



UNIVERSITÉ DE NICE SOPHIA ANTIPOLIS
PROJET TUTEURÉ DE LICENCE DE PHYSIQUE

ANNÉE 2018

Exemples d'Isolants Topologiques en mécanique

Auteurs:

William BONTEMPS
Xavier DE BORTOLI

Encadrants:

Matthieu BELLEC
Fabrice MORTESSAGNE

Projet réalisé à *l'Institut de Physique de Nice*



April 3, 2018

Sommaire

1	Introduction	1
1.1	Topologie	1
1.2	Isolants	1
1.3	Isolants Topologiques	1
1.4	Objectif du stage	2
2	Modes de vibrations des chaînes atomiques simples et diatomiques	3
2.1	Chaîne monoatomique simple	3
2.2	Chaîne linéaire diatomique	3
3	Chaîne finie de masses-ressorts	4
3.1	Résolution analytique	4
3.1.1	Chaîne : 2 masses 3 ressorts couplés	4
3.1.2	Chaîne : N Masses N-1 Ressorts couplés sans murs	5
4	Simulation Numérique	7
4.1	Cas N pair	7
4.2	Cas N impair	8
5	Conclusion	9

1 Introduction

1.1 Topologie

La topologie est une discipline des mathématiques qui vise à classer les objets par leur forme. Des objets sont topologiquement équivalents si on peut les déformer l'un en l'autre sans singularité, c'est à dire sans les trous ou les découper, comme l'illustre ci-dessous la figure 1, la tasse et le bagel ayant le même nombre de "trous" sont topologiquement similaires. Par exemple une sphère est topologiquement équivalente à un cube. En revanche, une tasse appartient à une classe topologique différente.



Figure 1: Déformation continue d'une tasse en bagel

Il y a un demi-siècle, le prix Nobel de physique **George Gamow**, observait que la topologie était, avec la théorie des nombres, le seul domaine des mathématiques qui n'avait pas d'applications en physique.

Depuis, la topologie est présente dans de nombreux domaines de la physique, on peut la retrouver en cosmologie, mécanique quantique, optique, géologie et encore bien d'autres domaines d'applications.

En 2016 l'Académie Royale des Sciences de Suède a choisis de décerner le prix Nobel de physique à trois théoriciens, **J. Thouless**, **F. Duncan M. Haldane** et **J. Michael Kosterlitz** pour leurs "*découvertes théoriques des transitions de phases topologiques et des phases topologiques de la matière*".

Récompensés pour leur travaux dans les années 70 et 80, ces trois théoriciens ont utilisé des arguments topologiques pour expliquer les étranges phénomènes de la matière à très basses températures (proches du zéro absolu) et à deux dimensions.

Plus récemment la topologie appliquée en physique de la matière condensée a permis le développement physique et expérimental des isolants topologiques.

1.2 Isolants

D'une façon générale, les propriétés de transport ondulatoire d'un système peuvent être étudiées en analysant la relation de dispersion qui relie k , le nombre d'onde et ω la pulsation.

Considérons à présent la figure 2b, elle nous montre la relation de dispersion de deux matériaux différents, le premier 2a est conducteur et le second est un isolant 2b qui est caractérisé par le gap (encadré en rouge).

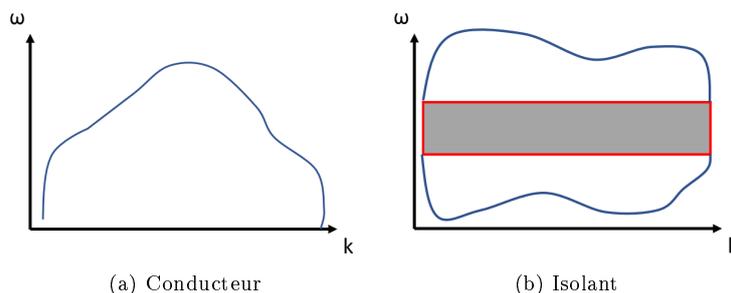


Figure 2: Courbe de dispersion typique d'un conducteur et d'un isolant.

1.3 Isolants Topologiques

Un isolant topologique est un matériau aux propriétés de transport électronique étonnantes : il est à la fois isolant en volume et conducteur en surface.

L'exemple le plus évident est l'effet Hall quantique (EQH) mis en évidence par **Klaus Von Klitzing** en 1980. L'effet Hall quantique se manifeste dans un gaz d'électrons bi-dimensionnel soumis à une basse température et à

un fort champ magnétique, **Klitzing** a observé que la résistance devenait constante et indépendante du champ magnétique. L'expérience et la mesure de la résistance sont illustrées sur la figure 3b et 3c.

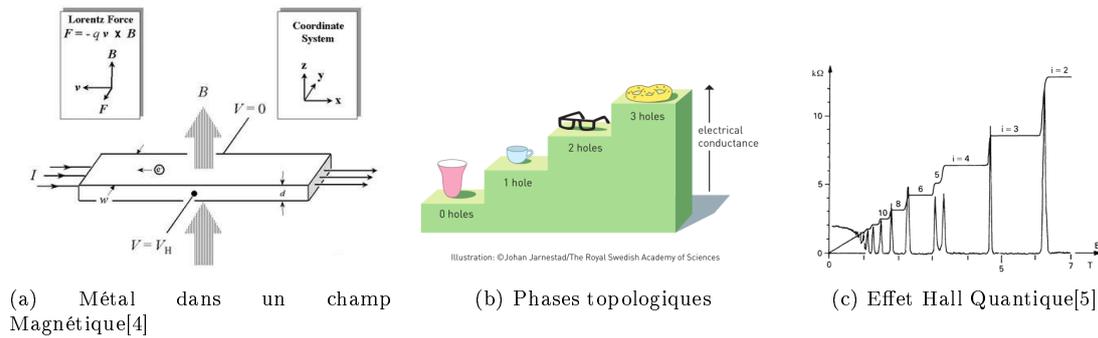


Figure 3: EHQ

Comme l'illustre les figures 3b et 3c on peut faire un rapprochement entre les phases topologiques et les plateaux de la figure 3c. Chaque plateau représente un nouveau "trou" dans le matériaux étudié.

La mesure de la résistance dans l'effet Hall quantique est très précise, avec neuf chiffres après la virgule [2]. **David Thouless** et ses collaborateurs ont relié cette valeur à une grandeur topologique globale du système.

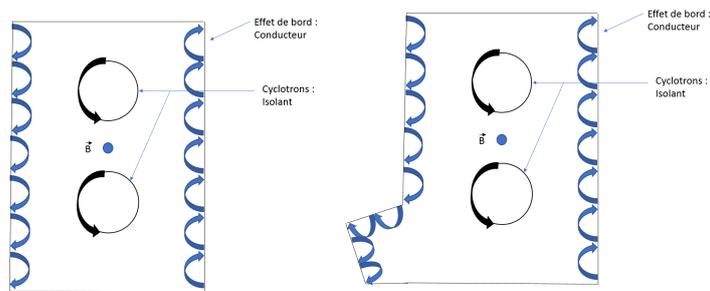


Figure 4: Gaz d'électrons soumis à un champ magnétique

La figure 4 illustre une vision classique de cet effet, ce champ magnétique va engendrer une rotation des électrons au sein du gaz. A l'intérieur du système les électrons sont localisés sur cette orbite, aux bords du système les électrons sont forcés à se déplacer. De plus ces états de bord sont insensible aux impuretés. Une trajectoire près des bord repars toujours dans la même direction même après une collision sur une impureté. Le système est donc isolant en volume et conduit parfaitement le courant sur les bords.

1.4 Objectif du stage

Le but projet est d'illustrer un cas similaire à celui de l'effet Hall quantique, grâce à la mécanique avec des outils plus simple. On utilisera donc les cas des chaines atomiques infini puis le cas des chaines de masses-ressorts couplés.

Par la suite le but sera d'illustrer et d'étudier ces concepts de transport topologique en s'appuyant sur des systèmes mécaniques simples composés d'un arrangement de briques Lego (figure 5).

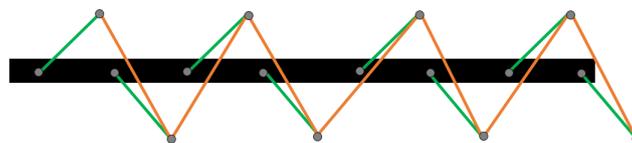


Figure 5: Transport topologique : Système mécanique schématisé

2 Modes de vibrations des chaînes atomiques simples et diatomiques

2.1 Chaîne monoatomique simple

Considérons une chaîne de N atomes de même masse. Soit x_n la position du n -ième atome déplacé de sa position d'équilibre $x_n^0 = na$, a représente la distance entre deux atomes et γ est le terme de couplage entre chaque atome. On appellera $u_n = x_n - x_n^0$ le déplacement de l'atome à partir de la position d'équilibre. On applique les conditions de périodicité : $x_0 = x_N$.

L'équation du mouvement de l'atome n se réduit à :

$$m\omega^2 u_n = \gamma(2 - e^{ika} - e^{-ika})u_n \quad (1)$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \quad (2)$$

On veut à présent savoir quelles sont les parties de ce spectre qui correspondent réellement aux modes de vibration.

Les modes k et $k + 2\pi/a$ décrivent la même vibration collective puisque :

$$u_n^k = e^{ikna - i\omega t}$$

$$u_n^{k + \frac{2\pi}{a}} = e^{ikna - i\omega t} e^{i\frac{2\pi}{a}na}$$

Seul l'intervalle de base de longueur $2\pi/a$ comporte les modes indépendants dont le nombre est :

$$\frac{2\pi}{a} \frac{1}{2\pi/L} = \frac{L}{a} = N$$

Ce sont les N degrés de liberté. La relation de dispersion montre qu'il y a une distribution des pulsations comprises entre 0 et $\omega_M = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}}$. Dans la figure 6 ω représente la pulsation et ka le nombre d'onde. On y aperçoit pas de gap.

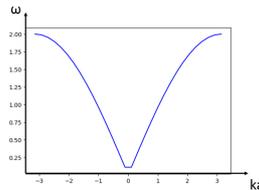


Figure 6: Courbe de dispersion d'une chaîne monoatomique

1

2.2 Chaîne linéaire diatomique

Soit un cristal unidimensionnel de longueur $L = Na$ (a : maille élémentaire). La maille élémentaire contient deux types atomes : A de masse m_1 et B de masse m_2 (on supposera $m_1 < m_2$). On appelle u_n le déplacement du n -ième atome A et v_n celui du n -ième atome B par rapport à leur position d'équilibre. A l'équilibre les atomes A et B sont équidistants.

Résolution par la mécanique classique

On cherche des solutions sous la forme d'ondes de propagation :

$$u_n = Ue^{-i\omega t} e^{inka}$$

¹Solution complète [1]

$$\nu_n = V e^{-i\omega t} e^{inka}$$

Qui conduisent à un système homogène de deux équations couplées :

$$\begin{pmatrix} 2C - m_1\omega^2 & -C(1 + e^{-ika}) \\ -C(1 + e^{ika}) & 2C - m_2\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 0 \quad (3)$$

$$\Rightarrow \omega^2 = C \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \left[1 \pm \left(1 - \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \right)^{\frac{1}{2}} \right]$$

Voici trois relations de dispersions que nous avons plotté pour différentes valeurs de m_2 .

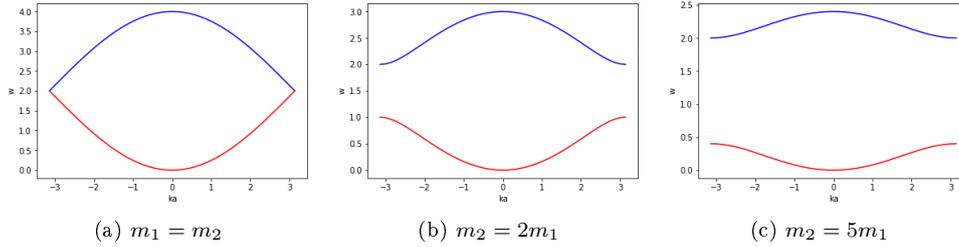


Figure 7: Courbe de dispersion d'une chaîne diatomique.

Ici on remarque bien le cas d'un conducteur devenant un isolant lorsque qu'on change m_2 . Dans le premier graphique 7a m_1 et m_2 sont égales, ensuite dans 7b $m_2 = 2$ et enfin dans 7c $m_2 = 5$. On s'aperçoit clairement de l'ouverture d'un gap lorsque le rapport des masses est différent de 1.

Le but de cette partie était de nous intéresser aux différentes relations de dispersions pouvant être observées sur des chaînes monoatomiques et diatomiques infinie, nous allons à présent étudier le cas de chaînes finies, afin de nous intéresser aux modes de bords visibles dans certaines configurations du système.

3 Chaîne finie de masses-ressorts

Nous allons à présent nous intéresser au cas d'une chaîne finie de masses-ressorts, ce système simple nous permettra d'illustrer signatures typiques des isolants topologiques. Ce chapitre sera divisé en deux parties :

- Premièrement nous résoudrons analytiquement un système simple.
- Puis à l'aide d'une simulation numérique nous étudierons différents les effets de bord associés à différentes configurations d'une chaîne finie

3.1 Résolution analytique

On fait une résolution analytique pour la partie 3.1.1 pour le reste on pose les équations.

3.1.1 Chaîne : 2 masses 3 ressorts couplés

Tout d'abord, on part du système le plus simple possible afin de bien assimilé les bases de cette partie. On choisit une chaîne masses-ressorts avec des mur aux bords du système. (Par la suite un enlèvera ces murs). On se base sur la position des masses et non sur leurs déplacements.

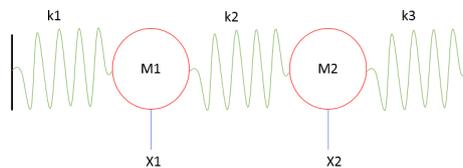


Figure 8: Chaîne 2 Masses 3 Ressorts couplés

Sur la figure 8 les masses et ressort sont à leur positions d'équilibre. M1 et M2 seront noté m_1 et m_2 par la suite, de même pour k_1 , k_2 et k_3 qui seront k_1 , k_2 et k_3 , les k représentent la constante de raideur du ressort, x_1 et x_2 représentent respectivement la position des masses m_1 et m_2 .

On applique à présent la dynamique au système étudié, on obtient donc les équations du mouvement :

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{x}_1 &= -(k_1 + k_2) \cdot x_1 + k_2 \cdot x_2 \\ m_2 \ddot{x}_2 &= k_2 \cdot x_1 - (k_2 + k_3) \cdot x_2 \end{aligned}$$

En divisant par la masse on retrouve les relations suivantes :

$$\ddot{x}_1 = \frac{-(k_1 + k_2)}{m_1} \cdot x_1 + \frac{k_2}{m_1} \cdot x_2 \quad (4)$$

$$\ddot{x}_2 = \frac{k_2}{m_2} \cdot x_1 + \frac{-(k_2 + k_3)}{m_2} \cdot x_2 \quad (5)$$

On simplifie les équations en prenant $m_1 = m_2 = m$ et $k_1 = k_2 = k_3 = k$.

Un peu à présent écrire le système sous forme vectorielle en prenant : $\frac{d^2 \vec{X}}{dt^2} = A \cdot \vec{X}$.

On obtient donc :

$$A = \begin{pmatrix} -2 \cdot \frac{k}{m} & \frac{k}{m} \\ \frac{k}{m} & -2 \cdot \frac{k}{m} \end{pmatrix} \Rightarrow \vec{X} = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} \quad (6)$$

On recherche une solution de la forme $\vec{X} = \vec{X}_0 \cdot e^{\omega t}$

On dérive deux fois par rapport au temps et en remplaçant dans l'équation vectorielle on obtient:

$$\omega^2 \cdot \vec{X}_0 \cdot e^{\omega t} = A \cdot \vec{X}_0 \cdot e^{\omega t} \rightarrow \omega^2 \cdot \vec{X}_0 = A \cdot \vec{X}_0$$

On pose $\lambda = \omega^2$, on a donc un problème aux valeurs propres $A \cdot \vec{X}_0 = \lambda \vec{X}_0$, λ représentant les valeurs propres de A et \vec{X}_0 vecteur propre de A .

Les valeurs propres sont déterminables grâce à la relation :

$$\det(A - \lambda \cdot Id) = 0$$

$$\begin{vmatrix} -2 \cdot \frac{k}{m} - \lambda & \frac{k}{m} \\ \frac{k}{m} & -2 \cdot \frac{k}{m} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (7)$$

$$\text{D'où : } \lambda^2 + 4 \cdot \frac{k}{m} \cdot \lambda + 3 \cdot \frac{k^2}{m^2} = 0$$

Les valeurs propres de A sont donc :

$$\begin{cases} \lambda_1 = -\frac{k}{m} \\ \lambda_2 = -\frac{3k}{m} \end{cases} \quad (8)$$

Pour déterminer les vecteurs propres on résout $A \cdot \vec{X}_1 = \lambda_1 \cdot \vec{X}_1$ et $A \cdot \vec{X}_2 = \lambda_2 \cdot \vec{X}_2$

On obtient alors :

- $\vec{X}_1 = (1, 1)$ le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_1 = -\frac{k}{m}$
- $\vec{X}_2 = (1, -1)$ le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_2 = -\frac{3k}{m}$

Ces vecteurs propres traduisent des oscillations dans la chaîne, \vec{X}_1 représente un mouvement des masses en phase, et \vec{X}_2 représente un mouvement des masses en opposition de phase.

2

3.1.2 Chaîne : N Masses N-1 Ressorts couplés sans murs

On s'intéresse à présent au cas d'une chaîne composée de 4 masses et de 3 ressort sans murs.

²Résolution tirée du site [3]

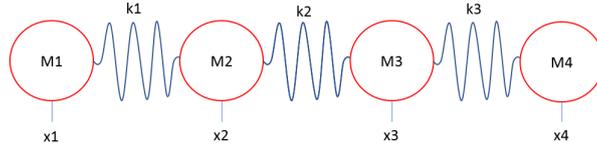


Figure 9: Chaîne 4 Masses 3 Ressorts couplés sans murs

Comme dans la partie précédente, on résout le problème et on obtient les équations du mouvement, elles seront un peu différentes en raison des conditions aux bords qui ont changées :

$$\begin{aligned}
 m_1 \ddot{x}_1 &= -k_1 \cdot x_1 + k_1 \cdot x_2 \\
 m_2 \ddot{x}_2 &= k_1 \cdot x_1 - k_1 \cdot x_2 - k_2 \cdot x_2 + k_2 \cdot x_3 \\
 m_3 \ddot{x}_3 &= k_2 \cdot x_2 - k_2 \cdot x_3 - k_3 \cdot x_3 + k_3 \cdot x_4 \\
 m_4 \ddot{x}_4 &= k_3 \cdot x_3 - k_3 \cdot x_4
 \end{aligned}$$

On se retrouve donc avec une matrice tridiagonale de forme :

$$A = \begin{pmatrix} \frac{k_1}{m_1} & -\frac{k_1}{m_1} & 0 & 0 \\ -\frac{k_1}{m_2} & \frac{k_1+k_2}{m_2} & -\frac{k_2}{m_2} & 0 \\ 0 & -\frac{k_2}{m_3} & \frac{k_2+k_3}{m_3} & -\frac{k_3}{m_3} \\ 0 & 0 & -\frac{k_3}{m_4} & \frac{k_3}{m_4} \end{pmatrix} \quad (9)$$

On peut donc généraliser cette matrice pour un système à N masses et $N - 1$ ressorts, ainsi on pourra l'utiliser numériquement et étudier les différents comportements liés à la chaîne masses ressort.

Soit une chaîne finie de N masses et $N - 1$ ressorts, on prend une masse quelconque à la position x_n et ses deux plus proches voisins, c'est à dire les masses situées en x_{n-1} et x_{n+1} (Fig.10)

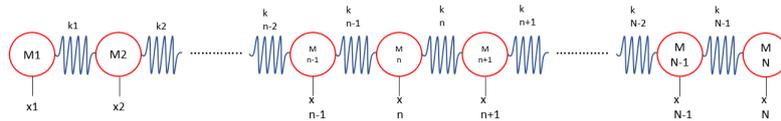


Figure 10: Chaîne N Masses N-1 Ressorts couplés sans murs

Comme précédemment on en déduit de la matrice A une matrice tridiagonale de taille $N * N$:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{k_1}{m_1} & -\frac{k_1}{m_1} & 0 & \cdot & 0 \\ -\frac{k_1}{m_2} & \frac{k_1+k_2}{m_2} & -\frac{k_2}{m_2} & \cdot \\ 0 & * & * & * & \cdot \\ \cdot & \cdot & * & * & * & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -\frac{k_{n-2}}{m_{n-1}} & \frac{k_{n-2}+k_{n-1}}{m_{n-1}} & -\frac{k_{n-1}}{m_n} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -\frac{k_{n-1}}{m_n} & \frac{k_{n-1}+k_n}{m_n} & -\frac{k_n}{m_{n+1}} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -\frac{k_n}{m_{n+1}} & \frac{k_n+k_{n+1}}{m_{n+1}} & -\frac{k_{n+1}}{m_{n+2}} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & * & * & * & \cdot & 0 \\ \cdot & -\frac{k_{N-2}}{m_{N-1}} & \frac{k_{N-2}+k_{N-1}}{m_{N-1}} & -\frac{k_{N-1}}{x_N} & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & -\frac{k_{N-1}}{m_N} & \frac{k_{N-1}}{x_N} & \cdot \end{pmatrix} \quad (10)$$

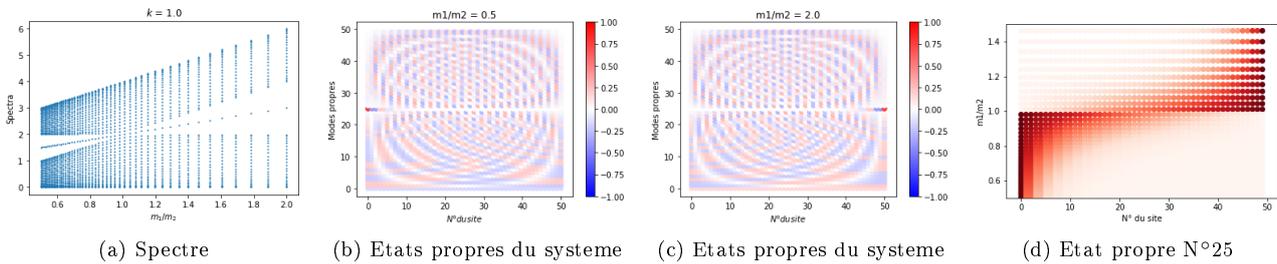
4 Simulation Numérique

Maintenant que nous avons tous les outils nécessaires pour le système masses-ressorts nous pouvons faire des simulations numériques. Le code que nous avons écrit est programmé en python. Le but de la simulation du système consiste à étudier le changement des états propres d'une chaîne de masses-ressorts pour différents rapports de $\frac{m_1}{m_2}$ on retrouvera des résultats similaires à ceux de la chaîne diatomique, c'est à dire l'ouverture et la fermeture d'un gap (comme dans la figure 2.2). Les chaînes étudiées étant finies, nous remarquerons par la suite la présence d'effets de bords selon certaines conditions.

On va étudier ce système dans deux grand cas, dans la premier cas on aura un nombre de masses N pair, et dans le deuxième cas N sera impair.

4.1 Cas N pair

On fixe le nombre de masses à $N = 50$ et $k = 1$, on va faire varier le rapport $\frac{m_1}{m_2}$ et on va s'intéresser aux modes propres du système masses-ressorts couplés vu en section (3.1.2).



La figure 11a illustre la courbe de dispersion du système, ici $m_1 = 1$ et $0.5 < m_2 < 2$, on considère $k = 1$ pour tous les ressorts du système.

On peut donc clairement voir un gap qui se ferme et se réouvre avec un état propre se situant à l'intérieur de ce gap. Cet état propre (N°25) représente un effet de bord. On peut aussi voir que le gap se ferme lorsque $\frac{m_1}{m_2} = 1$ le système se comporte comme une chaîne masses-ressorts avec les mêmes masses tout le long de la chaîne $m_1 = m_2$.

Les graphiques 11b, 11c représentent tous les états propres du système pour un rapport $\frac{m_1}{m_2}$ donné, en abscisse on représente le numéro du site, c'est à dire le numéro de la masse, et en ordonnée on représente le numéro du mode propre, la jauge à droite indique l'amplitude de déplacement des masses.

On remarque donc que l'état situé à l'intérieur du gap (l'état N°25) traduit un effet de bord. La figure 11d représente l'état à l'intérieur du gap pour $\frac{m_1}{m_2}$ allant de 0.5 à 1.5, on remarque que l'effet se délocalise d'un bord à l'autre lorsque le rapport change.

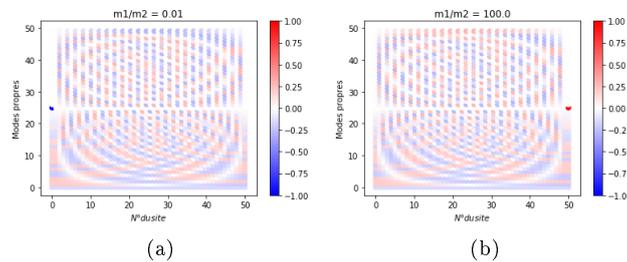


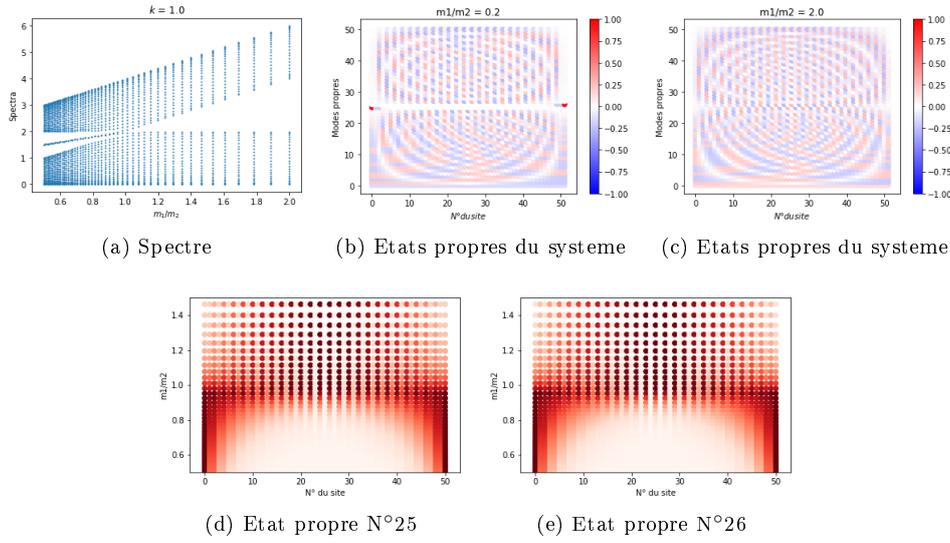
Figure 11: États propres du système

A présent on étudie les états propres du système pour $m_1 \ll m_2$ dans le premier cas (fig.11a) puis pour $m_1 \gg m_2$ dans le second cas (fig.11b)

L'état numéro 25 (situé dans le gap) de la figure 11a montre que seul la première masse bouge, pour une certaine fréquence donnée seul la première masse peut bouger, la deuxième étant trop lourde n'est pas affectée par les oscillations de la masse N°1, on peut représenter ça comme un ballon de tennis accroché par un ressort à un tank, on peut exciter le ballon de tennis autant qu'on veut cela n'affectera pas le tank. De même pour la figure 11b lorsqu'on inverse le rapport, l'effet se délocalise à l'autre bord du système.

4.2 Cas N impair

On fixe à présent $N = 51$.



On remarque des différences lorsque N est impair, sur la figure 12a on voit que les états propres localisés à l'intérieur du gap ne sont plus présents lorsque le rapport $\frac{m_1}{m_2} > 1$, cependant, contrairement au cas N pair, il y a deux états propres situés à l'intérieur du gap quand $m_1 < m_2$, ces deux états sont dégénérés.

On peut expliquer ce changement dans les états propres parce que le système commence par une masse $= m_1$ et se termine avec une masse similaire, on va donc se retrouver avec deux effets de bords comme on peut le voir dans la figure 12b. Cependant la figure 12c nous montre que lorsque le rapport $\frac{m_1}{m_2} > 1$ il n'y a plus d'effets de bords notables.

Les graphiques 12d et 12e nous montre l'évolution d'un état situé à l'intérieur du gap qui va ensuite se fondre avec les autres états.

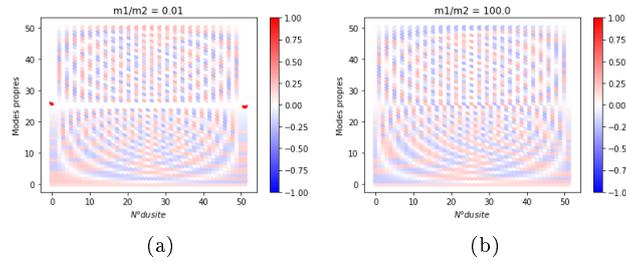


Figure 12: Etats propres du système

A présent le rapport $\frac{m_1}{m_2}$ est grand, dans le cas $m_1 \ll m_2$ on remarque sur le graphique 12a des effets de bords sur deux états propres du système, comme le système a un nombre de masses impair, il commence et se termine avec la masse $= m_1$ ce qui justifie la présence des deux effets de bords (contrairement au cas N pair ou on ne remarquait qu'un seul effet au bord du système).

Cependant lorsqu'on inverse le rapport et que $m_1 \gg m_2$ comme sur la figure 12b il n'y a plus d'effets notables, les masses les plus lourdes se trouvent aux bords de la chaîne, il est donc impossible qu'il n'y ait que la première et la dernière masse qui bouge, prenons à nouveau l'exemple du tank et de la balle de tennis. Dans le premier cas, la balle de tennis se trouve aux bords de la chaîne, ses oscillations n'affecteront pas le tank, le rapport est trop important. Cependant lorsque c'est le tank qui est aux bords du système, si on le fait osciller, il entrainera avec lui la balle de tennis, c'est donc pour ça qu'on ne voit aucun effet aux bords du système lorsque $m_1 \gg m_2$.

5 Conclusion

Le but de ce projet est de se familiariser avec la notion topologique en considérant une analyse avec un système mécanique simple : une chaîne masse-ressort.

Durant la première partie de ce stage nous avons brièvement introduit les isolants topologiques et observé numériquement et analytiquement leurs signatures typiques (ouverture/fermeture de gap, effets de bords).

La seconde partie du stage consistera d'une part à relier ses observations aux invariants topologiques et d'autre part mettre en place une expérience simple consistant en un assemblage de brique LEGO comme illustré dans la figure ci dessous.



Figure 13: Système mécanique LEGO

Bien que non mentionné dans ce rapport, nous avons commencé la description théorique de ce système.

Remerciements

Nous tenons à remercier nos deux encadrants de projet qui nous aident à comprendre ce sujet complexe mais très intéressant qu'est la topologie et les isolants topologique, nous remercions également leur disponibilité que cela soit au laboratoire ou par mail.

References

- [1] *Physique de la Matière Condensée*. 1991.
- [2] La recherche. *Article N°530*, 2017.
- [3] Manuel Goubet. Oscillations couplées de deux masses avec trois ressorts. <http://res-nlp.univ-lemans.fr/NLP_E_M01_G04_15/co/NLP_E_M01_G04_15.html>, 2009.
- [4] NIST. Hall effect 1. <<https://www.nist.gov/pml/engineering-physics-division/popular-links/hall-effect/hall-effect-figure-1>>, 2010.
- [5] Wikipedia. Effet hall quantique entier. <https://fr.wikipedia.org/wiki/Effet_Hall_quantique_entier>, 2017.