



HAL
open science

Signatures relativistes en spectroscopie de matériaux topologiques : en volume et en surface

Sergueï Tchoumakov

► **To cite this version:**

Sergueï Tchoumakov. Signatures relativistes en spectroscopie de matériaux topologiques : en volume et en surface. Systèmes mésoscopiques et effet Hall quantique [cond-mat.mes-hall]. Université Paris Saclay (COmUE), 2017. Français. NNT : 2017SACLS258 . tel-01613162

HAL Id: tel-01613162

<https://theses.hal.science/tel-01613162>

Submitted on 9 Oct 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 : 2017SACLS258

THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY
PRÉPARÉE À L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD
ÉCOLE DOCTORALE 564 PHYSIQUE EN ÎLE-DE-FRANCE
LABORATOIRE DE PHYSIQUE DES SOLIDES

DISCIPLINE : PHYSIQUE

Thèse soutenue à Orsay le 28 Septembre 2017 par

Sergueï Tchoumakov

**Signatures relativistes en spectroscopie de matériaux
topologiques : en volume et en surface**

Présidente du jury :	Mme Hélène Bouchiat	Directeur de Recherche (LPS, Orsay)
Rapporteurs :	M. Jérôme Cayssol	Professeur (LOMA, Bordeaux)
	M. Marco Polini	Chercheur (SNS, Italie)
Examineurs :	M. David Carpentier	Directeur de Recherche (ENS, Lyon)
	M. Bernard Plaçais	Directeur de Recherche (LPA, Paris)
Directeur de thèse :	M. Mark-Oliver Goerbig	Directeur de recherche (LPS, Orsay)
Co-directeur de thèse :	M. Marcello Civelli	Enseignant-chercheur (LPS, Orsay)

Remerciements

La rédaction de ce manuscrit est le point final de trois années de thèse qui m'ont beaucoup marquées. Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de Physique des Solides (LPS) à Orsay, une grande institution où j'ai apprécié le dynamisme et la camaraderie de tous. Cette atmosphère est entretenue par de nombreux séminaires de qualité et par divers événements. Je repense avec plaisir aux fêtes du laboratoire, organisées par Vincent Klein, dans le jardin à l'entrée du LPS. Le maintien du laboratoire est en grande partie l'œuvre de l'équipe technique, de l'équipe informatique et de l'équipe administrative avec qui j'ai aimé interagir et dont je souhaite remercier tous les membres et plus particulièrement Eric, Morgan, Ilan, Loan, Christophe, Véronique, Sophie, Stéphanie, Dominique et Sylvain.

Ce travail a été réalisé en étroite collaboration avec mes deux directeurs de thèse, Marcello Civelli et Mark Goerbig, que je remercie pour leur gentillesse. J'ai apprécié l'empathie et la perspicacité de Marcello tandis que Mark m'a impressionné par son sens de la camaraderie et son ouverture d'esprit. Ils ont su être patients alors que j'explorai doucement la littérature concernant les semi-métaux de Weyl, ils ont su être compréhensif tandis que j'abandonnai l'idée initiale d'étudier les corrélations et ils m'ont montré leur confiance tandis qu'ils me donnaient l'opportunité de collaborer avec d'autres groupes et martyriser.. euh.. encadrer des stagiaires du groupe. Leur approche des problèmes en physique m'a beaucoup inspiré et je suis fier d'emporter leurs enseignements avec moi.

Comme je l'ai mentionné, ce travail est le résultat de plusieurs collaborations. D'abord, parce que le sujet des semi-métaux de Weyl était nouveau au début de ma thèse, j'ai beaucoup bénéficié de discussions avec Pierre Rinkel et Thibaud Louvet qui commençaient aussi leur thèse sur le sujet. Une première moitié de cette thèse est le fruit de la collaboration avec Michael Hakl et Milan Orlita, à Grenoble (LNCMI), avec qui nous avons travaillé sur des questions de spectroscopie infrarouge et dont j'ai apprécié l'esprit critique. La seconde moitié de ce travail de thèse a beaucoup bénéficié de notre collaboration avec Andreas Inhofer, Erwann Bocquillon, Badih A. Assaf et Bernard Plaçais à Paris (LPA) et avec Victor Jouffrey et David Carpentier à Lyon (ENS). Nos réunions suivies d'un repas au Descartes me manqueront, j'ai beaucoup apprécié la caractère informatif et dynamique de nos discussions au LPA.

Avec l'enseignement j'ai aussi beaucoup appris. Je remercie Claude Pasquier, Pawel Wzietek, Marcello Civelli (bis) et Marc Gabay de m'avoir si bien accepté dans leurs équipes pédagogiques où j'ai à chaque fois trouvé une atmosphère agréable. J'ai appris au contact d'étudiants brillants dont certains ont eu le courage de faire un stage sous ma direction comme Baptiste Gouin, Guillaume Manzanares et Julien Basseler-Crahay. J'ai eu la chance de participer à plusieurs écoles et conférences que ce soit à Aussois, à Cargèse, à Munich, à San Sebastian, à Lyon, à Utrecht, à Stockholm, à Paris ou à Quy-Nhon. Mon travail en a beaucoup bénéficié et cela m'a permis de rencontrer des physiciens que j'espère revoir à l'avenir comme David, Bogusz, Diane, Erik, Jason Statham (si si), Diana, Flore, Ruben, Shamashis, Artem et JD.

Un grand merci à Jérôme Cayssol et à Marco Polini pour avoir sacrifié une partie de leurs vacances d'été pour l'évaluation de ce manuscrit et pour leur présence lors de ma soutenance de thèse. Merci à Hélène Bouchiat pour avoir accepté de présider à ma soutenance et pour la discussion qui a suivi. Enfin, merci à Bernard Plaçais (bis!) et David Carpentier (bis!) d'avoir accepté d'être examinateurs. Je vous remercie tous pour vos questions pertinentes lors de la soutenance.

Je remercie bien sûr le groupe THEO pour la bonne ambiance que ce soit au LPS ou, pendant notre déménagement, au Parc Club. Merci à Yunlong, Sébastien, Frédéric, Nicolas T., Clément, Mircea, Manali, Nicolas M., Oscar, Olesia, Arnaud, Vardan, Hridis, Khan, Andreij et Ryozone. La présence de nombreux thésards et postdocs a permis de bien décompresser, parfois à la limite de l'exaspération pour certains. Je n'oublierai jamais les très bons moments passés hors du laboratoire avec Vardan et Manali, on s'est bien marrés et, croyez-moi, ça a été indispensable à l'écriture de cette thèse. Avec une telle garderie il nous faut bien sûr une équipe de chercheurs permanents hors du commun. Je souhaite ainsi remercier Mark, Pascal, Frédéric, Marc (et ses tagliatelles al limone!), Marcello, Anu, Jean-Noël et Gilles pour leur présence, leurs conseils et leur bonne humeur.

En dehors du laboratoire, j'ai su compter sur le soutien d'amis et je tiens tout particulièrement à remercier Jean-Baptiste, Timothée V., Adel, Helmy, Yannick, Pierre et Sylvère. Mes parents et mes sœurs m'ont aidé à me

changer les idées à l'aide de sorties originales et de bons repas. Ils savent à quel point je leur suis reconnaissant pour tout. Je remercie enfin Caroline, et sa mère Véronique, que j'ai rencontré au début de la thèse et avec qui je continue ma route au Canada. Elle a beaucoup contribué à l'amélioration du contenu de ce manuscrit par ses nombreuses relectures, ainsi que son soutien et sa réinterprétation artistique de certaines figures.

Table des matières

Introduction	1
1 Introduction aux états de surface et aux phases topologiques	3
1.1 Découverte des états de surface	4
1.1.1 Théorème de Bloch	4
1.1.2 Bandes permises et bandes interdites	5
1.1.3 États de Tamm et de Shockley	6
1.1.4 Observation expérimentale	9
1.2 Symétrie de la surface et topologie	10
1.2.1 Cas de l'interface ponctuelle : sensibilité en la terminaison	10
1.2.2 Cas de l'interface graduelle : états de surface topologique	12
1.3 Matériaux topologiques	14
1.3.1 Rappel : l'effet Hall quantique entier	14
1.3.2 Effet Hall quantique anormal, phases topologiques bidimensionnelles	16
1.3.3 Les phases topologiques tridimensionnelles	19
1.3.4 Observations expérimentales	22
2 Modèles de basse énergie, covariance et niveaux de Landau	25
2.1 Modèles de basse énergie	25
2.1.1 Dédoublage des fermions de Weyl	26
2.1.2 Symétries cristallines	29
2.1.3 Fusion	29
2.1.4 Modèle de Kane et Bodnar	31
2.2 Covariance relativiste	34
2.2.1 Rotations	34
2.2.2 Transformation hyperboliques	37
2.3 Niveaux de Landau	40
2.3.1 Électrons non-relativistes	40
2.3.2 Électrons relativistes et structure de bande	44
2.3.3 Stabilité du mode $n = 0$ et chiralité	48
3 Spectroscopie infrarouge et magnéto-optique	51
3.1 Spectroscopie des semi-métaux de Weyl	51
3.1.1 Théorie classique, réponse plasma	52
3.1.2 Théorie quantique, transitions électroniques	53
3.2 Spectroscopie de l'arsenure de cadmium	58
3.2.1 Spectroscopie infrarouge	59
3.2.2 Spectroscopie magnéto optique	60

4	Électronique de surface des matériaux topologiques	63
4.1	Origines des états de surface	64
4.1.1	Terminaison du cristal et écrantage	64
4.1.2	Inversion de bande en surface	70
4.2	États de surfaces topologiques : un modèle illustratif	72
4.2.1	Spectre des états de surface et analogie magnétique	72
4.2.2	Existence et stabilité des états de surface	74
4.2.3	États de surface en présence d'un champ électrique	76
4.3	Caractérisation des états de surface d'un isolant topologique tridimensionnel	78
4.3.1	Modélisation de l'interface	78
4.3.2	États massifs de Bi_2Se_3 en spectroscopie ARPES	80
4.3.3	États massifs de HgTe en transport	82
4.4	États de surfaces d'un semi-métal de Weyl	85
4.4.1	Longueur de pénétration du champ électrique	85
4.4.2	Influence du champ magnétique dans le plan	87
4.4.3	Champ magnétique hors du plan	92
4.4.4	Rôle de l'inclinaison sur les états de surface	94
	Conclusion et perspectives	99
A	Courant magnétique chiral	101
A.1	Champ magnétique	101
A.2	Invariance de jauge	102
B	Modèles de basse énergie	103
B.1	Matrices de Pauli	103
B.2	Hamiltonien de Weyl réduit	103
B.3	Densité d'états	104
B.4	Diagonalisation du Hamiltonien	104
B.5	Covariance et rotation du modèle de Bodnar	105
B.6	Opérateurs d'échelles dépendants de l'énergie et de l'impulsion	107
C	Spectroscopie infrarouge	109
C.1	Expression de la conductivité optique	109
C.2	Opérateur vitesse	110
C.3	Conductivité optique du modèle de Bodnar, sans champ magnétique	112
C.4	Niveaux de Landau de Cd_3As_2 et spectroscopie infrarouge	114
D	Etats de surfaces des semi-métaux de Weyl et isolants topologiques	121
D.1	Hamiltonien de Pöschl-Teller avec décalage	121

Notations

- \mathcal{E} : champ électrique,
- \mathbf{B} : champ magnétique,
- v_F : vitesse de Fermi,
- $\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{p}$: vecteurs d'ondes et impulsion,
- \mathbf{t} : inclinaison,
- i : nombre imaginaire ($i^2 = -1$), lorsqu'il est porté en indice il indique une position dans le réseau de Bravais,
- $\hat{\sigma}_{x,y,z}, \hat{\tau}_{x,y,z}$: matrices de Pauli,
- ∂_θ : dérivée partielle par rapport à la variable θ ,
- $[A, B] \equiv AB - BA$,
- $\{A, B\} \equiv AB + BA$,
- \hat{H} : Hamiltonien,
- h.c. : hermitien conjugué.

Introduction

On distingue les différents états de la matière par leurs symétries. Ce raisonnement s'applique dès qu'il s'agit de différencier un liquide ou un gaz d'un solide cristallin, où les atomes sont périodiquement arrangés. Ces arrangements sont nombreux et eux-mêmes classifiés, ils donnent lieu à différents comportements électroniques en fonction de la densité de porteurs de charges : isolants, métaux ou semi-conducteurs. Les isolants et les métaux sont deux limites extrêmes où le courant électronique est soit absent ou soit présent, de manière incontrôlable. À mi-chemin entre les deux se trouvent les semi-conducteurs dont on sait aujourd'hui l'importance qu'ils ont pour le développement technologique. Les aimants et les supra-conducteurs sont d'autres exemples, fascinants, où les corrélations électroniques et électrons-phonon sont aussi comprises en termes de symétries.

Il y a pourtant des phases de la matière difficiles à distinguer en terme de symétries. Cette distinction est si faible que ce sont parfois seulement des effets quantiques qui permettent de les dévoiler comme pour les molécules chirales, pour l'hélicité (L et R) des fermions ultra-relativistes ou pour les isolants topologiques. La discussion théorique de tels effets en matière condensée remonte aux travaux de Shockley et à ceux de Su, Schrieffer et Heeger sur les états de surface mais la première observation notable fût la découverte de l'effet Hall quantique par von Klitzing. La compréhension de ces mesures permit à Haldane, puis à Kane et Mele, d'expliquer que les isolants topologiques, pourtant similaires entre eux, se distinguent drastiquement sous certaines conditions. Par exemple, par l'existence d'un effet Hall anormal ou par la présence d'états de surfaces insensibles à la qualité de la surface.

La modélisation des phases topologiques nécessite de savoir décrire à la fois le spectre en énergie *et* le comportement des fonctions d'ondes. Le comportement à basse énergie s'avère ainsi souvent très analogue à celui d'électrons relativistes et que l'on illustre par l'observation de l'effet tunnel de Klein. La relativité restreinte montre pourtant bien d'autres effets tel que la contraction du temps et la dilatation des longueurs, conséquences de la covariance de Lorentz des équations du mouvement. Ainsi, au cours de cette thèse, j'ai cherché à mettre en évidence l'importance de la covariance relativiste sur la réponse électronique de deux classes de matériaux topologiques : les semi-métaux de Weyl et les isolants topologiques. Je me suis en particulier concentré sur le comportement de ces matériaux dans un champ magnétique ou à leur interface. Ces perturbations montrent qu'un autre type de classification existe, en terme de *régime électrique* et de *régime magnétique*, très semblable à la distinction entre un événement de type espace et un événement de type temps dans l'espace de Minkowski.

Le premier chapitre est une introduction aux états de surface et aux matériaux topologiques. Au second, je détaille la covariance relativiste (rotations trigonométriques et hyperboliques) de modèles de basse énergie et je l'illustre dans le cas des niveaux de Landau. Je montre que cette covariance n'est pas une conséquence de la relativité restreinte mais bien du comportement à basse énergie. Le troisième chapitre est une application de ces outils à des calculs de spectroscopie infrarouge sans et avec champ magnétique, en lien avec notre collaboration avec les expérimentateurs du LNCMI, Grenoble, à la caractérisation de Cd_3As_2 . Nous montrons que le comportement de ce matériau s'écarte de celui d'un semi-métal de Dirac et s'apparente à un semi-métal de Kane. Le quatrième chapitre explique l'influence d'un champ magnétique, d'un champ électrique et d'une anisotropie de la relation de dispersion sur les états électroniques à l'interface entre deux matériaux topologiquement distincts. J'y présente les résultats de notre collaboration avec les expérimentateurs du LPA, Paris, à la caractérisation des états de surface d'échantillons tridimensionnels de HgTe déformés par des mesures de transport.

Chapitre 1

Introduction aux états de surface et aux phases topologiques

Si l'équation de Schrödinger permet en principe de déterminer le mouvement des électrons dans un solide, en pratique ce n'est pas ce que nous utilisons. Il y a deux raisons à cela : (i) les cristaux de la nature ont une géométrie compliquée et, (ii) la combinaison des potentiels qui entoure les ions et atomes du cristal est inconnue. C'est pour ces raisons que nous sommes amenés à introduire des hypothèses simplificatrices et dont le présent chapitre est une introduction. L'étude des propriétés optiques et électroniques des solides montre qu'une bonne description des états électroniques est en terme de leurs symétries. La symétrie la plus notable est l'invariance par translation discrète le long d'un réseau que l'on appelle *réseau de Bravais* et dont le *théorème de Bloch* est l'outil de prédilection [Blo29, Sla34, WS97]. Dans le cas d'un réseau infini, Kronig et Penney [dLKP31] ont ainsi été capables de résoudre exactement certaines situations et ont montré que la périodisation du réseau mène à un ensemble d'états électroniques permis – les *bandes permises* – entre lesquelles sont intercalées des bandes où aucun état électronique ne peut exister – les *bandes interdites*. Cependant un cristal n'est jamais vraiment périodique de par la présence de ses bords. En introduisant une terminaison au modèle de Kronig et Penney, Igor Tamm montra [Tam32] l'existence théorique d'états électroniques à la surface des cristaux. Cette découverte entraîna un fort engouement pour les états de surface et une contribution importante fût apportée par William Shockley [Sho39] qui étudia l'apparition des états de surface lors de la formation du cristal, lorsque les orbitales atomiques qui le constitue sont mises en interaction. Ce dernier travaillait alors pour le laboratoire Bell à la découverte d'un mécanisme purement électronique d'amplification et dont les états de surface peuvent être acteur. C'est d'ailleurs dans cette dynamique d'invention du transistor que Bardeen, Brattain et Shockley mirent en évidence, les premiers, l'existence expérimentale de ces états électroniques [Mey47, BS47].

L'argument de Shockley porte sur des concepts tels que la symétrie de l'interface et le croisement de bandes [Sho39] dont l'ambiguïté entraîne confusions et débats dans la littérature scientifique. Le premier à rationaliser ces propriétés de symétrie est Joshua Zak [Zak84, Zak85]. Ce dernier explique que pour certaines positions de l'interface, bien que la symétrie par translation est brisée, il est possible d'utiliser les symétries du groupe ponctuel du cristal pour évaluer l'existence d'états de surface. Cet éclairage de Zak s'avère en lien avec un travail qu'il publiera quelques années plus tard, sur le calcul de la phase de Berry des bandes avec symétrie d'inversion. Son raisonnement montre ainsi la relation entre la topologie des bandes et l'apparition d'états de surfaces. Ces discussions montrent que la préparation de l'interface joue pour beaucoup dans l'existence des états de surface et paraît ambiguë pour des observations expérimentales. Cependant, la modélisation de la chaîne de polyacétylène – dont il existe deux conformations dégénérées – par Su, Schrieffer et Heeger (SSH) [SSH79, SSH80] montre qu'à la jonction entre deux chaînes de configurations différentes il existe une déformation mécanique qui joue le rôle d'un soliton mécanique où des modes électroniques localisés existent. Ce modèle va être à l'origine de nombreux travaux sur les états à la surface des hétérojonctions où sont décrits des états de surface topologiquement stables. Ces notions de topologie se raffinent au cours des années, en lien avec l'interprétation de l'effet Hall quantique, et dont le graphène s'avère être une plate-forme utile pour la discussion des phases topologiques ainsi introduites. Ce matériau est bi-dimensionnel et son extension à

trois dimensions comporte diverses phases, dont les deux qui m'ont intéressées pour cette thèse : les isolants topologiques et les semi-métaux de Weyl.

1.1 Découverte des états de surface

La théorie des bandes s'appuie sur deux approximations : (i) les mouvements électroniques et nucléaires sont décorrélés par l'approximation de Born-Oppenheimer [BO27] et, (ii) chaque électron ne subit que le champ moyen des autres électrons et des noyaux. Les méthodes de calcul des états électroniques sont ainsi basées sur l'équation de Schrödinger indépendante du temps à un électron ¹

$$\left[-\frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (1.1)$$

où l'énergie potentielle $V(\mathbf{r})$ est périodique sur le réseau de Bravais, i.e. $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V(\mathbf{r})$, où \mathbf{R}_n , $n \in \mathbb{Z}$ sont les vecteurs du réseau de Bravais. Le théorème de Bloch [Blo29] permet de simplifier le traitement d'un tel potentiel [Sla34, WS97] et parfois même une résolution exacte [dLKP31]. L'introduction d'une coupure à la périodicité est à l'origine d'états localisés à la surface dont on distingue deux catégories, les états de de Tamm [Tam32, Goo39] et de Shockley [Sho39], et qui ne seront observés expérimentalement que quinze ans après leur découverte théorique [Mey47, BS47]. Ces points sont importants pour poser le contexte de cette thèse et une discussion plus approfondie peut être trouvée dans le livre suivant [DS92].

1.1.1 Théorème de Bloch

Selon le théorème de Bloch [Blo29], les solutions de l'équation de Schrödinger (1.1) s'écrivent sous la forme

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.2)$$

où $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sont des fonctions périodiques sur le réseau de Bravais et dont le vecteur d'onde \mathbf{k} dépend des conditions aux bords. Par exemple, dans le cas d'un cristal infini le vecteur d'onde est réel, $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$, alors que dans le cas d'un cristal périodique de taille L dans chaque direction le vecteur d'onde est discret, $\mathbf{k} = (u, v, w)2\pi/L$ où u, v, w sont des entiers.

Il existe d'autres formulations au théorème de Bloch et qui seront pratiques selon la situation. Par exemple, au lieu d'utiliser les $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ périodiques, on introduit la base orthonormée des *fonctions de Wannier* définies pour une bande n par

$$a_{n,\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (1.3)$$

où \mathbf{R} est un vecteur du réseau de Bravais. Elles sont construites à partir d'une même fonction $a_n(\mathbf{r})$ [Koh59] qui caractérise le comportement globale de la bande n . En présence de la symétrie d'inversion on peut caractériser cette fonction par deux nombres (\mathbf{s}, l) de sorte que $a_n^{(\mathbf{s}, l)}(\mathbf{r})$ et $l = \pm$ en fonction de la parité de $a_n(\mathbf{r})$ par rapport au centre d'inversion à la position \mathbf{s} [Koh59]. Cette propriété s'avère utile pour discuter certaines symétries de la fonction de Bloch qui dans cette base s'écrit

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} a_{n,\mathbf{R}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}. \quad (1.4)$$

Le théorème de Bloch, en utilisant la symétrie par translation discrète du Hamiltonien, a permis une dérivation approchée des énergies propres pour divers systèmes [Sla34, WS97]. La résolution exacte d'un potentiel périodique en une dimension fut apportée par R.L. Kronig et W.G. Penney en 1931.



F. Bloch

1. Pour cette équation et à de nombreuses reprises je me place dans un système d'unités où $\hbar = 1$.

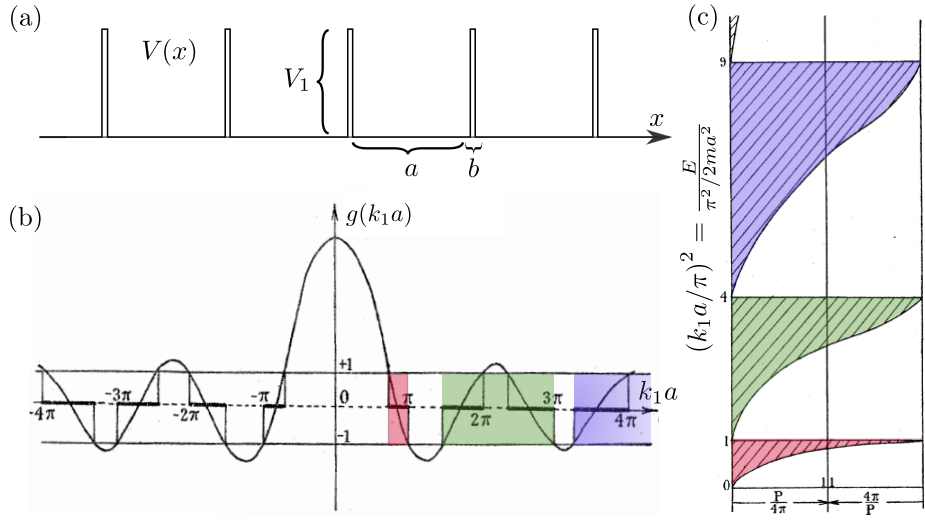


FIGURE 1.1 – Modèle de Kronig-Penney : (a) Schéma du potentiel périodique constitué de barrières de potentiel d'épaisseur b et de hauteur V_1 ; (b) Résolution graphique de la relation de dispersion ; (c) Spectre du modèle pour différentes valeurs de P , où $P \rightarrow 0$ est le spectre des électrons libres et $1/P \rightarrow 0$ est le spectre des électrons liés. Figures (b) et (c) extraites de [dLKP31].

1.1.2 Bandes permises et bandes interdites

Kronig et Penney [dLKP31] ont analysé le cas d'un potentiel périodique $V(x)$ comme celui illustré à la Figure 1.1(a) et pour lequel

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{pour } -b < x \leq 0, \\ 0 & \text{pour } 0 < x \leq a \end{cases}, \quad (1.5)$$

$$V[x + (a + b)] = V(x). \quad (1.6)$$

Les solutions de l'équation (1.1) doivent être de la forme des fonctions de Bloch $\Psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$ (1.2). On injecte ces solutions sur les deux domaines I = $\{x \in [-b, 0]\}$ et II = $\{x \in [0, a]\}$ où les ondes de Bloch $u_I(x)$ et $u_{II}(x)$ vérifient

$$\begin{cases} u_I'' + 2iku_I' - (k^2 + k_0^2)u_I = 0 \\ u_{II}'' + 2iku_{II}' - (k^2 - k_1^2)u_{II} = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} u_I(x) = Ae^{(k_0 - ik)x} + Be^{-(k_0 + ik)x} \\ u_{II}(x) = Ce^{i(k_1 - k)x} + De^{-i(k_1 + k)x} \end{cases}, \quad (1.7)$$

où $k_0 = \sqrt{2m(V_1 - E)}$ et $k_1 = \sqrt{2mE}$ sont réels et positifs par convention. Les coefficients A, B, C et D dépendent des conditions de continuité et de périodicité de u_I et u_{II}

$$\begin{aligned} \text{(continuité)} & : u_I(0) = u_{II}(0), \quad u_I'(0) = u_{II}'(0), \\ \text{(périodicité)} & : u_I(-b) = u_{II}(a), \quad u_I'(-b) = u_{II}'(a). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Les quatre équations ainsi obtenues correspondent à une solution non-nulle si seulement le déterminant des coefficients en face des quatre constantes s'annule. Ce qui permet d'obtenir la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney qui, à la limite où $b = 0$ et $V_1 = \infty$ tout en gardant $\lim_{b \rightarrow 0, k_0 \rightarrow \infty} k_0^2 ab/2 = P$ fini, se simplifie en

$$\cos(ka) = \cos(k_1 a) + P \sin(k_1 a)/k_1 a \equiv g(k_1 a). \quad (1.9)$$

La situation est alors similaire à un ensemble de puits quantiques délimités par des pics de Dirac. L'équation (1.9) est représentée graphiquement à la Figure 1.1(b). Comme pour toute valeur réelle de k on a $|\cos(ka)| \leq 1$, il n'y a de solution à (1.9) que pour les énergies telles que $-1 \leq g(k_1 a) \leq 1$: ce sont les *bandes permises*, en couleur sur les Figures 1.1(b,c). Les autres valeurs de k ne donnent aucune solution : ce sont les *bandes interdites*. Les bords de bande (permise) supérieurs sont donnés par

$$E_n = n^2 \pi^2 / 2ma^2 \quad n \in \mathbb{N}, \quad (1.10)$$

et les bords de bandes inférieurs sont obtenus pour $\cos(ka) = (-1)^n$ de sorte que, $k_1 = \sqrt{2mE}$,

$$\begin{cases} k_1 a \tan(k_1 a/2) = P & n \text{ pair,} \\ k_1 a / \tan(k_1 a/2) = -P & n \text{ impair.} \end{cases} \quad (1.11)$$

L'influence de P sur le spectre est notable, comme on le constate à la Figure 1.1(c). Ainsi, dans le cas où P est nul Eq.(1.9) a toujours une solution et il n'y a aucune bande interdite : c'est la limite des électrons libres. Par contre, si on augmente P – et donc l'énergie de liaison d'un électron au noyau – alors on voit apparaître des bandes interdites et une réduction de la taille des bandes permises. À la limite où $P = \infty$, les seules solutions sont pour $\sin(k_1 a) = 0$. Le spectre en énergie est alors discret et exprimé par (1.10) ce qui correspond à la situation d'un électron dans une boîte à la dimension de la distance a entre deux barrières de potentiel.

Ce comportement du modèle de Kronig-Penney est général comme en atteste le travail de Kramers [Kra35] : un potentiel périodique induit un ensemble de bandes permises et interdites. Cependant ce résultat dépend des conditions aux bords obtenues pour un cristal infini ou pour un cristal fini mais périodique. Dans le cas de la présence d'une terminaison au réseau, I. Tamm mit en évidence en 1932 l'existence théorique d'états localisés à l'interface et dont le spectre se situe dans les bandes interdites.

1.1.3 États de Tamm et de Shockley



I. Tamm

La formulation du théorème de Bloch ne spécifie pas le nombre d'onde \mathbf{k} , qui dépend des conditions aux bords. Il sera réel dans le cas d'un cristal infini ou périodique afin de garantir des solutions finies. Cependant, si on introduit une terminaison au cristal ce critère n'est plus nécessaire et \mathbf{k} peut être complexe. C'est ce point que Igor Tamm mit en évidence en introduisant une terminaison au modèle de Kronig-Penney [Tam32] et illustrée sur la Figure (1.2) où le potentiel est périodique à l'intérieur du cristal ($x > 0$) et constant dans le vide ($x < 0$). Le plan $x = 0$ correspond à la surface. De façon générale, on résout l'équation de Schrödinger dans le vide et dans le cristal et on impose la relation de continuité à la surface. La solution dans le cristal est une superposition des états à même énergie et, pour un système invariant par inversion où $E_k = E_{-k}$, on a

$$\begin{aligned} \text{(vide)} & : \Psi_v(x) = Ae^{k_0x} \\ \text{(cristal)} & : \Psi_c(x) = Bu_k(x)e^{ikx} + Cu_{-k}(x)e^{-ikx} \end{aligned} \quad (1.12)$$

où $k_0 = \sqrt{2m(V_0 - E)}$ est positif et réel. Les trois coefficients A , B et C sont déterminés par les deux relations de continuité $\Psi_v(0) = \Psi_c(0)$ et $\Psi'_v(0) = \Psi'_c(0)$. Il y a deux situations pour la résolution de ces équations. (i) Si k est

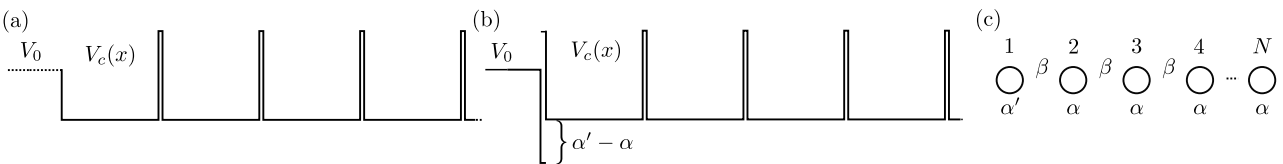


FIGURE 1.2 – Modèle de Tamm : (a) Illustration du potentiel utilisé par Tamm ; (b) Potentiel équivalent au potentiel de Tamm, le site terminal subit une différence de potentiel [Sho39] ; (c) Modèle sur réseau équivalent.

réel, on se trouve nécessairement dans les bandes permises du cristal et les deux équations à trois inconnus ont toujours une solution. (ii) Si k est complexe, on se trouve nécessairement dans les bandes interdites du cristal et la fonction d'onde du cristal est finie si B ou C est nul (selon le signe de la partie imaginaire de k). Les solutions sont exponentiellement décroissantes de part et d'autre de la surface, c'est ce que l'on appelle des *états de surface*. On peut distinguer ces états de surface en deux catégories, les états de Tamm et les états de Shockley dont je vais maintenant discuter.

Le modèle de Tamm

La terminaison utilisée par Tamm [Tam32] est décrite à la Figure 1.2(a) et on constate [Goo39, Sho39] que cette terminaison modifie le potentiel du dernier site du réseau tel qu'illustré à la Figure 1.2(b). On peut ainsi simplifier l'analyse à l'aide du modèle de liaisons fortes [Sho39, Gri60, DS92] décrit à la Figure 1.2(c) où l'intégrale Coulombienne α du dernier site, situé en $n = 1$, est modifiée. On note β l'intégrale d'échange et, sur la base des orbitales atomiques, la fonction d'onde s'écrit $\Psi = \sum_{n \geq 1} c_n \phi_n$. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit alors, pour $n > 1$,

$$(E - \alpha)c_n = \beta(c_{n+1} + c_{n-1}) \quad (1.13)$$

et la condition aux bord de cette chaîne en $n = 1$ est $(E - \alpha')c_1 = \beta c_2$. De plus, on considère que le cristal contient un nombre de sites N grand afin que l'autre extrémité soit négligeable et donc $c_{N+1} = 0$ [Gri60, DS92]. La décomposition des solutions sur les ondes de Bloch, $\Psi_\theta = \sum_n e^{in\theta} \psi_n$, donne $E(\theta) = \alpha + 2\beta \cos(\theta)$ (1.13), invariant par $\theta \rightarrow -\theta$, et en présence de l'interface on cherche donc les solutions sous la forme

$$c_{n,\theta} = ae^{in\theta} + be^{-in\theta} = A \cos(n\theta) + B \sin(n\theta). \quad (1.14)$$

Les conditions aux bords pour c_{N+1} et c_1 permettent d'obtenir les deux équations suivantes

$$c_n = A \sin[(N+1-n)\theta] / \sin[(N+1)\theta] \quad ; \quad z \equiv (\alpha' - \alpha) / \beta = \sin[(N+1)\theta] / \sin(N\theta). \quad (1.15)$$

La Figure (1.3)(a) correspond à la résolution graphique de la second équation de (1.15) et il intéressant d'étudier les différents régimes obtenus en fonction des valeurs prises par $z = (\alpha' - \alpha) / \beta$. Dans le cas où $z = 0$, $\alpha' = \alpha$, on trouve les N solutions réelles $\theta_j = j\pi/N$, $j \in \mathbb{N}$ de la chaîne périodique. Pour $-1 < z < 1$, on conserve N solutions réelles mais le spectre se décale vers les hautes ($0 < z < 1$) ou vers les basses ($-1 < z < 0$) énergies. Par contre, à la limite où $z > 1$ ($z < -1$) une des racines réelles en $\theta = 0$ ($\theta = \pi$) disparaît et il ne reste plus que $N - 1$ racines réelles pour θ . On récupère la racine manquante si on considère que θ est complexe et sous la forme

$$\theta = \xi + i\mu \quad (1.16)$$

avec μ réel et positif pour que la solution soit finie. Le spectre qui correspond à cette forme de θ est

$$E = \alpha + 2\beta [\cos(\xi) \cosh(\mu) - i \sin(\xi) \sinh(\mu)], \quad (1.17)$$

et pour une évolution unitaire la partie imaginaire de E doit être nulle, ce qui correspond à $\xi = 0$ ou π : ce sont les positions des bords de bandes où $E = \alpha \pm \beta$. De manière générale, les bords de bandes sont à l'origine de l'apparition des états de surface [Kra35, Koh59]. Dans le cas présent, si θ est complexe, on n'a que deux possibilités soit $\theta_P = i\mu$ [état de Tamm de type P, $z > 1$] soit $\theta_N = \pi + i\mu$ [état de Tamm de type N, $z < -1$] d'où on obtient les spectres $E_P = \alpha + \beta \cosh(\mu) > \alpha + \beta$ et $E_N = \alpha - \beta \cosh(\mu) < \alpha - \beta$ et les solutions propres $c_{P,n} = Ae^{-n\mu}$ et $c_{N,n} = A(-1)^n e^{-n\mu}$, pour une chaîne semi-infinie [DS92]. La décroissance exponentielle de ces solutions est accompagnée d'une oscillation à la période du bord de bande correspondant ($\xi = 0$ ou π) et que l'on schématise à la Figure 1.3(b). Les états de type P sont ceux qui ont été décrits par Tamm [Tam32], en raison de la terminaison utilisée où $z > 1$ [Goo39, Sho39].

Les états de Tamm sont donc les états obtenus sous l'effet d'un changement de potentiel sur les sites terminaux, ce qui permet d'obtenir jusque n états de surface si n sites terminaux sont affectés. C'est sur ce principe que l'on peut sonder les états de surface avec de forts champs électriques [DS92]. Cependant un tel potentiel joue le rôle d'impureté qui brise la symétrie de translation sur le site terminal, comme le fit remarquer W. Shockley en 1939 [Sho39].

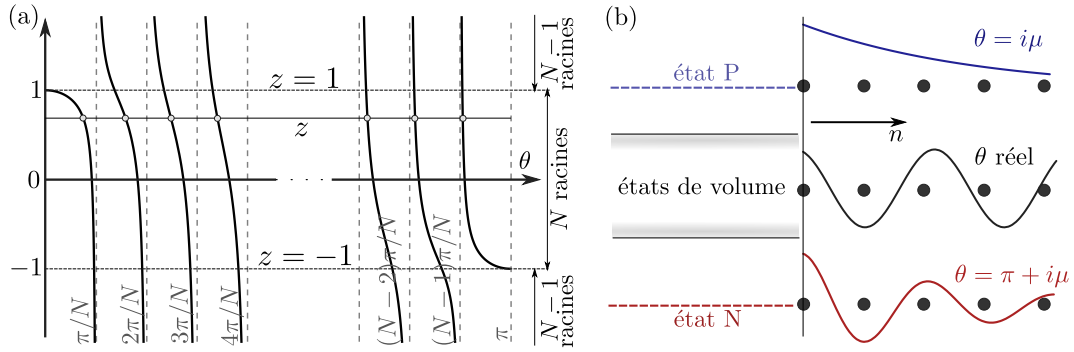
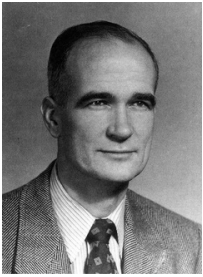


FIGURE 1.3 – Modèle de Tamm : (a) Solution graphique de la condition sur z . (b) Représentation schématique du comportement des états de Tamm de type P ($z > 1$) et de type N ($z < -1$).

Le modèle de Shockley



W. Shockley

A l’aide son modèle, illustré par la Figure 1.4(a), Shockley [Sho39] donne une nouvelle perspective aux états de surface. Il cherche à expliquer le spectre en énergie de ces états électroniques à l’aide des niveaux discrets des atomes qui coalescent d’une séparation infinie (b infini sur la Figure 1.4(a)) pour former le cristal (b fini). La différence du potentiel qu’il utilise (Fig. 1.4(a)) avec celui de Tamm (Fig. 1.2(a)) est que le site terminal n’est pas affecté par la surface. On va ici décrire les états de Shockley à l’aide du modèle de liaisons fortes [Goo39, DS92] illustré à la Figure 1.4(b) où il y a hybridation de deux orbitales, de type sp . L’intégrale Coulombienne α est partout constante et l’intégrale de résonance alterne entre les liens forts (β) et faibles (β'). Ce modèle est similaire à celui de la chaîne de polyacétylène [THH60, SSH79, SSH80] auquel on reviendra. Le réseau est composé de deux sites inéquivalents sur lesquels on décompose la fonction d’onde selon $\Psi = \sum_{n \geq 1} (u_n \Psi_{1,n} + v_n \Psi_{2,n})$ [voir Figure 1.4(b)] et l’équation Hamiltonienne s’écrit pour $n > 1$

$$\begin{cases} [(E - \alpha)/\beta]u_n = v_n + \eta v_{n-1} \\ [(E - \alpha)/\beta]v_n = u_n + \eta u_{n+1} \end{cases} \tag{1.18}$$

où $\eta = \beta'/\beta$. La résolution de ce modèle à l’aide du théorème de Bloch donne en fonction du vecteur d’onde θ $\Psi_\theta = \sum_{n \geq 1} (u_\theta \Psi_{1,n} + v_\theta \Psi_{2,n}) e^{in\theta}$ où les coefficients u_θ et v_θ sont solutions de l’équation matricielle

$$\hat{h}_\theta \equiv \begin{bmatrix} 0 & t(\theta) \\ t^*(\theta) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_\theta \\ v_\theta \end{bmatrix} = [(E - \alpha)/\beta] \begin{bmatrix} u_\theta \\ v_\theta \end{bmatrix}, \tag{1.19}$$

avec $t(\theta) = 1 + \eta e^{-i\theta}$. Le spectre associé $E_\pm(\theta) = \alpha \pm \beta [1 + \eta^2 + 2\eta \cos(2\theta)]^{1/2}$ est symétrique par inversion $E_\pm(\theta) = E_\pm(-\theta)$ et, en présence de l’interface, comme pour le modèle de Tamm (1.14), on peut écrire la solution pour u_n sous la forme $u_n = A \cos(n\theta) + B \sin(n\theta) = A \sin[(N + 1 - n)\theta] / \sin[(N + 1)\theta]$ dans le cas d’une chaîne semi-infinie où $u_{N+1} = 0$. De plus, la condition au bord $n = 1$, et qui correspond à (1.18) où $v_0 = 0$, donne

$$-\eta = \frac{\sin[(N + 1)\theta]}{\sin(N\theta)}. \tag{1.20}$$

Les équations obtenues sont les mêmes que dans le modèle de Tamm analysé précédemment, il suffit de remplacer $\eta \rightarrow -z$. Par conséquent, on aura un état de surface si seulement $|\eta| > 1$, c’est à dire s’il y a inversion de bande comme illustré à la Figure 1.4(c). Les solutions évanescentes ont $\theta = i\mu$ (ou $\theta = \pi/2 + i\mu$) d’où on obtient que le spectre des états de surface est toujours $E(\theta) = \alpha$, pile au centre du gap inversé. Ainsi, Shockley montre que si l’hybridation de deux orbitales au sein d’un réseau donne lieu à un croisement de bandes avec gap inversé (Fig. 1.4(c)) alors on obtient des états de surfaces sans avoir à introduire un potentiel de terminaison. Cette distinction entre états de Tamm et de Shockley sera sujette à de nombreuses discussions et il en ressort

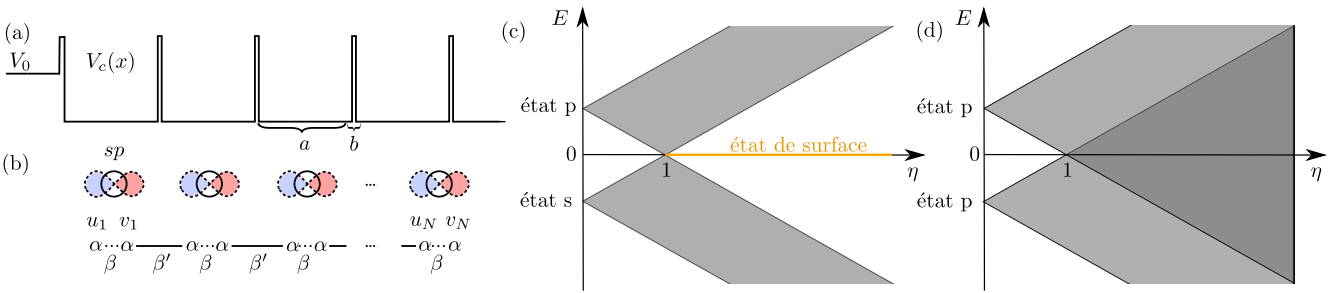


FIGURE 1.4 – Modèle de Shockley : (a) Illustration du potentiel. (b) Modèle sur réseau équivalent. (c) Croisement des bandes obtenus en fonction du paramètre $\eta = \beta'/\beta$, gap direct pour $\eta < 1$ et inversé pour $\eta > 1$ où les états de surface apparaissent. (d) Dans le cas où les bandes se recouvrent, aucun état de Shockley n'est obtenu au delà de $\eta = 1$.

que l'hybridation des orbitales est importante : dans le cas d'un recouvrement de bandes tel qu'illustré à la Figure 1.4(d) aucun état de Shockley ne peut être obtenu [TK69]. De plus, les résultats expérimentaux mettrons du temps à faire surface car il est naturel de penser que les effets de volume sont prédominants.

1.1.4 Observation expérimentale

Le début des années 1940 voit une meilleure compréhension de la jonction métal - semiconducteur grâce au travail de N. Mott [Mot39] sur les *redresseurs cristallins* dont la propriété notable est la présence d'un potentiel de redressement que les porteurs de charge doivent dépasser afin de transporter le courant. Ce potentiel de contact est associé à la redistribution en surface des porteurs de charge du semi-conducteur, afin d'équilibrer les énergies de Fermi des deux matériaux tel qu'illustré sur la Figure 1.5(a). On distingue les redresseurs à large surface des redresseurs à contact ponctuel. Dans les deux cas, le semi-conducteur fait contact avec le métal à deux de ses extrémités et, chaque jonction redresse le courant dans une direction opposée. On obtient un redressement asymétrique en modifiant la nature du contact d'une extrémité à l'autre (i) en utilisant différents métaux (redresseur à large surface) ou (ii) en ayant un contact ponctuel et l'autre étalé (redresseur à point de contact). De cette façon, la chute de potentiel est concentrée au niveau du contact de plus haute résistance et on peut en général négliger les effets de redressement associés à l'autre contact. En particulier, la théorie de N. Mott [Mot39] prédit que le potentiel de redressement V_r est directement lié à la différence de potentiel de sortie du semiconducteur (χ) et du métal (ϕ) : $V_r = \chi - \phi$ [voir Figure 1.5(a)]. Cependant, l'amélioration de la technique expérimentale permet à Meyerhof de montrer que le potentiel de redressement est indépendant du métal en contact avec l'échantillon [Mey47]. Dans le cas du silicium dopé *p*, il mesure un potentiel de redressement $V_r \approx 0.3V$ que le métal soit de l'or, du cuivre, du fer, du nickel, du platine, etc.. alors qu'il mesure bien une variabilité de leur tension de sortie [Mey47].



Bardeen, Shockley, Brattain

A la même époque, Shockley, Bardeen et Brattain travaillent aux laboratoires Bell à développer une technique d'amplification purement électronique, qui donnera lieu au transistor. Ils cherchent en particulier à contrôler électriquement le potentiel de redressement mais n'y parviennent pas [Sho50]. Ainsi, au vu des résultats de Meyerhof, Bardeen propose que les états de surface sont suffisamment denses pour faire écran à la redistribution des charges des impuretés au sein du semi-conducteur [Bar47]. Pour tester cette théorie des états de surface de Bardeen, Brattain mesure les potentiels de contact χ_n du silicium dopé *n* et χ_p du silicium dopé *p*, de sorte qu'en l'absence d'état de surface $\chi_p - \chi_n = E_g = 1.2 \text{ eV}$ est la taille du gap [voir Figure 1.5(b)]. Cependant il obtient $\chi_p - \chi_n = 0.3 - (-0.3) = 0.6\text{eV}$ [BS47] à cause des effets d'écrantage par les états de surface. La neutralisation chimique de l'écrantage des états de surface permettra à Bardeen et Brattain de découvrir le transistor à point de contact, suivi quelques temps plus tard par le transistor à effet de champ de Shockley [Sho50, RHH99].

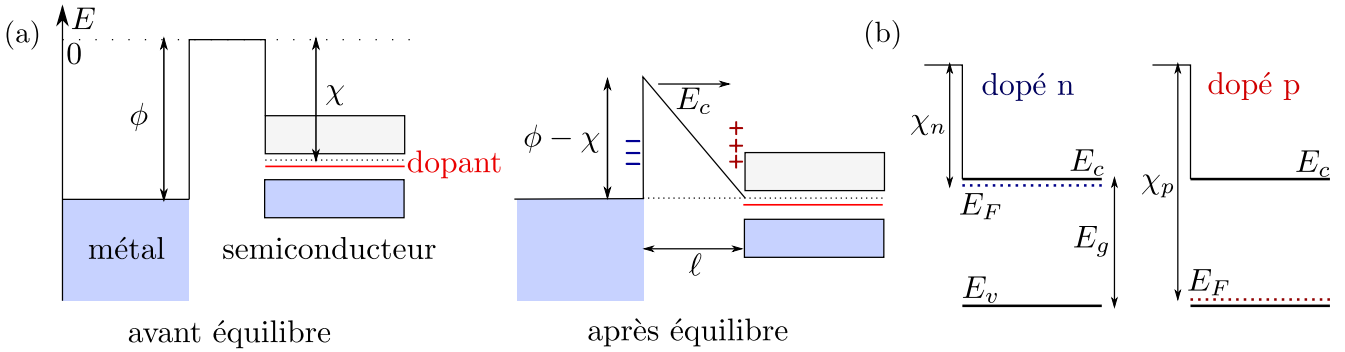


FIGURE 1.5 – Jonction métal - semiconducteur dopé. (a) Le transfert d'électrons vers le matériau de plus grand travail de sortie, ϕ , entraîne à l'équilibre une accumulation de charges sur une distance ℓ qui empêche le transit des porteurs de charges. La barrière est assez large pour qu'il n'y ait pas d'effet tunnel, les porteurs doivent passer par dessus. (b) Travaux de sortie pour un semiconducteur dopé n et p , en l'absence d'état de surface $\chi_p - \chi_n = E_g$.

1.2 Symétrie de la surface et topologie

1.2.1 Cas de l'interface ponctuelle : sensibilité en la terminaison

Les états de surface apparaissent dans les bandes interdites et en 1984 J.Zak propose de caractériser ces bandes afin de compléter l'argument de Shockley. Il montre que la symétrie des états électroniques peut s'exprimer en surface si la terminaison se situe en un centre de symétrie du groupe ponctuel (ou un plan de symétrie, en trois dimensions) du cristal [Zak84, Zak85]. Une manière de caractériser cette symétrie est en terme de la phase de Berry [Ber84, Zak89].

Phase de Zak et symétrie des bandes permises

Le concept de phase de Berry [Ber84] est à l'origine d'un fort engouement de la part des physiciens dans les années 1980 que ce soit en physique classique [KS88, BS88], nucléaire [Tyc87] et moléculaire [DGW⁺86]. Le principe étant que lors d'une évolution cyclique et adiabatique, un système peut accumuler une phase totale non-nulle. En matière condensée, la zone de Brillouin offre un espace de paramètres cyclique où l'évolution du vecteur d'onde \mathbf{k} finit par se refermer sur elle-même en bord de zone [Zak89]. Prenons l'exemple d'un électron dans un potentiel périodique $V(x+a) = V(x)$ et soumis à un potentiel vecteur $A(t)$, son équation de Schrödinger s'écrit

$$i\partial_t \Psi = \left[\frac{1}{2m} (p - eA(t))^2 + V(x) \right]. \quad (1.21)$$

Dans l'approximation adiabatique et dans la base des fonctions d'onde de Bloch $\Psi_{n,t}(x) = e^{ikx} u_{n,k(t)}(x)$, on ramène toute l'évolution à un vecteur d'onde dépendant du temps $k(t) = k + eA(t)$. Ainsi, les solutions peuvent s'écrire sous la forme [Zak89]

$$\Psi(x, t) = \exp^{i\gamma_n(t) - i \int_0^t E(k(t')) dt'} \Psi_{n,t} \quad \gamma_n = \frac{2\pi}{a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \int_0^a dx u_{n,k}^*(x) i \partial_k u_{n,k}(x). \quad (1.22)$$

Cette phase de Berry γ_n , que l'on appelle aussi *phase de Zak*, se présente pour un système qui n'est pas cyclique $H(t+T) \neq H(t)$ mais cependant lorsque $A(t)$ croît de $2\pi/a$ le vecteur d'onde k fait le tour de la zone de Brillouin et le mouvement est périodique à un changement de jauge près $u_{n,k+2\pi/a}(x) = e^{-i2\pi x/a} u_{n,k}(x)$. La phase de Zak permet ainsi de généraliser le concept de phase de Berry. De plus, elle est invariante par changement de jauge modulo 2π , $e^{i\gamma_n}$ est donc une observable qui permet de décrire une bande permise. Il est utile d'utiliser la base orthonormée des fonctions de Wannier (1.4) et réécrire γ_n sous la forme

$$\gamma_n = \frac{2\pi}{a} \int_{-\infty}^{\infty} x |a_n(x)|^2 dx. \quad (1.23)$$

Comme nous l'avons introduit à la Section 1.1.1, pour un système invariant par inversion la fonction de Wannier $a_n^{(s,l)}(x)$ d'une bande est paire ou impaire ($l = \pm$) par rapport à l'un des centres de symétrie ($s = 0$ ou $s = a/2$). Si $s = 0$ alors $a_n(-x) = \pm a_n(x)$ et donc $\gamma_n = 0$. Si $s = a/2$ alors $a_n(a-x) = \pm a_n(x)$ et donc $\gamma_n = \pi$. De cette manière le calcul de la phase de Zak d'une bande indique son centre d'inversion : (i) $s = 0$ si $\gamma_n = 0$ et (ii) $s = a/2$ si $\gamma_n = \pi$ et ceci permet aussi de caractériser l'existence des états de surface.

Existence des états de surface et symétrie de la surface

On considère un cristal dont la surface est en x_v tel que le vide est situé en $x < x_v$ et est décrit par le potentiel constant $V(x) = V_0$. On illustre ce potentiel par la Figure 1.6(a) où l'on dessine aussi la fonction d'onde à l'intérieur et à l'extérieur du cristal. En particulier, comme la composante de la fonction d'onde à l'extérieur du cristal croît exponentiellement, la condition de continuité en $x = x_v$ impose à la composante à l'intérieur du cristal de croître exponentiellement en ce point. La fonction d'onde $\Psi_k(x)$ dans le cristal vérifie donc

$$\rho(k, x_v) = \Psi'_k(x_v)/\Psi_k(x_v) > 0. \quad (1.24)$$

La condition nécessaire pour l'existence des états de surface est donc la positivité de $\rho(k, x_v)$, ce qui nous permet de caractériser les bandes interdites. On se place dans le cas d'un système invariant par inversion et dont les bords de bande sont en $k = 0$ et π/a [Zak84, Zak85, Zak89] [voir Figure 1.6(b)]. Comme les bords de bandes sont à l'origine des états de surface [Kra35, Koh59], ceux-ci ont $k = i\beta$ ou $k = \pi/a + i\beta$ avec $\beta > 0$ pour que l'onde de Bloch soit exponentiellement décroissante dans le cristal. Dans le cas où les centre de la symétrie d'inversion sont $x_v = 0$ ou $-a/2$, on peut relier la valeur de $\rho(k, x_v)$ d'une bande interdite à l'autre [Zak84, Zak85] en utilisant la règle du tableau de la Figure 1.6(c). Comme, en général, la plus basse bande interdite n'a pas de comportement oscillatoire, on a $\rho(i\beta, x_v) < 0$ et absence d'état de surface. Il est aussi intéressant de remarquer que pour une terminaison dans l'autre sens, où le vide est situé en $x > x_v$, le signe de $\rho(k, x_v)$ est opposé et $\rho(k, x_v) = -\rho(k^*, x_v)$.

On peut ainsi analyser le modèle de Shockley de la section 1.1.3 où la terminaison est en $x_v = -a/2$. Dans la limite de couplage faible [$|\eta| < 1$ à l'équation (1.20)], la symétrie des bandes de conduction et de valence en terme du centre de symétrie d'inversion $s = 0$ ou $-a/2$ et de la parité $l = \pm 1$ (1.4) est $(s, l) = (0, +)$ et $(0, -)$ tel qu'illustré sur la Figure 1.6(b). Comme pour la plus basse bande interdite $\rho_0(i\beta, 0) < 0$ on en déduit que pour les deux autres bandes interdites $\rho_1(\pi + i\beta, 0) < 0$ et $\rho_2(i\beta, 0) < 0$: la condition (1.24) n'est pas vérifiée, il n'y a aucun état de surface. Cependant pour un couplage plus fort, les bandes finissent par se croiser Fig.1.4(c) et les deux bandes sont alors de symétries $(q, l) = (a/2, +)$ et $(a/2, -)$ tel qu'illustré sur la Figure 1.6(b). Comme pour la plus basse bande interdite $\rho_0(i\beta, 0) < 0$, alors pour les deux autres bandes interdites $\rho_1(\pi + i\beta, 0) > 0$ et $\rho_2(i\beta, 0) < 0$: un état de surface existe au sein de la bande interdite commune aux deux bandes permises. Ce résultat est bien sûr inversé dans le cas où $x_v = -a/2$. Dans le cas du modèle de Tamm, le raisonnement précédent est court-circuité par la présence d'un potentiel de Dirac à l'interface [voir Fig. 1.2(b)] qui modifie la condition de passage pour $\Psi'_k(x)$ ce qui force l'apparition d'un état.

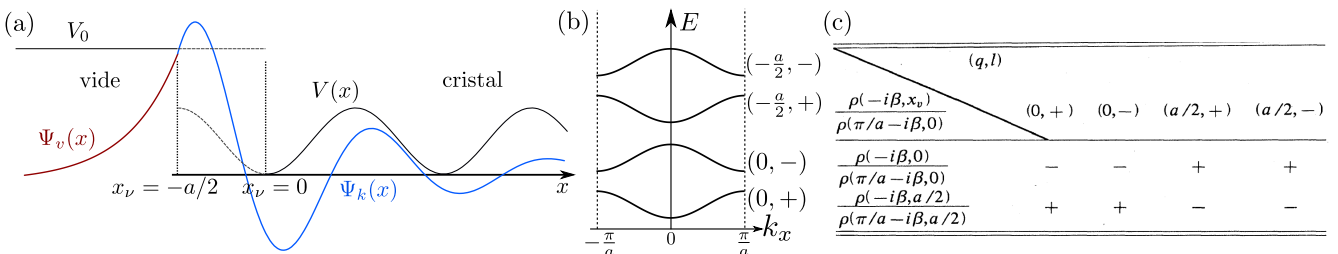


FIGURE 1.6 – Symétrie du site terminal. (a) Illustration des positions x_v de la surface et de la continuité de la fonction d'onde. (b) Bandes permises et caractérisation de leurs indices (q, l) sous la symétrie d'inversion. (c) Tableau des changements de signe de $\rho(k, x_v)$ lorsque l'on passe d'un bord de bande à un autre d'une bande permise de symétrie (q, l) . Les figures (b) et (c) sont extraites de [Zak84, Zak85].

Le raisonnement de Zak ramène ainsi les états de Shockley à la caractérisation du centre de symétrie $q = 0$ ou $-a/2$ des bandes, équivalent à une phase de Zak nulle ou égale à π , et à la position de l'interface sur une de ces deux positions $x_v = 0$ ou $-a/2$. Ce raisonnement peut être généralisé au cas d'une jonction entre deux cristaux semblables mais dont la valeur des paramètres a changé et où le critère de Zak (1.24) se réécrit $\rho_1(k + i\beta, x_v)/\rho_2(k - i\beta, x_v) > 0$ afin de prendre en compte le caractère oscillant des fonctions d'ondes [voir Figure 1.6(a)]. Si on pousse le raisonnement, il apparaît qu'un état de surface existe s'il y a des bandes dont le centre de symétrie change d'un matériau à l'autre. Bien sûr, ce raisonnement nécessite x_v en un centre de la symétrie ponctuelle mais, en pratique, l'interface entre les deux matériaux peut se relaxer et donner lieu à une interface graduelle où le point x_v n'a plus d'importance et où une autre symétrie, la *symétrie chirale*, permet de discuter l'existence des états de surface.

1.2.2 Cas de l'interface graduelle : états de surface topologique

L'interface entre deux cristaux perturbe le potentiel cristallin. Le modèle de la chaîne de polyacétylène introduite à la section 1.1.3 en est un bon exemple [SSH79, SSH80]. Si on développe le modèle de liaisons fortes des électrons autour d'une position d'équilibre où la chaîne n'est pas dimérisée, $\beta' = \beta$, alors on obtient pour le Hamiltonien du cristal

$$\hat{H} = - \sum_n [t - \alpha(u_{n+1} - u_n)] c_{n+1}^\dagger c_n + h.c. + \frac{K}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{M}{2} \sum_n \dot{u}_n^2, \quad (1.25)$$

où \hat{c}_n^\dagger et \hat{c}_n créé ou détruit un électron π au n -ème site et u_n décrit le déplacement des centres attracteurs du cristal. Dans la limite de la chaîne dimérisée, le déplacement u_n est alterné tel que $u_n = (-1)^n u$ ou $u_n = -(-1)^n u$ forment deux états fondamentaux dégénérés [SSH80]. Les valeurs $\pm u$ du paramètre d'ordre $\psi_n \equiv (-1)^n u_n$ décrivent ces deux états fondamentaux. Dans le cas d'une jonction entre deux chaînes où dans l'une $\psi_n = -u$ et dans l'autre $\psi_n = u$, Su, Shrieffer et Heeger [SSH79, SSH80] ont montré qu'à l'interface entre les deux il existe un état électronique dont la longueur de localisation est $\xi \equiv v_F/\Delta \approx 10a$ où $v_F = 2at$ est la vitesse de Fermi et $\Delta = 4\alpha u$ est le gap électronique [voir Figure 1.7]. Ce qui est notable est que l'extension ℓ du mur de domaine ψ_n est aussi de l'ordre de ξ , la raison étant qu'en théorie de champ moyen [TLLM80] on a $\psi_n = -16\alpha^3 a \langle c_n^\dagger \hat{\sigma}_x c_n \rangle / \kappa$ ce qui est proportionnel à la densité d'états locale. Ainsi, lorsque deux matériaux sont mis en contact, des changements peuvent se faire sur une échelle bien plus large que la cellule unité. Ce que l'on appelait jusque maintenant la surface a une extension que l'on appelle l'*interface* et peut contenir des modes localisés que l'on continuera d'appeler des états de surface.

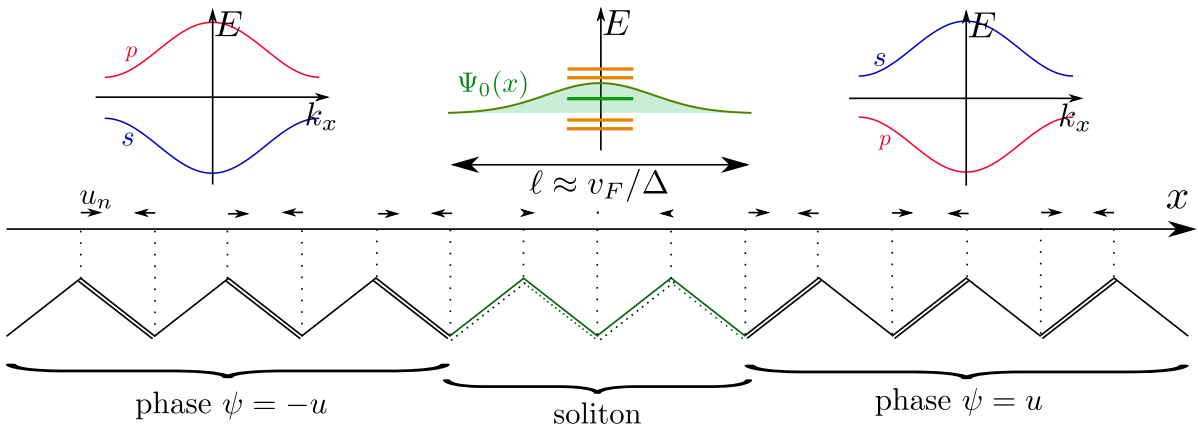


FIGURE 1.7 – Modèle de la chaîne de polyacétylène. A l'interface entre les deux états fondamentaux $\psi = \pm u$, la chaîne se déforme et la double liaison se délocalise. On illustre aussi le spectre électronique pour chaque partie de la chaîne.

L'équation de Schrödinger qui correspond à une telle interface n'est pas périodique et s'écrit

$$\{[p^2/2m + V(\mathbf{r})] + U(\mathbf{r})\} \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.26)$$

où $V(\mathbf{r})$ est le potentiel cristallin et $U(\mathbf{r})$ est une fonction lentement variable. Résoudre cette équation par une série de conditions aux bords le long du gradient de $U(\mathbf{r})$ est difficile [Har61, Fis10] et s'avère similaire à l'approximation de la fonction enveloppe [BD66, KL54, Ros11]. Cette théorie propose de réécrire la solution comme une superposition d'ondes de Bloch $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k}^3 F_{\alpha,\mathbf{k}} \psi_{\alpha,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. L'équation de Schrödinger (1.26) s'écrit alors en terme de l'Hamiltonien de Bloch $H(\mathbf{k})$

$$\sum_{\alpha'} \left[H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) F_{\alpha',\mathbf{k}} + \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k}'^3 \sum_{\mathbf{G}} B_{\alpha,\mathbf{k},\alpha',\mathbf{k}'(\mathbf{G})} U_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{G}) F_{\alpha',\mathbf{k}'} \right] = E F_{\alpha,\mathbf{k}} \quad (1.27)$$

où l'on a utilisé la périodicité de $u_{\alpha,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $B_{\alpha,\mathbf{k},\alpha',\mathbf{k}'(\mathbf{G})} = \int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha',\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ et $U_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{G}) = \int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} U_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{r})$. Pour un potentiel $U(\mathbf{r})$ lentement variable, on peut considérer $\mathbf{G} = 0$ et $B_{\alpha,\mathbf{k},\alpha',\mathbf{k}'(0)} \approx \delta_{\alpha,\alpha'}$. Ainsi, l'équation de Schrödinger devient

$$\sum_{\alpha'} H_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) F_{\alpha',\mathbf{k}} + \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k}'^3 U_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) F_{\alpha,\mathbf{k}'} = E F_{\alpha,\mathbf{k}} \quad (1.28)$$

dont la transformée de Fourier inverse donne $\sum_{\alpha'} H_{\alpha\alpha'}(-i\nabla_{\mathbf{r}}) F_{\alpha'}(\mathbf{r}) + U_{\alpha}(\mathbf{r}) F_{\alpha}(\mathbf{r}) = E F_{\alpha}(\mathbf{r})$. Ainsi l'effet d'un potentiel suffisamment lent peut être traité en remplaçant les vecteurs d'ondes par l'opérateur dérivée spatiale pour une équation appliquée à $F(\mathbf{r})$, l'onde enveloppe. Il faut garder à l'esprit que la solution propre à l'équation (1.26) est

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k}^3 F_{\alpha,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\alpha,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \sum_{\alpha} F_{\alpha}(\mathbf{r}) u_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (1.29)$$

C'est ce même raisonnement qui permet d'introduire un champ magnétique² par la substitution de Peierls $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla_{\mathbf{r}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})$ où $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est le potentiel vecteur et le champ magnétique est $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ [KL54].

Cette technique a été appliquée à la résolution des états de surface de la chaîne du polyacétylène [TLLM80]. Un autre calcul important, au vu des jonctions utilisées pour les matériaux topologiques, est le calcul des états de surface à l'interface PbTe/SnTe [VP85] et HgTe/CdTe [PPV87, LR12] par Volkov et Pankratov. Ils considèrent le modèle de basse énergie suivant

$$\begin{bmatrix} 0 & i\Delta(z) + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \\ -i\Delta(z) + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_- \\ F_+ \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} F_- \\ F_+ \end{bmatrix}, \quad (1.30)$$

où $\boldsymbol{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ est le vecteur des matrices de Pauli. Dans le cas où $\Delta(z) = \Delta_0$ le spectre est constitué de deux bandes doublement dégénérées $E_{\pm} = \pm \sqrt{\Delta_0^2 + v_F^2 k^2}$ et est indépendant du signe de Δ_0 , à la manière du paramètre d'ordre ϕ_n du modèle du polyacétylène [SSH79, SSH80]. Dans le cas d'un potentiel lentement variable, par exemple à cause d'un gradient de dopage, tel que $\Delta(z) = \Delta_0 \tanh(z/\ell)$ relie les deux phases $-\Delta_0$ et $+\Delta_0$, ils déterminent le spectre des états de surface de manière analogue à la chaîne de polyacétylène [TLLM80] et en terme de $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$, le vecteur d'onde parallèle à l'interface. En particulier, les états de surface dont le spectre est $E_{\pm} = v_F |\mathbf{k}_{\parallel}|$ sont indépendants du profil de $\Delta(z)$, ils ne sont pas dégénérés et leurs solutions propres s'écrivent toujours de la manière suivante

$$\Psi_{\pm}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & e^{-i\theta} \end{bmatrix} \exp \left[-\frac{1}{v_F} \int_0^z \Delta(z) dz + i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r} \right], \quad (1.31)$$

où $\tan(\theta) = k_y/k_x$. Ces états sont comme stables vis-à-vis des fluctuations du potentiel d'interface. L'origine de cette stabilité est similaire à celle du niveau de Landau $n = 0$ des fermions de Dirac dans un champ magnétique dont on doit l'explication à Aharonov et Casher [AC79, KHMA11, HKA15] par l'utilisation de la *symétrie chirale* et qui fait part importante de ma thèse. Nous y reviendrons au Chapitre 2. De plus, comme le spectre de ces

2. Dans ce cas, l'approximation d'un potentiel lentement variable correspond à une longueur magnétique $\ell_B = \sqrt{\hbar/eB} = 25.7\text{nm}/\sqrt{B[\text{T}]}$ négligeable devant le pas du réseau $a \sim 1\text{\AA}$, soit $B \ll 5 \cdot 10^4 \text{T}$ ce qui est raisonnable. Cela compte aussi pour l'échelle des non-uniformités du champ magnétique.

états de surface, aussi appelés *états de surface topologiques*, est valable pour n'importe quel potentiel d'interface, en particulier $\Delta(z) = \Delta_0(\Theta(-z) - \Theta(z))$ où $\Theta(z)$ est la fonction de Heaviside, on peut le calculer en appliquant directement la continuité de la fonction d'onde [ZKM12].

Ces états de surface topologiques semblent avoir la même origine que les états de Shockley : l'inversion de bandes que l'on a illustrée à la Figure 1.4(b). Les deux cas de figures sont néanmoins différents : (i) dans le cas du modèle de Shockley, l'existence des états de surface dépend fortement de la position x_v de l'interface comme l'a montré Zak [Zak84, Zak85] et, (ii) dans le cas des états de surface topologiques, si le potentiel d'interface est suffisamment doux – typiquement $\ell \approx v_F/\Delta \gg a$ – alors l'existence des états de surface est complètement insensible aux détails de l'interface. Dans ce qui suit nous serons intéressés par ces états de surface topologiques et leur lien avec un caractère que l'on doit à l'histoire de l'effet Hall quantique entier : l'*invariant topologique*.

1.3 Matériaux topologiques

La découverte expérimentale de l'effet Hall quantique entier [KDP80] a permis de mettre en avant l'importance des états de surface en physique de la matière condensée. Cette expérience est réalisée pour un champ magnétique suffisamment intense pour que le système soit dans un état isolant, i.e. l'énergie de Fermi est dans une bande interdite. Alors qu'on ne s'attend à aucune propriété de transport, l'expérience montre qu'il y a tout de même une contribution : celle des états de surface. L'existence de ces états est ainsi reliée à l'effet Hall et on s'attend à les observer même en l'absence d'un champ magnétique, s'il existe un effet Hall intrinsèque et que l'on caractérise à l'aide des invariants topologiques.

1.3.1 Rappel : l'effet Hall quantique entier

Une discussion approfondie de l'effet Hall peut être trouvée dans la thèse de Nicolas Thiébaud [Thi15] dont je donne ici un bref aperçu.

L'effet Hall, tel que découvert par E.H. Hall [Hal79], met en évidence la dérive des électrons en présence d'un champ magnétique \mathbf{B} et d'un champ électrique \mathcal{E} . Le champ magnétique donne aux électrons un mouvement cyclotron de pulsation $\omega_c = eB/m$ qui, en présence du champ électrique, dérive avec la vitesse $\mathbf{v}_D \equiv \mathcal{E} \times \mathbf{B}/B^2$. Si on associe cette vitesse de dérive à un courant I transverse au champ magnétique dont la densité de courant est $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}_D$, où e est la charge élémentaire et n la densité de porteurs de charge, alors tout se passe comme en présence d'un champ électrique transverse au champ magnétique et au courant et auquel on associe la différence de potentiel V_H . La résistance de Hall $R_H = V_H/I$ est ainsi

$$R_H = E_x/j_y = B/en \quad (1.32)$$

et fût mesurée par E.H Hall en 1879 [Hal79]. Ce raisonnement est valable (i) dans la limite d'un échantillon bi-dimensionnel afin de négliger le mouvement des électrons le long du champ magnétique et, (ii) dans la limite où les effets quantiques sont négligeables. La quantification des orbites cyclotrons en *niveaux de Landau*, dont la dégénérescence est $N_B = \Phi/\Phi_0$ où Φ est le flux total de champ magnétique et $\Phi_0 = h/e$ est le quantum de flux [AC79], doit être prise en compte lorsque le nombre de porteurs de charges N est comparable à N_B

$$(\text{limite quantique, densité}) : N/N_B = n\phi_0/B \lesssim 1, \quad (1.33)$$

et pour de faibles températures ($k_B T \ll \hbar\omega_c$) soit $T \lesssim 10\text{K}$. L'expérience de Hall [Hal79] a été réalisée à température ambiante et sur une feuille d'or dont la densité volumique est $\rho_{\text{Au}} = 5.9 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$, soit une densité surfacique $n_{\text{Au}} = (\rho_{\text{Au}})^{2/3} = 1.5 \times 10^{19} \text{ m}^{-2}$, d'où l'absence d'effets quantiques. L'utilisation d'un semiconducteur bidimensionnel $n \sim 10^{15} \text{ m}^{-2}$, un champ magnétique intense $B \sim 15 \text{ T}$ et une très basse température $T \sim 1.5 \text{ K}$ a ainsi permis à K. von Klitzing d'observer les effets quantiques de la résistance de Hall en 1980 [KDP80]. Il observe que l'évolution de la conductivité de Hall se fait par paliers centrés autour de valeurs du champ magnétique qui correspondent à des facteurs de remplissage des niveaux de Landau $\nu = N/N_B$ entiers [voir Figure 1.8]. De plus

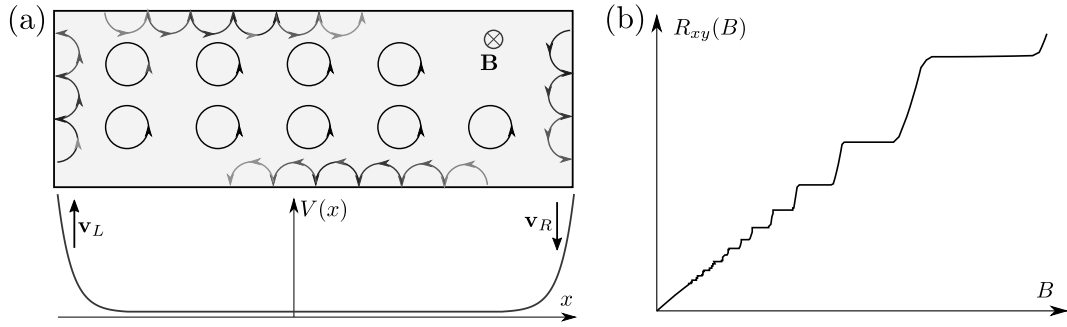


FIGURE 1.8 – Illustrations de l'effet Hall quantique entier. (a) Orbites cyclotrons et états chiraux aux bords de l'échantillon où le potentiel de confinement $V(x)$ change. (b) Paliers de la résistance de Hall.

les paliers évoluent comme l'inverse de ces entiers

$$R_H = B/en = h/ve^2. \quad (1.34)$$

C'est ce que l'on appelle l'*effet Hall quantique entier*. Il existe deux approches théoriques à l'expression de la conductivité de Hall :

- Soit le système est pris de taille finie [Lau81, Hal82, B88] et la conductivité de Hall est associée aux états de surface. Par exemple, la théorie de Büttiker [B88] considère un champ magnétique en jauge de Landau tel que

$$\hat{H} = [p_x^2 + (p_y + eBx)^2] / 2m + V(x), \quad (1.35)$$

où le potentiel $V(x)$ décrit le désordre, le confinement des électrons dans l'échantillon et un champ électrique. Les orbites cyclotron sont centrées autour de $\langle x \rangle = p_y \ell_B^2 / \hbar \in [0, L_x]$ où L_x est la taille de l'échantillon dans la direction x . La vitesse de groupe des électrons d'un niveau de Landau n s'écrit $v_{n,y} = \partial_{p_y} E_{n,p_y} = \hbar \partial_{\langle x \rangle} E_{n,p_y} / \ell_B^2$ et, dans l'approximation d'un potentiel $V(x)$ lentement variable par rapport à la longueur magnétique ℓ_B , l'énergie du niveau de Landau est $E_{n,p_y} = \hbar \omega(n + 1/2) + V(\langle x \rangle)$. Par conséquent, la vitesse moyenne d'un niveau de Landau rempli est

$$v_{n,y} = \frac{L_y}{h} \int_0^{\hbar L_x / \ell_B^2} \partial_{p_y} E_{n,p_y} dp_y = \frac{L_y}{h} [E(x = L_x) - E(x = 0)]. \quad (1.36)$$

La contribution de toutes les vitesses se compense en volume à part pour les états de surface et dont la différence d'énergie n'est rien d'autre que la tension de Hall. Ainsi pour un niveau de Landau complètement rempli on a $I_y = -e v_{n,y} / L_y = e^2 V_H / h$ alors que les quelques électrons peuplant un niveau peu rempli sont localisés par les impuretés du volume et ne contribuent pas au transport. La contribution de ν niveaux de Landau remplis se somme et donne lieu à la résistance de Hall (1.34). De plus, dans le cas où la contribution principale au potentiel $V(x)$ est celle du potentiel de confinement, constant dans le volume et qui change essentiellement en surface, tel qu'illustré à la Figure 1.8, alors la vitesse de groupe des états de volume est nulle et la vitesse de groupe des états de surface est $v_y = \hbar \partial_{\langle x \rangle} V(\langle x \rangle) / \ell_B^2$ dirigée dans une direction privilégiée pour une surface et pour une autre. On parle alors d'*état de surface chiral* que l'on représente à la Figure 1.8.

- Dans le cas d'un système infiniment grand, la conductivité de Hall $\sigma_{xy} = 1/R_H$ peut être calculée par la théorie de la réponse linéaire [Str82b, Str82a, TKNdN82, Koh85]. Son expression peut se réécrire comme le flux de la courbure de Berry [Ber84, Cay13] des états occupés à travers la première zone de Brillouin [Koh85]

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \int_{\text{BZ}} d^2 \mathbf{k} [\nabla \times \hat{\mathbf{A}}(k_x, k_y)]_z \quad \text{où} \quad \hat{\mathbf{A}}(k_x, k_y) \equiv \langle u_{\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (1.37)$$

Le facteur en face de e^2/h s'avère relié à au premier nombre de Chern $C_1 = \sigma_{xy} / (e^2/h)$ [Koh85, Cay13], un nombre entier utilisé pour caractériser le monopole magnétique de Dirac et en lien avec la topologie des fibrés vectoriels [Dir31, Zak64].

Pour ces raisons, la caractérisation des bandes de volume par un invariant topologique est associée à l'existence d'états de surface chiraux. Cette situation a été initialement introduite aux électrons dans un champ magnétique et généralisée, à l'aide de l'équation (1.37), à des systèmes sans champ magnétique : les phases topologiques.

1.3.2 Effet Hall quantique anormal, phases topologiques bidimensionnelles

Les systèmes hors équilibre montrent un certain nombre de relations de réciprocity universelles. Par exemple, l'effet Peltier – qui correspond aux changements de température aux jonctions entre différents métaux d'un même circuit traversé par un courant électrique – et l'effet Seebeck – qui décrit l'apparition d'une force électromotrice si une différence de température est maintenue en deux points d'un circuit – s'avèrent reliés par la relation de Kelvin [Tho57]. Les symétries globales et la thermodynamique ne permettent pas de mettre en évidence ces relations car leur origine vient de la symétrie des équations qui régissent le mouvement individuel des particules par renversement du temps, soit $t \rightarrow -t$ [Boh11, Ons31a, Ons31b, Cas45]. Comme le champ magnétique change de signe sous le renversement du temps (t, \mathbf{B}) \rightarrow ($-t, -\mathbf{B}$), on obtient pour la conductivité de Hall [Mei41, Cas45, CG41]

$$\text{(renversement du temps)} : \sigma_{xy}(\mathbf{B}) = \sigma_{yx}(-\mathbf{B}). \quad (1.38)$$

Dans le cas où l'énergie de Fermi est dans une bande interdite [Str82b, Str82a, TKNdN82, Koh85], l'équation (1.37) permet aussi d'écrire

$$(E_F \text{ dans une bande interdite}) : \sigma_{xy}(\mathbf{B}) = -\sigma_{yx}(\mathbf{B}). \quad (1.39)$$

Cette relation n'est pas valable dans le cas où l'énergie de Fermi est dans une bande permise, à cause de la contribution des états de volume au transport [Str82b, Str82a]. Des relations (1.38) et (1.39), on en déduit que $\sigma_{xy}(\mathbf{B}) = -\sigma_{xy}(-\mathbf{B})$ et la conductivité de Hall dans le gap d'un isolant est nulle en l'absence de champ magnétique. Une conductivité de Hall non-nulle en l'absence de champ magnétique nécessite donc de lever la symétrie par renversement du temps (1.38). On peut réaliser une telle situation pour les électrons de Dirac massifs [AC79, Jac84, Hal88] dont le Hamiltonien en présence d'un champ magnétique $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z = \nabla \times \mathbf{A}$ est

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \Delta & v_x(k_x + eA_x) - i v_y(k_y + eA_y) \\ v_x(k_x + eA_x) + i v_y(k_y + eA_y) & -\Delta \end{bmatrix}. \quad (1.40)$$

En l'absence de champ magnétique le spectre de cet Hamiltonien est $E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \left(\Delta^2 + v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2 \right)^{1/2}$, similaire à celui obtenu pour l'équation (1.30) et présente aussi des états de surface topologiques pour une inversion $\Delta \rightarrow -\Delta$ le long des x croissants et dont la dispersion est $E_{\text{surf.}} = -\text{sgn}(v_x v_y \Delta) |v_y| |k_y|$ [Cay13]. La présence d'un champ magnétique quantifie le spectre en niveaux de Landau [AC79, Jac84, Hal88]

$$E_{n \geq 1, \pm} = \pm \left(\Delta^2 + 2n |v_x v_y| \ell_B^2 \right)^{1/2}, \quad E_{n=0} = -\text{sgn}(B) \text{sgn}(v_x v_y \Delta) |\Delta|. \quad (1.41)$$

Ce spectre est schématisé sur la Figure 1.9(a) et a la particularité d'avoir un mode, le *mode zéro* ($n = 0$), dont l'énergie dépend du signe de $s = \text{sgn}(v_x v_y \Delta)$ et du signe de B . Si on place le niveau de Fermi dans le gap, comme les situations $sB > 0$ et $sB < 0$ ne diffèrent que par le peuplement d'un niveau de Landau dont la contribution à la conductivité de Hall est $\sigma_{0,xy} = e^2/h$ (1.34), on trouve

$$\sigma_{xy}(s, B) - \sigma_{xy}(s, -B) = \text{sgn}(v_x v_y \Delta B) e^2/h. \quad (1.42)$$

De plus, la symétrie $(s, B) \rightarrow (-s, -B)$ permet d'écrire une symétrie similaire à celle du renversement du temps (1.38) $[\sigma_{xy}(s) + \sigma_{xy}(-s)](B) = [\sigma_{xy}(s) + \sigma_{xy}(-s)](-B)$ qui avec l'antisymétrie (1.39) pour E_F dans une bande interdite donne

$$\sigma_{xy}(s, B) + \sigma_{xy}(-s, B) = 0. \quad (1.43)$$

On en déduit donc que pour un électron massif relativiste

$$\sigma_{xy} = \text{sgn}(B v_x v_y \Delta) e^2/2h. \quad (1.44)$$

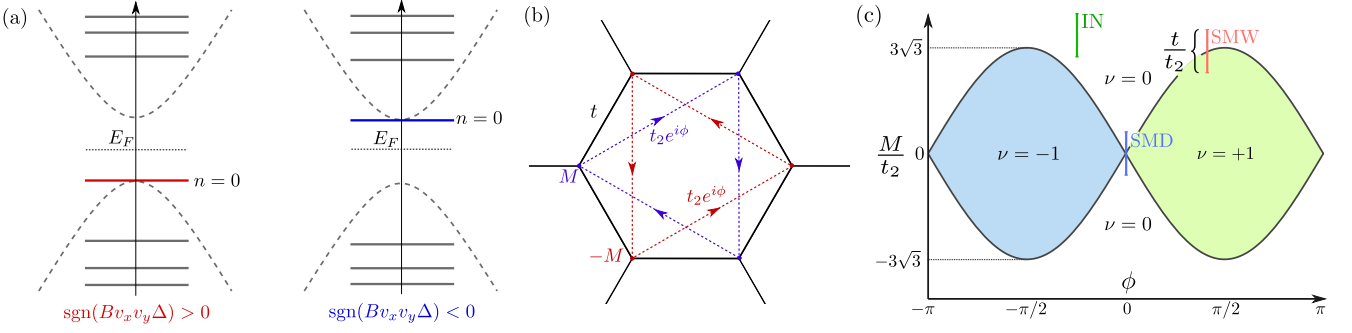


FIGURE 1.9 – Phase topologiques. (a) Niveaux de Landau d'un électron de Dirac massif en deux dimensions, pour différentes chiralités. (b) Modèle du graphène ($M = t_2 = 0$), le modèle de Haldane est obtenu pour $M, t_2 \neq 0$. (c) Phases de la conductivité de Hall anormale du modèle de Haldane. Les traits représentent l'ensemble des valeurs prises par M pour un empilement de feuillets de graphène (1.59) ; SMW/D = semi-métal de Weyl/Dirac, IN = Isolant normal.

La conductivité de Hall d'un électron de Dirac est donc non-nulle pour un champ magnétique infinitésimal, rôle qui sera tenu en pratique par la présence d'une aimantation rémanente [CZF⁺13, GFS⁺17a]. De plus, par analogie avec l'équation (1.37), on peut introduire un pseudo-nombre de Chern $\tilde{C}_1 = \text{sgn}(Bv_x v_y \Delta)/2$ et dont la dispersion des états de surface topologiques dépend. Ce pseudo-nombre de Chern \tilde{C}_1 est un demi-entier car, contrairement au nombre de Chern C_1 , les vecteurs d'ondes du modèle que l'on a décrit à l'équation (1.40) n'est pas défini sur un support compact [Koh85].

Le comportement à basse énergie des électrons du graphène est similaire à celui de l'équation de Dirac bidimensionnelle sans masse, où la vitesse de Fermi $v_F = v_x = v_y \approx c/300$. Il existe de nombreuses revues de littérature au sujet du graphène [Dut14, Cay13] dont le réseau, illustré à la Figure 1.9(b), est triangulaire bipartite. La décomposition des deux sous-réseaux A/B sur la base des ondes de Bloch, par exemple sous la forme [Dut14, BM09],

$$\Psi_A(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} c_A(\mathbf{k}), \quad \Psi_B(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} c_B(\mathbf{k}), \quad (1.45)$$

permet de diagonaliser le Hamiltonien par bloc, de sorte que $H_0 = \sum_{\mathbf{k}} c_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) H_{\alpha\beta} c_{\beta}(\mathbf{k})$. En l'absence de sauts entre seconds plus proches voisins, le bloc s'écrit $\hat{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\sigma} = h_1(\mathbf{k})\hat{\sigma}_1 + h_2(\mathbf{k})\hat{\sigma}_2$ où $\sigma_{i \in \{0,1,2,3\}}$ sont les matrices de Pauli. Le spectre correspondant est

$$E(\mathbf{k}) = \pm |\mathbf{h}(\mathbf{k})| = \pm \sqrt{h_1^2(\mathbf{k}) + h_2^2(\mathbf{k})} \quad (1.46)$$

avec une bande de valence ($-$) et une bande de conduction ($+$). Il s'avère que ces bandes se touchent, i.e. $\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \mathbf{0}$, en deux points, appelés \mathbf{K} et \mathbf{K}' , de la zone de Brillouin. Le spectre du Hamiltonien de basse énergie est $E_{\pm}(\mathbf{q}) = \pm v_F |\mathbf{q}|$ et est représenté par deux équations de Dirac sans masse

$$H_0 = v_F \sum_{\mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{q}}^{\dagger} \begin{bmatrix} 0 & q_x - iq_y & 0 & 0 \\ q_x + iq_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -q_x - iq_y \\ 0 & 0 & -q_x + iq_y & 0 \end{bmatrix} \Psi_{\mathbf{q}} \quad (1.47)$$

où $\Psi_{\mathbf{q}}^{\dagger} = [c_{A,\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{B,\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{A,-\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{B,-\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\dagger}]$. Les symétries par inversion \mathcal{I} et par renversement du temps \mathcal{T} [Cay13, Dut14] du graphène protègent ce modèle de l'ouverture d'un gap. En effet, si on développe le Hamiltonien sous la forme $\hat{H}(\mathbf{k}) = h_1(\mathbf{k})\hat{\sigma}_1 + h_2(\mathbf{k})\hat{\sigma}_2 + h_3(\mathbf{k})\hat{\sigma}_3$, elles imposent aux composantes $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ les relations suivantes

$$\begin{cases} \mathcal{I} & : (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \rightarrow (\sigma_1, -\sigma_2, -\sigma_3) \\ \mathcal{T} & : (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \rightarrow (\sigma_1, -\sigma_2, \sigma_3) \end{cases} \implies \begin{cases} h_1(\mathbf{k}) = h_1(-\mathbf{k}), \\ h_2(\mathbf{k}) = -h_2(-\mathbf{k}), \\ h_3(\mathbf{k}) = -h_3(-\mathbf{k}) = h_3(\mathbf{k}). \end{cases} \quad (1.48)$$

Une conductivité de Hall non-nulle en l'absence d'un champ magnétique, aussi appelée *conductivité de Hall anormale*, nécessite la présence d'un gap qui en présence de ces symétries est $h_3(\mathbf{k}) = 0$. La brisure de la symétrie d'inversion tout en conservant la symétrie par renversement du temps donne $h_3(\mathbf{k}) = h_3(-\mathbf{k})$ et donc un terme de masse identique en \mathbf{K} et $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$. Une façon de le réaliser est en imposant une différence de potentiel chimique M_2 entre les sites A et B du réseau, comme c'est le cas pour le nitrure de Bore hexagonal. Cependant, cette situation ne donne aucune conductivité de Hall anormale car la symétrie par renversement du temps est présente (1.38). Ce modèle sert souvent à décrire le *vide* où aucune conductivité de Hall anormale n'est présente. Une autre manière de le constater est de calculer le signe de $s = \text{sgn}(v_x v_y \Delta)$ en \mathbf{K} et \mathbf{K}' en utilisant le Hamiltonien (1.47) et sommer les deux contributions à l'effet Hall en se basant sur l'équation (1.44)

$$\sigma_{xy}^{(\text{TR})} = \{\text{sgn}[Bv_F h_3(\mathbf{K})] - \text{sgn}[Bv_F h_3(-\mathbf{K})]\} e^2 / 2h = 0 \quad (1.49)$$

et donc le facteur remplissage est comme attendu $\nu = 0$. Afin d'observer un effet Hall anormal, il est nécessaire de lever la symétrie par renversement du temps et en particulier d'avoir un signe opposé de la masse sur les deux vallées $h_3(\mathbf{K})/h_3(\mathbf{K}') < 0$. On obtient alors une conductivité de Hall anormale

$$\sigma_{xy}^{\text{H}} = \text{sgn}[Bv_F h_3(\mathbf{K})] e^2 / h \quad (1.50)$$

dont le facteur de remplissage est $\nu = \text{sgn}[v_F h_3(\mathbf{K})] = \pm 1$. Ce comportement est décrit dans le cas du graphène par Haldane [Hal88] en introduisant des termes de sauts de second plus proches voisins déphasés, $t_2 e^{\pm i\phi}$, comme par un champ magnétique, mais dont le flux magnétique par cellule unité est nul. On obtient ainsi un diagramme de phase en terme de M_2 et ϕ qui contrôlent la brisure des symétries d'inversion et par renversement du temps [voir Figure 1.9(c)]. Les phases où $\nu = \pm 1$ sont appelées *isolant de Chern*, en raison de la relation (1.37). Comme dans le cas de l'effet Hall quantique entier, la conductivité de Hall est soutenue par la présence d'états de surface que l'on peut décrire en modélisant le vide autour du graphène dans une phase $\nu = \pm 1$ par une phase $\nu = 0$. Dans ce cas, comme nous l'avons vu lors de la discussion du modèle des électrons de Dirac massifs (1.40), la dispersion des états de surface est donnée par

$$E_{\text{surf.}} = -\text{sgn}[v_F h_3(\mathbf{K})] |v_F| k_y. \quad (1.51)$$

Les modes de surface sont chiraux ou antichiraux en fonction du signe de B , comme dans le cas de l'effet Hall quantique entier. L'existence d'états de surface est bien sûr possible dans le graphène sans ouvrir de gap [DUM11].

Le modèle de Haldane montre que l'obtention d'une conductivité de Hall anormale nécessite de lever la symétrie par renversement du temps (1.38) qui, en présence du degré de liberté de spin $s_z = \uparrow \downarrow$, devient

$$(\text{symétrie par renversement du temps, spin}) : \sigma_{xy,\uparrow}(\mathbf{B}) = \sigma_{xy,\downarrow}(-\mathbf{B}). \quad (1.52)$$

Un isolant invariant par renversement du temps n'a donc aucune contribution à la conductivité de Hall. Cependant, ce n'est pas nécessairement le cas de la conductivité de Hall du courant polarisé en spin $\mathbf{j}_S = \mathbf{j}_{\uparrow} - \mathbf{j}_{\downarrow}$, ce que l'on appelle l'*effet Hall quantique de spin*. Cette effet est illustré par le modèle de Kane et Mele [KM05a] où les spins $\uparrow \downarrow$ correspondent à deux copies du modèle de Haldane avec chacun une phase ϕ opposée. Leurs facteurs de remplissage sont $\nu_{\uparrow} = -\nu_{\downarrow} = \text{sgn}[Bv_F h_{\uparrow,3}(\mathbf{K})]$ d'où une conductivité de Hall de spin $\sigma_{xy}^s = \sigma_{xy,\uparrow} - \sigma_{xy,\downarrow} = \text{sgn}[Bv_F h_{\uparrow,3}(\mathbf{K})] 2e^2 / h$, dont la mesure en transport n'est pas possible car nécessite de différencier les spins. Ce modèle est invariant par rotation du spin par \hat{S}_z qui est donc une quantité conservée. Cependant on déduit de l'équation de conservation de la densité de spin que l'effet Hall quantique de spin est accompagné d'une accumulation de spin sur deux faces opposées suivant [KM05b]

$$e \frac{d\langle \hat{S}_z \rangle}{dt} = \sigma_{xy}^s E_y. \quad (1.53)$$

Comme dans le cas de l'effet Hall quantique, cet effet est associé à la présence d'états de surface chiraux mais tel que chacun est accompagné par un état anti-chiral de spin opposé. Le transport par ces états est protégé de la

rétrodiffusion en l'absence d'impuretés qui brisent la symétrie par renversement du temps. Le travail de Kane et Mele [KM05a, KM05b] est d'autant plus fondamental qu'il montre que l'invariance par rotation du spin par \hat{S}_z n'est pas nécessaire pour l'existence de ces états de surface, qui subsistent pour toute perturbation invariante par renversement du temps, tout comme σ_{xy}^S , mais qui n'est plus nécessairement quantifié [KM05b]. Ils montrent que la symétrie par renversement du temps impose des symétries sur les fonctions d'ondes de Bloch [KM05b] et permet de classer les systèmes avec et sans effet Hall quantique de spin, on parle de classification Z_2 .

1.3.3 Les phases topologiques tridimensionnelles

Isolants topologiques. On peut chercher à généraliser l'argument de l'effet Hall anormal à trois dimensions en considérant cette fois des électrons relativistes massifs. Le raisonnement de Dirac [Dir28, Zee10] montre que ces électrons sont alors décrits par quatre équations différentielles du premier ordre couplées, similaires au modèle utilisé par Volkov et Pankratov [VP85, PPV87, LR12] et que nous avons abordé à l'équation (1.30). Le Hamiltonien après introduction d'un champ magnétique $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z = \nabla \times \mathbf{A}$ est

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} v_x(k_x + eA_x)\hat{\sigma}_x + v_y(k_y + eA_y)\hat{\sigma}_y + v_z k_z \hat{\sigma}_z & \Delta \hat{1} \\ \Delta \hat{1} & -v_x(k_x + eA_x)\hat{\sigma}_x - v_y(k_y + eA_y)\hat{\sigma}_y - v_z k_z \hat{\sigma}_z \end{bmatrix} \quad (1.54)$$

et dont on calcul le spectre suivant [Goe09]

$$E_{n \geq 0, \pm} = \pm (\Delta^2 + v_z^2 k_z^2 + 2n|v_x v_y|/\ell_B^2)^{1/2}. \quad (1.55)$$

Sa seule particularité est la dégénérescence double des niveaux $n \geq 1$ et simple du niveau $n = 0$. Par contre, contrairement à (1.41), le spectre ne change ni avec le signe de B ni avec le signe des paramètres. La conductivité de Hall anormale des états de volume pour une énergie de Fermi dans le gap est donc

$$\sigma_{xy}^{(\text{II}, \text{vol.})} = 0, \quad (1.56)$$

ce qui correspond à un facteur de remplissage $\nu = 0$. Cependant, comme nous en avons déjà discuté à la Section 1.2.2, l'inversion de bande à la surface de ces matériaux donne lieu à des états de surface topologiques. Ces derniers sont des électrons de Dirac sans masse bidimensionnels (1.31) dont la contribution à l'effet Hall est [FK07a]

$$\sigma_{xy}^{(\text{II}, \text{surf.})} = [\nu + \text{sgn}(\mu)/2] e^2/h \quad (1.57)$$

où ν est le facteur de remplissage de niveaux de Landau $n \geq 1$ et le potentiel chimique μ remplace l'échelle $v_x v_y \Delta$ dans le raisonnement de la Section 1.3.2. L'énergie de Fermi étant toujours fixée dans le gap de l'isolant de volume. La contribution totale à la conductivité de Hall pour une énergie de Fermi dans le gap de l'isolant est donc donnée par l'expression (1.69) et présente plusieurs paliers, à la manière de l'effet Hall quantique entier (1.34) mais *au sein d'une même bande interdite de volume*. De plus, dans le cadre des systèmes invariant par renversement du temps, la classification Z_2 s'étend aux isolants topologiques [FK07b]. On peut associer un indice Z_2 au modèle de basse énergie (1.30) au point Γ [ZKM12, Vol09] qui distingue deux catégories d'isolants

$$\delta = -\text{sgn}(v_x v_y v_z \Delta). \quad (1.58)$$

Semi-métaux de Weyl Une autre manière d'obtenir une phase topologique est d'utiliser le modèle de Haldane du graphène [Hal88] comme une brique de base pour construire un modèle à trois dimensions³. Si on empile des feuillets de graphène selon z et qu'on les couple par un terme de saut de plus proche voisin alterné, tel que $t_{z,AA} = -t_{z,BB}$, le Hamiltonien est inchangé sauf

$$h_3^{(3D)}(\mathbf{k}) = h_3^{(2D)}(\mathbf{k}) + 2t_z \cos(k_z a), \quad (1.59)$$

3. Cette procédure permet d'obtenir d'autres phases topologiques, telles que les semi-métaux en ligne de point nodaux, par rotation [LM17].

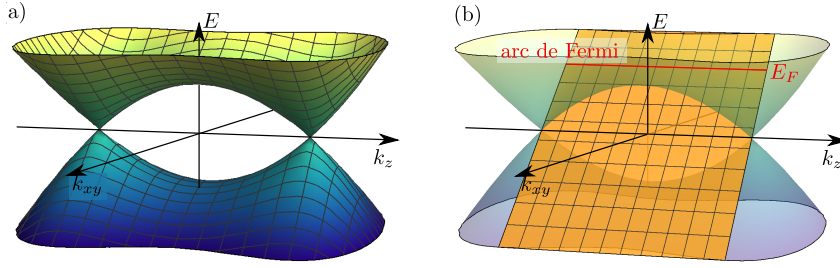


FIGURE 1.10 – Semi-métaux de Weyl. (a) Spectre des états de volume. Le Hamiltonien aux points de croisement s'apparente à celui de particules ultra-relativistes (1.60). (b) Spectre des états de surface (en orange). Ceux-ci ne sont définis que pour les impulsions qui contribuent à la conductivité de Hall anormale soit entre les deux cônes de Weyl (en transparence).

ce qui revient à réécrire $M \rightarrow M'(k_z) = M + 2t_z \cos(k_z a)$ comme une fonction de l'impulsion k_z . Si $t_z < M/t_2 \sin(\phi)$, on retrouve le comportement du modèle de Haldane. Cependant, si $t_z > M/t_2 \sin(\phi)$ alors la conductivité de Hall anormale σ_{xy} prend des valeurs non-nulles sur une gamme restreinte d'impulsions k_z . On l'illustre à la Figure 1.9(c) par un trait plein qui correspond aux différentes valeurs prises par $M(k_z)$. Le passage d'une phase à l'autre se fait en $k_z = \pm \Delta k/2$ où seul le gap en \mathbf{K} (ou \mathbf{K}') se referme et le spectre est $E_{\pm} = \pm \sqrt{v_x^2 q_x^2 + v_y^2 q_y^2 + v_z^2 q_z^2}$ [voir Figure 1.10(a)]. Le modèle de basse énergie pour les deux points de croisement est

$$H^{(\text{WSM})} = \sum_{\mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{q}}^{\dagger} \begin{bmatrix} v_z q_z & v_x q_x - i v_y q_y & 0 & 0 \\ v_x q_x + i v_y q_y & -v_z q_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -v_z q_z & v_x q_x - i v_y q_y \\ 0 & 0 & v_x q_x + i v_y q_y & v_z q_z \end{bmatrix} \Psi_{\mathbf{q}} \quad (1.60)$$

où l'on considère que le gap en \mathbf{K}' est suffisamment grand pour être négligé. Ce Hamiltonien est caractéristique des *semi-métaux de Weyl* par référence à l'équation de Weyl pour les particules ultra-relativistes à trois dimensions [Zee10]. On observe que la *parité*, $\text{sgn}(v_x v_y v_z)$, est opposée en chaque point de croisement. Un électron de Weyl en présence d'un champ magnétique uniforme $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$ montre les mêmes particularités que pour un électron massif sur un plan. Il suffit de remplacer Δ par $v_z k_z$ dans l'équation (1.41) et le spectre de niveaux de Landau est

$$E_{n \geq 1, \pm}(q_z) = \pm (v_z^2 q_z^2 + n |v_x v_y| / \ell_B^2)^{1/2}, \quad E_{n=0}(q_z) = -\text{sgn}(B) \text{sgn}(v_x v_y v_z) |v_z| q_z. \quad (1.61)$$

La conductivité de Hall est la somme des contribution de tous les k_z où $v = \pm 1$. Si on reprend les notations précédentes, on trouve ainsi

$$\sigma_{xy}^{(\text{WSM})} = \text{sgn}(v_x v_y v_z B) \Delta k e^2 / 2\pi h. \quad (1.62)$$

Cette relation nécessite plusieurs remarques. Elle est valable si l'énergie de Fermi est dans le gap, $E_F = 0$, et si on néglige les problèmes de remplissage des niveaux de Landau au niveaux des cônes car la dimension de la conductivité est modifié par la taille L_z selon z , prise comme étant grande. La conductivité de Hall anormale est accompagnée d'états de surface pour les impulsions k_z concernées. La relation de dispersion de ces états de surface topologiques est [OM14]

$$-\Delta k/2 < k_z < \Delta k/2 \quad : \quad E_{\text{surf}}^{(\text{WSM})}(k_y, k_z) = -\text{sgn}(v_x v_y v_z) |v_y| k_y. \quad (1.63)$$

La surface de Fermi au potentiel chimique μ des états de surface est décrite par un arc qui s'étend sur $k_z \in [-\Delta k/2, \Delta k/2]$ avec $k_y = -\text{sgn}(v_x v_y v_z) \mu / |v_y|$ [voir Figure 1.10(b)]. Ces états de surface topologiques sont souvent appelés *arcs de Fermi* par référence à leur surface de Fermi. L'ensemble de ces aspects montre que les semi-métaux de Weyl sont l'extension à trois-dimensions des isolants de Chern. On distingue les semi-métaux de Weyl

des *semi-métaux de Dirac* où une paire de cônes est accompagnée par son symétrique de parité opposée à k_z fixé. Par exemple, sur la Figure 1.9, pour $\phi = 0$ le changement de phase à $M = 0$ s'accompagne d'une fermeture simultanée des gaps en \mathbf{K} et \mathbf{K}' . Il n'y a pas de conductivité de Hall anormale, c'est un semi-métal de Dirac. Par analogie, les semi-métaux de Dirac s'apparentent aux isolants à effet Hall de spin où le degré de liberté de spin est ici joué par les vallées \mathbf{K} et \mathbf{K}' .

L'équation (1.61) montre que la vitesse de groupe $v_z = \partial_{q_z} E_{n,\pm}(q_z)$ de chaque niveau de Landau $n \geq 1$ se compense, par symétrie $q_z \rightarrow -q_z$, mais pas pour le niveau $n = 0$. Ainsi Vilenkin [Vil80] constate que pour un potentiel chimique μ , en prenant en compte la dégénérescence $N_B = \Phi/\Phi_0$, le courant moyen d'une particule de Weyl n'est pas nul

$$\langle j_z \rangle = \text{sgn}(v_x v_y v_z) \frac{|v_z| e^2 B}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dq_z f_D(|v_z| q_z - \mu). \quad (1.64)$$

On considère la présence d'un second électron de Weyl de chiralité opposée – comme c'est le cas pour le modèle (1.60) – mais dont le spectre est décalé en énergie et de potentiel chimique $-\mu$. Le courant moyen à température nulle pour ces deux cônes séparés en énergie de $\Delta\mu = 2\mu$ est ainsi [Vil80]

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \text{sgn}(v_x v_y v_z) \frac{|v_z| e^2}{h} \mathbf{B} \int_{-\infty}^{\infty} dq_z [f_D(|v_z| q_z - \mu) - f_D(|v_z| q_z + \mu)] = \text{sgn}(v_x v_y v_z) \frac{\Delta\mu e^2}{h} \mathbf{B}. \quad (1.65)$$

Cette relation indique qu'un courant permanent peut apparaître à l'état fondamental sous l'effet du champ magnétique, c'est l'*effet chiral magnétique*. Lors de sa dérivation, Vilenkin [Vil80] fait aussi remarquer que le raisonnement n'est valable que pour un champ magnétique statique uniforme et en injectant le courant (1.65) dans l'équation d'Ampère il observe une instabilité du champ magnétique

$$(\nabla^2 + \lambda^{-2}) \mathbf{B} = 0 \quad (1.66)$$

dont l'échelle spatiale est $\lambda = c/(2\alpha\Delta\mu)$ où α est la constante de structure fine et c la célérité de la lumière. L'effet chiral magnétique (1.65) est donc valable pour de faibles valeurs de $\Delta\mu$ où le champ magnétique est suffisamment uniforme, cependant cette équation donne à \mathbf{B} un comportement oscillatoire et le courant macroscopique peut être nul [voir Annexe A.1]. Ce calcul en incite beaucoup d'autres tels que [Eli83, FKW08, Kha14, KW09] mais les observations expérimentales manquent encore. Ce courant ne respecte pas la symétrie de jauge et certains travaux théoriques sont négatifs quant à son existence à l'équilibre [Naz86, Bui14, BPV15, Yam15, Zub16]. Par exemple, la réponse d'un courant statique uniforme à un champ magnétique tel que $\langle \mathbf{j} \rangle = \underline{\kappa} \cdot \mathbf{B}$ implique nécessairement une aimantation $\mathbf{M} = \frac{1}{2\mu_0} \int d^3\mathbf{x} [\mathbf{x} \times \mathbf{j}(\mathbf{x})]$ qui, pour un potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$ uniforme, est en moyenne [Naz86]

$$\langle \mathbf{M} \rangle = \underline{\underline{\kappa}}^T \cdot \mathbf{A} / \mu_0. \quad (1.67)$$

Ce n'est pas possible pour un système invariant de jauge tel qu'un semi-métal de Weyl mais peut l'être dans le cas d'un supraconducteur où la définition de la jauge est importante. L'argument est retranscrit en annexe A.2. Ainsi cet effet ne peut apparaître que si le système est hors équilibre ou en présence de non-uniformités du champ magnétique, ce qui n'est pas sans rappeler les fondements de la loi de Lenz⁴.

La réalisation de cet effet hors-équilibre, en générant la différence de potentiel chimique à l'aide d'un champ électrique [NN83, SS13], a été traitée par des raisonnements semi-classiques et prévoit une *magnétorésistance négative*. La conductivité correspondante a la forme [SS13]

$$\sigma_{zz} = \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar c} \frac{v_F}{c} \frac{(eB)^2 v_F^2}{\mu^2} \tau \quad (1.68)$$

où τ est le temps caractéristique des collisions. La limite semi-classique n'étant valide que si le potentiel chimique μ est assez grand (1.33).

4. Le barreau de Laplace se met en mouvement si le champ magnétique n'est pas uniforme sur le circuit ou s'il change dans le temps.

1.3.4 Observations expérimentales

Les expériences les plus fréquentes pour la caractérisation d'une phase semi-métal de Weyl ou isolant topologique sont les mesures ARPES (= *Angle Resolved Photo-Emission Spectroscopy*, en anglais) qui en général donnent des informations précieuses sur les états de surface. Les mesures de magnétorésistance sont plus difficiles à interpréter et une magnétorésistance négative n'est pas toujours indicative de la présence d'un semi-métal de Weyl. La classification suivante est souvent réalisée :

- **Isolants topologiques** : $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ [HQW⁺08], Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 [ZLQ⁺09, HXQ⁺09], ZrTe_5 [WMN⁺16, ZWY⁺17] et HgTe (sur CdTe). La structure de bande de HgTe en volume est bien connue [HKS⁺64, WD69, Sco69, GRGM73a] et est inversée [voir Figure 1.13(a)] mais présente une bande plate qui le rend métallique. Une différence de paramètres de maille entre les réseaux de HgTe et CdTe permet de décaler cette bande plate de 30 meV [BLN⁺11, DHQ⁺08] pour ouvrir un gap et observer les états de surface sans être dérangé par les états de volume⁵.
- **Semi-métaux de Weyl** : TaAs [XBA⁺15], NbAs [XAB⁺15], NbP [NGW⁺17], TaP [XWL⁺16], MoTe_2 (type II) et WTe_2 (type II). Nous discuterons de la classification des semi-métaux de Weyl en type-I et type-II au Chapitre 2.
- **Semi-métaux de Dirac** : Na_3Bi [LZZ⁺14, XKL⁺15] et Cd_3As_2 [AGJ⁺14, LJZ⁺14, NXS⁺14, BGE⁺14, LGA⁺15]. Nous verrons au Chapitre 3 que les propriétés optiques de l'arsenure de cadmium (Cd_3As_2) sont mieux décrites en terme d'un semi-métal de Kane où une bande plate est présente.

Arcs de Fermi. Nous avons mentionné la présence d'arcs de Fermi en surface des semi-métaux de Weyl. Ces derniers ont été identifiés par des mesures ARPES par de nombreux groupes expérimentaux [XAB⁺15, XWL⁺16, XBA⁺15, JXH16]. Les résultats obtenus ressemblent à ceux de la Figure 1.11 et montrent de multiples arcs de Fermi courbés, ce qui est attribué à la présence de multiples paires de fermions de Weyl de même chiralité (à ne pas confondre avec un semi-métal de Dirac). Les descriptions théoriques des états de surface topologiques décrivent plutôt un arc droit [OM14] tel que décrit à l'équation (1.63), mais nous verrons une explication à cette courbure au Chapitre 4.

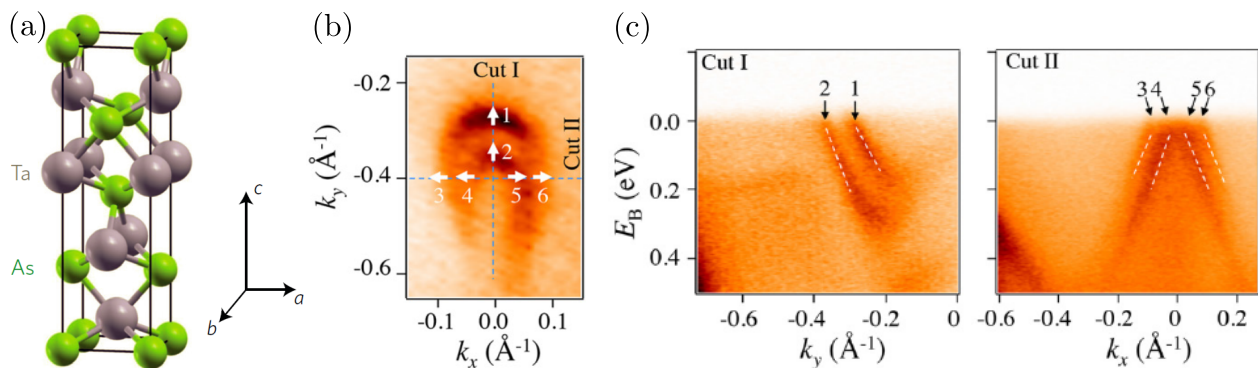


FIGURE 1.11 – Spectroscopie ARPES des états de surface du semi-métal de Weyl TaAs, figures tirées de [XBA⁺15]. (a) Structure cristalline commune aux composés de la famille (Ta,Nb)(As,P). (b) La surface de Fermi des états de surface montre deux arcs de Fermi qui disperse parallèlement tel qu'illustré par les flèches blanches. (c) Spectre des arcs de Fermi dans les directions k_x et k_y , les numéros 1-6 font référence aux points de la figure (b).

États massifs d'un isolant topologique. Pour Bi_2Se_3 , l'état de surface topologique a été observé en spectroscopie ARPES [BGB⁺10, BHM⁺11, BKdlT⁺12] mais est accompagné par des états liés des bandes de conduction et de valence, illustrés la Figure 1.12. Ces travaux associent ces états de surface supplémentaires à un effet de puits

5. En utilisant ce même principe, il a été prédit que le décalage de cette bande dans l'autre sens donne lieu à un semi-métal de Weyl mais il n'y a encore aucune observation expérimentale [RJY⁺16].

quantique suffisamment profond pour quantifier simultanément le bas (ou le haut) des bandes de conduction et de valence. Les travaux sur la chaîne de polyacétylène [SSH79, SSH80, TLLM80] et sur les hétérojonctions

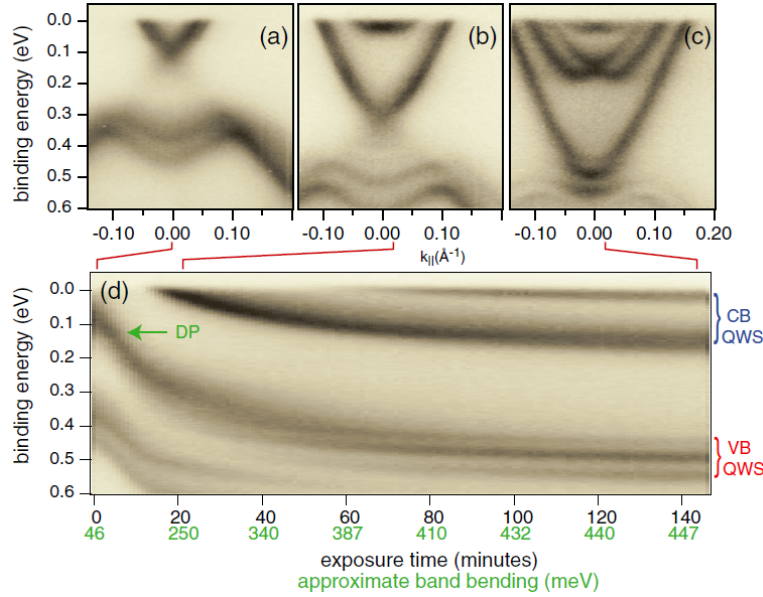


FIGURE 1.12 – Spectroscopie ARPES des états de surface de l'isolant topologique Bi_2Se_3 au cours de son oxydation par du monoxyde de carbone. Figures tirées de [BHM⁺11]. (a-c) Spectre des états de surface à différents instants de l'oxydation. (d) Évolution des énergies au point Γ au cours du temps et potentiel de surface estimé (en vert). Les états de la bande de conduction (CB), de la bande de valence (VB) et l'état de surface topologique en cône de Dirac (DP), sont indiqués. La séparation des bandes de conduction semble due à un couplage Rashba [BKdIT⁺12].

HgTe/CdTe [VP85, PPV87, LR12] mentionnent aussi la possibilité d'états de surface massifs. Ces états ne sont généralement pas étudiés car on admet que l'interface est suffisamment abrupte pour les négliger, à l'instar de [SSH79, SSH80]. Cependant, ces états massifs peuvent être observés sous l'effet d'un champ électrique à la manière du modèle de Tamm [voir Section 1.1.3]. Nous aborderons cette question au Chapitre 4.

Propriétés d'écrantage des états de surface.

L'analyse qui suit est inspirée par la thèse de A. Inhofer [Inh17] avec qui nous avons travaillé sur les propriétés de transport de HgTe (sur CdTe) en utilisant comme hypothèse de travail un fort écrantage du potentiel de grille par les états de surface.

Nous l'avons vu à la Section 1.1.4, les états de surfaces peuvent contribuer à l'écrantage du champ électrique. Dans le cas des isolants topologiques, cela se manifeste par l'apparition d'une asymétrie de la contribution à la conductivité de Hall de la face supérieure et inférieure de HgTe (sur CdTe) [BLN⁺11]. En effet, comme chaque état de surface contribue à la conductivité de Hall selon la relation 1.57, la conductivité de Hall totale est

$$\sigma_{xy}^{(\text{TI})} = [v_{\text{sup.}} + v_{\text{inf.}} + \text{sgn}(\mu)] e^2 / h. \quad (1.69)$$

où $v_{\text{sup./inf.}}$ est le facteur de remplissage des états de surface sur la partie supérieure/inférieure. Les deux états étant symétriques, on s'attend à ce que $v_{\text{sup.}} = v_{\text{inf.}}$ et le facteur de remplissage total $v_{\text{tot}} = v_{\text{sup.}} + v_{\text{inf.}} + \text{sgn}(\mu)$ est impaire. La figure 1.13(b) montre que c'est bien ce qui se produit à faible champ mais ce n'est plus le cas à fort champ, où v_{tot} devient pair. La seule raison constatée est un changement de l'environnement électrostatique en chaque surface. Cette même expérience a été réalisée en présence d'un potentiel de grille sur l'une des surfaces [BTS⁺14] et indique l'absence de contribution des états de volume. L'explication fournie attribue de fortes propriétés d'écrantage aux états de surface mais est vague et en désaccord avec un autre travail [BBB⁺14].

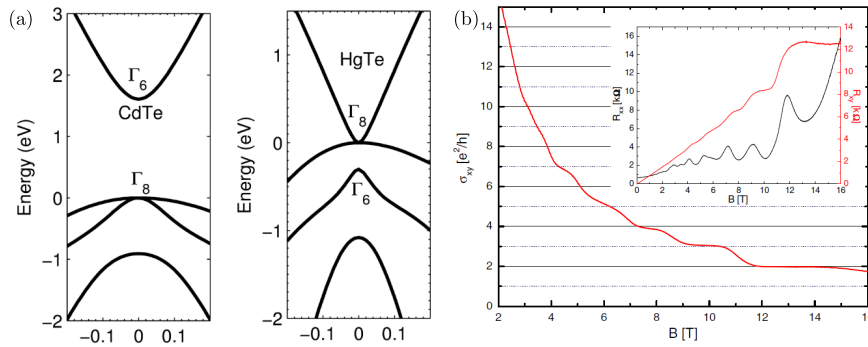


FIGURE 1.13 – (a) Structure de bande de CdTe et HgTe, tiré de [SKT⁺13]. Les bandes Γ_6 et Γ_8 ont la symétrie d'orbitales s et p : HgTe a donc une structure de bande inversée mais son comportement est métallique par la présence de la bande plate. (b) Conductivité de Hall de HgTe (sur CdTe), tiré de [BLN⁺11]. Le passage de paliers où le facteur de remplissage (1.34) est $\nu = 9, 7, 5$ à $\nu = 4, 3, 2$ indique une brisure de la symétrie entre les états de surface sur chaque face du matériau.

Magnétorésistance. L'interprétation de la magnétorésistance n'est pas sujette à consensus. Un exemple caractéristique est la magnétorésistance négative de $ZrTe_5$ [LKZ⁺16]. Le profil de la magnétorésistance est similaire à celui d'autres semi-métaux de Weyl, avec une montée de la résistance à petit champ magnétique et, au delà, le comportement décrit par l'équation (1.68). Cependant, une caractérisation plus approfondie montre que ce matériau est en fait un isolant topologique dont le gap est de l'ordre de $2\Delta = 100\text{meV}$ [WMN⁺16, ZWY⁺17] et pose donc la question de l'origine de cette magnétorésistance.

Chapitre 2

Modèles de basse énergie, covariance et niveaux de Landau

Au chapitre précédent nous avons abordé les matériaux topologiques en étudiant leur relation à l'effet Hall et aux états de surfaces. Nous avons peu insisté sur leur structure de bande qui rappelle celle rencontrée en mécanique quantique relativiste [Zee10], ce qui sera le sujet de ce chapitre. Je vais insister en particulier sur les structures de bandes sans gap rencontrées pour décrire les semi-métaux de Weyl et de Dirac (Section 2.1). Comme nous l'avons mentionné au Chapitre 1, ces modèles sont caractérisés par une chiralité dont nous allons discuter l'origine topologique et sa conservation lors de l'étude d'un modèle de fusion de cônes de chiralités opposées. Il s'avère que ces descriptions sont très proches d'une situation réaliste décrite par un modèle $k \cdot P$ adapté à Cd_3As_2 et qui nous sera utile pour expliquer les mesures de spectroscopie de ce semi-métal de Dirac au Chapitre 3. Nous aborderons les outils mathématiques nous permettant d'interpréter certains comportements des matériaux topologiques avec un vocabulaire qui rappelle celui de la relativité restreinte : covariance, boost de Lorentz, etc.. et qui a été au cœur de cette thèse [TCG16, TCG17] (Section 2.2). Ces outils nous seront utiles aux Chapitres 3 et 4. Cela nous permettra en particulier de discuter de manière approfondie les niveaux de Landau en présence et en l'absence d'un champ électrique transverse au champ magnétique, pour l'équation de Schrödinger non-relativiste et pour l'équation de Weyl (Section 2.3). La sensibilité des niveaux de Landau de l'équation de Weyl au champ électrique est notable, tout comme la stabilité du mode $n = 0$ vis-à-vis des fluctuations spatiales de champ magnétique. Ceci rappelle le comportement des états de surface topologiques discutés à la section 1.2.2 et que nous approfondirons au Chapitre 4.

2.1 Modèles de basse énergie

Un semi-métal de Weyl est un semi-conducteur à gap nul où la dispersion des quasi-particules autour d'un point de la zone de Brillouin, que l'on note \mathbf{K} , est linéaire avec l'impulsion dans chaque direction. La proximité des deux bandes permet de ramener l'étude du système à ces dernières, sur lesquelles agissent les matrices de Pauli $\hat{\sigma}_i$ ($i = 1, 2, 3$) [voir Annexe B.1]. Le modèle minimal pour ces quasi-particules est le suivant

$$\hat{H}(\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{K}) = \omega_0 \cdot \mathbf{q} \hat{1} + \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^d v_{ij} q_i \hat{\sigma}_j. \quad (2.1)$$

où d est la dimension d'espace. Ce modèle illustre le comportement à basse énergie du graphène aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}' pour $d = 2$ et décrit par l'équation (1.47). Dans ce chapitre, nous étudierons les modèles où $d = 3$ que l'on a déjà introduit à l'équation (1.60). Le spectre en énergie des états propres de (2.1) est $E_{\mathbf{q},\lambda} = \omega_0 \cdot \mathbf{q} + \lambda \sqrt{\sum_j (v_{ij} q_i)^2}$ avec $\lambda = \pm$ et s'obtient à l'aide des propriétés de commutation des matrices de Pauli [voir Annexe B.4]. Pour un semi-métal de Weyl, la dispersion étant linéaire dans chaque direction, nous pouvons redéfinir les vecteurs

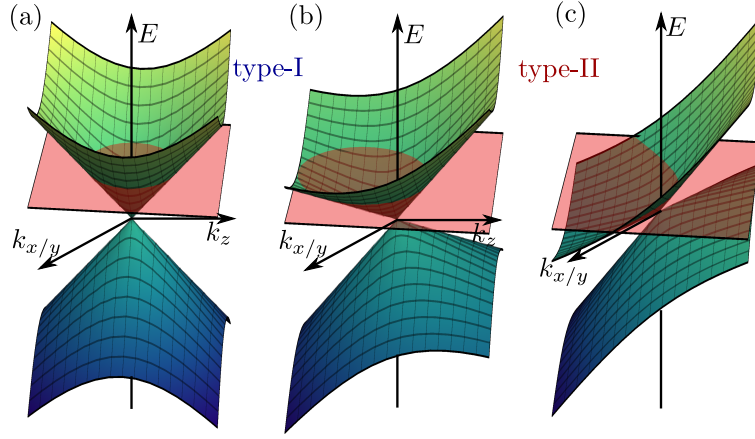


FIGURE 2.1 – Relation de dispersion des fermions de Weyl pour différentes inclinaison selon l’axe z (a) $t_z = 0$, (b) $t_z = 0.5$ et (c) $t_z = 1.5$. Le plan rouge est à énergie constante, il capture le comportement de la surface de Fermi qui croit avec l’énergie et l’inclinaison. Sous l’effet de l’inclinaison, la surface de Fermi est décalée le long de l’axe z pour différentes énergies.

d’ondes de telle sorte que le Hamiltonien générique s’écrit [voir Annexe B.2]

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \sum_{i=1}^3 v_i q_i (t_i \hat{\mathbb{1}} + \hat{\sigma}_i), \quad (2.2)$$

où, à moins que v_{ij} soit symétrique, les trois directions ne sont pas nécessairement orthogonales. C’est ce modèle auquel nous nous référerons par la suite en terme d’équation de Weyl ou de cône de Weyl, par abus de langage. Les vitesses de Fermi sont $v_i = \chi \sqrt{\sum_{j=1}^3 v_{ji}^2}$ où χ est la *chiralité du cône de Weyl* qui s’écrit $\chi \equiv \text{sgn}(v_x v_y v_z) = \text{sgn}[\det(\underline{v})]$. Le spectre s’écrit ainsi

$$E_\lambda(\mathbf{q}) = \left(\sum_i v_i t_i q_i + \lambda \sqrt{\sum_i (v_i q_i)^2} \right). \quad (2.3)$$

Le terme sous la racine donne au spectre une forme conique et le vecteur $\mathbf{t} = (t_1, t_2, t_3)$ décrit l’inclinaison des cônes. L’orientation de \mathbf{t} est celle de l’inclinaison de la structure de bande conique et son amplitude en donne l’importance. Différentes situations sont illustrées à la Figure 2.1 : (a) Si l’inclinaison est négligeable, $\|\mathbf{t}\| \equiv t \ll 1$, alors le spectre est composé de deux cônes diamétralement opposés. La densité d’états à l’énergie E est alors $g(E) = E^2 / (2\pi^2 |v_x v_y v_z|)$ [voir Annexe B.3]. (b) Pour une inclinaison suffisamment faible, $\|\mathbf{t}\| < 1$, la densité d’état reste finie $g(E, t) = E^2 / \left[2\pi^2 (1 - t^2)^2 |v_x v_y v_z| \right]$ [voir Annexe B.3] et on a un *semi-métal de type-I*. (c) Pour une inclinaison importante, $\|\mathbf{t}\| \geq 1$, les deux cônes qui constituent le spectre traversent l’énergie de Fermi [voir Figure 2.1(c)] : les lignes iso-énergies sont des paraboles ouvertes, ce qui indique que le modèle de départ n’est pas complet. La densité d’états est large et il est en principe nécessaire de décrire la structure de bande bien au delà du point nodal. Cependant pour certaines directions du champ magnétique cette description suffit et sera discutée à la Section 2.3. On a un *semi-métal de type-II* [SGW⁺15]. On parle parfois de semi-métaux de type-1.5 lorsqu’il y a simultanément la présence de cônes de type-I et type-II [KHLK17].

2.1.1 Dédoublément des fermions de Weyl

À la section 1.3.3 nous avons fait remarquer, dans le cas de l’empilement de feuillets de graphène, qu’à un cône de Weyl de chiralité χ correspond un autre cône de chiralité opposée, $-\chi$. Pour les particules ultrarelativistes, la chiralité est une quantité physique qui définit les saveurs L et R conservées par l’interaction faible. Cependant, il a été observé que toute tentative *raisonnable* de modéliser un lepton ultrarelativiste de chiralité donnée sur

un réseau est vouée à l'échec : les deux types de chiralités apparaissent toujours en même temps. Ce théorème de no-go a été décrit par Nielsen et Ninomyia [NN81c, NN81a, NN81b], dont je reproduis l'argument ci-dessous et qui repose sur les hypothèses suivantes :

(i) **Continuité.** Le Hamiltonien dans l'espace réel

$$\hat{H} = \int d\mathbf{x}^d d\mathbf{x}'^d \Psi^\dagger(\mathbf{x}') H(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}), \quad (2.4)$$

est tel que $H(\mathbf{x}, \mathbf{x}' \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ tend vers zéro suffisamment vite pour que sa transformée de Fourier, et donc le spectre et les fonctions d'ondes, soit continue. Typiquement, cela correspond à une convergence plus rapide que $1/r^d$, on dit alors que l'opérateur est *local*. Par exemple, on n'obtient pas le dédoublement de fermions dans le cas de la dérivée SLAC où $H(x)$ est non local. Le spectre est alors fortement discontinu en bords de bande [QW86, Cos02a, Cos02b]. Le nom de "dérivée SLAC" a été donné en l'honneur du *Stanford Linear Accelerator Center* où H.R. Quinn et M. Weinstein travaillaient au moment de leur découverte.

(ii) **Périodicité.** On considère un Hamiltonien périodique dans l'espace réel, $H(\mathbf{x} + \mathbf{R}, \mathbf{x}' + \mathbf{R}) = H(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, et on définit une zone de Brillouin sur laquelle on peut construire des solutions propres périodiques [voir Section 1.1.1].

(iii) **Spectres réels.** Les vecteurs d'ondes et l'énergie sont réels, dit autrement le Hamiltonien et l'impulsion sont des opérateurs hermitiens.

(iv) **Dimensions spatiales et de l'espace de Hilbert.** L'argument est valable en une dimension dans le cas où l'on peut négliger le croisement de bandes : la position relative de deux bandes étant décrite par trois variables et le vecteur d'onde étant décrit par une seule composante, le croisement de bande est en général une conséquence de la présence de symétries et n'est pas associé à la topologie. Par exemple, dans le cas du graphène, le vecteur d'onde a deux composantes et le croisement de bandes est permis par les symétries par inversion et par renversement du temps [Fuc13, Hat11] plutôt que par la topologie de la zone de Brillouin. On observe d'ailleurs qu'en l'absence de ces symétries, un cône de Dirac unique peut exister [Hal88].

Dans le cas d'un système en trois dimensions d'espace, le croisement de deux bandes est possible et on admet que l'on peut se concentrer sur ces deux bandes seulement. La présence d'une troisième bande est négligée et peut contredire l'argument [DFM86], ce qui est réalisé dans le cas de $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ et nos travaux sur Cd_3As_2 semblent aussi aller dans ce sens [voir Chapitre 3].

Cas unidimensionnel, une mise en jambe. Comme nous l'avons déjà mentionné, nous considérons qu'il n'y a pas de croisement de bandes et nous nous concentrons sur le spectre proche de l'énergie de Fermi. En chaque point de contact K_i avec la mer de Fermi nous avons

$$E(q = k - K_i) \approx \partial_k E|_{K_i} q \quad (2.5)$$

et nous notons $\chi = \text{sgn}(\partial_k E|_K)$ la chiralité d'un système unidimensionnel. Le spectre étant périodique, la courbe décrite par $[k, E(k)]$ est fermée et équivalente à un cercle. Si la courbe passe par l'un des points de contact K_i dans un sens (de chiralité χ) par continuité elle doit repasser par un autre point K_i dans l'autre sens (de chiralité $-\chi$) : lors du parcours, il y a autant d'états de chiralité $\chi = +$ que $\chi = -$ [voir Figure 2.2(a)]. Ce raisonnement, comme le suivant, fait référence au groupe d'homotopie qui sert à caractériser les courbes continues. Ce résultat s'applique à la dispersion des bandes de Landau dans la direction du champ magnétique.

Cas tridimensionnel. A proximité du croisement de deux bandes, le Hamiltonien linéarisé a la forme de l'équation (2.1) que l'on peut toujours¹ réécrire sous la forme (2.2) et dont le spectre, exprimé à l'équation (2.3), est indépendant de la chiralité $\chi = \text{sgn}[\det(\underline{v})]$. Cependant les solutions propres dépendent de χ mais sont

1. Le cas où $\det(\underline{v}) = 0$ est une situation critique que l'on ne décrit pas ici et apparaît lors de la fusion de cônes de chiralités opposées.

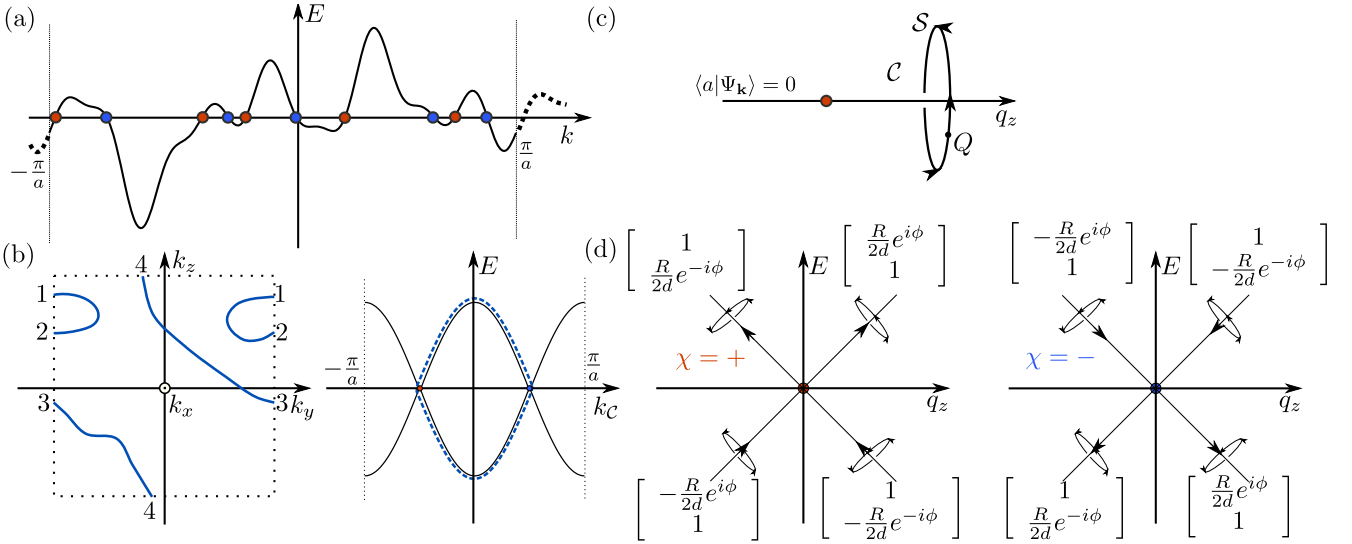


FIGURE 2.2 – Théorème de Nielsen-Ninomyia. (a) Structure de bande unidimensionnelle, chaque chiralité est représentée par un point rouge ou bleu. Dans le cas tridimensionnel, on illustre en (b) les trajectoires le long des solutions propres telles que $\langle a|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = 0$, ces dernières passent par tous les cônes de Weyl. On représente en (c) une portion de la trajectoire \mathcal{C} dont l'orientation est définie par la circulation de la phase de $\langle a|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ le long de \mathcal{S} et que l'on calcule en chaque point $Q \in \mathcal{S}$. (d) Les trajectoires pour les cônes de chiralité $\chi = +$ sont toujours montantes alors que pour la chiralité $\chi = -$ elles sont toujours descendantes.

indépendantes de \mathbf{t} et sont dérivées à l'annexe B.4. On définit un chemin unidimensionnel dans l'espace des vecteurs d'ondes et de l'énergie par

$$\mathcal{C} = \{(\mathbf{k}, E) | E = E_n(\mathbf{k}) \text{ et } \langle a|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = 0, n \in [1, N]\} \quad (2.6)$$

où $|a\rangle$ est un vecteur complexe constant tel que $\langle a|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle \equiv \sum_{i=1}^N a_i \Psi_{n\mathbf{k}}^{(i)}$ et $\Psi_{n\mathbf{k}}^{(i)}$ est la i -ème composante du N -spineur propre $\Psi_{n\mathbf{k}}$ associé à la bande n . La trajectoire \mathcal{C} est continue et unidimensionnelle car elle est décrite par quatre coordonnées avec trois contraintes : la contrainte $E = E_n(\mathbf{k})$ et deux contraintes liées à la partie imaginaire et réelle de $\langle a|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = 0$, toutes continues par hypothèse. Ces trajectoires passent toujours par les cônes de Weyl. En effet, au niveau d'un point de croisement, les solutions $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont dégénérées et l'état propre le plus général a la forme $\Psi_{\text{deg.}} = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$. Il est toujours possible de choisir α et β de telle sorte que $\langle a|\Psi_{\text{deg.}}\rangle = 0$. De plus, la périodicité de la zone de Brillouin permet de dire que cette courbe – qui passe par tous les points de croisements – est fermée (ou est un ensemble fini de courbes fermées) et donc chaque boucle passe autant de fois de la bande $\lambda = +$ à $\lambda = -$ et inversement [voir Figure 2.2(b)].

Il ne nous reste plus qu'à définir l'orientation de \mathcal{C} . La condition de normalisation $\langle \Psi_{n\mathbf{k}}|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle = 1$ définit les solutions à une phase globale près que l'on fixe afin que les états propres aient une expression analytique, en dehors des points de croisement. On choisit l'orientation de \mathcal{C} telle que l'accumulation de phase de $\langle a|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ est positive lorsque \mathbf{k} décrit un cercle dans le sens trigonométrique autour de \mathcal{C} [voir Figure 2.2(c)]. Par exemple, si on oriente l'axe z le long de \mathcal{C} , les solutions le long de \mathcal{C} pour la bande λ sont $^2 \Psi_{\mathbf{k}}^{\mathcal{C}} = |\text{sgn}(\lambda v_z q_z)\rangle$ de sorte que $|a\rangle = |-\text{sgn}(\lambda v_z q_z)\rangle$. Pour calculer l'accumulation de phase de $\langle a|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$, on définit les points Q du cercle \mathcal{S} de rayon R situé à une distance d du point de croisement dessiné à la Figure 2.2(c) par

$$q_x = R \cos(\phi), \quad q_y = R \sin(\phi), \quad q_z = d. \quad (2.7)$$

À la limite où $R/d \ll 1$, la solution propre y est telle que

$$|\Psi_{\mathbf{k}}^{\mathcal{S}}\rangle \approx |-\text{sgn}(\lambda v_z q_z)\rangle + \lambda \frac{R}{2d} e^{i \text{sgn}(v_x v_y v_z) \text{sgn}(\lambda q_z) \phi} |\text{sgn}(\lambda v_z q_z)\rangle \implies \langle a|\Psi_{\mathbf{k}}^{\mathcal{S}}\rangle = \lambda \frac{R}{2d} e^{i \text{sgn}(v_x v_y v_z) \text{sgn}(\lambda q_z) \phi}. \quad (2.8)$$

2. Ces solutions sont le long des pôles Nord et Sud où on prend la convention $\phi = 0$.

L'orientation de \mathcal{C} est donc donnée par le signe de $\text{sgn}(v_x v_y v_z) \text{sgn}(\lambda q_z)$. Par exemple, pour un cône de chiralité $\chi \equiv \text{sgn}(v_x v_y v_z) = +$, pour la bande $\lambda = +$ et $q_z > 0$, la courbe \mathcal{C} est orientée vers les k_z croissants. Ce résultat est reproduit à la Figure 2.2(d) pour les deux chiralités $\chi = \pm$, chaque bande $\lambda = \pm$ et chaque signe de q_z . On observe ainsi que la trajectoire va toujours de $\lambda = -$ à $+$ (respectivement $\lambda = +$ à $-$) pour un cône de chiralité $\chi = +$ (respectivement $\chi = -$) et comme par périodicité \mathcal{C} passe autant de fois dans chaque sens, on en déduit qu'il y a nécessairement autant de cônes de chaque chiralité.

2.1.2 Symétries cristallines

Nous avons vu au chapitre 1.3.2 que les points de dégénérescence du graphène sont permis par la présence simultanée des symétries par inversion \mathcal{P} et par renversement du temps \mathcal{T} dont on rappelle l'action pour une décomposition du Hamiltonien de la forme $\hat{H} = h_0(\mathbf{k})\hat{\mathbb{1}} + \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{P} : (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \rightarrow (\sigma_1, -\sigma_2, -\sigma_3) \\ \mathcal{T} : (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \rightarrow (\sigma_1, -\sigma_2, \sigma_3) \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} h_1(\mathbf{k}) = h_1(-\mathbf{k}), \\ h_2(\mathbf{k}) = -h_2(-\mathbf{k}), \\ h_3(\mathbf{k}) = -h_3(-\mathbf{k}) = h_3(\mathbf{k}). \end{array} \right. \quad (2.9)$$

La composante $h_3(\mathbf{k})$ est alors toujours nulle, ce qui n'est pas recherché pour un cône de Weyl tridimensionnel car cela implique $\det(v_{ij}) = 0$ pour le développement à l'équation (2.1). Il est donc nécessaire de briser l'une des deux symétries, par inversion ou par renversement du temps. On a ainsi deux classes de semi-métaux de Weyl

- (i) *Les semi-métaux de Weyl invariants par inversion.* Dans ce cas on admet que la symétrie par renversement du temps est levée mais que la symétrie par inversion est toujours présente. Alors, si en un point \mathbf{K} de la zone de Brillouin il y a un cône de Dirac de chiralité $\chi = \text{sgn}[\det(\partial_i h_j(\mathbf{K}))]$ alors au point $-\mathbf{K}$ il se trouve un autre cône, de chiralité $\chi' = -\text{sgn}[\det(\partial_{k_i} h_j(-\mathbf{K}))] = -\chi$ où un signe $-$ apparaît car l'opérateur dérivée est impair. Un tel semi-métal de Weyl permet en principe de réaliser un modèle minimal à seulement deux cônes de chiralités opposées.
- (ii) *Les semi-métaux de Weyl invariants par renversement du temps.* Dans ce cas, on considère que la symétrie par inversion est levée mais que la symétrie par renversement du temps est conservée. Alors, si en un point \mathbf{K} de la zone de Brillouin se trouve un cône de Dirac de chiralité $\chi = \text{sgn}[\det(\partial_i h_j(\mathbf{K}))]$, on retrouve au point $-\mathbf{K}$ un autre cône de chiralité $\chi' = -\text{sgn}[\det(\partial_{k_i} h_j(-\mathbf{K}))] = \chi$ identique. Ces deux cônes ont la même chiralité et doivent donc être accompagnés d'au moins deux autres cônes de chiralité opposée à cause du théorème de Nielsen-Ninomyia discuté à la section 2.1.1 : un tel modèle nécessite au moins quatre cônes de Weyl. Ce cas s'apparente au semi-métal de Dirac abordé au Chapitre 1.3.3.

Cet argument n'est valable qu'en l'absence du degré de liberté de spin, si ce dernier est pris en compte alors la structure de bande peut contenir des cônes de Weyl même en présence des symétries \mathcal{P} et \mathcal{T} . En effet, la symétrie par renversement du temps \mathcal{T} relie les Hamiltoniens H_\uparrow et H_\downarrow de chaque famille de spin. De son côté, la symétrie par inversion \mathcal{P} contraint la structure de bande pour une polarisation de spin donnée, par exemple H_\uparrow , qui peut être vu comme un semi-métal de Weyl invariant par inversion accompagné de son partenaire de spin opposé H_\downarrow de même chiralité. Une telle structure de bande est celle d'un semi-métal de Dirac, auquel on reviendra quand nous discuterons la structure de bande de l'arsenure de cadmium au Chapitre 3.

Par la suite nous considérerons le modèle minimal d'un semi-métal de Weyl invariant par inversion. Au Chapitre 4 nous allons décrire leurs états de surface lorsqu'ils sont en contact avec un isolant, ce qui nécessite de savoir connecter les deux modèles entre eux : comme les cônes de Weyl disparaissent en même temps, cela nécessite de pouvoir décrire leur fusion [MPFG09, dGFG⁺12].

2.1.3 Fusion

Nous considérons deux cônes de Weyl de chiralités opposées, situés en $(k_x, k_y, k_z) = (\pm\Delta k_0/2, 0, 0)$, symétriques par inversion et dont le modèle de basse énergie est ramené à un modèle à quatre bandes

$$\hat{H}_f = \left(\begin{array}{cc} v_F \mathbf{q} \cdot (\mathbf{t}\mathbb{1} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}) + \Delta k_0/2 \hat{\sigma}_x & \hat{V} \\ \hat{V}^\dagger & -v_F \mathbf{q} \cdot (\mathbf{t}\mathbb{1} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}) + \Delta k_0/2 \hat{\sigma}_x \end{array} \right), \quad (2.10)$$

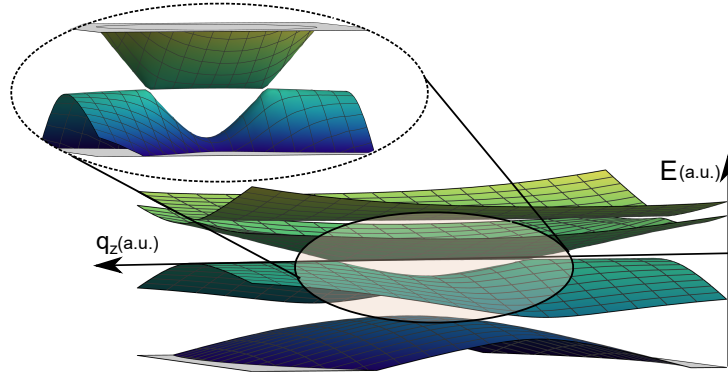


FIGURE 2.3 – Structure de bande de basse énergie d'un semi-métal de Weyl invariant par inversion avec deux cônes de chiralités opposées. La figure encadrée représente le modèle basse énergie à deux bandes.

tel que pour des cônes suffisamment séparés, la matrice de couplage est $\hat{V} = 0$. Le spectre est alors la superposition de celui de deux cônes de Weyl, séparés de Δk le long de k_x . Ce spectre est invariant par rotation d'axe x et les cônes de Weyl étant le long de cet axe, la perturbation \hat{V} n'ouvre pas spontanément de gap si elle conserve la symétrie par rotation. Le générateur de la symétrie par rotation [voir Section 2.2.1] est $\hat{\sigma}_x \otimes \hat{1}$, la perturbation qui préserve les cônes de Weyl vérifie donc

$$\left[\begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \hat{V} \\ \hat{V}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \right] = 0 \implies [\hat{\sigma}_x, \hat{V}] = 0 \implies \hat{V} = \kappa \hat{1} + \omega \hat{\sigma}_x, \quad (2.11)$$

pour la suite on considère la situation simplifiée $\omega = 0$. Le but est maintenant de réduire le modèle à quatre bandes en présence de cette perturbation à un modèle à deux bandes. Comme la fusion des cônes de Weyl se fait en $\mathbf{k} = 0$, il est intéressant de réécrire le modèle sur la base des états propres en $\mathbf{k} = 0$ notés $(\Psi_{++}, \Psi_{+-}, \Psi_{-+}, \Psi_{--})$. Dans cette base le Hamiltonien s'écrit $\hat{H}'_f = \hat{U} \hat{H}_f \hat{U}^\dagger$

$$\hat{H}'_f = \begin{pmatrix} -\left(\kappa + \frac{v_F \Delta k_0}{2}\right) & v_F(k_x - \mathbf{t} \cdot \mathbf{k}) & 0 & v_F(k_z - i k_y) \\ v_F(k_x - \mathbf{t} \cdot \mathbf{k}) & \left(\kappa - \frac{v_F \Delta k_0}{2}\right) & v_F(k_z - i k_y) & 0 \\ 0 & v_F(k_z + i k_y) & -\left(\kappa - \frac{v_F \Delta k_0}{2}\right) & -v_F(k_x + \mathbf{t} \cdot \mathbf{k}) \\ v_F(k_z + i k_y) & 0 & -v_F(k_x + \mathbf{t} \cdot \mathbf{k}) & \left(\kappa + \frac{v_F \Delta k_0}{2}\right) \end{pmatrix} \text{ avec } \hat{U} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

À la limite où $|\kappa + v_F \Delta k_0 / 2| \gg |\kappa - v_F \Delta k_0 / 2|$, le poids sur les états $\Psi_{\pm\pm}$ est négligeable pour les énergies propres proches de $|E| = |\kappa - v_F \Delta k_0 / 2|$. Le Hamiltonien peut être réduit sur la base de (Ψ_{+-}, Ψ_{-+})

$$\hat{H}'_f \begin{pmatrix} \Psi_{++} \\ \Psi_{+-} \\ \Psi_{-+} \\ \Psi_{--} \end{pmatrix} \approx E \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_{+-} \\ \Psi_{-+} \\ 0 \end{pmatrix} \implies \hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \Psi_{+-} \\ \Psi_{-+} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_{+-} \\ \Psi_{-+} \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

où \hat{H}_{eff} est le développement à l'ordre le plus bas en k_x, k_y et k_z dont on calcule l'expression suivante

$$\hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \frac{t_x(\Delta k/2)^2 - k_x \mathbf{t} \cdot \mathbf{k}}{2m_0} + \begin{pmatrix} \frac{k_x^2 - (\Delta k/2)^2}{2m_1} & v_F(k_z - i k_y) \\ v_F(k_z + i k_y) & -\frac{k_x^2 - (\Delta k/2)^2}{2m_1} \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Les paramètres sont $m_0 = (\kappa + v_F \Delta k_0 / 2) / 4v_F^2$, $m_1 = 2m_0 / (1 + t_x^2)$ et $\Delta k = \Delta k_0 \sqrt{1 - (2\kappa / v_F \Delta k_0)^2} / \sqrt{1 + t_x^2}$. On a décalé le spectre de $\Delta E = t_x \Delta k^2 / 8m_0$ afin que les cônes soient bien centrés en $E = 0$ et ce résultat n'est valable

que pour une faible inclinaison t_x . Par la suite on adapte nos notations et on permute les composantes $k_x \rightarrow k_z$ de sorte que le Hamiltonien effectif est

$$\hat{H}_{eff} = t_z \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) + \frac{v_F k_z}{\Delta k} (t_x k_x + t_y k_y) \quad (2.15)$$

$$+ \begin{pmatrix} \frac{k_z^2}{2m} - \Delta & v_F(k_x - i k_y) \\ v_F(k_x + i k_y) & -\left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta\right) \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

où $\Delta k = \sqrt{2m\Delta}$. Ce modèle de fusion est pratique pour décrire de nombreux aspects qualitatifs des semi-métaux de Weyl, cependant pour des situations concrètes il est nécessaire de composer avec un développement $k \cdot P$.

2.1.4 Modèle de Kane et Bodnar

Le modèle qui suit a été initialement proposé par Kildal [Kil74] afin de décrire les mesures optiques de CdGeAs₂. Il consiste en un modèle de Kane à quatre orbitales à symétrie cubique en présence de l'interaction spin-orbite et d'une déformation tétragonale du réseau. Ce modèle a été réutilisé par Bodnar [Bod77] afin de décrire les oscillations de Shubnikov-de Haas de Cd₃As₂. Comme dans [Kil74], on utilise la base des fonctions d'ondes de la bande de conduction et de valence de Cd₃As₂. On les écrit $|iS \downarrow\rangle, 2^{-\frac{1}{2}}|(X - iY) \downarrow\rangle, -2^{-\frac{1}{2}}|(X + iY) \downarrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |iS \uparrow\rangle, 2^{-\frac{1}{2}}|(X + iY) \uparrow\rangle, 2^{-\frac{1}{2}}|(X - iY) \uparrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$. Les \uparrow et \downarrow correspondent aux deux orientations de spin selon l'axe z tandis que S se réfère à la bande de conduction et X, Y, Z aux bandes de valence, dont les symétries respectives sont celles d'orbitales s et p . Dans cette base le Hamiltonien autour du point Γ s'écrit

$$\hat{H}_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -E_0 & P_{\perp} k_{-} & -P_{\perp} k_{+} & 0 & 0 & 0 & 0 & P_{\parallel} k_z \\ P_{\perp} k_{+} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -P_{\perp} k_{-} & 0 & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) & P_{\parallel} k_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_{\parallel} k_z & -E_0 & P_{\perp} k_{+} & P_{\perp} k_{-} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & P_{\perp} k_{-} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & P_{\perp} k_{+} & 0 & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ P_{\parallel} k_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

où E_0 décrit la séparation en énergie entre les bandes de valence et de conduction, Δ le couplage spin-orbite, δ la déformation tétragonale du champ cristallin et P_{\parallel}, P_{\perp} sont les termes de couplage interbandes. On introduit la notation $k_{\pm} = (k_x \pm i k_y)/\sqrt{2}$. Le spectre est calculé numériquement et consiste en quatre bandes doublement dégénérées dont deux ont des contacts ponctuels séparés de $\Delta k = 2\sqrt{\delta E_0/P_{\parallel}^2}$ [voir Figure 2.4]. Les bandes dispersent linéairement avec une vitesse de Fermi $v_{\parallel, \perp} = \sqrt{2/3}P_{\parallel, \perp}$.

Réalisations expérimentales. Le modèle (2.17) a été utilisé par Bodnar pour expliquer les oscillations Shubnikov-de Haas de Cd₃As₂ [Bod77] et s'avère similaire au développement basse énergie de HgTe [NPJ⁺05], en l'absence des termes quadratiques en vecteur d'onde. Dans le cas de Cd₃As₂, les paramètres obtenus par spectroscopie infrarouge sont [voir Chapitre 3]

$$P_{\perp} \approx P_{\parallel} = 7.5 \text{ eV.Å}, E_0 = 30 \text{ meV}, \delta = 30 \text{ meV}, \Delta = 300 - 400 \text{ meV}. \quad (2.18)$$

Comme $\delta \cdot E_0 > 0$ il y a deux cônes de Weyl distants de $\Delta k = 8 \cdot 10^{-3} \text{ Å}^{-1}$. Il ne semble pas y avoir de consensus sur les valeurs à donner pour la position des cônes de Dirac. On trouve par exemple $\Delta k = 6 \cdot 10^{-2} \text{ Å}^{-1}$ en STM [JZG⁺14] et $\Delta k = 0.2 - 0.3 \text{ Å}^{-1}$ en ARPES [NXS⁺14]. L'énergie de Fermi est en général $E_F \approx 100 - 200 \text{ meV}$ au dessus des cônes et il semble qu'elle fluctue beaucoup spatialement. Dans le cas de HgTe, la structure de bande est telle que $\delta = 0$ et le matériau a un comportement métallique [SKT⁺13]. Cependant, la croissance de HgTe sur CdTe a permis d'obtenir une déformation suffisamment uniforme sur 67 nm avec $\delta E_0 < 0$: la bande plate

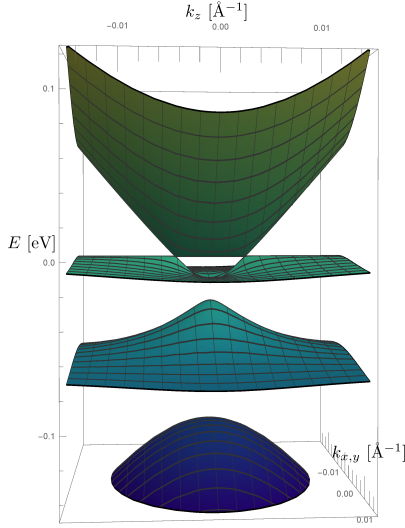


FIGURE 2.4 – Structure de bande du modèle de Bodnar pour les paramètres $P_{\perp} \approx P_{\parallel} = 7.5 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$, $E_0 = 30 \text{ meV}$, $\delta = 30 \text{ meV}$ et $\Delta = 100 \text{ meV}$ obtenus par spectroscopie infrarouge.

est séparée de la bande de conduction et permet d'observer un comportement isolant [BLN⁺11, DHQ⁺08]. Le gap ainsi obtenu est de l'ordre de 30 meV. Certaines études théoriques prédisent l'existence d'une phase semi-métal de Weyl pour HgTe pour une déformation dans l'autre sens mais il n'y a pour le moment aucune étude expérimentale allant dans ce sens [RJY⁺16].

Rotation. Il est pratique de réécrire cet Hamiltonien sous la forme plus condensée

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \hat{H}(\mathbf{k} = 0) + P_{\perp}(k_x \hat{J}_x + k_y \hat{J}_y) + P_{\parallel} k_z \hat{J}_z. \quad (2.19)$$

Avec cette représentation, on observe que la projection de \mathbf{J} sur n'importe quelle direction en coordonnées sphériques $\mathbf{n} = (\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi), \cos(\theta))$ se ramène à \hat{J}_z par une rotation matricielle telle que

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = J_x \sin(\theta) \cos(\phi) + J_y \sin(\theta) \sin(\phi) + J_z \cos(\theta) = U_{\phi}^{\dagger} (J_x \sin(\theta) + J_z \cos(\theta)) U_{\phi} = U_{\phi}^{\dagger} U_{\theta}^{\dagger} J_z U_{\theta} U_{\phi}, \quad (2.20)$$

$$U_{\phi} = \text{diag}\left(1, e^{-i\phi}, e^{i\phi}, e^{i\phi}, e^{i\phi}, e^{2i\phi}, 1, 1\right), \quad (2.21)$$

$$U_{\theta} = \exp(i\theta L), \quad (2.22)$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{2} \\ -\frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{i}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{i}{2} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

La dérivation de ces opérations est expliquée à la section 2.2.1. La rotation agit différemment sur $\hat{H}(\mathbf{k} = 0)$ en fonction de la présence ou de l'absence de la déformation cristalline. (i) Si $\delta = 0$ le Hamiltonien est covariant pour les rotations de n'importe quels angles θ, ϕ et la covariance agit sur les paramètres $(P_{\perp} k_x, P_{\perp} k_y, P_{\parallel} k_z)$ dans (2.19). On retrouve l'invariance par rotation des vecteurs d'ondes \mathbf{k} , bien que $P_{\perp} \neq P_{\parallel}$, par un simple changement d'échelle. Nous y reviendrons à la section 2.2.1. (ii) Si $\delta \neq 0$ le Hamiltonien est covariant pour les rotations d'angle ϕ autour de l'axe z seulement ($\theta = 0$). Par conséquent, si δ induit un croisement de bandes, il n'y aura ouverture de gap qu'en dehors de l'axe z [de la même façon que \hat{V} à la section 2.1.3]. Comme le spectre en $\mathbf{k} = 0$ est tel

que $E_1 = -E_0$, $E_2^{(\pm)} = -\frac{\Delta + \delta}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta - \delta/3}{2}\right)^2 + 2\delta^2/9}$ et $E_3 = 0$ et que, pour tout k_z , on a $E_3(k_x = 0, k_y = 0, k_z) = 0$: les

bandes $E_2^{(+)}$ et E_3 vont se croiser à $E = 0$ en $k_z = \pm\Delta k/2 = \pm\sqrt{\delta E_0/P_{\parallel}^2}$, ce qui correspond à la position des cônes de Weyl.

Limite de fort couplage spin-orbital. Le couplage spin-orbite $\Delta \approx 400$ meV est généralement large comparé aux autres échelles d'énergie. On peut donc éliminer les états correspondants $\Psi_{\Delta,1}$ et $\Psi_{\Delta,2}$, à $\mathbf{k} = 0$, à l'aide d'une projection et permutation \hat{P} tels que

$$\Psi_{\Delta,1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{2/3} \\ -\sqrt{1/3} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\Delta,2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sqrt{2/3} \\ -\sqrt{1/3} \end{pmatrix}, \quad \hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{1/3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2/3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{1/3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2/3} \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Le Hamiltonien projeté sur les six bandes restantes ($\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4, \psi_5, \psi_6$) est

$$\hat{H}_6 = \hat{P}^\dagger \hat{H}_8 \hat{P} = \begin{pmatrix} -E_0 & P_{\perp} k_- / \sqrt{2} & -P_{\perp} k_+ / \sqrt{6} & 0 & 0 & \sqrt{2/3} P_{\parallel} k_z \\ P_{\perp} k_+ / \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -P_{\perp} k_- / \sqrt{6} & 0 & -2\delta/3 & \sqrt{2/3} P_{\parallel} k_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2/3} P_{\parallel} k_z & -E_0 & P_{\perp} k_+ / \sqrt{2} & P_{\perp} k_- / \sqrt{6} \\ 0 & 0 & 0 & P_{\perp} k_- / \sqrt{2} & 0 & 0 \\ \sqrt{2/3} P_{\parallel} k_z & 0 & 0 & P_{\perp} k_+ / \sqrt{6} & 0 & -2\delta/3 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Modèle basse énergie des points de contact. Le spectre au niveau des deux points de contact est constitué de deux bandes doublement dégénérées. On utilise le même raisonnement que pour la fusion des cônes de Weyl au paragraphe 2.1.3 et on traite en perturbation les deux états à $E(\mathbf{k} = 0) = -E_0$ (ψ_1, ψ_4) du Hamiltonien (2.25). On obtient alors le modèle de basse énergie suivant, dans la base ($\psi_3, \psi_5, \psi_6, \psi_2$),

$$\hat{H}_{4,\text{eff.}} = \left\{ P_{\perp}^2 (k_x^2 + k_y^2) + P_{\parallel}^2 [k_z^2 - \delta E_0 / P_{\parallel}^2] \right\} \hat{\mathbb{1}} / 3E_0 \quad (2.26)$$

$$+ \begin{pmatrix} \Delta(k_x, k_y, k_z) & P_{\perp} P_{\parallel} k_+ k_z / \sqrt{3} E_0 & 0 & -P_{\perp}^2 k_-^2 / 2\sqrt{3} E_0 \\ P_{\perp} P_{\parallel} k_- k_z / \sqrt{3} E_0 & -\Delta(k_x, k_y, k_z) & P_{\perp}^2 k_-^2 / 2\sqrt{3} E_0 & 0 \\ 0 & P_{\perp}^2 k_+^2 / 2\sqrt{3} E_0 & \Delta(k_x, k_y, k_z) & P_{\perp} P_{\parallel} k_- k_z / \sqrt{3} E_0 \\ -P_{\perp}^2 k_+^2 / 2\sqrt{3} E_0 & 0 & P_{\perp} P_{\parallel} k_+ k_z / \sqrt{3} E_0 & -\Delta(k_x, k_y, k_z) \end{pmatrix},$$

où $\Delta(k_x, k_y, k_z) = [2P_{\parallel}^2 (k_z^2 - \delta E_0 / P_{\parallel}^2) - P_{\perp}^2 (k_x^2 + k_y^2)] / 6E_0$. On observe ainsi qu'en chacun des cônes, en $(k_x, k_y, k_z) \approx (0, 0, \pm\Delta k/2) = (0, 0, \pm\sqrt{\delta E_0 / P_{\parallel}^2})$, le Hamiltonien est

$$\hat{H}_{4,\pm\Delta k/2} = \pm v_z q_z \hat{\mathbb{1}} \pm \begin{pmatrix} v_z q_z & v_{\perp} k_+ & 0 & 0 \\ v_{\perp} k_- & -v_z q_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_z q_z & v_{\perp} k_- \\ 0 & 0 & v_{\perp} k_+ & -v_z q_z \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

où $v_z = P_{\parallel}^2 \Delta k / 3E_0 \approx 5$ eV.Å et $v_{\perp} = P_{\perp} P_{\parallel} \Delta k / 2\sqrt{3} E_0 \approx 4.3$ eV.Å. L'inclinaison selon z est critique, telle que $|t_z| = 1$, et des cônes de chiralités opposées se superposent en chaque point. C'est le modèle minimal d'un semi-métal de Dirac où les quatre cônes sont reliés par l'invariance par renversement du temps *et* par inversion. Les deux blocs ont une chiralité opposée en $k_z = \pm\Delta k/2$ alors qu'à la section 2.1.2 la symétrie par renversement du temps imposait des chiralités identiques. La différence porte ici sur la présence du spin : la symétrie par renversement du temps échange les deux saveurs de spins, ce qui correspond aux deux blocs de $\hat{H}_{4,\pm\Delta k/2}$.

Le comportement à basse énergie que nous venons de décrire n'est valable qu'autour des cônes de Dirac, pour une gamme d'énergies de l'ordre de $\delta \approx 30$ meV pour Cd_3As_2 . Au delà, les effets de croisement de bandes s'estompent et le comportement du modèle de Bodnar s'apparente à celui d'électrons de Kane plutôt que d'électrons de Dirac. Nous reviendrons sur ce modèle lors de l'étude de la spectroscopie infrarouge de Cd_3As_2 au Chapitre 3, nous verrons alors que pour ce matériau l'énergie de Fermi est $E_F \approx 100$ meV où le comportement de type *semimétal de Kane* prédomine.

2.2 Covariance relativiste

Dans le cadre de cette thèse nous allons étudier l'influence d'un potentiel doux sur les modèles que nous venons d'introduire, par exemple dû à un champ magnétique ou à une interface graduelle. Dans ces cas, les vecteurs d'ondes \mathbf{k} deviennent des opérateurs différentiels [voir section 1.2.2] et l'équation de Schrödinger indépendante du temps consiste en un ensemble de d'équations différentielles couplées. Pour un modèle à n bandes, on peut toujours réaliser la décomposition suivante sur une base de matrices hermitiennes

$$(\hat{H} - E\hat{1})\Psi = \sum_{i=1}^{n^2} h_i \hat{J}_i \Psi = \mathbf{h} \cdot \hat{\mathbf{J}} \Psi = 0, \quad (2.28)$$

où les coefficients $\mathbf{h} = (h_1, h_2, \dots, h_{n^2})$ sont des opérateurs hermitiens qui régissent les n équations différentielles. Le traitement de ces équations peut être simple en l'absence de certains paramètres, tel que l'inclinaison \mathbf{t} , mais pour traiter les cas plus généraux il est utile de pouvoir se ramener aux modèles plus simples par une transformation matricielle telles que les rotations et les transformations hyperboliques. En effet, pour une transformation inversible quelconque \hat{T} telle que $\hat{T}^\dagger \hat{J}_i \hat{T} = \sum_j \tau_{ij} \hat{J}_j = \underline{\underline{\tau}} \hat{\mathbf{J}}$, on peut réécrire l'équation Hamiltonienne sous la forme

$$\mathbf{h}' \cdot \hat{\mathbf{J}} \Psi' = 0 \quad \text{où} \quad \mathbf{h}' = \underline{\underline{\tau}}^T \mathbf{h}, \quad \Psi' = \hat{T}^{-1} \Psi. \quad (2.29)$$

De cette manière une rotation ou une transformation hyperbolique matricielle revient à une rotation ou à une transformation hyperbolique des coefficients \mathbf{h} et, comme je l'illustre à la Figure 2.5, on peut ainsi annuler certaines composantes de \mathbf{h} . Afin de deviner ces transformations, l'équation séculaire $\det(\hat{H} - E\hat{1}) = 0$ est un objet utile.

2.2.1 Rotations

Invariance par rotation. L'écriture de l'équation séculaire permet d'identifier les coefficients reliés par une rotation : ce sont ceux qui apparaissent sous une forme quadratique. Par exemple, dans le cas du modèle de Bodnar (2.17), on obtient l'équation séculaire suivante [SW83, SW85, Wal79]

$$\gamma(E) = f_1(E) [(P_{\parallel} k_x)^2 + (P_{\parallel} k_y)^2] + f_2(E) (P_{\perp} k_z)^2 \quad \text{où} \quad \begin{aligned} \gamma(E) &= E(E + E_0) [E(E + \Delta) + \delta(E + 2\Delta/3)], \\ f_1(E) &= [E(E + 2\Delta/3) + \delta(E + \Delta/3)], \\ f_2(E) &= E(E + 2\Delta/3). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Ainsi, une rotation des coefficients $P_{\parallel} k_x$ et $P_{\parallel} k_y$ de l'équation (2.19) entre eux ne modifie pas le spectre. On décrit cette rotation comme

$$\begin{pmatrix} P_{\parallel} k_x \\ P_{\parallel} k_y \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{\parallel} k_x \\ P_{\parallel} k_y \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

et, en s'appuyant sur le raisonnement qui a mené à l'équation (2.29), cette transformation des coefficients peut s'écrire à l'aide d'une transformation sur les matrices \hat{J}_x, \hat{J}_y introduites à l'équation (2.19)

$$\begin{pmatrix} \hat{J}_x \\ \hat{J}_y \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{J}_x \\ \hat{J}_y \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

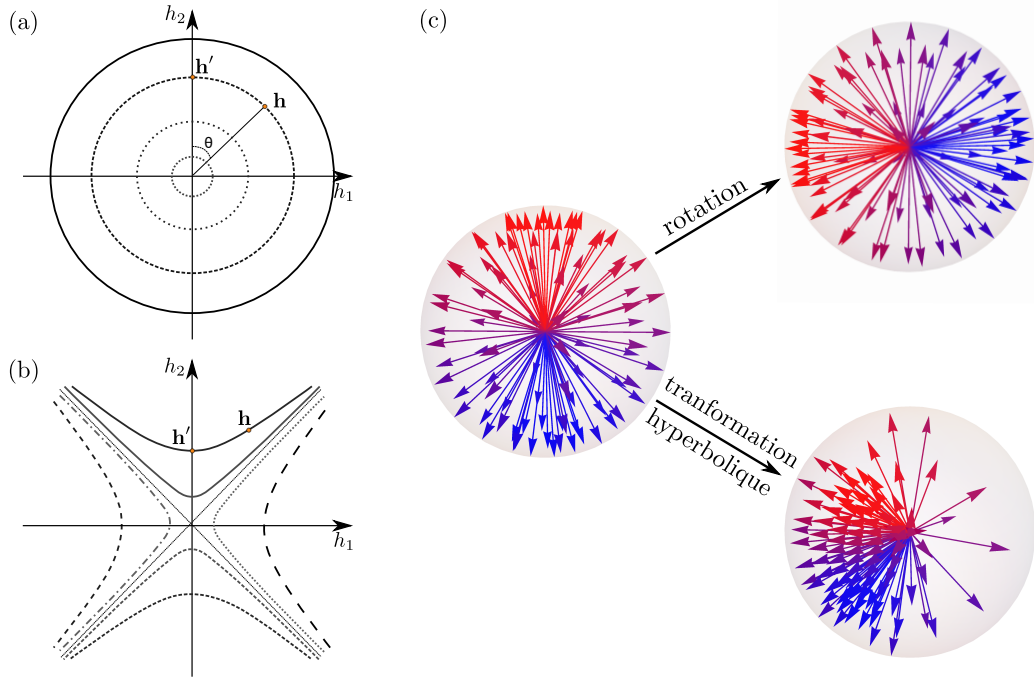


FIGURE 2.5 – Transformations covariantes. On illustre les courbes iso-Hamiltonien pour (a) les rotations et (b) les transformations hyperboliques. Ces deux transformations modifient une distribution de spineurs uniforme en la tournant pour une rotation ou en la translatant pour une transformation hyperbolique. On le représente sur la sphère de Bloch en tenant bien compte de la normalisation des spineurs.

On peut en principe se contenter de cette écriture mais afin de déterminer l'action de cette transformation sur les fonctions d'ondes, on postule que la transformation est unitaire et de la forme $\hat{T} = e^{i\theta\hat{L}}$ où \hat{L} est hermitien. On note ainsi $\hat{j}'_i(\theta) = e^{-i\theta\hat{L}}\hat{j}_i e^{i\theta\hat{L}}$ dont les dérivées par rapport à θ sont

$$\frac{d}{d\theta} \begin{pmatrix} \hat{j}_x \\ \hat{j}_y \end{pmatrix}' = e^{-i\theta\hat{L}} \begin{pmatrix} i[\hat{j}_x, \hat{L}] \\ i[\hat{j}_y, \hat{L}] \end{pmatrix} e^{i\theta\hat{L}} = \begin{pmatrix} -\sin(\theta) & \cos(\theta) \\ -\cos(\theta) & -\sin(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{j}_x \\ \hat{j}_y \end{pmatrix} = e^{-i\theta\hat{L}} \begin{pmatrix} \hat{j}_y \\ -\hat{j}_x \end{pmatrix} e^{i\theta\hat{L}}. \quad (2.33)$$

Les deux dernières relations sont déduites de (2.32). On en déduit donc que la rotation des deux coefficients ($P_{\parallel}k_x, P_{\parallel}k_y$) est réalisée grâce à la transformation matricielle $\hat{T} = e^{i\theta\hat{L}}$ telle que

$$\text{(définition rotation)} : [\hat{j}_x, \hat{L}] = -i\hat{j}_y, \quad [\hat{j}_y, \hat{L}] = i\hat{j}_x, \quad (2.34)$$

et de sorte que \hat{L} commute avec tous les autres opérateurs du développement (2.19), $[\hat{j}_z, \hat{L}] = [\hat{H}(\mathbf{k}=0), \hat{L}] = 0$. On obtient ainsi un ensemble d'équations sur les d^2 coefficients qui définissent \hat{L} et que l'on peut déterminer à l'aide d'un programme informatique. C'est d'ailleurs la méthode que j'ai utilisé pour déterminer le générateur \hat{L} à l'équation (2.23).

Un autre exemple est la rotation des coefficients \mathbf{h} dans le cas d'un Hamiltonien 2×2 qui s'écrit $\hat{H} = \mathbf{h} \cdot \hat{\sigma}$. Dans ce cas, les matrices de Pauli étant une représentation de l'algèbre de Lie des rotations, $[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$, une rotation d'axe principal \mathbf{u} et d'angle θ sera décrite par $\hat{T} = e^{i\theta\hat{\sigma}_u/2}$ où $\hat{\sigma}_u = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}$. Le calcul de la dérivée seconde de \hat{T} par rapport à θ donne une équation différentielle dont la solution est

$$\hat{T} = \cos(\theta/2)\hat{1} + \sin(\theta/2)\hat{\sigma}_u. \quad (2.35)$$

Relations de commutation. Le raisonnement précédent s'applique de manière plus générale à toute rotation des paramètres, sans que le Hamiltonien ne soit nécessairement invariant. Par exemple, dans le cas où l'on applique un champ magnétique uniforme dans une direction \mathbf{b} quelconque $\mathbf{B} = B\mathbf{b}$ alors par la substitution minimale $\mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi} = \mathbf{k} + e\mathbf{A}$, où \mathbf{A} est le potentiel vecteur, les règles de commutation deviennent $[\pi_\mu, \pi_\nu] =$

$-i\varepsilon_{\mu\nu\ell}b_\ell/\ell_B^2$. On peut simplifier ces règles de commutation à l'aide d'une rotation suivie d'un changement d'échelle des paramètres $(P_x\pi_x, P_y\pi_y, P_z\pi_z) \rightarrow P(p_x, p_y, p_z)$ tel que $Pp_j = \sum_j n_{j\mu}P_\mu\pi_\mu$. La rotation est décrite par les trois vecteurs orthonormés $\mathbf{n}_{j \in \{1,2,3\}} = \sum_{\mu=1}^3 n_{j\mu}\mathbf{e}_\mu$ et les changements d'échelle sont représentés par les vecteurs $\mathbf{Pn}_{j \in \{1,2,3\}} = \sum_{\mu=1}^3 P_\mu n_{j\mu}\mathbf{e}_\mu$. Les relations de commutation deviennent alors

$$[p_j, p_k] = -i (\mathbf{Pn}_j \times \mathbf{Pn}_k) \cdot \mathbf{b} / (P\ell_B)^2. \quad (2.36)$$

Il suffit de construire $\mathbf{Pn}_z // \mathbf{b}$, soit $\mathbf{n}_z = [\sum_{i=1}^3 (b_i/P_i)\mathbf{e}_i] / \sum_{j=1}^3 (b_j/P_j)^2$, avec $\mathbf{Pn}_x, \mathbf{Pn}_y \perp \mathbf{b}$ et de choisir $P = \sqrt{|(\mathbf{Pn}_x \times \mathbf{Pn}_y) \cdot \mathbf{b}|}$ pour que les relations de commutation se simplifient en

$$[p_x, p_y] = -i \operatorname{sgn} [\det(\mathbf{Pn}_x, \mathbf{Pn}_y, \mathbf{b})] / \ell_B^2, \quad [p_x, p_z] = 0, \quad [p_y, p_z] = 0. \quad (2.37)$$

La représentation matricielle de la rotation décrite par la matrice $n_{j\mu}$ peut se décomposer en deux temps :

- (i) Une rotation d'angle θ qui laisse $P_z\pi_z$ invariant, soit $n_{jz} = 0$ pour $z \in \{1,2,3\}$, et permet d'orienter \mathbf{Pn}_z dans le plan xy , parallèle à $\mathbf{b}_{xy} = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{e}_x)\mathbf{e}_x + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{e}_y)\mathbf{e}_y$. La transformation est $\hat{T}_1 = e^{i\theta\hat{L}}$ où la matrice \hat{L} vérifie les relations de commutation (2.38) auxquelles la contrainte $n_{jz} = 0$ impose aussi $[\hat{J}_z, \hat{L}] = 0$ mais aucune contrainte sur $[\hat{H}(\mathbf{k}=0), \hat{L}]$ comme c'était le cas pour le traitement de l'invariance par rotation.
- (ii) Une rotation d'angle ϕ qui laisse $(\mathbf{P}\boldsymbol{\pi}) \cdot \mathbf{b}_{xy}$ invariant, soit $n_{j(b_{xy})} = 0$, et permet d'orienter \mathbf{Pn}_z selon \mathbf{b} . La transformation est $\hat{T}_2 = e^{i\phi\hat{K}}$ telle que les relations de commutation de la matrice \hat{K} sont

$$[\hat{J}_z, \hat{K}] = -i\hat{J}_\perp, \quad [\hat{J}_\perp, \hat{K}] = i\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_{b_{xy}}, \hat{K}] = 0. \quad (2.38)$$

On a défini les matrices \hat{J}_\perp la composante de $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ perpendiculaire à $\mathbf{e}_z, \mathbf{b}_{xy}$ et $\hat{J}_{b_{xy}}$ la composante parallèle à \mathbf{b}_{xy} .

Le comportement des autres matrices, tel que $\hat{H}(\mathbf{k}=0)$ du modèle de Bodnar (2.19), sous ces deux transformations n'est pas simple. En général, on le détermine en évaluant une équation différentielle pour les angles θ (et ϕ) de $\hat{H}_\theta(\mathbf{k}=0) = e^{-i\theta\hat{L}}\hat{H}(\mathbf{k}=0)e^{i\theta\hat{L}}$. La dérivée première donne par exemple,

$$\frac{d}{d\theta}\hat{H}_\theta(\mathbf{k}=0) = e^{-i\theta\hat{L}}i[\hat{H}(\mathbf{k}=0), \hat{L}]e^{i\theta\hat{L}}. \quad (2.39)$$

Si $[\hat{H}(\mathbf{k}=0), \hat{L}] = 0$ on en déduit que $\hat{H}(\mathbf{k}=0)$ est invariant. Par contre si $[\hat{H}(\mathbf{k}=0), \hat{L}] = i\hat{D}$, on réitère la procédure : on dérive \hat{D}_θ jusqu'à obtenir un système de matrices fermé. Le raisonnement dans le cas du modèle de Bodnar est détaillé en Annexe B.5.

Nous venons de montrer l'intérêt des rotations pour : (i) Résoudre un Hamiltonien en éliminant certaines composantes puis en les reconstruisant à l'aide d'une rotation. Par exemple, on peut résoudre le cas $(k_x, k_y) = (k, 0)$ puis appliquer la rotation pour obtenir la solution en $(k_x, k_y) = k(\cos(\theta), \sin(\theta))$ et, (ii) Réduire le nombre de relations de commutation à traiter par un choix pratique des coordonnées, par exemple dans le cas d'un champ magnétique. Cependant, les rotations sont liées aux transformations unitaires, telles que $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, et ne permettent pas de combiner certaines composantes entre elles : par exemple, dans le cas de l'équation de Weyl (2.2), on aimerait réaliser une "rotation" entre l'inclinaison $v_x t_x q_x \hat{\mathbb{1}}$ et la partie conique $v_x q_x \hat{\sigma}_x$ mais ce n'est pas permis car $\mathbb{1} = \hat{U}^\dagger \mathbb{1} \hat{U}$ est invariant sous toute transformation unitaire. On se rend compte de la difficulté si on écrit l'équation séculaire de l'équation de Weyl sous la forme

$$(E - v_x t_x q_x)^2 - [(v_x q_x)^2 + (v_y q_y)^2 + (v_z q_z)^2] = 0. \quad (2.40)$$

Cette forme quadratique est celle d'une hyperbole, ce qui indique que la transformation linéaire entre les coefficients $E - v_x t_x q_x$ et $v_x q_x$ – en face de $\hat{\mathbb{1}}$ et $\hat{\sigma}_x$ – qui laisse l'équation séculaire invariante est la transformation hyperbolique [voir Figure 2.5(b)]

$$\begin{pmatrix} E - v_x t_x q_x \\ v_x q_x \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} \cosh(\eta) & \sinh(\eta) \\ \sinh(\eta) & \cosh(\eta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E - v_x t_x q_x \\ v_x q_x \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

De façon plus générale, on ne peut pratiquer une rotation que si le spectre des deux opérateurs en question est identique. C'est une contrainte forte que l'on peut aisément lever en considérant des transformations *inversibles* plus générales dont les transformations hyperboliques sont un exemple.

2.2.2 Transformation hyperboliques

Les transformations hyperboliques sont connues en mécanique quantique relativiste [Zee10] et se réfèrent aux boosts de Lorentz qui permettent de décrire un ensemble de coordonnées d'un référentiel inertiel dans un autre. Leur utilisation en matière condensée remonte à [AP67] mais a été peu étudiée jusqu'à leur application dans le contexte du graphène [LSB07] puis à travers l'étude des propriétés magnétiques et optiques de matériaux organiques quasi-bidimensionnels [GFMP08, GFMP09, SGTmH15]. Dans ces contextes, l'utilisation du boost de Lorentz est réalisée par analogie avec l'équation de la relativité restreinte. Dans cette partie je réutilise le raisonnement décrit par l'équation (2.29) et plutôt que de l'appliquer aux transformations unitaires, telles que $\hat{T} = e^{i\theta\hat{L}}$, je l'applique aux transformations hermitiennes, telles que $\hat{S} = e^{\eta\hat{\Gamma}}$ où $\hat{\Gamma}$ est hermitien.

Représentation matricielle. On généralise la remarque faite à l'équation (2.41) à la transformation d'un opérateur $\hat{W} = \omega\hat{A} + \nu\hat{B}$ tel que les coefficients (ω, ν) changent selon

$$\begin{pmatrix} \omega \\ \nu \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} \cosh(\eta) & \sinh(\eta) \\ \sinh(\eta) & \cosh(\eta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \\ \nu \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

Cette transformation laisse $s^2 = \omega^2 - \nu^2$ invariant et en fonction du signe de cette quantité on peut soit éliminer toute dépendance en ν , si $s^2 > 0$ avec $\tanh(\eta) = -\nu/\omega$, ou éliminer ω , si $s^2 < 0$ avec $\tanh(\eta) = -\omega/\nu$. Ces deux situations sont analogues aux limites de type espace et de type temps de la relativité restreinte [voir Figure 2.5(b)]. Comme nous l'avons précisé à l'équation (2.29) cette transformation sur les coefficients correspond à la transformation matricielle

$$\begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} \cosh(\eta) & \sinh(\eta) \\ \sinh(\eta) & \cosh(\eta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

On postule que la transformation est hermitienne et de la forme $\hat{S} = e^{\eta\hat{\Gamma}}$ où $\hat{\Gamma}$ est hermitien. Si on note $\hat{M}'(\eta) = e^{\eta\hat{\Gamma}}\hat{M}e^{\eta\hat{\Gamma}}$ les matrices dans la nouvelle base, alors les dérivées de \hat{A}' et \hat{B}' par rapport à η sont

$$\frac{d}{d\eta} \begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix}' = e^{\eta\hat{\Gamma}} \begin{pmatrix} \{\hat{A}, \hat{\Gamma}\} \\ \{\hat{B}, \hat{\Gamma}\} \end{pmatrix} e^{\eta\hat{\Gamma}} = \begin{pmatrix} \sinh(\eta) & \cosh(\eta) \\ \cosh(\eta) & \sinh(\eta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{A} \\ \hat{B} \end{pmatrix} = e^{\eta\hat{\Gamma}} \begin{pmatrix} \hat{B} \\ \hat{A} \end{pmatrix} e^{\eta\hat{\Gamma}}. \quad (2.44)$$

Les deux dernières relations sont déduites de (2.43). La transformation hyperbolique des coefficients (ω, ν) est donc réalisée grâce à la transformation matricielle $\hat{S} = e^{\eta\hat{\Gamma}}$ telle que

$$\text{(définition transformation hyperbolique)} : \quad \{\hat{A}, \hat{\Gamma}\} = \hat{B}, \quad \{\hat{B}, \hat{\Gamma}\} = \hat{A}. \quad (2.45)$$

Le cas qui nous intéresse en particulier est celui où $\hat{A} = \hat{\mathbb{1}}$. On a alors

$$\text{(si } \hat{A} = \hat{\mathbb{1}}) : \quad \begin{cases} \hat{\Gamma} = \hat{B}/2, \\ \hat{B}^2 = \mathbb{1}, \end{cases} \quad (2.46)$$

et comme la transformation nécessite $\hat{B}^2 = \mathbb{1}$, les valeurs propres de \hat{B} sont nécessairement réelles et égales à ± 1 . Par exemple, dans le cas des matrices 2×2 , ce rôle est tenu par les trois matrices de Pauli $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ et $\hat{\sigma}_z$, et on peut écrire $\hat{\Gamma} = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}/2$ où \mathbf{u} est un vecteur unitaire. Comme $\hat{S} = e^{\eta\hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}/2}$ est hermitien, on peut le décomposer sur la base des matrices hermitiennes $\{\hat{\mathbb{1}}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\} : \hat{S} = \sum_{i=0}^3 s_i \hat{\sigma}_i$. Cette base de matrices est orthonormée avec le produit scalaire suivant $(\hat{A}, \hat{B}) = \text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{B})$ et permet d'exprimer les coefficients $s_{i \in \{0,1,2,3\}}$ selon $s_i = \text{Tr}(\hat{\sigma}_i \hat{S}) = \text{Tr}(\hat{\sigma}_i e^{\eta\hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}/2}) = \text{Tr}(e^{\eta\hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}/4} \hat{\sigma}_i e^{\eta\hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}/4}) = \text{Tr}(\hat{\sigma}'_i(\eta/2))$. Par construction, les composantes $\hat{\sigma}_0 \equiv \hat{\mathbb{1}}$ et $\hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}$ se transforment selon (2.43) tandis que les composantes $\hat{\sigma}_\perp$ perpendiculaires à \mathbf{u} anticommulent avec $\hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}$ et sont donc invariantes sous la transformation \hat{S} . Enfin, comme seule $\hat{\sigma}_0$ est de trace non-nulle, on obtient

$$\hat{S} = \cosh(\eta/2) \hat{\mathbb{1}} + \sinh(\eta/2) \hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}. \quad (2.47)$$

Une autre manière d'obtenir cette relation est de dériver deux fois \hat{S} par rapport à η et résoudre l'équation différentielle correspondante, comme je l'ai fait à l'équation (2.35).

Relations de commutation (le retour). Cette transformation permet de continuer la procédure de simplification des relations de commutation abordée à l'équation (2.37). En effet, si à l'aide d'une rotation on oriente le champ magnétique selon $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ et que dans cette base on décompose le Hamiltonien de Weyl de l'équation (2.2) avec $\mathbf{t} = (t_x, 0, t_z)$ sous la forme $\hat{H} = h_0 \hat{\mathbb{1}} + \mathbf{h} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$, alors les coefficients h_i vérifient les relations de commutation suivantes

$$[h_0, h_2] = -i t_x v_x v_y / \ell_B^2, \quad [h_1, h_2] = -i v_x v_y / \ell_B^2, \quad [h_i, h_j] = 0 \text{ sinon.} \quad (2.48)$$

La transformation hyperbolique $\hat{S} = e^{\eta \hat{\sigma}_x / 2}$ transforme les coefficients h_0 et h_1 selon (2.42) tandis que h_2 et h_3 sont invariants. Les nouvelles relations de commutation sont alors

$$[h'_0, h'_2] = -i \gamma (\beta + t_x) v_x v_y / \ell_B^2, \quad [h'_1, h'_2] = -i \gamma (1 + \beta t_x) v_x v_y / \ell_B^2, \quad [h'_i, h'_j] = 0 \text{ sinon,} \quad (2.49)$$

où $\beta = \tanh(\eta) \in]-1, 1[$ et $\gamma = \cosh(\eta) = (1 - \beta^2)^{-1/2}$. On peut ainsi annuler l'un des deux commutateurs restants en fonction de la valeur de t_x

(i) *Limite magnétique.* Si $t_x \in]-1, 1[$ alors le choix $\beta = -t_x$ permet d'écrire

$$[h'_0, h'_2] = 0, \quad [h'_1, h'_2] = -i v_x v_y / \gamma \ell_B^2, \quad [h'_i, h'_j] = 0 \text{ sinon.} \quad (2.50)$$

Nous reviendrons à cette situation lors de la discussion des niveaux de Landau, on obtient alors le Hamiltonien de l'équation (2.99).

(ii) *Limite électrique.* Si $1/t_x \in]-1, 1[$ alors le choix $\beta = -1/t_x$ permet d'écrire

$$[h'_0, h'_2] = -i t_x v_x v_y / \gamma \ell_B^2, \quad [h'_1, h'_2] = 0, \quad [h'_i, h'_j] = 0 \text{ sinon.} \quad (2.51)$$

Je n'ai pas traité cette situation pour la thèse mais les équations du mouvement ressemblent à celles rencontrées pour les états de Sauter [Sau31, RkY84] dont le spectre est continu.

On parle de limite magnétique et de limite électrique par référence aux niveaux de Landau, discutés à la section 2.3. Nous verrons des exemples d'application lors de la discussion des niveaux de Landau ou des états de surface des semi-métaux de Weyl et avant ça je vais aborder quelques propriétés des transformations hyperboliques : (i) leur effet sur la distribution d'états sur la sphère de Bloch et, (ii) l'effet de deux transformations hyperboliques consécutives que l'on est amené à faire si, par exemple, on prend aussi en compte la composante t_y de \mathbf{t} pour les commutateurs de l'équation (2.48).

Représentation spinorielle. La représentation d'un état sur une sphère de Bloch permet de visualiser simplement les solutions d'une matrice 2×2 [voir Figure 2.5(c)]. Chaque état $|\mathbf{n}\rangle$ y est décrit en terme des angles (θ, ϕ)

$$|\mathbf{n}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

et vérifie $\langle \mathbf{n} | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{n} \rangle = \mathbf{n} \equiv [\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi), \cos(\theta)]$ ce qui permet une interprétation géométrique des transformations. Par exemple, dans le cas d'une rotation décrite à l'équation (2.35) les fonctions d'ondes se transforment selon $|\mathbf{n}\rangle \rightarrow |\mathbf{n}'\rangle = e^{i\theta \hat{\sigma}_u / 2} |\mathbf{n}\rangle$ et alors

$$\mathbf{n}'_{\text{rot.}} = \langle \mathbf{n}' | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{n}' \rangle = \langle \mathbf{n} | e^{-i\theta \hat{\sigma}_u / 2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} e^{i\theta \hat{\sigma}_u / 2} | \mathbf{n} \rangle = \langle \mathbf{n} | R_{\theta, \mathbf{u}} \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{n} \rangle = R_{\theta, \mathbf{u}} \langle \mathbf{n} | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{n} \rangle = R_{\theta, \mathbf{u}} \mathbf{n}, \quad (2.53)$$

où $R_{\theta, \mathbf{u}}$ est la rotation vectorielle d'axe \mathbf{u} et d'angle θ . Un autre exemple est celui des transformations hyperboliques où la fonction d'onde change selon $|\mathbf{n}\rangle \rightarrow |\mathbf{n}'\rangle = \mathcal{N} e^{\eta \hat{\sigma}_u / 2} |\mathbf{n}\rangle$ où \mathcal{N} est un facteur de normalisation. Dans ce cas on a

$$\mathbf{n}'_{\text{boost}} = \frac{\langle \mathbf{n}' | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{n}' \rangle}{\langle \mathbf{n}' | \mathbf{n}' \rangle} = \frac{\langle \mathbf{n} | e^{\eta \hat{\sigma}_u / 2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} e^{\eta \hat{\sigma}_u / 2} | \mathbf{n} \rangle}{\langle \mathbf{n} | e^{\eta \hat{\sigma}_u} | \mathbf{n} \rangle} = \frac{\mathbf{n}_\perp + \gamma (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} + \beta) \mathbf{u}}{\sqrt{(\mathbf{n}_\perp)^2 + \gamma^2 (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} + \beta)^2}}, \quad (2.54)$$

où \mathbf{n}_\perp sont les composantes de \mathbf{n} perpendiculaires à \mathbf{u} , $\beta = \tanh(\eta)$ et $\gamma = \cosh(\eta) = (1 - \beta^2)^{-1/2}$. A la Figure 2.5(c) on illustre cette transformation dans le cas où $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0$ et $\mathbf{n} = \mathbf{n}_\perp$. On a alors

$$\mathbf{n}' = \mathbf{n}/\gamma + \beta\mathbf{u}, \quad (2.55)$$

et la transformation hyperbolique s'apparente plus à une translation sur la sphère de Bloch qu'à une rotation. On obtient aussi les relations pratiques suivantes qui relient les transformations hyperboliques aux rotations et qui nous seront particulièrement utiles en présence d'un champ magnétique

$$\mathcal{N} e^{-\eta_1 \hat{\sigma}_x / 2} | \pm \mathbf{e}_z \rangle = e^{\pm i\theta_1 \hat{\sigma}_y / 2} | \pm \mathbf{e}_z \rangle, \quad (2.56)$$

$$\mathcal{N} e^{-\eta_2 \hat{\sigma}_y / 2} e^{-\eta_1 \hat{\sigma}_x / 2} | \pm \mathbf{e}_z \rangle = e^{\pm i\theta_s \hat{\sigma}_s / 2} | \pm \mathbf{e}_z \rangle, \quad (2.57)$$

où $\tan(\theta_1/2) = \sinh(\eta_1)$ et $\tan(\theta_s/2) = \sqrt{\sinh^2(\eta_1) + \cosh^2(\eta_1) \sinh^2(\eta_2)}$, $\hat{\sigma}_s = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{e}_s$ avec $\mathbf{e}_s = (-\sinh(\eta_2)\mathbf{e}_x + \tanh(\eta_1)\mathbf{e}_y) / \sqrt{\tanh^2(\eta_1) + \sinh^2(\eta_2)}$. La relation entre les transformations hyperboliques et les rotations est à l'origine de la rotation de Thomas-Wigner, connue en relativité restreinte, dont un effet notable est un facteur deux pour le terme de couplage spin-orbite [Zee10].

Rotation de Thomas-Wigner. Comme je l'ai mentionné au paragraphe précédent, si on ajoute la composante t_y à l'inclinaison $\mathbf{t} = (t_x, 0, t_z)$ il est nécessaire de réaliser deux transformations hyperboliques consécutives afin de simplifier les relations de commutation en présence d'un champ magnétique. Dans le cas des matrices 2×2 , deux transformations hyperboliques \hat{L}_1 et \hat{L}_2 sont décrites par $\hat{L}_i = e^{\eta_i \hat{\sigma} \cdot \mathbf{n}_i / 2}$ où $\mathbf{n}_i^2 = 1$, $i \in \{1, 2\}$. Ces opérateurs sont hermitiens, $\hat{L}_i^\dagger = \hat{L}_i$, mais pas leur produit

$$\hat{L}_1 \hat{L}_2 = \text{ch}_1 \text{ch}_2 (\mathbb{1} + \text{th}_1 \hat{\sigma} \cdot \mathbf{n}_1) (\mathbb{1} + \text{th}_2 \hat{\sigma} \cdot \mathbf{n}_2) \quad (2.58)$$

$$= \text{ch}_1 \text{ch}_2 [(1 + \text{th}_1 \text{th}_2 \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2) \mathbb{1} + (\text{th}_1 \mathbf{n}_1 + \text{th}_2 \mathbf{n}_2 + i \text{th}_1 \text{th}_2 \mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2) \cdot \hat{\sigma}], \quad (2.59)$$

où on a utilisé la relation (2.47) et noté $\cosh(\eta_i/2) = \text{ch}_i$ et $\tanh(\eta_i/2) = \text{th}_i$. Par conséquent, le produit de deux transformations hyperboliques n'est pas une transformation hyperbolique : cet effet est connu en relativité restreinte où le produit de deux boosts de Lorentz correspond en fait au produit d'un boost de Lorentz *et* d'une rotation : la rotation Thomas-Wigner. On retrouve le même effet ici, en effet pour la rotation $\hat{R}_{\theta, \mathbf{u}} = e^{i\theta \hat{\sigma} \cdot \mathbf{u} / 2}$ et la transformation hyperbolique $\hat{L}_3 = e^{\eta_3 \hat{\sigma} \cdot \mathbf{n}_3 / 2}$ avec $\mathbf{u}^2 = 1$ et $\mathbf{n}_3^2 = 1$, le calcul de $\hat{L}_3 \hat{R}_{\theta, \mathbf{u}}$ donne

$$\hat{L}_3 \hat{R}_{\theta, \mathbf{u}} = \text{ch}_3 c (\mathbb{1} + \text{th}_3 \hat{\sigma} \cdot \mathbf{n}_3) (\mathbb{1} + i t \hat{\sigma} \cdot \mathbf{u}) = \text{ch}_3 c [(1 + i t \text{th}_3 \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_3) \mathbb{1} + (\text{th}_3 \mathbf{n}_3 + i t \mathbf{u} + t \text{th}_3 \mathbf{u} \times \mathbf{n}_3) \cdot \hat{\sigma}] \quad (2.60)$$

où $c = \cos(\theta/2)$ et $t = \tan(\theta/2)$. Cette relation s'identifie à l'équation (2.58) $\hat{L}_1 \hat{L}_2 = \hat{L}_3 \hat{R}_{\theta, \mathbf{u}}$ et à l'aide du projecteur $\hat{P}_{i \in \{0, 1, 2, 3\}} \bullet = \text{Tr}(\hat{\sigma}_i \bullet)$ et par identification des parties réelles et imaginaires on obtient les huit relations suivantes

$$\begin{cases} \text{ch}_1 \text{ch}_2 (1 + \text{th}_1 \text{th}_2 \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2) = \text{ch}_3 c, \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_3 = 0, \\ \text{ch}_1 \text{ch}_2 (\text{th}_1 \mathbf{n}_1 + \text{th}_2 \mathbf{n}_2) = \text{ch}_3 \text{th}_3 c (\mathbf{n}_3 + t \mathbf{u} \times \mathbf{n}_3), \\ \text{ch}_1 \text{ch}_2 \text{th}_1 \text{th}_2 \mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2 = \text{ch}_3 c t \mathbf{u}. \end{cases} \quad (2.61)$$

La réécriture de ces relations sous une forme condensée donne

$$\begin{cases} t \mathbf{u} = \frac{\text{th}_1 \text{th}_2}{1 + \text{th}_1 \text{th}_2 \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2} \mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2, \\ \text{th}_3 \mathbf{n}_3 = \frac{(1 + \text{th}_2^2 + 2 \text{th}_1 \text{th}_2 \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2) \text{th}_1 \mathbf{n}_1 + (1 - \text{th}_1^2) \text{th}_2 \mathbf{n}_2}{1 + (\text{th}_1 \text{th}_2)^2 + 2 \text{th}_1 \text{th}_2 \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2}, \end{cases} \quad (2.62)$$

et ces dernières permettent d'exprimer l'angle de rotation θ et la rapidité η_3 . Par exemple, dans le cas où $\mathbf{n}_1 \equiv \mathbf{n}_2$: les deux boosts sont parallèles et on n'a aucune rotation, $t = 0$, et

$$\tanh(\eta_3/2) = \frac{\tanh(\eta_1/2) + \tanh(\eta_2/2)}{1 + \tanh(\eta_1/2) \tanh(\eta_2/2)} = \tanh[(\eta_1 + \eta_2)/2] \quad (2.63)$$

ce qui donne $\eta_3 = \eta_1 + \eta_2$ tel qu'attendu par des arguments géométriques en relativité restreinte. Autre exemple, la situation où deux transformations hyperboliques transverses sont nécessaires pour simplifier les relations de commutation en présence de l'inclinaison (2.48) avec $\mathbf{n}_1 = \mathbf{e}_x$ et $\mathbf{n}_2 = \mathbf{e}_y$, ces deux transformations hyperboliques consécutives peuvent se ramener à une seule si on tourne d'abord le système selon $\mathbf{u} = \mathbf{e}_x \times \mathbf{e}_y = \mathbf{e}_z$ avec un angle θ tel que

$$\tan(\theta/2) = \tanh(\eta_1/2) \tanh(\eta_2/2), \quad (2.64)$$

puis que l'on réalise une transformation hyperbolique avec une rapidité η telle que

$$\cosh(\eta_3/2) = \frac{\cosh(\eta_1/2) \cosh(\eta_2/2)}{\cos(\theta/2)}. \quad (2.65)$$

Cela justifie a posteriori notre choix $\mathbf{t} = (t_x, 0, t_z)$, ie $t_y = 0$, au paragraphe 2.2.2 : une rotation d'axe z permet d'orienter l'inclinaison \mathbf{t} afin d'éliminer la composante t_y . Ainsi pour les cas pratiques que nous considérons dans cette thèse, nous orienterons les axes afin de nous ramener à une seule transformation hyperbolique.

2.3 Niveaux de Landau

J'ai à plusieurs reprises mentionné que l'introduction d'un champ magnétique dans les équations du mouvement donne aux vecteurs d'ondes des relations de commutations non-triviales et à l'origine de la quantification du spectre. On parle de quantification en niveaux de Landau. Cette quantification est un outil puissant pour l'analyse de la structure de bande et nous l'exploiterons pour la caractérisation de Cd_3As_2 au chapitre 3. Nous allons ici étudier les étapes du raisonnement en présence d'un champ électrique (analogue à une inclinaison) dans le cas classique, non-relativiste et pour l'équation de Weyl. Je montrerai dans chacun des cas la façon dont le spectre et le potentiel chimique sont affectés par le champ électrique. La structure matricielle de l'équation de Weyl donne lieu à des transformations analogues aux boosts de Lorentz du champ électromagnétique et du potentiel chimique. Nous montrerons que l'équation de Weyl compte aussi des modes chiraux stables sous les fluctuations du champ magnétique et que nous discuterons dans le cadre de l'argument de Aharonov-Casher [AC79].

2.3.1 Électrons non-relativistes

Approche classique.

En mécanique classique, le mouvement d'un électron non relativiste dans des champs magnétique \mathbf{B} et électrique \mathcal{E} transverses est décrit par l'équation de Newton

$$m_e \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e[\mathcal{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]. \quad (2.66)$$

La solution homogène \mathbf{v}_c de cette équation est celle en l'absence de champ électrique ($\mathcal{E} = 0$) et où la force est toujours orthogonale à la vitesse et au champ magnétique. La projection de (2.66) (i) selon \mathbf{v}_c donne v_c^2 constant et (ii) selon \mathbf{B} donne $\mathbf{v} \cdot \mathbf{B}$ constant : la trajectoire est donc circulaire dans le plan perpendiculaire à \mathbf{B} et en translation rectiligne uniforme le long de \mathbf{B} , c'est le *mouvement cyclotron* dessiné à la figure 2.6. Les coordonnées de la trajectoire sont les suivantes

$$\mathbf{r}_c(t) = \begin{pmatrix} X + r_c \cos(\omega_c t + \phi) \\ Y + r_c \sin(\omega_c t + \phi) \\ z_0 + v_z t \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

où la pulsation cyclotron est $\omega_c = eB/m$ et la position transverse moyenne (X, Y) , le rayon cyclotron r_c , la position z_0 et la vitesse v_z selon z dépendent toutes des conditions initiales une fois la solution particulière

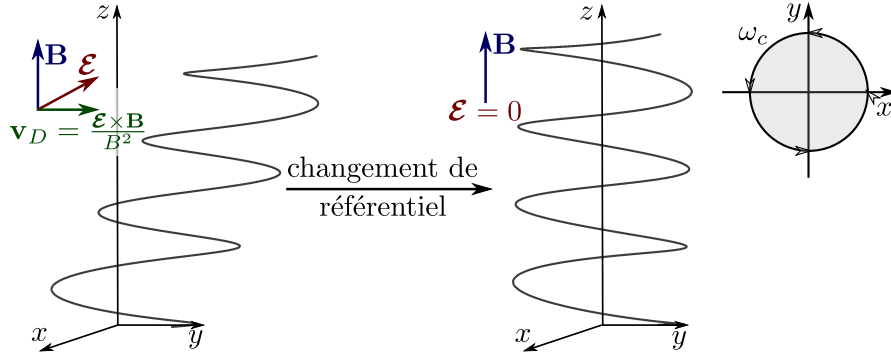


FIGURE 2.6 – Mouvement cyclotron en présence et en l’absence d’un champ électrique \mathcal{E} . L’encadré à droite représente le mouvement dans le plan xy en l’absence de champ électrique.

prise en compte. Dans le cas considéré $\mathcal{E} \cdot \mathbf{B} = 0$ et la solution particulière $\mathbf{v}_D = \mathcal{E} \times \mathbf{B} / B^2$ est indépendante du temps : ainsi, dans le référentiel à la vitesse \mathbf{v}_D tout se passe comme en l’absence de champ électrique et le mouvement est décrit par la solution homogène (2.67) [voir Figure 2.6]. D’ailleurs, avant de passer au traitement quantique, il est intéressant de remarquer que le passage à un référentiel à la vitesse \mathbf{v}^* modifie les champs magnétique et électrique *uniformes* de la façon suivante

$$(\text{covariance de l'équation de Newton, } \mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v} + \mathbf{v}^*) : \begin{cases} \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}' = \mathcal{E} + \mathbf{v}^* \times \mathbf{B}, \\ \mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B}' = \mathbf{B}. \end{cases} \quad (2.68)$$

Cette transformation traduit la covariance galiléenne de l’équation de Newton qui n’est valable que pour $|\mathbf{v}^*| \ll c$. Au delà, les champs électromagnétiques se transforment en suivant la covariance des équations de Maxwell, fondamentale pour que la célérité de la lumière soit indépendante du référentiel choisit, dont l’expression est

$$(\text{covariance des équations de Maxwell, } \mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v} + \mathbf{v}^*) : \begin{cases} \mathcal{E}_{\parallel} \rightarrow \mathcal{E}'_{\parallel} = \mathcal{E}_{\parallel}, \\ \mathcal{E}_{\perp} \rightarrow \mathcal{E}'_{\perp} = \gamma (\mathcal{E}_{\perp} + \mathbf{v}^* \times \mathbf{B}), \\ \mathbf{B}_{\parallel} \rightarrow \mathbf{B}'_{\parallel} = \mathbf{B}_{\parallel}, \\ \mathbf{B}_{\perp} \rightarrow \mathbf{B}'_{\perp} = \gamma (\mathbf{B}_{\perp} - \mathbf{v}^* \times \mathcal{E} / c^2), \end{cases} \quad (2.69)$$

où $\beta = \mathbf{v}^* / c$ et $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$. Dans le cas présent, les deux transformations coïncident à la limite où $v \ll c$. Dans le cas de l’équation de Weyl, nous verrons à la section (2.3.2) que la transformation des champs électrique et magnétique s’apparente à celle de l’équation (2.69) mais où la célérité c est remplacée par la vitesse de Fermi $v_F \ll c$ des électrons.

Approche quantique.

Changement de référentiel et choix de jauge. Comme nous l’avons indiqué à la section 1.3.1 à une faible température, une faible densité et un fort champ magnétique le système devient sensible aux fluctuations quantiques du rayon cyclotron qui est de l’ordre de grandeur de la longueur magnétique

$$\ell_B = \sqrt{\hbar / eB} \approx 26 \text{ nm} / \sqrt{B [\text{T}]} . \quad (2.70)$$

On introduit le champ magnétique au Hamiltonien $\hat{H} = p^2 / 2m$ en substituant l’impulsion $\mathbf{p} \rightarrow \boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ où \mathbf{A} est le potentiel vecteur tel que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Le champ électrique \mathcal{E} transverse à \mathbf{B} est introduit au moyen du potentiel scalaire $V(\mathbf{x}) = V_0 - \mathcal{E} \cdot \mathbf{x}$ tel que $\mathcal{E} = -\nabla V(\mathbf{x})$. L’impulsion généralisée $\boldsymbol{\pi}$ vérifie les relations de commutation $[\pi_i, \pi_j] = -ie\hbar \epsilon_{ijk} B_k$ que nous avons déjà rencontré à la section 2.2.1. Comme dans le cas classique, il s’agit maintenant de simplifier ces expressions. Une rotation des axes qui aligne \mathbf{e}_z selon \mathbf{B} permet d’écrire, comme pour le raisonnement qui a mené à l’équation (2.37),

$$[\pi_x, \pi_y] = -i \text{sgn}(B) / \ell_B^2 \quad [\pi_x, \pi_z] = 0 \quad [\pi_y, \pi_z] = 0. \quad (2.71)$$

De plus, la rotation d'axe z qui aligne \mathbf{e}_y selon \mathcal{E} permet d'écrire $V(\mathbf{x}) = V_0 - \mathcal{E}y$, tel que discuté au paragraphe 2.2.2. Afin de traiter l'influence du champ électrique il est pratique d'utiliser une jauge telle que le potentiel vecteur ne dépend que de la coordonnée y , soit $\mathbf{A} = -By\mathbf{e}_x$: c'est la *jauge de Landau*. Après ces transformations le Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{(p_x - eBy)^2}{2m} + 2em\mathcal{E}y - eV_0 = \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m} + \frac{[(p_x - m\frac{\mathcal{E}}{B}) - eBy]^2}{2m} + \frac{\mathcal{E}}{B} \left(p_x - \frac{m\mathcal{E}}{2B} \right) - eV_0. \quad (2.72)$$

De la même façon que dans le cas classique où le changement de référentiel à la vitesse \mathbf{v}_d se traduit par $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}' = \mathbf{p} - m\mathbf{v}_d$, nous pouvons redéfinir l'impulsion par $p_x \rightarrow p'_x = p_x - m\mathcal{E}/B$ tel que

$$\hat{H} = \frac{p_y'^2 + p_z'^2}{2m} + \frac{[p'_x - eBy]^2}{2m} + \frac{\mathcal{E}}{B} \left(p'_x + \frac{m\mathcal{E}}{2B} \right) - eV_0. \quad (2.73)$$

Avec le choix de jauge sur le potentiel vecteur, le Hamiltonien ne dépend pas explicitement de la position x et le terme additionnel n'est qu'une constante que l'on peut absorber par le choix de jauge scalaire $eV_0 = \frac{\mathcal{E}}{B} \left(p_x - \frac{m\mathcal{E}}{2B} \right)$. Ce choix de jauge affecte l'expression du potentiel chimique et nous y reviendrons à l'équation (2.83). Le Hamiltonien s'écrit alors

$$\hat{H} = \frac{p_y'^2 + p_z'^2}{2m} + \frac{(p'_x - eBy)^2}{2m} \equiv \pi'^2/2m, \quad (2.74)$$

ce qui est similaire à la situation sans champ électrique et où les relations de commutation (2.71) sont valables.

Opérateurs d'échelle. On résout le Hamiltonien (2.74) par analogie avec l'oscillateur harmonique [Goe09]. Pour cela on introduit l'opérateur d'échelle entre les coordonnées non-commutantes π_x, π_y : $\hat{a} = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} (\alpha\pi_x - i\beta\pi_y)$ où les constantes $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ sont telles que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \text{sgn}(B)\alpha\beta = 1. \quad (2.75)$$

L'opérateur nombre $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ a comme spectre les entiers $n \in \mathbb{N}$ dont les vecteurs propres $|n\rangle$ vérifient $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ et $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ ce qui permet de construire la base des *états nombres*

$$\text{(définition des états nombre)} : \hat{a}|0\rangle = 0, \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle. \quad (2.76)$$

De façon générale, on peut réécrire toute expression quadratique sous la forme

$$u\pi_x^2 + v\pi_y^2 = \frac{1}{2\ell_B^2} \left(\frac{u}{\alpha^2} - \frac{v}{\beta^2} \right) (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}) + \frac{1}{2\ell_B^2} \left(\frac{u}{\alpha^2} + \frac{v}{\beta^2} \right) (2\hat{n} + 1). \quad (2.77)$$

Alors, tant que $uv > 0$, on peut choisir $(\alpha/\beta)^2 = u/v$ en gardant $\alpha\beta = \text{sgn}(B)$ pour obtenir

$$\text{(réécriture d'une forme quadratique)} : \begin{cases} \hat{a} = \frac{\ell_B}{\sqrt{2\sqrt{uv}}} (\sqrt{|u|}\pi_x - i\text{sgn}(B)\sqrt{|v|}\pi_y) \\ u\pi_x^2 + v\pi_y^2 = \text{sgn}(u)(2\hat{n} + 1)\sqrt{uv}/\ell_B^2 \end{cases}. \quad (2.78)$$

Niveaux de Landau. Pour une particule non-relativiste dans des champs magnétique \mathbf{B} et électrique \mathcal{E} transverses dont l'équation est (2.74), on introduit l'opérateur d'échelle $\hat{a} = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} (\pi_x - i\text{sgn}(B)\pi_y)$, le Hamiltonien s'écrit alors

$$\hat{H} = p_z^2/2m + \hbar\omega_c(\hat{n} + 1/2), \quad (2.79)$$

où $\omega_c = eB/m$. Le spectre des états propres est $E_n(p_z) = p_z^2/2m + \hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})$ avec $n \in \mathbb{N}$ [Thi15, Goe09] et n'est pas affecté par le champ électrique [voir Figure 2.7]. Les bandes permises sont régulièrement espacées, proportionnellement à B , on les appelle les *bandes de Landau*.

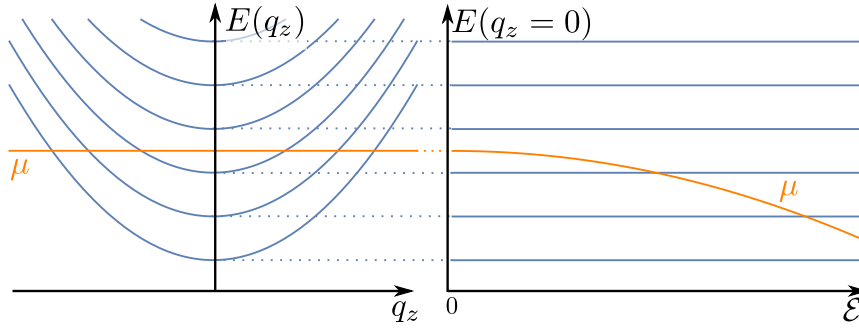


FIGURE 2.7 – Spectres des niveaux de Landau d'un électron non-relativiste en présence d'un champ électrique transverse \mathcal{E} . Les bords de bande sont indépendants de \mathcal{E} et le potentiel chimique μ (en orange) change avec le champ électrique, pour un nombre d'électrons fixé et en négligeant les effets de surface.

Les états propres sont ceux de l'opérateur \hat{n} et leur expression dépend de la jauge choisie. Dans le cadre de cette thèse, nous utiliserons la jauge de Landau, $\mathbf{A} = -By\mathbf{e}_y$, car elle facilite le traitement de l'inclinaison et du champ électrique. Dans ce cas, l'impulsion p_x reste un bon nombre quantique et pour la dimension y on obtient

$$\langle p_y \rangle = 0, \quad \langle y \rangle = (p_x - m\mathcal{E}/B) / eB = p'_x / eB. \quad (2.80)$$

La position moyenne $Y = \langle y \rangle$ de l'orbite joue le même rôle que la constante Y de l'équation (2.67). L'échantillon étant de taille finie, $\langle y \rangle \in [0, L_y]$ et $p_x = 2\pi k/L_x$ où $k \in \mathbb{Z}$, l'impulsion k_x peut prendre

$$N_B = L_x L_y / \ell_B^2 = \Phi / \Phi_0 \quad (2.81)$$

valeurs différentes, où Φ est le flux magnétique et $\Phi_0 = e/h$ est le quantum de flux. Chaque niveau de Landau étant indépendant de p_x on en déduit qu'ils sont chacun dégénérés N_B fois [Thi15, Goe09], cependant des fluctuations du champ magnétique peuvent lever cette dégénérescence et nous verrons plus loin qu'elle reste valable pour le niveau $n = 0$ du cas relativiste [AC79].

Potentiel chimique. On considère que le nombre d'électrons du système est fixe. Dans ce cas, à l'équilibre électrostatique et électrochimique le potentiel chimique μ et le potentiel électrique $V = V_0 - \mathcal{E}\langle y \rangle$ sont liés par

$$\mu + e(V_0 - \mathcal{E}\langle y \rangle) = \mu_0 \quad (2.82)$$

où μ_0 est le potentiel chimique en l'absence de champ électrique. Avec le choix de jauge pris pour \mathbf{A} et V_0 , on obtient l'expression suivante du potentiel chimique et indépendante du choix de jauge

$$\mu = \mu_0 - mv_d^2/2. \quad (2.83)$$

Cette expression du potentiel chimique dépend des choix de jauge que nous avons exprimé aux équations (2.72) et (2.73), elle présente l'avantage d'avoir un décalage en énergie constant. Ce décalage en énergie est similaire à celui que l'on obtient lors du passage au référentiel à la vitesse v_d à l'équation (2.66) avec l'apparition d'un terme d'énergie cinétique, comme p_x est centré autour de mv_d . On représente l'évolution du potentiel chimique avec le champ électrique \mathcal{E} sur la Figure 2.7, comme les bandes sont indépendantes de \mathcal{E} le potentiel chimique est susceptible de croiser des bandes de Landau. Il faut cependant pondérer cet argument par l'éventualité d'un écrantage de la part des états de surface et qui empêche le champ électrique d'influer sur le potentiel chimique de volume [voir Chapitre 4].

Le traitement détaillé que nous venons de réaliser a permis de montrer que dans le cas non relativiste le champ électrique ne modifie pas les bandes de Landau mais affecte seulement le potentiel chimique μ . Ce n'est pas le cas de l'équation de Weyl où le spectre est affecté par le champ électrique et des transformations analogues à (2.69) apparaissent.

2.3.2 Électrons relativistes et structure de bande

L'analogie entre l'oscillateur harmonique et les niveaux de Landau ne semble valable que dans le cas non-relativiste, par l'apparition d'une forme quadratique avec les impulsions telle que (2.77). Cependant, on retrouve ce même comportement quand on insère l'un des Hamiltonien de la section 2.1 à la place de l'énergie dans l'équation séculaire. Par exemple, pour un modèle 2×2 de la forme $\hat{H} = h_0 \hat{\mathbb{1}} + \mathbf{h} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ on obtient [voir Annexe B.4]

$$(\hat{H} - h_0 \hat{\mathbb{1}})^2 = \mathbf{h}^2 \hat{\mathbb{1}} + \sum_{i < j} i \varepsilon_{ijk} [h_i, h_j] \hat{\sigma}_k. \quad (2.84)$$

Dans la situation où le champ magnétique est orienté selon l'axe z , les modèles de cône de Weyl (2.2) et de fusion de cônes (2.15) sans inclinaison ($\mathbf{t} = 0 \Leftrightarrow h_0 = 0$) donnent, après la substitution $\mathbf{q} \rightarrow \boldsymbol{\pi} = \mathbf{q} + e\mathbf{A}$,

$$\hat{H}^2 = [h_3^2(q_z) + (v_x \pi_x)^2 + (v_y \pi_y)^2] \hat{\mathbb{1}} + \text{sgn}(v_x v_y B) |v_x v_y| \hat{\sigma}_z. \quad (2.85)$$

où $h_3(q_z) = v_z q_z$ pour le cône de Weyl (2.2) et $h_3(q_z) = [k_z^2 - (\Delta k/2)^2]/2m$ pour la fusion des cônes (2.15). On retrouve la forme quadratique déjà discutée à l'équation (2.78) et un bon choix d'opérateur d'échelle s'avère être $\hat{a} = \ell_B (v_x \pi_x - i \text{sgn}(v_x v_y B) v_y \pi_y) / \sqrt{2|v_x v_y|}$ tel que

$$\hat{H}^2 = h_3^2(k_z) + 2 \frac{|v_x v_y|}{\ell_B^2} \left\{ \hat{n} + \frac{1}{2} [1 + \text{sgn}(v_x v_y B) \hat{\sigma}_z] \right\}. \quad (2.86)$$

De cette relation on en déduit que pour $v_x v_y B > 0$ un état propre à l'énergie E a nécessairement la forme suivante $\Psi_n = [\alpha |n-1\rangle, \beta |n\rangle]$. Par la suite on étudiera ce cas de figure mais en gardant à l'esprit que le cas $v_x v_y B < 0$ donne $\Psi_n = [\alpha |n\rangle, \beta |n-1\rangle]$. La dégénérescence des niveaux de Landau est toujours donnée par N_B introduit à l'équation (2.81). Le Hamiltonien écrit en terme des opérateurs d'échelle est

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} h_3(q_z) & \sqrt{2|v_x v_y|} \hat{a} / \ell_B \\ \sqrt{2|v_x v_y|} \hat{a}^\dagger / \ell_B & -h_3(q_z) \end{pmatrix}. \quad (2.87)$$

Une fois projeté sur les solutions $\Psi_n = [\alpha |n-1\rangle, \beta |n\rangle]$, le Hamiltonien pour les coefficients $[\alpha, \beta]$ de la fonction d'onde est

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} h_3(q_z) & \sqrt{2n|v_x v_y|} / \ell_B \\ \sqrt{2n|v_x v_y|} / \ell_B & -h_3(q_z) \end{pmatrix}. \quad (2.88)$$

Comme on l'explique en annexe B.4, le spectre pour $n \geq 1$ est $E_{\lambda n}(q_z) = \lambda \sqrt{d_3^2(q_z) + 2n|v_x v_y| / \ell_B^2}$ (B.22) et les solutions propres sont (B.23)

$$\Psi_{\lambda, n}(d_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \left(1 + \lambda \frac{h_3}{E_{+n}(q_z)}\right)^{1/2} |n-1\rangle \\ \left(1 - \lambda \frac{h_3}{E_{+n}(q_z)}\right)^{1/2} |n\rangle \end{bmatrix}. \quad (2.89)$$

Le mode $n = 0$ se distingue des autres car il n'est associé qu'à une seule solution dont l'énergie propre est $E_{n=0}(q_z) = -\text{sgn}(B v_x v_y) h_3(q_z)$ et la solution propre est (i) $\Psi_{n=0} = [0, |0\rangle]$ si $v_x v_y B > 0$ ou (ii) $\Psi_{n=0} = [|0\rangle, 0]$ si $v_x v_y B < 0$. Cet état est stable vis-à-vis des fluctuations du champ magnétique mais avant d'en discuter nous allons aborder l'influence d'un champ électrique \mathcal{E} transverse sur les états propres.

Régime magnétique et électrique. La présence d'un champ électrique \mathcal{E} transverse au champ magnétique $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$ est décrite par l'introduction du potentiel scalaire $V(\mathbf{x}) = V_0 - \mathcal{E} y$, le Hamiltonien est alors

$$\hat{H} = e(\mathcal{E} y - V_0) \hat{\mathbb{1}} + \begin{pmatrix} h_3(q_z) & v_x(q_x - eBy) - i v_y q_y \\ v_x(q_x - eBy) + i q_y \pi_y & -h_3(q_z) \end{pmatrix}. \quad (2.90)$$

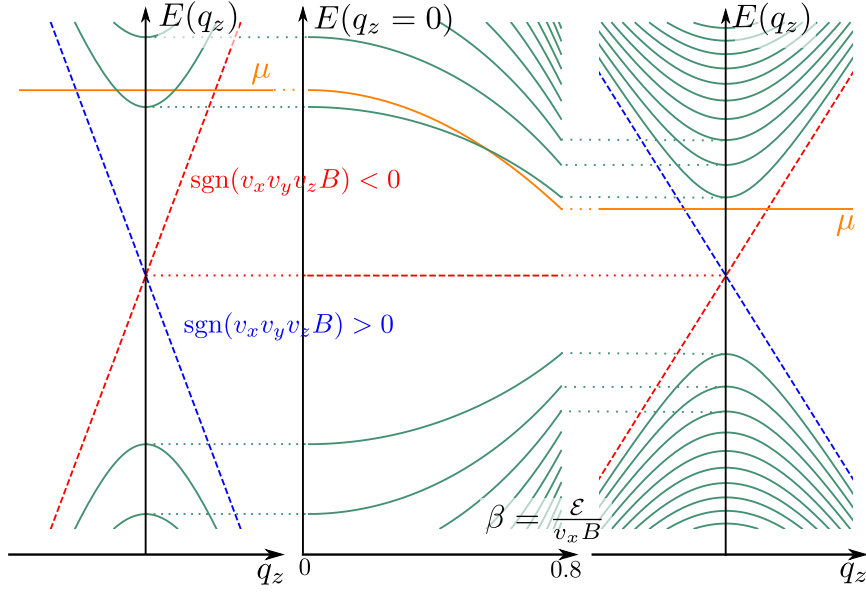


FIGURE 2.8 – Spectres des niveaux de Landau de l'équation d'un seul cône de Weyl sans inclinaison ($\mathbf{t} = 0$) en l'absence (à gauche, $\beta = 0$) et en présence (à droite, $\beta = \mathcal{E}/(v_x B) = 0.8$) d'un champ électrique transverse \mathcal{E} . Les courbes en pointillés correspondent au niveau $n = 0$ dans le cas où $\text{sgn}(v_x v_y v_z B) > 0$ (en bleu) et $\text{sgn}(v_x v_y v_z B) < 0$ (en rouge). La figure central reproduit le déplacement des bords de bandes en fonction du champ électrique et la courbe orange donne l'évolution du potentiel chimique μ avec le champ électrique.

où, pour simplifier les expressions, on se place en jauge de Landau $\mathbf{A} = -By\mathbf{e}_x$. On observe que l'on est dans une situation analogue à celle obtenue en présence d'une inclinaison $\mathbf{t} = (t_x, 0, t_z)$ à l'équation (2.48), comme pour l'équation de Dirac bidimensionnelle [GFMP09]. En effet la décomposition du Hamiltonien sous la forme $\hat{H} = h_0 \hat{1} + \mathbf{h} \cdot \hat{\sigma}$ donne les relations de commutation suivantes

$$[h_0, h_2] = i\hbar v_y \mathcal{E} = -i \text{sgn}(B) t_d v_x v_y / \ell_B^2, \quad [h_1, h_2] = -i \text{sgn}(B) v_x v_y / \ell_B^2, \quad [h_i, h_j] = 0 \text{ sinon}, \quad (2.91)$$

où l'on a introduit le paramètre d'inclinaison t_d associé à la vitesse de dérive $\mathbf{v}_d = \mathcal{E} \times \mathbf{B} / B^2 = \frac{\mathcal{E}}{B} \mathbf{e}_x \equiv v_d \mathbf{e}_x$ tel que $t_d = -v_d / v_x$. Nous avons montré à l'équation (2.49) qu'en fonction de la valeur de t_d , une transformation hyperbolique, $|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = \mathcal{N} e^{-\eta \hat{\sigma}_x / 2} |\Psi\rangle$ avec \mathcal{N} une constante de normalisation, simplifie ces relations de commutation. On rencontre les deux situations suivantes :

- *Régime magnétique.* Dans ce cas $-1 < t_d < 1$ et pour $\beta \equiv \tanh(\eta) = -t_d = \mathcal{E}/(v_x B)$, l'équation de Schrödinger s'écrit $\hat{H}' |\Psi'\rangle = E |\Psi'\rangle$ avec

$$\hat{H}' = (v_d q_x - eV_0) \hat{1} + \begin{pmatrix} h'_3(q_z) & v_x [q_x + \delta q - eB'y] - i v'_y q_y \\ v_x [q_x + \delta q - eB'y] + i v'_y q_y & -h_3(q_z) \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

où $h'_3(q_z) = \sqrt{1 - \beta^2} h_3(q_z)$, $v'_y = \sqrt{1 - \beta^2} v_y$, $B' = (1 - \beta^2) B$ et $\delta q_E = -\beta(E + eV_0) / v_x$. Cet Hamiltonien est similaire [AP67, LSB07] à celui de l'équation de Weyl avec champ magnétique mais *sans* champ électrique ($\mathcal{E} = 0$) (2.87)

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} h'_3(q_z) & \sqrt{2|v_x v'_y|} \hat{a}_E / \ell_{B'} \\ \sqrt{2|v_x v'_y|} \hat{a}_E^\dagger / \ell_{B'} & -h'_3(q_z) \end{pmatrix}, \quad (2.93)$$

où l'on a fixé la jauge $eV_0 = v_d q_x$, ce qui aura une incidence sur le potentiel chimique. On introduit aussi l'opérateur d'échelle $\hat{a}_E = (1 - \beta^2)^{3/4} \ell_B \{v_x [q_x + \delta q_E - eB'y] - i v'_y q_y\} / \sqrt{2|v_x v'_y|}$ qui dépend explicitement de l'énergie E à travers δq_E mais qui cependant définit toujours l'opérateur nombre $\hat{n}_E = \hat{a}_E^\dagger \hat{a}_E$. Les solutions

sont donc similaires à celles en l'absence du champ électrique avec, pour $n \geq 1$, dans la *base originale*

$$E_{\lambda n}(q_z, \beta) = \lambda \sqrt{(1 - \beta^2) h_3^2(q_z) + 2n(1 - \beta^2)^{3/2} |v_x v_y| / \ell_B^2} \quad (2.94)$$

$$\Psi_{\lambda, n}(d_3, \beta) = \frac{\hat{1} + \tanh(\eta/2) \hat{\sigma}_x}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \left(1 + \lambda \frac{(1 - \beta^2)^{1/2} h_3}{E_{+n}(q_z)}\right)^{1/2} |n-1\rangle_E \\ \left(1 - \lambda \frac{(1 - \beta^2)^{1/2} h_3}{E_{+n}(q_z)}\right)^{1/2} |n\rangle_E \end{bmatrix}. \quad (2.95)$$

Le mode $n = 0$ a quant à lui le spectre $E_0(q_z, \beta) = -\text{sgn}(v_x v_y B) (1 - \beta^2)^{1/2} h_3(q_z)$ et son état propre est, dans la base originale, $\Psi_0 = (\hat{1} + \tanh(\eta/2) \hat{\sigma}_x) |0\rangle_E \otimes |-\text{sgn}(v_x v_y B)\rangle$. Le spectre de ces solutions est représenté sur la Figure 2.8 pour différentes valeurs du champ électrique transverse.

Les états nombres $|n\rangle_E$ dépendent explicitement de l'énergie E considérée et le produit scalaire entre deux états nombres nécessite de prendre en compte leur différence en énergie tel qu'expliqué en Annexe B.6. L'apparition de cette dépendance en énergie est due au décalage des orbites pour différentes énergies à cause de l'inclinaison, tel qu'on l'aperçoit à la Figure 2.1 (b) et que l'on calcule explicitement en jauge de Landau

$$\langle q_y \rangle = 0, \quad \langle y \rangle_E = (q_x + \delta q_E) / eB'. \quad (2.96)$$

Pour un nombre d'électrons fixé, cela nous permet de déduire qu'à l'équilibre électrostatique et électrochimique la relation (2.82) s'écrit

$$\mu = (1 - \beta^2) \mu_0 = \mu_0 - m^* v_d^2 / 2. \quad (2.97)$$

où $m^* = 2\mu_0 / v_x^2$. Cette modification du potentiel chimique rappelle l'équation (2.83) obtenue dans le cas non relativiste, sauf que cette fois le potentiel chimique change comme lors d'un boost de Lorentz et le rôle de masse effective est tenu par le potentiel chimique μ_0 en l'absence de champ électrique ($\mathcal{E} = 0$). Comme les bandes sont affectées par le champ électrique de façon différente que le potentiel chimique, on s'attend à ce que la mer de Fermi croise des niveaux de Landau pour un champ électrique croissant comme illustré à la Figure 2.8.

- *Régime électrique.* Dans ce cas $-1 < 1/t_d < 1$ et pour $\beta \equiv \tanh(\eta) = -1/t_d$, l'équation de Schrödinger s'écrit $\hat{H}' |\Psi'\rangle = E |\Psi'\rangle$ tel que

$$\hat{H}' = e\mathcal{E}' y \hat{1} + \begin{pmatrix} h_3'(q_z) & v_x [q_x + \delta q_E] - i v_y' q_y \\ v_x [q_x + \delta q_E] + i v_y' q_y & -h_3(q_z) \end{pmatrix} \quad (2.98)$$

où $h_3'(q_z) = \sqrt{1 - \beta^2} h_3(q_z)$, $v_y' = \sqrt{1 - \beta^2} v_y$, $\mathcal{E}' = (1 - \beta^2) \mathcal{E}$ et $\delta q_E = -\beta (E + eV_0) / v_x$. On a fixé la jauge $eV_0 = \beta v_x q_x$ et l'équation est similaire à l'équation de Weyl avec champ électrique mais *sans* champ magnétique ($\mathbf{B} = 0$), on parle de régime électrique et dans ce cas on obtient un spectre continu dont les solutions sont des fonctions d'ondes délocalisées [AP67, LSB07, Sau31, RkY84].

La situation où des champs magnétique et électrique sont tout deux présents en même temps s'avère donc bien différente pour l'équation de Weyl que dans le cas non relativiste pour deux raisons (i) le spectre dépend explicitement du champ électrique appliqué au système et, (ii) il existe un champ électrique critique au-delà duquel il n'y a plus de niveaux de Landau. Les transformations du champ électromagnétique que l'on observe ressemblent à celles de la covariance des équations de Maxwell (2.69) où le rôle de la célérité c est tenu par la vitesse de Fermi $v_F = v_x$, mais dont l'origine est seulement la covariance de l'équation de Weyl et pour des structures de bandes plus riches on peut s'attendre à des transformations plus exotiques.

Analogie entre l'inclinaison \mathbf{t} et le champ électrique \mathcal{E} . Comme je l'ai fait remarquer et tel que déjà discuté pour l'équation de Dirac à deux dimensions [GFMP09], l'inclinaison \mathbf{t} tient le même rôle que le champ électrique si sa composante transverse $\mathbf{t}_\perp = \mathbf{t} \times \mathbf{B} / B$ est non-nulle. On peut alors reprendre le même raisonnement que ci-dessus et la limite magnétique est obtenue pour $|\mathbf{t}_\perp| < 1$ soit $|\sin(\alpha)| < 1/|\mathbf{t}|$ où α est l'angle entre le champ

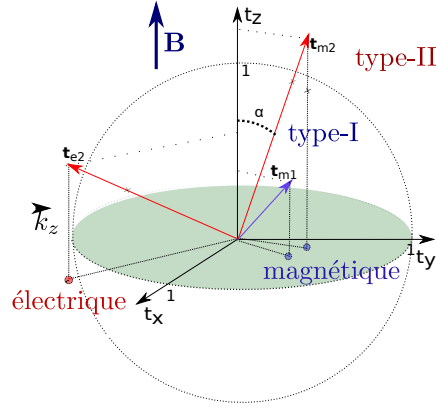


FIGURE 2.9 – On représente le vecteur d’inclinaison \mathbf{t} pour des cônes de type-I (en bleu) et de type-II (en rouge). La sphère délimite le domaine des deux phases et sous l’effet d’un champ magnétique seule la composante transverse, ici dans le plan xy , influence la quantification en niveaux de Landau.

magnétique et l’inclinaison. On observe ainsi que même un cône de Weyl de type-II ($t > 1$) peut avoir des niveaux de Landau, à condition que l’angle entre l’inclinaison et le champ magnétique ne soit pas trop grand. J’ai traduit cette condition graphiquement à la Figure 2.9 où le régime magnétique est atteint si seulement la projection de l’inclinaison \mathbf{t} dans le plan transverse au champ magnétique se trouve dans le disque vert.

Pour les calculs, on oriente les axes pour que $\mathbf{t} = (t_{\perp} = \sqrt{t_x^2 + t_y^2}, 0, t_z)$ et on réalise alors la transformation hyperbolique $|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = \mathcal{N} e^{-\eta \hat{\sigma}_x / 2} |\Psi\rangle$ avec $\beta \equiv \tanh(\eta) = -t_{\perp}$. L’équation de Schrödinger s’écrit alors $\hat{H}'|\Psi'\rangle = E|\Psi'\rangle$ avec

$$\hat{H}' = v_z t_z q_z \hat{1} + \begin{pmatrix} h'_3(q_z) & v_x [(1 - \beta^2)(q_x - eBy) + \delta q_{E,q_z}] - i v'_y q_y \\ v_x [(1 - \beta^2)(q_x - eBy) + \delta q_{E,q_z}] + i v'_y q_y & -h'_3(q_z) \end{pmatrix} \quad (2.99)$$

où $h'_3(q_z) = \sqrt{1 - \beta^2} h_3(q_z)$, $v'_y = \sqrt{1 - \beta^2} v_y$ et $\delta q_{E,q_z} = \beta(v_z t_z q_z - E) / v_x$. Dans ce cas les énergies propres sont

$$\begin{cases} E_{n,\lambda}(q_z) = v_z t_z q_z + \lambda \sqrt{(1 - \beta^2)^2 v_z^2 q_z^2 + 2n(1 - \beta^2)^{3/2} |v_x v_y| / \ell_B^2}, \\ E_0(q_z) = v_z [t_z - \text{sgn}(v_x v_y B) \sqrt{1 - \beta^2}] q_z = v'_z [t'_z - \text{sgn}(v_x v_y B)] q_z. \end{cases} \quad (2.100)$$

où $v'_z = \sqrt{1 - \beta^2} v_z$ et $t'_z = t |\cos(\alpha)| / \sqrt{1 - t^2 \sin^2(\alpha)}$. Le spectre des niveaux de Landau est tracé à la Figure 2.10. Il est fréquent d’associer la chiralité unidimensionnelle du niveau $n = 0$, $\chi_{n=0}^{(1D)} = \text{sgn} \left\{ v_z [t_z - \text{sgn}(v_x v_y B) \sqrt{1 - \beta^2}] \right\}$, à la chiralité tridimensionnelle des cônes de Weyl $\chi^{(3D)} = \text{sgn}(v_x v_y v_z)$ [voir section 2.1.1]. La relation (2.100) montre que cette relation tient dans le cas des cônes de type-I où $\chi_{I,n=0}^{(1D)} = -\text{sgn}(v_x v_y v_z B)$ mais ce n’est pas vrai dans le cas des cônes de Weyl de type-II où l’inclinaison prédomine dans la relation de dispersion, $\chi_{II,n=0}^{(1D)} = \text{sgn}(v_z t_z)$. La conservation de la chiralité nécessite donc soit (i) la présence de niveaux de Landau associés au comportement de la structure de bande en dehors des cônes de Weyl, soit (ii) une contrainte reliant l’inclinaison à la chiralité, tel que pour les modèles aux équations (2.15) et (2.17) où l’inclinaison change de signe pour chaque chiralité. On remarque aussi que la phase critique $t \rightarrow 1$ est mal définie et donne lieu à des niveaux $n = 0$ non-dispersifs. Le potentiel chimique ne change pas, contrairement à ce que l’on a obtenu en présence d’un champ électrique à l’équation (2.97).

L’équation de Weyl sous champ magnétique donne lieu à des niveaux de Landau si l’inclinaison est assez faible ($|\mathbf{t}| < 1$, type-I) ou si l’angle entre l’inclinaison et le champ magnétique α est suffisamment petit [voir Figure 2.1]. Cependant, si l’amplitude de l’inclinaison est importante ($|\mathbf{t}| > 1$) et que l’angle α est grand, alors on perd la quantification en niveaux de Landau de l’équation de Weyl. Il est alors nécessaire de d’étendre la description de la structure de bande au delà du point nodal [LLD⁺16, Kos16, ODB16, TBUK17]. La discussion précédente a fait l’objet d’un article [TCG16] qui a été soumis pour publication à la même période que deux autres travaux [KAH16, UB16] et dont je conseille la lecture.

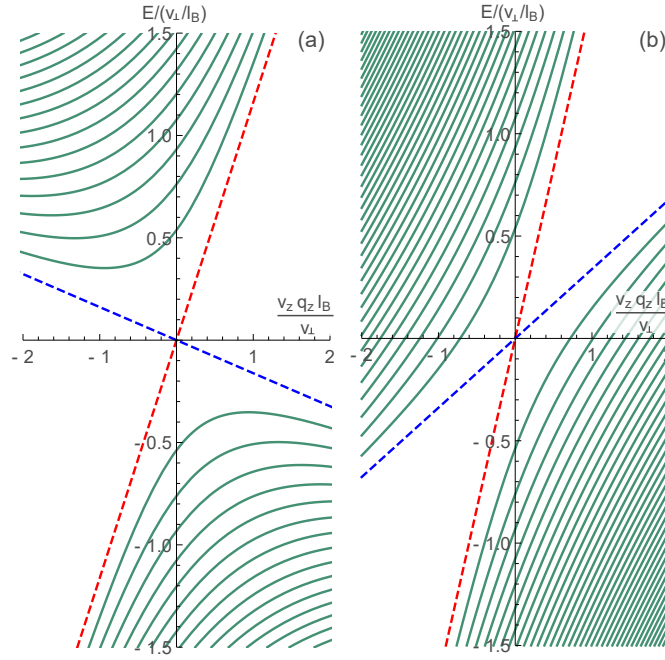


FIGURE 2.10 – Spectres des niveaux de Landau de l'équation d'un seul cône de Weyl de type-I (à gauche) et de type-II (à droite). Les droites en pointillés correspondent au niveau de Landau $n = 0$ pour $\text{sgn}(v_x v_y v_z B) > 0$ (en bleu) et $\text{sgn}(v_x v_y v_z B) < 0$ (en rouge). On observe que pour les semi-métaux de type-II les bandes supérieures et inférieures vont traverser la mer de Fermi et que les modes chiraux dispersent toujours dans le sens donné par l'inclinaison.

2.3.3 Stabilité du mode $n = 0$ et chiralité

La variation spatiale des composantes (h_0, \mathbf{h}) d'un Hamiltonien que l'on a décomposé sur une base $\hat{\mathbf{J}}$ de matrices hermitiennes

$$\hat{H}_{h_0, \mathbf{h}} = h_0(\mathbf{q}) \mathbb{1} + \mathbf{h}(\mathbf{q}) \cdot \hat{\mathbf{J}}, \quad (2.101)$$

peut donner lieu à un spectre discret. Nous l'avons explicitement montré en présence d'un champ magnétique uniforme $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ dans le cas des niveaux de Landau et nous l'avons mentionné au Chapitre 1 par la présence d'états de surface lors de variations du gap $\Delta(x)$ à l'interface de deux matériaux. Nous aborderons plus en détail le cas des états de surface au Chapitre 4. Dans ces deux cas de figures il est apparu que le Hamiltonien de Weyl possède des modes $n = 0$ qui ne dépendent pas explicitement des paramètres du potentiel. Cette propriété a été formalisée par Aharonov et Casher [AC79] pour les niveaux de Landau. Ils ont montré que pour l'équation de Dirac sans masse, le niveau de Landau $n = 0$ est insensible aux fluctuations dans le plan xy du champ magnétique $\mathbf{B} = B(x, y)\mathbf{e}_z$. Cet argument s'appuie sur la symétrie chirale que nous allons maintenant discuter et son extension en présence d'inclinaison a été traitée par [KHMA11, HKA15] dont je propose ici une reformulation à trois dimensions et à l'aide des transformations hyperboliques. Cela nous permettra au chapitre 4 de discuter la stabilité des états de surface topologiques.

Pour la suite, on considère le Hamiltonien de Weyl en présence d'un champ magnétique $\mathbf{B} = B(x, y)\mathbf{e}_z$ décrit par le potentiel vecteur $\mathbf{A} = A_x(x, y)\mathbf{e}_x + A_y(x, y)\mathbf{e}_y$

$$\hat{H} = \underbrace{[v_z t_z q_z \hat{\mathbb{1}} + h_3(q_z) \hat{\sigma}_z]}_{\equiv \hat{H}_z} + \underbrace{[v_x (t_x \hat{\mathbb{1}} + \hat{\sigma}_z)(q_x + eA_x) + v_y (t_y \hat{\mathbb{1}} + \hat{\sigma}_y)(q_y + eA_y)]}_{\equiv \hat{H}_{xy}}, \quad (2.102)$$

où $h_3(q_z) = v_z q_z$ pour un cône seul (2.2) et $h_3(q_z) = (q_z^2 - (\Delta k/2)^2)/2m$ pour deux cônes proches de la fusion (2.15). On sépare l'équation de Schrödinger $(\hat{H} - E\hat{\mathbb{1}})|\Psi\rangle = 0$ en deux parties, l'une dépend explicitement des

positions dans le plan \hat{H}_{xy} et l'autre ne dépend que des autres paramètres $\hat{H}_{Ez} = E\hat{1} - \hat{H}_z$. On se ramène ainsi à l'analyse de l'équation suivante

$$\hat{H}_{xy}|\Psi\rangle = \hat{H}_{Ez}|\Psi\rangle. \quad (2.103)$$

Nous allons commencer par mettre en évidence la symétrie chirale de \hat{H}_{xy} puis nous discuterons la stabilité des modes $n = 0$.

Chiralité. Admettons que nous connaissons un opérateur chirale $\hat{\kappa}$ hermitien tel que $\hat{\kappa}^2 = \hat{1}$ et qui anticommute avec le Hamiltonien \hat{H}_{xy}

$$\{\hat{\kappa}, \hat{H}_{xy}\} = 0. \quad (2.104)$$

Nous construirons explicitement cet opérateur à la fin de ce paragraphe. On peut alors projeter l'équation (2.103) sur la base des états propres $|\pm\rangle$ de $\hat{\kappa}$ tel qu'expliqué dans [HKA15, Z88]

$$\begin{bmatrix} \langle +|\hat{H}_{xy}|+\rangle & \langle +|\hat{H}_{xy}|-\rangle \\ \langle -|\hat{H}_{xy}|+\rangle & \langle -|\hat{H}_{xy}|-\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle +|\hat{H}_{Ez}|+\rangle & \langle +|\hat{H}_{Ez}|-\rangle \\ \langle -|\hat{H}_{Ez}|+\rangle & \langle -|\hat{H}_{Ez}|-\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{bmatrix},$$

et comme \hat{H}_{xy} est chirale dans la base $|\pm\rangle$, $\langle +|\hat{H}_{xy}|+\rangle = 0 = \langle -|\hat{H}_{xy}|-\rangle$, on obtient l'équation générique

$$\begin{bmatrix} 0 & \hat{\alpha}_- \\ \hat{\alpha}_+ & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle +|\hat{H}_{Ez}|+\rangle & \langle +|\hat{H}_{Ez}|-\rangle \\ \langle -|\hat{H}_{Ez}|+\rangle & \langle -|\hat{H}_{Ez}|-\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{bmatrix}, \quad (2.105)$$

où $\hat{\alpha}_-(x, k_x)$, $\hat{\alpha}_+(x, k_x)$ sont des opérateurs qui vont jouer le rôle d'opérateurs d'échelle. Cette équation admet en principe les deux solutions suivantes $\Psi_1 = (0, \Psi_-)$ et $\Psi_2 = (\Psi_+, 0)$ auxquelles correspondent les équations de mode zéro [HKA15]

$$\text{(Équations de modes zéro)} \quad : \quad \begin{cases} \Psi_1 : & \begin{cases} \hat{\alpha}_-\Psi_- = \langle +|\hat{H}_{Ez}|-\rangle\Psi_- \\ \langle -|\hat{H}_{Ez}|-\rangle = 0 \end{cases} \\ \Psi_2 : & \begin{cases} \hat{\alpha}_+\Psi_+ = \langle -|\hat{H}_{Ez}|+\rangle\Psi_+ \\ \langle +|\hat{H}_{Ez}|+\rangle = 0 \end{cases} \end{cases}. \quad (2.106)$$

L'argument de Aharonov-Casher discute de la stabilité de ces deux modes, comme nous le verrons à la section suivante mais avant nous allons explicitement dériver $\hat{\kappa}$ pour l'équation de Weyl (2.102).

La présence de l'identité $\hat{1}$ dans \hat{H}_{xy} complique la recherche d'une symétrie chirale et dans ce cas il s'avère que cette symétrie doit être recherchée sous une forme plus générale [KHMA11, HKA15, KAH16] où $\hat{\kappa}$ n'est pas hermitien. La symétrie chirale est alors définie selon, avec $\hat{\kappa}$ telle que $\hat{\kappa}^2 = \kappa^2\hat{1}$,

$$\text{(Symétrie chirale)} \quad : \quad \hat{\kappa}^\dagger \hat{H}_{xy} \hat{\kappa} = -\hat{H}_{xy}. \quad (2.107)$$

Une telle symétrie chirale permet de retrouver l'équation (2.106) sur la base des modes propres de $\hat{\kappa}$. Les transformations hyperboliques introduites à l'équation (2.43) permettent de faciliter la recherche d'une symétrie chirale de (2.102) en éliminant, à la limite magnétique, toute dépendance de \hat{H}_{xy} avec l'identité $\hat{1}$. La transformation est $\hat{H}' = e^{\eta\hat{1}} \hat{H} e^{\eta\hat{1}}$, tel que discutée aux équations (2.2.2) et (2.93) et l'équation (2.103) se réécrit

$$e^{\theta\hat{1}} \hat{H}_{xy} e^{\theta\hat{1}} |\Psi\rangle = e^{\theta\hat{1}} \hat{H}_{Ez} e^{\theta\hat{1}} |\Psi\rangle \quad (2.108)$$

pour laquelle on peut généralement trouver un opérateur chirale $\hat{\kappa}'$ hermitien qui anticommute avec $\hat{H}'_{xy} = e^{\theta\hat{1}} \hat{H}_{xy} e^{\theta\hat{1}}$. Ce qui permet d'écrire

$$\{\hat{\kappa}', e^{\eta\hat{1}} \hat{H}_{xy} e^{\eta\hat{1}}\} = 0 \implies \kappa_\eta^\dagger \hat{H}_{xy} \kappa_\eta = -\hat{H}_{xy} \quad (2.109)$$

avec $\kappa_\theta = e^{\eta\hat{\Gamma}} \hat{\kappa} e^{-\eta\hat{\Gamma}}$ l'opérateur chirale du Hamiltonien \hat{H}_{xy} .

On illustre ces considérations générales dans le cas du modèle (2.102) où, en l'absence d'inclinaison ($\mathbf{t} = 0$), l'opérateur chiralité est $\hat{\kappa} = \hat{\sigma}_z$. Si on introduit une inclinaison $\mathbf{t} = (t_x, 0, t_z)$, alors les deux Hamiltonien sont reliés par la transformation hyperbolique

$$\hat{H}(t_x = 0, t_z) = e^{\frac{\eta}{2}\hat{\sigma}_x} \hat{H}(t_x, t_z) e^{\frac{\eta}{2}\hat{\sigma}_x} \quad (2.110)$$

où $\tanh(\eta) = \beta = -t_x \in [-1, 1]$. On en déduit donc que l'opérateur chiralité de $\hat{H}(t_x, t_z)$ est

$$\hat{\kappa}_t = e^{\frac{\eta}{2}\hat{\sigma}_x} \hat{\sigma}_y e^{-\frac{\eta}{2}\hat{\sigma}_x} = \gamma(\hat{\sigma}_y - i\beta\hat{\sigma}_x) \quad (2.111)$$

où $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$. L'utilisation des transformations hyperboliques permet ainsi d'exprimer la chiralité pour une classe de systèmes plus variés avec une inclinaison [KAH16] ou un champ électrique transverse. Ces transformations n'étant valables que dans le régime magnétique, elles indiquent aussi la valeur critique des champs au delà desquels il y a brisure de la symétrie chirale. Cette dernière peut encore avoir un sens pour les semi-métaux de type-II ($|\mathbf{t}| > 1$) car c'est la composante transverse au champ magnétique qui compte [voir Figure 2.1].

Argument de Aharonov-Casher. Pour la suite j'oriente les axes tels que $\mathbf{t} = (t_x, 0, t_z)$ dans l'équation (2.102) et j'utilise le raisonnement précédent pour obtenir l'expression suivante des modes chiraux (2.106)

$$\left\{ \left[(1-\beta^2)v_x\partial_x - \sigma v_y' e A_y \right] + i\sigma \left[v_y'\partial_y + \sigma v_x(\delta q + e(1-\beta^2)A_x) \right] \right\} \Psi_\sigma = 0 \quad (2.112)$$

dont le spectre vérifie $E_\sigma(q_z) = v_z \left[t_z - \sigma\sqrt{1-\beta^2} \right] q_z$ similaire à celui du mode $n=0$ de l'équation (2.100). On peut alors réécrire la fonction d'onde sous la forme $\Psi_\sigma(\mathbf{r}) = e^{\sigma e\phi(\mathbf{r})} f_\sigma(\mathbf{r})$ que l'on injecte afin d'avoir

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_x \phi = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \frac{v_y}{v_x} A_y \\ \partial_y \phi = -\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \frac{v_x}{v_y} [\delta q/e + (1-\beta^2)A_x] \\ [\text{sgn}(v_x v_y) \lambda \partial_x + i\sigma \partial_y] f_\sigma = 0. \end{array} \right\} \Rightarrow \lambda^2 \partial_x^2 \phi + \lambda^{-2} \partial_y^2 \phi = \text{sgn}(v_x v_y) B_z(x, y), \quad (2.113)$$

où $\lambda = \sqrt{1-\beta^2} |v_x/v_y|$. On en déduit que f_σ est une fonction entière de $u = x + i\text{sgn}(v_x v_y)\sigma\lambda y$ dont le profil dépend des conditions aux bords. De plus, comme l'équation pour ϕ est similaire au Laplacien bidimensionnel : $\phi(x, y) = \int dx' dy' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') B_z(\mathbf{r}')$ où la fonction de Green est $G(\mathbf{r}) = \log(r/r_0)/2\pi$. À la limite asymptotique, a donc $\phi(x, y) \rightarrow \text{sgn}(v_x v_y) \Phi \log(r/r_0)/2\pi$, où $\Phi = \int d\mathbf{r} B_z(\mathbf{r})$ est le flux total de champ magnétique à travers le plan xy , et les fonctions d'ondes Ψ_σ vérifient donc

$$\Psi_\sigma \approx f_\sigma(u) \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\sigma \text{sgn}(v_x v_y) \Phi / \Phi_0} \quad (2.114)$$

où $\Phi_0 = e/h$ est le quantum de flux. Comme une fonction entière ne converge pas vers zéro dans toutes les directions à l'infini, la fonction d'onde Ψ_σ est normalisable si seulement $\sigma \text{sgn}(v_x v_y) \Phi > 0$ soit $\sigma = \text{sgn}(v_x v_y \Phi)$. On en déduit aussi que, comme la fonction d'onde Ψ_σ est de carré intégrable,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^2 |f_\sigma| \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\sigma 2 \text{sgn}(v_x v_y) \Phi / \Phi_0} = 0. \quad (2.115)$$

Si on décompose la fonction f_σ sur la base des polynômes $\left\{ (x + i\sigma \text{sgn}(v_x v_y)\lambda y)^j \right\}_{j \in \mathbb{N}}$, l'intégrabilité indique que le degré maximal est $j_{\max} = N_B - 1$ où N_B est la partie entière de Φ/Φ_0 . De ces résultats on en déduit donc que seul le mode Ψ_σ tel que $\sigma = \text{sgn}(v_x v_y \Phi)$ est stable, dont le spectre est $E_\sigma(q_z) = v_z \left[t_z - \text{sgn}(v_x v_y \Phi) \sqrt{1-\beta^2} \right] q_z$ et dont la dégénérescence est indépendante des fluctuations et égale à $N_B = \Phi/\Phi_0$.

Chapitre 3

Spectroscopie infrarouge et magnéto-optique

Au chapitre précédent, nous avons introduit plusieurs modèles pour décrire les semi-métaux de Weyl et dont les propriétés électroniques sont communes si la structure de bande est conique pour le gamme de potentiels chimiques étudiés. Cependant, les signatures que l'on associe aux semi-métaux de Weyl se retrouvent pour d'autres phases, ce qui nécessite de les caractériser par diverses méthodes. Par exemple, bien que la méthode ARPES soit souvent privilégiée elle ne résout pas nettement certains aspects de la structure de bande de Cd_3As_2 et certaines études concluent à l'existence d'un cône de Dirac sur une large gamme de potentiels chimiques [LJZ⁺14, NXS⁺14, BGE⁺14]. De son côté, la spectroscopie infrarouge est sensible à plusieurs contributions du matériau tels que les vibrations du cristal, le mouvement des charges libres, la structure de bande, etc... et qui permettent ensemble de reconstruire des informations très pertinentes sur la structure de bande. Après une courte introduction à la spectroscopie infrarouge dont les détails peuvent être retrouvés en annexe, je présente les caractéristiques optiques d'un semi-métal de Weyl en l'absence et en présence d'un champ magnétique. Cela nous servira pour analyser la réponse optique de Cd_3As_2 pour lequel nous verrons qu'une bande peu dispersive est en fait présente et que le modèle sous-jacent n'est pas celui d'un cône de Weyl mais ressemble plutôt à un modèle de Kane tel que décrit à la phase critique de $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ dans [OBZ⁺14].

3.1 Spectroscopie des semi-métaux de Weyl

La spectroscopie infrarouge est une technique optique où l'on sonde les divers modes d'un matériau grâce à la réflexion ou la transmission d'une onde électromagnétique à pulsation ω fixée¹. Dans l'un ou l'autre cas, la réponse du matériau est décrite par sa susceptibilité diélectrique $\chi(\omega)$ qui relie la polarisation \mathbf{P} du matériau au champ électrique $\mathbf{P}(\omega) = \underline{\chi}(\omega)\mathcal{E}(\omega)$ ou, de façon équivalente, par sa conductivité optique $\sigma(\omega)$ qui relie le courant volumique \mathbf{j} au champ électrique $\mathbf{j} = \underline{\sigma}(\omega)\mathcal{E}(\omega)$. Ces deux quantités sont reliées par l'équation de conservation de la charge

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (3.1)$$

sachant que $\rho = -\nabla \cdot \mathbf{P} = -\underline{\chi}(\omega)\varepsilon_0 \nabla \cdot \mathcal{E}(\omega)$. On peut ainsi définir la permittivité diélectrique $\varepsilon_r(\omega) = 1 + \underline{\chi}(\omega)$ du milieu en fonction de la conductivité optique seulement

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + i\sigma(\omega)/\varepsilon_0\omega. \quad (3.2)$$

La réflexion en énergie d'une onde qui passe d'un milieu d'indice optique n_1 à un milieu d'indice optique n_2 , en incidence normale, s'exprime sous la forme [BDF⁺04]

$$R(\omega) = \left| \frac{n_1(\omega) - n_2(\omega)}{n_1(\omega) + n_2(\omega)} \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon_r(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon_r(\omega)} + 1} \right|^2, \quad (3.3)$$

1. Les quantités complexes sont décrites avec la convention suivante : $A(t) = \sum_{\omega} A_{\omega} e^{-i\omega t}$.

où l'on a considéré que l'un des milieux est le vide, $n_2(\omega) = 1$, et exprimé l'indice optique du matériau en fonction de la permittivité relative du milieu, $n_1(\omega) = \sqrt{\varepsilon_r(\omega)}$. La réflectivité est mesurée expérimentalement à l'aide d'un spectromètre qui permet (i) de sélectionner la fréquence de l'onde incidente et réfléchi et, (ii) mesurer l'intensité de l'onde réfléchi et d'une onde de référence (en général réfléchi sur de l'or), à l'aide d'un bolomètre. Cependant, la mesure de la réflectivité $R(\omega)$ ne permet pas d'accéder à tout le contenu physique du coefficient de Fresnel $r(\omega) = [n_1(\omega) - n_2(\omega)] / [n_1(\omega) + n_2(\omega)] = \sqrt{R(\omega)} e^{i\phi(\omega)}$ censé nous permettre d'exprimer la permittivité diélectrique du milieu. La détermination de la phase $\phi(\omega)$ est obtenue par l'utilisation du théorème de Kramers-Kronig [Bod45, Roe65], qui exprime la causalité de la réponse et permet d'en relier les parties imaginaire et réelle par une intégrale sur toutes les fréquences – dont l'évaluation nécessite certaines approximations car la mesure ne permet d'accéder qu'à une gamme de fréquences réduites. Plus de détails sur la technique expérimentale peuvent être trouvés dans la thèse de Michael Hackl [Hak17] qui a réalisé des expériences de spectroscopie infrarouge sur Cd_3As_2 avec et sans champ magnétique, en lien avec mes calculs théoriques présentés ici.

Afin de comprendre la spécificité des résultats obtenus pour Cd_3As_2 , je commence par illustrer un modèle classique qui permet d'introduire la pulsation plasma puis je discute des contributions électroniques interbandes. J'illustre ces deux cas de figure dans le cas des semi-métaux de Weyl.

3.1.1 Théorie classique, réponse plasma

A la limite des basses fréquences, la réponse optique est dominée par la dynamique des particules libres [BDF⁺04]. Dans le cas non-relativiste et si on néglige les forces de frottements de la forme $\mathbf{f} = -\mathbf{j}/\tau$ ($\omega \gg 1/\tau$), l'équation du mouvement classique est

$$\partial_t \mathbf{j}(t) = \frac{ne^2}{m_e} \mathcal{E}(t) \implies \mathbf{j}_\omega = i \frac{ne^2}{m_e \omega} \mathbf{E}_\omega, \quad (3.4)$$

où $\mathbf{j} = -env$ est le courant, \mathbf{v} est la vitesse des charges ($-e$) libres de densité n et \mathcal{E} est le champ électrique. La conductivité optique est alors $\sigma(\omega) = ine^2 / m_e \omega$ d'où on déduit, à l'aide de l'équation (3.2), l'expression suivante de la permittivité diélectrique

$$\varepsilon_r = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (3.5)$$

où $\omega_p = \sqrt{ne^2 / m_e \varepsilon_0}$ est la pulsation plasma. On observe ainsi que pour $\omega < \omega_p$, $\varepsilon_r(\omega)$ est négatif. L'indice optique $n(\omega) = \sqrt{\varepsilon_r(\omega)}$ est donc purement imaginaire et la réflectivité en énergie est donc $R(\omega) = 1$: toute la lumière est réfléchi par la présence des charges libres [voir Figure 3.1]. Un raisonnement plus approfondi permet de prendre en compte l'influence de la dimension du gaz électronique et de sa relation de dispersion [DSH09], le résultat précédent étant obtenu pour une relation de dispersion quadratique $E \approx p^2 / 2m$ en trois dimensions. Pour ce qui nous concerne, les matériaux que l'on étudie ont une relation de dispersion linéaire $E \approx v_F |p|$ dans les trois dimensions et on a alors [DSH09]

$$\omega_p = \sqrt{(32\pi/3)^{1/3} v_F n^{2/3} e^2 / \varepsilon_0}. \quad (3.6)$$

Cette relation se retrouve à partir du cas non-relativiste, si on utilise la définition de la masse effective obtenue à l'équation (2.97) du Chapitre 2, $m = 2\mu_0 / v_F^2$, et que l'on applique la relation entre la densité n et la densité d'états $g(\mu) = \partial_\mu n$ où $g(\mu) = \mu^2 / (2\pi^2 v_F^3)$ pour la relation de dispersion linéaire.

Il y a d'autres contributions à la conductivité optique à basse fréquence telles que celle des phonons (vibrations), des magnons (excitations magnétiques), etc. qui se superposent à la réponse plasma mais que je ne détaillerai pas. A plus haute fréquence, on sonde les modes électroniques liés et qui vont nous intéresser à la section suivante. On néglige les excitations intra-atomiques qui se font aux pulsations proches de l'ultra-violet.

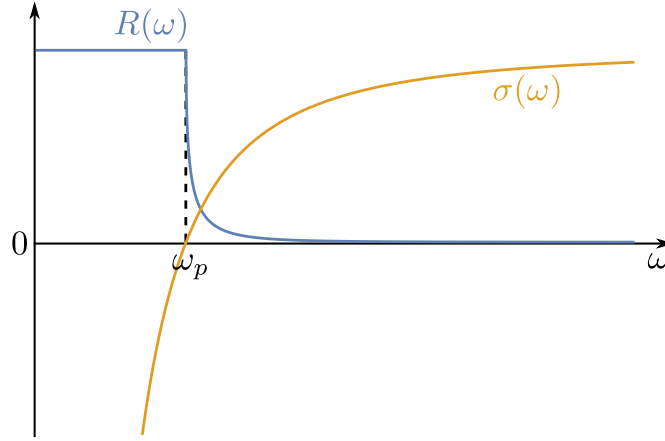


FIGURE 3.1 – Contribution plasma à la réflectivité (en bleu) et à la conductivité optique (en orange) pour différentes pulsations ω .

3.1.2 Théorie quantique, transitions électroniques

L'expression de la conductivité optique $\underline{\underline{\sigma}}$ en mécanique quantique statistique se déduit du calcul du courant électronique

$$\mathbf{j} \equiv e \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\mathbf{v}}), \quad (3.7)$$

où $\mathbf{v} = i [\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}]$ est l'opérateur vitesse et $\hat{\rho}$ est la matrice densité. La matrice densité est solution de l'équation d'évolution [BV13]

$$i \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\rho}, \hat{H} + \hat{V}(t)] + i(\hat{\rho} - \hat{\rho}_F)/\tau = 0, \quad (3.8)$$

où $\hat{\rho}_F = 1 / (1 + e^{\beta(\hat{H} - \mu)})$ est la densité d'état à l'équilibre et décrite par la distribution de Fermi. La perturbation par le champ électrique est $\hat{V}(t) = \mathcal{E} \cdot \hat{\mathbf{r}} \cos(\omega t)$ et le calcul de la conductivité optique se fait par le développement au premier ordre en \mathcal{E} de la matrice densité à l'équation (3.7). Le calcul est détaillé en Annexe C.1 et on obtient la formule de Kubo de la conductivité optique

$$\sigma_{ij}(\omega) = i e^2 \sum_{n,m} \frac{f_D(E_n) - f_D(E_m)}{E_m - E_n - \omega + i\delta} \frac{\langle m | \hat{v}_i | n \rangle \langle m | \hat{v}_j | n \rangle^*}{E_m - E_n}, \quad (3.9)$$

où $f_D(E) = 1 / (1 + e^{\beta(E - \mu)})$ est la distribution de Fermi-Dirac et $\delta = 1/\tau$. En pratique, on se contente d'étudier la partie réelle de la conductivité en prenant la limite² de faibles frottements où $\delta \rightarrow 0^+$

$$\text{Re}[\sigma_{ii}(\omega \neq 0)] = \frac{e^2}{\omega} \sum_{n,m} [f_D(E_n) - f_D(E_m)] |\langle m | \hat{v}_i | n \rangle|^2 \delta[\omega - (E_m - E_n)]. \quad (3.10)$$

Cette expression comporte trois composantes qui méritent d'être interprétées

- (i) Le terme $f_D(E_n) - f_D(E_m)$ décrit que seules les transitions d'un état occupé vers un état vide sont possibles, on parle de *blocage de Pauli*. On illustre cet effet de l'occupation par la coloration rouge et verte des bandes à la Figure 3.3.
- (ii) Le terme $|\langle m | \hat{v}_i | n \rangle|^2$ décrit l'intensité du couplage des deux bandes et traduit les *règles de sélection optiques*. Pour l'équation de Schrödinger usuelle introduite à l'équation (1.1), l'expression de l'opérateur vitesse est donnée par $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{p}}/m$ mais cela devient moins évident pour un Hamiltonien effectif tels que ceux décrits au Chapitre 2 et qui nous intéressent. Pour un Hamiltonien décomposé par blocs $\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} \Psi_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger h_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \Psi_{\beta\mathbf{k}}$

2. Ce qui permet d'utiliser la relation $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (1/(x + i\varepsilon)) = PV\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x)$.

sur une base d'ondes de Bloch dont les fonctions de Wannier définies à la section 1.1.1 du Chapitre 1 sont (i) localisées, et (ii) à symétrie sphérique, on montre en Annexe C.2 que l'opérateur vitesse \mathbf{v} s'écrit

$$\hat{\mathbf{v}} = \nabla_{\mathbf{k}} \hat{h}(\mathbf{k}). \quad (3.11)$$

Ce qui rappelle l'expression de la vitesse de groupe, $v_g = \partial E / \partial k$, en physique ondulatoire [BDF⁺04]. Nous admettrons par la suite que les Hamiltoniens effectifs introduits au Chapitre 2 vérifient les conditions d'applicabilité de la relation (3.11).

(iii) le terme $J_{mn}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta[\omega - (E_{m\mathbf{k}} - E_{n\mathbf{k}})]$ décrit la *densité d'états jointe*, en référence à la densité d'états $g(E) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - E_{\mathbf{k}})$ mais associés à la différence d'énergie entre deux bandes. Cette quantité décompte le nombre de transitions possibles pour une différence d'énergie ω .

Les deux premiers termes donnent en général une contribution constante et le comportement qualitatif de la conductivité optique pour la transition entre les bandes m et n est souvent bien exprimé par la densité d'états jointe $J_{mn}(E)$. De plus, dans le cas où les bandes m et n sont symétriques particules-trou, tel que $E_{m\mathbf{k}} = -E_{n\mathbf{k}}$, on peut écrire $J_{mn}(E) = g_m(2E)$ où $g_m(E)$ est la densité d'états de la bande m , soit

$$\text{Re}[\sigma(\omega)] \sim \frac{J_{mn}(\omega)}{\omega} \approx \frac{g_m(2\omega)}{\omega}. \quad (3.12)$$

Par exemple, pour un spectre de la forme $E_{\pm} = \pm v_F |k|$ en d -dimensions d'espace la densité d'états est $g_m(E) \sim E^{d-1}$. On s'attend donc à ce que la conductivité optique vérifie $\text{Re}[\sigma(\omega)] \sim \omega$ le cas d'un semi-métal de Weyl [BV13], ce que nous allons maintenant dériver explicitement.

Application : conductivité optique d'un cône de Weyl

Je vais exprimer la partie réelle de la conductivité optique, sans et avec champ magnétique, pour le modèle en cône de Weyl introduit à l'équation (2.3) du Chapitre 2 dont je rappelle l'expression

$$\hat{H} = \sum_i (t_i \hat{\mathbb{1}} + \hat{\sigma}_i) v_i q_i. \quad (3.13)$$

Réponse à champ magnétique nul. Au Chapitre 2 nous avons exprimé les énergies propres $E_{\pm}(\mathbf{k})$ et les états propres $\Psi_{\pm\mathbf{k}}$ du Hamiltonien (3.13), aux équations (2.3) et (B.20). En particulier, nous avons observé que les états propres sont indépendants de l'inclinaison \mathbf{t} et en utilisant l'orthogonalité des solutions propres on obtient

$$\hat{\mathbf{v}} = \sum_i (t_i \hat{\mathbb{1}} + \hat{\sigma}_i) v_i \mathbf{e}_i \implies \langle \Psi_{+\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{v}} | \Psi_{-\mathbf{k}} \rangle = \sum_i v_i \langle \Psi_{+\mathbf{k}} | \hat{\sigma}_i | \Psi_{-\mathbf{k}} \rangle \mathbf{e}_i. \quad (3.14)$$

Le couplage interbandes est donc indépendant de l'inclinaison \mathbf{t} . La densité d'états jointe est aussi indépendante de l'inclinaison car elle est seulement fonction de la différence d'énergie $\Delta E = E_{+\mathbf{k}} - E_{-\mathbf{k}} = 2\sqrt{v_x^2 q_x^2 + v_y^2 q_y^2 + v_z^2 q_z^2}$. Par conséquent, *l'inclinaison n'a d'effet sur la conductivité optique que par la distribution des électrons au sein des bandes*, donnée la distribution de Fermi $f_D(E)$. J'ai schématisé le remplissage des bandes pour l'équation de Weyl de type-I ($|\mathbf{t}| < 1$) et de type-II ($|\mathbf{t}| > 1$) aux Figures 3.2(a) et (b). Ces représentations ne sont pas habituelles car au lieu d'incliner les cônes c'est l'énergie de Fermi qui est penchée [voir équation (3.15)]. A température nulle et pour un semi-métal de type-I, l'effet du remplissage implique que les seules transitions qui contribuent à la conductivité optique (3.9) ont un vecteur d'onde \mathbf{q} tel que $E_-(\mathbf{q}) < \mu < E_+(\mathbf{q})$ soit

$$-\delta E(\mathbf{q}) < \tilde{\mu}(\mathbf{q}) \equiv \mu - v_z t q_z < \delta E(\mathbf{q}) \equiv \sqrt{v_x^2 q_x^2 + v_y^2 q_y^2 + v_z^2 q_z^2}, \quad (3.15)$$

où j'ai orienté les axes pour que l'inclinaison soit dans la direction z . Les transitions permises et interdites que décrit cette condition sont représentées par des flèches sur la Figure 3.2(a). On parle parfois de *blocage de Pauli* pour discuter ces transitions interdites, afin de ne pas confondre cet effet avec celui lié aux règles de sélection décrit par la matrice de couplage.

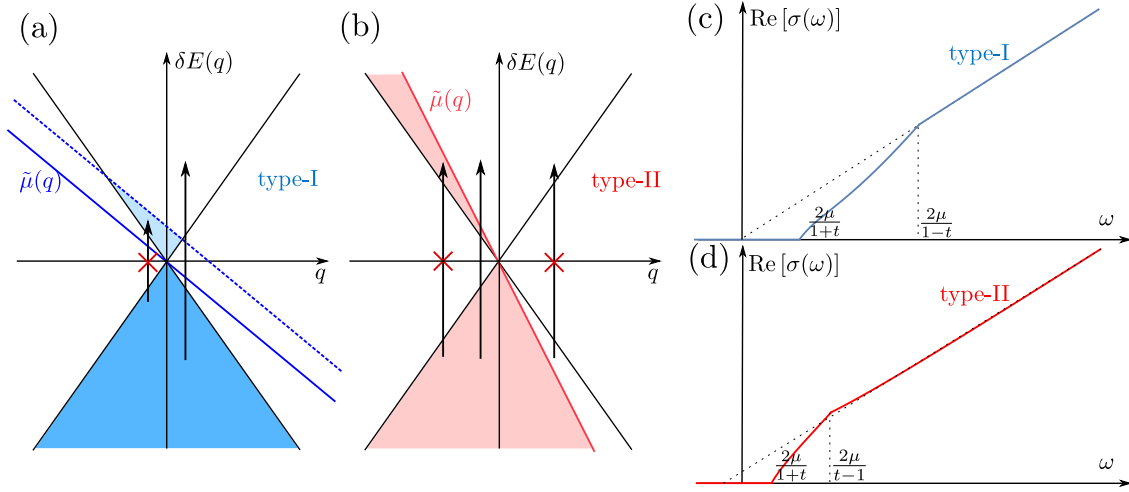


FIGURE 3.2 – Spectroscopie infrarouge d'un cône de Weyl de type-I (Figures (a) et (c)) et de type-II (Figures (b) et (d)). (a,b) On représente les quantités $\delta E(q)$ et $\tilde{\mu}(q)$ de l'équation (3.15) pour les vecteurs d'ondes q selon l'inclinaison, \mathbf{t} . Les zones colorées correspondent aux états occupés et on représente par des flèches les transitions optiques permises et interdites. (c,d) Partie réelle de la conductivité de Weyl. Le comportement asymptotique σ_∞ est représenté par une ligne en pointillés, il est linéaire dans les deux cas mais ce n'est que pour un type-I que son prolongement tend vers $\sigma = 0$. On observe que la zone intermédiaire où la réponse est sensible à l'inclinaison est d'autant plus grande que $|\mathbf{t}|$ est proche de 1.

Le calcul de la conductivité optique a été réalisé récemment [Car16] et le résultat est tracé aux Figures 3.2(c) et (d) dans le cas d'un semi-métal de type-I et -II. Dans le cas isotrope $v_x = v_y = v_z = v_F$ et $\text{Re}[\sigma_{xx}(\omega)] = \text{Re}[\sigma_{yy}(\omega)] = \text{Re}[\sigma_{zz}(\omega)]$, on obtient pour un semi-métal de type-I

$$\text{Re}[\sigma_{xx}(\omega)] = \frac{\sigma_0 \omega}{24\pi v_F} \begin{cases} 0 & \text{pour } \omega < 2\mu/(1+t), \\ \frac{1}{2} + \frac{3}{8t} \left(1 - \frac{2\mu}{\omega}\right) \left[1 + \frac{1}{3t^2} \left(1 - \frac{2\mu}{\omega}\right)^2\right] & \text{pour } 2\mu/(1+t) < \omega < 2\mu/(1-t), \\ 1 & \text{pour } 2\mu/(1-t) < \omega, \end{cases} \quad (3.16)$$

où $\sigma_0 = e^2/\hbar$. L'influence du remplissage des bandes est donc concentré entre les deux pulsations caractéristiques $\omega_{\mu,\pm} = 2\mu/(1 \pm t)$ qui sont identiques si $\mu = 0$ ou $t = 0$, situation que j'ai représenté par $\tilde{\mu}(q)$ en traits pleins à la Figure 3.2(a). Pour une pulsation au delà de ces pulsations caractéristiques, le comportement de la conductivité optique est linéaire $\sigma_\infty(\omega) \sim \omega$, comme on s'y attendait par la discussion sur la densité d'état. Il est intéressant d'analyser le prolongement à $\omega \rightarrow 0$ du comportement à grande pulsation $\sigma_\infty(\omega)$ [lignes en pointillés aux Figures 3.2(c) et (d)] [Car16] :

- (i) pour un semi-métal de type-I : $\sigma_\infty^I(\omega \rightarrow 0) = 0$;
- (ii) pour un semi-métal de type-II : $\sigma_\infty^{II}(\omega \rightarrow 0) > 0$;
- (iii) pour la phase critique $t = 1$ on a $\omega_{\mu,-} \rightarrow \infty$ et c'est le comportement intermédiaire qui prédomine où $\sigma(\omega)$ est aussi linéaire. On observe que $\sigma_\infty^{(t=1)}(\omega \rightarrow 0) < 0$.

Ainsi, la limite à $\omega = 0$ du comportement asymptotique de la conductivité optique permet de distinguer un semi-métal de type-I ou -II ou dans la phase critique, $t = 1$. Cette observation n'est bien sûr valable qu'à condition de négliger les autres transitions optiques, ce qui n'est pas nécessairement possible comme nous le verrons pour la spectroscopie infrarouge de Cd_3As_2 . La spectroscopie en présence d'un champ magnétique nous permettra de compléter l'information.

Réponse magnéto-optique. Nous avons discuté le spectre de l'équation de Weyl sous un champ magnétique à la section 2.3.2 du Chapitre 2. Pour rappel, nous avons alors exprimé les solutions propres en nous plaçant dans

une nouvelle base obtenue par la transformation hyperbolique $|\Psi'\rangle = \frac{1}{\gamma} e^{\eta \hat{\sigma}_x / 2} |\Psi\rangle$. Dans cette base, le terme de couplage pour une polarisation \mathbf{l} de la lumière est

$$\langle \Psi_2 | \mathbf{l} \cdot \hat{\mathbf{v}} | \Psi_1 \rangle = (1/\gamma^2) \langle \Psi'_2 | \mathbf{l} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \left(e^{\eta \hat{\sigma}_x / 2} \hat{H} e^{\eta \hat{\sigma}_x / 2} \right) | \Psi'_1 \rangle = (1/\gamma^2) \langle \Psi'_2 | \mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_+ v_\perp \hat{\sigma}_+ + \mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_- v_\perp \hat{\sigma}_- + \mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_z v_z \hat{\sigma}_z | \Psi'_1 \rangle \quad (3.17)$$

où $\hat{\sigma}_\pm = (\hat{\sigma}_x \pm i \hat{\sigma}_y) / 2$, $v_\perp = \gamma^{-1/2} \sqrt{v_x^2 / \gamma + \gamma v_y^2}$ et où l'on a défini deux polarisations elliptiques non-orthogonales ($\mathbf{e}_+^* \cdot \mathbf{e}_- \neq 0$) telles que

$$\mathbf{e}_\pm = \frac{1}{v_\perp} \begin{bmatrix} v_x / \gamma \\ 0 \\ \mp i v_y \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_z = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

Il est préférable de séparer le calcul de la conductivité optique pour les semi-métaux de type-I et de type-II. Par exemple, pour un semi-métal de type-I à température nulle, pour $\omega > 0$ et $\mu = 0$ seules les transitions $\lambda = - \rightarrow +$ sont permises et nous avons obtenu pour une polarisation \mathbf{l} de la lumière [TCG16]

$$\begin{aligned} \text{Re} [\sigma_{ll}^I(\omega)] &= \frac{\gamma v_\perp^2 \sigma_0 n_B}{2\pi\omega v_z} \left(|\mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_+|^2 \sum_{n \in \mathbb{N}} \Theta(\hbar\omega - (1 - \beta^2)^{3/4} v_F \sqrt{2n} / l_B) R_0^{n-1} (\hbar\omega)^2 \right. \\ &\quad + \sum_{n, m \in \mathbb{N}^*} \frac{\Theta(\hbar\omega - (1 - \beta^2)^{3/4} v_F (\sqrt{2m} + \sqrt{2n}) / l_B)}{\sqrt{\left[(\gamma \hbar\omega)^2 - \frac{2v_F^2}{\gamma l_B^2} (n+m) \right]^2 + \left(\frac{2v_F^2}{\gamma l_B^2} \right)^2 [(n-m)^2 - (n+m)^2]}} \\ &\quad \left\{ 2 \left[(\gamma \hbar\omega)^2 - \frac{2v_F^2}{\gamma l_B^2} (n+m) \right] [|\mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_+|^2 R_m^{n-1} (\hbar\omega)^2 + |\mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_-|^2 R_{m-1}^n (\hbar\omega)^2] \right. \\ &\quad \left. - \frac{4v_F^2}{\gamma l_B^2} \sqrt{nm} \text{Re} [(\mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_+)^* (\mathbf{l} \cdot \mathbf{e}_-)] R_{m-1}^n (\hbar\omega) R_m^{n-1} (\hbar\omega) \right\} \Bigg), \end{aligned} \quad (3.19)$$

où $\sigma_0 = e^2 / \hbar^2$, $n_B = 1 / (2\pi l_B^2)$ est la densité de flux, $\Theta(x)$ est la fonction de Heaviside et $R_p^s(\hbar\omega)$ est la fonction de recouvrement entre deux niveaux de Landau $|s\rangle$ et $|p\rangle$ déjà rencontrée à l'équation (B.39) de l'Annexe B.6 et dont l'expression est ici

$$R_p^s(\hbar\omega) = \langle s(E_{n,+}, k_z) | p(E_{m,-}, k_z) \rangle = \sqrt{\frac{s!}{p!}} \alpha_{\hbar\omega}^{p-s} L_s^{(p-s)}(|\alpha_{\hbar\omega}|^2) e^{-\frac{|\alpha_{\hbar\omega}|^2}{2}}, \quad (3.20)$$

$$\text{où } \alpha_{\hbar\omega} = -\frac{\beta}{(1 - \beta^2)^{3/4}} \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2} v_F l_B}. \quad (3.21)$$

Le premier terme de l'expression (3.19) montre que le mode $n = 0$ n'est couplé aux autres que pour une polarisation \mathbf{e}_+ de la lumière incidente. Le reste de l'expression donne l'amplitude des transitions entre niveaux de Landau, avec un pic de résonance à la fréquence [voir Figure 3.3(a)]

$$\hbar\omega_{mn} = (1 - \beta^2)^{3/4} v_F (\sqrt{2m} + \sqrt{2n}) / l_B. \quad (3.22)$$

On observe une décroissance en $1/\sqrt{E}$ de la conductivité optique aux pics de résonance en conséquence du comportement en $g(E) \sim E^{1/2}$ de la densité d'état d'un système unidimensionnel.

Dans le cas d'un semi-métal de type-II, il faut aussi ajouter les transitions $\lambda = \pm \rightarrow \pm = \sigma$ car le niveau de Fermi coupe toutes les bandes comme illustré à la Figure 2.10 du Chapitre 2. De plus l'expression de la conductivité optique est similaire à celle du type-I mais avec quelques changements [TCG16] :

- (i) L'amplitude des transitions $- \rightarrow +$, représentée par une flèche bleue dans l'encadré de la Figure 3.3(b), est (i) divisée par deux pour $\gamma \hbar\omega > E_c^+(n < m, m)$ et, (ii) nulle pour $\gamma \hbar\omega > E_c^+(m, n < m)$ où

$$E_c^{\alpha, \delta}(p, b) = \frac{\sqrt{2/\gamma} v_F l_B}{\sqrt{t_z'^2 - 1}} \left[\delta |t_z'| \sqrt{p} - \alpha \sqrt{p + [t_z'^2 - 1] b} \right]. \quad (3.23)$$

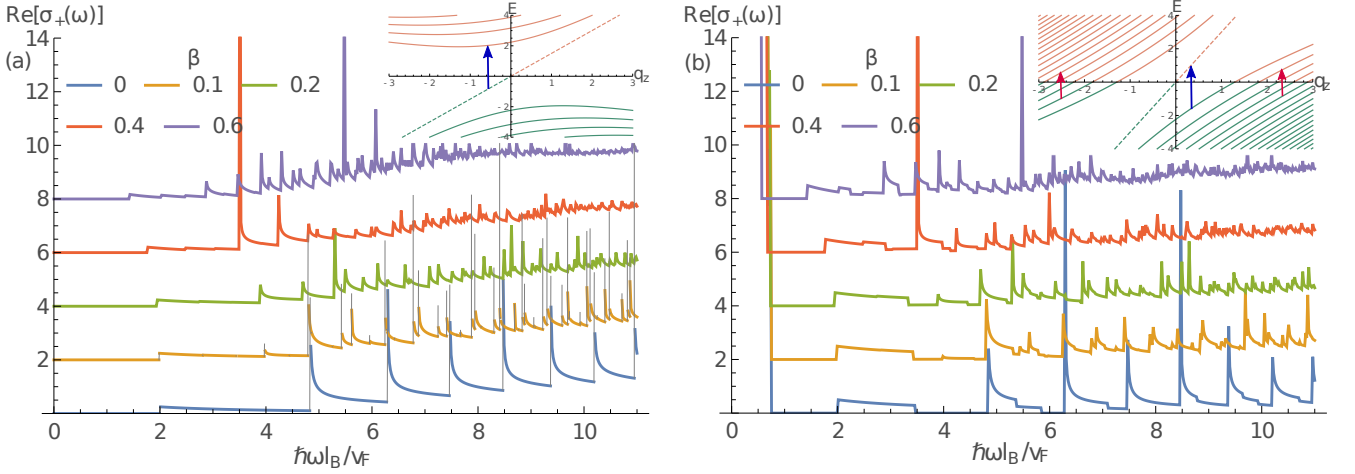


FIGURE 3.3 – Partie réelle de la conductivité optique pour un semi-métal de type-I (figure a, à gauche) et de type-II (figure b, à droite) dans un champ magnétique selon \mathbf{e}_z , une polarisation \mathbf{e}_+ et pour différentes valeurs de $\beta = t \sin(\alpha)$ ($= 0, 0.1, 0.2, 0.4$ et 0.6) où α est l'angle entre le champ magnétique et la direction de l'inclinaison. L'inclinaison est fixée à $t = 0.5$ et les courbes ont été décalées pour les valeurs croissantes de β . L'encadré permet de visualiser les niveaux de Landau occupés (en vert) et vides (en rouge), ainsi que les transitions optiques permises (indiquées par des flèches). A la limite où $\beta = 0$ on obtient les règles transitions $n \rightarrow n \pm 1$ habituelles pour les niveaux de Landau, tandis que pour de plus grandes valeurs de β de nouvelles transitions sont permises. Les pics ont une dispersion de la forme $1/\sqrt{\hbar\omega}$ caractéristique de la dispersion de systèmes 1D.

où $t'_z = \gamma\omega_z/v_z$ a été introduit à l'équation (2.100). La raison en est que chaque bande traverse l'énergie de Fermi et éteint certaines transitions. De plus, les transitions optiques avec le niveau $n = 0$ n'existent que pour des pulsations au delà de $\gamma\hbar\omega_c = E_c^{s+}(m, 0)$ avec $s = \text{sign}(v_x v_y v_z \omega_{0z} B)$.

- (ii) La contribution des transitions $\lambda = \pm \rightarrow \pm = \sigma$ représentée par des flèches rouges dans l'encadré de la Figure 3.3(b) est aussi similaire mais avec un facteur $-1/2$ additionnel. Les transitions entre états m et n sont permises pour $\gamma\hbar\omega$ compris entre $E_c^{\sigma\sigma}(n, m)$ et $E_c^{\sigma\sigma}(m, n)$ où $\sigma = \pm$.

L'ensemble des ces résultats sont représentés à la Figure 3.3 pour différentes valeurs de l'inclinaison transverse au champ magnétique, $\beta = -t_\perp = -t \sin(\alpha)$. On observe que lorsque \mathbf{B} et \mathbf{t} sont parallèles, les règles de sélection sont de la forme $(n, \lambda) \rightarrow (n \pm 1, \lambda)$ et que des transitions additionnelles sont permises dès que ces deux vecteurs forment un angle. Cette observation est déjà connue de la physique des cônes de Dirac bidimensionnels ($d = 2$) [SGTmH15] et dans des travaux plus anciens mais malheureusement peu connus [AP67]. La raison physique pour ces transitions optiques supplémentaires est le décalage des orbites dans l'espace des impulsions comme on peut le constater aux Figures 2.1(b) et (c) du Chapitre 2. Cela se traduit ici par la perte d'orthogonalité des états nombres $|n\rangle$ en conséquence de la transformation hyperbolique et que nous avons discuté en Annexe B.6. Le moment angulaire n'est plus un bon nombre quantique de par l'absence de symétrie par rotation.

Cependant, contrairement au cas bi-dimensionnel, la réponse d'un semi-métal de type-II montre un comportement qualitativement similaire à celui d'un type-I tant que l'angle que forme le champ magnétique et l'inclinaison n'est pas trop grand, $|\sin(\alpha)| < 1/t$. Au jeu des différences, on en trouve deux dans la réponse magnéto-optique des semi-métaux de Weyl de type-I et -II [TCG16]

- (i) pour un type-II on observe un large pic de la conductivité optique à basse fréquence, pour

$$\omega < (1 - \beta^2)^{3/4} \sqrt{2eB} v_\perp \frac{\sqrt{2}|t_z| - \sqrt{t_z^2 + 1}}{\sqrt{t_z^2 - 1}}. \quad (3.24)$$

Cet effet, décrit par les flèches rouge dans l'encadré de la Figure 3.3(b), est dû à la possibilité des transitions entre niveaux de Landau de la bande de conduction ou de valence. Nos résultats donnent un pic qui s'étend

jusqu'aux plus basses fréquences, $\omega = 0$, mais on s'attend à ce que ce ne soit pas le cas expérimentalement si la structure de bandes est constituée de poches d'électrons et de trous fermées [LLD⁺16, Kos16, ODB16, TBUK17]. La prise en compte de la taille finie de ces poches aura essentiellement pour effet de couper le pic de conductivité optique à basse fréquence.

(ii) pour un type-II les pics de résonance ont une pulsation de coupure caractéristique, décrite à l'équation (3.23), qui traduit le blocage de Pauli des transitions représentées par des flèches bleus dans l'encadré de la Figure 3.3(b).

La conductivité optique permet donc essentiellement d'explorer les effets de la densité d'état, comme le permet en principe la technique ARPES une fois intégrée sur tous les vecteurs d'ondes (on parle alors d'AIPES = *Angle Integrated Photo-Emission Spectroscopy*). Le couplage aux bandes est cependant mieux décrit dans le cas de la spectroscopie infrarouge, ce qui permet une analyse quantitative du profil de la conductivité optique. Nous allons maintenant utiliser les résultats précédents afin d'analyser la structure de bande de l'arsenure de cadmium.

3.2 Spectroscopie de l'arsenure de cadmium

Dans le cadre d'une collaboration avec des expérimentateurs du LNCMI à Grenoble, je me suis intéressé aux propriétés magnéto-optiques de Cd_3As_2 . Ce matériau a récemment suscité un certain intérêt en raison de l'identification de fermion avec une dispersion linéaire semblable aux fermions de Dirac.

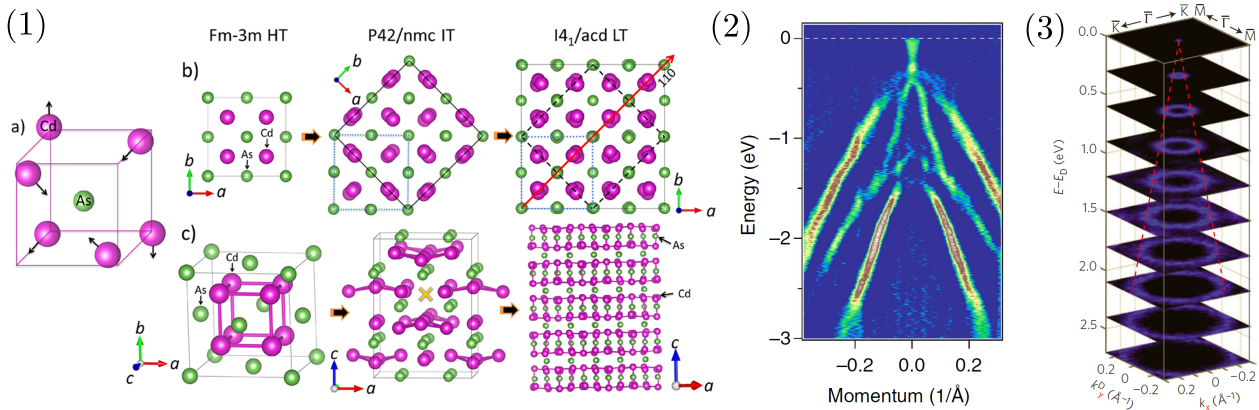


FIGURE 3.4 – (1) Les différentes phases de Cd_3As_2 à haute ($T > 900\text{K}$, structure HT), moyenne ($T \in [750 - 900]\text{K}$, structure IT) et basse ($T < 750\text{K}$, structure LT) température, figure tirée de [AGJ⁺14]. (2,3) Bandes obtenues par spectroscopie ARPES dans [NXS⁺14] pour (2) et [LJZ⁺14] pour (3).

La stœchiométrie Cd_3As_2 de l'arsenure de cadmium est en apparence simple mais pour ce matériau à fort couplage spin-orbite, la spectroscopie par rayons X [AGJ⁺14] montre que la cellule élémentaire du cristal à basse température compte 160 atomes [voir Figure 3.4(1)], qu'il existe un centre d'inversion et que le matériau n'est pas magnétique. L'étude de la structure de bande de Cd_3As_2 a ainsi fait l'objet de plusieurs calculs ab-initio [PWP84, SanSM94, MCPB17] et de modélisations effectives [Bod77, JZG⁺14]. Nous avons par exemple introduit à la section 2.1.4 du Chapitre 2 le modèle de Bodnar qui a été utilisé pour expliquer les oscillations de Shubnikov-de Haas de Cd_3As_2 [Bod77]. Cependant, lors de ma première année de thèse, trois études ARPES sur ce même matériau ont été publiées [LJZ⁺14, NXS⁺14, BGE⁺14], chacune indiquant la présence de cônes de Dirac centrés autour du point Γ , distants de $\Delta k \approx 0.2 - 0.3 \text{ \AA}^{-1}$, sans inclinaison ($\mathbf{t} = 0$) et dont la vitesse de Fermi est de l'ordre de $v_F \approx 6.2 \text{ eV. \AA}$ [voir Figures 3.4(2,3)]. Une analyse attentive de ces résultats indique la présence d'une bande plate qui intersecte les bandes coniques et rappelle le spectre du modèle de Bodnar [voir Figure 2.4] avec les paramètres $E_0 \approx \pm 100 \text{ meV}$, $\Delta \approx 400 - 800 \text{ meV}$. Je vais montrer ici que ce même modèle est cohérent avec les résultats obtenus par spectroscopie infrarouge par le groupe de Milan Orlita, avec qui nous avons collaboré afin d'interpréter les mesures de Anna Akrap et Michael Haki [AHT⁺16]. Ces résultats ont été publiés peu de temps

après ceux du groupe de Artem Pronin [NCN⁺16] avec qui j'ai eu l'occasion de discuter, au cours de l'école d'été sur le couplage spin-orbite organisée par Marcello Civelli. Leur approche est différente de la nôtre car ils analysent leurs résultats en terme d'un cône de Dirac et introduisent les interactions pour expliquer certaines caractéristiques de la conductivité optique. Notre analyse repose seulement sur le modèle de Bodnar et ne fait pas appel aux corrélations électroniques.

Les résultats expérimentaux que je présente ici sont obtenus pour une lumière non-polarisée et pour un faisceau incident normal à la surface d'un échantillon poli, selon (001), ou d'un échantillon obtenu après croissance cristalline, selon (112). Le principal défaut d'une autre orientation de la surface est la sensibilité de la réflectivité aux aspérités. Pour tout complément d'information concernant les propriétés physiques de Cd₃As₂ et la technique expérimentale employée pour la spectroscopie infrarouge, j'invite le lecteur à consulter la thèse de Michael Hakl [Hak17].

3.2.1 Spectroscopie infrarouge

La réflectivité et la conductivité optique de Cd₃As₂ ont été publiées dans [NCN⁺16] et [AHT⁺16] et sont reproduites sur la Figure 3.5. Les figures de gauche représentent la réflectivité des échantillons, on y reconnaît la contribution plasma ce qui indique la présence de porteurs de charge libres [voir Figure 3.1]. La pulsation plasma change d'un échantillon à l'autre, avec $\omega_p \approx 400 \text{ cm}^{-1} = 50 \text{ meV}$ dans [NCN⁺16] et $\omega_p^{001} \approx 30 \text{ meV}$ pour les échantillons polis avec une surface selon (001) et $\omega_p^{112} \approx 60 \text{ meV}$ pour les échantillons après croissance avec une surface selon (112) dans [AHT⁺16]. Ce comportement à basse fréquence est accompagné de pics de résonance, que l'on observe aussi dans le tracé de $\sigma_1 \equiv \text{Re}[\sigma(\omega)]$, autour de 15-30 meV. Ces pics sont associés aux résonances avec les vibrations cristallines.

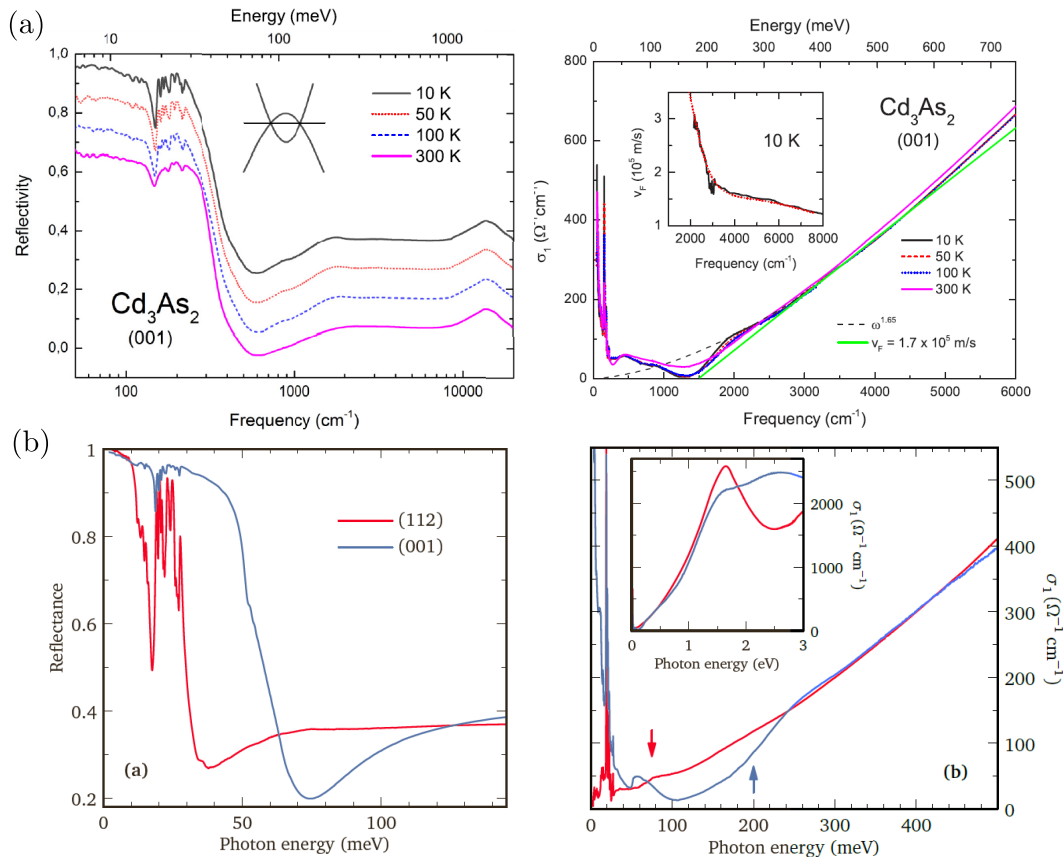


FIGURE 3.5 – Réflectivité (à gauche) et partie réelle de la conductivité optique (à droite) de Cd₃As₂ (a) tiré de [NCN⁺16] et (b) tiré de [AHT⁺16]. Pour la conversion d'unités, $100 \text{ meV} \approx 800 \text{ cm}^{-1}$.

La comparaison de la conductivité optique pour les orientations (001) et (112) [AHT⁺16] [Figure 3.5(b)]

montre une faible anisotropie du système, qui ne s'exprime vraiment qu'au delà de 500 meV (voir encadré). La différence de conductivité optique à basse fréquence est associée à une différence de densité de porteurs de charges, ce qui donne lieu à un blocage de Pauli dont la pulsation de coupure ω_μ dépend du potentiel chimique. La position de ces pulsations de coupure est indiquée par des flèches sur la Figure 3.5(b) où on lit $\omega_\mu^{001} \approx 200$ meV et $\omega_\mu^{112} \approx 100$ meV. Le potentiel chimique a été déterminé pour les deux échantillons de deux façons : (i) par l'étude des oscillations de Shubnikov-de Haas (conductivité) dont l'amplitude et la fréquence dépendent de la masse effective et du potentiel chimique du matériau [AM76] et, (ii) par le dédoublement de la pulsation plasma sous l'effet d'un champ magnétique avec une séparation égale à la pulsation cyclotron $\omega_c = eB/m$ [PF70] où $m = \mu/v_F^2$ pour une relation de dispersion linéaire telle qu'on l'a rencontré à l'équation (2.97). On obtient ainsi $\mu^{001} \approx 200$ meV et $\mu^{112} \approx 100$ meV soit exactement les pulsations de coupure : si on fait le lien avec la Figure 3.2 tout se passe comme en présence d'un semi-métal de Weyl à la phase critique où $t = 1$. Cela traduit en fait la *présence d'une bande plate*, qui est aussi décrite par le modèle de Bodnar et contredit le modèle d'un cône de Dirac sans inclinaison décrit dans [NCN⁺16] et les études ARPES [LJZ⁺14, NXS⁺14, BGE⁺14].

La pente de la conductivité optique est liée à la vitesse de Fermi. Par exemple, si on utilise la relation (3.16) obtenue pour l'équation de Weyl on obtient $v_F \approx 1$ eV.Å ce qui est bien plus petit que la valeur obtenue par spectroscopie infrarouge [LJZ⁺14, NXS⁺14, BGE⁺14] et STM [JZG⁺14]. Dans de le cas du modèle de Bodnar, la conductivité optique vérifie [voir Annexe C.3]

$$\text{Re} [\sigma_{xx}^\infty(\omega > 0)] = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{e^2}{4\pi P} \omega \left[\frac{13}{12} + \theta(\hbar\omega - \Delta) \left(1 - \frac{\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right]. \quad (3.25)$$

Cette expression est dérivée en en admettant que les échelles d'énergie δ et E_0 sont négligeables et que les vitesses de Fermi sont isotropes $P_\parallel \approx P_\perp \approx \sqrt{3/2} v_F$. Ces deux hypothèses sont en fait vérifiées par l'analyse de la réponse magnéto-optique que je décris à la section suivante. La discontinuité de l'expression (3.25) est due à l'activation des transitions avec la bande à très basse énergie, $E \approx -\Delta$, que l'on décrit dans l'approximation où $\Delta \gg \sqrt{3/2}(\hbar\omega - \Delta)$ et qui semble valable ici. Ainsi, la conductivité optique (i) est linéaire par morceaux, (ii) double sa pente pour $\hbar\omega > \Delta$ et (iii) l'extension du comportement de la conductivité à $\hbar\omega \gg \Delta$ à basse fréquence s'annule pour $\hbar\omega \approx \Delta$. Ce comportement de la conductivité optique du modèle de Bodnar se retrouve dans la réponse optique de Cd₃As₂ illustrée dans l'encadré de la Figure 3.5(b). On trouve ainsi $\Delta \approx 400$ meV, ce qui est proche du couplage spin orbite de InAs et ce qui s'explique par l'importance de la contribution anionique (dans les deux cas, l'arsenic) pour le couplage spin-orbite. Enfin, le calcul de la vitesse de Fermi donne $v_F \approx 6.1$ eV.Å, ce qui est cohérent avec les résultats obtenus par ARPES et STM. Cette valeur est plus grande que pour le modèle de cône de Dirac grâce à l'accroissement de la densité d'états jointe par la présence de la bande plate.

L'analyse magnéto-optique permet le complément de ces informations, en particulier en justifiant l'isotropie de la dispersion $P_\parallel = P_\perp$ et la petitesse de δ et E_0 .

3.2.2 Spectroscopie magnéto optique

La mesure de la réflectivité en présence d'un champ magnétique a été réalisée dans la configuration de Faraday – où le champ magnétique est parallèle au faisceau incident, pour des raisons d'accès du faisceau à l'échantillon. Les résultats expérimentaux ont été publiés dans [AHT⁺16] et je les reproduis aux Figures 3.6(a,b et c). La réflectivité affiche un pic que l'on associe à une transition inter-niveaux de Landau, et que l'on note par des cercles pleins. Cette résonance est accompagnée d'une seconde, à plus basse fréquence mais moins bien résolue et que l'on note par des cercles vides.

L'évolution des fréquences de résonance avec le champ magnétique est en \sqrt{B} , ce qui rappelle le spectre des électrons de Dirac dans un champ magnétique. Ce comportement révèle en fait une surface de Fermi qui croît linéairement avec l'impulsion et que l'on retrouve aussi dans le modèle de Bodnar. De plus, ces fréquences de résonance sont similaires pour les orientations (001) et (112), ce qui indique que les vitesses de Fermi sont isotropes, $P_\perp \approx P_\parallel$. En effet, à l'aide d'un raisonnement semi-classique on montre que pour un rapport de pulsations $\omega_c^{112}/\omega_c^{001} \approx 1.03$ on a le rapport $P_\perp/P_\parallel \approx 0.9$ [AHT⁺16].

L'intervalle en champ magnétique pour lequel on observe les pics de résonance est différent pour les deux échantillons. La limite quantique pour (112) est atteinte pour un champ magnétique plus faible que pour (001)

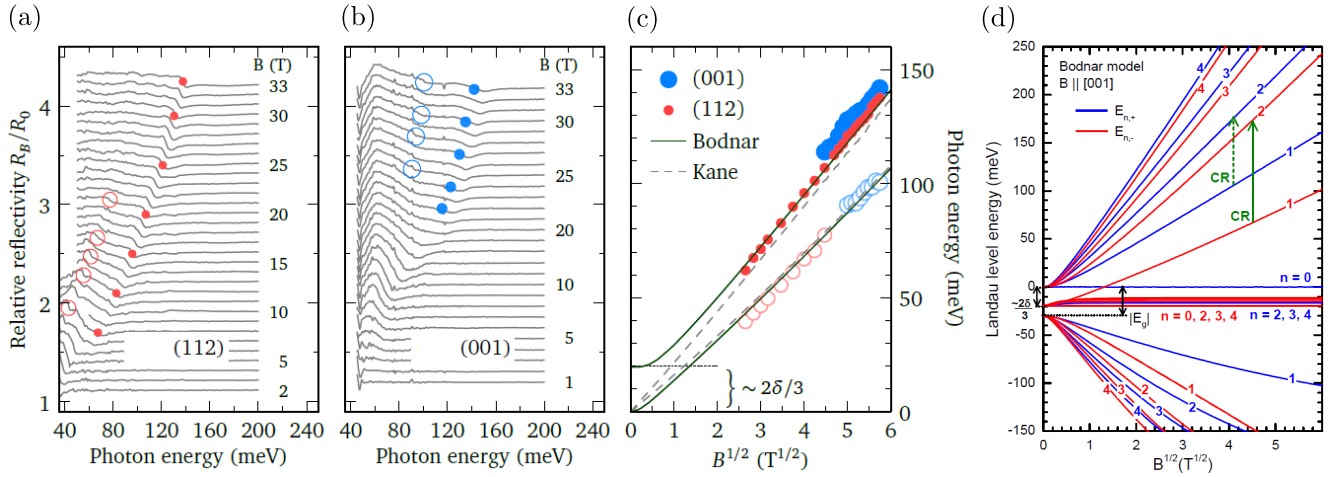


FIGURE 3.6 – Spectroscopie magnéto optique de Cd_3As_2 tirée de [AHT⁺16]. Les figures (a) et (b) sont le tracé de la réflectivité pour différentes valeurs du champ magnétique et pour des échantillons dont surface est orientée selon (001) et selon (112). Les courbes ont été décalées verticalement pour aider à la lisibilité. On reporte les pics de résonance sur la figure (c) en fonction du champ magnétique. La figure (d) correspond à l'évolution des bords de bande de Landau du modèle de Bodnar pour différentes valeurs du champ magnétique. La coloration rouge et bleu correspond à deux familles d'états propres entre lesquelles les transitions optiques sont interdites et toujours telles que $n \rightarrow n \pm 1$.

car, comme nous l'avons discuté à la section précédente, sa densité de porteurs est plus faible. Autre observation : le pic de résonance de basse énergie (cercles vides) devient inactif pour (112) au delà de $B = 20$ T et pas pour (001). C'est la conséquence du dépeuplement d'une bande de Landau, le potentiel chimique de (112) étant plus faible que (001).

Ces observations ne sont pas reproduites par le modèle avec un cône de Dirac sans inclinaison où la limite quantique est rapidement atteinte. Les transitions se font alors essentiellement avec le niveau $n = 0$ qui disperse sans bord de bande et ne donne pas de pic de réflectivité, à moins d'avoir un effet de blocage de Pauli mais cela ne reproduit qu'un des pics de résonance et ceci seulement pour $\mu = 0$ [AHT⁺16]. Nos calculs avec le modèle de Bodnar nous permettent de tracer à la Figure 3.6(d) les bords de bandes de Landau, $E_n(k_z = 0)$, à l'origine des pics de résonance, et dont le calcul est expliqué en Annexe C.4. Les flèches vertes sont les transitions qui permettent d'expliquer l'ensemble des observations expérimentales. On a reporté la fréquence de résonance de ces transitions en fonction du champ magnétique sur la Figure 3.6(c) (i) pour $E_0 = 30$ meV et $\delta = -30$ meV en traits pleins et, (ii) pour $E_0 = 0$ et $\delta = 0$ en tirets. Ce choix de paramètres reproduit bien le comportement expérimental mais est ambigu et nécessite une analyse plus poussée. Cependant, on s'attend à que ces deux paramètres soient petits comparés au potentiel chimique. Le comportement du matériau est alors essentiellement dominé par la dynamique du modèle de Kane que celle du modèle de Dirac car à haute énergie le modèle de Bodnar coïncide avec le modèle Kane.

Chapitre 4

Électronique de surface des matériaux topologiques

L'*interface* de deux solides est la démarcation qui définit le contact de deux matériaux et s'étend généralement sur une profondeur de quelques couches atomiques. Par exemple, le contact d'un semi-conducteur avec une électrode de métal est décrit par l'interface métal-semiconducteur illustrée sur la Figure 1.5. Une autre situation est celle de l'interface constituée par un solide en contact avec l'atmosphère ou, dans un cas idéal, avec le vide. On parle alors de *surface* du matériau.

En matière condensée, nous sommes amenés à décrire le comportement d'une très grande assemblée de particules, de l'ordre de 10^{23} atomes par centimètres cube. Le calcul de l'élasticité, de la conductivité électronique, de la réflectivité, de la chaleur spécifique, etc.. du matériau passe par une simplification du système à l'aide des symétries. La simplification la plus importante est apportée par la symétrie par translation discrète que l'on a introduit au Chapitre 1 et que l'on a exprimée par le théorème de Bloch. Elle s'appuie sur l'hypothèse d'un solide infiniment grand où le nombre d'atomes en surface – dont la densité est de l'ordre de 10^{15} atomes par centimètres carré – peut être négligé par rapport à celui du volume. Ceci est justifié pour un système dont la taille, L , est bien plus grande que ses dimensions microscopiques et pour les quantités physiques qui sont directement liées au nombre total d'atomes du système. On peut ainsi efficacement rendre compte des mesures spectroscopiques où les sondes – telles que le rayonnement infrarouge, X, de neutrons, etc – pénètrent profondément dans le matériau, de sorte à négliger l'influence des atomes en surface. Pour des échantillons macroscopiques, la validité de ces approches théoriques n'est donc valable que si

$$L, \lambda \gg n_{2d} / n_{3d} \approx n_{3d}^{-1/3} = 1\text{Å} - 1000\text{Å}, \quad (4.1)$$

où λ est la longueur de pénétration des sondes, n_{2d} et n_{3d} sont les densités de particules en surface et en volume. Cette approche en terme d'un solide infiniment étendu doit être questionnée si les sondes interagissent fortement avec le matériau et ne pénètrent que sur quelques couches atomiques du solide [voir Figure 4.1(a)]. C'est ce que l'on rencontre pour les mesures chimiques, de transport et de photo-émission. Par exemple, on illustre à la Figure 4.1 les longueurs typiques de pénétration en photo-émission et qui sont de l'ordre de 5-100 Å, l'électron arraché interagissant fortement avec son environnement. Ainsi, le développement et la miniaturisation croissantes de la technologie des semi-conducteurs auraient été impossibles sans une discussion approfondie des états de surface [voir section 1.1.4].

Nous avons vu au Chapitre 1 qu'il y a eu un regain d'intérêt pour la physique des états de surface après la découverte de l'effet Hall quantique [KDP80] et des matériaux topologiques [Hal88] [voir sections 1.3.1 et 1.3.2]. Ces approches ont comme point commun de ramener l'étude des états de surface à l'analyse du comportement du matériau en volume, ce que l'on appelle souvent la *correspondance volume-surface*. Cette correspondance n'est possible que pour des interfaces suffisamment douces comme l'a illustré le travail de Zak [Zak84, Zak85] [voir section 1.2.1] et sa formulation rappelle l'argument de Aharonov-Casher pour la stabilité du mode $n = 0$ du spectre de niveaux de Landau d'un électron relativiste [AC79] [voir section 2.3.3]. Mon travail de thèse s'est

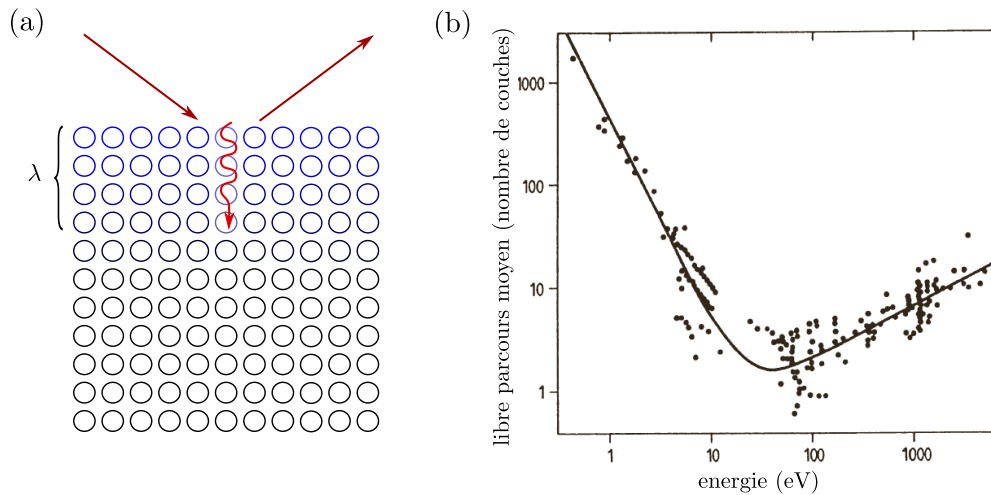


FIGURE 4.1 – (a) Illustration de la longueur de pénétration d’une sonde dans un matériau. (b) Longueur de pénétration de la spectroscopie par photo-émission pour différentes valeurs du rayonnement incident [tiré de [Lüt13]].

porté sur l’influence des champs magnétique et électrique et de l’inclinaison sur les états de surface des isolants topologiques et des semi-métaux de Weyl. Afin de présenter ce travail je vais commencer par un rappel de la physique des états de surface où je discute de façon approfondie le comportement en surface d’un semi-conducteur standard. J’introduis ensuite le modèle d’interface d’un matériau topologique que j’ai utilisé pour l’étude des isolants topologique et des semi-métaux de Weyl, dont je parle dans les deux sections qui suivent. Ce travail nous a permis d’interpréter certaines observations expérimentales sur les isolants topologiques Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 et HgTe .

4.1 Origines des états de surface

Au Chapitre 1, nous avons décrit les états de surface de quelques modèles simplifiés. Pour cela, il nous a suffi de résoudre l’équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

de part et d’autre de l’interface et imposer des conditions de continuité. Cette approche est très utile mais peut être trop simplificatrice pour certaines situations réalistes. Par exemple, le réseau cristallin peut se déformer à l’interface [SSH79, SSH80] [voir section 1.2.2] et les charges sont susceptibles de se réorganiser [Lüt13]. On s’attend par conséquent à une modification du potentiel $V(\mathbf{r})$ sur une échelle de longueur de taille finie. Les corrélations électroniques changent aussi à l’interface [KVM⁺10] mais je n’ai pas abordé cette problématique au cours de la thèse.

4.1.1 Terminaison du cristal et écrantage

Nous avons vu au Chapitre 1 que l’on distingue deux types d’états de surface :

- (i) Les états de Tamm sont associés à la présence d’un potentiel différent sur le site terminal par rapport à celui du volume. Ils sont par exemple dus à une irrégularité du cristal, une molécule adsorbée, etc. Si ce potentiel $\Delta\alpha$ dépasse la largeur de la bande permise, β , alors un état de surface apparaît au-dessus ou en-dessous de la bande permise [voir équation 1.15]. On parle d’états de surfaces *extrinsèques* comme lors de l’adsorption de molécules en surface, illustrée à la Figure 4.2(a).
- (ii) Les états de Shockley sont quant à eux associés à la terminaison d’un cristal où les interactions inter-atomiques β dépassent les interactions intra-atomiques β' et on dit que l’on a inversion de bande. On parle

d'états de surface *intrinsèques* comme par la présence de liaisons de valences libres illustrées à la Figure 4.2(b).

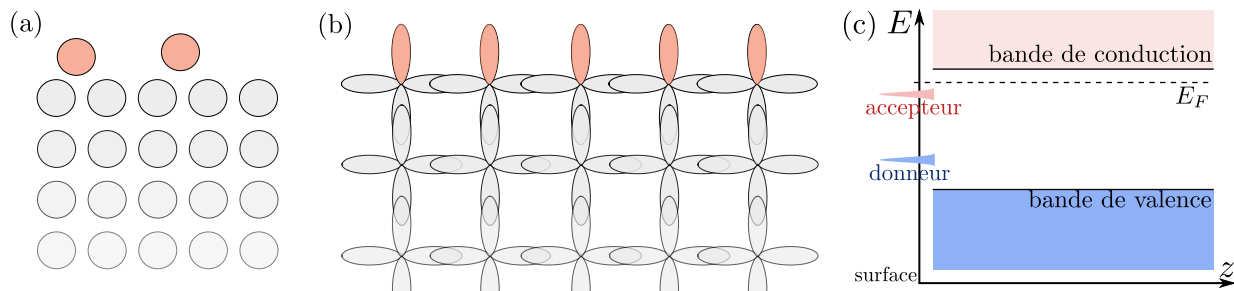


FIGURE 4.2 – (a,b) Illustration des phénomènes responsables (a) des états de Tamm et (b) des états de Shockley. Dans le cas (a) le potentiel du site terminal change par l'adsorption de molécules et dans le cas (b) des états de surfaces apparaissent au niveau des liaisons flottantes. (c) Caractère donneur et accepteur des états de surface.

Ces états de surface vont modifier l'équilibre des charges au sein du semi-conducteur [Lüt13, Inh17]. Comme les états de surface apparaissent par la disparition d'un état d'une des bandes de volume, il est important de garder la trace de leur origine et de distinguer les états de surface de la bande de conduction de ceux de la bande de valence [voir Figure 4.2 (c)]. Dans le volume, un état occupé de la bande de conduction porte une charge négative tandis qu'un état inoccupé de la bande de valence porte une charge positive. Par conséquent, un état de surface de la bande de conduction est neutre s'il est inoccupé, et chargé négativement s'il est occupé : c'est un *état accepteur*. De la même façon, un état de surface de la bande de valence est neutre s'il est occupé, et chargé positivement s'il est inoccupé : c'est un *état donneur*.

Ainsi si l'énergie de Fermi est suffisamment importante pour peupler l'état de surface accepteur, on observe un excès de charges en surface illustré à la Figure 4.2(c). La seule façon d'éviter une telle situation est de ramener les états accepteurs de surface à une énergie au dessus du niveau de Fermi, afin qu'ils soient inoccupés et que l'on retrouve la neutralité de charge du matériau. Comme l'énergie des états de surface par rapport aux bords de bande de volume est fixée par le potentiel de surface, on ne peut réduire la densité de charges des états accepteurs de surface qu'en déplaçant l'énergie des bandes de conduction et de valence. Ce mécanisme va en même temps décroître la densité de charge des niveaux donneurs de volume proche de la surface car ces derniers passent au dessus de l'énergie de Fermi, ce qui forme la *zone de charge d'espace*. On l'illustre sur la Figure 4.3 par les signes "+". Le décalage des bandes est tel que la charge en surface Q_s est exactement compensée par la charge de la zone de charge d'espace Q_z

$$\text{(condition de neutralité globale)} : Q_s + Q_z = 0. \quad (4.3)$$

On représente à la Figure 4.3 trois situations d'écrantage possibles, dans le cas d'un semi-conducteur dopé- n (négativement). Le cas d'un semi-conducteur dopé- p est en tout point analogue. Les situations que l'on décrit en général sont les suivantes [Lüt13]

- (i) *Zone de déplétion*. C'est le cas discuté au paragraphe précédent où l'on dépeuple les niveaux donneurs du volume par la présence de niveaux accepteurs en surface. Dans ce cas, le nombre de porteurs majoritaires diminue en surface ainsi que la conductivité [voir Figures 4.3].
- (ii) *Zone d'inversion*. Pour une zone de déplétion dont le potentiel de surface est important, l'énergie d'ionisation $E_i = (E_c + E_v)/2$ à $T = 0$ K peut croiser le potentiel chimique μ . Un semiconducteur étant dopé p si $E_F < E_i$, intrinsèque si $E_F = E_i$ et dopé n si $E_F > E_i$: la zone d'inversion correspond à l'inversion du type de porteurs majoritaires et une ré-augmentation de la conductivité [voir Figure 4.3].
- (iii) *Zone d'accumulation*. Dans ce cas, la présence de niveaux donneurs en surface augmente la densité de porteurs majoritaires et donc la conductivité. Si le potentiel de surface est suffisamment important, on peut arriver au point où la bande de conduction est peuplée et où les électrons libres du volume contribuent à l'écrantage.

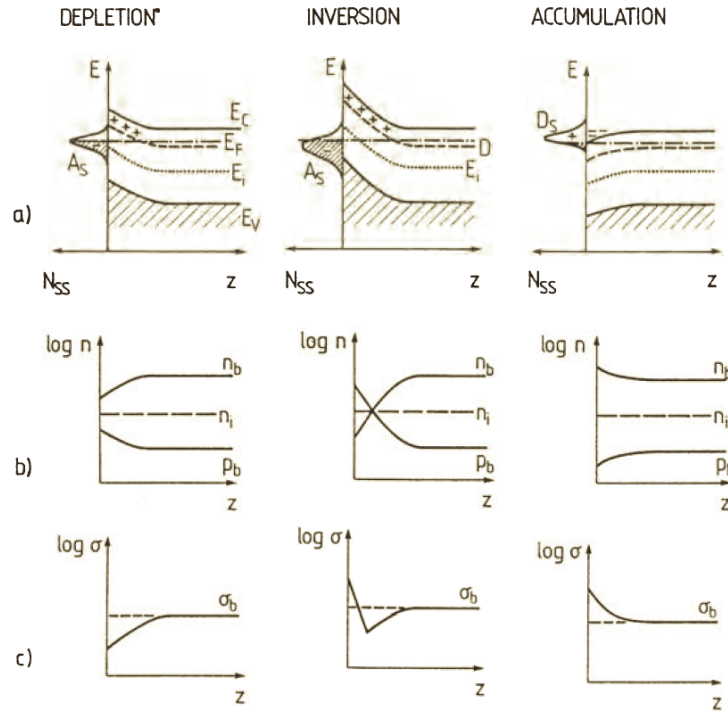


FIGURE 4.3 – Illustration du potentiel électrostatique, de la densité de porteurs et de la conductivité d'une zone de déplétion, d'une zone d'inversion et d'une zone d'accumulation [tiré de [Lüt13]].

De façon générale, ces situations sont décrites par l'équation de Poisson, où l'on admet l'uniformité du potentiel dans le plan de l'interface (xy),

$$\text{(équation de Poisson)} \quad : \quad \frac{d^2 V}{dz^2} = -\frac{e}{\epsilon_r \epsilon_0} n(z) \quad (4.4)$$

où la densité électronique $n(z)$ correspond à l'excès de charge des niveaux inoccupés et au défaut de charge des niveaux occupés. Pour le calcul de ces excès et défauts de charges, on admet un *équilibre électrochimique local* et la relation de Gibbs-Duhem permet ainsi de définir un potentiel électrochimique μ_0 uniforme que l'on exprime en fonction du potentiel chimique $\mu(z)$ et du potentiel électrique $V(z)$ selon

$$\text{(équilibre électrochimique)} \quad : \quad \mu_0 = \mu(z) + eV(z). \quad (4.5)$$

La densité électronique qui apparaît dans l'équation de Poisson est calculée à partir de la densité d'états $g(\mu) = \partial n / \partial \mu$ et déterminée par la résolution de l'équation de Schrödinger. Comme cette dernière dépend explicitement du potentiel, on est en principe amené à résoudre le système couplé d'équations de Schrödinger-Poisson. Cependant, pour cette thèse, je me contente soit du traitement de l'équation de Poisson pour une densité d'états fixée (capacité quantique, écrantage), soit du calcul des modes électroniques de l'équation de Schrödinger avec un potentiel électrostatique imposé (confinement électrostatique, effet du champ électrique sur les états de surface topologiques).

Nous allons maintenant exprimer les états quantiques que l'on obtient en présence du potentiel électrique de surface et la façon dont la capacité électrique est affectée par la distribution de charges à la surface du semi-conducteur. Ces calculs nous seront utiles pour interpréter les données obtenues par les mesures de transport de HgTe.

Effets quantiques

Dans le cas d'un semi-conducteur standard, on peut modéliser chaque bande par une relation de dispersion quadratique $E = (\hbar^2 k_x^2 + \hbar^2 k_y^2 + \hbar^2 k_z^2) / 2m$. Au niveau de la surface, le potentiel électrique $V(z)$ est décrit par l'équation

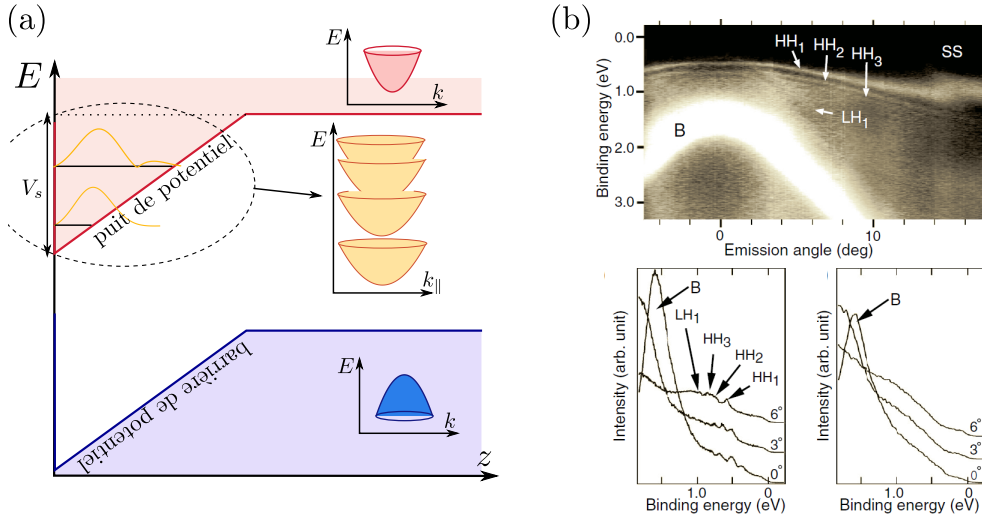


FIGURE 4.4 – (a) États de surfaces pour un potentiel d'écrantage décroissant. Les électrons (bande de conduction) sont confinés mais pas les trous (bande de valence). (b) Spectres de photo-émission du silicium dopé où sont observés les états confinés de la zone d'inversion ($V_s = 700$ meV sur une longueur de 30 nm), tiré de [THD05].

de Poisson et, plutôt que de le décrire de façon exacte, on peut le modéliser par un potentiel triangulaire suffisamment doux $V(z) = -\mathcal{E}z$. L'équation de Schrödinger s'écrit alors en terme de la fonction d'onde enveloppe $F(z)$

$$\left(-\frac{1}{2m}\partial_z^2 + e\mathcal{E}z\right)F(z) = \left(E - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m}\right)F(z), \quad (4.6)$$

et les solutions propres sont $\Psi(k_x, k_y) = F(z)e^{i(k_x x + k_y y)}$ [voir section 1.2.2]. On impose $F(z=0) = 0$ afin que les électrons restent confinés dans le cristal. La solution propre de 4.6 s'exprime en terme de la fonction d'Airy et le spectre est donné par les zéros de cette fonction¹ [Lüt13, SH67, Ste72]

$$E_n(k_{\parallel}) = \frac{1}{2m} \left(k_x^2 + k_y^2\right) + (n + 3/4)^{2/3} \varepsilon_0, \quad (4.7)$$

où $\varepsilon_0 = \left(\frac{3}{2}\pi\hbar e|\mathcal{E}|/\sqrt{2m}\right)^{2/3}$ et $n \in \mathbb{N}$. Cette quantification nécessite $\text{sgn}(m\mathcal{E}) > 0$: un puits de potentiel permet de confiner les électrons mais correspond à une barrière de potentiel pour les trous [voir Figure 4.4]. On aura donc seulement quantification des bords de bande inférieurs si $\mathcal{E} > 0$ et supérieurs si $\mathcal{E} < 0$, ce qui n'est pas sans rappeler les états N et les états P des états de Tamm [voir section 1.1.3]. Par la suite on appelle ces états les *états de surface triviaux* : ils ne décrivent que la quantification des électrons ou des trous mais jamais des deux à la fois. Ce comportement rappelle celui des états de surface de Tamm [voir section 1.1.3] où, en fonction du signe de $z = \Delta\alpha/\beta$, on obtient soit le confinement du bord de bande en $\theta_0 = 0$ ou en $\theta_0 = \pi$. La distinction entre les deux étant qu'en l'un la relation de dispersion est de type trou et, en l'autre, de type électron. Le confinement électrostatique peut ainsi être vu comme l'extension du mécanisme d'apparition des états de surface proposé par Tamm.

L'observation expérimentale de cette quantification n'est pas aisée car des effets d'écrantage complexes peuvent se produire [SH67, Ste72]. Comme pour les niveaux de Landau, on observe la quantification si la séparation entre niveaux dépasse leur extension, soit $\varepsilon_0\tau > \hbar$ où τ est le temps de diffusion. Ce qui se produit pour de forts champ électriques ou pour des bandes peu dispersives. Par exemple, par le dopage du silicium on obtient un champ électrique en surface assez fort pour observer la série de niveaux (4.7) par spectroscopie de photo-émission [THD05] [voir Figure 4.4(b)]. Ces observations ont été reportées pour d'autres matériaux tels que InN [KVM08] et Bi₂Se₃ [BHM⁺11] mais de façon plus qualitative. Nous avons déjà discuté les états de

1. On évalue en fait les zéros par le comportement asymptotique $Ai(-x) \approx \sin\left(\frac{2}{3}x^{3/2} + \pi/4\right) / \sqrt{\pi x^{1/4}}$ de la fonction d'Airy.

surface de Bi_2Se_3 à l'occasion de la Figure 1.12 du Chapitre 1 où des échantillons oxydés en surface présentent, pour un potentiel de surface comme celui de la Figure 4.4(a), à la fois des états de surface de type électron (bande de conduction) et de type trou (bande de valence). Pour ces expériences, la quantification des états de surface de type électron s'accorde avec les calculs en présence d'un potentiel électrostatique mais pas pour les états de type trou. Il a été suggéré [BHM⁺11] que la partie trou apparaît si le potentiel de surface dépasse la largeur de la bande de valence, que l'on vérifie pour Bi_2Se_3 mais pas pour les mesures analogues sur Bi_2Te_3 [CHW⁺12]. Nous verrons à la section 4.2 un autre mécanisme pour expliquer les états de surface de Bi_2Se_3 et de Bi_2Te_3 qui s'apparente cette fois à un champ magnétique, analogue au modèle de Shockley, capable de quantifier simultanément les états de type électron *et* de type trou [voir section 2.3].

Capacité quantique

Cette partie est inspirée de la thèse de Andreas Inhofer [Inh17] avec qui j'ai travaillé à l'interprétation de mesures de transport électronique. Je conseille la lecture de son manuscrit pour tout complément d'information.

La charge Q portée par un matériau soumis à une différence de potentiel V est décrite par la capacité électrique $C = Q/V$. Par exemple, dans le cas de deux électrodes de métal de surface S , séparées d'une distance d par un isolant de permittivité diélectrique ϵ on a $C = \epsilon S/d$. La généralisation de cette relation entre la charge et la différence de potentiel dans le cas non linéaire se fait en terme de la capacité différentielle

$$C = \frac{\partial Q}{\partial V}, \quad (4.8)$$

que je réécrirai parfois en terme de la capacité différentielle surfacique c . Nous aurons à interpréter des expériences où un semi-conducteur est couplé capacitivement à un circuit électronique, dans la configuration illustrée à la Figure 4.5(a). Le potentiel de grille V_g induit une charge Q_c à la surface d'un isolant d'épaisseur d . Ces deux quantités sont reliées au potentiel V_s à la surface du semi-conducteur par la capacité géométrique $C_g = \epsilon S/d$

$$Q_c = C_g [V_g - V_s(V_g)]. \quad (4.9)$$

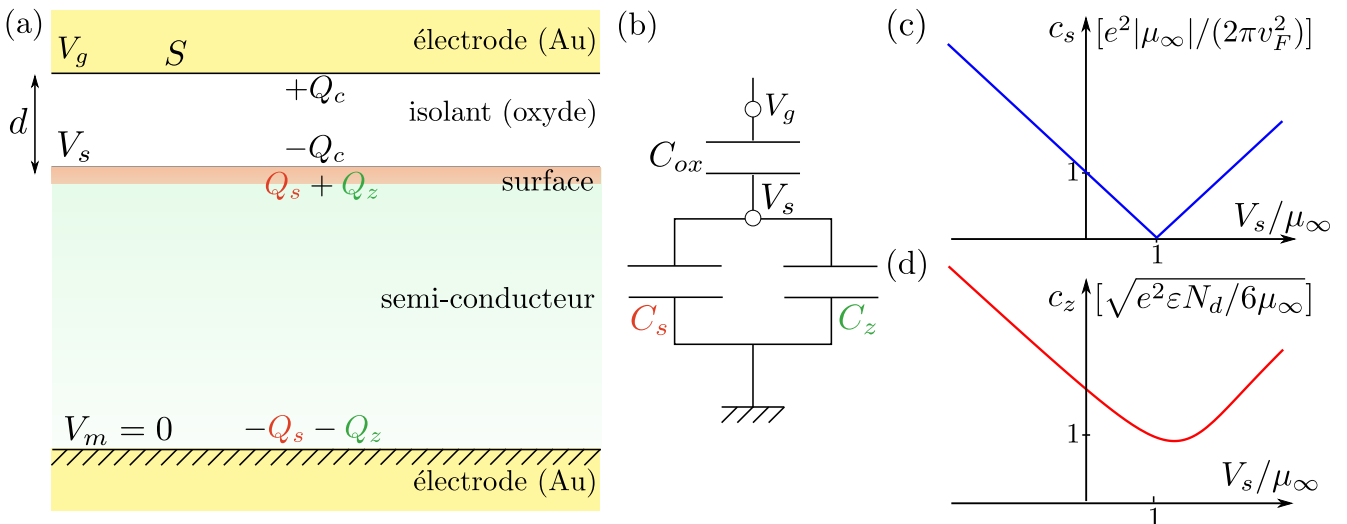


FIGURE 4.5 – (a) Schématisation du couplage capacitif au semi-conducteur et des quantités utilisées dans le texte. (b) Circuit électrique équivalent à l'équation (4.11). (c) Capacité quantique d'une relation de dispersion linéaire, $E = \pm v_F |\mathbf{k}|$, en deux et trois dimensions d'espace. La capacité n'est proportionnelle à la densité d'états que dans le cas bidimensionnel.

La valeur de $V_s(V_g)$ est pour l'instant inconnue et dépend de la condition de neutralité $Q_c + Q_s + Q_z = 0$. On introduit les capacités $C_s = -\partial Q_s / \partial V_s$ et $C_z = -\partial Q_z / \partial V_s$ des états de surface et de la zone de charge d'espace. La différentiation de l'équation (4.9) par rapport à $V_s(V_g)$ permet ainsi d'écrire [Inh17]

$$C_g + C_s + C_g = C_g \frac{\partial V_g}{\partial V_s(V_g)} = C_g \left[\frac{\partial Q_s}{\partial V_s(V_g)} + \frac{\partial Q_z}{\partial V_s(V_g)} \right] \frac{\partial V_g}{\partial (Q_s + Q_z)} = C_g (C_s + C_z) \frac{\partial V_g}{\partial Q_c}. \quad (4.10)$$

La capacité totale du système étant $C = \partial Q_c / \partial V_g$, on obtient

$$(\text{capacité équivalente}) : \frac{1}{C} = \frac{1}{C_g} + \frac{1}{C_s + C_z}, \quad (4.11)$$

dont le circuit équivalent est tracé à la Figure 4.5(b). Le calcul des capacités $C_s = -\partial Q_s / \partial V_s$ et $C_z = -\partial Q_z / \partial V_s$ se fait en deux étapes [Lüt13, Inh17]

(i) On utilise le théorème de Gauss afin de relier la charge au champ électrique \mathcal{E} et on impose $\mathcal{E}(z \rightarrow \infty) = 0$

$$Q = \varepsilon_0 \varepsilon_r \int dS dz \operatorname{div}(\mathcal{E}) = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathcal{E}_z(z=0) S. \quad (4.12)$$

Le calcul de la charge se ramène donc au calcul du champ électrique correspondant en $z = 0$.

(ii) On utilise l'équation de Poisson (4.4) et l'équilibre électrochimique (4.5) pour calculer le champ électrique. On intègre une fois en la multipliant par dV/dz et on impose $\mathcal{E}(V=0) = \mathcal{E}(z \rightarrow \infty) = 0$

$$\mathcal{E}(z) = \frac{dV}{dz} = \pm \sqrt{\frac{2e}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \int_0^V dv \int_{\mu_\infty - ev}^{\mu_\infty} d\mu g[\mu, z(v)]}, \quad (4.13)$$

où μ_∞ est le potentiel chimique du volume et $g(\mu, z)$ est la densité d'états locale des électrons². La densité d'états locale s'écrit $g(\mu, z) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\mu - E_{\mathbf{k}}) |F_{\mathbf{k}}(z)|^2$ où $F_{\mathbf{k}}[z]$ est la fonction enveloppe normalisée ($\int d(z/L_z) |F(z)|^2 = 1$). La présence de la fonction enveloppe nécessite le calcul explicite de $V(z)$ que l'on obtient en intégrant numériquement (4.13) [Lüt13]. On peut cependant faire le calcul analytique dans deux cas de figure :

• **États de surface.** Pour un état de surface fortement localisé $|F_{\mathbf{k}}(z)|^2 \approx \delta(z) = \mathcal{E}(z=0) \delta(V - V_s)$ et $g(\mu, z) = \mathcal{E}(z=0) g_{2d}(\mu) \delta(V - V_s)$, ce qui permet d'écrire

$$\mathcal{E}_{loc.}(z=0) = \frac{2e}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \int_{\mu_\infty - eV_s}^{\mu_\infty} d\mu g_{2d}(\mu). \quad (4.14)$$

On en déduit avec l'aide de (4.12) que la capacité des états de surface est $c_s = 2e^2 g_{2d}(\mu_\infty - eV_s)$. Cette relation est strictement valable pour les matériaux bi-dimensionnels, tel que le graphène, où on l'appelle la *capacité quantique*. Ce concept a été expliqué dans [Lur88] mais avait déjà été discuté et associé à la densité d'état du gaz bidimensionnel par le passé [BBF⁺80, KZ68, SGSH85]. Par exemple, si la dispersion des états de surface est linéaire $E_{\pm} = \pm v_F |\mathbf{k}|$, on obtient le comportement suivant de la capacité $c_s^{\text{Dirac}} = e^2 |\mu| / (2\pi v_F^2)$ [voir Figure 4.5(c)].

• **États délocalisés.** Dans le cas d'un état délocalisé $|F(z)|^2 = 1$ et $g(\mu, z) = g_{3d}(\mu)$, on obtient

$$\mathcal{E}_{deloc.}(z=0) = \sqrt{\frac{2e}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \int_0^{V_s} dv \int_{\mu_\infty - ev}^{\mu_\infty} d\mu g_{3d}(\mu)}. \quad (4.15)$$

La capacité correspondante est celle de la zone de charge d'espace dont l'expression est

$$c_z = -\frac{1}{S} \frac{\partial Q_z}{\partial V_s} = \sqrt{\frac{e \varepsilon_0 \varepsilon_r}{2}} \frac{\int_{\mu_\infty - eV_s}^{\mu_\infty} d\mu g_{3d}(\mu)}{\sqrt{\int_0^{V_s} dv \int_{\mu_\infty - ev}^{\mu_\infty} d\mu g_{3d}(\mu)}}. \quad (4.16)$$

2. On utilise la relation simplifiée $\partial n / \partial \mu = g(\mu, z)$ et pour les porteurs de types trou il faut compte un signe moins en facteur.

Par exemple, dans le cas d'un semi-métal de Weyl où l'on écrit la densité d'états sous la forme $g(\mu) = N_d(\mu/\mu_\infty)^2$, on obtient

$$c_z^{\text{Weyl}}(V_s) = \sqrt{\frac{e^2 \varepsilon_0 \varepsilon_r N_d}{6\mu_\infty}} \left| \frac{1 - (1 - eV_s/\mu_\infty)^3}{\sqrt{eV_s/\mu_\infty + \frac{1}{4}(1 - eV_s/\mu_\infty)^4}} \right|. \quad (4.17)$$

Cette expression est tracée à la Figure 4.5(d) où l'on constate que la capacité ne s'annule pas et évolue linéairement avec le potentiel de surface, ce qui ne reproduit pas le comportement de la densité d'état du semi-métal de Weyl $g_{3d}(\mu) \sim \mu^2$. On observe ici un effet de moyenne lié à l'écrantage du potentiel dans la zone de charge d'espace, ce qui a un rôle analogue à une moyenne thermique³. Cet effet complique la spectroscopie par la capacité quantique et affecte les états de surface si ces derniers sont étendus : on s'attend à un effet de moyenne d'autant plus important que les états de surface sont étendus dans le volume et que le potentiel de la zone de charge d'espace chute abruptement.

Le cas d'un semi-conducteur est plus compliqué à traiter à cause de son gap et de l'apparition d'une zone de déplétion lorsque la bande de conduction est totalement dépeuplée ($eV_s = \mu_\infty$) et suivie du peuplement de la bande de valence ($eV_s > \mu_\infty + \Delta$). Cette situation est discutée dans [Inh17] et pose certains problèmes comme l'apparition d'une jonction p - n en surface.

Par la suite, on considère que l'on peut séparer le calcul de la capacité des états de surface et des états de volume, ce qui est valable si la chute de potentiel au niveau des états de surface est négligeable [BBF⁺80]. En règle générale, on mesure la capacité quantique en fonction du potentiel de grille ou du champ magnétique ce qui permet une mesure directe de la densité d'états des états de surface. Nous y reviendrons à la section 4.3.3 mais auparavant je vais introduire l'équivalent des états de Shockley pour une interface continue.

4.1.2 Inversion de bande en surface

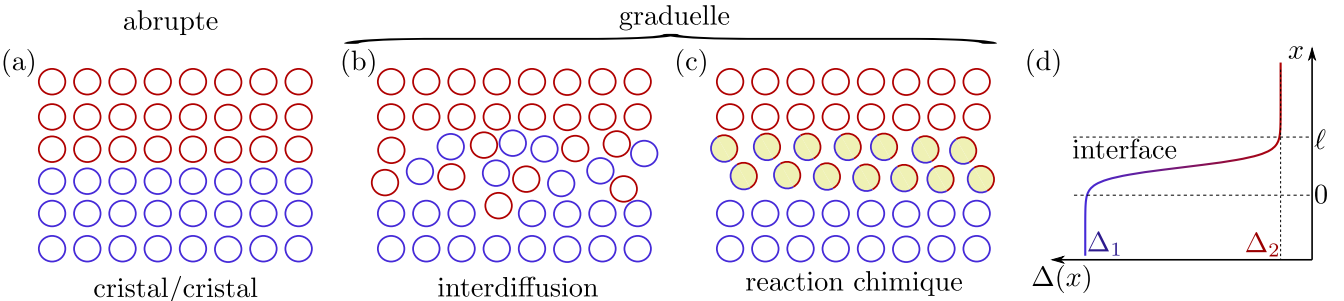


FIGURE 4.6 – L'interface de deux solides peut être abrupte (a) ou graduelle (b et c) pour diverses raisons. (c) Chaque solide est décrit par un paramètre d'ordre qui change doucement à l'interface et est à l'origine d'états de surface. Nous considérons le cas où ce paramètre d'ordre est le gap Δ , pour une hétérojonction topologique ce paramètre change de signe à l'interface.

Le comportement d'un électron à l'interface entre deux matériaux n'est pas seulement affecté par un décalage en bloc de la structure de bandes. Par exemple, le modèle de Su, Schrieffer et Heeger (SSH) [SSH79, SSH80] de la chaîne de polyacétyleène indique l'apparition de déformations de la chaîne sur une longueur $\xi \approx v_F/\Delta > a$ où v_F est la vitesse de Fermi et Δ le gap des états de volume [voir section 1.2.2]. Cette déformation a pour conséquence une dépendance en position du gap des électrons le long de la chaîne, $\Delta(z)$, et qui change de signe dans le cas du modèle SSH. De façon plus générale, on peut observer un potentiel différent sur chaque bande en fonction des conditions de croissance du matériau, de la diffusion atomique, de l'oxydation à la surface et des fluctuations du potentiel électrostatique au sein de grandes cellules élémentaires [voir Figure 4.6].

3. Par contre, contrairement à la moyenne thermique, le potentiel électrostatique a une forme triangulaire [voir Figure 4.4(a)] et donc la distribution de probabilités n'est pas symétrique et induit un décalage [voir Figure 4.5(c)].

Dans tous les cas, si ce potentiel est lentement variable, il est possible d'utiliser le développement de la fonction d'onde en terme d'une enveloppe lentement variable $F(z)$ introduite à la section 1.2.2

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(x, y, z) = F(z)e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (4.18)$$

On introduit la notation $k_{\parallel} = (k_x, k_y, 0)$ pour les vecteurs d'ondes dans le plan de l'interface (plane).

La forme exacte du potentiel de surface est généralement inconnue, ce qui donne une grande liberté pour la modélisation de l'interface. Pour cette thèse nous avons travaillé à la modélisation d'une interface lentement variable où les équations du mouvement s'avèrent très similaires à celle d'un électron dans un champ magnétique. Ce raisonnement sera détaillé à la section suivante mais avant cela je souhaite discuter les autres méthodes existantes. Ces dernières étendent la relation de continuité de l'équation de Schrödinger, utilisée pour dériver les états de Tamm et de Shockley [voir sections 1.1.3 et 1.1.3], et qui traduit la conservation de la densité de probabilité $\rho = |\Psi|^2$ et de l'opérateur courant $\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (4.19)$$

L'extension de cette relation de continuité aux modèles de basse énergie permet en principe de décrire les états d'une interface lentement variable. Par exemple, si le matériau est à l'interface avec le vide et si la fonction enveloppe $F(z)$ est solution du Hamiltonien de basse énergie suivant

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - i\hbar \hat{J} \partial_z, \quad (4.20)$$

avec \hat{H}_0 et \hat{J} des matrices hermitiennes indépendantes de la position, alors la condition de continuité s'écrit [VE16]

$$(\text{condition de continuité avec le vide}) : [\Psi^\dagger \hat{J} \Psi]_{\text{bords}} = 0. \quad (4.21)$$

Cette équation étant non-linéaire, on la linéarise en introduisant un opérateur \hat{O} tel que $\hat{O}\Psi(z=0) = 0$ et qui injecté dans l'équation (4.21) impose $\hat{O}^\dagger \hat{J} \hat{O} = \hat{J}$. Cette approche permet la dérivation d'une grande variété d'états de surfaces mais ceux-ci sont souvent difficiles à interpréter et dépendent de paramètres inconnus [DV17, VE16, EZV15]. L'apparition de ces états n'est pas forcément due à l'inversion de bande à l'interface, ce qui fut critiqué dans le cadre des isolants topologiques [ZKM12, Lin17]. Afin de pallier à ce défaut, une autre approche est d'imposer la continuité de l'équation de Schrödinger à l'interface entre deux matériaux [ZKM12]. Par exemple, avec le Hamiltonien (4.20), pour une matrice \hat{J} inversible, on a

$$(\text{condition de continuité entre matériaux}) : \hat{J}[\Psi(0^+) - \Psi(0^-)] = 0 \implies \Psi(0^+) = \Psi(0^-). \quad (4.22)$$

Cette relation de continuité a été utilisée avec succès pour décrire le comportement à la surface des isolants topologiques [ZKM12] et des semi-métaux de Weyl [OM14]. Cependant, cette approche présente un désavantage quand il s'agit d'y ajouter une perturbation en surface : l'interface étant fortement localisée, il est nécessaire d'introduire une perturbation elle aussi très localisée $\hat{V}(z) = \hat{V}_0 \delta(z)$. En présence d'un tel potentiel de surface, la continuité de la fonction d'onde devient ⁴

$$\Psi(0^+) - \Psi(0^-) = \hat{J}^{-1} \hat{V}_0 [\Psi(0^+) + \Psi(0^-)] / 2. \quad (4.23)$$

L'utilisation d'une perturbation localisée à l'interface est difficile à justifier car on s'attend à ce qu'elle s'étende aussi dans les matériaux. La méthode que je présente à la section suivante étend cette approche à une interface lentement variable, afin de permettre une description plus réaliste de l'influence des potentiels de surface.

4. On utilise que le carré de la fonction de Heaviside vérifie $\theta^2(z) = \theta(z) \implies 2\theta(z)\delta(z) = \delta(z)$, par conséquent $\int_0^\infty \delta(z)f(z) = f(0)/2$.

4.2 États de surfaces topologiques : un modèle illustratif

Au cours de cette section je vais illustrer les états électroniques à l'interface de deux isolants dont le nombre de Chern diffère [voir 1.3.2]. Nous allons considérer le cas simplifié où les isolants $j = 1, 2$ sont bi-dimensionnels et ne diffèrent que par le signe de leur gap. Ces derniers sont décrits par le modèle de basse énergie introduit à l'équation (1.40),

$$\hat{H}_j = \mu_j \hat{1} + \begin{pmatrix} \Delta_j & v_F(k_x - ik_y) \\ v_F(k_x + ik_y) & -\Delta_j \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Dans un premier temps nous fixons μ à zéro, le spectre de ce modèle est alors $E_{j,\pm}(k_x, k_y) = \pm \sqrt{\Delta_j^2 + v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2}$ et les deux isolants se distinguent par leurs gaps Δ_1 et Δ_2 . Ce modèle simplifié est décrit par un nombre de Chern partiel – car ce gap isolant est en principe accompagné d'un second – qui vaut $\text{sgn}(\Delta)/2$ [voir 1.3.2] et on considère que l'on a une *hétérojonction topologique* si $\Delta_1 \Delta_2 < 0$.

L'interface des deux isolants est perpendiculaire à l'axe x . On la décrit par un Hamiltonien dépendant de la position x et qui interpole les deux isolants de part et d'autre de l'interface, sur une longueur caractéristique ℓ [voir Figure 4.6(d)]. Cela revient à remplacer le paramètre Δ de l'équation (4.24) par un gap $\Delta(x)$ qui interpole entre les deux isolants, tel que $\Delta(x \rightarrow -\infty) = \Delta_1$ et $\Delta(x \rightarrow +\infty) = \Delta_2$. Ceci introduit une longueur caractéristique $\xi = 2v_F/|\Delta_2 - \Delta_1|$ qui se compare à l'épaisseur ℓ de l'interface : on a une *interface abrupte* si $\ell \leq \xi$ et une *interface douce* si $\ell > \xi$. On obtient l'un ou l'autre régime en fonction du matériau et des conditions de croissance. Le vecteur d'onde $k_x = -i\partial_x$ ne commute pas avec les positions, $[x, k_x] = i$, et il est utile de réécrire le Hamiltonien dans la *base chirale* à l'aide d'une rotation $|\Psi\rangle = e^{-i\pi\hat{\sigma}_x/4}|\Psi_c\rangle$

$$\hat{H}_c = \begin{pmatrix} v_F k_y & \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger & -v_F k_y \end{pmatrix}, \quad (4.25)$$

où l'on a introduit l'opérateur $\hat{a} = v_F k_x + i\Delta(x)$. Le profil de $\Delta(x)$ est en général choisit arbitrairement pour être comparé à l'expérience. La rotation fournit donc un hamiltonien sous une forme (4.25) qui souligne le lien avec des bandes de Landau [voir section 2.3]. En effet, on montre dans la suite que \hat{a} et \hat{a}^\dagger jouent le rôle d'opérateurs d'échelle et le "gap" entre bandes de Landau est ici donné par la dispersion selon l'axe y .

4.2.1 Spectre des états de surface et analogie magnétique

On peut par exemple choisir un potentiel de la forme

$$\Delta(x) = \frac{1}{2}(\Delta_2 - \Delta_1) [\delta + \tanh(x/\ell)], \quad (4.26)$$

où l'on a introduit le *rapport d'asymétrie* $\delta = (\Delta_1 + \Delta_2)/(\Delta_2 - \Delta_1)$. Le calcul dans le cas de gaps antisymétriques, $\delta = 0$, a été discuté à de nombreuses reprises [SSH79, SSH80, TLLM80, VP85, PPV87, PSW13, KY15, AYN16] car il est similaire à la résolution l'équation de Pöschl-Teller [PT33, Lek07]. Lors de cette thèse nous avons résolu la situation où $\delta \neq 0$ afin de discuter la situation plus réaliste d'une hétérojonction asymétrique ($|\delta| \rightarrow 1$) [TJI⁺17]. Le calcul est donné en Annexe D.1 pour les isolants topologiques tridimensionnels et dont nous discutons à la section 4.3. Cependant, il s'avère que les résultats obtenus pour un tel potentiel sont qualitativement reproduits par une linéarisation de $\Delta(x)$ au niveau de l'inversion de bande ($\Delta(x=0) = 0$)

$$\Delta(x) \approx \text{sgn}(\Delta_2 - \Delta_1) v_F x / \ell_S^2, \quad (4.27)$$

où la longueur caractéristique ℓ_S dépend du comportement du potentiel au niveau de l'inversion de bande. Par exemple, la linéarisation du potentiel (4.26) donne $\ell_S^I = \sqrt{\ell\xi/(1-\delta^2)}$ mais si on interpole directement le gap des deux isolants on obtient $\ell_S^{II} = \sqrt{\ell\xi}$ [KRvO13]. Nous allons voir que cette longueur ℓ_S est analogue à la

longueur magnétique ℓ_B des niveaux de Landau. En effet, si on introduit l'opérateur $\hat{c} = \ell_S \hat{a}^\dagger / \sqrt{2} v_F$ on trouve l'algèbre des opérateurs d'échelles rencontrée à l'équation (2.75)

$$[\hat{c}, \hat{c}^\dagger] = \text{sgn}(\Delta_2 - \Delta_1). \quad (4.28)$$

Par la suite, on considère la situation où $\Delta_2 > 0 > \Delta_1$, le traitement du cas $\Delta_1 > 0 > \Delta_2$ étant complètement analogue si on permute le rôle des opérateurs \hat{c} et \hat{c}^\dagger . Le Hamiltonien est alors similaire à celui d'un électron de Dirac en présence d'un champ magnétique (1.40)

$$\hat{H}_c = \begin{pmatrix} v_F k_y & \sqrt{2} v_F \hat{c}^\dagger / \ell_S \\ \sqrt{2} v_F \hat{c} / \ell_S & -v_F k_y \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

On rencontre une telle équation à l'occasion des niveaux de Landau d'un électron relativiste dans un champ magnétique uniforme [voir section 2.3]. Les états propres sont de la forme

$$\Psi_n = [\alpha_{1,n}|n\rangle, \alpha_{2,n}|n-1\rangle], \quad (4.30)$$

où $|n\rangle$ est un état propre de l'opérateur nombre $\hat{n} = \hat{c}^\dagger \hat{c}$. Le spectre et les états propres pour $n \geq 1$ sont obtenus par la diagonalisation du Hamiltonien

$$\hat{H}_{c,n} = v_F \begin{bmatrix} v_F k_y & \frac{\sqrt{2n} v_F}{\ell_S} \\ \frac{\sqrt{2n} v_F}{\ell_S} & -v_F k_y \end{bmatrix}, \quad (4.31)$$

qui agit sur le spineur $(\alpha_{1,n}, \alpha_{2,n})$. Le spectre correspondant est $E_{n,\pm}(k_y) = \pm \sqrt{v_F^2 k_y^2 + 2n v_F^2 / \ell_S^2}$, ce qui est similaire au spectre des niveaux de Landau obtenu à l'équation (1.41) où le rôle du gap est joué par le terme dispersif $v_F k_y$. Il y a donc en surface des états massifs qui dispersent en $v_F k_y$ le long de l'interface, avec un terme de masse $\Delta_n = \sqrt{2n} v_F / \ell_S$. De la même façon que pour les niveaux de Landau, le mode $n = 0$ est spécial car il est chiral, $\Psi_0 = [|0\rangle, 0]$, et son spectre $E_0(k_y) = v_F k_y$ ne dépend pas des paramètres du potentiel $\Delta(x)$ (4.27). Il est indépendant de la façon dont on modélise l'interface, on y reviendra à la section suivante. On l'appelle l'*état de surface chiral*. Le spectre des états de surface est représenté à la Figure 4.7(a) pour le potentiel (4.26). On superpose le gap des états de surfaces à la Figure 4.7(b) (i) pour le potentiel décrit à l'équation (4.26) et (ii) pour le potentiel linéarisé de l'équation (4.27). Les gaps des états massifs sont plus petits pour un potentiel adouci et les deux modèles ont un indice n maximal N lorsque le gap des états de surface dépasse le gap des états de volume (la courbe verte a été tracée au delà pour guider l'œil).

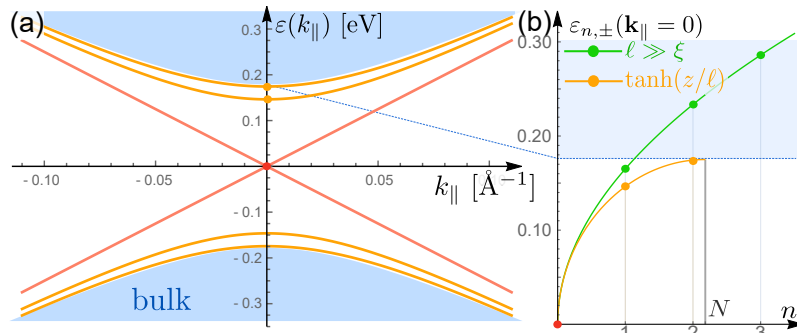


FIGURE 4.7 – (a) Spectre des états de surface pour le potentiel $\Delta(x) \sim \tanh(x/\ell)$ résolu en Annexe D.1 pour $\ell = 6$ nm, $v_F = 2.5$ eV.Å, $2\Delta_1 = -0.35$ eV et $2\Delta_2 = 5$ eV comme pour une interface entre Bi₂Se₃ et HfO₂. Le spectre est similaire pour un matériau bidimensionnel où $k_{||} = k_y$, et tridimensionnel où $k_{||} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$. L'état chiral ($n = 0$) est en rouge et les états massifs sont en orange, tous sont situés en dehors de bande de volume (en bleu). (b) Positions du bord de bande en fonction de l'indice du niveau pour le potentiel $\Delta(x) \sim \tanh(x/\ell)$ (en orange) et pour la limite d'une interface large (en vert). Le tracé des lignes sert de guide.

Le raisonnement précédent nécessite d'appliquer les conditions de continuité en $x = 0$ et ℓ . Ceci contraint les valeurs de n à celles où le gap des états massifs est dans le *gap commun* aux deux isolants. On peut ainsi estimer que le nombre d'états massifs maximal n_{max} est

$$n < n_{max} = \frac{\ell_s^2 \min(\Delta_1^2, \Delta_2^2)}{2v_F^2} \approx \frac{\ell}{\xi} (1 - |\delta|)^2. \quad (4.32)$$

En présence d'une forte asymétrie, $|\delta| \rightarrow 1$, le nombre d'états massifs est fortement réduit. Nous verrons à la section 4.2.3 que cette asymétrie peut être abaissée par l'application d'une différence de potentiel autour de l'interface. On observe enfin que les états massifs apparaissent par paires (pour un n donné, il y a les deux états \pm) et qu'il n'y a qu'un seul état chiral ($n = 0$) : le nombre d'états de surface est toujours impair [HK10]. Une autre condition d'existence phénoménologique, qui sera importante dans le cas des états de surface des semi-métaux de Weyl, porte sur la localisation des états de surface $\langle x \rangle \in [0, \ell]$. Dans le cas du modèle linéarisé à l'équation (4.29), en prenant $\Delta(x) = \Delta_1 + (\Delta_2 - \Delta_1)x/\ell$, j'obtiens par exemple

$$\langle x \rangle / \ell = \frac{1}{2} (1 - \delta) \in [0, 1], \quad (4.33)$$

ce qui revient à imposer la condition d'inversion de gap $\Delta_1 \Delta_2 < 0$.

Nous venons donc de montrer pour un modèle 2D simple mais générique, qu'une inversion de bande graduelle fait apparaître un état de surface chiral et un ensemble d'états massifs. Ceci est similaire au comportement des niveaux de Landau et nous verrons le caractère générique dans la suite de cette thèse où je discute de modèles plus réalistes, notamment en 3D. De plus, l'état chiral semble indépendant du potentiel et les états chiraux n'apparaissent que pour une interface suffisamment douce [voir équation (4.32)]. Ces propriétés peuvent être comprises par un raisonnement analogue à celui exposé par l'argument de Aharonov-Casher [AC79] [voir section 2.3.3] et dont nous allons maintenant discuter [TJI⁺17].

4.2.2 Existence et stabilité des états de surface

Pour cette section, nous considérons un profil général du potentiel $\Delta(z)$ à l'interface entre deux isolants [voir Figure 4.8].

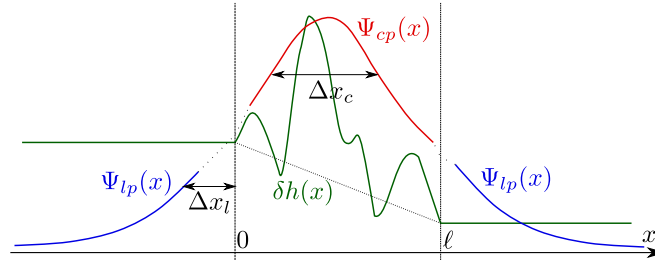


FIGURE 4.8 – Illustration d'un potentiel d'interface quelconque (en vert). La solution à courte portée Ψ_{cp} (en rouge) est obtenue pour un potentiel linéarisé et son extension est $\Delta x_c = \ell_s \sim \sqrt{\ell \xi}$. La solution à longue portée Ψ_{lp} (en bleu) est obtenue pour une interface abrupte [voir section 4.1.2] et son extension est $\Delta x_l = \ell_s^2 / \ell \sim \xi$. Le comportement à longue portée prédomine si $\ell \ll \Delta x_c, \Delta x_l$ soit pour $\ell \ll \xi$.

Stabilité du mode chiral. Le mode chiral ($n = 0$) ne dépend ni de $\Delta(z)$ ni de l'épaisseur ℓ de l'interface. Les solutions chirales $\Psi_+ = (\phi_+, 0)$ et $\Psi_- = (0, \phi_-)$ reproduisent le spectre du mode $n = 0$, $E_{0\pm}(k_y) = \pm v_F k_y$ [voir équation (2.106)] mais, à la façon de l'argument de Aharonov-Casher [AC79, KHMA11], seule l'une de ces solutions est confinée au niveau de l'interface [VP85, PPV87]. En effet, les composantes ϕ_{\pm} sont solutions de l'équation ($s = \pm$) [voir équation (2.112)]

$$[v_F \partial_x + s \Delta(x)] \phi_s = 0, \quad (4.34)$$

dont le comportement à longue portée est (i) $\phi_s \sim e^{-s\lambda_1 x}$ avec $\lambda_1 = \Delta_1 / v_F$ pour $z < 0$ et (ii) $\phi_s \sim e^{-s\lambda_2 x}$ avec $\lambda_2 = \Delta_2 / v_F$ pour $z > 0$. Dans le cas d'un échantillon infiniment grand, ces solutions sont localisées si seulement $s\lambda_2 > 0 > s\lambda_1$, soit pour $s = \text{sgn}(\Delta_2 - \Delta_1)$ et $\Delta_1 \Delta_2 < 0$. Le mode $n = 0$ existe donc dès qu'il y a inversion de bande et il est de chiralité $\text{sgn}(\Delta_2 - \Delta_1)$ dont le spectre est $E_0(k_y) = \text{sgn}(\Delta_2 - \Delta_1) v_F k_y$. Cet argument n'est valable que pour le mode chiral que l'on appelle parfois l'état de surface topologique.

Cette conclusion est aussi valable pour les états de surface des isolants topologiques tridimensionnels [VP85, PPV87, TJI⁺17] et des semi-métaux de Weyl [TCG17]. Les arguments sont en tout point les mêmes, seules les notations changent.

Existence des modes massifs. De façon générale, les solutions propres se décomposent sous la forme $\Psi = (\phi_+, \phi_-)$ et le carré du Hamiltonien (4.25) donne

$$[-v_F^2 \partial_z^2 + V_s(z)] \phi_s = (E^2 - v_F^2 k_y^2) \phi_s, \quad (4.35)$$

où $V_{\pm}(z) = \Delta(z)^2 \mp v_F \partial_z \Delta(z)$. Cette équation de Schrödinger unidimensionnelle non relativiste avec un potentiel confinant $V_s(z)$ et les énergies propres $\varepsilon_n^2 = E^2 - v_F^2 k_y^2$ est supersymétrique [Weg16]. Elle présente la symétrie chirale $\phi_s = -[v_F k_x - i s \Delta(x)] \phi_{-s}$ entre les solutions des potentiels V_{\pm} . Ainsi, hormis le mode $n = 0$, chaque mode est doublement dégénéré. J'ai représenté deux situations typiques de l'équation 4.35 : (i) en cas d'inversion de gap aux Figures 4.9(a et b) et (ii) en cas d'un minimum local du gap $|\Delta(z)|$ aux Figures 4.9(c et d).

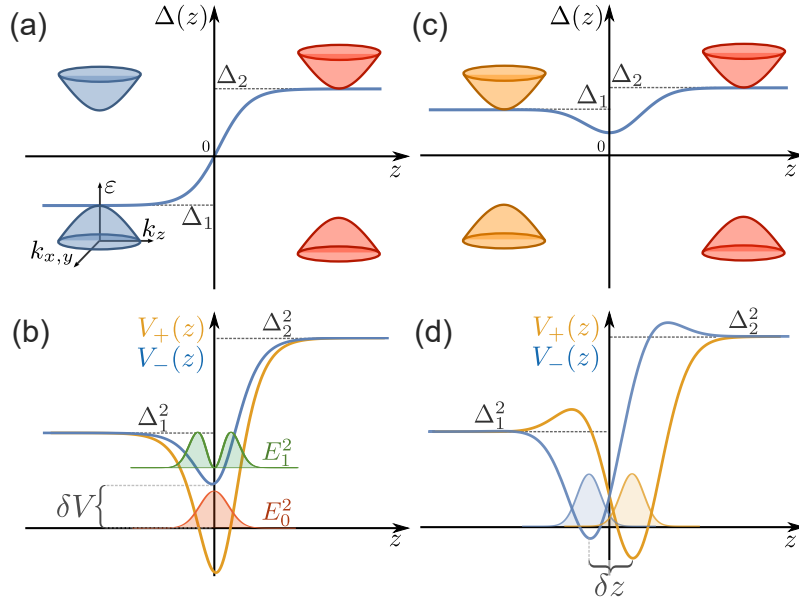


FIGURE 4.9 – Interface graduelle (a) d'une hétérojonction entre deux isolants de gaps opposés et (b) d'un empilement de trois isolants dont les gaps ont le même signe avec un gap minimal au centre. Les potentiels chiraux $V_{\pm}(z)$ sont représentés (b) pour l'hétérojonction et (d) pour l'empilement d'isolants.

Le cas d'une inversion de bande constitue ce que l'on appelle une *hétérojonction topologique*. Le cas illustré à la Figure 4.9(a) présente toujours un minimum pour $V_+(z)$ car $\Delta(z=0) = 0$ et donc $V_+(z=0) = -v_F \partial_z \Delta(z=0) < 0 < \Delta_1^2, \Delta_2^2$. L'état de surface associé à ce minimum est l'état de surface chiral dont l'énergie propre est $E_0 = 0$. Cet état n'est pas dégénéré car la symétrie chirale donne $V_-(z=0) = +v_F \partial_z \Delta(z=0) > E_0 = 0$, d'où l'absence d'un second mode chiral. L'existence des modes massifs dépend de la forme de $V_-(z)$: s'il existe un minimum, i.e. $V_-(0) < \min\{\Delta_1^2, \Delta_2^2\}$, il existe au moins un état de surface massif et son partenaire supersymétrique. On peut évaluer $V_-(z \sim 0) \sim v_F \partial_z \Delta(z=0) \sim v_F^2 / \ell \xi$, de sorte que la condition d'apparition d'un état de surface massif s'écrit $v_F^2 / \ell \xi < \min\{\Delta_1^2, \Delta_2^2\} = v_F^2 (1 - |\delta|)^2 / \xi^2$, ce qui est en accord avec la condition (4.32) déjà rencontrée.

Cette discussion peut être étendue aux *hétérojonctions conventionnelles* rencontrées dans le cas où une couche semi-conductrice est insérée entre deux isolants [KZ17] et ce qui correspond à la situation représentée

sur la Figure 4.9(c) et (d). On s'attend à observer des états de surface si la fonction $|\Delta(z)|$ présente un minimum $|\Delta_{\min}| < \min\{|\Delta_1|, |\Delta_2|\}$ tel qu'illustré à la Figure 4.9(c). On s'attend alors à l'apparition d'états doublement dégénérés et séparés d'une distance $\delta z \approx v_F/2\Delta_{\min}$ de part et d'autre de l'interface [voir Figure 4.9(d)].

4.2.3 États de surface en présence d'un champ électrique

Nous considérons maintenant que les isolants de part et d'autre de l'hétérojonction topologique ont un potentiel chimique μ différent. Cela se produit pour des matériaux dont les potentiels d'ionisation sont différents ou si l'on applique une différence de potentiel électrique. L'écrantage peut être concentré en surface [voir section 4.1.1], ce qui semble avoir été observé pour HgTe et a été associé à l'écrantage par les états de surface topologiques [BTS⁺14]. Ce phénomène est appelé l'*écrantage de Dirac*. On associe à ces effets d'écrantage un champ électrique \mathcal{E} tel que $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1 = e\mathcal{E}\ell$. On s'attend à ce que ce champ affecte les états de surface de la même façon que les niveaux de Landau abordés à la section 2.3 en raison de la covariance relativiste de l'équation de Dirac, ce que nous montrons dans ce paragraphe.

La chute de potentiel est modélisée par un potentiel chimique dépendant de la position, $\mu(z) = \frac{1}{2}e\mathcal{E}\ell f(z)$, et dont le profil $f(z)$ est similaire à celui du gap $\Delta(z)$, avec $f(\pm\infty) = \pm 1$. Cette situation est illustrée à la Fig 4.10(a) avec la convention d'un potentiel chimique opposé sur chaque isolant. Il s'agit alors de réaliser la transformation hyperbolique du Hamiltonien (4.25) dans la base chirale, $|\tilde{\Psi}\rangle = \mathcal{N} e^{-\eta\hat{\sigma}_y/2}|\Psi\rangle$ [voir section 2.2.2] afin de se ramener à la situation en l'absence de champ électrique décrite à la section 4.2.1. L'équation de Schrödinger s'écrit alors $\hat{H}'_c|\tilde{\Psi}\rangle = E|\tilde{\Psi}\rangle$ pour $\tanh(\eta) \equiv \beta = -e\mathcal{E}\ell/(\Delta_2 - \Delta_1) \in [-1, 1]$, avec

$$\hat{H}'_c = -\frac{1}{2}e\mathcal{E}\ell\delta\hat{1} + \hat{H}_c(v'_F, \xi', \delta', \ell) \quad (4.36)$$

où \hat{H}_c a été défini à l'équation (4.25) avec $v'_F = \sqrt{1 - \beta^2}v_F$, $\xi' = \xi/\sqrt{1 - \beta^2}$ et

$$\delta' = \frac{1}{1 - \beta^2} \left[\delta - \frac{Ee\mathcal{E}\ell/2}{(v_F/\xi)^2} \right] = \frac{1}{1 - \beta^2} \left[\delta - \frac{E(\mu_2 - \mu_1)/2}{(v_F/\xi)^2} \right]. \quad (4.37)$$

Comme $|\beta| < 1$, il existe un *champ électrique critique* $\mathcal{E}_c = (\Delta_2 - \Delta_1)/e\ell$ au delà duquel il n'est plus possible de se ramener à l'image d'une hétérojonction où les deux gaps sont centrés l'un sur l'autre. Ce champ critique est associé à la tension de claquage de la jonction au delà de laquelle le gap commun E_g aux deux matériaux disparaît [voir Figure 4.10(a)]. On n'obtient les états de surface que si la différence de potentiel chimique est plus petite que la différence de gaps. Le mode chiral ($n = 0$) est stable pour tous les champs en deçà du champ critique [voir section 2.3.3] et de nouveaux modes massifs apparaissent pour les champs croissants car l'asymétrie δ' – qui limitait le nombre de modes massifs à l'équation (4.32) – est abaissée. Comme l'expression de l'asymétrie effective δ' dépend explicitement de l'énergie E : (i) on s'attend à observer de nouveaux modes massifs sur la bande supérieur si $\delta e\mathcal{E}\ell > 0$ ou sur la bande inférieur sinon, et (ii) l'expression du spectre pour un profil tel que (4.26) est résolue de façon auto-cohérente car l'expression en l'absence de champ électrique dépend explicitement de δ .

Dans le cas du potentiel linéarisé discuté à la section 4.2.1, on en déduit le spectre en présence du champ électrique

$$E_{n,\pm}(k_y) = -e\mathcal{E}\ell\delta/2 \pm v'_F \sqrt{k_y^2 + 2(1 - \beta^2)^{1/2}n/\ell_S^2}. \quad (4.38)$$

Les conséquences de l'application d'une différence de potentiel que l'on déduit de cette expression sont les suivantes

- (i) L'aplatissement de la relation de dispersion de chaque mode, $v'_F = \sqrt{1 - \beta^2}v_F$. Ce résultat a été obtenu pour le mode chiral dans [LR12, VE16, DFCGDA17, KSPS17, TJI⁺17, ITA⁺17].
- (ii) La réduction du gap des états massifs, $(v_F/\ell_n)' = (1 - \beta^2)^{3/4}v_F/\ell_n$. Ce résultat est analogue à celui obtenu en 2D pour les niveaux de Landau en présence d'un champ électrique transverse [AP67, LSB07, GFMP09] et discuté à la section 2.3. On l'observe sur la Figure 4.10(c) où le gap des états massifs décroît quand la différence de potentiel augmente.

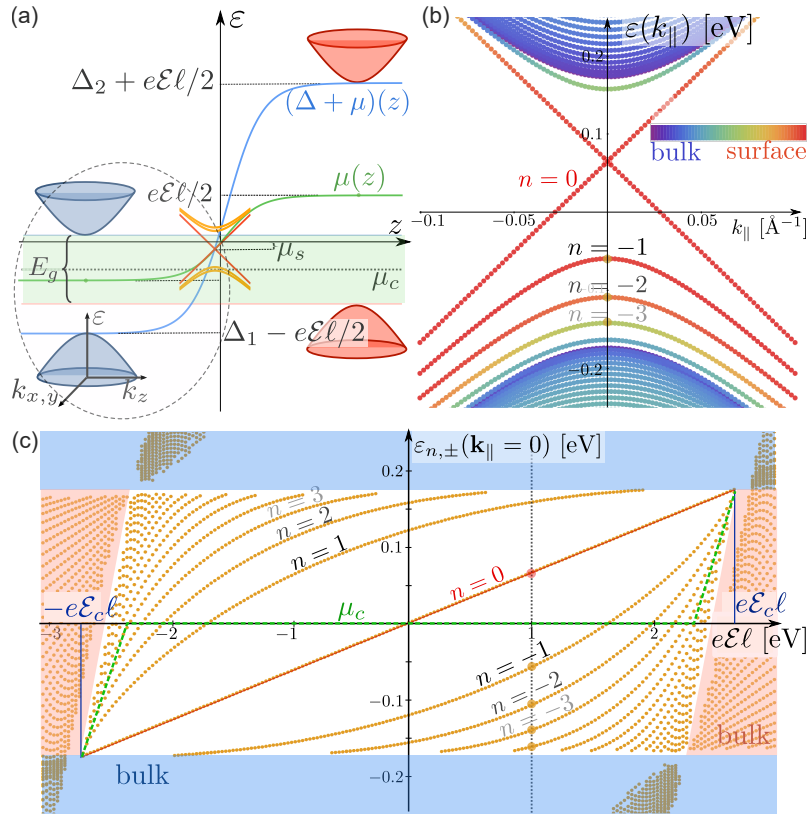


FIGURE 4.10 – États de surface d’une hétérojonction topologique entre deux isolants dopés n et p . (a) Illustration de l’hétérojonction avec $\mu_{p,n} = \pm e\mathcal{E}\ell/2$ pour $\mathcal{E} > \delta\mathcal{E}_c$. La jonction pn est caractérisée par le potentiel μ_c et par le gap commun aux deux isolants (en vert) de largeur $E_g = |\Delta_2 - \Delta_1 - e\mathcal{E}\ell|$ qui s’annule si $|\beta| > 1$. Le spectre des états de surface est décalé en énergie du potentiel chimique $\mu(z_0)$ au point z_0 de l’inversion de bandes. (b) Spectre numérique avec les mêmes paramètres que ceux de la Figure 4.7, $f(z/\ell) = \tanh(z/\ell)$ et centrés autour du centre de la bande interdite de l’isolant inversé [cercle en pointillés du panneau (a)]. On a pris $e\mathcal{E}\ell = 1$ eV et les couleurs correspondent à l’amplitude de la densité de surface $\rho \approx |\Psi(z = z_0)|^2$ de chaque état. (c) Bords de bande $\varepsilon_{n,\pm}(k_{||} = 0)$ des états de surface en fonction de la différence de potentiel chimique $e\mathcal{E}\ell$. Plusieurs états de surface massifs apparaissent pour $|e\mathcal{E}\ell|$ proche de $|e\mathcal{E}_c\ell| = |\Delta_2 - \Delta_1| = 2.675$ eV, pour une asymétrie de gap négative et forte ($\delta < 0$, $|\delta| = 0.87 \sim 1 = |\delta|_{\max}$).

(iii) Le décalage en énergie μ_s des états de surface par rapport aux états de volume dépend de l’asymétrie des gaps δ . On trouve $\mu_s = -\frac{1}{2}e\mathcal{E}\ell\delta$ dans la convention où les potentiels chimiques sont opposés pour chaque isolant. Cette valeur est en fait celle du potentiel chimique à l’inversion de gap en z_0 , $\mu_s = \mu(z = z_0)$ et se trouve toujours dans le plus petit gap isolant [voir figure 4.10(a)].

Le potentiel chimique, μ_c , de la jonction p - n est au milieu du gap commun aux deux isolants [voir figure 4.10(a et c)] et sa valeur dans le cas où $|\Delta_1| < |\Delta_2|$ est (i) pour $\mathcal{E} < -\delta\mathcal{E}_c$, $\mu_{c,1} = e\mathcal{E}_c\ell\delta/2$, (ii) pour $-\delta\mathcal{E}_c < \mathcal{E} < \delta\mathcal{E}_c$, $\mu_{c,2} = -e\mathcal{E}\ell/2$ et, (iii) pour $\mathcal{E} > \delta\mathcal{E}_c$, $\mu_{c,3} = -e\mathcal{E}_c\ell\delta/2$. Par conséquent le dopage des états de surface est $\mu_{c,s} = \mu_c - \mu_s$ et avec notre modèle on trouve $|\mu_{c,s}| < |\delta\Delta_1|$.

Le spectre des états de surface a été obtenu à l’aide des transformations hyperboliques pour un cas simplifié à l’équation (4.38). La résolution numérique de l’équation (4.24) pour le potentiel (4.26) en présence d’une différence de potentiel chimique a été obtenue par Victor Jouffrey avec qui nous avons collaboré sur ce projet [TJI⁺17]. On représente les résultats de ces simulations aux Figures 4.10(b) et (c) où l’on retrouve les comportements déjà décrits : l’existence d’un champ critique, le décalage en énergie des états de surface, la diminution de leur gap et l’augmentation du nombre d’états de surfaces du côté trou ou du côté électrons en fonction du signe de $\Delta_2 - \Delta_1$ par rapport à $\mu_2 - \mu_1$. Ces calculs numériques corroborent ainsi de manière frappante la symétrie relativiste de ces états de surface, en accord avec la théorie que j’ai étudié ici.

Nous venons ainsi de montrer que les états de surfaces d'une hétérojonction topologique se comportent de façon similaire aux niveaux de Landau. Nous allons maintenant illustrer ce comportement des états de surface pour les isolants topologiques tridimensionnels [section 4.3] et les semi-métaux de Weyl [section 4.4]. En particulier, nous discuterons des résultats expérimentaux que l'on attribue à la présence des états de surface massifs et nous verrons comment les états de surface d'un semi-métal de Weyl sont affectés par un véritable champ magnétique et par l'inclinaison des cônes.

4.3 Caractérisation des états de surface d'un isolant topologique tridimensionnel

Je réutilise les résultats précédents dans le cas des isolants topologiques tridimensionnels (Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 et HgTe) et je montre l'influence qu'a un champ magnétique sur les états de surface pour une configuration où il est hors du plan et dans le plan de l'interface. Dans un second temps je vais interpréter les résultats expérimentaux pour Bi_2Se_3 et Bi_2Te_3 en ARPES [BGB⁺10, BHM⁺11, BKdIT⁺12, CHW⁺12] et pour HgTe en transport [ITA⁺17] en terme de l'existence d'états massifs d'une hétérojonction douce et en présence d'un fort champ électrique en surface. Les expériences de transport sur HgTe ont été réalisées récemment au LPA, Paris à l'occasion de la thèse de Andreas Inhofer sous la supervision de Bernard Plaçais [Inh17]. Nos travaux ont beaucoup profité des discussions avec eux et leur équipe, notamment Erwann Bocquillon et Badih A. Assaf, mais aussi de la collaboration avec David Carpentier à l'ENS de Lyon et Victor Jouffrey qui est actuellement en thèse à Cambridge, Royaume-Uni. Ce dernier nous a fourni les simulations numériques permettant de vérifier nos calculs en terme de transformations relativistes.

4.3.1 Modélisation de l'interface

Dans le cas tridimensionnel, on décrit une phase isolante par le Hamiltonien suivant

$$\hat{H}_0 = \mu \hat{1} \otimes \hat{1} + \Delta \hat{1} \otimes \hat{\tau}_z + v_F k_z \hat{1} \otimes \hat{\tau}_y + v_F (k_y \hat{\sigma}_x - k_x \hat{\sigma}_y) \otimes \hat{\tau}_x, \quad (4.39)$$

où, pour Bi_2Se_3 , les matrices de Pauli $\hat{\sigma}$ et $\hat{\tau}$ agissent respectivement sur le degré de liberté de spin et orbital [ZKM12]. Ce modèle est similaire à celui des phases isolantes bi-dimensionnelles à l'équation (4.24) avec l'ajout de l'impulsion k_z qui nécessite de passer à un Hamiltonien de dimensions au moins 4×4 pour que le modèle soit isotrope et de gap non-nul [Zee10]. Le spectre est ainsi constitué des bandes $E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\Delta^2 + v_F^2 k^2}$ chacune doublement dégénérée. On considère $v_F > 0$ et l'indice \mathbb{Z}_2 de cet Hamiltonien est $\text{sgn}(\Delta)$ [ZKM12]. On a toujours une hétérojonction topologique si les gaps Δ_1 et Δ_2 des deux isolants en contact vérifient $\Delta_1 \Delta_2 < 0$.

Afin de modéliser le contact, selon z , des deux isolants, on interpole le gap de chacun par la fonction $\Delta(z)$, comme à la section 4.2. Il est pratique de se placer dans la base chirale, par la rotation $|\Psi\rangle = e^{-i\pi \hat{1} \otimes \hat{\tau}_y / 4} |\Psi'\rangle$,

$$\hat{H}_c = \begin{bmatrix} 0 & v_F k_+ & 0 & \hat{a} \\ v_F k_- & 0 & \hat{a} & 0 \\ 0 & \hat{a}^\dagger & 0 & -v_F k_- \\ \hat{a}^\dagger & 0 & -v_F k_+ & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.40)$$

où $k_{\pm} = k_y \pm i k_x$ et où l'on introduit l'opérateur $\hat{a} = -[v_F i k_z + \Delta(z)]$. La résolution est en tout points similaire au cas bidimensionnel. On résout le cas du profil continu (4.26) en Annexe D.1 pour lequel le spectre est [voir Figure 4.7]

$$E_{n,\pm}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \pm v_F \sqrt{k_{\parallel}^2 + 1/\ell_n^2} \quad (4.41)$$

où $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ et où l'extension de chaque mode dans la direction z est donné par

$$\frac{1}{\ell_n^2} = \frac{2n}{\ell \xi} \left(1 - n \frac{\xi}{2\ell}\right) \left[1 - \left(\frac{\delta}{1 - n \frac{\xi}{\ell}}\right)^2\right], \quad (4.42)$$

en terme de l'indice entier n délimité par $n < N = \frac{\ell}{\xi} \left(1 - \sqrt{|\delta|}\right)$. Cette condition sur n est similaire à celle obtenue dans le cas du profil linéaire à l'équation (4.32) car elle impose aux gaps des états de surface massifs d'être plus petits que les gaps de volume. Chaque bande $n \geq 1$ est doublement dégénérée tandis que le mode chiral $n = 0$ est simplement dégénéré, ce dernier est l'état de surface topologique indépendant du profil du potentiel de surface [voir section 4.2.2].

Comme dans le cas bi-dimensionnel, il est pratique d'analyser le Hamiltonien pour un gap linéarisé $\Delta(z) \simeq \text{sgn}(\Delta_2 - \Delta_1) v_F z / \ell_S^2$ pour lequel on introduit les opérateurs d'échelle $\hat{c} = \ell_S \hat{a} / \sqrt{2} v_F$, $\hat{c}^\dagger = \ell_S \hat{a}^\dagger / \sqrt{2} v_F$ tels que $[\hat{c}, \hat{c}^\dagger] = \text{sgn}(\Delta_2 - \Delta_1)$. Le traitement est identique à celui de la section 4.2 : pour $\Delta_2 > 0 > \Delta_1$, les états propres s'écrivent sous la forme⁵ $\Psi_n = [\alpha_{1,n}|n-1\rangle, \alpha_{2,n}|n-1\rangle, \alpha_{3,n}|n\rangle, \alpha_{4,n}|n\rangle]$ où $|n\rangle$ est l'état nombre associé à l'opérateur $\hat{n} = \hat{c}^\dagger \hat{c}$. Le spectre des états propres pour $n \geq 1$ est obtenu en diagonalisant le Hamiltonien suivant

$$\hat{H}_{c,n} = v_F \begin{bmatrix} 0 & k_+ & 0 & \frac{\sqrt{2n}}{\ell_S} \\ k_- & 0 & \frac{\sqrt{2n}}{\ell_S} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2n}}{\ell_S} & 0 & -k_- \\ \frac{\sqrt{2n}}{\ell_S} & 0 & -k_+ & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.43)$$

On trouve ainsi le spectre $E_\pm(\mathbf{k}_\parallel) = \pm v_F \sqrt{k_\parallel^2 + 1/\ell_n'^2}$ où $\ell_n' = \sqrt{2n/\ell_S}$ ressemble au développement limité de (4.42) pour $\ell \gg \xi$. L'état de surface chiral ($n = 0$) s'écrit quant à lui $\Psi_0 = [0, 0, \alpha|0\rangle, \beta|0\rangle]$ et le Hamiltonien agissant sur les composantes (α, β) s'écrit

$$\hat{H}_{c,n} = v_F \begin{bmatrix} 0 & -k_- \\ -k_+ & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.44)$$

Le spectre correspondant au mode chiral ($n = 0$) est donc le cône de Dirac $E_{0,\pm}(\mathbf{k}_\parallel) = \pm v_F |\mathbf{k}_\parallel|$. La dérivation des états à la surface d'un isolant topologique tridimensionnel est ainsi bien analogue au cas bidimensionnel et tous les résultats se transposent [TJI⁺17]. Les raisonnements étant analogues je ne vais pas les reproduire, ce sera aussi le cas pour les semi-métaux de Weyl. Cependant, maintenant que les états de surface sont bidimensionnels je vais discuter leur spectre en présence d'un champ magnétique hors du plan et dans le plan.

Champ magnétique hors du plan. Dans le cas d'un champ magnétique hors du plan, $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$ ($B > 0$), on introduit les opérateurs d'échelle \hat{b}, \hat{b}^\dagger tel que $\hat{b} = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} k_+$ [voir section 2.3]. Le Hamiltonien (4.40) s'écrit alors

$$\hat{H}_c = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} v_F \hat{b} / \ell_B & 0 & \hat{a} \\ \sqrt{2} v_F \hat{b}^\dagger / \ell_B & 0 & \hat{a} & 0 \\ 0 & \hat{a}^\dagger & 0 & -\sqrt{2} v_F \hat{b}^\dagger / \ell_B \\ \hat{a}^\dagger & 0 & -\sqrt{2} v_F \hat{b} / \ell_B & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.45)$$

pour lequel on peut écrire les états propres sous la forme $\Psi_m = [\beta_{1,m}|m-1\rangle, \beta_{2,m}|m\rangle, \beta_{3,m}|m\rangle, \beta_{4,m}|m-1\rangle]$ où l'on note $|m\rangle$ l'état propre de $\hat{m} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$. La détermination des états de surface est similaire aux passages précédents où l'on remplace $k_\parallel \rightarrow \sqrt{2n}/\ell_B$, quelque soit le profil $\Delta(z)$. On constate que chaque état de surface, qu'il soit chiral ($n = 0$) ou pas ($n \geq 1$), donne lieu à un mode magnétique chiral ($m = 0$) dont l'énergie propre est *indépendante* du champ magnétique

$$E_{n \geq 1, m=0} = \pm v_F / \ell_n, \quad (4.46)$$

$$E_{n=0, m=0} = 0. \quad (4.47)$$

La situation est intéressante car on est confronté à deux types d'oscillateurs associés (*i*) à la quantification du mouvement dans l'interface \hat{a}, \hat{a}^\dagger et (*ii*) à la quantification de Landau \hat{b}, \hat{b}^\dagger de fermions de Dirac sans masse ($n = 0$) et massifs ($n \geq 1$), accompagné de la dégénérescence $N_B = \phi_B / \phi_0$ discutée au Chapitre 1. Cependant, le cas d'un champ magnétique hors du plan n'altère pas le potentiel $\Delta(z)$ et pour cela il est nécessaire de considérer un champ magnétique dans le plan.

5. Il suffit de permuter les composantes dans le cas $\Delta_1 > 0 > \Delta_2$.

Champ magnétique dans le plan. On considère le cas d'un champ magnétique dans le plan, $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_x$, que l'on introduit en jauge de Landau par la substitution $k_y \rightarrow k_y - \text{sgn}(B)z/\ell_B^2$. Afin de pouvoir traiter cette situation nous considérerons un profil linéaire du gap à l'interface, de la forme

$$\Delta(z) = \Delta_1 + (\Delta_2 - \Delta_1)z/\ell = \Delta_1 + v_F z/\ell_S^2, \quad (4.48)$$

tel que $\Delta(0) = \Delta_1$ et $\Delta(\ell) = \Delta_2$. On se ramène alors au Hamiltonien dans la base chirale en réalisant la rotation suivante de l'équation (4.40), $|\Psi'\rangle = e^{-i\theta\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\mathbb{1}}} |\Psi''\rangle$ avec $\tan(\theta) = \text{sgn}(B)\ell_S^2/\ell_B^2$,

$$\hat{H}_{CB} = \begin{bmatrix} 0 & v'_F(k_y - \delta k_y) + i v_F k_x & 0 & \sqrt{2} v_F \hat{c}'/\ell'_S \\ v'_F(k_y - \delta k_y) - i v_F k_x & 0 & \sqrt{2} v_F \hat{c}'/\ell'_S & 0 \\ 0 & \sqrt{2} v_F \hat{c}'^\dagger/\ell'_S & 0 & -[v'_F(k_y - \delta k_y) - i v_F k_x] \\ \sqrt{2} v_F \hat{c}'^\dagger/\ell'_S & 0 & -[v'_F(k_y - \delta k_y) + i v_F k_x] & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.49)$$

où $v'_F/v_F = 1/\sqrt{1 + \tan^2(\theta)}$, $\delta k_y = -\tan(\theta)\Delta_1$, $1/\ell_S'^2 = 1/\ell_S^2 + 1/\ell_B^2$ et en remplaçant $\Delta(z)$ par

$$\Delta'(z) = [\Delta_1 - \tan(\theta)v_F k_y]/\sqrt{1 + \tan^2(\theta)} + v_F z/\ell'_S, \quad (4.50)$$

dans l'expression de \hat{c} du paragraphe précédent. La résolution de cet Hamiltonien est identique à celle de l'équation (4.43) et on a pour les états de surface

- (i) une diminution de la vitesse de Fermi transverse au champ magnétique (ici v_y) : ceci traduit la localisation des orbites cyclotron et engendre une augmentation de la densité d'états des états de surface,
- (ii) une augmentation du gap des états de surface en $v_F/\ell_S \sim v_F/\ell_B$ que l'on a rencontré pour les niveaux de Landau [voir section 2.3],
- (iii) un décalage de la relation de dispersion de δk_y selon k_y : cet effet n'a pas de rôle physique et peut être éliminé en translatant le potentiel vecteur,
- (iv) une réduction des valeurs accessibles de k_y , en effet on calcule

$$k_y = \frac{1}{\tan(\theta)} \left[\frac{\Delta_1}{v_F} + \sqrt{1 + \tan^2(\theta)} \frac{\langle z \rangle}{\ell_S'^2} \right] \in \left[\frac{1}{\tan(\theta)} \frac{\Delta_1}{v_F}, \frac{1}{\tan(\theta)} \frac{\Delta_1}{v_F} + \sqrt{1 + 1/\tan^2(\theta)} \frac{\ell}{\ell_S'^2} \right]. \quad (4.51)$$

À la limite d'un fort champ magnétique $\tan(\theta) \rightarrow \infty$ on se retrouve avec la condition de quantification des orbites de Landau pour un système dont la dimension est ℓ selon z [Goe09].

Ainsi on s'attend à observer l'influence du champ magnétique en transport par (i) les variations de capacité quantique – proportionnelle à la densité d'états des états de surface – car v_y et les valeurs permises de k_y changent et par (ii) la disparition de canaux de transport par l'évolution du gap en v_F/ℓ_S . Ces mesures n'ont pour le moment pas été réalisées et elles seraient un moyen de tester la description en terme d'une interface graduelle.

La prise en compte simultanée d'une composante du champ magnétique \mathbf{B} hors du plan (B_z) et dans le plan (B_x) donnera ainsi lieu à : pour B_z , une quantification de Landau des états de surface et pour B_x une augmentation du gap entre les bandes des états de surface.

4.3.2 États massifs de Bi_2Se_3 en spectroscopie ARPES

L'isolant topologique Bi_2Se_3 a été caractérisé à de multiples reprises. On lui attribue une vitesse de Fermi $v_F = 2.3..5 \text{ eV \AA}$ [XQH⁺09, HXY⁺12] et un gap de $2\Delta = 350 \text{ meV}$ [BGB⁺10], ce qui permet d'estimer $\xi \approx v_F/\Delta = 6.5..23 \text{ \AA}$. Les mesures de spectroscopie ARPES dont j'ai discuté au Chapitre 1 à l'occasion de la Figure 1.12, ont été faites en atmosphère oxydante et montrent l'existence de quelques états de surface massifs de type électron et de type trou (2..3 de chaque) [BHM⁺11]. On sait qu'une telle atmosphère favorise la croissance d'une couche

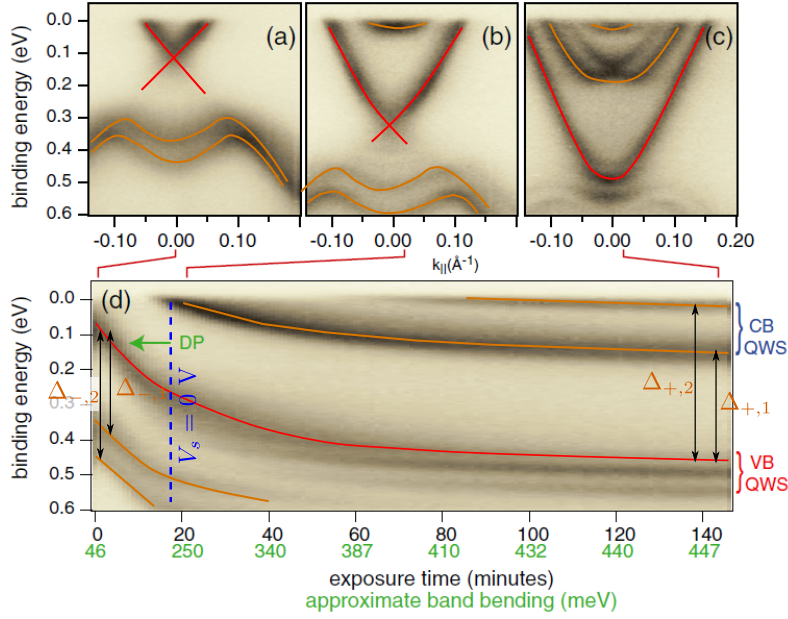


FIGURE 4.11 – Spectroscopie ARPES des états de surface de l’isolant topologique Bi_2Se_3 au cours de son oxydation par du monoxyde de carbone, tiré de [BHM⁺11]. J’y ai superposé des lignes de couleur afin d’identifier les états de surface d’une hétérojonction topologique. La ligne rouge identifie le mode chiral ($n = 0$) et les lignes oranges les modes massifs ($n \geq 1$). J’estime la position du zéro de potentiel de surface ($V_s = 0$ V) au niveau de la ligne bleu, là où les états massifs s’éloignent le plus du mode chiral. On observe une asymétrie particule trou qui est peut-être liée à la présence d’un terme supplémentaire en $k^2/2m\hat{1}$ à l’équation (4.39) [ZKM12]. Je pense que cette asymétrie peut expliquer les nombreuses sous-bandes qui apparaissent sous le mode chiral lorsque ce dernier se rapproche de la bande de valence, à cause du confinement électrostatique de la partie électron au centre de la bande de valence.

d’oxyde à la surface du matériau de l’ordre de $\ell \approx 10..20$ Å [GDA⁺16] et que j’associe à une interface graduelle [voir Figure 4.6] où l’on s’attend justement à observer $N \approx \ell/\xi = 1..3$ états de surface massifs [voir équation (4.32)]. De plus, on estime $\ell_s = \sqrt{\ell\xi} \approx 8..20$ Å, ce qui donne un ordre de grandeur du gap des états de surface massifs $\Delta_{n \geq 1} \approx v_F/\ell_s = 100..600$ meV en accord raisonnable avec les résultats expérimentaux [BHM⁺11]. Des mesures similaires ont été réalisées sur Bi_2Te_3 dont les caractéristiques sont proches de celles de Bi_2Se_3 et pour lequel ces ordres de grandeur se vérifient aussi. Pour ce dernier la quantification purement électrostatique de la bande de valence ne devrait pas être permise car le potentiel de surface est plus petit que la largeur de la bande [CHW⁺12] et l’apparition des états massifs en conséquence de l’inversion de bande est une explication alternative à approfondir. J’identifie le spectre des états de surface associés à l’inversion de bande sur la Figure 4.11 avec en rouge le mode chiral ($n = 0$) et en orange les modes massifs ($n \geq 1$). Le spectre n’étant pas symétrique particule-trou, peut être par la présence d’un terme supplémentaire en $k^2/2m\hat{1}$ à l’équation (4.39) [ZKM12], on observe des états de surface supplémentaires que j’associe au confinement électrostatique de la partie électron de la bande de valence [voir section 4.1.1].

Une lecture attentive de la position en énergie des états massifs de Bi_2Se_3 à la Figure 4.11 [BHM⁺11] permet d’extraire les valeurs suivantes pour le gap des états massifs : (i) $\Delta_{+,n=1} \approx 330$ meV et $\Delta_{+,n=2} \approx 450$ meV pour les états massifs de type électron et, (ii) $\Delta_{-,n=1} \approx -330$ meV et $\Delta_{-,n=2} \approx -400$ meV pour les états massifs de type trou. Nos calculs indiquent que le rapport des gaps des états $n = 1$ et $n = 2$ par rapport au point de Dirac est proche de $\sqrt{2} \approx 1.4$ dans le traitement approximatif d’une inversion de gap linéaire, ce qui peut être vu comme une borne supérieure [voir section 4.2]. On trouve ici $\Delta_{+,2}/\Delta_{+,1} \approx 1.36$ et $\Delta_{-,2}/\Delta_{-,1} \approx 1.2$ en bon accord avec notre théorie. En outre, je lis ces gaps pour les potentiels extrémaux de [BHM⁺11] que j’identifie comme étant $V_s = \pm 200$ meV en posant $V_s = 0$ à l’endroit où les états massifs sont les plus éloignés en énergie du point de Dirac [voir Figures 4.10 et 4.11]. Nos calculs théoriques montrent que le gap des états massifs en présence d’une

chute de potentiel dépend seulement de $\beta^2 \sim V_s^2$ et est donc indépendant du signe de V_s : dans ces conditions, le fait que l'on trouve le même gap pour les états de type trou et de type électron se justifie bien par une interface graduelle.

La tension de claquage d'une hétérojonction topologique comprenant Bi_3Se_3 est $eV_c = e\mathcal{E}_c\ell > 2\Delta = 350$ meV. On s'attend donc à ce que le paramètre $\beta = V/V_c$ introduit pour décrire l'influence du champ électrique sur les états massifs [voir section 4.2] soit $\beta < \beta_{max} = V_s/V_c = 0.56$. La renormalisation de la vitesse de Fermi est donc au plus $v'_F/v_F = \sqrt{1 - \beta_{max}^2} = 0.82$ et celle du gap est au plus de $\Delta'/\Delta = (1 - \beta_{max}^2)^{3/4} = 0.75$ pour les résultats reportés dans [BHM⁺11]. Il est difficile d'être suffisamment précis sur la lecture des figures pour vérifier ces pourcentages.

Ces ordres de grandeurs indiquent que les états de surface massifs observés en ARPES lors de l'oxydation de Bi_2Se_3 et de Bi_2Te_3 peuvent être expliqués en terme d'une inversion de bande graduelle plutôt qu'avec des arguments purement électrostatiques [voir section 4.1.1]. Des mesures supplémentaires en spectroscopie ARPES de l'oxydation de Bi_2Se_3 sont encore nécessaires pour étudier quantitativement l'évolution du gap des états massifs, de la vitesse de Fermi et du potentiel de surface. D'ailleurs, pour ces expériences la mesure du potentiel de surface se fait en suivant le déplacement en énergie du point de Dirac, ce qui n'est valable que si $\delta \approx 1$ car, comme nous l'avons montré à l'équation (4.38), on s'attend à un déplacement $\mu_s \approx V_s\delta$. Ainsi, la caractérisation du gap de l'oxyde permettrait l'évaluation de δ et donc d'accroître la précision sur la lecture du potentiel de surface V_s . Au delà, il a été montré récemment [BXK⁺17] que le dopage à l'indium (In) de Bi_2Se_3 permet de passer d'un isolant topologique à un isolant trivial : la caractérisation par spectroscopie ARPES de ces deux phases en atmosphère oxydante serait un moyen de vérifier la présence d'une inversion de bande graduelle. On ne s'attend pas à observer la coexistence des états de surface de type électron et de type trou lorsqu'on se trouve dans la phase triviale.

4.3.3 États massifs de HgTe en transport

L'analyse des mesures de transport de HgTe (déformé) a fait l'objet de la thèse de Andreas Inhofer avec qui nous avons collaboré à l'interprétation des mesures [ITA⁺17]. Je me contenterai ici d'une description superficielle de ces résultats expérimentaux dont les détails sont donnés dans la thèse d'Andreas [Inh17].

La croissance de HgTe sur CdTe déforme sa maille cristalline et décale la bande Γ_8 massive par rapport aux bandes Γ_8 légère et Γ_6 qui forment un gap inversé de $2\Delta_{\text{HgTe}} = -302$ meV [GRGM73b] [voir Figure 1.13(a)]. Ceci permet d'éliminer la contribution de la bande massive sur une portion de 25 meV du gap inversé. Ainsi, il a été possible de réaliser l'étude de la conductivité de Hall des états de surface de ces échantillons [voir Figure 1.13(a)] [BLN⁺11], ce qui a montré que le remplissage des états de surface est différent sur les deux faces opposées et a été attribué aux propriétés d'écrantage. Il semblerait en effet que les états de surface de cet isolant topologique agissent comme une cage de Faraday qui cache le potentiel électrique du volume, ce que l'on appelle l'*écrantage de Dirac* [BTS⁺14]. Dans ce cas, si on réalise une mesure de capacité, comme nous l'avons décrit à la section 4.1.1, alors on s'attend à être surtout sensible à la capacité quantique c_s des états de surface. La mesure de cette capacité pour différents potentiels de grille permet de remonter à la densité d'état des états de surface [voir équation (4.14)].

Une telle mesure de la densité d'états sur une large gamme de potentiels chimiques est possible si la capacité géométrique $c_g = \epsilon/d$ est suffisamment grande dans la configuration décrite à la Figure 4.5(a). C'est le cas des mesures de capacité quantique c_s et de conductivité σ dont on tire la constante de diffusion $\mathcal{D} = \sigma/c_s \sim \tau$ que je reporte à la Figure 4.12 et qui sont obtenues pour différentes tensions de grille V_g [ITA⁺17, Inh17]. Les mesures ont été réalisées sur deux types d'échantillons (i) un échantillon capé d'une couche de $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ ($2\Delta_{\text{CdHgTe}} = 900$ meV [BS72]) afin de le protéger de l'oxydation [Figures 4.12(a) et (b)] et (ii) un échantillon non-capé et dont la surface, en contact avec l'oxydant HfO_2 , s'oxyde [Figures 4.12(d),(e),(f),(g) et (h)]. L'échantillon de HgTe est épais de 67 nm ce qui est suffisant pour pouvoir négliger l'autre surface. Les figures expérimentales sont obtenues en fonction de la densité électronique $n = \frac{1}{e} \int C_{\text{tot}}(V_g) dV_g$ et du potentiel chimique $\mu = e \int (C_{\text{tot}}/C_q) dV_g$ dont l'évolution est grossièrement proportionnel au potentiel de grille V_g . Le champ électrique est évalué comme

étant celui dans l'isolant HfO_2 , $\mathcal{E} = ne/(C_g d)$. Ces mesures indiquent l'existence d'états massifs (notés MSS pour *Massive Surface States* sur la Figure 4.12) que l'on attribue aux états d'une interface graduelle et que je résume ici.

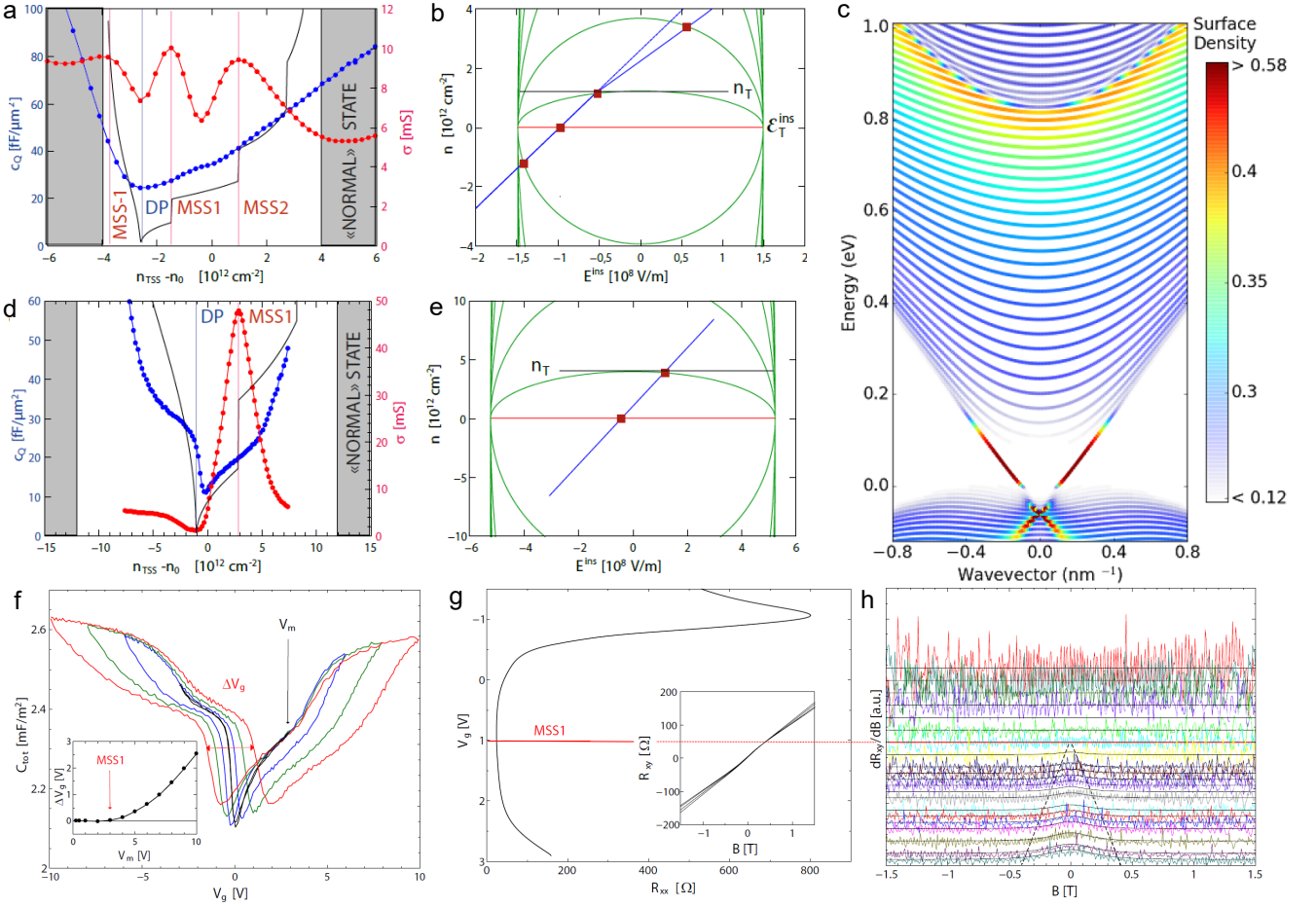


FIGURE 4.12 – Mesures de transport de HgTe déformé [tirées de [ITA⁺17]] pour une interface avec un oxyde (a,b) et pour une interface avec $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ (d,e,f,g,h). (a,d) Capacité quantique (en bleu) et conductivité (en rouge) en fonction de la densité surfacique de porteurs. La capacité quantique permet essentiellement de repérer la position du cône de Dirac tandis que la conductivité indique la position des états massifs. (b,e) On reporte par des carrés rouge la position des bords de bande des états massifs sur un diagramme similaire à celui de la Figure 4.10. La droite bleu correspond à la droite de charge alors que les lignes vertes correspondent à la position du bord de bande des états massifs en fonction du champ électrique à la surface. (c) Spectre des états de volume (en bleu) et des états de surface (en jaune-rouge) obtenu numériquement pour une interface large (5 nm) entre HgTe et CdTe, sans différence de potentiel chimique. Les états de surface coexistent avec les états de volume par un effet de taille de finie (l'hybridation est alors faible). (f) Cycle d'hystérésis de $C_s - V_g$. (g et h) Mesure de transport direct. On trace la conductivité longitudinale σ_{xx} et la dérivée de la conductivité de Hall σ_{xy} autour de $B = 0\text{T}$. La forme en S de la conductivité de Hall est indiquée dans l'encadré de la figure (g).

Capacité quantique. Les mesures de capacité quantique sont tracées en bleu sur les Figures 4.12(a) pour l'échantillon oxydé et 4.12(d) pour l'échantillon capé. On constate un minimum de capacité quantique que l'on attribue au cône de Dirac avec (i) un profil plus étalé et dopé pour l'échantillon oxydé et (ii) un profil raide et non (ou peu) dopé au cône de Dirac pour l'échantillon capé. On retrouve le profil dessiné à la Figure 4.5 pour les états de surface de Dirac, sur une large gamme de dopage n correspondant à une gamme de potentiels chimiques de l'ordre de 300 meV. Ceci indique que l'on n'observe peu la contribution des états de volume, en conséquence de l'écrantage de Dirac [BTS⁺14]. La capacité quantique ne s'annule jamais, même

pour l'échantillon non-dopé : la raison n'est pas encore claire mais est peut être du au recouvrement du cône de Dirac par la bande Γ_8 lourde, ce qui décale le minimum apparent [voir Figure 4.12].

On observe de légers accrocs au comportement linéaire de la capacité quantique, peut-être lié à l'apparition d'états de surface dont la densité d'états est tracée en lignes noires aux Figures 4.12(a) et (d). Les deux courbes ne se superposent pas. On peut invoquer plusieurs raisons pour l'expliquer mais je pense qu'on observe un effet de moyenne lié à l'étalement spatial des états massifs dans le volume (décrit par la fonction enveloppe $F(z)$ à l'équation (4.13) et que nous n'avons pas prise en compte).

Conductivité. La conductivité σ mesurée en radiofréquence est tracée en rouge sur les Figures 4.12(a) pour l'échantillon oxydé et 4.12(d) pour l'échantillon capé. On observe que le minimum de conductivité au niveau du cône de Dirac n'est pas centré au même endroit que la capacité quantique : ceci étaye l'explication précédente de la superposition du cône de Dirac et de la bande Γ_8 massive dessinée à la Figure 4.12(c).

Dans le cas des échantillons capés [Figure 4.12(d)], la constante de diffusion $\mathcal{D}(\mu) = \sigma/C_s \sim \tau$ s'avère linéaire avec le potentiel chimique. On l'explique en terme d'un mécanisme de diffusion par des impuretés chargées [CHSDS10, Inh17]. La chute de la constante de diffusion à $\mu = 300$ meV (le pic de conductivité) s'accompagne d'un accroc de la capacité quantique. Ce pic de conductivité est lié à l'apparition d'un mécanisme de diffusion supplémentaire que l'on attribue à la nucléation d'un état massif.

Dans le cas des échantillons oxydés, on observe la même phénoménologie mais avec cette fois deux pics de diffusion du côté des électrons et peut-être un troisième du côté trou. Cette fois la capacité quantique ne montre pas d'accroc, probablement à cause d'une contribution d'arrière-plan du volume, qui est dopé.

La position des pics de conductivité a été reportée sur les Figures 4.12(b) et (c) où est tracée la position théorique des bords de bande des états massifs en fonction du champ électrique [voir Figure 4.10]. Ceci permet d'évaluer le champ critique \mathcal{E}_c des deux échantillons : $\mathcal{E}_{\text{capé}} \approx 10^8 \text{ V m}^{-1} > \mathcal{E}_{\text{oxydé}} \approx 0.4 \cdot 10^8 \text{ V.m}^{-1}$. La différence de ces deux valeurs indique que le gap de la couche d'oxyde doit être plus petit que celui de HgCdTe. On trouve un gap des états de surface, de l'ordre de 100 – 300 meV, plus large que celui de l'isolant, ce qui indique une faible hybridation entre états de surface et de volume [voir Figure 4.12(c)]. On peut interpréter ces états en tant que *quasirésonances* [DS92].

Métastabilité, hystérésis de la droite $C_q - V_g$. Le tracé de la relation $C_q(V_g)$ pour l'échantillon capé avec une tension de grille lentement variable montre l'apparition d'un cycle d'hystérésis si la tension de grille dépasse $V_g = 3$ V [voir Figure 4.12(f)]. Ce que l'on vérifie en traçant la largeur du décalage en tension ΔV sur le cycle en fonction de la tension de grille maximal V_m (voir encadré de la Figure 4.12(f)). On attribue cet hystérésis à l'apparition d'un état de surface supplémentaire à partir d'une tension de grille critique. On observe aussi un décalage du minimum de capacité, ce qui indique le transfert de charges vers le volume.

Conductivité de Hall. La mesure de résistance DC montre un accroissement de la résistance autour de $V_g = 3$ V [voir Figure 4.12(g)] qui est accompagné par un changement du profil de la conductivité de Hall qui prend une forme en S [voir Figure 4.12(h)]. Cette forme en S s'explique par l'apparition d'un porteur de charge supplémentaire [AM76] à partir de $V_g = 1$ V.

L'ensemble de ces mesures s'explique qualitativement par la présence d'états de surface massifs contrôlés par un champ électrique comme à la section 4.2. Leur interprétation reste toutefois difficile et nécessite une meilleure description de l'écrantage en surface et des mesures pour d'autres interfaces qu'avec $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ et HfO_2 . Nous avons pris le parti d'expliquer les mesures à l'aide de quasi-résonances [voir Figure 4.12], ce qui peut être discutable.

Les semi-métaux de Weyl ont, comme les phases isolantes, la possibilité d'avoir des états de surface topologiques. Ces états sont particuliers car ils n'ont pas une surface de Fermi fermée, on parle d'arcs de Fermi, ce que nous allons maintenant étudier en présence d'un champ magnétique et d'une inclinaison.

4.4 États de surfaces d'un semi-métal de Weyl

La discussion des propriétés de transport des semi-métaux de Weyl repose généralement sur le comportement en volume de ces matériaux. Ce n'est pourtant pas une conclusion évidente si on calcule la longueur de pénétration du champ électrique au sein du matériau : on s'attend alors à observer une contribution non-négligeable de la part des états de surface. En partant de ce constat nous avons entrepris de décrire l'influence du champ magnétique et de l'inclinaison des cônes sur les états de surface [TCG17]. Il existe de nombreux travaux théoriques sur les états de surface des semi-métaux de Weyl [OM14, LA15, DV17] mais ce n'est que récemment que l'approche d'une interface douce a été utilisée pour ces matériaux [GVVI16, AYN16, TCG17].

4.4.1 Longueur de pénétration du champ électrique

Comme nous l'avons mentionné en introduction, on peut négliger la contribution des états de surface si la longueur de pénétration λ [équation (4.1)] est suffisamment importante. Par exemple, on s'attend au comportement suivant du rapport des conductivités σ des états de volume et de surface

$$\sigma_{\text{volume}}/\sigma_{\text{surface}} \sim \lambda/\Delta x, \quad (4.52)$$

où Δx est l'extension des états de surface. L'évaluation de λ est en général compliquée et nous nous contenterons ici d'un ordre de grandeur, qui indique que $\lambda \sim \Delta x$ et donc $\sigma_{\text{volume}}/\sigma_{\text{surface}} \sim 1$. Pour cela nous allons considérer l'écrantage du mode de surface chiral ($n = 0$) et des états de volume [LA15] d'un semi-métal de Weyl, à l'aide de l'équation de Poisson (4.4)

$$U''(x) = -\frac{e}{\epsilon_0} n(x), \quad (4.53)$$

où $U(x)$ est le potentiel électrique, e est la charge élémentaire et $n(x)$ est la densité électronique. Nous considérerons l'équilibre électrochimique d'un matériau non dopé tel que $\mu(x) + eV(x) = 0$ [voir équation (4.5)].

Écrantage par les états de surface. On considère la situation où le semi-métal de Weyl est situé en $x < 0$ et le vide en $x > 0$, chacun étant décrit par un modèle similaire à celui introduit à la section 2.1.3. Les cônes de Weyl ont une vitesse de Fermi v_F et sont situés dans l'espace réciproque en $\mathbf{k} = \pm \Delta k \mathbf{e}_z$. On admet que les états de surface d'une interface abrupte ($\ell \ll 1/\Delta k$) entre un semi-métal proche de la fusion (2.15) et un isolant à large gap vérifient [OM14]

$$\begin{cases} E(k_{\parallel}) = v_F k_y, \\ |\Psi_s\rangle = \sqrt{\frac{(\Delta k/2)^2 - k_z^2}{m v_F}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\frac{k_z^2 - (\Delta k/2)^2}{2m v_F} x}. \end{cases} \quad (4.54)$$

Les impulsions dans le plan étant $\mathbf{k}_{\parallel} = (0, k_y, k_z)$ avec $k_z \in [-\Delta k/2, \Delta k/2]$. La densité électronique vérifie donc

$$\frac{\partial n_s}{\partial \mu} = g_s(\mu, x) = \frac{1}{(2\pi)^2 v_F} \int_{-\frac{\Delta k}{2}}^{\frac{\Delta k}{2}} dk_z \frac{(\Delta k/2)^2 - k_z^2}{m v_F} e^{\frac{k_z^2 - (\Delta k/2)^2}{m v_F} x} \quad (4.55)$$

où $g_s(\mu, x)$ est la densité d'état locale par unités de surface selon la normale à l'interface. Le changement d'échelle $x \rightarrow s = \frac{(\Delta k/2)^2}{m v_F} x$ permet de réécrire l'équation de Poisson sous la forme

$$U''(s) = g \left(\int_{-1}^1 du (1 - u^2) e^{s(u^2-1)} \right) U(s), \quad (4.56)$$

où $g = 2\alpha m v_F / \pi \Delta k$ avec $\alpha = e^2 / 4\pi \epsilon_r \epsilon_0 v_F$ la constante de structure fine du matériau et ϵ_r la permittivité relative. Les deux échelles caractéristiques de l'équation de Poisson sont alors

- (i) L'extension des états de surface $\Delta x = m v_F / (\Delta k/2)^2$. Comme le gap Δ entre deux cônes de Weyl vérifie $\Delta = (\Delta k/2)^2 / 2m \approx v_F \Delta k / 2$, on peut utiliser l'approximation $v_F m / \Delta k \approx 1$ et $\Delta x \approx 2/\Delta k$.

- (ii) L'amplitude d'écrantage $g = 2\alpha m v_F / \pi \Delta k \approx 2\alpha / \pi = (2\alpha_0 / \pi \epsilon_r)(c / v_F)$ en terme de la constante de structure $\alpha_0 = 1/137$. On s'attend à ce que l'écrantage par les états de surface soit important si $g > 1$ et faible si $g < 1$. Il est notable que la constante d'écrantage est indépendante du potentiel électrique, à la façon d'un métal.

Dans le cas de Na_3Bi [LZZ⁺14, DE16, JLB⁺16] on a $\Delta k = 2\sqrt{2m\Delta} = 0.1 \text{ \AA}$, $v_F = 2.5 \text{ eV\AA}$, $1/2m = 10 \text{ eV\AA}^2$ et $\epsilon_r = 5$. Par conséquent, $g \approx 1$ et $\Delta x \approx 5 \text{ nm}$: l'arc de Fermi écran le champ électrique sur l'extension caractéristique des états de surface, comme le montrent nos calculs numériques à la Figure 4.13. Ce même calcul dans le cas d'une interface large ($\ell \gtrsim 1/\Delta k$) donne une extension des états de surface plus courte que l'épaisseur de l'interface, $\Delta x \sim \sqrt{\ell/\Delta k} < \ell$. Dans ce cas on s'attend à ce que le champ électrique renormalise la structure de bande des états de surface comme à la section 4.2.3.

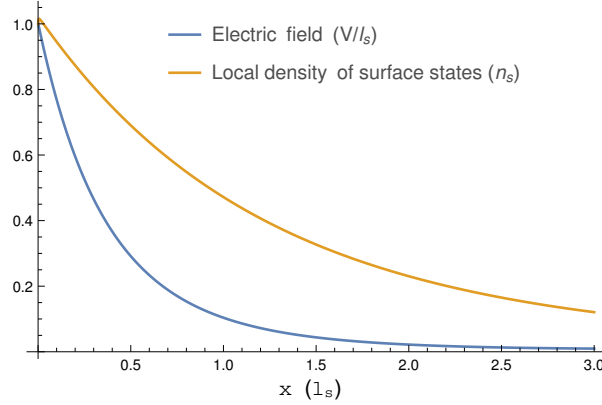


FIGURE 4.13 – Écrantage du champ électrique pour un semi-métal de Dirac tel que Na_3Bi (en bleu). La longueur de pénétration est de l'ordre de l'extension des états de surface dont on représente la densité locale (en orange).

Écrantage par les états de volume. La contribution des états de surface montre que le champ électrique est écranté sur l'extension typique des états de surface. Il est intéressant de voir comment les états de volume peuvent réduire encore cette longueur de pénétration. La dispersion d'un cône de Weyl étant $E(\mathbf{k}) = \pm v_F |\mathbf{k}|$, la densité d'état et l'équation de Poisson s'écrivent

$$\frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{\mu^2}{\pi^2 v_F^3}, \quad U''(y) = -\frac{4g\alpha e^2}{3\pi^2 v_F^2} U^3(y). \quad (4.57)$$

L'équation de Poisson est non linéaire et on estime la longueur de pénétration $\lambda = (3\pi^2 v_F^2 / 4g\alpha e^2 \mathcal{E}^2)^{1/4}$ pour un champ électrique typique $\mathcal{E} \sim U/\lambda$. Le rapport de cette longueur de pénétration avec celle des états de surface s'écrit

$$\frac{\ell_{scr}}{\lambda} = \sqrt{\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0}}, \quad (4.58)$$

où l'on a introduit le champ caractéristique $\mathcal{E}_0 \approx \sqrt{\frac{3}{g\alpha} \frac{\pi \Delta \Delta k}{16e}} \approx 10^6 \text{ V/m}$ (soit $U_0 \sim 10 \text{ mV}$) pour Na_3Bi . Ce n'est qu'au delà de ce champ électrique que les états de volume contribuent plus à l'écrantage que les états de surface, ce qui s'explique en terme de densité d'état : alors que les états de surface ont une densité d'états constante $g_s(E) \sim 1$ proportionnelle à la longueur de l'arc de Fermi, la densité d'états en volume s'annule au niveau des cônes $g_v(E) \sim E^2$.

On s'attend donc à ce que les états de surface contribuent de façon non négligeable au transport électronique. Leur structure de bande peut même être renormalisée en présence d'un potentiel électrique suffisamment important, comme dans le cas des isolants topologiques [section 4.2.3]. Les sections suivantes vont nous permettre de montrer l'influence du champ magnétique et de l'inclinaison sur la conductivité des états de

surface qui, selon la relation d'Einstein, s'écrit

$$\sigma_{ii} = \frac{e^2 \tau (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v}_g)^2}{2} g(\mu), \quad (4.59)$$

en terme de la charge élémentaire e , du temps de diffusion τ , de la densité d'états $g(\mu)$, de la vitesse de groupe $\mathbf{v}_g = \nabla E$ et de l'orientation \mathbf{e}_i , $i = x, y, z$ du courant.

4.4.2 Influence du champ magnétique dans le plan

La dérivation des états de surface d'un semi-métal reprend la méthodologie introduite pour un isolant topologique à la section 4.2. On peut décrire l'ensemble des phases de cette section par le Hamiltonien

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} M(k_z) & v_F(k_x - ik_y) \\ v_F(k_x + ik_y) & -M(k_z) \end{bmatrix}, \quad (4.60)$$

où le terme $M(k_z)$ permet de décrire (i) un isolant (4.24) si $M(k_z) = k_z^2/2m + \Delta$ ($m, \Delta > 0$), (ii) un semi-métal de Weyl proche de la fusion (2.15) si $M(k_z) = k_z^2/2m - \Delta$ ($m, \Delta > 0$) ou (iii) un cône de Weyl unique (2.2) si $M(k_z) = v_F k_z$.

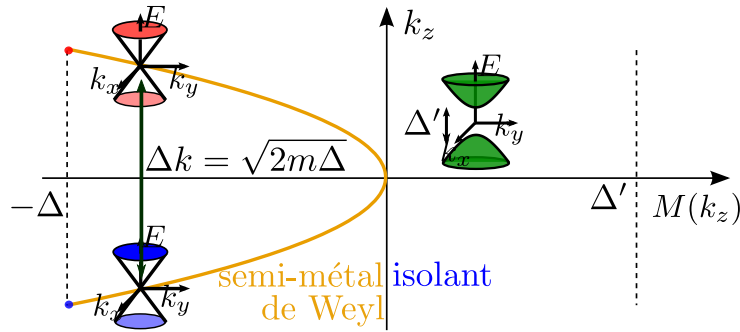


FIGURE 4.14 – Illustration des phases décrites par le modèle de fusion. La variation du paramètre Δ permet de passer de façon continue d'une phase semi-métallique à une phase isolante par le rapprochement (courbe orange) puis la fusion des cônes de Weyl.

Nous discuterons dans un premier temps le cas idéalisé du contact entre deux semi-métaux de Weyl dont les cônes sont légèrement décalés. L'intuition ainsi gagnée sur ce modèle nous permettra de mieux comprendre les états à l'interface entre un semi-métal de Weyl et un isolant.

Décalage d'un cône de Weyl à l'interface

On considère la situation où un cône de Weyl se déplace dans l'espace réciproque au passage d'une interface. On décrit les cônes de part et d'autre de l'interface par les Hamiltoniens $\hat{H}_{1g} = v_F \mathbf{k} \cdot \hat{\sigma}$ pour $x < 0$ et $\hat{H}_{1d} = v_F (\mathbf{k} - \delta \mathbf{k}) \cdot \hat{\sigma}$ pour $x > \ell$. Le comportement des électrons au niveau de l'interface $x \in [0, \ell]$ peut à nouveau être décrit par l'interpolation linéaire entre les deux Hamiltoniens

$$\hat{H}_{1s} = v_F (\mathbf{k} - \delta \mathbf{k} x / \ell) \cdot \hat{\sigma}. \quad (4.61)$$

Cette dépendance spatiale rappelle celle obtenue pour un électron de Dirac dans le pseudo-champ magnétique $\mathbf{B}_p = \nabla \times \mathbf{A}_p$ où la substitution de Peierls donne la dépendance en position $\hat{H}_B = v_F \mathbf{A}_p \cdot \hat{\sigma}$. Le cas présent est analogue à celui d'un pseudo-champ magnétique dans le plan de l'interface

$$\mathbf{B}_p = -\delta \mathbf{k} \times \mathbf{e}_x / (e\ell), \quad (4.62)$$

où \mathbf{e}_x est le vecteur unitaire normal à l'interface. Le pseudo-potential vecteur \mathbf{A}_p correspondant n'est pas invariant de jauge car $\nabla \cdot \mathbf{A}_p = \delta k_x$ est fixé par le modèle. Ce terme est à l'origine d'une dépendance en position

de la phase $\phi(x) = -x^2 \delta k_x / 2\ell$ de la fonction d'onde [TCG17] et que nous retrouverons à l'équation (4.65) lors du calcul de la longueur d'onde moyenne de la fonction enveloppe des états de surface.

La rotation d'angle θ et d'axe x de \hat{H}_{1s} permet de réécrire, pour $\tan(\theta) = \delta k_z / \delta k_y$,

$$\hat{H}_{1s}^{(\theta)} = e^{i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_x} \hat{H}_{1s} e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_x} = \begin{pmatrix} M(k_{\parallel}) & \sqrt{2}v_F \hat{c} / \ell_S \\ \sqrt{2}v_F \hat{c}^\dagger / \ell_S & -M(k_{\parallel}) \end{pmatrix}, \quad (4.63)$$

où $\ell_S = \sqrt{\ell / |\delta \mathbf{k}_{\parallel}|}$ est la longueur magnétique effective discutée à la section 4.2. Cette longueur dépend à la fois de l'épaisseur ℓ de l'interface et de la projection $\delta \mathbf{k}_{\parallel}$ des nœuds de Weyl dans le plan de l'interface. Par rapport aux états de surface dans les isolants topologiques, décrits à la section 4.2, $|\delta \mathbf{k}_{\parallel}|^{-1}$ joue le rôle de la longueur intrinsèque ξ . La dispersion des états de surface dépend de $M(k_{\parallel})$ dont l'expression est

$$M(k_{\parallel}) = v_F \frac{\delta k_y k_z - \delta k_z k_y}{|\delta \mathbf{k}_{\parallel}|} = v_F \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_p, \quad (4.64)$$

où $\mathbf{b}_p = \mathbf{B}_p / B_p$ est le vecteur unitaire associé à l'orientation du pseudo-champ magnétique. Les opérateurs d'échelle sont similaires à ceux introduits à l'équation (4.29) et nous permettent de définir l'opérateur nombre $\hat{n} = \hat{c}^\dagger \hat{c}$. Les états nombre $|n\rangle$ sont caractérisés par une extension $\sqrt{2n+1}\ell_S$ et

$$\begin{aligned} (\text{position moyenne}) & : \langle x \rangle / \ell = (\delta k_y k_y + \delta k_z k_z) / \delta \mathbf{k}_{\parallel}^2, \\ (\text{longueur d'onde moyenne}) & : \lambda_x = 2\pi\ell / (\delta k_x \langle x \rangle). \end{aligned} \quad (4.65)$$

Cette longueur d'onde moyenne peut être vue comme une conséquence de la fixation de jauge du pseudo-potential vecteur \mathbf{A}_p vu précédemment.

On est ainsi en mesure de résoudre l'équation de Schrödinger de la même façon que pour l'équation (4.29) de la section 4.2. On obtient, pour $n \geq 1$ (et $v_x \ell > 0$), des états massifs qui ne dispersent que dans la direction du pseudo-champ magnétique \mathbf{B}_p [voir équation (4.64)]

$$\begin{cases} |\Psi_{\lambda,n}\rangle = e^{i\theta\hat{\sigma}_x/2} \begin{pmatrix} \left[1 + \lambda \frac{M(\mathbf{k}_{\parallel})}{E_n}\right] |n-1\rangle \\ \lambda \left[1 - \lambda \frac{M(\mathbf{k}_{\parallel})}{E_n}\right] |n\rangle \end{pmatrix}, \\ E_{\lambda,n}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \lambda E_n = \lambda \sqrt{M(\mathbf{k}_{\parallel})^2 + 2v_F^2 n / \ell_S^2}. \end{cases} \quad (4.66)$$

Nous sommes particulièrement intéressés par le mode chiral ($n=0$) pour lequel nous avons (pour $v_x \ell > 0$)

$$\begin{cases} |\Psi_0^+\rangle = e^{i\theta\hat{\sigma}_x/2} \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}, \\ E_0(\mathbf{k}_{\parallel}) = -M(\mathbf{k}_{\parallel}), \end{cases} \quad (4.67)$$

Dans la situation où $v_x \ell < 0$, le cône se déplace dans le sens contraire au cas $v_x \ell > 0$ lors de la traversée de l'interface. Dans ce cas, les composantes des fonctions d'ondes sont permutées et $E_0(\mathbf{k}_{\parallel}) = M(\mathbf{k}_{\parallel})$.

La surface de Fermi du mode chiral est définie par $E_0(\mathbf{k}_{\parallel}) = \mu$ soit $v_F \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_p = \mu$: elle forme un arc perpendiculaire au pseudo-champ magnétique \mathbf{B}_p . De plus, si on impose à la fonction d'onde d'être localisée dans l'interface $\langle x \rangle \in [0, \ell]$ [voir équation (4.33)] alors on obtient un arc ouvert tel que

$$0 < \frac{k_y}{\delta k_y} - \tan(\theta) \frac{\mu}{v_F |\delta \mathbf{k}_{\parallel}|} = \frac{k_z}{\delta k_z} + \cotan(\theta) \frac{\mu}{v_F |\delta \mathbf{k}_{\parallel}|} < 1. \quad (4.68)$$

L'arc est donc de longueur $v_F |\delta \mathbf{k}_{\parallel}|$ avec l'une de ses extrémités en $(k_y, k_z) = (\sin(\theta), -\cos(\theta))\mu / v_F$. Sur la Figure 4.15 est dessinée par des lignes en pointillés (en vert, jaune et bleu) l'équation de cette surface de Fermi, que l'on appelle *arc de Fermi*, pour différents décalages $\delta \mathbf{k}$ et pour $\mu = 0$. Sur cette figure je note $\delta k_y^{-1} = \ell_B$, afin d'y

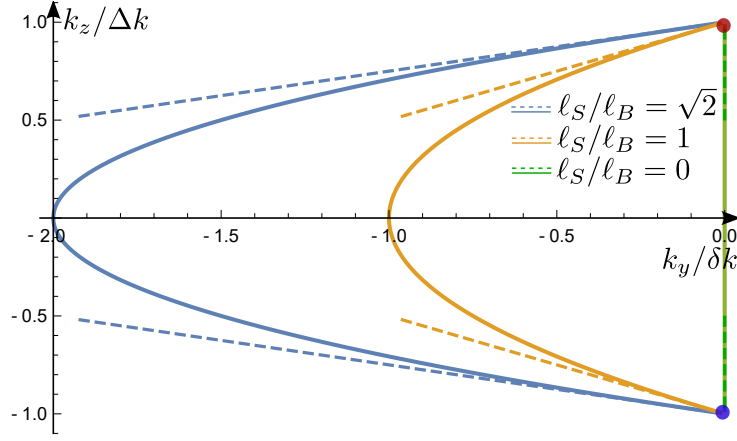


FIGURE 4.15 – Surface de Fermi du mode chiral ($n = 0$) à $\mu = 0$ pour le déplacement d'un cône de Weyl à l'interface (en tiret) et pour la fusion de cônes de Weyl (en traits plein). Les vecteurs d'ondes dans le plan $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_y, k_z)$ ont été renormalisés par le déplacement caractéristique dans chaque direction. Les deux modèles donnent des résultats qualitativement similaires.

revenir lorsque je discuterai l'effet d'un champ magnétique. L'équation de cet arc s'avère très similaire à celle obtenue pour semi-métal de Weyl proche de la fusion en contact avec un isolant et que l'on traite à la section suivante. Les états de surface entre deux semi-métaux de Weyl ont récemment été discutés pour l'étude du transport des semi-métaux de Weyl sous l'effet de déformations qui renormalisent la position des cônes au sein du matériau [GVVI16].

Enfin, il est intéressant d'ajouter un véritable champ magnétique $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ dans le plan de l'interface, introduit en jauge de Landau par la substitution de Peierls $k_y \rightarrow k_y - \text{sgn}(B)/\ell_B^2$. Cette situation revient à redéfinir $\delta k_y \rightarrow \delta k_y + \text{sgn}(B)\ell/\ell_B^2$ dont on déduit deux conséquences du champ magnétique sur l'arc de Fermi :

- (i) L'orientation de l'arc change pour être perpendiculaire à $\mathbf{B}_p + \mathbf{B} \sim \ell_B \delta \mathbf{k} \times \mathbf{e}_x + \frac{\ell}{\ell_B} \mathbf{b}$ où \mathbf{b} est l'orientation du champ magnétique. Ce changement d'orientation est accompagné d'un changement de la direction de la relation de dispersion, orientée parallèlement à $\mathbf{B}_p + \mathbf{B}$ [voir équation (4.64)]. Ceci est représenté sur la Figure 4.15 en lignes pointillées pour différentes valeurs du champ magnétique, représenté par ℓ_B , pour un déplacement du cône $\delta \mathbf{k} = \delta k_z \mathbf{e}_z$ fixé.
- (ii) La longueur de l'arc de Fermi change pour être $L = v_F \sqrt{\delta k_z^2 + (\delta k_y + \text{sgn}(B)\ell/\ell_B^2)^2}$. Si le champ magnétique est suffisamment faible, $\ell_B > \ell$, cette longueur peut croître comme décroître. Par contre pour un fort champ magnétique, $\ell_B < \ell$, la longueur de l'arc croît linéairement avec le champ magnétique $L \approx v_F \sqrt{\ell} eB/h$.

Ces deux effets seront importants si le champ magnétique est suffisamment intense pour que la longueur magnétique soit plus petite que l'extension de l'interface $\ell_B = \sqrt{eB/h} < \ell$. Dans ce cas on s'attend à deux effets sur l'expression (4.59) de la conductivité

- (i) *Densité d'états*. La densité d'états dépend de la longueur de l'arc et on trouve, indépendamment du potentiel chimique μ ,

$$g_B(\mu) = \frac{1}{(2\pi)^2 |v_y v_z|} \sqrt{v_y^2 \left[\delta k_y - \text{sign}(B) \frac{\ell}{\ell_B^2} \right]^2 + (v_z \delta k_z)^2} \quad (4.69)$$

$$\approx_{\ell_B \gg \ell} g_0 - \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{|v_y|}{|v_z|} \frac{\delta k_y \text{sign}(B) \ell / \ell_B^2}{\sqrt{(v_y \delta k_y)^2 + (v_z \delta k_z)^2}} \quad (\text{faible champ}) \quad (4.70)$$

$$\approx_{\ell_B \ll \ell} \frac{1}{(2\pi)^2 |v_z|} \frac{\ell}{\ell_B^2} \sim B \quad (\text{fort champ}). \quad (4.71)$$

On s'attend donc à ce que pour de fort champ magnétique, la conductivité (4.59) des arcs de Fermi soit croissante avec l'amplitude du champ magnétique parallèle à l'interface. Cet effet traduit la dégénérescence des niveaux de Landau en unité de flux $N_B = \Phi/\Phi_0 \sim B$ discuté à la section 2.3.

(ii) *Vitesse de groupe.* L'orientation de la vitesse de groupe des états de surface change selon

$$\mathbf{v}_B = v_F \frac{\mathbf{B}_p + \mathbf{B}}{|\mathbf{B}_p + \mathbf{B}|} \underset{\ell_B \ll \ell}{\approx} v_F \mathbf{b}, \quad (4.72)$$

où \mathbf{b} est l'orientation du champ magnétique. Ainsi, pour un fort champ magnétique, le courant soit essentiellement orienté dans la direction parallèle au champ magnétique. Cet effet est la traduction de la localisation du mouvement dans le plan transverse au champ magnétique, comme pour le mouvement cyclotron discuté à la section 2.3.

Ces effets sont donc très similaires à ceux attendus pour le transport électronique des niveaux de Landau en volume [NN83, SS13]. Par conséquent, afin d'explorer cette physique des états de surface à l'aide d'un champ magnétique il faudrait se placer à la limite intermédiaire où $\ell_B \sim \ell$. Dans ce cas, le résultat sera de fortes anisotropies du transport avec l'orientation du champ magnétique et qui dépendent de l'amplitude et de l'orientation du décalage $\delta \mathbf{k}_\parallel$.

Cette description des états de surface à l'interface de deux semi-métaux de Weyl est simplifiée. Cependant, elle traduit qualitativement les principales caractéristiques des états de surface d'un semi-métal de Weyl à l'interface avec un isolant. Ceci est abordé à la section suivante.

Interface entre un semi-métal de Weyl et un isolant

Nous considérons la situation plus réaliste où un semi-métal de Weyl est en contact avec un isolant, chacun étant décrit par le modèle (4.60)

$$\hat{H}_2 = v_F (k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y) + (k_z^2/2m - \Delta) \hat{\sigma}_z, \quad (4.73)$$

où (i) $\Delta > 0$ pour un semi-métal de Weyl avec des cônes situés en $k_z = \pm \Delta k/2 = \pm \sqrt{2m\Delta}$ et (ii) $\Delta = -\Delta' < 0$ pour un isolant. On modélise le comportement des états électroniques à l'interface, $x \in [0, \ell]$, par l'interpolation linéaire du semi-métal de Weyl en $x < 0$ et de l'isolant en $x > \ell$

$$\hat{H}_{2s} = v_F (k_x \hat{\sigma}_x + k_y \hat{\sigma}_y) + \left(k_z^2/2m - \Delta + \frac{\Delta + \Delta'}{\ell} x \right) \hat{\sigma}_z. \quad (4.74)$$

Comme on l'a vu à la section précédente, on associe à la dépendance en position du Hamiltonien (4.74) un pseudo-champ magnétique $\mathbf{B}_p = \nabla \times \mathbf{A} = -B_p \mathbf{e}_y$ où $B_p = (\Delta + \Delta')/(e v_F \ell)$. À ce stade, on peut aussi introduire un véritable champ magnétique $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$ orienté dans la direction qui sépare les deux cônes. Cette orientation permet des expressions simplifiées dans le cas du modèle de fusion⁶. L'ajout du champ magnétique donne lieu, en jauge de Landau, à la substitution $k_y \rightarrow k_y + \text{sign}(B)x/\ell_B^2$, ce qui revient à ajouter le terme $\text{sign}(B)v_F \ell/\ell_B^2 \hat{\sigma}_y$ au Hamiltonien de l'équation (4.74). L'effet de ce champ magnétique est donc similaire à celui du déplacement de la structure de bande de $k_y = 0$ à $k_y = \delta k_y = -\text{sgn}(B)\ell/\ell_B^2$ lors de la traversée de l'interface, comme on l'a vu à la section précédente.

La rotation des équations d'un angle θ et d'axe x , $|\Psi_\theta\rangle = e^{i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_x} |\Psi\rangle$, pour $\tan(\theta) = \ell_B^2/\ell_{B_p}^2$ avec $\ell_{B_p} = 1/\sqrt{eB_p}$ la longueur du pseudo-champ magnétique, donne

$$\hat{H}_{2s}^{(\theta)} = e^{i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_x} \hat{H}_{2s} e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_x} = \begin{pmatrix} M(\mathbf{k}_\parallel) & \sqrt{2}v_F \hat{c}_2/\ell_S \\ \sqrt{2}v_F \hat{c}_2^\dagger/\ell_S & -M(\mathbf{k}_\parallel) \end{pmatrix}. \quad (4.75)$$

6. Le champ magnétique n'étant plus selon un axe de symétrie principale il faut passer par un traitement numérique ou une approche en théorie de champ moyen.

On a introduit la longueur caractéristique des états de surface $\ell_s = 1/\sqrt{eB_T}$ associée au champ magnétique (effectif) résultant $B_T = \sqrt{B_p^2 + B^2}$. Les opérateurs d'échelle $\hat{c}_2, \hat{c}_2^\dagger$ sont définis comme à la section 4.2. Ils définissent les états nombre $|n\rangle$ dont l'extension est $\Delta x_n = \sqrt{2n+1}\ell_s$ et la position moyenne est

$$\frac{\langle x \rangle}{\ell} = -\frac{B_p \left[B_p \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) + B v_F k_y \right]}{B_T^2 (\Delta + \Delta')}. \quad (4.76)$$

On calcule le terme de masse suivant, dont la forme rappelle celle de l'équation (4.64) où apparaissent les composantes du Hamiltonien transverses à chaque champ magnétique

$$M(\mathbf{k}_\parallel) = [B(k_z^2/2m - \Delta) - B_p v_F k_y] / B_T. \quad (4.77)$$

On en déduit ainsi la dispersion de l'état chiral ($n=0$) (pour $v_x \ell > 0$) $E_0(k_\parallel) = -M(\mathbf{k}_\parallel)$ dont je vais maintenant discuter la surface de Fermi. La condition de localisation des états de surface, $\langle x \rangle \in [0, \ell]$, impose aussi

$$0 > B_p(k_z^2/2m - \Delta) + B v_F k_y > -B_T^2(\Delta + \Delta')/B_p. \quad (4.78)$$

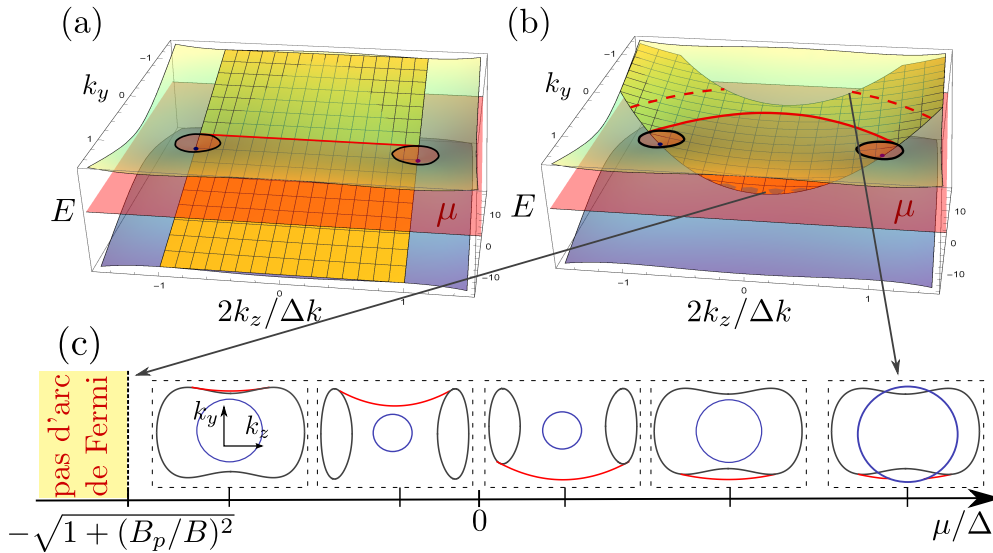


FIGURE 4.16 – (a) et (b) : Superposition du spectre du semi-métal de Weyl en $k_x = 0$ (bande de conduction en vert et bande de valence en bleu), du spectre des états de surface chiraux ($n=0$) qui vérifient $\langle x \rangle \in [0, \ell]$ (en orange) et d'un plan à énergie constante μ (fixé dans le bande de conduction, en rouge transparent). Les cercles noirs correspondent aux sections à $k_x = 0$ de la surface de Fermi du semi-métal de Weyl. L'arc de Fermi est tracé en rouge et connecte la surface de Fermi du volume. Ces spectres sont obtenus (a) pour un champ magnétique dans le plan négligeable $B \ll B_p$ (isolant à fort gap Δ') où l'on retrouve le comportement obtenu dans d'autres études et (b) pour un champ magnétique $B \sim B_p$ (isolant à faible gap Δ'). (c) Surface de Fermi du semi-métal de Weyl (en noir), de l'isolant (en bleu) et de l'état de surface (en rouge), pour différentes valeurs du potentiel chimique μ et une courbure non-nulle de l'arc de Fermi. L'arc de Fermi disparaît ou est coupé en deux lorsque sa surface de Fermi pénètre celle du semi-métal de Weyl ou celle de l'isolant.

En l'absence de champ magnétique ($B=0$) le spectre du mode chiral ($n=0$) est identique à celui obtenu pour une interface abrupte [OM14] : $E_0 = v_F k_y$ [voir Figure 4.16 (a)]. La similarité des résultats obtenus pour une interface abrupte et pour une interface épaisse est une conséquence de l'argument de Aharonov-Casher évoqué à la section 4.2 : la forme du potentiel importe peu pour la dispersion le mode chiral. Cependant, la description en terme d'une interface graduelle permet de discuter les effets du champ magnétique $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ quand l'extension des orbites cyclotrons est suffisamment faible ($\ell_B \sim \ell$).

En présence du champ magnétique, la surface de Fermi de l'état chiral ($n = 0$) au potentiel chimique μ est décrite par les équations

$$-1 < \frac{\frac{k_z^2}{2m} - \Delta}{\Delta + \Delta'} + \frac{B}{B_T} \frac{\mu}{\Delta + \Delta'} = \frac{k_y}{\delta k_y} - \frac{B_p}{B_T} \frac{\mu}{v_F \delta k_y} < 0. \quad (4.79)$$

On représente l'arc en présence du champ magnétique à la Figure 4.16 (b). L'arc est courbé de la même façon qu'à la section précédente et les deux approches ont un même comportement aux bords de l'arc [voir Figure 4.15, lignes continues pour différentes valeurs du champ magnétique]. En revanche, dans le cas de la fusion, l'arc de Fermi ne relie les surfaces de Fermi des deux cônes du semi-métal de Weyl que pour un potentiel chimique faible proche de zéro

$$\sqrt{1 + (B_p/B)^2} \Delta' > \text{sign}(B)\mu > \sqrt{1 + (B_p/B)^2} \Delta, \quad (4.80)$$

au delà, l'arc disparaît totalement ou est coupé en deux morceaux. Ceci explique le trou que l'on observe dans la relation de dispersion des états de surface à plus grande énergie [voir Figure 4.16(b)] qui traduit l'hybridation des états de surface avec les états de volume si l'arc se courbe trop et dépasse le bord de bande du semi-métal de Weyl ou de l'isolant [voir Figure 4.16(c)]. Pour observer cet effet, on a donc besoin :

- (i) que l'arc de Fermi soit courbé. Dans le cas présent cela correspond à $B \neq 0$, ce qui est analogue à un décalage de la structure de bande transversalement à la direction des deux cônes lors de la traversée de l'interface.
- (ii) que le gap de l'isolant Δ' puisse être comparable au potentiel chimique μ . Ce n'est pas toujours le cas en ARPES où l'isolant décrit le vide, dont le gap est très grand. On doit pouvoir l'observer lors du vieillissement de la surface du semi-métal en atmosphère oxydante mais, à présent, aucune expérience de la sorte n'a encore été réalisée. Ce comportement a été calculé numériquement par un autre groupe [GVVI16].

La description des états de surface d'un semi-métaux de Weyl en terme d'une interface graduelle permet donc de faire les deux observations suivantes

- (i) *Un champ magnétique dans le plan déforme la surface de Fermi, ce qui modifie la densité d'états et la vitesse de groupe.* À fort champ magnétique ($\ell_B \ll \ell$) on retrouve les niveaux de Landau tandis qu'à faible champ ($\ell_B \gg \ell$) on retrouve le comportement des états de surface. Le régime intermédiaire ($\ell_B \sim \ell$) doit permettre l'évaluation de l'amplitude et de l'orientation du pseudo-champ magnétique \mathbf{B}_p mais nécessite des champ magnétiques intenses ou une interface suffisamment douce. Pour contourner ce problème, l'application d'un fort champ électrique en surface devrait permettre d'augmenter la sensibilité des mesures par la réduction de B_p .
- (ii) *Un arc de Fermi courbé peut disparaître ou être coupé en deux si $\mu \sim \Delta, \Delta'$.* Les expériences mentionnées au Chapitre 1 montrent que les arcs de Fermi sont en général courbés, ainsi on s'attend à ce que l'oxydation de la surface donne lieu à un isolant dont le gap est suffisamment petit pour couper l'arc de Fermi.

Le traitement précédent a l'avantage de mettre sur un pied d'égalité le potentiel de surface et le champ magnétique dans le plan. On s'attend à ce qu'un champ magnétique hors du plan $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_x$ discrétise le spectre des états de surface comme dans le cas des états de surface d'un isolant topologique. Cependant, comme la surface de Fermi des états de surface est ouverte, le champ magnétique hors du plan va en fait être en compétition avec le pseudo-champ magnétique \mathbf{B}_p .

4.4.3 Champ magnétique hors du plan

La surface de Fermi des états de surface d'un semi-métal de Weyl étant ouverte, l'analyse semi-classique des niveaux de Landau pour un champ magnétique hors du plan semble voué à l'échec : il est impossible de décrire une orbite fermée. Pourtant, des expériences récentes ont associé des oscillations quantiques aux états de surface, en considérant que chaque portion d'arc de Fermi de part et d'autre du matériau est connectée

par les états de volume [voir Figure 4.17(a)] [ZBH⁺16, MNH⁺16]. La dépendance des oscillations quantiques avec l'orientation θ du champ magnétique, l'épaisseur L des échantillons et leur forme sont en accord avec l'explication théorique. Ces expériences ont été réalisées sur Cd₃As₂ étudié au Chapitre 2 où les mesures optiques ont montré la présence d'une bande plate : elle n'est pas prise en compte dans la description théorique [ZBH⁺16] et je pense qu'une analyse plus fine permettrait de mieux comprendre la structure de bande de l'arsenure de cadmium.

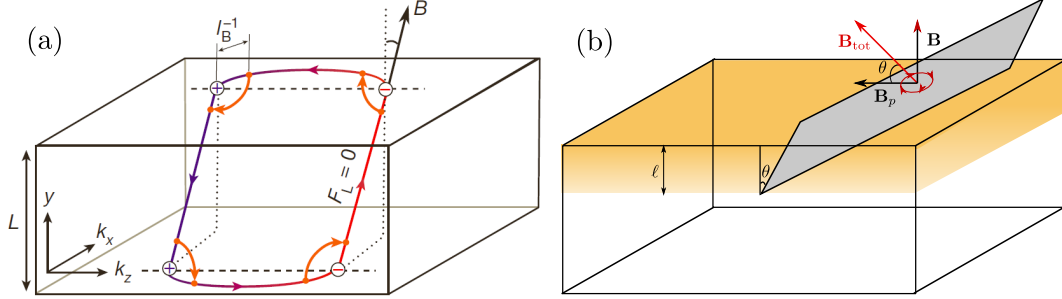


FIGURE 4.17 – (a) Orbite cyclotron obtenue en complétant les arcs de Fermi de deux surfaces opposées par diffusion via les états de volume [tiré de [MNH⁺16]]. (b) Orientation du pseudo-champ magnétique \mathbf{B}_p et du champ magnétique \mathbf{B} pour une interface de taille finie (en orange). Le plan de localisation est tourné (en gris).

Dans le cas où l'on attribue à l'interface un profil graduel, il est intéressant de réaliser le calcul des niveaux de Landau dans la configuration d'un champ magnétique hors du plan $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_x$ [voir Figure 4.17(b)]. On l'introduit au Hamiltonien (4.60) en jauge de Landau par la substitution $k_z \rightarrow k_z + \text{sign}(B)y/\ell_B^2$. Nous n'étudierons pas cette situation pour l'interface où les cônes de Weyl fusionnent mais dans le cas simplifié où un cône se décale de $k_z = 0$ à $k_z = \delta k_z$ dans l'espace réciproque⁷, comme à l'équation (4.61). Dans ce cas, il suffit de réaliser deux rotations successives de (4.60) : (i) une rotation du Hamiltonien d'un angle θ_1 et d'axe z avec $\tan(\theta_1) = \ell/(\delta k_z \ell_B^2)$ afin de simplifier les relations de commutation puis, (ii) une rotation du Hamiltonien d'un angle $\theta_2 = \pi/2$ et d'axe x afin de se placer dans la base chirale. On obtient alors

$$\hat{H}_\perp^{(\theta)} = e^{i\frac{\pi}{4}\hat{\sigma}_x} e^{i\frac{\theta_1}{2}\hat{\sigma}_z} \hat{H}_{1s} e^{-i\frac{\pi}{4}\hat{\sigma}_x} e^{-i\frac{\pi}{4}\hat{\sigma}_x} = \begin{pmatrix} M(k_\parallel) & \sqrt{2}v_F \hat{c}/\ell_S \\ \sqrt{2}v_F \hat{c}^\dagger/\ell_S & -M(k_\parallel) \end{pmatrix}, \quad (4.81)$$

où les deux nombres quantiques qui composent \mathbf{k}_\parallel sont k_z et $k_p = \frac{k_x \ell / \ell_B^2 - k_y \delta k_z}{\sqrt{(\ell / \ell_B^2)^2 + (\delta k_z)^2}}$. Le terme de masse s'écrit $M(k_\parallel) = v_F k_p$ et l'extension typique ℓ_S vérifie

$$1/\ell_S^2 = \sqrt{(1/\ell_B^2)^2 + (\delta k_z/\ell)^2}. \quad (4.82)$$

Le spectre de l'état chirale ($n = 0$) est très similaire à celui obtenu aux sections précédentes [voir Figure 4.16(a)] mais selon le vecteur d'onde k_p . Il est intéressant de développer les opérateurs d'échelle dans ce cas de figure

$$\hat{c} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{k_x \delta k_z + k_y \ell / \ell_B^2}{\ell / \ell_S^3} - i \ell_S (k_z + x \delta k_z / \ell + y / \ell_B^2) \right], \quad (4.83)$$

afin de constater que l'on a la relation entre k_z et les positions moyennes suivante

$$k_z = -\langle x \rangle \delta k_z / \ell - \langle y \rangle / \ell_B^2 \in [-\delta k_z - L_y / \ell_B^2, 0]. \quad (4.84)$$

Par conséquent, on observe une forte augmentation de longueur de l'arc avec la taille de la surface et le champ magnétique. Contrairement au cas d'un champ magnétique dans le plan où l'accroissement est de l'ordre de ℓ / ℓ_B^2 [voir équation (4.69)] il est maintenant bien plus grand, de l'ordre de L / ℓ_B^2 . Je m'attends à ce que la

7. On fixe δk_x et δk_y à zéro pour simplifier les calculs.

sensibilité expérimentale soit accrue dans une telle configuration, en particulier pour observer les oscillations quantique qui auront lieu si la longueur magnétique est plus courte que $\ell_{S,0} = \sqrt{\ell/\delta k_z}$. Par exemple, dans le cas de Cd_3As_2 on s'attend à avoir $\delta k_z \approx 8 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$ et pour $\ell \approx 2 \text{ nm}$ on obtient $\ell_{S,0} \approx 5 \text{ nm}$. Cela nécessite des champs magnétiques bien plus larges que ceux utilisés dans [MNH⁺16] et on ne peut pas attribuer les oscillations quantiques qu'ils observent à un modèle d'interface graduelle.

Nous venons de voir qu'un champ magnétique affecte les états de surface d'un semi-métal de Weyl si sa longueur magnétique ℓ_B est comparable à l'épaisseur de l'interface ℓ . Comme on considère que $\ell \approx 2 - 3 \text{ nm}$, l'observation semble peu réaliste. Dans l'idéal l'utilisation d'un potentiel électrique pour dilater ℓ_S par les effets relativistes discutés à la section 4.2 peut exacerber les effets du champ magnétique. Nous allons maintenant aborder l'inclinaison des états de surface qui joue un rôle similaire au potentiel électrique.

4.4.4 Rôle de l'inclinaison sur les états de surface

Le caractère topologique d'un semi-métal de Weyl est indépendant de l'inclinaison car elle n'apparaît pas explicitement dans l'expression de la fonction d'onde [SGW⁺15]. Par contre, cela ne signifie pas que cette quantité ne va pas altérer les propriétés physiques des semi-métaux de Weyl comme le montre le comportement des niveaux de Landau discutés aux Chapitres 2 et 3. En particulier, la disparition de la quantification en niveaux de Landau pour les semi-métaux de type-II pour certaines orientations du champ magnétique pose la question de la visibilité de l'arc de Fermi pour toutes les orientations de l'interface. Cette problématique est fondamentale pour la caractérisation des semi-métaux de Weyl en spectroscopie ARPES où l'observation de l'arc de Fermi détermine la classification du matériau en tant que semi-métal de Weyl [HXBH17].

Modèle. Nous avons introduit à la section 2.1.3 un modèle de cônes de Weyl inclinés à la fusion, dont je rappelle le Hamiltonien

$$\hat{H} = t_z \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) + \frac{v_F k_z}{\Delta k} (t_x k_x + t_y k_y) + \begin{pmatrix} \frac{k_z^2}{2m} - \Delta & v_F(k_x - i k_y) \\ v_F(k_x + i k_y) & -\left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) \end{pmatrix}. \quad (4.85)$$

Ce modèle décrit (i) un semi-métal de Weyl si $\Delta > 0$, dont les cônes sont situés en $k_z = \pm \sqrt{2m\Delta}$ et d'inclinaisons $\pm \mathbf{t} = \pm(t_x, t_y, t_z)$ et (ii) un isolant si $\Delta = -\Delta' > 0$ et $|t'_x|, |t'_y|, |t'_z| < 1$. Ainsi, pour un semi-métal de type-I ou de type-II à gauche de l'interface ($x < 0$) et un isolant à droite ($x > \ell$), le comportement des électrons est modélisé en interpolant chacun des paramètres entre les deux matériaux pour $x \in [0, \ell]$

$$\hat{H}_{ts} = \left[e\mathcal{E}_p x + t_z \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) + \frac{2v_F k_z}{\Delta k} (t_x k_x + t_y k_y) \right] \mathbb{1} + \begin{pmatrix} \frac{k_z^2}{2m} - \Delta + e v_F B_p x & v_F(k_x - i k_y) \\ v_F(k_x + i k_y) & -\left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta + e v_F B_p x \right) \end{pmatrix}. \quad (4.86)$$

On introduit le pseudo-champ magnétique B_p et le pseudo-champ électrique \mathcal{E}_p

$$B_p = \frac{\Delta + \Delta'}{e v_F \ell}, \quad (4.87)$$

$$\mathcal{E}_p(k_x, k_y, k_z) = \frac{1}{e\ell} \left\{ (t'_z - t_z) \frac{k_z^2}{2m} + t_z \Delta + t'_z \Delta' + \frac{2v_F k_z}{\Delta k} \left[(t'_x - t_x) k_x + (t'_y - t_y) k_y \right] \right\}.$$

Nous avons déjà eu l'occasion d'introduire le pseudo-champ magnétique aux sections précédentes et il est désormais en compétition avec le pseudo-champ électrique qui compte deux contributions :

- (i) la première, $(t_z \Delta + t'_z \Delta')/e\ell$, est due au changement du gap à l'interface et ressemble au pseudo-champ électrique qui apparaît quand on fait la substitution de Peierls sur un cône de Weyl incliné [voir section 2.3.2],
- (ii) la seconde, est due au changement de l'inclinaison à l'interface.

La description d'une phase isolante avec un terme d'inclinaison paraît artificiel et on est tenté de fixer $\mathbf{t}' = 0$. Afin de pouvoir mener nos calculs à bien nous allons considérer la situation où l'inclinaison dans la direction de l'interface ne change pas, $\mathbf{t}' = (t_x, 0, 0)$, afin d'éliminer toute dépendance en vecteur d'onde k_x dans l'expression du champ électrique. Il faudra cependant garder à l'esprit que la notion de phase isolante n'est valable que tant que $|t_x| < 1$. Le pseudo-champ électrique est alors

$$\mathcal{E}_p(k_y, k_z) = -\frac{1}{e\ell} \left[t_z \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) + t_y \frac{2k_z}{\Delta k} v_F k_y \right]. \quad (4.88)$$

On peut en principe aussi ajouter l'effet d'une chute de potentiel électrostatique à l'interface, par exemple due à un potentiel de grille ou à des effets d'impuretés de surface. Nous ne le ferons pas afin de nous concentrer spécifiquement sur l'influence de l'inclinaison sur la quantification des états de surface. Afin de traiter l'effet du pseudo-champ électrique nous allons utiliser les transformations hyperboliques introduites à la section 2.2.2 où l'on peut soit éliminer le pseudo-champ électrique si la vitesse de dérive $v_D = \mathcal{E}_p/B_p < v_F$ soit éliminer le pseudo-champ magnétique si $v_D > v_F$. Ceci dépend de l'inclinaison et ne donne lieu à une quantification des états de surface que dans le premier cas.

Changement de référentiel. On commence d'abord par se placer dans la base chirale qui – en l'absence d'un champ magnétique dans la direction des deux cônes ou d'un déplacement de la structure de bande selon k_y – revient à tourner le Hamiltonien selon l'axe x d'un angle $\pi/2$

$$\hat{H}'_{ts} = e^{i\pi\hat{\sigma}_x/4} \hat{H}_{ts} e^{-i\pi\hat{\sigma}_x/4} \quad (4.89)$$

$$= \left[e\mathcal{E}_p x + t_z \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) + \frac{2v_F k_z}{\Delta k} (t_x k_x + t_y k_y) \right] \mathbb{1} + \begin{pmatrix} -v_F k_y & v_F k_x - i e v_F B_p (x - \langle x \rangle_0) \\ v_F k_x + i e v_F B_p (x - \langle x \rangle_0) & v_F k_y \end{pmatrix}, \quad (4.90)$$

où la position moyenne $\langle x \rangle_0 / \ell = (\Delta - k_z^2/2m)/(\Delta + \Delta')$ est la même que celle calculée à l'équation (4.76) pour $B = 0$. Les dépendances en x et k_x en face de l'identité, $\mathbb{1}$, sont ensuite absorbées par une série de deux transformations hyperboliques à la manière du traitement utilisé pour les niveaux de Landau à la section 2.3. La première transformation hyperbolique de rapidité η_1 et d'axe x absorbe le terme $2t_x v_F k_z k_x / \Delta k$ tandis que la seconde transformation, de rapidité η_2 et d'axe y , absorbe le pseudo-champ électrique $e\mathcal{E}_p x$. L'équation de Schrödinger s'écrit alors $\hat{H}'_{st} |\tilde{\Psi}\rangle = E |\tilde{\Psi}\rangle$ où $|\tilde{\Psi}\rangle = \mathcal{N} e^{-\frac{\eta_2}{2} \hat{\sigma}_y} e^{-\frac{\eta_1}{2} \hat{\sigma}_x} |\Psi\rangle$ avec une constante de normalisation \mathcal{N} et

$$\begin{aligned} \hat{H}'_{st} = & \left[2t_y \frac{k_z}{\Delta k} v_F k_y + [t_z - T_z(\mathbf{k}_{\parallel})] \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) \right] \mathbb{1} + \frac{1}{\gamma_3} \left\{ \frac{v_F k_x}{\gamma_1} + \gamma_1 \beta_1 e E_p(\mathbf{k}_{\parallel}) [x - x_1(E, \mathbf{k}_{\parallel})] \right\} \hat{\sigma}_x \\ & + \frac{1}{\gamma_3} \frac{e v_F B_p}{\gamma_2} \left\{ x - [\langle x \rangle_0 + \gamma_3^2 T_z^2(\mathbf{k}_{\parallel}) x_1(E, \mathbf{k}_{\parallel})] \right\} \hat{\sigma}_y - \frac{1}{\gamma_3} v_F k_y \hat{\sigma}_z, \end{aligned} \quad (4.91)$$

où l'on introduit $x_1(E, \mathbf{k}_{\parallel}) = \left[E - \frac{2t_y k_z}{\Delta k} v_F k_y - (t_z - T_z(\mathbf{k}_{\parallel})) \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) \right] / e E_p(\mathbf{k}_{\parallel})$, $T_z(\mathbf{k}_{\parallel}) = E_p(\mathbf{k}_{\parallel}) / (v_F B_p)$, $\beta_1 = \tanh(\eta_1) = -t_x k_z / \Delta k$, $\beta_2 = \tanh(\eta_2) = -\gamma_1 T_z(\mathbf{k}_{\parallel})$ et $\gamma_i = 1 / \sqrt{1 - \beta_i^2}$.

Cette expression est longue mais le terme en face de l'identité, $\mathbb{1}$, ne compte plus de dépendance en x et k_x tandis que les autres composantes peuvent de nouveau être traitées à l'aide des opérateurs d'échelle. À ce stade, il est important de remarquer que les deux transformations hyperboliques successives ne sont valables que si

$$\beta_3^2(\mathbf{k}_{\parallel}) = \left(2t_x \frac{k_z}{\Delta k} \right)^2 + T_z^2(\mathbf{k}_{\parallel}) < 1, \quad (4.92)$$

auquel on associe $\gamma_3 = \gamma_1 \gamma_2 = 1 / \sqrt{1 - \beta_3^2} = 1 / \lambda_3$. Cette condition traduit le régime magnétique discuté à la section 2.3 et il n'y a pas d'état de surface pour les valeurs de \mathbf{k}_{\parallel} qui ne satisfont pas (4.92). Au paragraphe suivant j'exprime le spectre des états qui vérifient cette équation.

Spectre des états de surface. Afin de résoudre le Hamiltonien (4.91), on introduit les opérateurs d'échelle, $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = \text{sign}(v_F \ell)$, suivants

$$\hat{b} = \frac{\ell_S}{\sqrt{2}\lambda_3^{3/2}v_F} \text{Tr} \left[\hat{H}_{st}^\eta \frac{\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y}{2} \right], \quad (4.93)$$

$$\hat{b}^\dagger = \frac{\ell_S}{\sqrt{2}\lambda_3^{3/2}v_F} \text{Tr} \left[\hat{H}_{st}^\eta \frac{\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y}{2} \right], \quad (4.94)$$

où $\ell_S = 1/\sqrt{eB_p}$ est la longueur de localisation introduite à l'équation (4.75) pour $\mathbf{t} = 0$ et $B = 0$. Ces opérateurs d'échelle dépendent explicitement de l'énergie E et l'impulsion dans le plan \mathbf{k}_\parallel [voir Annexe B.6], la position moyenne d'un état propre $|n\rangle_{E,\mathbf{k}_\parallel}$ de $\hat{n}_{E,\mathbf{k}_\parallel} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$ a pour position moyenne $\langle x \rangle \in [0, \ell]$

$$\langle x \rangle = \langle x \rangle_0 + \gamma_3^2 T_z^2(\mathbf{k}_\parallel) x_1(E, \mathbf{k}_\parallel). \quad (4.95)$$

Le Hamiltonien de l'équation (4.91) se réécrit ainsi en terme des opérateurs d'échelle

$$\hat{H}_{st}^\eta = \left\{ t_y \frac{2k_z}{\Delta k} v_F k_y + [t_z - T_z(\mathbf{k}_\parallel)] \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta \right) \right\} \mathbb{1} + \begin{pmatrix} -\lambda_3 v_F k_y & \sqrt{2}\lambda_3^{3/2} v_F \hat{b} / \ell_S \\ \sqrt{2}\lambda_3^{3/2} v_F \hat{b}^\dagger / \ell_S & \lambda_3 v_F k_y \end{pmatrix}. \quad (4.96)$$

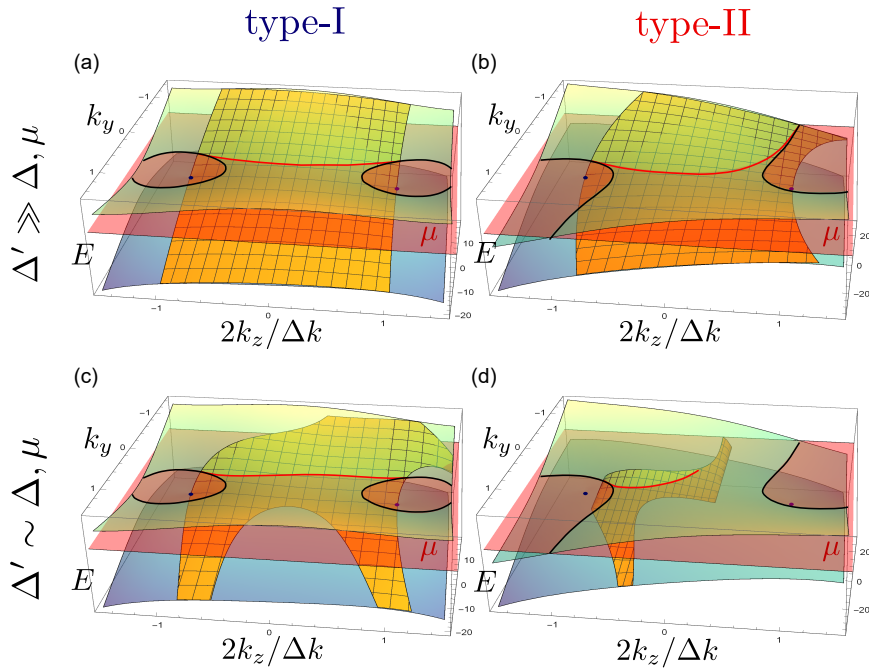


FIGURE 4.18 – Spectre du semi-métal de Weyl (en vert et bleu transparent), de l'état de surface chiral ($n = 0$, en orange) et du plan à énergie constante μ (en rouge transparent). La surface de Fermi à $k_x = 0$ du semi-métal de Weyl sont les cercles noirs et l'arc de Fermi est représenté par un trait rouge. Pour (a) et (b) le gap de l'isolant est large ($\Delta' \gg \Delta, \mu$) et le pseudo-champ magnétique \mathbf{B}_p n'est jamais dépassé par le pseudo-champ électrique \mathcal{E}_p associé à l'inclinaison des cônes, que l'on ait (a) un semi-métal de type-I où $\mathbf{t}_1 = (0.1, 0.1, -0.4)$ ($|\mathbf{t}_1| = 0.18 < 1$) ou (b) un semi-métal de type-II où $\mathbf{t}_2 = (0.1, 0.75, -0.75)$ ($|\mathbf{t}_2| = 1.13 > 1$). On utilise les mêmes valeurs pour l'inclinaison pour (c) et (d) où l'isolant à un gap comparable aux autre échelles d'énergies ($\Delta' \sim \Delta, \mu$) ce qui donne lieu à une coupure de l'arc. Ceci est similaire au comportement obtenu à la section 4.4.2 où pour $\mu \neq 0$ l'arc de Fermi pénètre la surface de Fermi de l'isolant ou du semi-métal de Weyl. Il est notable que dans le cas d'un semi-métal de type-II [Figure (d)] l'arc de Fermi peut n'être connecté qu'à un seul des cônes, car alors le pseudo-champ électrique domine, $\mathcal{E}_p(\mathbf{k}_\parallel)/B_p > v_F$.

Le calcul est alors similaire à celui des sections précédentes et pour les niveaux de Landau [voir Section 2.3 et Annexe B.4]. Les solutions, pour $\nu_x \ell > 0$ et $n \geq 1$, sont

$$|\Psi_{\sigma,n}\rangle = \hat{R} \begin{pmatrix} \left(1 - \sigma \frac{\lambda_3 \nu_F k_y}{E_n}\right) |n-1\rangle \\ \sigma \left(1 + \sigma \frac{\lambda_3 \nu_F k_y}{E_n}\right) |n\rangle \end{pmatrix}, \quad (4.97)$$

$$E_{\sigma,n}(\mathbf{k}_{\parallel}) = t_y \frac{2k_z}{\Delta k} \nu_F k_y + (t_z - T_z(\mathbf{k}_{\parallel})) \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta\right) + \sigma E_n,$$

où $\sigma = \pm$, $\hat{R} = \mathcal{N} e^{-\eta_2 \hat{\sigma}_y / 2} e^{-\eta_1 \hat{\sigma}_x / 2} e^{i\pi \hat{\sigma}_x / 4}$ et $E_n = \sqrt{\lambda_3^2 \nu_F^2 k_y^2 + 2\lambda_3^3 \nu_F^2 n / \ell_S}$. Comme dans le cas des niveaux de Landau ou des isolants topologiques, le gap des états $n \geq 1$ est renormalisé par le facteur $(1 - \beta_3^2)^{3/4}$ lié à la transformation hyperbolique. On s'attend donc à ce que ces états de plus haute énergie soient observés expérimentalement pour les semi-métaux de Weyl et en fonction de l'orientation la surface, étant donné que β_3 est grossièrement la composante de l'inclinaison transverse au pseudo-champ magnétique et dont l'orientation dépend de la surface. Alors que dans la limite d'une interface abrupte, $\ell \rightarrow 0$, le gap des états $n \geq 1$ devient infiniment large, l'état de surface chiral ($n = 0$) est toujours présent et correspond à la solution suivante pour $\nu_x \ell > 0$

$$|\Psi_0\rangle = \mathcal{N} e^{-\eta_2 \hat{\sigma}_y / 2} e^{-\eta_1 \hat{\sigma}_x / 2} e^{i\pi \hat{\sigma}_x / 4} \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}, \quad (4.98)$$

$$E_0(\mathbf{k}_{\parallel}) = \left(t_y \frac{2k_z}{\Delta k} - \lambda_3\right) \nu_F k_y + [t_z - T_z(\mathbf{k}_{\parallel})] \left(\frac{k_z^2}{2m} - \Delta\right).$$

Dans le cas où $\nu_x \ell < 0$, il suffit de permuter les composantes du spineur et de remplacer $\lambda_3 \rightarrow -\lambda_3$ dans l'expression du spectre. La polarisation en isospin des états propres est orientée selon $\mathbf{u}(\mathbf{k}_{\parallel}) = -\gamma_1 \beta_1 \mathbf{e}_x - \gamma_2 [\gamma_1 \beta_2 + \text{sign}(\nu_x \ell)] \mathbf{e}_y$.

On obtient ainsi l'arc de Fermi représenté à la Figure 4.18 pour deux inclinaisons différentes et pour deux valeurs du gap Δ' de l'isolant. Les sous-figures (a) et (c) correspondent à un semi-métal de type-I, dont l'inclinaison est modérée, et les sous-figures (b) et (d) correspondent à un semi-métal de type-II. Il y a deux conditions d'existence des états de surfaces (i) la condition de localisation $\langle x \rangle \in [0, \ell]$ et (ii) la condition de régime magnétique $|\beta_3| < 1$ (4.92). À la limite où $\Delta' \gg \Delta$ (Figures (a) et (b)), i.e. lorsque le semi-métal de Weyl est en contact avec un isolant de grand gap ou avec le vide, on retrouve la situation sans inclinaison car le pseudo-champ électrique est négligeable face au pseudo-champ magnétique et on obtient un arc de Fermi entier [voir Figures 4.18(a) et (b)]. En revanche, dans le cas d'un isolant à petit gap, $\Delta' \ll \Delta$, (Figures (c) et (d)) la condition du régime magnétique (4.92) est

$$\left(2t_x \frac{k_z}{\Delta k}\right)^2 + \left(\frac{t_z(k_z^2 - (\Delta k/2)^2) + t_y(2k_z/\Delta k)2m\nu_F k_y}{(\Delta k/2)^2}\right)^2 < 1. \quad (4.99)$$

et, pour le niveau $n = 0$, la condition de localisation s'écrit

$$-2m\Delta' < \left(1 - s \frac{\nu_F k_y}{\lambda_3(\Delta + \Delta')}\right) k_z^2 + s \frac{\nu_F k_y}{\lambda_3(\Delta + \Delta')} \left(t_z(\Delta k/2)^2 - t_y \frac{2k_z}{\Delta k} 2m\nu_F k_y\right) < \Delta k^2, \quad (4.100)$$

où $s = \text{sign}(\nu_x \ell)$. Par exemple, dans le cas où $t_y = 0$, on obtient les deux inégalités suivantes pour la surface de Fermi $E_0(\mathbf{k}_{\parallel}) = \mu$

$$t_x^2 q_z^2 + t_z^2 [q_z^2 - 1]^2 = \beta_3^2 < 1, \quad (4.101)$$

$$-\frac{1 - t_x^2 q_z^2 + t_z [t_z (q_z^2 - 1) - \frac{\mu}{\Delta}]}{1 - t_x^2 q_z^2 - t_z [t_z (2q_z^2 - 1) (q_z^2 - 1) - \frac{\mu}{\Delta}]} < q_z^2 < 1, \quad (4.102)$$

où $q_z = 2k_z/\Delta k$. Ces deux conditions montrent que, même à $\mu = 0$, pour $t_z > 1$ (semi-métal de Weyl de type-II) l'arc de Fermi est coupé en deux [voir Figure 4.18(d)] et disparaît totalement une fois que $t_x^2(1 - t_x^2/4t_z^2) > 1$. La disparition de l'arc est facilitée pour les potentiels chimiques croissants. Comme ces conditions dépendent de l'orientation de la surface, on s'attend à ce que son orientation par rapport à l'inclinaison soit cruciale pour l'existence des états de surface et l'analyse des mesures expérimentales.

Conclusion et perspectives

Cette thèse a porté sur le caractère relativiste de deux classes de matériaux topologiques : les semi-métaux de Weyl et les isolants topologiques. Ce caractère relativiste s'exprime lorsque ces matériaux sont soumis à une perturbation dont on simplifie le traitement grâce aux transformations hyperboliques, connues en relativité restreinte mais peu utilisées en physique de la matière condensée. Je les ai appliquées à des modèles de basse énergie dont l'équation est semblable à l'équation de Dirac et soumis aux deux composantes d'un potentiel : (1) l'une, *magnétique*, se couple avec des charges opposées à deux types d'orbitales et, (2) l'autre, *électrique*, se couple avec la même charge aux deux types d'orbitales. Les transformations hyperboliques permettent d'éliminer l'une ou l'autre de ces composantes, ce qui permet de conclure sur l'existence d'états liés dans le cas du régime magnétique ou d'états délocalisés dans le cas du régime électrique. Au cours de cette procédure, on obtient une renormalisation des paramètres qui rappelle la contraction et la dilatation des durées et des longueurs en relativité restreinte. J'ai illustré cette procédure dans le cas des niveaux de Landau et des états de surface, en présence d'un champ électrique ou d'une inclinaison de la relation de dispersion.

Après une introduction aux états de surface, l'effet Hall et les matériaux topologiques, j'ai introduit les principaux outils utilisés pendant cette thèse de doctorat. Les modèles de basse énergie m'ont permis de décrire avec différents degrés de précision la présence de plusieurs cônes de Weyl avec une inclinaison. Les changements de base de ces modèles permettent de simplifier le traitement d'un Hamiltonien dont les composantes ne commutent pas entre elles, comme en présence d'un champ magnétique ou à l'interface de deux matériaux. Le cas des rotations est l'exemple le plus fréquemment rencontré et j'ai montré qu'il est similaire au cas des transformations hyperboliques. J'ai illustré l'importance de ces transformations pour le calcul des niveaux de Landau en présence d'un champ électrique transverse au champ magnétique. Les transformations hyperboliques m'ont permis de faire le parallèle avec le cas d'un cône de Dirac incliné et d'étendre le domaine d'application de l'argument de Aharonov-Casher. Il existe très probablement d'autres transformations canoniques dont l'utilité peut être importante à la simplification des équations du mouvement en mécanique quantique, je pense en particulier au traitement des corrélations électroniques.

Au troisième chapitre, j'ai appliqué ces transformations pour le calcul de la réponse magnéto-optique des semi-métaux de Weyl où un effet notable est l'apparition de transitions inter-niveaux de Landau supplémentaires, au-delà de la règle $n \rightarrow n \pm 1$. Ces transitions additionnelles s'expliquent à l'aide des transformations hyperboliques qui décrivent la dérive des orbites cyclotron sous l'influence de l'inclinaison. L'apparition de ces transitions est susceptible d'expliquer certaines mesures récentes obtenues par Michael Hakl et Milan Orlita au LNCMI, Grenoble en spectroscopie infrarouge. J'ai eu l'occasion de travailler avec eux à l'interprétation de données de la spectroscopie de Cd_3As_2 sans et avec champ magnétique. L'objectif était de comprendre les anomalies expérimentales en rapport avec la récente interprétation de ce matériau en tant que semi-métal de Dirac. Nous avons expliqué ces anomalies par la présence d'une bande plate à basse énergie, ce qui est bien décrit par le modèle de Bodnar. Il s'avère ainsi que le comportement des électrons aux remplissages usuels se rapproche plutôt de celui d'un semi-métal de Kane que de Dirac. Nous continuons à travailler ensemble sur ce projet et nous espérons pouvoir mieux comprendre le comportement des électrons proches du croisement de bande.

Le dernier chapitre porte sur la modélisation de la surface des matériaux topologiques en terme d'une interface graduelle. Cette modélisation permet de dériver, en plus de l'état de surface topologique, un ensemble d'états de surface massifs de type électron et de type trou. Ces états de surface massifs ne doivent pas être

confondus avec ceux d'un puits de potentiel électrostatique où ne peuvent pas coexister à la fois des états de type trou et de type électron. Ce point fort m'a permis de réinterpréter la nature des états de surface des isolants topologiques Bi_2Se_3 et Bi_2Te_3 observés en spectroscopie ARPES pour des échantillons oxydés. Ce travail a eu pour origine une discussion sur les mesures de transport d'échantillons de HgTe déformé, réalisées par Andreas Inhofer et Bernard Plaçais au LPA, Paris. Ils ont observé que le transport de l'état de surface topologique est accompagné de pics de résistance que l'on a associé à la présence d'états de surface massifs. Ces états étant obtenus théoriquement par le passé mais peu étudiés, mon travail de thèse a consisté à pousser le raisonnement plus loin afin de décrire le rôle d'un potentiel électrique sur ces états. En particulier, le champ électrique ramène les états de surface à plus basse énergie tout en les délocalisant, ce qui permet de les observer plus facilement. Cet effet se décrit à l'aide des transformations hyperboliques, comme en présence de champs électrique et magnétique croisés. J'ai aussi étudié la question des états de surface des semi-métaux de Weyl, motivé par l'éventualité que les états de surface contribuent fortement au transport. J'ai montré que pour une interface entre un semi-métal de Weyl et un isolant, si le gap de ce dernier est suffisamment petit, alors (1) les états de surface sont sensibles au champ magnétique et (2) les états de surface d'un semi-métal de type-II peuvent disparaître au niveau des points nodaux, pour certaines orientations de la surface par rapport à l'inclinaison. J'ai ainsi voulu montrer que les états de surface d'un semi-métal peuvent être manipulés avec un champ magnétique et que l'absence d'une surface de Fermi fermée n'empêche pas le calcul des niveaux de Landau. Une autre raison à ce projet était de mieux comprendre les semi-métaux de type-II dont la découverte prédisait qu'ils étaient topologiques et comptaient donc toujours des états de surface. Notre projet a validé cette affirmation dans le cas où l'isolant a un gap infiniment grand.

Il y a plusieurs voies au développement de ce travail de thèse. L'extension des changements de référentiels, au delà des rotations trigonométriques et hyperboliques, devrait permettre de traiter d'autres situations où le champ magnétique est orienté en dehors de l'axe de symétrie principale [BB67, HS] comme pour l'orientation [112] de Cd_3As_2 . Cela permettrait aussi de traiter les effets de l'asymétrie particule-trou sur les états de surface de Bi_2Se_3 et Bi_2Te_3 oxydé [ZKM12]. La fin de ma thèse m'a permis de prendre conscience de l'importance des effets d'écrantage sur la réponse des états de surface. Par exemple, j'ai mentionné en introduction le changement de parité de la conductivité de Hall d'échantillons de HgTe tridimensionnels, associé à une asymétrie des états de surface entre les deux côtés de l'échantillon [BLN⁺11]. Le tracé des demi-cercles de la conductivité longitudinale et de Hall [DR94] a récemment permis de mettre en évidence cette asymétrie, similaire à un effet Hall quantique fractionnaire ($\nu = 1/2$) sans interaction [GFS⁺17b, MKY⁺17]. Ceci nécessite de mieux comprendre le comportement de l'écrantage en présence d'états de surface en prenant en compte : (i) l'extension de la fonction d'onde, comme nous l'avons vu pour la capacité quantique à la section 4.1.1, (ii) les modifications qu'entraîne le potentiel électrostatique sur les états de surface, et (iii) l'écrantage simultané des états de surface et de volume.

Il y a d'autres développements, plus spéculatifs, de la physique des états de surface qui m'intéressent. Le premier porte sur la dépendance en vitesse du premier nombre de Chern, C_1 , des matériaux topologiques. Par exemple nous avons montré à la section 1.3.2 que pour un isolant topologique $C_1 = \text{sgn}(v_x v_y v_z \Delta)$ et nous nous sommes concentré sur des matériaux dont les gaps, Δ , sont de signes opposés. Dans le cas où l'on considère un changement de signe des vitesses à la traversée de l'interface, par exemple $v_{x1} > 0$ change en $-v_{x2} < 0$, alors on obtient aussi des états de surface chiraux mais dont le spectre est gappé. Enfin, décrire la surface en terme d'une interface graduelle peut permettre : (i) de décrire la sensibilité au champ électrique des états de Majorana à la surface des supraconducteurs afin de pouvoir les manipuler autrement qu'avec un champ magnétique [CVF12, ORvO10], (ii) de décrire les états de surface des supra-conducteurs de type-p et d où le changement de signe du gap supraconducteur reproduit le comportement des semi-métaux de Weyl et (iii) de simplifier la description des mouvements atmosphériques où l'équateur joue le rôle de l'interface entre pôle Nord et pôle Sud où la force de Coriolis change de signe [DMV]. Je pense que cela peut permettre de discuter les mouvements atmosphériques de Jupiter [lien] si l'on considère une interface graduelle et par l'introduction d'un pseudo-champ électrique décrit par les fluctuations du rayon de la planète.

Annexe A

Courant magnétique chiral

A.1 Champ magnétique

On considère la situation où un champ magnétique uniforme est appliqué en dehors du matériau ($z < 0$) avec $\mathbf{B}_0 = B_{0x}\mathbf{e}_x + B_{0z}\mathbf{e}_z$. On cherche à résoudre l'équation (1.66) du champ magnétique dans la matériau ($z > 0$). Par invariance par translation dans le plan xy on a $\mathbf{B}(x, y, z) = \mathbf{B}(z)$ et chaque composante a une solution de la forme

$$B_i(z) = K_i \cos(z/\lambda) + L_i \sin(z/\lambda). \quad (\text{A.1})$$

Les équations de Maxwell nous permettent aussi d'écrire

$$\begin{aligned} (\text{équation de Maxwell-Thomson}) & : B'_z(z) = 0, \\ (\text{équation de Maxwell-Ampère}) & : \begin{cases} B'_x(z) = \lambda^{-1} B_y(z), \\ B'_y(z) = -\lambda^{-1} B_x(z), \\ B_z(z) = 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

L'équation de Maxwell-Thompson indique aussi la continuité de B_z à l'interface et, comme $K_i = L_i = 0$, les équations ne sont solubles que si $B_{0z} = 0$. Le cas $B_{0z} \neq 0$ nécessite de lever l'invariance par translation dans le plan xy ou l'introduction d'un monopole magnétique en surface qui écranterait totalement B_z mais dont le sens physique n'est pas clair. Cependant, on ne s'attend pas à ce que B_{0z} contribue au courant, en accord avec l'équation de Maxwell-Ampère intégrée.

Pour $B_{0z} = 0$ et en négligeant les courants de surface, la continuité du champ magnétique parallèle à l'interface donne, pour $z > 0$,

$$\mathbf{B}(z) = B_{0x} \cos(z/\lambda)\mathbf{e}_x + B_{0x} \sin(z/\lambda)\mathbf{e}_y \quad (\text{A.3})$$

et, dans ce cas, le courant macroscopique déduit de l'équation (1.65) est nul $\langle \mathbf{j} \rangle = 0$.

Remarque : Le courant de l'anomalie chirale est incompressible au sens où il n'est pas accompagné d'une accumulation de charges

$$\begin{aligned} (\text{équation de Maxwell-Thompson}) & : \operatorname{div}(\mathbf{B}) = 0, \\ (\text{courant magnétique chiral}) & : \mathbf{j} = \operatorname{sgn}(v_x v_y v_z) \frac{\Delta \mu e^2}{h} \mathbf{B}, \\ (\text{conservation de la charge}) & : \partial_t \rho + \operatorname{div}(\mathbf{j}) = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

On en déduit donc que la densité de charges $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x})$ reste constante. Le courant entrant et le courant sortant sont égaux.

A.2 Invariance de jauge

L'argument suivant est tiré de l'article de Y. Nazarov [Naz86].

La réponse du courant au seul champ magnétique s'écrit de façon la plus générale en fonction du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{x})$

$$j^\alpha(\mathbf{x}) = \int_V d^3\mathbf{x}' Q^{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') A^\beta(\mathbf{x}'). \quad (\text{A.5})$$

Dans le cas de la réponse du courant à un champ magnétique \mathbf{B} homogène on choisit la jauge symétrique où $A^\alpha(\mathbf{x}) = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} B^\beta x^\gamma / 2$ et le courant moyen s'écrit

$$\langle j^\alpha \rangle = \frac{1}{2V} \int_V d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{x}' Q^{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} x^\gamma B^\beta \equiv \kappa^{\alpha\beta} B^\beta. \quad (\text{A.6})$$

On peut maintenant exprimer l'aimantation moyenne pour une potentiel de jauge $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$ uniforme. L'expression de l'aimantation locale est $\mathbf{M} = \frac{1}{2\mu_0} \int d^3\mathbf{x} [\mathbf{x} \times \mathbf{j}(\mathbf{x})]$, par conséquent

$$\langle M^\alpha \rangle = \frac{1}{2\mu_0 V} \int d^3\mathbf{x} \varepsilon^{\alpha\gamma\delta} x^\gamma j^\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\mu_0 V} \int_V d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{x}' \varepsilon^{\alpha\gamma\delta} x^\gamma Q^{\delta\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') A^\beta = \kappa^{\beta\alpha} A^\beta / \mu_0. \quad (\text{A.7})$$

où pour la dernière égalité j'utilise le relation de Onsager $Q^{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = Q^{\beta\alpha}(\mathbf{x}', \mathbf{x})$. On obtient donc une aimantation \mathbf{M} non-nulle pour un potentiel vecteur \mathbf{A} uniforme

$$M^\alpha = \kappa^{\beta\alpha} A^\beta / \mu_0. \quad (\text{A.8})$$

Ce résultat n'est pas celui attendu pour un système invariant de jauge tel qu'un semi-métal de Weyl, ce qui indique l'impossibilité d'observer l'effet magnétique chiral pour un système à l'équilibre.

Annexe B

Modèles de basse énergie

B.1 Matrices de Pauli

Les matrices de Pauli sont les matrices hermitiennes sans trace, $\text{Tr}(\hat{\sigma}_i) = 0$, de dimensions 2×2 suivantes

$$\hat{\sigma}_1 = \hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

et dont les relations de commutations sont

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k, \quad (\text{B.2})$$

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}\hat{1}. \quad (\text{B.3})$$

Ce qui permet de réduire le produit de deux matrices de Pauli à la relation suivante $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k + \delta_{ij}\hat{1}$. Ces matrices sont indépendantes l'une à l'autre : toute expression de la forme $\hat{M} = \sum_i \alpha_i \hat{\sigma}_i$ est unique, en effet pour toute matrice $\hat{N} = \sum_i \beta_i \hat{\sigma}_i$ tel que $\hat{M} = \hat{N}$ on obtient à l'aide des propriétés de la trace que $\alpha_i = \beta_i$.

B.2 Hamiltonien de Weyl réduit

Nous considérons le Hamiltonien de Weyl décrit à l'équation (2.1) et nous définissons trois axes principaux ($\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*$) le long desquels les composantes de l'impulsion sont

$$v_i^* q_i^* = \sum_{j=1}^3 v_{ji} q_j, \quad (\text{B.4})$$

où les coefficients v_i^* sont tels que les vecteurs \mathbf{e}_i^* sont normalisés et que l'on détermine en identifiant $q_i^* = \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_i^* = \sum_j q_j \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_i^*$ avec l'expression (B.4),

$$\mathbf{e}_i^* = \sum_{j=1}^3 v_{ji} \mathbf{e}_j / v_i^*. \quad (\text{B.5})$$

La normalisation donne ainsi $v_i^{*2} = \sum_{j=1}^3 v_{ji}^2$ et par la suite on note la matrice $\{v_{ji}/v_i^*\}_{ij} = n_{ij}$, chaque vecteur colonne étant normalisé. Les trois axes principaux sont bien indépendants si seulement leur déterminant est non nul,

$$\det(\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*) = \det(n_{ij}) \det(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) \quad (\text{B.6})$$

et on choisit le signe des v_i^* afin que les deux bases aient la même orientation, $\det(\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*) = \det(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) = 1$ et donc $\det(\underline{n}) = 1 > 0$. Ce qui revient à choisir $|v_i^*| = \sqrt{\sum_{j=1}^3 v_{ji}^2}$ et $\text{sgn}(v_1^* v_2^* v_3^*) = \text{sgn}[\det(v_{ji})]$ et le Hamiltonien

de Weyl réduit s'écrit

$$\hat{H} = \sum_i (t_i^* \hat{\mathbb{1}} + \hat{\sigma}_i) v_i^* q_i^*, \quad (\text{B.7})$$

où $\mathbf{t}^* = \underline{\underline{n}}^{-1} \cdot \mathbf{t}$. Ce qui permet d'écrire (2.2).

B.3 Densité d'états

On considère le modèle minimal de semi-métal de Weyl (2.2) et on oriente les axes q_x , q_y et q_z de telle sorte que le spectre s'écrit

$$E_\lambda(\mathbf{q}) = v_z t q_z + \lambda \sqrt{v_x^2 q_x^2 + v_y^2 q_y^2 + v_z^2 q_z^2} \quad (\text{B.8})$$

où $\lambda = \pm$. La densité d'état $g(E, t)$ de la bande λ a pour expression

$$g(E, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \mathbf{q} \delta(E - E_\lambda(\mathbf{q})) \quad (\text{B.9})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2 |v_x v_y v_z|} \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \int_0^\infty dr r^2 \delta[E - (t \cos(\theta) + \lambda) r] \quad (\text{B.10})$$

$$= \frac{E^2}{(2\pi)^2 |v_x v_y v_z|} \int_{-1}^1 du \frac{1}{(1 + \lambda t u)^3} \quad (\text{B.11})$$

$$= \frac{E^2}{2\pi^2 (1 - t^2)^2 |v_x v_y v_z|}. \quad (\text{B.12})$$

B.4 Diagonalisation du Hamiltonien

Un Hamiltonien est en général un opérateur hermitien par conservation de la densité de probabilité. Ainsi, dans le cas d'un sous-espace de Hilbert de dimension $d = 2$, le Hamiltonien y compte $d^2 = 4$ degrés de libertés dont une base sont les matrices $\{\hat{\sigma}_0, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3\} = \{\mathbb{1}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$ de sorte que le Hamiltonien s'écrit

$$\hat{H} = d_0 \hat{\mathbb{1}} + \mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{bmatrix} d_0 + d_3 & d_1 - i d_2 \\ d_1 + i d_2 & d_0 - d_3 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.13})$$

où les coefficients (d_0, d_1, d_2, d_3) sont hermitiens. Le calcul du carré de $\hat{H} - d_0 \hat{\mathbb{1}}$ donne

$$(\hat{H} - d_0 \hat{\mathbb{1}})^2 = (\mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \sum_{ij} d_i d_j \sigma_i \sigma_j = \frac{1}{4} \sum_{ij} (\{d_i, d_j\} \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} + [d_i, d_j] [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j]) \quad (\text{B.14})$$

$$= \mathbf{d}^2 + \sum_{i < j} i \varepsilon_{ijk} [d_i, d_j] \hat{\sigma}_k. \quad (\text{B.15})$$

On a utilisé la décomposition d'un produit d'opérateurs en la somme du produit symétrisé et anti-symétrisé. On a alors deux cas caractéristiques,

– Si les coefficients d_i commutent entre eux alors l'équation (B.15) permet d'obtenir directement le spectre suivant

$$E_\lambda(\mathbf{d}) = d_0 + \lambda \sqrt{d_1^2 + d_2^2 + d_3^2} = d_0 \pm \|\mathbf{d}\|, \quad (\text{B.16})$$

où $\lambda = \pm$ et on utilise les valeurs propres des coefficients d_i . On note $\Psi_\lambda(\mathbf{d}) = [\alpha_\lambda, \beta_\lambda]$ les vecteurs propres correspondants. Ces derniers sont normalisés et sont solutions de l'équation suivante

$$(d_3 - \lambda \|\mathbf{d}\|) \alpha_\lambda + (d_1 - i d_2) \beta_\lambda = 0 \quad (\text{B.17})$$

$$\Rightarrow -\lambda (\|\mathbf{d}\| - \lambda d_3) \alpha_\lambda + (\|\mathbf{d}\|^2 - d_3^2)^{1/2} \frac{d_1 - i d_2}{\sqrt{d_1^2 + d_2^2}} \beta_\lambda = 0 \quad (\text{B.18})$$

$$\Rightarrow -\lambda (\|\mathbf{d}\| - \lambda d_3)^{1/2} \alpha_\lambda + (\|\mathbf{d}\| + \lambda d_3)^{1/2} \frac{d_1 - i d_2}{\sqrt{d_1^2 + d_2^2}} \beta_\lambda = 0. \quad (\text{B.19})$$

Par conséquent, la solution normalisée est, avec $e^{i\theta} = \frac{d_1 + i d_2}{\sqrt{d_1^2 + d_2^2}}$,

$$\Psi_\lambda(\mathbf{d}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \left(1 + \lambda \frac{d_3}{\|\mathbf{d}\|}\right)^{1/2} \\ \lambda \left(1 - \lambda \frac{d_3}{\|\mathbf{d}\|}\right)^{1/2} e^{i\theta} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.20})$$

– Si seuls les deux coefficients d_1 et d_2 ne commutent pas entre eux tel que $[d_1, d_2] = -ig$. Alors l'équation (B.15) s'écrit

$$(\hat{H} - d_0 \hat{1})^2 = d_3^2 + d_1^2 + d_2^2 + \text{sgn}(g) |g| \hat{\sigma}_z = d_3^2 + 2 \left\{ \hat{n} + \frac{1}{2} [1 + \text{sgn}(g) \hat{\sigma}_z] \right\} |g| \quad (\text{B.21})$$

où de $[d_1, d_2] = -ig$, et par analogie avec l'oscillateur harmonique, on a $d_1^2 + d_2^2 = (2\hat{n} + 1)|g|$ tel que les états propres de \hat{n} , $|n\rangle$, ont pour valeur propre les entiers $n \in \mathbb{N}$. Le spectre des états propres du Hamiltonien est donc

$$E_{\lambda,n}(d_3) = d_0 + \lambda \Delta E_n(d_3) = d_0 + \lambda \sqrt{d_3^2 + 2n|g|}, \quad (\text{B.22})$$

où $\lambda = \pm$. De l'équation (B.21), on déduit que les composantes de l'état propre $\Psi_{\lambda,n}(d_3)$ sont de la forme $\Psi_{\lambda,n}(d_3) = [\alpha_{\lambda,n}|n-1\rangle, \beta_{\lambda,n}|n\rangle]$ et à l'aide du même raisonnement que pour l'équation (B.20) on obtient pour $g > 0$

$$\Psi_{\lambda,n}(d_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \left(1 + \lambda \frac{d_3}{\Delta E_n(d_3)}\right)^{1/2} |n-1\rangle \\ \lambda \left(1 - \lambda \frac{d_3}{\Delta E_n(d_3)}\right)^{1/2} |n\rangle \end{bmatrix} \quad (\text{B.23})$$

(dans le cas où $g < 0$ il faut permuter $|n\rangle$ et $|n-1\rangle$). Les états propres $|n\rangle$ sont construits en résolvant d'abord l'état $n = 0$ tel que $(d_1 - i d_2) |0\rangle = 0$ puis en utilisant la propriété suivante $(d_1 + i d_2) |n\rangle = \sqrt{|g|(n+1)} |n+1\rangle$. L'état propre à $n = 0$ est spécial car on n'a alors qu'un seul état propre d'énergie $E_0 = -\text{sgn}(g) d_3$ et dont l'état propre est, pour $g > 0$,

$$\Psi_0(d_3) = \begin{bmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{bmatrix}. \quad (\text{B.24})$$

À l'aide des boost des Lorentz, il s'avère aussi possible de résoudre le cas où $[d_1, d_2] = -ig$ et où en plus $d_0 = c_0 + t_1 d_1 + t_2 d_2$.

B.5 Covariance et rotation du modèle de Bodnar

On considère le modèle de Bodnar (2.17) en présence d'un champ magnétique orienté selon

$$\mathbf{b} = (\sin(\theta_B) \cos(\phi_B), \sin(\theta_B) \sin(\phi_B), \cos(\theta_B)), \quad (\text{B.25})$$

et on simplifie les relations de commutation à l'aide des opérations décrites à l'équation (2.23) avec $\phi = \phi_B$ et $\theta = -\arctan[P_{\perp} \tan(\theta_B)/P_{\parallel}]$ et on cherche à déterminer la façon dont se transforme $\hat{H}(\mathbf{k} = 0)$. Ce dernier commute avec \hat{U}_{ϕ} mais pas avec \hat{U}_{θ} , à cause du paramètre δ . On peut décomposer $\hat{H}(\mathbf{k} = 0) = \hat{H}_0 + \delta \hat{D}_1$ où

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} -E_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\delta}{4} & \frac{\delta}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\delta}{4} & -\left(\frac{2}{3}\Delta + \frac{\delta}{4}\right) & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -\left(\frac{\delta}{2} + \frac{\Delta}{3}\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -E_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\delta}{4} & -\frac{\delta}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\delta}{4} & -\left(\frac{2}{3}\Delta + \frac{\delta}{4}\right) & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -\left(\frac{\delta}{2} + \frac{\Delta}{3}\right) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.26})$$

$$\hat{D}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -E_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.27})$$

et tel que $[\hat{H}_0, \hat{L}] = 0$, $[\hat{D}_1, \hat{L}] = i\hat{D}_2$ et $[\hat{D}_2, \hat{L}] = -4i\hat{D}_1$ où

$$\hat{D}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.28})$$

L'équation différentielle d'ordre deux pour $\hat{H}(\mathbf{k} = 0)$ donne

$$U_{\theta=-\alpha}^{\dagger} U_{\phi_B}^{\dagger} \hat{H}(\mathbf{k} = 0) U_{\phi_B} U_{\theta=-\alpha} = \hat{H}_0 + \delta \left[\cos(2\alpha) \hat{D}_1 + \frac{1}{2} \sin(2\alpha) \hat{D}_2 \right]. \quad (\text{B.29})$$

On en déduit donc qu'après rotation, le Hamiltonien est, avec $P = \sqrt{|P_{\perp}^2 \cos(\alpha) \cos(\theta_B) + P_{\perp} P_{\parallel} \sin(\alpha) \sin(\theta_B)|}$,

$$\hat{H}_{\alpha} = U_{\theta=-\alpha}^{\dagger} U_{\phi_B}^{\dagger} \hat{H} U_{\phi_B} U_{\theta=-\alpha} \quad (\text{B.30})$$

$$= \begin{pmatrix} -E_0 & Pk_{-} & -Pk_{+} & 0 & 0 & 0 & 0 & Pk_z \\ Pk_{+} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & \frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} \\ -Pk_{-} & \frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} - \frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -\delta \cos^2(\alpha) - \frac{\Delta}{3} & Pk_z & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Pk_z & -E_0 & Pk_{+} & Pk_{-} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & Pk_{-} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & Pk_{+} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} - \frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ Pk_z & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & -\frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -\delta \cos^2(\alpha) - \frac{\Delta}{3} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.31})$$

B.6 Opérateurs d'échelles dépendants de l'énergie et de l'impulsion

Pour la résolution des niveaux de Landau en présence d'un champ électrique transverse nous avons été amené à introduire à l'équation (2.93) des opérateurs d'échelle qui dépendent explicitement de l'énergie. Cette même procédure apparaît dans le cas où l'équation de Weyl comporte une inclinaison $\mathbf{t} = (t_\perp, 0, t_z)$, comme nous l'avons décrit à l'équation (2.99) où, par exemple, les opérateurs d'échelle sont

$$\hat{a}_{E,q_z} = \ell_B \left\{ v_x [(1 - \beta^2)(q_x - eBy) + \delta q_{E,q_z}] - i v'_y q_y \right\} / \sqrt{2(1 - \beta^2)^{3/2} |v_x v_y|} \quad (\text{B.32})$$

où $\beta = -t_\perp$ et $\delta q_{E,q_z} = \beta(v_z t_z q_z - E) / v_x$. On observe que pour des énergies E et des impulsions q_z différentes, deux opérateurs d'échelles auront

$$\hat{a}_{E_1, q_{z,1}} - \hat{a}_{E_2, q_{z,2}} = \alpha_{1,2} \equiv \alpha(E_1 - E_2, q_{z,1} - q_{z,2}), \quad (\text{B.33})$$

où $\alpha(E, q_z) = \frac{v_x}{\sqrt{2(1 - \beta^2)^{3/2} |v_x v_y|}} \ell_B \delta q_{E,q_z}$. Ce décalage $\alpha_{1,2}$ indique que chaque orbite cyclotron est décalée pour différentes énergies E et impulsions q_z [SZ97]. Cela influe sur la définition des états $|0(E, q_z)\rangle$, tels que $\hat{a}(E, q_z)|0(E, q_z)\rangle = 0$, et l'équation (B.33) permet d'écrire

$$\hat{a}(E_1, q_{z,1})|0(E_2, q_{z,2})\rangle = \alpha_{1,2}|0(E_2, q_{z,2})\rangle. \quad (\text{B.34})$$

Ce qui est la définition d'un état cohérent de $\hat{a}(E_1, q_{z,1})$. Cela nous permet de déduire la relation entre deux bases d'états nombres à différentes énergies et impulsions [SZ97]

$$|0(E_2, q_{z,2})\rangle = e^{-\frac{|\alpha_{1,2}|^2}{2}} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\alpha_{1,2}^p}{\sqrt{p!}} |p(E_1, q_{z,1})\rangle. \quad (\text{B.35})$$

Cette relation nous permet de calculer le produit scalaire entre deux états nombres à différentes énergies E et impulsions q_z , en effet

$$\langle n_2(E_2, q_{z,2}) | n_1(E_1, q_{z,1}) \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_2!}} \langle 0(E_2, q_{z,2}) | \hat{a}(E_2, q_{z,2})^{n_2} | n_1(E_1, q_{z,1}) \rangle. \quad (\text{B.36})$$

Il suffit alors de remplacer $\hat{a}(E_2, q_{z,2})$ par l'expression (B.33), d'utiliser la relation binomiale $(a+b)^{n_2} = \sum_{k=0}^{n_2} \binom{n_2}{k} a^k b^{n_2-k}$ et la relation (B.35). Les termes qui apparaissent dans la somme de la relation binomiale sont de la forme

$$\langle \alpha_{12} | \hat{a}(E_2, q_{z,2})^{n_2-k} | n_1(E_1, q_{z,1}) \rangle = \sqrt{\frac{n_1!}{(k+n_1-n_2)!}} \langle \alpha_{12} | (k+n_1-n_2)(E_2, q_{z,2}) \rangle \quad (\text{B.37})$$

$$= \frac{\sqrt{n_1!} \alpha_{12}^{*k+n_1-n_2}}{(k+n_1-n_2)!} e^{-\frac{|\alpha_{12}|^2}{2}}, \quad (\text{B.38})$$

et une fois réintroduits dans la somme, ces termes permettent de reconnaître le polynôme de Laguerre généralisé $L_n^{(\alpha)}(x) = \sum_{k=0}^n \binom{n+\alpha}{n-k} \frac{(-x)^k}{k!}$. On obtient ainsi le produit scalaire entre deux états nombres à différentes énergies E et impulsions q_z

$$\langle n_2(E_2, q_{z,2}) | n_1(E_1, q_{z,1}) \rangle = \sqrt{\frac{n_2!}{n_1!}} \alpha_{1,2}^{*n_1-n_2} L_{n_2}^{(n_1-n_2)}(|\alpha_{1,2}|^2) e^{-\frac{|\alpha_{1,2}|^2}{2}}. \quad (\text{B.39})$$

Cela influe sur les éléments de matrices des processus que l'on peut rencontrer, tel qu'en magnéto-optique.

Annexe C

Spectroscopie infrarouge

C.1 Expression de la conductivité optique

Dans le cadre de la matière condensée, l'état du système est décrit par une matrice densité, $\hat{\rho}$, et pour un ensemble de fermions à l'équilibre elle s'exprime comme

$$\hat{\rho}_F = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\hat{H} - \mu)}}, \quad (\text{C.1})$$

où $Z = \text{trace}(e^{-\beta \hat{H}})$, la trace étant réalisée pour une statistique fermionique et tel que $\text{trace}(\hat{\rho}_F) = N$ le nombre de particules. L'équation d'évolution de la matrice densité lors de l'application d'une perturbation \hat{V} au système est

$$i \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\rho}, \hat{H} + \hat{V}(t)] + i \hat{\rho} / \tau = 0, \quad (\text{C.2})$$

où le dernier terme atténue les effets brusques sur le système et permet une mise en place adiabatique de \hat{V} ; à la fin des calculs on peut considérer $1/\tau \rightarrow 0^+$. Je décris les étapes pour résoudre l'équation (C.2) avec $\hat{\rho}(-\infty) = \hat{\rho}_F$:

(i) On écrit $\tilde{\rho} = \hat{\rho} e^{-t/\tau}$ alors

$$i \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + [\tilde{\rho}, \hat{H} + \hat{V}(t)] = 0. \quad (\text{C.3})$$

(ii) On passe en représentation interaction et on note $\hat{\rho}_I = e^{i\hat{H}t} \tilde{\rho} e^{-i\hat{H}t}$, de sorte qu'on a désormais

$$i \frac{\partial \hat{\rho}_I}{\partial t} + [\hat{\rho}_I, \hat{V}(t)] = 0, \quad (\text{C.4})$$

dont la solution est directement

$$\hat{\rho}_I(t) = \hat{\rho}_I(-\infty) + i \int_{-\infty}^t dt' [\hat{\rho}_I(t') + \hat{\rho}_F, \hat{V}(t')]. \quad (\text{C.5})$$

(iii) si on remplace les $\hat{\rho}_I(t)$ par leur expression en terme de $\hat{\rho}(t)$ on obtient

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_F + i e^{-t/\tau} \int_{-\infty}^t dt' e^{t'/\tau} e^{i\hat{H}(t'-t)} [\hat{\rho}(t'), \hat{V}(t')] e^{-i\hat{H}(t'-t)}. \quad (\text{C.6})$$

Dans le cas où le potentiel d'interaction \hat{V} est petit, on peut développer la matrice densité en série $\hat{\rho} = \hat{\rho}_F + \hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_2 + \dots$ et alors on a

$$\hat{\rho}_1(t) = i \int_0^\infty ds e^{-s/\tau} e^{-i\hat{H}s} [\hat{\rho}_F, \hat{V}(t-s)] e^{i\hat{H}s}, \quad (\text{C.7})$$

où on a fait le changement de variable $s = t - t'$.

On fait maintenant l'hypothèse que le potentiel $\hat{V}(t)$ n'a qu'une seule composante en fréquence de sorte que

$$\hat{V}(t) = e^{i\omega t} \hat{V}, \quad (\text{C.8})$$

et de cette manière on a

$$\hat{\rho}_1(t) = i e^{i\omega t} \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} e^{-s/\tau} e^{-i\hat{H}s} [\tilde{\rho}_F, \hat{V}] e^{i\hat{H}s}. \quad (\text{C.9})$$

L'intégrale est indépendante du temps, on en déduit donc que $\hat{\rho}_1(t)$ est en régime stationnaire à tout instant. Le facteur $e^{-t/\tau}$ permet la convergence de l'intégrale, on peut considérer $1/\tau = \delta \rightarrow 0^+$. De cette manière on obtient l'expression suivante pour la conductivité optique

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{e^2}{i} \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} e^{-s/\tau} \text{Tr} \left(\hat{v}_i e^{-i\hat{H}s} [\tilde{\rho}_F, \hat{r}_j] e^{i\hat{H}s} \right). \quad (\text{C.10})$$

On développe explicitement cette expression sur la base des états propres du Hamiltonien \hat{H}_0 , où l'on note $|\alpha\rangle$ l'état propre associé à l'énergie E_α , et on utilise la relation de fermeture $\sum_m |m\rangle\langle m| = \mathbb{1}$ pour obtenir

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{e^2}{i} \sum_{n,m} f_D(E_n) \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} e^{-s/\tau} \text{Tr} \left(\hat{v}_i e^{-i\hat{H}s} (|n\rangle\langle n| \hat{r}_j |m\rangle\langle m| - |m\rangle\langle m| \hat{r}_j |n\rangle\langle n|) e^{i\hat{H}s} \right) \quad (\text{C.11})$$

$$= \frac{e^2}{i} \sum_{n,m} (f_D(E_n) - f_D(E_m)) \int_0^\infty ds e^{-i\omega s} e^{-s/\tau} \text{Tr} \left(\hat{v}_i e^{-i\hat{H}s} |n\rangle\langle n| \hat{r}_j |m\rangle\langle m| e^{i\hat{H}s} \right) \quad (\text{C.12})$$

$$= \frac{e^2}{i} \sum_{n,m} (f_D(E_n) - f_D(E_m)) \int_0^\infty ds e^{i(E_m - E_n - \omega + i\delta)s} \underbrace{\text{Tr} \left(\hat{v}_i |n\rangle\langle n| \hat{r}_j |m\rangle\langle m| \right)}_{= \langle m| \hat{v}_i |n\rangle \langle n| \hat{r}_j |m\rangle} \quad (\text{C.13})$$

$$= e^2 \sum_{n,m} \frac{f_D(E_n) - f_D(E_m)}{E_m - E_n - \omega + i\delta} \langle m| \hat{v}_i |n\rangle \langle n| \hat{r}_j |m\rangle. \quad (\text{C.14})$$

L'expression est simplifiée en remplaçant l'opérateur position grâce à la relation $\mathbf{v} = [\mathbf{r}, \hat{H}] / i$ d'où

$$\langle n| \mathbf{r} |m\rangle = i \frac{\langle n| \mathbf{v} |m\rangle}{E_m - E_n}. \quad (\text{C.15})$$

On a ainsi

$$\sigma_{ij}(\omega) = i e^2 \sum_{n,m} \frac{f_D(E_n) - f_D(E_m)}{E_m - E_n - \omega + i\delta} \frac{\langle m| \hat{v}_i |n\rangle \langle m| \hat{v}_j |n\rangle^*}{E_m - E_n}. \quad (\text{C.16})$$

C.2 Opérateur vitesse

Nous avons vu à la Section 1.1.1 du Chapitre 1 deux formulations du théorème de Bloch, en fonction des états périodiques $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ et en fonction des états de Wannier $a_{\alpha, \mathbf{R}}(\mathbf{r})$

$$\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\alpha, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} a_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}. \quad (\text{C.17})$$

Nous allons utiliser ces différentes notations afin d'exprimer l'opérateur vitesse en trois étapes [BV13]

- (i) L'expression en terme des états de Wannier $|a_\alpha\rangle$ est pratique lorsque l'on se restreint à un sous-ensemble de n orbitales atomiques, tel qu'on l'a vu pour le graphène à l'équation (1.45) du Chapitre 1. Les solutions propres s'écrivent alors sous la forme $|\Phi_{l, \mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mu=1}^n c_{l, \mu}(\mathbf{k}) |\Psi_{\mu, \mathbf{k}}\rangle$ où les coefficients $c_{l, \mu}$ sont solutions d'une équation matricielle

$$\hat{h}(\mathbf{k}) c_l(\mathbf{k}) = E_{n, \mathbf{k}} c_n(\mathbf{k}), \quad (\text{C.18})$$

où \hat{h} est lié au Hamiltonien par la relation $\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \alpha'} |\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}\rangle \hat{h}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) \langle \Psi_{\alpha', \mathbf{k}}|$.

(ii) L'expression en terme des fonctions d'ondes périodiques $|u_{\alpha,\mathbf{k}}\rangle$ a l'avantage de simplifier l'écriture de l'opérateur vitesse \hat{v} . L'équation de Schrödinger de ces états étant

$$\hat{H}_{\mathbf{k}}|u_{\alpha,\mathbf{k}}\rangle \equiv e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}\hat{H}e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}|u_{\alpha,\mathbf{k}}\rangle = E_{n,\mathbf{k}}|u_{\alpha,\mathbf{k}}\rangle, \quad (\text{C.19})$$

l'opérateur vitesse $\hat{v} \equiv i[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}]$ s'écrit $\mathbf{v} = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}\nabla_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}$. Les éléments de matrices de \hat{v} entre deux états propres $|\Phi_{l,\mathbf{k}}\rangle$ que l'on développe sur la base des états périodiques sont

$$\langle\Phi_{m,\mathbf{p}}|\hat{v}|\Phi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \delta_{nm}\delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k})\nabla_{\mathbf{k}}E_{n,\mathbf{k}} + (E_{n,\mathbf{k}} - E_{m,\mathbf{p}})\langle u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\nabla_{\mathbf{k}}u_{n,\mathbf{k}}\rangle. \quad (\text{C.20})$$

Le détail du calcul est rédigé au paragraphe suivant.

(iii) On exprime les solutions périodiques en fonction des solutions propres exprimées dans la base des états de Bravais $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} c_{l,\mu}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)} a_{\mu}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$, alors on peut réécrire les éléments de l'opérateur vitesse sous la forme

$$\langle\Psi_{m,\mathbf{p}}|\hat{v}|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k})c_m^{\dagger}(\mathbf{k})\nabla_{\mathbf{k}}h(\mathbf{k})c_n(\mathbf{k}) + \delta\mathbf{v} \quad (\text{C.21})$$

$$\text{où } \delta\mathbf{v} = -i \sum_{\mu,\nu} c_m^{(\nu)*}(\mathbf{p})c_n^{(\mu)}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}_j,\mathbf{R}_i} \int d^3\mathbf{r} a_{\nu}^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)\mathbf{r}a_{\mu}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i). \quad (\text{C.22})$$

Si la base des états de Wannier est suffisamment localisée – peu de recouvrement si $\mathbf{R}_i \neq \mathbf{R}_j$ – et à symétrie sphérique – pas de moment dipolaire si $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_j$ – alors le terme sous l'intégrale peut être négligé ($\delta\mathbf{v} \approx 0$). C'est ce que l'on fera par la suite et il faudra garder à l'esprit que le choix de la base est important, tout changement de base dépendant des vecteurs d'onde \mathbf{k} tel que $c'_{n\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}}c_{n\mathbf{k}}$ ajoute un terme additionnel [voir paragraphe suivant].

L'opérateur vitesse s'exprime donc aisément à l'aide du Hamiltonien par bloc $\hat{h}(\mathbf{k})$

$$\hat{v} = \nabla_{\mathbf{k}}\hat{h}(\mathbf{k}). \quad (\text{C.23})$$

Détail du calcul de l'opérateur vitesse

On s'inspire de l'équation de Heisenberg pour définir l'opérateur vitesse,

$$\hat{v} \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}] \approx \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{eff}, \hat{\mathbf{r}}] \quad (\text{C.24})$$

De plus on observe que $\nabla_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}} = -ie^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_{eff}]e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} = \hbar e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}\hat{v}e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}$, $\forall \mathbf{k}$, par conséquent les éléments de matrice de l'opérateur \hat{v} sur les états propres du hamiltonien sont

$$\hbar\langle\Psi_{m,\mathbf{p}}|\hat{v}|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \langle\Psi_{m,\mathbf{p}}|e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}\nabla_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle = \langle u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\nabla_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{C.25})$$

$$= \nabla_{\mathbf{k}}\left(\langle u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\hat{H}_{\mathbf{k}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle\right) - \langle u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\hat{H}_{\mathbf{k}}|\nabla_{\mathbf{k}}u_{n,\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{C.26})$$

$$- \langle u_{m,\mathbf{p}}|\nabla_{\mathbf{k}}\left(\underbrace{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}}_{=-\nabla_{\mathbf{p}}(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}})}\hat{H}_{\mathbf{k}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle\right) \\ = \nabla_{\mathbf{k}}(E_{n,\mathbf{k}}\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{p})\delta_{m,n}) + \nabla_{\mathbf{p}}(E_{n,\mathbf{k}}\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{p})\delta_{m,n}) \quad (\text{C.27})$$

$$- \langle u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\hat{H}_{\mathbf{k}}|\nabla_{\mathbf{k}}u_{n,\mathbf{k}}\rangle - \langle\nabla_{\mathbf{p}}u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\hat{H}_{\mathbf{k}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{C.28})$$

On utilise que $e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\hat{H}_{\mathbf{k}} = \hat{H}_{\mathbf{p}}e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}$ et $\langle\nabla_{\mathbf{p}}u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle = -\langle u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\nabla_{\mathbf{k}}u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ pour écrire

$$\hbar\langle\Psi_{m,\mathbf{p}}|\hat{v}|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \delta_{mn}\delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k})\nabla_{\mathbf{k}}E_{n,\mathbf{k}} + (E_{n,\mathbf{k}} - E_{m,\mathbf{p}})\langle u_{m,\mathbf{p}}|e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\hat{\mathbf{r}}}\nabla_{\mathbf{k}}u_{n,\mathbf{k}}\rangle. \quad (\text{C.29})$$

Approximation, en vu de calculs pratiques

L'expression précédente est trop compliquée pour être utilisée puisqu'on n'a pas directement accès aux $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$. Il faut faire le lien avec la base des orbitales atomiques. On observe que,

$$\langle u_{m,\mathbf{p}} | e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\hat{\mathbf{r}}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mu} \nabla_{\mathbf{k}} c_n^{(\mu)}(\mathbf{k}) \underbrace{\langle u_{m,\mathbf{p}} | e^{-i\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \psi_{\mu,k} \rangle}_{=\langle \Psi_{m,\mathbf{p}} | \psi_{\mu,k} \rangle} - i \sum_{\mu} c_n^{(\mu)}(\mathbf{k}) \underbrace{\langle u_{m,\mathbf{p}} | e^{-i\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \psi_{\mu,k} \rangle}_{=\langle \Psi_{m,\mathbf{p}} | \psi_{\mu,k} \rangle} \quad (\text{C.30})$$

$$= \delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) c_m^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} c_n(\mathbf{k}) - i \sum_{\mu,\nu} c_m^{(\nu)*}(\mathbf{p}) c_n^{(\mu)}(\mathbf{k}) \langle \Psi_{\nu,\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{r}} \psi_{\mu,k} \rangle \quad (\text{C.31})$$

Or $\langle \Psi_{\nu,\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{r}} \psi_{\mu,k} \rangle = \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}') \phi_{\mu}(\mathbf{r}) \sum_{R_j, R_i} \langle \mathbf{r}' + \mathbf{R}_j | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r} + \mathbf{R}_i \rangle = \sum_{R_j, R_i} \int d^3\mathbf{r} \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j) \mathbf{r} \phi_{\mu}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$, donc :

$$\langle u_{m,\mathbf{p}} | e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\hat{\mathbf{r}}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) c_m^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} c_n(\mathbf{k}) - i \sum_{\mu,\nu} c_m^{(\nu)*}(\mathbf{p}) c_n^{(\mu)}(\mathbf{k}) \sum_{R_j, R_i} \int d^3\mathbf{r} \phi_{\nu}^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j) \mathbf{r} \phi_{\mu}(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i) \quad (\text{C.32})$$

Le second terme semble compliqué à prendre en compte et décrit la polarisation associée aux orbitales atomiques. Cependant, les orbitales atomiques sont en général (i) éloignées les unes des autres (peu de recouvrement si $\mathbf{R}_i \neq \mathbf{R}_j$) et (ii) à symétrie sphérique (pas de moment dipolaire si $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_j$), le second terme peut ainsi être évalué à zéro. On a alors

$$\langle u_{m,\mathbf{p}} | e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\hat{\mathbf{r}}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \rangle \approx \delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) c_m^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} c_n(\mathbf{k}) \quad (\text{C.33})$$

Par conséquent, si on néglige les termes de polarisation orbitale, les éléments de matrice de l'opérateur vitesse s'écrivent simplement sur la base des états propres

$$\hbar \langle \Psi_{m,\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{v}} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \approx \delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \left(\delta_{mn} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n,\mathbf{k}} + (E_{n,\mathbf{k}} - E_{m,\mathbf{k}}) c_m^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} c_n(\mathbf{k}) \right) \quad (\text{C.34})$$

$$\approx \delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) c_m^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} h(\mathbf{k}) c_n(\mathbf{k}). \quad (\text{C.35})$$

Cette écriture n'est possible que sur une base d'orbitales atomiques et si l'on passe à une base quelconque décrite par $c'_{n,\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}} c_{n,\mathbf{k}}$, alors

$$\hbar \langle \Psi_{m,\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{v}} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \approx \delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \left[c_m^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} \hat{h}'(\mathbf{k}) c'_n(\mathbf{k}) - c_m^{\dagger}(\mathbf{k}) [\hat{h}'(\mathbf{k}), \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \nabla_{\mathbf{k}} \hat{U}_{\mathbf{k}}] c'_n(\mathbf{k}) \right]. \quad (\text{C.36})$$

Le terme additionnel est un terme correctif à prendre en compte pour tout changement de base et décrit la dérive en position des nouvelles orbitales.

C.3 Conductivité optique du modèle de Bodnar, sans champ magnétique

Dans cette partie, je vais exprimer la conductivité optique du modèle de Bodnar à l'aide de la relation (C.16) de la conductivité optique, dont je rappelle l'expression

$$\text{Re}[\sigma_{ii}(\omega)] = \frac{\sigma_0}{\omega} \sum_{l,l'=1}^8 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \underbrace{(f_D(E_l(\mathbf{k})) - f_D(E_{l'}(\mathbf{k})))}_{\text{band occupation}} \underbrace{|c_l^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{k_i} H(\mathbf{k}) c_{l'}(\mathbf{k})|^2}_{\text{interband coupling}} \underbrace{\delta(\hbar\omega - (E_l(\mathbf{k}) - E_{l'}(\mathbf{k})))}_{\sim \text{density of states JDOS}} \quad (\text{C.37})$$

avec $\sigma_0 = \pi e^2 / \hbar^2$, l, l' indices les états propres du modèle de Bodnar décrit à l'équation (2.1.4) du Chapitre 2. Avec la notation de l'équation (2.19), chaque composante de l'opérateur vitesse s'écrit $\nabla_{k_i} H = P J_i$ où $i = x, y, z$ représente les directions cartésiennes. En accord avec les résultats obtenus en magnéto optique, on admet $P_{\perp} \approx P_{\parallel} = P$. De plus, l'énergie de la lumière incidente $\hbar\omega$ étant suffisamment large pour négliger δ et E_0 , on peut ainsi utiliser la transformation (2.23) afin de relier n'importe quel état propre $|l, \mathbf{k}\rangle$ à un état où l'impulsion est selon z , $|l, \mathbf{k}\rangle = \hat{U}_{\phi}^{\dagger} \hat{U}_{\theta}^{\dagger} |l, k_z = |\mathbf{k}|\rangle$ où θ, ϕ sont les coordonnées sphériques.

On admet que $\Delta \approx 400$ meV est suffisamment large pour que l'on sépare les états Ψ_1 et Ψ_2 à l'énergie $-\Delta$ des autres. À l'ordre le plus bas en Pk/Δ on a

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{2/3} \\ -\sqrt{1/3} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sqrt{2/3} \\ -\sqrt{1/3} \end{pmatrix}, \quad Q.P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.38})$$

Dans cette nouvelle base, le Hamiltonien 6×6 projeté est

$$\hat{H}_\infty(\mathbf{k}) \equiv (Q.P)^\dagger \hat{H}(Q.P) = \hat{H}_\infty(\mathbf{k}=0) + P\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}}_\infty \quad (\text{C.39})$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Pk_- \\ 0 & 0 & 0 & Pk_+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}P_\perp k_+ \\ 0 & Pk_- & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z \\ Pk_+ & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.40})$$

avec $k_\pm = (k_x \pm ik_y)/\sqrt{2}$. Il est similaire à l'équation (2.25) mais on a ajouté un changement de base supplémentaire afin de faciliter le raisonnement ultérieur. De plus dans la nouvelle base, l'invariance par rotation est toujours présente et s'écrit maintenant

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_\infty \cdot \mathbf{n} &= J_{\infty,x} \sin(\theta) \cos(\phi) + J_{\infty,y} \sin(\theta) \sin(\phi) + J_{\infty,z} \cos(\theta) = U_{\infty,\phi}^\dagger (J_{\infty,x} \sin(\theta) + J_{\infty,z} \cos(\theta)) U_{\infty,\phi} \\ &= U_{\infty,\phi}^\dagger U_{\infty,\theta}^\dagger J_{\infty,z} U_{\infty,\theta} U_{\infty,\phi} \end{aligned} \quad (\text{C.41})$$

$$U_{\infty,\phi} = \text{diag}(e^{2i\phi}, e^{-i\phi}, 1, 1, e^{i\phi}, e^{i\phi}) \quad (\text{C.42})$$

$$U_{\infty,\theta} = \exp(i\theta L^\infty) \quad (\text{C.43})$$

$$L_\infty = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{2} \\ -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.44})$$

On peut ainsi ramener l'étude de tous les états à ceux tel que $|l, k_z = |\mathbf{k}|\rangle$. En effet, par rotation on a

$$\hat{H}_{\infty,z}(\mathbf{k}) \equiv U_{\infty,\phi}^\dagger U_{\infty,\theta}^\dagger (Q.P)^\dagger \hat{H}(Q.P) U_{\infty,\theta} U_{\infty,\phi} = \sqrt{\frac{2}{3}} P_\perp k \hat{J}_{\infty,z}, \quad (\text{C.45})$$

dont on trouve les trois énergies propres suivantes, chacune doublement dégénérée,

$$E_0(\mathbf{k}) = 0, \quad E_\pm(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\frac{2}{3}} Pk \quad (\text{C.46})$$

associées aux six états propres suivants

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{0,1} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{0,2} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{+,1} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}_{+,2} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{-,1} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}_{-,2} \quad (C.47)$$

Comme les énergies propres ne dépendent que de $|\mathbf{k}|$, l'intégration sur θ, ϕ de l'intégrale (C.37) donne les éléments de couplage interbandes suivants pour σ_{xx} :

$$J_{ll'}^x = P^2 \int d\theta d\phi |\langle l, \mathbf{k} | J_x | l', \mathbf{k} \rangle|^2 = P_{\perp}^2 \int d\theta d\phi |\langle l, k_z = |\mathbf{k}| | \hat{U}_{\theta} \hat{U}_{\phi} J_x \hat{U}_{\phi}^{\dagger} \hat{U}_{\theta}^{\dagger} | l', k_z = |\mathbf{k}| \rangle|^2 \quad (C.48)$$

$$= P^2 \int d\theta d\phi |\langle l, k_z = |\mathbf{k}| | \hat{J}_x \cos(\theta) \cos(\phi) - \hat{J}_y \sin(\phi) + \hat{J}_z \sin(\theta) \cos(\phi) | l', k_z = |\mathbf{k}| \rangle|^2 \quad (C.49)$$

$$= \frac{4\pi P^2}{3} (2|\langle l, k_z = |\mathbf{k}| | \hat{J}_x | l', k_z = |\mathbf{k}| \rangle|^2 + |\langle l, k_z = |\mathbf{k}| | \hat{J}_z | l', k_z = |\mathbf{k}| \rangle|^2) \quad (C.50)$$

où l'on a utilisé $[\hat{L}, \hat{J}_x] = -i\hat{J}_z$, $[\hat{L}, \hat{J}_y] = 0$ et $[\hat{L}, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x$. L'expression de la matrice de couplage dans la base définie à l'équation (C.47) et à laquelle on ajoute le couplage avec les états Ψ_1 et Ψ_2 à l'énergie $-\Delta$ (deux dernières colonnes) est ainsi

$$J^x = \frac{4\pi P^2}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (C.51)$$

La conductivité optique pour un potentiel chimique $\mu > 0$ est la somme des contributions des trois transitions suivantes (i) de $E = 0$ à $E = \sqrt{2/3}Pk$, (ii) de $E = -\sqrt{2/3}Pk$ à $E = \sqrt{2/3}Pk$ et, (iii) de $E = -\Delta$ à $E = \sqrt{2/3}Pk$. On obtient ainsi

$$\text{Re}[\sigma_{xx}^{\infty}(\omega > 0)] = \frac{\sigma_0}{\omega} \frac{4\pi P^2}{3} \int \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \left[\delta\left(\hbar\omega - \sqrt{\frac{2}{3}}Pk\right) + \frac{2}{3} \delta\left(\hbar\omega - 2\sqrt{\frac{2}{3}}Pk\right) + \delta\left(\hbar\omega - \Delta - \sqrt{\frac{2}{3}}Pk\right) \right] \quad (C.52)$$

$$= \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{e^2}{4\pi P} \omega \left[\frac{13}{12} + \theta(\hbar\omega - \Delta) \left(1 - \frac{\Delta}{\hbar\omega}\right)^2 \right]. \quad (C.53)$$

Comme le dernier terme est obtenu en découplant les bandes à $E = -\Delta$ des autres, il n'est en fait valable que pour $\Delta \gg Pk = \sqrt{3/2}(\hbar\omega - \Delta)$ et il semble correspondre au comportement expérimental.

C.4 Niveaux de Landau de Cd_3As_2 et spectroscopie infrarouge

On considère de nouveau le modèle de Bodnar introduit à l'équation (2.1.4) du Chapitre 2. On considère qu'un champ magnétique est appliqué dans le plan xy et on obtient les règles de commutation suivantes

$$[k_x, k_y] = -\frac{i}{l_B^2} \cos(\theta), \quad [k_x, k_z] = 0, \quad [k_y, k_z] = -\frac{i}{l_B^2} \sin(\theta). \quad (C.54)$$

Si on exprime $\{\phi_3, \dots, \phi_8\}$ en terme de ϕ_1 et ϕ_2 comme dans [SW83], ce qui est similaire à insérer le Hamiltonien dans l'équation séculaire, alors on obtient l'équation matricielle suivante

$$\left(\gamma(E) - f_1(E)(k_x^2 + k_y^2) - f_2(E)k_z^2 \right) \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3}\Delta(E + \delta)P_{\perp}^2 i[k_x, k_y] & -\frac{1}{3}E\Delta P_{\perp}P_{\parallel} i[k_y, k_z] \\ -\frac{1}{3}E\Delta P_{\perp}P_{\parallel} i[k_y, k_z] & -\frac{1}{3}\Delta(E + \delta)P_{\perp}^2 i[k_x, k_y] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} \quad (C.55)$$

où

$$\gamma(E) = E(E + E_0)[E(E + \Delta) + \delta(E + \frac{2}{3}\Delta)], \quad (C.56)$$

$$f_1(E) = P_{\perp}^2 [E(E + \frac{2}{3}\Delta) + \delta(E + \frac{1}{3}\Delta)], \quad (C.57)$$

$$f_2(E) = P_{\parallel}^2 E(E + \frac{2}{3}\Delta). \quad (C.58)$$

Ceci redonne, en l'absence de champ magnétique, l'équation séculaire

$$\gamma(E) = f_1(E)(k_x^2 + k_y^2) + f_2(E)k_z^2. \quad (C.59)$$

Quantification

En présence du champ magnétique, les relations de commutation sont non-nulles et on a

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3}\Delta(E + \delta)P_{\perp}^2 i[k_x, k_y] & -\frac{1}{3}E\Delta P_{\perp}P_{\parallel} i[k_y, k_z] \\ -\frac{1}{3}E\Delta P_{\perp}P_{\parallel} i[k_y, k_z] & -\frac{1}{3}\Delta(E + \delta)P_{\perp}^2 i[k_x, k_y] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3}\Delta(E + \delta)P_{\perp}^2 \frac{\cos(\theta)}{l_B^2} & -\frac{1}{3}E\Delta P_{\perp}P_{\parallel} \frac{\sin(\theta)}{l_B^2} \\ -\frac{1}{3}E\Delta P_{\perp}P_{\parallel} \frac{\sin(\theta)}{l_B^2} & -\frac{1}{3}\Delta(E + \delta)P_{\perp}^2 \frac{\cos(\theta)}{l_B^2} \end{bmatrix} \quad (C.60)$$

$$= \frac{1}{3}\Delta(E + \delta)P_{\perp}^2 \frac{\cos(\theta)}{l_B^2} \hat{\sigma}_z - \frac{1}{3}E\Delta P_{\perp}P_{\parallel} \frac{\sin(\theta)}{l_B^2} \hat{\sigma}_x. \quad (C.61)$$

On peut redéfinir les impulsions sous la forme suivante

$$k_x = \cos(\theta)k'_x + \sin(\theta)k'_z \quad (C.62)$$

$$k_y = k'_y \quad (C.63)$$

$$k_z = -\sin(\theta)k'_x + \cos(\theta)k'_z \quad (C.64)$$

de sorte que les règles de commutation sont désormais

$$[k'_x, k'_y] = -\frac{i}{l_B}, \quad [k'_x, k'_z] = 0, \quad [k'_y, k'_z] = 0. \quad (C.65)$$

Dans notre cas, on obtient ainsi

$$\begin{aligned} f_1(E)(k_x^2 + k_y^2) + f_2(E)k_z^2 &= [\cos(\theta)^2 f_1(E) + \sin(\theta)^2 f_2(E)] \left(k'_x + \frac{\cos(\theta) \sin(\theta) (f_2(E) - f_1(E))}{\cos(\theta)^2 f_1(E) + \sin(\theta)^2 f_2(E)} k'_z \right)^2 + f_1(E)k_y^2 \\ &+ \frac{f_1(E)f_2(E)}{\cos^2(\theta)f_1(E) + \sin^2(\theta)f_2(E)} k_z'^2. \end{aligned} \quad (C.66)$$

L'expression des opérateurs d'échelle, dérivés à l'équation (2.78) du Chapitre 2, est toujours valable si on translate k'_x d'une constante. Ainsi, si $(\cos(\theta)^2 f_1(E) + \sin(\theta)^2 f_2(E))/f_1(E) > 0$ alors

$$\begin{aligned} f_1(E)(k_x^2 + k_y^2) + f_2(E)k_z^2 &= \frac{\text{sign}(f_1(E))(2n+1)}{l_B^2} \sqrt{f_1(E)(\cos(\theta)^2 f_1(E) + \sin(\theta)^2 f_2(E))} \\ &+ \frac{f_1(E)f_2(E)}{\cos^2(\theta)f_1(E) + \sin^2(\theta)f_2(E)} k_z'^2 \end{aligned} \quad (C.67)$$

où le nombre entier $n \in \mathbb{N}$ est valeur propre de l'opérateur nombre \hat{n} associé aux opérateurs d'échelle définis à l'équation (2.78). Cette expression n'est plus valide dans le cas où

$$(\cos(\theta)^2 f_1(E) + \sin(\theta)^2 f_2(E)) / f_1(E) < 0 \quad (\text{C.68})$$

$$\Rightarrow 0 > \frac{f_1(E)}{f_2(E)} > -\tan(\theta)^2 \quad (\text{C.69})$$

$$\Rightarrow 0 > 1 + \delta \frac{E + \frac{1}{3}\Delta}{E(E + \frac{2}{3}\Delta)} > -\tan(\theta)^2, \quad (\text{C.70})$$

ce qui décrit la condition pour avoir des orbites ouvertes. On trouve ainsi des solutions pour des énergies en dehors d'un intervalle de taille finie de l'ordre de δ et qui se trouve à $E < 0$. Cette gamme d'énergie est celle des cônes de Dirac où la relation de dispersion semble présenter un point selle. Cet intervalle disparaît pour $\delta = 0$ ou pour $\theta = 0$, soit un champ magnétique dans la direction [001]. Les niveaux de Landau sont alors solutions de l'équation polynomiale suivante

$$\begin{aligned} \gamma(E) = & \frac{\text{sign}(f_1(E))(2n+1)}{l_B^2} \sqrt{f_1(E)(\cos(\theta)^2 f_1(E) + \sin(\theta)^2 f_2(E))} \\ & + \frac{f_1(E)f_2(E)}{\cos^2(\theta)f_1(E) + \sin^2(\theta)f_2(E)} k_z'^2 \pm \frac{1}{3l_B^2} P_{\perp} \Delta \sqrt{P_{\perp}^2 \cos^2(\theta)(E+\delta)^2 + E^2 P_{\parallel} \sin(\theta)^2} \end{aligned} \quad (\text{C.71})$$

La résolution numérique de cette équation a été réalisée dans [SW83] où la condition (C.70) n'était pas prise en compte, ce qui a mené à des confusions dans la littérature [LA87]. De plus, nous allons le voir, certaines valeurs de n ne donnent pas lieu à 8 solutions comme on peut s'y attendre en comptant le degré du polynôme de l'équation (C.71) mais moins. Pour cela nous allons analyser en détail deux situations, pour un champ magnétique selon la direction [001] et [112].

Champ magnétique dans la direction [001]

L'équation (C.71) permet de montrer que chaque composante de la fonction d'onde s'écrit comme un état nombre. Comme le Hamiltonien s'écrit sous la forme suivante, avec \hat{a} l'opérateur d'échelle,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -E_0 & P_{\perp} \hat{a} & -P_{\perp} \hat{a}^{\dagger} & 0 & 0 & 0 & 0 & P_{\parallel} k_z \\ P_{\perp} \hat{a}^{\dagger} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -P_{\perp} \hat{a} & 0 & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) & P_{\parallel} k_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_{\parallel} k_z & -E_0 & P_{\perp} \hat{a}^{\dagger} & P_{\perp} \hat{a} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & P_{\perp} \hat{a} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & P_{\perp} \hat{a}^{\dagger} & 0 & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ P_{\parallel} k_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) \end{pmatrix} \quad (\text{C.72})$$

on en déduit que les solutions propres ont la forme suivante

$$\Phi_n = (\alpha_{1,+} \phi_n \quad \alpha_{2,+} \phi_{n+1} \quad \alpha_{3,+} \phi_{n-1} \quad \alpha_{4,+} \phi_{n-1} \quad \alpha_{1,-} \phi_{n-1} \quad \alpha_{2,-} \phi_{n-2} \quad \alpha_{3,-} \phi_n \quad \alpha_{4,-} \phi_n) \quad (\text{C.73})$$

où $\phi_n = \phi_n(y + p_x l_B^2) e^{i p_x x}$ est solution de l'équation de l'oscillateur harmonique et $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ est la longueur magnétique. Les coefficients sont solutions de l'équation aux valeurs propres suivante

$$\hat{H}_B \Psi = E \Psi$$

avec $\Psi = (\alpha_{1,+}, \alpha_{2,+}, \alpha_{3,+}, \alpha_{4,+}, \alpha_{1,-}, \alpha_{2,-}, \alpha_{3,-}, \alpha_{4,-})$ et

$$\hat{H}_B = \begin{pmatrix} -E_0 & \sqrt{n+1} \frac{P_\perp}{l_B} & -\sqrt{n} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & 0 & 0 & 0 & P_\parallel k_z \\ \sqrt{n+1} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{n} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) & P_\parallel k_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_\parallel k_z & -E_0 & \sqrt{n-1} \frac{P_\perp}{l_B} & \sqrt{n} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n-1} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ P_\parallel k_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) \end{pmatrix} \quad (C.74)$$

dont les valeurs propres sont les niveaux de Landau. Les pics de résonance pour la spectroscopie d'un système unidimensionnel sont obtenus par les bords de bande, qui sont ici situés en $k_z = 0$, et sur lesquels nous nous concentrerons par la suite. Dans ce cas, les sous-espaces \pm sont découplés et on peut chercher des solutions sous la forme suivante (pour $n \geq 2$)

$$\Psi_{n,+} = (\alpha_{1,+} \phi_{n-1} \quad \alpha_{2,+} \phi_n \quad \alpha_{3,+} \phi_{n-2} \quad \alpha_{4,+} \phi_{n-2} \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0) , \quad (C.75)$$

$$\Psi_{n,-} = (0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \alpha_{1,-} \phi_{n-1} \quad \alpha_{2,-} \phi_{n-2} \quad \alpha_{3,-} \phi_n \quad \alpha_{4,-} \phi_n) . \quad (C.76)$$

dont les coefficients sont solutions de

$$\begin{pmatrix} -E_0 & \sqrt{n+1} \frac{P_\perp}{l_B} & -\sqrt{n} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 \\ \sqrt{n+1} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{n} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1,+} \\ \alpha_{2,+} \\ \alpha_{3,+} \\ \alpha_{4,+} \end{pmatrix} = E_{n,+} \begin{pmatrix} \alpha_{1,+} \\ \alpha_{2,+} \\ \alpha_{3,+} \\ \alpha_{4,+} \end{pmatrix} , \quad (C.77)$$

$$\begin{pmatrix} -E_0 & \sqrt{n} \frac{P_\perp}{l_B} & \sqrt{n+1} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 \\ \sqrt{n} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{n+1} \frac{P_\perp}{l_B} & 0 & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1,-} \\ \alpha_{2,-} \\ \alpha_{3,-} \\ \alpha_{4,-} \end{pmatrix} = E_{n,-} \begin{pmatrix} \alpha_{1,-} \\ \alpha_{2,-} \\ \alpha_{3,-} \\ \alpha_{4,-} \end{pmatrix} . \quad (C.78)$$

Il existe, comme pour l'équation de Weyl, des plus bas niveaux de Landau $n = 0$ et $n = 1$ qui sont spéciaux car plusieurs composantes de la fonction d'onde s'annulent :

(i) pour $n = 0$, la fonction d'onde est de la forme

$$\phi_{0,+} = (0 \quad \phi_0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0) , \quad (C.79)$$

$$\phi_{0,-} = (0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \alpha_{3,-} \phi_0 \quad \alpha_{4,-} \phi_0) . \quad (C.80)$$

et les trois énergies propres correspondantes sont

$$E_{0,+} = 0 , \quad (C.81)$$

$$E_{0,-}^{(\pm)} = -\frac{\Delta + \delta}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta - \delta/3}{2}\right)^2 + 2\delta^2/9} . \quad (C.82)$$

On peut montrer à l'aide d'un argument similaire à celui de Aharonov-Casher [voir section 2.3.3] que le mode $n = 0$ est stable vis-à-vis des fluctuations du champ magnétique. Si on prend en compte la dispersion selon z , on n'observe pas l'anomalie sur le signe des vitesses de Fermi observée pour les semi-métaux de Weyl, tout comme pour un cône de Weyl à la phase critique $t = 1$.

Les coefficients $\alpha_{3,-}$ et $\alpha_{4,-}$ sont solutions de

$$\begin{pmatrix} -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{3,-} \\ \alpha_{4,-} \end{pmatrix} = E_{0,-}^{(\pm)} \begin{pmatrix} \alpha_{2,-} \\ \alpha_{4,-} \end{pmatrix} . \quad (C.83)$$

(ii) pour $n = 1$, les solutions sont de la forme suivante

$$\phi_{1,+} = \begin{pmatrix} \alpha_{1,+}\phi_0 & \alpha_{2,+}\phi_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.84})$$

$$\phi_{1,-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha_{1,-}\phi_0 & 0 & \alpha_{3,-}\phi_1 & \alpha_{4,-}\phi_1 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.85})$$

Les deux énergies propres de type + sont

$$E_{1,+}^{(\pm)} = -\frac{E_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_0}{2}\right)^2 + \left(\frac{P_{\perp}}{l_B}\right)^2}, \quad (\text{C.86})$$

et les coefficients correspondants vérifient l'équation

$$\begin{pmatrix} -E_0 & \frac{P_{\perp}}{l_B} \\ \frac{P_{\perp}}{l_B} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1,+} \\ \alpha_{2,+} \end{pmatrix} = E_{1,+}^{(\pm)} \begin{pmatrix} \alpha_{1,+} \\ \alpha_{2,+} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.87})$$

Les trois solutions propres de type – sont solutions de l'équation matricielle 3×3 suivante

$$\begin{pmatrix} -E_0 & \frac{P_{\perp}}{l_B} & 0 \\ \frac{P_{\perp}}{l_B} & -\frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -(\delta + \frac{\Delta}{3}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1,-} \\ \alpha_{2,-} \\ \alpha_{4,-} \end{pmatrix} = E_{1,-} \begin{pmatrix} \alpha_{1,-} \\ \alpha_{2,-} \\ \alpha_{4,-} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.88})$$

Les règles de sélection optiques à $k_z = 0$ sont obtenues en calculant les éléments de matrice de $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$. Elles sont telles que

(i) $\Psi_n \rightarrow \Psi_{n\pm 1}$,

(ii) les transitions entre $\Psi_{n,-}$ et $\Psi_{n',+}$ sont interdites, en incidence normale.

Il est intéressant de remarquer que pour un modèle de cônes de Dirac, la taille du gap permet d'éliminer toutes les transitions de type + ou – : on perd la moitié des transitions optiques. Ce n'est pas observé dans le cas du modèle de Bodnar.

Champ magnétique dans la direction [112]

Dans ce cas une approche analytique paraît plus compliquée et nécessite de réécrire le Hamiltonien avec des opérateurs d'échelle énergie-dépendants comme on l'a vu à l'équation (C.71). Ce n'est pas sans rappeler le comportement obtenu pour les électrons de Dirac en présence d'un champ électrique ou d'une inclinaison. Je n'ai pas eu l'occasion de continuer ce calcul mais, afin de pouvoir interpréter les mesures expérimentales, nous avons développé le calcul numérique des niveaux de Landau. Pour cela on s'appuie sur les résultats obtenus dans la direction [001] et il est pratique de réécrire le Hamiltonien dans la base où les relations de commutation sont

$$[k_x, k_y] = -\frac{i}{l_B^2}, \quad [k_x, k_z] = 0, \quad [k_y, k_z] = 0. \quad (\text{C.89})$$

A l'aide du changement de base décrit à l'équation (B.31), on a

$$\hat{H}_{\alpha} = \begin{pmatrix} -E_0 & P\hat{a}/\ell_B & -P\hat{a}^{\dagger}/\ell_B & 0 & 0 & 0 & 0 & Pk_z \\ P\hat{a}^{\dagger}/\ell_B & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & \frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} \\ -P\hat{a}/\ell_B & \frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} - \frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 & 0 & 0 & -\frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -\delta \cos^2(\alpha) - \frac{\Delta}{3} & Pk_z & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Pk_z & -E_0 & P\hat{a}^{\dagger}/\ell_B & P\hat{a}/\ell_B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & P\hat{a}/\ell_B & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & P\hat{a}^{\dagger}/\ell_B & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} & -\frac{\delta \sin^2(\alpha)}{2} - \frac{2}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} \\ Pk_z & \frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & -\frac{\delta \sin(2\alpha)}{2\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -\delta \cos^2(\alpha) - \frac{\Delta}{3} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.90})$$

Il suffit pour cela de réaliser le développement de chaque coefficient de la fonction d'onde sur les états propres de l'oscillateur harmonique ϕ_n . La fonction d'onde Ψ se décompose sous la forme $\Psi = (\psi_i)_{i \in [1,8]}$ avec pour chaque composante

$$\psi_i = \sum_{k=0}^{N_i} c_{i,k} \phi_k. \quad (C.91)$$

Afin de conserver la structure des plus bas niveaux de Landau obtenue pour la direction [001], on choisit N_i tel que

$$\begin{cases} N_2 = N_7 = N_8 = N_{\max}, \\ N_1 = N_5 = N_{\max} - 1, \\ N_3 = N_4 = N_6 = N_{\max} - 2. \end{cases} \quad (C.92)$$

où N_{\max} est le plus grand niveau de Landau que l'on calcule. Avec le choix $N_{\max} = 4$ on obtient en général une bonne approximation. Si on injecte la forme (C.91) dans l'équation de Schödinger indépendante du temps, alors on obtient comme dans la méthode CLAO (*Combinaison Lineaire d'Orbitales Atomiques*)

$$\sum_{j=1}^6 H_{ij} \psi_j = E \psi_i \implies \sum_{j=1}^6 \sum_{k=0}^{N_j} H_{ij} \phi_k c_{i,k} = E \sum_{k=0}^{N_i} c_{i,k} \phi_k. \quad (C.93)$$

Il suffit de projeter cette équation sur ϕ_n afin d'obtenir

$$\sum_{j=1}^6 \sum_{k=0}^{N_j} \phi_n^* H_{ij} \phi_k c_{i,k} = E \sum_{k=0}^{N_i} c_{i,k} \delta_{n,k}. \quad (C.94)$$

On définit de cette manière une matrice de dimension $\sum_j N_j = 32$. Ses coefficients sont ceux de (C.72) où

1. chaque scalaire (E_g, δ, Δ, q_z) devient une matrice de taille $(N_i + 1) \times (N_j + 1)$ à la ligne i et colonne j , ce qui correspond au delta de Kronecker $\delta_{n,m}$ avec $n \in [0, N_i]$ et $m \in [0, N_j]$.
2. les opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger à la ligne i et la colonne j sont écrits

$$\langle n | \hat{a} | m \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n+1,m}, \quad (C.95)$$

$$\langle n | \hat{a}^\dagger | m \rangle = \sqrt{n} \delta_{n-1,m}, \quad (C.96)$$

avec $n \in [0, N_i]$ et $m \in [0, N_j]$.

Comme les pics de résonance en spectroscopie d'un système unidimensionnel sont obtenus pour les transitions optiques en bords de bande, on peut limiter le calcul numérique à $q_z = 0$. Pour un champ magnétique dans la direction [112], en utilisant le résultat de l'Annexe B.5, l'angle du changement de base à l'équation (C.72) est $\alpha = \arctan(\sqrt{2}P_\perp/P_\parallel)$, et en admettant $P_\perp \approx P_\parallel$ on a $\alpha \approx \theta_B$. On trace le spectre obtenu pour $\delta = 30\text{meV}$, $E_g = -30\text{meV}$, $\Delta = 400\text{meV}$, $v = 0.93 \times 10^6\text{m/s}$ ($P = \sqrt{3/2}\hbar v = 7.5\text{eV/\AA}$) et pour les deux directions [001] et [112] à la Figure C.1.

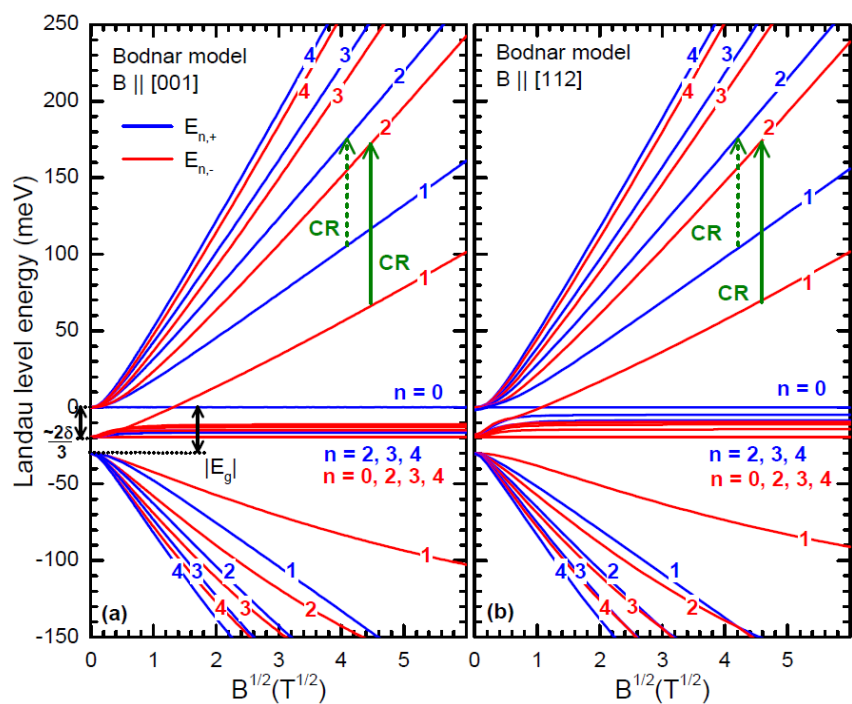


FIGURE C.1 – Spectre des niveaux de Landau obtenu numériquement pour deux directions du champ magnétique, tiré de notre article [AHT⁺16].

Annexe D

Etats de surfaces des semi-métaux de Weyl et isolants topologiques

D.1 Hamiltonien de Pöschl-Teller avec décalage

On considère le Hamiltonien d'un isolant topologique suivant [ZKM12]

$$\hat{H}_0 = \Delta \hat{1} \otimes \hat{\tau}_z + v_F k_z \hat{1} \otimes \hat{\tau}_y + v_F (k_y \hat{\sigma}_x - k_x \hat{\sigma}_y) \otimes \hat{\tau}_x \quad (\text{D.1})$$

Les matrices de Pauli $\hat{\sigma}$ et $\hat{\tau}$ agissent sur les degrés de libertés de spin et orbitaux. Le spectre de ce Hamiltonien est constitué de deux bandes doublement dégénérées $E_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \pm \sqrt{\Delta^2 + v_F^2 k^2}$ et son indice \mathbb{Z}_2 est $\text{sgn}(\Delta)$. On distingue deux isolants par leurs gaps Δ_1 et Δ_2 et ceux-ci constituent une hétérojonction topologique si $\Delta_1 \Delta_2 < 0$.

Nous allons modéliser l'interface de la même manière qu'à la section 4.2 et l'on réécrit le Hamiltonien dans la *base chirale* $|\Psi\rangle = e^{-i\pi \hat{1} \otimes \hat{\tau}_y / 4} |\Psi'\rangle$

$$\hat{H}_c = \begin{bmatrix} 0 & v_F k_+ & 0 & \hat{a} \\ v_F k_- & 0 & \hat{a} & 0 \\ 0 & \hat{a}^\dagger & 0 & -v_F k_+ \\ \hat{a}^\dagger & 0 & -v_F k_- & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{D.2})$$

où $k_{\pm} = k_y \pm i k_x$ et $\hat{a} = -[v_F i k_z + \Delta(z)]$. Cette annexe présente le calcul du spectre des états de surface de cet Hamiltonien pour un gap dont le profil est

$$\Delta(z) = \frac{1}{2}(\Delta_2 - \Delta_1)[\delta + \tanh(z/\ell)], \quad (\text{D.3})$$

où le rapport d'asymétrie des gap est $\delta = (\Delta_1 + \Delta_2)/(\Delta_2 - \Delta_1)$. Ce profil a été résolu à de multiples occasions pour des interfaces antisymétriques où $\delta = 0$ [LR12] et nous considérons ici le cas plus réaliste où $\delta \neq 0$. Pour la suite, j'introduis les notations $\bar{\Delta} = (\Delta_2 + \Delta_1)/2$ et $\delta\Delta = (\Delta_2 - \Delta_1)/2$. Le changement de variable suivant $s = [1 - \tanh(z/\ell)]/2$ permet de réécrire

$$\hat{a} = \frac{2v_F}{\ell} s(1-s)\partial_s - (\bar{\Delta} + \delta\Delta - 2\delta\Delta s), \quad (\text{D.4})$$

$$\hat{a}^\dagger = -\frac{2v_F}{\ell} s(1-s)\partial_s - (\bar{\Delta} + \delta\Delta - 2\delta\Delta s). \quad (\text{D.5})$$

Le calcul du carré du Hamiltonien (D.2) et la décomposition de la fonction d'onde en deux spineurs ϕ_σ , $\sigma = \pm$ tel que $\Psi = (\phi_+, \phi_-)$, permettent d'écrire

$$\left[\frac{1}{2} \left(\{\hat{a}^\dagger, \hat{a}\} + \sigma [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \right) - (E^2 - v_F^2 k_{\parallel}^2) \right] \phi_\sigma = 0 \quad (\text{D.6})$$

$$\Rightarrow \left[s(1-s)\partial_s^2 + (1-2s)\partial_s - \left(\frac{\ell}{2v_F} \right)^2 \left\{ \frac{[\bar{\Delta} + (1-2s)\delta\Delta]^2 - (E^2 - v_F^2 k_{\parallel}^2)}{s(1-s)} - \sigma \frac{4v_F \delta\Delta}{\ell} \right\} \right] \phi_\sigma = 0. \quad (\text{D.7})$$

Afin d'éliminer la singularité en $1/s(1-s)$, on réécrit les spineurs sous la forme suivante : $\phi_\sigma(s) = s^\alpha(1-s)^\beta u_\sigma(s)$. On reconnaît alors l'équation d'Euler hypergéométrique [WW96] $s(1-s)\partial_s^2\phi + [c - (1+a+b)s]\partial_s\phi - ab\phi = 0$ si on choisit les paramètres α et β suivants

$$\begin{cases} \alpha^2 = (\ell/2v_F)^2 \left[\Delta_1^2 - (E^2 - v_F^2 k_\parallel^2) \right] \\ \beta^2 = (\ell/2v_F)^2 \left[\Delta_2^2 - (E^2 - v_F^2 k_\parallel^2) \right] \end{cases}, \quad (\text{D.8})$$

On prend désormais la convention que ces racines sont positives. L'équation est ramenée à la suivante

$$\left[s(1-s)\partial_s^2 + [1+2\alpha - 2(1+\alpha+\beta)s]\partial_s - \left\{ (\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1) - \frac{\ell\delta\Delta}{v_F} \left(\sigma + \frac{\ell\delta\Delta}{v_F} \right) \right\} \right] u_\sigma(s) = 0, \quad (\text{D.9})$$

dont les solutions sont exprimées en termes des fonctions hypergéométriques ${}_2F_1(a, b, c; s)$ où ${}_2F_1(a, b, c; s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n(b)_n}{(c)_n} z^n / n!$ avec $(x)_n = x(x+1)\cdots(x+n-1)$. On note les paramètres auxiliaires de l'équation d'Euler hypergéométrique

$$\begin{cases} a_\sigma = 1/2 + \alpha + \beta + \left| 1/2 + \sigma \frac{\ell\delta\Delta}{v_F} \right|, \\ b_\sigma = 1/2 + \alpha + \beta - \left| 1/2 + \sigma \frac{\ell\delta\Delta}{v_F} \right|, \\ c = 1 + 2\alpha. \end{cases} \quad (\text{D.10})$$

Pour chaque valeur de σ , il y a deux solutions possibles [WW96] (i) $u_I(s) = {}_2F_1(a, b, c; s)$ et (ii) $u_{II}(s) = s^{1-c} {}_2F_1(1+a-c, 1+b-c, 2-c; s)$. La solution $u_{II}(s)$ ne décrit pas un état lié à la surface car $\phi_{II}(s \sim 0) = s^\alpha(1-s)^\beta u_{II}(s \sim 0) \sim s^{1+\alpha-c}$ diverge en $s=0$ ($x=\infty$) comme $1+\alpha-c = -\alpha < 0$: seuls les solutions $u_I(s)$ peuvent décrire les états de surface. On vérifie bien que $\phi_I(s \sim 0) = s^\alpha(1-s)^\beta u_I(s \sim 0) \sim s^\alpha$ s'annule en $s=0$ ($x=\infty$), cependant il est aussi nécessaire de vérifier le comportement de cette fonction en $s=1$ ($x=-\infty$). À l'aide des relations sur les fonctions hypergéométriques [WW96], on a

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; s) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b+1-c; 1-s) \\ &\quad + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-s)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b, 1+c-a-b; 1-s). \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

Par conséquent, pour $s \sim 1$ ($x = -\infty$)

$$\phi_\sigma(s \sim 1) \sim \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a_\sigma-b_\sigma)}{\Gamma(c-a_\sigma)\Gamma(c-b_\sigma)} (1-s)^\beta + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a_\sigma+b_\sigma-c)}{\Gamma(a_\sigma)\Gamma(b_\sigma)} (1-s)^{-\beta}. \quad (\text{D.12})$$

Comme $\beta > 0$, cette expression diverge à moins que $\Gamma(a_\sigma)$ ou $\Gamma(b_\sigma)$ ne diverge aussi. On rencontre cette situation dans le cas où a_σ ou b_σ est un entier négatif et, comme $a > b$, cette condition ne peut être satisfaite que pour b . On peut ainsi écrire la condition de quantification des états de surface, pour $n \in \mathbb{N}$,

$$\sqrt{\Delta_1^2 - (E^2 - v_F^2 k_\parallel^2)} + \sqrt{\Delta_2^2 - (E^2 - v_F^2 k_\parallel^2)} = \left| \frac{2v_F}{\ell} \left| \left| \frac{1}{2} + \sigma \frac{\ell\delta\Delta}{v_F} \right| - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right| \right| \equiv g_\sigma(n), \quad (\text{D.13})$$

dont on déduit l'expression des énergies propres

$$E = \pm \sqrt{v_F^2 k_\parallel^2 - \frac{1}{4g_\sigma^2(n)} [g_\sigma^2(n) - 4\delta\Delta^2][g_\sigma^2(n) - 4\bar{\Delta}^2]}. \quad (\text{D.14})$$

Comme nous l'avons montré, le comportement à longue portée des fonctions d'ondes est donné par (i) $\phi_< = (1-s)^\beta = 1/(1+e^{-z/\ell})^\beta$ pour $s \sim 1$ ($x \sim -\infty$), et par (ii) $\phi_>(s) = s^\alpha = 1/(1+e^{z/\ell})^\alpha$ pour $s \sim 0$ ($x \sim \infty$). Ce n'est valable que si $\alpha, \beta > 0$, ce qui selon l'équation (D.8) impose $E^2 - (v_F k_\parallel)^2 < \min(\Delta_1^2, \Delta_2^2)$. De plus, comme α, β apparaissent dans l'expression $b_\sigma = -n$, on déduit de $\alpha^2 - \beta^2 = (\ell/2v_F)^2 4\bar{\Delta}\delta\Delta$ et $\alpha + \beta = g_\sigma(n)\ell/2v_F$ que

$$g_\sigma(n) > 2\sqrt{|\bar{\Delta}\delta\Delta|} = \sqrt{|\Delta_1^2 - \Delta_2^2|}. \quad (\text{D.15})$$

Ici, nous ne sommes pas intéressés par la forme exacte des fonctions d'ondes que nous ne détaillerons pas. À la section 4.2 nous avons introduit deux limites $\ell > v_F/\delta\Delta$ (interface épaisse) et $\ell < v_F/\delta\Delta$ (interface abrupte), qui correspondent aux deux situations suivantes :

Interface épaisse, $|\ell| > |v_F/2\delta\Delta|$. Dans cette situation, on peut réécrire

$$g_\sigma(n) = 2|\delta\Delta| - \left| \frac{2v_F}{\ell} \left[n + \frac{1 - \text{sgn}(\sigma\ell\delta\Delta/v_F)}{2} \right] \right|. \quad (\text{D.16})$$

On trouve alors que les deux ensembles d'états pour $\sigma = \pm$ sont associés à une famille d'états $|n\rangle$ tel que $\phi_+ \sim |n\rangle$ et $\phi_- \sim |n + \text{sgn}(\ell\delta\Delta/v_F)\rangle$ comme pour les niveaux de Landau. Cette structure induit l'existence d'un état chirale ($n = 0$) dont la polarisation sur la base chirale est ϕ_σ avec $\sigma = -\text{sgn}(\ell\delta\Delta/v_F)$. On simplifie les notations en choisissant $g(n) = g_+(n) = 2(|\delta\Delta| - |v_F/\ell|n)$ et de l'équation (D.15) on déduit que l'indice n doit être tel que

$$n < N_{max.} = \frac{\ell|\delta\Delta|}{|v_F|} \left(1 - \sqrt{\left| \frac{\bar{\Delta}}{\delta\Delta} \right|} \right) = \frac{\ell}{\xi} (1 - \sqrt{\delta}), \quad (\text{D.17})$$

où j'ai utilisé les notations introduites à la section 4.2. Par conséquent on ne trouve d'états liés ($N_{max.} \geq 0$) que si $|\bar{\Delta}/\delta\Delta| < 1$, ce qui correspond aux situations avec inversion de gap ($\Delta_1\Delta_2 < 0$).

Interface abrupte, $|\ell| < |v_F/2\delta\Delta|$. Dans ce cas, on peut écrire

$$g_\sigma(n) = \left| \frac{2v_F}{\ell} \left[\text{sgn}(\sigma\ell\delta\Delta/v_F) \left| \frac{\ell\delta\Delta}{v_F} \right| - n \right] \right|. \quad (\text{D.18})$$

De cette relation et de la condition D.15), on déduit que les indices n sont tels que

$$-n > \text{sgn}(\sigma\ell\delta\Delta/v_F) \left| \frac{\ell\delta\Delta}{v_F} \right| + \left| \frac{\ell}{2v_F} \sqrt{\bar{\Delta}\delta\Delta} \right| > \underbrace{\text{sgn}(\sigma\ell\delta\Delta/v_F) \left| \frac{\ell\delta\Delta}{v_F} \right|}_{\in [0, \frac{1}{2}]}, \quad (\text{D.19})$$

qui n'admet la solution $n = 0$ que pour le spineur ϕ_σ dans la base chirale tel que $\sigma = -\text{sgn}(\ell\delta\Delta/v_F)$: seul l'état de surface chirale est présent.

Les calculs précédents montrent que dans le cas d'un interface graduelle, les états de surface ont le spectre suivant ($n \in \mathbb{N}$)

$$E = \pm \sqrt{v_F^2 k_{\parallel}^2 - \frac{1}{f^2(n)} [f^2(n) - \delta\Delta^2] [f^2(n) - \bar{\Delta}^2]}, \quad (\text{D.20})$$

avec $f(n) = |\delta\Delta| - |v_F/\ell|n$ et $n < N_{max.} = \frac{\ell|\delta\Delta|}{|v_F|} \left(1 - \sqrt{\left| \frac{\bar{\Delta}}{\delta\Delta} \right|} \right)$. On peut rendre cette expression plus explicite

$$E = \pm \sqrt{v_F^2 k_{\parallel}^2 + 2n(1 - \bar{\Delta}^2/\delta\Delta^2) \left| \frac{v_F\delta\Delta}{\ell} \right| \frac{(1 - |\frac{v_F}{2\ell\delta\Delta}|n) \left(1 + \frac{|v_F/\ell|}{\Delta_1} n \right) \left(1 - \frac{|v_F/\ell|}{\Delta_2} n \right)}{(1 - |\frac{v_F}{\ell\delta\Delta}|n)^2}} \quad (\text{D.21})$$

$$\approx \pm \sqrt{v_F^2 k_{\parallel}^2 + 2n(1 - \bar{\Delta}^2/\delta\Delta^2) \left| \frac{v_F\delta\Delta}{\ell} \right|} + o\left(\frac{v_F}{\ell}\right) \quad (\text{D.22})$$

où la dernière relation correspond à la limite d'une interface très épaisse $\ell \gg v_F/\delta\Delta$ abordée à la section 4.2.

Avec les notations de la section 4.2, le spectre a la forme

$$\varepsilon_{n,\pm}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \pm v_F \sqrt{k_{\parallel}^2 + 1/\ell_n^2}, \quad (\text{D.23})$$

où $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ et $\frac{1}{\ell_n^2} = \frac{2n}{\ell\xi} \left(1 - n \frac{\xi}{2\ell} \right) \left[1 - \left(\frac{\delta}{1 - n \frac{\xi}{\ell}} \right)^2 \right]$ est l'extension de chaque mode surface dans la direction z , en terme de l'indice entier n tel que

$$n < n_{max} = \frac{\ell}{\xi} (1 - \sqrt{|\delta|}). \quad (\text{D.24})$$

Bibliographie

- [Ž88] T. P. Živković. Particle-hole symmetry and complementary quantum systems. *International Journal of Quantum Chemistry*, 34(4) :333–359, 1988.
- [AC79] Y. Aharonov and A. Casher. Ground state of a spin- $\frac{1}{2}$ charged particle in a two-dimensional magnetic field. *Phys. Rev. A*, 19 :2461–2462, Jun 1979.
- [AGJ⁺ 14] Mazhar N. Ali, Quinn Gibson, Sangjun Jeon, Brian B. Zhou, Ali Yazdani, and R. J. Cava. The crystal and electronic structures of Cd_3As_2 , the three-dimensional electronic analogue of graphene. *Inorganic Chemistry*, 53(8) :4062–4067, 2014. PMID : 24679042.
- [AHT⁺ 16] A. Akrap, M. Hakl, S. Tchoumakov, I. Crassee, J. Kuba, M. O. Goerbig, C. C. Homes, O. Caha, J. Novák, F. Teppe, W. Desrat, S. Koochpayeh, L. Wu, N. P. Armitage, A. Nateprov, E. Arushanov, Q. D. Gibson, R. J. Cava, D. van der Marel, B. A. Piot, C. Faugeras, G. Martinez, M. Potemski, and M. Orlita. Magneto-optical signature of massless Kane electrons in Cd_3As_2 . *Phys. Rev. Lett.*, 117 :136401, Sep 2016.
- [AM76] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid State Physics*. HRW international editions. Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [AP67] A. G. Aronov and G. E. Pikus. Light Absorption in Semiconductors in Crossed Electric and Magnetic Fields. *SOVIET PHYSICS JETP*, 24(2), 1967.
- [AYN16] Yasufumi Araki, Akihito Yoshida, and Kentaro Nomura. Universal charge and current on magnetic domain walls in Weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 94 :115312, Sep 2016.
- [B88] M. Büttiker. Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multiprobe conductors. *Phys. Rev. B*, 38 :9375–9389, Nov 1988.
- [Bar47] John Bardeen. Surface states and rectification at a metal semi-conductor contact. *Phys. Rev.*, 71 :717–727, May 1947.
- [BB67] A. Baldereschi and F. Bassani. Landau levels and magneto-optic effects at saddle points. *Phys. Rev. Lett.*, 19 :66–68, Jul 1967.
- [BBB⁺ 14] Yuval Baum, Jan Böttcher, Christoph Brüne, Cornelius Thienel, Laurens W. Molenkamp, Ady Stern, and Ewelina M. Hankiewicz. Self-consistent k.p calculations for gated thin layers of three-dimensional topological insulators. *Phys. Rev. B*, 89 :245136, Jun 2014.
- [BBF⁺ 80] Allen J. Bard, Andrew B. Bocarsly, Fu Ren F. Fan, Erick G. Walton, and Mark S. Wrighton. The concept of Fermi level pinning at semiconductor/liquid junctions. Consequences for energy conversion efficiency and selection of useful solution redox couples in solar devices. *Journal of the American Chemical Society*, 102(11) :3671–3677, May 1980.
- [BD66] D. J. BenDaniel and C. B. Duke. Space-charge effects on electron tunneling. *Phys. Rev.*, 152 :683–692, Dec 1966.
- [BDF⁺ 04] J.M. Brébec, T. Desmarais, A. Favier, M. Ménétrier, B. Noël, C. Orsini, J.M. Vanhaecke, and R. Noel. *Ondes 2e année MP-MP*/PC-PC*/PSI-PSI*/PT-PT* : Cours avec exercices corrigés*. H Prépa Physique. Hachette Éducation, 2004.

- [Ber84] M. V. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 392(1802) :45–57, 1984.
- [BGB⁺ 10] Marco Bianchi, Dandan Guan, Shining Bao, Jianli Mi, Bo Brummerstedt Iversen, Philip D.C. King, and Philip Hofmann. Coexistence of the topological state and a two-dimensional electron gas on the surface of Bi₂Se₃. *Nature Communications*, 1(8) :128, November 2010.
- [BGE⁺ 14] Sergey Borisenko, Quinn Gibson, Danil Evtushinsky, Volodymyr Zabolotnyy, Bernd Büchner, and Robert J. Cava. Experimental realization of a three-dimensional dirac semimetal. *Phys. Rev. Lett.*, 113 :027603, Jul 2014.
- [BHM⁺ 11] Marco Bianchi, Richard C. Hatch, Jianli Mi, Bo Brummerstedt Iversen, and Philip Hofmann. Simultaneous quantization of bulk conduction and valence states through adsorption of nonmagnetic impurities on Bi₂Se₃. *Phys. Rev. Lett.*, 107 :086802, Aug 2011.
- [BKdIT⁺ 12] M.S. Bahramy, P.D.C King, A. de la Torre, J. Chang, M. Shi, L. Patthey, G. Balakrishnan, Ph. Hofmann, R. Arita, N. Nagaosa, and F. Baumberger. Emergent quantum confinement at topological insulator surfaces. *Nature Communications*, 3 :1159, October 2012.
- [BLN⁺ 11] C. Brüne, C. X. Liu, E. G. Novik, E. M. Hankiewicz, H. Buhmann, Y. L. Chen, X. L. Qi, Z. X. Shen, S. C. Zhang, and L. W. Molenkamp. Quantum hall effect from the topological surface states of strained bulk hgte. *Phys. Rev. Lett.*, 106 :126803, Mar 2011.
- [Blo29] Felix Bloch. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, 52(7) :555–600, 1929.
- [BM09] Cristina Bena and Gilles Montambaux. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New Journal of Physics*, 11(9) :095003, 2009.
- [BO27] M. Born and R. Oppenheimer. Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 389(20) :457–484, 1927.
- [Bod45] H.W. Bode. *Network Analysis and Feedback Amplifier Design*. Bell Telephone Laboratories series. Van Nostrand, 1945.
- [Bod77] J. Bodnar. Band structure of Cd₃As₂ from Shubnikov-de Haas and de Haas-van Alphen effects. *Proceedings of the III International Conference in Warsaw*, pages 311–316, 1977.
- [Boh11] N. Bohr. *Studier Over Metallernes Elektronteori*. Kbh, 1911.
- [BPV15] P. V. Buividovich, M. Pühr, and S. N. Valgushev. Chiral magnetic conductivity in an interacting lattice model of parity-breaking Weyl semimetal. *Phys. Rev. B*, 92 :205122, Nov 2015.
- [BS47] W. H. Brattain and W. Shockley. Density of surface states on silicon deduced from contact potential measurements. *Phys. Rev.*, 72 :345–345, Aug 1947.
- [BS72] J. Baars and F. Sorger. Reststrahlen spectra of hgte and Cd₃Hg_{1-x}Te. *Solid State Communications*, 10(9) :875 – 878, 1972.
- [BS88] A. Bhattacharjee and Tanaji Sen. Geometric angles in cyclic evolutions of a classical system. *Phys. Rev. A*, 38 :4389–4394, Nov 1988.
- [BTS⁺ 14] Christoph Brüne, Cornelius Thienel, Michael Stuibler, Jan Böttcher, Hartmut Buhmann, Elena G. Novik, Chao-Xing Liu, Ewelina M. Hankiewicz, and Laurens W. Molenkamp. Dirac-screening stabilized surface-state transport in a topological insulator. *Phys. Rev. X*, 4 :041045, Dec 2014.
- [Bui14] P.V. Buividovich. Anomalous transport with overlap fermions. *Nuclear Physics A*, 925 :218 – 253, 2014.
- [BV13] Ádám Bácsi and Attila Virosztek. Low-frequency optical conductivity in graphene and in other scale-invariant two-band systems. *Phys. Rev. B*, 87 :125425, Mar 2013.
- [BXK⁺ 17] Ilya Belopolski, Su-Yang Xu, Nikesh Koirala, Chang Liu, Guang Bian, Vladimir N. Strocov, Guoqing Chang, Madhab Neupane, Nasser Alidoust, Daniel Sanchez, Hao Zheng, Matthew Brahlek,

- Victor Rogalev, Timur Kim, Nicholas C. Plumb, Chaoyu Chen, François Bertran, Patrick Le Fèvre, Amina Taleb-Ibrahimi, Maria-Carmen Asensio, Ming Shi, Hsin Lin, Moritz Hoesch, Seongshik Oh, and M. Zahid Hasan. A novel artificial condensed matter lattice and a new platform for one-dimensional topological phases. *Science Advances*, 3(3), 2017.
- [Car16] J. P. Carbotte. Dirac cone tilt on interband optical background of type-i and type-ii weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 94 :165111, Oct 2016.
- [Cas45] H. B. G. Casimir. On onsager's principle of microscopic reversibility. *Rev. Mod. Phys.*, 17 :343–350, Apr 1945.
- [Cay13] Jérôme Cayssol. Introduction to dirac materials and topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, 14(9–10) :760 – 778, 2013. Topological insulators / Isolants topologiques Topological insulators / Isolants topologiques.
- [CG41] H.B.G. Casimir and A.N. Gerritsen. The electric resistance of single crystals of bismuth in a magnetic field. *Physica*, 8(10) :1107 – 1112, 1941.
- [CHSDS10] Dimitrie Culcer, E. H. Hwang, Tudor D. Stanescu, and S. Das Sarma. Two-dimensional surface charge transport in topological insulators. *Phys. Rev. B*, 82 :155457, Oct 2010.
- [CHW⁺12] Chaoyu Chen, Shaolong He, Hongming Weng, Wentao Zhang, Lin Zhao, Haiyun Liu, Xiaowen Jia, Daixiang Mou, Shanyu Liu, Junfeng He, Yingying Peng, Ya Feng, Zhuojin Xie, Guodong Liu, Xiaoli Dong, Jun Zhang, Xiaoyang Wang, Qinjun Peng, Zhimin Wang, Shenjin Zhang, Feng Yang, Chuangtian Chen, Zuyan Xu, Xi Dai, Zhong Fang, and X. J. Zhou. Robustness of topological order and formation of quantum well states in topological insulators exposed to ambient environment. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 109 :3694–3698, 2012.
- [Cos02a] John P. Costella. A new proposal for the fermion doubling problem. *arXiv :hep-lat/0207008*, Jul 2002. arXiv : hep-lat/0207008.
- [Cos02b] John P. Costella. A new proposal for the fermion doubling problem. II. Improving the operators for finite lattices. *arXiv :hep-lat/0207015*, Jul 2002. arXiv : hep-lat/0207015.
- [CVF12] A. M. Cook, M. M. Vazifeh, and M. Franz. Stability of majorana fermions in proximity-coupled topological insulator nanowires. *Phys. Rev. B*, 86 :155431, Oct 2012.
- [CZF⁺13] Cui-Zu Chang, Jinsong Zhang, Xiao Feng, Jie Shen, Zuocheng Zhang, Minghua Guo, Kang Li, Yunbo Ou, Pang Wei, Li-Li Wang, Zhong-Qing Ji, Yang Feng, Shuaihua Ji, Xi Chen, Jinfeng Jia, Xi Dai, Zhong Fang, Shou-Cheng Zhang, Ke He, Yayu Wang, Li Lu, Xu-Cun Ma, and Qi-Kun Xue. Experimental observation of the quantum anomalous hall effect in a magnetic topological insulator. *Science*, 340(6129) :167–170, 2013.
- [DE16] Mehrdad Dadsetani and Ali Ebrahimian. Optical distinctions between weyl semimetal taas and dirac semimetal na₃bi : An ab initio investigation. *Journal of Electronic Materials*, 45(11) :5867–5876, Nov 2016.
- [DFCGDA17] A. Diaz-Fernandez, L. Chico, J.W. Gonzalez, and F. Dominguez-Adame. Tuning the fermi velocity in dirac materials with an electric field. *arXiv*, 1702.08296, Feb 2017.
- [DFM86] E. Dagotto, E. Fradkin, and A. Moreo. A comment on the nielsen-ninomiya theorem. *Physics Letters B*, 172(3) :383 – 386, 1986.
- [dGFG⁺12] R. de Gail, J.-N. Fuchs, M.O. Goerbig, F. Piéchon, and G. Montambaux. Manipulation of dirac points in graphene-like crystals. *Physica B : Condensed Matter*, 407(11) :1948 – 1952, 2012. Proceedings of the International Workshop on Electronic Crystals (ECRY-2011).
- [DGW⁺86] Guy Delacrétaz, Edward R. Grant, Robert L. Whetten, Ludger Wöste, and Josef W. Zwanziger. Fractional quantization of molecular pseudorotation in na₃. *Phys. Rev. Lett.*, 56 :2598–2601, Jun 1986.
- [DHQ⁺08] Xi Dai, Taylor L. Hughes, Xiao-Liang Qi, Zhong Fang, and Shou-Cheng Zhang. Helical edge and surface states in hgte quantum wells and bulk insulators. *Phys. Rev. B*, 77 :125319, Mar 2008.

- [Dir28] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 117(778) :610–624, 1928.
- [Dir31] P. A. M. Dirac. Quantised singularities in the electromagnetic field. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 133(821) :60–72, 1931.
- [dLKP31] R. de L. Kronig and W. G. Penney. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 130(814) :499–513, 1931.
- [DMV] Pierre Delplace, J.B. Marston, and Antoine Venaille. Topological origin of equatorial waves. *arXiv*, 1702.07583.
- [DR94] A. M. Dykhne and I. M. Ruzin. Theory of the fractional quantum hall effect : The two-phase model. *Phys. Rev. B*, 50 :2369–2379, Jul 1994.
- [DS92] S.G. Davison and M. Stešlicka. *Basic theory of surface states*. Monographs on the physics and chemistry of materials. Clarendon Press, 1992.
- [DSH09] S. Das Sarma and E. H. Hwang. Collective modes of the massless dirac plasma. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :206412, May 2009.
- [DUM11] P. Delplace, D. Ullmo, and G. Montambaux. Zak phase and the existence of edge states in graphene. *Phys. Rev. B*, 84 :195452, Nov 2011.
- [Dut14] Clément Dutreix. *Impurity and boundary modes in the honeycomb lattice*. PhD thesis, Université Paris-Sud, 2014. Thèse de doctorat dirigée par Montambaux, Gilles Physique Paris 11 2014.
- [DV17] Zh. A. Devizorova and V. A. Volkov. Fermi arcs formation in weyl semimetals : The key role of intervalley interaction. *Phys. Rev. B*, 95 :081302, Feb 2017.
- [Eli83] GM Eliashberg. Electrical current and magnetic fields in conductors with mirror-isomeric structure. *JETP Letters*, 38(4) :220–223, 1983.
- [EZV15] V. V. Enaldiev, I. V. Zagorodnev, and V. A. Volkov. Boundary conditions and surface state spectra in topological insulators. *JETP Letter*, 101(2) :89–96, Jan 2015.
- [Fis10] G. Fishman. *Semi-conducteurs : les bases de la théorie k.p.* Annales de la Faculté des sciences de l'Université de Clermont : Physique. Éd. de l'École polytechnique, 2010.
- [FK07a] Liang Fu and C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 76 :045302, Jul 2007.
- [FK07b] Liang Fu and C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 76 :045302, Jul 2007.
- [FKW08] Kenji Fukushima, Dmitri E. Kharzeev, and Harmen J. Warringa. Chiral magnetic effect. *Phys. Rev. D*, 78 :074033, Oct 2008.
- [Fuc13] J.-N. Fuchs. Dirac fermions in graphene and analogues : magnetic field and topological properties. *ArXiv e-prints*, June 2013.
- [GDA⁺16] Avery J. Green, Sonal Dey, Yong Q. An, Brendan O'Brien, Samuel O'Mullane, Bradley Thiel, and Alain C. Diebold. Surface oxidation of the topological insulator Bi_2Se_3 . *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films*, 34(6) :061403, 2016.
- [GFMP08] M. O. Goerbig, J.-N. Fuchs, G. Montambaux, and F. Piéchon. Tilted anisotropic dirac cones in quinoid-type graphene and α -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$. *Phys. Rev. B*, 78 :045415, Jul 2008.
- [GFMP09] M. O. Goerbig, J.-N. Fuchs, G. Montambaux, and F. Piéchon. Electric-field-induced lifting of the valley degeneracy in α -(bedt-ttf) $_2\text{I}_3$ dirac-like landau levels. *EPL (Europhysics Letters)*, 85(5) :57005, 2009.
- [GFS⁺17a] S. Grauer, K. M. Fijalkowski, S. Schreyeck, M. Winnerlein, K. Brunner, R. Thomale, C. Gould, and L. W. Molenkamp. Scaling of the quantum anomalous hall effect as an indicator of axion electrodynamics. *arXiv*, 1706.04575, 2017.

- [GFS⁺17b] S. Grauer, K. M. Fijalkowski, S. Schreyeck, M. Winnerlein, K. Brunner, R. Thomale, C. Gould, and L. W. Molenkamp. Scaling of the quantum anomalous hall effect as an indicator of axion electrodynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 118 :246801, Jun 2017.
- [Goe09] M. O. Goerbig. lecture notes for the singapore session “ultracold gases and quantum information” of les houches summer school. *Les Houches Summer School*, page 102, 2009.
- [Goo39] E. T. Goodwin. Electronic states at the surfaces of crystals : iiii. the approximation of tight binding : further extensions. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 35(2) :232–241, 1939.
- [GRGM73a] Y. Guldner, C. Rigaux, M. Grynberg, and A. Mycielski. Interband $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_8$ magnetoabsorption in hgte. *Phys. Rev. B*, 8 :3875–3883, Oct 1973.
- [GRGM73b] Y. Guldner, C. Rigaux, M. Grynberg, and A. Mycielski. Interband $\Gamma_6 \rightarrow \Gamma_8$ magnetoabsorption in hgte. *Phys. Rev. B*, 8 :3875–3883, Oct 1973.
- [Gri60] T.B. Grimley. The wave mechanics of the surface bond in chemisorption. *Advances in Catalysis*, 12 :1 – 30, 1960.
- [GVVI16] Adolfo G. Grushin, Jörn W. F. Venderbos, Ashvin Vishwanath, and Roni Ilan. Inhomogeneous weyl and dirac semimetals : Transport in axial magnetic fields and fermi arc surface states from pseudo-landau levels. *Phys. Rev. X*, 6 :041046, Dec 2016.
- [Hak17] Michael Hakl. *Spectroscopie infrarouge de Cd3As2*. PhD thesis, Grenoble, 2017. Thèse de doctorat dirigée par Milan Orlita, 2017.
- [Hal79] E. H. Hall. On a new action of the magnet on electric currents. *American Journal of Mathematics*, 2(3) :287–292, 1879.
- [Hal82] B. I. Halperin. Quantized hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Phys. Rev. B*, 25 :2185–2190, Feb 1982.
- [Hal88] F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels : Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61 :2015–2018, Oct 1988.
- [Har61] Walter A. Harrison. Tunneling from an independent-particle point of view. *Phys. Rev.*, 123 :85–89, Jul 1961.
- [Hat11] Y Hatsugai. Topological aspect of graphene physics. *Journal of Physics : Conference Series*, 334(1) :012004, 2011.
- [HK10] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium. *Rev. Mod. Phys.*, 82 :3045–3067, Nov 2010.
- [HKA15] Yasuhiro Hatsugai, Tohru Kawarabayashi, and Hideo Aoki. Survival of sharp $n = 0$ landau levels in massive tilted dirac fermions : Role of the generalized chiral operator. *Phys. Rev. B*, 91 :085112, Feb 2015.
- [HKS⁺64] T.C. Harman, W.H. Kleiner, A.J. Strauss, G.B. Wright, J.G. Mavroides, J.M. Honig, and D.H. Dickey. Band structure of hgte and hgte-cdte alloys. *Solid State Communications*, 2(10) :305 – 308, 1964.
- [HQW⁺08] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. *Nature*, 452(7190) :970–974, April 2008.
- [HS] F. D. M. Haldane and Yu Shen. Geometry of landau orbits in the absence of rotational symmetry. *arXiv*.
- [HXBH17] M. Zahid Hasan, Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, and Shin-Ming Huang. Discovery of weyl fermion semimetals and topological fermi arc states. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 8 :289–309, February 2017.
- [HXQ⁺09] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. Observation of time-reversal-protected single-dirac-cone topological-insulator states in bi_2te_3 and sb_2te_3 . *Phys. Rev. Lett.*, 103 :146401, Sep 2009.

- [HXY⁺12] Liang He, Faxian Xiu, Xinxin Yu, Marcus Teague, Wanjun Jiang, Yabin Fan, Xufeng Kou, Muring Lang, Yong Wang, Guan Huang, Nai-Chang Yeh, and Kang L. Wang. Surface-dominated conduction in a 6 nm thick Bi_2Se_3 thin film. *Nano Letters*, 12(3) :1486–1490, 2012.
- [Inh17] Andreas Inhofer. *Etude de la compressibilité AC des isolants topologiques 3D HgTe et Bi2Se3 : Mise en évidence d'états massifs excités de surface*. PhD thesis, Paris, 2017. Thèse de doctorat dirigée par Plaçais, Bernard.
- [ITA⁺17] Andreas Inhofer, Sergueï Tchoumakov, Badhi A. Assaf, Gwendal Fève, Jean-Marc Berroir, Victor Jouffrey, David Carpentier, Mark O. Goerbig, Bernard Plaçais, K Bendias, D.M. Mahler, Erwann Bocquillon, R. Schlereth, C. Brüne, H Buhmann, and L.W. Molenkamp. Topological confined massive surface states in strained bulk hgte probed by rf compressibility. *arXiv*, 1704.04045, Apr 2017.
- [Jac84] R. Jackiw. Fractional charge and zero modes for planar systems in a magnetic field. *Phys. Rev. D*, 29 :2375–2377, May 1984.
- [JLB⁺16] G. S. Jenkins, C. Lane, B. Barbiellini, A. B. Sushkov, R. L. Carey, Fengguang Liu, J. W. Krizan, S. K. Kushwaha, Q. Gibson, Tay-Rong Chang, Horng-Tay Jeng, Hsin Lin, R. J. Cava, A. Bansil, and H. D. Drew. Three-dimensional dirac cone carrier dynamics in na_3Bi and cd_3as_2 . *Phys. Rev. B*, 94 :085121, Aug 2016.
- [JXH16] Shuang Jia, Su-Yang Xu, and M. Zahid Hasan. Weyl semimetals, Fermi arcs and chiral anomalies. *Nature Materials*, 15(11) :1140–1144, 2016.
- [JZG⁺14] Sangjun Jeon, Brian B. Zhou, Andras Gyenis, Benjamin E. Feldman, Itamar Kimchi, Andrew C. Potter, Quinn D. Gibson, Robert J. Cava, Ashvin Vishwanath, and Ali Yazdani. Landau quantization and quasiparticle interference in the three-dimensional Dirac semimetal Cd_3as_2 . *Nature Materials*, 13(9), September 2014.
- [KAH16] Tohru Kawarabayashi, Hideo Aoki, and Yasuhiro Hatsugai. Lattice realization of the generalized chiral symmetry in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 94 :235307, Dec 2016.
- [KDP80] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45 :494–497, Aug 1980.
- [Kha14] Dmitri E. Kharzeev. The chiral magnetic effect and anomaly-induced transport. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 75 :133 – 151, 2014.
- [KHLK17] Xiao Kong, Jing He, Ying Liang, and Su-Peng Kou. Tunable weyl semimetal and its possible realization in optical lattices. *Phys. Rev. A*, 95 :033629, Mar 2017.
- [KHMA11] Tohru Kawarabayashi, Yasuhiro Hatsugai, Takahiro Morimoto, and Hideo Aoki. Generalized chiral symmetry and stability of zero modes for tilted dirac cones. *Phys. Rev. B*, 83 :153414, Apr 2011.
- [Kil74] H. Kildal. Band structure of cdgeas_2 near $\vec{k}=0$. *Phys. Rev. B*, 10 :5082–5087, Dec 1974.
- [KL54] W. Kohn and J. M. Luttinger. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors. *Phys. Rev.*, 96 :529–530, Oct 1954.
- [KM05a] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :226801, Nov 2005.
- [KM05b] C. L. Kane and E. J. Mele. Z_2 . *Phys. Rev. Lett.*, 95 :146802, Sep 2005.
- [Koh59] W. Kohn. Analytic properties of bloch waves and wannier functions. *Phys. Rev.*, 115 :809–821, Aug 1959.
- [Koh85] Mahito Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. *Annals of Physics*, 160(2) :343–354, 1985.
- [Kos16] Mikito Koshino. Cyclotron resonance of figure-of-eight orbits in a type-ii weyl semimetal. *Phys. Rev. B*, 94 :035202, Jul 2016.

- [Kra35] H.A. Kramers. Das eigenwertproblem im eindimensionalen periodischen kraftfelde. *Physica*, 2(1) :483 – 490, 1935.
- [KRvO13] Torsten Karzig, Gil Refael, and Felix von Oppen. Boosting majorana zero modes. *Phys. Rev. X*, 3 :041017, Nov 2013.
- [KS88] M. Kugler and S. Shtrikman. Berry’s phase, locally inertial frames, and classical analogues. *Phys. Rev. D*, 37 :934–937, Feb 1988.
- [KSPS17] N. Klier, S. Sharma, O. Pankratov, and S. Shallcross. Bulk physics entwined with a topological surface state. *arXiv*, 1702.08784, Feb 2017.
- [KVM08] P. D. C. King, T. D. Veal, and C. F. McConville. Nonparabolic coupled poisson-schrödinger solutions for quantized electron accumulation layers : Band bending, charge profile, and subbands at inn surfaces. *Phys. Rev. B*, 77 :125305, Mar 2008.
- [KVM⁺10] P. D. C. King, T. D. Veal, C. F. McConville, J. Zúñiga Pérez, V. Muñoz Sanjosé, M. Hopkinson, E. D. L. Rienks, M. Fuglsang Jensen, and Ph. Hofmann. Surface band-gap narrowing in quantized electron accumulation layers. *Phys. Rev. Lett.*, 104 :256803, Jun 2010.
- [KW09] Dmitri E. Kharzeev and Harmen J. Warringa. Chiral magnetic conductivity. *Phys. Rev. D*, 80 :034028, Aug 2009.
- [KY15] F. R. Klinkhamer and L. Yang. Fermions with a bounded and discrete mass spectrum. *Phys. Rev. D*, 91 :045028, Feb 2015.
- [KZ68] M. Kaplit and J. N. Zemel. Capacitance observations of landau levels in surface quantization. *Phys. Rev. Lett.*, 21 :212–215, Jul 1968.
- [KZ17] M. Kotulla and U Zülicke. Manipulating topological-insulator properties using quantum confinement. *arXiv*, 1703.09356, Mar 2017.
- [LA87] H. El Alaoui Lamrani and M. J. Aubin. The magneto-optical properties of cd3as2 exposed to circularly polarized radiation : interband transitions. *Canadian Journal of Physics*, 65(3) :199–203, 1987.
- [LA15] Songci Li and A. V. Andreev. Spiraling fermi arcs in weyl materials. *Phys. Rev. B*, 92 :201107, Nov 2015.
- [Lau81] R. B. Laughlin. Quantized hall conductivity in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 23 :5632–5633, May 1981.
- [Lek07] John Lekner. Reflectionless eigenstates of the sech² potential. *American Journal of Physics*, 75(12) :1151–1157, 2007.
- [LGA⁺15] Tian Liang, Quinn Gibson, Mazhar N. Ali, Minhao Liu, R. J. Cava, and N. P. Ong. Ultrahigh mobility and giant magnetoresistance in the Dirac semimetal Cd3as2. *Nature Materials*, 14(3) :280–284, March 2015.
- [Lin17] Chyi-Lung Lin. On the boundary conditions for eliminating negative energy states in the infinite square well model. *arxiv*, May 2017.
- [LJZ⁺14] Z. K. Liu, J. Jiang, B. Zhou, Z. J. Wang, Y. Zhang, H. M. Weng, D. Prabhakaran, S.-K. Mo, H. Peng, P. Dudin, T. Kim, M. Hoesch, Z. Fang, X. Dai, Z. X. Shen, D. L. Feng, Z. Hussain, and Y. L. Chen. A stable three-dimensional topological Dirac semimetal Cd3as2. *Nature Materials*, 13(7) :677–681, Jul 2014.
- [LKZ⁺16] Qiang Li, Dmitri E. Kharzeev, Cheng Zhang, Yuan Huang, I. Pletikosic, A.V. Fedorov, R.D. Zhong, J.A. Schneeloch, G.D. Gu, and T. Valla. Chiral magnetic effect in ZrTe5. *Nature Physics*, 12(6) :550–554, February 2016.
- [LLD⁺16] Fei-Ye Li, Xi Luo, Xi Dai, Yue Yu, Fan Zhang, and Gang Chen. Hybrid weyl semimetal. *Phys. Rev. B*, 94 :121105, Sep 2016.

- [LM17] Lih-King Lim and Roderich Moessner. Pseudospin vortex ring with a nodal line in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 118 :016401, Jan 2017.
- [LR12] G. Landwehr and E.I. Rashba. *Landau Level Spectroscopy*. Modern Problems in Condensed Matter Sciences. Elsevier Science, 2012.
- [LSB07] Vinu Lukose, R. Shankar, and G. Baskaran. Novel electric field effects on landau levels in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :116802, Mar 2007.
- [Lur88] Serge Luryi. Quantum capacitance devices. *Applied Physics Letters*, 52(6) :501–503, 1988.
- [Lüt13] H. Lüth. *Surfaces and Interfaces of Solid Materials*. Springer Study Edition. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [LZZ⁺14] Z. K. Liu, B. Zhou, Y. Zhang, Z. J. Wang, H. M. Weng, D. Prabhakaran, S.-K. Mo, Z. X. Shen, Z. Fang, X. Dai, Z. Hussain, and Y. L. Chen. Discovery of a three-dimensional topological dirac semimetal, na3bi. *Science*, 343(6173) :864–867, 2014.
- [MCPB17] Adriano Mosca Conte, Olivia Pulci, and Friedhelm Bechstedt. Electronic and optical properties of topological semimetal Cd3as2. *Nature, Scientific Reports*, 7 :45500, April 2017.
- [Mei41] J. Meixner. Zur theorie der elektrischen transporterscheinungen im magnetfeld. *Annalen der Physik*, 432(3) :165–180, 1941.
- [Mey47] Walter E. Meyerhof. Contact potential difference in silicon crystal rectifiers. *Phys. Rev.*, 71 :727–735, May 1947.
- [MKY⁺17] M. Mogi, M. Kawamura, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, Y. Kozuka, N. Shirakawa, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura. A magnetic heterostructure of topological insulators as a candidate for an axion insulator. *Nature Materials*, 16(5) :516–521, May 2017.
- [MNH⁺16] Philip J. W. Moll, Nityan L. Nair, Toni Helm, Andrew C. Potter, Itamar Kimchi, Ashvin Vishwanath, and James G. Analytis. Transport evidence for Fermi-arc-mediated chirality transfer in the Dirac semimetal Cd3as2. *Nature*, 535(7611) :266–270, July 2016.
- [Mot39] N. F. Mott. The theory of crystal rectifiers. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 171(944) :27–38, 1939.
- [MPFG09] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig. A universal hamiltonian for motion and merging of dirac points in a two-dimensional crystal. *The European Physical Journal B*, 72(4) :509, 2009.
- [Naz86] Yu V Nazarov. Instability due to magnetically induced currents. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 91 :342, 1986.
- [NCN⁺16] D. Neubauer, J. P. Carbotte, A. A. Nateprov, A. Löhle, M. Dressel, and A. V. Pronin. Interband optical conductivity of the [001]-oriented dirac semimetal cd₃as₂. *Phys. Rev. B*, 93 :121202, Mar 2016.
- [NGW⁺17] Anna Corinna Niemann, Johannes Gooth, Shu-Chun Wu, Svenja Bäßler, Philip Sergelius, Ruben Hühne, Bernd Rellinghaus, Chandra Shekhar, Vicky Süß, Marcus Schmidt, Claudia Felser, Binghai Yan, and Kornelius Nielsch. Chiral magnetoresistance in the Weyl semimetal NbP. *Scientific Reports*, 7 :43394, March 2017.
- [NN81a] H.B. Nielsen and M. Ninomiya. Absence of neutrinos on a lattice : (i) proof by homotopy theory. *Nuclear Physics B*, 185(1) :20 – 40, 1981.
- [NN81b] H.B. Nielsen and M. Ninomiya. Absence of neutrinos on a lattice : (II). Intuitive topological proof. *Nuclear Physics B*, 193(1) :173 – 194, 1981.
- [NN81c] Holger Bech Nielsen and Masao Ninomiya. A no-go theorem for regularizing chiral fermions. *Physics Letters B*, 105(2) :219–223, 1981.
- [NN83] H.B. Nielsen and Masao Ninomiya. The adler-bell-jackiw anomaly and weyl fermions in a crystal. *Physics Letters B*, 130(6) :389 – 396, 1983.

- [NPJ]⁺05] E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp. Band structure of semimagnetic $\text{Hg}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$ quantum wells. *Phys. Rev. B*, 72 :035321, Jul 2005.
- [NXS]⁺14] Madhab Neupane, Su-Yang Xu, Raman Sankar, Nasser Alidoust, Guang Bian, Chang Liu, Ilya Belopolski, Tay-Rong Chang, Horng-Tay Jeng, Hsin Lin, Arun Bansil, Fangcheng Chou, and M. Zahid Hasan. Observation of a three-dimensional topological Dirac semimetal phase in high-mobility Cd_3As_2 . *Nature Communications*, 5 :3786, May 2014.
- [OBZ]⁺14] M. Orlita, D. M. Basko, M. S. Zholudev, F. Teppe, W. Knap, V. I. Gavrilenko, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzkii, P. Neugebauer, C. Faugeras, A-L. Barra, G. Martinez, and M. Potemski. Observation of three-dimensional massless Kane fermions in a zinc-blende crystal. *Nat Phys*, 10(3) :233–238, March 2014.
- [ODB16] T. E. O’Brien, M. Diez, and C. W. J. Beenakker. Magnetic breakdown and Klein tunneling in a type-II Weyl semimetal. *Phys. Rev. Lett.*, 116 :236401, Jun 2016.
- [OM14] Ryo Okugawa and Shuichi Murakami. Dispersion of Fermi arcs in Weyl semimetals and their evolutions to Dirac cones. *Phys. Rev. B*, 89 :235315, Jun 2014.
- [Ons31a] Lars Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. i. *Phys. Rev.*, 37 :405–426, Feb 1931.
- [Ons31b] Lars Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. ii. *Phys. Rev.*, 38 :2265–2279, Dec 1931.
- [ORvO10] Yuval Oreg, Gil Refael, and Felix von Oppen. Helical liquids and Majorana bound states in quantum wires. *Phys. Rev. Lett.*, 105 :177002, Oct 2010.
- [PF70] ED Palik and JK Furdyna. Infrared and microwave magnetoplasma effects in semiconductors. *Reports on Progress in Physics*, 33(3) :1193, 1970.
- [PPV87] O.A. Pankratov, S.V. Pakhomov, and B.A. Volkov. Supersymmetry in heterojunctions: Band-inverting contact on the basis of $\text{Pb}_1\text{-xSn}_x\text{Te}$ and $\text{Hg}_1\text{-xCd}_x\text{Te}$. *Solid State Communications*, 61(2) :93–96, 1987.
- [PSW13] Tomislav Prokopec, Michael G. Schmidt, and Jan Weenink. Exact solution of the Dirac equation with CP violation. *Phys. Rev. D*, 87 :083508, Apr 2013.
- [PT33] G. Pöschl and E. Teller. Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators. *Zeitschrift für Physik*, 83(3) :143–151, Mar 1933.
- [PWP84] B. Plenkiewicz, P.R. Wallace, and P. Plenkiewicz. The role of vacancies in the band structure of Cd_3As_2 . *Solid State Communications*, 50(7) :681–684, 1984.
- [QW86] Helen R. Quinn and Marvin Weinstein. Lattice theories of chiral fermions. *Phys. Rev. D*, 34 :2440–2456, Oct 1986.
- [RHH99] Michael Riordan, Lillian Hoddeson, and Conyers Herring. The invention of the transistor. *Rev. Mod. Phys.*, 71 :S336–S345, Mar 1999.
- [RJY]⁺16] Jiawei Ruan, Shao-Kai Jian, Hong Yao, Haijun Zhang, Shou-Cheng Zhang, and Dingyu Xing. Symmetry-protected ideal Weyl semimetal in HgTe -class materials. *Nature Communications*, 7 :11136, April 2016.
- [RkY84] Su Ru-keng and Zhang Yuhong. Exact solutions of the Dirac equation with a linear scalar confining potential in a uniform electric field. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 17(4) :851, 1984.
- [Roe65] D M Roessler. Kramers-Kronig analysis of reflection data. *British Journal of Applied Physics*, 16(8) :1119, 1965.
- [Ros11] Fausto Rossi. *The Envelope-Function Approximation*, pages 345–348. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2011.

- [SanSM94] K. Sierański, J. Szatkowski, and J. Misiewicz. Semiempirical tight-binding band structure of ii_3v_2 semiconductors : cd_3p_2 , zn_3p_2 , cd_3as_2 , and zn_3as_2 . *Phys. Rev. B*, 50 :7331–7337, Sep 1994.
- [Sau31] Fritz Sauter. Über das verhalten eines elektrons im homogenen elektrischen feld nach der relativistischen theorie diracs. *Zeitschrift für Physik*, 69(11) :742–764, 1931.
- [Sco69] M. W. Scott. Energy gap in $\text{hg}_1\text{-xcdxte}$ by optical absorption. *Journal of Applied Physics*, 40(10) :4077–4081, 1969.
- [SGSH85] T. P. Smith, B. B. Goldberg, P. J. Stiles, and M. Heiblum. Direct measurement of the density of states of a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 32 :2696–2699, Aug 1985.
- [SGTmH15] Judit Sári, Mark O. Goerbig, and Csaba Tóke. Magneto-optics of quasirelativistic electrons in graphene with an inplane electric field and in tilted dirac cones in $\alpha - (\text{BEDT TTF})_2\text{i}_3$. *Phys. Rev. B*, 92 :035306, Jul 2015.
- [SGW⁺15] Alexey A. Soluyanov, Dominik Gresch, Zhijun Wang, QuanSheng Wu, Matthias Troyer, Xi Dai, and B. Andrei Bernevig. Type-II Weyl semimetals. *Nature*, 527(7579) :495–498, November 2015.
- [SH67] Frank Stern and W. E. Howard. Properties of semiconductor surface inversion layers in the electric quantum limit. *Phys. Rev.*, 163 :816–835, Nov 1967.
- [Sho39] William Shockley. On the surface states associated with a periodic potential. *Phys. Rev.*, 56 :317–323, Aug 1939.
- [Sho50] W. Shockley. *Electrons and holes in semiconductors : with applications to transistor electronics*. Bell Telephone Laboratories series. Van Nostrand, 1950.
- [SKT⁺13] Parijat Sengupta, Tillmann Kubis, Yaohua Tan, Michael Povolotskyi, and Gerhard Klimeck. Design principles for hgte based topological insulator devices. *Journal of Applied Physics*, 114(4) :043702, 2013.
- [Sla34] J. C. Slater. Electronic energy bands in metals. *Phys. Rev.*, 45 :794–801, Jun 1934.
- [SS13] D. T. Son and B. Z. Spivak. Chiral anomaly and classical negative magnetoresistance of weyl metals. *Phys. Rev. B*, 88 :104412, Sep 2013.
- [SSH79] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. Solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. Lett.*, 42 :1698–1701, Jun 1979.
- [SSH80] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. Soliton excitations in polyacetylene. *Phys. Rev. B*, 22 :2099–2111, Aug 1980.
- [Ste72] Frank Stern. Self-consistent results for n -type si inversion layers. *Phys. Rev. B*, 5 :4891–4899, Jun 1972.
- [Str82a] P Streda. Quantised hall effect in a two-dimensional periodic potential. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 15(36) :L1299, 1982.
- [Str82b] P Streda. Theory of quantised hall conductivity in two dimensions. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 15(22) :L717, 1982.
- [SW83] M Singh and P R Wallace. Theory of the intraband magneto-optics of cadmium arsenide. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 16(20) :3877, 1983.
- [SW85] M. Singh and P.R. Wallace. High- g -factors and landau level crossing in the valence band of narrow gap semiconductors. *Solid State Communications*, 53(2) :165 – 170, 1985.
- [SZ97] Marlan O. (Marlan Orvil) Scully and 1952 Zubairy, Muhammad Suhail. *Quantum optics*. Cambridge ; New York : Cambridge University Press, 1997.
- [Tam32] Ig. Tamm. Über eine mögliche art der elektronenbindung an kristaloberflächen. *Zeitschrift für Physik*, 76(11) :849–850, 1932.
- [TBUK17] M Trescher, E.J. Bergholtz, M. Udagawa, and J Knolle. Charge density wave instabilities of type-ii weyl semimetals in a strong magnetic field. *arxiv*, Jul 2017.

- [TCG16] Serguei Tchoumakov, Marcello Civelli, and Mark O. Goerbig. Magnetic-field-induced relativistic properties in type-i and type-ii weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.*, 117 :086402, Aug 2016.
- [TCG17] Serguei Tchoumakov, Marcello Civelli, and Mark O. Goerbig. Magnetic description of the fermi arc in type-i and type-ii weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 95 :125306, Mar 2017.
- [THD05] Sakura Nishino Takeda, Naoto Higashi, and Hiroshi Daimon. Visualization of in-plane dispersion of hole subbands by photoelectron spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 94 :037401, Jan 2005.
- [THH60] Mikio Tsuji, Sigeru Huzinaga, and Tasuke Hasino. Bond alternation in long polyenes. *Rev. Mod. Phys.*, 32 :425–427, Apr 1960.
- [Thi15] Nicolas Thiébaud. *Effet Hall quantique fractionnaire dans la bicouche et le puits large*. PhD thesis, Université Paris-Sud, 2015. Thèse de doctorat dirigée par Goerbig, Mark Oliver et Regnault, Nicolas Physique théorique Paris 11 2015.
- [Tho57] William Thomson. 4. on a mechanical theory of thermo-electric currents. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, 3 :91–98, 1857.
- [TJI⁺17] Serguei Tchoumakov, Victor Jouffrey, Andreas Inhofer, Erwann Bocquillon, Bernard Plaçais, David Carpentier, and Mark O. Goerbig. Massive states in topological heterojunctions. *arXiv*, 1704.08954, Apr 2017.
- [TK69] M. Tomášek and J. Koutecký. Nature of the chemisorption bond on semiconductor surfaces. *International Journal of Quantum Chemistry*, 3(3) :249–267, 1969.
- [TKNdN82] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :405–408, Aug 1982.
- [TLLM80] Hajime Takayama, Y. R. Lin-Liu, and Kazumi Maki. Continuum model for solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. B*, 21 :2388–2393, Mar 1980.
- [Tyc87] Robert Tycko. Adiabatic rotational splittings and berry's phase in nuclear quadrupole resonance. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :2281–2284, Jun 1987.
- [UB16] M. Udagawa and E. J. Bergholtz. Field-selective anomaly and chiral mode reversal in type-ii weyl materials. *Phys. Rev. Lett.*, 117 :086401, Aug 2016.
- [VE16] V. A. Volkov and V. V. Enaldiev. Surface states of a system of dirac fermions : A minimal model. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 122(3) :608–620, Mar 2016.
- [Vil80] Alexander Vilenkin. Equilibrium parity-violating current in a magnetic field. *Phys. Rev. D*, 22 :3080–3084, Dec 1980.
- [Vol09] G. E. Volovik. Topological invariant for superfluid ³He-b and quantum phase transitions. *JETP Letters*, 90(8) :587–591, 2009.
- [VP85] BA Volkov and OA Pankratov. Two-dimensional massless electrons in an inverted contact. *JETP Lett*, 42(49) :178, 1985.
- [Wal79] P. R. Wallace. Electronic g-factor in cd₃as₂. *physica status solidi (b)*, 92(1) :49–55, 1979.
- [WD69] John D. Wiley and R. N. Dexter. Helicons and nonresonant cyclotron absorption in semiconductors. ii. hg_{1-x}cd_xTe. *Phys. Rev.*, 181 :1181–1190, May 1969.
- [Weg16] F. Wegner. *Supermathematics and its Applications in Statistical Physics : Grassmann Variables and the Method of Supersymmetry*. Lecture Notes in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [WMN⁺16] R. Wu, J.-Z. Ma, S.-M. Nie, L.-X. Zhao, X. Huang, J.-X. Yin, B.-B. Fu, P. Richard, G.-F. Chen, Z. Fang, X. Dai, H.-M. Weng, T. Qian, H. Ding, and S. H. Pan. Evidence for topological edge states in a large energy gap near the step edges on the surface of zrte₅. *Phys. Rev. X*, 6 :021017, May 2016.
- [WS97] E. P. Wigner and F. Seitz. *On the Constitution of Metallic Sodium*, pages 365–371. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1997.

- [WW96] E.T. Whittaker and G.N. Watson. *A Course of Modern Analysis*. A Course of Modern Analysis : An Introduction to the General Theory of Infinite Processes and of Analytic Functions, with an Account of the Principal Transcendental Functions. Cambridge University Press, 1996.
- [XAB⁺15] Su-Yang Xu, Nasser Alidoust, Ilya Belopolski, Zhujun Yuan, Guang Bian, Tay-Rong Chang, Hao Zheng, Vladimir N. Strocov, Daniel S. Sanchez, Guoqing Chang, Chenglong Zhang, Daixiang Mou, Yun Wu, Lunan Huang, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, BaoKai Wang, Arun Bansil, Horng-Tay Jeng, Titus Neupert, Adam Kaminski, Hsin Lin, Shuang Jia, and M. Zahid Hasan. Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide. *Nature Physics*, 11(9) :748–754, 2015.
- [XBA⁺15] S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, S.-M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D. S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P. P. Shibayev, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science*, 349(6248) :613–617, August 2015.
- [XKL⁺15] Jun Xiong, Satya K. Kushwaha, Tian Liang, Jason W. Krizan, Max Hirschberger, Wudi Wang, R. J. Cava, and N. P. Ong. Evidence for the chiral anomaly in the dirac semimetal na3bi. *Science*, 350(6259) :413–416, 2015.
- [XQH⁺09] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface. *Nat Phys*, 5(6) :398–402, 2009.
- [XWL⁺16] N. Xu, H. M. Weng, B. Q. Lv, C. E. Matt, J. Park, F. Bisti, V. N. Strocov, D. Gawryluk, E. Pomjakushina, K. Conder, N. C. Plumb, M. Radovic, G. Autès, O. V. Yazyev, Z. Fang, X. Dai, T. Qian, J. Mesot, H. Ding, and M. Shi. Observation of Weyl nodes and Fermi arcs in tantalum phosphide. *Nature Communications*, 7 :11006, March 2016.
- [Yam15] Naoki Yamamoto. Generalized bloch theorem and chiral transport phenomena. *Phys. Rev. D*, 92 :085011, Oct 2015.
- [Zak64] J. Zak. Magnetic translation group. *Phys. Rev.*, 134 :A1602–A1606, Jun 1964.
- [Zak84] J. Zak. Band crossing and surface states in solids. *Physics Letters A*, 106(8) :399 – 402, 1984.
- [Zak85] J. Zak. Symmetry criterion for surface states in solids. *Phys. Rev. B*, 32 :2218–2226, Aug 1985.
- [Zak89] J. Zak. Berry’s phase for energy bands in solids. *Phys. Rev. Lett.*, 62 :2747–2750, Jun 1989.
- [ZBH⁺16] Yi Zhang, Daniel Bulmash, Pavan Hosur, Andrew C. Potter, and Ashvin Vishwanath. Quantum oscillations from generic surface Fermi arcs and bulk chiral modes in Weyl semimetals. *Scientific Reports*, 6 :srep23741, April 2016.
- [Zee10] A. Zee. *Quantum Field Theory in a Nutshell : (Second Edition)*. In a Nutshell. Princeton University Press, 2010.
- [ZKM12] Fan Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele. Surface states of topological insulators. *Phys. Rev. B*, 86 :081303, Aug 2012.
- [ZLQ⁺09] Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface. *Nature Physics*, 5(6) :438–442, June 2009.
- [Zub16] M. A. Zubkov. Absence of equilibrium chiral magnetic effect. *Phys. Rev. D*, 93 :105036, May 2016.
- [ZWY⁺17] Yan Zhang, Chenlu Wang, Li Yu, Guodong Liu, Aiji Liang, Jianwei Huang, Simin Nie, Xuan Sun, Yuxiao Zhang, Bing Shen, Jing Liu, Hongming Weng, Lingxiao Zhao, Genfu Chen, Xiaowen Jia, Cheng Hu, Ying Ding, Wenjuan Zhao, Qiang Gao, Cong Li, Shaolong He, Lin Zhao, Fengfeng Zhang, Shenjin Zhang, Feng Yang, Zhimin Wang, Qinjun Peng, Xi Dai, Zhong Fang, Zuyan Xu, Chuangtian Chen, and X. J. Zhou. Electronic evidence of temperature-induced Lifshitz transition and topological nature in ZrTe₅. *Nature Communications*, 8 :15512, May 2017.

Sergueï TCHOUMAKOV



📍 5 rue Charles de Gaulle - 91400, Orsay, FRANCE

✉ serguei.tchoumakov@u-psud.fr

☎ (+33)(0)6.84.14.79.37

Education

- 2014 - now **Doctor of Philosophy, PhD** – *Physics*, in progress.
Laboratoire de Physique du Solide (LPS), Université Paris-Sud, Orsay, France.
Supervisors : Dr. Mark-Oliver Goerbig and Dr. Marcello Civelli.
Project : Correlations in Weyl semimetals.
- 2014 **Master of Science** – *Physics*, with honors.
École normale supérieure de Lyon, France.
- 2013 **Master of Science** – *Teaching in physics*.
École normale supérieure de Lyon, France.
Success in a French competitive exam for teaching and called *Agrégation*, major in physics.
- 2011 **Bachelor of Science** – *Physics*, with honors.
École normale supérieure de Lyon, France.
- 2007-2010 **Undergraduate courses to prepare nationwide competitive exams in sciences**.
Lycée Janson-de-Sailly and Lycée Claude-Bernard. Paris, France.
Success in the entrance exam of École normale supérieure de Lyon, France.
- 2007 **High-School diploma** – major in physics and chemistry, with honors.
Lycée Simone-Signoret. Vaux-le-Pénil, France.

Publications

• Published

- 2017 **Magnetic description of the Fermi arc in type-I and type-II Weyl semimetals.**
S.Tchoumakov, M. Civelli and M.-O.Goerbig,
[Physical Review B **95**, 125306.](#)
- 2016 **Magnetic-field-induced relativistic properties in type-I and type-II Weyl semimetals.**
S.Tchoumakov, M. Civelli and M.-O.Goerbig,
[Physical Review Letters **117**, 086402.](#)
- 2016 **Magneto-optical signature of massless Kane electrons in Cd3As2.**
A. Akrap, M. Haki, S. Tchoumakov, I. Crassee, J. Kuba, M. O. Goerbig, C. C. Homes,
O. Caha, J. Novak, F. Tepe, S. Koohpayeh, Liang Wu, N. P. Armitage, A. Nateprov,
E. Arushanov, Q. D. Gibson, R. J. Cava, D. van der Marel, C. Faugeras, G. Martinez,
M. Potemski and M. Orlita,
[Physical Review Letters **117**, 136401.](#)

• Submitted

2017 **Topological confined massive surface states in strained bulk HgTe probed by RF compressibility.**

A. Inhofer, [S.Tchoumakov](#), B. Assaf, G. Fève, J.M. Berroir, D. Carpentier, M.-O.Goerbig and B. Plaçais ; Bendias, D. Mahler, E. Bocquillon, R. Schlereth, C. Brüne, H. Buhmann and L.W. Molenkamp.

[arxiv :1704.04045](#)

2017 **Massive states in topological heterojunctions**

[S.Tchoumakov](#), V. Jouffrey, A. Inhofer, D. Carpentier, E. Bocquillon, B. Plaçais and M.O. Goerbig,

[arxiv :1704.08954](#)

Schools, conferences and seminars

August, 2017 **Conference : Vietnam Nanophysics.**

Quy-Nhon (Vietnam)

"Massive surfaces in topological heterojunctions", *invited speaker*.

July, 2017 **Colloquim : Spin-orbit interactions and the g-factor.**

ESPCI, Paris (France)

"Surface states of type-I and type-II Weyl semimetals", *invited speaker*.

May, 2017 **Conference : Frontiers of Topological Quantum Matter.**

Nordita, Stockholm (Sweden)

Poster "Relativistic electrons at the surface".

December, 2016 **Seminar : Relativistic properties of Weyl semimetals.**

University of Utrecht (the Netherlands), *invited seminar*.

November, 2016 **School : Topological matter interactions and light-matter coupling.**

Institut d'Etudes Scientifiques de Cargèse (Corsica, France), *participant*.

Poster "Relativistic electrons in condensed matter".

October, 2016 **Conference : TOPOLyon.**

Ecole Normale Supérieure de Lyon (France),

"Relativistic properties of Weyl semimetals", *invited speaker*.

August, 2016 **School : Topological matter school.**

Palacio Mirama in San Sebastian (Spain), *participant*.

Poster "Relativistic electrons in condensed matter".

December, 2015 **Conference : Mesoscopic physics at CNRS.**

Aussois (France), *participant*.

Poster "Spectroscopy of Weyl cones at merging".

August, 2015 **School : Topological phases of matter.**

Lorentz institute, Munich (Germany), *participant*.

August, 2015 **School : Physics due to spin-orbit coupling in correlated electron systems.**

Institut d'Etudes Scientifiques de Cargèse (Corsica, France), *participant*.

Poster "Correlations in a Weyl semimetal".

December, 2014 **Conference : Mesoscopic physics at CNRS.**

Aussois (France), *participant*.

Professional experiences

- Administrative

2015-2016 **Organization of informal seminars of the theory group**,
Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, Orsay, France.

- Teaching

June-July 2017 **Supervision of an internship**, third-year undergraduate in physics at the Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, Orsay, France.

Student : Julien Basseler.

Project : Tamm, Shockley and band-bending surface states.

2014-2017 **Teaching assistant**, third-year undergraduates in Physics.

Université Paris-Sud, Orsay, France.

Teachings : Mathematics for physicists (25hours/year), Informatics : C# (24hours/year) and Electromagnetism in matter (20hours/year).

May-July, 2015 **Supervision of two internships** : third-year undergraduates in physics at the Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, Orsay, France.

Students : Baptiste Gouin and Guillaume Manzanares.

Project : Ultra-relativistic electrons in condensed matter.

- Scientific

April, 2017 **Peer-reviewing** for Europhysics Letter, in collaboration with M.O. Goerbig.

October, 2016 **Peer-reviewing** for Physical Review B, in collaboration with M.O. Goerbig.

May-July, 2014 **Internship**. Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, Orsay, France.

Supervisors : Pr. Mark Oliver Goerbig and Pr. Marcello Civelli.

Project : Mean-field study of correlations in Weyl semimetals.

May-July, 2012 **Internship**. Institut Néel, Grenoble.

Supervisor : Pr. Alexia Auffèves.

Project : Theoretical study of the light-matter interaction in waveguides.

June-July, 2011 **Internship**. Laboratoire de physique des interactions ioniques et moléculaires, Marseille.

Supervisor : Pr. Caroline Champenois.

Project : Experimental study of Coulomb crystals in an octupolar magnetic trap.

En Français.

Titre :

Signatures relativistes en spectroscopie de matériaux topologiques : en volume et en surface

Mots clés :

Semi-métaux de Weyl, isolants topologiques, champ magnétique, champ électrique, états de surface, spectroscopie infrarouge, transport électronique

Résumé :

Dans cette thèse je me suis intéressé au caractère relativiste de matériaux topologiques tridimensionnels : les semi-métaux de Weyl et les isolants topologiques. Après une introduction aux états de surfaces et aux matériaux topologiques, je discute leurs propriétés de covariance sous les rotations trigonométriques et hyperboliques. Ces transformations me permettent de traiter les équations du mouvement d'un électron dans un champ magnétique ou à la surface, sous l'influence d'un champ électrique ou d'une inclinaison de la relation de dispersion. En première partie, je l'illustre dans le cas de la réponse magnéto-optique des semi-métaux de Weyl, en présence d'une inclinaison. Ces calculs sont en lien avec ma collaboration avec les expérimentateurs du LNCMI à Grenoble pour la caractérisation de la structure de bande de Cd_3As_2 où l'on montre que ce matériau est un semi-métal de Kane et non un semi-métal de Dirac dans la gamme de potentiels chimiques expérimentalement accessible. L'autre partie de cette thèse porte sur les états de surface des isolants topologiques où l'on montre qu'il existe des états de surface massifs au delà de l'état de surface chiral. Ces états semblent avoir été observés par des études en ARPES d'échantillons de Bi_2Se_3 et Bi_2Te_3 oxydés et par des mesures de transport sur HgTe déformé. J'ai ainsi eu l'occasion de travailler avec les expérimentateurs du LPA à Paris sur le comportement des états de surface de HgTe sous forts effets de champ. Je termine par une discussion des états à l'interface entre un semi-métal de Weyl et un isolant dans le cas où le gap de ce dernier est suffisamment petit pour observer l'effet d'un champ magnétique et d'une inclinaison de la relation de dispersion sur les états de surface.

In English.

Title :

Signature of special relativity in the spectroscopy of topological materials : in the bulk and at the surface

Keywords :

Weyl semimetals, topological insulators, magnetic field, electric field, surface states, infrared spectroscopy, electronic transport

Abstract :

During my PhD studies I focused on the relativistic properties of threedimensional topological materials, namely Weyl semimetals and topological insulators. After introducing surface states and topological materials I discuss their covariance in trigonometric and hyperbolic rotations. These transformations help to solve the equations of motion of an electron in a magnetic field or at the surface with an applied electric field or with a tilt in the band dispersion. In a first place, I illustrate these transformations for the magneto-optical response of tilted Weyl semimetals. This work is related to my collaboration with experimentalists at LNCMI, Grenoble for characterizing the band structure of Cd_3As_2 where we show that this material is a Kane semi-metal instead of a Dirac semi-metal in the experimentally accessible range of chemical doping. The other part of this thesis is concerned with the surface states of topological insulators. I show that massive surface states can also exist in addition to the chiral surface state due to band inversion. Such states may have already been observed in ARPES measurement of oxidized Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 and in transport measurement of strained bulk HgTe . I show the work we performed with experimentalists at LPA, Paris on the behavior of HgTe surface states for strong field effects. Finally, I discuss the states at the interface of a Weyl semimetal and a small gap insulator. In this situation, an applied magnetic field or the tilt of the band dispersion can strongly affect the observed surface states.

