



MASTER SCIENCES DE LA MATIÈRE
École Normale Supérieure de Lyon
Université Claude Bernard Lyon I

Stage 2010–2011
DEBIERRE Vincent
M1 Physique

Phase de Hall quantique de spin

Résumé : Le but de ce stage a été d'étudier une phase de la matière possédant des propriétés topologiques distinctes de celles des isolants habituels. Les matériaux appartenant à cette phase dite "isolante topologique" sont caractérisés par la présence d'une interaction de spin-orbite qui entraîne l'existence d'états de conduction de bord.

Nous avons vu comment une telle phase apparaît dans des matériaux caractérisés par la présence d'une forte interaction de spin-orbite, celle-ci induisant une inversion dans la structure de bande. Nous nous sommes également intéressés plus précisément aux propriétés topologiques de cette phase qui se distingue de la phase isolante par la valeur d'un nombre entier appelé "invariant topologique".

Mots clefs : *Effet Hall quantique de spin - Isolants topologiques - États de bord - Renversement du temps*

Stage encadré par :

David Carpentier

david.carpentier@ens-lyon.fr / tél. (+33) 4 72 72 88 88

Laboratoire de Physique de l'École Normale Supérieure de Lyon

46, allée d'Italie 69007 Lyon, France

<http://www.ens-lyon.fr/PHYSIQUE/>

Remerciements

Je remercie très vivement mon directeur de stage David Carpentier. Au-delà de sa patience et du caractère invariablement limpide de ses explications, je tiens à le remercier avec beaucoup de sincérité pour avoir construit un stage aussi captivant. Il a su rendre ce sujet pointu à la fois attirant et abordable.

Je remercie plus généralement le groupe de travail de Théorie de la Matière Condensée, qui m'a intégré durant ces quelques mois à son fonctionnement, ainsi que le Laboratoire de Physique de l'École Normale Supérieure de Lyon.

*“There’s something about many-particle quantum mechanics that causes perfection to emerge out of imperfection”, **Joel Moore.***

Table des matières

1	Phénoménologie de l'effet Hall quantique de spin	1
1.1	Introduction	1
1.2	Analogie avec l'effet Hall quantique de charge - États de bord	1
1.2.1	États de bord dans le cadre de l'effet Hall quantique de charge	1
1.2.2	États de bord dans le cadre de l'effet Hall quantique de spin	2
1.3	Mise en évidence expérimentale de l'effet Hall quantique de spin	3
1.3.1	Application du formalisme de Landauer-Büttiker à l'effet Hall quantique de charge et à l'effet Hall quantique de spin	3
1.3.2	Inversion de la matrice de conductance - Diagrammes de potentiel	5
1.3.3	Détection de la phase de Hall quantique de spin	6
1.4	Organisation du rapport	7
2	Phase topologique dans le graphène	7
2.1	Structure et modélisation du graphène	8
2.2	Paramétrage de Dirac	8
2.3	Inversion de bande dans le graphène	9
2.3.1	Diagonalisation du Hamiltonien aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}'	9
2.3.2	Inversion de bande	10
2.4	Renversement du temps et invariant topologique	12
2.4.1	Opération de renversement du temps	12
2.4.2	Sous-espaces pair et impair	12
2.4.3	Invariant topologique \mathbb{Z}_2	13
2.4.4	Zéros du Pfaffien dans la zone de Brillouin - Transition de phase topologique	13
2.4.5	Pfaffien aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}'	14
2.4.6	Expression de l'invariant topologique \mathbb{Z}_2	15
3	Inversion de bande et fermions de Dirac	16
3.1	Physique du graphène à basse énergie	16
3.2	Réalisation de la phase de Hall quantique de spin dans un puits quantique	17
3.2.1	Structure de bande dans les matériaux de volume	17
3.2.2	Argument qualitatif sur l'effet des jonctions	17
3.2.3	Hamiltonien de Kane	18
3.2.4	Hamiltonien de Dirac	19
4	Conclusion	20
	Annexes	21
A	Quelques considérations sur l'interaction de spin-orbite	21
A.1	Généralités	21
A.1.1	De l'équation de Dirac vers l'équation de Pauli	21
A.1.2	Spin-orbite dans un nuage électronique	21
A.2	Interaction de spin-orbite dans les solides	22
A.2.1	Spin-orbite de type Rashba	22
A.2.2	Spin-orbite de type Dresselhaus	23

B	Formalisme de Landauer-Büttiker du transport électronique	23
B.1	Formalisme de Landauer	23
B.1.1	Conductance intrinsèque d'une portion de fil pour un mode de transport	23
B.1.2	Conductance à deux terminaux	25
B.2	Formalisme de Büttiker	25
B.2.1	Position du problème - Matrice de conductance	25
B.2.2	Exemple du conducteur à quatre terminaux	26
C	Puits quantique : calcul perturbatif du Hamiltonien effectif	27
C.1	États propres du Hamiltonien à moment nul	27
C.2	Forme du Hamiltonien effectif	29
D	Formulations mathématiques de l'invariant topologique	30
D.1	Phase de Berry	30
D.2	Polarisation par rapport au renversement du temps	30
D.3	Équivalence des différentes formulations	32
D.4	Tentative d'interprétation physique	33

1 Phénoménologie de l'effet Hall quantique de spin

1.1 Introduction

Les isolants topologiques sont des matériaux qui possèdent des états de conduction localisés aux bords des échantillons. Ils se distinguent des isolants traditionnels par ces états de bord et des métaux par le caractère isolant de l'intérieur de leur volume. Ils peuvent donc être décrits très improprement comme des “métaux à l'extérieur et des isolants à l'intérieur”. Ce qui est remarquable est que cette distinction entre volume et surface est observée dans un même matériau homogène. Les isolants topologiques constituent ainsi une phase distincte de la matière qui possède des propriétés différentes de celles de la phase isolante traditionnelle qui est dite “topologiquement triviale”. Ainsi les états de conduction sont topologiquement protégés, c'est-à-dire qu'ils ne peuvent pas être détruits par les interactions ou les impuretés. C'est cette propriété particulière qui fait de cette nouvelle phase de la matière un candidat pour des applications intéressantes en électronique et en spintronique.

Dans les systèmes bidimensionnels qui nous intéresseront, l'apparition de la phase isolante topologique est permise par l'effet Hall quantique de spin : celui-ci se manifeste en présence d'une forte interaction de spin-orbite. **Le spin-orbite a pour effet de coupler le spin d'un électron à son moment** : ceci est crucial dans l'apparition des états de bord. Les transitions de phase topologiques marquant la frontière entre deux phases topologiquement distinctes ne sont pas décrites par la théorie de Landau mais par des considérations sur les propriétés topologiques des matériaux considérés. Les transitions de phase topologiques que nous rencontrerons distinguent une phase isolante “traditionnelle” d'une phase de Hall quantique de spin par la parité du nombre d'états de bord de ces deux phases. Ainsi la phase de Hall quantique de spin est distinguée de la phase isolante par ce nombre entier dit topologique appartenant à l'ensemble $\mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}$.

Nous commençons notre exposé par des considérations sur l'existence des états de bord et leur détection expérimentale.

1.2 Analogie avec l'effet Hall quantique de charge - États de bord

Pour expliquer l'effet Hall quantique de spin, nous pouvons baser notre raisonnement sur des analogies avec l'effet Hall quantique (que nous appellerons “effet Hall quantique de charge” pour éviter toute ambiguïté).

1.2.1 États de bord dans le cadre de l'effet Hall quantique de charge

Considérons un gaz d'électrons astreint à se déplacer sur un plan perpendiculairement auquel est appliqué un champ magnétique $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$ constant et uniforme. Le Hamiltonien du système s'écrit, avec la jauge de Landau $\mathbf{A} = -By \mathbf{e}_x$:

$$H = \frac{1}{2m} \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + eBy \right)^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] + V_{\text{confinement}}(y). \quad (1.1)$$

La fonction d'onde peut alors s'écrire $\Psi_{k,q}(x, y) = e^{ikx} \phi_q(y)$, où l'équation de Schrödinger vérifiée par ϕ_q correspond à un oscillateur harmonique perturbé par le potentiel de confinement. Les niveaux de cet “oscillateur harmonique” sont appelés niveaux de Landau.

Nous pouvons voir sur la FIG.1.1 que si l'énergie de Fermi se situe entre deux niveaux de Landau alors les états de conduction sont situés sur les bords de l'échantillon : ils sont appelés "états de bord". ν niveaux de Landau engendrent ν états de bord.

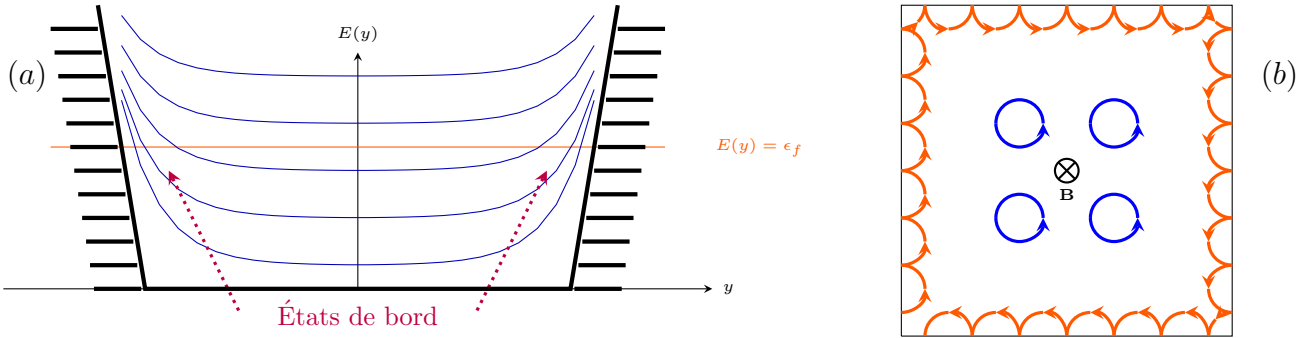


FIG.1.1 (a) Niveaux de Landau (perturbés par le potentiel de confinement) d'un conducteur dans le cadre de l'effet Hall quantique de charge. L'intersection des courbes correspondantes avec celle repérant la position de l'énergie de Fermi correspond aux états de bord. (b) Représentation classique des états de bord dans un échantillon soumis à un champ magnétique.

1.2.2 États de bord dans le cadre de l'effet Hall quantique de spin

L'apparition de l'effet Hall quantique de spin ne nécessite pas, à l'inverse de l'effet Hall quantique de charge, qu'un champ magnétique soit appliqué à l'échantillon, mais nécessite en revanche une forte **interaction de spin-orbite** couplant le spin à un champ magnétique effectif. Dans le cadre de l'effet Hall quantique de spin, le transport se fait également par des états de bord. Ceci peut intuitivement être vu comme une "superposition de deux effets Hall quantiques de charge" où les états de spins opposés se propagent en sens inverse l'un de l'autre, en raison du couplage de spin-orbite.

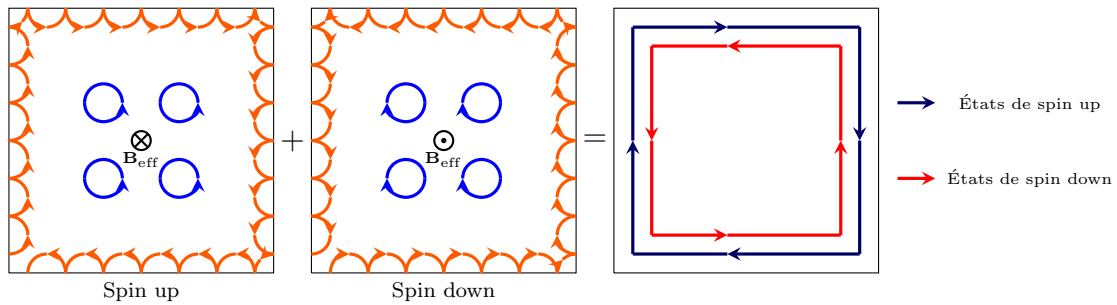


FIG.1.2 États de bord dans le cadre de l'effet Hall quantique de spin.

En l'absence de champ magnétique, mais en présence d'une interaction de spin-orbite suffisamment intense, il peut donc y avoir des états de bord dans un isolant qui est dans ce cas dit "topologique". La phase isolante topologique possède des propriétés différentes de celles des isolants habituels dits "triviaux". Ces propriétés topologiques sont robustes et ne peuvent donc pas être perdues lors d'un changement perturbatif des grandeurs qui paramètrent le Hamiltonien. Ceci entraîne par l'argument qui suit l'apparition d'états de conduction au bord de l'échantillon. Les propriétés des deux phases sont décrites par un nombre entier appelé invariant topologique, appartenant à \mathbb{Z}_2 [15], différent dans les deux phases. Nous avons affaire à deux isolants : les états se situent dans chaque phase de part et d'autre du niveau de Fermi. L'invariant topologique étant une propriété robuste de la phase qu'il décrit, il faut pour qu'il soit

modifié à l'interface que la structure de bande soit complètement réarrangée (l'invariant ne peut varier continûment). Les bandes d'énergie doivent ainsi intersecter le niveau de Fermi à cette interface : il est donc clair que les états de conduction sont des états de bord. En pratique, cette situation est toujours réalisée puisqu'un échantillon d'isolant topologique est toujours entouré d'un isolant trivial, que ce soit un autre matériau qui protège l'échantillon ou tout simplement l'air.

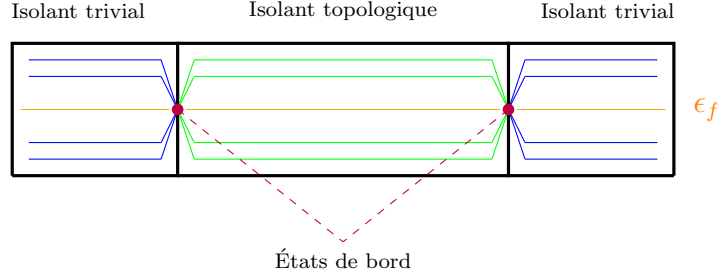


FIG.1.3 Modification de la structure de bande des matériaux au niveau d'une interface isolant trivial-isolant topologique. Pour que les propriétés topologiques soient modifiées à l'interface, il faut que les bandes se réarrangent.

1.3 Mise en évidence expérimentale de l'effet Hall quantique de spin

Attachons-nous à présenter un protocole expérimental qui permette une caractérisation très claire de la phase de Hall quantique de spin. Ce protocole consiste en des mesures de conductance au niveau des contacts d'un canal de conduction à six contacts dans lequel circule un courant. Il vise à mettre en évidence l'existence d'états de bord. Le formalisme du transport électronique développé par Landauer et approfondi par Büttiker [8], présenté en annexe, est utilisé pour la construction de ce dispositif. Il s'attache à décrire le transport électronique dans un milieu en fonction de ses propriétés de diffusion.

1.3.1 Application du formalisme de Landauer-Büttiker à l'effet Hall quantique de charge et à l'effet Hall quantique de spin

Par une représentation classique des états de bord nous constatons que dans le cadre de l'effet Hall quantique de charge, sous l'effet du champ magnétique, les électrons suivent des orbites cyclotron, mais celles-ci sont grandement perturbées par le potentiel de confinement à proximité des bords de l'échantillon. Par cette image, nous voyons donc que sous l'action du champ magnétique, les états de bord se propagent tous dans le même sens, le long du périmètre de l'échantillon : il y a brisure de l'invariance par renversement du temps.

Dans le cadre de l'effet Hall quantique de spin, les états de spins opposés se propagent dans des sens opposés, ce qui s'explique par le fait que **le spin est couplé au moment par l'interaction de spin-orbite** dont le Hamiltonien s'écrit sous la forme $\hat{H}_{SO} = -\beta \hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$ où le champ magnétique effectif est une fonction du moment \mathbf{k} .

Le formalisme de Landauer-Büttiker, présenté en annexe, permet de calculer les conductances dans ces systèmes multi-contacts en reliant les courants et les potentiels mesurés au niveau des différents contacts par une **matrice de conductance** :

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ \vdots \\ I_N \end{bmatrix} = \frac{e}{h} \begin{bmatrix} (1 - R_{11}) & -T_{12} & \cdots & -T_{1N} \\ -T_{21} & (1 - R_{22}) & \cdots & -T_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -T_{N1} & -T_{N2} & \cdots & (1 - R_{NN}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_N \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

où R_{kk} est le coefficient de réflexion du contact k et T_{ij} le coefficient de transmission du contact j vers le contact i .

La forme de la matrice de conductance n'a *a priori* rien de trivial dans le cas général mais se déduit sans calcul dans le cas de l'effet Hall quantique de charge et de l'effet Hall quantique de spin.

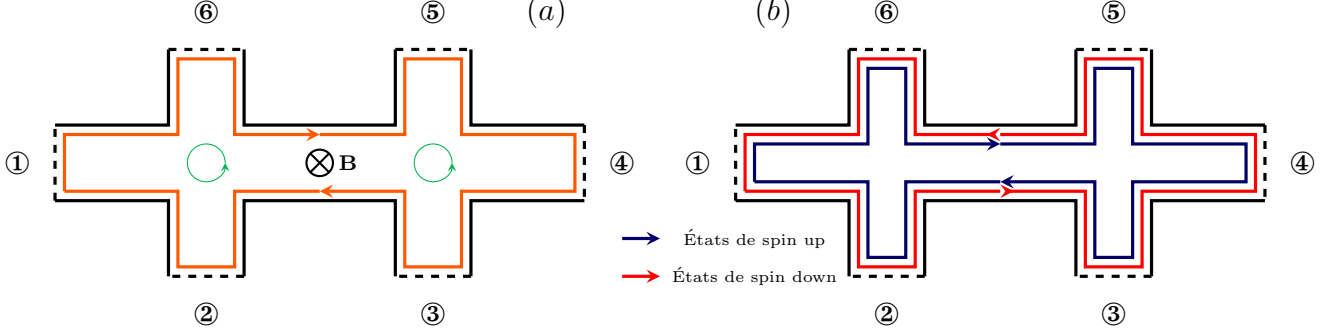


FIG.1.4 Propagation des états de bord (a) de l'effet Hall quantique de charge et (b) de l'effet Hall quantique de spin dans un conducteur à six terminaux.

* Effet Hall quantique de charge

Dans le cadre de l'effet Hall quantique de charge l'intégralité des électrons est transmise d'un contact au suivant par transport sur les états de bord. Les coefficients de réflexion et de transmission entre contacts sont ainsi donnés par $\forall(i, j) R_{ii} = 0, T_{ij} = \nu \delta_{i(j+1)}$ (avec conditions aux limites périodiques) où ν est le nombre de niveaux de Landau, et nous écrivons alors la matrice de conductance :

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \\ I_6 \end{bmatrix} = \nu \frac{e}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{bmatrix}. \quad (1.3)$$

Nous pouvons remarquer que la matrice de conductance n'est pas symétrique, ce qui est normal en présence d'un champ magnétique car la symétrie d'invariance par rapport au temps est brisée (le transport est dit chiral).

* Effet Hall quantique de spin

Les deux modes de propagation de spins opposés contribuent de manière égale. Les coefficients de réflexion et de transmission entre contacts sont ainsi donnés par $\forall(i, j) R_{ii} = 0, T_{ij} = \delta_{i(j-1)} + \delta_{i(j+1)}$ (avec conditions aux limites périodiques) et nous écrivons alors la matrice de conductance (les éléments diagonaux valent 2 car il y a deux modes de propagation (spin up/down)) :

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \\ I_6 \end{bmatrix} = \frac{e}{h} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{bmatrix}. \quad (1.4)$$

Le transport de charge est en revanche ici complètement achiral, car l'invariance du système par renversement du temps est préservée. De plus il n'y a qu'un mode de transport par orientation de spin car le nombre d'états de bord appartient à \mathbb{Z}_2 .

1.3.2 Inversion de la matrice de conductance - Diagrammes de potentiel

Comme l'on ne mesure que des différences de potentiel et que le courant total est conservé d'après les lois de Kirchhoff, nous pouvons éliminer une variable dans chaque vecteur (ici, nous prendrons arbitrairement la référence des potentiels à μ_6) et ainsi ramener le problème à une matrice 5×5 . Dans la suite, le chemin du courant est imposé et nous regardons les valeurs prises par les potentiels chimiques au niveau des différents terminaux. Un tenseur de résistance $R_{i \rightarrow j}^{mn}$ est ainsi défini, où le courant circule de i vers j et la différence de potentiel considérée est calculée entre les terminaux m et n . Dans la suite les valeurs des résistances réduites $\bar{r}_{i \rightarrow j}^{mn}$ seront données en unités de $\frac{h}{e^2}$.

* Effet Hall quantique de charge

Le problème se ramène à

$$\begin{bmatrix} \mu_1 - \mu_6 \\ \mu_2 - \mu_6 \\ \mu_3 - \mu_6 \\ \mu_4 - \mu_6 \\ \mu_5 - \mu_6 \end{bmatrix} = \frac{1}{\nu} \frac{h}{e} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \end{bmatrix}. \quad (1.5)$$

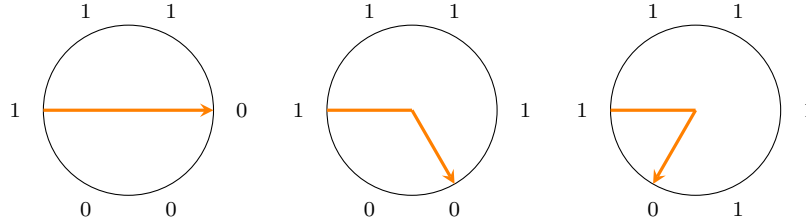


FIG.1.5 Diagrammes de potentiel chimique en unités de $\frac{Ie}{h\nu}$ pour l'effet Hall quantique de charge. La flèche représente le chemin du courant. La géométrie du conducteur n'ayant pas d'importance en raison de la forme triviale de la matrice de conductance, les terminaux sont représentés sur un cercle.

Nous pouvons remarquer sur les diagrammes que le conducteur est séparé en deux zones, l'une au même potentiel que l'entrée et l'autre au même potentiel que la sortie du courant.

Tenseur de résistance :

* Courant $1 \rightarrow 4$: $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(12),(13),(14)} = \frac{1}{\nu}$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(25),(26),(35),(36),(45),(46)} = -\frac{1}{\nu}$,
 $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(15),(16),(23),(24),(34),(56)} = 0$.

* Courant $1 \rightarrow 3$: $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(12),(13)} = \frac{1}{\nu}$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(24),(25),(26),(34),(35),(36)} = -\frac{1}{\nu}$,
 $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(14),(15),(16),(23),(45),(46),(56)} = 0$.

* Courant $1 \rightarrow 2$: $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(12)} = \frac{1}{\nu}$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(23),(24),(25),(26)} = -\frac{1}{\nu}$,
 $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(13),(14),(15),(16),(34),(35),(36),(45),(46),(56)} = 0$.

* Effet Hall quantique de spin

Le problème se ramène à

$$\begin{bmatrix} \mu_1 - \mu_6 \\ \mu_2 - \mu_6 \\ \mu_3 - \mu_6 \\ \mu_4 - \mu_6 \\ \mu_5 - \mu_6 \end{bmatrix} = \frac{h}{6e} \begin{bmatrix} 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 4 & 8 & 6 & 4 & 2 \\ 3 & 6 & 9 & 6 & 3 \\ 2 & 4 & 6 & 8 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \end{bmatrix}. \quad (1.6)$$

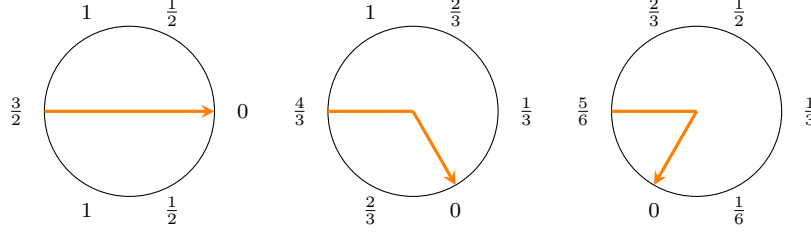


FIG.1.6 Diagrammes de potentiel chimique en unités de $\frac{Ie}{h}$ pour l'effet Hall quantique de spin. La flèche représente le chemin du courant. La géométrie du conducteur n'ayant pas d'importance en raison de la forme triviale de la matrice de conductance, les terminaux sont représentés sur un cercle.

La physique de l'effet Hall quantique de spin est beaucoup plus riche : les résistances prennent plusieurs valeurs différentes. Les chutes de potentiel sont constantes entre deux terminaux voisins lorsque l'on parcourt circulairement le conducteur dans un sens ou dans l'autre.

Tenseur de résistance

* Courant $1 \rightarrow 4$: $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(14)} = 3/2$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(13),(15),(24)} = 1$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(46)} = -1$,
 $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(12),(16),(23),(25),(34)} = 1/2$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(36),(45),(56)} = -1/2$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(26),(35)} = 0$.

* Courant $1 \rightarrow 3$: $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(13)} = 4/3$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(14)} = 1$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(36)} = -1$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(12),(15),(23)} = 2/3$,
 $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(35),(46)} = -2/3$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(16),(24)} = 1/3$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(26),(34),(45),(56)} = -1/3$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(25)} = 0$.

* Courant $1 \rightarrow 2$: $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(12)} = 5/6$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(13)} = 2/3$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(26)} = -2/3$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(14)} = 1/2$,
 $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(25),(36)} = -1/2$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(15)} = 1/3$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(24),(35),(46)} = -1/3$, $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(16)} = 1/6$,
 $\bar{r}_{1 \rightarrow 2}^{(23),(34),(45),(56)} = -1/6$.

Nous avons ainsi, en nous basant sur le formalisme de Landauer-Büttiker du transport électronique, construit un protocole expérimental permettant de caractériser sans ambiguïté la phase de Hall quantique de spin. Le paragraphe suivant va confirmer la validité de ce protocole.

1.3.3 Détection de la phase de Hall quantique de spin

Des mesures réalisées par Roth *et al.* [9] ont permis, à l'aide du formalisme de Landauer-Büttiker, de détecter la phase de Hall quantique de spin. Le système sur lequel les mesures ont été réalisées est un puits quantique de tellurure de mercure HgTe. Nous étudierons ce système [par la suite](#), mais attachons-nous pour l'instant à montrer quelques résultats expérimentaux.

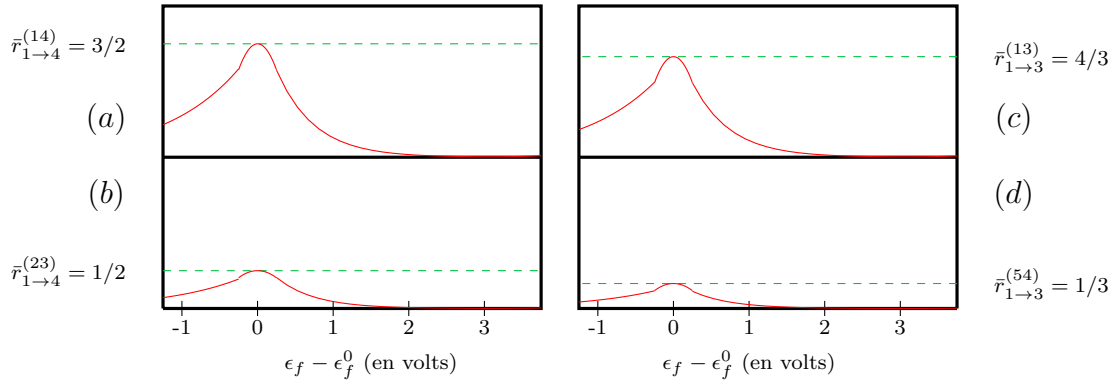


FIG.1.7 Mesures de résistances à quatre terminaux (deux terminaux de courant et deux terminaux de tension) pour un conducteur à six contacts. Les courbes sont adaptées de [9] et représentent les résistances (a) $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(14)}$, (b) $\bar{r}_{1 \rightarrow 4}^{(23)}$, (c) $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(13)}$ et (d) $\bar{r}_{1 \rightarrow 3}^{(54)}$ exprimées en unités de $\frac{h}{e^2}$ pour différentes valeurs du niveau de Fermi qui est déplacé à l'aide d'une tension de grille. Les mesures sont comparées aux prédictions du formalisme de Landauer-Büttiker

Le formalisme de Landauer-Büttiker nous a donc permis de construire un protocole de détection de l'effet Hall quantique de spin, et de montrer que les puits quantiques de tellure de mercure HgTe permettent une réalisation de la phase de Hall quantique de spin. C'est ce type de mesure qui permet de vérifier que les systèmes que nous étudierons par la suite sont bien dans la phase de Hall quantique de spin.

1.4 Organisation du rapport

Ayant en premier lieu expliqué pourquoi des états de bord peuvent apparaître et comment il est possible de les détecter, nous allons montrer avec l'exemple du graphène comment distinguer la phase topologique par rapport à la phase triviale. Nous montrerons ensuite que même si les propriétés topologiques du graphène sont impossibles à mettre en évidence expérimentalement en raison de la faiblesse de l'interaction de spin-orbite, il est possible de réaliser la phase topologique dans un puits quantique dont la physique de basse énergie est équivalente à celle du graphène : l'interaction de spin-orbite provoque une inversion par rapport à la structure de bande "habituelle".

Quatre annexes sont également proposés. Un premier développe quelques éléments permettant de se familiariser avec l'interaction de spin-orbite. Un second présente brièvement le formalisme de Landauer-Büttiker du transport électronique, crucial d'un point de vue expérimental car il prédit les signatures caractéristiques des états de bord. Un troisième présente les calculs réalisés sur le puits quantique de tellure de mercure HgTe. Enfin un quatrième propose une formulation alternative de l'invariant topologique en terme de phase de Berry.

2 Phase topologique dans le graphène

Le graphène a été proposé par Kane et Mele [14, 15] comme réalisation expérimentale de la phase de Hall quantique de spin. Même si l'interaction de spin-orbite s'est avérée par la suite trop faible pour que cette phase soit détectée expérimentalement, nous allons exposer les motivations d'une telle prédiction. Nous verrons que l'opération de renversement du temps est cruciale dans la distinction de la phase topologique par rapport à la phase triviale.

2.1 Structure et modélisation du graphène

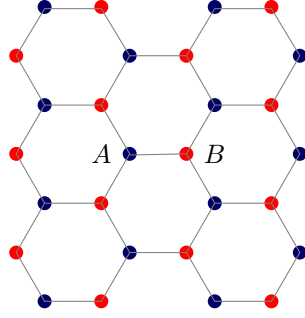


FIG.2.1 Structure du graphène.

Le graphène est un cristal monocouche de carbone avec un réseau hexagonal composé de deux sous-réseaux A et B . Suivant Kane et Mele [14, 15] nous considérons le Hamiltonien de tight-binding suivant pour le graphène :

$$\begin{aligned} \hat{H} = t \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{a}_i) + i\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \nu_{ij} \hat{s}_z (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i) \\ + i\lambda_R \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{s}_x e_{ij}^y - \hat{s}_y e_{ij}^x) (\hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{a}_i) + \lambda_V \sum_i (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i) \quad (2.1) \end{aligned}$$

où les sommes repérées par $\langle ij \rangle$ portent sur les premiers voisins et celles repérées par $\langle\langle ij \rangle\rangle$ sur les seconds voisins.

$\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i, \hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i$ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation sur un site i du sous-réseau A ou B . ν_{ij} est donné par ± 1 selon que le mouvement de l'électron se fait dans le sens anti-horaire ou horaire pour passer d'un site à l'autre; e_{ij}^x et e_{ij}^y sont les composantes du vecteur directeur du segment reliant les sites i et j . Enfin \hat{s}_x, \hat{s}_y et \hat{s}_z sont les opérateurs de spin de l'électron (l'indice de spin est abandonné sur les opérateurs de création et d'annihilation afin de ne pas alourdir les notations).

Outre le premier terme habituel de saut entre premiers voisins, ce Hamiltonien comprend un terme de spin-orbite intrinsèque (type Dresselhaus) qui induit des sauts entre seconds voisins, un terme de spin-orbite extrinsèque (type Rashba) dû à l'application d'un champ extérieur perpendiculaire au plan cristallin (ou à l'interaction avec un substrat ou un autre plan de graphène) et un potentiel de sous-réseau introduit artificiellement pour décrire la transition entre la phase de Hall quantique de spin (phase topologique) et la phase isolante.

2.2 Paramétrage de Dirac

La description du graphène en terme de réseau de Bravais nécessite d'avoir deux atomes par maille. Nous pouvons donc écrire le Hamiltonien dans l'espace de Fourier à l'aide des composantes du vecteur d'opérateurs de pseudospin $\hat{\sigma}$ pour caractériser cette dégénérescence. Les états $|\uparrow_\sigma\rangle$ et $|\downarrow_\sigma\rangle$ sont respectivement des états localisés sur les sous-réseaux A et B .

Pour paramétrer le Hamiltonien, nous définissons cinq matrices de Dirac [15] qui, avec leurs commutateurs et l'opérateur identité, génèrent une algèbre de Clifford :

$$\hat{\Gamma}_1 \equiv \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\mathbb{1}}_2, \quad \hat{\Gamma}_2 \equiv \hat{\sigma}_z \otimes \hat{\mathbb{1}}_2, \quad \hat{\Gamma}_3 \equiv \hat{\sigma}_y \otimes \hat{s}_x, \quad \hat{\Gamma}_4 \equiv \hat{\sigma}_y \otimes \hat{s}_y, \quad \hat{\Gamma}_5 \equiv \hat{\sigma}_y \otimes \hat{s}_z \text{ et } \hat{\Gamma}_{ij} \equiv \frac{1}{2i} [\hat{\Gamma}_i, \hat{\Gamma}_j].$$

Le Hamiltonien (2.1) est ainsi paramétré dans l'espace $\left\{ \left\{ \hat{\mathbb{1}}_2, \{ \hat{\sigma}_{x_i} \} \right\} \otimes \left\{ \hat{\mathbb{1}}_2, \{ \hat{s}_{x_j} \} \right\} \right\}$ (il faut

noter qu'il n'a pas de composante sur $\hat{\mathbf{l}}_\sigma \otimes \hat{\mathbf{l}}_s$) par

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^5 d_i(\mathbf{k}) \hat{\Gamma}_i + \sum_{i=1}^5 \sum_{j>i} d_{ij}(\mathbf{k}) \hat{\Gamma}_{ij}. \quad (2.2)$$

Les valeurs des coefficients $d_i(\mathbf{k})$ et $d_{ij}(\mathbf{k})$ sont données par transformation de Fourier du Hamiltonien de tight-binding. Les seuls coefficients non nuls obtenus sont [15] :

$$\begin{aligned} d_1 &= t(1 + 2 \cos x \cos y) & d_{12} &= -2t \cos x \sin y \\ d_2 &= \lambda_V & d_{15} &= 2\lambda_{SO}(\sin(2x) - 2 \sin x \cos y) \\ d_3 &= \lambda_R(1 - \cos x \cos y) & d_{23} &= -\lambda_R \cos x \sin y \\ d_4 &= -\sqrt{3}\lambda_R \sin x \sin y & d_{24} &= \sqrt{3}\lambda_R \sin x \cos y \end{aligned}$$

où $x \equiv \frac{a}{2}k_x$ et $y \equiv \frac{a\sqrt{3}}{2}k_y$.

Nous allons maintenant étudier brièvement la structure de bande du graphène. Nous verrons qu'il existe deux phases isolantes distinguées par une inversion de bande. Par la suite nous verrons que les propriétés de ces phases par rapport au renversement du temps sont différentes.

2.3 Inversion de bande dans le graphène

En l'absence de spin-orbite intrinsèque et extrinsèque et de potentiel de sous-réseau, les niveaux d'énergie sont dégénérés avec des valeurs de

$$\pm t \sqrt{1 + 4 \cos x \cos y + 4 \cos^2 x \cos^2 y + 4 \cos^2 x \sin^2 y}$$

où $x \equiv \frac{a}{2}k_x$ et $y \equiv \frac{a\sqrt{3}}{2}k_y$. Cette expression s'annule en $(x, y) = (\pm \frac{2\pi}{3}, 0)$. Étant à la recherche d'une inversion de bande, nous allons naturellement considérer le spectre en ces points qui correspondent aux moments $\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3a}e_x$ et $\mathbf{K}' = -\frac{4\pi}{3a}e_x$.

2.3.1 Diagonalisation du Hamiltonien aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}'

Définissons $\mathbf{p} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{K}$ et $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{K}'$, et $\Delta_{SO} \equiv 3\sqrt{3}\lambda_{SO}$. Nous considérons le spectre aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}' , ce qui revient à prendre $p_x = p_y = 0$ ou $q_x = q_y = 0$. Le système propre de \hat{H} est donné en ces points par :

Moment	Valeur propre	Vecteur propre
\mathbf{K}	$-\Delta_{SO} + \lambda_V$	$(0, 0, 0, 1)$
\mathbf{K}	$-\Delta_{SO} - \lambda_V$	$(1, 0, 0, 0)$
\mathbf{K}	$\Delta_{SO} + \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2}$	$(0, -\frac{i}{3\lambda_R}(\lambda_V + \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2}), 1, 0)$
\mathbf{K}	$\Delta_{SO} - \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2}$	$(0, \frac{i}{3\lambda_R}(-\lambda_V + \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2}), 1, 0)$
\mathbf{K}'	$-\Delta_{SO} + \lambda_V$	$(0, 0, 1, 0)$
\mathbf{K}'	$-\Delta_{SO} - \lambda_V$	$(0, 1, 0, 0)$
\mathbf{K}'	$\Delta_{SO} + \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2}$	$(\frac{i}{3\lambda_R}(-\lambda_V + \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2}), 0, 0, 1)$
\mathbf{K}'	$\Delta_{SO} - \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2}$	$(-\frac{i}{3\lambda_R}(\lambda_V + \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2}), 0, 0, 1)$

(2.3)

où les vecteurs propres sont exprimés dans la base $B_\sigma \otimes B_s = \{|\uparrow_\sigma \uparrow_s\rangle, |\uparrow_\sigma \downarrow_s\rangle, |\downarrow_\sigma \uparrow_s\rangle, |\downarrow_\sigma \downarrow_s\rangle\}$.

Considérons dans la suite des énergies normalisées par Δ_{SO} et posons

$$\begin{cases} v & \equiv \frac{\lambda_V}{\Delta_{SO}}, \\ w & \equiv \frac{\lambda_R}{\Delta_{SO}}. \end{cases}$$

2.3.2 Inversion de bande

Intéressons-nous à l'inversion de bande observée sur la FIG.2.3. Regardons dans quelle région de l'espace des paramètres cette inversion se produit. Il y a inversion de bande lorsque $(-1 + |v|) - (1 - \sqrt{v^2 + 9w^2}) \geq 0$, c'est-à-dire lorsque $|v| \geq 1$ ou $|\sqrt{1 - |v|}| \geq \frac{3w}{2}$.

L'inversion des bandes est due à l'importance de l'interaction de spin-orbite. Celle-ci brise une dégénérescence de la structure de bande habituelle et induit ainsi, lorsque Δ_{SO} est important, une inversion. Lorsque v et/ou w augmente(nt), cet écart est compensé et la phase de Hall quantique de spin est perdue : la structure de bande n'est plus dominée par l'interaction de spin-orbite.

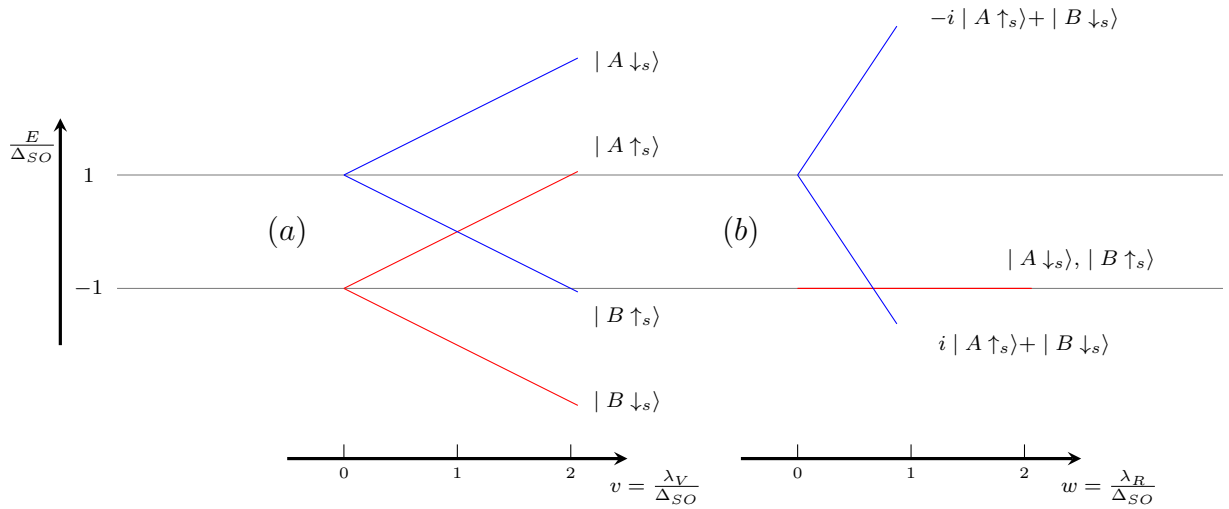


FIG.2.3 Niveaux d'énergie du Hamiltonien à $\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3a}e_x$. Selon la valeur des paramètres v et w il peut y avoir une inversion entre les bandes d'énergies réduites $-1 + |v|$ et $1 - \sqrt{v^2 + 9w^2}$. (a) $w = 0$, (b) $v = 0$.

Pour les faibles valeurs de v et w (fort spin-orbite), on voit que la structure de bande est dominée par l'interaction de spin-orbite. Lorsque v et/ou w augmente(nt), la différence d'énergie $2\Delta_{SO}$ entre les bandes est compensée par les autres effets.

L'inversion de bande sépare deux phases isolantes (elles possèdent toutes deux un gap), mais nous allons voir à présent qu'elles ne sont pas identiques : selon les valeurs de λ_V , les états propres occupés de ce Hamiltonien n'ont pas le même comportement par rapport au renversement du temps.

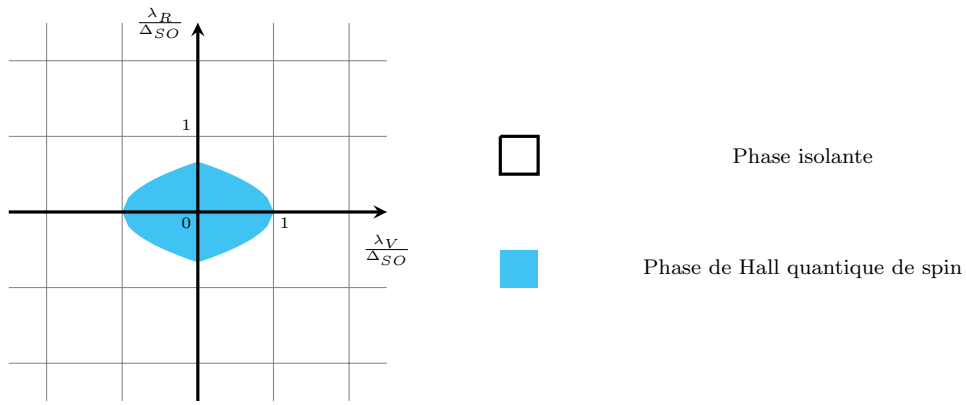


FIG.2.4 Diagramme de phase du graphène en fonction des paramètres $v \equiv \frac{\lambda_V}{\Delta_{SO}}$ et $w \equiv \frac{\lambda_R}{\Delta_{SO}}$ qui correspondent aux intensités respectives de l'interaction de spin-orbite extrinsèque et du potentiel de sous-réseau par rapport à celle du spin-orbite intrinsèque.

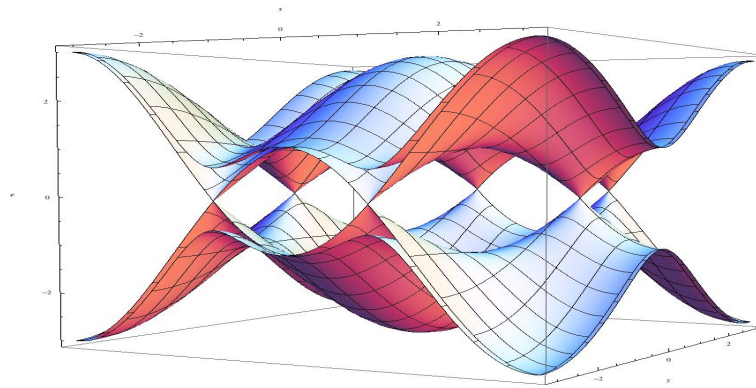


FIG.2.5 Structure de bande tridimensionnelle du graphène à la transition entre la phase isolante et la phase de Hall quantique de spin.

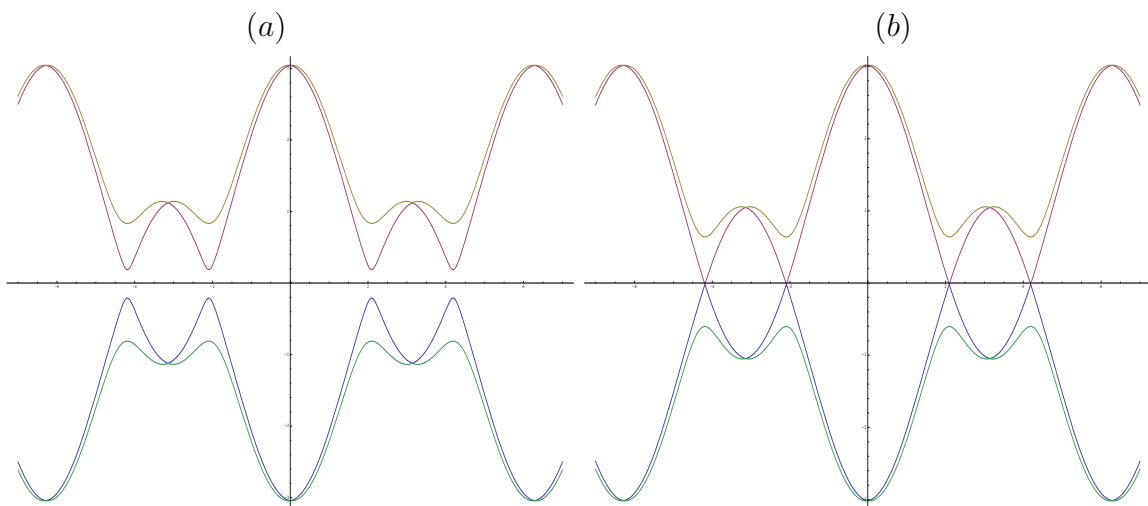


FIG.2.6 Structure de bande à $y = 0$ (pour $\lambda_{SO} = 0.06t$, $\lambda_R = 0.05t$) (a) dans la phase isolante ($\lambda_V = .01t$) et (b) dans la phase topologique à proximité de la transition ($\lambda_V = .03t$).

2.4 Renversement du temps et invariant topologique

2.4.1 Opération de renversement du temps

Pour un tel système, l'opérateur $\hat{\Theta}$ de renversement du temps est défini par

$$\hat{\Theta} \equiv i \hat{\mathbb{1}}_\sigma \otimes \hat{s}_y \hat{\Lambda} \quad (2.4)$$

où $\hat{\Lambda}$ est l'opérateur de conjugaison complexe. L'opérateur de renversement du temps est antilinéaire, c'est-à-dire que pour tout nombre complexe z il vérifie $\hat{\Theta}z = z^*\hat{\Theta}$. Un vecteur est toujours orthogonal à son conjugué par renversement du temps [1].

L'examen du comportement des états propres du Hamiltonien par rapport au renversement du temps permet de distinguer deux types de phases par la topologie de leurs états propres sur la zone de Brillouin. Plus précisément, nous considérons les éléments de la matrice $m_{ij}(\mathbf{k}) \equiv \langle u_i(\mathbf{k}) | \hat{\Theta} | u_j(\mathbf{k}) \rangle$ où les $|u_i(\mathbf{k})\rangle$ sont les **états occupés**. Le **Hamiltonien (2.2)** possède quatre états propres dont deux, situés en-dessous du niveau de Fermi, sont occupés : la matrice à considérer possède quatre éléments. Montrons qu'il est possible de l'écrire au moyen d'une seule quantité, son Pfaffien.

Les opérateurs antilinéaires \hat{C} vérifient [7] $\langle \psi | \hat{C} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hat{C}^\dagger | \psi \rangle$, d'où, avec $\hat{\Theta}^\dagger = -\hat{\Theta}$:

$$\langle u_i(\mathbf{k}) | \hat{\Theta} | u_j(\mathbf{k}) \rangle = -\langle u_j(\mathbf{k}) | \hat{\Theta} | u_i(\mathbf{k}) \rangle. \quad (2.5)$$

Ainsi la matrice 2×2 de l'opérateur de renversement du temps est antisymétrique et est dans le cas présent **décrite par un unique nombre : son Pfaffien** $P(\mathbf{k})$, qui est égal à la racine carrée de son déterminant. Ainsi nous notons $\langle u_i(\mathbf{k}) | \hat{\Theta} | u_j(\mathbf{k}) \rangle = \epsilon_{ij} P(\mathbf{k})$.

2.4.2 Sous-espaces pair et impair

Dans le cas général, le Hamiltonien d'un système physique vérifie $\hat{\Theta} \hat{H}(\mathbf{k}) \hat{\Theta}^{-1} = \hat{H}(-\mathbf{k})$. Considérons le **Hamiltonien (2.2)** : on voit que $\forall i d_i(-\mathbf{k}) = d_i(\mathbf{k})$ et $\forall (i, j) d_{ij}(-\mathbf{k}) = -d_{ij}(\mathbf{k})$. Ainsi le Hamiltonien vérifie

$$\begin{cases} \hat{\Theta} \hat{H}(\mathbf{k}) \hat{\Theta}^{-1} = \hat{H}(\mathbf{k}) & \text{aux points où } d_{ij}(\mathbf{k}) = 0 \forall (i, j), \\ \hat{\Theta} \hat{H}(\mathbf{k}) \hat{\Theta}^{-1} = -\hat{H}(\mathbf{k}) & \text{aux points où } d_i(\mathbf{k}) = 0 \forall i. \end{cases} \quad (2.6)$$

Ces sous-espaces de la zone de Brillouin sont respectivement appelés sous-espaces pair et impair. Le Pfaffien y prend des valeurs remarquables :

Dans le sous-espace pair $\hat{H}(\mathbf{k}) \hat{\Theta} | u(\mathbf{k}) \rangle = E(\mathbf{k}) \hat{\Theta} | u(\mathbf{k}) \rangle$, et $\hat{\Theta} | u(\mathbf{k}) \rangle$ est donc vecteur propre de $\hat{H}(\mathbf{k})$ pour la même valeur propre que $|u(\mathbf{k})\rangle$. Pour les états occupés, l'énergie est négative : $\hat{\Theta} | u(\mathbf{k}) \rangle$ étant orthogonal à $|u(\mathbf{k})\rangle$, il est donc égal à une phase près à l'autre état occupé (seul cet état peut avoir une valeur propre négative), et donc $|P(\mathbf{k})| = 1$.

Dans le sous-espace impair $\hat{H}(\mathbf{k}) \hat{\Theta} | u(\mathbf{k}) \rangle = -E(\mathbf{k}) \hat{\Theta} | u(\mathbf{k}) \rangle$, et $\hat{\Theta} | u(\mathbf{k}) \rangle$ est donc vecteur propre de $\hat{H}(\mathbf{k})$ pour la valeur propre opposée à celle associée à $|u(\mathbf{k})\rangle$. Pour les états occupés, l'énergie est négative : $\hat{\Theta} | u(\mathbf{k}) \rangle$ étant orthogonal à $|u(\mathbf{k})\rangle$, il est donc égal à une phase près à un état d'énergie positive non occupé, et donc $|P(\mathbf{k})| = 0$.

Il existe dans la zone de Brillouin quatre points particuliers correspondant aux **moments invariants par renversement du temps** Γ_i qui, du fait de la périodicité du réseau réciproque, sont envoyés sur eux-mêmes par renversement du temps : $\hat{\Theta} \Gamma_i \hat{\Theta}^{-1} = \Gamma_i$. Cette identité assure par l'argument ci-dessus que $|P(\Gamma_i)| = 1$. On peut vérifier explicitement qu'en ces points $d_{ij}(\mathbf{k}) = 0 \forall (i, j)$. Ces points jouent un rôle crucial, et ils permettent de comprendre intuitivement pourquoi l'invariant topologique est simplement une parité par l'argument qui suit, et qui s'appuie également sur la propriété de parité $|P(\mathbf{k})| = |P(-\mathbf{k})|$.

2.4.3 Invariant topologique \mathbb{Z}_2

L'invariant topologique caractérisant chacune des phases est donné par la parité du nombre de paires de zéros du Pfaffien dans la zone de Brillouin [15]. Il appartient donc à l'ensemble \mathbb{Z}_2 .

Les zéros du Pfaffien en \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$ étant de vorticités opposées, deux paires de zéros $\pm\mathbf{k}_1$ et $\pm\mathbf{k}_2$ peuvent s'annihiler lorsque $\pm\mathbf{k}_1 = \mp\mathbf{k}_2$ [15] (il est possible de modifier la position des zéros en modifiant la valeur des paramètres (sans changer de phase)). En revanche une paire ne peut être détruite sans changer de phase : en effet, pour s'annihiler, deux zéros en $\pm\mathbf{k}$ devraient se rencontrer en un point Γ_i , mais ceci est interdit par le fait que $|P(\Gamma_i)| = 1$ est toujours vérifié pour des raisons de symétrie par rapport au renversement du temps. Ainsi, les deux phases sont distinguées par la parité du nombre de paires de zéros du Pfaffien.

2.4.4 Zéros du Pfaffien dans la zone de Brillouin - Transition de phase topologique

Sur la FIG.2.7 la différence notable se trouve à proximité des points $(x, y) = (\pm\frac{2\pi}{3}, 0)$. Les différences observées aux points $(x, y) = (\pm\frac{\pi}{3}, \pm\pi)$ n'ont pas d'importance car le nombre de paires de zéros supplémentaires est pair (= 2) et n'a donc pas d'incidence. Pour confirmer cette observation nous traçons le Pfaffien le long de l'axe $y = 0$ pour différentes valeurs de λ_V .

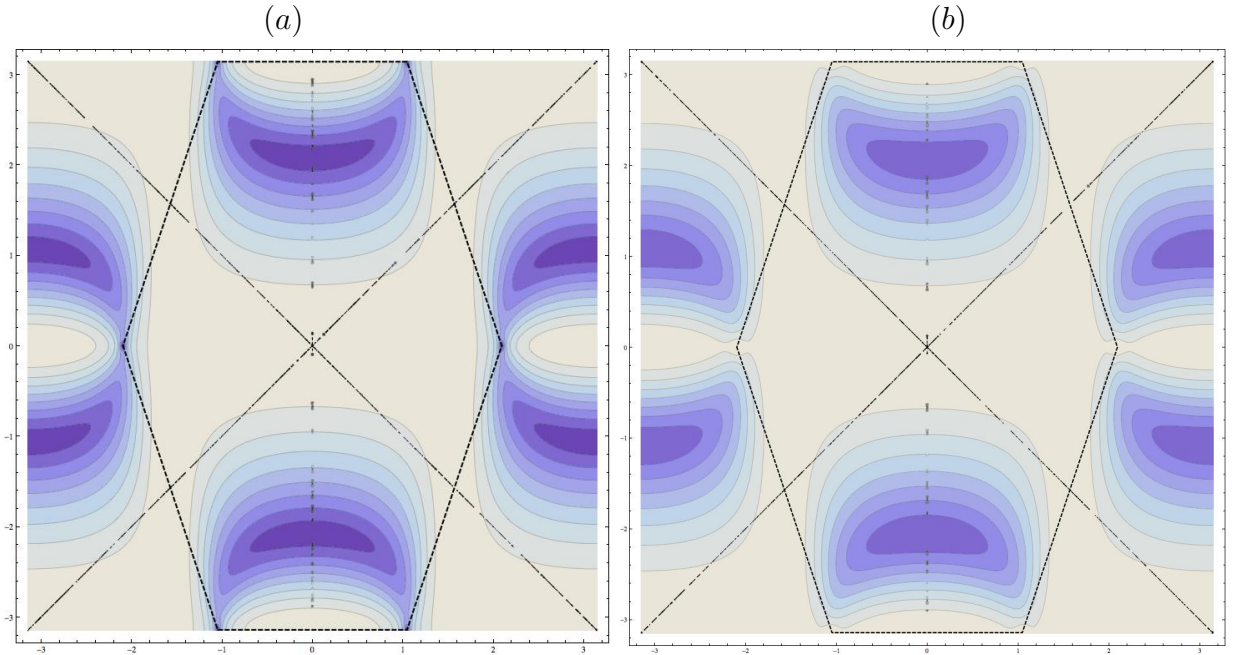


FIG.2.7 Module du Pfaffien $|P(\mathbf{k})|$ dans la zone de Brillouin pour (a) $\lambda_V = 0.1t$ et (b) $\lambda_V = 0.4t$. $\lambda_{SO} = 0.06t$ et $\lambda_R = 0.05t$ pour les deux figures. Le module est proche de 0 dans les zones sombres et proche de 1 dans les zones claires. Une différence nette aux points $(x, y) = (\pm\frac{2\pi}{3}, 0)$ est observée.

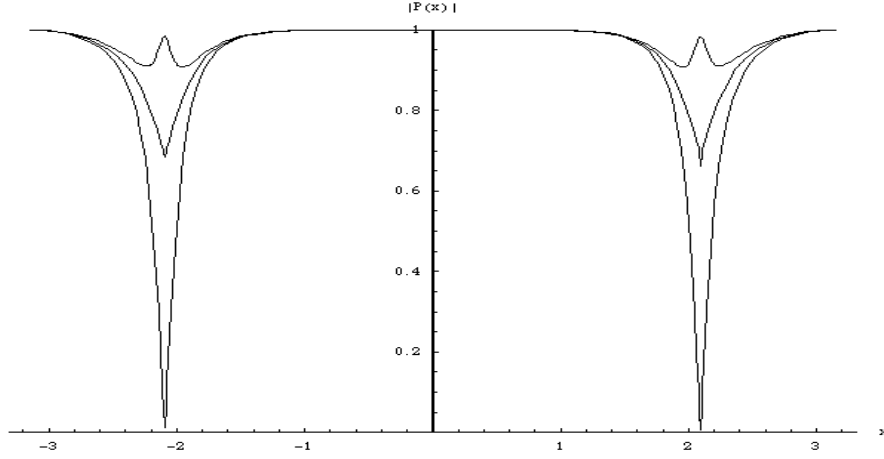


FIG.2.8 Module du Pfaffien à $y = 0$ pour $\lambda_{SO} = 0.06t$, $\lambda_R = 0.05t$ et différentes valeurs de λ_V ($\lambda_V = 0.1t$, $\lambda_V = 0.29365t$, $\lambda_V = 0.4t$). Lorsque λ_V augmente, on passe un seuil à partir duquel le Pfaffien ne s'annule pas : ceci traduit l'inversion de bande et donc le changement de phase.

Nous allons maintenant voir que cette distinction observées sur la FIG.2.7 et la FIG.2.8 entre les deux cas de figure correspond effectivement à la transition entre la phase isolante et la phase de Hall quantique de spin.

2.4.5 Pfaffien aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}'

Montrons par le calcul que la valeur du Pfaffien au point \mathbf{K} (nous savons que $P(\mathbf{K}) = P(\mathbf{K}')$) permet effectivement de distinguer les deux régions de l'espace des paramètres de part-et-d'autre de l'inversion de bande. Le [tableau \(2.3\)](#) nous donne les bandes occupées dans les deux phases :

Moment	Phase isolante	Phase de Hall quantique de spin	
\mathbf{K}	$ B \downarrow_s\rangle$	$\sqrt{\frac{1}{1+\mu_+^2}} [-i\mu_+ A \downarrow_s\rangle + B \uparrow_s\rangle]$	(2.7)
\mathbf{K}	$\sqrt{\frac{1}{1+\mu_-^2}} [i\mu_- A \downarrow_s\rangle + B \uparrow_s\rangle]$	$\sqrt{\frac{1}{1+\mu_-^2}} [i\mu_- A \downarrow_s\rangle + B \uparrow_s\rangle]$	
\mathbf{K}'	$ B \uparrow_s\rangle$	$\sqrt{\frac{1}{1+\mu_+^2}} [-i\mu_+ A \uparrow_s\rangle + B \downarrow_s\rangle]$	
\mathbf{K}'	$\sqrt{\frac{1}{1+\mu_-^2}} [i\mu_- A \uparrow_s\rangle + B \downarrow_s\rangle]$	$\sqrt{\frac{1}{1+\mu_-^2}} [i\mu_- A \uparrow_s\rangle + B \downarrow_s\rangle]$	

$$\text{où } \mu_{\pm} \equiv \frac{1}{3\lambda_R} \left(\pm\lambda_V + \sqrt{\lambda_V^2 + 9\lambda_R^2} \right).$$

Le calcul du Pfaffien revient à regarder les produits scalaires entre les états propres aux moments \mathbf{K} et \mathbf{K}' . De cette manière nous obtenons en utilisant $\mu_+\mu_- = 1$:

$$\begin{cases} P(\mathbf{K}) = P(\mathbf{K}') = \sqrt{\frac{1}{1+\mu_-^2}} & \text{dans la phase isolante,} \\ P(\mathbf{K}) = P(\mathbf{K}') = 0 & \text{dans la phase de Hall quantique de spin.} \end{cases} \quad (2.8)$$

Nous comprenons donc que cette modification des propriétés topologiques des états propres traduit directement l'inversion de bande. La phase où le Pfaffien possède des zéros en $x = \pm \frac{2\pi}{3}$ (c'est-à-dire aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}'), qui est la phase de Hall quantique de spin, et dans dans

laquelle l'interaction de spin-orbite domine la structure de bande aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}' , est dite topologiquement non triviale. Il faut se rappeler que nous avons introduit le potentiel de sous-réseau artificiellement pour permettre la distinction de ces deux phases. En réalité, λ_V est nul et le graphène est toujours dans la phase de Hall quantique de spin. Mais l'introduction de ce paramètre nous aura permis de comprendre que même si cette phase possède à première vue la structure de bande d'un isolant, elle n'est pas strictement équivalente à la phase isolante "traditionnelle" en ce qui concerne la topologie des états propres sur la zone de Brillouin. À l'examen des coefficients $d_{ij}(\mathbf{k})$ il est clair que le sous-espace impair comme nous l'avons défini plus haut est vide (λ_V est constant). Et pourtant nous avons trouvé une paire de zéros du Pfaffien. Ceci nous amène à redéfinir notre sous-espace impair comme l'ensemble des moments où le Pfaffien s'annule.

2.4.6 Expression de l'invariant topologique \mathbb{Z}_2

Nous avons vu que le nombre de paires de zéros du Pfaffien $P(\mathbf{k})$ de la matrice $\langle u_i(\mathbf{k}) | \hat{\Theta} | u_j(\mathbf{k}) \rangle$ dans la zone de Brillouin permet de distinguer les deux phases. Nous allons utiliser les méthodes de l'analyse complexe pour donner une expression de cet invariant. En analyse complexe, le nombre de zéros (avec multiplicité) d'une fonction f dans une région délimitée par un lacet γ est donné par l'expression suivante [4], conséquence du théorème de Cauchy :

$$n(\gamma) = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\gamma} \frac{f'(z)}{f(z)} dz.$$

Assimilons la zone de Brillouin à un sous-ensemble de \mathbb{C} . Il est ainsi possible de trouver le nombre η_{topo} de paires de zéros de P en calculant

$$\eta_{topo} = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\gamma_0} d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \ln [P(\mathbf{k})] \quad (2.9)$$

où γ_0 est un lacet entourant une moitié de la zone de Brillouin.

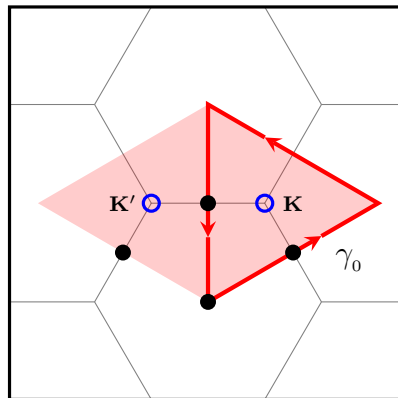


FIG.2.8 Chemin d'intégration dans l'espace réciproque. Une définition possible, différente de celle utilisée plus haut, de la zone de Brillouin est représentée en rose. Les points noirs représentent les moments invariants par renversement du temps et les cercles bleus repèrent les positions des moments de coordonnées réduites $(x, y) = (\pm \frac{2\pi}{3}, 0)$ où le Pfaffien s'annule dans la phase topologique.

Nous présentons en annexe une formulation plus élaborée de l'invariant topologique à partir de la notion de phase de Berry. Dans la partie suivante, nous étudions un système où l'effet Hall quantique de spin a été mesuré effectivement.

3 Inversion de bande et fermions de Dirac

Expérimentalement, la phase topologique n'est pas accessible dans le graphène à des températures réalistes. Ceci est dû à la faiblesse de l'interaction de spin-orbite, [qui s'explique facilement par le fait que le noyau de l'atome de carbone est un noyau léger](#). En revanche, les mesures réalisées par Roth *et al.* [9] ont mis en évidence cette phase dans un autre système : les puits quantiques de tellurure de mercure HgTe. Nous nous attacherons en suivant Bernevig *et al.* [10] à construire le plus simplement possible un Hamiltonien effectif pour comprendre ces observations. Nous verrons qu'à basse énergie, ces puits quantiques partagent de nombreuses propriétés avec le graphène.

3.1 Physique du graphène à basse énergie

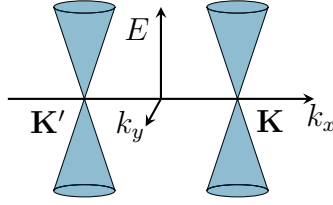


FIG.3.1 En l'absence d'interaction de spin-orbite (intrinsèque et extrinsèque), la relation de dispersion du graphène est donnée à proximité des moments \mathbf{K} et \mathbf{K}' par les cônes de Dirac.

Développons le [Hamiltonien \(2.2\)](#) autour des moments associés aux états de basse énergie : $\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3a}e_x$ et $\mathbf{K}' = -\frac{4\pi}{3a}e_x$. Ces états sont localisés dans l'espace réciproque à proximité des points \mathbf{K} et \mathbf{K}' , et sont dégénérés : un opérateur d'isospin $\hat{\tau}$ est introduit artificiellement pour caractériser cette dégénérescence. Les états $|\uparrow_\tau\rangle$ et $|\downarrow_\tau\rangle$ sont respectivement des états localisés dans l'espace réciproque à proximité des moments \mathbf{K} et \mathbf{K}' . Dans l'espace engendré par

$$B_\tau \otimes B_\sigma \otimes B_s = \{|\uparrow_\tau\uparrow\uparrow_s\rangle, |\uparrow_\tau\uparrow\downarrow_s\rangle, |\uparrow_\tau\downarrow\uparrow_s\rangle, |\uparrow_\tau\downarrow\downarrow_s\rangle, |\downarrow_\tau\uparrow\uparrow_s\rangle, |\downarrow_\tau\uparrow\downarrow_s\rangle, |\downarrow_\tau\downarrow\uparrow_s\rangle, |\downarrow_\tau\downarrow\downarrow_s\rangle\},$$

le Hamiltonien complet s'écrit [14] après un développement limité au premier ordre en p_x , p_y et q_x , q_y où $\mathbf{p} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{K}$ et $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{K}'$, et avec $\Delta_{SO} \equiv 3\sqrt{3}\lambda_{SO}$:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \hat{J} & 0 \\ 0 & \hat{K} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

avec

$$\hat{J} = \begin{bmatrix} \Delta_{SO} + \lambda_V & 0 & \hbar v_f(p_x - ip_y) & 0 \\ 0 & -\Delta_{SO} + \lambda_V & 2i\lambda_R & \hbar v_f(p_x - ip_y) \\ \hbar v_f(p_x + ip_y) & -2i\lambda_R & -\Delta_{SO} - \lambda_V & 0 \\ 0 & \hbar v_f(p_x + ip_y) & 0 & \Delta_{SO} - \lambda_V \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

et

$$\hat{K} = \begin{bmatrix} -\Delta_{SO} + \lambda_V & 0 & -\hbar v_f(q_x + iq_y) & 2i\lambda_R \\ 0 & \Delta_{SO} + \lambda_V & 0 & -\hbar v_f(q_x + iq_y) \\ -\hbar v_f(q_x - iq_y) & 0 & \Delta_{SO} - \lambda_V & 0 \\ -2i\lambda_R & -\hbar v_f(q_x - iq_y) & 0 & -\Delta_{SO} - \lambda_V \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Nous allons montrer que cette dispersion linéaire et l'inversion de bande [évoquée plus haut](#) se retrouvent dans le système qui a permis de confirmer expérimentalement l'existence de la phase de Hall quantique de spin : le puits quantique de tellurure de mercure HgTe.

3.2 Réalisation de la phase de Hall quantique de spin dans un puits quantique

3.2.1 Structure de bande dans les matériaux de volume

Il a été calculé par Bernevig *et al.* [10] et confirmé expérimentalement [9] qu'une réalisation de la phase de Hall quantique de spin était permise par un puits quantique formé d'une couche de tellure de mercure HgTe d'épaisseur d entre deux couches de tellure de cadmium CdTe. L'apparition de cette phase est liée à la structure de bande électronique des deux matériaux concernés, qui est représentée sur la FIG.3.2. Remarquons que les positions relatives des bandes Γ_6 et Γ_8 y sont inversées, ce qui va constituer le point de départ de notre raisonnement.

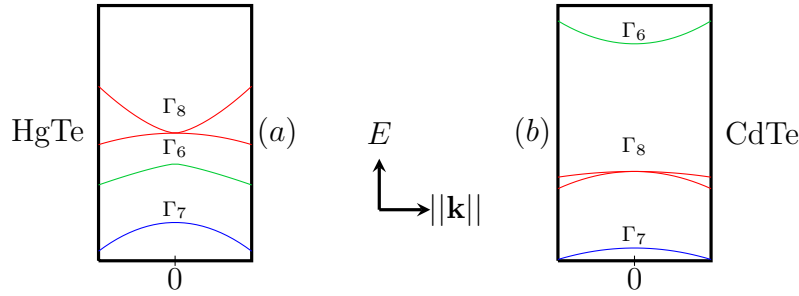


FIG.3.2 Structure de bande (a) du tellure de mercure HgTe et (b) du tellure de cadmium CdTe au voisinage du point Γ ($\mathbf{k} = 0$).

3.2.2 Argument qualitatif sur l'effet des jonctions

L'inversion des positions relatives des bandes Γ_6 et Γ_8 dans le puits de tellure de mercure HgTe par rapport au tellure de cadmium CdTe a une importante conséquence sur les bandes hybridées E_1 et H_1 représentées en gras sur la FIG.3.3. L'état du puits est hybridé entre HgTe et CdTe. Plus le puits est épais, plus sa structure de bande est influencée par HgTe et moins elle l'est par CdTe. Nous verrons par la suite que E_1 est construit à partir de Γ_6 et certains états de Γ_8 alors que H_1 correspond strictement aux autres états de Γ_8 . Par conséquent l'énergie de H_1 est d'autant plus élevée que l'épaisseur d est importante, alors que celle de E_1 décroît au contraire avec d . Il existe donc une épaisseur critique d_c correspondant à une inversion de bande. Nous allons voir en construisant un Hamiltonien effectif que cette inversion de bande est liée à la présence d'un terme de spin-orbite. Nous pouvons nous attendre, d'après ce que nous connaissons du graphène, à ce que cette inversion de bande soit liée à une transition de phase topologique.

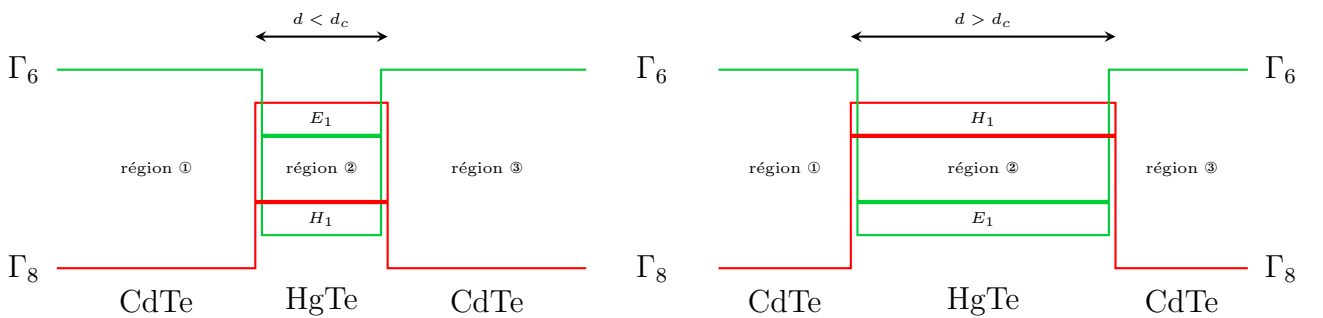


FIG.3.3 Modification de la structure de bande de l'hétérostructure. Lorsque l'épaisseur d de la couche de tellure de mercure HgTe dépasse un seuil d_c , les positions (au point $\mathbf{k}_\perp \equiv k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y = \mathbf{0}$) des bandes d'énergies H_1 et E_1 des états confinés dans le puits quantique (dessinées en gras) s'inversent. Dans les deux cas la phase est isolante.

3.2.3 Hamiltonien de Kane

Forts de notre argument sur l'inversion des bandes séparant deux phases isolantes, nous montrons que l'analogie entre le graphène et le puits quantique est tout à fait valable. De plus, les atomes mis en jeu ici étant nettement plus lourds que le carbone, l'interaction de spin-orbite est considérablement plus forte, expliquant l'observation expérimentale des propriétés topologiques du système.

Utilisons le modèle de Kane pour décrire la structure des bandes qui nous intéressent. Le modèle de Kane est un modèle effectif de basse énergie. Il permet de décrire les semiconducteurs ayant une asymétrie d'inversion dans leur structure [6], ce qui entraîne l'existence d'un terme de spin-orbite intrinsèque.

La bande Γ_6 correspond à des états s et la bande Γ_8 à des états p : définissons la base

$$B_K \equiv \{|\Gamma_6, \frac{1}{2}\rangle, |\Gamma_6, -\frac{1}{2}\rangle, |\Gamma_8, \frac{3}{2}\rangle, |\Gamma_8, \frac{1}{2}\rangle, |\Gamma_8, -\frac{1}{2}\rangle, |\Gamma_8, -\frac{3}{2}\rangle\}. \quad (3.4)$$

Dans le modèle de Kane le Hamiltonien \hat{H}_K y est donné par [10]

$$\hat{H}_K = \begin{bmatrix} E_C \hat{\mathbb{1}}_2 + \hat{H}_C & \hat{T} \\ \hat{T}^\dagger & E_V \hat{\mathbb{1}}_4 + \hat{H}_V \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

\hat{H}_K est valable dans les trois régions et s'exprime à l'aide des opérateurs suivants :

$$\hat{H}_C \equiv \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \hat{\mathbb{1}}_2, \quad \hat{H}_V \equiv -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} (\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2) \hat{\mathbb{1}}_4 + \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_2 (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{S}})^2, \quad (3.6)$$

$$\hat{T} \equiv \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} P k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & \frac{1}{\sqrt{6}} P k_+ & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} P k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & \frac{1}{\sqrt{2}} P k_+ \end{bmatrix}, \quad (3.7)$$

où P est l'élément de matrice de Kane entre les bandes s et p , que nous traiterons comme un paramètre phénoménologique du système. m_0 et m^* sont respectivement la masse au repos de l'électron et sa masse effective dans la bande de conduction, γ_1 et γ_2 sont les paramètres de Luttinger de la bande de valence [10] et sont des constantes sans dimension dépendant de la nature du matériau, enfin k_\pm est défini de manière habituelle par $k_\pm = k_x \pm i k_y$. Il convient aussi de préciser que $\hat{\mathbf{S}}$ est le vecteur d'opérateurs (4×4) de spin $\frac{3}{2}$ adimensionné dont les composantes s'expriment à l'aide des matrices de Pauli et de la matrice

$$\hat{\varphi} = \frac{2}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

par

$$\hat{S}_x = \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_x & \hat{\varphi}^\dagger \\ \hat{\varphi} & \hat{\sigma}_x \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_y & (i\hat{\varphi})^\dagger \\ i\hat{\varphi} & \hat{\sigma}_y \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 3 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -3 \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

Pour obtenir la forme des bandes E_1 et H_1 nous utilisons la théorie des perturbations au voisinage du point $\mathbf{k}_\perp = \mathbf{0}$ où $\mathbf{k}_\perp \equiv k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$. C'est dans cette région que le gap entre les bandes Γ_6 et Γ_8 est le plus faible. Sont présentés en annexe les calculs permettant de construire un Hamiltonien effectif de Dirac à partir du Hamiltonien de Kane. Ces calculs montrent que trois bandes d'énergie notées H_1 , E_1 et L_1 sont issues de l'hybridation des bandes des deux matériaux.

3.2.4 Hamiltonien de Dirac

Les calculs réalisés en annexe nous permettent de ne pas considérer la bande L_1 qui est éloignée des deux autres en énergie (nous savons que l'inversion de bande attendue ne la concernera pas) : travaillons dans la base $B_{EH} = \{|E_1, +\rangle, |H_1, +\rangle, |E_1, -\rangle, |H_1, -\rangle\}$.

Le Hamiltonien effectif \hat{H}_{eff} est calculé en éliminant le degré de liberté selon z :

$$\hat{H}_{\text{eff}(i,j)} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \psi_i(z) | \hat{H}_K | \psi_j(z) \rangle, \quad (3.10)$$

où les ψ_i sont les éléments de la base B_{EH} . Cela revient à calculer la perturbation au premier ordre. Les éléments de matrice se calculent numériquement [10] mais nous pouvons néanmoins dégager la forme de la matrice de manière qualitative (ce qui est fait en annexe), d'une part en repérant les intégrales qui vont s'annuler par des considérations de parité, d'autre part en s'intéressant à la dépendance (constante, linéaire ou quadratique) des éléments de matrice non nuls par rapport aux composantes planaires k_x et k_y du vecteur d'onde. Pour cela il est essentiel de se remémorer les propriétés de parité des fonctions d'onde f_i . Après intégration numérique un Hamiltonien diagonal par blocs est obtenu [10] :

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \begin{bmatrix} \epsilon_k + W(k) & Ak_- & 0 & 0 \\ Ak_+ & \epsilon_k - W(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_k + W(k) & -Ak_+ \\ 0 & 0 & -Ak_- & \epsilon_k - W(k) \end{bmatrix}, \quad (3.11)$$

avec $\epsilon_k = C - D(k_x^2 + k_y^2)$ et $W(k) = M - B(k_x^2 + k_y^2)$ et où A , B , C , D et M sont des paramètres issus de l'intégration numérique.

Procédons enfin à une transformation unitaire (correspondant à une rotation de π des axes x et y dans le bloc du bas) $\hat{H}_{\text{eff}} \rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{H}_{\text{eff}} \hat{U}$ avec l'opérateur

$$\hat{U} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbb{1}}_2 & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{bmatrix}.$$

Finalement le Hamiltonien effectif obtenu est diagonal par blocs et s'exprime en fonction d'un hamiltonien de Dirac $\hat{H}_D(\mathbf{k})$:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \begin{bmatrix} \hat{H}_D(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \hat{H}_D^*(\mathbf{k}) \end{bmatrix}, \quad (3.12)$$

où

$$\hat{H}_D(\mathbf{k}) \equiv \epsilon_k \hat{\mathbb{1}}_2 + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (3.13)$$

avec le vecteur $\mathbf{d}(\mathbf{k}) \equiv A(k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y) + W(k) \mathbf{e}_z$.

Il est observé numériquement que M , qui s'apparente à une pseudo-masse dans le hamiltonien de Dirac \hat{H}_D (la différence d'énergie entre les deux bandes au point $\mathbf{k}_\perp = \mathbf{0}$ est égale à $2M$), change de signe lorsque l'épaisseur du puits atteint la valeur $d = d_c$ [10]. Il se produit donc une

inversion de bande. De plus la dispersion est linéaire à basse énergie : ceci est très similaire aux observations que nous avons pu faire dans le graphène. En effet le Hamiltonien effectif que nous venons d'écrire présente un terme d'interaction spin-orbite où le spin est couplé au moment. Roth *et al.* ont confirmé expérimentalement [9] par des mesures de résistance dans des barres de Hall que l'interaction de spin-orbite est suffisamment forte pour permettre l'apparition de la phase de Hall quantique de spin. La phase topologique a donc une existence bien réelle.

4 Conclusion

Nous avons donc montré que dans un isolant bidimensionnel, il peut y avoir une inversion dans la structure de bande du fait de l'interaction de spin-orbite. De part et d'autre de cette inversion existent deux phases isolantes non équivalentes, qui se distinguent l'une de l'autre par les propriétés de leurs états propres par rapport au renversement du temps.

Si l'interaction de spin-orbite est suffisamment intense, il est possible d'observer des propriétés remarquables dans l'une des deux phases, dite non triviale. Cette interaction de spin-orbite couple le spin des électrons à un champ magnétique effectif, ce qui induit l'existence d'états de conduction aux bords de l'échantillon, les électrons de spins opposés se propageant en sens opposé.

Concernant la possibilité de l'extension des considérations présentées dans ce rapport à trois dimensions, l'existence d'isolants topologiques 3D a été pour la première fois prédite à l'été 2006, puis confirmée expérimentalement en 2008 [17] dans le BiSb. En trois dimensions, il convient de faire la différence entre isolants topologiques forts et faibles. Un isolant topologique faible peut être vu et même construit comme un empilement de couches d'isolant topologiques 2D, alors qu'un isolant topologique fort n'est pas strictement équivalent à un isolant topologique 2D [18].

Clairement, le domaine des isolants topologiques est encore très jeune et même si ce rapport ne présente qu'un modeste aperçu des connaissances actuelles sur le sujet, nous pouvons probablement en dire autant de ces connaissances par rapport à ce qu'il reste encore à découvrir.

Annexes

A Quelques considérations sur l'interaction de spin-orbite

A.1 Généralités

A.1.1 De l'équation de Dirac vers l'équation de Pauli

Nous rappelons brièvement dans ce paragraphe comment est établie l'expression de l'interaction de spin-orbite par un un passage à la limite semi-classique sur l'équation de Dirac. L'équation de Dirac s'écrit en notation covariante (où A_μ est le quadri-potentiel électromagnétique) :

$$[i\hbar\gamma^\mu(\partial_\mu + ieA_\mu) - m]\psi = 0 \quad (\text{A.1})$$

où $\psi = \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix}$ est une fonction d'onde à quatre (2×2) composantes. φ et χ sont appelés spineurs de Dirac.

Nous obtenons, en utilisant la représentation habituelle des matrices de Dirac

$$\gamma^0 \equiv \begin{bmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{bmatrix}, \quad \gamma^i \equiv \begin{bmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{bmatrix},$$

le système suivant [1] (où ϵ désigne l'énergie de la particule) :

$$\begin{cases} \left(\epsilon - e\hat{A}_0 - mc \right) \varphi = c \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right) \right) \chi, \\ \left(\epsilon - e\hat{A}_0 + mc \right) \chi = c \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right) \right) \varphi. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

En notant $\bar{E} = \epsilon - mc^2$ l'approximation suivante au premier ordre en $(\frac{\bar{E} - e\hat{A}_0}{2mc^2})$ est obtenue :

$$\chi = \left[1 - \frac{\bar{E} - e\hat{A}_0}{2mc^2} \right] \left[\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2mc} \right] \varphi. \quad (\text{A.3})$$

En utilisant l'identité $(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{A}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{B}}) = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{B}} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}})$ vérifiée par des vecteurs d'opérateurs $\hat{\mathbf{A}}$ et $\hat{\mathbf{B}}$ commutant avec les matrices de Pauli, et en changeant de variable [2] par $\varphi_s = \left(1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}}{8m^2c^2} \right) \varphi$, nous obtenons l'équation de Schrödinger semi-classique (équation de Pauli) $E_s\varphi_s = \hat{H}_s\varphi_s$ avec

$$\hat{H}_s = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + e\hat{A}_0(\mathbf{r}) + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 \hat{A}_0 + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left(\nabla \hat{A}_0 \times \hat{\mathbf{p}} \right). \quad (\text{A.4})$$

Nous reconnaissons, en plus du Hamiltonien classique et du terme dit d'interaction de contact proportionnel à $\nabla^2 \hat{A}_0$ (le laplacien d'un potentiel coulombien est uniquement non nul au point où se trouve la charge produisant le potentiel), le terme de spin-orbite qui couple le spin au mouvement de la particule par un terme proportionnel à $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \left(\nabla \hat{A}_0 \times \hat{\mathbf{p}} \right)$.

A.1.2 Spin-orbite dans un nuage électronique

Intéressons-nous à l'interaction de spin-orbite dans un atome. En négligeant les interactions électron-électron au sein d'un nuage électronique, un électron est soumis à un potentiel $V(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r}$ exercé par le noyau. Nous avons alors, en notant $\hat{H}_{so} = \lambda(r)\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$, et en utilisant $A_0(r) = -cV(r)$:

$$\lambda(r) = \left(\frac{\alpha \hbar}{2c} \right) \left(\frac{Z}{m_e^2 r^3} \right) \quad (\text{A.5})$$

où $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ est la constante de structure fine.

L'expression du facteur λ , qui donne l'intensité de l'interaction spin-orbite, montre que celle-ci est avant tout importante pour les atomes lourds. En effet, $\frac{1}{r^3}$ est en valeur moyenne inversement proportionnel au volume occupé par une orbitale atomique, lequel varie comme $a_B^3 = \left[\frac{\hbar}{c Z \alpha m_e} \right]^3$. Ainsi l'intensité de l'interaction spin-orbite croît proportionnellement à Z^4 [3], la rendant prépondérante pour les atomes lourds :

$$\lambda(r) \simeq 2 \frac{m_e c^2}{\hbar^2} (Z\alpha)^4. \quad (\text{A.6})$$

A.2 Interaction de spin-orbite dans les solides

Comme le calcul perturbatif effectué à partir de l'équation de Dirac nous l'a appris, l'interaction de spin-orbite a souvent pour effet de lever une dégénérescence présente dans le formalisme non relativiste. Généralement traités en théorie des perturbations, ses effets peuvent se révéler prépondérants dans certains matériaux comportant des atomes lourds, comme dans ceux qui nous intéressent dans cette étude.

Pour les interactions de type Rashba et Dresselhaus nous écrivons le Hamiltonien de spin-orbite comme un terme d'interaction entre un champ magnétique effectif et le moment magnétique intrinsèque de l'électron : $\hat{H}_{SO} = -\hat{\mathbf{B}}_{\text{eff}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_s$ où $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -\frac{g_s}{2} \mu_B \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ avec g_s le facteur de Landé électronique et μ_B le magnéton de Bohr.

A.2.1 Spin-orbite de type Rashba

Considérons un gaz d'électrons bidimensionnel confiné au niveau d'une hétérostructure. Le potentiel de confinement est relié à un champ électrique \mathbf{E} transverse au système, qui induit une interaction de spin-orbite [11] pour laquelle le champ magnétique effectif est calculé par transformation de Lorentz :

$$\mathbf{B}_{\text{SIA}} = -\frac{\hbar}{m_{\text{eff}} c^2} (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \quad (\text{A.7})$$

où l'indice **SIA** signifie "Structure Inversion Asymmetry". En effet le potentiel de confinement doit être asymétrique (par rapport à une inversion) pour que ce terme apparaisse.

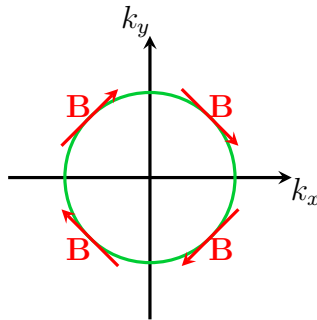


FIG.A.1 Champ magnétique effectif pour un terme de spin-orbite de type Rashba.

A.2.2 Spin-orbite de type Dresselhaus

Considérons un gaz d'électrons évoluant dans une structure cristalline. Si cette structure ne possède pas de symétrie d'inversion, alors il existe un champ magnétique effectif \mathbf{B}_{BIA} [12] où l'indice signifie "Bulk Inversion Asymmetry".

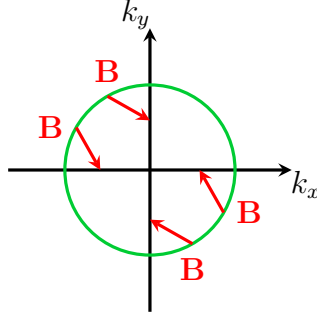


FIG.A.2 Champ magnétique effectif pour un terme de spin-orbite de type Dresselhaus [13].

B Formalisme de Landauer-Büttiker du transport électronique

B.1 Formalisme de Landauer

Le formalisme de Landauer s'attache à décrire le transport électronique dans un fil sans en examiner la structure en détail. Pour ceci, attribuons à la portion de fil qui nous intéresse une matrice de diffusion qui décrit le transport en terme de réflexion et de transmission des fonctions d'onde. Nous pouvons ainsi en déduire la conductance de la portion de fil.

B.1.1 Conductance intrinsèque d'une portion de fil pour un mode de transport

Soit une portion de fil décrite par une matrice de diffusion \hat{S} . Nous notons ψ^L et ψ^R les amplitudes respectives des fonctions d'onde se déplaçant vers la gauche et vers la droite. Ainsi ψ_1^R et ψ_2^L sont les fonctions d'onde entrantes, ψ_1^L et ψ_2^R sont les fonctions d'onde sortantes. Ces amplitudes sont reliées par la matrice de diffusion \hat{S} :

$$\begin{bmatrix} \psi_1^L \\ \psi_2^R \end{bmatrix} = \hat{S} \begin{bmatrix} \psi_1^R \\ \psi_2^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r & t' \\ t & r' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1^R \\ \psi_2^L \end{bmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

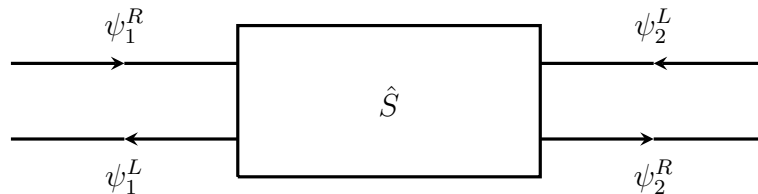


FIG.B.1 Fonctions d'onde entrantes et sortantes au niveau du conducteur décrit par la matrice de diffusion.

Le courant étant donné par $\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$, il est possible d'écrire une relation analogue pour les courants associés, en définissant des coefficients de transmission $T = tt^*$, $T' = t't'^*$ et de réflexion $R = rr^*$, $R' = r'r'^*$ en intensité :

$$\begin{bmatrix} j_1^L \\ j_2^R \end{bmatrix} = \hat{M} \begin{bmatrix} j_1^R \\ j_2^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R & T' \\ T & R' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1^R \\ j_2^L \end{bmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Par conservation du courant, la matrice \hat{S} est unitaire : en notant l'équation (B.1) par $|\psi_{out}\rangle = \hat{S} |\psi_{in}\rangle$ il vient

$$\begin{aligned} \langle \psi_{out} | \psi_{out} \rangle &= \langle \psi_{in} | \psi_{in} \rangle \\ \Leftrightarrow \langle \psi_{in} | \hat{S}^\dagger \hat{S} | \psi_{in} \rangle &= \langle \psi_{in} | \psi_{in} \rangle \\ \Leftrightarrow \hat{S}^\dagger \hat{S} &= \hat{\mathbb{1}}. \end{aligned}$$

De plus la matrice \hat{M} est invariante par renversement du temps en champ magnétique nul : l'équation (B.2) s'écrit

$$\begin{bmatrix} j_1^R \\ j_2^L \end{bmatrix} = \hat{M} \begin{bmatrix} j_1^L \\ j_2^R \end{bmatrix}$$

après renversement du temps en l'absence de champ magnétique, or l'égalité

$$\begin{bmatrix} j_1^R \\ j_2^L \end{bmatrix} = \hat{M}^\dagger \begin{bmatrix} j_1^L \\ j_2^R \end{bmatrix}$$

est également vérifiée par unitarité de \hat{M} .

Ainsi $\hat{M} = \hat{M}^\dagger$, d'où $T = T'$.

Nous avons finalement pour les coefficients de transmission et de réflexion en intensité les relations suivantes : $R = R'$, $T = T'$, $R + T = R' + T' = 1$.

L'intensité est ainsi donnée en terme des courants entrants par

$$I = j_1^R - j_1^L = j_2^R - j_2^L = T(j_1^R - j_2^L). \quad (\text{B.3})$$

En notant $\delta\mu = e \delta V$ la différence de potentiel chimique qui se crée entre les deux extrémités du conducteur, il y a une différence de densité électronique $n_1 - n_2 = \frac{dn}{dE} \Big|_{\epsilon_f} e \delta V$.

Or $n_1 = \frac{1}{ev_f}(j_1^R + j_1^L)$ et $n_2 = \frac{1}{ev_f}(j_2^R + j_2^L)$, d'où $n_1 - n_2 = \frac{2}{ev_f}R(j_1^R - j_2^L)$.

Le fait qu'un unique mode de propagation soit considéré implique que les fils reliés au conducteur sont infiniment fins : le problème est monodimensionnel. D'où

$$\frac{dn}{dE} \Big|_{\epsilon_f} = \frac{dn}{dk} \frac{dk}{dE} \Big|_{\epsilon_f} = \frac{S}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2 k_f} = \frac{S}{\hbar v_f}, \quad (\text{B.4})$$

où S (pris égal à 2) est le facteur de dégénérescence dû au spin.

Ainsi nous obtenons

$$\delta V = \frac{\hbar}{e^2} R(j_1^R - j_2^L), \quad (\text{B.5})$$

D'où la formule de Landauer pour la conductance à un mode :

$$G = \frac{I}{\delta V} = \frac{e^2 T}{\hbar R}. \quad (\text{B.6})$$

Nous notons que la formule de Landauer donne une conductance longitudinale : dans ce calcul la différence de potentiel considérée est parallèle au sens de propagation du courant.

B.1.2 Conductance à deux terminaux

Il faut également savoir que si la portion de fil est reliée à chaque extrémité à des réservoirs de potentiels chimiques respectifs μ_1 et μ_2 alors en calculant la conductance entre les deux réservoirs nous obtenons

$$G_C = \frac{e^2}{h} T. \quad (\text{B.7})$$

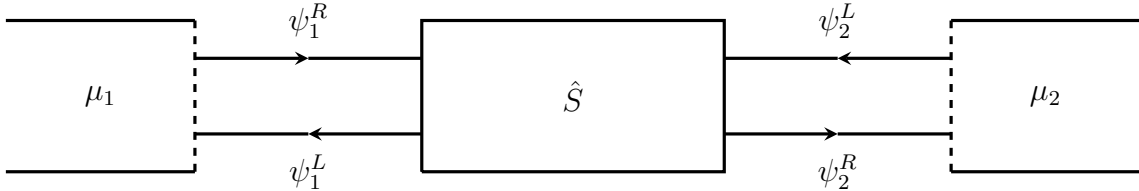


FIG.B.2 Conducteur relié à deux réservoirs.

Ce résultat peut se montrer de la manière suivante : nous considérons les contacts entre les réservoirs et le fil comme parfaits, et nous calculons la conductance $G = \frac{Ie}{\mu_1 - \mu_2}$.

Par définition nous avons pour $i = 1$ ou 2 : $I = j_i^R - j_i^L$, soit

$$I = ev_f(n_i^R - n_i^L) = ev_f \int \left(\frac{dn_i^R}{dE} f_i^R(E) - \frac{dn_i^L}{dE} f_i^L(E) \right) dE. \quad (\text{B.8})$$

De la même manière que précédemment $I = \frac{e}{h}(\mu_1 - \mu_2)T$, d'où l'équation (B.7).

Ainsi la conductance à deux terminaux, qui est la conductance mesurée expérimentalement, est plus faible que la conductance intrinsèque (en effet $R \leq 1$). La différence entre les deux conductances est due à l'existence des résistances de contact (le changement de géométrie induit une résistance non nulle au niveau du contact).

B.2 Formalisme de Büttiker

B.2.1 Position du problème - Matrice de conductance

Nous nous intéressons au cas dit à N terminaux où la portion de fil est reliée à N réservoirs de potentiels chimiques respectifs μ_i (voir la FIG.B.3 pour un schéma du cas à quatre terminaux).

Le courant circulant dans un conducteur où la densité électronique est égale à n est donné à température nulle par un calcul similaire à celui réalisé précédemment :

$$I = env_f = ev_f \int f(E) \frac{dn}{dE} \Big|_{\epsilon_f} dE = \frac{e}{h} \mu, \quad (\text{B.9})$$

où nous avons utilisé l'identité $\int f(E) dE = \mu$ valable à température nulle pour la statistique de Fermi-Dirac.

En sommant les contributions des courants réfléchis et transmis arrivant des différents terminaux, un courant circulant au niveau du contact k s'écrit alors [8] :

$$I_k = \frac{e}{h} \left[(1 - R_{kk})\mu_k - \sum_{j \neq k} T_{kj}\mu_j \right], \quad (\text{B.10})$$

où R_{kk} est le coefficient de réflexion du contact k , et T_{ij} le coefficient de transmission du réservoir j vers le réservoir i . Nous écrivons alors la matrice de conductance qui exprime les courants en fonction des potentiels :

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ \vdots \\ I_N \end{bmatrix} = \frac{e}{h} \begin{bmatrix} (1 - R_{11}) & -T_{12} & \cdots & -T_{1N} \\ -T_{21} & (1 - R_{22}) & \cdots & -T_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -T_{N1} & -T_{N2} & \cdots & (1 - R_{NN}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_N \end{bmatrix} \quad (\text{B.11})$$

Les courants étant nuls à l'équilibre, *i.e.* quand les potentiels chimiques sont égaux, la somme des éléments de chaque ligne de la matrice est nulle. Par conservation du courant total, la somme des éléments de chaque colonne est également nulle.

B.2.2 Exemple du conducteur à quatre terminaux

Intéressons-nous au calcul de la conductance dans le cas à quatre terminaux. Nous fixons les courants en choisissant $I_1 + I_3 = I_2 + I_4 = 0$.

Ce choix permet de se ramener à deux variables pour les potentiels chimiques :

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \end{bmatrix} = \frac{e}{h} \begin{bmatrix} \alpha_{11} & -\alpha_{12} \\ -\alpha_{21} & \alpha_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 - \mu_3 \\ \mu_2 - \mu_4 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.12})$$

En notant $S = T_{12} + T_{14} + T_{32} + T_{34} = T_{21} + T_{41} + T_{23} + T_{43}$ nous trouvons après calcul

$$\begin{aligned} \alpha_{11} &= (1 - R_{11}) - \frac{1}{S}(T_{12} + T_{14})(T_{41} + T_{21}), & \alpha_{12} &= \frac{1}{S}(T_{12}T_{34} - T_{14}T_{32}), \\ \alpha_{21} &= \frac{1}{S}(T_{21}T_{43} - T_{41}T_{23}), & \alpha_{22} &= (1 - R_{22}) - \frac{1}{S}(T_{21} + T_{23})(T_{32} + T_{12}). \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

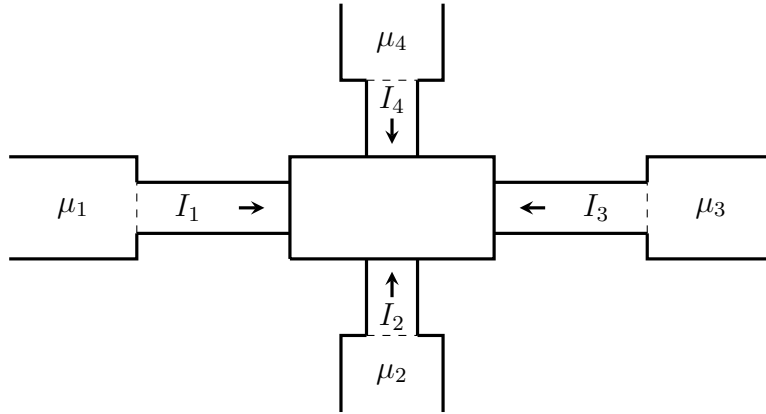


FIG.B.3 Conducteur à quatre terminaux.

La configuration à quatre terminaux permet de mesurer une conductance transversale : pour cela nous considérons que les terminaux ② et ④ sont des sondes à potentiel et donc que $I_2 = I_4 = 0$.

Nous obtenons alors la conductance transversale, avec $I_1 = I = -I_3$:

$$G_{1 \rightarrow 3}^{(24)} = \frac{eI}{\mu_2 - \mu_4} = e \frac{\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21}}{\alpha_{21}}, \quad (\text{B.14})$$

où la notation $G_{i \rightarrow j}^{(mn)}$ signifie que le courant circule de i vers j et que la différence de potentiel considérée pour mesurer la conductance est calculée entre les terminaux m et n .

C Puits quantique : calcul perturbatif du Hamiltonien effectif

Cet annexe présente les calculs intermédiaires réalisés sur le puits quantique de tellure de mercure HgTe. Nous nous appuyons sur le [modèle de Kane](#).

C.1 États propres du Hamiltonien à moment nul

Définissons les opérateurs

$$\hat{F} \equiv E_C(z) + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_z^2, \quad \hat{U} \equiv E_V(z) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1(z) k_z^2, \quad \hat{V} \equiv \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_2(z) k_z^2.$$

Au point $\mathbf{k}_\perp = \mathbf{0}$ le [Hamiltonien de Kane \(3.5\)](#) s'écrit

$$\hat{H}_K(\mathbf{k}_\perp = \mathbf{0}) = \begin{bmatrix} \hat{F} & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & 0 & 0 \\ 0 & \hat{F} & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & 0 \\ 0 & 0 & \hat{U} + \hat{V} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & 0 & 0 & \hat{U} - \hat{V} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} P k_z & 0 & 0 & \hat{U} - \hat{V} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{U} + \hat{V} \end{bmatrix}. \quad (\text{C.1})$$

Notons $f_i(z)$ les six composantes de la fonction d'onde sur les [états de la base](#) (voir [éq. \(3.4\)](#)). Dans la suite nous noterons $Q^{(\text{Cd})}$ et $Q^{(\text{Hg})}$ les valeurs d'un paramètre Q respectivement dans le tellure de cadmium CdTe et le tellure de mercure HgTe.

→ Bande H_1 : Nous pouvons immédiatement remarquer que les états $|\Gamma_8, \pm \frac{3}{2}\rangle$ sont états propres du Hamiltonien à l'ordre zéro. Ces états sont respectivement les états de spin up et down de la bande H_1 . Ainsi pour $i = 3$ ou 6 , f_i est solution de l'équation de Schrödinger

$$E_V(z) f_i(z) + \frac{\hbar^2}{2m_0} [\gamma_1(z) - 2\gamma_2(z)] \frac{d^2 f_i}{dz^2} = E f_i(z),$$

qui a pour solution dans les différentes régions :

$$f_i(z) = \begin{cases} c_i e^{\beta(E)z} & \text{dans la région } \textcircled{1}, \\ v_i \cos(\kappa(E)z) & \text{dans la région } \textcircled{2}, \\ c_i e^{-\beta(E)z} & \text{dans la région } \textcircled{3}. \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

Les paramètres $\beta(E)$ et $\kappa(E)$ sont donnés par

$$\beta^2(E) = \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{E - E_V^{(\text{Cd})}}{\gamma_1^{(\text{Cd})} - 2\gamma_2^{(\text{Cd})}}, \quad \kappa^2(E) = \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{E_V^{(\text{Hg})} - E}{\gamma_1^{(\text{Hg})} - 2\gamma_2^{(\text{Hg})}}.$$

Il est possible de tirer des conditions de raccordement la relation $\frac{v_i}{c_i} = \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta(E)d}}{\cos(\frac{1}{2}\kappa(E)d)}$, d'où

$$\frac{(\gamma_1^{(\text{Hg})} - 2\gamma_2^{(\text{Hg})}) \kappa(E)}{(\gamma_1^{(\text{Cd})} - 2\gamma_2^{(\text{Cd})}) \beta(E)} = \cot \left(\frac{1}{2} \kappa(E) d \right). \quad (\text{C.3})$$

Finalement, par substitution, nous obtenons l'équation

$$\frac{(\gamma_1^{(\text{Hg})} - 2\gamma_2^{(\text{Hg})}) (E - E_V^{(\text{Hg})})}{(\gamma_1^{(\text{Cd})} - 2\gamma_2^{(\text{Cd})}) (E - E_V^{(\text{Cd})})} = -\cot^2 \left[\left[\frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{(E_V^{(\text{Hg})} - E)}{(\gamma_1^{(\text{Hg})} - 2\gamma_2^{(\text{Hg})})} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{d}{2} \right] \quad (\text{C.4})$$

qui est intégrable numériquement pour obtenir la valeur de l'énergie.

→ Bandes E_1 et L_1 : Nous remarquons que les états $|\Gamma_6, \frac{1}{2}\rangle$ et $|\Gamma_8, \frac{1}{2}\rangle$ d'une part, les états $|\Gamma_6, -\frac{1}{2}\rangle$ et $|\Gamma_8, -\frac{1}{2}\rangle$ d'autre part, sont couplés entre eux mais n'interagissent pas avec les autres états à l'ordre zéro. Ces combinaisons respectives correspondent aux états de spin up et down des bandes E_1 et L_1 . Ainsi pour le couple ordonné $(j, k) = (1, 4)$ ou $(2, 5)$ nous avons le système d'équations couplées suivant :

$$\begin{cases} \left[E_C(z) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \right] f_j(z) - iP \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{df_k}{dz} = E f_j(z), \\ -iP \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{df_j}{dz} + \left[E_V(z) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1(z) + 2\gamma_2(z)) \frac{d^2}{dz^2} \right] f_k(z) = E f_k(z). \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

Les fonctions d'onde f_j et f_k sont données par

$$f_j(z) = \begin{cases} c_j e^{\alpha(E)z} & \text{dans la région ①,} \\ 2v_j \cosh(\delta(E)z) & \text{dans la région ②,} \\ c_j e^{-\alpha(E)z} & \text{dans la région ③,} \end{cases} \text{ et } f_k(z) = \begin{cases} c_k e^{\alpha(E)z} & \text{dans la région ①,} \\ 2v_k \sinh(\delta(E)z) & \text{dans la région ②,} \\ -c_k e^{-\alpha(E)z} & \text{dans la région ③.} \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

pour E_1 et

$$f_j(z) = \begin{cases} c_j e^{\alpha(E)z} & \text{dans la région ①,} \\ 2v_j \sinh(\delta(E)z) & \text{dans la région ②,} \\ c_j e^{-\alpha(E)z} & \text{dans la région ③,} \end{cases} \text{ et } f_k(z) = \begin{cases} c_k e^{\alpha(E)z} & \text{dans la région ①,} \\ 2v_k \cosh(\delta(E)z) & \text{dans la région ②,} \\ -c_k e^{-\alpha(E)z} & \text{dans la région ③.} \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

pour L_1 . Les fonctions d'onde sont évanescentes dans les deux directions car nous nous intéressons à une particule située dans le gap entre les bandes Γ_6 et Γ_8 , aussi bien dans CdTe que dans HgTe.

Des conditions de raccordement sont déduites les équations

$$\alpha(E) = -\delta(E) \omega \left(\frac{\delta(E)d}{2} \right) \quad (\text{C.8})$$

où la fonction ω dépend de la bande considérée :

$$\omega = \begin{cases} \tanh & \text{pour } E_1, \\ \coth & \text{pour } L_1. \end{cases}$$

En remarquant par continuité de la fonction d'onde et du courant que pour E_1 et L_1 la grandeur $E - E_V^{(\text{X})} + (\gamma_1^{(\text{X})} + 2\gamma_2^{(\text{X})}) [\zeta^{(\text{X})}]^2(E)$ avec $\zeta^{(\text{Cd})} = \alpha$ et $\zeta^{(\text{Hg})} = \delta$, ne dépend pas du matériau, nous pouvons poser $Y^{(\text{X})} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m^{*(\text{X})}}$ et résoudre

$$E \left(1 - \omega^2 \left(\frac{\delta(E)d}{2} \right) \right) = \left[E_C^{(\text{Cd})} - Y^{(\text{Cd})} \delta^2(E) \right] - \omega^2 \left(\frac{\delta(E)d}{2} \right) \left[E_C^{(\text{Hg})} - Y^{(\text{Hg})} \delta^2(E) \right] \quad (\text{C.9})$$

pour obtenir l'énergie, où $\delta(E)$ est solution de l'équation

$$\frac{-i\sqrt{\frac{2}{3}}P\delta(E)}{E - E_C^{(\text{Hg})} + Y^{(\text{Hg})}\delta^2(E)} = \frac{E - E_V^{(\text{Hg})} + \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1^{(\text{Hg})} + 2\gamma_2^{(\text{Hg})})\delta^2(E)}{-i\sqrt{\frac{2}{3}}P\delta(E)}. \quad (\text{C.10})$$

La résolution numérique de ces équations [10] permet de voir que la bande L_1 est éloignée de E_1 et H_1 à proximité du point $\mathbf{k}_\perp = \mathbf{0}$ qui nous intéresse. Nous ne la considèrerons plus par la suite.

C.2 Forme du Hamiltonien effectif

Le Hamiltonien effectif \hat{H}_{eff} est calculé en éliminant le degré de liberté selon z :

$$\hat{H}_{\text{eff}(i,j)} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \psi_i(z) | \hat{H}_K | \psi_j(z) \rangle, \quad (\text{C.11})$$

où les ψ_i sont les éléments de la base $B_{EH} = \{|E_1, +\rangle, |H_1, +\rangle, |E_1, -\rangle, |H_1, -\rangle\}$.

Pour les bandes E_1 et H_1 nous avons les propriétés suivantes :

- f_1, f_2, f_3 et f_6 sont des fonctions paires de z .
- f_4 et f_5 sont des fonctions impaires de z .

→ Éléments $\langle E_1, \pm | \hat{H}_K | E_1, \pm \rangle$: Les éléments de matrice concernés sont $\hat{H}_{K(1,1)}$ et $\hat{H}_{K(4,4)}$ d'une part, et $\hat{H}_{K(2,2)}$ et $\hat{H}_{K(5,5)}$ d'autre part. Nous avons des termes constants E_C ou E_V et des termes cinétiques en \mathbf{k}_\perp^2 , ainsi que des termes linéaires et quadratiques en k_z , mais ceux-ci sont supprimés par l'intégration.

→ Éléments $\langle H_1, \pm | \hat{H}_K | H_1, \pm \rangle$: Les éléments de matrice concernés sont $\hat{H}_{K(3,3)}$ d'une part et $\hat{H}_{K(6,6)}$ d'autre part. Les mêmes considérations sont valables.

→ Éléments $\langle E_1, \pm | \hat{H}_K | H_1, \pm \rangle$: Les éléments de matrice concernés sont $\hat{H}_{K(1,3)}$ et $\hat{H}_{K(4,3)}$ d'une part et $\hat{H}_{K(2,6)}$ et $\hat{H}_{K(5,6)}$ d'autre part. Ils tous sont linéaires en k_x et k_y , alors que la dépendance linéaire en k_z de certains d'entre eux est supprimée par l'intégration.

→ Éléments $\langle E_1, + | \hat{H}_K | E_1, - \rangle$: Les éléments de matrice concernés sont $\hat{H}_{K(1,2)}$ et $\hat{H}_{K(4,5)}$, et $\hat{H}_{K(1,5)}$ et $\hat{H}_{K(4,2)}$. Les deux premiers cités s'annulent trivialement car les états correspondants ne sont pas couplés par le Hamiltonien. Les deux derniers cités s'annulent par parité car les fonctions f_1 et f_5 d'une part, f_4 et f_2 d'autre part, sont de parités opposées et ces états ne sont couplés que par une "constante" au sens de z (en toute rigueur une fonction de k_x et k_y).

→ Éléments $\langle H_1, + | \hat{H}_K | H_1, - \rangle$: L'élément de matrice concerné est $\hat{H}_{K(3,6)}$, qui s'annule trivialement car les états correspondants ne sont pas couplés par le Hamiltonien.

→ Éléments $\langle E_1, \pm | \hat{H}_K | H_1, \mp \rangle$: Les éléments de matrice concernés sont $\hat{H}_{K(1,6)}$ et $\hat{H}_{K(4,6)}$ d'une part, et $\hat{H}_{K(2,3)}$ et $\hat{H}_{K(5,3)}$ d'autre part. $\hat{H}_{K(1,6)}$ et $\hat{H}_{K(2,3)}$ s'annulent trivialement car les états correspondants ne sont pas couplés par le Hamiltonien. $\hat{H}_{K(4,6)}$ et $\hat{H}_{K(5,3)}$ s'annulent par parité car les fonctions f_4 et f_6 d'une part, f_5 et f_3 d'autre part, sont de parités opposées et ces états ne sont couplés que par une "constante" au sens de z (en toute rigueur une fonction

de k_x et k_y).

D Formulations mathématiques de l'invariant topologique

Nous allons voir en nous appuyant sur Fu et Kane [16] que l'utilisation d'un formalisme plus élaboré pour le calcul de l'invariant topologique \mathbb{Z}_2 permet à un public plus averti que l'auteur de ce rapport de mieux comprendre sa signification physique. Afin d'inscrire les arguments présentés dans une démarche aussi progressive que possible, nous essayons de dresser une analogie avec la phase de Berry, que nous présentons brièvement pour commencer.

D.1 Phase de Berry

Considérons un Hamiltonien fonction d'un vecteur de paramètres (ensemble de paramètres) $\mathbf{R}(t)$, et supposons que ces paramètres sont des fonctions adiabatiques du temps. Le système est préparé à $t = 0$ dans un état propre n du Hamiltonien : $|\psi(0)\rangle = |n, \mathbf{R}(0)\rangle$ d'énergie $E_n(\mathbf{R}(0))$. Le Hamiltonien dépendant explicitement du temps, l'opérateur d'évolution n'est pas réduit à sa plus simple expression (sinon l'équation de Schrödinger n'est pas vérifiée), mais s'écrit [5] :

$$\hat{U}(t) = e^{i[\varphi_n(t) - \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt']}. \quad (\text{D.1})$$

La résolution de l'équation de Schrödinger donne

$$\frac{d\varphi_n}{dt} = i \langle n, \mathbf{R}(t) | \frac{d}{dt} | n, \mathbf{R}(t) \rangle, \quad (\text{D.2})$$

d'où l'expression de la phase supplémentaire :

$$\varphi_n(t) = i \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \cdot d\mathbf{R}. \quad (\text{D.3})$$

Supposons maintenant que le système suit un lacet (chemin fermé) dans l'espace des paramètres au cours du temps : $\exists T / \mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$.

Au bout d'un temps T , l'opérateur d'évolution a acquis une phase supplémentaire

$$\varphi_n(T) = i \oint_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(T)} \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \cdot d\mathbf{R}. \quad (\text{D.4})$$

Rien n'assure *a priori* que l'intégrande soit la différentielle exacte d'une fonction des paramètres. Cette phase dite de Berry subsiste donc dans le cas général. Il est facile de montrer [5] que φ_n est bien réel.

D.2 Polarisation par rapport au renversement du temps

Étudions maintenant un système bidimensionnel et invariant par renversement du temps, où l'effet Hall quantique de spin est présent. Afin de se simplifier quelque peu la tâche, considérons un matériau qui possède une zone de Brillouin beaucoup plus simple que le graphène.

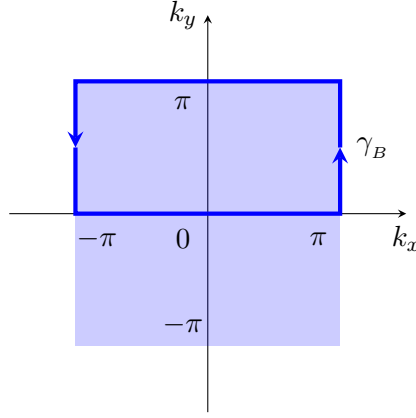


FIG.D.1 Zone de Brillouin et chemin d'intégration γ_B utilisés pour cet annexe.

Considérons les états propres du Hamiltonien : du fait de l'invariance par renversement du temps, nous pouvons les classer en N paires de Kramers d'états de même énergie et de moments $\pm \mathbf{k}$ opposés, et écrire le système suivant où $n \in \{1, \dots, N\}$ [16] :

$$\begin{cases} |u_{-\mathbf{k},n}^I\rangle &= - e^{i\chi_{\mathbf{k},n}} \hat{\Theta} |u_{\mathbf{k},n}^{II}\rangle, \\ |u_{-\mathbf{k},n}^{II}\rangle &= e^{i\chi_{-\mathbf{k},n}} \hat{\Theta} |u_{\mathbf{k},n}^I\rangle. \end{cases} \quad (\text{D.5})$$

Définissons par analogie avec (C.4) les connexions partielles de Berry

$$A^s(\pm \mathbf{k}) \equiv \pm i \sum_n \langle u_{\mathbf{k},n}^s | \frac{d}{dk_x} | u_{\mathbf{k},n}^s \rangle \quad (\text{D.6})$$

où $s = \text{I}$ ou II , et les polarisations partielles correspondantes

$$P^s(k_y) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{(-\pi, k_y)}^{(\pi, k_y)} dk_x A^s(\mathbf{k}). \quad (\text{D.7})$$

La polarisation par rapport au renversement du temps (PRT) est définie par

$$P_{RT}(k_y) \equiv P^I(k_y) - P^{II}(k_y). \quad (\text{D.8})$$

Nous allons montrer que cette PRT est étroitement liée à l'invariant topologique évoqué dans ce rapport.

Pour ceci considérons une matrice légèrement différente de la matrice $m_{ij}(\mathbf{k})$ définie dans le texte : $w_{ij}(\mathbf{k}) \equiv \langle u_{-\mathbf{k},i}^s | \hat{\Theta} | u_{\mathbf{k},j}^{s'} \rangle$.

$w_{ij}(\mathbf{k})$ s'exprime comme un produit tensoriel de matrices $\bar{w}_{ij}(\mathbf{k})$ écrites dans des bases du type $\{|u_{\mathbf{k},j}^I\rangle, |u_{-\mathbf{k},j}^{II}\rangle\}$ ou $\{|u_{\mathbf{k},j}^{II}\rangle, |u_{-\mathbf{k},j}^I\rangle\}$. D'après (D.5) ces matrices ont pour expression :

$$\bar{w}_{ij}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i\chi_{-\mathbf{k},n}} \\ e^{-i\chi_{\mathbf{k},n}} & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{D.9})$$

De l'égalité

$$A^I(-k_x, k_y) - A^{II}(k_x, k_y) = - \sum_n \frac{d}{dk_x} \chi_{\mathbf{k},n} \quad (\text{D.10})$$

se déduit

$$\begin{cases} P^I(k_y) &= \frac{1}{2\pi} \left[\int_{(0,k_y)}^{(\pi,k_y)} dk_x A(\mathbf{k}) - \sum_n (\chi_{(\pi,k_y),n} - \chi_{(0,k_y),n}) \right], \\ P^{II}(k_y) &= \frac{1}{2\pi} \left[\int_{(-\pi,k_y)}^{(0,k_y)} dk_x A(\mathbf{k}) - \sum_n (\chi_{(0,k_y),n} - \chi_{(\pi,k_y),n}) \right] \end{cases} \quad (\text{D.11})$$

où $A(\mathbf{k}) \equiv A^I(\mathbf{k}) + A^{II}(\mathbf{k})$.

Ainsi nous trouvons par (C.9) la polarisation par rapport au renversement du temps :

$$P_{RT}(k_y) = \frac{1}{2\pi} \left\{ \left[\int_{(0,k_y)}^{(\pi,k_y)} dk_x A(\mathbf{k}) - \int_{(-\pi,k_y)}^{(0,k_y)} dk_x A(\mathbf{k}) \right] - 2i \ln \left(\frac{\text{Pf}(w((\pi, k_y)))}{\text{Pf}(w((0, k_y)))} \right) \right\}. \quad (\text{D.12})$$

D.3 Équivalence des différentes formulations

Il est possible de montrer [16] que l'expression établie à la fin du paragraphe précédent peut se réécrire uniquement en fonction de la matrice $w(\mathbf{k})$ par

$$P_{RT}(k_y) = \frac{1}{2i\pi} \left[\int_{(0,k_y)}^{(\pi,k_y)} dk_x \text{Tr}(w^\dagger(\mathbf{k}) \frac{d}{dk_x} w(\mathbf{k})) + 2 \ln \left(\frac{\text{Pf}(w((\pi, k_y)))}{\text{Pf}(w((0, k_y)))} \right) \right]. \quad (\text{D.13})$$

Nous allons à présent pouvoir retrouver l'expression de l'invariant [donnée dans le corps du rapport](#).

De l'égalité $\text{Det}(e^w(\mathbf{k})) = e^{\text{Tr} w(\mathbf{k})}$ il vient par dérivation $\text{Tr}(w^\dagger(\mathbf{k}) \frac{d}{dk_x} w(\mathbf{k})) = \frac{d}{dk_x} \ln(\text{Det}(w(\mathbf{k})))$.
Ainsi

$$P_{RT}(k_y) = \frac{1}{2i\pi} \left[\int_{(0,k_y)}^{(\pi,k_y)} dk_x \frac{d}{dk_x} \ln(\text{Det}(w(\mathbf{k}))) + 2 \ln \left(\frac{\text{Pf}(w((\pi, k_y)))}{\text{Pf}(w((0, k_y)))} \right) \right]. \quad (\text{D.14})$$

En utilisant les propriétés des opérateurs antilinéaires [7], il est facile de montrer que $w(\mathbf{k})m^*(\mathbf{k})w^t(\mathbf{k}) = m(-\mathbf{k})$ où

$$\begin{cases} m_{ij}(\mathbf{k}) &\equiv \langle u_{\mathbf{k},i}^s | \hat{\Theta} | u_{\mathbf{k},j}^{s'} \rangle, \\ w_{ij}(\mathbf{k}) &\equiv \langle u_{-\mathbf{k},i}^s | \hat{\Theta} | u_{\mathbf{k},j}^{s'} \rangle. \end{cases}$$

Nous en déduisons $\text{Det}(w(\mathbf{k})) = \text{Det}(w(-\mathbf{k})) = \frac{\text{Pf}(m(\mathbf{k}))}{\text{Pf}(m^*(-\mathbf{k}))}$.

Soit finalement

$$P_{RT}(k_y) = \frac{1}{2i\pi} \left[\int_{(0,k_y)}^{(\pi,k_y)} dk_x \frac{d}{dk_x} [\ln(\text{Pf}(m(\mathbf{k})) - \ln(\text{Pf}(m^*(-\mathbf{k}))) + 2 \ln \left(\frac{\text{Pf}(w((\pi, k_y)))}{\text{Pf}(w((0, k_y)))} \right) \right]. \quad (\text{D.15})$$

Considérons maintenant $P_{RT}(0)$ et $P_{RT}(\pi)$: $(0,0)$, $(0,\pi)$, $(\pi,0)$, (π,π) étant les moments $\mathbf{\Gamma}_i$ invariants par renversement du temps (vérifiant $\hat{\Theta}\mathbf{k}\hat{\Theta}^{-1} = \mathbf{k}$), nous avons $|\text{Pf}(w(\mathbf{\Gamma}_i))| = 1$.

Dans le plan complexe, le logarithme est défini à $2i\pi$ près, d'où

$$\begin{cases} P_{RT}(0) &= \frac{1}{2i\pi} \left[\int_{(0,0)}^{(\pi,0)} dk_x \frac{d}{dk_x} [\ln(\text{Pf}(m(\mathbf{k})) - \ln(\text{Pf}(m^*(-\mathbf{k}))) \right] \text{mod} 2, \\ P_{RT}(\pi) &= \frac{1}{2i\pi} \left[\int_{(0,\pi)}^{(\pi,\pi)} dk_x \frac{d}{dk_x} [\ln(\text{Pf}(m(\mathbf{k})) - \ln(\text{Pf}(m^*(-\mathbf{k}))) \right] \text{mod} 2. \end{cases}$$

Il est alors possible de se ramener [16] à

$$\begin{cases} P_{RT}(0) &= \frac{1}{2i\pi} \left[\int_{(-\pi,0)}^{(\pi,0)} dk_x \frac{d}{dk_x} \ln(\text{Pf}(m(\mathbf{k}))) \right] \text{mod} 2, \\ P_{RT}(\pi) &= \frac{1}{2i\pi} \left[\int_{(-\pi,\pi)}^{(\pi,\pi)} dk_x \frac{d}{dk_x} \ln(\text{Pf}(m(\mathbf{k}))) \right] \text{mod} 2. \end{cases}$$

Finalement :

$$P_{RT}(\pi) - P_{RT}(0) = \left[\frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma_B} d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \ln(\text{Pf}(m(\mathbf{k}))) \right] \text{mod} 2. \quad (\text{D.16})$$

Nous retrouvons bien l'expression définie dans le rapport.

D.4 Tentative d'interprétation physique

Pour mieux comprendre ce que “mesure” l'invariant topologique, revenons sur le calcul effectué. À s fixé la différence entre les valeurs de P^s prises en $k_y = 0$ $k_y = \pi$ constitue la **phases de Berry** “récupérée” par l'état $s = I$ ou II d'une paire de Kramers lorsqu'on **parcourt une moitié de la zone de Brillouin suivant γ_B** . La polarisation par rapport au renversement du temps P_{RT} est donc la **différence entre les phases de Berry “récupérées” par les deux états d'une paire de Kramers** lorsqu'on parcourt γ_B (en physique de la matière condensée, la zone de Brillouin est un espace des paramètres naturel).

Aller plus loin dans cette interprétation nécessiterait plus de temps et plus d'expertise dans le domaine, aussi en restons-nous là.

Références

- [1] A. Messiah, *Mécanique quantique - Tome 2*, Dunod (1995).
- [2] V.B. Berestetsky, E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, *Cours de Physique Théorique, Tome 4 : Électrodynamique Quantique*, Mir (1989).
- [3] L.P. Lévy, *Magnétisme et supraconductivité*, InterÉditions / CNRS Éditions (1997).
- [4] J.B. Conway, *Functions of One Complex Variable*, Springer-Verlag (1978).
- [5] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*, Institute of Physics Publishing (1990).
- [6] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer (2003).
- [7] C.M. Caves, *Antilinear Operators*, [Notes disponibles en ligne](#).
- [8] M. Büttiker, “Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multiprobe conductors”, *Phys. Rev. B*, **38**, 9375-9389 (1988).
- [9] A. Roth, C. Brüne, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, “Nonlocal Transport in the Quantum Spin Hall State”, *Science*, **325**, 294 (2009).
- [10] B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.-C. Zhang, “Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells”, *Science*, **314**, 1757 (2006).
- [11] Y.A. Bychkov, E.I. Rashba, “Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers”, *J. Phys C : Solis State Phys.*, **17**, 6039-6045 (1984).
- [12] G. Dresselhaus, “Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structure”, *Phys. Rev.*, **100**, 580-586 (1955).
- [13] L. Meier, G. Salis, I. Shorubalko, E. Gini, S. Schön, K. Ensslin, “Measurement of Rashba and Dresselhaus spin-orbit magnetic fields”, *Nature*, **3**, 650-654 (2007).
- [14] C.L. Kane, E.J. Mele, “Quantum Spin Hall Effect In Graphene”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 226801 (2005).
- [15] C.L. Kane, E.J. Mele, “ \mathbb{Z}_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 146802 (2005).
- [16] L. Fu, C.L. Kane, “Time reversal polarization and a \mathbb{Z}_2 adiabatic spin pump”, *Phys. Rev. B*, **74**, 195312 (2006).
- [17] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y.S. Hor, R.J. Cava, M.Z. Hasan, “A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase”, *Nature*, **452**, 970-974 (2008).
- [18] M.Z. Hasan, C.L. Kane, “Colloquim : Topological Insulators”, *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 3045 (2010).