par souci de généralité) s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.14)$$

où $V(\mathbf{r})$ est le potentiel que subit l'électron, créé par le noyau et les autres $Z - 1$ électrons.

La partie cinétique du hamiltonien d'une particule dans un champ magnétique s'obtient en opérant le *couplage minimal*, où l'on remplace $\hat{\mathbf{P}}$ par $\hat{\mathbf{P}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$. Pour un électron, $q = -e$, et donc

$$\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} \rightarrow \frac{(\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))^2}{2m} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{e}{2m}(\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) + \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot \hat{\mathbf{P}}) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})^2. \quad (1.15)$$

Choisissons la jauge symétrique pour le potentiel vecteur : $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{r}$ ⁶. L'opérateur $\hat{\mathbf{P}}$ commutant avec $\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$ ⁷, la partie cinétique peut s'écrire

$$\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2m}\mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{e^2}{8m}(\mathbf{B} \wedge \hat{\mathbf{r}})^2 \quad (1.16)$$

avec $\hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{\hbar}\hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{P}}$ l'opérateur *moment cinétique orbital* adimensionné.

En plus d'une modification du terme cinétique, se rajoute au hamiltonien un terme dû au couplage entre le spin et le champ magnétique : $g_0\mu_B\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$ où g_0 est un coefficient adimensionné proche de 2, et μ_B est le *magnéton de Bohr* de l'électron défini par

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}. \quad (1.17)$$

5. Ces cours ont été mis en ligne en 2013 par Caltech à cette adresse : <http://feynmanlectures.caltech.edu/>.

6. À opposer à la jauge de Landau utilisée plus loin dans le manuscrit $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -Bye_x$ ou $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = Bxe_y$.

7. On rappelle que $[\hat{r}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}$.

CHAPITRE 1. MAGNÉTISME LOCALISÉ ET MAGNÉTISME ITINÉRANT D'ÉLECTRONS LIBRES

Ainsi, le hamiltonien de l'électron dans un champ magnétique s'écrit finalement

$$\hat{\mathcal{H}}(B) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \mu_B \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{L}} + g_0 \hat{\mathbf{S}}) + \frac{e^2}{8m} B^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2). \quad (1.18)$$

Variation d'énergie dans un champ magnétique

Comment varie l'énergie d'un état propre $|\psi\rangle$ de $\hat{\mathcal{H}}_0$ lors de l'établissement d'un champ magnétique? Comme notre but est de faire tendre la perturbation vers 0, nous pouvons utiliser la théorie de perturbation stationnaire pour trouver l'expression de la variation d'énergie. En supposant l'état fondamental $|\psi\rangle$ non dégénéré,

$$E_\psi \rightarrow E_\psi + \langle \psi | \Delta \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle + \sum_{|\phi\rangle \neq |\psi\rangle} \frac{|\langle \psi | \Delta \hat{\mathcal{H}} | \phi \rangle|^2}{E_\psi - E_\phi}. \quad (1.19)$$

En ne gardant que les termes au plus quadratiques en champ magnétique, on obtient finalement pour la variation d'énergie d'un état propre :

$$\Delta E_\psi = \mu_B \mathbf{B} \cdot \langle \psi | (\hat{\mathbf{L}} + g_0 \hat{\mathbf{S}}) | \psi \rangle + \sum_{|\phi\rangle \neq |\psi\rangle} \frac{|\langle \psi | \mu_B \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{L}} + g_0 \hat{\mathbf{S}}) | \phi \rangle|^2}{E_\psi - E_\phi} + \frac{e^2}{8m} B^2 \langle \psi | \hat{x}^2 + \hat{y}^2 | \psi \rangle. \quad (1.20)$$

Une différence majeure entre le premier et les deux derniers termes est leur dépendance en B : contrairement aux deux derniers qui sont quadratiques, le premier est linéaire en B , ce qui implique l'existence d'un moment magnétique en l'absence de champ. Une seconde différence est le signe de leur variation énergétique : le premier et le deuxième sont négatifs, alors que le troisième est positif. Étudions rapidement chacun de ces termes ; nous verrons que le terme linéaire domine la réponse magnétique lorsqu'il est non-nul.

Afin d'obtenir la susceptibilité, il ne suffit pas d'avoir la variation d'énergie d'un atome : χ_{orb} est une grandeur statistique, et à moins d'être à température nulle, il faut donc en toute rigueur calculer l'énergie libre d'une assemblée d'atomes.

Diamagnétisme de Larmor

Dans le cas d'un état fondamental où les couches atomiques des atomes sont totalement remplies, $\hat{\mathbf{L}} |\psi\rangle = \hat{\mathbf{S}} |\psi\rangle = 0$. Les deux premiers termes de (1.20) sont nuls, seul le terme positif contribue. Par symétrie sphérique de l'état fondamental d'un atome à couches remplies,

$$\langle \psi | \hat{x}^2 + \hat{y}^2 | \psi \rangle = \frac{2}{3} \langle \psi | \hat{r}^2 | \psi \rangle, \quad (1.21)$$

où $\langle \psi | \hat{r}^2 | \psi \rangle$ peut être semi-classiquement interprétée comme le carré du rayon quadratique moyen r^2 de l'orbitale atomique $|\psi\rangle$.

Sauf à très haute température, la probabilité que l'électron ne soit pas dans l'état fondamental est négligeable ; les électrons peuvent être considérés dans le même état, et la susceptibilité s'obtient alors facilement à partir de la variation d'énergie

$$\chi_{\text{Larmor}} = -\mu_0 \frac{1}{V} \frac{\partial^2 N \Delta E_\psi}{\partial B^2} = -\mu_0 \frac{ne^2 r^2}{6m} \quad (1.22)$$

avec N le nombre d'atomes, et n la densité. Cette susceptibilité *de Larmor*⁸ est négative, donc donne une réponse diamagnétique. Cette réponse est faible, les valeurs absolues typiques étant de l'ordre de $\sim 10^{-7}$. Ce terme n'est jamais nul, et la réponse est présente pour tous les atomes. Tous les éléments sont donc magnétiques.

La formule (1.22) peut être également obtenue par un argument semi-classique basé sur l'application de la loi de Lenz à des électrons sur des orbites autour du noyau. On se reportera à la Réf. [107] pour une critique de cette approche, qui préconise plutôt une approche semi-classique basée sur un moment cinétique quantifié.

Paramagnétisme de Van Vleck

Si toutes les couches électroniques sont remplies, alors le moment cinétique total J est nul. Cependant, il existe d'autres cas où $J = 0$ (si la couche est presque à demi-remplie par exemple). Par symétrie, cela impose que le terme linéaire en B de (1.20) s'annule, mais pas forcément le second terme appelé *terme de Van Vleck*. L'état fondamental étant toujours non-dégénéré, la réponse de l'assemblée d'atomes est presque toujours déterminée par la balance énergétique entre les contributions de Larmor et de Van Vleck qui sont du même ordre de grandeur.

Si la contribution de Larmor provient de la réponse d'un unique état à la présence d'un champ extérieur, on voit que la réponse de Van Vleck a une structure différente : celle-ci nécessite l'existence d'états à plus haute énergie. On pourrait appeler cela un couplage *inter-niveaux atomiques*. Le magnétisme de Van Vleck existe aussi dans les molécules, en remplaçant les orbitales atomiques par des orbitales moléculaires. Sa structure laisse présager l'existence de couplage interbandes dans le cas d'un cristal à plusieurs bandes d'énergie.

Paramagnétisme d'orientation

Dans les autres cas où $J \neq 0$, le terme linéaire en B est non-nul, et il est alors dominant devant les deux autres termes. Il contribue à donner une aimantation spontanée au système. Grâce au théorème de Wigner-Eckart [57], on peut montrer que

$$\mu_B \mathbf{B} \cdot \langle \psi | (\hat{\mathbf{L}} + g_0 \hat{\mathbf{S}}) | \psi \rangle = g(JLS) \mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} \quad (1.23)$$

avec $g(JLS)$ un coefficient numérique appelé *facteur de Landé* et valant

$$g(JLS) = \frac{g_0 + 1}{2} + \frac{g_0 - 1}{2} \frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)}. \quad (1.24)$$

Le terme linéaire dans (1.20) peut alors être compris comme l'énergie $-\mu_{\text{eff}} \cdot \mathbf{B}$ d'un moment magnétique effectif $\mu_{\text{eff}} = -g(JLS) \mu_B \mathbf{J}$ dans un champ magnétique. La situation la plus favorable énergétiquement pour un dipôle est d'être aligné avec le champ magnétique. Cependant, l'état fondamental sans champ étant ici dégénéré $2J+1$ fois, obtenir la susceptibilité du système à l'équilibre demande un calcul de physique statistique qui s'écrit explicitement avec la fonction de Brillouin⁹

$$B(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J}x\right). \quad (1.25)$$

8. Elle est aussi connue sous le nom de *susceptibilité de Langevin* aux États-Unis. En France, le magnétisme de Langevin désigne généralement le magnétisme de Brillouin traité d'un point de vue semi-classique.

9. Une approche semi-classique fait apparaître la fonction de Langevin $L(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}$. Le résultat quantique tend vers celui-ci lorsque $J \rightarrow \infty$.

CHAPITRE 1. MAGNÉTISME LOCALISÉ ET MAGNÉTISME ITINÉRANT D'ÉLECTRONS LIBRES

En particulier, on retrouve la loi de Curie à haute température :

$$\chi_{\text{Curie}} = \frac{n(g\mu_B)^2 J(J+1)}{3 k_B T} \propto \frac{1}{T}. \quad (1.26)$$

La susceptibilité d'orientation vaut typiquement 10^{-3} à température ambiante. Elle est donc petite devant 1 (l'hypothèse $B \approx \mu_0 H$ est bien vérifiée), mais grande devant les réponses de Larmor et de Van Vleck.

Si on a pu définir une susceptibilité finie à température nulle pour les termes de Van Vleck et Larmor, on remarque ici que la susceptibilité d'orientation diverge à température nulle. Cela est directement lié à l'existence d'une aimantation spontanée. En effet, si $T = 0$, appliquer un champ magnétique sur un système aimanté va tourner cette aimantation, quelque soit la force du champ. Ceci correspond à une susceptibilité divergente.

1.4 Magnétisme itinérant d'électrons libres

En supplément du magnétisme localisé étudié dans le paragraphe précédent, un cristal présente du *magnétisme itinérant*, provenant de la réponse magnétique des électrons délocalisés sur le cristal. Étudions le cas le plus simple de la réponse magnétique d'un gaz d'électrons bidimensionnel où est négligé le potentiel cristallin, c'est-à-dire des électrons libres. On considère deux hamiltoniens, l'un avec une relation de dispersion quadratique caractéristique des électrons non-relativistes, et l'autre avec une relation de dispersion linéaire, correspondant à des électrons ultra-relativistes (le cas pertinent dans le cadre d'une approximation continue de la structure de bandes du graphène près des points de Dirac par exemple).

Électrons non-relativistes

Considérons le cas le plus simple d'électrons ayant pour hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \quad (1.27)$$

dont le spectre est présenté FIG. 1.1. Comme déjà discuté, le champ magnétique $B = B e_z$ s'insère dans le hamiltonien *via* le couplage minimal. En fixant une jauge, il est possible de résoudre exactement l'équation aux valeurs propres, et on obtient les célèbres niveaux de Landau [6, 78] : les énergies accessibles ne forment plus un continuum indicé par l'impulsion mais un ensemble discret de valeurs régulièrement espacées

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N} \quad (1.28)$$

avec $\omega_c = \frac{eB}{m}$ la *pulsation cyclotron*. Ces niveaux sont très fortement dégénérés : la dégénérescence peut s'exprimer comme le rapport entre le flux du champ magnétique à travers le système entier $\phi = SB$ et le *quantum de flux* (ou *flux élémentaire*) $\phi_0 = h/e$:

$$\mathcal{N}_B = \frac{SBe}{h} = \frac{\phi}{\phi_0} \quad (1.29)$$

où S est l'aire du système.

1.4. MAGNÉTISME ITINÉRANT D'ÉLECTRONS LIBRES

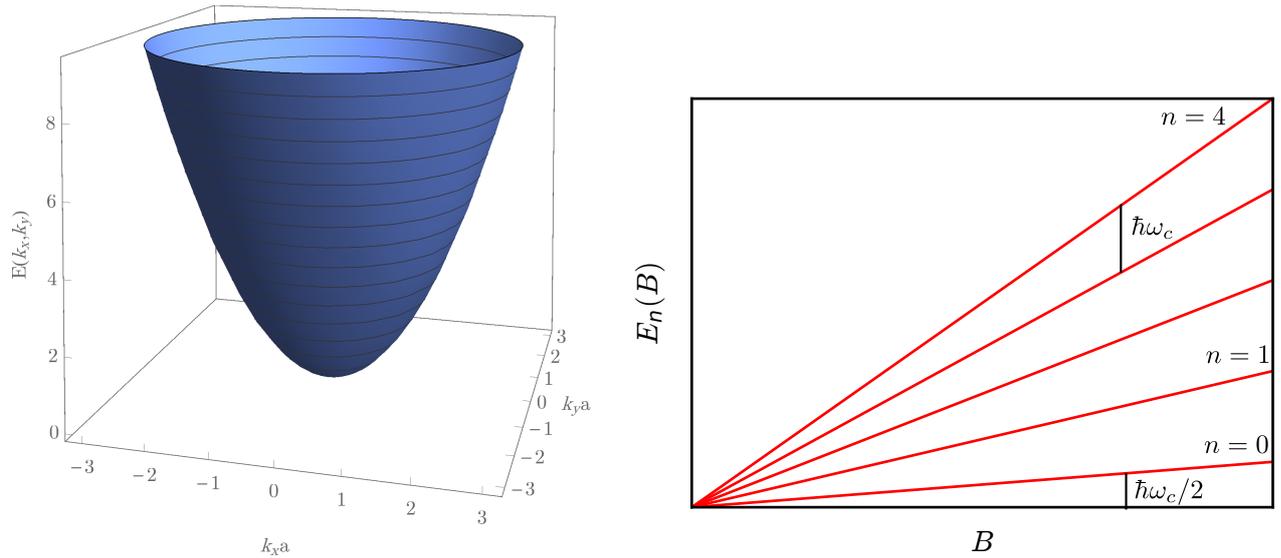


FIGURE 1.1 – À gauche : spectre d'électrons libres non-relativistes avec une énergie normalisée par $\hbar^2/2ma^2$, a étant une longueur caractéristique. À droite : niveaux de Landau associés, linéaires en champ magnétique et équidistants.

À partir de ce spectre, il est possible de calculer le grand potentiel $\Xi(B)$ en présence d'un champ magnétique, et en particulier d'en déduire la susceptibilité χ_{Landau} .

$$\Xi(B) = -k_B T \sum_{\text{états}} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) = -k_B T \mathcal{N}_B \sum_{n \geq 0} \ln \left(1 + e^{-\beta(\hbar\omega_c(n + \frac{1}{2}) - \mu)} \right), \quad (1.30)$$

ce que l'on peut écrire

$$\Xi(B) = -m \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^2 \frac{S}{2\pi} \alpha \sum_{n \geq 0} f \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) \alpha \right) \quad (1.31)$$

en ayant défini le paramètre sans dimension $\alpha = \beta\hbar\omega_c$, et la fonction $f(x) = \ln(1 + e^{-x + \beta\mu})$. Dans l'esprit de la démonstration de Landau [78], utilisons la formule d'Euler-MacLaurin, qui nous permet de trouver un développement à un ordre arbitraire en α de $\Xi(B)$. On se place dans la situation $\alpha \ll 1$, c'est-à-dire lorsque l'espacement $\hbar\omega_c$ entre niveaux de Landau est petit devant l'énergie thermique $k_B T$.¹⁰ À l'ordre 2 en α , elle s'écrit :

$$\alpha \sum_{0 \leq n < N} f \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) \alpha \right) = \int_0^{N\alpha} f(x) dx - \frac{\alpha^2}{24} (f'(N\alpha) - f'(0)) + o(\alpha^2) \quad (1.32)$$

$$\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} f(x) dx - \frac{\alpha^2}{24} (f'(\infty) - f'(0)) + o(\alpha^2). \quad (1.33)$$

¹⁰. Cela a pour effet de « lisser » le passage d'un niveau de Landau pour μ . Dans la situation $\alpha \gg 1$, dès que μ passe un niveau de Landau, un changement abrupt est visible dans Ξ , et *a fortiori* dans ses dérivées. Ce régime est celui des oscillations quantiques.

CHAPITRE 1. MAGNÉTISME LOCALISÉ ET MAGNÉTISME ITINÉRANT D'ÉLECTRONS LIBRES

Ainsi,

$$\Xi(B) = -m \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^2 \frac{S}{2\pi} \left[\int_0^\infty f(x) dx - \frac{\alpha^2}{24} (f'(\infty) - f'(0)) + o(\alpha^2) \right]. \quad (1.34)$$

Le premier terme entre crochets donne le grand potentiel en champ nul, alors que le second donne la susceptibilité. f étant reliée à la fonction de Fermi n_F par $f' = -n_F$, on a $f'(\infty) = 0$ et $f'(0) = 1$, d'où

$$\chi_{\text{Landau}} = -\mu_0 m \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{2\pi} \frac{2}{24} \left(\frac{\hbar e}{m k_B T} \right)^2 n_F(0). \quad (1.35)$$

On trouve finalement à $T = 0$:

$$\chi_{\text{Landau}} = -\frac{\mu_0 e^2}{24\pi m}. \quad (1.36)$$

Cette susceptibilité est le résultat de Landau (ici dans le cas bidimensionnel) : un gaz d'électrons libres possède une susceptibilité orbitale négative, c'est-à-dire une réponse diamagnétique (le *diamagnétisme de Landau*). Celle-ci peut se réécrire

$$\chi_{\text{Landau}} = -\frac{\mu_0 \mu_B^2 \rho_0}{3} \quad (1.37)$$

où $\rho_0 = m/(2\pi\hbar^2)$ est la densité d'états en l'absence de champ magnétique, et μ_B le magnéton de Bohr.

Comparaison au magnétisme de spin itinérant

Nous avons vu dans les paragraphes précédents des effets localisés du magnétisme de spin, mais il existe également un effet itinérant. Dans le cas où le couplage spin-orbite est négligé, l'effet du spin est d'ajouter au hamiltonien sans spin un *terme Zeeman* $g_0 \mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ (cf. (1.18)). Celui-ci va asymétriser le remplissage des bandes d'énergie, ce qui se traduit par une réponse magnétique de spin dépendant de la densité d'états près du niveau de Fermi ρ_0 . On montre que la *susceptibilité de Pauli* s'écrit à température nulle : [6]

$$\chi_{\text{spin}} = \mu_0 \mu_B^2 \rho_0. \quad (1.38)$$

Sans couplage spin-orbite, la susceptibilité totale est simplement la somme des contributions orbitale et de spin :

$$\chi = \chi_{\text{orb}} + \chi_{\text{spin}}. \quad (1.39)$$

Pour des électrons libres non-relativistes, $\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3} \chi_{\text{spin}}$, la réponse est donc toujours paramagnétique.

Si le calcul de Landau ne concerne que les électrons libres, le calcul de Pauli pour l'effet du spin est très général, ce qui montre que la contribution du spin est facile à calculer et ne prend pas en compte d'éventuels couplages entre bandes d'un cristal ; pour cette raison nous l'oublierons par la suite, et nous ne considérerons des électrons sans spin. À partir des résultats de susceptibilité orbitale des chapitres suivants, la susceptibilité totale s'obtient immédiatement en multipliant par la dégénérescence de spin $g_s = 2$ le résultat orbital, et en ajoutant la susceptibilité de Pauli.

Retour sur le caractère quantique du magnétisme

En quoi ces niveaux de Landau permettent-ils de comprendre l'existence du magnétisme en mécanique quantique? Une propriété fondamentale de ces niveaux est l'existence d'une énergie minimale $\hbar\omega_c/2$, alors que le spectre sans champ commence à $E = 0$. Cette propriété permet de comprendre de façon intuitive que l'énergie du système va donc être augmentée en présence de champ magnétique, et va provoquer une réponse diamagnétique du système tentant de fuir les zones de fort champ. Cette énergie de seuil étant dû à un commutateur non-nul entre les opérateurs $\hat{\Pi}_i = \hat{P}_i + eA_i(\hat{r})$, on peut qualitativement comprendre le magnétisme quantique comme issu d'une non-commutation qui engendre cette énergie de l'état fondamental.

On note de plus un résultat surprenant : la susceptibilité magnétique à température nulle ne dépend pas du potentiel chimique : peu importe le nombre d'électrons dans le système, la susceptibilité de Landau est toujours la même! Pour un hamiltonien général, nous verrons que la susceptibilité dépend en fait du potentiel chimique.

Le caractère quantique est donc indispensable à la compréhension du magnétisme. Cependant, on peut s'étonner que \hbar n'apparaisse pas dans le résultat de Landau.

Remarque : dépendance en \hbar de la susceptibilité

L'équation (1.36) —pourtant totalement quantique— ne dépend pas de \hbar . Ceci est surprenant puisque on s'attend à une susceptibilité qui tende vers 0 lorsqu'on passe à la limite classique, c'est-à-dire dans la limite $\hbar \rightarrow 0$. Il n'y a ici aucune contradiction, et ce résultat découle directement des hypothèses de la dérivation de la susceptibilité. Cette problématique peut être séparée en deux questions distinctes :

- Pourquoi la susceptibilité est-elle indépendante de \hbar ? À $T = 0$, ce résultat découle du principe de Pauli. En effet, cherchons la modification du grand potentiel dû au champ magnétique à l'ordre 2 en B pour un spectre quadratique. Puisque les électrons sont des fermions, on définit l'énergie de Fermi $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$, et le grand potentiel à champ nul vaut typiquement $\Xi(0) \sim N\varepsilon_F$ où N est le nombre d'électrons dans le gaz. On peut écrire perturbativement

$$\Xi(B) = \Xi(0) \left(1 + \alpha \left(\frac{\hbar\omega_c}{\varepsilon_F} \right)^2 \right) \quad (1.40)$$

puisque le premier ordre est nécessairement nul par symétrie de renversement du temps, et avec α une constante numérique. D'où une susceptibilité

$$\chi \sim \frac{\mu_0}{S} N \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \frac{\hbar^2 e^2}{m} \frac{4m^2}{\hbar^4 k_F^4} \sim \frac{\mu_0 e^2}{m} \quad (1.41)$$

indépendante de \hbar .

- Maintenant, à température non-nulle, la susceptibilité va-t-elle à 0 si $\hbar \rightarrow 0$? Dans l'ensemble grand-canonique, on peut fixer la densité moyenne de particules $\langle n \rangle$, ce qui donne un potentiel chimique $\mu(\langle n \rangle, T)$ fixé, mais dépendant du choix de $\langle n \rangle$.

Lorsque $\hbar \rightarrow 0$ à T fixée, on quitte le régime quantique, la distribution de Fermi-Dirac devient celle de Maxwell-Boltzmann. Ainsi, d'après (1.35),

$$\chi_{\text{orb}}(\mu, T) = -\frac{\mu_0 e^2}{24\pi m} \frac{1}{e^{-\mu/k_B T} + 1} \approx -\frac{\mu_0 e^2}{24\pi m} e^{\mu/k_B T}. \quad (1.42)$$

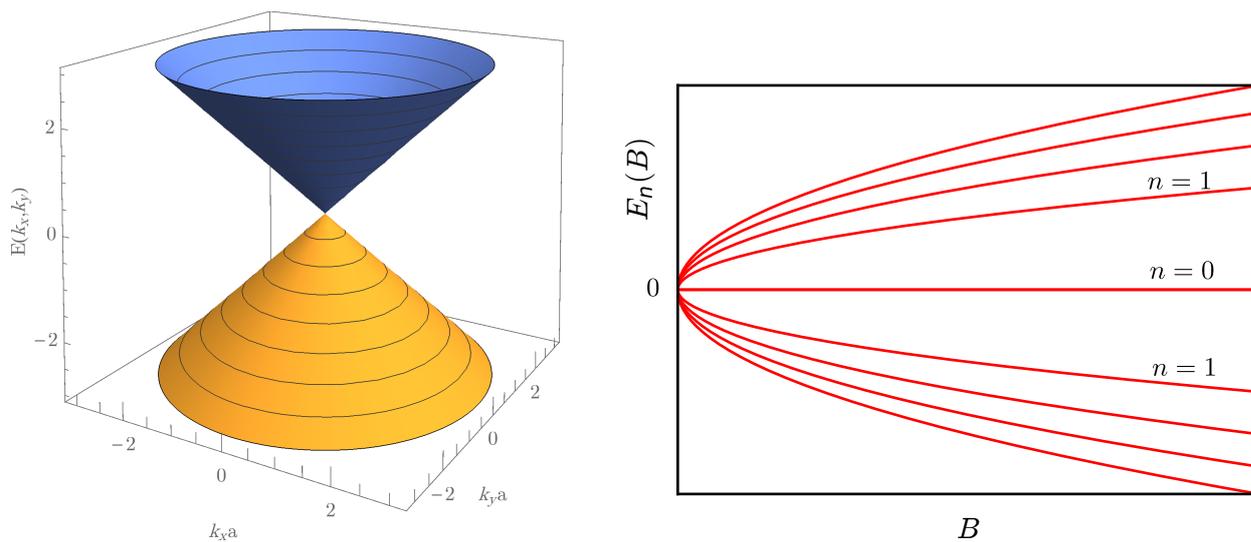


FIGURE 1.2 – À gauche : spectre des électrons de Dirac, avec une énergie normalisée par $\hbar v/a$. À droite : niveaux de Landau associés en racine carrée du champ magnétique.

Or la relation entre μ et $\langle n \rangle$ s'écrit $\langle n \rangle = -\frac{\partial \Xi}{\partial \mu} \approx \rho_0 T e^{\mu/k_B T}$, d'où

$$\chi_{\text{orb}}(\mu, T) \approx -\frac{1}{3} \frac{\mu_B^2 n}{T} \propto -\hbar^2 \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0, \quad (1.43)$$

la susceptibilité tend bien vers 0, on retrouve le résultat classique de Bohr-Van Leeuwen. Si on avait cependant conservé μ fixé, alors la relation entre μ et $\langle n \rangle$ montrerait que la densité de particules diverge lorsque $\hbar \rightarrow 0$, ce qui n'est physiquement pas acceptable.

Électrons ultra-relativistes

Dans le cas de particules sans masse (photons ou fermions régis par l'équation de Dirac avec une masse nulle), le hamiltonien n'est plus quadratique en l'opérateur impulsion \hat{P} mais linéaire, ce qui donne un spectre conique (FIG. 1.2). L'exemple probablement le plus emblématique en matière condensée est celui des électrons de conduction du graphène se propageant dans un réseau hexagonal proche du demi-remplissage. Le hamiltonien d'un électron est approximé par

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar v \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (1.44)$$

où $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ est le vecteur des matrices de Pauli, v la pente du spectre qui correspond à une vitesse caractéristique (pour le graphène c'est la vitesse au niveau de Fermi à faible dopage $v_F \approx c/300$). La relation de dispersion s'écrit $E_{\mathbf{k}} = \pm \hbar v |\mathbf{k}|$.

En appliquant le couplage minimal au hamiltonien (1.44), on trouve l'existence de niveaux de Landau possédant un comportement différent de ceux associés au hamiltonien quadratique :

$$E_n = \pm \hbar \omega_{\text{lin}} \sqrt{n}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (1.45)$$

1.4. MAGNÉTISME ITINÉRANT D'ÉLECTRONS LIBRES

avec $\omega_{\text{lin}} = v\sqrt{2eB\hbar}$. Ils ne sont pas également espacés et sont en racine du champ magnétique. De plus, un des niveaux de Landau a une énergie nulle. La transformation du $n + \frac{1}{2}$ en n est purement quantique, et vient du calcul d'un commutateur dans la diagonalisation du problème.¹¹

En appliquant la formule d'Euler-MacLaurin, on trouve une susceptibilité

$$\chi_{\text{McC}} = \frac{\mu_0 e^2 v^2}{6\pi} n'_F(0) \xrightarrow{T \rightarrow 0} -\frac{\mu_0 e^2 v^2}{6\pi} \delta(\mu). \quad (1.46)$$

McClure [89] fut le premier à dériver cette expression de la susceptibilité d'électrons ultra-relativistes, en cherchant à comprendre la forte réponse diamagnétique du graphite. Il a de plus noté que les niveaux de Landau semi-classiques n'étaient pas en accord avec les niveaux de Landau purement quantiques où le facteur $\frac{1}{2}$ était manquant. Il attribue —à juste titre comme nous le verrons plus loin— cette forte réponse magnétique à des transitions interbandes entre les deux bandes du graphène.

On notera qu'ici la susceptibilité qui diverge est $\tilde{\chi}_{\text{orb}}$ introduite au début du chapitre. Cela signifie expulsion totale du champ magnétique à température nulle. [111]

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons introduit les grandeurs magnétiques orbitales M_0 et χ_{orb} que nous chercherons à calculer par la suite. Nous avons également rappelé des résultats de magnétisme localisé et de magnétisme itinérant, en les adjoignant de remarques moins connues comme l'interprétation classique ou quantique du magnétisme et l'indépendance de χ_{Landau} en \hbar . Si ces résultats concernant les particules libres sont bien connus, ils serviront de référence dans la suite de ce manuscrit, soit lorsque la relation de dispersion prendra des formes simples (linéaire ou quadratique), soit lorsqu'on cherchera à retrouver la limite d'atomes isolés.

11. On trouvera les détails de cette dérivation par exemple dans les notes de séminaire de G. Montambaux et M.O. Goerbig : <http://www.bourbaphy.fr/juin2014.html>.

CHAPITRE 1. MAGNÉTISME LOCALISÉ ET MAGNÉTISME ITINÉRANT D'ÉLECTRONS LIBRES

Chapitre 2

Introduction à la théorie géométrique des bandes

Après avoir défini les grandeurs caractérisant la réponse magnétique du système, l'objectif est maintenant de donner une courte introduction à la théorie géométrique des bandes. De même que la conductivité transverse σ_{xy} , nous verrons que la susceptibilité orbitale est une grandeur dépendant de la géométrie de l'espace des états de Bloch (ou plutôt de leur partie périodique), et cela va s'avérer important pour interpréter physiquement les différentes contributions de χ_{orb} .

Si de nombreux physiciens [16, 69, 84, 125, 154] avaient déjà travaillé sur ces effets interbandes, c'est dans les années 80 que les publications de Berry [14] et Simon [135] ont relié ces aspects à une théorie géométrique des bandes, et ont fait le lien entre conductivité de Hall [147] et invariants topologiques (nombre de Chern). Alors que ce manuscrit est en rédaction, le prix Nobel de physique de cette année a entre autres récompensé les travaux de D. Haldane et D. Thouless ayant contribué à la naissance de cette théorie géométrique.

Nous commencerons par rappeler le théorème de Bloch, puis l'approximation de liaisons fortes qui sera détaillée dans le cas d'un ou deux atomes par maille. Ensuite, en s'appuyant sur les définitions précédentes, nous introduirons la théorie géométrique des bandes et nous concluons avec un paragraphe sur les symétries discrètes que peuvent présenter les modèles cristallins que nous allons étudier.

2.1 Théorème de Bloch et bandes d'énergies

L'étude du problème d'un électron dans un potentiel créé par un arrangement périodique d'atomes est au cœur de la physique du solide sans interaction. Cet arrangement périodique appelé *cristal* est la combinaison d'un *réseau*, et d'une maille élémentaire, groupe d'atomes qui se retrouvent en chaque point du réseau. Le hamiltonien d'un électron dans un cristal peut s'écrire

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + U(\hat{r}) \quad (2.1)$$

CHAPITRE 2. INTRODUCTION À LA THÉORIE GÉOMÉTRIQUE DES BANDES

où $U(\mathbf{r})$ est une fonction périodique, de même périodicité que le réseau cristallin. Cette périodicité impose que

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}] = 0, \quad (2.2)$$

avec $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}$ l'opérateur de translation d'un vecteur \mathbf{R} quelconque du réseau de Bravais, $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}$ agissant sur les fonctions d'ondes par $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. Or une famille d'opérateurs qui commutent sont co-diagonalisables, il existe donc une base d'états propres $|\Psi_{\alpha}\rangle$ de $\hat{\mathcal{H}}$ qui sont aussi vecteurs propres des $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}$ pour tout \mathbf{R} du réseau de Bravais. Les valeurs propres de l'opérateur de translation $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}$ étant les $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$, on en déduit que pour toute fonction propre Ψ_{α} de cette famille

$$\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \Psi_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

où \mathbf{k} est un vecteur bidimensionnel, *a priori* quelconque¹; l'indice α de la base pouvant alors se factoriser en un couple (\mathbf{k}, n) . Ce résultat appelé *théorème de Bloch* est équivalent à dire que les fonctions $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ peuvent se mettre sous la forme

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

avec $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ une fonction périodique en \mathbf{r} , de même périodicité que le réseau de Bravais. En termes d'états, on écrira avec l'opérateur position \hat{r} :

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{r}}|u_{n\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.5)$$

Les fonctions propres $\Psi_{n\mathbf{k}}$ et les états $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ associés sont appelés respectivement *fonctions de Bloch* et *états de Bloch*. Les parties périodiques des états de Bloch sont associés à des états $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$, et une description en termes des $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ ou des $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ est équivalente, bien que ces états possèdent des propriétés différentes que nous détaillons dans les paragraphes suivants.

Transformation unitaire dépendante de \mathbf{k}

Un état de Bloch $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ vérifie l'équation aux valeurs propres

$$\hat{\mathcal{H}}|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = E_{n\mathbf{k}}|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (2.6)$$

où l'on choisit d'indicer les solutions par un vecteur \mathbf{k} et un entier naturel n . Les états $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ vérifient alors :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}|u_{n\mathbf{k}}\rangle = E_{n\mathbf{k}}|u_{n\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.7)$$

avec $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{r}}\hat{\mathcal{H}}e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{r}}$ une transformée unitaire de $\hat{\mathcal{H}}$. Pour tout \mathbf{k} fixé, le *hamiltonien dans l'espace réciproque* $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}$ contient toute l'information de $\hat{\mathcal{H}}$. On construit ici une famille d'opérateurs $\{\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}}$ *a priori* redondante. On notera la différence fondamentale entre l'opérateur $\hat{\mathcal{H}}$ où n et \mathbf{k} sont des nombres quantiques, et l'opérateur $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}$ où n est toujours un nombre quantique, mais \mathbf{k} est simplement un paramètre continu. On note que \mathbf{k} en tant que nombre quantique est restreint à la première zone de Brillouin, mais n'a pas cette limitation en tant que paramètre.

A priori, à chaque vecteur \mathbf{k} correspond une infinité dénombrable d'états indicés par n (puisque chaque atome possède typiquement une infinité d'orbitales), l'*indice de bandes*. Concrètement cependant, on limite toujours l'étude à un nombre fini N de bandes en projetant le hamiltonien :

1. Pour les cristaux de taille finie selon une direction, le vecteur d'onde prend un nombre fini de valeurs égal au nombre de sites dans cette direction.

2.1. THÉORÈME DE BLOCH ET BANDES D'ÉNERGIES

si \mathcal{P}_k est le projecteur orthogonal sur le sous-espace des bandes considérées, l'opérateur projeté $\mathcal{P}_k \hat{\mathcal{H}}_k \mathcal{P}_k = \sum_n E_{nk} |u_{nk}\rangle \langle u_{nk}|$ peut être représenté par une matrice carrée \mathcal{H}_k de taille N qu'on appellera *hamiltonien de Bloch* ou *matrice hamiltonienne*. \mathcal{H}_k dépend du choix de la base des $|u_{nk}\rangle$, notion sur laquelle nous reviendrons dans le paragraphe sur le modèle de liaisons fortes.

Périodicité en k

Dans l'espace réel, la périodicité des fonctions $u_{nk}(\mathbf{r})$ est directement reliée à la périodicité du potentiel cristallin $U(\mathbf{r})$, les fonctions de Bloch étant le produit de ces fonctions périodiques et d'ondes planes.

Intéressons-nous à la périodicité dans l'espace réciproque. Par définition des états de Bloch, on peut décomposer le hamiltonien sous la forme

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{n, \mathbf{k} \in \text{PBZ}} E_{nk} |\Psi_{nk}\rangle \langle \Psi_{nk}|. \quad (2.8)$$

Celui-ci ne dépendant pas de k , et comme nous avons contraint k à la première zone de Brillouin pour des raisons de redondance, une translation $k \rightarrow k + \mathbf{K}$ avec \mathbf{K} un vecteur du réseau réciproque ne doit pas changer la somme. On en déduit que E_{nk} est une fonction périodique de k , de période la première zone de Brillouin (PZB); mais ce n'est pas forcément le cas des états de Bloch. En toute généralité, on a

$$|\Psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{K}}\rangle = e^{i\varphi_k} |\Psi_{nk}\rangle, \quad (2.9)$$

la phase φ_k ne pouvant pas toujours être prise nulle. La périodicité en k des états de Bloch est assujettie à l'existence d'un choix de jauge qui donne pour $|\Psi_{nk}\rangle$ des fonctions continues de k . Si un tel choix est possible, alors les états de Bloch sont périodiques. Loin d'être anodin, on peut montrer que l'existence de cette jauge est équivalente à la trivialité de la topologie de la phase considérée (c'est-à-dire avec un nombre de Chern nul; grandeur définie plus loin dans ce chapitre). Pour un nombre de Chern non-nul, la phase de $|\Psi_{nk}\rangle$ sera une fonction discontinue, avec une singularité souvent rapportée sur un des bords de la PZB [137]. Dans la suite, on s'intéressera aux phases non topologiques, on pourra toujours faire un choix de jauge périodique où les états de Bloch seront périodiques en k , de période la PZB.

Dans cette jauge périodique où $|\Psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{K}}\rangle = |\Psi_{nk}\rangle$, d'après la définition (2.5), on observe que les états $|u_{nk}\rangle$ vérifient :

$$|u_{n\mathbf{k}+\mathbf{K}}\rangle = e^{-i\mathbf{K}\cdot\hat{\mathbf{r}}} |u_{nk}\rangle; \quad (2.10)$$

ou en termes de fonctions d'ondes

$$u_{n\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}+\mathbf{K})} \Psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{r}\cdot\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{r}\cdot\mathbf{k}} \Psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{r}\cdot\mathbf{K}} u_{nk}(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

L'état $|u_{nk}\rangle$ est modifié d'une phase locale, qui dépend du point \mathbf{r} considéré et n'est donc pas périodique en k . Si cela n'a pas d'influence dans le cas d'un réseau à un atome par maille, nous verrons que ce résultat est critique à la compréhension des couplages interbandes dans les cristaux à plusieurs atomes par maille. De même, notons que les hamiltoniens $\hat{\mathcal{H}}_k$ et \mathcal{H}_k ne sont pas nécessairement périodiques en k de période la PZB.²

2. Les quantités physiques dont nous discuterons plus loin, à savoir la courbure de Berry, le moment magnétique orbital et le tenseur géométrique sont des quantités périodiques en k de période la PZB.

2.2 Approximation de liaisons fortes

Aborder le problème général d'électrons dans un potentiel périodique est analytiquement impossible sans approximation. Il existe maintenant de nombreuses méthodes pour trouver des fonctions d'onde approchées et les énergies associées des électrons dans un cristal. [6] Celle que nous développerons et utiliserons par la suite est l'*approximation de liaisons fortes* (*tight-binding approximation*); elle est valide lorsque les orbitales atomiques sont peu modifiées par la présence du réseau (ce qui nécessite entre autres que l'extension des orbitales atomiques soit petite devant la distance inter-atomique).

Cristaux à un atome par maille

Considérons un cristal de N atomes disposés sur un réseau de Bravais : la maille élémentaire contient donc un unique atome. Nous étudierons au CHAP. 5 deux exemples de tels modèles, un sur réseau carré et un sur réseau triangulaire. On repère la position des mailles élémentaires par le vecteur \mathbf{R} .

Soit $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{R}}^{\text{at}}$ le hamiltonien d'un atome à la position \mathbf{R} . Supposons pour simplifier le problème que celui-ci n'ait qu'une orbitale³ $|\mathbf{R}\rangle$, et d'énergie ε : $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{R}}^{\text{at}}|\mathbf{R}\rangle = \varepsilon|\mathbf{R}\rangle$. Le hamiltonien d'une assemblée d'atomes isolés s'écrit simplement $\hat{\mathcal{H}}^{\text{iso}} = \sum_{\mathbf{R}} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{R}}^{\text{at}}$.

Cependant, lorsque les atomes sont proches, le hamiltonien d'un électron doit prendre en compte les interactions entre atomes voisins, et peut s'écrire formellement $\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{R}} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{R}}^{\text{at}} + \Delta U_{\mathbf{R}}$. Les états localisés $|\mathbf{R}\rangle$ ne sont plus des états propres de $\hat{\mathcal{H}}$.

Afin de simplifier l'étude qui va suivre, supposons que les orbitales $|\mathbf{R}\rangle$ soient orthogonales, ce qui revient à négliger la matrice de recouvrement entre orbitales.⁴ On définit pour $\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'$ les éléments de matrice du hamiltonien par

$$t(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = \langle \mathbf{R}' | \hat{\mathcal{H}} | \mathbf{R} \rangle, \quad (2.12)$$

qui ne sont des fonctions que de la distance entre les atomes $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ appelées *intégrales de saut*. Le hamiltonien s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{R}} \varepsilon |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}| + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} t(\mathbf{R} - \mathbf{R}') |\mathbf{R}'\rangle \langle \mathbf{R}|. \quad (2.13)$$

La famille $\{|\mathbf{R}\rangle\}_{\mathbf{R}}$ est une base orthonormée de l'espace de Hilbert, et on peut chercher les états propres de $\hat{\mathcal{H}}$ indicés par α en développant $|\Psi_{\alpha}\rangle$ sur la base $|\mathbf{R}\rangle$:

$$|\Psi_{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} C_{\alpha}(\mathbf{R}) |\mathbf{R}\rangle. \quad (2.14)$$

Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ étant périodique, on sait qu'il vérifie le théorème de Bloch, c'est-à-dire que les fonctions propres peuvent être cherchées sous la forme

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

3. ou simplement que les orbitales soient très éloignées en énergie, et donc qu'elles ne puissent que peu interférer.

4. Nous adoptons ici une approche élémentaire afin de ne pas obscurcir la discussion qui va suivre sur l'importance du choix de la base pour les états $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$. Le modèle des liaisons fortes est plus rigoureusement décrit en termes de fonctions de Wannier, méthode détaillée dans la revue de Modugno et al. [93] ou dans le cours de J. Dalibard de 2015 disponible à l'adresse http://www.college-de-france.fr/media/jean-dalibard/UPL3520254961557932367_cours_2016____Chapitre_4.pdf.

2.2. APPROXIMATION DE LIAISONS FORTES

où l'indice α est remplacé par le couple (n, \mathbf{k}) ; condition qui impose une contrainte forte sur les $C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{R})$ (la famille $\{|\mathbf{R}\rangle\}_{\mathbf{R}}$ étant une base orthonormée) :

$$C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{R} + \mathbf{S}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{S}} C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{R}) \quad \text{ou encore} \quad C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{0}). \quad (2.16)$$

La fonction propre de Bloch est ainsi déterminée à un préfacteur complexe $C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{0})$ près. La normalisation de $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ assure que $|C_{n\mathbf{k}}(\mathbf{0})| = 1$. Ainsi, l'état de Bloch est entièrement déterminé par $\hat{\mathcal{H}}$, à une phase globale (éventuellement dépendante de \mathbf{k}) qui n'a pas d'influence physique. On en déduit en particulier que l'indice n est superflu, le modèle n'a qu'une seule bande. Finalement, on peut choisir :

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle. \quad (2.17)$$

La famille de vecteurs propres $\{|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle\}_{\mathbf{k}}$ est une base orthonormée de l'espace de Hilbert, associée aux valeurs propres $\{E_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}}$ qui sont directement déterminées par les intégrales de saut :

$$E_{\mathbf{k}} = \langle \Psi_{\mathbf{k}} | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} \langle \mathbf{R} | \hat{\mathcal{H}} | \mathbf{R}' \rangle \quad (2.18)$$

$$= \frac{N}{N} \varepsilon + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} t(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \quad (2.19)$$

$$= \varepsilon + \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} t(\mathbf{R}) \quad (2.20)$$

Les fonctions $E_{\mathbf{k}}$ et $t(\mathbf{R})$ sont transformées de Fourier l'une de l'autre. Pour faciliter les calculs, on se limite souvent aux liens entre plus proches voisins, c'est-à-dire $t(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \approx 0$ dès que $|\mathbf{R} - \mathbf{R}'| > a$.

En passant, on remarque que les états $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ pour un cristal à une bande s'écrivent

$$|u_{\mathbf{k}}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle = |\Psi_{n\mathbf{k}=0}\rangle \quad (2.21)$$

et sont donc indépendants de \mathbf{k} . Tous les $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ sont identiques, alors que les $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ sont tous orthogonaux entre eux !

Cristal à deux atomes par maille

Le cas d'un cristal à plusieurs atomes par maille est plus délicat, mais fondamental pour l'étude des interactions interbandes. On considère toujours des atomes à une seule orbitale.⁵

Supposons cette fois que le cristal soit composé de $2N$ atomes à une orbitale chacun, répartis sur un réseau de Bravais et avec deux atomes par maille appelés A et B (on pense par exemple au graphène). Notons $|\mathbf{R}, \ell\rangle$ l'orbitale située à la position $\mathbf{R}_{\ell} = \mathbf{R} + \mathbf{d}_{\ell}$, \mathbf{R} indiquant la position de la maille élémentaire considérée, et \mathbf{d}_{ℓ} la position de l'atome dans cette maille (on prend par convention $\mathbf{d}_A = \mathbf{0}$). Le hamiltonien s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{R}, \ell} \varepsilon_{\ell} |\mathbf{R}, \ell\rangle \langle \mathbf{R}, \ell| + \sum_{\mathbf{R}, \ell, \mathbf{R}', \ell'} t(\mathbf{R}_{\ell} - \mathbf{R}'_{\ell'}) |\mathbf{R}', \ell'\rangle \langle \mathbf{R}, \ell|, \quad (2.22)$$

5. La multiplication du nombre d'orbitales par atome va, comme le nombre d'atomes par maille, augmenter le nombre de bandes. Cependant, les orbitales sont souvent 1) de symétries différentes, et 2) très éloignées en énergie (typiquement $\Delta E \sim 5 \text{ eV} > t$); pour ces raisons les orbitales ne se couplent pas ou peu entre elles. De plus, plusieurs orbitales ayant la même position dans la maille, toutes les subtilités qui suivent concernant le choix de la base ne s'appliquent pas.

CHAPITRE 2. INTRODUCTION À LA THÉORIE GÉOMÉTRIQUE DES BANDES

ce que l'on abrégera dans les chapitres suivants en :

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} |i\rangle\langle j|, \quad (2.23)$$

où $\langle i, j \rangle$ signifie que i et j sont des atomes du réseau plus proches voisins (abrégé ppv).

En supposant que ces orbitales sont orthogonales, une fonction propre du hamiltonien peut s'écrire par combinaison linéaire des orbitales atomiques (CLOA) :

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{R}, \ell} C_{n\mathbf{k}}^\ell(\mathbf{R}) |\mathbf{R}, \ell\rangle. \quad (2.24)$$

La périodicité du hamiltonien va imposer une condition similaire à (2.16) sur les coefficients, d'où

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{R}, \ell} C_{n\mathbf{k}}^\ell(\mathbf{0}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}, \ell\rangle \quad (2.25)$$

$$= \frac{C_{n\mathbf{k}}^A(\mathbf{0})}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}, A\rangle + \frac{C_{n\mathbf{k}}^B(\mathbf{0})}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}, B\rangle. \quad (2.26)$$

Cette expression pousse à définir une base dans laquelle les états de Bloch s'écriront plus simplement, essentiellement donnée par la transformée de Fourier des états $|\mathbf{R}, \ell\rangle$. On peut définir les $2N$ états

$$|\mathbf{k}, A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}, A\rangle \quad \text{et} \quad |\mathbf{k}, B\rangle_\alpha = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}, B\rangle \quad (2.27)$$

qui forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert. La fonction $\alpha_{\mathbf{k}}$ est *a priori* indéterminée, elle constitue un choix de base. Si une infinité de choix sont possibles pour $\alpha_{\mathbf{k}}$, deux bases ont un caractère particulier car elles simplifient les expressions des états de Bloch ou de leur partie périodique. Celles-ci ont été introduites dans la Réf. [10] dans le contexte du réseau nid d'abeille, et nous nous focaliserons sur la description de ces deux bases notées I et II.

Base I Le choix le plus simple et utilisé par exemple dans Ashcroft et Mermin [6] est sûrement de prendre $\alpha_{\mathbf{k}} = 0$, ce que l'on appellera « base I ». La phase relative entre les deux états $|\mathbf{k}, A\rangle$ et $|\mathbf{k}, B\rangle$ est nulle, les fonctions de Bloch s'écrivent

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_{n\mathbf{k}}^A(\mathbf{0}) |\mathbf{k}, A\rangle + C_{n\mathbf{k}}^B(\mathbf{0}) |\mathbf{k}, B\rangle_I) \quad (2.28)$$

et le hamiltonien peut se diagonaliser par bloc :

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} |\mathbf{k}, A\rangle & |\mathbf{k}, B\rangle_I \end{pmatrix} \mathcal{H}_{\mathbf{k}}^I \begin{pmatrix} \langle \mathbf{k}, A| \\ \langle \mathbf{k}, B|_I \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

où $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^I$ est une matrice 2×2 hermitienne. Celle-ci se paramètre

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^I = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & (f_{\mathbf{k}}^I)^* \\ f_{\mathbf{k}}^I & \varepsilon_B \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

où la fonction $f_{\mathbf{k}}^I$ vaut dans l'exemple du réseau nid d'abeille de vecteurs de base \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2

$$f_{\mathbf{k}}^I = -t (1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2}). \quad (2.31)$$

2.2. APPROXIMATION DE LIAISONS FORTES

On définit la phase de cette fonction par $f_{\mathbf{k}}^I = |f_{\mathbf{k}}^I| e^{-i\phi_I(\mathbf{k})}$. Un des avantages de ce choix de base est que $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^I$ est périodique dans l'espace réciproque de période la zone de Brillouin, comme on le voit sur (2.31).

Pour simplifier l'argumentation, on suppose les deux atomes de même énergie sur site : $\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0$, alors $E_{n\mathbf{k}} = n|f_{\mathbf{k}}^I|$ où $n = \pm 1$, et à une phase globale près les états de Bloch s'écrivent simplement

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\mathbf{k}, A\rangle + ne^{i\phi_I(\mathbf{k})} |\mathbf{k}, B\rangle_I \right). \quad (2.32)$$

Les $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ ont une expression faisant intervenir la phase $\phi_I(\mathbf{k})$ présente dans le hamiltonien. Cette caractéristique n'est vraie qu'avec ce choix de base.

Maintenant calculons les $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ associés aux états de Bloch, et pour cela, repassons dans l'espace réel avec l'équation (2.26) :

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} (|\mathbf{R}, A\rangle + ne^{i\phi_I} |\mathbf{R}, B\rangle). \quad (2.33)$$

Dans cette situation, il est tentant, et c'est ce qui est fait en général, de définir l'opérateur position de la maille

$$\hat{R} = \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{R} |\mathbf{R}, \ell\rangle \langle \mathbf{R}, \ell|, \quad (2.34)$$

puis de factoriser l'expression des états de Bloch

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{R}} \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{R}} (|\mathbf{R}, A\rangle + ne^{i\phi_I} |\mathbf{R}, B\rangle) \quad (2.35)$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{R}} |\tilde{u}_{n\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.36)$$

les vecteurs $|\tilde{u}_{n\mathbf{k}}\rangle$ pouvant s'écrire simplement

$$|\tilde{u}_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{R}} (|\mathbf{R}, A\rangle + ne^{i\phi_I} |\mathbf{R}, B\rangle) \quad (2.37)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{k} = \mathbf{0}, A\rangle + ne^{i\phi_I} |\mathbf{k} = \mathbf{0}, B\rangle_I) \quad (2.38)$$

Cette expression est utilisée dans la littérature, en général sous la forme

$$|\tilde{u}_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ ne^{i\phi_I(\mathbf{k})} \end{pmatrix}_I. \quad (2.39)$$

Cependant, les $|\tilde{u}_{n\mathbf{k}}\rangle$ ne sont pas les $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ usuellement définis à partir du vrai opérateur position \hat{r} .⁶ Alors que \hat{R} donne la position d'une maille, \hat{r} donne la position physique des atomes :

$$\hat{r} = \sum_{\mathbf{R}, \ell} (\mathbf{R} + \mathbf{d}_\ell) |\mathbf{R}, \ell\rangle \langle \mathbf{R}, \ell|. \quad (2.40)$$

6. Notons que le hamiltonien (2.22) ne fait pas intervenir l'opérateur position \hat{r} , et ne contient pas réellement toute l'information sur le modèle. Cette information est présente dans $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}$ car celui-ci fait intervenir \hat{r} dans sa définition. Cette propriété contraire à l'intuition provient du fait que dans le modèle de liaisons fortes, on considère les amplitudes t comme des paramètres indépendants de la position des atomes. Physiquement, on s'attend au contraire à ce que les amplitudes de sauts dépendent fortement des distances interatomiques.

CHAPITRE 2. INTRODUCTION À LA THÉORIE GÉOMÉTRIQUE DES BANDES

Si l'on utilise le vrai opérateur position pour factoriser les états de Bloch (2.33), cela donne

$$|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}\frac{1}{\sqrt{2N}}\sum_{\mathbf{R}}(|\mathbf{R}, A\rangle + ne^{i\phi_{\text{I}}-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_B}|\mathbf{R}, B\rangle) \quad (2.41)$$

ce qui suggère de définir une nouvelle base pour laquelle $\phi_{\text{II}}(\mathbf{k}) = \phi_{\text{I}}(\mathbf{k}) - \mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_B$.

Base II Un autre choix de base utilisé entre autres par Wallace [153] —dite base II— est de prendre la fonction $\alpha_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_B$ où \mathbf{d}_B est le vecteur position de l'atome B dans la maille élémentaire. Avec ce choix, la matrice hamiltonienne $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\text{II}}$ s'écrit

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\text{II}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & (f_{\mathbf{k}}^{\text{II}})^* \\ f_{\mathbf{k}}^{\text{II}} & \varepsilon_B \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

où la fonction $f_{\mathbf{k}}^{\text{II}}$ s'écrit en fonction de $f_{\mathbf{k}}^{\text{I}}$:

$$f_{\mathbf{k}}^{\text{II}} = -t\sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_j} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_B} f_{\mathbf{k}}^{\text{I}} \quad (2.43)$$

où les δ_j sont les vecteurs reliant un atome A aux atomes B plus proches voisins. On remarque que la norme de $f_{\mathbf{k}}$ ne dépend pas du choix de la base I ou II, seule sa phase est modifiée : $\phi_{\text{II}}(\mathbf{k}) = \phi_{\text{I}}(\mathbf{k}) - \mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_B$. Avec ce choix, la matrice hamiltonienne $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\text{II}}$ n'est plus nécessairement périodique en \mathbf{k} de période la PZB. Cependant, ce choix de base présente l'avantage d'avoir une expression très simple des états $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$: reprenons (2.41) et introduisons les vecteurs (2.27) associés à la base II ; on obtient

$$|u_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathbf{k} = \mathbf{0}, A\rangle + ne^{i\phi_{\text{II}}}|\mathbf{k} = \mathbf{0}, B\rangle_{\text{II}}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ ne^{i\phi_{\text{II}}(\mathbf{k})} \end{pmatrix}_{\text{II}}. \quad (2.44)$$

L'utilité de la base II est d'avoir une expression simple des $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ dans une base qui est indépendante de \mathbf{k} . Ceci permet en particulier de calculer des grandeurs géométriques, qui comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre dépendent des dérivées des $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$.

Dans la suite du manuscrit, la matrice hamiltonienne des modèles étudiés sera toujours écrite dans la base II, et prendra l'une des formes suivantes

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (2.45)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} (|\mathbf{k}, A\rangle \quad |\mathbf{k}, B\rangle)_{\text{II}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\text{II}} \begin{pmatrix} \langle \mathbf{k}, A| \\ \langle \mathbf{k}, B| \end{pmatrix}_{\text{II}} \quad (2.46)$$

$$= \sum_{n\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle\langle u_{n\mathbf{k}}| \quad (2.47)$$

2.3 Théorie géométrique des bandes

Dans le paragraphe précédent, nous avons introduit le modèle de liaisons fortes, et nous avons rapporté le problème initial à l'étude d'une matrice $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ (représentant le hamiltonien) qui dépend du paramètre \mathbf{k} dans la zone de Brillouin avec des conditions aux bords périodiques. Cette matrice $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ est directement liée aux $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$, et non aux $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$. Nous allons voir qu'on peut étudier l'évolution

2.3. THÉORIE GÉOMÉTRIQUE DES BANDES

en fonction de k de cette base $|u_{nk}\rangle$, et que ces notions se révéleront utiles dans une description géométrique de la susceptibilité, quantité thermodynamique faisant intervenir le remplissage de toutes les bandes.

Les états de Bloch (2.15), en tant que vecteurs propres normés de l'opérateur \hat{H} , forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert. En conséquence

$$\langle \Psi_{nk} | \Psi_{mk'} \rangle = \delta_{nm} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (2.48)$$

Les états $|u_{nk}\rangle$ sont quant à eux des vecteurs propres de \hat{H}_k et ils vérifient :

$$\langle u_{nk} | u_{mk} \rangle = \delta_{nm}. \quad (2.49)$$

Attention, $|u_{nk}\rangle$ et $|u_{nk'}\rangle$ sont deux vecteurs propres de différents hamiltoniens \hat{H}_k et $\hat{H}_{k'}$; on ne sait donc rien du recouvrement de ces deux états, et en général

$$\langle u_{nk} | u_{nk'} \rangle \neq \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (2.50)$$

De cette constatation, on définit la *matrice de recouvrement* [16] des états $|u_{nk}\rangle$ par

$$S_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle u_{nk} | u_{mk'} \rangle. \quad (2.51)$$

2.3.1 Première approche et définitions

Comment évolue un système dans un état stationnaire lorsqu'on modifie « lentement » un paramètre extérieur? Cette question, définissant la notion d'adiabaticité, a été posée par Berry en prenant comme paramètre le temps dans l'équation de Schrödinger. [14] De là, il définit la notion de phase de Berry, qui animera tant les physiciens de la matière condensée, mais également d'autres domaines dont la physique atomique, la chimie quantique, etc. Une introduction très pédagogique à la phase de Berry dans l'équation de Schrödinger se trouve dans les cours de J. Dalibard donnés au Collège de France⁷.

Si la notion d'adiabaticité est cruciale pour une évolution temporelle, en matière condensée nous considérons des évolutions fictives en le paramètre k , que l'on peut supposer aussi lentes que l'on veut. Si les bandes sont séparées en énergie par une bande interdite (ou *gap*), on peut s'intéresser à l'évolution d'un état projeté sur sa bande n , où la dynamique rapide des transitions interbandes sera incluse dans une évolution lente « effective » le long de la bande n . Fixons donc l'indice n , et supposons que le spectre d'énergie soit non-dégénéré, c'est-à-dire qu'il n'existe qu'une droite $\mathbb{C} |u_{nk}\rangle$ par valeur propre E_{nk} , ce qui exclut en théorie le graphène et tous les systèmes où les bandes se touchent (métaux et semi-métaux).⁸

Le point de départ est l'observation de la non-orthogonalité de la famille $\{|u_{nk}\rangle\}_k$: on cherche à quantifier de « combien » les vecteurs ne sont pas orthogonaux.⁹ Pour cela, Provost & Vallée [120] ont introduit la notion de distance entre états quantiques dépendant d'un paramètre (ici k) :

$$d(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \sqrt{1 - |\langle u_{nk_1} | u_{nk_2} \rangle|^2} = \sqrt{1 - |S_{nn}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)|^2}. \quad (2.52)$$

7. <http://www.college-de-france.fr/site/jean-dalibard/course-2014-05-28-09h30.htm>

8. Ce formalisme sera étendu à ces systèmes, avec prudence près de ces points singuliers.

9. Cela ne serait pas possible avec les états $|\Psi_{nk}\rangle$ puisque ceux-ci sont directement orthogonaux, dès que $k' \neq k$. De plus, la construction de Berry se base sur un hamiltonien dépendant d'un paramètre, ce qui ne s'applique pas directement à \hat{H} .

CHAPITRE 2. INTRODUCTION À LA THÉORIE GÉOMÉTRIQUE DES BANDES

Cette définition satisfait tous les axiomes de la distance mathématique.¹⁰ La distance entre deux états est maximale et égale à 1 lorsque les états sont orthogonaux.

On peut donner une version locale de la définition globale (2.52) lorsque \mathbf{k}_2 est proche de \mathbf{k}_1 . Écrivons $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}$ et $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k} + d\mathbf{k}$, alors

$$|u_{n\mathbf{k}+d\mathbf{k}}\rangle = |u_{n\mathbf{k}}\rangle + dk_i \partial_i |u_{n\mathbf{k}}\rangle + \frac{1}{2} dk_i dk_j \partial_{ij} |u_{n\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.53)$$

avec le raccourci d'écriture $\partial_i = \partial_{k_i}$. La distance (2.52) étant une forme quadratique symétrique, son développement limité ne contient que des termes pairs en $d\mathbf{k}$, et impose une condition sur le terme d'ordre 1 du développement (2.53)¹¹ :

$$\Re \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_i u_{n\mathbf{k}} \rangle = 0. \quad (2.54)$$

On définit une quantité appelée *connexion de Berry* :

$$\boxed{\mathcal{A}_{n\mathbf{k}} = i \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle = -\Im \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle} \quad (2.55)$$

qui est un vecteur à composantes réelles.

Le développement limité dans la définition de la distance entre états donne :

$$[d(\mathbf{k}, \mathbf{k} + d\mathbf{k})]^2 = 1 - \left(1 + \frac{1}{2} dk_i dk_j \Re \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{ij} u_{n\mathbf{k}} \rangle\right)^2 - \left(-dk_i \mathcal{A}_{n\mathbf{k},i} + \frac{1}{2} dk_i dk_j \Im \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{ij} u_{n\mathbf{k}} \rangle\right)^2, \quad (2.56)$$

qui se simplifie en se limitant à l'ordre 2 en :

$$d(\mathbf{k}, \mathbf{k} + d\mathbf{k})^2 = dk_i dk_j (-\Re \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{ij} u_{n\mathbf{k}} \rangle - \mathcal{A}_{n\mathbf{k},i} \mathcal{A}_{n\mathbf{k},j}). \quad (2.57)$$

Cette expression peut se réécrire plus simplement en utilisant à nouveau la propriété (2.54), et en la dérivant par rapport à k_j :

$$\Re \langle \partial_j u_{n\mathbf{k}} | \partial_i u_{n\mathbf{k}} \rangle + \Re \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{ij} u_{n\mathbf{k}} \rangle = 0, \quad (2.58)$$

d'où finalement

$$d(\mathbf{k}, \mathbf{k} + d\mathbf{k})^2 = dk_i dk_j (\Re \langle \partial_j u_{n\mathbf{k}} | \partial_i u_{n\mathbf{k}} \rangle - \mathcal{A}_{n\mathbf{k},i} \mathcal{A}_{n\mathbf{k},j}). \quad (2.59)$$

L'équation (2.59) définit le *tenseur métrique*

$$g_{n\mathbf{k},ij} = \Re \langle \partial_j u_{n\mathbf{k}} | \partial_i u_{n\mathbf{k}} \rangle - \mathcal{A}_{n\mathbf{k},i} \mathcal{A}_{n\mathbf{k},j}, \quad (2.60)$$

forme bilinéaire symétrique en l'échange $i \leftrightarrow j$. Avec l'expression explicite de $\mathcal{A}_{n\mathbf{k},i}$, on peut réécrire :

$$g_{n\mathbf{k},ij} = \Re \langle \partial_j u_{n\mathbf{k}} | (1 - |u_{n\mathbf{k}}\rangle \langle u_{n\mathbf{k}}|) | \partial_i u_{n\mathbf{k}} \rangle = \Re \langle \partial_j u_{n\mathbf{k}} | \hat{Q}_{n\mathbf{k}} | \partial_i u_{n\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.61)$$

où l'opérateur $\hat{Q}_{n\mathbf{k}} = 1 - |u_{n\mathbf{k}}\rangle \langle u_{n\mathbf{k}}|$ est un projecteur orthogonal sur l'hyperplan orthogonal à la droite $\mathbb{C} |u_{n\mathbf{k}}\rangle$.

10. On aurait aussi pu penser peut-être plus naturellement à introduire la distance $\|u_{n\mathbf{k}_1} - u_{n\mathbf{k}_2}\|$ qui vérifie également les axiomes mathématiques. Cependant, il est facile de voir que cette distance n'est pas invariante de jauge, et n'étant donc pas une observable physique, il faut la corriger en conséquence. La métrique corrigée est identique à la métrique définie dans ce paragraphe. [120]

11. Un argument donnant le même résultat serait d'utiliser le caractère normé de $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$.

Invariance de jauge et dérivée covariante

Rappelons-nous qu'en mécanique quantique, la seule partie physiquement mesurable de la fonction d'onde du système est son module ; sa phase pouvant être choisie de façon arbitraire : c'est ce qu'on appelle une liberté de jauge. Cela signifie que précédemment, il n'y avait pas de raison de préférer l'état $|u_{nk}\rangle$ à l'état $e^{i\varphi_k}|u_{nk}\rangle$ où φ_k est une fonction réelle de k quelconque. Ce choix étant arbitraire, il ne doit pas se répercuter sur les grandeurs physiquement mesurables. Or, si l'on fait une transformation de *jauge de Berry*¹²

$$|u_{nk}\rangle \longrightarrow e^{i\varphi_{nk}} |u_{nk}\rangle, \quad (2.62)$$

la connexion de Berry est également modifiée :

$$\mathcal{A}_{nk} \longrightarrow \mathcal{A}_{nk} - \partial_k \varphi_{nk}. \quad (2.63)$$

On en déduit que \mathcal{A} n'est pas une grandeur physiquement mesurable à l'instar du potentiel vecteur en électromagnétisme. Cependant, par une compensation des termes supplémentaires, la métrique $g_{nk,ij}$ se retrouve être indépendante de la *jauge de Berry*, et celle-ci est une quantité physique, théoriquement mesurable [102].

En considérant $|u_{nk}\rangle$ comme une fonction de k , la dérivée du vecteur n'est pas non plus indépendante de la jauge. En revanche, la dérivée définie par :

$$|D_{nk}u_{nk}\rangle = |\partial_k u_{nk}\rangle + i\mathcal{A}_{nk}|u_{nk}\rangle \quad (2.64)$$

laisse passer la phase à travers la dérivée, comme on le voit facilement avec le changement de jauge de la connexion de Berry. Cette dérivation est appelée *dérivée covariante*. Par définition,

$$\langle u_{nk} | D_{nk} u_{nk} \rangle = 0. \quad (2.65)$$

Courbure de Berry

Si la connexion de Berry est comparable à un potentiel vecteur, on peut définir l'équivalent du champ magnétique appelé *courbure de Berry* :

$$\Omega_{nk} = \text{rot}_k \mathcal{A}_{nk}. \quad (2.66)$$

La courbure de Berry ne dépend pas du choix de la jauge de Berry, tout comme le champ B ne dépend pas de la jauge magnétique. Elle s'exprime simplement en termes des $|u_{nk}\rangle$:

$$\boxed{\Omega_{nk} = i \langle \partial_k u_{nk} | \times | \partial_k u_{nk} \rangle}, \quad (2.67)$$

ou de façon équivalente en composantes

$$\Omega_{nk}^\ell = \epsilon^{\ell ij} \langle \partial_i u_{nk} | \partial_j u_{nk} \rangle \quad (2.68)$$

avec $\epsilon^{\ell ij}$ le tenseur totalement antisymétrique. Cette expression est celle d'un pseudo-vecteur (dont l'exemple le plus célèbre est le champ magnétique), et qui représente la partie antisymétrique d'un tenseur à trois dimensions. En particulier, si le vecteur $|u_{nk}\rangle$ n'a que des composantes réelles, alors la courbure de Berry est nulle (en dehors des éventuels points de dégénérescence du spectre).

12. La jauge de Berry est une jauge $U(1)$ au même titre que la jauge électromagnétique, mais qui ne doivent pas être confondues.

Tenseur géométrique

Les expressions (2.61) et (2.67) ont la même homogénéité, et sont en fait deux parties d'un même objet mathématique, le *tenseur géométrique*, défini par

$$T_{n\mathbf{k},ij} = \left\langle \partial_j u_{n\mathbf{k}} \left| \hat{Q}_{n\mathbf{k}} \right| \partial_i u_{n\mathbf{k}} \right\rangle. \quad (2.69)$$

On montre que

$$T_{n\mathbf{k},ij} = g_{n\mathbf{k},ij} - i\epsilon^{\ell ij} \frac{\Omega_{n\mathbf{k}}^\ell}{2}. \quad (2.70)$$

La grandeur $g_{n\mathbf{k},ij}$ (resp. $\Omega_{n\mathbf{k}}^{ij}$) est la partie réelle (resp. imaginaire à un facteur -2 près) et symétrique (antisymétrique à un facteur -2 près) du tenseur géométrique.

Phase de Berry

La distance entre états définie précédemment est une mesure de l'orthogonalité de deux vecteurs. Mais étant définie par le module du produit scalaire, toute information sur l'évolution de la phase entre les deux états est perdue. Cela pourrait être sans importance puisque celle-ci est *a priori* dépendante du choix de la jauge de Berry : entre deux états infiniment proches $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ et $|\Psi_{n\mathbf{k}+\mathbf{d}\mathbf{k}}\rangle$, la différence de phase s'écrit

$$\Delta\varphi_{n\mathbf{k}} = \mathcal{A}_{n\mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}\mathbf{k} \quad (2.71)$$

avec $\mathcal{A}_{n\mathbf{k}}$ qui dépend du choix de jauge. Cependant, en intégrant maintenant sur un contour fermé \mathcal{C} de la PZB, nous obtenons

$$\Gamma_{n,\mathcal{C}} = \oint_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{n\mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}\mathbf{k} = \iint_S \Omega_{n\mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}\mathcal{S}_{\mathbf{k}} \quad (2.72)$$

où S est une surface ouverte s'appuyant sur le contour \mathcal{C} . Cette expression ne dépend plus que du flux de la courbure de Berry à travers une surface s'appuyant sur \mathcal{C} . De plus, Ω étant un champ de vecteur à divergence nulle, l'intégrale ne dépend pas du choix de S , seulement du contour \mathcal{C} . Cette grandeur indépendante de la jauge s'appelle la *phase de Berry* accumulée sur le contour \mathcal{C} . Γ mesure le flux de la courbure de Berry à travers une surface de l'espace réciproque.

La phase de Berry permet de caractériser des points singuliers du champ $\mathbf{k} \rightarrow |u_{n\mathbf{k}}\rangle$: elle sera typiquement non-nulle autour d'un point de Dirac dans le cas du graphène. C'est l'équivalent de la phase Aharonov-Bohm dans le contexte électromagnétique. Elle est à mi-chemin entre géométrie et topologie, puisqu'elle n'est ni une quantité locale, ni une quantité topologique (cf. discussion sur la partie topologique de la phase de Berry [36]).

Nombre de Chern

Nous avons vu que la phase de Berry se comprenait comme le flux de la courbure de Berry à travers une surface ouverte de l'espace réciproque. Si on s'intéresse au flux à travers une surface fermée, celui-ci est quantifié :¹³

$$\frac{1}{2\pi} \iint_{\text{PZB}} \Omega_{n\mathbf{k}} \cdot \mathbf{d}\mathcal{S}_{\mathbf{k}} = C_n \quad (2.73)$$

13. À deux dimensions, la seule surface fermée possible est le tore. À trois dimensions en revanche, on peut définir un nombre de Chern pour chaque surface non équivalente, typiquement les bords de la PZB à trois dimensions.

où C_n est un entier relatif, appelé *nombre de Chern*. En prolongeant l'analogie avec l'électromagnétisme, cela revient à étudier la divergence du champ magnétique $\text{div } \mathbf{B}$. Dirac, dans son article fondateur [29], montra que la quantification de la charge électrique pouvait être reliée à l'existence d'un monopôle magnétique. Si celui-ci existe, alors les charges électriques et magnétiques sont quantifiées. Le flux du champ magnétique à travers une surface fermée entourant un de ces monopôles est donc également quantifiée.¹⁴

Moment magnétique orbital

Lors de l'étude semi-classique du magnétisme développée par Gao, Chang et Niu [49] que nous esquisserons dans l'annexe D, une autre quantité géométrique apparaît, qui peut être comprise comme un mélange entre quantités géométriques et spectrales. Cette quantité appelée *moment cinétique orbital* vaut

$$\mathbf{m}_{nk} = -i \frac{e}{\hbar} \langle \partial_{\mathbf{k}} u_{nk} | \times (\mathcal{H}_{\mathbf{k}} - E_{nk}) | \partial_{\mathbf{k}} u_{nk} \rangle, \quad (2.74)$$

expression proche de la courbure de Berry, avec une dimension d'énergie supplémentaire.

Dans une théorie semi-classique développée par Chang et Niu [22] où l'on s'intéresse à la dynamique d'un paquet d'ondes, \mathbf{m}_{nk} s'interprète comme le moment magnétique orbital du paquet d'onde lié à son extension spatiale. Parce qu'on projette la dynamique sur une unique bande dans l'espace réciproque, celui-ci a nécessairement une taille minimale dans l'espace réel de l'ordre de celle de la maille élémentaire. Cette extension spatiale lui associe alors un moment orbital propre. On se reportera également à la revue de Di Xiao, Chang et Niu [157] pour des détails sur la théorie semi-classique.

2.3.2 Expressions explicites des quantités géométriques

À l'aide de la théorie de perturbation, il est possible de donner des expressions explicites pour les quantités géométriques définies précédemment. En effet, $|u_{n\mathbf{k}+\mathbf{d}\mathbf{k}}\rangle$ est un état proche de $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$, mais pas tout à fait un état propre de $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$. Écrivons $\mathcal{H}_{\mathbf{k}+\mathbf{d}\mathbf{k}} \approx \mathcal{H}_{\mathbf{k}} + \mathbf{d}\mathbf{k} \cdot \partial_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}}$, on peut formellement interpréter le second terme comme une perturbation de $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$. L'état propre $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ va évoluer avec cette perturbation, et la théorie de perturbation non dégénérée au premier ordre donne

$$|u_{n\mathbf{k}+\mathbf{d}\mathbf{k}}\rangle \approx |u_{n\mathbf{k}}\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m\mathbf{k}} | \mathbf{d}\mathbf{k} \cdot \partial_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}}} |u_{m\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.75)$$

En passant à la limite, la relation devient une égalité, et

$$\partial_{\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m\mathbf{k}} | \partial_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}}} |u_{m\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.76)$$

Cette façon de relier deux états qui ne sont pas des états propres du même opérateur, et donc ne vivent pas dans le même espace, fait appel à la notion de connexion et de transport parallèle. En utilisant la définition (2.55) on voit tout de suite que la fonction $\mathbf{k} \rightarrow \mathcal{A}_{n\mathbf{k}}$ est ici nulle sur son ensemble de définition. Ceci est lié au choix implicite de la jauge liée au transport parallèle où la

14. Si l'existence d'un monopôle magnétique n'a pas été démontrée à ce jour, il est possible d'avoir des monopôles d'excitation magnétique : $\text{div } \mathbf{B} = 0$ implique $\text{div } \mathbf{H} = -\text{div } \mathbf{M}$. On observe effectivement des monopôles de \mathbf{H} dans les bulles magnétiques de spin, les skyrmions, les systèmes frustrés comme les glaces de spin, etc.

CHAPITRE 2. INTRODUCTION À LA THÉORIE GÉOMÉTRIQUE DES BANDES

phase de l'état $|u_{nk}\rangle$ ne varie pas ; ce qui a pour conséquence d'avoir $\partial_{\mathbf{k}} |u_{nk}\rangle$ orthogonal à $|u_{nk}\rangle$ [124]. Dans cette jauge, les fonctions $\mathbf{k} \rightarrow u_{nk}$ ne sont pas univaluées.¹⁵ C'est cependant une jauge simple pour calculer des quantités qui *in fine* ne dépendront pas de la jauge. On obtient par exemple une expression du tenseur géométrique :

$$g_{nk,ij} = \Re \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{mk} | \partial_i \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{nk} \rangle \langle u_{nk} | \partial_j \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{mk} \rangle}{(E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}})^2}, \quad (2.77)$$

de la courbure de Berry :

$$\Omega_{nk}^\ell = i \varepsilon^{ij\ell} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{mk} | \partial_i \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{nk} \rangle \langle u_{nk} | \partial_j \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{mk} \rangle}{(E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}})^2} \quad (2.78)$$

et du moment magnétique orbital :

$$m_{nk}^\ell = -\frac{ie}{2\hbar} \varepsilon^{ij\ell} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{mk} | \partial_i \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{nk} \rangle \langle u_{nk} | \partial_j \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{mk} \rangle}{E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}}}. \quad (2.79)$$

Comme dans la théorie de perturbation, on peut interpréter ces formules par des transitions virtuelles vers d'autres bandes : par exemple pour (2.77) : on part de l'état $|u_{nk}\rangle$, on fait un saut virtuel vers une autre bande m grâce à l'opérateur vitesse $v_{\mathbf{k}} = \partial_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ dans l'espace réciproque, puis on refait un saut vers la bande n initiale avec une autre composante j du même opérateur vitesse. On retrouve cette idée dans la dénomination *vertical mixing* de certains auteurs. [49, 110]

2.3.3 Formulation mathématique

Les grandeurs introduites dans la section précédente de façon élémentaire sont en fait bien connues des géomètres, et ont une portée plus générale en géométrie différentielle complexe. L'objet de cette partie est de mettre rapidement en contexte mathématique la Berry-ologie introduite précédemment.

Appelons \mathcal{C} le cristal, défini sur le réseau de Bravais \mathbb{Z}^2 . Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ est défini sur l'espace de Hilbert $\ell^2(\mathcal{C}, \mathbb{C})$ des fonctions de carré sommable sur le cristal.

À \mathbf{k} fixé, l'ensemble des états de Bloch $\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \{|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle\}_n$ où \mathbf{k} est pris dans la première zone de Brillouin forme un espace vectoriel de dimension N égale au nombre d'orbitales dans la maille élémentaire du cristal. Dans le cas du graphène, $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ sera par exemple un espace de dimension 2. L'ensemble $\mathcal{H} = \{\mathcal{H}_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}}$ est un fibré vectoriel à N dimensions sur la PZB (un tore), c'est-à-dire qu'à chaque \mathbf{k} on associe un espace de dimension N . Les $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ sont appelés *fibres* de \mathcal{H} . On appelle *section* une fonction $\mathbf{k} \mapsto f_{\mathbf{k}}$ qui associe à chaque \mathbf{k} un élément de $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$. Les fonctions de Bloch $\Psi_n : \mathbf{k} \mapsto \Psi_{n\mathbf{k}}$ sont des exemples de sections.

Les $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ sont *a priori* décorrélés les uns des autres. Afin de comparer deux vecteurs dans des $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ différents, il est possible de les « relier » entre eux en choisissant une connexion. Une *connexion* est la donnée d'une dérivée covariante des sections du fibré, et elle définit un transport parallèle : comme $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ et $|\Psi_{n\mathbf{k}'}\rangle$ vivent dans des espaces différents, il faut pouvoir transporter parallèlement le second dans l'espace du premier pour pouvoir les comparer. Ce choix de transport parallèle n'est pas unique, mais certains choix sont plus physiques que d'autres.

15. Dans cette jauge, le calcul de la phase de Berry doit prendre en compte la différence de valeurs de u_{nk} sur les bords de la zone de Brillouin, en plus de la circulation de la connexion.

Les variétés riemanniennes n'ont besoin que d'une seule quantité (à savoir le tenseur métrique) pour être complètement caractérisées (la métrique définit naturellement la connexion de Lévi-Civita). Les variétés complexes que l'on considère ici possèdent entre guillemets un degré de liberté supplémentaire dû à leur caractère complexe : les états $|u_{nk}\rangle$ sont des vecteurs complexes, lors d'un transport parallèle il faut suivre leur norme (*via* le tenseur métrique) et leur phase (*via* la courbure de Berry).

Pour un fibré trivial comme \mathcal{H} , la donnée d'une famille de sections suffit à définir le choix de la connexion alors donnée par l'équation (3) de la Réf. [35]. Ces sections sont des bases orthonormées de \mathcal{H}_k pour tout k . On notera que le caractère trivial du fibré \mathcal{H} a une conséquence importante sur les nombres de Chern des bandes du système :

$$\sum_n C_n = 0. \quad (2.80)$$

Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_k$ sur le N -espace vectoriel peut être représenté sous forme matricielle, et cette représentation dépendra de la base de sections choisie, par exemple les bases I ou II définies ci-dessus. Le choix de la base II s'avère plus physique, puisque la connexion est reliée à la transformée de Fourier de l'opérateur position \hat{r} [35, 36]. Pour une description plus approfondie de cette formulation mathématique de la topologie des bandes, ainsi qu'à l'application à un modèle sur réseau en nid d'abeille, on se reportera par exemple à la revue de D. Carpentier [20].

2.4 Symétries discrètes

Lorsqu'un système est invariant par une transformation, on dit que cette transformation est une symétrie du système. La présence d'une symétrie impose des contraintes sur certaines grandeurs physiques telles que le hamiltonien. Dans le cas d'un cristal, la périodicité du potentiel cristallin est par exemple à l'origine du théorème de Bloch : le hamiltonien commute avec tous les opérateurs de translation par des vecteurs du réseau de Bravais.

Certaines transformations sont particulièrement pertinentes dans le cas de modèles cristallins : la symétrie de renversement du temps, la symétrie d'inversion, et les symétries chirales. L'objectif sera ici de définir ces symétries, et d'en déduire des conséquences sur le hamiltonien, ses états propres, ses énergies propres, et les quantités géométriques.

2.4.1 Symétrie de renversement du temps

Transformation de renversement du temps

Une première symétrie discrète est l'opération de renversement du temps \mathcal{T} . Celui-ci laisse l'opérateur position invariant, mais oppose les impulsions des particules. On peut montrer que c'est un opérateur anti-unitaire qu'on écrit [13]

$$\mathcal{T} = UK, \quad (2.81)$$

où U est une matrice unitaire, et K un opérateur qui prend le complexe conjugué de toutes les quantités à sa droite (opérateur qui ne peut pas être représenté comme une matrice). Dans le cas de particules sans spin $U = 1$ convient, et $\mathcal{T} = K$ est simplement l'opérateur de conjugaison

CHAPITRE 2. INTRODUCTION À LA THÉORIE GÉOMÉTRIQUE DES BANDES

complexe. Dans la suite de la discussion, nous nous plaçons dans ce cas particulier où le hamiltonien ne dépend que de l'espace et non du spin des particules.

Dans le cas d'un hamiltonien de liaisons fortes (2.46), le renversement du temps revient dans l'espace réel à $t_{ij} \rightarrow t_{ij}^*$ (puisqu'il conserve l'opérateur position $\mathcal{T}\hat{r} = \hat{r}\mathcal{T}$). Dans l'espace réciproque, il change $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ car

$$\mathcal{T}|\mathbf{k}, \ell\rangle = \mathcal{T} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}, \ell\rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}, \ell\rangle \mathcal{T} = |-\mathbf{k}, \ell\rangle \mathcal{T}. \quad (2.82)$$

Ainsi, lorsqu'on applique le renversement du temps, la décomposition (2.46) montre que $\mathcal{H}_{\mathbf{k}} \rightarrow \mathcal{H}_{-\mathbf{k}}^*$ et les énergies deviennent $E_{n\mathbf{k}} \rightarrow E_{n-\mathbf{k}}$.¹⁶

Systèmes symétriques par \mathcal{T}

Supposons que le renversement du temps soit une symétrie du système, c'est-à-dire

$$[\hat{\mathcal{H}}, \mathcal{T}] = 0 \quad \text{ou} \quad \mathcal{T}\hat{\mathcal{H}}\mathcal{T}^{-1} = \hat{\mathcal{H}}. \quad (2.83)$$

Dans l'espace réel, la symétrie par renversement du temps impose à la matrice d'être réelle : $t_{ij} = t_{ij}^*$ (on verra avec la substitution de Peierls qu'un champ magnétique brise cette symétrie). Dans l'espace réciproque, la matrice hamiltonienne vérifie

$$\boxed{\mathcal{H}_{-\mathbf{k}}^* = \mathcal{H}_{\mathbf{k}}}. \quad (2.84)$$

On en déduit que si $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ est un état propre de $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ d'énergie $E_{\mathbf{k}}$, alors $\mathcal{T}|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ est aussi état propre de $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$ d'énergie $E_{-\mathbf{k}}$. Le spectre est donc pair en \mathbf{k} .

Tous les modèles que nous considérerons auront cette symétrie en l'absence de champ magnétique. Un exemple de modèle brisant le renversement du temps est le modèle de Haldane [60].

Conséquences sur les quantités géométriques

Sous l'action de \mathcal{T} , les $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sont transformées en $u_{n-\mathbf{k}}(\mathbf{r})^*$. À partir des expressions (2.77), (2.78) et (2.79), on peut calculer les nouvelles quantités géométriques après l'opération de renversement du temps [13] :

$$\begin{aligned} g_{n\mathbf{k},ij} &\longrightarrow g_{n-\mathbf{k},ij} \\ \Omega_{n\mathbf{k}} &\longrightarrow -\Omega_{n-\mathbf{k}} \\ \mathbf{m}_{n\mathbf{k}} &\longrightarrow -\mathbf{m}_{n-\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (2.85)$$

À l'image d'un champ magnétique et d'une aimantation respectivement, la courbure de Berry et le moment orbital changent de signe après renversement du temps.

2.4.2 Symétrie d'inversion spatiale

Transformation d'inversion

Beaucoup de cristaux possèdent une symétrie d'inversion spatiale ponctuelle ; c'est-à-dire qu'il existe un point à la position \mathbf{r}_0 (sur le réseau ou non) tel que le cristal après rotation de 180° autour de ce point se superpose au cristal initial (ce qui n'impose pas qu'un atome A soit envoyé sur un

16. Dans le cas des particules avec spin, ce résultat se généralise en reliant deux énergies reliées à des spins opposés.

autre atome A). Par définition de cette transformation, un point r de l'espace se transforme en r' vérifiant

$$\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0 = -(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (2.86)$$

Dans le cas d'un réseau carré par exemple, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{0}$ convient, et la transformation d'inversion revient à opposer toutes les positions. Dans le cas d'un réseau sur nid d'abeille, \mathbf{r}_0 peut être choisi au milieu d'un lien reliant les deux atomes dans la maille, et les atomes A et B seront inversés.

Sans détailler les calculs, on retiendra que pour les réseaux que nous étudierons dans les chapitres suivants (carré, triangulaire et nid d'abeille), l'effet sur la matrice hamiltonienne est de changer $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$; de plus, pour le nid d'abeille, les atomes A et B sont échangés.

Cependant, un réseau peut posséder une symétrie d'inversion sans que le modèle en lui-même soit symétrique. L'exemple du nitrure de bore est emblématique : le réseau nid d'abeille est symétrique par inversion avec un centre d'inversion au milieu d'un lien entre deux atomes, mais si les atomes A et B ont des énergies différentes, alors le hamiltonien n'est pas invariant.

Conséquences d'une symétrie d'inversion

Si un modèle possède une symétrie d'inversion $[\hat{\mathcal{H}}, \mathcal{I}] = 0$, de même que pour la symétrie de renversement du temps, le spectre est pair en \mathbf{k} . De plus, les quantités géométriques se transforment de la façon suivante :

$$\begin{aligned} g_{n\mathbf{k},ij} &\longrightarrow g_{n-\mathbf{k},ij} \\ \Omega_{n\mathbf{k}} &\longrightarrow \Omega_{n-\mathbf{k}} \\ \mathbf{m}_{n\mathbf{k}} &\longrightarrow \mathbf{m}_{n-\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Toutes les fonctions géométriques d'un modèle possédant une symétrie d'inversion sont donc paires en \mathbf{k} .

Une conséquence importante pour les systèmes possédant la symétrie de renversement du temps et une symétrie d'inversion est que la courbure de Berry est nulle, partout où les $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ sont bien définis (c'est-à-dire si le spectre n'est pas dégénéré). En revanche, cela n'impose au tenseur géométrique que d'être pair. Nous reviendrons sur cette situation dans le CHAP. 7 lors de l'étude du modèle à deux bandes sur réseau carré où on montrera que les effets interbandes ne sont contrôlés que par le tenseur métrique.

2.4.3 Symétrie chirale

Un autre type de symétrie discrète peut se produire : il peut exister un opérateur unitaire S qui anti-commute avec le hamiltonien $\{\hat{\mathcal{H}}, S\} = 0$ tout en étant une symétrie $S^2 = \mathbb{1}$. Cette situation se présente fréquemment lorsque le système possède un degré de liberté interne.

Réseaux bipartis

Un *réseau biparti* est un graphe où l'on peut séparer tous les sommets en deux familles U et V telles que tous les liens connectent un élément de U à un élément de V . Par exemple, un réseau carré est biparti, un réseau nid d'abeille est biparti avec $U = \{\text{atomes } A\}$ et $V = \{\text{atomes } B\}$, tant qu'on ne considère pas de potentiel sur site. Le modèle du graphène avec sauts seconds voisins n'est pas biparti puisqu'il connecte des atomes A aux atomes A ; et de même le modèle du nitrure de bore n'est pas biparti puisque le potentiel sur site est considéré comme un lien avec retour sur le même site.

CHAPITRE 2. INTRODUCTION À LA THÉORIE GÉOMÉTRIQUE DES BANDES

Les réseaux bipartis sont des exemples de systèmes présentant une symétrie chirale, souvent appelée *symétrie de sous-réseau* dans ce contexte. Nous verrons que le hamiltonien des modèles sur réseau biparti à deux atomes par maille s'écrit à l'aide de deux matrices de Pauli (par exemple σ_x et σ_y pour le graphène); laissant ainsi la dernière (σ_z) anti-commuter avec $\hat{\mathcal{H}}$.

Conséquence d'une symétrie chirale

Soit \mathcal{S} un opérateur unitaire qui anti-commute avec le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}\mathcal{S} = -\mathcal{S}\hat{\mathcal{H}}$. Si $|\Psi\rangle$ est un état propre du hamiltonien d'énergie E , alors $\mathcal{S}|\Psi\rangle$ est également état propre d'énergie $-E$: les deux bandes étant symétriques par rapport à $E = 0$.

Le cas des modèles à trois bandes est particulièrement intéressant : un modèle à trois bandes possédant la symétrie chirale a deux bandes appariées, et sa troisième est nécessairement une bande plate à énergie nulle. Cette symétrie n'étant pas brisée en présence d'un champ magnétique, la bande plate est inerte avec le champ magnétique. Cependant, nous verrons au CHAP. 8 que les caractéristiques magnétiques du système peuvent être grandement altérées par l'existence de cette bande (modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$).

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons introduit la théorie des bandes de Bloch, puis l'approximation des liaisons fortes. Cette méthode est l'une des méthodes d'approximation les plus utilisées en physique des solides pour étudier les systèmes avec et sans interaction. La simulation de systèmes de matière condensée avec des expériences d'atomes froids permet de réaliser exactement des modèles de liaisons fortes, sur réseau carré ou nid d'abeille (on consultera par exemple la revue de N. Goldman [53] à ce sujet). Nous avons mis l'accent sur des aspects géométriques peu connus lors de modèles à plusieurs atomes par maille, en particulier le choix de la base d'écriture de la matrice hamiltonienne, liberté qui a provoqué une certaine confusion lors des premiers travaux sur les réseaux hexagonaux (voir la Réf. [10]). Nous avons introduit une vision géométrique moderne de théorie des bandes, qui nous permettra de formuler et d'interpréter le plus simplement possible la susceptibilité magnétique orbitale. Enfin, nous avons détaillé trois types de symétries discrètes qui se retrouveront dans les modèles étudiés par la suite, symétries qui imposeront des contraintes sur la forme de la susceptibilité orbitale.

Chapitre 3

Magnétisme dans un modèle de liaisons fortes

Dans le CHAP. 1, nous avons introduit une méthode systématique pour inclure les effets du champ magnétique dans le hamiltonien d'un système de particules *via* le couplage minimal, et dans le CHAP. 2, nous avons défini l'approximation de liaisons fortes permettant de simplifier l'approche des propriétés électroniques dans un potentiel périodique. Si cette approximation s'avère très pratique, la façon dont le champ magnétique peut être intégré dans le hamiltonien n'est pas évidente. Dans cette partie, il s'agira de détailler une méthode appelée *substitution de Peierls* qui permet de concilier approximation de liaisons fortes et champ magnétique. Cette méthode bien connue présente des limitations que nous détaillerons, et nous montrerons comment les dépasser. Ensuite, nous l'appliquerons pour dériver le papillon de Hofstadter, et introduire une méthode originale de détermination de la susceptibilité orbitale. Enfin, nous détaillerons la démonstration d'une règle de somme du grand potentiel d'un modèle de liaisons fortes avec la substitution de Peierls, qui contraint la susceptibilité orbitale de tels systèmes.

3.1 Approche à la Peierls du magnétisme dans l'approximation de liaisons fortes

Lors de l'établissement d'un champ magnétique, celui-ci va modifier plusieurs grandeurs électroniques, ce qui va engendrer différentes contributions à la réponse magnétique totale :

- Les propriétés atomiques vont tout d'abord être altérées. Ceci a été vu dans le CHAP. 1, et a pour effet de modifier les énergies des états atomiques $|i\rangle$. À la contribution diamagnétique de Larmor toujours présente, s'ajoute le paramagnétisme de Langevin si le moment orbital atomique est non nul. L'orbitale $|i\rangle$ n'étant plus exactement un état propre du hamiltonien, des termes de couplages entre orbitales sont possibles, ce qui donne naissance à la contribution de Van Vleck.
- Parce que le potentiel vecteur varie spatialement, la base des orbitales à considérer pour écrire les états de Bloch diagonalisant le hamiltonien ne sera plus $\{|i\rangle\}$, mais une famille composée

CHAPITRE 3. MAGNÉTISME DANS UN MODÈLE DE LIAISONS FORTES

d'états transformés de jauge¹ de ceux-ci. Même si les états étaient initialement orthogonaux, un recouvrement va apparaître, et va modifier l'amplitude de saut t_{ij} entre sites du réseau, en phase et en module.

En champ magnétique, on prévoit donc un hamiltonien liaisons fortes (2.23) de la forme

$$\hat{\mathcal{H}}(B) = \sum_i \varepsilon_i(B) {}_B\langle \Phi_i | \langle \Phi_i |_B + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij}(B) {}_B\langle \Phi_i | \langle \Phi_j |_B, \quad (3.1)$$

où les $t_{ij}(B)$ sont maintenant des paramètres complexes, et les nouvelles orbitales $|\Phi_i\rangle_B$ sont à définir à partir des orbitales sans champ $|i\rangle$ et forment une base orthonormée. Afin de trouver ces nouveaux paramètres, nous allons suivre la procédure proposée par Matsuura et Ogata [86].

Modification des quantités atomiques

Comme nous l'avons précisé, l'énergie des orbitales atomiques va être modifiée en présence d'un champ magnétique. On se cantonnera à écrire phénoménologiquement

$$\boxed{\varepsilon_i(B) = \varepsilon_i + \varepsilon'_i B + \varepsilon''_i \frac{B^2}{2}} \quad (3.2)$$

où les paramètres ε'_i et ε''_i sont déterminés par la résolution de l'équation de Schrödinger vérifiée par l'orbitale $|i\rangle$. La correction ε'_i est non-nulle uniquement si le système brise la symétrie par renversement du temps. Dans les cas les plus fréquents, $\varepsilon_i(B) = \varepsilon_i + \varepsilon''_i \frac{B^2}{2}$.

Insistons sur le fait que les énergies considérées sont bien les énergies des orbitales électroniques sur lesquelles nous allons former les états de Bloch, et sont donc les énergies des électrons itinérants. Les électrons de cœur ne sont pas considérés dans cette approche, même si en toute rigueur ils contribuent également à la réponse magnétique totale du système de la même manière.

Transformation de jauge

En l'absence de champ magnétique, toutes les orbitales $|i\rangle$ ont le même hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}^{\text{at}}$. En présence d'un champ magnétique, celui-ci est modifié avec $\hat{\mathbf{P}} \rightarrow \hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Or, le potentiel vecteur dépendant linéairement de la position de l'atome, chaque atome aura un potentiel vecteur (et donc un hamiltonien) différent, translaté par rapport au potentiel de l'atome placé à l'origine du repère. Le champ magnétique étant constant sur le réseau tous les sites doivent être équivalents : cet effet est nécessairement non-physique, et peut être éliminé par une transformation de jauge. Définissons la *phase de Peierls*

$$\theta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \quad (3.3)$$

reliée à l'intégrale curviligne du potentiel vecteur, intégrale calculée sur la ligne droite joignant les deux positions \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 . Comme

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, e^{i\theta(\mathbf{R}, \hat{\mathbf{r}})} \right] = -e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) e^{i\theta(\mathbf{R}, \hat{\mathbf{r}})}, \quad (3.4)$$

1. On parle ici et dans tout ce chapitre de jauge *électromagnétique*, à ne pas confondre avec la jauge de Berry du chapitre précédent.

3.1. APPROCHE À LA PEIERLS DU MAGNÉTISME DANS L'APPROXIMATION DE LIAISONS FORTES

on définit alors de nouvelles orbitales

$$|i\rangle_B = \exp \left[-i \frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_i}^{\hat{\mathbf{r}}} \mathbf{A}(\mathbf{r}', t) \, d\mathbf{r}' \right] |i\rangle = e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}})} |i\rangle, \quad (3.5)$$

qui sont physiquement équivalentes aux anciennes (puisqu'elles en sont déduites par une transformation de jauge), mais qui « voient » maintenant toutes le même hamiltonien, celui de l'atome placé à l'origine du repère. En effet :

$$\left(\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) \right) |i\rangle_B = e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}})} \hat{\mathbf{P}} |i\rangle, \quad (3.6)$$

d'où

$$\hat{\mathcal{H}}(B) |i\rangle_B = e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}})} \hat{\mathcal{H}} |i\rangle. \quad (3.7)$$

Nouvelle base de fonctions orthonormées

À cause de la modification de jauge, les nouvelles orbitales (3.5) ne sont plus orthogonales entre elles dès que $B \neq 0$ (à supposer qu'elles l'étaient initialement, c'est-à-dire que nous ayons considérés les états de Wannier plutôt que les orbitales atomiques « nues », cf. discussion dans le CHAP. 2), et on peut définir l'intégrale de recouvrement

$$S_{ij} = {}_B \langle i | j \rangle_B - \delta_{ij}. \quad (3.8)$$

Une base adéquate pour décomposer le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}(B)$ serait formée de combinaisons linéaires d'orbitales $|i\rangle_B$:

$$|\Phi_i\rangle_B = \sum_j \frac{1}{\delta_{ij} + S_{ij}} |j\rangle_B \approx |i\rangle_B - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} S_{ij} |j\rangle_B. \quad (3.9)$$

La famille $\{|\Phi_i\rangle_B\}$ est orthonormée, les coefficients de la combinaison linéaire ayant été choisis pour.

Modification des amplitudes de sauts

Il reste maintenant à obtenir les nouvelles amplitudes de saut du hamiltonien liaisons fortes (3.1) sous champ magnétique, définies par

$$t_{ij}(B) = {}_B \langle \Phi_j | \hat{\mathcal{H}}(B) | \Phi_i \rangle_B \quad (3.10)$$

$$= {}_B \langle j | \hat{\mathcal{H}}(B) | i \rangle_B + \mathcal{O}(B). \quad (3.11)$$

L'orthogonalisation des orbitales sous champ implique des corrections complexes des t_{ij} qui viennent modifier normes et phases des t_{ij} .

Le premier terme du second membre de (3.11) va également modifier les liens dans le hamiltonien puisque :

$${}_B \langle j | \hat{\mathcal{H}}(B) | i \rangle_B = \langle j | e^{i(\theta(\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}}) + \theta(\hat{\mathbf{r}}, \mathbf{R}_j))} \hat{\mathcal{H}} | i \rangle = e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)} \langle j | e^{i\Phi_{\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}}, \mathbf{R}_j}} \hat{\mathcal{H}} | i \rangle \quad (3.12)$$

où l'on a défini $\Phi_{\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}}, \mathbf{R}_j}$ comme l'intégrale du potentiel vecteur le long du chemin fermé $\mathbf{R}_i \rightarrow \hat{\mathbf{r}} \rightarrow \mathbf{R}_j \rightarrow \mathbf{R}_i$:

$$\Phi_{\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}}, \mathbf{R}_j} = -\frac{e}{\hbar} \oint_{\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}}, \mathbf{R}_j} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = -\frac{e}{\hbar} \iint_{\mathbf{R}_i, \hat{\mathbf{r}}, \mathbf{R}_j} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}. \quad (3.13)$$

CHAPITRE 3. MAGNÉTISME DANS UN MODÈLE DE LIAISONS FORTES

Toujours perturbativement en champ magnétique, on peut développer l'exponentielle :

$$\left\langle j \left| \hat{\mathcal{H}}(B) \right| i \right\rangle_B = e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)} \left\langle j \left| \hat{\mathcal{H}} \right| i \right\rangle + \mathcal{O}(B) = e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)} (t_{ij} + \mathcal{O}(B)). \quad (3.14)$$

Finalement, les coefficients dans le hamiltonien en champ magnétique sont différents en module et en phase des t_{ij} . En regroupant les deux effets des équations (3.11) et (3.14), on peut écrire de façon phénoménologique

$$t_{ij}(B) = e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)} \left(t_{ij} + t'_{ij} B + t''_{ij} \frac{B^2}{2} \right). \quad (3.15)$$

Lorsque le système est symétrique par renversement du temps, $t'_{ij} = 0$; et fréquemment nous avons $t''_{ij} < 0$, ce qui conduit à une contribution diamagnétique, et à une contraction de la bande d'énergie.

Dans son article séminal de 1933, Peierls [114] avait déjà compris chacune des conséquences du champ magnétique, aussi bien sur la phase des amplitudes de saut que sur leur module, ou sur les énergies de site. La postérité n'a cependant retenu que la célèbre *substitution de Peierls* qui ne prend en compte que la modification de la phase des t_{ij} , et que l'on résume fréquemment ainsi : prendre en compte le champ magnétique dans un modèle de liaisons fortes revient à faire la substitution

$$t_{ij} \longrightarrow t_{ij} e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)} \quad (3.16)$$

dans le hamiltonien.

Ces différents effets du champ magnétique ont été ré-exposés dans l'article récent de Matsuura *et al.* [86], et les auteurs y présentent la susceptibilité totale d'un modèle à une bande sur réseau carré à une bande en la comparant à celle obtenue par la substitution de Peierls seule (cf. CHAP. 5). En particulier, ils montrent que cette contribution qui est une contribution de mer de Fermi n'est pas négligeable devant la contribution de surface de Fermi produite par la substitution de Peierls.

3.2 Limites de la substitution de Peierls

Calcul de l'intégrale curviligne

Pour deux sites voisins i et j , la substitution de Peierls et le choix de la ligne droite comme chemin d'intégration du potentiel vecteur semble intuitif. Cependant, le champ magnétique n'étant pas à rotationnel nul, le choix du chemin est important. Ceci est d'autant plus critique dans le cas de deux sites i et j qui ne sont pas plus proches voisins, mais avec un site k entre les deux : quel chemin d'intégration choisir entre i et j ? La ligne droite (ij), ou une ligne brisée (ikj) qui suit les liens (ik) et (kj)? Boykin *et al.* [18], après un calcul fastidieux en repartant du hamiltonien microscopique et en opérant le couplage minimal, ont confirmé que le choix de la ligne droite comme chemin d'intégration est celui physiquement correct dans tous les cas de figure.

Intensités des champs magnétiques

- En matière condensée, l'hypothèse de faible champ magnétique est toujours vérifiée : prenons $B \sim 1$ T, l'aire typique de la cellule élémentaire est $a^2 \sim 10^{-20}$ m², alors

$$2\pi \frac{\phi}{\phi_0} \sim 2\pi \frac{10^{-19} \cdot 10^{-20}}{6 \cdot 10^{-34}} \sim 10^{-4} \ll 1 \quad (3.17)$$

3.2. LIMITES DE LA SUBSTITUTION DE PEIERLS

où ϕ est le flux de B à travers une cellule unité. Ceci justifie l'utilisation de la substitution de Peierls pour l'étude des modèles liaisons fortes en matière condensée sous champ magnétique puisque B est une perturbation.

- Il est cependant possible de la mettre en défaut avec des réseaux d'atomes froids [3] ou des réseaux de Moiré [26], l'aire de la cellule élémentaire du réseau résultant peut être plusieurs ordres de grandeur plus grande, et le flux magnétique étant alors de l'ordre de ϕ_0 .² Mentionnons aussi la physique des réseaux de fils supraconducteurs pour lesquels la température de transition T_c est reliée au bas de bande du spectre de Hofstadter. Le pas de ces réseaux est tel que le champ correspondant à un quantum de flux est de l'ordre de quelques mT. Dans ce cas, la température critique est reliée à la plus basse valeur propre de l'équation de Ginzburg-Landau sur réseau qui est formellement équivalente à un problème de liaisons fortes sous champ donc au spectre de Hofstadter [113].
- Lorsqu'on se place dans un régime où le potentiel périodique est une perturbation comparée au champ magnétique, c'est-à-dire lorsque le potentiel périodique vient lever la dégénérescence des niveaux de Landau, Hasegawa et al. [61] et plus systématiquement Montambaux [95] ont montré que l'énergie d'un gaz d'électrons dans un modèle de liaisons fortes avec un quantum de flux par électron est toujours plus petite que l'énergie sans champ magnétique, et donc le système favoriserait cet état avec un niveau de Landau rempli. Cette prédiction doit être prise avec précaution puisqu'elle s'appuie sur des calculs utilisant la substitution de Peierls utilisée dans de forts champs magnétiques. Un commentaire à cette lettre [104] modère ce résultat en montrant qu'il ne s'applique pas pour tout potentiel périodique, et en particulier que le phénomène peut s'inverser lorsque la force du potentiel augmente.
- En champ magnétique fort, Alexandrov et Capellmann [4] précisent de façon semi-quantitative une correction à la formule de Peierls, que ce dernier avait qualitativement comprise : l'intégrale de saut entre deux voisins va diminuer exponentiellement avec le champ magnétique, ce qui va contribuer à localiser les électrons et donc à augmenter leur énergie. La réponse sera donc d'autant plus diamagnétique. Comme déjà mentionné, la Réf. [86] discute en détail ces corrections qui vont affecter la susceptibilité orbitale.

Limite des électrons presque libres

Alexandrov et Capellmann [4] étudient le régime opposé du modèle des liaisons fortes, à savoir celui des électrons presque libres. Ils mettent en avant que quelle que soit la densité électronique, la substitution de Peierls n'est pas utilisable dans l'approximation des électrons quasi-libres ; ceci étant dû à la forte dégénérescence des états propres du système en présence d'un champ magnétique, comparables à des niveaux de Landau. Si cette non-validité était effectivement attendue dans une limite opposée à l'approximation des liaisons fortes, il est bon de garder à l'esprit que la substitution de Peierls n'est pas universelle.

Champs magnétiques fortement inhomogènes

La substitution de Peierls peut également être mise en défaut dans des modèles de liaisons fortes avec des faibles champs magnétiques, si ceux-ci sont rapidement variables à l'échelle de la

2. Nous reviendrons brièvement sur cette approximation lors de l'étude du papillon de Hofstadter, qui consiste justement à étudier les champs magnétiques forts.

cellule unité. Ibañez-Azpiroz *et al.* [67] considèrent le modèle de Haldane pour lequel le champ magnétique change de signe à l'intérieur d'une maille élémentaire, ce qui implique une forte variation du potentiel vecteur à l'échelle de la maille atomique. Le modèle de liaisons fortes en champ magnétique est dérivé de deux façons différentes : (i) par la substitution de Peierls (ii) en considérant le potentiel vecteur comme variant à la période du potentiel cristallin, et en le prenant en compte directement dans le modèle. Si on s'attend à ce que la substitution de Peierls ne dise rien du module des t_{ij} et des énergies $\varepsilon_i(B)$, leurs résultats montrent que la substitution de Peierls donne des résultats quantitativement **et** qualitativement faux pour la phase des t_{ij} , et ce même à faible champ magnétique (voir en particulier la FIG. 3 de la Réf. [67]).

Couplage minimal dans le hamiltonien de Bloch

La substitution de Peierls ainsi définie permet de prendre en compte le champ magnétique dans l'espace réel. Très souvent, on développe le hamiltonien de Bloch (dans l'espace complexe) en puissances de $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ dans le voisinage d'un point \mathbf{k}_0 . Comment intégrer le champ magnétique directement dans ce hamiltonien simplifié ?

Peierls montre que dans la limite de validité de sa substitution, le champ magnétique peut être pris en compte en opérant un « couplage minimal » comme on le ferait pour le hamiltonien microscopique, c'est-à-dire remplacer :

$$\mathbf{k} \longrightarrow \hat{\Pi} = \frac{1}{\hbar}(\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})) \quad (3.18)$$

dans la matrice hamiltonienne $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$, qui (re)devient un opérateur qu'il faut diagonaliser. [70, 114] Ce remplacement, valable tant que le potentiel vecteur ne varie pas trop vite à l'échelle de la maille atomique, est également appelé « substitution de Peierls » dans la littérature ; afin d'éviter les confusions, nous l'appellerons *substitution de Peierls continue*. La proposition de Peierls constitue une première méthode d'obtention d'un hamiltonien effectif en présence de champ magnétique ; travaux qui seront enrichis par la suite (voir l'annexe D).

3.3 Calcul de la susceptibilité *via* le papillon de Hofstadter

La substitution de Peierls donne une prescription dans l'espace réel pour introduire le champ magnétique dans le hamiltonien de liaisons fortes. L'objet de cette partie est de présenter une méthode de calcul semi-numérique de la susceptibilité orbitale d'un modèle de liaisons fortes à partir du hamiltonien dans l'espace réel, que nous utiliserons sur un modèle plus proches voisins (ppv) sur réseau carré. Nous allons présenter l'équation de Harper, ainsi que le papillon de Hofstadter, deux notions bien connues, mais que nous utiliserons ici de manière originale. Cette méthode de calcul de χ_{orb} ne dépendant que du hamiltonien de liaisons fortes $\hat{\mathcal{H}}$ et de la substitution de Peierls, elle servira dans tout le manuscrit de point de comparaison numérique pour les formules analytiques dérivées indépendamment dans l'espace réciproque.

3.3.1 Modèle à une bande sur réseau carré

Afin de mettre en application la substitution de Peierls, on choisit un modèle simple sur réseau carré à un atome par maille, avec des sauts limités aux premiers voisins. Celui-ci est présenté FIG. 3.1, soit a le pas du réseau et t l'amplitude de saut entre plus proches voisins.

3.3. CALCUL DE LA SUSCEPTIBILITÉ VIA LE PAPILLON DE HOFSTADTER

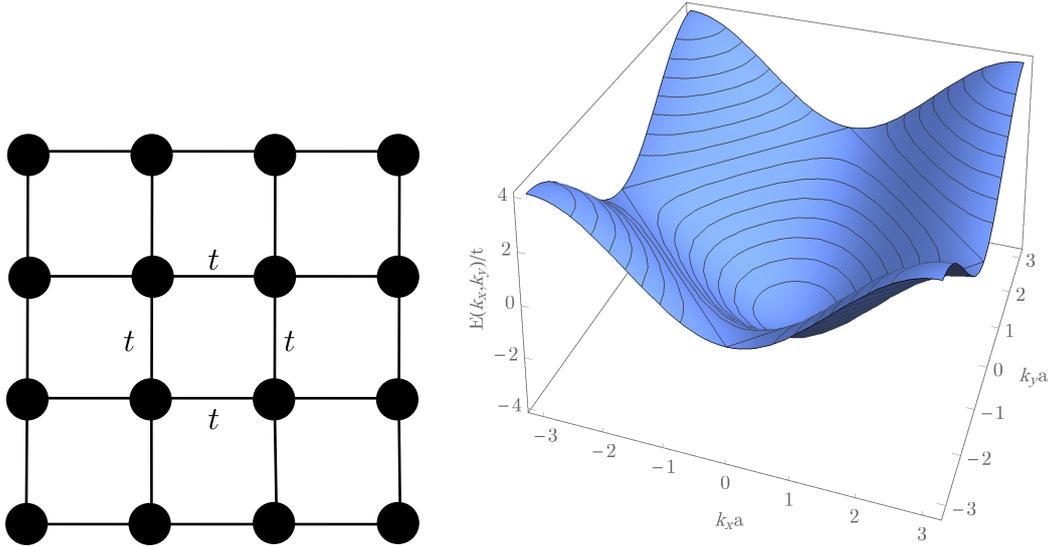


FIGURE 3.1 – À gauche, le réseau carré avec l'intégrale de saut entre plus proches voisins (ppv) t . À droite le spectre du modèle à une bande associé sur réseau carré (en ordonnée E/t variant entre -4 et 4 , en abscisses $k_x a$ et $k_y a$ sur une zone de Brillouin). Le minimum de la bande est atteint au point Γ , et il présente des points cols sur les limites de la PZB.

Le hamiltonien de ce modèle de liaisons fortes dans l'espace réel s'écrit³

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle\langle j| \quad (3.19)$$

$$= -t \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} (|m,n\rangle\langle m+1,n| + |m,n\rangle\langle m-1,n| + |m,n\rangle\langle m,n+1| + |m,n\rangle\langle m,n-1|) \quad (3.20)$$

en repérant un site i par deux indices $(m,n) \in \mathbb{Z}^2$. Puisqu'il n'y a qu'une orbitale par atome, et un atome par maille, celui-ci a un spectre donné par (2.20), ce qui donne dans notre cas :

$$E_{\mathbf{k}} = -2t (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)). \quad (3.21)$$

Ce spectre est présenté FIG. 3.1. Les vecteurs \mathbf{k} sont pris dans la première zone de Brillouin rectangulaire, d'aire $4\pi^2/a^2$. On remarque en particulier que près du bas de la bande, ce spectre peut être approximé par une relation de dispersion parabolique

$$E_{\mathbf{k}} \approx \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{m^*} = \frac{2ta^2}{\hbar^2}. \quad (3.22)$$

Un électron vérifiant cette relation de dispersion est « presque libre », dans le sens où sa relation de dispersion est quadratique, mais où sa masse propre m est remplacée par la masse effective du réseau m^* .

3. On choisit ici la convention où $t > 0$, avec un facteur $-t$ devant le hamiltonien ; cela a pour conséquence de donner un minimum de la relation de dispersion au point Γ . Dans le CHAP. 7, nous changerons de convention lors de l'étude des modèles à bandes plates, avec $t < 0$; ceci afin que la bande plate soit celle de plus basse énergie. Ce choix n'influence aucunement la physique du problème, et sert juste à en simplifier l'analyse.

3.3.2 Équation de Harper du réseau carré

Afin de simplifier les calculs, on choisit la jauge de Landau $\mathbf{A} = -By\mathbf{e}_x$, compatible avec un champ magnétique constant $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$. La phase de Peierls s'écrit alors :

$$\theta(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) = \frac{-e}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_j} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = \frac{eB}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_j} y dx = \frac{eB}{\hbar} \frac{y_i + y_j}{2} (x_j - x_i). \quad (3.23)$$

Celle-ci est en particulier nulle pour les liens verticaux puisque le potentiel vecteur leur est orthogonal. Une autre jauge aurait donné un résultat différent pour la phase de Peierls ; cependant, la quantité physique pertinente —la phase accumulée sur un cycle fermé— est reliée au flux du champ magnétique à travers celui-ci et est donc indépendante de la jauge.

En utilisant la substitution de Peierls, le hamiltonien du modèle sur réseau carré en présence d'un champ magnétique s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}}(B) = \sum_{\langle i,j \rangle} t e^{i\theta(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)} |i\rangle \langle j| = t \sum_{m,n \in \mathbb{Z}} (e^{i\theta_{m,n}} |m+1, n\rangle \langle m, n| + |m, n+1\rangle \langle m, n| + \text{h.c.}) \quad (3.24)$$

où $\mathbf{R}_i = m\mathbf{e}_x + n\mathbf{e}_y$ et

$$\theta_{m,n} = \frac{eB}{\hbar} na^2 = 2\pi n \frac{\phi}{\phi_0} = 2\pi f n \quad (3.25)$$

avec $\phi = Ba^2$, $\phi_0 = h/e$ le quantum de flux, et $f = \frac{\phi}{\phi_0}$ le flux réduit.

Définition

La *plaquette* du réseau est par définition la plus petite surface du réseau cristallin délimitée par des sauts entre sites. Dans ce modèle à un atome par maille, la plaquette est égale à la maille élémentaire qui est un carré de surface a^2 . Cependant, ceci n'est pas toujours vérifié, il suffit de penser par exemple au réseau carré à deux atomes par maille. La maille élémentaire est alors doublée, mais la plaquette reste identique. On retiendra que $\phi = Ba^2$ est le flux à travers la plaquette élémentaire du réseau.⁴

Théorème de Bloch magnétique

On remarque que la phase (3.25) ne dépend que de n . Le hamiltonien conserve sa périodicité selon (Ox) ; on peut donc appliquer le théorème de Bloch dans cette direction et on peut choisir les fonctions propres de $\hat{\mathcal{H}}(B)$ sous la forme

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} \tilde{\Psi}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.26)$$

où $\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}}$ est une fonction périodique selon (Ox) de période a . Cependant, le hamiltonien ayant perdu sa périodicité selon l'axe (Oy) , les fonctions propres ne peuvent se factoriser simplement selon cet axe, et sont donc à chercher sous la forme générale :

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_m e^{ik_x m a} \sum_n a_n e^{ik_y n a} |m, n\rangle, \quad (3.27)$$

4. Dans certains réseaux à plusieurs atomes par maille, il peut y avoir plusieurs plaquettes élémentaires. Si celles-ci ne sont pas commensurables, alors la méthode ci-après n'est pas utilisable.

3.3. CALCUL DE LA SUSCEPTIBILITÉ VIA LE PAPILLON DE HOFSTADTER

qui se ramène bien sûr à (2.17) si la périodicité est restaurée (c'est-à-dire $a_n = 1$ pour tout n). L'équation de Schrödinger associée $\hat{\mathcal{H}}|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = E_{\mathbf{k}}|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ est appelée *équation de Harper*, elle donne un système à N_y équations pour les coefficients a_n avec N_y le nombre d'atomes selon (Oy) . Pour un système infini, les a_n sont reliés par une infinité d'équations

$$E_{\mathbf{k}}a_n = te^{-ik_y a}e^{2i\pi f(n-\frac{1}{2})}a_{n-1} + te^{ik_y a}e^{2i\pi f(n+\frac{1}{2})}a_{n+1} + 2t \cos(k_x a) a_n. \quad (3.28)$$

Flux rationnels

Un cas se démarque par sa simplicité cependant, celui où $f = \phi/\phi_0$ est un nombre rationnel, que l'on peut écrire p/q . Dans cette situation, les équations de Harper vérifiées par a_n et a_{n+q} sont les mêmes, et on peut donc les chercher égaux. Ainsi, la suite infinie d'équations devient un système linéaire à q équations, qu'il est facile de résoudre numériquement, dans la limite où q ne dépasse pas la dizaine de milliers. Physiquement, avoir $f = \phi/\phi_0$ rationnel signifie qu'on a commensurabilité entre le flux passant à travers une maille élémentaire, et le flux élémentaire h/e .

Si, $f = \frac{p}{q}$, alors les t_{ij} sont périodiques de période qa . Le système récupère une périodicité globale qa dans la direction y , et se comporte comme un cristal sur réseau rectangulaire à q atomes par maille. Ces q atomes apportent q bandes magnétiques, souvent appelées *sous-bandes magnétiques*. On se placera toujours dans ce cas pour les approches numériques.

3.3.3 Papillon de Hofstadter

Grâce à la restauration du théorème de Bloch, il est possible de trouver facilement les énergies propres du réseau pour n'importe quel champ magnétique rationnel. Après l'étude de la structure mathématique de ces équations par Azbel [8], Hofstadter [66] traça le graphe des énergies propres E_n en fonction de la variable f pour le modèle une bande sur réseau carré. Celui-ci est présenté FIG. 3.2. Sa forme suggestive a laissé à la postérité le nom de *papillon de Hofstadter*, nom donné au graphe (E_n, f) pour tout modèle de liaisons fortes en champ magnétique.

Symétries

Le papillon de Hofstadter du réseau carré présente un grand nombre de propriétés, dont un caractère fractal. Celui-ci intéresse particulièrement les mathématiciens, et est considéré comme un objet d'étude en soit. Le papillon possède également des propriétés de symétrie :

- Tout d'abord, le papillon possède la symétrie $\phi \rightarrow \phi + \phi_0$, c'est-à-dire $f \rightarrow f + 1$. Pour cette raison, il n'est tracé qu'entre 0 et 1 sur la FIG. 3.2. Cette symétrie provient de la substitution de Peierls, car si $f = 1$, alors les phases de Peierls sont des multiples de 2π , et le hamiltonien est donc le même qu'en l'absence de champ. Évidemment, cette symétrie n'existe pas dans les systèmes réels, et n'est qu'un artefact de la modélisation. En effet, lorsque $f \sim 1$, le potentiel vecteur varie spatialement trop vite à l'échelle de la maille atomique pour que la substitution de Peierls soit justifiée (cf. SEC. 3.1). Il faut aller au-delà de cette approximation pour avoir un résultat physique cohérent.
- On peut aussi observer une symétrie $f \rightarrow 1 - f$, qui est équivalente avec la symétrie précédente, à une symétrie $f \rightarrow -f$. Celle-ci est une manifestation directe de la symétrie de renversement du temps que vérifie le système en l'absence de champ. Tous les modèles que

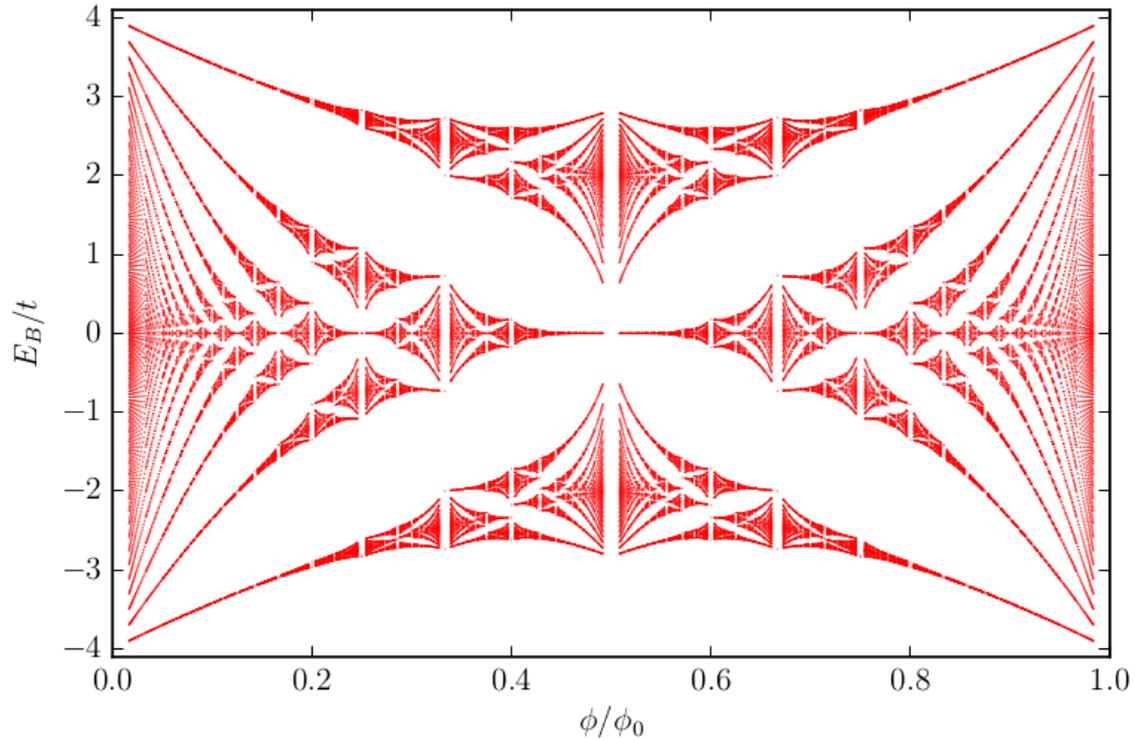


FIGURE 3.2 – Papillon de Hofstadter du modèle une bande sur réseau carré. On a tracé tous les $0 < p/q < 1$ avec $1 \leq q \leq 60$.

nous étudierons possèdent cette symétrie; le papillon du modèle de Haldane sur réseau nid d'abeille ne serait en revanche pas tenu d'avoir cette propriété.

- Enfin, le papillon possède une symétrie $E_n \rightarrow -E_n$. Celle-ci est reliée à la symétrie chirale du modèle sous-jacent, le réseau étant biparti.

Niveaux de Landau

Si globalement le papillon a l'air d'avoir une structure compliquée, il est possible d'en interpréter certaines parties. Le voisinage de $(f = 0, E_n = -4)$ en est un exemple : on observe une série de niveaux qui augmentent linéairement avec le champ magnétique, et qui sont également espacés en énergie pour un f donné. Ces niveaux résultent de la structure locale du spectre du modèle qui se trouve être quadratique en bas de bande. Ce sont des niveaux de Landau classiques espacés de $\hbar\omega_c$, avec une masse correspondant à la masse effective m^* du réseau dans l'approximation parabolique proche du bord de bandes.

Ces niveaux augmentent avec le champ magnétique, et donc si seuls ces niveaux sont peuplés, on prédit une réponse diamagnétique du système. Cette réponse est en tout point similaire à celle des électrons libres avec une masse effective (cf. SEC. 1.4).

3.3.4 Susceptibilité orbitale numérique

À l'aide du spectre en champ magnétique obtenu dans la partie précédente, on obtient toutes les propriétés thermodynamiques, en particulier la susceptibilité orbitale définie à l'équation (1.10). Les auteurs de la Réf. [112] utilisent également le spectre numérique en champ magnétique pour calculer la susceptibilité. Concrètement, le grand potentiel s'écrit

$$\Xi(\mu, T) = -k_B T \sum_{\text{états}} \ln \left(1 + e^{-\beta(E_n - \mu)} \right). \quad (3.29)$$

Dans un champ magnétique rationnel où $f = \frac{p}{q}$, le système présente q bandes d'énergies, d'où

$$\Xi(\mu, T) = -k_B T \sum_{\text{états}} \ln \left(1 + e^{-\beta(E_n - \mu)} \right) \quad (3.30)$$

$$= -k_B T \sum_{\mathbf{k}, \text{bandes}} \ln \left(1 + e^{-\beta(E_n(\mathbf{k}) - \mu)} \right) \quad (3.31)$$

$$= -k_B T \sum_{1 \leq i \leq q} \int \ln \left(1 + e^{-\beta(E_i(\mathbf{k}) - \mu)} \right) \frac{S d^2 k}{4\pi^2}. \quad (3.32)$$

La bande d'énergie s'est décomposée en q sous-bandes. En contre-partie, la première zone de Brillouin a été réduite d'un facteur q , ce qui assure la conservation du nombre d'états avant et après l'établissement du champ magnétique. On l'appelle PZB magnétique.

Utilisons l'astuce proposée dans la Réf. [95] pour simplifier ce calcul : la largeur de bande en l'absence de champ étant de l'ordre de grandeur de l'amplitude de saut t , pour un grand dénominateur $q \sim 1000$, les bandes d'énergies en présence du champ sont très étroites. Dans ces conditions, pour une fonction g dans l'espace réciproque suffisamment lentement variable,

$$\int g(\mathbf{k}) \frac{S d^2 k}{4\pi^2} \approx g(\mathbf{k}_0) \frac{S}{4\pi^2} \times S_{\text{PZB}} \quad (3.33)$$

avec \mathbf{k}_0 un vecteur d'onde quelconque de la PZB, et S_{PZB} l'aire de la PZB magnétique. Comme $S = N \times S_m = Na^2$ est la surface du système, et $S_{\text{PZB}} = \frac{2\pi}{a} \times \frac{2\pi}{qa}$, le grand potentiel s'écrit comme une simple somme :

$$\Xi(\mu, T) = -k_B T \frac{N}{q} \sum_{1 \leq i \leq 2q} \ln \left(1 + e^{-\beta(E_i(\mathbf{k}_0) - \mu)} \right), \quad (3.34)$$

dont on déduit la susceptibilité orbitale

$$\chi_{\text{orb}}(\mu, T) = -\frac{\mu_0}{S} \frac{\partial^2 \Xi}{\partial B^2} = -\frac{\mu_0 k_B T}{S} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \sum_{1 \leq i \leq 2q} \frac{N}{q} \ln \left(1 + e^{-\beta(E_i(\mathbf{k}_0) - \mu)} \right). \quad (3.35)$$

La figure 3.3 montre le résultat d'un tel calcul numérique pour le modèle sur réseau carré. Malgré la simplicité de ce modèle, de nombreuses choses sont à commenter sur cette susceptibilité, ce qui sera fait dans le CHAP. 5. On peut déjà remarquer un résultat spectaculaire : la susceptibilité n'est pas toujours diamagnétique comme l'annonçait la Réf. [6], et diverge même positivement à $\mu = 0$!

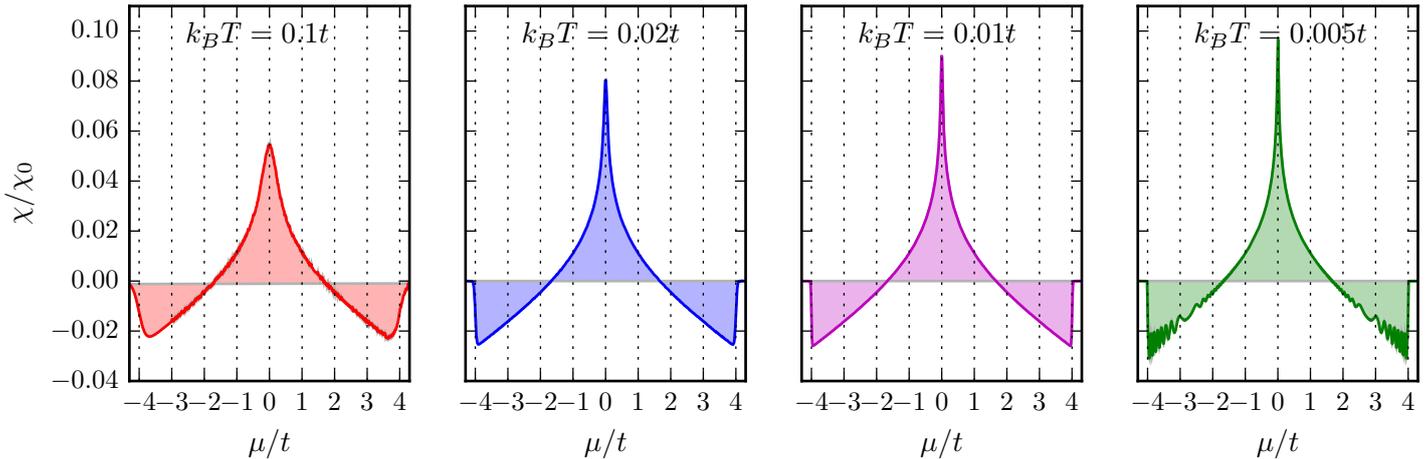


FIGURE 3.3 – Susceptibilité magnétique orbitale numérique du modèle à une bande sur réseau carré en fonction du potentiel chimique μ , tracée pour plusieurs températures. La susceptibilité est normalisée par $\chi_0 = \mu_0 t e^2 a^2 / \hbar^2$, et le potentiel chimique par la largeur de bande t . Lorsque T diminue, la divergence se fait plus piquée. De plus, pour le dernier graphe, on atteint la limite où l'énergie thermique n'est plus grande devant l'énergie magnétique (avec $p = 1, 2, 3$ et $q = 2201$); ce qui explique l'apparition d'oscillations.

Limites

Avant de clore cette partie, mentionnons les limites de cette méthode de calcul de la susceptibilité. Les températures de calcul utilisées dans la FIG. 3.3 mettent en avant le compromis nécessaire : on souhaite avoir la température la plus basse possible afin de bien discerner au mieux les éventuelles divergences et plateaux, mais on doit tout de même la choisir de telle sorte que l'énergie thermique reste grande devant l'énergie magnétique (qui correspond à l'espacement entre niveaux de Landau) afin de rester hors de la zone des oscillations quantiques ; une grande température va permettre aux électrons de passer d'un niveau de Landau à l'autre facilement, et va ainsi « lisser » le passage du potentiel chimique à travers les niveaux de Landau.

Regardons l'ordre de grandeur de cette température limite. Aux bords de bande du modèle sur réseau carré, la masse effective est donnée par $\frac{1}{m^*} = \frac{2ta^2}{\hbar^2}$, d'où une énergie magnétique

$$E_B \sim \hbar\omega_B = \hbar \frac{eB}{m^*} = \frac{2e}{\hbar} (Ba^2)t = 4\pi \frac{\phi}{\phi_0} t = 2t \times 2\pi \frac{p}{q}. \quad (3.36)$$

Typiquement, pour $p = 1$ et $q \sim 1000$, on obtient $E_B \sim 6/1000 \times t \sim 0.01t$. Cette valeur est une borne inférieure pour l'énergie thermique. Nous pouvons en effet remarquer que pour $k_B T = 0.005t$, la susceptibilité présente des oscillations magnétiques, qui disparaissent si B diminue (pour $q = 3000$ par exemple).

3.4 Règle de somme pour un hamiltonien de liaisons fortes

Dans un modèle de liaisons fortes avec la substitution de Peierls, le grand potentiel du système est contraint, et vérifie une règle de somme que nous allons démontrer dans cette section. Cette règle de somme sera un outil puissant pour vérifier lors du calcul de susceptibilités si celles-ci sont compatibles avec le modèle énoncé. Cette contrainte s'écrit :

$$\boxed{\int \chi_{\text{orb}}(\mu, B) d\mu = 0}. \quad (3.37)$$

La démonstration utilise des résultats liés au choix du modèle de liaisons fortes, avec la substitution de Peierls :

- On suppose que le spectre est **borné**, et qu'il se comporte continûment avec le champ magnétique. Cette hypothèse élimine donc les spectres continus habituels des électrons libres, et en toute rigueur demande de tronquer nécessairement à un nombre fini de bandes. Le spectre est donc $< E_{\text{max}}(B)$.
- $\text{Tr } \mathbb{1}$ est indépendant du champ magnétique ; c'est-à-dire que le nombre d'états N_{tot} ne dépend pas du champ. Cette hypothèse n'est pas restrictive.
- $\text{Tr } \hat{\mathcal{H}}(B)$ est indépendant du champ magnétique. Ceci est vrai car on suppose que les énergies sur site ne sont pas modifiées : $\varepsilon_i(B) \approx \varepsilon_i$, puisque le champ magnétique n'intervient que dans la phase des t_{ij} .
- $\text{Tr } \hat{\mathcal{H}}^2(B)$ est indépendant du champ magnétique. De même, ceci est vrai uniquement parce qu'on suppose les $|t_{ij}|$ inchangés en champ magnétique. En effet, les termes diagonaux de $\hat{\mathcal{H}}^2$ font apparaître des produits $t_{ik}t_{ki}$ qui sont indépendants de B dans l'approximation de la substitution de Peierls.

3.4.1 Démonstration à $T = 0$

Commençons par montrer la relation à température nulle, qui est la situation dans laquelle on se place dans la suite du manuscrit, puisque même à température ambiante $k_{\text{B}}T \ll t$. À température nulle, le grand potentiel s'écrit simplement en fonction de la densité d'états doublement intégrée :

$$\Xi(\mu, T, B) = -k_{\text{B}}T \int_{-\infty}^{\infty} \rho(E, B) \ln \left(1 + e^{-(E-\mu)/k_{\text{B}}T} \right) dE \xrightarrow{T \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\mu} \rho(E, B)(E - \mu) dE. \quad (3.38)$$

En définissant les densités d'états intégrée N et doublement intégrée \mathcal{N} par

$$N(E, B) = \int_{-\infty}^E \rho(E', B) dE' \quad \text{et} \quad \mathcal{N}(E, B) = \int_{-\infty}^E N(E', B) dE' \quad (3.39)$$

on obtient

$$\Xi(\mu, 0, B) = \int_{-\infty}^{\mu} \rho(E, B)(E - \mu) dE = \int_{-\infty}^{\mu} \rho(E, B)E dE - \mu N(\mu, B) \quad (3.40)$$

$$= [N(E, B)]_{-\infty}^{\mu} - \mu N(\mu, B) \quad (3.41)$$

$$= -\mathcal{N}(\mu, B). \quad (3.42)$$

CHAPITRE 3. MAGNÉTISME DANS UN MODÈLE DE LIAISONS FORTES

En particulier,

$$\text{Tr } \hat{\mathcal{H}} = \int_{-\infty}^{\infty} E \rho(E, B) \, dE = \mu N(\mu, B) - \mathcal{N}(\mu, B) \quad (3.43)$$

pour tout $\mu > E_{\max}(B)$. Au-dessus du spectre, $\rho(\mu, B)$ est nulle, $N(\mu, B) = N_{\text{tot}}$ est constante, et $\mathcal{N}(\mu, B)$ est linéaire en μ comme l'indique (3.43); le terme de gauche étant indépendant du champ par hypothèse.

Fixons une énergie $\mathcal{E} > E_{\max}(B)$ pour tous les champs magnétiques considérés ici, et calculons $\text{Tr } \hat{\mathcal{H}}^2$:

$$\text{Tr } \hat{\mathcal{H}}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} E^2 \rho(E, B) \, dE = \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} E^2 \rho(E, B) \, dE \quad (3.44)$$

$$= [E^2 N(E, B)]_{-\infty}^{\mathcal{E}} - 2 \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} EN(E, B) \, dE \quad (3.45)$$

$$= \mathcal{E}^2 N_{\text{tot}} - 2 [EN(E, B)]_{-\infty}^{\mathcal{E}} + 2 \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} \mathcal{N}(E, B) \, dE \quad (3.46)$$

$$= -\mathcal{E}^2 N_{\text{tot}} + 2\mathcal{E} \text{Tr } \hat{\mathcal{H}} - 2 \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} \Xi(\mu, 0, B) \, d\mu \quad (3.47)$$

où l'on a utilisé (3.43) dans la dernière ligne. Ceci conclut la démonstration : nous pouvons donc exprimer l'intégrale du grand potentiel sur une plage comprenant tout le spectre, de façon indépendante de B :

$$\int_{-\infty}^{\mathcal{E}} \Xi(\mu, 0, B) \, d\mu = -\frac{\mathcal{E}^2}{2} N_{\text{tot}} + \mathcal{E} \text{Tr } \hat{\mathcal{H}} - \frac{1}{2} \text{Tr } \hat{\mathcal{H}}^2 \quad (3.48)$$

et on en déduit de suite la règle de somme sur χ_{orb} en dérivant deux fois par rapport au champ magnétique.

3.4.2 Extension à température non-nulle

On peut étendre la règle de somme précédente puisque le grand potentiel à température quelconque peut s'écrire comme une convolution du grand potentiel à température nulle :

$$\Xi(\mu, T, B) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Xi(E, 0, B) n'_{\text{F}}(\mu - E, T) \, dE, \quad (3.49)$$

où l'on peut remplacer $+\infty$ par \mathcal{E} puisqu'il n'y a pas d'états au-dessus de \mathcal{E} . D'où la suite d'égalités

$$\int_{-\infty}^{\mathcal{E}} \Xi(\mu, T, B) \, d\mu = - \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} \Xi(\mu, 0, B) n'_{\text{F}}(\mu - E, T) \, dE \, d\mu \quad (3.50)$$

$$= - \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} \Xi(E, 0, B) \underbrace{\int_{-\infty}^{\mathcal{E}} n'_{\text{F}}(\mu - E, T) \, d\mu}_{=-1} \, dE \quad (3.51)$$

$$= \int_{-\infty}^{\mathcal{E}} \Xi(E, 0, B) \, dE, \quad (3.52)$$

qui prouve le résultat à température quelconque.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons discuté de façon détaillée une méthode très fréquemment utilisée en matière condensée qui permet de concilier champ magnétique et approximation de liaisons fortes. Nous avons ensuite mis à profit la substitution de Peierls pour calculer de façon numérique la susceptibilité orbitale. Cette technique simple sera utilisée pour tous les autres modèles étudiés dans ce manuscrit en tant que vérification de l'approche analytique. Cette vérification ne sera pas toujours rappelée pour les modèles à deux bandes, mais sera l'outil principal d'investigation pour les modèles à trois bandes. Elle n'est pas restreinte aux systèmes cristallins, mais peut être utilisée pour calculer la susceptibilité de systèmes désordonnés ou quasi-périodiques.

CHAPITRE 3. MAGNÉTISME DANS UN MODÈLE DE LIAISONS FORTES

Chapitre 4

État de l'art du magnétisme orbital

Nous avons introduit les notions fondamentales concernant le magnétisme dans les modèles de liaisons fortes dans les chapitres précédents. Avant d'exposer en détail les principaux travaux réalisés durant cette thèse, ce chapitre va permettre de faire un tour d'horizon des différents résultats à la fois théoriques et expérimentaux des dernières décennies sur le magnétisme orbital.

4.1 Historique des travaux théoriques concernant la susceptibilité orbitale

Dans cette partie on s'intéresse à l'état de la recherche théorique sur le magnétisme orbital, qu'il soit antérieur, contemporain ou postérieur aux résultats obtenus durant cette thèse. Si nous avons essayé de broser un paysage assez large des recherches sur le sujet, ce paragraphe n'a pas la prétention d'être exhaustif sur tous les résultats obtenus durant le XX^e siècle.

Travaux pionniers de Landau et Peierls

C'est Landau [78] en 1930 qui a montré l'existence du diamagnétisme orbital itinérant. Même si celui-ci est plus faible pour les électrons libres que le paramagnétisme de Pauli, son existence intrinsèque a ouvert la voie à des généralisations aux modèles cristallins. Peierls [114] a généralisé le travail de Landau à un modèle à une bande en proposant un hamiltonien électronique effectif dans un champ magnétique. Son article fondateur donne naissance à la substitution de Peierls (cf. CHAP. 3), et la formule de Landau-Peierls de la susceptibilité orbitale, dont nous esquisserons la démonstration au CHAP. 5.

Premiers essais de Adams

Si Peierls avait posé les jalons d'une théorie de la susceptibilité orbitale, il fallut attendre une vingtaine d'années que des physiciens s'intéressent au problème multibandes. Celui-ci s'est probablement débloqué avec l'apparition de nouvelles représentations des états de Bloch : Luttinger [83] utilisa les fonctions de Wannier pour étudier l'effet du champ magnétique sur les électrons dans un cristal, et démontra en particulier la substitution continue de Peierls (3.18) consistant à remplacer k par $k - \frac{e}{\hbar}A$ dans la relation de dispersion E_{nk} . Adams généralisa cette représentation en

CHAPITRE 4. ÉTAT DE L'ART DU MAGNÉTISME ORBITAL

dérivant un hamiltonien dans la base des fonctions de Wannier [1, 2], et obtint une formule pour la susceptibilité orbitale.

Travaux de Hebborn et Sondheimer

Plus tard, Hebborn et Sondheimer s'intéressèrent à cette question, et dérivèrent une formule pour χ_{orb} en partant successivement de la base des fonctions de Bloch, puis de la base des fonctions u_{nk} périodiques [62–64]. Ce résultat fondé sur le calcul de la fonction de partition du système est très fastidieux, et donne une formule pour la susceptibilité loin d'être transparente. Une différence majeure avec les travaux d'Adams étant dans le choix d'un potentiel variant faiblement, qui élimine les problèmes de divergences apparaissant chez Adams. Kohn [70] donne également une dérivation d'un hamiltonien effectif en présence d'un champ magnétique, mais sa dérivation et son résultat restent obscurs. Dans le CHAP. 5, nous comparerons la formule dérivée par Hebborn et Sondheimer à la formule de Peierls dans le cas d'un modèle à une bande.

Généralisation au spin-orbite

Roth et Misra [92, 125] reprirent le calcul de χ_{orb} avec un potentiel vecteur lentement variable, cette fois dans la base des fonctions de Wannier puis une base d'ondes planes orthogonalisée, et retrouvèrent le résultat de Hebborn et Sondheimer. À la fin de leur article, ils comparent difficilement théorie et expériences pour Al, Li et Na (références expérimentales dans la Réf. [92]).

Misra et Kleinman [91] généralisèrent ce calcul en incorporant le couplage spin-orbite, et montrèrent que la susceptibilité résultante se décompose en trois termes : un terme purement orbital, un terme de spin avec un facteur g modifié par la structure de bandes, et un terme mixte lié au couplage spin-orbite, qu'ils calculent explicitement, mais difficilement interprétable.

Tous les résultats précédents, bien qu'impressionnants d'un point de vue calculatoire, laissent les lecteurs sur leur faim car peu d'applications sont proposées, ce qui est sûrement lié à la grande difficulté d'appréhension des formules dans leur globalité.

Approche géométrique avant l'heure

Indépendamment, Blount en 1962 [16] dérive d'une façon que l'on pourrait *a posteriori* qualifier de « moderne », un hamiltonien multibandes effectif en présence d'un champ magnétique, et retrouve à l'ordre le plus bas le hamiltonien à une bande de Peierls. Il inclut également le spin-orbite dans son traitement, et obtient une autre formulation de la susceptibilité. Sa démonstration se base sur l'utilisation d'une théorie qu'il a développée [17] et qui est à la source de la théorie géométrique actuelle, utilisant sans les nommer la connexion, la courbure de Berry, le moment magnétique orbital, la dérivation covariante, etc.

Formulation en fonctions de Green

Une décennie plus tard, Fukuyama s'intéressa pendant sa thèse au même problème. En partant d'une autre base de fonctions —celle de Luttinger et Kohn [84]— et en utilisant la technique de Hebborn et al. du potentiel vecteur sinusoidal, celui-ci fut capable de trouver une formule extrêmement compacte et élégante de la susceptibilité orbitale, en terme de produits matriciels de fonctions de Green et de dérivées du hamiltonien de Bloch (on précisera les notations au chapitre

4.1. HISTORIQUE DES TRAVAUX THÉORIQUES CONCERNANT LA SUSCEPTIBILITÉ ORBITALE

suivant) [37, 41] :

$$\chi_{\text{Fuku}} = -\frac{\mu_0 e^2}{2\pi\hbar^2} \Im \left(\int n_{\text{F}}(E) \iint \text{Tr} \{ h^x g h^y g h^x g h^y g \} \frac{d^2 k}{4\pi^2} dE \right). \quad (4.1)$$

Il appliqua cette formule au bismuth [43], puis inclua dans un second temps les effets de spin-orbite [44]. Avec sa méthode, il s'intéressa également à la conductivité de Hall. [39, 40] Plus tard, Ogata et Fukuyama [110] donneront une version « géométrique » de la formule de Fukuyama, c'est-à-dire en termes d'intégrales de produits scalaires des fonctions $u_{n,k}$ et leurs dérivées. Ils montreront en particulier l'équivalence de leur formule avec le résultat de Hebborn et al.

Extension aux modèles de liaisons fortes

La formule de Fukuyama, comme toutes les formules précédentes, a été démontrée en partant du hamiltonien microscopique quadratique avec un potentiel périodique. Cependant, dans les modèles liaisons fortes, le hamiltonien de Bloch \hat{H}_k est une projection du hamiltonien \hat{H} sur un sous-ensemble de bandes, possédant en conséquence des propriétés différentes. En particulier, celui-ci présente des termes croisés en $k_x k_y$ non-nuls qui peuvent donner des contributions supplémentaires à la susceptibilité. Gómez-Santos et Stauber [55], en suivant également une méthode de fonctions de Green, ont proposé une formule généralisant celle de Fukuyama (déjà proposée dans un cas particulier par Koshino et Ando [74]) et s'appliquant dans le cadre d'un hamiltonien de Bloch d'un modèle de liaisons fortes. Leur dérivation utilise une technique développée dans un article précédent [138] rendant continu le hamiltonien initial. Lapidaire, leur démonstration laisse le lecteur perplexe quant à la validité de la preuve, bien que la formule finale χ_{GSS} semble satisfaisante :

$$\chi_{\text{GSS}} = -\frac{\mu_0 e^2}{2\pi\hbar^2} \Im \left(\int n_{\text{F}}(E) \iint \text{Tr} \left\{ h^x g h^y g h^x g h^y g + \frac{1}{2} h^{xy} (g h^x g h^y + g h^y g h^x) \right\} \frac{d^2 k}{4\pi^2} dE \right). \quad (4.2)$$

Ce travail de thèse se situe après la publication de Gómez-Santos et Stauber, et va contourner certains problèmes présents dans leur démonstration. Nous obtiendrons une autre formulation de la susceptibilité, mais nous montrerons qu'elle est équivalente à la leur.

Approche semi-classique

Une approche semi-classique de la physique cristalline s'est développée en parallèle des théories de perturbation décrites précédemment, sur laquelle nous reviendrons dans l'annexe D. L'équipe de Q. Niu travaille depuis quelques années sur cette approche, et a en particulier dérivé un hamiltonien effectif pour un paquet d'ondes se déplaçant sur une bande d'énergie [141], en incluant les effets de projection sur une bande, c'est-à-dire des termes de phase de Berry. Avec ce point de départ, ils ont étudié l'effet au second ordre d'un champ magnétique sur le paquet d'ondes, ce qui leur a permis d'obtenir une formule de la susceptibilité orbitale d'un cristal en termes des propriétés géométriques [49]. À un préfacteur numérique près, leur résultat est équivalent à la formule proposée par Blount quelques décennies auparavant. [16]

Approches numérique

Peu de chercheurs se sont penchés sur la simulation numérique *ab initio* de la susceptibilité orbitale. Mauri et Louie [87] proposèrent une simulation numérique utilisant la théorie de la fonctionnelle densité (DFT), et appliquèrent leur résultats au cas du diamant et au néon ; cependant,



FIGURE 4.1 – Mise en évidence du diamagnétisme du graphite : lévitation à température ambiante de graphite pyrolytique grâce à un agencement quadripolaire d’aimants néodymes. Empruntée à <https://www.supermagnete.fr/>

ces travaux étaient axés sur le magnétisme d’électrons dans des cristaux moléculaires plutôt que le magnétisme d’électrons réellement itinérants en utilisant la formulation de Vignale [152] de la susceptibilité. Il donne des résultats proches à 10% près des valeurs expérimentales. Dans ces cristaux, la réponse magnétique totale est simplement donnée par la somme des contributions de chaque entité.

4.2 Approches expérimentales du magnétisme orbital

Choix des résultats présentés

Nous présentons ici des résultats concernant essentiellement le magnétisme orbital de systèmes physiques dont le spectre peut être approximé à des fermions de Dirac, puisque ce sont eux qui présentent les susceptibilités diamagnétiques les plus fortes, permettant (FIG. 4.1) au graphite de léviter à température ambiante ! Comme des supraconducteurs à température ambiante n’ont pas été mis en évidence à l’heure actuelle, le graphène est l’élément le plus diamagnétique connu à température ambiante.

Propriétés du bismuth

Comme nous l’avons déjà noté dans l’introduction, les résultats expérimentaux suggérant l’existence d’un diamagnétisme itinérant étaient concentrés sur le bismuth et l’antimoine dans les années ’20. Outre des propriétés électriques et thermodynamiques intéressantes [45], c’est la mise en évidence des oscillations quantiques dans l’aimantation par de Haas et Van Alphen [25] et dans la conductivité électrique par Shubnikov et de Haas [134] à basse température qui a déclenché un vif intérêt pour le magnétisme orbital. Ces deux types d’oscillations sont visibles dans le régime $k_B T \ll \hbar \omega_c$ où $\hbar \omega_c \propto B$ est l’énergie typique entre deux niveaux de Landau (équidistants pour des électrons libres, mais pas nécessairement dans des modèles cristallins). Lorsque le champ magnétique varie, les niveaux de Landau défilent devant le potentiel chimique, ce qui implique des

4.2. APPROCHES EXPÉRIMENTALES DU MAGNÉTISME ORBITAL

ÉLÉMENT	$\chi \times 10^5$
Supraconducteur ($T \sim 1$ K)	-10^5
Eau	-0,9
Bismuth (//) [52]	-1,7
Diamant [52]	-0,58
Graphite (\perp) [85]	-17
Graphite (//) [85, 131]	-82
Graphène (//, $T = 4,2$ K) [105]	-360
$-\chi_0^{3D} = -\frac{\mu_0 e^2 t a^2}{\hbar^2 d_{CC}}$ (graphite)	-8,9

TABLE 4.1 – Valeurs typiques de susceptibilités magnétiques à température ambiante (sauf si précisé) de quelques matériaux diamagnétiques

oscillations de la conductivité en particulier.

Outre ces oscillations quantiques à fort champ (ou basse température), le bismuth a une forte réponse diamagnétique à bas champ (ou haute température), dont la découverte par Faraday date du XIX^e siècle. Mesurée à l'aide d'une balance de Gouy¹, la valeur typique pour le bismuth pur à des températures de l'ordre du kelvin est $\chi = -1,7 \cdot 10^{-5}$ [52], mais on remarque que la réponse est anisotrope (la réponse parallèle $\chi_{//} = -2,3 \cdot 10^{-5}$ à l'axe extraordinaire est supérieure de 30% à la réponse perpendiculaire $\chi_{\perp} = -1,5 \cdot 10^{-5}$). La Réf. [133] montre des valeurs de $\chi_{//}$ sur une grande plage de température (jusqu'à environ 400 K) : la susceptibilité varie très peu ($\leq 10\%$), ce qui est caractéristique du diamagnétisme. Elle présente également les réponses magnétiques de plusieurs alliages entre le bismuth et un autre élément métallique (plomb, tellure, antimoine) ; la susceptibilité varie typiquement entre $-0,8 \cdot 10^{-5}$ et $-2,7 \cdot 10^{-5}$. Plus de détails sur le magnétisme et les propriétés électriques du bismuth peuvent être trouvées dans la revue [45].

Diamagnétisme du graphite

Le graphite est un autre exemple de matériau diamagnétique, à ce jour le matériau tridimensionnel avec la plus grande susceptibilité diamagnétique (en valeur absolue) à température ambiante ! À cause de sa structure cristalline en plans d'atomes de carbone (feuilles de graphène) liés par des interactions de van der Waals, sa réponse est très anisotrope, jusqu'à 20 fois plus grande lorsque le champ magnétique est parallèle à l'axe extraordinaire, typiquement $\chi_{//} \sim -36 \cdot 10^{-5}$. [47, 118] Les mesures les plus récentes donnent une valeur de $\chi_{//} = -58 \cdot 10^{-5}$ (voir la Réf. [85] pour une revue sur les susceptibilités de différentes formes allotropiques du graphite). La FIG. 4.2 montre un tel graphe.

Grâce à cette spectaculaire réponse diamagnétique, il est possible de faire léviter à température ambiante du graphite pyrolytique (cf. FIG. 4.1).² Cette lévitation est plus facile (mais peut-être moins impressionnante ?) que celle d'une grenouille, basée sur le diamagnétisme de l'eau [15].³

1. La balance de Gouy mesure la variation de poids apparent d'un échantillon dont on veut mesurer la susceptibilité, lorsqu'on le place dans un champ magnétique uniforme.

2. Ce résultat a d'ailleurs fait l'objet d'un problème posé à un concours international étudiant de physique : l'édition 2015 de l'International Physicists' Tournament : <http://iptnet.info>.

3. Geim a co-découvert le graphène, Berry a fortement influencé la théorie géométrique des solides, et ils se sont associés pour travailler sur le magnétisme [15] : les trois thèmes de ce manuscrit !

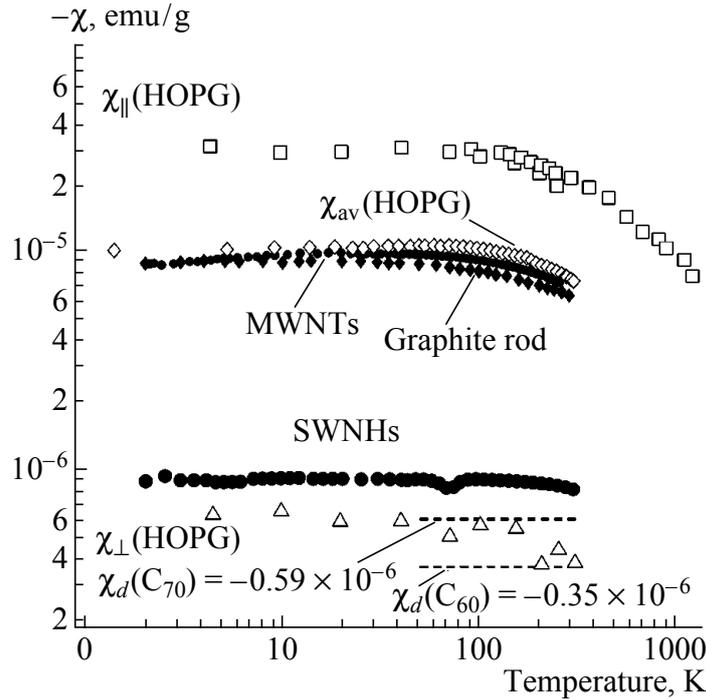


Fig. 3. Experimental values of magnetic susceptibility of highly oriented pyrolytic graphite (HOPG) in the longitudinal ($\chi_{||}$) and transverse (χ_{\perp}) directions, powdered HOPG (χ_{av}), a graphite rod, multiple-wall nanotubes (MWNTs), single-wall nanohorns (SWNHs), and C_{60} and C_{70} fullerenes [48].

FIGURE 4.2 – Susceptibilités magnétiques massiques de différentes formes allotropiques du graphite en fonction de la température. Pour obtenir χ dans le S.I. on calcule $\chi = 4\pi\rho\chi_m$ (emu/g) avec une masse volumique typique $\rho = 2,2 \cdot 10^3 \text{ kg}\cdot\text{cm}^{-3}$. Figure tirée de la Réf. [85].

Du graphite au graphène

Le graphène, un unique plan d'atomes de carbone, est un matériau purement bidimensionnel formé d'atomes disposés sur un réseau nid d'abeille. Durant le XX^e siècle, il a été théoriquement étudié en tant qu'intermédiaire intéressant pour en déduire la réponse magnétique du graphite [153], mais en restant un objet théorique.

Depuis sa découverte expérimentale [106], le graphène a attiré un grand nombre de chercheurs par ses caractéristiques hors du commun⁴. La revue de Castro Neto et al. [21] donne un panorama très complet des travaux sur le graphène entre le début des années 2000 et 2009, le graphène étant célèbre pour la réalisation en matière condensée d'un spectre linéaire de particules ultra-

4. Pour un détail de ces caractéristiques, on pourra lire la dernière page du texte informatif du comité Nobel à l'adresse http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2010/advanced-physicsprize2010.pdf.

4.2. APPROCHES EXPÉRIMENTALES DU MAGNÉTISME ORBITAL

relativistes. Cela se passe près de deux points de la première zone de Brillouin, depuis appelés points de Dirac. Cette particularité apporte un parallèle avec la physique des hautes énergies, où la vitesse de la lumière est remplacée par la vitesse de Fermi dans le graphène ($v_F \approx c/300$).

Susceptibilité orbitale du graphène

La mesure de susceptibilité orbitale d'un système bidimensionnel s'avère plus délicate que celle d'un matériau tridimensionnel, parce qu'à susceptibilités similaires, les moments magnétiques induits sont nettement plus faibles, et donc les signaux difficiles à isoler. Une possibilité pour augmenter le signal mesuré est d'empiler de façon aléatoire des feuilles de graphène, et retrouver ainsi un matériau tridimensionnel. À cause du caractère aléatoire, cet empilement est censé réagir comme plusieurs couches de graphène décorrélées, et non comme un morceau de graphite.

Sepioni et al. [131] produisent des multicouches de graphène à partir de graphite pyrolytique fortement orienté (HOPG) en cassant les liaisons de van der Waals intercouches par bombardement d'ultrasons dans différents solvants organiques. Après centrifugation, ils obtiennent des agglomérats de petits cristaux de graphène multicouches (entre 1 et 5 couches). Ces cristaux font typiquement 50 nm de largeur, et l'échantillon composite s'étend sur une taille macroscopique de 1 cm. Afin de mesurer l'aimantation de l'échantillon, ils utilisent un magnétomètre à SQUID. L'article conclut à l'absence de ferromagnétisme dans le graphène (question débattue à l'époque), et confirme le caractère diamagnétique à température ambiante (qui varie peu en température) du graphène, avec une valeur cependant plus faible que celle qu'ils mesurent pour le graphite : $\chi = -82 \cdot 10^{-5}$. De plus, ils détectent une réponse paramagnétique à basse température, et proposent plusieurs explications, dont l'existence de défauts dans le réseau cristallin, ou du magnétisme dû aux bords des échantillons. Un travail ultérieur [100] montre que des impuretés (de fluorine) ou des lacunes dans le réseau (produits par bombardement d'ions) donnent effectivement du paramagnétisme de moments (spins 1/2) isolés.

Dans la même optique d'utiliser un matériau tridimensionnel, il est également possible de partir de graphite quasi-bidimensionnel (quasi-two-dimensional graphite QTDG) qui est une forme allotropique particulière du graphite : les plans de graphène sont disposés de façon aléatoire les uns au-dessus des autres, et la distance entre plans est plus grande que celle du graphite standard ($d_{\text{QTDG}} = 0,343$ nm contre $d_c = 0,335$ nm), ce qui tend à voir les différents plans comme découplés. Kotosonov [77] a mesuré la susceptibilité magnétique d'un tel système, sur une grande gamme de températures (100 – 1 000 K) à l'aide d'une balance de Faraday.⁵ Il compare ses résultats aux prévisions de McClure [89], mais la comparaison est limitée, car il est nécessaire de renormaliser la température apparaissant dans la formule de McClure pour obtenir un résultat quantitatif ; renormalisation justifiée par la présence de désordre (un décalage de typiquement 200 K, soit 20 meV).

Nikolaev et al. [105] étudient également du QTDG, mais mesurent la susceptibilité à l'aide d'une autre méthode basée sur des techniques de résonance magnétique nucléaire (en croisant le résultat avec celui obtenu avec un magnétomètre (*ballistic magnetometer*)). Ils mesurent une susceptibilité à $T = 4,2$ K de $\chi_m = -1,3 \cdot 10^{-4}$ emu/g, soit $\chi = -3,6 \cdot 10^{-3}$, ce qui est un record à température ambiante.⁶

5. La balance de Faraday est une variante de la balance de Gouy (comme celles de Evans et Watt) où on utilise un champ inhomogène, et on mesure la force subie par le système.

6. Pour la masse volumique de leur échantillon $\rho = 2,2 \cdot 10^3$ kg·m⁻³, on obtient une susceptibilité $\chi = 0,28$ emu/cm³ qui est convertie en unités SI en multipliant par un facteur $4\pi 10^{-3}$.

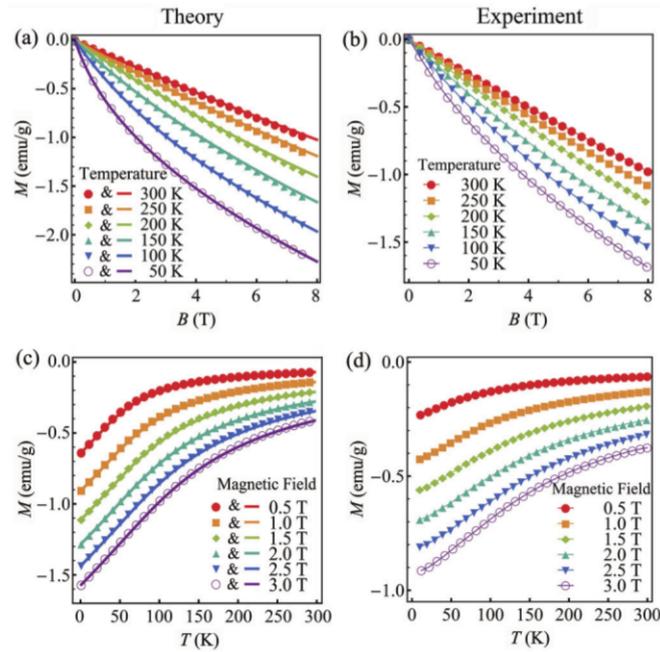


FIGURE 4.3 – Aimantation du graphène en fonction du champ magnétique appliqué à température fixée, et en fonction de la température à champ magnétique fixé. Figure tirée de la Réf. [81].

Magnétisme du graphène dans le régime des oscillations quantiques

Mesurer une susceptibilité magnétique sous-entend se placer dans le régime linéaire où l'énergie thermique est grande devant l'énergie magnétique, le régime inverse étant celui des oscillations quantiques. Li et al. dans un article récent [81] ont étudié les deux régimes dans le cas du graphène en partant de cristaux de SiC et en mesurant l'aimantation d'un échantillon en fonction du champ magnétique. Après 8h de croissance, leur échantillon est finalement composé d'un assemblage aléatoire de feuilles de graphène. Les feuilles de graphène obtenues ont une taille de quelques microns. La méthode de mesure de l'aimantation n'est étonnamment pas détaillée. La FIG. 4.3 présente une comparaison entre théorie et expériences dans les deux régimes : à régime à haute température, ils vérifient qu'une relation linéaire $M \propto B$ est justifiée. En revanche, dans le régime de basse température, ils obtiennent une aimantation $M \propto \sqrt{B}$, qu'ils valident théoriquement à l'aide d'un calcul explicite du grand potentiel à température nulle.

Afin d'interpréter au mieux ces résultats, nous préférons reporter cette analyse lors de l'étude du graphène au CHAP. 7 ; nous aurons alors tous les éléments, à savoir le comportement des fermions de Dirac à fort et bas champ, ainsi que la contribution du réseau.

Travaux de mesures de la susceptibilité du graphène

Les méthodes précédentes utilisant des empilements de couches de graphène permettent d'obtenir des signaux relativement facilement mesurables. Cependant, une limitation importante est qu'il n'est alors pas possible de modifier le dopage du graphène. Pour étudier la variation en potentiel

4.2. APPROCHES EXPÉRIMENTALES DU MAGNÉTISME ORBITAL

chimique, il est nécessaire de travailler avec une couche monoatomique de graphène sur laquelle une grille électrostatique pourra imposer un potentiel.

Dans mon laboratoire d'accueil, le groupe *Physique mésoscopique* travaille actuellement sous l'impulsion d'H. Bouchiat à la mesure de la susceptibilité orbitale du graphène monocouche. Pour cela, ils investiguent plusieurs méthodes de mesures dont l'utilisation d'un SQUID déjà citée, ainsi qu'une méthode mesurant des courants induits à l'aide d'une barre de Hall. Enfin, ils démarrent une collaboration avec l'équipe de V. Jacques spécialiste des centres N/V dans le diamant.⁷ Ces centres, essentiellement des systèmes quantiques à deux niveaux, sont fortement sensibles au champ magnétique local. L'idée serait de placer un nanocrystal de diamant avec un centre N/V à la pointe d'un microscope à force atomique (AFM) pour obtenir une sonde locale de champ.

Remarque : influence du couplage spin-orbite

Le couplage spin-orbite attire beaucoup d'attention depuis quelques années, et nous nous limiterons à citer le travail de Schober et al. [129] sur le semiconducteur BiTeI, qui montre une tendance du couplage spin-orbite à générer du paramagnétisme de bord de bandes. Le couplage spin-orbite modifie les niveaux de Landau, jusqu'à les rendre décroissant en champ magnétique, ce qui se traduit par du paramagnétisme de bord de bande là où on attendrait du diamagnétisme de Landau !

Remarque : normalisation des susceptibilités dans ce manuscrit

Comme nous l'avons déjà mentionné, toutes les susceptibilités présentées de modèles de liaisons fortes sont normalisées par

$$\chi_0 = \frac{\mu_0 t e^2 a^2}{\hbar^2} \quad (4.3)$$

où t est l'amplitude de saut entre deux plus proches voisins espacés d'une distance a . Cette susceptibilité dépend bien sûr du modèle ; pour le graphène par exemple $t \sim 2,8 \text{ eV}$, $a \sim 0,15 \text{ nm}$, on obtient un ordre de grandeur $\chi_0 \sim 2,9 \cdot 10^{-14} \text{ m}$, qui correspond à une susceptibilité tridimensionnelle pour le graphite $\chi_0^{3D} = \frac{\chi_0}{d_{CC}} \sim 8,9 \cdot 10^{-5}$ où $d_{CC} \sim 0,3 \text{ nm}$ est ici la distance entre plans de graphène selon l'axe extraordinaire du graphite.

7. Les centres N/V sont l'un des défauts ponctuels du diamant, où un atome d'azote a remplacé un atome de carbone, et une lacune s'est créée à proximité.

CHAPITRE 4. ÉTAT DE L'ART DU MAGNÉTISME ORBITAL

Chapitre 5

Formule de Peierls et modèles à une bande

Peierls proposa trois ans après le travail de Landau une formule pour la susceptibilité orbitale d'un modèle à une bande d'un cristal. Dans son article fondateur de 1933 [114], il détaille sa méthode de calcul de façon pédagogique en traitant successivement le cas des électrons libres avec une statistique classique ou quantique en retrouvant le résultat de Landau, puis enfin le cas des électrons dans un modèle de liaisons fortes à une bande d'un cristal. Pour cela, il introduit dans le même article la méthode maintenant connue sous le nom de substitution de Peierls. Au-delà de l'effet sur les phases des intégrales de saut, Peierls a conscience des autres effets jouant sur le magnétisme orbital, et donne deux autres contributions très souvent oubliées et partiellement redécouvertes dans des articles récents [86]. Pour son aspect historique fondateur, nous développerons dans cette partie avec une légère adaptation les grandes lignes du calcul de Peierls en faisant ressortir les problématiques dominantes.

Le résultat de la formule de Peierls sur un exemple concret (le modèle à une bande ppv sur réseau carré) sera comparé au résultat obtenu par la méthode de calcul du CHAP. 3. Nous regarderons un second exemple de modèle sur réseau triangulaire, modèle qui permettra de comparer les résultats obtenus par différentes formules postérieures à Peierls, dont celle de Hebborn et Sondheimer [32] et Fukuyama [41].

5.1 Dérivation de la formule de Peierls

Peierls cherche les modifications du potentiel thermodynamique Ξ en présence d'un champ magnétique B à l'aide d'un développement limité de Ξ à l'ordre 2. Pour un gaz de Fermi,

$$\Xi = \text{Tr} \left\{ f(\hat{\mathcal{H}}) \right\} \quad \text{où} \quad f(\hat{\mathcal{H}}) = -k_{\text{B}}T \ln \left(1 + e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu)} \right). \quad (5.1)$$

Il s'agit donc de calculer la trace d'une fonction du hamiltonien. Il examine dans son article les différentes difficultés auxquelles il faut se confronter pour mener à bien ce calcul. La problématique centrale est la suivante : comment calculer la trace d'une fonction d'une somme d'opérateurs $f(\hat{U} + \hat{V})$ uniquement en fonction des valeurs propres de \hat{U} et \hat{V} ?

5.1.1 Cas des électrons libres

Pour suivre l'idée de Peierls, reprenons rapidement le cas des électrons libres dont le hamiltonien s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{(\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))}{2m} = \frac{\Pi_x^2}{2m} + \frac{\Pi_y^2}{2m} + \frac{\Pi_z^2}{2m} = \hat{U} + \hat{V} + \hat{W} \quad (5.2)$$

avec Π le vecteur des impulsions invariantes de jauge. On note que pour un champ $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, l'impulsion généralisée Π_z commute avec les deux autres composantes du vecteur, mais

$$[\Pi_x, \Pi_y] = -ie\hbar B = -i\frac{\hbar^2}{\ell_B^2} \quad \text{où} \quad \ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}. \quad (5.3)$$

La grandeur ℓ_B est dénommée *longueur magnétique*. Peierls montre que ce simple résultat de non-commutation est en fait à l'origine de l'existence du magnétisme en mécanique quantique.

Afin de calculer $\text{Tr}\{f(\hat{U} + \hat{V})\}$, Peierls passe dans l'espace de Fourier, en écrivant :

$$f(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(\lambda) e^{i\lambda E} d\lambda, \quad (5.4)$$

pour calculer séparément chaque trace $\text{Tr}\{e^{i\lambda(\hat{U} + \hat{V})}\}$. On cherche à exprimer ces traces en fonction seulement des valeurs propres U_m et V_n des deux opérateurs, la difficulté venant de leur non-commutation, et donc

$$\text{Tr}\{e^{i\lambda(\hat{U} + \hat{V})}\} \neq \text{Tr}\{e^{i\lambda\hat{U}} e^{i\lambda\hat{V}}\} \stackrel{(*)}{=} \sum_{m,n} e^{i\lambda(U_m + V_n)}. \quad (5.5)$$

Le terme de droite est de la forme souhaitée puisqu'il ne dépend que des valeurs propres des opérateurs \hat{U} et \hat{V} . L'égalité (*) n'est pas immédiate, elle est démontrée dans l'article de Peierls. En mécanique classique où toutes les grandeurs commutent, (5.5) serait une égalité. Mais le terme de droite n'est rien d'autre que le potentiel thermodynamique évalué en champ nul ! Ce qui confirme que le magnétisme est intrinsèquement lié à des non-commutations d'opérateurs quantiques.

Peierls calcule la différence entre les deux membres de l'équation (5.5) en considérant comme petit paramètre les commutateurs des opérateurs entre eux ; autrement dit, il se place dans la limite où $\mu_B B / k_B T \ll 1$. Quelques lignes d'algèbre linéaire et un développement limité plus tard, on a

$$e^{i\lambda(\hat{U} + \hat{V})} - \frac{1}{2} \left(e^{i\lambda\hat{U}} e^{i\lambda\hat{V}} + e^{i\lambda\hat{V}} e^{i\lambda\hat{U}} \right) \approx \left[-\frac{\lambda^4}{8} \hat{\varepsilon}^2 - i \frac{\hat{\alpha} - \hat{\beta}}{12} \lambda^3 \right] e^{i\lambda(\hat{U} + \hat{V})} \quad (5.6)$$

où $\hat{\varepsilon} = [\hat{U}, \hat{V}]$, $\hat{\alpha} = [\hat{U}, \hat{\varepsilon}]$ et $\hat{\beta} = [\hat{V}, \hat{\varepsilon}]$. Il se limite donc à l'ordre 2 en $\hat{\varepsilon}$ et l'ordre 1 en $\hat{\alpha}$ et $\hat{\beta}$.

En multipliant (5.6) par $\alpha(\lambda)$, en intégrant sur λ , et en prenant la trace, la variation du grand potentiel s'exprime comme

$$\Delta\Xi(B) = \text{Tr} \left[\frac{\hat{\varepsilon}^2}{8} f^{iv}(\hat{U} + \hat{V}) + \frac{\hat{\alpha} - \hat{\beta}}{12} f'''(\hat{U} + \hat{V}) \right]. \quad (5.7)$$

Or dans un champ magnétique uniforme, toujours au deuxième ordre en $\mu_B B / k_B T$,

$$\hat{\varepsilon}^2 = -\frac{4}{m} \mu_B^2 B^2 \Pi_x^2 \Pi_y^2 \quad \text{et} \quad \hat{\alpha} - \hat{\beta} = -\frac{4}{m} \mu_B^2 B^2 (\Pi_x^2 + \Pi_y^2). \quad (5.8)$$

5.1. DÉRIVATION DE LA FORMULE DE PEIERLS

Comme on ne s'intéresse qu'à l'ordre quadratique en B , on peut calculer la trace des deux derniers termes du membre de droite comme si les opérateurs commutaient entre eux (les corrections sont des puissances plus grandes de B). Cette trace correspond à l'intégrale sur toutes les valeurs de Π_x et Π_y . Les dérivées de la fonction f s'annulent exponentiellement à l'infini, des intégrations par parties n'apportent pas de termes de bord. L'utilisation de la règle de la chaîne

$$\frac{\partial f}{\partial \Pi_x}(E(\Pi_x, \Pi_y)) = \frac{\partial E}{\partial \Pi_x} f'(E) = \frac{\Pi_x}{m} f'(E) \quad (5.9)$$

permet de simplifier l'expression (5.7), et de retrouver le résultat de Landau

$$\Delta \Xi = -\frac{\mu_B^2 B^2}{6} \text{Tr} \left\{ \frac{d^2 f}{dE^2} \right\}, \quad (5.10)$$

d'où

$$\chi_{\text{Landau}} = -\frac{\mu_0}{V} \frac{\partial^2 \Xi}{\partial B^2} = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{3} \int f''(E(\Pi_x, \Pi_y, \Pi_z)) \frac{d^3 \Pi}{(2\pi)^3} \quad (5.11)$$

$$= \frac{\mu_0 \mu_B^2}{3} \int n'_F(E(\Pi_x, \Pi_y, \Pi_z)) \frac{d^3 \Pi}{(2\pi)^3} \quad (5.12)$$

$$= -\frac{\mu_0 \mu_B^2 n}{3} \quad (5.13)$$

avec n la densité électronique du système. On retrouve la susceptibilité de Landau des électrons libres discutée précédemment (1.36).

5.1.2 Cas d'un cristal dans un modèle à une bande

Dans un modèle cristallin à une bande, la relation de dispersion est plus complexe : le hamiltonien n'est plus la somme de deux carrés d'opérateurs dont le commutateur est petit. Par exemple, le réseau carré a une relation de dispersion en $\cos(k_x a) + \cos(k_y a)$. Comment alors appliquer la méthode précédente? Peierls utilise sa substitution (3.18) dans la relation de dispersion (qui est ici égale au hamiltonien de Bloch car il n'y a qu'une bande), et cherche à nouveau à évaluer la trace de cet opérateur en utilisant une décomposition de Fourier.

Après des manipulations similaires au cas des électrons libres, mais considérablement plus calculatoires, Peierls écrit la susceptibilité magnétique orbitale des électrons de valence sous la forme :

$$\boxed{\chi_{\text{orb}} = \chi_1 + \chi_2 + \chi_{\text{LP}}}, \quad (5.14)$$

avec

1. Une première contributions qui provient de la modification des énergies des orbitales atomiques $\varepsilon(B) = \varepsilon + \varepsilon'' B^2/2$ des électrons de conduction (cf. (3.2)). Celle-ci s'écrit simplement

$$\chi_1 = \mu_0 \varepsilon'' \iint_{\text{BZ}} n_F(E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (5.15)$$

et est donc directement proportionnelle à la densité d'états intégrée. Autrement dit, à $T = 0$, χ_1 est proportionnelle au nombre total d'électrons (à $B = 0$).

2. Une seconde contribution provenant de la modification de la structure de bandes, c'est-à-dire de la largeur de bandes (3.16) $t(B) = t + t'' \frac{B^2}{2}$ en présence du champ magnétique. Alors, la structure de bande $E_{\mathbf{k}}$ est modifiée, $E_{\mathbf{k}} \rightarrow E_{\mathbf{k}} + E''_{\mathbf{k}} \frac{B^2}{2}$, on obtient

$$\chi_2 = -\mu_0 \iint_{\text{BZ}} E''_{\mathbf{k}} n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2}, \quad (5.16)$$

également un terme de mer de Fermi. Dans le cas simple d'un modèle plus proches voisins, la susceptibilité prend la forme très simple suivante :

$$\chi_2 = -\mu_0 t'' \iint_{\text{BZ}} E_{\mathbf{k}} n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2}, \quad (5.17)$$

ce qui signifie qu'à $T = 0$, χ_2 est directement proportionnelle à l'énergie totale du gaz d'électrons (à $B = 0$).

3. Enfin, un terme purement lié à la structure cristalline et directement dû à la phase acquise par les t_{ij} :

$$\chi_{\text{LP}} = \frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \iint_{\text{BZ}} \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right)^2 \right) n'_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2}. \quad (5.18)$$

Ce troisième terme fait intervenir le hessien de la relation de dispersion, qui représente la courbure de la surface $E(k_x, k_y)$. Cette courbure est moyennée sur le niveau de Fermi.

S'il faut génériquement considérer les trois termes comme partie intégrante du résultat de Peierls, c'est la troisième contribution χ_{LP} qui a été *a posteriori* dénommée *susceptibilité de Landau-Peierls* ou simplement *susceptibilité de Peierls*. On notera que les deux premiers termes sont liés à la mer de Fermi, et seulement le troisième est déterminé par le voisinage du niveau de Fermi.

5.2 Application au réseau carré

Comme application immédiate de la formule de Peierls, on s'intéresse au modèle sur réseau carré introduit au CHAP. 3 lors de l'étude numérique de la susceptibilité *via* le papillon de Hofstadter (FIG. 3.1). Rappelons que son spectre (3.21) est donné par

$$E_{\mathbf{k}} = -2t (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)), \quad (5.19)$$

et la densité d'états $\rho(E)$ en l'absence de champ magnétique est tracée FIG. 5.1. En particulier on note deux propriétés : (1) en bord de bandes, l'approximation quadratique du spectre correspond à une valeur constante de $\rho(E)$ (typique des électrons libres à deux dimensions); (2) les points cols du spectre près de $E = 0$ donnent naissance à une singularité de Van Hove dans la densité d'états, qui se manifeste à deux dimensions par une divergence logarithmique en $E = 0$ [6]. Celle-ci se calcule exactement en fonction de l'intégrale elliptique complète de première espèce K (résultat connu depuis les années '50; pour les détails du calcul, on peut se référer à l'annexe B de la Réf. [108]) :

$$\rho(\varepsilon) = \iint_{\text{BZ}} \delta(\varepsilon - E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2} a = \frac{1}{2\pi^2 t a^2} K \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{4t} \right)^2} \right). \quad (5.20)$$

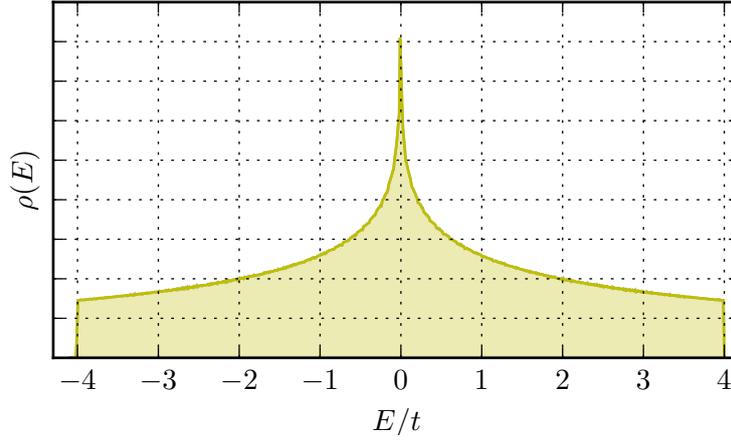


FIGURE 5.1 – Densité d'états du modèle à une bande avec sauts entre plus proches voisins sur réseau carré. Elle présente une singularité de Van Hove à $E = 0$ (correspondant à un point col dans le spectre). Sur les bords, on a une densité approximativement constante caractéristique d'un gaz d'électrons libres bidimensionnel.

Susceptibilité orbitale

Pour les modèles à une bande, la connaissance du spectre $E_{\mathbf{k}}$ (puisque égale à l'unique coefficient du hamiltonien) détermine la susceptibilité orbitale et toutes les autres propriétés. À cause de la géométrie à angles droits du réseau carré, celui-ci a un spectre séparable en k_x et k_y (le spectre s'écrit comme une somme $f(k_x) + f(k_y)$), et la dérivée croisée $\frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y}$ est nulle :¹

$$\chi_{\text{LP}}(T, \mu) = \frac{\mu_0 e^2}{12 \hbar^2} \iint_{\text{BZ}} n'_F(E_{\mathbf{k}}) \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (5.21)$$

$$= \frac{\mu_0 e^2 t^2 a^4}{3 \hbar^2} \iint_{\text{BZ}} n'_F(E_{\mathbf{k}}) \cos(k_x a) \cos(k_y a) \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (5.22)$$

$$= -\frac{\mu_0 e^2 a^2}{24 \hbar^2} \left[(\mu^2 - 8t^2) \rho(\mu) - \int_{-\infty}^{\mu} \rho(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon \right] \quad (5.23)$$

où l'on se reportera aux Réfs. [54, 108, 136] pour le passage à la dernière ligne, en particulier à la Réf. [108] pour les détails de calcul d'intégrales.

La susceptibilité à $T = 0$ ² est présentée sur la FIG. 5.2; elle présente différentes caractéristiques bien identifiables que nous retrouverons dans nombre de modèles multibandes :

- La susceptibilité est négative près du bord de bande, et tend vers une valeur finie. Cette propriété est une conséquence directe de la structure de bandes : près de ses extrémités, elle peut être approximée par une dispersion quadratique isotrope, avec une masse effective pour

1. On dérivera par la suite d'autres formules pour la susceptibilité orbitale, qui donnent des limites à une bande différentes. Dans ce contexte où $E^{xy} = 0$, elles donneront cependant toutes le même résultat.

2. Les susceptibilités ne seront jamais tracées à T strictement nulle, mais dans une limite où $k_B T$ est négligeable devant les autres énergies du problème.

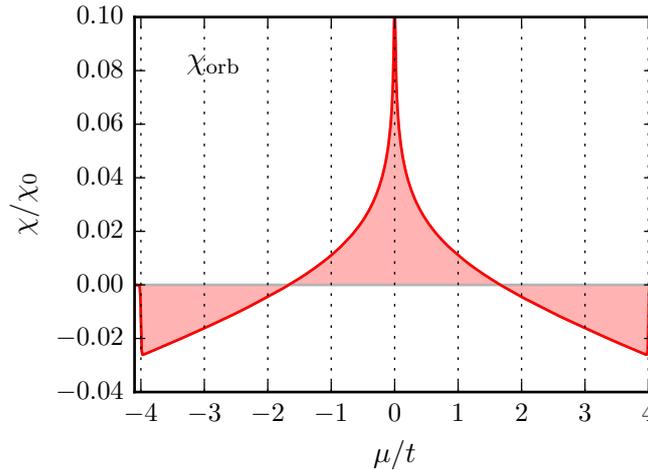


FIGURE 5.2 – Susceptibilité orbitale d’un modèle à une bande sur réseau carré, normalisée par $\chi_0 = \mu_0 e^2 a^2 t / \hbar^2$ pour une énergie thermique $k_B T = 0.005t$ négligeable devant les autres énergies en jeu (sauf exactement à $\mu = 0$ où c’est l’énergie limitant la divergence de la susceptibilité. Elle change continûment de signe avec μ , et diverge à $\mu = 0$.

les électrons m^* communément appelée *masse de bande*. En développant le spectre (5.19) près du point Γ , on trouve $E_{\mathbf{k}} \approx -4t + t\mathbf{k}^2 a^2$, c’est-à-dire un spectre quadratique de masse effective

$$\frac{1}{m^*} = \frac{2ta^2}{\hbar^2}. \quad (5.24)$$

Cette masse détermine la limite de la susceptibilité, puisque celle-ci vérifie la formule de Landau

$$\chi_{\text{LP}}(\mu \sim -4) = -\frac{\mu_0 e^2}{24\pi m^*} \quad (5.25)$$

où la masse nue des électrons m_e a été remplacée par la masse de bande m^* .

- On peut vérifier sur ce graphe que la règle de somme (3.37) est respectée comme il se doit en calculant l’intégrale sous la courbe.
- On remarque à $\mu = 0$ une divergence positive de χ_{LP} que nous discutons dans le paragraphe suivant.

5.3 Existence du paramagnétisme orbital

Comme cela s’observe sur la FIG. 5.2, la susceptibilité *peut* prendre des valeurs positives. En fait, puisque χ_{LP} vérifie la règle de somme (3.37), elle doit *nécessairement* avoir des valeurs positives pour compenser ses parties négatives.

Dans le cas du modèle sur réseau carré, il est possible de comprendre de façon qualitative pourquoi la susceptibilité change de signe lorsque μ approche d’un point col : proche d’un tel point, la

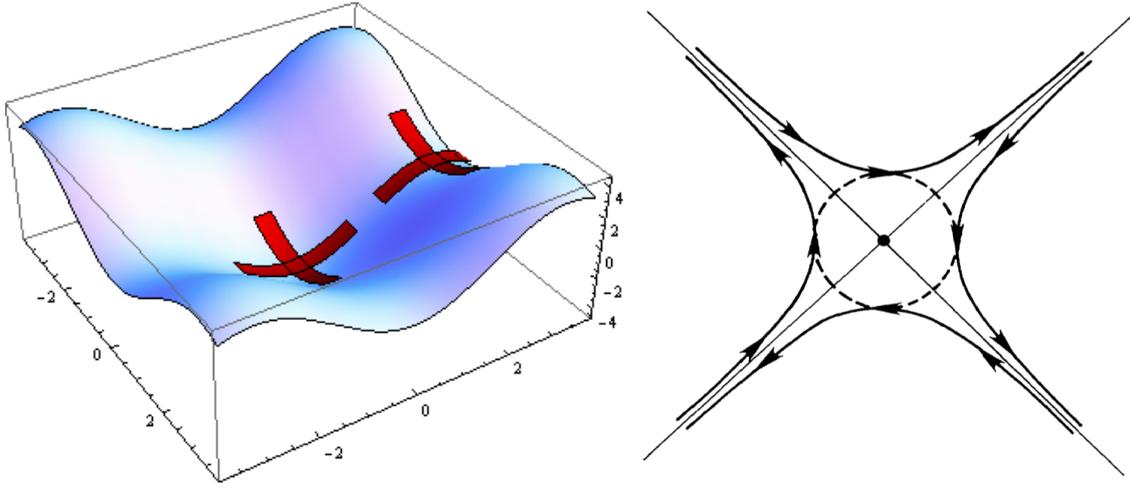


FIGURE 5.3 – À gauche, mise en évidence d'un point col sur le spectre du réseau carré. À droite, trajectoires semi-classiques des électrons sur les lignes isoénergétiques. Près d'un point col, celles-ci étant proches, l'électron peut sauter sur d'autres lignes par effet tunnel, ce qui revient à parcourir la trajectoire en pointillés dans un sens opposé aux trajectoires initiales. Figure tirée de [152].

relation de dispersion est approximativement quadratique dans deux directions perpendiculaires avec des masses m_1 et m_2 de signes opposés. Le hessien $\hbar^2/(m_1 m_2)$ est alors négatif, d'où l'on déduit

$$\chi_{\text{LP}}^{\text{point selle}} \approx -\frac{\mu_0 e^2}{12\pi \hbar^2} \times \frac{\hbar^4}{m_1 m_2} \rho(E_F) = \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2 \rho(E_F)}{12\pi |m_1 m_2|} > 0. \quad (5.26)$$

Non seulement la susceptibilité est positive, mais elle diverge de façon concomitante avec la densité d'états! La formule de Peierls met en évidence quelque chose de très décrié lors de la publication de son article, et toujours peu connu : la susceptibilité orbitale n'est pas limitée à des contributions négatives, mais peut exhiber du *paramagnétisme orbital*. Même si les autres contributions à la susceptibilité orbitale (χ_1 et χ_2 entre autres) peuvent renforcer la réponse diamagnétique, la divergence de χ_{LP} assure qu'il est possible (au moins théoriquement) de mesurer du paramagnétisme qui n'est pas lié au spin.

Vignale [152] confirma ce résultat en démontrant l'existence du paramagnétisme orbital en partant du hamiltonien d'un électron dans un potentiel périodique perturbé par un champ magnétique et en calculant la différence d'énergie entre les deux états à l'ordre 2. Aux abords d'un point col, cette différence prend une forme très simple, l'annulation de $\partial_k E_k$ imposant aux fonctions de Bloch d'être réelles, approche qui confirme la forme (5.26) de la susceptibilité.

Cet argument quantique peut également être interprété de façon semi-classique : dans cette vision, les électrons sont des particules ponctuelles qui subissent la force de Lorentz ; comme celle-ci ne travaille pas, l'énergie des électrons ne change pas. Ils parcourent des lignes isoénergétiques sur le spectre E_k , et le sens de parcours est imposé par la force : les orbites fermées de l'électron sont parcourues dans le sens donnant une réponse diamagnétique. À l'approche d'un point col comme sur la FIG. 5.3, ces courbes isoénergétiques se rapprochent, et sont séparées d'une barrière de potentiel

faible. L'effet tunnel permet de passer de l'une à l'autre, et donner finalement une orbite parcourue dans le sens opposé au sens initial. Ce phénomène est appelé *rupture magnétique*.

5.4 Commentaires et limites de la susceptibilité de Peierls

Au-delà des observations sur le comportement de la susceptibilité propres au modèle précédent, on peut noter quelques propriétés générales de la susceptibilité de Peierls ; ainsi que certaines de ses limites.

- La formule (5.18) généralise au cas d'électrons dans un cristal à une bande la formule de Landau (1.36) des électrons libres : si on choisit une relation de dispersion quadratique $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$, la formule de Peierls se réduit au diamagnétisme de Landau.
- L'intégrande de (5.18) n'est rien d'autre que le hessien de la relation de dispersion $E_{\mathbf{k}}$, c'est-à-dire le déterminant de la matrice jacobienne $\left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{1 \leq i, j \leq 2}$. Cela généralise la notion de masse de bande, puisque si la relation de dispersion est quadratique dans deux directions orthogonales, le hessien sera $\sim \frac{1}{m_1 m_2}$ où m_1 et m_2 sont les masses effectives dans ces deux directions.
- La susceptibilité de Peierls vérifie la règle de somme (3.37), ce qui se traduit en

$$\iint_{\text{BZ}} \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right)^2 \right) \frac{d^2 k}{4\pi^2} = 0, \quad (5.27)$$

c'est-à-dire que l'intégrale du hessien sur toute la zone de Brillouin est nulle.

- Les deux précédentes remarques démontrent l'existence du paramagnétisme orbital, en particulier lorsque le potentiel chimique coïncide avec l'énergie d'un point col du spectre.
- Pour des électrons libres ultra-relativistes, le résultat est surprenant puisqu'il prédit une susceptibilité nulle quel que soit le potentiel chimique, en contradiction avec le résultat de McClure (1.46) démontré précédemment. Ceci est dû à la limite de validité de la formule de Peierls, incorrecte dans le cas des électrons relativistes qui présentent deux bandes d'énergie. Une discussion supplémentaire sera faite lors de l'étude du graphène et du nitrure de bore au CHAP. 7.
- Bien sûr, cette formule a été dérivée à partir de la substitution de Peierls, elle est donc limitée aux modèles de liaisons fortes tout comme la substitution de Peierls.
- De plus, il faut ajouter à χ_{LP} les deux autres contributions des électrons de conduction χ_1 et χ_2 discutées dans la SEC. 5.1.2. Matsuura et Ogata dans un article récent [86] ont redémontré l'existence de ces contributions, et les ont tracées dans le cas particulier du modèle à une bande sur réseau carré (cf. FIG. 5.4).

Si la formule de Landau-Peierls n'est valide que pour les modèles à une bande, il est possible d'en définir artificiellement une version multibandes en sommant les contributions de chacune des bandes :

$$\chi_{\text{LP}} = \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \frac{1}{12} \sum_n \iint_{\text{BZ}} \left(\frac{\partial^2 E_{n\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 E_{n\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \left(\frac{\partial^2 E_{n\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right)^2 \right) n'_F(E_{n\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2}. \quad (5.28)$$

5.5. LIEN AVEC LA CONDUCTIVITÉ DE HALL σ_{XY} À UNE BANDE

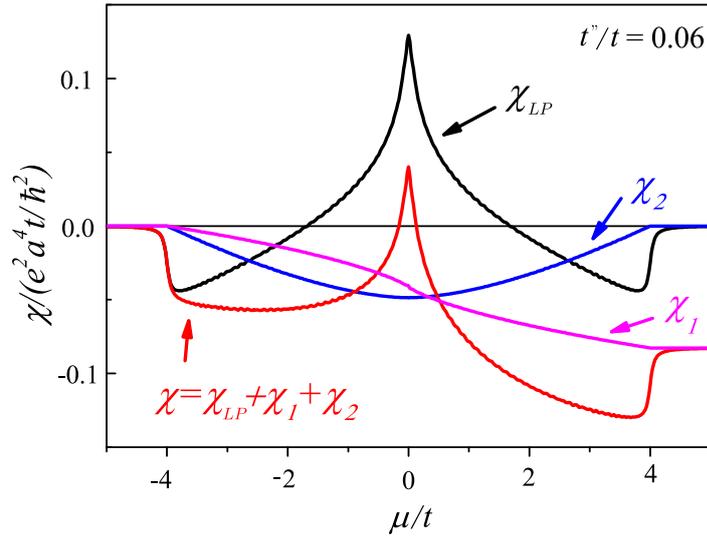


FIGURE 5.4 – Les différentes contributions de la susceptibilité orbitale du modèle sur réseau carré : χ_{LP} la contribution de surface de Fermi, χ_1 reliée à la variation d'énergie sur site $\varepsilon(B)$ d'après la définition (3.2) proportionnelle au nombre d'électrons du gaz, et χ_2 due à la variation de l'amplitude de saut $t(B)$ selon (3.16) où t'' a été adimensionné par a^2/ϕ_0 , proportionnelle à l'énergie totale du gaz. Figure adaptée de la Réf. [86].

On ne s'attend pas à ce que cette expression soit correcte, mais elle servira de point de comparaison pour isoler les effets interbandes de la susceptibilité.

5.5 Lien avec la conductivité de Hall σ_{xy} à une bande

Les modèles à une bande $E_{\mathbf{k}}$ présentent une curiosité : un lien entre la susceptibilité orbitale χ_{LP} et la conductivité de Hall σ_{xy} d'un métal. La Réf. [40] donne par exemple pour σ_{xy} (en enlevant le facteur $g_s = 2$) :

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^3}{\hbar^4} \tau^2 B \iint_{\text{BZ}} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \left(\frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right) n'_F(E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (5.29)$$

où τ est le temps de relaxation, supposé indépendant de \mathbf{k} .

À l'aide d'une intégration par partie, on peut montrer une relation de proportionnalité entre σ_{xy} et χ_{LP} à une bande. En effet, en intégrant par partie sur k_x (5.29) il vient

$$\sigma_{xy} = \frac{e^3}{\hbar^4} \tau^2 B \iint_{\text{BZ}} \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} + \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial^3 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y^2} - \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right)^2 - \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial^3 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2 \partial k_y} \right) n_F(E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (5.30)$$

le terme intégré étant nul puisqu'un modèle à une bande totalement remplie ou totalement vide a nécessairement une conductivité de Hall nulle. L'équation (5.30) n'est pas symétrique en x et

CHAPITRE 5. FORMULE DE PEIERLS ET MODÈLES À UNE BANDE

y , mais n'a pourtant aucune raison de les différencier. En échangeant les deux variables, puis en intégrant par partie sur y , on obtient

$$\sigma_{xy} = \frac{e^3}{\hbar^4} \tau^2 B \iint_{\text{BZ}} \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} + \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{\partial^3 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2 \partial k_y} - \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right)^2 - \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{\partial^3 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y^2} \right) n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2}. \quad (5.31)$$

En faisant la moyenne de ces deux expressions, on trouve alors :

$$\sigma_{xy} = \frac{e^3}{\hbar^4} \tau^2 B \iint_{\text{BZ}} \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \left(\frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}}}{\partial k_x \partial k_y} \right)^2 \right) n_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}}) \frac{d^2 k}{4\pi^2}, \quad (5.32)$$

formule très proche de χ_{LP} . On en déduit la relation

$$\chi_{\text{LP}} = \frac{\mu_0 \hbar^2}{12e\tau^2 B} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial \mu}. \quad (5.33)$$

Cette relation permet d'interpréter les changements de signe de la susceptibilité orbitale comme des variations de la conductivité de Hall.

La relation (5.33) n'a été démontrée qu'à une bande, et n'est probablement pas vérifiée pour des systèmes multibandes. Cependant, il pourrait être intéressant de voir à quel point les propriétés de transport dans σ_{xy} peuvent être reliées à des propriétés thermodynamiques telles que χ_{orb} . Il existe une autre relation entre σ_{xy} et le magnétisme orbital, cette fois avec l'aimantation orbitale. Dans la bande interdite d'un isolant, la formule de Streda [140] démontrée en une phrase par Widom [155] est vérifiée :

$$\sigma_{xy}^{\text{gap}} = e \left. \frac{\partial N}{\partial B} \right|_{E=\mu} = e \frac{\partial M}{\partial \mu} = \frac{e^2}{h} C, \quad (5.34)$$

où C est la somme des nombres de Chern des bandes remplies.

5.6 Comparaison avec les formules de susceptibilité postérieures aux travaux de Peierls

Après la formule de Peierls, de nombreux travaux ont cherché à généraliser cette approche à des modèles à plusieurs bandes (cf. CHAP. 4). Ici, nous chercherons à comparer ces généralisations projetées à une bande avec la formule de Peierls en les appliquant sur un modèle à une bande sur réseau triangulaire, qui malgré son caractère simpliste capture les différences fondamentales entre ces approches. Nous verrons qu'elles ne sont pas toutes compatibles entre elles, et nous tenterons d'expliquer les raisons de ces différences.

Dans la section précédente, nous avons vu que les expressions peuvent devenir longues à cause de notations non-efficaces. Nous noterons maintenant les dérivées $\frac{\partial}{\partial k_i}$ sous la forme d'un exposant : $\frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_i} = E^i$, et où l'indice \mathbf{k} est implicite. De même, on notera les hamiltoniens en l'absence de champ magnétique $\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = h$.

5.6.1 Susceptibilité orbitale à une bande

Dans le cas simple d'un modèle à une bande, la matrice hamiltonienne $\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = h$ est de taille 1×1 , et se réduit à un scalaire qui est la relation de dispersion $E_{\mathbf{k}}$ de la bande. Puisque l'espace vectoriel

5.6. COMPARAISON AVEC LES FORMULES DE SUSCEPTIBILITÉ POSTÉRIEURES AUX TRAVAUX DE PEIERLS

est une droite, n'importe quel vecteur de norme 1 est un vecteur propre associé ; on peut donc le fixer indépendant de k . Les notions de courbure de Berry et de tenseur géométrique n'ont pas de sens pour les modèles à une bande.

Formule de Peierls

Réécrivons la formule de Peierls

$$\chi_{\text{LP}} = \frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \iint n'_F(E_{\mathbf{k}}) \left(E^{xx} E^{yy} - (E^{xy})^2 \right) \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (5.35)$$

qui nous servira d'« étalon » pour la suite.

Formule de Hebborn-Sondheimer

Hebborn et Sondheimer [32] ont proposé une autre formule pour les modèles à une bande :

$$\chi_{\text{Hebborn}} = \frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \iint n'_F(E_{\mathbf{k}}) \left(E^{xx} E^{yy} - (E^{xy})^2 + \frac{3}{2} (E^{xxy} E^y + E^{xyy} E^x)^2 \right) \frac{d^2k}{4\pi^2}. \quad (5.36)$$

Bien que similaire dans la structure à la formule de Peierls (5.35), elle prédit des résultats quantitativement et qualitativement différents.

Formule de Fukuyama

La formule historique de Fukuyama multibandes (4.1) peut être projetée sur des modèles à une bande. Après quelques manipulations (intégrations par parties et symétrisations en x et y), on obtient

$$\chi_{\text{Fuku}}^{1b} = -\frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \iint n'_F(E_{\mathbf{k}}) \left(E^{xx} E^{yy} + 2(E^{xy})^2 + \frac{3}{2} (E^{xxy} E^y + E^{xyy} E^x)^2 \right) \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (5.37)$$

Ce résultat est différent de ceux de Peierls et de Hebborn, et Fukuyama commente cette différence dans son article [41]. Il associe la non-concordance des formules à une mauvaise définition de l'approximation des systèmes à une bande. En effet, l'hypothèse d'une structure à une bande est utilisée à différents moments dans les deux démonstrations : Peierls part dès le début avec une structure de bandes simplifiée (modèle liaisons fortes à une bande), alors que Fukuyama démontre sa formule dans un cadre général (hamiltonien microscopique avec une infinité de bandes), puis projette son résultat sur une structure à une bande, procédure qui, contrairement au calcul de Peierls, inclut des termes « interbandes » correspondant à des allers-retours virtuels entre la bande de projection et les autres bandes.

Formule de Gómez-Santos et Stauber

Cherchons la limite une bande de la susceptibilité de Gómez-Santos et Stauber, qui généralise celle de Fukuyama aux modèles liaisons fortes (4.2). Le premier terme de cette équation est égal à celui de Fukuyama, il s'agit donc de trouver la limite du second ; pour une bande, il s'écrit

$$\chi_{\text{GSS}}^{1b} - \chi_{\text{Fuku}}^{1b} = -\frac{\mu_0 e^2}{2\pi\hbar^2} \Im \left(\int n_F(E_{\mathbf{k}}) \iint \frac{E^x E^y E^{xy}}{(E - E_{\mathbf{k}})^3} \frac{d^2k}{4\pi^2} \right). \quad (5.38)$$

CHAPITRE 5. FORMULE DE PEIERLS ET MODÈLES À UNE BANDE

Après une intégration par partie et une symétrisation entre x et y , on obtient

$$\chi_{\text{GSS}}^{\text{1b}} - \chi_{\text{Fuku}}^{\text{1b}} = \frac{\mu_0 e^2}{2\pi\hbar^2} \Im \left(\int n_{\text{F}}(E) \iint \frac{1}{(E - E_{\mathbf{k}})^2} \left((E^{xy})^2 + \frac{1}{2} (E^{xxy} + E^{xyy}) \right) \frac{d^2k}{4\pi^2} dE \right) \quad (5.39)$$

d'où finalement

$$\chi_{\text{GSS}}^{\text{1b}} = \chi_{\text{Fuku}}^{\text{1b}} - \frac{\mu_0 e^2}{12\pi\hbar^2} \iint n'_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}}) \left(3(E^{xy})^2 + \frac{3}{2} (E^{xxy} E^y + E^{xyy} E^x) \right) \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (5.40)$$

$$= \frac{\mu_0 e^2}{12\pi\hbar^2} \iint n'_{\text{F}}(E_{\mathbf{k}}) (E^{xx} E^{yy} - (E^{xy})^2) \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (5.41)$$

$$= \chi_{\text{LP}}. \quad (5.42)$$

Ainsi, le terme supplémentaire de la formule de Fukuyama à une bande est compensé, et on retrouve la formule (5.35). On retient donc que la généralisation de la formule de Fukuyama aux modèles de liaisons fortes donne le même résultat que la formule de Peierls.

Nous dérivons également un formule (6.32) de la susceptibilité orbitale notée χ_{RPFM} , et nous montrerons qu'elle est équivalente à (4.2). Nous montrerons que la projection à une bande se fait très simplement, tout en redonnant le résultat de Peierls.

Ce paragraphe montre donc que trois formules « concurrentes » ressortent pour les modèles à une bande : (1) la formule de Peierls, identique à celle de Gómez-Santos et Stauber et celle RPFM; (2) la formule de Hebborn et Sondheimer; (3) la formule de Fukuyama.

5.6.2 Modèle à une bande sur réseau triangulaire

Dans une partie précédente, nous avons appliqué la formule de Peierls à un modèle à une bande sur réseau carré. Parce que ce modèle est séparable, c'est-à-dire $h^{xy} = 0$, les trois formules concurrentes décrites dans le paragraphe ci-dessus donnent le même résultat. Afin de pouvoir les différencier, nous changeons la géométrie du réseau sous-jacent de façon à obtenir un hamiltonien avec des dérivées croisées non-nulles. Prenons un modèle une bande (limité aux liens entre premiers voisins) sur réseau triangulaire (FIG. 5.5).

Pour ce modèle, la relation de dispersion qui est identique à la matrice hamiltonienne vaut

$$E_{\mathbf{k}} = -2t \left(\cos(k_x a) + 2 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2} \right). \quad (5.43)$$

La première zone de Brillouin a une forme hexagonale d'aire de $8\pi^2/(\sqrt{3}a^2)$. On vérifie qu'à la différence de (3.21), cette relation de dispersion n'est pas séparable. Le spectre de ce modèle premiers voisins est représenté sur la FIG. 5.5. Comme le modèle sur réseau carré, celui-ci possède une singularité de Van Hove, localisée cette fois-ci en $E = -2t$.

Sur la FIG. 5.6 sont représentées les résultats des différentes formules à une bande, soit χ_{LP} (qui coïncide à une bande avec χ_{GSS} et χ_{RPFM} que nous dériverons dans le CHAP. 6), χ_{Fuku} et χ_{Hebborn} . Les trois expressions donnent des résultats quantitativement et qualitativement différents, voire contradictoires. En pointillés est représenté le résultat de la méthode numérique décrite dans le CHAP. 3, et vient complètement valider l'utilisation de la formule de Landau-Peierls. En plus de ne pas être conforme au résultat numérique, les deux autres ont des problèmes intrinsèques :

5.6. COMPARAISON AVEC LES FORMULES DE SUSCEPTIBILITÉ POSTÉRIEURES AUX TRAVAUX DE PEIERLS

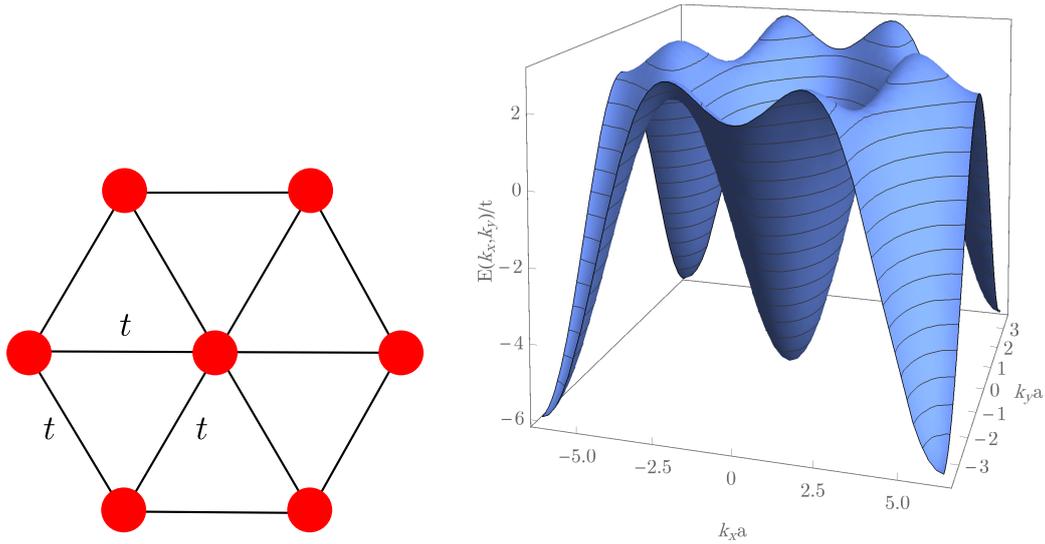


FIGURE 5.5 – À gauche, le réseau triangulaire. À droite, le spectre du modèle plus proches voisins (ppv) à une bande sur réseau triangulaire. Il est tracé sur une zone contenant la première zone de Brillouin, hexagonale. La relation de dispersion est minimale au point Γ et maximale aux points K et K' de la PZB.

- χ_{Fuku} vérifie la règle de somme, mais prédit une susceptibilité négative près de la singularité de Van Hove. Cette observation est en contradiction avec le résultat du modèle précédent et l'argument de la Réf. [152]. Par conséquent, cette susceptibilité orbitale ne peut être retenue, et la formule de Fukuyama n'est donc pas correcte pour les modèles à une bande non séparables.
- χ_{Hebborn} donne quant à elle un résultat proche de la formule de Landau-Peierls, mais telle que $\chi_{\text{Hebborn}}(\mu) > \chi_{\text{LP}}(\mu)$ pour tout μ . Comme χ_{LP} vérifie la règle de somme, cela implique que ce n'est pas le cas pour χ_{Hebborn} , et donc comme χ_{Fuku} , cette formule n'est pas correcte pour les modèles à une seule bande.

Cela peut paraître surprenant que la formule de Fukuyama, pourtant dérivée à partir du hamiltonien le plus général pour un électron dans un potentiel périodique $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{r})$ donne une réponse erronée pour un modèle aussi simple. Comme Fukuyama et ses co-auteurs le font eux-même remarquer [41], cette différence est due à un effet de projection : à quel moment précise-t-on que le modèle a une unique bande ? Peierls le suppose dès le début du calcul, Fukuyama à la toute fin, et Hebborn et Sondheimer lors d'une étape intermédiaire. Cela introduit dans la formule projetée des termes intrabandes qui nécessitent l'existence d'autres bandes dans le modèle pour être bien définis. Cette approximation d'un espace de Hilbert de dimension infinie vers un espace de dimension finie induit des projections, qui peuvent résulter en l'apparition de termes non-séparables dans le hamiltonien du système, inexistant dans un hamiltonien microscopique.

Pour cette raison, les modèles à une bande étant « les plus projetés », on s'attend à ce que les résultats entre les deux formules soient les plus différents. Nous verrons que l'accord avec les modèles

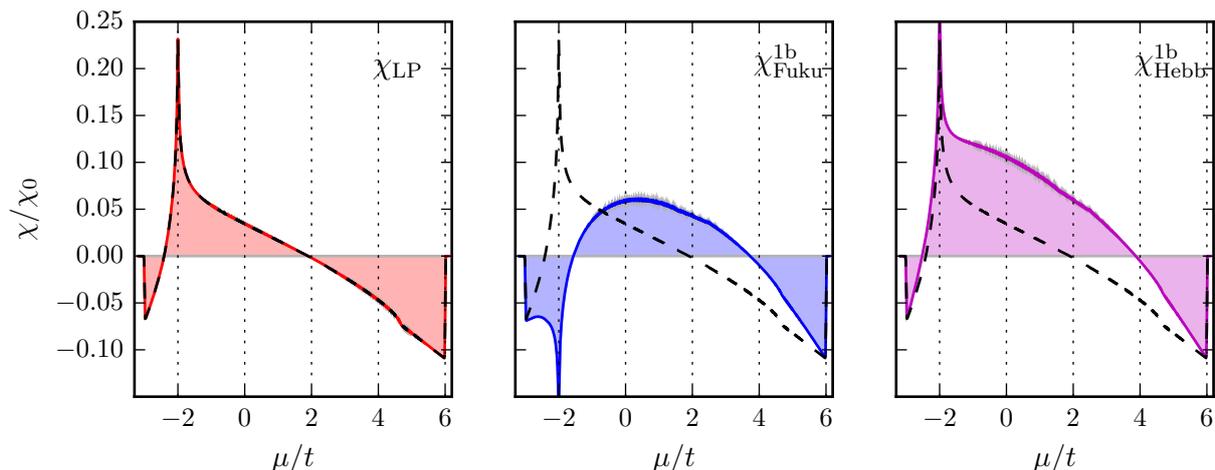


FIGURE 5.6 – Résultats des trois formules pour la susceptibilité orbitale du modèle à une bande sur réseau triangulaire : formule de Landau-Peierls, Fukuyama et Hebborn-Sondheimer. En pointillés noirs est tracé le résultat de la méthode numérique *via* le papillon de Hofstadter, en parfait accord avec la susceptibilité de Landau-Peierls.

deux bandes entre la susceptibilité de Fukuyama et la susceptibilité numérique est bien meilleure (cf. FIG. 7.11)

Conclusion

Après avoir redonné les étapes de la démonstration de la formule de Peierls (aussi appelée susceptibilité de Landau-Peierls) pour les modèles à une bande, nous avons appliqué cette formule au cas d'un modèle simple sur réseau carré. Le résultat est en tout point semblable à celui obtenu par une approche numérique au CHAP. 3. Nous avons enfin proposé une comparaison entre l'expression de Peierls et les formules ultérieures de Hebborn et Sondheimer, et Fukuyama sur un réseau triangulaire. Le caractère non-séparable du réseau a permis de différencier les différentes formulations ; la conclusion étant que la susceptibilité d'un modèle à une bande est bien décrit par la formule de Peierls. Dans la suite, l'objectif sera de généraliser la formulation de Peierls à plusieurs bandes, tout en étant sûr de retrouver l'expression correcte pour les modèles à une bande.

Chapitre 6

Théorie de perturbation invariante de jauge

Après le résultat de Peierls, plusieurs travaux ont tenté de le généraliser aux modèles multibandes, mais il a cependant fallu attendre plusieurs décennies avant d'obtenir des formules généralisant le terme χ_{LP} qui soient utilisables, compactes, et qui se prêtent à une interprétation physique au moins partielle.

Nous l'avons déjà mentionné, mais rappelons que le calcul de la susceptibilité de Pauli liée au magnétisme de spin ne présente pas de difficultés même dans le cas d'un modèle multibandes puisque celle-ci est simplement proportionnelle à la densité d'états sans champ magnétique. Avec plusieurs bandes d'énergie, il suffit de sommer les contributions de chacune des bandes. De même, généraliser les deux premières contributions du résultat de Peierls χ_1 (liée à la variation d'énergie de l'orbitale atomique) et χ_2 (liée à la modification de l'amplitude de saut) ne pose pas de problème conceptuel, ces contributions étant intrinsèques à chacune des bandes. C'est la généralisation de χ_{LP} qui va attirer notre attention dans la suite du manuscrit, celle-ci faisant apparaître des termes de couplage entre bandes rendant son calcul explicite délicat.

Nous allons présenter une théorie de perturbation en champ magnétique originale, permettant de travailler avec des quantités indépendantes de la jauge choisie pour le potentiel vecteur. Cette méthode de perturbation est *a priori* valide à tout ordre, nous montrerons dans les parties suivantes comment cette méthode permet de dériver l'aimantation spontanée et la susceptibilité magnétique orbitale d'un système, qu'il soit cristallin ou non. Cette théorie de perturbation et la formule de susceptibilité résultante peuvent également être lus dans [123].

Nous noterons les hamiltoniens et fonctions de Green dépendantes du champ magnétique en capitales (\mathcal{H}_k ou \mathcal{G}), et celles du système sans champ en minuscules (h et g).

Enfin, dans ce chapitre, la lettre g sera utilisée pour la fonction de Green g et ses éléments de matrice g_{ij} , à ne pas confondre avec le tenseur métrique g_{ij} absent ici, qui ré-apparaîtra dans les prochains chapitres.

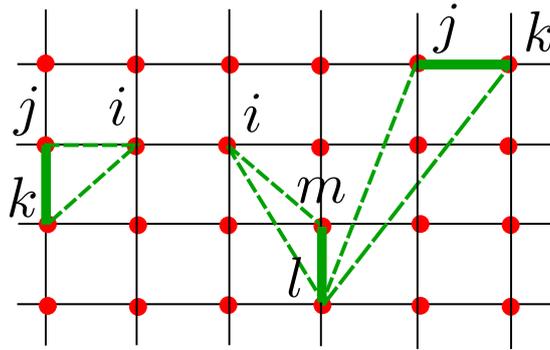


FIGURE 6.1 – Φ_{jki} est un paramètre sans dimension proportionnel au flux magnétique à travers l’aire d’un triangle (ijk) . Sur cette figure sont représentés les deux types de termes apparaissant dans le développement (6.12).

6.1 Hamiltonien et phases

Partons d’un hamiltonien liaisons fortes en présence d’un champ magnétique, où l’on a pris en compte la seule contribution provenant de la substitution de Peierls (c’est-à-dire en introduisant la phase de Peierls) :

$$\hat{\mathcal{H}}(B) = \sum_{i,j} t_{ij} e^{i\theta_{ij}} |i\rangle \langle j| \quad (6.1)$$

où les phases θ_{ij} ont été définies au chapitre 3. Définissons

$$\Phi_{ijk} = \theta_{ij} + \theta_{jk} + \theta_{ki} = \frac{e}{\hbar} \oint_{ijk} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} = \frac{e}{\hbar} \iint_{ijk} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}. \quad (6.2)$$

Si θ_{ij} dépend de la jauge, Φ_{ijk} n’en dépend pas d’après la formule de Stokes puisque Φ_{ijk} est proportionnel au flux magnétique dans le triangle orienté (ijk) (cf. FIG. 6.1). Cette quantité s’écrit explicitement en coordonnées cartésiennes :

$$\Phi_{ijk} = \frac{eB}{2\hbar} [(x_i - x_k)(y_k - y_j) - (y_i - y_k)(x_k - x_j)]. \quad (6.3)$$

On retiendra que Φ_{ijk} est proportionnel au champ magnétique.

6.2 Théorie de perturbation

Écrivons le grand potentiel en présence d’un champ magnétique à l’aide de la densité d’états (DOS) $\rho(E, B)$ du système :

$$\Xi(T, \mu, B) = -T \int_{-\infty}^{+\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\mu)/k_B T} \right) \rho(E, B) dE. \quad (6.4)$$

En introduisant la fonction de Green retardée \mathcal{G} par

$$\mathcal{G} = \left(E - \hat{\mathcal{H}} + i\eta \right)^{-1} \quad (6.5)$$

6.2. THÉORIE DE PERTURBATION

où $\eta \rightarrow 0$, il est possible d'exprimer facilement la densité d'état en fonction de \mathcal{G} :

$$\rho(E, B) = -\frac{1}{\pi} \Im \text{Tr} \mathcal{G}(E, B). \quad (6.6)$$

Formuler une théorie de perturbation pour Ξ revient donc à en trouver une pour la fonction de Green $\mathcal{G}(B)$. Pour cela, il est possible de développer simplement $\mathcal{G}(B)$ en puissances de $g = \mathcal{G}(B = 0)$. Cependant, le résultat obtenu ainsi que la procédure sont dépendantes de la jauge du potentiel vecteur choisie.¹ Une astuce pour contourner ce problème consiste à définir une fonction de Green modifiée \tilde{g} qui dépend du champ magnétique : [19, 23]

$$\tilde{g}_{ij} = e^{i\theta_{ij}} g_{ij}. \quad (6.7)$$

On développe ensuite \mathcal{G} en fonctions de \tilde{g} , et ce développement sera indépendant de jauge comme nous allons le voir. On réintroduit g à la fin de la procédure, ce qui laisse des expressions explicitement invariantes de jauge pour les éléments diagonaux de la matrice \mathcal{G} qui sont les seuls à entrer dans le calcul de la DOS (6.6).

Par définition de la fonction de Green, suivi d'un calcul élémentaire, on peut montrer la suite d'égalités

$$\mathcal{G}^{-1}(E) = E - \hat{\mathcal{H}} = (1 - \mathcal{T})\tilde{g}^{-1} \quad (6.8)$$

avec \mathcal{T} valant :

$$\mathcal{T}_{ij} = e^{i\theta_{ij}} \sum_k (e^{i\Phi_{ikj}} - 1) t_{ik} g_{kj}. \quad (6.9)$$

L'équation (6.8) fournit un développement en puissances de l'opérateur \mathcal{T} pour la fonction de Green en champ magnétique

$$\mathcal{G}(E) = (E - \hat{\mathcal{H}})^{-1} = \tilde{g}(1 - \mathcal{T})^{-1} = \tilde{g} \sum_{n \geq 0} \mathcal{T}^n. \quad (6.10)$$

Remarquons cependant que les puissances de l'opérateur \mathcal{T} ne correspondent pas directement à des puissances du champ magnétique ;, soient $\mathcal{G}^{(1)}$ et $\mathcal{G}^{(2)}$ les ordres 1 et 2 en champ magnétique. Dans le calcul de la trace de \mathcal{G} n'interviennent que les éléments diagonaux, (6.10) permet ainsi d'écrire

$$\mathcal{G}_{ii}^{(1)} = i \sum_{jk} \Phi_{jki} g_{ij} t_{jk} g_{ki} \quad (6.11)$$

et

$$\mathcal{G}_{ii}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{jk} \Phi_{jki}^2 g_{ij} t_{jk} g_{ki} - \sum_{jklm} \Phi_{jkl} \Phi_{lmi} g_{ij} t_{jk} g_{kl} t_{lm} g_{mi}, \quad (6.12)$$

où $\mathcal{G}_{ii}^{(1)} \propto B$ et $\mathcal{G}_{ii}^{(2)} \propto B^2$. Contrairement aux éléments hors-diagonaux, les $\mathcal{G}_{ii}^{(m)}$ ($m \in \mathbb{N}$) ne dépendent pas de la jauge. L'ordre 2 $\mathcal{G}_{ii}^{(2)}$ du développement en B contient deux termes qui proviennent de deux puissances différentes en \mathcal{T} .

En utilisant (6.3) dans les équations (6.11) et (6.12), on fait apparaître des produits d'opérateurs avec des valeurs propres d'opérateurs positions \hat{x} et \hat{y} , qui peuvent s'écrire

$$\hat{x} = \sum_i x_i |i\rangle \langle i| \quad \text{et} \quad \hat{y} = \sum_i y_i |i\rangle \langle i|. \quad (6.13)$$

1. Dans les cristaux, cette méthode a aussi le défaut de briser l'invariance par translation puisque les phases dépendent explicitement de la position.

CHAPITRE 6. THÉORIE DE PERTURBATION INVARIANTE DE JAUGE

Après quelques lignes de calculs élémentaires, $\mathcal{G}_{ii}^{(1)}$ et $\mathcal{G}_{ii}^{(2)}$ peuvent s'exprimer comme des commutateurs de h , g , \hat{x} et \hat{y} . Afin de simplifier les notations, notons

$$\hat{O}^x = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}, \hat{O}], \quad (6.14)$$

et de façon équivalente \hat{O}^y si \hat{O} est un opérateur. Ce commutateur algébrique correspond, dans le cas des cristaux, à une dérivée dans l'espace réciproque pour la représentation O_k de \hat{O} . Le cas particulier où \hat{O} est le hamiltonien définit les composantes de l'opérateur vitesse

$$\hat{v}_x = \hat{x} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}, h] \quad \text{et} \quad \hat{v}_y = \hat{y} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{y}, h]. \quad (6.15)$$

Avec ces notations, on montre que (6.11) et (6.12) s'écrivent

$$\mathcal{G}_{ii}^{(1)} = -\frac{ieB}{2\hbar} (gh^x g^y - gh^y g^x)_{ii} \quad (6.16)$$

et

$$\mathcal{G}_{ii}^{(2)} = -\frac{e^2 B^2}{8\hbar^2} [g(h^{xx} g^{yy} + h^{yy} g^{xx} - 2h^{xy} g^{xy} + 2(h^x g^y - h^y g^x)^2)]_{ii}. \quad (6.17)$$

Le dernier terme de (6.17) ressemble au carré de la correction d'ordre 1, il correspond au terme de Van Vleck de la physique atomique.

Si nous n'avons donné que les expressions des deux premiers ordres, il est également possible de calculer les ordres supérieurs. Cette théorie de perturbation présente l'avantage de conserver l'invariance de jauge pour les éléments diagonaux de la fonction de Green à tous les ordres. De plus, celle-ci se base sur un hamiltonien de liaisons fortes avec la substitution de Peierls, mais ne nécessite pas la notion de cristal, c'est-à-dire l'invariance par translation : elle est valable sur des systèmes désordonnés ou quasi-cristallins par exemple.

6.3 Définitions et propriétés

Dans les parties suivantes, nous allons manipuler les fonctions de Green et les intégrales sur l'énergie et les vecteurs d'onde afin de dériver les expressions de l'aimantation et de la susceptibilité. Définissons quelques notations, et rappelons des propriétés utiles.

Trace

Pour les systèmes cristallins, la trace d'un opérateur peut s'écrire à l'aide d'une intégrale sur la première zone de Brillouin dans l'espace réciproque :

$$\text{Tr} \hat{O} = \iint_{\text{BZ}} \text{tr} \{O_k\} \frac{d^2 k}{4\pi^2} = \sum_n \iint_{\text{BZ}} O_{nk} \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (6.18)$$

où tr est l'opérateur de trace partielle sur les bandes indicées par $n \in \mathbb{N}$.

Relation d'équivalence

Pour simplifier les calculs, nous définissons la relation d'équivalence entre deux opérateurs suivante :

$$\hat{a} \cong \hat{b} \iff \text{Tr } \hat{a} = \text{Tr } \hat{b} \iff \iint_{\text{BZ}} \text{tr} \{a_{\mathbf{k}}\} \frac{d^2k}{4\pi^2} = \iint_{\text{BZ}} \text{tr} \{b_{\mathbf{k}}\} \frac{d^2k}{4\pi^2}. \quad (6.19)$$

En particulier, deux expressions obtenues par intégration par parties dans l'espace réciproque sont équivalentes pour \cong , propriété que l'on utilisera fréquemment (les termes tout intégrés étant toujours nuls). De plus, $\hat{a}\hat{b} \cong \hat{b}\hat{a}$ puisque la trace est cyclique.²

Fonction de Green

Enfin, on mettra à profit quelques propriétés de la fonction de Green

$$\frac{\partial g}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{E - h} \right) = -g^2, \quad (6.20)$$

et de sa version dans l'espace réciproque

$$\frac{\partial g_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} = \frac{\partial}{\partial k_x} \left(\frac{1}{E - h_{\mathbf{k}}} \right) = g_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}}^x g_{\mathbf{k}}, \quad (6.21)$$

qui devient dans l'espace réel

$$g^x = -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, g] = gh^x g. \quad (6.22)$$

6.4 Aimantation spontanée

L'aimantation spontanée d'un système s'obtient en introduisant le résultat (6.16) de la théorie de perturbation au premier ordre dans la définition (1.9) utilisée avec (6.4) et (6.6). Alors

$$M_0 = -\frac{1}{S} \left. \frac{\partial \Xi}{\partial B} \right|_{B=0} \quad (6.23)$$

$$= \frac{k_B T}{S} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\mu)/k_B T} \right) \frac{\partial \rho}{\partial B} (E, B=0) dE \quad (6.24)$$

$$= -\frac{k_B T}{\pi S} \Im \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\mu)/k_B T} \right) \text{Tr} \left\{ -\frac{ie}{2\hbar} (gh^x g^y - gh^y g^x) \right\} dE \quad (6.25)$$

$$= \frac{ie k_B T}{2\hbar \pi S} \Im \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\mu)/k_B T} \right) \text{Tr} \{ gh^x g^y - gh^y g^x \} dE. \quad (6.26)$$

Comme la théorie de perturbation, l'équation (6.26) est une expression générale de l'aimantation spontanée d'un système en termes de ses fonctions de Green, et n'est pas restreinte au cas des cristaux. Ne faisant intervenir que des commutateurs, elle s'applique aussi aux systèmes non périodiques.

Pendant, dans le cas des cristaux il est possible de trouver une expression en termes des grandeurs géométriques comme la courbure de Berry. En effet, en utilisant les expressions de g ,

2. On supposera être en dimension finie. En dimension infinie, cela n'est plus vrai comme le montre $\text{Tr} [\hat{x}, \hat{P}_x] = \text{Tr} (i\hbar) \neq 0$.

CHAPITRE 6. THÉORIE DE PERTURBATION INVARIANTE DE JAUGE

Ω_{nk} et m_{nk} en termes des fonctions u_{nk} , l'annexe B montre que l'aimantation peut s'écrire :

$$M_0 = \sum_n \int \left[n_F(E_{nk}) m_{nk} + \frac{e k_B T}{\hbar} \ln \left(1 + e^{-\beta(E_{nk} - \mu)} \right) \Omega_{nk} \right] \frac{d^2 k}{4\pi^2}. \quad (6.27)$$

L'équation (6.27) est identique aux formules dérivées en 2005 par deux groupes avec des méthodes indépendantes [145, 158], maintenant bien établies et utilisées dans les calculs *ab initio*. Cette expression est à l'origine de la « théorie moderne de l'aimantation », voir [144] pour un article de revue sur le sujet.

L'équation (6.27) montre que l'aimantation spontanée peut avoir deux sources différentes : la première est un terme de mer de Fermi, où on somme tous les moments magnétiques orbitaux m_{nk} des électrons dans les bandes remplies. Le second est relié à la courbure de Berry, caractérisant la géométrie de l'espace des bandes. Il peut être interprété comme un magnétisme dû aux fonctions de Wannier sur les bords du cristal. [145]

Dans le cas très courant où le modèle est symétrique par renversement du temps, la courbure de Berry et le moment magnétique orbital sont impairs en k . L'aimantation spontanée du système est donc nulle, et il faut aller à l'ordre suivant en champ magnétique pour connaître la réponse à un champ extérieur.

6.5 Susceptibilité orbitale

Intéressons-nous maintenant à l'ordre 2 de la théorie de perturbation. En utilisant (6.17), la susceptibilité peut s'écrire :

$$\chi_{\text{RPFM}} = -\frac{\mu_0}{S} \left. \frac{\partial^2 \Xi}{\partial B^2} \right|_{B=0} \quad (6.28)$$

$$= -\frac{\mu_0}{S} \frac{k_B T}{\pi} \Im \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\mu)/k_B T} \right) \text{Tr} \left. \frac{\partial^2 \mathcal{G}^{(2)}}{\partial B^2} \right|_{B=0} dE \quad (6.29)$$

$$= -\frac{\mu_0}{S} \frac{k_B T}{\pi} \left(-\frac{2e^2}{8\hbar^2} \right) \Im \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\mu)/k_B T} \right) \text{Tr} \{ \Gamma \} dE \quad (6.30)$$

où

$$\Gamma = gh^{xx}g^{yy} + gh^{yy}g^{xx} - 2gh^{xy}g^{xy} + 2g(h^xg^y - h^yg^x)^2. \quad (6.31)$$

La notation χ_{RPFM} sera utilisée dans ce manuscrit pour distinguer les différentes formulations et approches de la susceptibilité orbitale. Lorsqu'aucune confusion ne sera possible, nous la noterons simplement χ_{orb} .

L'objet de cette partie va être de trouver une expression satisfaisante pour la susceptibilité orbitale, et précisément, nous allons montrer que celle-ci peut s'écrire

$$\chi_{\text{RPFM}} = -\frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \frac{\Im}{\pi S} \int_{-\infty}^{\infty} n_F(E) \text{Tr} \{ gh^{xx}gh^{yy} - gh^{xy}gh^{xy} - 4(gh^xgh^xgh^ygh^y - gh^xgh^ygh^xgh^y) \} dE. \quad (6.32)$$

Pour ce faire, le calcul sera décomposé en deux étapes : une première pour éliminer le logarithme dans l'intégrale (6.30), puis une seconde pour réécrire le terme dans la trace de façon symétrique.

Étape n°1

L'objet de cette étape est d'écrire le terme dans la trace de (6.17) comme une dérivée totale de l'énergie. En utilisant les propriétés des dérivées des fonctions de Green, Γ peut se développer en trois termes :

$$\Gamma = gh^{xx}g^{yy} + gh^{yy}g^{xx} - 2gh^{xy}g^{xy} + 2g(h^xg^y - h^yg^x)^2 \quad (6.33)$$

$$= g(h^{xx}gh^{yy} + h^{yy}gh^{xx} - 2h^{xy}gh^{xy})g \quad (6.34)$$

$$+ 2g(h^{xx}gh^ygh^y + h^{yy}gh^xgh^x - h^{xy}gh^xgh^y - h^{xy}gh^ygh^x)g \quad (6.35)$$

$$+ 2g(h^xgh^ygh^xgh^y - h^xgh^ygh^ygh^x - h^ygh^xgh^xgh^y + h^ygh^xgh^ygh^x)g. \quad (6.36)$$

Le premier terme (6.34) noté Γ_1 se réécrit facilement comme une dérivée totale de E :

$$\Gamma_1 = g(h^{xx}gh^{yy} + h^{yy}gh^{xx} - 2h^{xy}gh^{xy})g = -\frac{\partial}{\partial E}(h^{xx}gh^{yy}g - h^{xy}gh^{xy}g). \quad (6.37)$$

Le reste demande un peu plus de manipulations, en particulier des intégrations par parties dans l'espace réciproque sur k_x et k_y . Remarquons que

$$gh^{xx}gh^ygh^y g \cong -g(2h^xgh^xgh^ygh^y + h^xgh^{xy}gh^y + h^xgh^ygh^xgh^y + h^xgh^ygh^{xy} + h^xgh^ygh^ygh^x)g$$

$$gh^{yy}gh^xgh^x g \cong -g(2h^ygh^ygh^xgh^x + h^ygh^{xy}gh^x + h^ygh^xgh^ygh^x + h^ygh^xgh^{xy} + h^ygh^xgh^xgh^y)g,$$

ce qui permet de réécrire (6.35) et (6.36) comme la somme $\Gamma_2 + \Gamma_3$ d'expressions :

$$\Gamma_2 = -2g(h^xgh^{xy}gh^y + h^xgh^ygh^{xy} + h^ygh^{xy}gh^x + h^ygh^xgh^{xy} + h^{xy}gh^xgh^y + h^{xy}gh^ygh^x)g \quad (6.38)$$

$$\Gamma_3 = -4g(h^xgh^xgh^ygh^y + h^ygh^ygh^xgh^x + h^ygh^xgh^xgh^y + h^xgh^ygh^ygh^x)g. \quad (6.39)$$

Ces deux termes peuvent s'écrire comme des dérivées totales :

$$\Gamma_2 = 2\frac{\partial}{\partial E}(gh^{xy}gh^ygh^x + gh^{xy}gh^xgh^y) \quad (6.40)$$

$$\Gamma_3 = \frac{\partial}{\partial E}(4gh^xgh^xgh^ygh^y). \quad (6.41)$$

Ainsi on peut factoriser la trace,

$$\text{Tr} \{\Gamma\} = \frac{\partial}{\partial E} \text{Tr} \{\Delta\} \quad (6.42)$$

avec

$$\Delta = -gh^{xx}gh^{yy} + gh^{xy}gh^{xy} + 2gh^{xy}(gh^ygh^x + gh^xgh^y) + 4gh^xgh^xgh^ygh^y. \quad (6.43)$$

À l'aide d'une intégration par parties sur l'énergie, on fait donc disparaître le logarithme dans la susceptibilité³, celle-ci peut s'exprimer avec des produits d'au plus quatre fonctions de Green :

$$\chi_{\text{RPFM}} = -\frac{\mu_0 e^2}{S\hbar^2} \frac{k_B T}{4\pi} \Im \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{1}{k_B T} n_F(E) \right) \text{Tr} \Delta \, dE \quad (6.44)$$

$$= \frac{\mu_0 e^2}{S\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \Im \int_{-\infty}^{\infty} n_F(E) \text{Tr} \Delta \, dE. \quad (6.45)$$

3. Le terme tout intégré étant nulle à cause de la décroissance des fonctions de Green en $\pm\infty$.

Étape n°2

Si la formule précédente est correcte et de portée générale, son expression n'est pas totalement satisfaisante pour notre objectif de mettre en évidence les effets interbandes. La formulation à une bande étant connue (cf. (5.18)), on cherche une expression qui la généralise de façon « naturelle », en explicitant la contribution des autres bandes.

Une telle formulation s'obtient avec des manipulations sur $\text{Tr } \Delta$, en particulier des intégrations par parties dans l'espace réciproque. Utilisons les égalités suivantes :

$$gh^{xy}gh^ygh^x \cong -gh^xgh^ygh^ygh^x - gh^ygh^xgh^ygh^x - gh^ygh^{xy}gh^x - gh^ygh^ygh^xgh^x - gh^ygh^ygh^{xx} \quad (6.46)$$

$$gh^{xy}gh^xgh^y \cong -gh^ygh^xgh^xgh^y - gh^xgh^ygh^xgh^y - gh^xgh^{xy}gh^y - gh^xgh^xgh^ygh^y - gh^xgh^xgh^{yy} \quad (6.47)$$

$$gh^xgh^xgh^{yy} = g^xh^xgh^{yy} \cong -gh^{xx}gh^{yy} - gh^xgh^xgh^{yy} - gh^xgh^{xxy} \quad (6.48)$$

$$gh^ygh^ygh^{xx} = g^yh^ygh^{xx} \cong -gh^{xx}gh^{yy} - gh^ygh^ygh^{xx} - gh^ygh^{xxy}. \quad (6.49)$$

En combinant ces quatre relations, nous obtenons l'identité

$$3gh^{xy}(gh^ygh^x + gh^xgh^y) \cong gh^{xx}gh^{yy} - gh^{xy}gh^{xy} - 4gh^xgh^xgh^ygh^y - 2gh^xgh^ygh^xgh^y. \quad (6.50)$$

Et en utilisant (6.50) dans l'expression (6.43) de Δ , on obtient

$$\Delta = -\frac{1}{3}(gh^{xx}gh^{yy} - gh^{xy}gh^{xy}) + \frac{4}{3}gh^xgh^xgh^ygh^y - \frac{4}{3}gh^xgh^ygh^xgh^y \quad (6.51)$$

$$= -\frac{1}{3}(gh^{xx}gh^{yy} - gh^{xy}gh^{xy} - 4(gh^xgh^xgh^ygh^y - gh^xgh^ygh^xgh^y)). \quad (6.52)$$

Finalement, en insérant ce résultat dans l'expression (6.45) de χ_{RPFM} , on retrouve le résultat annoncé au début de la section, à savoir (6.32).

La théorie de perturbation précédente, et l'équation (6.32), notée RPFM dans la suite du manuscrit, font partie des résultats centraux de ce travail de thèse. De façon similaire à l'aimantation orbitale, cette formule est également valable dans le cas d'un système non cristallin. En effet, il est possible (même si très fastidieux) d'obtenir ce résultat en ne manipulant que les commutateurs des fonctions de Green et dérivées du hamiltonien dans l'espace réel, sans faire appel à l'espace réciproque. En particulier, on pourra l'appliquer dans le cas de molécules, rubans, ou systèmes désordonnés.

Généralisation de la formule de Peierls

L'expression (6.32) a la propriété que l'on recherchait initialement, c'est-à-dire qu'elle généralise « naturellement » la formule de Peierls donnée dans le chapitre précédent. En effet, le premier terme a exactement la même structure, où l'on a remplacé les dérivées secondes de la relation de dispersion par celles du hamiltonien, et à une bande le terme de droite disparaît puisque les scalaires commutent. Si les matrices en jeu étaient diagonales, ce premier terme serait exactement la somme sur toutes les bandes de la contribution de Peierls. Le fait que le produit fasse intervenir des éléments non-diagonaux révèle la présence d'un couplage interbandes.

Équivalence avec la formule GSS

En utilisant une nouvelle fois (6.50), il est facile de montrer l'équivalence entre (6.32) et l'expression dérivée par Gómez-Santos et Stauber (4.2).

En particulier, notre formule n'est pas équivalente à celle de Fukuyama [41]. Cela provient du point de départ de la dérivation : par hypothèse, nous étudions des hamiltoniens de liaisons fortes, qui peuvent avoir des termes croisés non nuls $h^{xy} \neq 0$ (systèmes non-séparables) et se limitent à un nombre fini de bandes. Rappelons que ceci est fondamentalement différent du point de départ microscopique de Fukuyama, qui démontre son résultat à partir d'un hamiltonien à un électron en $\hat{P}^2/2m + V(\hat{r})$ possédant par définition une infinité de bandes.

Conclusion

L'objectif de ce chapitre a été la dérivation d'une théorie de perturbation invariante de jauge en champ magnétique. Nous avons calculé l'ordre 1 (l'aimantation) et l'ordre 2 (la susceptibilité orbitale), résultats écrits en termes de fonctions de Green (retardées). Dans la suite du manuscrit, nous allons appliquer ces formules à l'étude de modèles multibandes afin de mettre en évidence les effets de couplage interbandes.

CHAPITRE 6. THÉORIE DE PERTURBATION INVARIANTE DE JAUGE

Chapitre 7

Magnétisme orbital des modèles à deux bandes

Dans ce chapitre, le plus long du manuscrit, nous allons dériver une formulation géométrique de la susceptibilité orbitale pour les modèles à deux bandes, ceux-ci étant les plus pertinents pour sonder les effets interbandes sur la susceptibilité.¹ Cette formulation, avec les différentes contributions χ_{LP} , χ_g , χ_Ω et $\tilde{\chi}_g$ permettra de détailler de nombreuses conséquences des effets géométriques du hamiltonien sur la susceptibilité orbitale. Nous illustrerons cette formule sur divers modèles, présentant ou non une symétrie chirale, qu'ils soient isolants ou semi-métalliques, avec éventuellement des nombres d'enroulements non nuls. Dans la dernière section, on s'intéresse aux modèles sans symétrie chirale dont le spectre présente une bande plate : ce sont des modèles très utiles pour étudier l'aspect géométrique de la susceptibilité, la contribution du spectre de cette bande étant nulle.

7.1 Position du problème

Un modèle à deux bandes est caractérisé par une matrice hamiltonienne que l'on peut toujours écrire sous la forme

$$\mathcal{H}_k = E_{0,k}\mathbb{1} + E_k \mathbf{n}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (7.1)$$

avec $\mathbf{n}_k = (n_x, n_y, n_z)$ un vecteur dépendant de \mathbf{k} de norme 1, et $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ le vecteur des matrices de Pauli. Les énergies propres d'une telle matrice sont les $E_{\alpha k} = E_{0,k} + \alpha E_k$ où $\alpha = \pm 1$ est l'indice de bande.² Ces valeurs propres sont associés aux vecteurs propres

$$|u_{\alpha k}\rangle = \frac{1}{1 + \alpha(2n_z + 1)} \begin{pmatrix} n_z + \alpha \\ n_x + in_y \end{pmatrix} \quad (7.2)$$

de projecteurs

$$\mathcal{P}_{\alpha k} = \frac{1 + \alpha \mathbf{n}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}}{2}. \quad (7.3)$$

1. Comme illustré dans la Réf. [58], les études avec la prise en compte d'un grand nombre de bandes corrigent essentiellement les phénomènes observés à deux bandes.

2. On conservera par la suite la notation E_{nk} pour les considérations générales, et $E_{\alpha k}$ pour le cas particulier des modèles à deux bandes.

CHAPITRE 7. MAGNÉTISME ORBITAL DES MODÈLES À DEUX BANDES

Les quantités géométriques telles que la courbure de Berry et le tenseur métrique peuvent s'exprimer simplement en termes des dérivées du vecteur \mathbf{n}_k . Seule la composante selon Oz de la courbure de Berry est non-nulle, et vaut :

$$\Omega_{\alpha k} = \alpha \frac{\mathbf{n}_k^x \wedge \mathbf{n}_k^y \cdot \mathbf{n}_k}{2} = \alpha \Omega_k. \quad (7.4)$$

Le tenseur métrique est quant à lui indépendant de la bande :

$$g_{\alpha k, ij} = \frac{\mathbf{n}_k^i \cdot \mathbf{n}_k^j}{4} = g_{ij}. \quad (7.5)$$

On définit l'inverse du tenseur métrique g^{ij} par $g_{ij}g^{jk} = \delta_{ik}$.

À deux bandes, toutes les quantités géométriques sont directement reliées puisque le développement de (7.4) et (7.5) montre la relation

$$\Omega_k^2 = 4(g_{xx}g_{yy} - g_{xy}^2) = 4\det g_{ij}. \quad (7.6)$$

Enfin, le moment magnétique orbital se trouve être proportionnel à la courbure de Berry :

$$m_{\alpha k} = \frac{e}{\hbar} \alpha E_k \Omega_{\alpha k} = \frac{e}{\hbar} E_k \Omega_k. \quad (7.7)$$

Comme le tenseur métrique, celui-ci ne dépend pas de la bande α . La fonction de Green (à ne pas confondre avec le tenseur métrique g_{ij}) est diagonale dans l'espace réciproque :

$$g(E) = \sum_{\alpha k} g_{\alpha k}(E) \mathcal{P}_{\alpha k} = \sum_{\alpha k} \frac{1}{E - E_{\alpha k}} \mathcal{P}_{\alpha k}. \quad (7.8)$$

7.2 Susceptibilité orbitale géométrique à deux bandes

Comme nous l'avons signalé, nous allons nous limiter à des modèles à deux bandes de systèmes bidimensionnels afin d'avoir des expressions de susceptibilités les plus facilement interprétables, et qui illustrent très bien les couplages interbandes. La susceptibilité calculée par notre méthode sera notée χ_{orb} excepté lorsqu'on cherchera à la comparer à d'autres formulations, et nous la noterons χ_{RPFM} .

Pour un modèle à deux bandes, il est possible de simplifier l'expression (6.32) en faisant disparaître les fonctions de Green, et l'intégrale sur l'énergie. La formule résultante sera alors écrite en termes d'intégrales sur la première zone de Brillouin. Comme pour la formulation avec les fonctions de Green, des intégrales par parties peuvent permettre d'écrire des formules différentes mais équivalentes.

Partons de (6.32)

$$\chi_{\text{RPFM}} = -\frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \frac{\Im m}{\pi S} \int_{-\infty}^{\infty} n_{\text{F}}(E) \iint_{\text{BZ}} \{U_{\mathbf{k}}(E) + V_{\mathbf{k}}(E)\} \frac{d^2 k}{4\pi^2} dE \quad (7.9)$$

où on a défini

$$U_{\mathbf{k}}(E) = \text{tr} \{gh^{xx}gh^{yy} - gh^{xy}gh^{xy}\} \quad (7.10)$$

$$V_{\mathbf{k}}(E) = -4\text{tr} \{gh^x gh^x gh^y gh^y - gh^x gh^y gh^x gh^y\}. \quad (7.11)$$

7.2. SUSCEPTIBILITÉ ORBITALE GÉOMÉTRIQUE À DEUX BANDES

Dans l'annexe C, on montre que la susceptibilité peut se décomposer sous la forme :

$$\boxed{\chi_{\text{orb}}^{2b} = \chi_{\text{LP}} + \chi_{\Omega} + \chi_g + \tilde{\chi}_g} \quad (7.12)$$

où les différents termes sont :

- la susceptibilité de Landau-Peierls χ_{LP} (somme des contributions de chacune des bandes)

$$\chi_{\text{LP}} = \frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} n'_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) \left(E_{\alpha}^{xx} E_{\alpha}^{yy} - (E_{\alpha}^{xy})^2 \right) \frac{d^2k}{4\pi^2}; \quad (7.13)$$

- la susceptibilité χ_{Ω} contrôlée par la courbure de Berry (ou $m_{\alpha\mathbf{k}}$ d'après (7.7))

$$\boxed{\chi_{\Omega} = \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} \left(-n'_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) + \alpha \frac{n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} \right) E_{\mathbf{k}}^2 \Omega_{\mathbf{k}}^2 \frac{d^2k}{4\pi^2}}; \quad (7.14)$$

- la susceptibilité χ_g caractérisée par le tenseur métrique g_{ij} et son inverse g^{ij}

$$\boxed{\chi_g = \frac{\mu_0 e^2}{2\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} -\alpha \frac{n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} \partial_j (E_{\mathbf{k}}^2 \partial_i (\det(g) g^{ij})) \frac{d^2k}{4\pi^2}}; \quad (7.15)$$

- et la susceptibilité $\tilde{\chi}_g$ également caractérisée par g_{ij} , mais nulle si le système possède une symétrie particule-trou

$$\boxed{\tilde{\chi}_g = \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} \det(g) g^{ij} E_0^i \left[\left(n'_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) - \alpha \frac{n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} \right) E_0^j + \alpha n'_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) E^j \right] \frac{d^2k}{4\pi^2}}. \quad (7.16)$$

Bien sûr, comme nous l'avons déjà précisé, ce découpage est *un* découpage parmi d'autres possibles. Au cours de ce travail de thèse nous avons rencontré différentes façons d'écrire la susceptibilité, entre autre celui de la Réf. [49], similaire au découpage historique de Blount [16]. Notre première dérivation de la susceptibilité (dans le cas de modèles respectant la symétrie chirale) a fait apparaître également une formulation différente mais équivalente [123].

Nous avons ici choisi de ne présenter qu'un seul découpage, celui présentant probablement le plus grand intérêt physique. [117] Les arguments principaux sont que :

- la structure $\chi_{\text{orb}} = \chi_{\text{LP}} + \chi_{\text{inter}}$ met en évidence les contributions interbandes;
- chacun des termes est (relativement) simple. Ceux-ci ne font intervenir que la fonction de Fermi et sa dérivée (contrairement à la Réf. [123] qui utilise la dérivée seconde également);
- chaque terme séparément vérifie la règle de somme (3.37), contrairement aux termes de la Réf. [49] pour laquelle des contribution sont non-nulles même lorsque tout les états sont remplis;
- le comportement de chacun des termes est guidé par les symétries du modèle :
 - (★) si le modèle respecte la symétrie particule-trou (par exemple avec une symétrie chirale), $E_{0,\mathbf{k}} = 0$, donc $\tilde{\chi}_g = 0$;
 - (★) si le modèle respecte la symétrie d'inversion et la symétrie par renversement du temps, $\chi_{\Omega} = 0$.

Lien avec la formulation de Gao, Chang et Niu

Il est particulièrement intéressant de comparer le découpage proposé avec celui de la Réf. [49]. Cette comparaison est détaillée dans l'annexe D où nous esquissons la méthode semi-classique utilisée pour calculer la susceptibilité orbitale. On montre en particulier que les deux résultats sont équivalents (à un facteur numérique près). Ce travail a été fait de façon contemporaine à nos travaux. Leur expression est intéressante, parce qu'elle cherche à faire le lien avec le magnétisme d'atomes libres, en identifiant des contributions dites de Langevin (ou Larmor) et de Van Vleck. Elle souffre cependant de quelques limitations, en particulier elle ne permet pas de retrouver la susceptibilité de Landau-Peierls avec leur formalisme. Leur expression est très proche de celle proposée par Blount dans la seconde moitié du XX^e siècle. [16]

7.3 Applications à des modèles avec symétrie particule-trou

Nous avons obtenu une formule présentant l'avantage de mettre en évidence les effets interbandes, et sur laquelle se traduisaient aisément les symétries du modèle choisi. Il est maintenant temps de la mettre en application sur une large gamme de modèles, l'objectif étant d'expliquer les différents comportements observés, plus riches que sur les systèmes à une seule bande.

Ici, on s'intéresse tout d'abord aux modèles où la symétrie particule-trou est respectée, ce qui a pour conséquence $\tilde{\chi}_g = 0$: seuls les termes χ_{LP} , χ_g et χ_Ω contribueront à la susceptibilité. Ces modèles sont très fréquents en physique théorique de la matière condensée, car faciles à étudier. De plus, l'ajout d'un terme proportionnel à la matrice unité dans le hamiltonien n'a pas d'effet sur les propriétés géométriques du hamiltonien puisqu'il ne modifie pas ses fonctions propres. Nous étudierons quelques-uns de ces modèles dans un second temps dans le cas particulier de bandes plates.

7.3.1 Modèles sur réseau carré

Une méthode très simple pour obtenir un modèle à deux bandes à partir du modèle sur réseau carré du CHAP. 5 est de remplir le réseau avec deux types d'atomes, dont les orbitales ont des énergies différentes. Quitte à soustraire au hamiltonien une matrice proportionnelle à la matrice unité, on peut supposer que les énergies sur site sont opposées de valeur Δ . Supposons de plus une asymétrie dans les amplitudes de probabilité de saut entre plus proches voisins, comme indiqué sur la FIG. 7.1. Cette dernière hypothèse permettra d'interpoler entre deux modèles bien connus : un modèle sur réseau carré et le modèle de briques ; proche du réseau nid d'abeille du graphène. Cela a été récemment implémenté dans une simulation quantique à base d'atomes froids afin de mettre en évidence la fusion de points de Dirac (phénomène que l'on reverra ci-dessous). [143]

La matrice hamiltonienne du modèle limité aux plus proches voisins peut s'écrire $\mathcal{H}_k = E_k \mathbf{n}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}$ avec

$$E_k \mathbf{n}_k = t \begin{pmatrix} 2 \cos(k_x a) + (1 + \lambda) \cos(k_y a) \\ (1 - \lambda) \sin(k_y a) \\ \Delta \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \lambda = \frac{t'}{t}. \quad (7.17)$$

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

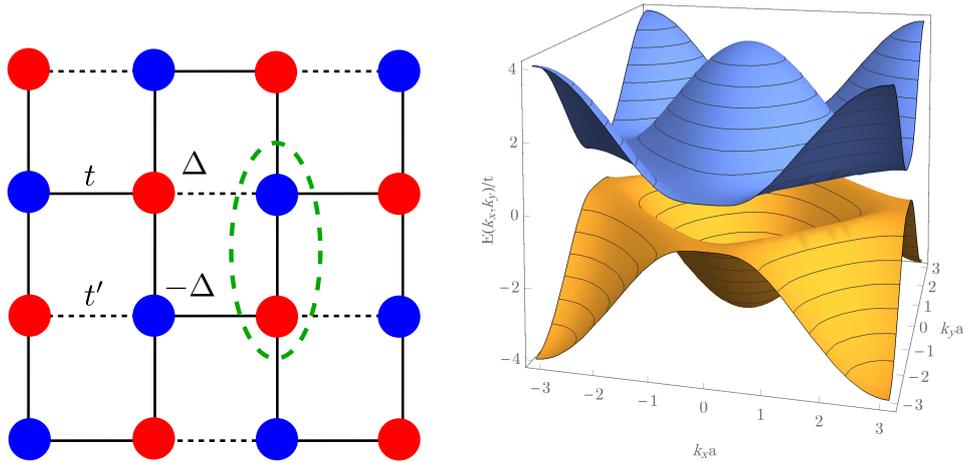


FIGURE 7.1 – À gauche : réseau de briques (avec un motif entouré en vert); on définit le paramètre sans dimension $\lambda = t'/t$. À droite : spectre du modèle à deux bandes sur réseau carré ($\lambda = 1$) tracé pour $\Delta = 0.3t$. Le minimum de la bande de conduction est atteint sur une ligne de points et non des points isolés (à l'image d'un « chapeau mexicain »).

7.3.1.1 Réseau carré avec bande interdite ($\lambda = 1$)

Commençons par le cas $\lambda = 1$ où le réseau est carré. Si $\Delta \neq 0$, alors les sites du réseau ne sont pas équivalents, et il s'agit d'un modèle à deux atomes par maille sur réseau carré. Ce modèle respecte la symétrie par renversement du temps, la symétrie d'inversion, et la symétrie chirale. En conséquence, $\chi_\Omega = \tilde{\chi}_g = 0$, c'est un modèle où la susceptibilité interbandes est uniquement contrainte par le tenseur métrique. On peut écrire la susceptibilité sous la forme :

$$\chi_{\text{orb}} = \chi_{\text{LP}} + \chi_g. \quad (7.18)$$

Les différents termes de la susceptibilité sont représentés sur la FIG. 7.2. Alors que dans la littérature le couplage interbandes est souvent sous-entendu comme la conséquence d'une courbure de Berry non-nulle, ce système très simple est un exemple avec de forts effets interbandes (il suffit de regarder la contribution χ_g de la FIG. 7.2 pour s'en convaincre) sans courbure de Berry! [117] *Ce fait remarquable met en avant une quantité physique —le tenseur métrique— jusqu'ici peu considérée dans la littérature, qui contrôle totalement les effets géométriques dans ce modèle.*

Comparaison avec le modèle à une bande

On remarque que la susceptibilité est similaire à celle du modèle à une bande, mais avec une nette différence à l'intérieur de la bande interdite. En effet, la susceptibilité est constante entre $-\Delta$ et Δ , ce qui est dû à la dépendance en la fonction de Fermi et sa dérivée de χ_{orb} : quel que soit μ à l'intérieur de la bande interdite, n_F est constante, et donc n'_F nulle. Ceci explique en particulier que $\chi_{\text{LP}} = 0$ dans le gap; la susceptibilité n'est pas qu'un effet de surface de Fermi, mais inclut des contributions de la mer de Fermi, et quelles que soient les intégrations par parties réalisées, celles-ci ne pourront pas faire disparaître le terme en n_F .

CHAPITRE 7. MAGNÉTISME ORBITAL DES MODÈLES À DEUX BANDES

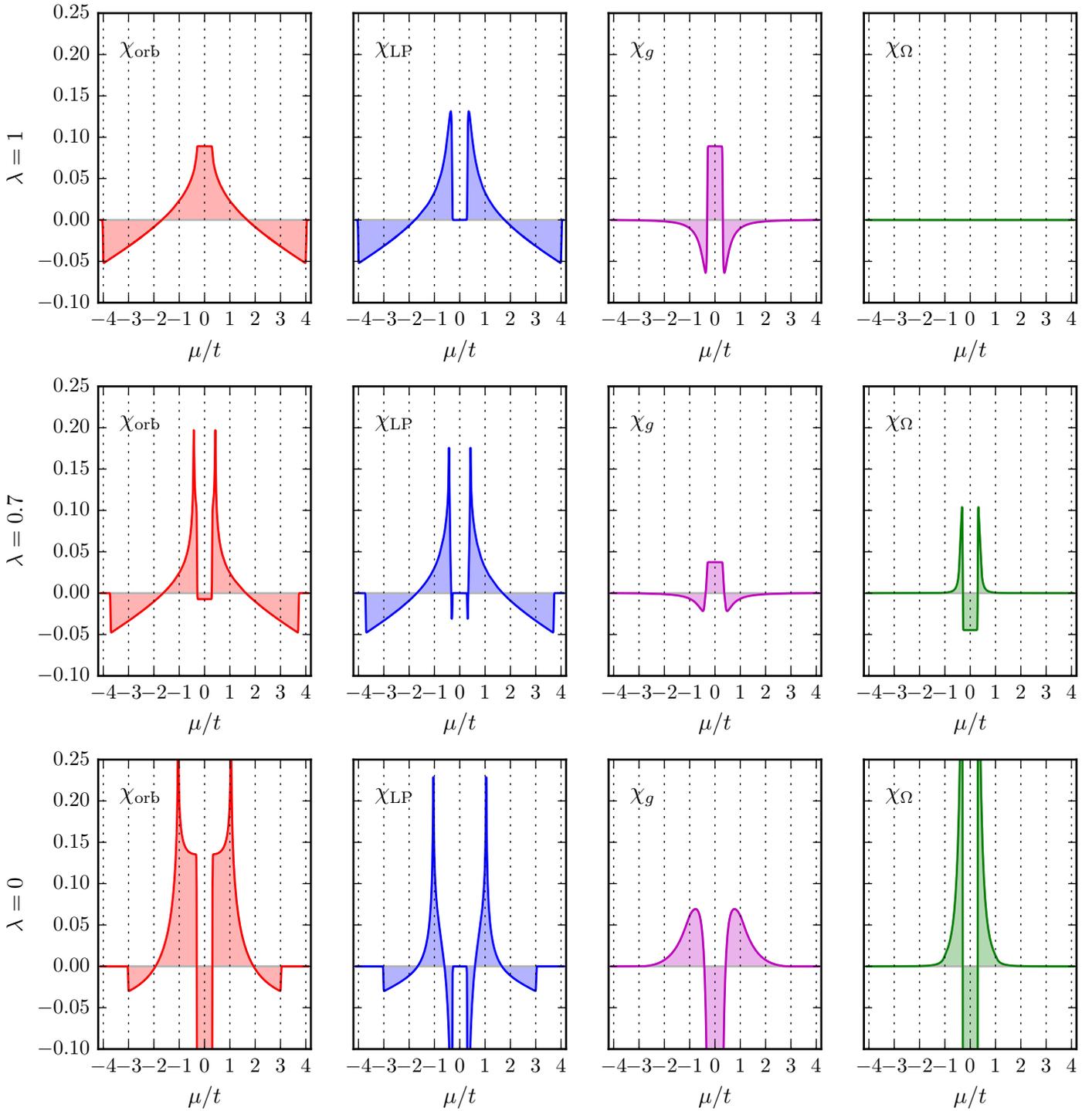


FIGURE 7.2 – Les différentes contributions de la susceptibilité orbitale sont tracées pour le modèle à deux bandes sur réseau de briques ($k_B T = 0.005t$) avec $\Delta = 0.3t$. De haut en bas : $\lambda = 1$ (modèle sur réseau carré), $\lambda = 0.7$ (intermédiaire) et $\lambda = 0$ (réseau de briques). Si $\lambda = 1$, la courbure de Berry est nulle. Quand λ passe de 1 à 0, la contribution dominante des effets interbandes passe de χ_g à χ_{Ω} .

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

On remarque de plus que χ_g ne contribue de façon significative que lorsque μ est proche de l'intervalle $[-\Delta, \Delta]$, c'est-à-dire là où l'on s'attend à des couplages entre les deux bandes maximaux. La contribution χ_g vient corriger la contribution de Peierls sur les bords du gap ($E = \pm\Delta$), pour donner une valeur constante à χ_{orb} dans le gap. Nous verrons que cette caractéristique est assez rare en réalité : c'est souvent χ_Ω qui contribue majoritairement à la susceptibilité dans la bande interdite. Que χ_g soit dominant est une particularité des modèles avec les symétries de renversement du temps et d'inversion.

La contribution de Peierls donne quant à elle le comportement correct près des bords de bande externes : une susceptibilité négative correspondant au résultat de Landau où la masse nue de l'électron est remplacée par la masse de bande. Cependant, on observe un comportement original près des bords de bandes bordant la bande interdite : la susceptibilité est —contre toute attente— positive, et la réponse paramagnétique. Ceci est dû à la relation de dispersion atypique pour un bord de bande : la valeur propre positive de (7.17) est par exemple

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + 4(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))^2} \quad (7.19)$$

d'où

$$E^i = \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k_i} = -a \sin(k_i a) \frac{\sqrt{E_{\mathbf{k}}^2 - \Delta^2}}{E_{\mathbf{k}}}. \quad (7.20)$$

On remarque que les deux dérivées selon k_x et k_y sont simultanément nulles en des points isolés de la zone de Brillouin qui correspondent aux maxima d'énergie ($k_x = k_y = 0$ [π]), mais également sur des lignes $k_x a + k_y a = \pi$ et $k_x a - k_y a = \pi$ qui correspondent aux minima. Avec une rotation de 45° des axes k_x et k_y on comprend que le hessien (quantité géométrique caractéristique³ de la surface $E(k_x, k_y)$ qui ne dépend pas du changement de coordonnées) est nul sur le bord de la bande interdite. Une étude des dérivées du hessien montre que celui-ci est négatif proche des bords des bandes, d'où une réponse paramagnétique pour la susceptibilité de Peierls. Ceci est un autre exemple de singularité de Van Hove, ici le spectre n'a pas de point col, mais est parabolique dans une direction et constant dans l'autre.

Évolution en fonction de λ [117]

Faisons varier le paramètre λ , et autorisons ainsi la courbure de Berry à être non-nulle (le modèle perdant la symétrie d'inversion). La FIG. 7.2 montre l'évolution des différentes contributions pour la susceptibilité orbitale pour une valeur intermédiaire de $\lambda = 0.7$.

On constate la diminution de χ_g au profit de χ_Ω . La contribution du terme χ_{LP} près des bords de bandes internes change de signe, et devient négative, comme pour des bords de bande habituels. Ceci montre la levée de dégénérescence des lignes d'extrema en fonction de λ vers des extrema isolés.

7.3.1.2 Réseau de briques ($\lambda = 0$)

Lorsque $\lambda = 0$, le réseau obtenu est appelé « réseau de briques » ; c'est en quelque sorte le réseau nid d'abeille du graphène avec des angles droits. Avec la présence de la bande interdite, ce modèle est à comparer au nitrure de bore. Contrairement au réseau carré, celui-ci brise la symétrie par

3. On parle ici de la géométrie de la surface $E(k_x, k_y)$, qui est une notion différente de la géométrie des états $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ sur le fibré de Bloch.

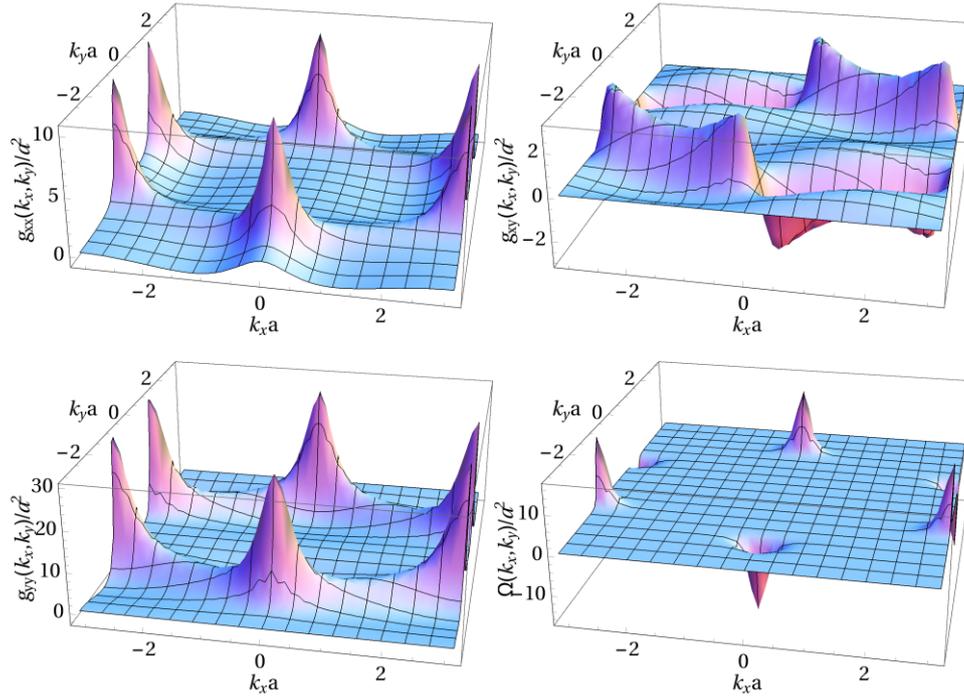


FIGURE 7.3 – Tenseur métrique et courbure de Berry du réseau de briques. Les composantes g_{xx} et g_{yy} ont une forme similaire, mais avec des valeurs maximales différentes ; elles sont toutes les deux positives puisque ce sont des normes de vecteurs ($g_{xx} = \frac{1}{2} \mathbf{n}^x \cdot \mathbf{n}^x$ par exemple). La courbure de Berry est nettement plus localisé dans l’espace réciproque que le tenseur métrique.

inversion, et autorise une courbure de Berry non-nulle qui va alors contribuer à la susceptibilité totale. On remarque que l’intégrande de (7.14) est le produit d’une combinaison de fonctions de Fermi et d’un terme toujours positif. Lorsque $-\Delta \leq \mu \leq \Delta$, seul le terme de mer de Fermi contribue, qui donne nécessairement un terme positif.

Sur la FIG. 7.2, l’importance relative des différentes susceptibilités a maintenant changé : le couplage interbandes est ici dominé par χ_Ω , au moins aux bords de bandes. Afin de visualiser leurs variations typiques dans l’espace réciproque, les quantités géométriques (tenseur métrique et courbure de Berry) sont tracées sur la FIG. 7.3. Si les deux composantes g_{xx} et g_{yy} sont nécessairement positives, le signe de g_{xy} n’est pas fixé. On remarque que la courbure de Berry est plus localisée dans la zone de Brillouin que le tenseur métrique.

La susceptibilité totale a une forme très similaire à celle du nitrure de bore, comme nous le verrons dans le paragraphe suivant.

7.3.2 Graphène et nitrure de bore

Le graphène a été l’un des premiers modèles auxquels nous avons appliqué notre formule de susceptibilité : si le magnétisme était déjà une thématique d’intérêt dans l’équipe qui m’a accueilli [27, 28, 36], le travail de Gómez-Santos et Stauber [55] a motivé une recherche plus approfondie sur

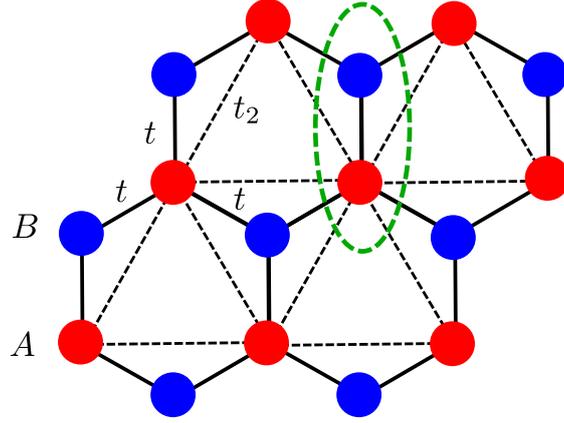


FIGURE 7.4 – Réseau nid d’abeille des modèles à deux bandes. Pour le graphène, les liens entre seconds voisins t_2 sont nuls. En vert est entouré un motif.

la susceptibilité orbitale du graphène, et des cristaux en général [98, 122, 148], recherche dont ce travail de thèse est issu. Une présentation des résultats expérimentaux relatifs au magnétisme orbital du graphène a déjà été donnée au CHAP. 4, mais nous reviendrons particulièrement sur une expérience récente [81] à la lumière des résultats de cette section.

Modèle sur réseau nid d’abeille

Intéressons-nous à un réseau nid d’abeille formé d’un réseau de Bravais triangulaire avec deux atomes par maille (atomes identiques pour le graphène ou différents pour le nitrure de bore), celui-ci est représenté sur la FIG. 7.4.

En notant 2Δ la différence d’énergie des sites A et B , et en ne prenant en compte que les sauts vers les plus proches voisins, le hamiltonien de Bloch peut s’écrire

$$h = \begin{pmatrix} \Delta & tf(\mathbf{k}) \\ tf^*(\mathbf{k}) & -\Delta \end{pmatrix} \quad (7.21)$$

où

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{\delta_i} e^{i\delta_j \cdot \mathbf{k}} = e^{ik_y a} + 2e^{-ik_y a/2} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \quad (7.22)$$

et les trois vecteurs δ_j représentent les liens entre plus proches voisins A et B . Le modèle où $\Delta \neq 0$ est celui du nitrure de bore, et lorsque $\Delta \rightarrow 0$ on retrouve celui du graphène.⁴

À l’instar du modèle sur réseau carré, l’ouverture de la bande interdite est engendrée par la brisure de la symétrie d’inversion en même temps que la brisure de la symétrie chirale (dans le cas présent, le hamiltonien n’anti-commute plus avec σ_z dès que $\Delta \neq 0$), et autorise une courbure de Berry non-nulle. On peut obtenir une expression simple de celle-ci, à condition de changer le

4. En réalité, pour obtenir une limite non-divergente pour la courbure de Berry, la susceptibilité du graphène ainsi que des autres semi-métaux seront tracées avec une bande interdite, petite devant toutes les énergies du problème.

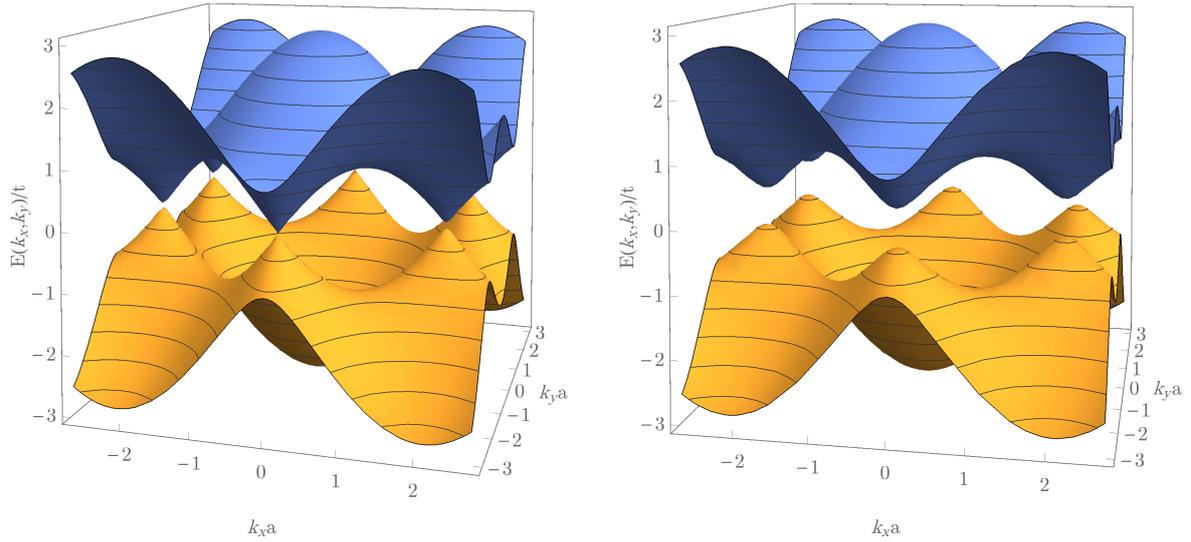


FIGURE 7.5 – À gauche, le spectre du graphène sur une zone contenant la première zone de Brillouin hexagonale. Le graphène a deux bandes qui sont dégénérées aux points K et K' . Près de ces points, la relation de dispersion est linéaire. À droite le spectre du nitrure de bore avec $\Delta = 0.3t$: une bande interdite s'est ouverte au niveau des points de Dirac de 2Δ .

paramétrage du hamiltonien de Bloch [36] :

$$h = E_{\mathbf{k}} \mathbf{n}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = E_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta e^{-i\theta} \\ \sin \beta e^{+i\theta} & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

où $E_{\mathbf{k}}$ est le spectre de la bande $\alpha = +1$:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + |f(\mathbf{k})|^2}. \quad (7.24)$$

Le spectre $E_{\alpha\mathbf{k}} = \alpha E_{\mathbf{k}}$ est représenté sur la FIG. 7.5 pour le graphène ($\Delta = 0$) et le nitrure de bore ($\Delta = 0.3t$). On voit en particulier que les deux bandes sont dégénérées aux *points de Dirac*, dont deux points K et K' inéquivalents dans la première zone de Brillouin ; leur voisinage sont les deux *vallées* du graphène. Près de ces points, la relation de dispersion est approximativement linéaire.

Géométrie des états de Bloch, et nombre d'enroulement

En choisissant comme vecteurs propres les

$$|u_{+\mathbf{k}}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) \\ \sin(\beta/2)e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |u_{-\mathbf{k}}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\beta/2)e^{-i\theta} \\ \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \quad (7.25)$$

la connexion de Berry s'exprime simplement : [36]

$$\mathcal{A}_{\alpha\mathbf{k}} = \langle u_{\alpha\mathbf{k}} | \partial_{\mathbf{k}} u_{\alpha\mathbf{k}} \rangle = -\alpha \sin^2 \frac{\beta}{2} \partial_{\mathbf{k}} \theta. \quad (7.26)$$

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

On en déduit la courbure de Berry

$$\Omega_{\alpha k} = \partial_{\mathbf{k}} \wedge \mathcal{A}_{\alpha k} = \frac{\alpha}{2} \nabla_{\mathbf{k}} \cos \beta \wedge \nabla_{\mathbf{k}} \theta = -\frac{\alpha}{2} \sin \beta (\partial_x \beta \partial_y \theta - \partial_y \beta \partial_x \theta) \mathbf{e}_z. \quad (7.27)$$

À partir de la courbure, on peut calculer la phase de Berry le long d'un chemin \mathcal{C}_K entourant une fois un point K :

$$\Gamma_{\alpha}(\mathcal{C}_K) = \oint_{\mathcal{C}_K} \mathcal{A}_{\alpha k} \cdot d\mathbf{k} = \pi W_{\alpha}(\mathcal{C}_K)(1 - \cos \beta) \quad (7.28)$$

où nous avons défini le *nombre d'enroulement* $W_{\alpha}(\mathcal{C}_K)$ du champ de vecteurs $|u_{\alpha k}\rangle$ autour de K par :

$$W_{\alpha}(\mathcal{C}_K) = -\frac{\alpha}{2\pi} \oint_{\mathcal{C}_K} d\theta. \quad (7.29)$$

Celui-ci est un nombre topologique, c'est-à-dire qu'il ne varie pas si l'on déforme continûment \mathcal{C}_K : en effet, il ne dépend que du nombre de zéros du champ de vecteurs enlacés par le chemin et de leur multiplicité. C'est un entier, qui vaut ici $W_{\alpha}(\mathcal{C}_K) = \alpha$. Dans l'autre vallée (près de K'), les nombres d'enroulement (et donc les phases de Berry) sont opposés.

Dans le cas particulier du graphène, l'expression (7.27) suggère que sa courbure de Berry est nulle pour tout k où θ est bien défini ; ceci étant attendu puisque le graphène respecte la symétrie d'inversion. Lorsque le spectre est dégénéré ($E_k = 0$), le paramétrage (7.23) n'est plus valable car la phase θ n'est plus définie. Pour comprendre ce qui se passe alors, revenons au calcul de la phase de Berry : celle-ci tend vers une valeur finie $\pi W_{\alpha}(\mathcal{C}_K)$ lorsque le gap tend vers zéro. Ce résultat montre que la courbure de Berry ne peut être uniformément nulle pour le graphène. Comme elle est nulle dès que $k \neq 0$, elle est singulière (et opposée) aux deux points de Dirac. Nous retiendrons qu'il faut être prudent dans l'évaluation des quantités géométriques lorsque la structure de bandes est dégénérée.

Susceptibilité orbitale du graphène

Commençons par le cas $\Delta = 0$ du graphène. Comme nous l'avons mentionné, la dégénérescence du spectre autorise une courbure de Berry non nulle malgré la symétrie d'inversion, et χ_{Ω} n'est pas nulle.

Les contributions χ_{LP} , χ_{Ω} et χ_g ainsi que le total sont tracés en fonction du potentiel chimique sur la FIG. 7.6. Cette figure est en excellent accord avec le résultat de la Réf. [55], ainsi qu'avec une approche numérique par le papillon de Hofstadter.⁵ Alors que le résultat de la FIG. 7.6 provient d'une théorie de perturbation, la méthode numérique est construite sur une diagonalisation exacte du hamiltonien liaisons fortes en présence d'un faible champ magnétique obtenu avec la substitution de Peierls.

La caractéristique la plus flagrante de cette susceptibilité est sa grande valeur absolue en $\mu = 0$, qui diverge lorsque la température tend vers 0. Ce comportement $\propto 1/T$ a été prévu par McClure [89] pour des fermions de Dirac à potentiel chimique exactement nul (cf. (1.46)) :

$$\chi_{\text{McC}}(\mu, T) = \frac{3}{4\pi} \text{tn}'_{\text{F}}(0) \chi_0 \stackrel{\mu=0}{=} -\frac{3t}{16\pi k_{\text{B}} T} \chi_0. \quad (7.30)$$

La FIG. 7.7 montre le résultat de notre prédiction à $\mu = 0$, qui est qualitativement en accord avec la loi de McClure ; cependant, et comme l'avait remarqué les auteurs de la Réf. [55], il y a un décalage

5. Tous les modèles étudiés analytiquement ont été vérifiés par une approche numérique comme décrite dans le CHAP. 3.

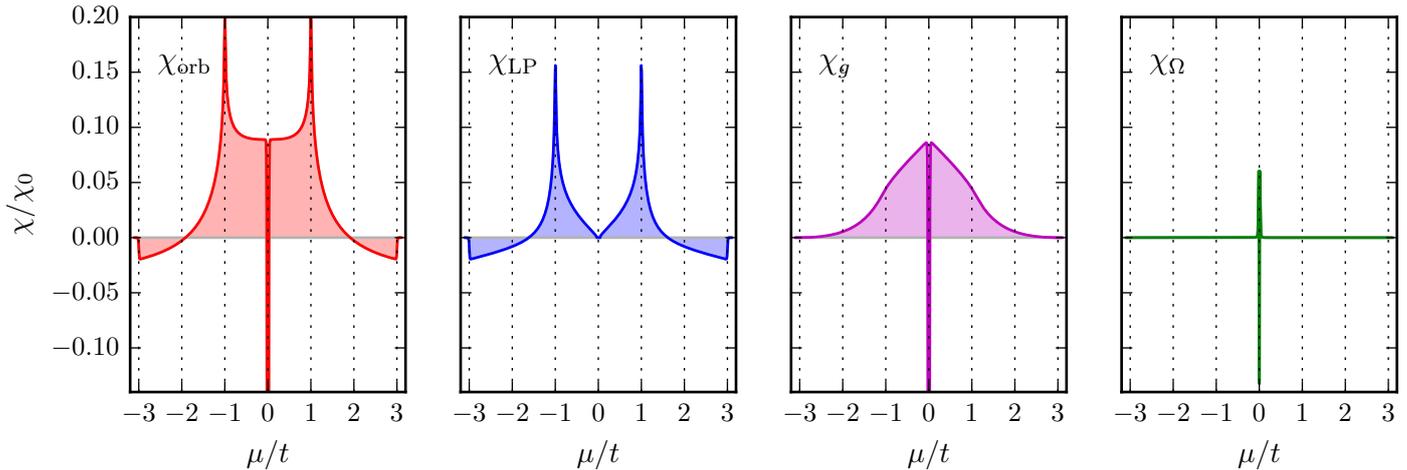


FIGURE 7.6 – Susceptibilité du graphène et ses trois contributions en fonction du potentiel chimique ($k_B T = 0.005t$). On peut observer le plateau paramagnétique à $\chi \approx 0.089\chi_0$. On observe facilement que la règle de somme n'est pas respectée par χ_{LP} , ce qui est dû à la nullité de la densité d'états à $E = 0$.

vertical constant, que l'on note χ_{pl} et qu'on appelle *plateau paramagnétique*. Il est facile de trouver une expression analytique pour cette correction, qui est évaluée numériquement à [123]

$$\chi_{pl} \approx 0.089\chi_0, \quad (7.31)$$

soit une valeur approximativement cinq fois plus grande que le diamagnétisme de Landau du bord de bandes.

Si on s'éloigne de $\mu = 0$ mais en restant dans son voisinage, la formule de McClure prédit une susceptibilité nulle à $T = 0$ d'après (7.30). Nous observons une valeur positive, qui correspond au plateau défini précédemment. Cette valeur constante, non prévue par la théorie de McClure, est donc nécessairement une correction due au réseau cristallin sous-jacent.

À $\mu = \pm t$, on observe une divergence (logarithmique) vers $+\infty$ qui correspond à des singularités de van Hove dans la densité d'état [152]; résultat similaire à la divergence de la susceptibilité du modèle sur réseau carré à $\mu = 0$. On note que la susceptibilité de Peierls prédit un tel effet, puisque ceci est encodé dans la densité d'états et la courbure du spectre.

En dehors de ces singularités ($|\mu| \geq t$), la susceptibilité suit qualitativement la susceptibilité de Peierls, en convergeant sur les bords de bandes vers du diamagnétisme de Landau avec

$$\chi_{\text{Landau}} = -\frac{\mu_0 e^2}{24\pi m^*} = -\frac{\chi_0}{16\pi} \approx -0.02\chi_0 \quad (7.32)$$

où la masse de bande $m^* = 2\hbar^2/(3ta^2)$ provient du développement quadratique du spectre proche de $\mu = \pm 3t$.

Le pic diamagnétique ainsi que le plateau paramagnétique n'étant pas prévus par la susceptibilité de Peierls (tendant vers zéro en $\mu = 0$ avec la densité d'états), ces effets sont à interpréter comme des effets interbandes, effets qui se manifestent majoritairement à l'intérieur des singularités de Van Hove.

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

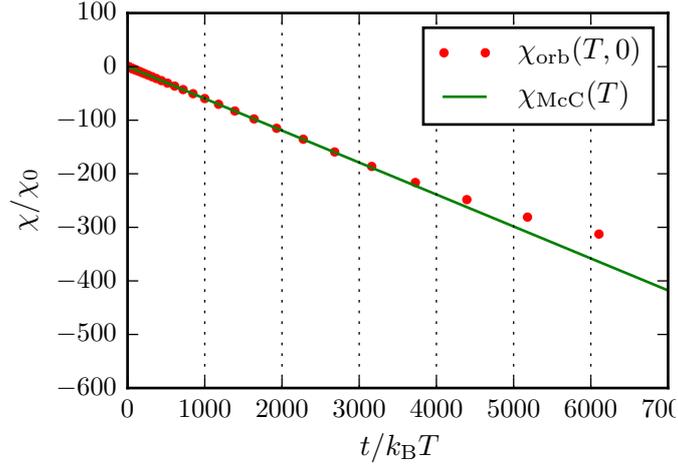


FIGURE 7.7 – Susceptibilité du graphène à potentiel chimique nul en fonction de l’inverse de la température. Résultat en accord avec la susceptibilité de McClure.

Pour terminer cette description, notons que la règle de somme (3.37) est vérifiée pour notre calcul, mais ni pour χ_{McC} , ni pour χ_{LP} séparément (nous reviendrons sur cette dernière dans le cas du nitrure de bore). Bien que χ_{McC} contienne des effets interbandes, et χ_{LP} des effets de réseau, la susceptibilité totale n’est pas simplement la somme de ces deux contributions.

Pic diamagnétique : approche basse énergie

Si on s’intéresse particulièrement à la susceptibilité à potentiel chimique nul, il est possible de linéariser le problème près du point de contact entre les bandes. En effet, McClure a utilisé un spectre de Dirac, qui lui a permis de trouver les niveaux de Landau associés, et de remonter à la susceptibilité *via* la formule d’Euler-MacLaurin. S’il a trouvé la divergence en température, sa méthode n’a cependant pas permis de mettre en évidence le plateau paramagnétique. Koshino et Ando [73] ont étendu ce calcul au nitrure de bore.

Une approche alternative consiste à linéariser le hamiltonien près d’un point \mathbf{k} de l’espace réciproque et à calculer directement la susceptibilité grâce à son expression en termes des fonctions de Green. Cette méthode a déjà été employée dans le passé à partir de la formule de Fukuyama pour le graphite [127], le graphène bicouche [126], les électrons semi-Dirac [9], les électrons de Dirac. [38]

Dans l’exemple du graphène, on choisit les points de Dirac où les bandes se touchent comme point de développement. Près d’un point K de position $\mathbf{k}_D = (0, 4\pi/(3\sqrt{3}a))$, écrivons $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_D$, le hamiltonien se linéarise en

$$h \approx \hbar v_F (q_x \sigma_x + k_y \sigma_y) = \hbar v_F \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (7.33)$$

avec $v_F = 3ta/(2\hbar)$ la vitesse de Fermi dans le graphène. La fonction de Green associée est alors

$$g(E) = (E - h)^{-1} \approx \frac{E + v_F q_x \sigma_x + v_F q_y \sigma_y}{E^2 - v_F^2 q^2}. \quad (7.34)$$

Le hamiltonien étant linéaire, il est plus facile de choisir (4.2) comme point de départ de calcul de

CHAPITRE 7. MAGNÉTISME ORBITAL DES MODÈLES À DEUX BANDES

χ_{orb} , puisque le second membre est directement nul. Pour le premier, on a

$$\text{tr} \{h^x g h^y g h^x g h^y g\} = \frac{16v_{\text{F}}^4 q_x^2 q_y^2}{(E - v_{\text{F}}^2 q^2)^4} - \frac{2}{(E^2 - v_{\text{F}}^2 q^2)^2}. \quad (7.35)$$

Il s'agit ensuite de calculer l'intégrale sur q_x et q_y , ce qui peut se faire en utilisant les coordonnées polaires q et θ ($q = qe^{i\theta}$) :

$$\iint_{\text{BZ}} \text{tr} \{h^x g h^y g h^x g h^y g\} \frac{d^2 q}{4\pi^2} = \int_0^\infty q \left[\frac{16v_{\text{F}}^4 q^2 q^2}{(E - v_{\text{F}}^2 q^2)^4} \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta \sin^2 \theta d\theta - \frac{2}{(E^2 - v_{\text{F}}^2 q^2)^2} 2\pi \right] dq. \quad (7.36)$$

Avec une décomposition de $1/(E^2 - v_{\text{F}}^2 q^2)^n$ ($n = 2$ ou 4) en fractions rationnelles élémentaires, et un changement de variable $\tilde{q} = v_{\text{F}} q$, les deux intégrales peuvent être calculées, ce qui donne :

$$\iint_{\text{BZ}} \text{tr} \{h^x g h^y g h^x g h^y g\} \frac{d^2 q}{4\pi^2} = \frac{v_{\text{F}}^2}{3\pi E^2}. \quad (7.37)$$

Finalement, en utilisant (A.1),

$$\chi_{\text{orb}} = \frac{\mu_0 e^2 v_{\text{F}}^2}{6\pi \hbar^2} n'_{\text{F}}(0) = \frac{3\chi_0}{4\pi} t n'_{\text{F}}(0). \quad (7.38)$$

On retrouve donc le résultat de McClure (7.30), et celui de Fukuyama [38] (puisque le terme correctif de χ_{GSS} ne contribue pas). Cette méthode ne permet pas non plus de retrouver le plateau paramagnétique, et ce même en allant à l'ordre suivant dans le développement limité du hamiltonien près de K qui suffit pourtant pour calculer le hessien exact. Cela montre que la contribution du plateau n'est pas une contribution de la surface de Fermi, mais une propriété qui dépend du remplissage des bandes, et ne se retrouve pas avec une approximation locale du hamiltonien [59].

Niveaux de Landau et papillon de Hofstadter

Ce caractère fortement diamagnétique du graphène est surprenant, mais peut-être compris énergétiquement à partir d'une analyse des niveaux de Landau de la relation de dispersion linéarisée près des points de Dirac, comme nous l'avons présenté dans la Réf. [122]. Essentiellement, connaissant la relation de dispersion, la densité d'états du système sans champ, et les niveaux de Landau, on découpe le spectre en « tranches » avec autant d'états que la dégénérescence des niveaux de Landau, et on associe cette tranche d'états sans champ à un niveau de Landau. En répétant cette opération sur tout le spectre, on obtient le résultat exact de la différence d'énergie avant et sans champ magnétique (cf. FIG. 7.8). Alors que tous les autres niveaux donnent une variation d'énergie négative, le premier niveau de Landau augmente l'énergie du système de sorte à dominer la correction des autres niveaux : la réponse est donc gouvernée par le premier niveau. [122]

Le papillon de Hofstadter du graphène généralise l'approche précédente des niveaux de Landau limitée à la relation de dispersion linéarisée près des points de Dirac. Ayant été étudié par Rammal [121], celui-ci est appelé spectre de Hofstadter-Rammal ; il est présenté sur la FIG. 7.9. On observe des niveaux de Landau linéaire en bas et en haut du spectre. On observe également des niveaux en racine carrée près de l'énergie nulle, qui correspondent aux niveaux d'un spectre linéaire à champ nul, et en particulier le niveau à énergie nulle, qui est responsable de la forte réponse diamagnétique comme nous venons de le voir.

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

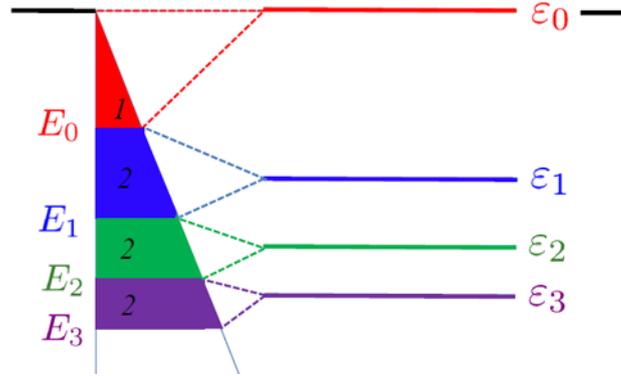


FIGURE 7.8 – Répartition des états du spectre à champ nul dans les niveaux de Landau du graphène. Le niveau à énergie nulle fait augmenter l'énergie du système, tandis que les autres niveaux apportent une petite contribution positive.

Variation en champ magnétique de la réponse orbitale

Nous avons donc vu que le graphène possède deux contributions qui se superposent à potentiel chimique nul, à savoir le pic de McClure et le plateau paramagnétique. Le pic de divergence est lié au hamiltonien effectif à basse énergie, alors que la contribution du plateau est un effet de réseau. Cette divergence varie de plus avec la température, ce qui est inhabituel pour une réponse magnétique issue d'une théorie linéaire (dans le CHAP. 4, nous avons rappelé que le diamagnétisme est très peu sensible à la température). La divergence anormale et la dépendance en T de la susceptibilité suggère d'étudier son comportement à B et T finis.

Cas des fermions de Dirac L'expression analytique à température nulle de l'énergie de fermions de Dirac a été dérivée en 2002 dans la Réf. [103] dans le contexte des cuprates, et les expressions des différentes grandeurs thermodynamiques (en particulier l'aimantation) à température nulle a été obtenue par Sharapov et al. [132] Montambaux, dans des notes non publiées, a montré que le grand potentiel de fermions de Dirac à dopage nul pouvait être calculé pour toute valeur du rapport $k_B T / \epsilon_B$ à l'aide d'une sommation de Poisson :⁶

$$\Xi(\mu = 0, T, B) = \frac{\epsilon_B^3}{4\pi^2 \hbar^2 v_F^2} \sum_{p \geq 1} \frac{1}{p^{3/2}} \int_0^\infty \frac{\beta/4}{\cosh^2(\beta E/2)} \left(1 - 2S \left(2\sqrt{p} \frac{E}{\epsilon_B} \right) \right) dE \quad (7.39)$$

où $\epsilon_B = v_F \sqrt{2\hbar e B}$ et où S est l'intégrale de Fresnel définie par

$$S(x) = \int_0^x \left(\frac{\pi t^2}{2} \right) dt. \quad (7.40)$$

Essentiellement, on peut retenir de l'expression (7.39) que le grand potentiel s'écrit

$$\Xi(\mu = 0, T, B) \propto \frac{\epsilon_B^4}{k_B T} G \left(\frac{\epsilon_B}{k_B T} \right) \quad (7.41)$$

6. Ce calcul, basé sur la connaissance des niveaux de Landau, peut-être généralisé au cas de spectres linéaires avec des phases de Berry différentes, ce qui a été appliqué pour le $\alpha - \tau_3$ dans la Réf. [122] afin d'interpréter le changement de signe de la susceptibilité.

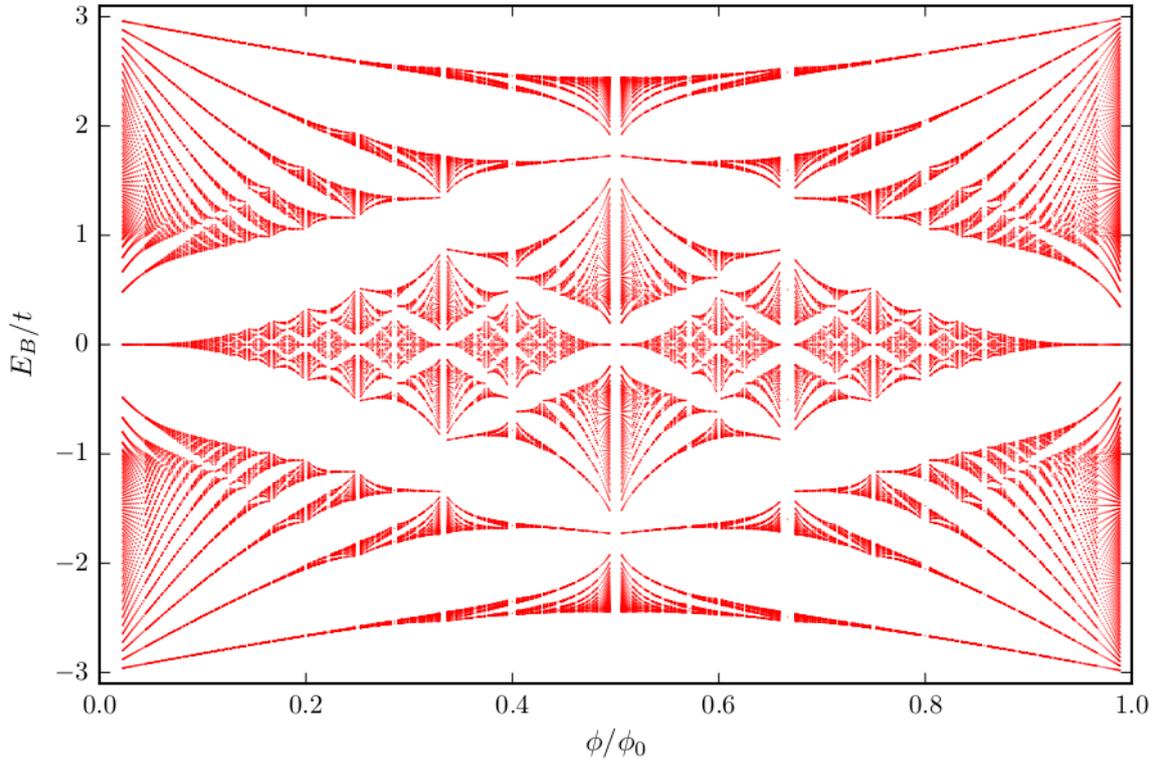


FIGURE 7.9 – Papillon de Hofstadter-Rammal du graphène. On trace tous les énergies pour $\phi/\phi_0 = p/q$ avec $1 \leq q \leq 70$ et $1 \leq p \leq q$. Les niveaux d'énergie sont en racine du champ près de $E = 0$, et linéaires sur les bords de bandes $\pm 3t$.

où G est une fonction continue telle que $G(0) = 1$ et $G(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{x}$.

Du grand potentiel, on déduit l'aimantation et la susceptibilité en fonction du champ. Qualitativement, on obtient donc :

- (i) Si $\epsilon_B \ll k_B T$, alors $\Xi(\mu = 0, T, B) \propto \frac{\epsilon_B^4}{k_B T}$, on obtient une aimantation $\propto B/T$, et une susceptibilité $\propto 1/T$. C'est le régime dans lequel nous avons calculé la susceptibilité précédemment.
- (ii) Si maintenant $\epsilon_B \gg k_B T$, c'est-à-dire qu'on se place dans le régime des oscillations quantiques,⁷ le grand potentiel est $\propto B^{3/2}$, donc l'aimantation $\propto \sqrt{B}$; résultat qui implique une divergence de la susceptibilité à champ nul!

À la lumière de ces résultats, on peut revenir sur l'analyse des résultats de la Réf. [81] présentés sur la FIG. 4.3. À température nulle, cette expression s'accorde qualitativement avec les mesures de la Réf. [81]. L'aimantation $M(B)$ étant en racine carrée du champ, la susceptibilité est en $1/\sqrt{B}$. Dans le régime où $k_B T$ est l'énergie dominante, ils retrouvent une dépendance qui pourrait être en $1/T$.

⁷ À potentiel chimique nul, il n'y a en réalité pas d'oscillations quantiques, puisqu'aucun niveau de Landau ne traverse l'énergie $E = 0$. On retrouve des oscillations dès que $\mu \neq 0$.

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

L'analyse précédente est exacte dans le cas de fermions de Dirac. Pour le modèle de liaisons fortes du graphène, la structure de bandes va avoir un effet supplémentaire, même à potentiel chimique exactement nul : c'est le plateau paramagnétique. À la susceptibilité en $1/T$, il faut ajouter une contribution constante $\chi_{\text{pl}} = 0,089\chi_0$. Pour cette raison, on montre que l'aimantation du graphène dans le régime des forts champs ($\epsilon_B \gg k_B T$) suit une loi mixte de la forme :

$$M(T = 0) = -C\sqrt{B} + \chi_{\text{pl}}B \quad (7.42)$$

où C est un coefficient positif indépendant du champ magnétique. Dans la Réf. [122], on étudie l'évolution des coefficients devant les deux lois de puissances pour le modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$ à trois bandes, que l'on reverra au CHAP. 8.

Extension au nitrure de bore

Le cas $\Delta \neq 0$ ⁸ est en fait plus simple à traiter que le cas du graphène, puisque la brisure de la symétrie d'inversion lève la dégénérescence aux points de Dirac [130], et permet d'avoir deux bandes isolées (cf. FIG. 7.5) sur lesquelles les quantités géométriques sont bien définies.

On note que si la phase de Berry autour d'un point K évolue avec Δ (correspondant à β dans le paramétrage choisi), le nombre d'enroulement est quant à lui fixé. En ce sens, le premier caractérise les couplages entre bandes alors que le second est une propriété ne s'intéressant qu'à la topologie de la fonction d'onde.

La susceptibilité orbitale du nitrure de bore sur la FIG. 7.10 montre un comportement intéressant : la susceptibilité multi-bandes de Landau-Peierls étant la somme des contributions de chacune des bandes et étant uniquement déterminée par n'_F , elle prévoit une contribution nulle dans la bande interdite séparant les deux bandes. Cependant, χ_{orb} présente une contribution diamagnétique résiduelle dans la bande interdite, non-négligeable même lorsque le gap est comparable à t (ici $2\Delta = 0,6t$). Ceci est la manifestation des effets interbandes, présents bien que les bandes soient très éloignées en énergie. Cet effet est similaire à celui trouvé dans le bismuth [44], mais d'un ordre de grandeur plus grand.

Lorsque μ franchit $\pm\Delta$, on note une discontinuité dans la susceptibilité qui la fait changer de signe. Le nitrure de bore est un modèle avec un bord de bande parabolique qui donne cependant une susceptibilité paramagnétique, en désaccord avec la prédiction de Landau : cette contribution très similaire au plateau paramagnétique du graphène, ne peut se comprendre seulement avec le spectre du modèle (comme dans le cas du modèle sur réseau carré), et consiste en un effet interbandes, qui vient contre-balancer le diamagnétisme de Landau sous-jacent (visible dans la susceptibilité de Peierls). Ce signe de la susceptibilité peut être expliqué à partir des niveaux de Landau de la bande de conduction du modèle, qui s'écrivent $E_n - \Delta \approx \hbar \frac{eB}{m^*} n$ avec $n \in \mathbb{N}$ et $m^* = \frac{4\Delta\hbar^2}{9t^2a^2}$, au lieu d'une relation typique $\hbar \frac{eB}{m^*} (n + \frac{1}{2})$. La translation $n + \frac{1}{2} \rightarrow n$ dans les indices des niveaux de Landau a été attribué à une phase de Berry topologique de π (ou un nombre d'enroulement ± 1) [36].

Dans la limite où Δ tend vers 0, on retrouve le cas du graphène. Étonnement, la susceptibilité de Landau-Peierls vérifie la règle de somme (3.37) pour tout $\Delta > 0$. Le passage à la limite $\Delta \rightarrow 0$ est singulier parce que χ_{LP} doit être nulle à $\mu = 0$, ce qui élimine la divergence des deux pics diamagnétiques visibles sur la FIG. 7.10. La susceptibilité de Landau-Peierls vérifie la règle de somme pour tout système isolant.

8. Pour le nitrure de bore, la bande interdite est très grande, typiquement $\Delta \sim 3\text{eV}$, soit du même ordre de grandeur que t . Ici, on choisit $2\Delta = 0.6t$.

Comparaison au modèle basse énergie

Si on compare au cas du graphène, la présence du gap va élargir le pic diamagnétique $\delta(\mu)$ de la susceptibilité à $T = 0$. Ceci peut se comprendre qualitativement avec un développement à basse énergie où l'on trouve un comportement $\chi_{\text{orb}} \propto 1/\Delta$. Tous calculs faits,

$$\chi_{\text{orb}} = \frac{\mu_0 e^2}{6\pi\hbar^2} t \frac{n_{\text{F}}(\Delta) - n_{\text{F}}(-\Delta)}{2\Delta} \xrightarrow{\Delta \rightarrow 0} \frac{\mu_0 e^2}{6\pi\hbar^2} t n'_{\text{F}}(0). \quad (7.43)$$

Vue la loi à basse énergie, on remarque que $\int_{-\Delta}^{+\Delta} \chi_{\text{orb}} \approx \Delta \frac{\text{cste}}{\Delta} \approx \text{cste}$. le poids de χ_{orb} dans la bande interdite est donc conservé, ce qui correspond dans le cas du graphène à la divergence en $-\delta(\mu)$. La loi (7.43) peut être vue comme une formule de McClure généralisée [73, 101], et elle redonne le cas du graphène lorsque $\Delta \rightarrow 0$.

Plus précisément, il est possible de calculer chacun des termes de la susceptibilité séparément dans le modèle basse énergie. Les résultats sont résumés dans le tableau de la FIG. 7.10, où $\beta = \frac{\sqrt{3}}{8\pi} \frac{1}{\Delta}$ est une constante de normalisation. Cette décomposition apporte une information supplémentaire : la nullité de la susceptibilité en dehors du gap dans le modèle linéarisé provient d'une annulation fortuite entre les différentes contributions, chacune suivant une loi de décroissance en $1/\mu^3$. Les susceptibilités à basse énergie sont tracées dans la partie basse de la FIG. 7.10. On remarque que χ_{Ω} du modèle linéarisé est très proche du modèle sur réseau. Les valeurs des susceptibilités totales dans la bande interdite ne coïncident pas cependant, à cause d'une mauvaise approximation de χ_g . Au moins pour ce modèle, χ_{Ω} ne nécessite donc pour être estimée que le voisinage des points de Dirac, contrairement à χ_g qui nécessite une intégrale sur la zone de Brillouin. Cela est confirmé par ce qu'on observait sur le modèle à deux bandes sur réseau carré FIG. 7.3.

Effet de la température et du désordre

Dans les tracés des susceptibilités, nous n'avons pas discuté de l'effet de la température. Comme $t \sim 1$ eV, à température ambiante l'énergie thermique est négligeable $k_{\text{B}}T \sim 25$ meV $\ll t$. Celle-ci ne se manifeste sur les graphes des susceptibilités qu'aux valeurs de μ où la susceptibilité varie très vite, typiquement près des divergences : soit les singularités de Van Hove, soit le pic diamagnétique du graphène à $\mu = 0$. La température a pour effet de « lisser » ces divergences.

L'effet du désordre est similaire à celui de la température, et va lisser la susceptibilité, en particulier près de ses divergences. Expérimentalement, on s'attend à ce que ce soit ce phénomène qui soit largement dominant, devant l'effet de température ou même l'élargissement naturel dû à la bande interdite. La formule de Fukuyama [41] a été utilisée dans le cas du graphène [42, 109], et il a été confirmé que l'effet du désordre est d'élargir le pic diamagnétique. [101]

En résumé, l'effet du désordre, de la température et d'une bande interdite sur le diamagnétisme du graphène sont assez similaires : ils viennent adoucir la divergence à potentiel chimique nul.

Comparaison avec la susceptibilité de Fukuyama

Comme nous l'avons fait dans le cas du réseau triangulaire, comparons le résultat obtenu par la formule de Fukuyama et celui obtenu précédemment. La susceptibilité de Fukuyama χ_{Fuku} , la correction de Gómez-Santos et Stauber $\chi_{\text{GSS}} - \chi_{\text{Fuku}}$ et χ_{RPFM} sont tracées sur la FIG. 7.11. On vérifie bien que $\chi_{\text{RPFM}} = \chi_{\text{Fuku}} + (\chi_{\text{GSS}} - \chi_{\text{Fuku}})$ comme nous l'avons montré de façon générale. Contrairement au cas du modèle à une bande sur réseau triangulaire, le résultat de Fukuyama est étonnement proche de la susceptibilité totale; ceci a de plus été vérifié sur les autres modèles

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

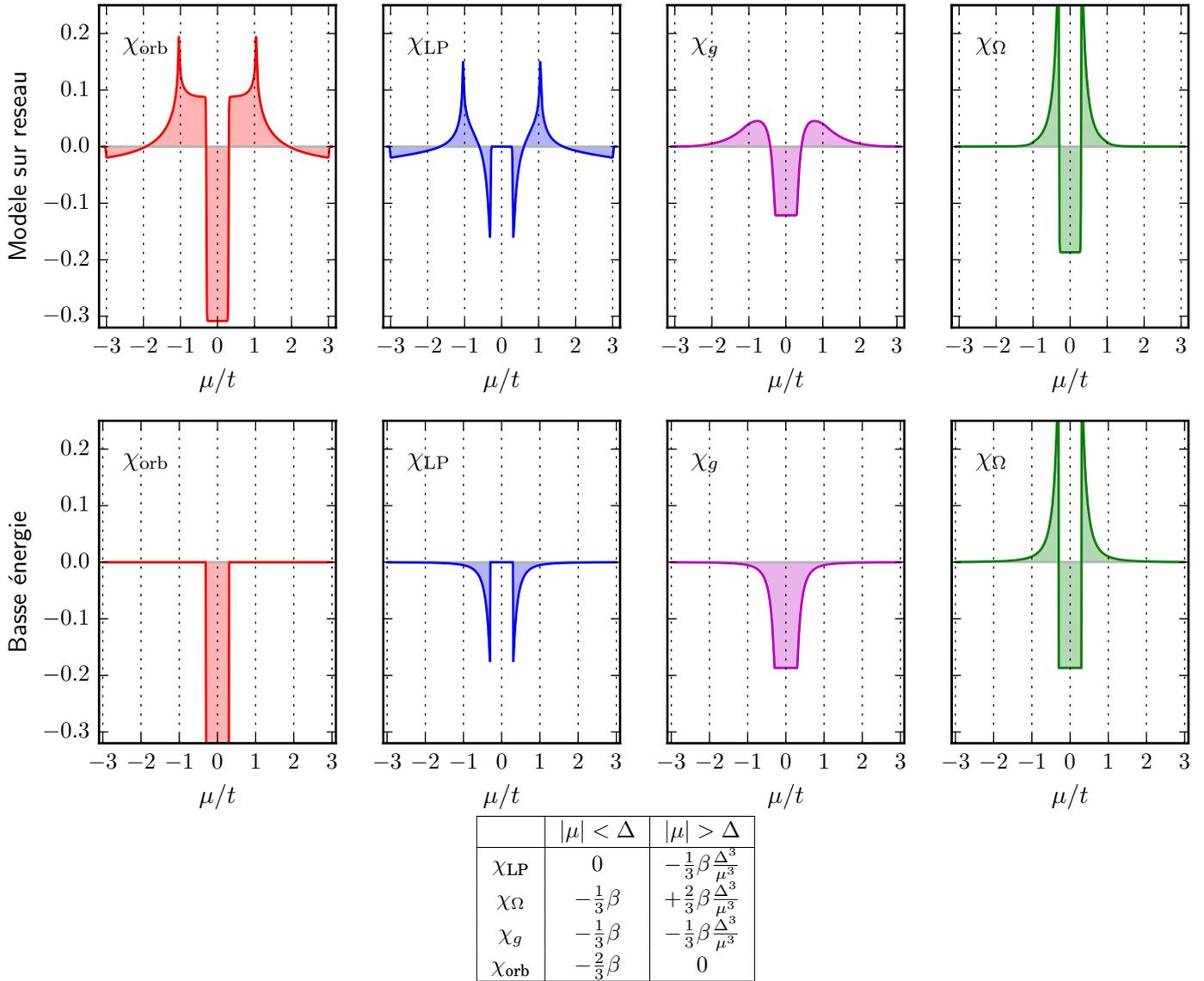


FIGURE 7.10 – En haut : susceptibilité orbitale du nitrure de bore. On a choisit une bande interdite $2\Delta = 0.6t$ plus petite qu'en réalité afin de pouvoir observer le comportement entre les singularités de Van Hove et la divergence diamagnétique ($k_B T = 0.005t$). Au milieu : les différentes contributions pour le modèle linéarisé près des points de Dirac. En bas : tableau regroupant les différentes contributions dans l'approximation basse énergie. $\beta = \frac{\sqrt{3}}{8\pi} \frac{1}{\Delta}$ est une constante de normalisation.

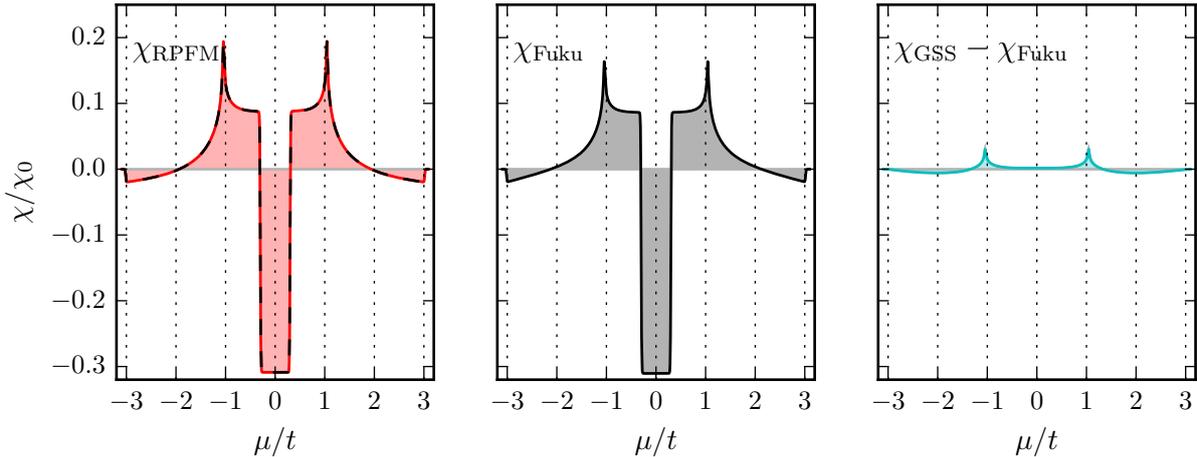


FIGURE 7.11 – Comparaison des susceptibilités χ_{RPFM} , χ_{Fuku} et $\chi_{\text{GSS}} - \chi_{\text{Fuku}}$ sur l'exemple du nitrure de bore ($k_{\text{B}}T = 0.005t$). La somme des deux dernières contributions est affichée sur χ_{RPFM} en pointillés ; les deux courbes sont superposées (y compris dans la bande interdite). On note que la différence entre χ_{RPFM} et χ_{Fuku} est faible.

deux bandes que nous allons détailler. Cette observation vient renforcer (sans la démontrer) notre spéculation sur l'origine de la différence entre les deux approches, à savoir l'opération de projection sur un nombre fini de bandes.

Prédictions théoriques sur le magnétisme du graphène

De nombreux travaux théoriques ont été récemment réalisés sur le magnétisme du graphène, au-delà de la réponse magnétique de systèmes infinis. Le groupe de recherche autour de Koshino et Ando est en particulier très actif dans le domaine : ils ont étudié la force répulsive du graphène (due au diamagnétisme) sur un objet magnétique et l'écrantage du champ magnétique [75], le magnétisme d'échantillons finis de graphène [111, 112] en calculant la susceptibilité orbitale et étudiant l'influence en fonction de la taille et des bords choisis. Ils introduisirent également [72, 73] la notion de paramagnétisme de vallée (analogue au paramagnétisme de spin, mais le degré de liberté est ici la position dans l'espace réciproque) que l'on retrouve dans le nitrure de bore.

7.3.3 Fusion des points de Dirac et au-delà

Avec les exemples précédents, on a vu qu'il était possible d'ouvrir un gap dans la structure de bandes à condition de briser la symétrie d'inversion. Est-ce cependant nécessaire ? Non, mais tant que la symétrie est conservée, la présence des points de Dirac et leurs propriétés topologiques empêchent toute déformation de lever la dégénérescence entre les bandes. Il faut donc se « débarasser » tout d'abord de ces points de Dirac avant de pouvoir ouvrir une bande interdite.

Tout en conservant la structure en nid d'abeille, supposons que l'on étire le graphène selon une direction du réseau. La déformation va engendrer une modification des amplitudes de sauts, phénoménologiquement on aura deux amplitudes à une valeur t et une autre à t' . La matrice ha-

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

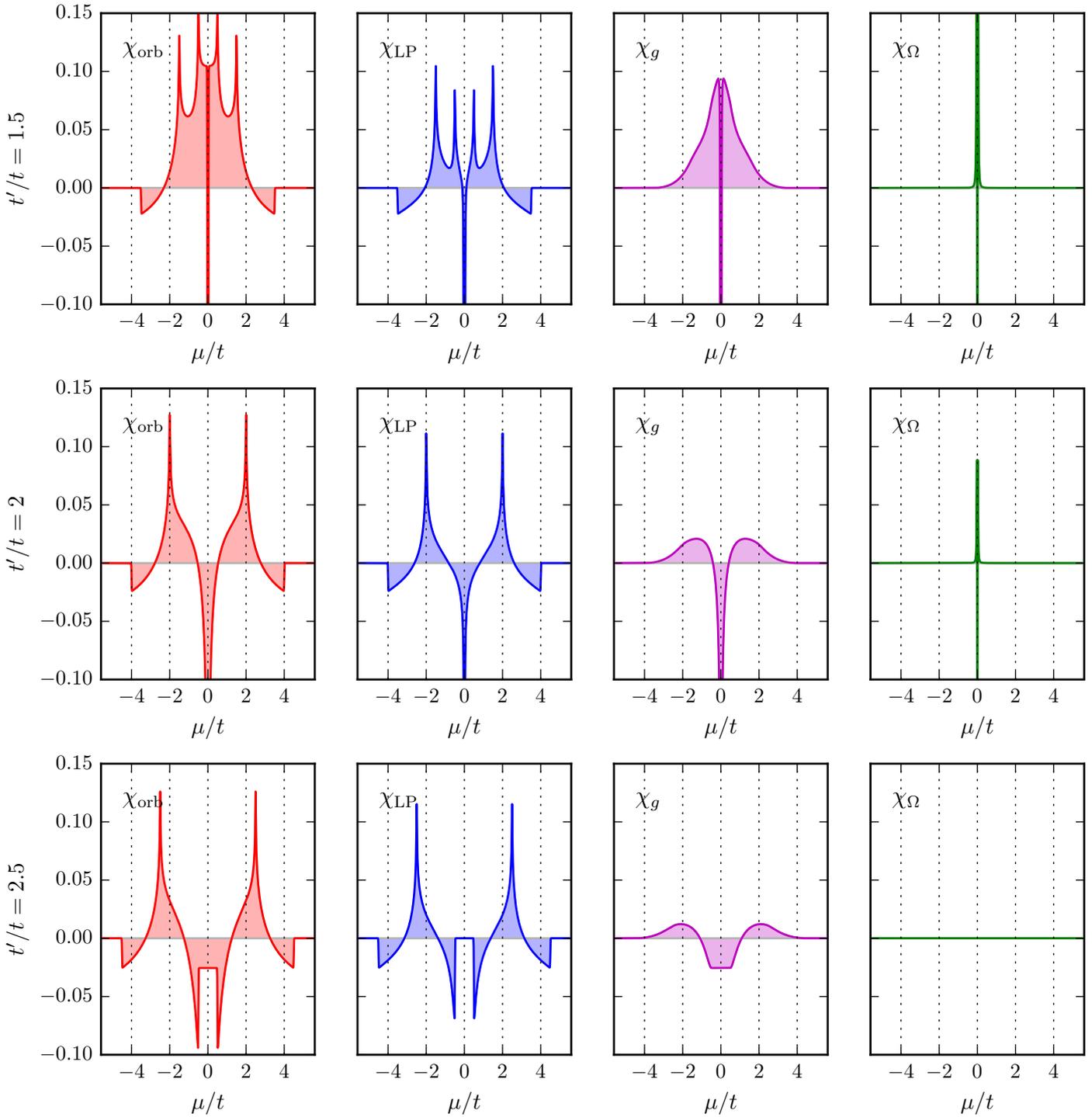


FIGURE 7.12 – Susceptibilité orbitale d'électrons du graphène étiré ($k_B T = 0.005t$). En haut, $t'/t = 1.5$, les points de Dirac se sont séparés en deux. Au milieu, $t'/t = 2$, les points de Dirac ont fusionnés. En bas, $t'/t = 2.5$, les points de Dirac ont disparu, une bande interdite est apparue dans la structure de bandes.

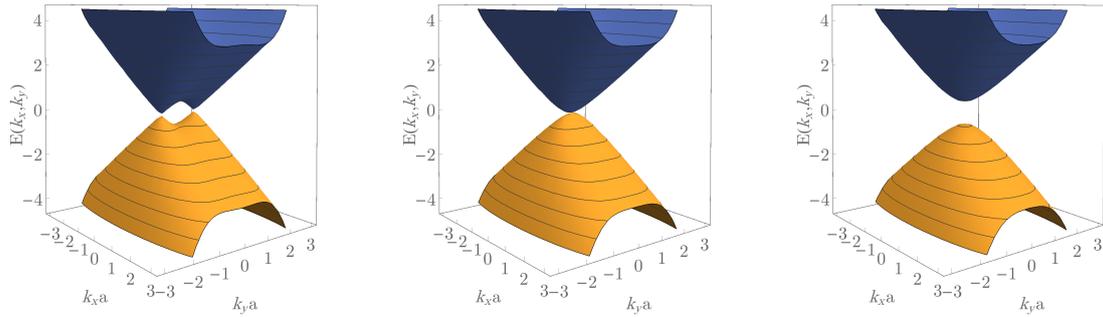


FIGURE 7.13 – De gauche à droite, spectres d'électrons pour le graphène étiré avec $t'/t = 1.5, 2$ et 2.5 . Pour $t'/t < 2$, les points de Dirac se rapprochent, puis fusionnent à $t'/t = 2$; la relation de dispersion à $b = 2$ est linéaire selon k_x et quadratique selon k_y . À $t'/t = 2.5 > 2$, une bande interdite s'est ouverte dans la structure

miltonienne correspondante s'écrit [28]

$$h = t \begin{pmatrix} \frac{t'}{t} \cos(k_y a) + 2 \cos(k_y a/2) \cos(\sqrt{3}k_x a/2) \\ -\frac{t'}{t} \sin(k_y a) + 2 \sin(k_y a/2) \cos(\sqrt{3}k_x a/2) \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \sigma. \quad (7.44)$$

Cas $t' < 2t$: mouvement des points de Dirac

Dans la PZB, augmenter le paramètre $t'/t < 2$ aura pour effet de déplacer les points de Dirac, qui vont quitter les points K et K' pour se rapprocher du point M . La structure de bandes reste qualitativement la même, les points de Dirac étant déplacés selon les axes KMK' de la zone de Brillouin. La susceptibilité magnétique d'un cas $t' < 2t$ est tracée sur la FIG. 7.12 (en haut). On remarque un dédoublement des singularités de Van Hove. En effet, les points de Dirac se rapprochant, le point col les reliant change d'énergie.

Cas $t' = 2t$: électrons semi-Dirac

À la valeur critique $t' = 2t$, se produit une transition topologique de Lifshitz où fusionnent les points de Dirac [96, 97] aux points M de la PZB, et le spectre à basse énergie devient anisotrope : il reste linéaire dans une direction, mais devient quadratique sur l'axe perpendiculaire (cf. FIG. 7.13); les électrons dans ce modèle sont qualifiés de *semi-Dirac* puisqu'ils constituent un intermédiaire exotique entre électrons de Schrödinger et de Dirac. [96, 97, 115, 156]

La susceptibilité orbitale de ce modèle de fusion des points de Dirac et ses différentes contributions sont représentées sur la FIG. 7.12. On remarque en particulier que la susceptibilité de Landau-Peierls prédit la divergence à $\mu = 0$ de la susceptibilité lorsque $T \rightarrow 0$. Cependant, la loi d'échelle n'est pas la même que celle de $\chi_{\text{orb}} : \chi_{\text{LP}}(\mu = 0) \propto 1/T$, mais une analyse à basse énergie similaire à celle du graphène montre que

$$\chi_{\text{low}}(T) \approx -\frac{\chi_0}{\sqrt{T}} \frac{\Gamma(3/4)^2}{\pi^{5/2}} \int_0^\infty \text{sech}^2 x^2 dx \quad (7.45)$$

avec $\Gamma(x)$ la fonction d'Euler, et $\int_0^\infty \text{sech}^2 x^2 dx \approx 0.952781$. Une étude antérieure avait été menée sur

7.3. APPLICATIONS À DES MODÈLES AVEC SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

ce modèle [9], mais à partir de $\chi_{\text{Fuku}}^{\text{1b}}$. La loi d'échelle est la même, mais avec un pré-facteur différent. De façon fortuite (car elle néglige une partie des effets interbandes), cette approche donne la même loi d'échelle.

Dans cet exemple, l'effet du couplage interbandes est différent, puisqu'il ne crée pas une divergence diamagnétique comme dans le cas du graphène, mais au contraire « adoucit » une divergence déjà présente dans la formule de Peierls.

Le nombre d'enroulement autour du point M est la somme de ceux des points de Dirac qui s'annulent. On a donc une phase où tout nombre d'enroulement est nul. La protection des points de Dirac est levée, continuer à changer t' va séparer les bandes. Pour une vision plus générale de la fusion de points de Dirac selon leur nombre d'enroulement, on pourra consulter la Réf. [46].

Cas $t' > 2t$: ouverture d'un gap

Lorsqu'on continue d'augmenter t'/t au-delà de 2, les points de Dirac ont disparu, et une bande interdite apparaît au-dessus des points M . [96, 97] Cette situation est différente du nitrure de bore où les points de Dirac ont été scindés par un gap : ici ils ont fusionné puis ouvert une bande interdite. En fusionnant les points de Dirac, les nombres d'enroulement autour des ex-points sont nuls, la courbure de Berry est alors identiquement nulle. La susceptibilité orbitale de ce modèle est présentée sur la FIG. 7.12.

Comme le nitrure de bore, la susceptibilité est diamagnétique dans la bande interdite, cependant son comportement est différent puisqu'elle reste diamagnétique lorsque μ passe à travers les extrema des bandes. On remarque que contrairement au nitrure de bore, la susceptibilité est qualitativement bien décrite par χ_{LP} , ce qui indique que les effets interbandes ont été drastiquement réduit après l'annihilation des points de Dirac.

Une approche basse énergie montre que la susceptibilité dans le gap varie avec une loi d'échelle différente :

$$\chi_{\text{low}}(\mu \in \text{gap}, T = 0) \propto -\frac{1}{\sqrt{\Delta_*}} \quad (7.46)$$

où le gap dans la structure de bandes est donné par $2\Delta_* = 2(t' - 2t)$.

7.3.4 Graphène bicouche simulé

Le graphène bicouche

Après l'essor du graphène, les systèmes multicouches ont également attiré l'attention pour des propriétés topologiques différentes. Le graphène bicouche (généralement avec un empilement $A-B$ où les atomes A sont au-dessus des atomes B , appelé AB *stacking*) présente un intérêt particulier : dans sa structure à quatre bandes, les deux bandes centrales possèdent deux points de contact quadratiques en K et K' là où la monocouche avait un spectre linéaire. La surprise provient d'un nombre d'enroulement de 2 (resp. -2) autour de K (resp. K'). En perturbant le hamiltonien du bicouche, il est même possible de décomposer le contact +2 en trois points de Dirac +1 et un point de Dirac -1 ; et de même en changeant les signes en K' . L'étude des fusions des points de Dirac est détaillée dans les Réfs. [46, 76], et on trouvera une revue sur les propriétés du graphène bicouche par McCann et Koshino [88].

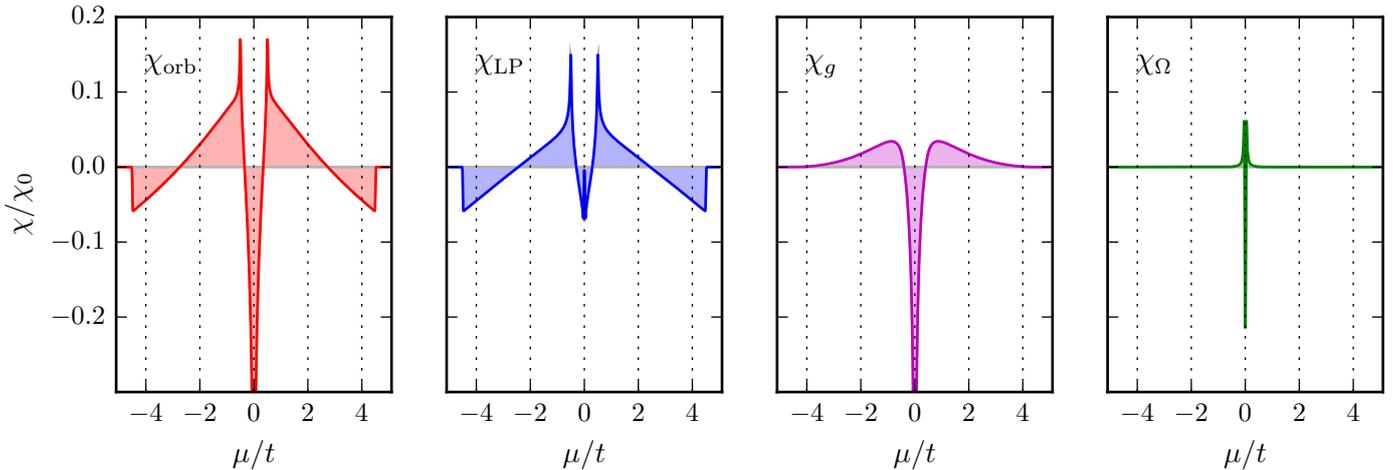


FIGURE 7.14 – Susceptibilité orbitale d’un modèle sur réseau nid d’abeille simulant le graphène bicouche ($k_B T = 0.005t$). La susceptibilité de Landau-Peierls est similaire à celle de deux réseaux triangulaires.

Modèle à deux bandes

Bien que le graphène bicouche soit un modèle à quatre atomes par maille, Montambaux [94] a montré qu’il existe un modèle à deux bandes qui reproduit le hamiltonien du graphène bicouche à basse énergie, c’est-à-dire près des points K et K' .

On considère un modèle-jouet sur réseau nid d’abeille avec (comme le graphène) des sauts entre plus proches voisins d’amplitude t , et des sauts vers les troisièmes plus proches voisins d’amplitude $t_3 = t/2$.⁹ Parce que les liens ne couplent que des atomes appartenant à des sous-réseaux différents, le modèle a toujours la symétrie chirale, donc le spectre est symétrique particule-trou (contrairement au graphène avec seconds voisins par exemple).

En tant que modèle de liaisons fortes à deux bandes, il est possible d’utiliser (7.12) pour calculer la susceptibilité orbitale. Le hamiltonien de ce modèle s’écrit

$$h = t \begin{pmatrix} \cos(2k_y) + 2 \cos(k_y) \cos(\sqrt{3}k_x) \\ \sin(2k_y) - 2 \sin(k_y) \cos(\sqrt{3}k_x) \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (7.47)$$

Susceptibilité orbitale

La FIG. 7.14 montre la susceptibilité du modèle. On s’attend à ce que le comportement à dopage nul ($\mu = 0$) soit similaire à celui du bicouche¹⁰ : la susceptibilité diverge négativement à l’énergie du contact des bandes, mais cette fois avec une loi logarithmique (cf. FIG. 7.14) qui diffère du graphène

9. La Réf. [139] a étudié de façon plus générale l’influence d’interaction à plus longues distances sur un réseau nid d’abeille et mis en évidence des situations où la dégénérescence a lieu sur une ligne entourant le point K lui-même dégénéré.

10. Bien sûr, comme nous l’avons déjà vu, χ_{orb} ne dépend pas seulement du niveau de Fermi, mais également du remplissage des bandes. Celles-ci apporteront éventuellement une contribution constante à la susceptibilité ; pour cette raison, on s’intéresse uniquement à la loi d’échelle en $\mu = 0$.

7.4. CONCLUSIONS SUR LES MODÈLES À SYMÉTRIE PARTICULE-TROU

monocouche. La contribution de Peierls donne une valeur négative finie due au comportement parabolique des bandes à énergie nulle.

Une approche basse énergie permet de retrouver ce comportement :

$$\chi_{\text{low}} = -\frac{\chi_0}{16\pi} \int_{-E_c}^{E_c} n'_F(E) \left(\ln \frac{|E|}{E_c} + \frac{1}{3} \right) dE \quad (7.48)$$

qui est cohérent avec des calculs précédents [74, 126], où E_c est une énergie de coupure ultraviolette (de l'ordre de t dans notre modèle sur réseau, et de t_\perp l'amplitude de saut inter-couches dans le vrai bicouche, qui donne la limite de validité de l'approximation à deux bandes du modèle total à quatre bandes). En particulier, $\chi_{\text{low}}(\mu = 0, T) \propto \ln T$.

7.4 Conclusions sur les modèles à symétrie particule-trou

Faisons ici un point sur les informations apprises lors de l'étude des modèles deux bandes symétriques particule-trou. On s'intéressera à des systèmes brisant cette symétrie dans la partie suivante.

Systèmes métalliques

Tous les systèmes métalliques (modèles sans gap) étudiés ici ont une susceptibilité divergente lorsque le potentiel chimique est à l'énergie des points de contact; de plus cette divergence est diamagnétique dans les trois exemples (graphène, électrons semi-Dirac et pseudo-bicouche). Ceci n'est cependant pas à généraliser trop rapidement : dans la Réf. [122], nous avons mis en avant un modèle-jouet à trois bandes où la valeur de la susceptibilité à énergie nulle pouvait changer continûment de signe; nous détaillerons ce modèle riche en surprises dans le chapitre suivant concernant les modèles à trois bandes. De plus, dans la suite de ce chapitre, nous verrons un système à deux bandes (le modèle de Mielke) qui a une divergence paramagnétique au point de contact des deux bandes.

Systèmes isolants

L'étude de modèles isolants (modèle sur réseau carré, nitrure de bore et graphène étiré au-delà de la fusion des points de Dirac) a montré une variété de comportements, dont nous retenons des résultats surprenants :

- Un isolant de bande, avec un potentiel chimique à l'intérieur de la bande interdite peut avoir une réponse magnétique non-nulle (voir aussi la Réf. [44]). Cette conclusion va à l'encontre de la pensée commune que toute bande remplie est inerte. Cela peut se révéler faux pour le transport dans des matériaux topologiques (σ_{xy} est non-nulle si le nombre de Chern ne l'est pas non plus), mais également pour des quantités thermodynamiques telles que la susceptibilité orbitale. Pis, tous les modèles étudiés ici ont une réponse magnétique non-nulle dans leur gap, suggérant que ce caractère est très général.
- Tous les systèmes étudiés ici présentent du diamagnétisme dans leur bande interdite. Comme pour les métaux, il serait dangereux de généraliser ce résultat trop rapidement : nous verrons dans la section suivante des modèles à deux bandes exhibant du paramagnétisme de bande interdite. Ce magnétisme peut être vu comme une généralisation du magnétisme de Van Vleck

CHAPITRE 7. MAGNÉTISME ORBITAL DES MODÈLES À DEUX BANDES

pour un atome isolé : lorsque la moitié des orbitales est occupée, l'atome exhibe une réponse magnétique due aux transitions inter-orbitales fictives ; ici il faut remplacer inter-orbitales par interbandes.

- Alors qu'il est courant de penser que la courbure de Berry est l'unique quantité géométrique qui crée des effets géométriques, nous avons vu grâce à un modèle à deux bandes sur réseau carré que le tenseur métrique peut être également à l'origine d'un fort couplage interbandes, alors même que la courbure de Berry est nulle. Celle-ci peut d'ailleurs fréquemment être nulle pour des raisons de symétries, alors que le tenseur métrique est en général toujours présent.
- Un autre résultat notable est le comportement de la susceptibilité en bord de bande : sur les bords de la bande interdite, la susceptibilité n'est pas forcée de converger vers la susceptibilité de Landau attendue par la contribution de Landau-Peierls, même si le bord de bandes est parabolique. Nous interprétons ce résultat comme une preuve de l'importance des couplages interbandes, même pour si celles-ci sont très éloignées en énergie.

7.5 Cas des systèmes à bandes plates

Il existe des modèles qui ont la particularité d'avoir une relation de dispersion constante $E_k = \text{cste}$, c'est-à-dire une bande plate. Ces modèles se rencontrent rarement dans les cristaux habituels, et peuvent être considérés comme pathologiques puisque cela signifie qu'un nombre macroscopique d'états a exactement la même énergie.

Cependant cette situation se présente fréquemment dès que l'on se place en présence d'un champ magnétique : en effet, on transforme une relation de dispersion continue en une série de niveaux de Landau discrets. Ces niveaux sont régulièrement espacés dans le cas des électrons libres (où lorsqu'une approximation quadratique de la relation de dispersion est possible) d'une énergie $\hbar\omega_c$ proportionnelle au champ magnétique. Si le champ est suffisamment grand, il est possible de mettre tous les électrons dans le plus bas niveau, et alors le système possède une relation de dispersion constante : une bande plate.

Notons un point physique important dans les systèmes à bandes plates : supposons qu'en partant d'un réseau avec des bandes dispersives, nous puissions modifier un paramètre du hamiltonien pour aplatir peu à peu l'une des bandes, jusqu'à la rendre totalement plate. Alors physiquement, l'aplatissement de la bande signifie une diminution de l'importance de l'énergie cinétique : tous les électrons ont la même énergie cinétique dans un modèle à bande plate. Ainsi, plus la bande s'aplatit, plus l'interaction coulombienne prend de l'importance. Les systèmes fortement corrélés peuvent présenter des phases thermodynamiquement stables exotiques, telles que les cristaux de Wigner ou un effet Hall quantique fractionnaire décrit en termes de fermions composites. [51]

Dans ce qui suivra, et malgré la remarque précédente, nous ne prendrons pas en compte l'interaction coulombienne dans l'étude des bandes plates. Nous nous focaliserons sur la conséquence de la présence d'une telle bande sur la réponse magnétique orbitale du système. Une relation de dispersion constante donnant une contribution de Peierls nulle, le magnétisme orbital d'une bande plate est essentiellement dû à des effets interbandes, autrement dit des effets géométriques de $k \mapsto \mathcal{H}_k$ et des états propres de \mathcal{H}_k . Les modèles à bandes plates sont donc idéaux pour étudier l'effet des propriétés géométriques sur la susceptibilité orbitale.

Dans cette section, nous commencerons par donner une méthode générale permettant de trouver des modèles à bandes plates à partir d'un réseau sous-jacent donné. Nous utiliserons cette méthode

pour trouver trois modèles à bandes plates choisis pour leur différentes symétries qui vont se répercuter sur la réponse magnétique orbitale. Nous nous permettrons également quelques digressions vis-à-vis de la susceptibilité pour quelques considérations sur le papillon de Hofstadter de tels systèmes, et en particulier comment étudier la dispersion de la bande plate lors de l'établissement du champ magnétique.

7.5.1 Obtenir des bandes plates

Si les systèmes possédant une bande plate sont rares, il est possible de construire des modèles présentant une telle structure à l'aide d'une méthode générique. Tout d'abord, commençons par une remarque importante qui va guider notre recherche de système à bande plate : un modèle à deux bandes avec une bande plate et une bande dispersive brise nécessairement la symétrie chirale. En effet, celle-ci impose au système une contrainte très forte : pour toute énergie E_k accessible, l'énergie $-E_k$ l'est également ; ce qui apparie les bandes dispersives dans un cristal. Ainsi, un système à symétrie chirale a nécessairement un nombre pair de bandes dispersives.

Concrètement, les modèles à deux atomes par maille brisant la symétrie chirale sont ceux qui brisent le caractère biparti du réseau : des atomes A peuvent être reliés à des atomes B mais également à des atomes A . Afin de construire ces modèles, nous allons partir de réseaux simples bipartis, et ajouter des liens supplémentaires dont l'amplitude de saut sera variable.

Partons de la matrice hamiltonienne dans l'espace réciproque la plus générale pour un modèle à deux bandes :

$$h = \begin{pmatrix} g_1(\mathbf{k}) & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & g_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (7.49)$$

avec g_1 et g_2 des fonctions réelles de \mathbf{k} et f une fonction complexe. Les énergies propres du hamiltonien (7.49) sont des solutions de l'équation polynomiale

$$E^2 - (g_1(\mathbf{k}) + g_2(\mathbf{k}))E + g_1(\mathbf{k})g_2(\mathbf{k}) - |f(\mathbf{k})|^2 = 0. \quad (7.50)$$

Imposer une bande plate au modèle, revient à résoudre $E_k = K$ pour une des solutions.

7.5.2 Modèle de Mielke

7.5.2.1 Réseau carré décoré

Le modèle de Mielke part du réseau le plus simple à deux dimensions : le réseau carré. *A priori*, ce réseau est à un seul atome par maille, mais il est toujours possible de séparer le réseau en deux parties formant aussi des réseaux carrés, de telle sorte que le réseau soit biparti. On recherche un modèle possédant une bande plate, et nous allons voir que dans une approche de liaisons fortes, il est possible de se limiter à un hamiltonien avec des sauts second voisins. Cela impose donc $f(\mathbf{k}) = 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$ où a est la distance entre plus proches voisins et t l'amplitude de saut entre eux. g_1 et g_2 encodent les sauts vers des sites du même sous-réseau, et leur forme est alors contrainte. Ils sont des combinaisons linéaires des fonctions $\cos(k_x a + k_y a)$ et $\cos(k_x a - k_y a)$, ce qu'on écrit génériquement

$$\begin{cases} g_1(\mathbf{k}) = \alpha \cos(k_x a + k_y a) + \beta \cos(k_x a - k_y a) & (7.51a) \\ g_2(\mathbf{k}) = \gamma \cos(k_x a + k_y a) + \delta \cos(k_x a - k_y a). & (7.51b) \end{cases}$$

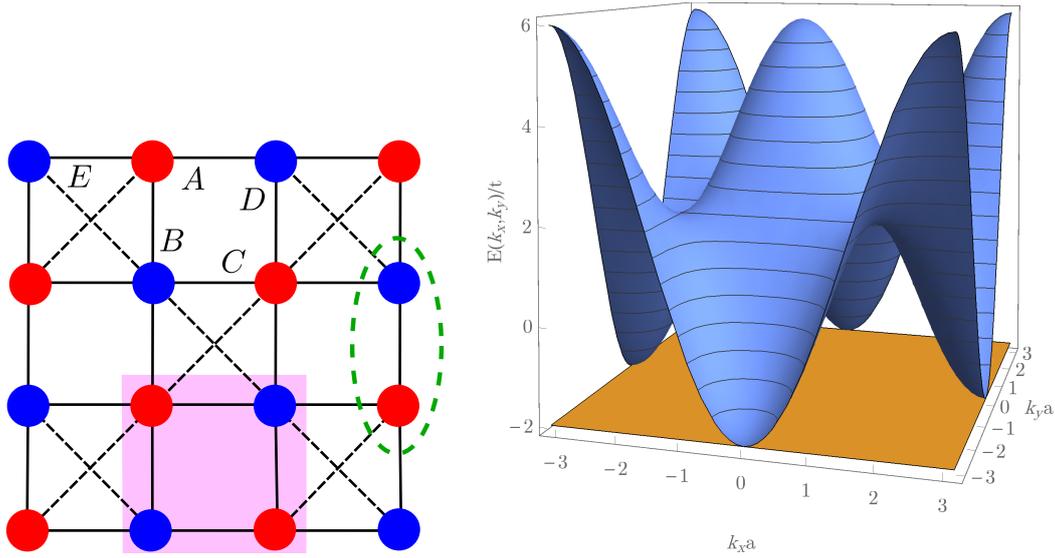


FIGURE 7.15 – À gauche le schéma du réseau carré décoré. En vert est entouré une maille élémentaire, et on montre en violet un état localisé associé à un carré non décoré du réseau. À droite, le spectre du modèle échiquier sur la première zone de Brillouin. Il est composé d’une bande plate à $E = -2t$ accolée à une bande dispersive très similaire à celle d’un réseau carré.

En substituant cet *ansatz* dans (7.50), on obtient après quelques manipulations élémentaires deux solutions équivalentes par échange des sous-réseaux. L’une d’entre elle s’écrit

$$\alpha = \delta = -K = \mp 2t \quad (7.52a)$$

$$\beta = \gamma = 0. \quad (7.52b)$$

Afin d’être cohérent avec la définition du hamiltonien, et d’avoir un système physiquement plausible, on choisit $\alpha, \beta, \gamma, \delta \geq 0$. Finalement, nous arrivons à un modèle possédant une bande plate construit sur un « réseau carré décoré ». [90] Le hamiltonien a la forme de (7.49) avec

$$\begin{cases} f(\mathbf{k}) = 2t(\cos k_x a + \cos k_y a) & (7.53a) \\ g_1(\mathbf{k}) = 2t \cos(k_x a + k_y a) & (7.53b) \\ g_2(\mathbf{k}) = 2t \cos(k_x a - k_y a). & (7.53c) \end{cases}$$

Ce réseau schématisé sur la FIG. 7.15 a déjà été étudié dans le passé [5, 90] et est connu en tant que *réseau de Mielke* ou *réseau échiquier*. Son spectre est représenté sur la FIG. 7.15. Il est composé d’une bande plate à $E = -2t$, et une bande dispersive qui touche la bande plate dans la première zone de Brillouin en $(0, \pi)$ et $(\pi, 0)$.

États localisés

La présence d’une bande plate est de plus corrélée avec l’existence d’états localisés sur le système : la technique précédente revient en réalité à faire varier les intégrales de saut t et t_2 et les

ajuster de telle sorte que les différents chemins menant à un atome interfèrent destructivement, ce qui annule certains éléments de matrice du hamiltonien.

Dans l'exemple du réseau échiquier et du modèle à deux bandes, on peut trouver un nombre macroscopique d'états localisés d'énergie propre $E = -2t$. En effet, considérons la superposition d'états des quatre orbitales atomiques d'atomes entourant un carré vide du réseau (FIG. 7.15) selon cette définition :

$$|\Psi_{\text{loc}}\rangle = \frac{1}{2} (|A\rangle - |B\rangle + |C\rangle - |D\rangle). \quad (7.54)$$

Cet état est un état propre localisé du hamiltonien dans l'espace réel. Pour le vérifier, calculons par exemple $\langle E | \hat{H} | \Psi_{\text{loc}} \rangle$ avec E un état d'un atome voisin (FIG. 7.15). Deux contributions apparaissent de cet élément de matrice : le saut depuis A et celui depuis B . À cause de la différence de signes dans (7.54), ces contributions vont interférer destructivement et s'annuler. Le raisonnement précédent s'applique de la même façon aux autres sites voisins. Cet argument montre que $|\Psi_{\text{loc}}\rangle$ est localisé, et un calcul élémentaire montre de plus que c'est un état propre.

Les autres états propres sont des translation de $|\Psi_{\text{loc}}\rangle$, et puisqu'à chaque carré « non décoré » du réseau est associé un état localisé, il y a autant d'états localisés que d'états dans la bande plate c'est-à-dire $N/2$ où N est le nombre d'atomes. Cette famille forme une base d'états propres du sous-espace associé à la bande plate, mais pas une base orthogonale.

7.5.2.2 Susceptibilité orbitale

Le hamiltonien du réseau échiquier

$$h = 2t \begin{pmatrix} \cos(k_x a + k_y a) & \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \\ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) & \cos(k_x a - k_y a) \end{pmatrix} \quad (7.55)$$

peut s'écrire sous la forme (7.1) avec

$$E_{0,\mathbf{k}} = 2t \cos(k_x a) \cos(k_y a) \quad (7.56)$$

$$E_{\mathbf{k}} = 2t(1 + \cos(k_x a) \cos(k_y a)) \quad (7.57)$$

et

$$\mathbf{n}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{1 + \cos(k_x a) \cos(k_y a)} \begin{pmatrix} \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \\ 0 \\ \sin(k_x a) \sin(k_y a) \end{pmatrix}. \quad (7.58)$$

De l'expression (2.67), on remarque que la courbure de Berry est nulle ; ce qui est le cas pour tout hamiltonien réel. Plus généralement, ceci se produit dès que $\mathbf{k} \mapsto \mathbf{n}(\mathbf{k})$ décrit une surface dégénérée (une ligne) sur S^2 : par exemple lorsqu'une composante de $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ est constante.

La susceptibilité orbitale du modèle est présentée sur la FIG. 7.16. La susceptibilité totale du modèle est paramagnétique en bord de bande ! Plus précisément, comme dans les systèmes présentant la symétrie chirale, χ_g donne une contribution négative près d'une dégénérescence ; cependant celle-ci est plus que compensée par la nouvelle contribution $\tilde{\chi}_g$, ce qui résulte en une divergence paramagnétique à l'énergie de la bande plate.

Le reste du spectre se comprend avec des arguments déjà vus précédemment : plus on s'éloigne de la bande plate, plus χ_{orb} se rapproche de la susceptibilité de Peierls, possède en particulier une

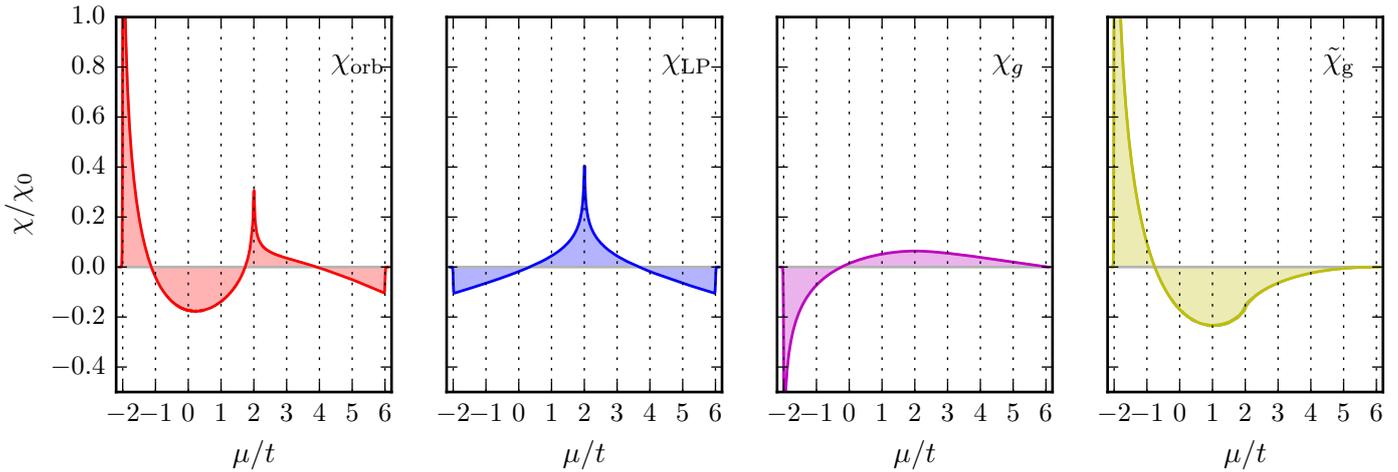


FIGURE 7.16 – Susceptibilité orbitale du modèle deux bandes sur réseau échiquier ($k_B T = 0.005t$). La contribution $\tilde{\chi}_g$ est non nulle, divergente sur la bande plate, et dominante pour ce modèle.

divergence paramagnétique au niveau de la singularité de Van Hove du modèle, et tend vers une valeur diamagnétique en bord de bande compatible avec la susceptibilité de Landau. Comme attendu, la contribution de Peierls ne « voit » pas la bande plate.

On a donc mis en évidence un modèle où la contribution $\tilde{\chi}_g$ peut devenir dominante, et donner un caractère paramagnétique divergent à température nulle au bord de bande. Cette caractéristique peut également se comprendre à l'aide du papillon de Hofstadter, comme nous allons le voir.

7.5.2.3 Papillon de Hofstadter

Dans le modèle à une bande sur réseau carré, la plaquette était la maille élémentaire. Ici cependant, la plaquette est un triangle (par exemple ABE sur la FIG. 7.15) d'aire $a^2/2$, le flux magnétique est défini par $\phi = Ba^2/2$, et le papillon est tracé sur la FIG. 7.17. Très près de $\phi = 0$, on peut séparer le papillon en deux régions :

- $E \leq -2t$: à l'énergie de la bande plate on observe un ensemble d'états qui vont diminuer en énergie lorsque ϕ/ϕ_0 augmente. On est alors tenté de les associer à la bande plate puisqu'on a vu qu'elle donnait une contribution paramagnétique.
- $E > -2t$: cette partie du spectre ressemble au papillon du réseau carré —ce qui n'est pas très surprenant. On reconnaît en particulier des niveaux de Landau près de $E = 6t$ et proches de la bande plate à $E = -2t$.

Afin d'approfondir ces deux interprétations, regardons précisément le devenir de la bande plate lorsque le champ magnétique est branché.

Dispersion de la bande plate

On remarque que le champ magnétique va détruire la bande plate présente à énergie nulle. Si ce caractère est fréquent, il n'est pas obligatoire comme nous le verrons dans le chapitre suivant

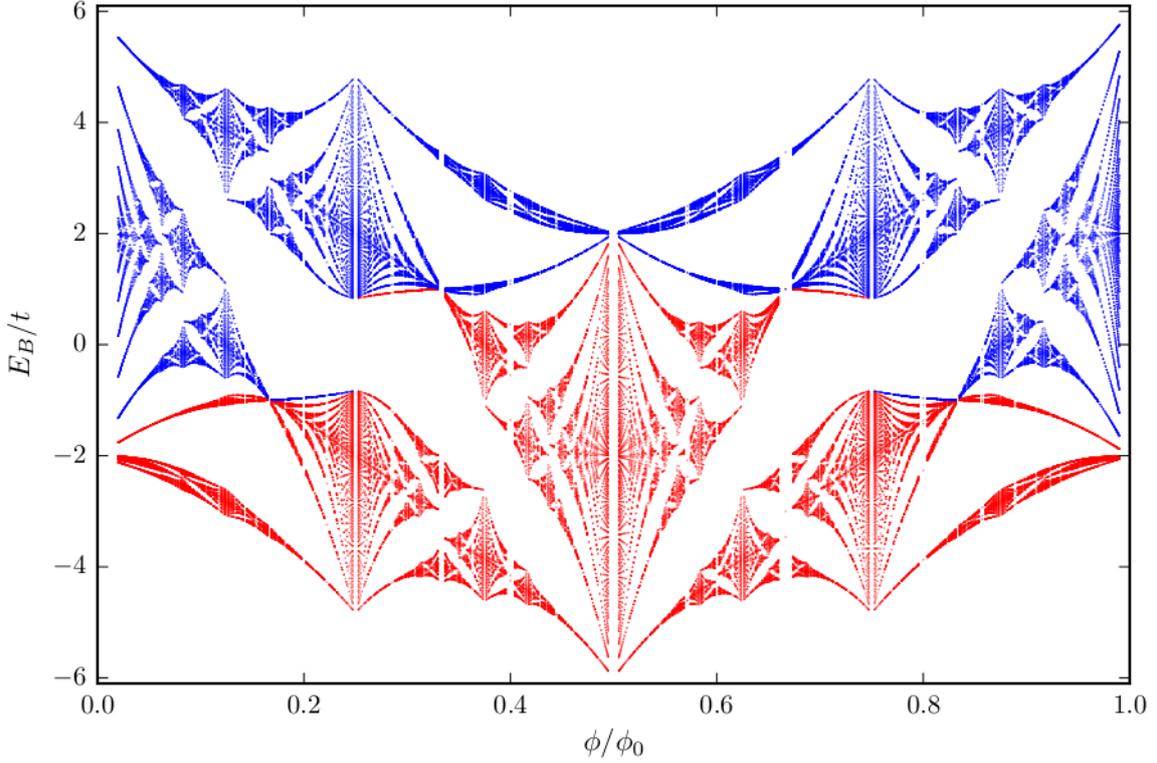


FIGURE 7.17 – Papillon de Hofstadter du modèle deux bandes sur réseau échiquier. On a colorié en deux couleurs différentes les états appartenant aux deux bandes. On voit en particulier à $\phi = 0$ un niveau de Landau montant qui provient de la bande plate. [5]

sur l'exemple du modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$.

Lors de l'établissement d'un champ magnétique, il est en fait possible d'interpréter le comportement du spectre proche de $E = -2t$ comme des niveaux de Landau. Choisissons par exemple de développer le hamiltonien (7.55) près d'un point M de la zone de Brillouin où les bandes sont en contact $\mathbf{k}_M = (0, \pi)$. Soit $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_M$, le hamiltonien approché s'écrit

$$h \approx t \begin{pmatrix} -2 + (q_x + q_y)^2 a^2 & q_y^2 a^2 - q_x^2 a^2 \\ q_y^2 a^2 - q_x^2 a^2 & -2 + (q_x - q_y)^2 a^2 \end{pmatrix}. \quad (7.59)$$

De plus, une rotation selon la matrice σ_x transforme σ_y en σ_z et σ_z en $-\sigma_y$, laissant σ_x inchangé. Après cette transformation, on réintroduit le champ magnétique dans le hamiltonien approché « à la Peierls », c'est-à-dire en remplaçant q par des opérateurs. Ici :

$$q_x \rightarrow \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}\ell_B} \quad \text{et} \quad q_y \rightarrow i \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}\ell_B} \quad (7.60)$$

ce qui donne pour le hamiltonien effectif

$$h^{\text{eff}} = -2t\mathbb{1} + 2t \frac{a^2}{\ell_B^2} \begin{pmatrix} \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} & (\hat{a})^2 \\ (\hat{a}^\dagger)^2 & \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.61)$$

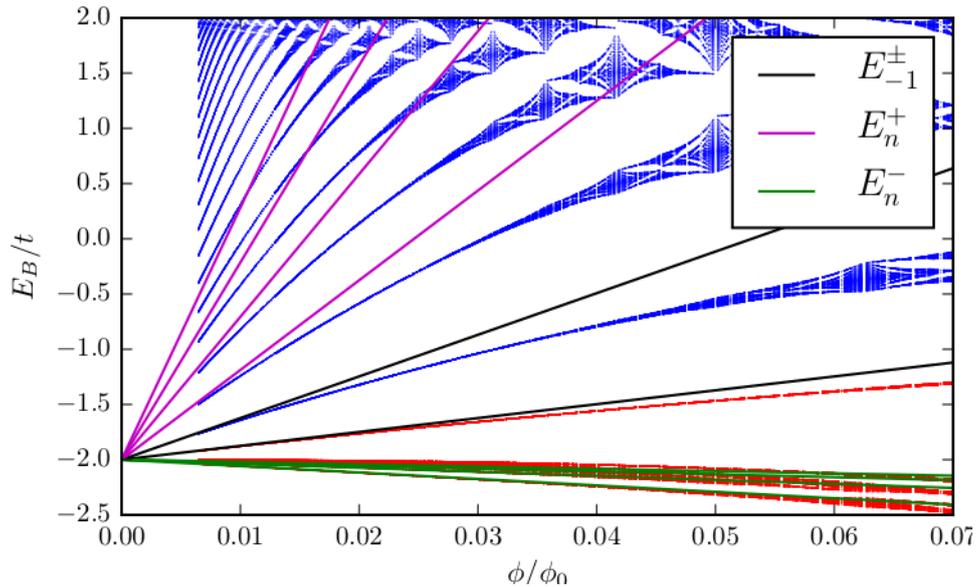


FIGURE 7.18 – Zoom sur le papillon de Hofstadter près de l'énergie fondamentale au niveau de la bande plate du modèle sur réseau échiquier. Trois familles de niveaux de Landau (bleus, vert et noir) sont visibles. Si les bleus correspondent à la bande dispersive, les verts montrent la dispersion de la bande plate en champ magnétique. Les noirs sont d'origine mixte.

Cette substitution a transformé une matrice de nombres en opérateur dont il faut trouver les états propres. Vue la présence de l'opérateur nombre $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, il paraît judicieux de les chercher sous la forme d'états nombres $|n\rangle$, $n \in \mathbb{N}$. En effet, on vérifie que les états propres du hamiltonien (7.61) sont formés de deux familles notées $+/-$ et indexées par $n \in \mathbb{N}$, accompagnées de deux états un peu à part notés avec $n = -1$:

$$|\psi_{-1}^+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}, \quad |\psi_{-1}^-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |1\rangle \end{pmatrix}, \quad (7.62)$$

$$|\psi_n^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |n\rangle \\ \pm |n+2\rangle \end{pmatrix}. \quad (7.63)$$

Leurs énergies respectives sont

$$E_{-1}^\pm = -2t + \frac{2t}{\ell_B^2} \pm \frac{t}{\ell_B^2}, \quad (7.64a)$$

$$E_n^\pm = -2t + \frac{t}{\ell_B^2} \left(2n + 3 \pm 2\sqrt{n^2 + 3n + 3} \right). \quad (7.64b)$$

Ces états dont l'énergie varie linéairement avec le champ magnétique sont des niveaux de Landau issus de la bande plate et de la partie supérieure du spectre concernant le modèle une bande sur réseau carré.

Il est possible de vérifier la validité de cette approche en zoomant sur le papillon de Hofstadter, près de la zone $E = -2t$ à faible champ magnétique. Sur la FIG. 7.18 on superpose au papillon

7.5. CAS DES SYSTÈMES À BANDES PLATES

les solutions précédentes. L'accord entre l'approche numérique et cette approximation est très bon lorsque les effets de réseau ne sont pas dominants (faibles champs magnétiques). On peut distinguer trois familles de niveaux de Landau :

- la famille E_n^+ diamagnétique, directement issue des niveaux de Landau du modèle à une bande;
- la famille E_n^- dont l'énergie diminue avec le champ magnétique, ce qui est inattendu pour des niveaux de Landau. Cette famille tend vers l'énergie de la bande plate lorsque $n \rightarrow \infty$: si n est grand

$$E_n^- \approx -2t - \frac{3}{4\ell_B^2} \frac{t}{n} \quad (7.65)$$

où l'on voit plus clairement la décroissance des niveaux avec le champ magnétique. Cette propriété a déjà été observée sur un autre modèle présentant une bande plate par Xiao et al. [159]. Cette série de niveaux de Landau permet de mieux comprendre la divergence paramagnétique de la susceptibilité.

- Enfin les deux niveaux E_{-1}^\pm isolés, qui sont diamagnétiques. En réalité, un argument basé sur le comptage du nombre d'états montre que ces deux états n'appartiennent pas à la même partie du spectre : l'énergie E_{-1}^\pm provient de la bande \pm , ce qui justifie la notation initiale. Cela se voit avec le coloriage de la FIG. 7.18.

On retiendra donc que la bande plate peut donner naissance à des niveaux de Landau décroissants avec le champ magnétique, qui sont à l'origine d'une réponse globalement paramagnétique du système. Dans la suite de cette partie, nous allons étudier deux autres modèles à bande plate, un sur réseau carré l'autre sur réseau nid d'abeille, présentant tous deux une bande interdite.

7.5.3 Modèle de Tasaki

Il existe d'autres méthodes pour décorer un réseau carré et obtenir des bandes plates au-delà du modèle précédent : on peut considérer des sauts plus lointains, avec les troisièmes voisins (saut t_3).

Le hamiltonien de Bloch s'écrit

$$h = t \begin{pmatrix} \frac{t_2}{t} f(\mathbf{k}) + \frac{t_3}{t} (g_1(\mathbf{k}) + g_2(\mathbf{k})) & g_1(\frac{\mathbf{k}}{2}) + g_2(\frac{\mathbf{k}}{2}) \\ g_1(\frac{\mathbf{k}}{2}) + g_2(\frac{\mathbf{k}}{2}) & 0 \end{pmatrix} \quad (7.66)$$

avec f , g_1 et g_2 les mêmes fonctions que celle du modèle échiquier. Résoudre l'équation (7.50) nous donne une solution avec $t_3 = t/2$. Le spectre obtenu est présenté sur la FIG. 7.19. Comme dans le cas du modèle sur réseau carré avec gap, le minimum de la bande dispersive est atteint sur une ligne de vecteur k . Les deux comportements sont cependant différents, puisqu'ici la ligne est refermée sur elle-même. Le bas de bandes en forme de « chapeau mexicain »¹¹ est pseudo-1D, contrairement aux points isolés habituels.

11. On parle ici d'une ressemblance qualitative uniquement, puisque que le spectre d'un chapeau mexicain est en $-x^2 + x^4$, alors qu'il s'agit ici d'une relation à basse énergie du type $-|x| + x^2$.

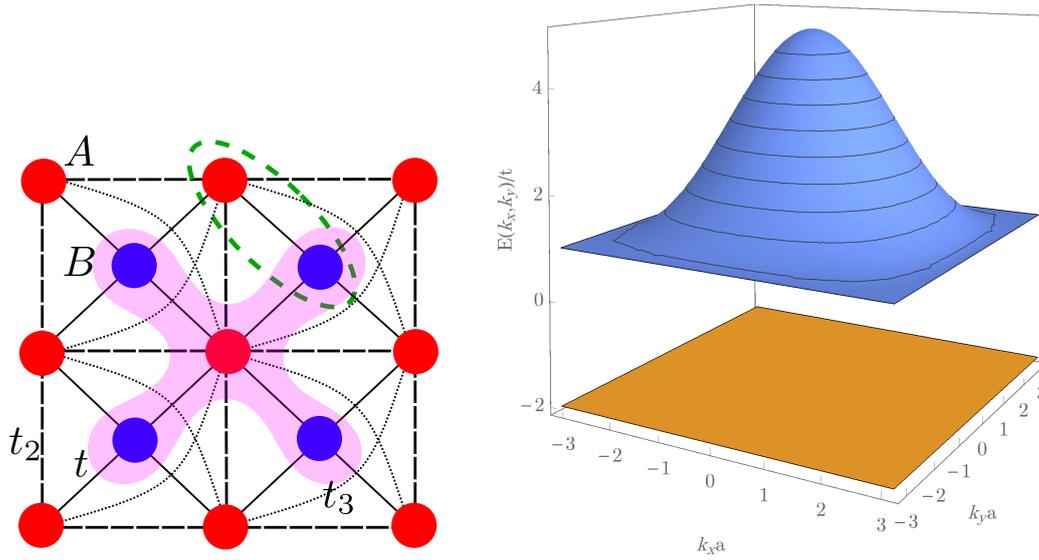


FIGURE 7.19 – À gauche : réseau carré décoré avec couplage $A - A$ entre seconds et troisièmes voisins. En vert une cellule unitaire, et en violet un état localisé propre. À droite : le spectre du modèle de Tasaki avec une bande plate et une bande dispersive séparées par une bande interdite.

États localisés

Intéressons-nous aux états localisés à l'énergie $E = -2t$. Soient $|A\rangle$ l'orbitale d'un atome rouge et $|B_i\rangle$ celles des quatre atomes bleus premiers voisins, si on les suppose orthogonaux, alors l'état

$$|\Psi_{\text{loc}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|A\rangle + \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq 4} |B_i\rangle \right) \quad (7.67)$$

est localisé. Celui-ci est représenté schématiquement sur la FIG. 7.19. Il y a autant d'états localisés que d'atomes A , donc $N/2$ états qui constituent la bande plate. La famille d'états localisés est une base des états de la bande plate, mais toujours non-orthogonale.

Susceptibilité orbitale

Le hamiltonien (7.66), peut facilement se récrire comme (7.1), avec

$$E_{0,\mathbf{k}} = \frac{t}{2} (\cos k_x + \cos k_y + \cos k_x \cos k_y) \quad (7.68)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{t}{2} (4 + \cos k_x + \cos k_y + \cos k_x \cos k_y) \quad (7.69)$$

et

$$\mathbf{n}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} g_1(\frac{\mathbf{k}}{2}) + g_2(\frac{\mathbf{k}}{2}) \\ 0 \\ \frac{1}{2} \left(\frac{t_2}{t} f + \frac{t_3}{t} (g_1 + g_2) \right) \end{pmatrix}. \quad (7.70)$$

Comme dans le modèle précédent, la courbure de Berry s'annule, puisque le vecteur $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ a une composante nulle.

7.5. CAS DES SYSTÈMES À BANDES PLATES

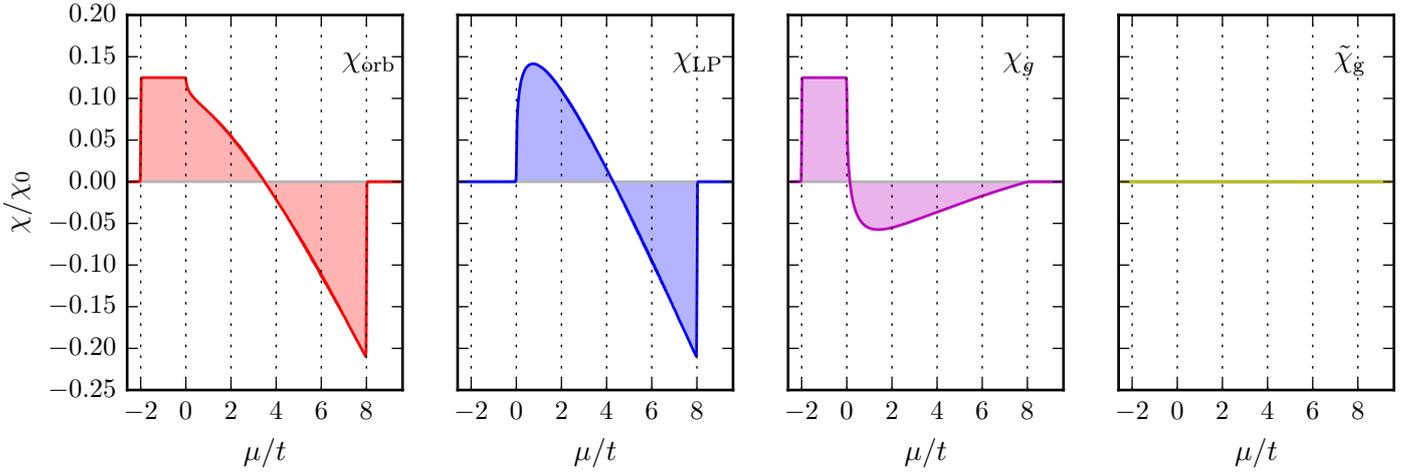


FIGURE 7.20 – Susceptibilité orbitale du modèle de Tasaki ($k_B T = 0.005t$). Bien que la symétrie de sous-réseau soit brisée dans ce modèle, $\tilde{\chi}_g$ est nul de façon fortuite. χ_Ω étant nulle, les effets interbandes sont de nouveau totalement décrits par χ_g .

La FIG. 7.20 montre la susceptibilité orbitale du modèle. Par un jeu de compensations fortuites, on montre que $\tilde{\chi}_g = 0$. À l’opposé du modèle précédent, la contribution de la bande plate à $E = -2t$ est finie. La susceptibilité est non-nulle, constante et paramagnétique dans le gap. Ceci est possible car la courbure de Berry est nulle, et la contribution χ_Ω normalement dominante est nulle, et c’est χ_g qui domine les effets interbandes. On a de plus une valeur paramagnétique sur le bord de la bande dispersive, étonnement due à la partie de Peierls. Comme dans le cas du modèle sur réseau carré, cette curiosité provient de la structure non-parabolique du spectre à basse énergie.

7.5.4 Modèle nid d’abeille avec second voisins

Pour conclure sur les modèles à deux bandes avec une bande plate, on s’intéresse à un modèle sur un réseau nid d’abeille avec interactions seconds voisins pour l’un des sous-réseaux. Ce modèle est intéressant parce qu’il possède une bande interdite comme le modèle de Tasaki, et sa contribution χ_Ω est non nulle puisque le modèle brise la symétrie d’inversion. Le réseau est identique au graphène avec des liens $A - A$ entre seconds voisins supplémentaires (cf. FIG. 7.4), le hamiltonien s’écrit

$$h = - \begin{pmatrix} t_2 \tilde{g}_1(\mathbf{k}) & t \tilde{f}(\mathbf{k}) \\ t \tilde{f}^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (7.71)$$

où

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = e^{ik_y a} + 2e^{-ik_y a/2} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x a\right) \quad (7.72a)$$

$$\tilde{g}_1(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3} k_x a) + 4 \cos\left(\frac{3}{2} k_y a\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_x a\right) \quad (7.72b)$$

et t_2 est le paramètre du lien $A - A$. La résolution de (7.50) montre qu’une bande plate apparaît pour $t_2 = t/\sqrt{3}$.

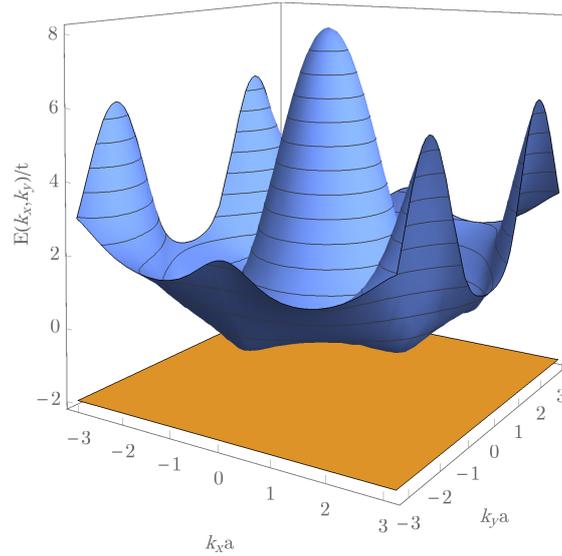


FIGURE 7.21 – Spectre du modèle sur réseau nid d’abeille avec bande plate

États localisés

Les états localisés associés à la bande plate sont centrés sur les atomes du sous-réseau A et s’expriment

$$|\Psi_{\text{loc}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|A\rangle + \sum_{\langle A,j \rangle} |B_j\rangle \right). \quad (7.73)$$

Susceptibilité orbitale

On peut montrer que pour ce modèle

$$E_{0,\mathbf{k}} = \frac{t_2}{2} \tilde{g}_1 \quad (7.74)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{t^2 |\tilde{f}|^2 + \frac{t_2^2}{4} \tilde{g}_1^2} \quad (7.75)$$

et

$$\mathbf{n}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} t \Re \tilde{f} \\ t \Im \tilde{f} \\ \frac{t_2}{2} \tilde{g}_1 \end{pmatrix}. \quad (7.76)$$

La géométrie du réseau nid d’abeille implique un vecteur $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ pour ce modèle qui a trois composantes qui varient (tel que $\mathbf{k} \mapsto \mathbf{n}(\mathbf{k})$ n’est plus une ligne sur la sphère, mais bien une surface), et donc une courbure de Berry non-nulle. La contribution χ_{Ω} va contribuer à la susceptibilité totale. Dans cet exemple, on retrouve la prédominance de χ_{Ω} sur les effets interbandes. Celle-ci fait diverger la susceptibilité sur la bande plate, et donne une réponse diamagnétique dans le gap (c’est toujours le cas puisque l’intégrande de χ_{Ω} devant les fonctions de Fermi est toujours positif). On retrouve une susceptibilité diamagnétique pour χ_{LP} et plus globalement une réponse similaire à celle du modèle

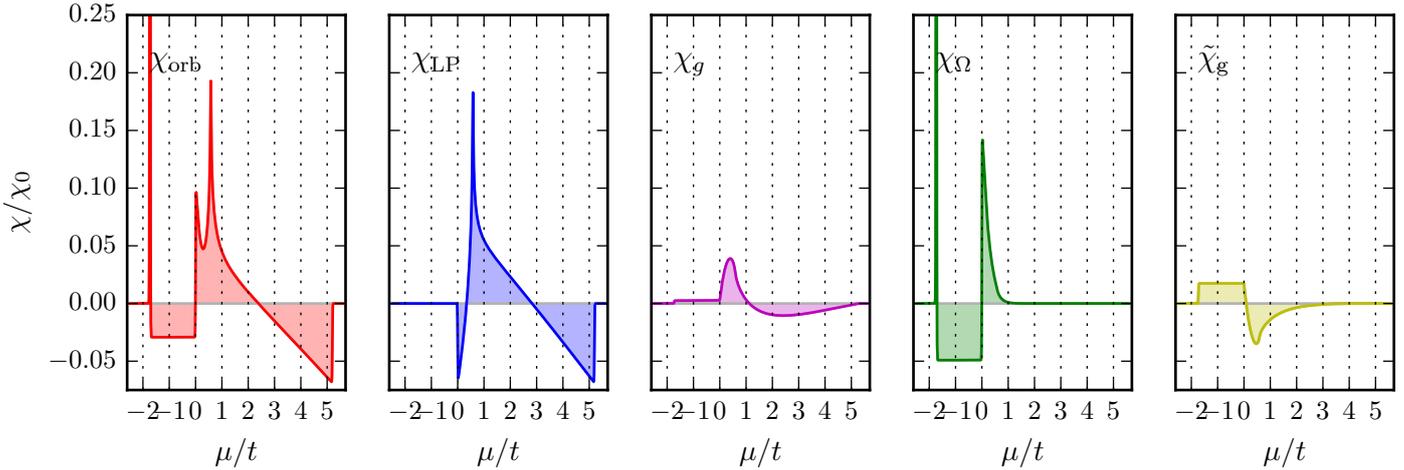


FIGURE 7.22 – Susceptibilité orbitale du modèle à bande plate sur réseau nid d’abeille ($k_B T = 0.005t$). Tous les termes contribuent à χ_{orb} . Contrairement au cas du modèle échiquier, la susceptibilité $\tilde{\chi}_g$ ne diverge pas sur la bande plate.

une bande sur réseau triangulaire, mais effacée par la réponse de χ_Ω au bord de la bande dispersive. En s’éloignant de la bande interdite, les effets interbandes s’effacent, et χ_{LP} devient la contribution dominante.

Conclusion

L’étude de la susceptibilité orbitale de modèles à plusieurs bandes présente plusieurs aspects importants :

- L’étude des différents modèles à deux bandes, mais également les systèmes à une bande (sur réseau carré et triangulaire) a montré une multitude de comportements para- et diamagnétiques, nuls, finis et divergents. Le paramagnétisme orbital compris entre autres par Vignale [152] était déjà intuité par Peierls (bien que le titre de son article contienne « diamagnétisme »). La contribution venant de la substitution de Peierls devant respecter la règle de somme $\int \chi_{\text{orb}} d\mu = 0$, celle-ci passe nécessairement par un comportement paramagnétique si on varie le potentiel chimique. De plus, la susceptibilité orbitale n’est pas nécessairement du même ordre de grandeur que la susceptibilité de Pauli : dans le cas du graphène, le magnétisme orbital diverge à énergie nulle, alors que le magnétisme de spin va à zéro avec la densité d’états.
- La susceptibilité orbitale dérivée d’une théorie de perturbation à l’ordre 2 n’est pas déterminée seulement par le spectre du modèle en champ nul, mais dépend de façon cruciale des vecteurs propres du hamiltonien. La formule de Peierls qui ne dépend que des dérivées du spectre ne peut donc n’être exact que pour les modèles à une bande. Les couplages interbandes modifient drastiquement la susceptibilité que ce soit celle des isolants ou des métaux. Ces couplages provenant des projecteurs du hamiltonien et des états sur une bande peuvent être compris en

CHAPITRE 7. MAGNÉTISME ORBITAL DES MODÈLES À DEUX BANDES

tant que propriétés géométriques du fibré de Bloch ; propriétés communément connues sous le nom d'effets de phases de Berry [157] qui sont donc une mesure du couplage entre bandes.

- L'approche perturbative peut être remplacée par une approche numérique utilisant le spectre en champ magnétique. La susceptibilité orbitale étant une quantité thermodynamique, elle peut s'exprimer complètement à l'aide du spectre en champ magnétique. La remarque précédente montre que ce spectre n'est pas seulement déterminé par le spectre en champ nul. Cette approche a été développée par Landau pour le cas des électrons libres [78], et s'il n'est pas possible de trouver l'expression des niveaux de Landau pour un hamiltonien de Bloch, la méthode numérique *via* le papillon de Hofstadter est toujours utilisable dans le cas d'un cristal.
- La formule de Fukuyama [41] ne s'applique pas de façon générale aux modèles de liaisons fortes puisqu'elle suppose que la dérivée croisée h^{xy} est toujours nulle. [55, 74] Dans le cas des modèles à une bande, celle-ci fonctionne pour les modèles séparables (réseau carré) mais est fortement invalide pour d'autres (réseau triangulaire). Celle-ci est obtenue à partir d'un modèle microscopique où le hamiltonien de l'électron a une partie cinétique triviale, ce qui n'est pas le cas des modèles liaisons fortes avec un nombre fini de bandes. Nous avons cependant remarqué que l'accord entre χ_{orb} et χ_{Fuku} était nettement meilleur à deux bandes sur le nitrure de bore, étude qui donne les mêmes conclusions sur les autres modèles. Pour cette raison, nous supposons que la différence quantitative entre χ_{Fuku} et χ_{orb} provient de la projection d'un modèle microscopique à un nombre infini de bandes vers un modèle (typiquement liaisons fortes) à un nombre fini de bandes.
- La susceptibilité orbitale des modèles à plusieurs bandes n'est jamais une propriété de la surface de Fermi seule [59], mais dépend du remplissage des bandes et contient des contributions non négligeables de la mer de Fermi. Ceci est particulièrement frappant sur la présence d'une contribution non nulle à la susceptibilité dans une bande interdite d'isolant. Dans le nitrure de bore par exemple, la susceptibilité orbitale passe d'une valeur négative dans le gap à une valeur positive en bord de bandes (le plateau paramagnétique). Ces observations sont à opposer au diamagnétisme supposé de Landau près d'un bord de bande parabolique.

Chapitre 8

Systemes à trois bandes

L'examen des systèmes à deux bandes a permis l'étude approfondie des conséquences du couplage interbandes sur le magnétisme orbital. En effet, certains systèmes ont une susceptibilité très différente de celle donnée par la formule de Landau-Peierls, en particulier lorsque le potentiel chimique est énergétiquement proche des deux bandes. Une réponse initialement diamagnétique et fidèle à la formule de Landau des électrons libres (avec une masse de bandes) peut se transformer en réponse paramagnétique. De même, nous avons montré que la susceptibilité magnétique dans une bande interdite d'un système isolant n'est pas forcément nulle. Les systèmes à bandes plates sont un terrain de jeu particulièrement intéressant de ce côté, car la contribution de Landau-Peierls est par définition nulle sur la bande plate, il ne reste que les effets interbandes dans la réponse magnétique.

Si l'expression (6.32) est valide quelque soit le nombre de bandes du modèle, la dérivation et l'interprétation d'une formulation en termes géométriques comme (7.12) est plus délicate pour un modèle à trois bandes. Ceux-ci apportent en particulier un ingrédient supplémentaire en présence de symétries contraignantes. Comme déjà mentionné (cf. SEC. 2.4), une symétrie chirale impose aux bandes la propriété d'être appariées par la symétrie $E \rightarrow -E$. Dans les modèles à trois bandes avec une symétrie chirale, deux des trois bandes sont symétriques l'une de l'autre ($E_{1k} = -E_{2k}$), la dernière devant être conjuguée à elle-même ($E_{3k} = -E_{3k}$) et est donc nécessairement une bande plate d'énergie nulle. La présence d'une bande plate dans le spectre d'un modèle à trois bandes peut avoir une origine plus fondamentale que le hasard d'interférences destructives des modèles à deux bandes du chapitre précédent : elle est une conséquence directe de la symétrie de sous-réseau (qui est une symétrie chirale).

Dans cette partie, nous allons discuter de modèles à trois bandes respectant la symétrie chirale, et donc présentant une bande plate à énergie nulle. De plus, on construit un modèle original dérivé du réseau nid d'abeille du graphène dépendant d'un paramètre α qui interpole continûment entre le graphène et le modèle \mathcal{T}_3 (ou *réseau de dés*), mais dont le spectre à champ nul est totalement indépendant. On montre que la réponse magnétique dépend drastiquement du paramètre α , et subit une transition paramagnétique / diamagnétique à $\mu = 0$! Modifier α revient à changer les effets interbandes dans le modèle sans changer les propriétés spectrales ; ce qui montre de façon claire l'importance du couplage interbandes dans la susceptibilité magnétique orbitale.

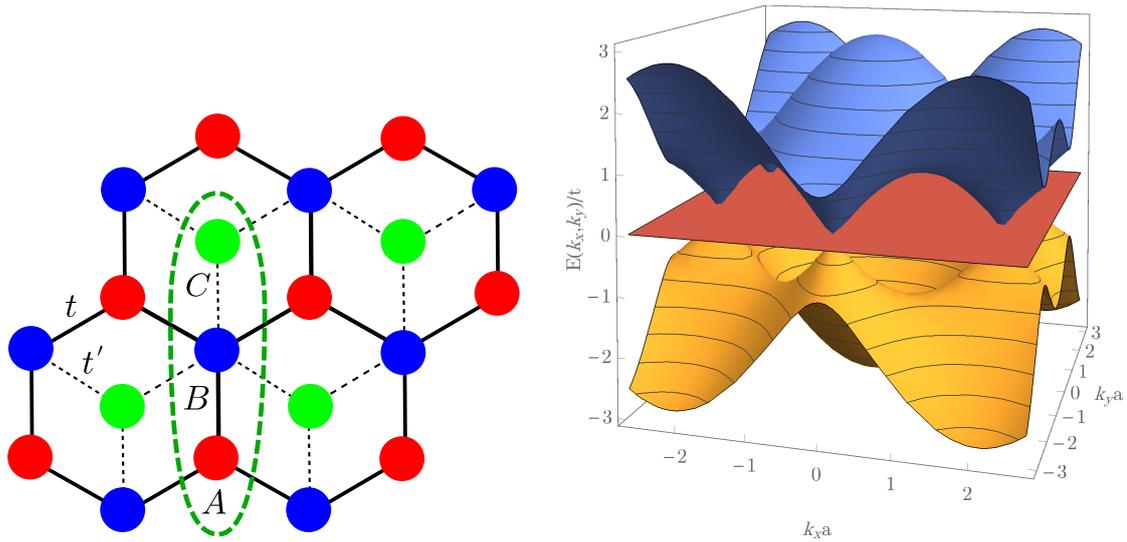


FIGURE 8.1 – À gauche le réseau du modèle \mathcal{T}_3 . Il est triangulaire à trois atomes par maille; un motif est mis en avant en pointillés verts. Dans la nomenclature de Sutherland [142], les sites A et C à trois voisins sont des jantes (*rim*), les sites C à six voisins, des moyeux (*hub*). À droite : spectre à trois bandes du modèle \mathcal{T}_3 . Les deux bandes dispersives sont identiques à celles du graphène.

8.1 Modèle \mathcal{T}_3

8.1.1 Réseau, hamiltonien et spectre

Considérons le réseau représenté sur la FIG. 8.1, avec tous les liens égaux. Celui-ci se comprend comme un réseau de Bravais triangulaire à trois atomes par maille. Il se construit en partant d'un réseau hexagonal, et en ajoutant au centre de chaque hexagone un site relié à trois voisins. Il existe donc trois sites non-équivalents notés A , B et C sur la FIG. 8.1, et ces sites ont des coordinences différentes (3 ou 6). Celui-ci mime un arrangement de cubes tri-dimensionnel, et à cause de cet effet d'optique il est souvent appelé réseau de dés (ou *dice lattice*).

Le modèle de plus proches voisins appelé modèle \mathcal{T}_3 a déjà été examiné par Sutherland [142] en recherchant des réseaux possédant des états localisés et stables devant le désordre. Comme nous l'avons déjà détaillé lors de la discussion sur les modèles à bandes plates, la présence d'une bande plate révèle l'existence d'états localisés.

Sans changer la physique du modèle, nous choisissons $t\sqrt{2}$ comme amplitude de saut entre plus proches voisins, t étant l'amplitude de saut dans le graphène. Ce choix facilitera la comparaison entre les deux modèles, sans influencer les observables physiques. La matrice hamiltonienne dans l'espace réciproque s'écrit :

$$h = \frac{t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) & 0 \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 & f(\mathbf{k}) \\ 0 & f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

où $f(\mathbf{k})$ est la fonction définie pour le graphène (7.22). Le spectre de ce hamiltonien est représenté sur la FIG. 8.1. Ses valeurs propres sont $E_0 = 0$ et $E_{\lambda\mathbf{k}} = \lambda E_{\mathbf{k}}$ avec $\lambda = \pm 1$ et $E_{\mathbf{k}} = |f(\mathbf{k})|$. À ces trois

valeurs propres sont associés les vecteurs propres

$$|\psi_{\lambda\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \\ 2\lambda \\ e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \quad |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \\ 0 \\ -e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad (8.2)$$

où $\theta_{\mathbf{k}}$ est l'argument dans le plan complexe de $f(\mathbf{k}) = |f(\mathbf{k})|e^{i\theta_{\mathbf{k}}}$.

Mis à part la bande plate, ce modèle a la même relation de dispersion que le graphène et possède les mêmes points de Dirac K et K' en $\xi\mathbf{k}_D$ (avec $\xi = \pm$ l'indice de vallée et \mathbf{k}_D la position du point K définis lors de l'étude du graphène). Au voisinage de ces points où s'annule $f(\mathbf{k})$, écrivons $\mathbf{k} = \xi\mathbf{k}_D + \mathbf{q}$, alors $f(\mathbf{k}) \simeq v_F(\xi q_x - iq_y)$ où $v_F = 3ta/(2\hbar)$ est la vitesse de Fermi du graphène, et le hamiltonien effectif peut alors s'écrire [11]

$$\mathcal{H}_{\mathbf{q}} = \pm v_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{q}, \quad (8.3)$$

expression très similaire au hamiltonien effectif des électrons du graphène, à la différence que \mathbf{S} est un vecteur de matrices de spin 1, et non de spin 1/2 (les matrices de Pauli). Le spectre est linéaire au voisinage de ces points : $E_{\lambda} \simeq \lambda v_F |\mathbf{q}|$ et $E_0 = 0$.

À cause des termes de phases présents dans (8.2), l'enroulement de la phase des vecteurs d'ondes autour des points K et K' n'est pas trivial ; les nombres d'enroulement sont non-nuls, et par inspection des vecteurs d'ondes, les nombres d'enroulement des deux bandes dispersives sont égaux. Ce résultat est surprenant car opposé au graphène où les deux bandes ont un nombre d'enroulement opposé. Pour compenser, la bande plate a un nombre d'enroulement opposé et double des bandes dispersives. Si les propriétés spectrales du graphène et du modèle \mathcal{T}_3 sont donc identiques, les propriétés géométriques sont très différentes puisque que les bandes dispersives sont maintenant symétriques.

8.1.2 Magnétisme orbital du modèle \mathcal{T}_3

Pour calculer la susceptibilité orbitale du modèle \mathcal{T}_3 , il faut repartir de son expression en termes de fonctions de Green et généraliser la formulation géométrique (7.12) à deux bandes. On peut sinon utiliser la formulation de [49]. Les calculs devenant lourds et d'interprétation difficile, nous privilégions pour ce modèle une approche perturbative (cf. annexe 6), complétée d'une vérification numérique à partir du papillon de Hofstadter.

Approche perturbative

Afin de trouver le comportement de la susceptibilité lorsque le potentiel chimique est proche de la bande plate, utilisons à nouveau l'approche perturbative à basse énergie en partant de (4.2) avec le hamiltonien approché dans l'une des vallées (le résultat est similaire dans l'autre)

$$h = \frac{\hbar v_F}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & q^* & 0 \\ q & 0 & q^* \\ 0 & q & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.4)$$

CHAPITRE 8. SYSTÈMES À TROIS BANDES

où $q = q_x + iq_y$. La dérivée croisée h^{xy} étant nulle, le terme « Stauber » ne contribue pas dans (4.2). La fonction de Green s'écrit

$$g(E) = (E - h)^{-1} = \frac{\sqrt{2}}{\hbar v_F} \frac{1}{\bar{E}(\bar{E}^2 - 2|q|^2)} \begin{pmatrix} \bar{E}^2 - |q|^2 & \bar{E}q^* & (q^*)^2 \\ \bar{E}q & \bar{E}^2 & \bar{E}q^* \\ q^2 & \bar{E}q & \bar{E}^2 - |q|^2 \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

où $\bar{E} = \frac{E}{\hbar v_F / \sqrt{2}}$. À partir de cette expression, la trace sous l'intégrale en k se calcule de façon élémentaire, pour obtenir

$$\text{Tr} \left\{ (h^x g h^y g)^2 \right\} = \frac{16^2}{(\bar{E}^2 - 2|q|^2)^4} q_x^2 q_y^2. \quad (8.6)$$

L'intégrale dans l'espace réciproque s'étend (fictivement) sur tout le plan. En opérant un changement de variable polaire ($q_x = q \cos \theta$ et $q_y = q \sin \theta$), on peut séparer l'intégrale en un produit :

$$\int \text{Tr} \left\{ (h^x g h^y g)^2 \right\} \frac{d^2 q}{4\pi^2} = \underbrace{\frac{64}{\pi^2} \left(\int_0^\infty \frac{q^5}{(\bar{E}^2 - 2q^2)} dq \right)}_{=A} \times \underbrace{\left(\int_0^{2\pi} \cos^2 \theta \sin^2 \theta d\theta \right)}_{=B}. \quad (8.7)$$

On vérifie que $B = \pi/4$, et on calcule A par intégration par parties successives en dérivant le numérateur et intégrant le dénominateur. Après deux IPP, on obtient

$$A = \frac{4}{12} \left[\frac{1}{4} \frac{1}{\bar{E}^2 - 2q^2} \right]_0^\infty = -\frac{1}{12\bar{E}^2}. \quad (8.8)$$

Ce qui donne pour la susceptibilité correspondant au spectre linéarisé

$$\chi_{\text{low}} = -\frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \Im \int \frac{-16}{48\pi} \frac{n_F(E)}{\bar{E}^2} dE = -\frac{\mu_0 e^2 v_F^2}{12\pi} n_F'(\mu), \quad (8.9)$$

et en particulier

$$\chi_{\text{low}} \xrightarrow{T \rightarrow 0} = +\frac{\mu_0 e^2 v_F^2}{12\pi} \delta(\mu). \quad (8.10)$$

À un facteur 1/2 et un signe près, on retrouve la susceptibilité à basse énergie du graphène (7.38). Le signe opposé implique cependant une réponse magnétique totalement différente du graphène : le modèle \mathcal{T}_3 est paramagnétique.

Le modèle \mathcal{T}_3 , qui est un modèle identique au graphène en terme de spectre (modulo la bande plate, inerte en champ magnétique comme nous allons le voir), a une réponse magnétique opposée. Ceci montre une fois de plus l'effet des couplages interbandes sur la réponse magnétique d'un cristal. Dans la suite, nous allons confirmer cette approche basse énergie par une résolution numérique de la susceptibilité basée sur le calcul du spectre en champ magnétique.

Approche numérique

La méthode précédente ne donnait que la susceptibilité proche des points de Dirac, puisque le spectre a été développé au voisinage de $E = 0$. Regardons ce que la méthode numérique basée sur le papillon de Hofstadter (cf. CHAP. 3) peut nous apprendre de plus sur la susceptibilité. Le papillon de Hofstadter du modèle \mathcal{T}_3 — déjà étudié dans la Réf. [151] — est reproduit FIG. 8.2.

Comme nous l'avons déjà mentionné lors de l'étude des modèles deux bandes à bande plate, un modèle préservant la symétrie chirale de sous-réseau a un spectre symétrique par $E \rightarrow -E$. Cette

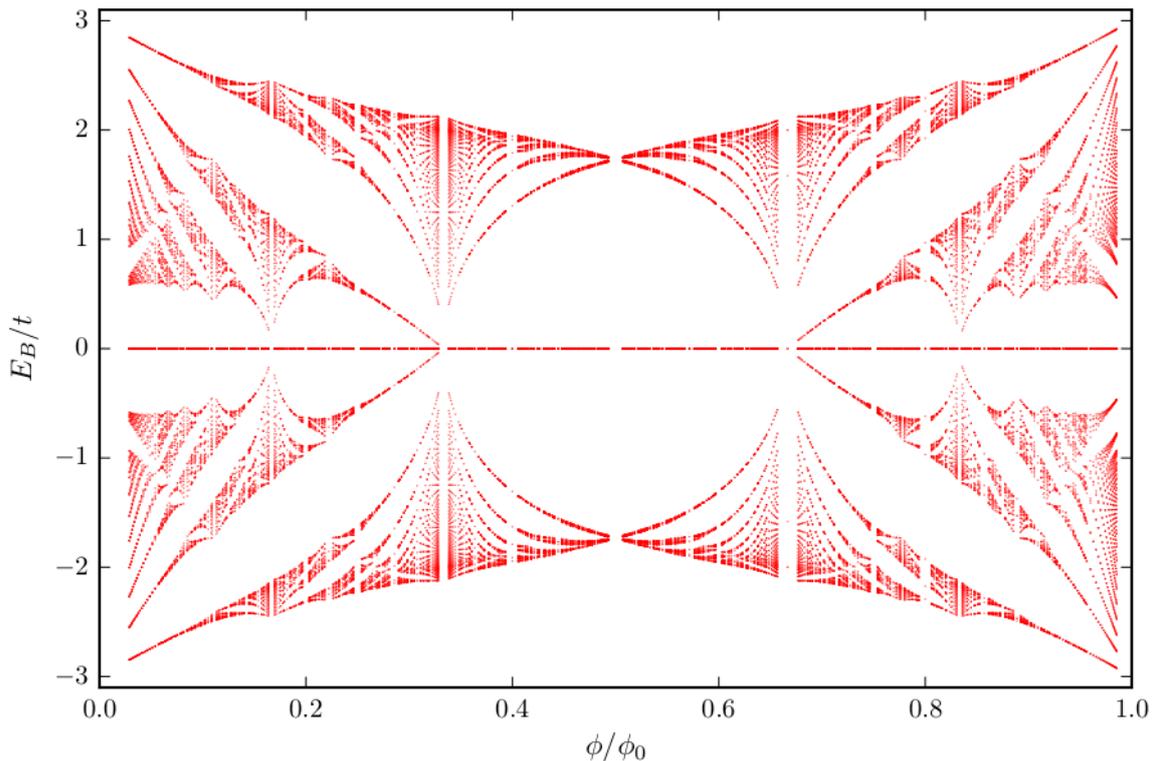


FIGURE 8.2 – Papillon de Hofstadter du modèle \mathcal{T}_3 . La bande plate à champ nul reste à $E = 0$. $\phi = \phi_0/2$ est un point particulièrement intéressant, avec des cages d’Aharonov-Bohm. [98, 151]

symétrie n’étant pas brisée par le champ magnétique (seule la phase des termes de sauts change, le modèle reste biparti), le papillon de Hofstadter est également symétrique selon son axe horizontal.

On remarque que la bande plate reste à énergie nulle, ce qui est imposé par la symétrie chirale. On distingue donc les bandes plates des modèles précédemment étudiés, qu’on pourrait appeler « accidentelles », de la bande plate du modèle \mathcal{T}_3 qui est robuste, et imposée par les symétries du problème.

Comme à température nulle, la susceptibilité est directement déterminée par la variation d’énergie lorsqu’on établit le champ, la bande plate ne contribue donc pas à la réponse magnétique puisque son énergie en champ magnétique est toujours nulle. Il est tentant d’en déduire que ce modèle se comporte comme le graphène. En effet, le papillon de la FIG. 8.2 présente de nombreuses similarités avec le papillon du graphène : des niveaux de Landau linéaires en B en bas du spectre, des niveaux en \sqrt{B} près de $E = 0$, et des points d’accumulation qui rappellent les singularités de Van Hove du graphène, aussi présentes sur le spectre du modèle \mathcal{T}_3 . On note cependant que dans le cas du graphène, le niveau à énergie nulle est un niveau de Landau, donc de dégénérescence proportionnelle au champ ; ici le nombre d’états est fixé : c’est le nombre d’états dans la bande plate.

Le résultat de la méthode numérique utilisant le papillon pour le calcul de la susceptibilité orbitale du modèle \mathcal{T}_3 est tracé sur la FIG. 8.3. La susceptibilité orbitale du modèle \mathcal{T}_3 est très proche de celle du graphène lorsque $|\mu| > t$, ce qui était attendu par la similarité de leur spectre. Cependant,

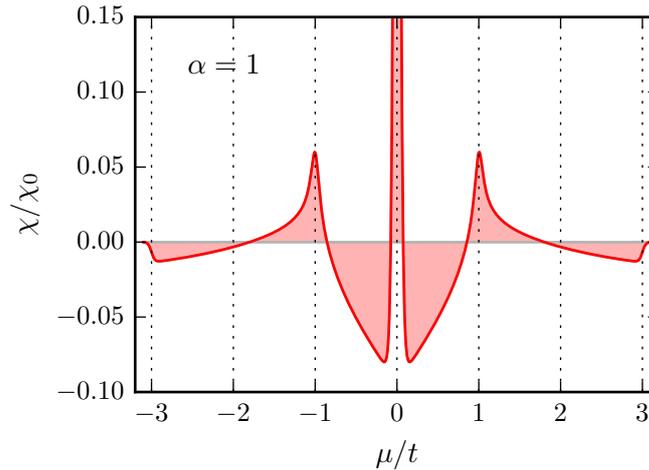


FIGURE 8.3 – Susceptibilité orbitale du modèle \mathcal{T}_3 obtenue à partir du papillon de Hofstadter. Elle est tracée pour $k_B T = 0.01t$, soit une énergie thermique dix fois plus importante que les susceptibilités du CHAP. 7. La diminution en température est simplement limitée par le temps et la mémoire de calcul.

leur réponse est totalement opposée si $|\mu| < t$, bien que la bande plate soit magnétiquement inerte. La susceptibilité à $\mu = 0$ est bien cohérente avec le développement perturbatif du paragraphe précédent.

Ce papillon présente de nombreux aspects intéressants, dont un caractère fortement dégénéré à $f = \frac{1}{2}$: les seules énergies possibles sont ± 3 et 0 . Les états sont alors localisés dans ce qui sera dénommé des cages Aharonov-Bohm [151]. Le rapport de stage de M. Morigi [98] décrit un grand nombre de caractéristiques de ce papillon, avec une attention particulière aux flux $\phi = \phi_0/3$ et $\phi = \phi_0/2$.

8.2 Généralisation au modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$

Afin de mieux cerner ce changement drastique de réponse magnétique entre le graphène et le modèle \mathcal{T}_3 , introduisons un paramètre supplémentaire dans le modèle précédent : supposons que le lien d'un atome B vers un atome C soit t' différent de t , et introduisons la force relative entre t' et t —que par originalité débordante nous nommerons $\alpha = t'/t$.

8.2.1 Réseau, hamiltonien et spectre

Le réseau est le même que celui sous-jacent au modèle \mathcal{T}_3 , et nous appellerons ce nouveau modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$. Cette nomenclature est d'ailleurs passée dans la littérature, suite à la publication de la Réf. [122]. Pour $\alpha = 1$, tous les liens ont la même valeur et on retrouve le modèle \mathcal{T}_3 . Si $\alpha = 0$, les sites C ne sont pas reliés au réseau cristallin, et les atomes sont donc isolés : ils produisent trivialement une bande plate d'énergie égale à l'énergie sur site donc 0 ; avec les autres sites A et B disposés en nid d'abeille on retrouve le réseau du graphène.

8.2. GÉNÉRALISATION AU MODÈLE $\alpha - \mathcal{T}_3$

Si toutes les valeurs de α (positives) sont possibles, on peut se restreindre à l'intervalle $[0, 1]$ car le système présente une symétrie $\alpha \mapsto 1/\alpha$ où les sites centraux deviennent les sites des hexagones et *vice versa*. Un paramétrage qui va faciliter les calculs par la suite est d'introduire le paramètre angulaire β tel que $\alpha = \tan \beta$. Pour le graphène : $\beta = 0$, et pour le modèle \mathcal{T}_3 : $\beta = \pi/4$.

Le hamiltonien de ce problème se déduit de celui du modèle \mathcal{T}_3 à un facteur d'échelle (dépendant de α) près :

$$h = \frac{t}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) & 0 \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 & \alpha f(\mathbf{k}) \\ 0 & \alpha f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} 0 & \cos \beta f(\mathbf{k}) & 0 \\ \cos \beta f^*(\mathbf{k}) & 0 & \sin \beta f(\mathbf{k}) \\ 0 & \sin \beta f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.11)$$

La propriété remarquable de ce modèle et qui en fait son intérêt est que toute la famille $\alpha - \mathcal{T}_3$ a le même spectre à trois bandes ; indépendant de α . Comme pour le modèle \mathcal{T}_3 , les énergies propres sont données par : $E_0 = 0$ et $E_{\lambda\mathbf{k}} = \lambda|f(\mathbf{k})|$ avec $\lambda = \pm 1$ l'indice de bande. Il possède les mêmes cônes de Dirac à basse énergie que le graphène. Les vecteurs propres associés s'écrivent

$$|\psi_{\lambda\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \beta e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \\ \lambda \\ \sin \beta e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \quad |\psi_{0\mathbf{k}}\rangle = \begin{pmatrix} \sin \beta e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \\ 0 \\ -\cos \beta e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (8.12)$$

Phases de Berry

Les phases de Berry autour des points de Dirac K et K' peuvent se calculer de façon similaire à celles du modèle \mathcal{T}_3 . À α fixé, la phase de Berry dans les trois bandes $(\lambda, 0)$ autour du point de Dirac de la vallée ξ , vaut

$$\phi_{\lambda,\xi} = \xi\pi \cos 2\beta \quad \text{et} \quad \phi_{0,\xi} = -2\xi\pi \cos 2\beta. \quad (8.13)$$

Ces phases de Berry sont donc les mêmes dans les deux bandes $\lambda = \pm$, et de signe opposé à celle de la bande plate. Dans le cas limite $\beta = 0$ du graphène, la phase des bandes dispersives tend vers π identique à $-\pi$. Celle de la bande plate tend vers 2π équivalent à 0. Comme dans le graphène, les phases de Berry des deux vallées sont opposées dans chaque bande.

8.2.2 Approche basse énergie

Le calcul dans le cas du modèle \mathcal{T}_3 peut être adapté pour le réseau $\alpha - \mathcal{T}_3$. De même que pour le modèle \mathcal{T}_3 , le second terme de la formule (4.2) est nul pour le hamiltonien linéarisé près d'un point de Dirac :

$$h = \hbar v \begin{pmatrix} 0 & q^* \cos \beta & 0 \\ q \cos \beta & 0 & q^* \sin \beta \\ 0 & q \sin \beta & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.14)$$

Comme nous l'avons déjà remarqué, lorsque $\alpha = 1$ le hamiltonien s'écrit comme celui d'un spin 1 alors que pour $\alpha = 0$ on retrouve le graphène, et la matrice (restreinte aux atomes A et B) s'écrivant comme une matrice de spin 1/2. Pour un α intermédiaire, h ne peut pas s'écrire avec des matrices de spin. Cette propriété du modèle a des conséquences surprenantes : si $\alpha = 0, 1$, le système a une conductance minimale non-nulle, qui disparaît dès que $0 < \alpha < 1$. [82]

Après quelques étapes élémentaires, nous obtenons :

$$\chi_{\text{low}} = \frac{\mu_0 e^2 v^2}{6\pi} \frac{1 + 3 \cos 4\beta}{4} n'_F(\mu). \quad (8.15)$$

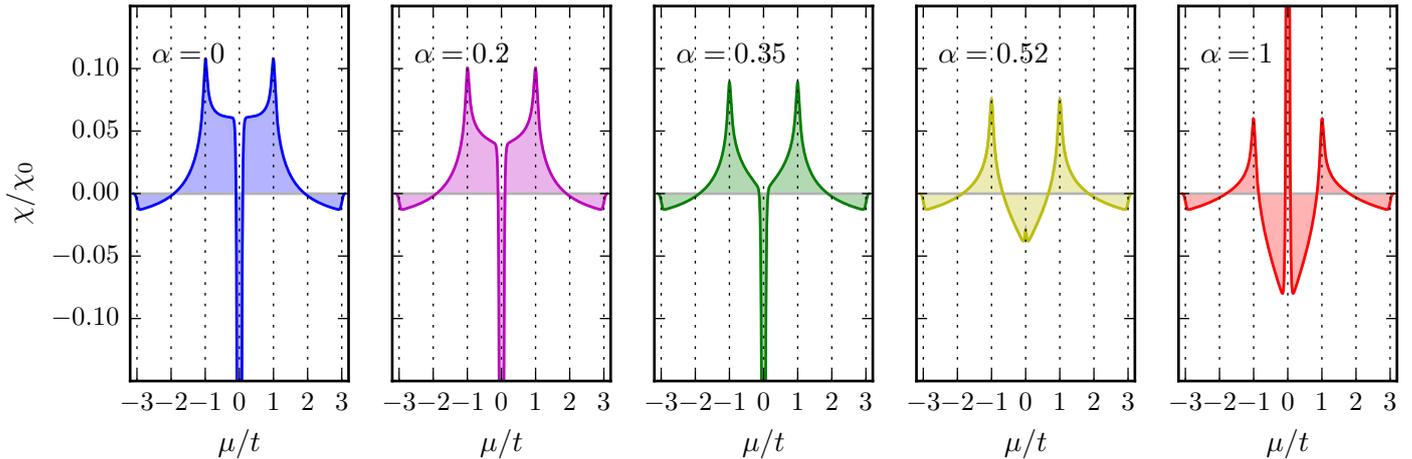


FIGURE 8.4 – Susceptibilité numérique du $\alpha - \mathcal{T}_3$ pour différentes valeurs de α . On observe la disparition de la divergence diamagnétique à $\alpha = \alpha_c \approx 0,52$; au-delà, la divergence devient paramagnétique.

Cette expression interpole entre la susceptibilité négative du graphène ($\beta = 0$) à $\mu = 0$, et la susceptibilité positive du modèle \mathcal{T}_3 ($\beta = \pi/4$). Elle est strictement nulle pour $\alpha = \alpha_c$ tel que

$$\alpha_c = \tan \left[\frac{1}{4} \arccos \left(-\frac{1}{3} \right) \right] = \frac{\sqrt{3} - 1}{2}. \quad (8.16)$$

On observe donc que la susceptibilité orbitale à basse énergie change continûment avec α , et passe d'une situation diamagnétique à paramagnétique. Ceci est nécessairement le fruit des effets interbandes, puisque le spectre à champ nul du $\alpha - \mathcal{T}_3$ est indépendant de α . Vérifions maintenant ce comportement sur la susceptibilité en fonction de μ .

8.2.3 Susceptibilité orbitale numérique

La FIG. 8.4 montre l'évolution de la susceptibilité orbitale en fonction du paramètre α . Elle change de signe à $\mu = 0$ pour $\alpha = \alpha_c$. On observe effectivement cette transition entre paramagnétisme et diamagnétisme pour une valeur critique du paramètre α . Dans un modèle où le spectre est indépendant de α , ce résultat montre de façon spectaculaire comme la susceptibilité est fortement déterminée par les propriétés des états propres du hamiltonien du modèle.

8.2.4 Niveaux de Landau

Si le spectre en champ nul est indépendant de α , il y a plusieurs quantités qui évoluent en fonction de α , et en particulier les niveaux de Landau approchés près de l'énergie nulle. On sait que les niveaux sont en racine carrée du champ dans le cas du graphène près d'un point de Dirac (voir l'Éq. (1.45)), et on s'attend à un comportement similaire puisque le spectre est toujours linéaire.

Afin d'obtenir une expression approchée des niveaux de Landau à bas champ magnétique, on utilise la substitution de Peierls continue dans le hamiltonien (8.11) linéarisé près d'un point de

8.2. GÉNÉRALISATION AU MODÈLE $\alpha - \mathcal{T}_3$

Dirac. On introduit les opérateurs création \hat{a}^\dagger et annihilation \hat{a} sans dimension :

$$\hat{a}^\dagger = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}}(q_x + iq_y) \quad \text{et} \quad \hat{a} = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}}(q_x - iq_y) \quad (8.17)$$

ce qui transforme la matrice (8.11) en opérateur :

$$h = E_B \begin{pmatrix} 0 & \cos \beta \hat{a}^\dagger & 0 \\ \cos \beta \hat{a} & 0 & \sin \beta \hat{a}^\dagger \\ 0 & \sin \beta \hat{a} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad E_B = \frac{\hbar v \sqrt{2}}{\ell_B} = \frac{v}{2\pi} \sqrt{\frac{2eB}{\hbar}} \quad (8.18)$$

Près du point K' , on obtiendrait un résultat similaire en remplaçant \hat{a} par $-\hat{a}^\dagger$. On peut typiquement chercher des solutions de l'équation aux valeurs propres avec des vecteurs d'états nombres $|n\rangle$ vecteurs propres de l'opérateur nombre $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$. Les valeurs propres correspondantes sont les énergies de niveaux de Landau, et sont différents dans chaque vallée :

$$E_p = \pm E_B \sqrt{p + \gamma_\xi} \quad \text{où} \quad p \in \mathbb{N} \quad (8.19)$$

avec γ_ξ un facteur dépendant de la vallée ξ : $\gamma_+ = \sin^2 \beta = 1 - \gamma_-$. La bande plate contient toujours un tiers des états à énergie nulle. Il est possible de réindexer les niveaux pour avoir une seule expression pour les deux vallées :¹

$$E_n = \pm E_B \sqrt{|n + \gamma|} \quad \text{où} \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (8.20)$$

On a choisi $\gamma = \gamma_+ = \sin^2 \beta$; l'indice n est maintenant un entier relatif. On remarque donc quelque chose de surprenant : les niveaux de Landau ne coïncident dans les deux vallées du réseau $\alpha - \mathcal{T}_3$ que pour $\alpha = 0$ et 1 (cf. FIG. 8.5). Pour $\alpha \notin \{0; 1\}$, il serait donc possible de distinguer expérimentalement les deux vallées par des mesures d'énergie. Cette levée de dégénérescence est difficile à obtenir dans le graphène, puisqu'il faut considérer des processus à grand vecteur d'onde, c'est-à-dire dont la longueur d'onde est similaire à une dimension de la maille.

Sur la FIG. 8.5, on remarque que seul le graphène possède un niveau de Landau à énergie nulle. Dès que $\alpha \neq 0$, $E_n \neq 0$ pour tout n . À partir des niveaux de Landau, il est possible de mener la même analyse qu'avec les niveaux du graphène, à savoir répartir les états du spectre sans champ dans les niveaux de Landau (de dégénérescence $\frac{eB}{\hbar}$). Ce processus est montré sur la FIG. 8.6.

Sur la FIG. 8.6, sont tracés les spectres à champ nul et les niveaux de Landau pour le graphène (déjà vus dans le chapitre précédent, FIG. 7.8) et pour le $\alpha - \mathcal{T}_3$. Dans le cas du graphène ($\alpha = 0$), le niveau de Landau à énergie nulle revêt un rôle particulier car il fait augmenter l'énergie totale des états arrivant à énergie nulle. Bien qu'on puisse montrer que tous les autres niveaux de Landau font baisser l'énergie totale de leur tranche d'états associée, le comportement global est dominé par le niveau d'énergie nulle, ce qui résulte en une réponse diamagnétique. Lorsqu'on branche α en revanche, ce niveau va baisser en énergie jusqu'à atteindre la situation de la FIG. 8.6, et contribuer également à diminuer l'énergie totale du système. Ce raisonnement explique le changement de signe de χ_{orb} en fonction de α , et *a fortiori* à $\alpha = 1$.

1. On peut aussi les obtenir par un raisonnement semi-classique en utilisant les travaux de la Réf. [50] comme décrit dans l'annexe D.

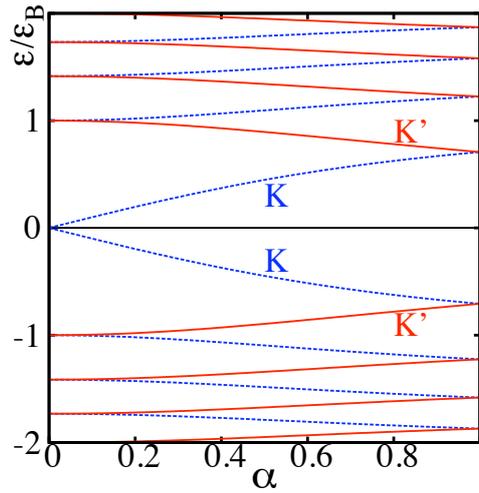


FIGURE 8.5 – Évolution des niveaux de Landau du réseau $\alpha - \mathcal{T}_3$ en fonction de α . Les deux vallées ne sont dégénérées qu'à $\alpha = 0$ et $\alpha = 1$.

Conclusion

Dans ce dernier chapitre, nous avons abordé les modèles à trois bandes, essentiellement de façon numérique. Grâce à un bon choix de réseau, nous avons obtenu un modèle fonction d'un paramètre α dont les bandes d'énergie ne dépendaient pas. Ce modèle présente une bande plate à $E = 0$, comme tous les modèles possédant une symétrie chirale. L'étude de la susceptibilité orbitale a révélé l'importance des effets interbandes sur cette susceptibilité, et modifier le paramètre permet d'observer une transition dia-/paramagnétique.

Il aurait été possible de regarder à nouveau chacun des systèmes semi-métalliques du CHAP. 7 en ajoutant un atome central, et nous aurions découvert de nouvelles propriétés. Piéchon et al. [116] étudie ces généralisations à trois bandes. Un des résultats est de montrer que malgré la diversité des densités d'états à champ nul, tous les modèles considérés subissent une transition dia-/paramagnétique à demi-remplissage.

Nous avons discuté dans le cas du graphène de la susceptibilité en tant que fonction du champ magnétique. Cette étude peut être menée dans le $\alpha - \mathcal{T}_3$ pour caractériser plus finement la transition observée [122].

8.2. GÉNÉRALISATION AU MODÈLE $\alpha - \mathcal{T}_3$

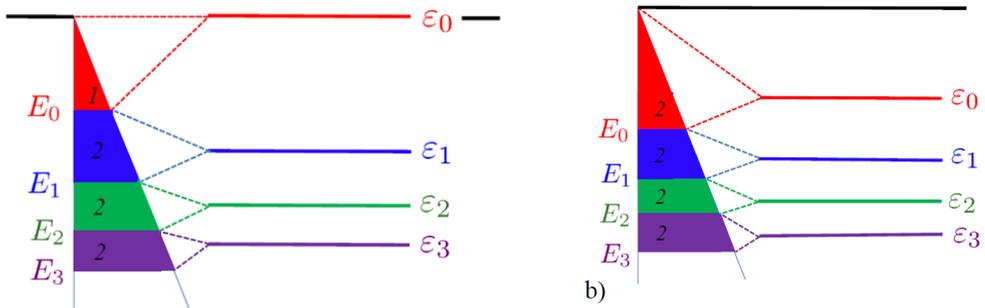


FIGURE 8.6 – Sur les deux figures, on montre comment le spectre à champ nul se répartit dans les niveaux de Landau ϵ_n à champ fini (graphène à gauche, et modèle \mathcal{T}_3 à droite). L'état à énergie nulle du graphène a une importance particulière, puisque c'est lui qui gouverne sa réponse diamagnétique. Son absence pour le modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$ rend le système paramagnétique.

CHAPITRE 8. SYSTÈMES À TROIS BANDES

Conclusion

À la lumière des résultats présentés dans ce manuscrit, revenons à la citation d'Ashcroft et Mermin de notre introduction, et répondons à deux questions : quelles sont les sources du magnétisme orbital ? Qu'est-ce qui caractérise le magnétisme orbital dans les cristaux ?

Si on écarte le magnétisme de couplage spin-orbite, le magnétisme orbital et le magnétisme de spin sont deux contributions découplées à la réponse magnétique totale, et la réponse de spin est simplement calculable à partir de la densité d'états du cristal (sans champ magnétique). Le magnétisme orbital est composé de la contribution des électrons de cœur (magnétisme localisé), et des électrons itinérants, qui ont été le sujet central de ce manuscrit. Nous avons vu, et cela était déjà connu de Peierls, que le champ magnétique intervient de trois façons différentes : il modifie les énergies des orbitales électroniques formant les fonctions de Bloch ; il renormalise les intégrales de saut entre atomes voisins car il change la forme des orbitales atomiques ; et enfin il donne une phase à ces intégrales de saut. Ces trois phénomènes apportent autant de contributions au magnétisme orbital itinérant, mais alors que les deux premières contributions se calculent bande par bande comme la susceptibilité de Pauli, la troisième contribution fait réellement intervenir des effets interbandes à travers la géométrie de l'espace des bandes du hamiltonien cristallin.

Grâce à une formulation générale en termes de fonctions de Green (CHAP. 6), une formulation géométrique pour les modèles à deux bandes (CHAP. 7), et en s'appuyant essentiellement sur les résultats précédents de Peierls, Blount, Fukuyama, ou plus récemment Gomez-Santos et Stauber, nous avons tenté d'illustrer les différentes facettes du magnétisme orbital itinérant :

- la susceptibilité orbitale n'est pas une propriété du seul niveau de Fermi, mais implique la mer de Fermi, c'est-à-dire la contribution de tous les électrons, y compris des bandes remplies ;
- en conséquence, un système avec des bandes d'énergie totalement remplies ou vides a génériquement une réponse magnétique non nulle ;
- la susceptibilité de bord de bande ne suit pas toujours le diamagnétisme de Landau, que ce soit sur des bords de bandes bordant un gap (effets interbandes comme dans le nitrure de bore) ou des bords extrêmes de la structure de bandes comme l'a montré l'étude des modèles à bandes plates ;
- le couplage interbandes peut induire une divergence de la susceptibilité orbitale au niveau d'un point de dégénérescence du spectre. On note que ce n'est pas une propriété exclusive de la susceptibilité interbandes, puisque la contribution de Peierls peut également diverger dans certains cas (par exemple à une singularité de van Hove de la densité d'états) ;

CHAPITRE 8. SYSTÈMES À TROIS BANDES

- le magnétisme orbital, s'exprimant à l'aide de quantités géométriques, ne dépend pas uniquement du spectre électronique à champ nul. La susceptibilité peut s'exprimer avec la combinaison du spectre à champ nul, et des quantités géométriques (courbure de Berry, moment orbital et tenseur métrique). Cette dépendance en les quantités géométriques est particulièrement flagrante dans le modèle $\alpha - \mathcal{T}_3$.

Au-delà de présenter les résultats de mon travail de thèse, l'objectif de ce manuscrit était également de donner un panorama général de l'avancée des recherches théoriques sur le magnétisme orbital au cours des 80 dernières années. Cela nous a permis de rappeler le travail remarquable de Peierls qui avait compris le magnétisme orbital des modèles liaisons fortes à une bande, ainsi que de noter que le travail de Blount qui contient déjà essentiellement une formulation semi-classique très similaire à des résultats publiés récemment, ajoutant ce qui manquait au travail de Peierls à savoir les effets interbandes.

Bien sûr, ces résultats lèvent de nombreuses questions qui mériteraient d'approfondir le travail initié dans ce manuscrit :

- Si le magnétisme de spin ne donne qu'une contribution triviale puisque proportionnelle à la densité d'états à champ nul, obtenir la réponse magnétique totale doit passer par l'étude du couplage spin-orbite, et de l'intégration de cet effet dans la susceptibilité orbitale. L'effet conjugué du magnétisme de spin-orbite et du couplage Zeeman pourrait en particulier apporter des phénomènes magnétiques nouveaux, comme des bords de bande paramagnétiques.
- Ce manuscrit a donné de nombreux exemples de modèles à deux bandes, présentant isolants ou semi-métalliques. Nous avons aussi présenté un modèle à trois bandes qui permettait d'illustrer la dépendance géométrique de la susceptibilité ; cependant, la formule de la susceptibilité orbitale faisant intervenir quatre fonctions de Green, on s'attend à ce que les modèles à quatre bandes puissent présenter des propriétés nouvelles. *A minima*, il serait possible d'étudier les corrections apportées par la prise en compte de bandes voisines dans les modèles décrits au CHAP. 7. La Réf. [58] donne la susceptibilité du graphène avec un modèle à huit bandes ; comme on peut s'y attendre, l'ajout des contributions des autres bandes ne change pas qualitativement le résultat obtenu, et ce à cause de l'éloignement en énergie des autres bandes qui limite l'intensité des couplages interbandes.
- Nous n'avons pas parlé de l'effet des interactions électroniques sur la réponse magnétique, et ce champ difficile reste peu exploré à ce jour, à l'exception de résultats sur les fermions de Dirac [119] suggérant l'existence d'un paramagnétisme dans le voisinage du dopage nul mais en négligeant les effets du réseau.
- Nous avons étudié principalement des modèles bidimensionnels parfaits. Mais expérimentalement, les cristaux présentent toujours un certain nombre de défauts, qui peuvent modifier drastiquement les caractéristiques électroniques de transport des cristaux. Comment la susceptibilité orbitale itinérante serait-elle modifiée par la présence de fort désordre, en particulier sur des systèmes à basse dimension ? de localisation forte ? La méthode numérique basée sur le papillon de Hofstadter serait un outil de choix pour aborder ces problématiques.

Annexe A

Formules d'intégration de la fonction de Fermi

Une formule très utile pour calculer les intégrales sur l'énergie dans la théorie de perturbation est

$$\Im \int \frac{n_F(E)}{(E-\alpha)^i} dE = -\frac{\pi}{(i-1)!} n_F^{(i-1)}(\alpha). \quad (\text{A.1})$$

Celle-ci se montre simplement par récurrence, tous les termes intégrés étant nuls. En effet :

$$\int \frac{n_F(E)}{(E-\alpha)^i} dE = \frac{1}{i} \int \frac{n_F(E)}{(E-\alpha)^{i-1}} dE \quad (\text{A.2})$$

$$= \frac{1}{i!} \int \frac{n_F^{(i)}(E)}{E-\alpha} dE, \quad (\text{A.3})$$

puis on utilise la définition de la partie principale de Cauchy pour la fonction inverse :

$$\frac{1}{E-\alpha} = \mathcal{P} \frac{1}{E-\alpha} - i\pi\delta(E-\alpha). \quad (\text{A.4})$$

On en déduit la formule recherchée :

$$\boxed{\Im \int \frac{n_F(E)}{(E-\alpha)^i} dE = -\frac{\pi}{(i-1)!} n_F^{(i-1)}(\alpha)}. \quad (\text{A.5})$$

ANNEXE A. FORMULES D'INTÉGRATION DE LA FONCTION DE FERMI

Annexe B

Expression de l'aimantation orbitale

B.1 Position du problème

Partons de l'expression (6.26) de l'aimantation orbitale dérivée avec la théorie de perturbation :

$$M_0 = \frac{ie k_B T}{2\hbar\pi S} \Im \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\mu)/k_B T} \right) \text{Tr} \{ g h^x g^y - g h^y g^x \} dE. \quad (\text{B.1})$$

On peut écrire la fonction de Green g dans la base des $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$:

$$g(E) = \sum_n \int \frac{|u_{n\mathbf{k}}\rangle \langle u_{n\mathbf{k}}|}{E - E_{n\mathbf{k}}} \frac{d^2k}{4\pi^2}. \quad (\text{B.2})$$

De plus, rappelons les expressions de la courbure de Berry et de l'aimantation orbitale :

$$\Omega_{n\mathbf{k}} = i \langle \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} | \times | \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle = i (\langle \partial_x u_{n\mathbf{k}} | \partial_y u_{n\mathbf{k}} \rangle - \langle \partial_y u_{n\mathbf{k}} | \partial_x u_{n\mathbf{k}} \rangle) \mathbf{e}_z \quad (\text{B.3})$$

$$= i \sum_{m \neq n} \left\langle u_{n\mathbf{k}} \left| \frac{h^x \mathcal{P}_{m\mathbf{k}} h^y - h^y \mathcal{P}_{m\mathbf{k}} h^x}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})^2} \right| u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \mathbf{e}_z, \quad (\text{B.4})$$

et

$$m_{n\mathbf{k}} = -\frac{ie}{2\hbar} \langle \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} | \times (h - E_{n\mathbf{k}}) | \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{B.5})$$

$$= -\frac{ie}{2\hbar} (\langle \partial_x u_{n\mathbf{k}} | (h - E_{n\mathbf{k}}) | \partial_y u_{n\mathbf{k}} \rangle - \langle \partial_y u_{n\mathbf{k}} | (h - E_{n\mathbf{k}}) | \partial_x u_{n\mathbf{k}} \rangle) \mathbf{e}_z \quad (\text{B.6})$$

$$= \frac{ie}{2\hbar} \sum_{m \neq n} \left\langle u_{n\mathbf{k}} \left| \frac{h^x \mathcal{P}_{m\mathbf{k}} h^y - h^y \mathcal{P}_{m\mathbf{k}} h^x}{E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}}} \right| u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \mathbf{e}_z, \quad (\text{B.7})$$

avec $\mathcal{P}_{n\mathbf{k}} = |u_{n\mathbf{k}}\rangle \langle u_{n\mathbf{k}}|$ le projecteur sur l'état $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$.

B.2 Calcul de la trace

Calculons le premier morceau de la trace de l'équation (6.27) en introduisant des relations de fermeture :

$$\text{Tr } gh^x gh^y g = \sum_n \int \frac{d^2k}{4\pi^2} \left\langle u_{n\mathbf{k}} \left| \sum_m \int \frac{|u_{m\mathbf{k}_1}\rangle \langle u_{m\mathbf{k}_1}|}{(E - E_{m\mathbf{k}_1})^2} \frac{d^2k_1}{4\pi^2} h^x \sum_l \int \frac{|u_{l\mathbf{k}_2}\rangle \langle u_{l\mathbf{k}_2}|}{E - E_{l\mathbf{k}_2}} \frac{d^2k_2}{4\pi^2} \right| h^y u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \quad (\text{B.8})$$

Comme h^i et g sont diagonaux en \mathbf{k} , et g diagonal en n , l'expression se simplifie :

$$\text{Tr } gh^x gh^y g = \sum_{n,l} \int \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | h^x | u_{l\mathbf{k}} \rangle \langle u_{l\mathbf{k}} | h^y | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E - E_{n\mathbf{k}})^2 (E - E_{l\mathbf{k}})} \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{B.9})$$

d'où

$$\text{Tr } \{gh^x gh^y g - gh^y gh^x g\} = \sum_{n,l} \int \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | h^x \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^y - h^y \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^x | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E - E_{n\mathbf{k}})^2 (E - E_{l\mathbf{k}})} \frac{d^2k}{4\pi^2}. \quad (\text{B.10})$$

Ainsi,

$$M_0(\mu) = \frac{k_B T}{2\pi} \Im m \int \ln \left(1 + e^{-\beta(E-\mu)} \right) \sum_{n,l \neq n} \frac{ie}{\hbar} \int \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | h^x \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^y - h^y \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^x | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E - E_{n\mathbf{k}})^2 (E - E_{l\mathbf{k}})} \frac{d^2k}{4\pi^2} dE. \quad (\text{B.11})$$

Le terme $l = n$ étant nul, on peut l'enlever sans changer l'expression. Il s'agit de calculer la partie imaginaire et l'intégrale sur E de l'expression (B.11). Pour cela, on écrit

$$\frac{1}{(E - E_{n\mathbf{k}})^2 (E - E_{l\mathbf{k}})} = \frac{1}{E_{n\mathbf{k}} - E_{l\mathbf{k}}} \frac{1}{(E - E_{n\mathbf{k}})^2} - \frac{1}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{l\mathbf{k}})^2} \frac{1}{E - E_{n\mathbf{k}}} + \frac{1}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{l\mathbf{k}})^2} \frac{1}{E - E_{l\mathbf{k}}}. \quad (\text{B.12})$$

En injectant (B.12) dans (B.11), on obtient trois termes : le premier fait apparaître le moment magnétique, et le second la courbure de Berry :

$$M_0(\mu) = \frac{e k_B T}{\hbar 2\pi} \Im m \int \ln \left(1 + e^{-\beta(E-\mu)} \right) \int \sum_n \left\{ \frac{2\hbar}{e} \frac{m_{n\mathbf{k}}}{(E - E_{n\mathbf{k}})^2} - \frac{\Omega_{n\mathbf{k}}}{(E - E_{n\mathbf{k}})} \right. \\ \left. + i \sum_{l \neq n} \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | h^x \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^y - h^y \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^x | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{l\mathbf{k}})^2 (E - E_{l\mathbf{k}})} \right\} \frac{d^2k}{4\pi^2} dE. \quad (\text{B.13})$$

Reste à changer le nom des variables $n \rightarrow l$ et $l \rightarrow n$ dans le troisième terme, puis l'ordre des sommes ; en réorganisant les termes, on obtient :

$$i \sum_{n,l \neq n} \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | h^x \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^y - h^y \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^x | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{l\mathbf{k}})^2 (E - E_{l\mathbf{k}})} = -i \sum_{n,l \neq n} \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | h^x \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^y - h^y \mathcal{P}_{l\mathbf{k}} h^x | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{l\mathbf{k}})^2 (E - E_{n\mathbf{k}})} = -\frac{\Omega_{n\mathbf{k}}}{(E - E_{n\mathbf{k}})}. \quad (\text{B.14})$$

On peut calculer l'intégrale sur E avec (A.1) pour obtenir

$$M_0(\mu) = -\frac{e k_B T}{\hbar 2} \sum_n \int \left[(-\beta) n_F(E_{n\mathbf{k}}) \frac{2\hbar}{e} m_{n\mathbf{k}} - 2 \ln \left(1 + e^{-\beta(E_{n\mathbf{k}}-\mu)} \right) \Omega_{n\mathbf{k}} \right] \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{B.15})$$

$$= \sum_n \int \left[n_F(E_{n\mathbf{k}}) m_{n\mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar \beta} \ln \left(1 + e^{-\beta(E_{n\mathbf{k}}-\mu)} \right) \Omega_{n\mathbf{k}} \right] \frac{d^2k}{4\pi^2}. \quad (\text{B.16})$$

qui est identique à la formule présentée dans [144].

Annexe C

Dérivation de la formule à 2 bandes

C.1 Quelques éléments de matrice

On donne ici quelques relations utiles pour dériver explicitement la formule à deux bandes.

Relations géométriques sur les $|u_{nk}\rangle$

On commence par rappeler les relations générales reliées à la géométrie du fibré de Bloch : l'orthogonalité des fonctions appartenant à différentes bandes (des vecteurs propres d'un même hamiltonien)

$$\langle u_{nk} | u_{mk} \rangle = \delta_{mn}. \quad (\text{C.1})$$

Les $|u_{nk}\rangle$ ne sont cependant pas orthogonaux en k puisqu'ils ne sont pas vecteurs propres des mêmes opérateurs :

$$\begin{aligned} \langle u_{nk} | i\partial_k u_{nk} \rangle &= \mathcal{A}_{nk} \\ \langle u_{nk} | D_j u_{nk} \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

puisque

$$|D u_{nk}\rangle = |\partial_k u_{nk}\rangle + i\mathcal{A}_{nk} |u_{nk}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{mk} | \partial_k |u_{nk}\rangle}{E_{mk} - E_{nk}} |u_{mk}\rangle. \quad (\text{C.3})$$

De plus, par définition :

$$\langle D_i u_{nk} | D_j u_{nk} \rangle = T_{nk}^{ij} = g_{ij} - \frac{i}{2} \varepsilon^{ijp} \Omega_{k,p}. \quad (\text{C.4})$$

Relations supplémentaires à deux bandes

Plus spécifiquement, il y a quelques relations très utiles pour les modèles à deux bandes, où les quantités géométriques sont toutes reliées. Si $\alpha = \pm 1$ est l'indice de bande, $\Omega_{\alpha k} = \alpha \Omega_k$, $g_{\alpha k, ij} = g_{ij}$ (où la dépendance en k est implicite). On a :

$$\begin{aligned} m_{\alpha k} &= \alpha E_k \Omega_k \\ 4(g_{xx}g_{yy} - (g_{xy})^2) &= (\Omega_k)^2 \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

ANNEXE C. DÉRIVATION DE LA FORMULE À 2 BANDES

Avec un hamiltonien à deux bandes $h = E_{0\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, on a également

$$\begin{aligned} \langle u_{\alpha\mathbf{k}} | h | u_{\alpha'\mathbf{k}} \rangle &= \delta_{\alpha\alpha'} E_{\alpha\mathbf{k}} \\ \langle u_{\alpha\mathbf{k}} | h^i | u_{-\alpha\mathbf{k}} \rangle \langle u_{-\alpha\mathbf{k}} | h^j | u_{\alpha\mathbf{k}} \rangle &= \mathbf{n}^i \cdot \mathbf{n}^j = 4g_{ij} \\ \langle u_{\alpha\mathbf{k}} | h^{ij} | u_{\alpha\mathbf{k}} \rangle &= E_{\alpha\mathbf{k}}^{ij} - 4\alpha E_{\mathbf{k}} g_{ij} \\ \langle D_i u_{\alpha\mathbf{k}} | h^{kl} | D_j u_{\alpha\mathbf{k}} \rangle &= g_{ij} (E_{-\alpha}^{kl} + 4\alpha E_{\mathbf{k}} g_{kl}) \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

C.2 Dérivation de la formule géométrique à deux bandes

Cette dérivation est essentiellement extraite du supplément de la Réf. [117]. On présente la dérivation des quatre contributions χ_{LP} , χ_{Ω} , χ_g et $\tilde{\chi}_g$. Commençons par réécrire la susceptibilité en termes de fonctions de Green (6.32) sous la forme :

$$\chi_{\text{orb}} = -\frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \frac{\Im m}{\pi S} \int_{-\infty}^{\infty} n_{\text{F}}(E) \iint_{\text{BZ}} (U(\mathbf{k}, E) + V(\mathbf{k}, E)) \frac{d^2 k}{4\pi^2} dE. \quad (\text{C.7})$$

avec

$$\begin{aligned} U(\mathbf{k}, E) &= \text{tr} (gh^{xx}gh^{yy} - gh^{xy}gh^{xy}), \\ V(\mathbf{k}, E) &= 2\text{tr} ((gh^xgh^y - gh^ygh^x)^2). \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

En utilisant des étapes identiques à celles décrites dans l'annexe D de la Réf. [123], on obtient

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 U_{\alpha}^{(1)} + g_{\alpha} g_{-\alpha} U^{(2)}, \\ V &= \sum_{\alpha} g_{\alpha}^3 g_{-\alpha} V_{\alpha}^{(1)} + g_{\alpha}^2 g_{-\alpha}^2 V^{(2)} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

avec $g_{\alpha}(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{E - E_{\alpha\mathbf{k}}}$ et où

$$\begin{aligned} U_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{k}) &= (E_{\alpha}^{xx} E_{\alpha}^{yy} - E_{\alpha}^{xy} E_{\alpha}^{xy}) + 4(E_{\mathbf{k}}^2 \Omega^2 - \alpha E_{\mathbf{k}} g^{ij} E_{\alpha}^{ij}), \\ U^{(2)}(\mathbf{k}) &= -4(E_{\mathbf{k}}^2 \Omega^2 + \frac{1}{2} \partial_{ij} (E_{\mathbf{k}}^2 g^{ij}) - E_{\mathbf{k}} g^{ij} E^{ij}), \\ V_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{k}) &= -16\epsilon^2 g^{ij} E_{\alpha}^i E_{\alpha}^j, \\ V^{(2)}(\mathbf{k}) &= -16E_{\mathbf{k}}^2 (2E_{\mathbf{k}}^2 \Omega^2 - g^{ij} E_{\alpha}^i E_{-\alpha}^j), \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

où on a choisi g^{ij} comme l'inverse de g_{ij} multiplié par $\det g$. On choisit cette définition dans cette annexe pour des raisons de longueur ; dans tout le corps du manuscrit g^{ij} est l'inverse du tenseur métrique.

À partir de là, en utilisant l'identité $\partial_i (g_{\alpha}^n) = n g_{\alpha}^{n+1} E_{\alpha}^i$ et en intégrant par parties, on trouve :

$$\int_{\text{BZ}} \frac{d^2 k}{4\pi^2} \sum_{\alpha} g_{\alpha}^3 g_{-\alpha} V_{\alpha}^{(1)} = \int_{\text{BZ}} \frac{d^2 k}{4\pi^2} \sum_{\alpha} 8[g_{\alpha}^2 g_{-\alpha}^2 (\epsilon^2 g^{ij} E_{\alpha}^i E_{-\alpha}^j) + g_{\alpha}^2 g_{-\alpha} (\epsilon^2 g^{ij} E_{\alpha}^{ij}) - \frac{1}{2} g_{\alpha} g_{-\alpha} \partial_{ij} (E_{\mathbf{k}}^2 g^{ij})]. \quad (\text{C.11})$$

En utilisant maintenant les identités suivantes

$$\begin{aligned} g_{\alpha} g_{-\alpha} &= \frac{\alpha}{2E_{\mathbf{k}}} (g_{\alpha} - g_{-\alpha}), \\ g_{\alpha}^2 g_{-\alpha}^2 &= \frac{1}{4E_{\mathbf{k}}^2} (g_{\alpha}^2 + g_{-\alpha}^2 - 2g_{\alpha} g_{-\alpha}), \\ g_{\alpha}^2 g_{-\alpha} &= \frac{\alpha}{2E_{\mathbf{k}}} (g_{\alpha}^2 - g_{\alpha} g_{-\alpha}), \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

il est possible de réécrire (C.9) comme

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 U_{\alpha}^{(1)} + \alpha \frac{g_{\alpha}}{E_{\mathbf{k}}} U^{(2)}, \\ V &= \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 \tilde{V}_{\alpha}^{(1)} + \alpha \frac{g_{\alpha}}{E_{\mathbf{k}}} \tilde{V}^{(2)} \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

C.3. EXPRESSIONS EXPLICITES DES CONTRIBUTIONS DANS LA SUSCEPTIBILITÉ À DEUX BANDES

où

$$\begin{aligned}\tilde{V}_\alpha^{(1)}(\mathbf{k}) &= 4(-4E_{\mathbf{k}}^2\Omega^2 + 3g^{ij}E_\alpha^i E_{-\alpha}^j + \alpha E_{\mathbf{k}} g^{ij} E_\alpha^{ij}), \\ \tilde{V}_\alpha^{(2)}(\mathbf{k}) &= -4(-4E_{\mathbf{k}}^2\Omega^2 + 3g^{ij}E_\alpha^i E_{-\alpha}^j + E_{\mathbf{k}} g^{ij} E^{ij} + \partial_{ij}(E_{\mathbf{k}}^2 g^{ij})).\end{aligned}\quad (\text{C.14})$$

Sommer U et V donne

$$\begin{aligned}\frac{U+V}{12} &= \sum_\alpha g_\alpha^2 \left[\frac{1}{12}(E_\alpha^{xx} E_\alpha^{yy} - E_\alpha^{xy} E_\alpha^{yx}) - E_{\mathbf{k}}^2 \Omega^2 + g^{ij} E_\alpha^i E_{-\alpha}^j \right] \\ &\quad + \alpha \frac{g_\alpha}{E_{\mathbf{k}}} [E_{\mathbf{k}}^2 \Omega^2 - g^{ij} E_\alpha^i E_{-\alpha}^j - \frac{1}{2} \partial_{ij}(E_{\mathbf{k}}^2 g^{ij})].\end{aligned}\quad (\text{C.15})$$

L'étape ultime consiste à calculer l'intégrale explicite sur la variable E , en utilisant (A.1)

Les différents termes qui apparaissent dans (C.15) donnent plusieurs contributions à la susceptibilité :

$$\chi_{\text{orb}} = \chi_{\text{LP}} + \chi_\Omega + \chi_g + \tilde{\chi}_g, \quad (\text{C.16})$$

où les expressions sont données dans le texte.

C.3 Expressions explicites des contributions dans la susceptibilité à deux bandes

L'expression de la susceptibilité orbitale à deux bandes peut être écrite de façon moins concise, mais plus pratique pour les calculs. Nous regroupons ici les expressions utilisées pour chacun des termes. Ces expressions permettent de plus de faire le lien avec les formulations alternatives (semi-classique entre autre).

C.3.1 Terme de courbure de Berry

$$\chi_\Omega = \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} \left(-n'_F(E_{\alpha\mathbf{k}}) + \alpha \frac{n_F(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} \right) m_{\alpha\mathbf{k}}^2 \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{C.17})$$

$$= \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} \left(-n'_F(E_{\alpha\mathbf{k}}) + \alpha \frac{n_F(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} \right) E_{\mathbf{k}}^2 \frac{[(\mathbf{n}^x \wedge \mathbf{n}^y) \cdot \mathbf{n}]^2}{4} \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{C.18})$$

C.3.2 Terme de tenseur géométrique

$$\chi_g = \frac{\mu_0 e^2}{2\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} -\alpha \frac{n_F(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} \partial_j (E_{\mathbf{k}}^2 \partial_i (g^{ij})) \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{C.19})$$

c'est-à-dire

$$\begin{aligned}\chi_g &= \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} -\frac{\alpha n_F(E_{\alpha\mathbf{k}})}{2} \left[E^x (\partial_x g_{yy} - \partial_y g_{xy}) + E^y (\partial_y g_{xx} - \partial_x g_{xy}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{E_{\mathbf{k}}}{4} (\mathbf{n}^{xy} \cdot \mathbf{n}^{xy} - \mathbf{n}^{xx} \cdot \mathbf{n}^{yy}) \right] \frac{d^2k}{4\pi^2}\end{aligned}\quad (\text{C.20})$$

C.3.3 Terme de brisure de symétrie particule-trou

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{g}} = \tilde{\chi}_{\mathbf{g}}^1 + \tilde{\chi}_{\mathbf{g}}^2 \quad (\text{C.21})$$

où

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{g}}^1 = \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} -\alpha \frac{n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} (g^{ij} \partial_i E_0 \partial_j E_0) \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{C.22})$$

$$= \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} \left(n'_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) - \alpha \frac{n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} \right) \left((E_{0\mathbf{k}}^x)^2 g_{yy} + (E_{0\mathbf{k}}^y)^2 g_{xx} - 2E_{0\mathbf{k}}^x E_{0\mathbf{k}}^y g_{xy} \right) \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{C.23})$$

et

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{g}}^2 = \frac{\mu_0 e^2}{\hbar^2} \sum_{\alpha=\pm 1} \iint_{\text{BZ}} \alpha n'_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) (E_{0\mathbf{k}}^x E^x g_{yy} + E_{0\mathbf{k}}^y E^y g_{xx} - (E_{0\mathbf{k}}^y E^x + E_{0\mathbf{k}}^x E^y) g_{xy}) \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{C.24})$$

Annexe D

Magnétisme semi-classique et effets géométriques

D.1 Court historique des approches semi-classiques

Les effets de magnétisme orbital et plus généralement les effets de projection sur une bande peuvent être étudiés d'un point de vue différent mais très riche : celui de l'étude semi-classique du mouvement d'un paquet d'ondes de Bloch restreint à une bande, mais en présence des autres bandes. Les équations historiques de Bloch-Peierls

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_{nk} = \frac{1}{\hbar} \partial_{\mathbf{k}} E_{nk} \quad (\text{D.1})$$

$$\hbar \dot{\mathbf{\Pi}} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v}_{nk} \wedge \mathbf{B}), \quad (\text{D.2})$$

détaillées par exemple dans la Réf. [6], ne capturent pas certains effets géométriques de phase de Berry.

Une fois de plus, c'est à Peierls [114] que l'on doit le début du magnétisme semi-classique, avec sa substitution continue, qui donne un hamiltonien effectif à une bande en présence d'un champ magnétique. La recherche d'un tel hamiltonien a été le moteur de nombreuses recherches de physiciens tels que Slater, Luttinger, Kohn, Adams, Blount, Roth, Karplus, Wannier, etc., on consultera la revue [141] et les références 1 à 25 sur ce sujet. La première approche rigoureuse de recherche d'un hamiltonien effectif est basée sur l'utilisation des fonctions de Wannier ; une théorie basée sur l'approximation WKB a aussi été développée, en particulier pour étudier le comportement semi-classique des équations de Harper.

L'hypothèse fondamentale, commune à toutes les approches, est qu'un paquet d'ondes va être forcé de rester sur une bande : c'est l'hypothèse d'adiabaticité. L'interdiction de transitions Landau-Zener et donc la projection de la dynamique sur une seule bande va créer des termes nouveaux dans les équations semi-classiques, basés sur les quantités géométriques déjà introduites. En présence de champ magnétique ou électrique, cette hypothèse est respectée si l'énergie séparant cette bande des autres est grande devant $\hbar\omega_c = \hbar eB/m$ et eEa respectivement, c'est-à-dire en évitant les phénomènes de ruptures magnétique et électrique.

L'approche que nous allons développer ici est basée sur une méthode variationnelle dépendante du temps développée par Chang et Niu [141], où l'on cherche à extrémiser une action dépendant des

ANNEXE D. MAGNÉTISME SEMI-CLASSIQUE ET EFFETS GÉOMÉTRIQUES

paramètres d'un paquet d'ondes. Nous ne ferons pas les calculs détaillés, nous renvoyons le lecteur vers la Réf. [141] pour plus de détails.

D.2 Définitions

On considère un électron de Bloch sans spin, restreint à se mouvoir dans la n^e bande. Un paquet d'ondes est une superposition d'états propres du hamiltonien localisé dans l'espace réel et l'espace réciproque. Si r_c est la position moyenne de ce paquet d'ondes, l'idée de l'approximation semi-classique va être de développer le hamiltonien vu par le paquet d'ondes près de cette position moyenne :

$$\hat{H}(\hat{r}, \hat{P}) = \hat{H}^c(\hat{P}) + \frac{1}{2} \left((\hat{r} - r_c) \cdot \partial_r \hat{H}(r_c) + \partial_r \hat{H}(r_c) \cdot (\hat{r} - r_c) \right) + \mathcal{O}((\hat{r} - r_c)^2) \quad (\text{D.3})$$

où $\hat{H}^c(\hat{P}, B) = \hat{H}(r_c, \hat{P})$ est appelé *hamiltonien local*. Soient $|\psi_{n\mathbf{k}}^c\rangle$ les états propres de \hat{H}^c , de valeurs propres $E_{n\mathbf{k}}^c$. Soit $|\Psi^c\rangle$ l'état quantique du paquet d'ondes, on peut l'écrire dans la base des fonctions propres :

$$|\Psi^c\rangle = \int w^c(\mathbf{k}, t) |\psi_{n\mathbf{k}}^c(\mathbf{k})\rangle d^3k. \quad (\text{D.4})$$

Pour que la dénomination ait un sens, on suppose que la fonction $w^c(\mathbf{k}, t)$ reste localisée dans l'espace réciproque, et on définit le vecteur d'onde typique \mathbf{k}_c par

$$\mathbf{k}_c(t) = \int \mathbf{k} |w^c(\mathbf{k}, t)|^2 d^3k. \quad (\text{D.5})$$

Si l'on pose $w^c(\mathbf{k}) = |w^c(\mathbf{k})|e^{-i\gamma^c(\mathbf{k})}$, la position moyenne du paquet d'ondes doit vérifier la relation de cohérence suivante :

$$\mathbf{r}_c = \langle \Psi^c | \hat{r} | \Psi^c \rangle = \int |w^c(\mathbf{k})|^2 [\partial_{\mathbf{k}} \gamma^c(\mathbf{k}) + \mathcal{A}_n(\mathbf{k})] d^3k \approx \partial_{\mathbf{k}} \gamma^c(\mathbf{k}_c) + \mathcal{A}_n(\mathbf{k}_c). \quad (\text{D.6})$$

Cette relation implicite est une contrainte, dont il faudra tenir compte dans une formulation lagrangienne où l'on souhaiterait voir $r_c(t)$ et $\mathbf{k}_c(t)$ comme deux fonctions indépendantes. Attention, r_c dépend de n , et ne correspond donc pas à la position canonique de l'électron. On l'appelle *position invariante de jauge*, ou position projetée sur la n^e bande.

D.3 Énergie d'un paquet d'ondes dans un champ électromagnétique

On cherche à calculer l'énergie $E(r_c, \mathbf{k}_c)$ d'un paquet d'ondes dans un champ électromagnétique. De façon générale, le hamiltonien en champ magnétique est obtenu par le couplage minimal sur le hamiltonien \hat{H}_0 en l'absence de champ magnétique

$$\hat{H}(\hat{r}, \hat{P}, B) = \hat{H}_0(\hat{r}, \hat{P} + e\mathbf{A}(\hat{r})) - eV(\hat{r}) \quad (\text{D.7})$$

avec $B = \text{rot } A$ et $E = -\text{grad } V$. Le paquet d'ondes ayant une extension spatiale finie, il n'est cependant pas déterminé uniquement par

$$\hat{H}^c = \hat{H}(r_c, \hat{P}, B) = \hat{H}_0(r_c, \hat{P} + e\mathbf{A}(r_c)) - eV(r_c) \quad (\text{D.8})$$

D.4. LAGRANGIEN EFFECTIF DU PAQUET D'ONDES

mais également par les variations de $\hat{\mathcal{H}}$ proches de \mathbf{r}_c . On peut donc faire un développement limité en $\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c$:

$$\hat{\mathcal{H}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{P}}, B) \approx \hat{\mathcal{H}}^c(\hat{\mathbf{P}}, B) + \hat{\mathcal{H}}_1^c(\hat{\mathbf{P}}, B) + \hat{\mathcal{H}}_2^c(\hat{\mathbf{P}}, B) + \dots \quad (\text{D.9})$$

À l'ordre 1, pour des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} uniformes, on obtient l'énergie d'un paquet d'ondes

$$\tilde{E}(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c) = \langle \Psi^c | \hat{\mathcal{H}} | \Psi^c \rangle \quad (\text{D.10})$$

$$\approx \langle \Psi^c | \hat{\mathcal{H}}^c | \Psi^c \rangle + e \langle \Psi^c | \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c | \Psi^c \rangle \cdot \mathbf{E} + \frac{e}{2m} \langle \Psi^c | (\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c) \wedge (\hat{\mathbf{P}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_c)) | \Psi^c \rangle \cdot \mathbf{B} \quad (\text{D.11})$$

$$= E_0(\mathbf{\Pi}_c) - eV(\mathbf{r}_c) + \frac{e}{2m} \mathbf{L}(\mathbf{\Pi}_c) \cdot \mathbf{B} \quad (\text{D.12})$$

où l'on a défini le *moment invariant de jauge* $\mathbf{\Pi}_c = \mathbf{k}_c + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}_c)$, et le moment cinétique orbital du paquet d'ondes

$$\mathbf{L}(\mathbf{k}) = \langle \Psi^c | \hat{\mathbf{L}} | \Psi^c \rangle = \langle \Psi^c | (\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c) \wedge \hat{\mathbf{P}} | \Psi^c \rangle. \quad (\text{D.13})$$

Le premier terme de (D.12) consiste en la substitution de Peierls, le deuxième est l'abaissement de l'énergie par le champ électrique en \mathbf{r}_c , et le dernier provient de l'existence d'un moment cinétique du paquet d'ondes dû à son extension spatiale finie et son éventuelle rotation. On remarque qu'à l'ordre 1, le champ \mathbf{E} n'apporte aucune contribution supplémentaire puisque l'élément de matrice est nul par définition.

L'énergie d'un paquet d'ondes s'écrit finalement

$$\tilde{E}(\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c) = E_0(\mathbf{\Pi}_c) - eV(\mathbf{r}_c) - \mathbf{m}_n(\mathbf{\Pi}_c) \cdot \mathbf{B} \quad (\text{D.14})$$

où $\mathbf{m}_n(\mathbf{\Pi}_c)$ est le moment magnétique associé au paquet d'ondes.¹ On montre que celui-ci peut s'écrire :

$$\mathbf{m}_n^\ell(\mathbf{\Pi}_c) = \frac{-e}{2m} \mathbf{L}(\mathbf{\Pi}_c) = -\frac{ie}{2\hbar} \varepsilon^{ij\ell} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_i \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \partial_j \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}}}. \quad (\text{D.15})$$

Cette interprétation physique justifie l'introduction un peu abstraite présentée dans le CHAP. 2.

D.4 Lagrangien effectif du paquet d'ondes

Dans le cas statique, résoudre un problème par une méthode variationnelle revient à trouver les paramètres \mathbf{r}_c et \mathbf{k}_c qui minimisent l'énergie $\langle \Psi^c | \hat{\mathcal{H}} | \Psi^c \rangle$. Afin de trouver l'évolution des fonctions $\mathbf{r}_c(t)$ et $\mathbf{k}_c(t)$, on passe par une approche lagrangienne² en définissant

$$L_{\text{eff}}(t, \mathbf{r}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \mathbf{k}_c, \dot{\mathbf{k}}_c) = \left\langle \Psi^c \left| i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{\mathcal{H}} \right| \Psi^c \right\rangle \quad (\text{D.16})$$

et en cherchant à minimiser l'action $S_{\text{eff}} = \int L_{\text{eff}} dt$. Cette fois-ci, on veut minimiser une fonctionnelle des fonctions $\mathbf{r}_c(t)$ et $\mathbf{k}_c(t)$.

1. Si on voulait re-quantifier le problème, l'énergie E deviendrait le hamiltonien effectif à une bande. On note que celui-ci dépasse l'approximation de Peierls, puisqu'il contient le terme de moment magnétique orbital (voir par exemple le Landau et Lifschitz vol. 9 équation 59.9 [79])

2. Dans les travaux numériques, cette approche est connue sous le nom de Dirac-Frenkel.

ANNEXE D. MAGNÉTISME SEMI-CLASSIQUE ET EFFETS GÉOMÉTRIQUES

Le second terme de (D.16) a été calculé dans le paragraphe précédent, et on montre que :

$$\left\langle \Psi^c \left| i\hbar \frac{d}{dt} \right| \Psi^c \right\rangle = \hbar \left\langle u_{nk} \left| \frac{du_{nk}}{dt} \right. \right\rangle + \hbar \mathbf{k}_c \cdot \dot{\mathbf{r}}_c = \hbar \dot{\mathbf{\Pi}}_c \cdot \mathcal{A}_n(\mathbf{\Pi}_c) + \hbar \mathbf{k}_c \cdot \dot{\mathbf{r}}_c. \quad (\text{D.17})$$

Cette expression prend en compte la contrainte (D.6).

Le lagrangien effectif s'écrit

$$L_{\text{eff}}(t, \mathbf{r}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \mathbf{k}_c, \dot{\mathbf{k}}_c) = \hbar \dot{\mathbf{\Pi}}_c \cdot \mathcal{A}_n(\mathbf{\Pi}_c) + \hbar \mathbf{k}_c \cdot \dot{\mathbf{r}}_c - E_0(\mathbf{\Pi}_c) - eV(\mathbf{r}_c) + \mathbf{m}_n(\mathbf{\Pi}_c) \cdot \mathbf{B} \quad (\text{D.18})$$

Pour un champ magnétique uniforme, $\mathbf{\Pi}_c$ est une fonction affine de \mathbf{r}_c , et on peut faire le changement de variable $(\mathbf{k}_c, \dot{\mathbf{k}}_c) \rightarrow (\mathbf{\Pi}_c, \dot{\mathbf{\Pi}}_c)$ dans le lagrangien sans changer la forme des équations d'Euler-Lagrange. Finalement :

$$L_{\text{eff}}(t, \mathbf{r}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \mathbf{\Pi}_c, \dot{\mathbf{\Pi}}_c) = \hbar \dot{\mathbf{\Pi}}_c \cdot \mathcal{A}_n(\mathbf{\Pi}_c) + (\hbar \mathbf{\Pi}_c - e\mathbf{A}(\mathbf{r}_c)) \cdot \dot{\mathbf{r}}_c - E_0(\mathbf{\Pi}_c) - eV(\mathbf{r}_c) + \mathbf{m}_n(\mathbf{\Pi}_c) \cdot \mathbf{B} \quad (\text{D.19})$$

D.5 Équations du mouvement semi-classiques à l'ordre 1

À partir du lagrangien (D.19), on obtient les deux équations d'Euler-Lagrange suivantes :

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \frac{\partial \tilde{E}_n}{\partial \hbar \mathbf{\Pi}_c} - \dot{\mathbf{\Pi}}_c \wedge \mathbf{\Omega}_n(\mathbf{\Pi}_c) \quad (\text{D.20})$$

$$\hbar \dot{\mathbf{\Pi}}_c = -\frac{\partial \tilde{E}_n}{\partial \mathbf{r}_c} - e\dot{\mathbf{r}}_c \wedge \mathbf{B} \quad (\text{D.21})$$

où l'énergie du paquet d'ondes s'écrit

$$\tilde{E}_n = E_0(\mathbf{\Pi}_c) - eV(\mathbf{r}_c) - \mathbf{m}_n(\mathbf{\Pi}_c) \cdot \mathbf{B}. \quad (\text{D.22})$$

Ce sont les équations semi-classiques de la dynamique d'un paquet d'onde contraint à une bande. Ces équations déterminent l'évolution de la position moyenne du paquet d'ondes et de son vecteur d'onde moyen. La seconde équation se résume à la force de Lorentz. La première ligne montre que l'évolution de \mathbf{r}_c est liée à la courbure de Berry. Les termes supplémentaires introduisent les nouveautés suivantes :

- (i) l'énergie \tilde{E}_n d'un paquet d'ondes fait intervenir le moment magnétique orbital, auquel est associé un effet Zeeman ;
- (ii) le nouveau terme dans l'évolution de $\dot{\mathbf{r}}_c$ ressemble à une version duale de la partie magnétique d'une force de Lorentz, où la position et le champ magnétique sont remplacés respectivement par l'impulsion et la courbure de Berry. Cette modification de la vitesse, appelée *vitesse anormale* a été obtenue par Karplus et Luttinger. [69]
- (iii) Comme pour un moment magnétique dans un champ magnétique inhomogène, la seconde équation assure que dans un champ inhomogène, le paquet d'ondes va subir une force de déviation dont le sens va dépendre du signe de \mathbf{m}_n .

D.6. DENSITÉ D'ÉTATS EFFECTIVE ET AIMANTATION SPONTANÉE

Les propriétés de transport en champ électromagnétique s'étudient de façon semi-classique en utilisant ces équations dans l'équation de Boltzmann. [22]

On insiste sur le fait que les variables r_c et Π_c ne sont pas canoniquement conjuguées, ce sont les quantités invariantes de jauge. Les position et impulsion canoniques $i\partial_{k_c}$ et k_c sont conjuguées, et ne dépendent pas de la bande n , et les position et impulsion invariantes de jauge sont définies par :

$$r_c = i\partial_{k_c} + \mathcal{A}_n(k_c) \quad (\text{D.23})$$

$$\Pi_c = k_c + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(r_c) \quad (\text{D.24})$$

ce sont les position et impulsion projetées sur la n^e bande.

Les équations semi-classiques peuvent également s'obtenir à partir d'une approche hamiltonienne équivalente. Cependant, la remarque précédente demande de la prudence : avec des variables non-conjuguées la forme des équations de Hamilton n'est pas standard. [30, 56, 99]

Ces termes supplémentaires contribuent également dans la quantification semi-classique des orbites cyclotrons, on se reportera à la Réf. [36] pour plus de détails.

D.6 Densité d'états effective et aimantation spontanée

La description en termes des variables (r_c, Π_c) est plus naturelle que celle avec (r_c, k_c) puisque Π_c (resp. r_c) est une quantité indépendante de la jauge électromagnétique (resp. de Berry). Cependant, les variables r_c et Π_c ne sont pas conjuguées ; en utilisant ces variables, la forme volume de l'espace des phases est modifiée : [31, 158]

$$dV = \left(1 + \frac{e}{\hbar} \boldsymbol{\Omega}_n \cdot \mathbf{B}\right) d^3r d^3\Pi. \quad (\text{D.25})$$

La densité d'états étant $1/(2\pi)^3$, une observable \mathcal{O} a pour valeur moyenne

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \iiint_{\text{BZ}} \mathcal{O}_n(\Pi) \frac{dV}{(2\pi)^3} \quad (\text{D.26})$$

Si on choisit le grand potentiel pour \mathcal{O} , on peut en déduire l'aimantation spontanée d'un système à température nulle :

$$M_0 = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial \Xi}{\partial \mathbf{B}} \right|_{B=0} \quad (\text{D.27})$$

$$= -\sum_n \iiint_{\text{BZ}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{B}} \left[(E_0(\Pi) - \mathbf{m}_n(\Pi) \cdot \mathbf{B}) \left(1 + \frac{e}{\hbar} \boldsymbol{\Omega}_n \cdot \mathbf{B}\right) \right]_{B=0} \frac{d^3\Pi}{8\pi^3} \quad (\text{D.28})$$

$$= -\sum_n \iiint_{\text{BZ}} \left(\frac{e}{\hbar} (\mu - E_0) \boldsymbol{\Omega}_n + \mathbf{m}_n \right) \frac{d^3\Pi}{8\pi^3} \quad (\text{D.29})$$

D.7 Approche semi-classique de la susceptibilité orbitale

D.7.1 Modifications d'ordre supérieur dans la théorie semi-classique

Afin d'obtenir la susceptibilité orbitale de façon semi-classique, il faut développer la théorie à l'ordre suivant en champ magnétique. Ce travail a été fait dans les Réfs. [48, 49], et les modifications essentielles de la théorie sont :

ANNEXE D. MAGNÉTISME SEMI-CLASSIQUE ET EFFETS GÉOMÉTRIQUES

- il faut prendre en compte une contribution d'ordre 2 dans l'énergie du paquet d'ondes ; [49]
- les fonctions u_{nk} subissent un déplacement, qui induit une correction linéaire en B pour la courbure de Berry ; ce qui doit être inclus dans les termes d'ordre 0 et 1. [48]. En particulier, la forme des équations semi-classiques n'est pas modifiée à l'ordre suivant, mais les quantités sont à évaluer à $k \neq k_c$, ce qui entraîne une correction effective linéaire en B pour la courbure de Berry.

D.7.2 Formulation générale

La susceptibilité dérivée par Gao, Yang et Niu [49] s'écrit finalement sous la forme

$$\chi_{\text{Gao}} = \chi_{\text{LP}} + \chi_{\text{ps}} + \chi_{\text{Pol}} + \chi_{\text{VV}} + \chi_{\text{Lang}} + \chi_{\text{sea}} \quad (\text{D.30})$$

où

1. χ_{LP} est la contribution de Peierls dérivée dans le CHAP. 5 ;³
2. χ_{ps} a la forme d'une susceptibilité de Pauli associée au moment magnétique orbital :

$$\chi_{\text{ps}} = -\frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n \frac{n'_F(E_{nk})}{2} (\mathbf{m}_{nk} \cdot \mathbf{B})^2 \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{D.31})$$

3. χ_{Pol} est une susceptibilité d'« une énergie de polarisation dans l'espace réciproque »

$$\chi_{\text{Pol}} = -2 \frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n \frac{n'_F(E_{nk})}{4} \nabla E_{nk} \cdot \mathbf{P}_{nk} \frac{d^2k}{4\pi^2}, \quad (\text{D.32})$$

la quantité \mathbf{P}_{nk} étant définie par :

$$P_{nk}^i = \frac{1}{4} \left[\langle (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})^i u_{nk} | \partial_j E_{nk} \mathbb{1} + \partial_j \mathcal{H}_k | (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})^j u_{nk} \rangle \right] \quad (\text{D.33})$$

où \mathbf{D} est le vecteur de dérivation covariante, défini par $\mathbf{D} = \partial + i\mathcal{A}$. Le facteur 2 en rouge n'est pas présent dans la publication initiale [49], mais n'est pas cohérent avec la littérature dont est issue cette formule [16], a été reporté comme manquant par d'autres auteurs [110, p. 13], et est confirmé par nos propres expressions.

4. χ_{VV} serait l'équivalent de la susceptibilité de Van Vleck pour les cristaux :

$$\chi_{\text{VV}} = -\frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n n_F(E_{nk}) \sum_{m \neq n} \frac{G_{nm} G_{mn}}{E_{nk} - E_{mk}} \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{D.34})$$

avec $G_{ij} = -\mathbf{B} \cdot (\partial E_{0k} \wedge \mathcal{A}_{nm})$, où $\mathcal{A}_{mn} = i \langle u_{nk} | \partial u_{mk} \rangle$ est la connexion de Berry interbande.

3. Cependant, dans cette approche semi-classique, la susceptibilité de Peierls doit être postulée : l'approche se base sur le cas de modèles à plusieurs bandes où l'on projette sur l'une d'entre elles. Dans le cas à une bande, le grand potentiel semi-classique ne dépend pas du champ magnétique, on obtient une susceptibilité nulle. Possiblement, l'ingrédient manquant pour trouver la susceptibilité de Peierls est la largeur intrinsèque d'un paquet d'ondes qui est négligée dans cette approche.

D.7. APPROCHE SEMI-CLASSIQUE DE LA SUSCEPTIBILITÉ ORBITALE

5. χ_{Lang} serait l'équivalent de la susceptibilité de Larmor (/ Langevin) pour un atome isolé :

$$\chi_{\text{Lang}} = -\frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n \frac{n_{\text{F}}(E_{n\mathbf{k}})}{16} [-2 \langle (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})_i u_{n\mathbf{k}} | \partial_{ij} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})_j u_{n\mathbf{k}} \rangle + (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})_i (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})_j \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{ij} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle] \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{D.35})$$

6. et enfin χ_{sea} est un terme de mer de Fermi

$$\chi_{\text{sea}} = \frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n n_{\text{F}}(E_{n\mathbf{k}}) \left[\frac{3}{4} (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}_{n\mathbf{k}}) (\mathbf{B} \cdot \mathbf{m}_{n\mathbf{k}}) + \frac{1}{8} \varepsilon_{sik} \varepsilon_{tjl} B_s B_t g_{ij} \partial_{kl} E_{n\mathbf{k}} \right] \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{D.36})$$

D.7.3 Cas bidimensionnel d'un modèle à deux bandes

Contribution de Van Vleck

Le calcul de χ_{VV} est conditionné à celui de G_{nm} , qui s'exprime à partir de la connexion de Berry hors-diagonale, en particulier pour un modèle à deux bandes

$$G_{+-} G_{-+} = B^2 ((E_{0\mathbf{k}}^x)^2 \mathcal{A}_{+-,y} \mathcal{A}_{-+,y} + (E_{0\mathbf{k}}^y)^2 \mathcal{A}_{+-,x} \mathcal{A}_{-+,x} - E_{0\mathbf{k}}^x E_{0\mathbf{k}}^y (\mathcal{A}_{+-,x} \mathcal{A}_{-+,y} + \mathcal{A}_{+-,y} \mathcal{A}_{-+,x})) \quad (\text{D.37})$$

où $\mathcal{A}_{+-,i}$ est la composante i de \mathcal{A}_{+-} . Or

$$\mathcal{A}_{+-,i} \mathcal{A}_{-+,j} = i \langle u_{+\mathbf{k}} | \partial_i u_{-\mathbf{k}} \rangle i \langle u_{-\mathbf{k}} | \partial_j u_{+\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{D.38})$$

$$= \frac{\mathbf{n}^i \cdot \mathbf{n}^j}{4} \quad (\text{D.39})$$

$$= g_{ij}. \quad (\text{D.40})$$

Ainsi

$$G_{+-} G_{-+} = B^2 ((E_{0\mathbf{k}}^x)^2 g_{yy} + (E_{0\mathbf{k}}^y)^2 g_{xx} - 2E_{0\mathbf{k}}^x E_{0\mathbf{k}}^y g_{xy}) \quad (\text{D.41})$$

d'où

$$\chi_{\text{VV}} = -\frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n n_{\text{F}}(E_{n\mathbf{k}}) \sum_{m \neq n} \frac{G_{nm} G_{mn}}{E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}}} \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{D.42})$$

$$= -\frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_{\alpha} n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) \frac{G_{\alpha\bar{\alpha}} G_{\bar{\alpha}\alpha}}{2\alpha E_{\mathbf{k}}} \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{D.43})$$

$$= \iint_{\text{BZ}} \sum_{\alpha} -\alpha \frac{n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}} [(E_{0\mathbf{k}}^x)^2 g_{yy} + (E_{0\mathbf{k}}^y)^2 g_{xx} - 2E_{0\mathbf{k}}^x E_{0\mathbf{k}}^y g_{xy}] \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{D.44})$$

Ce terme est exactement égal à (C.23), terme apparaissant dans $\tilde{\chi}_g$.

Contribution de polarisation énergétique

Pour le terme de polarisation

$$\chi_{\text{Pol}} = -2 \frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n \frac{n'_{\text{F}}(E_{n\mathbf{k}})}{4} \nabla E_{n\mathbf{k}} \cdot \mathbf{P}_{n\mathbf{k}} \frac{d^2 k}{4\pi^2}, \quad (\text{D.45})$$

ANNEXE D. MAGNÉTISME SEMI-CLASSIQUE ET EFFETS GÉOMÉTRIQUES

il s'agit de calculer des éléments de matrices avec les dérivées du hamiltonien :

$$P_n^x = -\frac{B^2}{2} [-\langle D_y u_{n\mathbf{k}} | E^x + h^x | D_y u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle D_x u_{n\mathbf{k}} | E^y + h^y | D_x u_{n\mathbf{k}} \rangle + \text{c.c.}] \quad (\text{D.46})$$

De façon générale,

$$\langle D_i u_{n\mathbf{k}} | D_j u_{n\mathbf{k}} \rangle = g_{ij} \quad (\text{D.47})$$

et en particulier dans les systèmes à deux bandes

$$\langle D_i u_{\alpha\mathbf{k}} | h^m | D_j u_{\alpha\mathbf{k}} \rangle = E_{\alpha\mathbf{k}}^m g_{ij} \quad (\text{D.48})$$

ce qui permet d'écrire :

$$\mathbf{P}_n = B^2 \begin{pmatrix} E_0^x g_{yy} - E_0^y g_{xy} \\ E_0^y g_{xx} - E_0^x g_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{D.49})$$

et donc

$$\chi_{\text{Pol}} = \iint_{\text{BZ}} \sum_{\alpha} n'_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) [E_{\alpha}^x (E_0^x g_{yy} - E_0^y g_{xy}) + E_{\alpha}^y (E_0^y g_{xx} - E_0^x g_{xy})] \frac{d^2k}{4\pi^2}. \quad (\text{D.50})$$

En séparant les énergies $E_{\alpha\mathbf{k}} = E_{0\mathbf{k}} + \alpha E_{\mathbf{k}}$, on obtient deux termes qui, additionnés à χ_{VV} , viennent compléter $\tilde{\chi}_{\text{g}}$. On retient donc (modulo le facteur 2 dans l'article original) :

$$\tilde{\chi}_{\text{g}} = \chi_{\text{VV}} + \chi_{\text{Pol}} \quad (\text{D.51})$$

Contribution de pseudo-spin

La contribution semblable à la susceptibilité de Pauli pour l'aimantation orbitale $m_{n\mathbf{k}}$ du paquet d'ondes s'écrit à deux bandes simplement

$$\chi_{\text{ps}} = -\frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n \frac{n'_{\text{F}}(E_{n\mathbf{k}})}{2} (\mathbf{m}_{n\mathbf{k}} \cdot \mathbf{B})^2 \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{D.52})$$

$$= \iint_{\text{BZ}} \sum_{\alpha} -n'_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) m_{\alpha\mathbf{k}} \Omega_{\alpha\mathbf{k}} \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{D.53})$$

$$(\text{D.54})$$

Ce terme est à comparer à χ_{Ω} : il est égal au terme de surface de Fermi.

Contribution de mer de Fermi

Le terme « non interprété » de la Réf. [49] s'écrit facilement à deux bandes :

$$\chi_{\text{sea}} = \frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n n_{\text{F}}(E_{n\mathbf{k}}) \left[\frac{3}{4} (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}_{n\mathbf{k}}) (\mathbf{B} \cdot \mathbf{m}_{n\mathbf{k}}) + \frac{1}{8} \varepsilon_{sik} \varepsilon_{tjl} B_s B_t g_{ij} \partial_{kl} E_{0\mathbf{k}} \right] \frac{d^2k}{4\pi^2} \quad (\text{D.55})$$

$$= \iint_{\text{BZ}} \sum_{\alpha} n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) \left[\frac{3}{2} m_{\alpha\mathbf{k}} \Omega_{\alpha\mathbf{k}} + \frac{1}{4} (g_{xx} E_{\alpha}^{yy} + g_{yy} E_{\alpha}^{xx} - g_{xy} E_{\alpha}^{xy}) \right] \frac{d^2k}{4\pi^2}. \quad (\text{D.56})$$

Mis à part le facteur 3/2 (qui sera compensé dans le terme de Langevin), la première partie s'ajoute à χ_{ps} pour donner χ_{Ω} .

Contribution de Langevin

Pour terminer la démonstration de l'équivalence avec l'expression de Gao et Niu —et par transitivité celle de Blount— que le second terme de (D.55) et la contribution de Langevin font exactement χ_g . On a :

$$\chi_{\text{Lang}} = -\frac{\partial^2}{\partial B^2} \iint_{\text{BZ}} \sum_n \frac{n_{\text{F}}(E_{n\mathbf{k}})}{16} [-2 \langle (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})_i u_{n\mathbf{k}} | \partial_{ij} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})_j u_{n\mathbf{k}} \rangle + (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})_i (\mathbf{B} \wedge \mathbf{D})_j \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{ij} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle] \frac{d^2 k}{4\pi^2}. \quad (\text{D.57})$$

Il s'agit de calculer des éléments de matrice hors diagonaux avec les dérivées du hamiltonien, et des éléments diagonaux des dérivées secondes.

On obtient :

$$\chi_{\text{Lang}} = -\iint_{\text{BZ}} \sum_{\alpha} n_{\text{F}}(E_{\alpha\mathbf{k}}) \left[\frac{\alpha}{2} m_{\alpha\mathbf{k}} \Omega_{\mathbf{k}} \right] \quad (\text{D.58})$$

$$+ E^x (\partial_x g_{yy} - \partial_y g_{xy}) + E^y (\partial_y g_{xx} - \partial_x g_{xy}) + \frac{E_{\mathbf{k}}}{4} (\mathbf{n}^{xy} \cdot \mathbf{n}^{xy} - \mathbf{n}^{xx} \cdot \mathbf{n}^{yy}) \quad (\text{D.59})$$

$$+ \frac{\alpha}{2} (E^{xx} g_{yy} + E^{yy} g_{xx} - 2E^{xy} g_{xy}) + \frac{1}{4} (E_{\bar{\alpha}}^{xx} g_{yy} + E_{\bar{\alpha}}^{yy} g_{xx} - 2E_{\bar{\alpha}}^{xy} g_{xy}) \left] \frac{d^2 k}{4\pi^2} \quad (\text{D.60})$$

La première ligne vient compensé le facteur 3/2 malheureux de la contribution de la mer de Fermi, la seconde est exactement χ_g , et la troisième s'annule exactement avec la deuxième moitié de la contribution χ_{sea} . Ceci complète donc la preuve de l'égalité entre les différentes formulations.

Commentaires et exemple

Le calcul nous éclaire également sur un point intéressant : des « termes parasites » apparaissent dans les deux dernières contributions, qui viennent s'annuler, et $\chi_{\text{sea}} + \chi_{\text{Lang}}$ est nettement plus simple que chacun des deux termes séparément. Au-delà de l'écriture, il s'agit également d'un problème d'interprétation physique : ces termes supplémentaires donnent des propriétés trompeuses aux deux contributions : celles-ci ne respectent plus la règle de somme, et elles ne tendent pas vers 0 lorsque l'ensemble des états est rempli, c'est-à-dire que toutes les bandes sont remplies. Nous pouvons illustrer ce résultat sur le modèle deux bandes du graphène, où l'on ajoute un terme second voisin identique pour les atomes A et B (ce qui brise la symétrie chirale, et montre alors les contributions χ_{Pol} et χ_{VV}). Les différents termes de la formulation de Gao et Niu sont tracés sur la FIG. D.1.

Grâce au coloriage, on reconnaît facilement la non-nullité des deux termes lorsque les deux bandes sont remplies. Quant à la règle de somme... aucune des contributions ne la vérifie ici.

Les auteurs de la Réf. [49] associent de façon intéressante les deux contributions χ_{VV} et χ_{Lang} des propriétés lorsque le potentiel périodique tend vers zéro, et retrouvent le magnétisme d'atomes isolés (d'où le nom choisi par les auteurs pour ces contributions). D'une part, ce découpage séparé peut sembler quelque peu artificiel puisque la susceptibilité orbitale totale est toujours nulle lorsque toutes les bandes sont remplies (corollaire direct de la règle de somme), ce qui revient à écrire $0 = a - a$ et ajuster a . De plus, il faut rester prudent sur cette limite d'atomes isolés, puisque cette dérivation n'est valable que dans un modèle de liaisons fortes et non dans un régime d'électrons presque libres. Pis, il a été montré que la substitution de Peierls n'est même qualitativement pas valable dans cette limite.

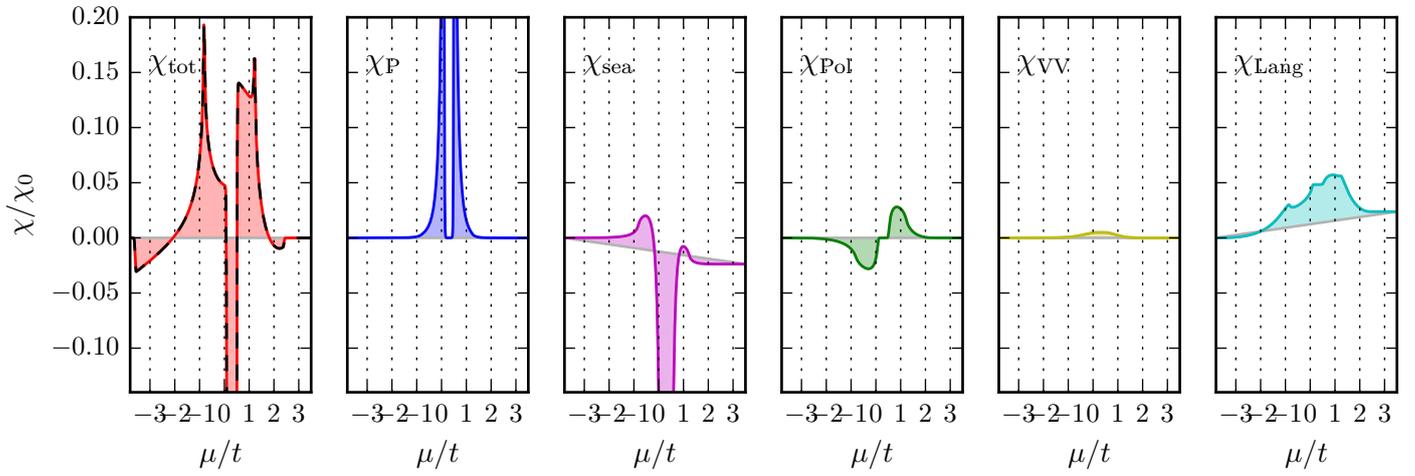


FIGURE D.1 – Contributions de la susceptibilité de Gao et Niu (excepté χ_{LP}) pour le modèle du nitrure de bore ($\Delta = 0.2t$) avec des sauts vers les seconds voisins $t' = 0.1t$. En pointillés noirs est superposée la susceptibilité orbitale obtenue par notre méthode.

Bibliographie

- [1] E. N. ADAMS. « Motion of an Electron in a Perturbed Periodic Potential ». In : *Physical Review* **85** (1952), p. 41–50. DOI : [10.1103/PhysRev.85.41](https://doi.org/10.1103/PhysRev.85.41).
- [2] E. N. ADAMS. « Motion of an Electron in a Perturbed Periodic Potential ». In : *Physical Review* **86** (1952), p. 427–428. DOI : [10.1103/PhysRev.86.427](https://doi.org/10.1103/PhysRev.86.427).
- [3] M. AIDELSBURGER, M. ATALA, M. LOHSE, J. T. BARREIRO, B. PAREDES et I. BLOCH. « Realization of the Hofstadter Hamiltonian with Ultracold Atoms in Optical Lattices ». In : *Physical Review Letters* **111** (2013), p. 185301. DOI : [10.1103/PhysRevLett.111.185301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.185301).
- [4] A. S. ALEXANDROV et H. CAPELLMANN. « Orbital diamagnetism of two-dimensional electrons ». In : *Physical Review Letters* **66** (1991), p. 365–368. DOI : [10.1103/PhysRevLett.66.365](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.66.365).
- [5] H. AOKI, M. ANDO et H. MATSUMURA. « Hofstadter butterflies for flat bands ». In : *Physical Review B* **54** (1996), R17296–R17299. DOI : [10.1103/PhysRevB.54.R17296](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.R17296).
- [6] N.W. ASHCROFT et N.D. MERMIN. *Physique des solides*. EDP Sciences, 2002.
- [7] J. E. AVRON, R. SEILER et B. SIMON. « Homotopy and Quantization in Condensed Matter Physics ». In : *Phys. Rev. Lett.* **51** (1983), p. 51–53. DOI : [10.1103/PhysRevLett.51.51](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.51.51).
- [8] M. Y. AZBEL. « Energy spectrum of a conduction electron in a magnetic field ». In : *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **19** (1964), p. 634.
- [9] S. BANERJEE et W. E. PICKETT. « Phenomenology of a semi-Dirac semi-Weyl semimetal ». In : *Physical Review B* **86** (2012), p. 075124. DOI : [10.1103/PhysRevB.86.075124](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.075124).
- [10] C. BENA et G. MONTAMBAUX. « Remarks on the tight-binding model of graphene ». In : *New Journal of Physics* **11** (2009), p. 095003. DOI : [10.1088/1367-2630/11/9/095003](https://doi.org/10.1088/1367-2630/11/9/095003).
- [11] D. BERCIoux, D. F. URBAN, H. GRABERT et W. HÄUSLER. « Massless Dirac-Weyl fermions in a \mathcal{T}_3 optical lattice ». In : *Physical Review A* **80** (2009), p. 063603. DOI : [10.1103/PhysRevA.80.063603](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.063603).
- [12] B. A. BERNEVIG, T. L. HUGHES et S.-C. ZHANG. « Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells ». In : *Science* **314** (2006), p. 1757–1761. DOI : [10.1126/science.1133734](https://doi.org/10.1126/science.1133734).
- [13] B.A. BERNEVIG et T.L. HUGHES. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, 2013.
- [14] M. V. BERRY. « Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes ». In : *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **392** (1984), p. 45–57. DOI : [10.1098/rspa.1984.0023](https://doi.org/10.1098/rspa.1984.0023).

BIBLIOGRAPHIE

- [15] M.V. BERRY et A.K. GEIM. « Of flying frogs and levitrons ». In : *European Journal of Physics* **18** (1997), p. 307. DOI : [10.1088/0143-0807/18/4/012](https://doi.org/10.1088/0143-0807/18/4/012).
- [16] E. I. BLOUNT. « Bloch Electrons in a Magnetic Field ». In : *Physical Review* **126** (1962), p. 1636–1653. DOI : [10.1103/PhysRev.126.1636](https://doi.org/10.1103/PhysRev.126.1636).
- [17] E. I. BLOUNT. *Solid-State Physics*. T. 13. Seitz, F. et Turnbull, D. in Academic Press Inc., 1961.
- [18] T. B. BOYKIN, R. C. BOWEN et G. KLIMECK. « Electromagnetic coupling and gauge invariance in the empirical tight-binding method ». In : *Physical Review B* **63** (2001), p. 245314. DOI : [10.1103/PhysRevB.63.245314](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.245314).
- [19] P. BRIET, H. D. CORNEAN et B. SAVOIE. « A Rigorous Proof of the Landau-Peierls Formula and much more ». In : *Annales Henri Poincaré* **13** (2012), p. 1–40. DOI : [10.1007/s00023-011-0128-x](https://doi.org/10.1007/s00023-011-0128-x).
- [20] D. CARPENTIER. « Topology of Bands in Solids : From Insulators to Dirac Matter ». In : MATIÈRE DE DIRAC, *Séminaire Poincaré XVIII* (2014), p. 87–118.
- [21] A. H. CASTRO NETO, F. GUINEA, N. M. R. PERES, K. S. NOVOSELOV et A. K. GEIM. « The electronic properties of graphene ». In : *Review of Modern Physics* **81** (2009), p. 109–162. DOI : [10.1103/RevModPhys.81.109](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109).
- [22] M.-C. CHANG et Q. NIU. « Berry phase, hyperorbits, and the Hofstadter spectrum : Semiclassical dynamics in magnetic Bloch bands ». In : *Physical Review B* **53** (1996), p. 7010–7023. DOI : [10.1103/PhysRevB.53.7010](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.7010).
- [23] K.-T. CHEN et P. A. LEE. « Unified formalism for calculating polarization, magnetization, and more in a periodic insulator ». In : *Physical Review B* **84** (2011), p. 205137. DOI : [10.1103/PhysRevB.84.205137](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.205137).
- [24] C. G. DARWIN. « LI. The dynamical motions of charged particles ». In : *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **39** (1920), p. 537–551.
- [25] W. J. DE HAAS et P. M. VAN ALPHEN. « The Dependence of the Susceptibility of Diamagnetic Metals upon the Fields ». In : *Commun. Kamerlingh Onnes Lab. Univ. Leiden* **212a** (1930), p. 170.
- [26] C. R. DEAN, L. WANG, P. MAHER, C. FORSYTHE, F. GHAHARI, Y. GAO, J. KATOCH, M. ISHIGAMI, P. MOON, M. KOSHINO et al. « Hofstadter’s butterfly and the fractal quantum Hall effect in moire superlattices ». In : *Nature* **497** (2013), p. 598–602. DOI : [10.1038/nature12186](https://doi.org/10.1038/nature12186).
- [27] P. DIETL. « Le graphène et le réseau nid d’abeille généralisé sous champ magnétique ». Rapport de stage. 2007.
- [28] P. DIETL, F. PIÉCHON et G. MONTAMBAUX. « New Magnetic Field Dependence of Landau Levels in a Graphene-like Structure ». In : *Physical Review Letters* **100** (2008), p. 236405. DOI : [10.1103/PhysRevLett.100.236405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.236405).
- [29] P. A. M. DIRAC. « Quantised Singularities in the Electromagnetic Field ». In : *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **133** (1931), p. 60–72. DOI : [10.1098/rspa.1931.0130](https://doi.org/10.1098/rspa.1931.0130).

- [30] C. DUVAL, Z. HORVÁTH, P. A. HORVÁTHY, L. MARTINA et P. C. STICHEL. « Berry phase correction to electron density in solids and exotic dynamics ». In : *Modern Physics Letters B* **20** (2006), p. 373–378. DOI : [10.1142/S0217984906010573](https://doi.org/10.1142/S0217984906010573).
- [31] C. DUVAL, Z. HORVÁTH, P. A. HORVÁTHY, L. MARTINA et P. C. STICHEL. « Comment on “Berry Phase Correction to Electron Density of States in Solids” ». In : *Physical Review Letters* **96** (2006), p. 099701. DOI : [10.1103/PhysRevLett.96.099701](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.099701).
- [32] Hebborn J. E. et Sondheimer E. H. « The diamagnetism of conduction electrons in metals ». In : *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **13** (1960), p. 105–123. DOI : [10.1016/0022-3697\(60\)90131-1](https://doi.org/10.1016/0022-3697(60)90131-1).
- [33] H. ESSÉN. « Classical diamagnetism, magnetic interaction energies, and repulsive forces in magnetized plasmas ». In : *Europhysics Letters* **94** (2011), p. 47003. DOI : [10.1209/0295-5075/94/47003](https://doi.org/10.1209/0295-5075/94/47003).
- [34] H. ESSÉN et M. C. N. FIOLEHAIS. « Meissner effect, diamagnetism, and classical physics—a review ». In : *American Journal of Physics* **80** (2012), p. 164–169. DOI : [10.1119/1.3662027](https://doi.org/10.1119/1.3662027).
- [35] M. FRUCHAR, D. CARPENTIER et K. GAWEDZKI. « Parallel transport and band theory in crystals ». In : *Europhysics Letters* **106** (2014), p. 60002. DOI : [10.1209/0295-5075/106/60002](https://doi.org/10.1209/0295-5075/106/60002).
- [36] J.-N. FUCHS, F. PIÉCHON, M. O. GOERBIG et G. MONTAMBAUX. « Topological Berry phase and semiclassical quantization of cyclotron orbits for two dimensional electrons in coupled band models ». In : *European Physics Journal B* **77** (2010), p. 351–362. DOI : [10.1140/epjb/e2010-00259-2](https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-00259-2).
- [37] H. FUKUYAMA. « A formula for the orbital magnetic susceptibility of Bloch electrons in weak fields ». In : *Physics Letters A* **32** (1970), p. 111–112. DOI : [10.1016/0375-9601\(70\)90117-9](https://doi.org/10.1016/0375-9601(70)90117-9).
- [38] H. FUKUYAMA. « Anomalous Orbital Magnetism and Hall Effect of Massless Fermions in Two Dimension ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* **76** (2007), p. 043711. DOI : [10.1143/JPSJ.76.043711](https://doi.org/10.1143/JPSJ.76.043711).
- [39] H. FUKUYAMA. « Hall Effect and Orbital Magnetism of Binary Alloys ». In : *Progress of Theoretical Physics* **44** (1970), p. 879–898. DOI : [10.1143/PTP.44.879](https://doi.org/10.1143/PTP.44.879).
- [40] H. FUKUYAMA. « Theory of Hall Effect. II. » In : *Progress of Theoretical Physics* **42** (1969), p. 1284–1303.
- [41] H. FUKUYAMA. « Theory of Orbital Magnetism of Bloch Electrons : Coulomb Interactions ». In : *Progress of Theoretical Physics* **45** (1971), p. 704–729. DOI : [10.1143/PTP.45.704](https://doi.org/10.1143/PTP.45.704).
- [42] H. FUKUYAMA, Y. FUSEYA, M. OGATA, A. KOBAYASHI et Y. SUZUMURA. « Dirac electrons in solids ». In : *Physica B : Condensed Matter* **407** (2012). Proceedings of the International Workshop on Electronic Crystals (ECRYS-2011), p. 1943–1947. DOI : [10.1016/j.physb.2012.01.071](https://doi.org/10.1016/j.physb.2012.01.071).
- [43] H. FUKUYAMA et R. KUBO. « Interband Effect on Magnetic Susceptibility. I. A Simple Two-Band Model ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* **27** (1969), p. 604–614. DOI : [10.1143/JPSJ.27.604](https://doi.org/10.1143/JPSJ.27.604).

BIBLIOGRAPHIE

- [44] H. FUKUYAMA et R. KUBO. « Interband Effects on Magnetic Susceptibility. II. Diamagnetism of Bismuth ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* **28** (1970), p. 570–581. DOI : [10.1143/JPSJ.28.570](https://doi.org/10.1143/JPSJ.28.570).
- [45] Y. FUSEYA, M. OGATA et H. FUKUYAMA. « Transport Properties and Diamagnetism of Dirac Electrons in Bismuth ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* **84** (2015), p. 012001. DOI : [10.7566/JPSJ.84.012001](https://doi.org/10.7566/JPSJ.84.012001).
- [46] R. de GAIL, J.-N. FUCHS, M.O. GOERBIG, F. PIÉCHON et G. MONTAMBAUX. « Manipulation of Dirac points in graphene-like crystals ». In : *Physica B : Condensed Matter* **407** (2012). Proceedings of the International Workshop on Electronic Crystals (ECRYS-2011), p. 1948–1952. DOI : [10.1016/j.physb.2012.01.072](https://doi.org/10.1016/j.physb.2012.01.072).
- [47] N. GANGULI et K. S. KRISHNAN. « The Magnetic and Other Properties of the Free Electrons in Graphite ». In : *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **177** (1941), p. 168–182. DOI : [10.1098/rspa.1941.0002](https://doi.org/10.1098/rspa.1941.0002).
- [48] Y. GAO, S. A. YANG et Q. NIU. « Field Induced Positional Shift of Bloch Electrons and Its Dynamical Implications ». In : *Phys. Rev. Lett.* **112** (2014), p. 166601. DOI : [10.1103/PhysRevLett.112.166601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.166601).
- [49] Y. GAO, S. A. YANG et Q. NIU. « Geometrical effects in orbital magnetic susceptibility ». In : *Physical Review B* **91** (2015), p. 214405. DOI : [10.1103/PhysRevB.91.214405](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.214405).
- [50] Y. GAO, S. A. YANG et Q. NIU. « Magnetic Response Functions in Landau Levels ». In : *arXiv :1507.06342* (2015).
- [51] M. O. GOERBIG. « Electronic properties of graphene in a strong magnetic field ». In : *Review of Modern Physics* **83** (2011), p. 1193–1243. DOI : [10.1103/RevModPhys.83.1193](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.1193).
- [52] A. GOETZ et A. B. FOCKE. « The Crystal Diamagnetism of Bismuth Crystals ». In : *Physical Review* **45** (1934), p. 170–199. DOI : [10.1103/PhysRev.45.170](https://doi.org/10.1103/PhysRev.45.170).
- [53] N. GOLDMAN, J. C. BUDICH et P. ZOLLER. « Topological quantum matter with ultracold gases in optical lattices ». In : *Nature Physics* **12** (2016), p. 639–645. DOI : [10.1038/nphys3803](https://doi.org/10.1038/nphys3803).
- [54] M. GOLDSTEIN et R. BERKOVITS. « Orbital magnetic susceptibility of disordered mesoscopic systems ». In : *Physical Review B* **69** (2004), p. 035323. DOI : [10.1103/PhysRevB.69.035323](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.035323).
- [55] G. GÓMEZ-SANTOS et T. STAUBER. « Measurable Lattice Effects on the Charge and Magnetic Response in Graphene ». In : *Physical Review Letters* **106** (2011), p. 045504. DOI : [10.1103/PhysRevLett.106.045504](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.045504).
- [56] P. GOSSELIN, F. MÉNAS, A. BÉRARD et H. MOHRBACH. « Semiclassical dynamics of electrons in magnetic Bloch bands : A Hamiltonian approach ». In : *Europhysics Letters* **76** (2006), p. 651. DOI : [10.1209/epl/i2006-10321-4](https://doi.org/10.1209/epl/i2006-10321-4).
- [57] K. GOTTFRIED et T.-M. YAN. *Quantum mechanics : fundamentals*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [58] A. GUTIÉRREZ-RUBIO, T. STAUBER, G. GÓMEZ-SANTOS, R. ASGARI et F. GUINEA. « Orbital magnetic susceptibility of graphene and MoS₂ ». In : *Phys. Rev. B* **93** (2016), p. 085133. DOI : [10.1103/PhysRevB.93.085133](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.085133).

- [59] F. D. M. HALDANE. « Berry Curvature on the Fermi Surface : Anomalous Hall Effect as a Topological Fermi-Liquid Property ». In : *Physical Review Letters* **93** (2004), p. 206602. DOI : [10.1103/PhysRevLett.93.206602](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.206602).
- [60] F. D. M. HALDANE. « Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels : Condensed-Matter Realization of the Parity Anomaly ». In : *Physical Review Letters* **61** (1988), p. 2015–2018. DOI : [10.1103/PhysRevLett.61.2015](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2015).
- [61] Y. HASEGAWA, P. LEDERER, T. M. RICE et P. B. WIEGMANN. « Theory of electronic diamagnetism in two-dimensional lattices ». In : *Physical Review Letters* **63** (1989), p. 907–910. DOI : [10.1103/PhysRevLett.63.907](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.63.907).
- [62] J. E. HEBBORN, Luttinger J.M., Sondheimer E.H. et Stiles P.J. « The orbital diamagnetic susceptibility of Bloch electrons ». In : *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **25** (1964), p. 741–749. DOI : [10.1016/0022-3697\(64\)90186-6](https://doi.org/10.1016/0022-3697(64)90186-6).
- [63] J. E. HEBBORN et E. H. SONDHEIMER. « Diamagnetism of Conduction Electrons in Metals ». In : *Physical Review Letters* **2** (1959), p. 150–152. DOI : [10.1103/PhysRevLett.2.150](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.2.150).
- [64] J. E. HEBBORN et E. H. SONDHEIMER. « The diamagnetism of conduction electrons in metals ». In : *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **13** (1960), p. 105–123. DOI : [10.1016/0022-3697\(60\)90131-1](https://doi.org/10.1016/0022-3697(60)90131-1).
- [65] Lillian HODDESON, Gordon BAYM et Michael ECKERT. « The development of the quantum-mechanical electron theory of metals : 19281933 ». In : *Review of Modern Physics* **59** (1987), p. 287–327. DOI : [10.1103/RevModPhys.59.287](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.59.287).
- [66] D. R. HOFSTADTER. « Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields ». In : *Physical Review B* **14** (1976), p. 2239–2249. DOI : [10.1103/PhysRevB.14.2239](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.2239).
- [67] J. IBAÑEZ-AZPIROZ, A. EIGUREN, A. BERGARA, G. PETTINI et M. MODUGNO. « Breakdown of the Peierls substitution for the Haldane model with ultracold atoms ». In : *Physical Review A* **90** (2014), p. 033609. DOI : [10.1103/PhysRevA.90.033609](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.90.033609).
- [68] C. L. KANE et E. J. MELE. « Quantum Spin Hall Effect in Graphene ». In : *Physical Review Letters* **95** (2005), p. 226801. DOI : [10.1103/PhysRevLett.95.226801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.226801).
- [69] R. KARPLUS et J. M. LUTTINGER. « Hall Effect in Ferromagnetics ». In : *Physical Review* **95** (1954), p. 1154–1160. DOI : [10.1103/PhysRev.95.1154](https://doi.org/10.1103/PhysRev.95.1154).
- [70] W. KOHN. « Theory of Bloch Electrons in a Magnetic Field : The Effective Hamiltonian ». In : *Physical Review* **115** (1959), p. 1460–1478. DOI : [10.1103/PhysRev.115.1460](https://doi.org/10.1103/PhysRev.115.1460).
- [71] Markus KÖNIG, Steffen WIEDMANN, Christoph BRÜNE, Andreas ROTH, Hartmut BUHMANN, Laurens W. MOLENKAMP, Xiao-Liang QI et Shou-Cheng ZHANG. « Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells ». In : *Science* **318** (2007), p. 766–770. DOI : [10.1126/science.1148047](https://doi.org/10.1126/science.1148047).
- [72] M. KOSHINO. « Chiral orbital current and anomalous magnetic moment in gapped graphene ». In : *Physical Review B* **84** (2011), p. 125427. DOI : [10.1103/PhysRevB.84.125427](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.125427).
- [73] M. KOSHINO et T. ANDO. « Anomalous orbital magnetism in Dirac-electron systems : Role of pseudospin paramagnetism ». In : *Physical Review B* **81** (2010), p. 195431. DOI : [10.1103/PhysRevB.81.195431](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.195431).

BIBLIOGRAPHIE

- [74] M. KOSHINO et T. ANDO. « Orbital diamagnetism in multilayer graphenes : Systematic study with the effective mass approximation ». In : *Physical Review B* **76** (2007), p. 085425. DOI : [10.1103/PhysRevB.76.085425](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.085425).
- [75] M. KOSHINO, Y. ARIMURA et T. ANDO. « Magnetic Field Screening and Mirroring in Graphene ». In : *Physical Review Letters* **102** (2009), p. 177203. DOI : [10.1103/PhysRevLett.102.177203](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.177203).
- [76] M. KOSHINO et E. MCCANN. « Trigonal warping and Berry's phase $N\pi$ in ABC-stacked multilayer graphene ». In : *Physical Review B* **80** (2009), p. 165409. DOI : [10.1103/PhysRevB.80.165409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.165409).
- [77] A.S. KOTOSONOV. « Diamagnetism of quasi-two-dimensional graphites ». In : *JETP Letters* **43** (1986), p. 37–39.
- [78] L. LANDAU. « Diamagnetism of Metals ». In : *Zeitschrift für Physik* **64** (1930), p. 629.
- [79] L. LANDAU et E. LIFCHITZ. *Physique statistique*. Éditions Mir, 1991.
- [80] L. LANDAU et E. LIFCHITZ. *Théorie des champs*. Éditions Mir, 1970.
- [81] Z. LI, L. CHEN, S. MENG, L. GUO, J. HUANG, Y. LIU, W. WANG et X. CHEN. « Field and temperature dependence of intrinsic diamagnetism in graphene : Theory and experiment ». In : *Physical Review B* **91** (2015), p. 094429. DOI : [10.1103/PhysRevB.91.094429](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.094429).
- [82] T. LOUVET, P. DELPLACE, A. A. FEDORENKO et D. CARPENTIER. « On the origin of minimal conductivity at a band crossing ». In : *Physical Review B* **92** (2015), p. 155116. DOI : [10.1103/PhysRevB.92.155116](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.155116).
- [83] J. M. LUTTINGER. « The Effect of a Magnetic Field on Electrons in a Periodic Potential ». In : *Physical Review* **84** (1951), p. 814–817. DOI : [10.1103/PhysRev.84.814](https://doi.org/10.1103/PhysRev.84.814).
- [84] J. M. LUTTINGER et W. KOHN. « Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields ». In : *Physical Review* **97** (1955), p. 869–883. DOI : [10.1103/PhysRev.97.869](https://doi.org/10.1103/PhysRev.97.869).
- [85] T. L. MAKAROVA. « Magnetic properties of carbon structures ». In : *Semiconductors* **38** (2004), p. 615–638. DOI : [10.1134/1.1766362](https://doi.org/10.1134/1.1766362).
- [86] H. MATSUURA et M. OGATA. « Theory of Orbital Susceptibility in the Tight-Binding Model : Corrections to the Peierls Phase ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* **85** (2016), p. 074709. DOI : [10.7566/JPSJ.85.074709](https://doi.org/10.7566/JPSJ.85.074709).
- [87] F. MAURI et S. G. LOUIE. « Magnetic Susceptibility of Insulators from First Principles ». In : *Physical Review Letters* **76** (1996), p. 4246–4249. DOI : [10.1103/PhysRevLett.76.4246](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.4246).
- [88] E. MCCANN et M. KOSHINO. « The electronic properties of bilayer graphene ». In : *Reports on Progress in Physics* **76** (2013), p. 056503. DOI : [10.1088/0034-4885/76/5/056503](https://doi.org/10.1088/0034-4885/76/5/056503).
- [89] J. W. McCLURE. « Diamagnetism of Graphite ». In : *Physical Review* **104** (1956), p. 666–671. DOI : [10.1103/PhysRev.104.666](https://doi.org/10.1103/PhysRev.104.666).
- [90] A. MIELKE. « Ferromagnetism in the Hubbard model on line graphs and further considerations ». In : *Journal of Physics A : Mathematical and General* **24** (1991), p. 3311. DOI : [10.1088/0305-4470/24/14/018](https://doi.org/10.1088/0305-4470/24/14/018).
- [91] P. K. MISRA et L. KLEINMAN. « Theory of the Magnetic Susceptibility of Bloch Electrons ». In : *Physical Review B* **5** (1972), p. 4581–4597. DOI : [10.1103/PhysRevB.5.4581](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.5.4581).

- [92] P. K. MISRA et L. M. ROTH. « Theory of Diamagnetic Susceptibility of Metals ». In : *Physical Review* **177** (1969), p. 1089–1102. DOI : [10.1103/PhysRev.177.1089](https://doi.org/10.1103/PhysRev.177.1089).
- [93] M. MODUGNO, J. IBAN EZ-AZPIROZ et G. PETTINI. « Tight-binding models for ultracold atoms in optical lattices : general formulation and applications ». In : *Science China Physics, Mechanics & Astronomy* **59**, 660001 (2016), p. 660001. DOI : [10.1007/s11433-015-0514-5](https://doi.org/10.1007/s11433-015-0514-5).
- [94] G. MONTAMBAUX. « An equivalence between monolayer and bilayer honeycomb lattices ». In : *European Physics Journal B* **85** (2012), p. 375. DOI : [10.1140/epjb/e2012-30570-7](https://doi.org/10.1140/epjb/e2012-30570-7).
- [95] G. MONTAMBAUX. « Comment on “Theory of electronic diamagnetism in two-dimensional lattices” ». In : *Physical Review Letters* **63** (1989), p. 1657–1657. DOI : [10.1103/PhysRevLett.63.1657](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.63.1657).
- [96] G. MONTAMBAUX, F. PIÉCHON, J.-N. FUCHS et M. O. GOERBIG. « A universal Hamiltonian for motion and merging of Dirac points in a two-dimensional crystal ». In : *European Physics Journal B* **72** (2009), p. 509–520. DOI : [10.1140/epjb/e2009-00383-0](https://doi.org/10.1140/epjb/e2009-00383-0).
- [97] G. MONTAMBAUX, F. PIÉCHON, J.-N. FUCHS et M. O. GOERBIG. « Merging of Dirac points in a two-dimensional crystal ». In : *Physical Review B* **80** (2009), p. 153412. DOI : [10.1103/PhysRevB.80.153412](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.153412).
- [98] M. MORIGI. « Coupled bands effects in dice-like lattices under magnetic field ». Rapport de stage de master. 2012.
- [99] P. J. MORRISON. « Hamiltonian description of the ideal fluid ». In : *Rev. Mod. Phys.* **70** (1998), p. 467–521. DOI : [10.1103/RevModPhys.70.467](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.70.467).
- [100] R. R. NAIR, M. SEPIONI, I.-L. TSAI, O. LEHTINEN, J. KEINONEN, A. V. KRASHENINNIKOV, T. THOMSON, A. K. GEIM et I. V. GRIGORIEVA. « Spin-half paramagnetism in graphene induced by point defects ». In : *Nature Physics* **8** (2012), p. 199–202. DOI : [10.1038/nphys2183](https://doi.org/10.1038/nphys2183).
- [101] M. NAKAMURA. « Orbital magnetism and transport phenomena in two-dimensional Dirac fermions in a weak magnetic field ». In : *Physical Review B* **76** (2007), p. 113301. DOI : [10.1103/PhysRevB.76.113301](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.113301).
- [102] T. NEUPERT, C. CHAMON et C. MUDRY. « Measuring the quantum geometry of Bloch bands with current noise ». In : *Physical Review B* **87** (2013), p. 245103. DOI : [10.1103/PhysRevB.87.245103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.245103).
- [103] H. K. NGUYEN et S. CHAKRAVARTY. « Effects of magnetic field on the d -density-wave order in the cuprates ». In : *Physical Review B* **65** (2002), p. 180519. DOI : [10.1103/PhysRevB.65.180519](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.180519).
- [104] V. N. NICOPOULOS et S. A. TRUGMAN. « Comment on “Theory of electronic diamagnetism in two-dimensional lattices” ». In : *Physical Review Letters* **64** (1990), p. 237–237. DOI : [10.1103/PhysRevLett.64.237](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.237).
- [105] E. G. NIKOLAEV, A. S. KOTOSONOV, E. A. SHALASHUGINA, A. M. TROYANOVSKII et V. I. TSEBRO. « Local diamagnetic susceptibility of quasi-two-dimensional graphite ». In : *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **117** (2013), p. 338–342. DOI : [10.1134/S1063776113100166](https://doi.org/10.1134/S1063776113100166).
- [106] K. S. NOVOSELOV, A. K. GEIM, S. V. MOROZOV, D. JIANG, Y. ZHANG, S. V. DUBONOS, I. V. GRIGORIEVA et A. A. FIRSOV. « Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films ». In : *Science* **306** (2004), p. 666–669. DOI : [10.1126/science.1102896](https://doi.org/10.1126/science.1102896).

BIBLIOGRAPHIE

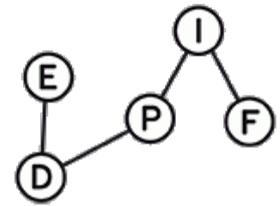
- [107] S. L. O'DELL et R. K. P. ZIA. « Classical and semiclassical diamagnetism : A critique of treatment in elementary texts ». In : *American Journal of Physics* **54** (1986), p. 32–35. DOI : [10.1119/1.14766](https://doi.org/10.1119/1.14766).
- [108] M. OGATA. « Orbital Magnetism of Bloch Electrons : II. Application to Single-Band Models and Corrections to Landau–Peierls Susceptibility ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* **85** (2016), p. 064709. DOI : [10.7566/JPSJ.85.064709](https://doi.org/10.7566/JPSJ.85.064709).
- [109] M. OGATA. « Orbital Magnetism of Bloch Electrons : III. Application to Graphene ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* **85** (2016), p. 104708. DOI : [10.7566/JPSJ.85.104708](https://doi.org/10.7566/JPSJ.85.104708).
- [110] M. OGATA et H. FUKUYAMA. « Orbital Magnetism of Bloch Electrons I. General Formula ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* **84** (2015), p. 124708. DOI : [10.7566/JPSJ.84.124708](https://doi.org/10.7566/JPSJ.84.124708).
- [111] Y. OMINATO et M. KOSHINO. « Orbital magnetic susceptibility of finite-sized graphene ». In : *Physical Review B* **85** (2012), p. 165454. DOI : [10.1103/PhysRevB.85.165454](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.165454).
- [112] Y. OMINATO et M. KOSHINO. « Orbital magnetism of graphene flakes ». In : *Physical Review B* **87** (2013), p. 115433. DOI : [10.1103/PhysRevB.87.115433](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115433).
- [113] B. PANNETIER, J. CHAUSSY et R. RAMMAL. « Experimental determination of the (H,T) phase diagram of a superconducting network ». In : *Journal de Physique Lettres* **44** (1983), p. 853–858. DOI : [10.1051/jphyslet:019830044020085300](https://doi.org/10.1051/jphyslet:019830044020085300).
- [114] R. PEIERLS. « On the Theory of Diamagnetism of Conduction Electrons ». In : *Zeitschrift für Physik* **80** (1933), p. 763.
- [115] Vitor M. PEREIRA, A. H. CASTRO NETO et N. M. R. PERES. « Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene ». In : *Physical Review B* **80** (2009), p. 045401. DOI : [10.1103/PhysRevB.80.045401](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.045401).
- [116] F. PIÉCHON, J.-N. FUCHS, A. RAOUX et G. MONTAMBAUX. « Tunable orbital susceptibility in $\alpha - T_3$ tight-binding models ». In : *Journal of Physics : Conference Series* **603** (2015), p. 012001. DOI : [10.1088/1742-6596/603/1/012001](https://doi.org/10.1088/1742-6596/603/1/012001).
- [117] F. PIÉCHON, A. RAOUX, J.-N. FUCHS et G. MONTAMBAUX. « Geometric orbital susceptibility : Quantum metric without Berry curvature ». In : *Physical Review B* **94** (2016), p. 134423. DOI : [10.1103/PhysRevB.94.134423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.134423).
- [118] E. POQUET, N. LUMBROSO, J. HOARAU, A. MARCHAND, A. PACAULT et D.E. SOULE. « Étude du diamagnétisme de monocristaux de graphite ». In : *Journal de chimie physique et de physico-chimie biologique* **57** (1960), p. 866–872.
- [119] A. PRINCIPI, M. POLINI, G. VIGNALE et M. I. KATSNELSON. « Many-Body Orbital Paramagnetism in Doped Graphene Sheets ». In : *Physical Review Letters* **104** (2010), p. 225503. DOI : [10.1103/PhysRevLett.104.225503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.225503).
- [120] J. P. PROVOST et G. VALLEE. « Riemannian structure on manifolds of quantum states ». In : *Communications in Mathematical Physics* **76** (1980), p. 289–301.
- [121] R. RAMMAL. « Landau level spectrum of Bloch electrons in a honeycomb lattice ». In : *Journal de Physique* **46** (1985), p. 1345–1354. DOI : [10.1051/jphys:019850046080134500](https://doi.org/10.1051/jphys:019850046080134500).

- [122] A. RAOUX, M. MORIGI, J.-N. FUCHS, F. PIÉCHON et G. MONTAMBAUX. « From Dia- to Paramagnetic Orbital Susceptibility of Massless Fermions ». In : *Physical Review Letters* **112** (2014), p. 026402. DOI : [10.1103/PhysRevLett.112.026402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.026402).
- [123] A. RAOUX, F. PIÉCHON, J.-N. FUCHS et G. MONTAMBAUX. « Orbital magnetism in coupled-bands models ». In : *Physical Review B* **91** (2015), p. 085120. DOI : [10.1103/PhysRevB.91.085120](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.085120).
- [124] R. RESTA. « Manifestations of Berry’s phase in molecules and condensed matter ». In : *Journal of Physics : Condensed Matter* **12** (2000), R107. DOI : [10.1088/0953-8984/12/9/201](https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/9/201).
- [125] L.M. ROTH. « Theory of Bloch electrons in a magnetic field ». In : *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **23** (1962), p. 433–446. DOI : [10.1016/0022-3697\(62\)90083-5](https://doi.org/10.1016/0022-3697(62)90083-5).
- [126] S. A. SAFRAN. « Stage dependence of magnetic susceptibility of intercalated graphite ». In : *Physical Review B* **30** (1984), p. 421–423. DOI : [10.1103/PhysRevB.30.421](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.30.421).
- [127] S. A. SAFRAN et F. J. DISALVO. « Theory of magnetic susceptibility of graphite intercalation compounds ». In : *Phys. Rev. B* **20** (1979), p. 4889–4895. DOI : [10.1103/PhysRevB.20.4889](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.20.4889).
- [128] B. SAVOIE. « A rigorous proof of the Bohr–van Leeuwen theorem in the semiclassical limit ». In : *Reviews in Mathematical Physics* **27** (2015), p. 1550019. DOI : [10.1142/S0129055X15500191](https://doi.org/10.1142/S0129055X15500191).
- [129] G. A. H. SCHOBER, H. MURAKAWA, M. S. BAHRAMY, R. ARITA, Y. KANEKO, Y. TOKURA et N. NAGAOSA. « Mechanisms of Enhanced Orbital Dia- and Paramagnetism : Application to the Rashba Semiconductor BiTeI ». In : *Physical Review Letters* **108** (2012), p. 247208. DOI : [10.1103/PhysRevLett.108.247208](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.247208).
- [130] Gordon W. SEMENOFF. « Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly ». In : *Physical Review Letters* **53** (1984), p. 2449–2452. DOI : [10.1103/PhysRevLett.53.2449](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.53.2449).
- [131] M. SEPIONI, R. R. NAIR, S. RABLEN, J. NARAYANAN, F. TUNA, R. WINPENNY, A. K. GEIM et I. V. GRIGORIEVA. « Limits on Intrinsic Magnetism in Graphene ». In : *Physical Review Letters* **105** (2010), p. 207205. DOI : [10.1103/PhysRevLett.105.207205](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.207205).
- [132] S. G. SHARAPOV, V. P. GUSYNIN et H. BECK. « Magnetic oscillations in planar systems with the Dirac-like spectrum of quasiparticle excitations ». In : *Phys. Rev. B* **69** (2004), p. 075104. DOI : [10.1103/PhysRevB.69.075104](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.075104).
- [133] D. SHOENBERG et M. Z. UDDIN. « The Magnetic Properties of Bismuth. I. Dependence of Susceptibility on Temperature and Addition of Other Elements ». In : *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **156** (1936), p. 687–701. DOI : [10.1098/rspa.1936.0175](https://doi.org/10.1098/rspa.1936.0175).
- [134] L.V. SHUBNIKOV et W.J. de HAAS. « New phenomena in the change in resistance of bismuth crystals in a magnetic field at the temperature of liquid hydrogen ». In : *Proceedings of the Royal Netherlands Academy of Arts and Science* **33** (1930), p. 363–378.
- [135] Barry SIMON. « Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and Berry’s Phase ». In : *Physical Review Letters* **51** (1983), p. 2167–2170. DOI : [10.1103/PhysRevLett.51.2167](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.51.2167).
- [136] P. SKUDLARSKI et G. VIGNALE. « Electronic diamagnetism in a three-dimensional lattice ». In : *Physical Review B* **43** (1991), p. 5764–5768. DOI : [10.1103/PhysRevB.43.5764](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.5764).

BIBLIOGRAPHIE

- [137] A. A. SOLUYANOV et D. VANDERBILT. « Smooth gauge for topological insulators ». In : *Physical Review B* **85** (2012), p. 115415. DOI : [10.1103/PhysRevB.85.115415](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.115415).
- [138] T. STAUBER et G. GÓMEZ-SANTOS. « Dynamical current-current correlation of the hexagonal lattice and graphene ». In : *Physical Review B* **82** (2010), p. 155412. DOI : [10.1103/PhysRevB.82.155412](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.155412).
- [139] D. STICLET et F. PIÉCHON. « Distant-neighbor hopping in graphene and Haldane models ». In : *Physical Review B* **87** (2013), p. 115402. DOI : [10.1103/PhysRevB.87.115402](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115402).
- [140] P. STREDA. « Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions ». In : *Journal of Physics C : Solid State Physics* **15** (1982), p. L717. DOI : [10.1088/0022-3719/15/22/005](https://doi.org/10.1088/0022-3719/15/22/005).
- [141] G. SUNDARAM et Q. NIU. « Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals : Gradient corrections and Berry-phase effects ». In : *Physical Review B* **59** (1999), p. 14915–14925. DOI : [10.1103/PhysRevB.59.14915](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.14915).
- [142] B. SUTHERLAND. « Localization of electronic wave functions due to local topology ». In : *Physical Review B* **34** (1986), p. 5208–5211. DOI : [10.1103/PhysRevB.34.5208](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.5208).
- [143] L. TARRUELL, T. UEHLINGER, G. JOTZU et T. ESSLINGER. « Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice ». In : *Nature* **483** (2012). DOI : [10.1038/nature10871](https://doi.org/10.1038/nature10871).
- [144] T. THONHAUSER. « Theory of orbital magnetization in solids ». In : *International Journal of Modern Physics B* **25** (2011), p. 1429–1458. DOI : [10.1142/S0217979211058912](https://doi.org/10.1142/S0217979211058912).
- [145] T. THONHAUSER, D. CERESOLI, D. VANDERBILT et R. RESTA. « Orbital Magnetization in Periodic Insulators ». In : *Physical Review Letters* **95** (2005), p. 137205. DOI : [10.1103/PhysRevLett.95.137205](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.137205).
- [146] D. J. THOULESS. « Quantization of particle transport ». In : *Physical Review B* **27** (1983), p. 6083–6087. DOI : [10.1103/PhysRevB.27.6083](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.6083).
- [147] D. J. THOULESS, M. KOHMOTO, M. P. NIGHTINGALE et M. den NIJS. « Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential ». In : *Physical Review Letters* **49** (1982), p. 405–408. DOI : [10.1103/PhysRevLett.49.405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.405).
- [148] G. M. TIA. « Le magnétisme orbital dans le graphène sur réseau ». Rapport de stage de master. 2011.
- [149] H.-J. VAN LEEUWEN. « Problèmes de la théorie électronique du magnétisme ». In : *Journal de Physique et le Radium* **2** (1921), p. 361–377. DOI : [10.1051/jphysrad:01921002012036100](https://doi.org/10.1051/jphysrad:01921002012036100).
- [150] J. H. VAN VLECK. « Quantum mechanics – The key to understanding magnetism ». In : *Review of Modern Physics* **50** (1978), p. 181–189. DOI : [10.1103/RevModPhys.50.181](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.50.181).
- [151] J. VIDAL, R. MOSSERI et B. DOUÇOT. « Aharonov-Bohm Cages in Two-Dimensional Structures ». In : *Physical Review Letters* **81** (1998), p. 5888–5891. DOI : [10.1103/PhysRevLett.81.5888](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.81.5888).
- [152] G. VIGNALE. « Orbital paramagnetism of electrons in a two-dimensional lattice ». In : *Physical Review Letters* **67** (1991), p. 358–361. DOI : [10.1103/PhysRevLett.67.358](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.67.358).
- [153] P. R. WALLACE. « The Band Theory of Graphite ». In : *Physical Review* **71** (1947), p. 622–634. DOI : [10.1103/PhysRev.71.622](https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622).

- [154] G. H. WANNIER et U. N. UPADHYAYA. « Zero-Field Susceptibility of Bloch Electrons ». In : *Physical Review* **136** (1964), A803–A810. DOI : [10.1103/PhysRev.136.A803](https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.A803).
- [155] A. WIDOM. « Thermodynamic derivation of the Hall effect current ». In : *Physics Letters A* **90** (1982), p. 474. DOI : [10.1016/0375-9601\(82\)90401-7](https://doi.org/10.1016/0375-9601(82)90401-7).
- [156] B. WUNSCH, F. GUINEA et F. SOLS. « Dirac-point engineering and topological phase transitions in honeycomb optical lattices ». In : *New Journal of Physics* **10** (2008), p. 103027. DOI : [10.1088/1367-2630/10/10/103027](https://doi.org/10.1088/1367-2630/10/10/103027).
- [157] D. XIAO, M.-C. CHANG et Q. NIU. « Berry phase effects on electronic properties ». In : *Review of Modern Physics* **82** (2010), p. 1959–2007. DOI : [10.1103/RevModPhys.82.1959](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1959).
- [158] D. XIAO, J. SHI et Q. NIU. « Berry Phase Correction to Electron Density of States in Solids ». In : *Physical Review Letters* **95** (2005), p. 137204. DOI : [10.1103/PhysRevLett.95.137204](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.137204).
- [159] Y. XIAO, V. PELLETIER, P. M. CHAIKIN et D. A. HUSE. « Landau levels in the case of two degenerate coupled bands : Kagomé lattice tight-binding spectrum ». In : *Physical Review B* **67** (2003), p. 104505. DOI : [10.1103/PhysRevB.67.104505](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.104505).



Titre : Magnétisme orbital et aspects géométriques de la théorie des bandes

Mots clefs : magnétisme orbital, susceptibilité, théorie des bandes, courbure de Berry

Résumé : Mon travail de recherche a porté sur l'étude de la réponse magnétique orbitale d'un gaz d'électrons dans le potentiel cristallin d'un solide. Cette étude est dans la continuité du travail de Landau (diamagnétisme de Landau) et de Peierls, ce dernier ayant développé une formule de susceptibilité orbitale valable pour les modèles cristallins à une bande. L'objet de ma thèse a été de généraliser cette formule à un nombre quelconque de bandes, travail réalisé à l'aide d'une théorie de perturbation invariante de jauge. Je me concentre particulièrement sur l'étude des modèles à deux bandes, afin de mettre en évidence l'importance

des couplages interbandes dans la susceptibilité orbitale. Cela fait intervenir la courbure de Berry, grandeur classiquement associée à ces couplages, mais également le tenseur métrique qui joue un rôle crucial. En particulier, je montre qu'un isolant de bandes peut avoir une réponse magnétique même si sa bande de valence est remplie, et je mets en évidence un modèle où les propriétés géométriques peuvent être variées tout en maintenant fixes les propriétés spectrales, ce qui induit des modifications importantes de la réponse magnétique.

Title : Orbital magnetism and geometrical aspects of band theory

Keywords : orbital magnetism, susceptibility, band theory, Berry curvature

Abstract : My research project has been to study the orbital magnetic response of an electron gas in the periodic potential of a crystal. Its purpose is to generalize Landau's diamagnetism and Peierls' formula for one-band crystals. The main goal was to generalize Peierls' work to any number of bands. Then, I applied the obtained formula to 2-band systems in order to highlight the role of interband effects in the orbital susceptibility. The suscepti-

bility can be written using Berry curvature, quantity associated to interband effects, as well as the metric tensor. In particular, I show that a band insulator can have a non-vanishing magnetic response even if the chemical potential lies in the gap. Moreover, I study a model where the geometric properties can be tuned without changing the dispersion relation. This tuning can drastically modify the orbital magnetic response.

