

Défauts topologiques dans la
structure de bande du modèle à
trois bandes Lieb-kagomé

Le modèle

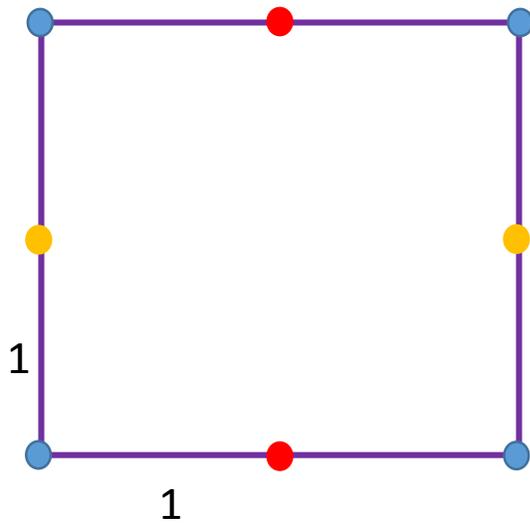
- On choisit le hamiltonien de Lieb-kagomé

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 2 \cos \frac{k_x}{2} & 2t' \cos \frac{k_x + k_y}{2} \\ 2 \cos \frac{k_x}{2} & 0 & 2 \cos \frac{k_y}{2} \\ 2t' \cos \frac{k_x + k_y}{2} & 2 \cos \frac{k_y}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

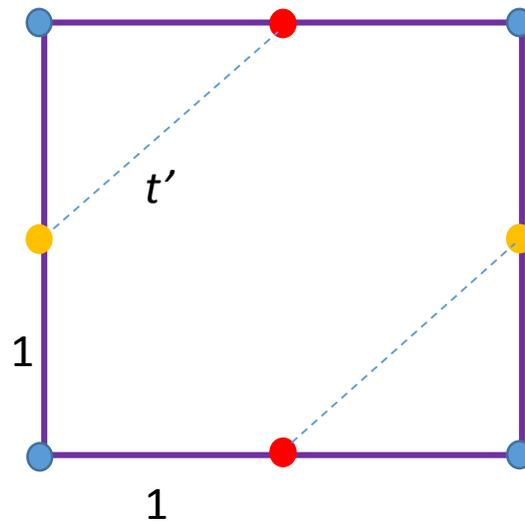
qui interpole continûment de $t' = 0$ (Lieb) à $t' = 1$ (kagomé).

Structure dans l'espace réel

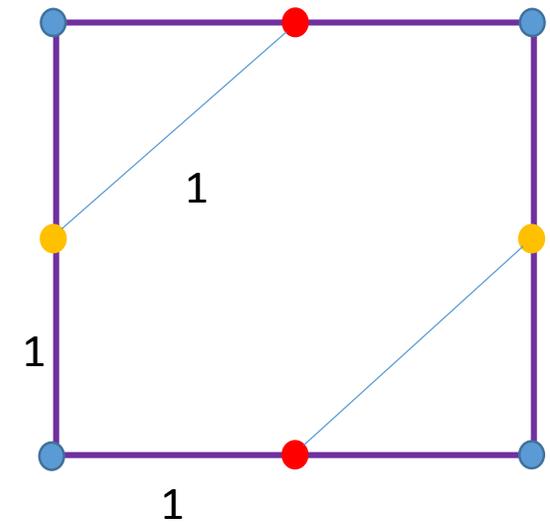
- Cellule cristalline



$t' = 0$ Lieb



t' quelconque

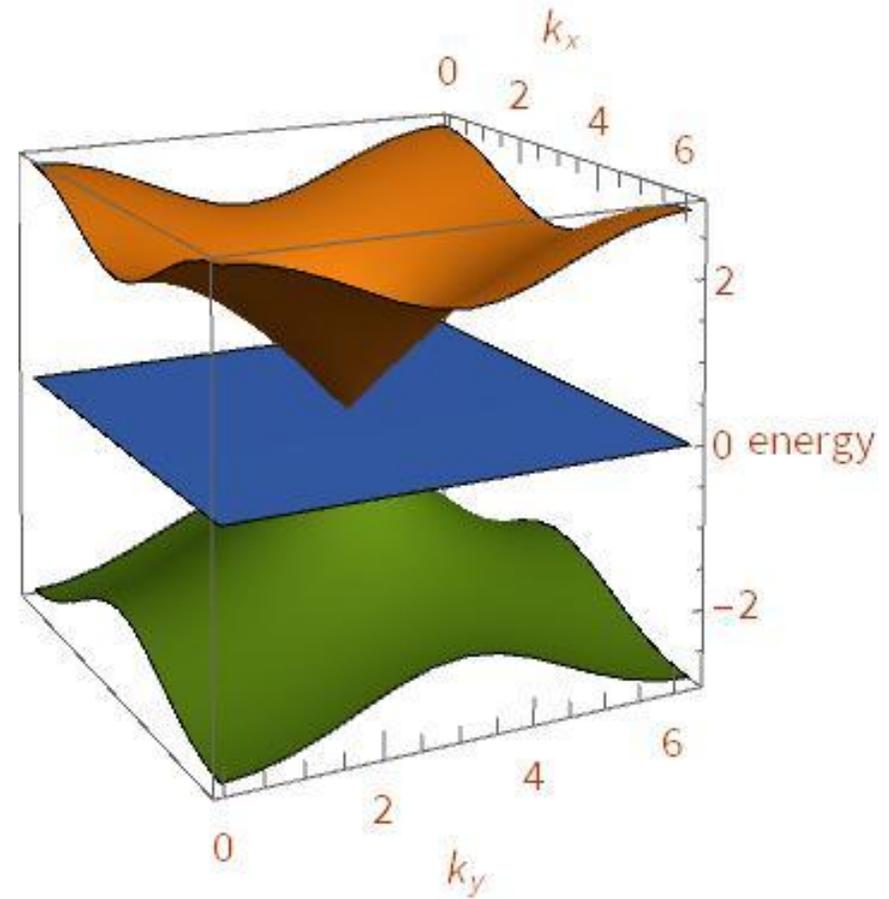


$t' = 1$ kagomé
(déformé)

Hamiltonien de Lieb ($t' = 0$)

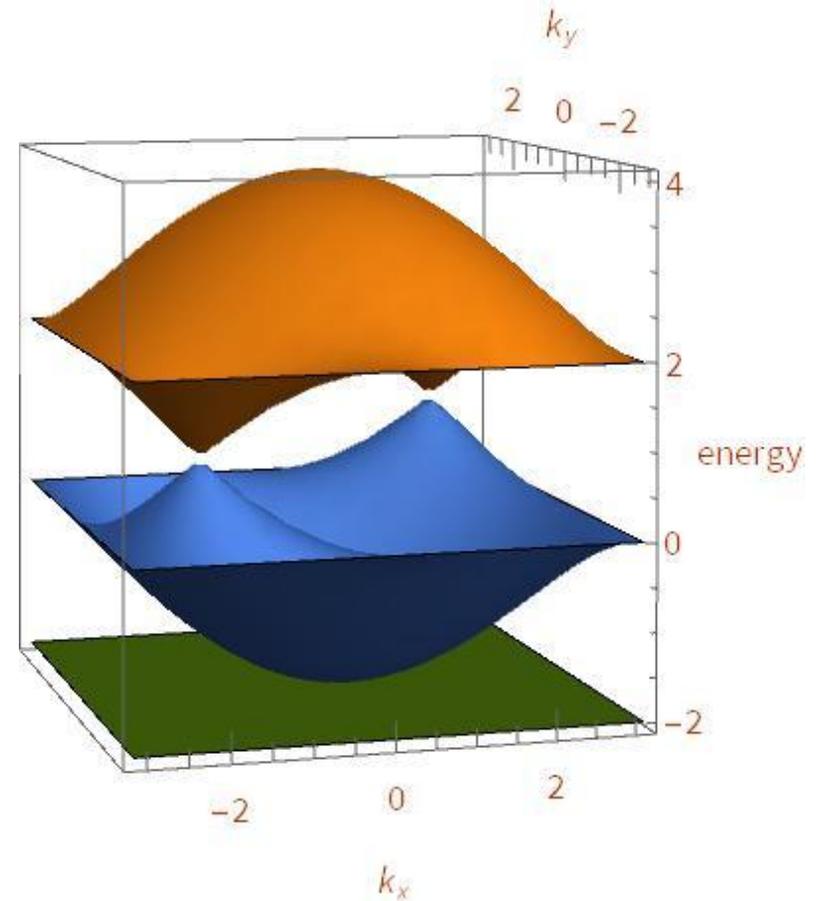
Il y a un point de dégénérescence triple

C'est un point de Dirac pour les bandes du dessus et du dessous



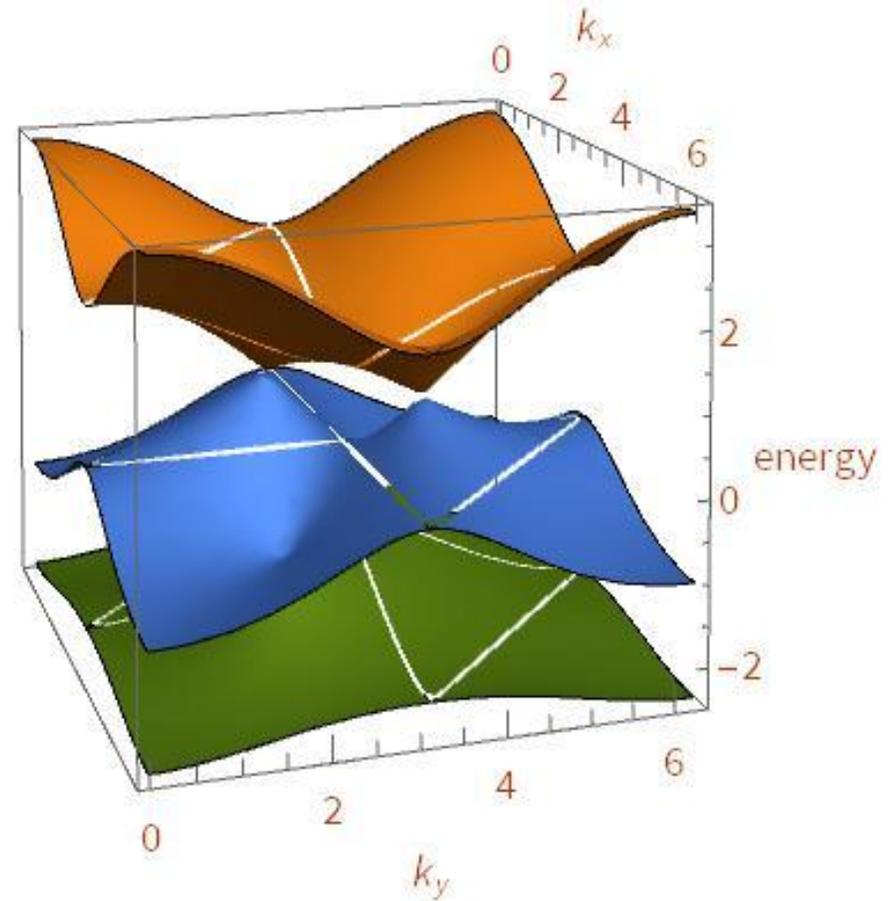
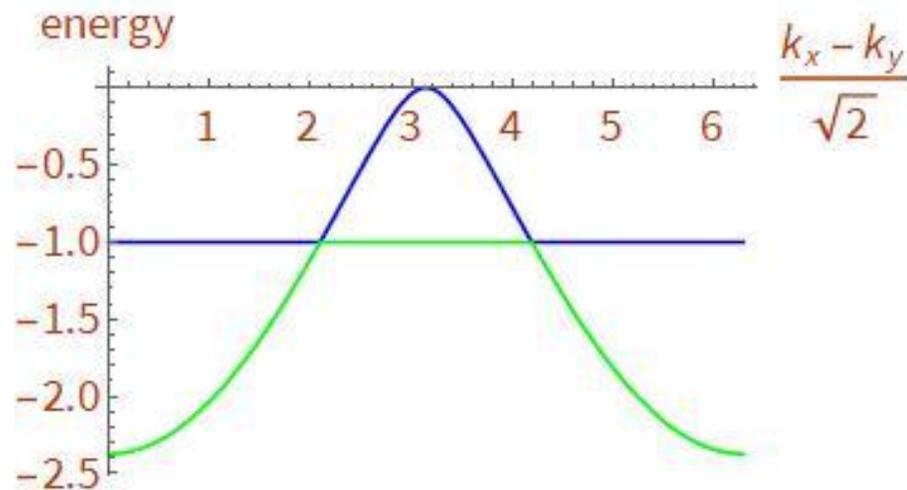
Hamiltonien de kagomé ($t' = 1$)

Il y a un point de contact parabolique ($w = 0$ ou 2)
et deux points de Dirac (analogues au graphène)



Cas intermédiaire ($t' = 1/2$)

On retrouve les deux points de Dirac entre les bandes supérieures.
On observe deux points de Dirac tiltés entre les deux bandes inférieures (le cône de Dirac admet un axe parallèle à xOy).



Expressions analytiques

← signe

- Les énergies sont $e_n(\vec{k}, t') = (1 - 2n^2) \times$

$$2 \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{2 + t'^2 + \cos(k_x) + \cos(k_y) + t'^2 \cos(k_x + k_y)} \cos \frac{\theta(\vec{k}, t') + n \pi}{3} \text{ avec}$$

$$\theta(\vec{k}, t') = \left\{ \begin{array}{l} \tan^{-1} \sqrt{\frac{2}{27t'^3} \frac{(2 + t'^2 + \cos(k_x) + \cos(k_y) + t'^2 \cos(k_x + k_y))^3}{(1 + \cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_x + k_y))^2}} \quad \textcircled{1} \\ \pi - \tan^{-1} \sqrt{\frac{2}{27t'^3} \frac{(2 + t'^2 + \cos(k_x) + \cos(k_y) + t'^2 \cos(k_x + k_y))^3}{(1 + \cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_x + k_y))^2}} \quad \textcircled{2} \end{array} \right.$$

Cas ① si $1 + \cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_x + k_y) > 0$, cas ② sinon.

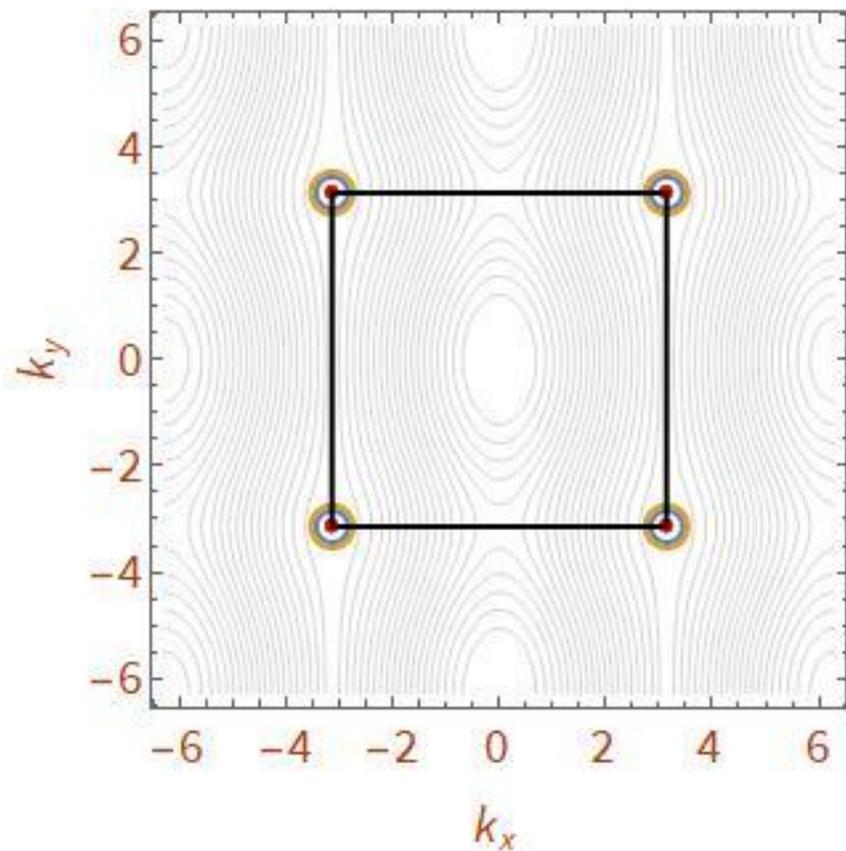
- n peut prendre les valeurs 0 (supérieur), 1 (intermédiaire) ou -1 (inférieure).

Expressions analytiques (suite)

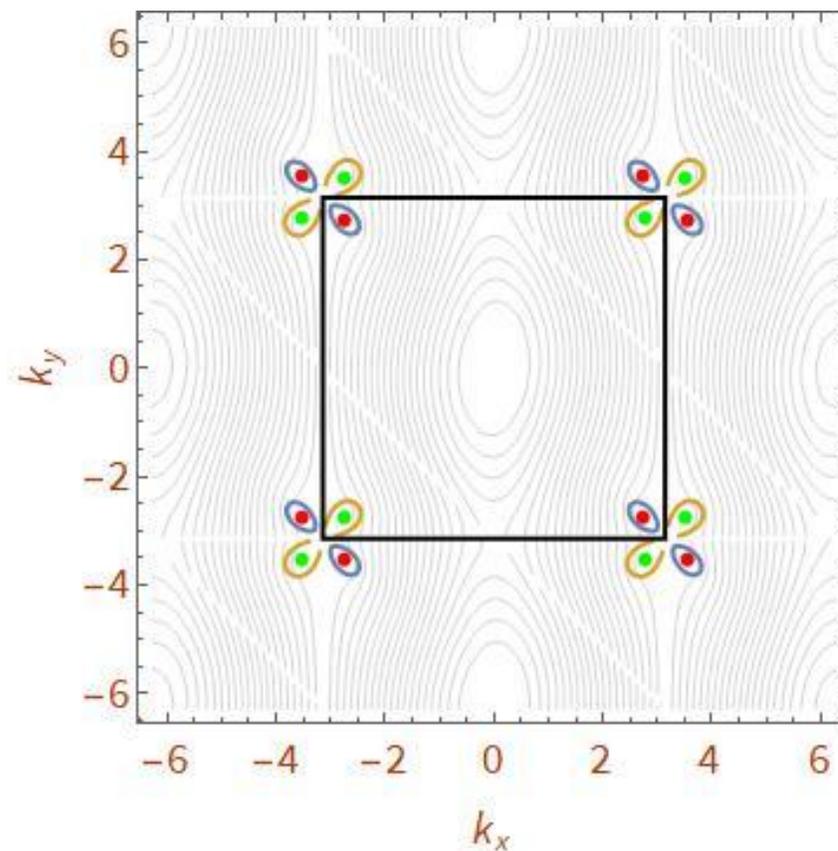
- Les vecteurs propres s'écrivent :

$$\vec{v}_n(\vec{k}, t') = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) + \frac{t'}{2} \cos\left(\frac{k_x + k_y}{2}\right) e_n(\vec{k}, t') \\ t' \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{k_x + k_y}{2}\right) + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) e_n(\vec{k}, t') \\ - \cos\left(\frac{k_x}{2}\right)^2 + \frac{1}{4} e_n(\vec{k}, t')^2 \end{pmatrix}$$

singularités

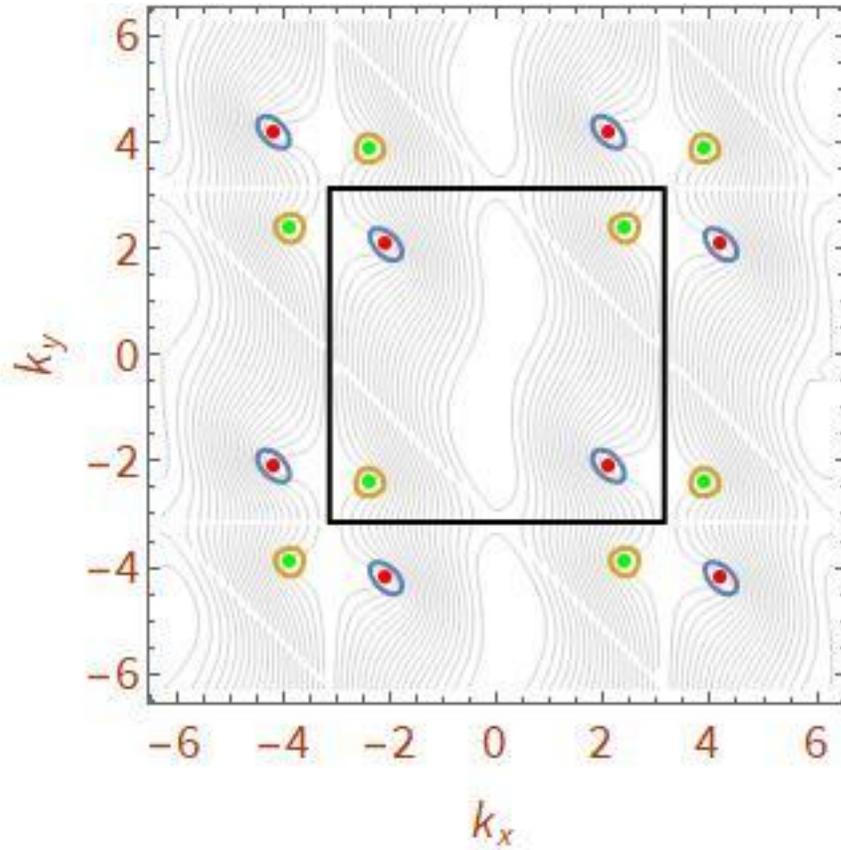


$t' = 0$ Lieb

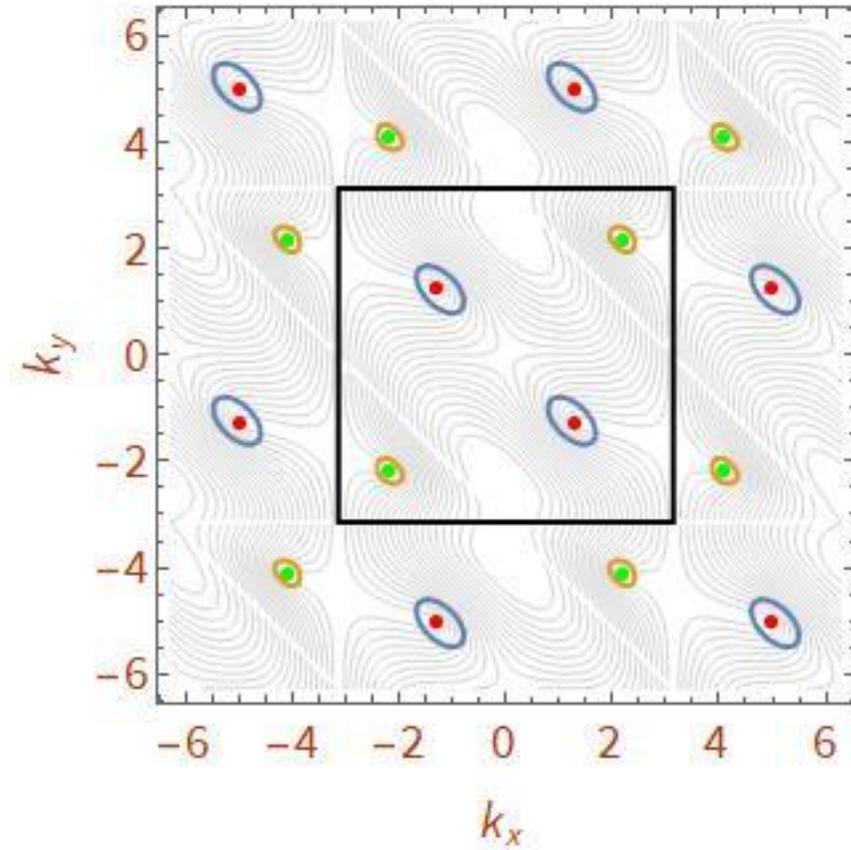


$t' = 1/5$

Singularités (suite)

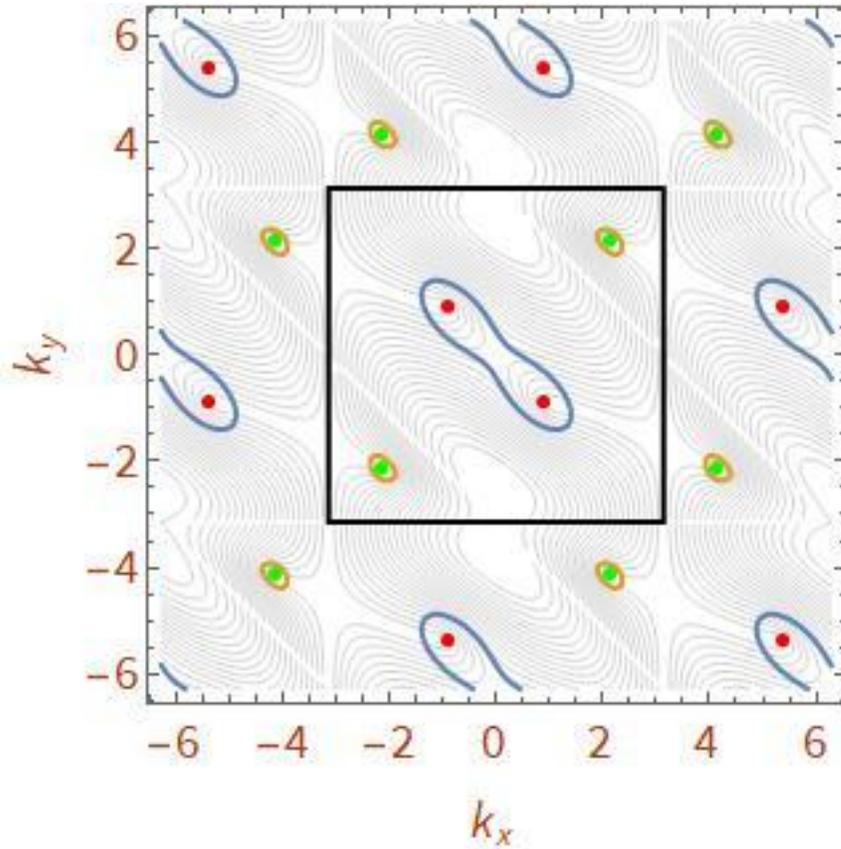


$$t' = 1/2$$

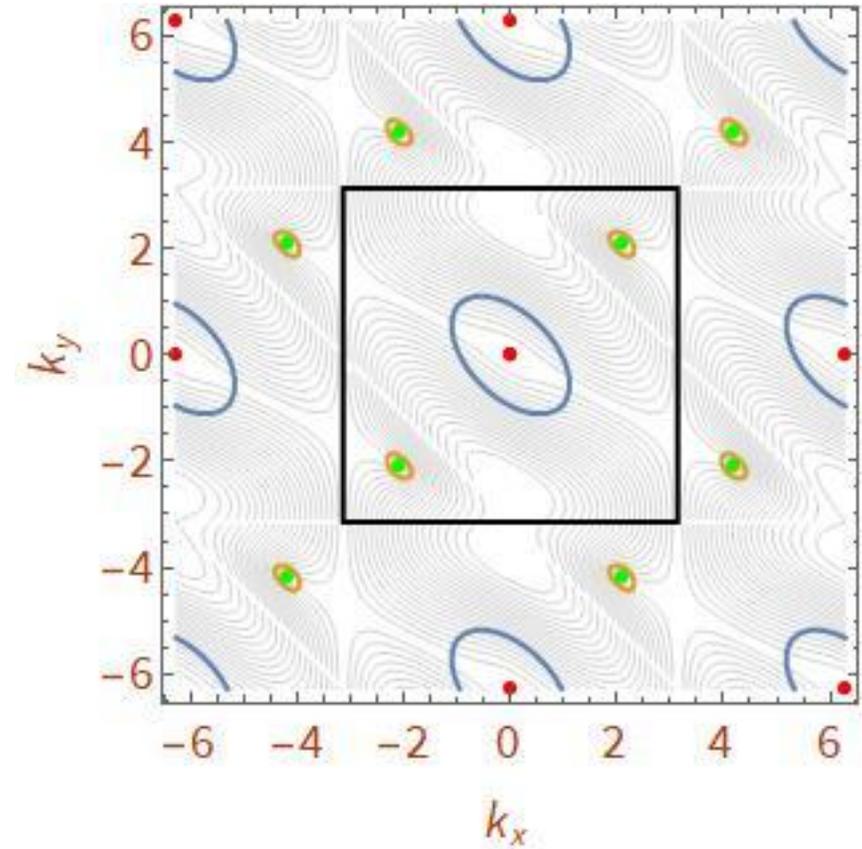


$$t' = 4/5$$

Singularités (suite)

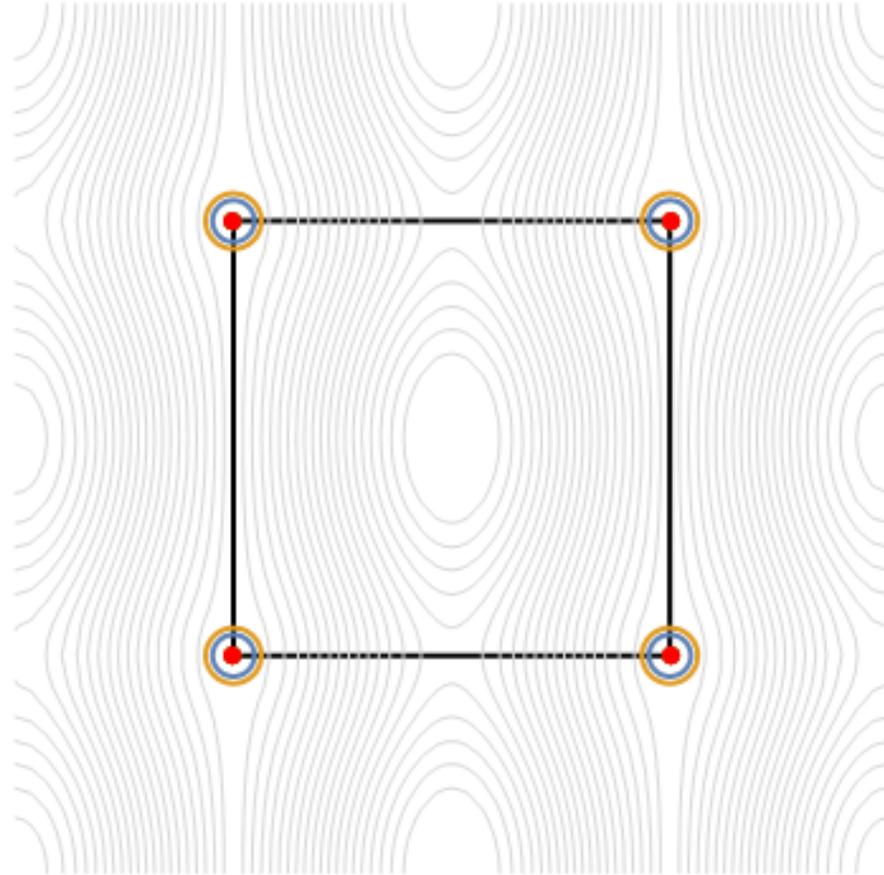


$t' = 9/10$



$t' = 1$ kagomé

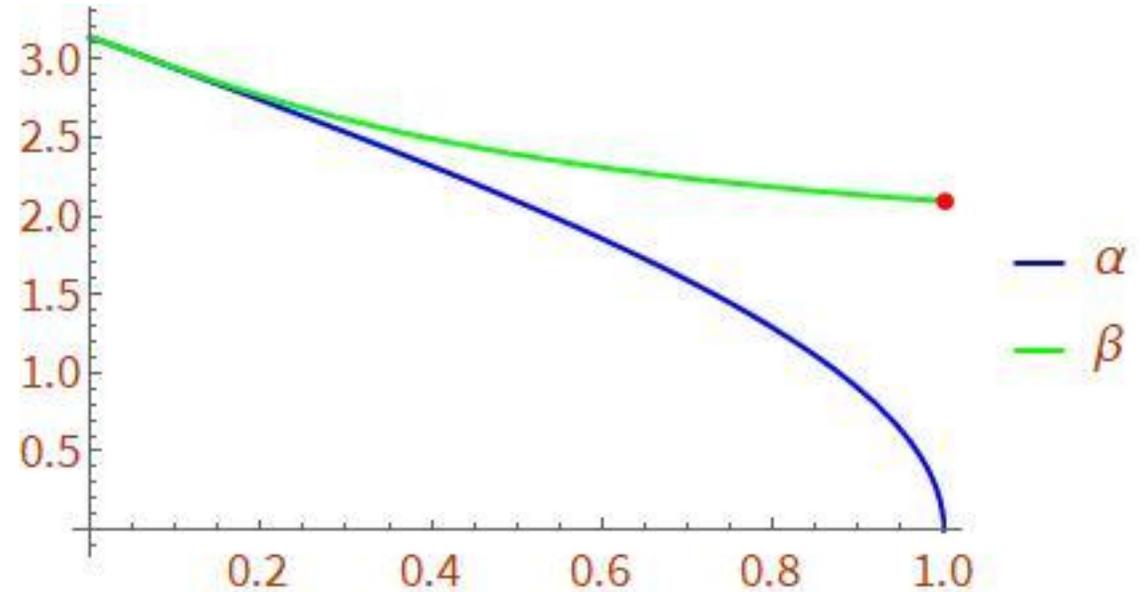
Singularités (fin)



Singularités

Positions des singularités:

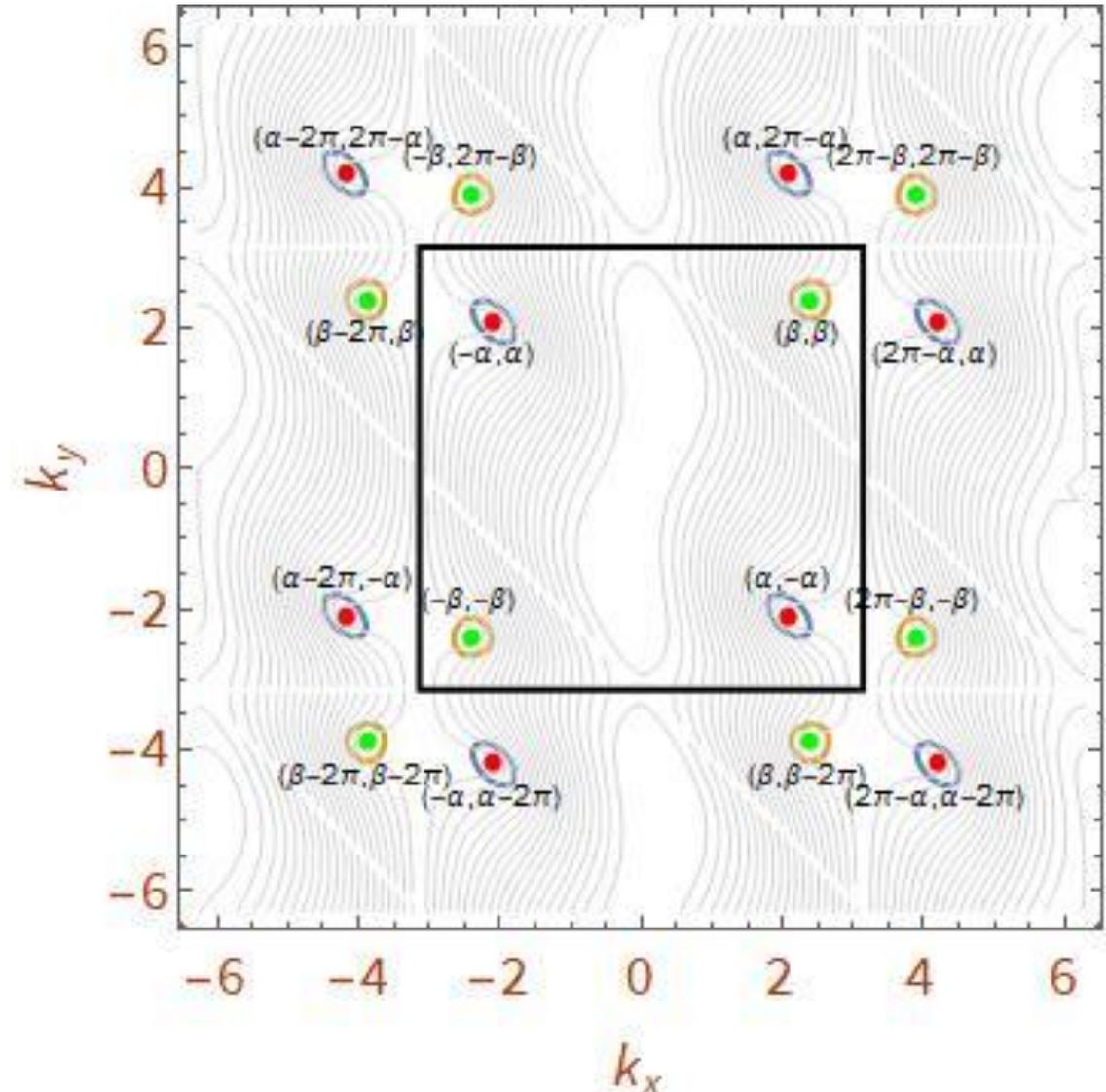
- $\alpha_{t'} = 2 \cos^{-1}(t')$
- $\beta_{t'} = 2 \cos^{-1}\left(\frac{\sqrt{1+8t'^2}-1}{4t'}\right)$



Singularités

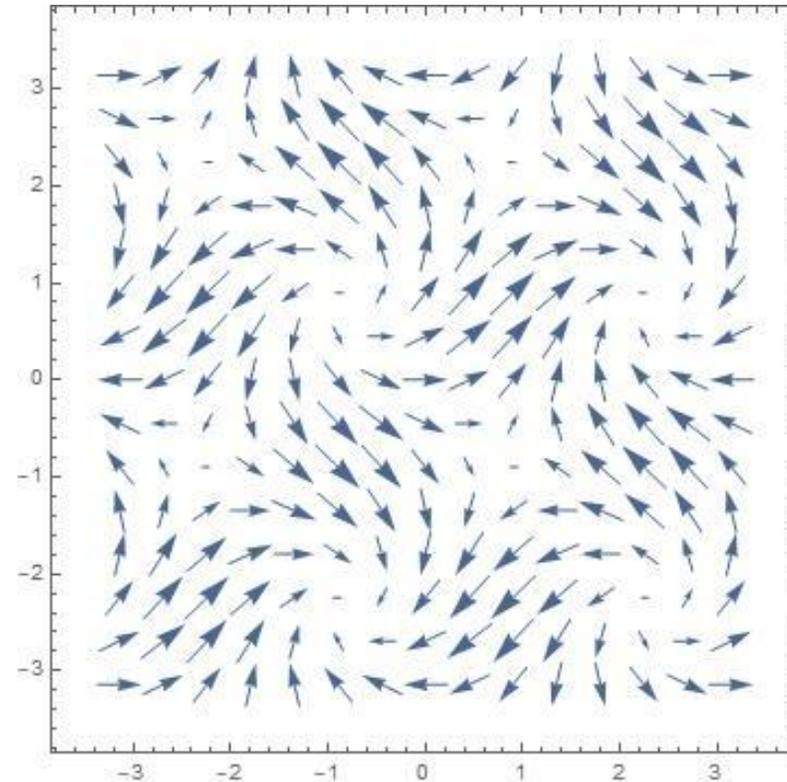
Positions des singularités:

- $\alpha_{t'} = 2 \cos^{-1}(t')$
- $\beta_{t'} = 2 \cos^{-1}\left(\frac{\sqrt{1+8t'^2}-1}{4t'}\right)$



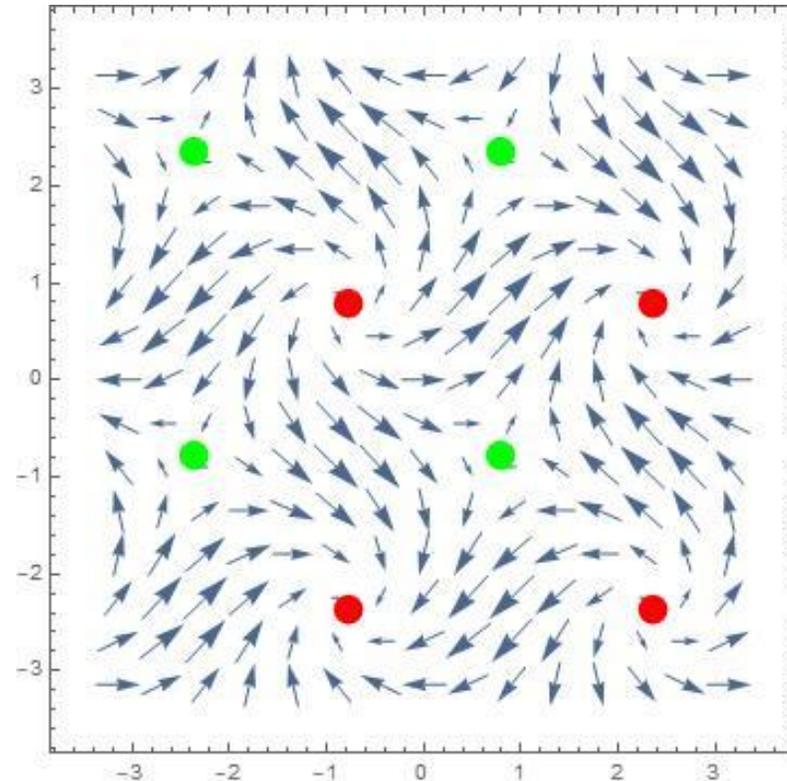
État de l'art

- On projette localement autour d'une singularité sur 2 bandes.
- À 2 bandes, les deux vecteurs propres sont orthogonaux.
- On peut définir un pseudo-spin à partir d'un vecteur propre (v_x, v_y)
- On regarde les lignes de champ



État de l'art

- On projette localement autour d'une singularité sur 2 bandes.
- À 2 bandes, les deux vecteurs propres sont orthogonaux.
- On peut définir un pseudo-spin à partir d'un vecteur propre (v_x, v_y) .
- On regarde ses lignes de champ.
- On identifie les singularités ● et ●.
- On distingue les enroulements positifs ($w = 1$) et négatifs ($w = -1$).

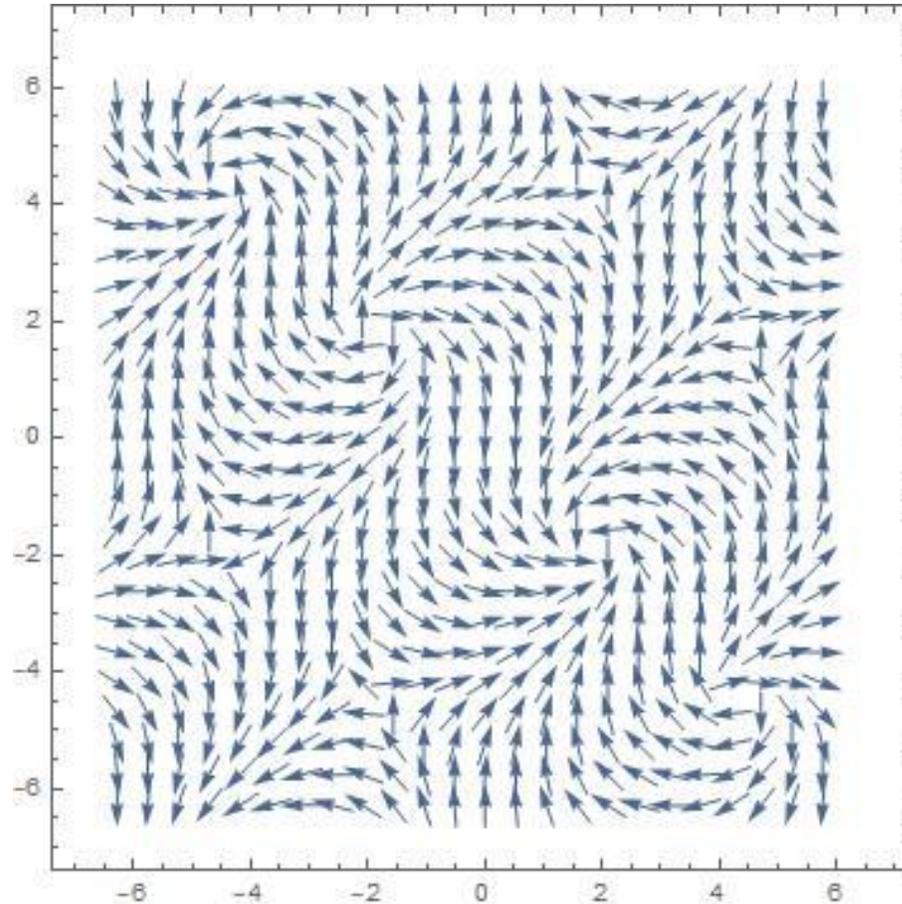


Représentation des singularités

- Pour chaque vecteur propre, on peut représenter (v_x, v_y) ou (v_x, v_z) ou (v_y, v_z) .
- On peut se référer aux angles (θ, φ) des sphériques
$$\begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}.$$
- Ça fait au total 6 angles pour les trois vecteurs; on réduit de 6 à 3.
- Il ne faut pas oublier les phases, qui ne sont pas déterminées.
- On préfèrerait représenter $\rho = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} (\overline{v_x} \quad \overline{v_y} \quad \overline{v_z})$ le projecteur sur l'état physique associé au vecteur propre

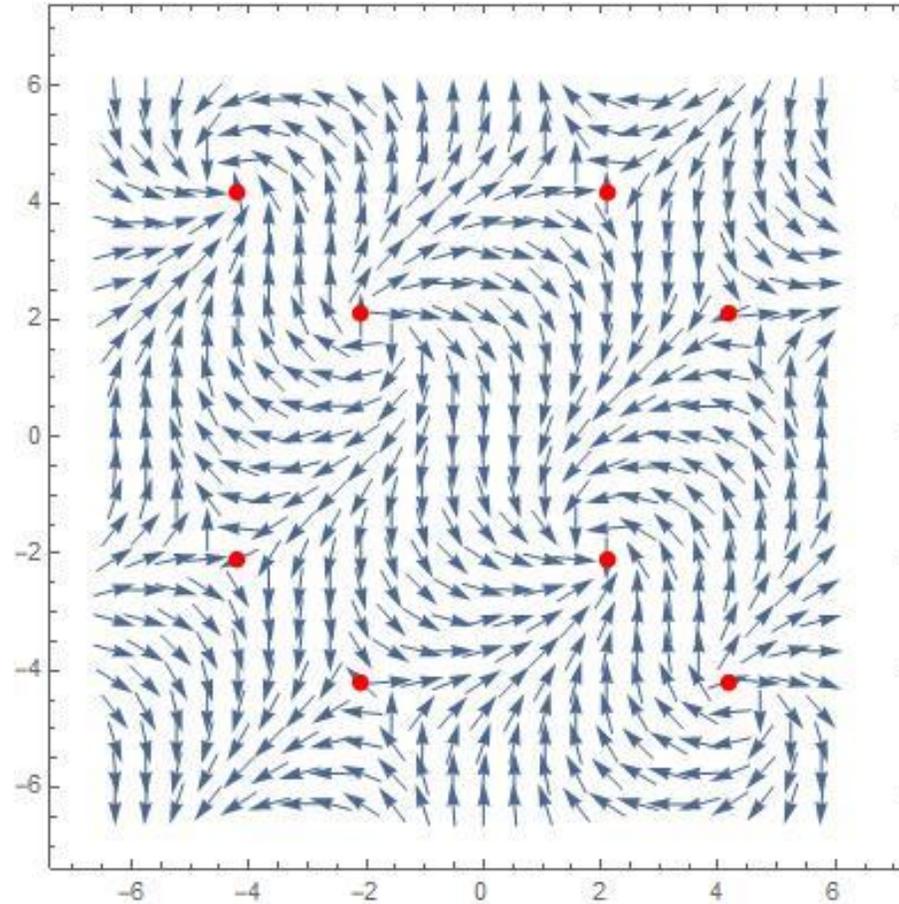
Carte des singularités

Carte de $(\cos 2\varphi, \sin 2\varphi)$
pour le vecteur propre
associé au niveau inférieur.



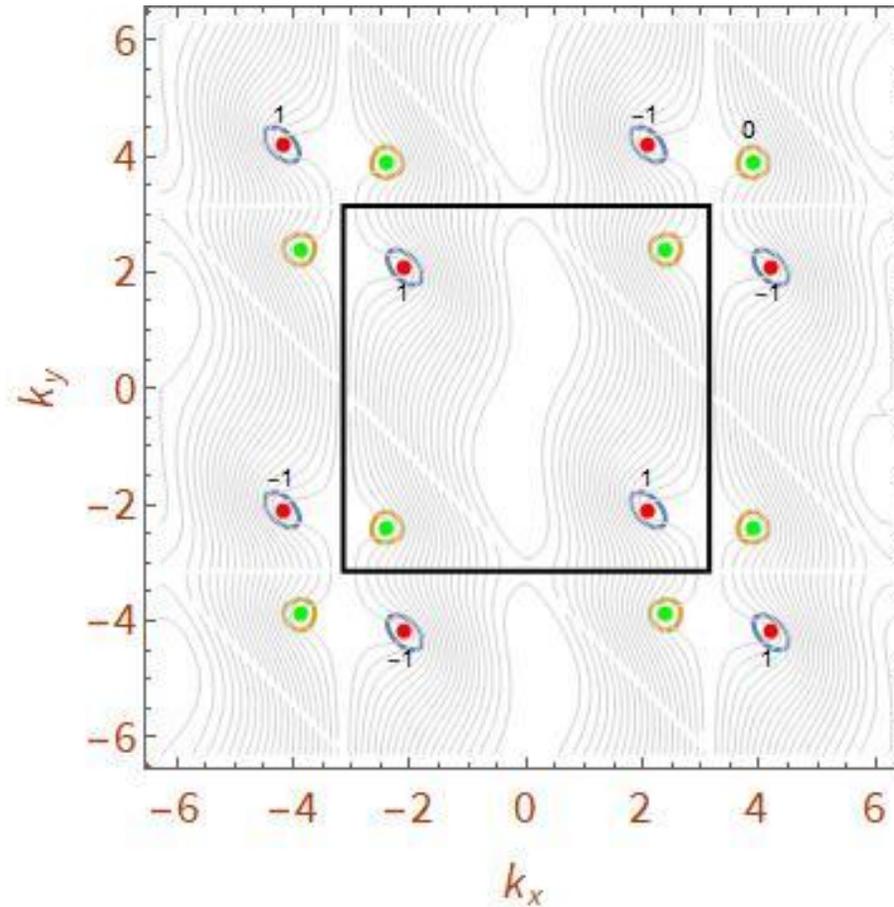
Carte des singularités

Carte de $(\cos 2\varphi, \sin 2\varphi)$
pour le vecteur propre
associé au niveau inférieur.



Exemple de carte des singularités

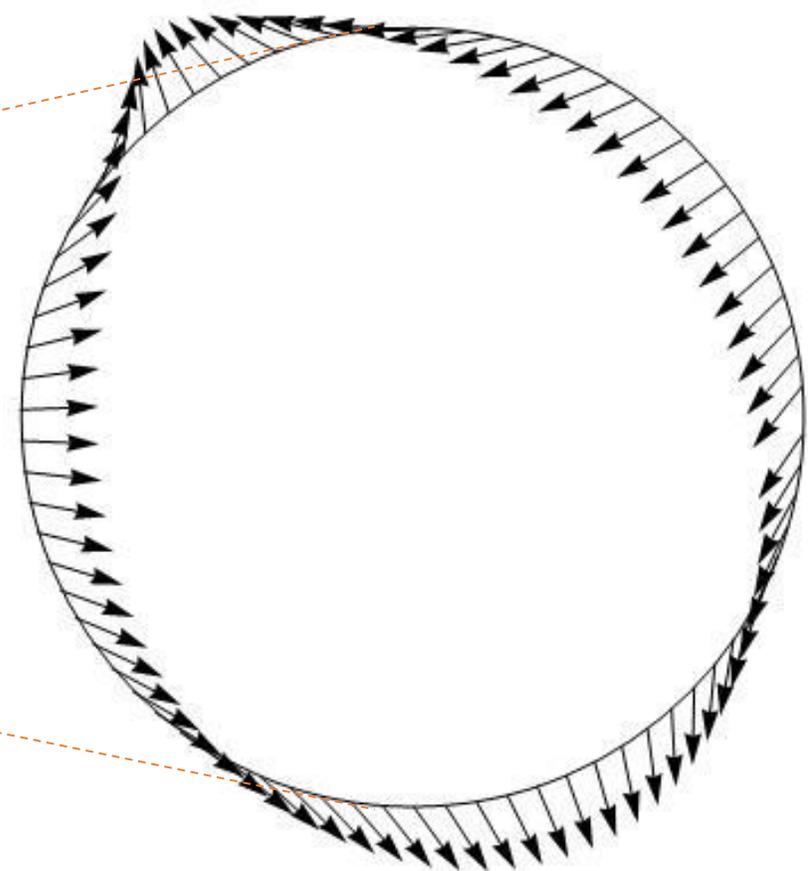
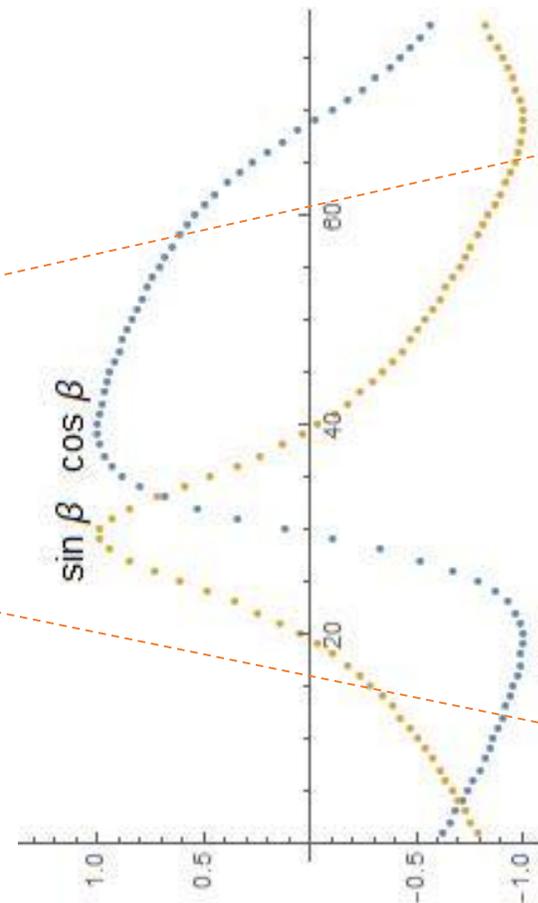
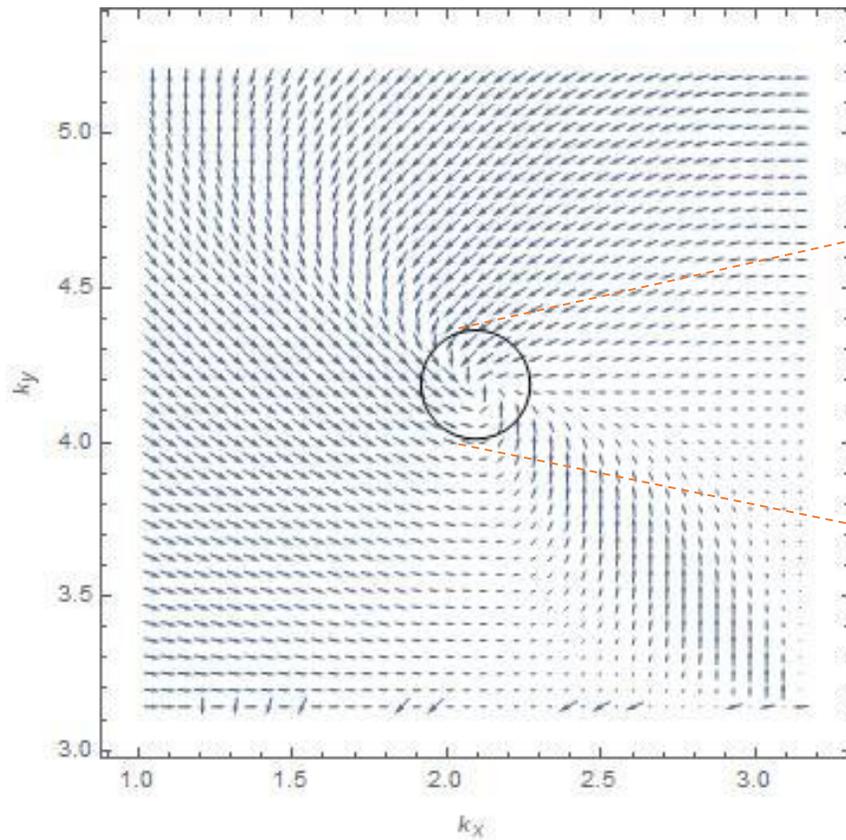
Singularités dans la carte de $(\cos 2\varphi, \sin 2\varphi)$ pour le vecteur propre associé au niveau inférieur.



Méthode d'analyse des singularités

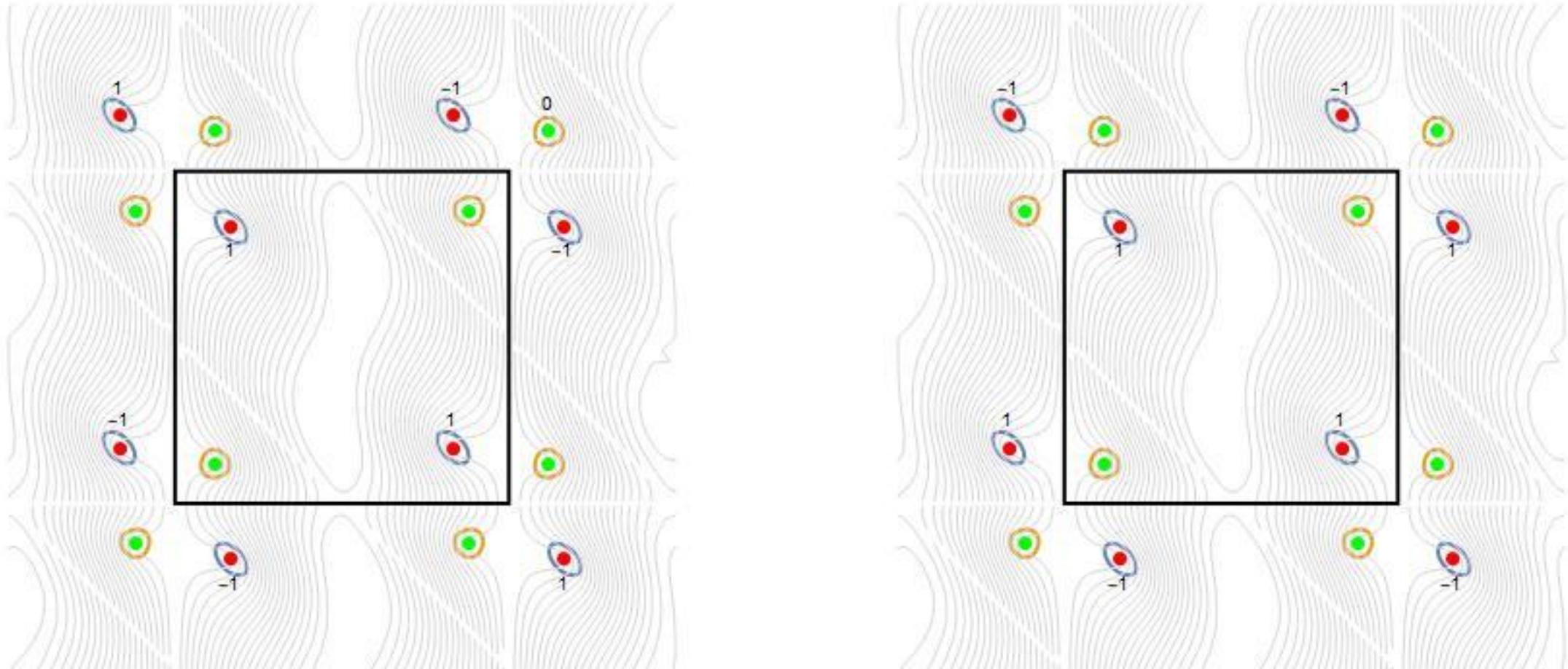
- On étudie les points $(\alpha, 2\pi - \alpha)$ sur l'angle 2φ .

Lignes de champs



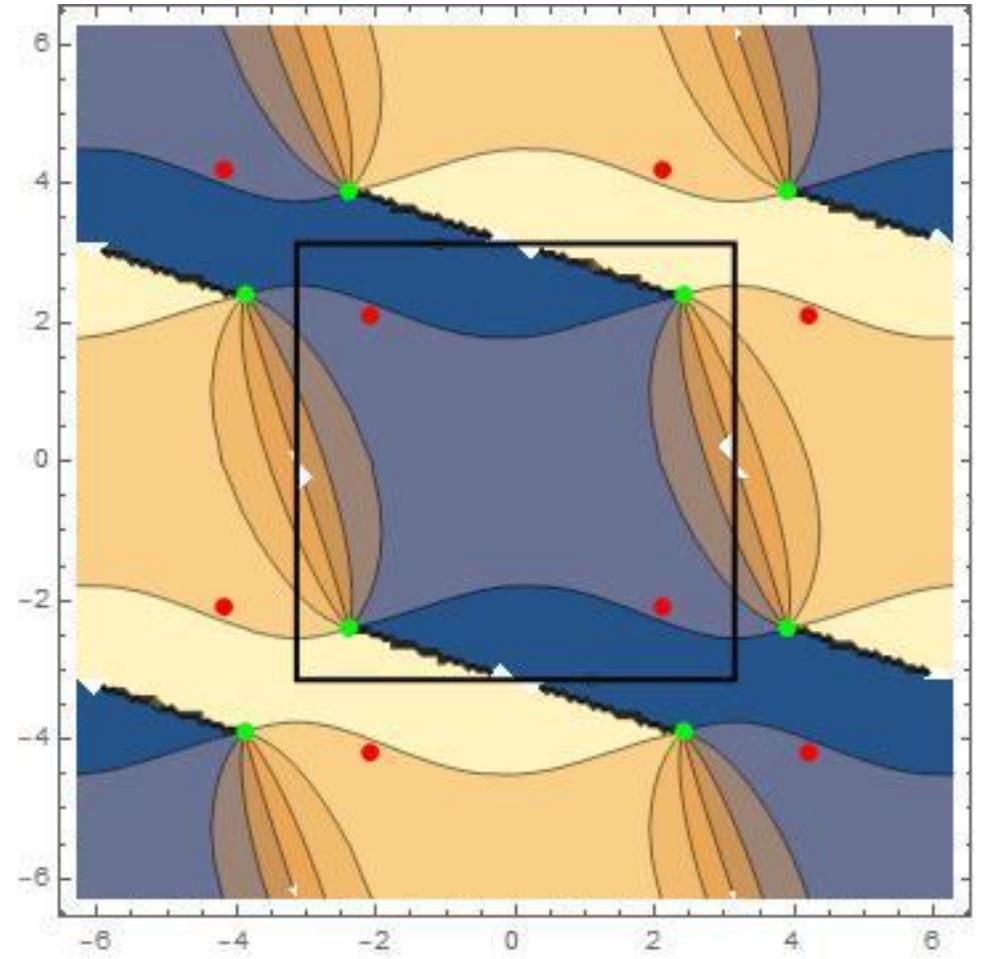
Analyse des singularités (suite)

- Voici les résultats avec 2φ et 2θ pour le niveau inférieur:



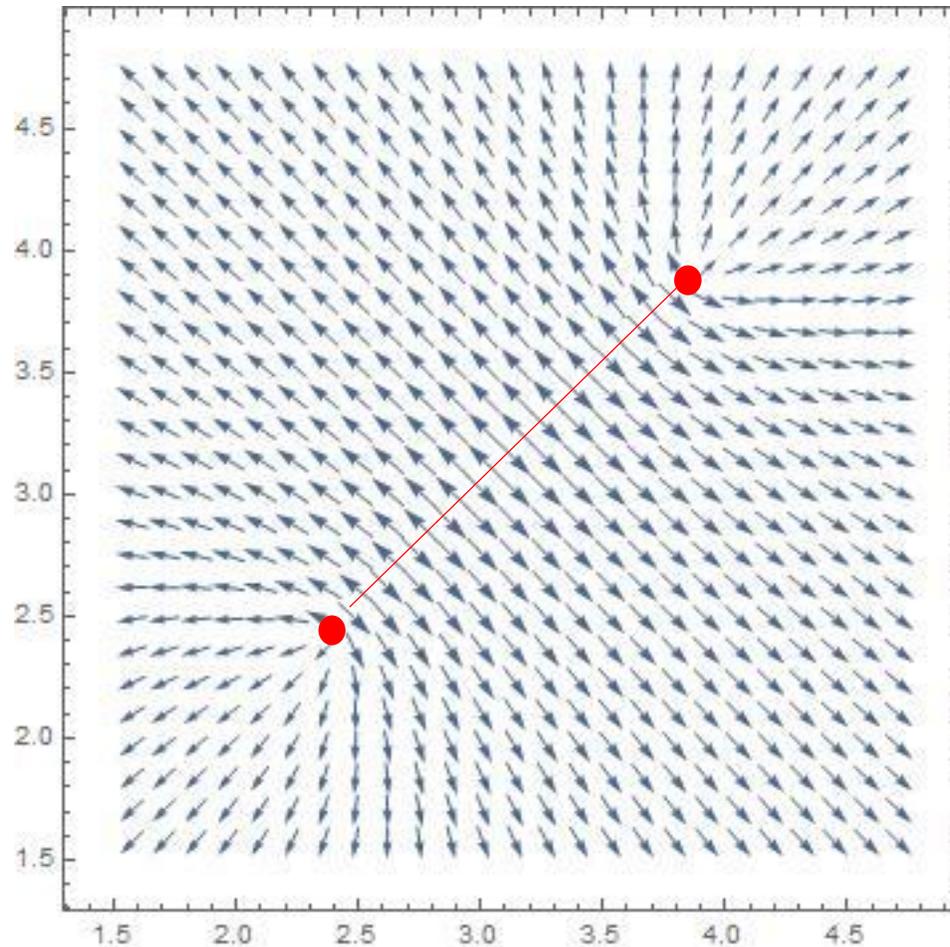
Difficultés

- On observe des valeurs différentes selon les cartes.
- Il est donc nécessaire de travailler l'interprétation des objets sur lesquels on trouve des enroulements non triviaux.
- Les phases peuvent varier de façon discontinue : ici v_x du niveau supérieur (dans ce cas, $|v_x|$ convient bien).



Autre interprétation

- On obtient cette ligne droite de discontinuité reliant les singularités diagonales



Équations en coordonnées de Bloch sphère généralisée de dimension 8

- On peut décomposer tout état, qui est représenté par un projecteur orthogonal ρ sur la base des états de spin 1, soit les 8 matrices:

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$\lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

Équations en coordonnées de Bloch(suite)

- On a $\rho = a_1\lambda_1 + a_2\lambda_2 + a_3\lambda_3 + a_4\lambda_4 + a_5\lambda_5 + a_6\lambda_6 + a_7\lambda_7 + a_8\lambda_8$
- Les composantes vérifient les équations suivantes:

$$a_4^2 + a_5^2 + a_6^2 + a_7^2 + \frac{4}{3} \left(a_8 + \frac{1}{4} \right)^2 = \frac{3}{4}$$

$$a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = \frac{1}{3} (a_8 + 1)^2$$

$$\frac{2}{\sqrt{3}} a_3 (1 - 2a_8) = (a_4^2 + a_5^2)^2 - (a_6^2 + a_7^2)^2$$

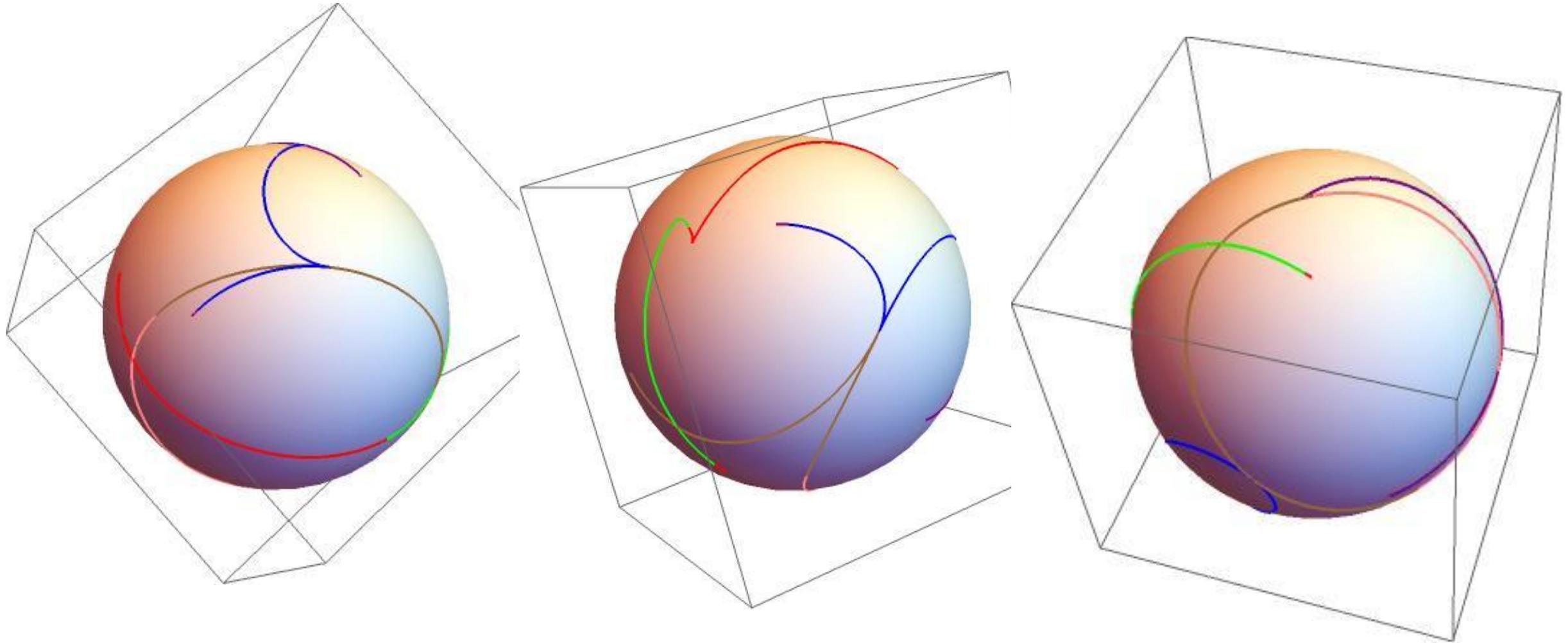
$$\tan^{-1} \left(\frac{a_2}{a_1} \right) = \tan^{-1} \left(\frac{a_5}{a_4} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{a_7}{a_6} \right) \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{3}} a_1 (1 - 2a_8) = a_4 a_6 + a_5 a_7 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} a_2 (1 - 2a_8) = a_5 a_6 - a_4 a_7 \end{array} \right\}$$

Équations en coordonnées de Bloch(suite)

- Dans le cas réel, on a $a_2 = a_5 = a_7 = 0$
- Les équations deviennent:

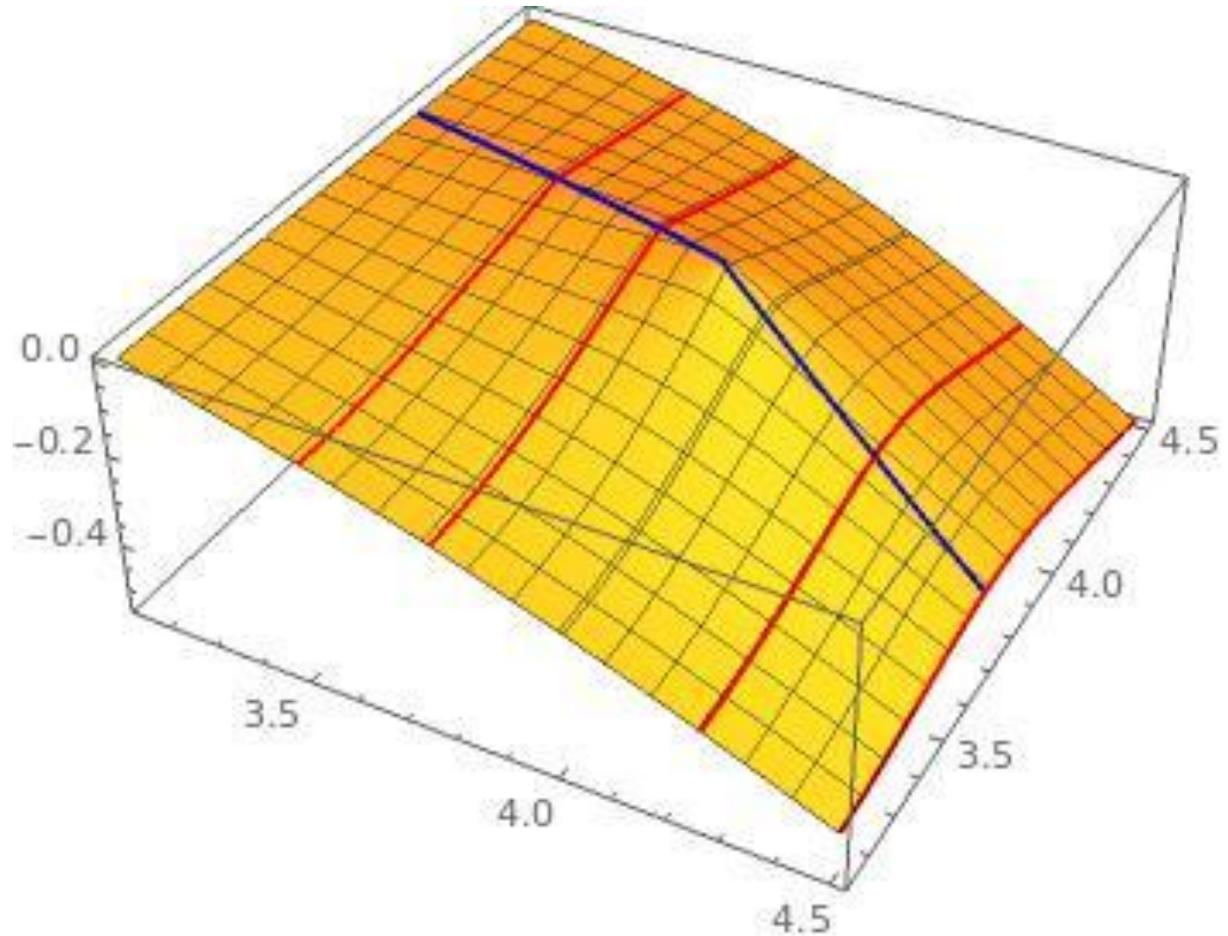
$$a_4^2 + a_6^2 + \frac{4}{3} \left(a_8 + \frac{1}{4} \right)^2 = \frac{3}{4} \qquad \cancel{a_1^2 + a_3^2 = \frac{1}{3} (a_8 + 1)^2} \text{ inutile}$$
$$\frac{1}{\sqrt{3}} a_1 (1 - 2a_8) = a_4 a_6 \qquad \frac{2}{\sqrt{3}} a_3 (1 - 2a_8) = a_4^4 - a_6^4$$

Représentation sur une sphère



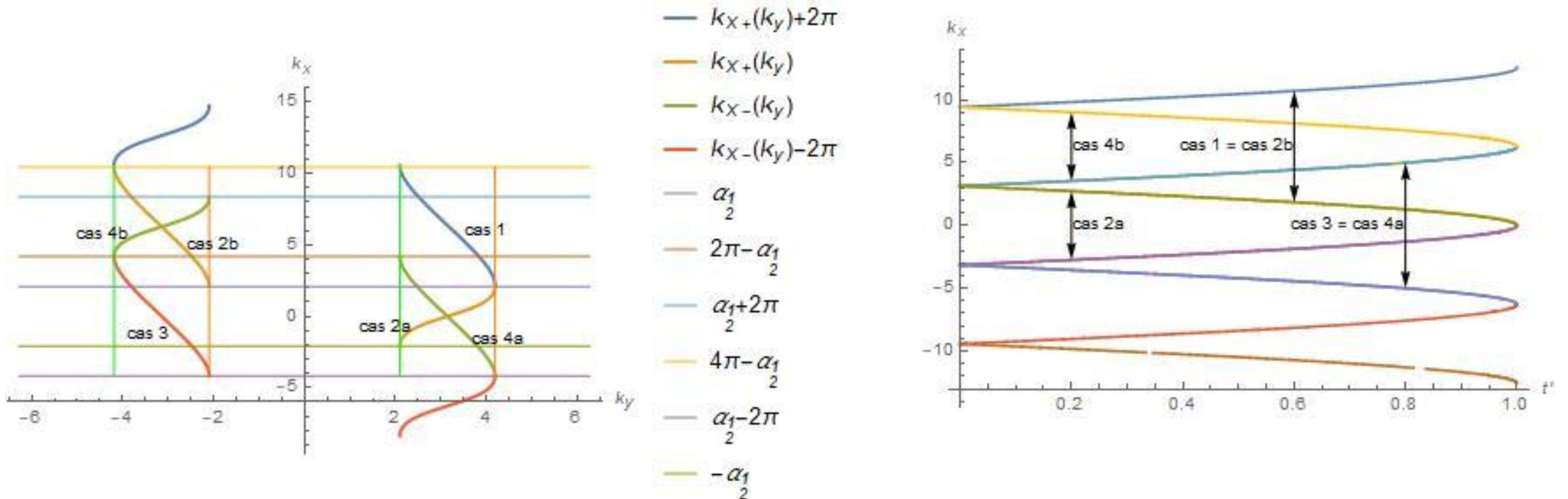
Discontinuités de la représentation

- N admet une ligne de discontinuité:



Résolution : outils analytiques

- Les singularités se situent dans la région $N_n(\vec{k}) = 0$
- Les solutions s'écrivent : $k_{x\pm}(k_y) = 2 \cos^{-1} \left(\pm \cos \left(\frac{k_y}{2} \right) / t' \right) - k_y$

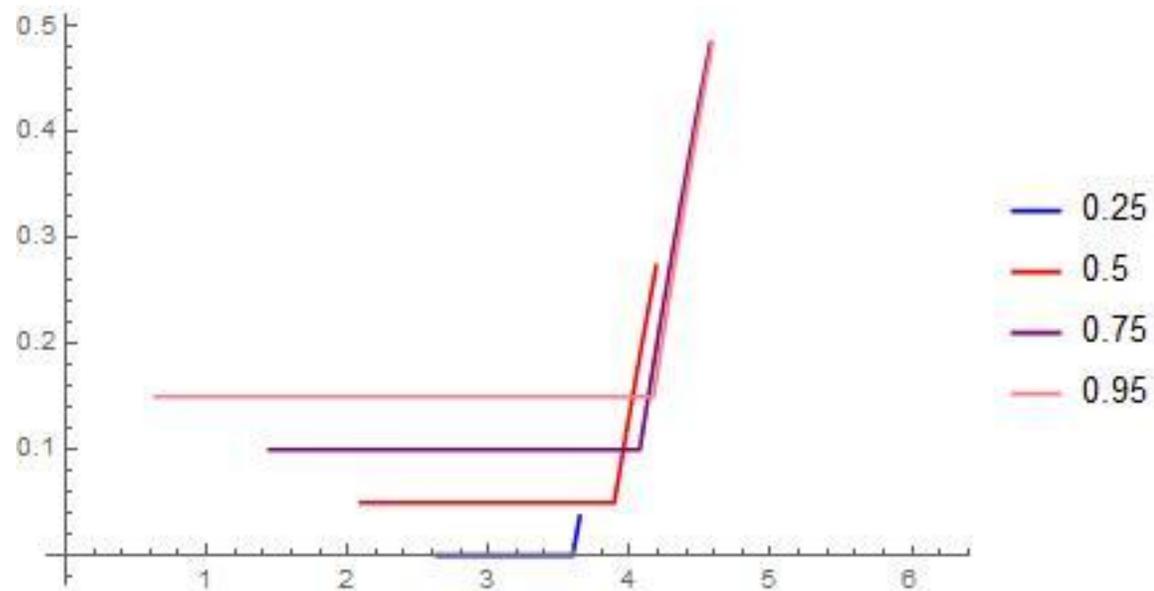


Difficultés analytiques

- $k_x = k_{x\pm}(k_y)$ ne suffit pas, il faut une autre condition, qui se simplifie si cette première est vérifiée:

- $$\sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{3 + \cos(k_x) + 2\cos(k_y)} \cos\left(\frac{\theta_n(\vec{k}) + n\pi}{3}\right) = \cos\left(\frac{k_x}{2}\right)$$

- Elle est vérifiée sur des régions restreintes:



Conversion avec les paramètres de Bloore

- $\rho = \begin{pmatrix} \alpha^2 & \alpha\beta & \alpha\gamma \\ \alpha\beta & \beta^2 & \beta\gamma \\ \alpha\gamma & \beta\gamma & \gamma^2 \end{pmatrix}$ représentation de Bloore dans le cas réel

- On a $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 0$ dans cette représentation.

- Les équations de passage Gell-Mann Bloore sont :

$$a_1 = \sqrt{3}\alpha\beta$$

$$a_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}(\alpha^2 - \beta^2)$$

$$a_4 = \sqrt{3}\alpha\gamma$$

$$a_6 = \sqrt{3}\beta\gamma$$

$$a_8 = \frac{1}{2}(3\alpha^2 + 3\beta^2 - 2) = \frac{1}{2}(1 - 3\gamma^2)$$