



**HAL**  
open science

# Transport électronique dans le graphène et les isolants topologiques 2D en présence de désordre magnétique

Arnaud D Demion

► **To cite this version:**

Arnaud D Demion. Transport électronique dans le graphène et les isolants topologiques 2D en présence de désordre magnétique. Physique [physics]. Aix Marseille Université, 2015. Français. NNT: . tel-01780769

**HAL Id: tel-01780769**

**<https://hal.science/tel-01780769>**

Submitted on 27 Apr 2018

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



## École doctorale Physique et Sciences de la Matière

Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence  
Équipe Théorie, Modélisation et Simulation

### Thèse

Présentée pour l'obtention du grade de Docteur de l'Université  
d'Aix-Marseille

par

**Arnaud Demion**

# Transport électronique dans le graphène et les isolants topologiques 2D en présence de désordre magnétique

---

Spécialité : Matière Condensée Nanosciences

Soutenue le 6 novembre 2015, devant un jury composé de :

---

Rapporteur	<b>David Carpentier</b>	(CR au laboratoire de phys. de l'ÉNS Lyon)
Rapporteur	<b>Jérôme Cayssol</b>	(Prof. à l'Université Bordeaux I)
Président du jury	<b>Pierre Müller</b>	(Prof. à l'Université d'Aix-Marseille)
Examineur	<b>Philippe Briet</b>	(Prof. à l'Université de Toulon)
Directeur	<b>Alberto Verga</b>	(Prof. à l'Université d'Aix-Marseille)
Codirecteur	<b>Laurent Raymond</b>	(MCF à l'Université d'Aix-Marseille)



# Citations (en vrac)

Ces citations n'ont pas vocation à être sérieuses, elles sont simplement un clin d'œil aux personnes qui m'ont aidé et soutenu pendant ma thèse et une série de références culturelles qui m'ont touché ou amusé.

- « *Ça me fatigue...* » Laurent Raymond, à propos de la rigidité administrative
- « *Quand on met des grandeurs non adimensionnées dans une exponentielle, je considère que l'on ne fait plus de la physique.* » Alberto Verga
- « *Le réseau n'est qu'un cas particulier de la gaufre.* » Laurent Chôné
- « *Le mauvais esprit est l'exercice correct de la bonne foi.* » Vincent Debierre
- « *En fait, manger ça endort, en fait.* » Pierre Manas
- « *Hé, hé! T'en as ?* » Guillaume Segueineaud
- « *Ce n'est pas parce qu'il y a un gardien que tu ne peux pas marquer de but.* » Romain Rainaud
- « *Ph'nglui mglw'nafh Cthulhu R'lyeh wgah'nagl fhtagn.* » Howard Phillips Lovecraft
- « *Il vaut mieux mobiliser son intelligence sur des conneries que mobiliser sa connerie sur des choses intelligentes.* » Devise Shaddock
- « *La science est sur le point de tester les limites de Dieu et de sa création. Dieu a imposé les limites entre le monde des vivants et le monde des morts. Ces scientifiques sont-ils sur le point d'ouvrir les portes de l'Enfer? [...] Sommes-nous au seuil des jours maléfiques dont la Bible fait allusion? Est-ce que les hordes de démons qui rôdent dans les fosses de l'enfer sont sur le point de déferler massivement dans notre monde? Il faut méditer quant à ces questions avant de permettre aux scientifiques de procéder à de telles expériences.* » Le pape François, à propos du CERN
- « *The world is not an illusion, it's an abstraction.* » Alfred Korzybski
- « *Ce qu'il y a de philosophique dans le problème de la croyance est la question de savoir ce qu'on appelle « croire » et non pas ce que l'on peut ou doit croire.* » Jacques Bouveresse, *Peut-on ne pas croire? : Sur la vérité, la croyance & la foi*
- « *Il vaut mieux viser la perfection et la manquer que viser l'imperfection et l'atteindre.* » Bertrand Russell

# Remerciements

Les remerciements ne sont jamais aisés à rédiger, il y a toujours la crainte d'oublier une personne importante ou d'en faire de trop. Et pourtant, il s'agit d'une partie importante d'un manuscrit de thèse, car avant d'être un exercice intellectuel, une thèse de doctorat est avant tout une aventure humaine.

Je commencerai par remercier Alberto Verga et Laurent Raymond, qui ont eu la patience et la pédagogie pour m'accompagner dans mon travail. Je les remercie d'autant plus qu'ils ont su me soutenir tandis que je rencontrais des problèmes personnels suivis de soucis de santé. Ils ont pris le relai dans une partie des travaux pour me permettre de rendre un travail cohérent et consistant.

Mes prochains remerciements vont à mes parents et à mon frère, ainsi qu'à toute ma famille. Le stress rend parfois désobligeant avec ses proches, j'espère qu'ils ne m'en tiendront pas rigueur. Si la question « Alors la thèse, ça avance ? » tend à devenir sempiternelle pour chaque étudiant en thèse, elle est l'expression d'une affection, d'un intérêt et d'une curiosité que tout un chacun pourra avoir avec un parent. Et pour l'affection et le soutien dont ils m'ont gratifié, je leur présente encore mes remerciements sincères et mon affection.

J'aimerais remercier l'équipe « Théorie, modélisation et simulations » pour m'avoir accueilli, ainsi que pour les discussions enrichissantes lors des pauses café. Je n'oublie pas que la plupart d'entre eux ont été mes enseignants lors de ma dernière année de licence et ma première année de master, et je leur dois en partie mon goût pour la physique théorique et plus précisément pour la matière condensée. Je remercie tout particulièrement Steffen Schäfer, Jean Marc Debierre et Rahma Guérin pour leur soutien et leur intérêt.

Je tiens à remercier tous mes amis. Je remercie Vincent Debierre pour la stimulation intellectuelle qu'il m'a prodigué et les longues conversations au sujet de la philosophie, Laurent Chôné pour sa finesse d'esprit, Guillaume Segueaud pour les longues rigolades et le thé vert japonais, Johann Julien pour son esprit facétieux et sa philosophie de vie, Nicolas Kern et Elsa Engeldinger pour leur entrain (je le remercie encore de m'avoir choisi comme témoin pour son mariage), Yoann Pellegrino pour ses fabuleux risotti et ses anecdotes d'huissier, Boris Gombeer pour son amour de la bonne chère, Rémy Durbesson et Raphaëlle Vial pour leur sagesse, et enfin Raphaël Bozonnet pour son soutien, son aide pour améliorer ma santé et son amitié profonde.

Je remercie enfin Aristote Durbesson-Vial, mon merveilleux petit filleul. Qu'il soit assuré que je lui offre sa première guitare électrique pour embêter papa et maman.

# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>9</b>
0.1 Contexte . . . . .	9
0.1.1 Pourquoi les fermions de Dirac ? . . . . .	9
0.1.2 Où en est-on ? . . . . .	10
0.2 Systèmes étudiés . . . . .	11
0.3 Symétries et désordres . . . . .	12
0.3.1 Symétrie de translation . . . . .	12
0.3.2 Symétrie par renversement du temps . . . . .	13
0.4 Résumé des chapitres et annexes . . . . .	13
<b>1 Désordre magnétique dans le graphène</b>	<b>15</b>
1.1 Introduction . . . . .	15
1.1.1 Description et historique . . . . .	15
1.1.2 Problématique . . . . .	15
1.2 Modèle de graphène en champ électrique fort . . . . .	17
1.2.1 Hamiltonien tight-binding . . . . .	17
1.2.1.1 Description du réseau . . . . .	17
1.2.1.2 Hamiltonien . . . . .	17
1.2.2 Potentiel aléatoire . . . . .	20
1.2.3 Méthode d'intégration numérique . . . . .	20
1.3 Courant et création de paires . . . . .	22
1.3.1 Système pur . . . . .	22
1.3.1.1 Approche de Landau-Zener . . . . .	22
1.3.1.2 Approche WKB . . . . .	25
1.3.1.3 Courant et création de paires sur un réseau . . . . .	25
1.3.2 Système désordonné . . . . .	28
1.3.2.1 Densité d'états . . . . .	28
1.3.2.2 Largeur du paquet d'onde . . . . .	29
1.3.2.3 Phénoménologie . . . . .	30
1.4 Densité locale d'états et localisation . . . . .	33
1.4.1 Localisation . . . . .	33
1.4.2 Polarons magnétiques . . . . .	34
1.5 Conclusion . . . . .	35
<b>2 Désordre magnétique dans les isolants topologiques 2D</b>	<b>37</b>
2.1 Introduction . . . . .	37
2.1.1 Description et historique . . . . .	37
2.1.1.1 État de bord 1D . . . . .	41
2.1.1.2 État de bord 2D . . . . .	43
2.1.1.3 Conductance de Hall, nombre de Chern et phase de Berry . . . . .	44

2.1.2	Problématique	45
2.2	Modèle	46
2.2.1	Tight-binding BHZ	46
2.2.1.1	Hamiltonien BHZ	46
2.2.1.2	Unités	48
2.2.1.3	Hamiltonien en espace réel	48
2.2.2	Potentiel aléatoire	50
2.2.3	Outils numériques pour les dispositifs bi-terminaux	52
2.2.3.1	Formule de Landauer	52
2.2.3.2	Self-énergie des contacts	52
2.2.3.3	Algorithme récursif pour les fonctions de Green	55
2.2.3.4	Implémentation et ensemble des paramètres	58
2.2.4	Outils numériques pour les dispositifs multi-terminaux	59
2.2.4.1	Algorithme récursif pour les fonctions de Green	59
2.2.5	Structures électroniques dans l'approximation de champ moyen	61
2.3	Résultats	64
2.3.1	Espace des phases	64
2.3.1.1	$M_z = 1$	65
2.3.1.2	$M_z < 1$	69
2.3.2	Courants locaux et densité locale d'états	72
2.4	Discussion : l'approximation de Born	78
2.4.1	Perturbation en champ moyen	78
2.4.2	Auto-cohérence	81
2.4.2.1	$M_z = 1$	81
2.4.2.2	$M_z < 1$	86
2.5	Conclusion	87
<b>3</b>	<b>Perspectives</b>	<b>89</b>
3.1	Idées de travaux pour poursuivre	89
3.1.1	Couplage en série de rubans de HgTe avec différents désordres magnétiques	89
3.1.2	Modélisation de dispositifs à base de graphène avec réservoirs	90
3.1.3	Dispositifs multi-terminaux	90
3.1.4	Auto-organisation des impuretés dans les isolants topologiques	94
	<b>Conclusion générale</b>	<b>95</b>
<b>A</b>	<b>Méthode des polynômes de Chebyshev</b>	<b>97</b>
A.1	Présentation des idées de base de la méthode	97
A.2	Décomposition en moments	97
A.3	Calcul des moments	98
A.4	Filtrage des oscillations de Gibbs	99
A.5	Implémentation	100
<b>B</b>	<b>Introduction au transport électronique</b>	<b>101</b>
B.1	Présentation d'un système <i>tight-binding</i>	101
B.2	Écriture du courant	102
<b>C</b>	<b>Formalisme des fonctions de Green Keldysh</b>	<b>105</b>

<b>D</b>	<b>Approximation de Born</b>	<b>110</b>
D.1	Approximation de Born au second ordre . . . . .	110
D.2	Approximation de Born au second ordre auto-cohérente . . . . .	112
<b>E</b>	<b>Implémentation de l'algorithme multi-terminaux</b>	<b>113</b>



# Introduction générale

## 0.1 Contexte

### 0.1.1 Pourquoi les fermions de Dirac ?

Jusque dans les années 80, le transport électronique dans les matériaux était étudié sous l'angle de trois classes de matériaux : les isolants, les métaux, et les semi-conducteurs. La différence entre ces matériaux se fait au niveau de la structure de bande décrivant les excitations autour du niveau de Fermi dans un modèle à une particule. Cette structure de bande est composée de la bande de valence, qui contient les états remplis, et la bande de conduction qui peut être peuplée par des états qui participeront à la conduction. Dans un isolant, le niveau de Fermi se situe entre une bande de valence et une bande de conduction séparées par un gap d'énergie important, empêchant les électrons de passer de la première à la seconde pour participer au transport. Deux phénomènes physiques peuvent également mener à un état isolant de la matière, le premier étant l'interaction électron-électron menant aux isolants de Mott [1], le second étant la localisation d'Anderson, ou localisation forte de la fonction d'onde, due au désordre [2] (le transport des excitations d'un régime balistique passe à un régime diffusif puis sous diffusif à mesure que la localisation s'intensifie). Dans un métal, le niveau de Fermi coupe une bande, de telle sorte que celle-ci ne soit pas totalement remplie et permettant aux électrons de participer librement au transport. Les semi-conducteurs sont des isolants dont le gap est suffisamment petit pour avoir des excitations à température ambiante [3]. À ces états de la matière s'ajoutent les effets Hall qui étaient déjà connus : l'effet Hall [4] et l'effet spin Hall [5]. Le transport au sein de systèmes permettant la conduction s'effectue en les connectant à des réservoirs dans des états d'équilibre différents (par exemple avec des potentiels chimiques différents, des températures différentes, etc...). La formule de Landauer permet de calculer la conductance de ces systèmes en quantum de  $e^2/h$  et donc de caractériser leurs propriétés de transport [6, 7].

En 1984 un nouveau type de matériau est prédit théoriquement par G. W. Semenoff [8], D. P. DeVincenzo et E. J. Mele [9], possédant des excitations électroniques décrites par des fermions de Dirac. Le graphène est un matériau dont les excitations électroniques sont très bien décrites en termes de fermions de Dirac sans masse. Les expériences effectuées à partir de 2004 grâce aux travaux de Andre Geim et Konstantin Novoselov [10] pour isoler une couche de graphène ont pu permettre de mettre en évidence les propriétés électroniques du graphène et la mobilité exceptionnelle des électrons au sein du matériau : ceux-ci se déplacent à environ  $v = 10^6$  m/s, soit 150 fois plus rapidement que dans le silicium. Parallèlement, de nouvelles phases de la matière sont apparues, avec l'effet Hall quantique découvert expérimentalement en 1980 par Klaus von Klitzing [11], les isolants de Chern décrits par Haldane en 1988 [12], les isolants topologiques décrits par Kane et Mele en 2005 [13, 14], etc... Nous reparlerons ultérieurement des isolants de Chern et des isolants topologiques, en explicitant le caractère topologique de ces phases de la matière.

L'industrie de la microélectronique s'est construite jusqu'à maintenant sur les semi-conducteurs et en particulier le silicium. Le transistor a remplacé la triode et sa miniaturisation, grâce à l'amélioration des procédés de fabrication, a permis la construction de dispositifs de calcul et de traitement du signal de plus en plus complexes et de plus en plus efficaces énergétiquement (processeurs, DSP, etc...). La loi empirique de Moore décrit depuis lors l'évolution de la puissance de calcul des ordinateurs : le nombre de transistors des microprocesseurs double tous les 18 mois grâce, entre autre, à des procédés de gravure du silicium toujours plus fins et à des techniques d'empilement des structures. Cependant, on se heurtera bientôt aux contraintes physiques : aux alentours des 10 nm de finesse de gravure d'un transistor, on sera confronté aux effets quantiques (tunneling des électrons, dopage inhomogène des différents transistors au sein d'une même puce à cause de la petitesse des jonctions, etc...). Les limites devraient être atteintes aux alentours de 2020, et posent de gros problèmes industriels et économiques : si l'industrie de la microélectronique n'est plus capable d'évoluer, elle deviendra non rentable et le risque est qu'elle disparaisse. De ce constat, nous tirons une conclusion : nous devons changer de paradigme et proposer de nouvelles façons de construire des dispositifs de calcul plus petits et/ou plus performants. Les matériaux dont les électrons sont décrits par des fermions de Dirac sont de très bons candidats pour le futur de cette industrie. Le graphène peut par exemple permettre de construire des transistors fonctionnant à des fréquences de l'ordre du térahertz en s'échauffant très peu. L'enroulement de feuilles de graphène donne des nanotubes de carbone qui peuvent avoir des propriétés différentes suivant leur chiralité, ils peuvent être métalliques ou semi-conducteurs. Les isolants topologiques quant à eux sont une voie vers des dispositifs de manipulation du spin en vue de faire de la spintronique (utiliser les spins à la place des charges pour transporter et manipuler l'information). Leur conductance quantifiée peut également permettre de créer des dispositifs à deux ou trois niveaux : on peut par exemple imaginer faire passer un dispositif d'une conductance de  $2e^2/h$  à  $e^2/h$  et à 0.

### 0.1.2 Où en est-on ?

À l'heure actuelle de nombreuses expériences visant à créer des dispositifs d'électronique ou de spintronique sur la base de ces nouveaux matériaux sont à l'étude dans des laboratoires de recherche avec pour but final de remplacer le silicium dont la finesse de gravure limite sera bientôt atteinte. Nous pouvons par exemple, et concernant l'électronique, citer les travaux financés par IBM sur les premiers transistors au graphène fonctionnant à des fréquences de l'ordre du gigahertz [15], des études à l'œuvre pour utiliser les nanotubes de carbone pour relier des dispositifs entre eux (couches de transistors au sein d'une même puce par exemple), de récents travaux montrant que l'on peut trier les nanotubes de carbone suivant leur chiralité à l'aide d'un laser, pour sélectionner ceux dont les propriétés de transport seront utiles suivant le domaine d'application (métal ou semi-conducteur) [16], etc... Du côté de la spintronique nous pouvons énumérer des études conduites sur des semi-conducteurs magnétiques dilués (*diluted magnetic semiconductors*, DMS) comme la magnétorésistance géante [17] ou les spin valves [18, 19]. La magnétorésistance géante est un effet quantique observé dans des structures composées de couches minces alternées de matériaux ferromagnétiques et non magnétiques [20] et a été appliquée pour la première fois dans les têtes de lecture des disques durs (comme capteur de champ magnétique). Elle permet entre autre de créer des spin valves par un empilage de trois couches, deux ferromagnétiques dont le champ coercitif est différent, et une non magnétique au milieu des deux autres. On peut ainsi agir sur l'orientation des spins dans les deux couches ferromagnétiques afin qu'ils soient parallèles ou antiparallèles, causant une augmentation de la

résistance dans le second cas. On contrôle ainsi le spin des électrons qui transitent dans la structure, permettant ainsi de créer des transistors à spin. Le couplage magnétique aujourd'hui dans les dispositifs de stockage par l'intermédiaire de la magnétorésistance géante, et dans les dispositifs de *spin transfer torque* [21].

Il a été montré en 2014 qu'avec un transistor à spin l'on peut s'attendre à une consommation d'énergie jusqu'à dix mille fois inférieure à celle d'un transistor CMOS conventionnel [22]. De tels dispositifs nécessitent des matériaux séparant les électrons suivant l'orientation de leur spin, ce que les isolants topologiques permettent précisément de faire. Les isolants topologiques présentent un avantage indéniable sur les semi-conducteurs dilués pour ce type d'applications, car ce sont des matériaux auto-polarisés avec des états ne dissipant pas d'énergie. Ils sont des isolants avec un fort couplage spin-orbite, ce qui permet de faire apparaître naturellement des courants polarisés en spin. Des mesures de transport ont été effectuées dans un dispositif basé sur un isolant topologique de type Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> (bismuth selenium) [23] en contrôlant la densité des porteurs sur les surfaces grâce à une tension de grille. Une excellente discussion permettant de comprendre l'intérêt de tous ces matériaux pour la spintronique a été publiée en 2012 par Dmytro Pesin et Allan H. MacDonald [24].

Les modèles de particules de Dirac, Majorana et Weyl décrivant habituellement les particules élémentaires ont donc récemment été introduits dans la physique de la matière condensée. Dans cette thèse nous nous intéresserons à deux modèles de matériaux dont les excitations électroniques sont décrites par des fermions de Dirac sans masse : le graphène et les isolants topologiques de type HgTe (tellure de mercure). Nous nous intéresserons à l'effet du désordre magnétique dans ces matériaux pour en évaluer l'impact sur les propriétés de transport, soit pour décrire au mieux les systèmes physiques qui possèdent toujours des impuretés, soit pour tenter de contrôler les propriétés de transport en utilisant la magnétisation des impuretés dont le matériau aura été dopé.

## 0.2 Systèmes étudiés

Lorsqu'ils ne sont pas magnétisés par un champ ou un désordre magnétique, les systèmes décrits par des fermions de Dirac possèdent une symétrie par renversement du temps. Les travaux de cette thèse seront centrés sur l'effet de la brisure de cette symétrie par un désordre magnétique. Nous étudierons globalement deux matériaux dans deux chapitres différents : le graphène et les isolants topologiques 2D de type HgTe (tellure de mercure). Nous introduirons dans le chapitre sur les isolants topologiques la notion de phase topologique de la matière. Le point commun entre ces deux types de matériaux, hormis le fait qu'ils soient tous les deux bi-dimensionnels, est le fait qu'ils soient décrits à basse énergie par des hamiltoniens proches de l'opérateur de Dirac. L'opérateur de Dirac à quatre dimensions est donné par

$$D = c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta, \quad (1)$$

où  $c$  est la vitesse de la lumière,  $m$  est la masse des fermions et

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z), \quad \alpha_i = \sigma_x \otimes \sigma_i, \quad \beta = \sigma_z \otimes \sigma_0, \quad (2)$$

avec  $\sigma_i$  les matrices de Pauli et  $\sigma_0$  la matrice identité. Les hamiltoniens décrivant le graphène et les isolants topologiques sont des variantes 2D de cet opérateur. La caractéristique principale de ce type de hamiltonien, comparé aux hamiltoniens décrivant des métaux, isolants ou semi-conducteurs habituels est le fait qu'ils présentent une dispersion linéaire à des nombres d'onde  $k$  petits si  $m$  est nulle. Dans le cas du graphène, cette dispersion

(ou structure de bande) décrit le *bulk* (volume ou surface) du matériau, tandis que dans les isolants topologiques elle n'apparaît que sur les bords, le *bulk* présentant la structure de bande d'un isolant. Cette dispersion linéaire décrit des excitations (électrons-trous) sans masse, soit des fermions de Dirac. Cette masse nulle est responsable de l'absence de dispersion des excitations qui se déplacent tous à une même vitesse limite, ce qui ouvre la voie à l'étude de matériaux transportant les charges sans pertes par effet Joule. Nous verrons que dans le cas des isolants topologiques, il existe un couplage entre le spin des porteurs de charge et leur vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ , ce qui rend ces matériaux intéressants pour la manipulation des spins. Une autre donnée importante à noter est le fait que, ces états conducteurs n'existant que sur les bords de l'échantillon, la conductance sera quantifiée et liée au nombre de canaux de conduction présents sur les bords.

La symétrie par renversement du temps est rendue possible par la présence des deux secteurs de spin. Cette symétrie se retrouvera dans les propriétés de transport des matériaux étudiés, les deux espèces de spin participent à établir une invariance temporelle dans les propriétés de transport : la conductivité de spin est nulle. Pour modifier les propriétés de transport, on peut donc briser cette symétrie. Il existe plusieurs façons de briser l'invariance par renversement du temps d'un système. La première est d'appliquer un champ magnétique  $\mathbf{B}$  perpendiculaire au plan du système. Une autre façon est d'ajouter un désordre magnétique au sein de celui-ci, en ajoutant par exemple des atomes (ou molécules) magnétiques dans le réseau cristallin.

### 0.3 Symétries et désordres

Avec l'ajout d'un désordre magnétique dans des échantillons de graphène ou d'isolants topologiques, nous serons confrontés à deux types de brisures de symétrie : la brisure de symétrie par translation et la brisure de symétrie par renversement du temps.

Le concept de changement de phase dans le cadre de brisures spontanées de symétrie est intrinsèquement lié à la notion de paramètre d'ordre. Un paramètre d'ordre est une quantité caractérisant l'état d'un système physique lors d'une transformation de phase, celle-ci se produisant à une valeur critique de ce paramètre d'ordre (par exemple : la masse volumique pour une transition gaz/liquide, un champ complexe  $\psi$  pour une transition conducteur/supraconducteur, etc...).

Il existe des phases de la matière n'étant pas décrites par un paramètre d'ordre et qui ne peuvent être vues sous l'angle de la brisure spontanée de symétrie. Les phases topologiques sont des phases de la matière qui sont décrites par un *invariant topologique*.

#### 0.3.1 Symétrie de translation

Nous nous intéresserons au cas de la symétrie de translation dans les cristaux. Un cristal présentant une invariance par translation est un cristal qui présente des caractéristiques identiques en chacun de ses points de réseau. Dans un système *tight-binding*, cela se traduit par un même nombre de sites voisins en chaque site, une même énergie de site, une même énergie de saut entre deux sites dans une direction donnée, et ce quel que soit le site cristallin observé.

Cette symétrie peut être brisée de deux manières différentes : en changeant l'énergie sur site d'un ou plusieurs sites, ou l'énergie de saut entre différents sites voisins. Un cas de désordre bien connu pour briser l'invariance par translation est le désordre d'Anderson : il s'agit d'ajouter à chaque site  $i$  une énergie aléatoire  $W_i$  contenue dans un intervalle  $W_i \in [-W/2, W/2]$ . Prenons l'exemple d'une chaîne atomique 1D de 6 atomes, avec une énergie de site  $\epsilon$ , une énergie de saut entre atomes  $-\nu$  et bouclée sur elle-même, à laquelle

on a ajouté un désordre d'Anderson [2],

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon & -\nu & 0 & 0 & 0 & -\nu \\ -\nu & \epsilon & -\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\nu & \epsilon & -\nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\nu & \epsilon & -\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\nu & \epsilon & -\nu \\ -\nu & 0 & 0 & 0 & -\nu & \epsilon \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} W_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & W_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & W_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & W_6 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Nous pouvons également imaginer un réseau présentant des lacunes et/ou des substitutions d'atomes (ou molécules) d'un site par une espèce différente, ce qui pourra changer l'énergie du site en question et l'énergie de saut avec les voisins.

Le désordre que nous allons étudier dans cette thèse est un désordre d'impuretés magnétiques. Nous ajouterons aléatoirement en des points du réseau, avec une concentration  $c$ , des impuretés possédant un spin et couplées aux porteurs. Nous souhaitons étudier les effets de la brisure de symétrie par renversement du temps par un désordre d'impuretés magnétiques, et une configuration de désordre donnée sur un échantillon de taille finie n'est pas suffisante pour établir un modèle générique, car elle ne possède pas d'invariance par translation. Il sera alors nécessaire de rétablir l'invariance par translation, en effectuant une moyenne sur  $N$  configurations aléatoires de désordres. Avec des configurations suffisamment décorréelées, les quantités mesurées seront distribuées selon une loi normale, et leur convergence s'effectuera en  $1/\sqrt{N}$  [25].

### 0.3.2 Symétrie par renversement du temps

La symétrie par renversement du temps notée  $\mathcal{T}$  est introduite par une transformation anti-unitaire et anti-linéaire. Cet opérateur transforme les vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$  en  $-\mathbf{k}$  et échange les spins par une opération de conjugaison complexe et de transposition (un spin up devient un spin down et vice versa), ce qui se traduit par une dégénérescence en énergie  $\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\downarrow}(\mathbf{k})$  [26]. La condition pour avoir un hamiltonien invariant par renversement temporel est que  $[H, \mathcal{T}] = 0$ . Si cette symétrie est brisée, la dégénérescence en spin est levée, et nous obtenons deux bandes d'énergie séparées  $\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k})$  et  $\epsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}) \neq \epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k})$ . Comme nous l'avons expliqué précédemment, il existe plusieurs façons de briser l'invariance par renversement du temps d'un système : un champ magnétique  $\mathbf{B}$  ou un désordre magnétique.

Le désordre magnétique peut être réalisé en dopant un matériau donné avec des atomes ou molécules magnétiques. L'organisation du spin des impuretés pourra dépendre des propriétés du matériau (ferromagnétique, paramagnétique ou antiferromagnétique par exemple), de la température de celui-ci, et on peut imaginer pouvoir contrôler le magnétisme moyen par l'intermédiaire de champs externes (des méthodes de polarisation des impuretés dans un isolant topologique de type HgTe sont discutées dans l'article [27]). Il existe de nombreuses façons de doper un matériau avec des impuretés possédant un spin, des lacunes au sein d'un réseau de graphène peuvent par exemple engendrer du magnétisme [28].

## 0.4 Résumé des chapitres et annexes

Le contenu de cette thèse est divisé en trois parties qui constituent les chapitres qui suivent le premier chapitre d'introduction générale. Le manuscrit s'achève sur quatre annexes contenant quelques parties techniques et des rappels techniques de physique de la matière condensée.

## **Chapitre 1 : Désordre magnétique dans le graphène**

Dans ce premier chapitre nous aborderons le sujet du transport dans le graphène et nous étudierons comment le désordre magnétique en modifie les propriétés. Après avoir établi un bref historique et posé la problématique, nous décrirons un modèle de graphène désordonné en champ électrique fort, puis nous étudierons le courant et la création de paires électrons-trous avant de nous intéresser à la densité locale d'états pour étudier la localisation de la fonction d'onde.

## **Chapitre 2 : Désordre magnétique dans les isolants topologiques 2D**

Le chapitre 2 sera dédiée à l'étude du transport dans un isolant topologique 2D de type HgTe en présence de désordre magnétique. De même que pour le graphène, nous établirons un bref historique et poserons la problématique, puis nous décrirons le modèle utilisé ainsi que les outils numériques, et nous présenterons enfin les résultats phénoménologiques des simulations avant de les confronter à une approximation de Born auto-cohérente permettant de comprendre les mécanismes physiques.

## **Chapitre 3 : Perspectives**

Dans ce dernier chapitre nous exposerons des idées de travaux pour poursuivre, et nous ferons le point sur ceux qui ont été effectués au cours de cette thèse.

## **Annexe A : Méthode des polynômes de Chebyshev**

Cette annexe contient une explication sur la décomposition d'opérateurs en noyaux polynomiaux ainsi qu'une méthode d'implémentation numérique de celle-ci. Cette méthode sera utile pour calculer les densités d'états et densités locales d'états dans le cadre de l'étude du graphène.

## **Annexe B : Introduction au transport électronique**

Nous ferons ici une introduction sur le transport électronique au sein de systèmes reliés à des contacts et des réservoirs thermodynamiques.

## **Annexe C : Formalisme des fonctions de Green Keldysh**

Le formalisme des fonctions de Green Keldysh ou fonctions de Green hors équilibre nous sera utile pour effectuer des calculs sur le transport dans les isolants topologiques. Ceci nous sera particulièrement utile pour calculer les courants de liens (ou courants locaux) et la densité locale d'états hors équilibre, que nous utiliserons dans le chapitre 2 pour montrer les mécanismes menant à des modifications de transport.

## **Annexe D : Approximation de Born**

Cette dernière annexe exposera les bases de l'approximation de Born au second ordre et son pendant auto-cohérent. L'approximation de Born auto-cohérente au second ordre nous servira à la fin du chapitre 2 pour étayer les résultats numériques.

# Chapitre 1

## Désordre magnétique dans le graphène

### 1.1 Introduction

#### 1.1.1 Description et historique

Le graphène est un matériau constitué d'une couche monoatomique d'atomes de carbone agencés suivant un réseau hexagonal et l'empilement de ces couches constitue le graphite. De par sa nature bidimensionnelle, il est un très bon conducteur thermique car les phonons s'y propagent aisément. Il est aussi un très bon conducteur électrique car les charges y sont transportées balistiquement. Les excitations au sein du graphène sont décrites par des paires de quasi-particules électrons et trous dont la propagation s'effectue sans dispersion et sans résistance [29, 30, 31]. Par analogie avec la mécanique quantique relativiste fermionique, nous identifions ces paires à des particules-antiparticules sans masse. La vitesse de groupe agit ici comme une vitesse limite similaire à la vitesse de la lumière : toutes les excitations se propagent à la vitesse  $v = 10^6$  m/s, quelle que soit leur énergie. L'équation de Dirac est ici idoine pour décrire ces excitations qui présentent une relation de dispersion linéaire, contrairement aux matériaux habituellement décrits par une équation de Schrödinger corrigée par une interaction de spin-orbite et présentant une structure de bandes paraboliques.

La théorie du graphène a tout d'abord été étudiée par P. R. Wallace en 1947 [32] pour comprendre les propriétés électroniques du graphite. L'équation de Dirac décrivant des fermions sans masse est apparue la première fois en 1984 avec les travaux de G. W. Semenoff, D. P. DeVincenzo et E. J. Mele [9]. À partir de 1970 le graphène a commencé à être produit par épitaxie, et en 1990 des films minces ont été produits par exfoliation mécanique mais il a fallu attendre 2004 pour obtenir des films de moins de 50 à 100 couches de graphène. C'est en cette année que Andre Geim et Konstantin Novoselov ont réussi à isoler une seule couche de graphène par extraction mécanique à l'université de Manchester [10]. L'*effet Hall quantique anomal* a ensuite pu être observé dans le graphène, mettant en évidence la *phase de Berry* des fermions de Dirac sans masse [33, 34]. Andre Geim et Konstantin Novoselov ont reçu le prix Nobel de physique pour leurs découvertes en 2010.

#### 1.1.2 Problématique

Sous l'application d'un champ électrique faible, la théorie de la réponse linéaire prédit une conductivité minimale, caractéristique de la dispersion linéaire près du point de Dirac [35]. Cette conductivité est insensible au désordre faible : quand la diffusion inter-

vallées peut être négligée elle découle de l'absence de localisation d'Anderson lorsqu'un désordre scalaire est présent [36, 37]. Augmenter l'intensité du désordre facilite paradoxalement la conduction par le mécanisme de « tunneling » de Klein (paradoxe de Klein) [38]. Le désordre à courte portée permettant les transitions inter-vallées [39], la diffusion dépendante du spin déclenchée par exemple par des impuretés magnétiques [40, 41], et les différences de potentiel comme dans les jonctions  $n$ - $p$  qui introduisent des corrections non-linéaires à la conductivité [42], peuvent changer qualitativement les propriétés de transport du graphène pur.

La description des excitations électroniques du graphène mène à un constat intéressant : un mécanisme de production de paires électrons-trous de Schwinger [43, 44] peut être mis en évidence. Sous l'application d'un champ électrique fort la production de paires électron-trou va dominer la réponse linéaire en mettant à disposition de nouveaux transporteurs de charge, menant à une réponse non linéaire en exposant  $3/2$  du champ électrique  $E$ . La modification des caractéristiques du courant en fonction du voltage par cette production de paires a ainsi été démontrée expérimentalement [45].

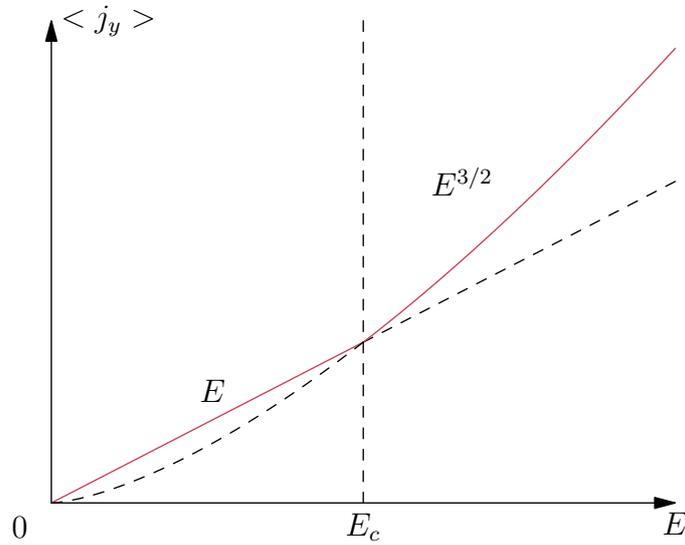


FIGURE 1.1 – Tracé des différents régimes du courant en fonction de l'intensité du champ électrique.  $E_c$  correspond au champ électrique critique au delà duquel le régime linéaire fait place au régime en puissance  $3/2$ .

Les propriétés de transport sont liées à la structure de bande électronique du graphène, qui peut être modifiée par divers mécanismes incluant la diffusion sur des impuretés ou des lacunes de réseau [46], et par des perturbations provenant de configurations de bords aléatoires : suivant la façon dont on coupe un échantillon de graphène, les bords pourront être en configuration *zigzag* ou *armchair* [47, 48]. Le graphène étant un matériau bidimensionnel, il est fortement soumis à l'environnement. Un échantillon de graphène considéré comme étant pur expérimentalement est en réalité un échantillon présentant environ 40% d'imperfections (sans oublier l'influence du substrat). Fort de ce constat, nous comprenons l'intérêt d'étudier l'influence de différents types de désordre sur les propriétés de conduction. Tous ces processus changent les bandes d'énergie en peuplant les niveaux au voisinage du point de Dirac, et en changeant leurs propriétés de localisation. En particulier, doper du graphène avec des impuretés magnétiques peut briser la symétrie entre les sous-réseaux et ouvrir un gap dans la structure de bande [49, 50, 28].

L'effet du désordre d'Anderson sur les propriétés de transport du graphène a déjà

été étudié [51], menant à une augmentation de la conductance de celui-ci. Nous nous proposons d'examiner l'effet des impuretés magnétiques sur le transport électronique en régime de champ électrique fort pour étudier la modification éventuelle des propriétés de transport non linéaire. Nous nous intéresserons à la dépendance du taux de création de paires et du courant électrique suivant l'intensité du champ électrique appliqué. Avec un désordre paramagnétique, nous nous attendons à ce que les propriétés générales du transport non-linéaire soient conservées [52, 53], mais avec un ordre magnétique, ces propriétés devraient être modifiées en conséquence de la localisation et de l'ouverture d'un gap dans la structure de bandes [54]. En plus de l'apparition d'états localisés, l'ouverture d'un gap induit par des impuretés magnétiques polarisées (ordre magnétique avec désordre spatial) devrait diminuer significativement la production de paires, et par conséquent changer les caractéristiques de courant-voltage.

## 1.2 Modèle de graphène en champ électrique fort

### 1.2.1 Hamiltonien tight-binding

#### 1.2.1.1 Description du réseau

Nous décrivons des électrons dans le graphène soumis à un champ électrique extérieur, par un modèle *tight-binding* bi-dimensionnel avec interactions entre premiers voisins et des impuretés magnétiques classiquement aléatoirement distribuées. Nous considérons un réseau hexagonal avec  $N$  sites, une aire  $L^2$ , avec deux atomes  $A, B$  par cellule. La constante de réseau  $a$  est la plus petite distance interatomique et  $a \approx 0.25$  nm. Les vecteurs primitifs sont [29],

$$\mathbf{a}_1 = a(1, 0), \quad (1.1)$$

$$\mathbf{a}_2 = a(-1/2, \sqrt{3}/2), \quad (1.2)$$

et les vecteurs réciproques,

$$\mathbf{b}_1 = (2\pi/a)(1, 1/\sqrt{3}), \quad (1.3)$$

$$\mathbf{b}_2 = (2\pi/a)(0, 2/\sqrt{3}), \quad (1.4)$$

que l'on a représenté sur la Fig. 1.3. Soit  $i$  un point du réseau de coordonnées  $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i)$  ( $i = 1, \dots, N$ ); les voisins  $\mathbf{x}_j$  de  $\mathbf{x}_i$  sont donnés par les trois vecteurs  $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_i + \mathbf{d}_{ij}$ , où  $\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{d}_a$ , ( $a = 1, 2, 3$ ) :

$$\mathbf{d}_1 = a(0, 1/\sqrt{3}), \quad (1.5)$$

$$\mathbf{d}_2 = -a(1/2, 1/2\sqrt{3}), \quad (1.6)$$

$$\mathbf{d}_3 = a(1/2, -1/2\sqrt{3}). \quad (1.7)$$

La première zone de Brillouin représentée à la Fig. 1.3 est un hexagone dont les points K et K' correspondent à la dégénérescence des deux sous réseaux  $A$  et  $B$ .

#### 1.2.1.2 Hamiltonien

Les électrons dans le graphène peuvent être décrit par un modèle *tight-binding* 2D avec des interactions entre premiers voisins. Nous écrivons le terme de saut avec l'énergie de saut  $\nu$ ,

$$H = -\nu \sum_{\langle i,j \rangle} (c_j^\dagger c_i + c_i^\dagger c_j), \quad (1.8)$$

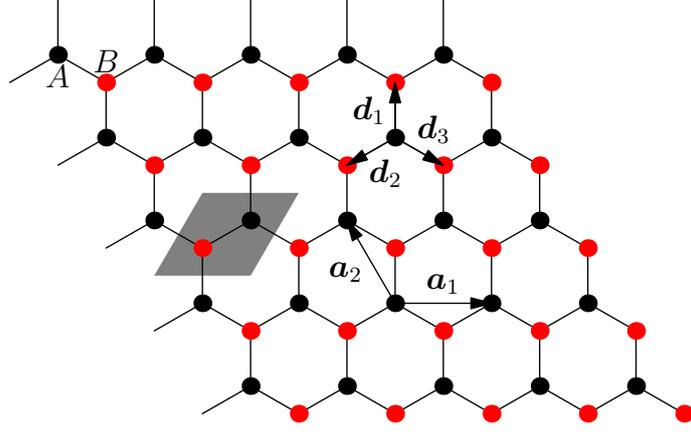


FIGURE 1.2 – Réseau hexagonal de graphène comportant deux sous réseaux  $A$  (en noir) et  $B$  (en rouge). Le losange gris contient une cellule primitive,  $\mathbf{a}_1$  et  $\mathbf{a}_2$  sont les vecteurs de réseau et les vecteurs  $\mathbf{d}_a$  définissent les premiers voisins.

où  $c_i = (c_{i\uparrow} \ c_{i\downarrow})^T$  ( $c_i^\dagger = (c_{i\uparrow}^\dagger \ c_{i\downarrow}^\dagger)$ ) est l'opérateur colonne d'annihilation (opérateur ligne de création) d'une particule de spin up ( $\uparrow$ ) ou down ( $\downarrow$ ) au site  $i$ . Nous voulons par la suite étudier la dynamique du système sous l'action d'un champ électrique. Afin de préserver la symétrie de translation, le champ électrique extérieur  $\mathbf{E}$  est introduit dans le terme de saut à travers un potentiel vecteur  $\mathbf{A} = t\mathbf{E} = (0, -tE_y)$  dépendant du temps  $t$ , donnant le facteur de phase avec  $\phi_{ij}(t) = -et\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}_{ij}$ , où  $e$  est la charge élémentaire,

$$H(t) = -\nu \sum_{\langle i,j \rangle} \left( e^{-i\phi_{ij}(t)} c_j^\dagger c_i + e^{i\phi_{ij}(t)} c_i^\dagger c_j \right). \quad (1.9)$$

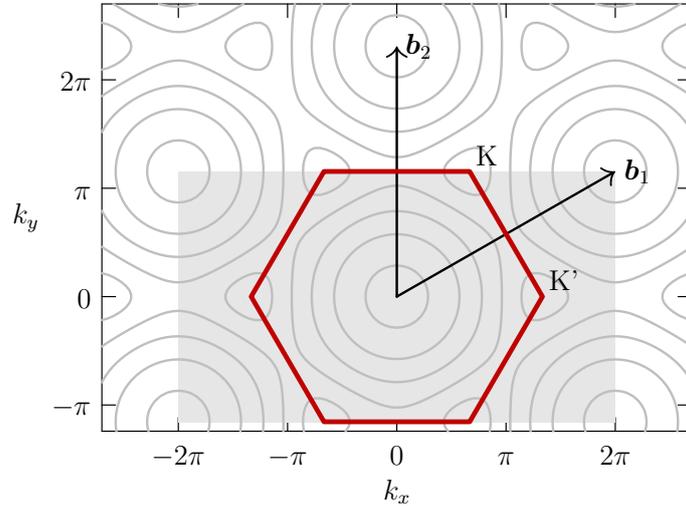


FIGURE 1.3 – Contours de l'énergie  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  and zone de Brillouin pour du graphène pur ( $BZ$  hexagone rouge);  $\mathbf{b}_1$  et  $\mathbf{b}_2$  sont les vecteurs primitifs du réseau réciproque. Les relations de dispersion en cônes de Dirac sont situées aux points  $K$  et  $K'$ . Le rectangle gris clair définit le domaine d'intégration utilisé dans les calculs numériques, il couvre l'équivalent de deux zones de Brillouin.

L'invariance par translation nous permet d'écrire le hamiltonien d'une façon agréable dans l'espace des moments, de sorte que le terme dépendant du temps est diagonal par

blocs :

$$H(t) = \sum_{\mathbf{k} \in BZ} \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} H_{\mathbf{k}}(t) \psi_{\mathbf{k}} \quad (1.10)$$

où  $\mathbf{k}$  est un nombre d'onde dans la zone de Brillouin  $BZ$  [3] et

$$\psi_{\mathbf{k}} = (\psi_{\mathbf{k},A,\uparrow} \psi_{\mathbf{k},B,\uparrow} \psi_{\mathbf{k},A,\downarrow} \psi_{\mathbf{k},B,\downarrow})^T$$

est l'opérateur d'annihilation d'une particule de nombre d'onde  $\mathbf{k}$ , appartenant au sous-réseau  $(A, B)$ , et de spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . Dans l'espace des moments, le terme de saut du hamiltonien devient,

$$H_{\mathbf{k}}(t) = \sigma_0 \otimes \begin{pmatrix} 0 & h_{\mathbf{k}}(t) \\ h_{\mathbf{k}}^*(t) & 0 \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

où  $\sigma_0$  est la matrice identité  $2 \times 2$  et

$$h_{\mathbf{k}}(t) = -\nu \sum_{a=1}^3 e^{-i(h\mathbf{k} + et\mathbf{E}) \cdot \mathbf{d}_a}, \quad h_{\mathbf{k}}(0) = h_{\mathbf{k}}. \quad (1.12)$$

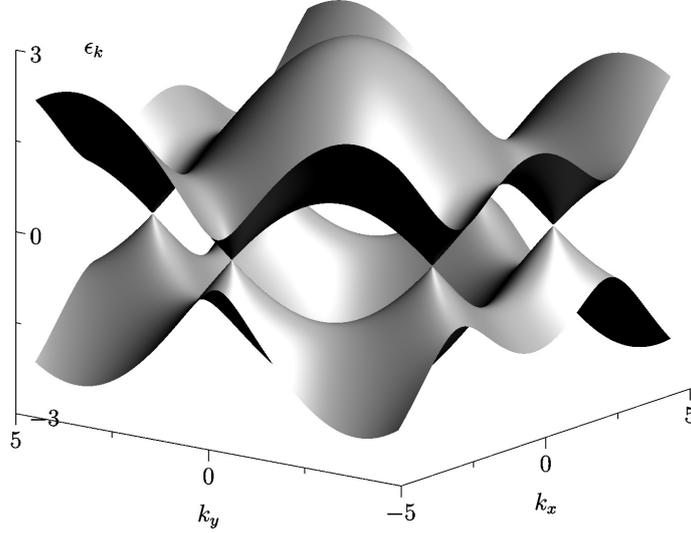


FIGURE 1.4 – Représentation 3D des valeurs propres  $\pm\epsilon_{\mathbf{k}}$  avec la bande positive (électrons) et négative (trous). La perspective nous permet de voir quatre des six cônes de Dirac.

Le spectre d'énergie du système pur isolé est donné par les valeurs propres de  $H_{\mathbf{k}}(0)$  [52],

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = |h_{\mathbf{k}}|, \quad (1.13)$$

(on représente  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  à la Fig. 1.4 et les contours à la Fig. 1.3). Les vecteurs d'onde correspondants sont,

$$\begin{aligned} |\mathbf{k}, +, \uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & |\mathbf{k}, -, \uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |\mathbf{k}, +, \downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}}/2} \end{pmatrix}, & |\mathbf{k}, -, \downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -e^{i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}}/2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

où  $\tan \phi_{\mathbf{k}} = \text{Im } h_{\mathbf{k}} / \text{Re } h_{\mathbf{k}}$ , et les signes  $\pm$  correspondent à des états d'énergie positive (électrons) ou négative (trous). Nous rappelons que ce que l'on nomme ici électrons et trous ne sont qu'une analogie aux particules et antiparticules (électron et positron) de la mécanique quantique relativiste, décrivant les excitations électroniques dans le graphène.

### 1.2.2 Potentiel aléatoire

On ajoute au terme de saut avec le terme d'impuretés qui couple électrons et trous avec des moments magnétiques (classiques) à travers la constante d'échange  $J_I$  [55],

$$H(t) = -\nu \sum_{\langle i,j \rangle} \left( e^{-i\phi_{ij}(t)} c_j^\dagger \sigma_0 c_i + e^{i\phi_{ij}(t)} c_i^\dagger \sigma_0 c_j \right) + J_I \sum_{i \in I} \mathbf{n}_i \cdot (c_i^\dagger \boldsymbol{\sigma} c_i), \quad (1.14)$$

où dans le terme d'impuretés,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  représente les matrices de Pauli. La somme s'effectue sur l'ensemble  $I$  de  $N_I$  sites distribués aléatoirement, et  $\mathbf{n}_i$  est un vecteur normal pointant dans la direction du moment magnétique de l'impureté considérée. Le nombre d'impuretés par site est noté  $n_I = N_I a^2 / L^2$ .

Le hamiltonien s'écrit dans l'espace des moments :

$$H(t) = \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger H_{\mathbf{k}}(t) \psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q} \in \text{BZ}} \psi_{\mathbf{q}}^\dagger V_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}. \quad (1.15)$$

Dans cet espace, le terme de saut du hamiltonien devient,

$$H_{\mathbf{k}}(t) = \sigma_0 \otimes \begin{pmatrix} 0 & h_{\mathbf{k}}(t) \\ h_{\mathbf{k}}^*(t) & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.16)$$

et le terme de couplage entre spins fixés et itinérants est donné par la convolution

$$V_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} = J_I \sum_{i \in I} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} \mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes \chi_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i}, \quad (1.17)$$

où  $\chi_i = \text{diag}(1, 0)$  si  $i \in A$  et  $\chi_i = \text{diag}(0, 1)$  si  $i \in B$ .

Nous utiliserons comme système d'unité les valeurs expérimentales mesurées sur des échantillons de graphène [54], soit  $\nu = 3 \text{ eV}$  et  $a = 0.25 \text{ nm}$  respectivement comme unités d'énergie et de longueur. L'unité de temps est  $t_0 = \hbar / \nu \approx 0.3 \text{ fs}$ , et l'unité de champ électrique  $E_0 = \nu / ea \approx 10^{10} \text{ V m}^{-1}$ . La vitesse de Fermi est de l'ordre de  $v_F \sim \nu a / \hbar \approx 10^6 \text{ ms}^{-1}$ . Dans la suite nous utilisons le système d'unités où  $\nu = a = \hbar = e = 1$ . Les valeurs typiques du modèle adimensionné sont :  $J_I = 0.1, \dots, 1.5$ ,  $n_I = 0.4$ , et  $E_y = 10^{-3}, \dots, 10^{-2}$ .

Dans le hamiltonien du système pur, nous pouvons observer l'apparition de deux échelles de temps : l'une liée à la propagation des électrons avec  $t_0 \sim 1$  et l'autre liée à l'application du potentiel  $Et$  avec  $t_E \sim 1/\sqrt{E}$ . Quand le champ électrique est faible ( $\sqrt{E} \ll 1$ ), nous avons  $t_E \gg t_0$ , soit deux échelles de temps distinctes. Une troisième échelle de temps apparaît avec l'introduction de conditions de bords périodiques, il s'agit du temps de Bloch  $t_B \sim E$ .

### 1.2.3 Méthode d'intégration numérique

L'évolution temporelle du système est calculée à partir de l'opérateur d'évolution

$$U_{\mathbf{k}} = T \exp \left( -i \int_t^{t'} H_{\mathbf{k}}(t) dt \right), \quad (1.18)$$

où  $T$  est l'opérateur d'ordonnement du temps. Dans l'approximation des petits pas de temps, cet opérateur s'écrit

$$U_{\mathbf{k}} = \exp \left( -i \int_t^{t+\Delta t} H_{\mathbf{k}}(t) dt \right), \quad (1.19)$$

et on le discrétise en utilisant une méthode de séparation dans l'espace des moments en pas de temps  $\Delta t$

$$\Psi_{\mathbf{k}}(t + \Delta t) = U_{\mathbf{k}}(\frac{1}{2}\Delta t) T_{\mathbf{k}}(t + \Delta t) U_{\mathbf{k}}(\frac{1}{2}\Delta t) \Psi_{\mathbf{k}}(t), \quad (1.20)$$

où

$$T_{\mathbf{k}}(t + \Delta t) = \exp \left\{ -\frac{i}{2}\Delta t [H_{\mathbf{k}}(t + \Delta t) + H_{\mathbf{k}}(t)] \right\}.$$

Cette méthode n'est pas exacte car elle implique des  $\Delta t$  suffisamment petits, l'erreur commise étant de l'ordre de  $(\Delta t)^2$  [56]. En appliquant la méthode semi spectrale permettant de calculer l'évolution induite par le désordre en espace réel (où le potentiel est diagonal), on obtient :

$$U_{\mathbf{k}}(\frac{1}{2}\Delta t) = F_{\mathbf{k},i}^{-1} \circ \exp \left[ -\frac{i}{2}\Delta t V_i \right] \circ F_{i,\mathbf{k}},$$

avec  $F_{i,\mathbf{k}}$  la transformée de Fourier, et  $V_i = J_I \mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes \chi_i$  l'énergie potentielle d'impuretés. La fonction d'onde est obtenue à partir de  $\Psi(\mathbf{x}_i, t) = F_{i,\mathbf{k}} \circ \Psi_{\mathbf{k}}(t)$ . Le maillage de vecteurs  $\mathbf{k}$  est défini dans le rectangle de la Fig. 1.3, avec deux fois l'aire de la première zone de Brillouin.

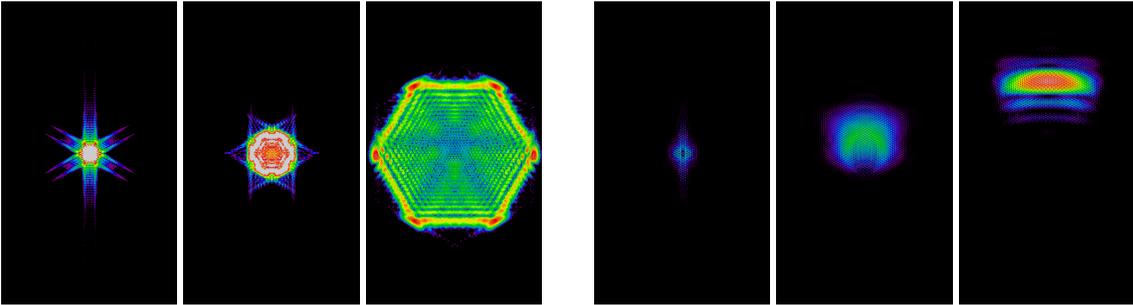


FIGURE 1.5 – Évolution temporelle des densités de trou (gauche) et d'électron (droite). Temps  $t = 4, 16, 60 t_0$ , champ électrique  $E_y = 0.01 E_0$ , réseau  $2 \times 256^2$  sites. La palette de couleurs (de bleu à rouge) est en échelle logarithmique pour rehausser les petites valeurs de la fonction d'onde. Des cutoffs ont été appliqués sur les plus petites et les plus grandes valeurs de la fonction d'onde pour respectivement définir le niveau de noir et d'écrêtage (blanc). Toutes les figures d'évolution de fonction d'onde qui suivront ont été générées avec les mêmes valeurs de cutoff.

Pour illustrer le comportement du système dans le cas le plus simple, nous montrons dans la Fig. 1.5 des instantanés de la densité de probabilité d'électron et de trou  $|\Psi(\mathbf{x}_i, t)|^2$  pour le système pur, à différents temps. Une échelle logarithmique est utilisée pour rehausser les faibles valeurs de la fonction d'onde. La condition initiale est un trou placé au centre du réseau, dans un état possédant pour fonction d'onde  $\Psi(\mathbf{x}_0, 0) = \langle \mathbf{x}_0, 0 | \mathbf{k}, -, \uparrow \rangle$ . La fonction d'onde d'électron est initialement nulle, mais comme on le voit dans le panneau de droite de la Fig. 1.5, elle croît avec le temps. Le maximum de probabilité de densité tends à glisser dans la direction de  $E_y$  pour les trous, et dans la direction opposée pour les électrons. Tandis que la densité d'électron croît dans la direction  $y$  positive, la densité de trou développe simultanément une asymétrie, avec une plus grande concentration dans

la direction  $-y$ . La croissance de la densité d'électron est liée à la production de paires électrons-trous. En effet, sous l'action du champ électrique fort, des paires électrons-trous sont produites à travers le mécanisme de Schwinger [43, 52, 57], menant au régime de réponse non-linéaire (le mécanisme de Schwinger est l'équivalent en physique des particules du mécanisme de Landau-Zener que nous décrirons dans la section suivante). Nous pouvons remarquer qu'au temps  $t \approx 60 t_0$  la fonction d'onde atteint les bords du système, donnant un ordre de grandeur pour le seuil des effets de taille finie (qui dépendent de l'intensité du champ électrique); dans la suite nous montrons l'évolution des quantités physiques jusqu'à des temps  $t = 100 t_0$  (avec un réseau plus grand :  $2 \times 512^2$  sites).

## 1.3 Courant et création de paires

### 1.3.1 Système pur

#### 1.3.1.1 Approche de Landau-Zener

Nous allons appliquer le mécanisme de Schwinger au cas du graphène et le comparer à l'effet Landau-Zener [58, 59, 60]. Il s'agit de dénombrer les paires électron-trou produites par l'application d'un champ électrique classique et la densité de ces porteurs créés nous renseignera sur les propriétés de transport du graphène [52].

Nous nous intéressons au cas du graphène pur, et les secteurs de spins étant dégénérés, nous n'en considérerons qu'un seul (en prenant en compte cette dégénérescence par un facteur 2 dans le courant). Au voisinage du point  $K$  de la zone de Brillouin le hamiltonien se réécrit comme étant [30, 29]

$$H_{\mathbf{k}} = v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.21)$$

En le réécrivant avec les trois matrices de Pauli  $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$  il devient

$$H_{\mathbf{k}} = v_F(\tau_x k_x + \tau_y k_y), \quad H_{\mathbf{k}} = v_F \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{k}, \quad (1.22)$$

et  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ . Remarque : en développant au voisinage de  $K'$  vient le résultat suivant

$$H_{\mathbf{k}} = v_F(\tau_x k_x - \tau_y k_y), \quad H_{\mathbf{k}} = v_F \boldsymbol{\tau}^* \cdot \mathbf{k}.$$

Au temps  $t = 0$  un champ électrique est introduit suivant  $y$ , dérivant du potentiel vecteur dépendant du temps  $\mathbf{A}(t) = (0, A(t), 0)$  avec  $A(t) = Et$ . Il découle une équation de Dirac [30, 52]

$$H_{\mathbf{k}} = v_F \{ \tau_x k_x + \tau_y (k_y - A(t)) \}. \quad (1.23)$$

On diagonalise le Hamiltonien avec la transformation [52]

$$U^\dagger H_{\mathbf{k}} U = \tau_z \epsilon_k(t). \quad (1.24)$$

Ceci nous permet de nous placer dans le cas de la transformation adiabatique du modèle Landau-Zener avec le suivi de l'évolution d'un état pour un champ électrique infinitésimal. La transformation est donnée par la matrice unitaire

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} & -e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}, \quad (1.25)$$

avec  $\tan \varphi = (k_y - A(t))/k_x$ . Et le spectre d'énergie est donné par

$$\epsilon_k(t) = \pm v_F \sqrt{k_x^2 + (k_y - A(t))^2}. \quad (1.26)$$

En posant l'équation de Schrödinger  $H_k(t)\psi_k(t) = i\partial_t\psi_k(t)$  et le changement de base  $\psi_k(t) = U\Phi_k(t)$  il vient le changement de jauge

$$i\partial_t\Phi_k(t) = (U^\dagger H_k U - iU^\dagger \partial_t U)\Phi_k(t),$$

soit

$$U^\dagger H_k U \Phi_k(t) = i(\partial_t + U^\dagger \partial_t U)\Phi_k(t),$$

que l'on peut apparenter à une dérivation covariante :  $D_t = \partial_t + U^\dagger \partial_t U$ . On obtient donc finalement [52]

$$i\partial_t\Phi_k(t) = \left( \tau_z \epsilon_k(t) - \tau_y \frac{v_F^2 k_x E}{2\epsilon_k^2(t)} \right) \Phi_k(t). \quad (1.27)$$

On peut voir que la transformation fait apparaître des termes hors diagonaux dans le hamiltonien. Les termes hors diagonaux ont pour conséquence de briser l'équilibre du système qui aura tendance à changer d'état : ici il peut y avoir le transfert de la fonction d'onde d'un état  $A$  vers un état  $B$  et vice versa, ce qui nous ramène précisément à l'effet Landau-Zener.

On va étudier un système dans l'état fondamental caractérisé par des niveaux d'énergie négatifs entièrement remplis  $\Phi_k(t=0) = (0, 1)$ . On pose dans la suite l'opérateur courant  $j_y = -v_y$  avec  $v_y$  l'opérateur vitesse. Soit

$$v_y = i[H, Y],$$

$$v_y = i[v_F \tau_y P_y, Y] = v_F \tau_y,$$

et donc l'opérateur courant devient

$$j_y = -2v_F \tau_y,$$

où le facteur 2 prend en compte la dégénérescence de spin. Après le changement de jauge on a

$$j_y = -2v_F(\tau_z \cos \varphi + \tau_x \sin \varphi). \quad (1.28)$$

Soit la fonction d'onde  $\Phi_k(t) = (\alpha_k(t), \beta_k(t))$  et la valeur du courant au temps  $t$  est

$$\langle \alpha_k(t) | j_y | \beta_k(t) \rangle = \langle j_y \rangle_k(t),$$

ce qui nous donne

$$\langle j_y \rangle_k(t) = -2v_F \left\{ \cos \varphi (|\alpha_k(t)|^2 - |\beta_k(t)|^2) + 2 \sin \varphi \operatorname{Re}[i\alpha_k(t)\beta_k^*(t)] \right\}. \quad (1.29)$$

Cette expression peut être modifiée en utilisant la conservation de la charge  $|\alpha_k(t)|^2 - |\beta_k(t)|^2 = 2|\alpha_k(t)|^2 - 1$ . On peut montrer simplement que

$$\partial_t |\alpha_k(t)|^2 = 2\operatorname{Re}[\alpha_k(t)\partial_t \alpha_k^*(t)].$$

En utilisant le Hamiltonien Eq. 1.27, il vient

$$\partial_t \alpha_k^*(t) = i\epsilon_k(t)\alpha_k(t) - i\frac{v_F^2 k_x E}{2\epsilon_k^2(t)}\beta_k^*(t),$$

d'où

$$\partial_t |\alpha_k(t)|^2 = -\frac{v_F^2 k_x E}{\epsilon_k^2(t)} \operatorname{Re}[i\alpha_k(t)\beta_k^*(t)].$$

Ce qui nous mène, en posant le taux de création de paires  $n_{\mathbf{k}}(t) = |\alpha_{\mathbf{k}}(t)|^2$ , à [52]

$$\langle j_y \rangle_{\mathbf{k}}(t) = -2v_F \left[ \frac{v_F(k_y - Et)}{\epsilon_{\mathbf{k}}(t)} (2n_{\mathbf{k}}(t) - 1) - 2 \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}(t)}{v_F E} \partial_t n_{\mathbf{k}}(t) \right]. \quad (1.30)$$

Cette équation nous donne le courant dans le graphène ainsi que son évolution dans le temps lorsque l'on applique un champ électrique  $E$ .

Nous allons maintenant expliciter  $n_{\mathbf{k}}(t)$  et donner sa signification physique pour obtenir l'évolution temporelle du courant. En appliquant la méthode de Zener au système d'équations couplées définies par le Hamiltonien Eq. 1.27 on obtient la solution [52]

$$n_{\mathbf{k}}(t) = \Theta(k_y) \Theta(Et - k_y) \exp \left( -\frac{\pi v_F k_x^2}{E} \right), \quad (1.31)$$

avec  $\Theta$  la fonction de Heaviside. Cette équation est le taux de production de paires de Schwinger mais aussi la probabilité de transition de Landau-Zener entre un état initial et un état final [59]. On peut la voir également comme le coefficient de transmission des ondes à travers la barrière de potentiel que constitue le gap d'énergie qui s'ouvre sous l'action du champ électrique. Pour un échantillon d'une longueur de l'ordre de  $l \approx 1 \mu\text{m}$  et une tension appliquée de l'ordre de 1 V, le champ électrique est de l'ordre de  $E \approx 10^6$  V/m et le taux de création de paires intégré sur tous les  $\mathbf{k}$  est de l'ordre de  $n \approx 10^{10}$ .

En injectant l'Eq. 1.31 dans l'Eq. 1.30 et en intégrant sur les  $\mathbf{k}$  on aboutit à une équation composée de deux termes que voici [52]

$$\langle j_y \rangle(t) = 2 \frac{E}{\pi^2} \sqrt{v_F E t^2}, \quad (1.32)$$

$$\langle j_y \rangle_{\text{pol}}(t) = 2 \frac{E}{\pi^3}. \quad (1.33)$$

Ces deux termes sont respectivement le terme de conduction et le terme de polarisation. À faible champ électrique  $E$  le courant de polarisation domine, mais ensuite le courant de conduction prend le dessus. Ceci correspond au fait que si  $E$  est faible, on polarise le graphène sans pour autant avoir le transfert des fonctions d'onde de  $A$  vers  $B$  mais que si celui ci devient plus intense les transitions deviennent possible. De plus on voit que le terme de conduction est linéaire avec le temps, ce qui correspond à la production croissante de paires décrite par Schwinger. L'évolution temporelle du courant dans une feuille de graphène fait apparaître un temps critique, séparant les régimes où dominant le courant de polarisation ou le courant de création de paires. [52]

$$t_c = \frac{\pi}{\sqrt{v_F E}}, \quad (1.34)$$

où  $v_F = \sqrt{3}/2$  dans nos unités. Pour un champ électrique de l'ordre de  $E \approx 10^6$  V/m et au temps critique, le courant de polarisation est de l'ordre de  $\langle j_y \rangle_{\text{pol}} \approx 10$  A et le courant de conduction est de l'ordre de  $\langle j_y \rangle(t_c) \approx 100$  A. Nous écrivons le taux de création de paires intégré sur tous les modes  $\mathbf{k}$  :

$$N(t) = \frac{2}{\pi^2} \int d\mathbf{k} n_{\mathbf{k}}(t) = \frac{2E}{\pi^2 v_F} \sqrt{v_F E t^2}. \quad (1.35)$$

Le courant peut donc être écrit en fonction du taux de création de paires

$$\langle j_y \rangle(t) = v_F N(t). \quad (1.36)$$

### 1.3.1.2 Approche WKB

Le courant de création de paires peut aussi être obtenu par l'approche WKB [45] à partir de l'opérateur de Dirac pour du graphène pur. À l'aide de la formule de Landauer [61]

$$I = \langle j \rangle = \frac{2e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} M(\epsilon) T_{\text{WKB}}(\epsilon), \quad (1.37)$$

où  $f(\epsilon)$  est la distribution de Fermi-Dirac,  $M(\epsilon)$  est le nombre de modes de propagation et  $T_{\text{WKB}}$  est le coefficient de transmission de l'onde à travers le gap déterminé avec la méthode WKB<sup>1</sup> nous allons pouvoir déterminer une expression du courant et la comparer à celle obtenue au §1.3.1.1 [45]. Les transitions se produisent près du point où  $\epsilon_k = 0$ . On suppose que  $k_y \gg k_x$  et la composante suivant  $y$  du vecteur d'onde de l'électron au temps  $t$  est donnée par

$$k_y = \sqrt{\left(\frac{Et}{\hbar}\right)^2 - k_x^2}, \quad (1.38)$$

et le coefficient de transmission est obtenu après intégration dans la zone de potentiel classiquement interdite

$$\begin{aligned} T_{\text{WKB}} &= \exp\left(-2\text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dy k_y\right) \\ &= \exp\left(-\frac{2k_x^2}{E} \int_{-1}^1 ds \sqrt{1-s^2}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{k_x^2 \pi v_F}{E}\right). \end{aligned} \quad (1.39)$$

On peut remarquer que ce coefficient de transmission correspond au taux de création de paire Eq. 1.31. Le courant s'écrit donc grâce à la formule de Landauer (avec un facteur 4 de dégénérescence de spin et de vallée)

$$\langle j_y \rangle(t) = 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_x}{2\pi} \int_0^{Et} \frac{d\epsilon_k}{dk_y} dk_y T_{\text{WKB}}, \quad (1.40)$$

avec  $\epsilon_k = \pm v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . Comme  $k_y \gg k_x$  on peut remplacer  $\frac{d\epsilon_k}{dk_y}$  par  $v_F dk_y$ , ce qui nous amène après intégration à

$$\langle j_y \rangle(t) = \frac{2E}{\pi^2} \sqrt{v_F E t^2}, \quad (1.41)$$

qui est l'expression du courant dans le régime non linéaire établie au §1.3.1.1. Le régime linéaire n'apparaît pas ici car on a posé la condition  $k_y \gg k_x$  pour l'approche WKB.

### 1.3.1.3 Courant et création de paires sur un réseau

Afin de caractériser le transport en présence d'impuretés sur un réseau, nous nous intéressons au taux de création de paires, dont la définition est [53]

$$N(t) = \sum_{\mathbf{k} \in BZ} \left\langle \left| \langle - | \psi_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \psi_{\mathbf{k}} | + \rangle \right|^2 \right\rangle, \quad (1.42)$$

---

1. Méthode semi-classique développée en 1926 par Wentzel, Kramers et Brillouin.

où  $|+\rangle = |\mathbf{k}, +, \uparrow\rangle$ , et  $|-\rangle = |\mathbf{k}, -, \uparrow\rangle$ , ainsi que la densité de courant moyenne (moyennée sur la surface  $L^2$ ),

$$j(t) = \langle j_y \rangle(t) = -\frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \left\langle \langle 0 | \psi_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial A_y} \psi_{\mathbf{k}}(t) | 0 \rangle \right\rangle, \quad (1.43)$$

où les crochets extérieurs  $\langle \dots \rangle$  sont la moyenne sur le désordre, et  $|0\rangle$  est l'état initial, habituellement pris comme étant  $|0\rangle = |\mathbf{k}, -, \uparrow\rangle$  (un trou de spin up centré à l'origine). La densité de courant et le taux de création de paires correspondant, dans le cas pur, sont représentés à la Fig. 1.6, pour différentes valeurs de champ électrique. Après une transitoire initiale, dans laquelle le courant oscille autour d'une constante et dont la durée se raccourcit en augmentant l'intensité du champ électrique, le courant croît presque linéairement avec le temps. La constante caractérisant le régime initial  $j(t)/E$ , correspond à la conductivité,

$$\sigma_0 = \frac{4 e^2}{\pi h} = \frac{2}{\pi^2}, \quad (1.44)$$

obtenue par la théorie de la réponse linéaire pour des champs statiques [46]. Un calcul simple, mené en utilisant l'analogie du système de Dirac basse énergie avec le hamiltonien de l'effet tunnel de Landau-Zener [62], mène à la mise à l'échelle  $t \rightarrow \sqrt{E}t$  et  $j \rightarrow E(\sqrt{E}t)$ ; le taux de création de paires se comporte de façon similaire. Nous obtenons explicitement [52],

$$j(t)/E = 2ev_F N(t)/E = \sigma_0 \sqrt{v_F E} t, \quad (1.45)$$

où, dans nos unités, la vitesse de Fermi près du point de Dirac est  $v_F = \sqrt{3}/2$ . Ces mises à l'échelle sont confirmées numériquement, comme montré à la Fig. 1.6 (colonnes de droite pour (a) et (b)); en particulier, la pente prédite par Eq. (1.45), 0.189 n'est que légèrement plus grande que dans le résultat numérique, à peu près 0.16. La différence pourrait être attribuée à la renormalisation de la formule basse énergie continue (1.45), due au réseau et sa la longueur caractéristique intrinsèque  $a$  et à la largeur finie des bandes d'énergie. En outre, la pente correspondante du taux de création de paires, environ 0.1, est en parfait accord avec la relation  $j(t)/N(t) = 2ev_F = \sqrt{3} \approx 1.6$ . Par conséquent, les régimes linéaire et non-linéaire sont tous deux caractérisés par le *même* préfacteur, la conductivité statique  $\sigma_0$ . De plus, comme nous le démontrons dans la suite, le comportement observé dans la limite pure s'étend de façon lisse au régime (paramétrique) du désordre, comme prédit par la théorie de la réponse linéaire : la conductivité statique est insensible au désordre faible.

Il est à noter que le régime statique pur est singulier dans le cadre de l'approximation de la réponse linéaire, en ce sens que la valeur de la conductivité dépend de la manière dont sont prises la valeur de fréquence nulle  $\omega$  et la limite de désordre (comme indiqué dans le document fondateur Ref. [35]). En effet, au lieu de la valeur statique (1.44) et dans la limite de fréquence basse, nous obtenons,

$$\bar{\sigma} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma(\omega) = (\pi/2)(e^2/h) = 1/4 \neq \sigma_0.$$

Cette valeur de conductivité a été trouvée par ailleurs pour le régime linéaire initial, en utilisant une approximation valide pour des moments finis  $p \gg eEt$ , [63] ou plus généralement, pour les régimes linéaire et non-linéaire, en utilisant une représentation en série tronquée de la solution de l'équation de Dirac, calculée en utilisant de petits et grands cut-offs (see Ref. [53])<sup>2</sup>. Avec le modèle présenté, nous utilisons une méthode d'intégration spectrale qui nous permet de calculer exactement les opérateurs différentiels sur le

2. Notons cependant que l'évolution non-linéaire trouvée dans Ref. [53] est identique à celle montrée dans la Fig. 1.6. En fait, la formule de fit (1.45) est rigoureusement équivalente à l'Eq. (72) du papier référencé (où les auteurs notent  $\sigma_2 \lambda = \sigma_0 \sqrt{v_F} = (2/\pi^2)(\sqrt{3}/2)^{1/2}$  avec  $\sigma_2 = \bar{\sigma}$ ).

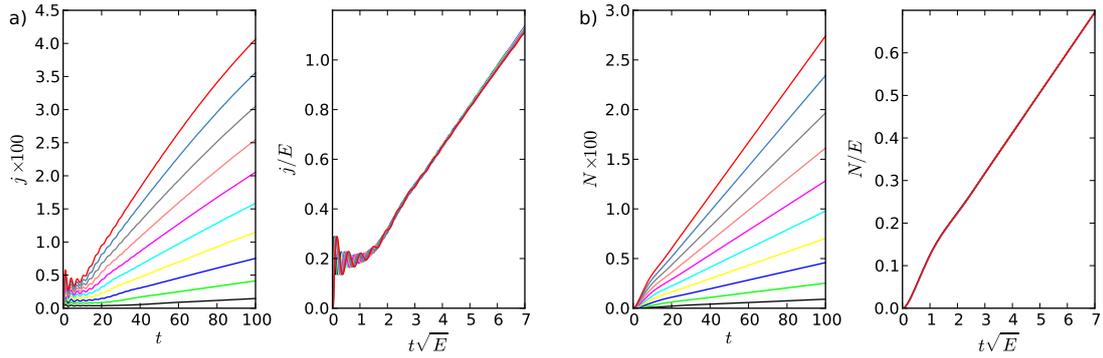


FIGURE 1.6 – Courant (a) et taux de création de paires (b), pour une feuille de graphène pure. Quand les données sont mises à l'échelle avec la puissance du champ électrique appropriée, les courbes se superposent (comme montré dans les panneaux de droite de (a) et (b)). Champs électriques  $E = 0.002, 0.004, \dots, 0.02 E_0$  (10 valeurs par pas de  $0.002 E_0$ , du noir au rouge). Les calculs ont été effectués sur un réseau de  $2 \times 512^2$  sites. Toutes les figures de courants et de taux de création de paires suivantes ont été générées avec les mêmes paramètres de champs électriques et de taille de réseau.

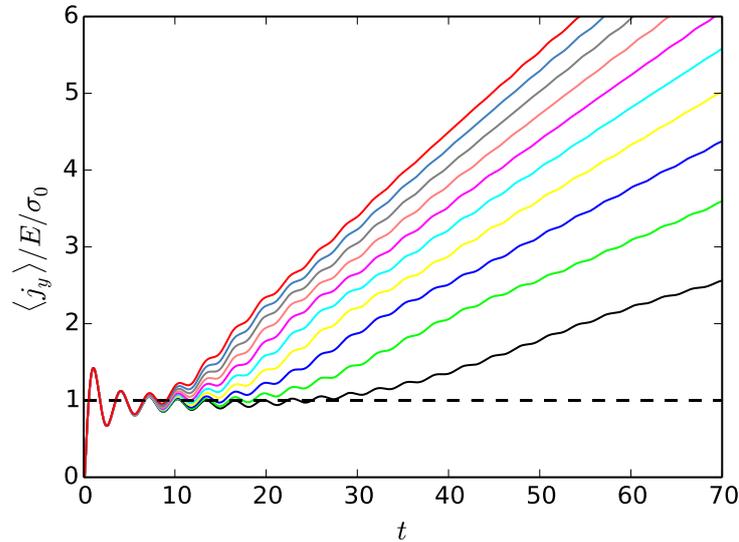


FIGURE 1.7 – Les courants ont été normalisés par leurs champs électriques respectifs et par la conductivité minimale  $\sigma_0$ . Nous pouvons observer que la réponse linéaire est décrite par la conductivité  $\sigma_0$ , là où les courbes se superposent à la droite en pointillés. Les paramètres de champ électrique et de taille de réseau sont les mêmes que pour la Fig. 1.6.

réseau. La prise en compte complète des effets du réseau régularisent la dynamique, menant naturellement à la conductivité  $\sigma_0$ , dans un champ électrique strictement constant,  $\omega = 0$ .

### 1.3.2 Système désordonné

#### 1.3.2.1 Densité d'états

Dans la suite nous considérons deux types de désordres magnétiques, un avec l'orientation des moments magnétiques  $\mathbf{n}_i$  uniformément distribué sur la sphère, et l'autre avec  $\mathbf{n}_i = (0, 0, \pm 1)$  pour les sites des deux sous-réseaux A et B, respectivement. L'effet des impuretés sur les bandes électroniques dépendra de ces deux types de désordres magnétiques : des moments distribués aléatoirement (cas paramagnétique) contribueront à peupler les niveaux d'énergie autour de l'énergie de Fermi ; des moments magnétiques suivant un ordre antiferromagnétique avec des orientations de spins différentes suivant les deux sous-réseaux (cas magnétique) briseront l'invariance par renversement du temps et ouvriront un gap. Une mesure quantitative de ces effets peut être obtenue par la densité d'états,

$$\rho(\epsilon) = \sum_n \langle \delta(\epsilon - \epsilon_n) \rangle, \quad (1.46)$$

où  $\epsilon_n$  sont les états-propres du hamiltonien désordonné. Nous calculons la densité d'états Eq. (1.46) en utilisant la méthode de Chebyshev [64] (voir annexe A). Dans la Fig. 1.8 nous montrons la densité d'états pour des intensités de désordre croissantes (données par les valeurs de la constante d'échange), dans les deux types de désordres (magnétique et paramagnétique). En accroissant l'intensité du désordre paramagnétique, les bandes d'énergie s'élargissent et une densité d'état finie se développe près de  $\epsilon = 0$ . En accroissant le désordre magnétique, le comportement près de  $\epsilon = 0$  change drastiquement : un gap dont la largeur est proportionnelle à l'intensité du désordre apparaît [65, 54]. On peut s'attendre à ce que les deux types de désordre influencent différemment les propriétés de transport en fonction de la modification qu'ils peuvent introduire dans les symétries du système ; en particulier, l'ordre magnétique peut changer qualitativement la réponse du système au champ électrique appliqué, en raison de la brisure de symétrie par renversement du temps sous-jacente.

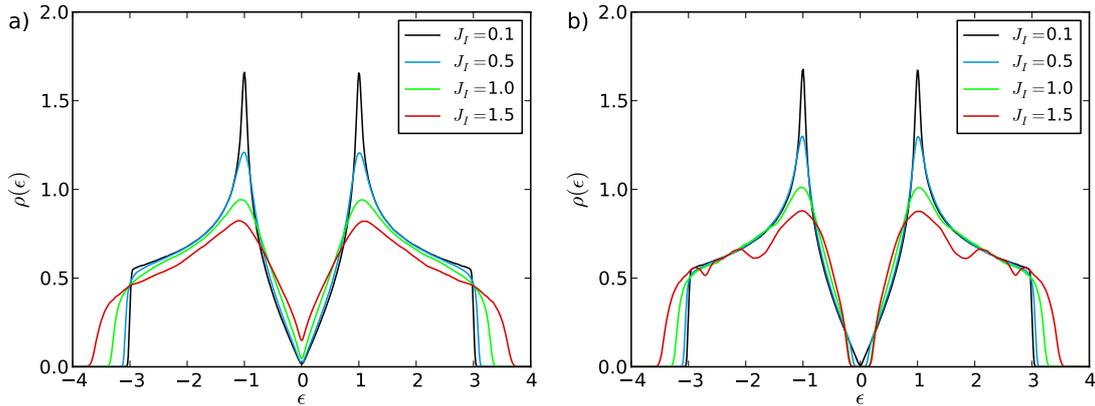


FIGURE 1.8 – Effet du désordre sur les densités d'états. (a) cas paramagnétique ; (b) cas magnétique. Désordre  $J_I = 0.1, 0.5, 1.0, 1.5 \nu$ . On observe l'ouverture d'un gap dans le cas magnétique, tandis que des états sont peuplés autour de  $\epsilon = 0$  dans le cas paramagnétique. Les calculs ont été effectués sur un réseau de  $2 \times 512^2$  sites.

La figure 1.9 présente l'évolution temporelle de la densité d'électron pour le cas paramagnétique (à gauche) et pour le cas magnétique (à droite), pour deux valeurs d'intensité de désordre, faible (en haut) et forte (en bas). On peut les comparer au cas pur à la Fig. 1.5 (à gauche). À faible désordre, l'électron se propage comme dans le cas pur, de façon quasi-balistique (panneaux du haut). Augmenter l'intensité du désordre résulte en un changement de régime, vers un régime diffusif (panneaux du bas). Il est également intéressant de noter que, dans la phase initiale de l'évolution du système, la densité d'électron croît rapidement comparé au cas pur, ce qui suggère une augmentation du taux de création de paires en présence des impuretés. L'effet principal du désordre se situe dans l'accroissement rapide et renforcé de la densité de probabilité, dû à la diffusion sur les impuretés. La majeure partie de la densité d'électron restant en arrière du glissement du maximum de probabilité de densité du cas pur, le courant doit décroître. La comparaison entre les deux types de désordres révèle que dans le cas magnétique, l'asymétrie de distribution est plus faible que dans le cas paramagnétique, et qu'à fort désordre elle tend à devenir pratiquement isotrope, signalant un possible effet de localisation.

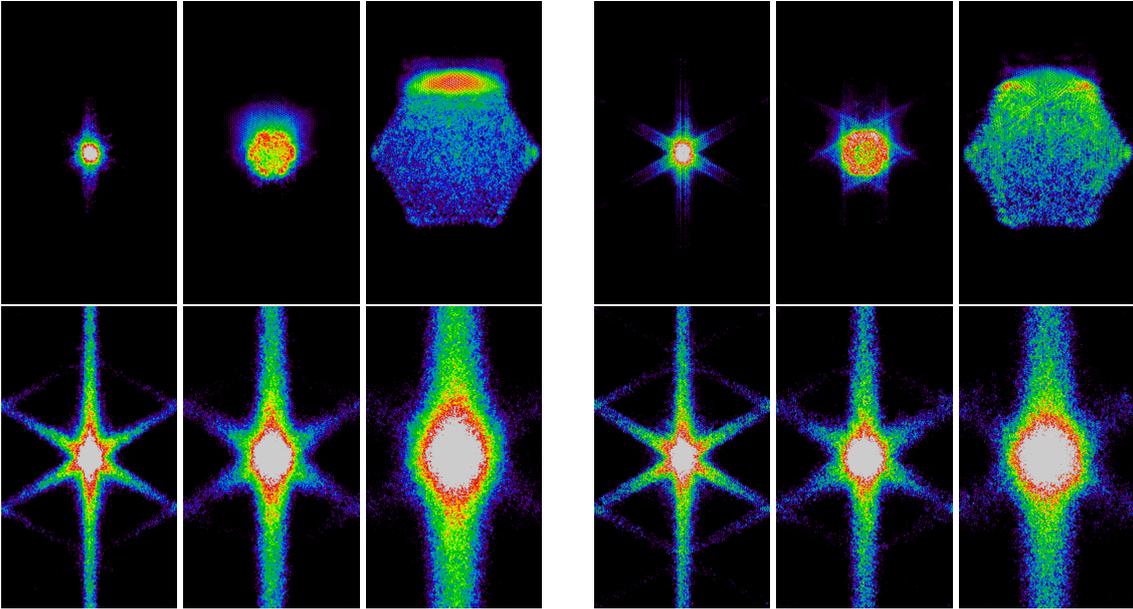


FIGURE 1.9 – Densité d'électron en fonction du temps pour différentes intensités de désordre (haut  $J_I = 0.1\nu$ , bas  $J_I = 1.0\nu$ ) et configurations (gauche paramagnétique, droit magnétique). Sur la rangée du haut on peut observer une plus grande propension à la localisation dans le cas magnétique que dans le cas paramagnétique (l'asymétrie de densité de probabilité est moins importante). La rangée du bas présente un régime diffusif pour les deux types de désordre, ainsi qu'un renforcement de la densité de probabilité de présence, conséquence d'une augmentation brusque de la production de paires. Champ électrique  $E = 0.02 E_0$ , temps  $t = 4, 16, 60 t_0$ , taille du réseau  $2 \times 256^2$  sites.

### 1.3.2.2 Largeur du paquet d'onde

L'existence du changement entre régime balistique et régime diffusif est également soutenue par la mesure de la largeur de la fonction d'onde  $w(t)$ ,

$$w(t)^2 = \int_{L^2} d\mathbf{x} |\mathbf{x}|^2 |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (1.47)$$

représentée à la Fig. 1.10. Le paquet d’ondes évolue suivant une loi de puissance  $w(t) \sim t^\beta$ , avec un exposant caractéristique  $\beta$ . L’exposant, qui dans le cas pur a la valeur balistique  $\beta = 1$ , tend vers la valeur diffusif  $\beta = 0.5$  dans le cas paramagnétique. Pour un désordre fort dans le cas magnétique, il montre une transition d’un comportement super-diffusif vers un comportement sous-diffusif. La transition entre ces deux régimes coïncide avec le croisement des courbes dans la Fig. 1.10b, à environ  $J_I \approx 1 \nu$ .

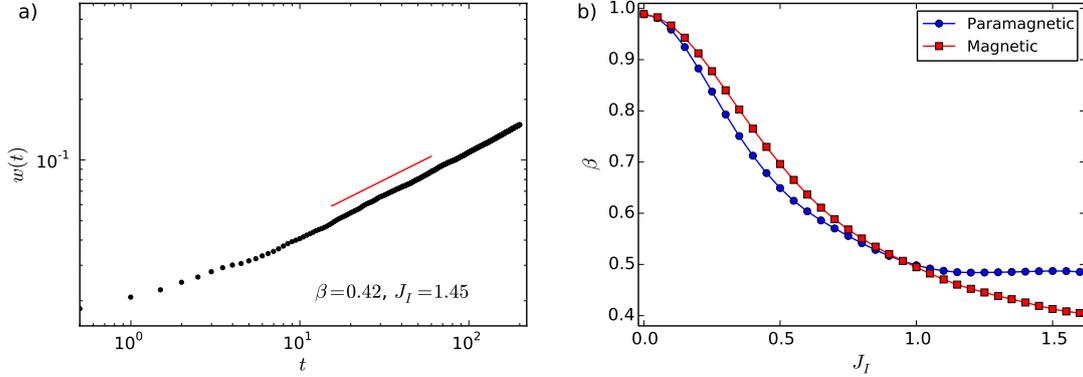


FIGURE 1.10 – Largeur du paquet d’onde, se propageant dans un environnement désordonné (champ électrique nul). (a) Exemple de  $w(t)$  dans le cas magnétique, avec un exposant sous-diffusif  $\beta = 0.45$  (la largeur est mesurée en unités de constante de réseau  $a$ ). (b) Exposant de la loi de puissance en fonction de l’intensité du désordre. Le cas paramagnétique (bleu) passe d’un régime balistique pur à un régime diffusif pur, tandis que le cas magnétique (rouge) tend vers un régime sous diffusif. Les calculs ont été effectués sur un réseau de  $2 \times 256^2$  sites.

### 1.3.2.3 Phénoménologie

Ces changements qualitatifs dans la structure électronique et de la phénoménologie de l’évolution du système se traduisent par une série de changements dans les propriétés de transport qui deviennent particulièrement importants dans le cas magnétique. Nous montrons à la Fig. 1.11 l’évolution temporelle de la densité de courant et du taux de création de paire, dans les cas paramagnétique (a,b) et magnétique (c,d), pour différentes valeurs de champ électrique (a-d), ou d’intensité de désordre dans le cas magnétique (e-f). Pour comparer avec le système pur Fig. 1.6, nous traçons également les données mises à l’échelle [panneaux de droite dans (a-d)]. Il est à noter que l’évolution initiale est fortement sensible à la configuration du désordre. Nous rappelons que l’état initial est un trou situé à l’origine, et polarisé en spin up. Suivant son voisinage, s’il contient ou non une impureté, ou si l’origine est occupée par une impureté, l’évolution individuelle du paquet d’onde est différente; ceci reflète l’existence de larges fluctuations statistiques du courant et de la production de paires. Ce type de dépendance aux conditions initiales a déjà été notée dans le problème de la percolation quantique bidimensionnelle [66]. Par conséquent, les données correspondantes au champ électrique les plus faibles,  $E = 2, 4, 6 \times 10^{-3}$ , n’ont pas complètement convergé après une moyenne sur  $2^{13}$  configurations (courbes noire, verte et bleue dans la Fig. 1.11).

Le comportement non-linéaire de la mise à l’échelle du courant  $j(t) \sim E^{3/2}t$  est préservé dans le cas paramagnétique (dans la limite des erreurs statistiques), mais disparaît complètement dans le cas magnétique. Même dans le cas paramagnétique et pour un désordre faible, il existe des différences par rapport au cas pur : en premier lieu, le taux

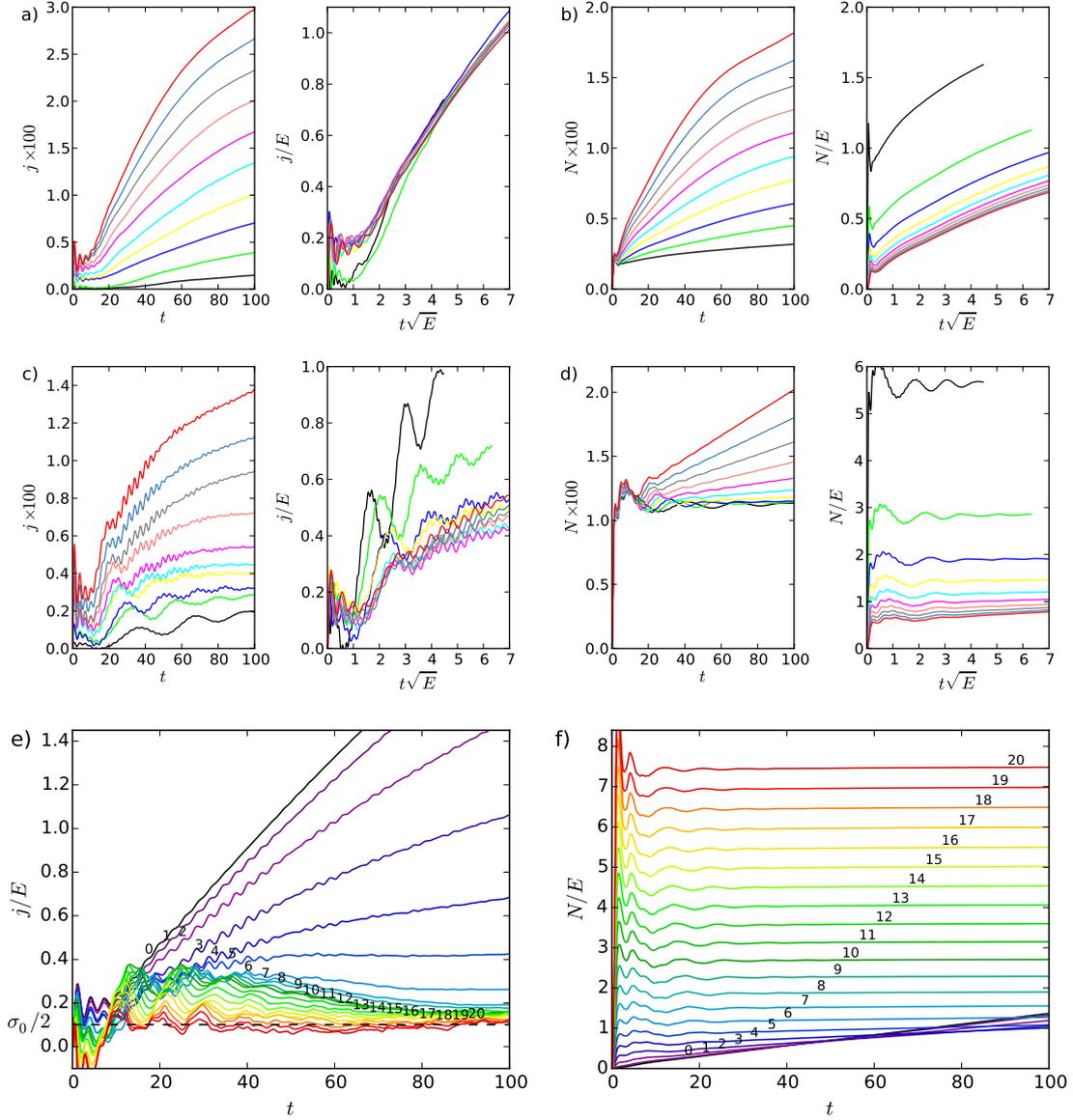


FIGURE 1.11 – Dépendance du courant (a,c,e) et du taux de création de paire (b,d,f) au champ électrique et au désordre. (a,b) cas paramagnétique, et (c,d) cas magnétique pour différentes valeurs du champ électrique ( $E = 0.002 E_0$ , en noir, jusqu'à  $0.02 E_0$ , en rouge, comme dans la Fig. 1.5), et  $J_I = 0.2\nu$ . Effet du désordre pour un champ électrique fixé  $E = 0.02 E_0$  dans le cas magnétique : courant (e), et taux de création de paires (f) ; les courbes correspondent à 21 valeurs  $J_I = 0, \dots, 1.0\nu$  (du noir au rouge, par pas de  $0.05\nu$ , et numérotées de 0 à 20). La ligne en pointillés dans (e) montre que le courant est supérieur à la moitié de la conductivité linéaire  $\sigma_0/2$  pour  $J_I \leq 1.0\nu$ . Les moyennes sont faites sur 8192 configurations de désordre. Les calculs ont été effectués sur un réseau de  $2 \times 512^2$  sites.

de création de paires initial passe à une valeur finie, ce qui compte tenu de la gamme de champs électriques utilisés dans ces calculs, apparaît être indépendant du champ électrique ; deuxièmement, en dépit de la superposition des courbes mises à l'échelle (panneaux de droite de la Fig. 1.11b), la droite en fonction du temps caractéristique est bien plus courte que dans le cas pur.

En comparant avec le cas paramagnétique, nous notons que le courant traversant un support magnétiquement polarisé est réduit par un facteur d'environ 2 pour un champ électrique donné (Fig. 1.11c). Simultanément et à première vue, paradoxalement, le nombre de paires, et donc le nombre de porteurs, augmente rapidement pendant le transitoire initial. En même temps, la propagation de la fonction d'onde est quasi-balistique dans un régime d'intensité de désordre faible à intermédiaire (cf. Fig. 1.10, pour  $J_I < 0.5$ ). Ces observations montrent que nous sommes en présence d'un régime caractérisé par une augmentation rapide de la densité de probabilité, à laquelle le taux de création de paires est proportionnel, en liaison avec un déplacement lent de sa valeur moyenne, qui détermine le courant. En outre, l'absence d'une loi de puissance définie dans le champ des caractéristiques courant-champ électrique, en particulier pour les champs électriques les plus faibles  $E \leq 0.01 E_0$  (courbe cyan), peut être reliée au comportement du nombre de paires qui tend à saturer. Par conséquent, dans le cas magnétique, le courant induit par la polarisation domine celui qui est induit par la production de paires, effaçant la dépendance en puissance du champ électrique.

Pour étudier l'influence du désordre magnétique sur le courant et la production de paires, nous fixons le champ électrique à  $E = 0.02 E_0$ , et faisons varier  $J_I$  entre la valeur « pure »  $J_I = 0$  et une valeur de désordre modérée  $J_I = 1.0 \nu$ , limite du régime balistique (Figs. 1.11e and 1.11f). Nous notons que pour une intensité de désordre d'environ  $J_I \approx 0.25$  (courbe 5), le courant et le taux de création de paires tendent à saturer vers une constante (indépendante du temps), après un régime transitoire initial. En accroissant le désordre le courant ne s'annule pas, mais semble converger (dans la limite des fortes fluctuations) vers une constante indépendante de  $J_I$ . Il est important de rappeler que l'état initial est toujours à niveau d'énergie nulle, qui est le gap d'énergie ouvert par les impuretés magnétiques (cf. Fig. 1.8). Cette valeur asymptotique dépend du champ électrique.

Le taux de création de paires semble être moins sensible aux fluctuations stochastiques. Cela se justifie par le fait que le taux de création de paires est calculé dans le repère comobile (celui dans lequel  $k_y - Et$  est constant), et est donc insensible à la phase de la fonction d'onde contrairement au courant. Après un transitoire initial,  $N(t)$  sature à une valeur proportionnelle à l'amplitude du désordre. Ceci contraste fortement avec le mécanisme de Schwinger qui donnerait un taux exponentiellement petit dans le gap d'énergie ; pour un fort désordre magnétique la production d'états électroniques à partir de l'état trou initial est sans doute due à la diffusion sur les impuretés et pas directement reliée à l'intensité du champ électrique (comme on peut le voir dans la Fig. 1.11d, où la discontinuité initiale de  $N(t)$  à  $t = 0^+$  ne dépend pas de  $E$ ).

Donc, en accroissant le désordre magnétique dans le régime balistique ou superdiffusif ( $J_I < 1$ ), le courant décroît au temps longs, mais reste au dessus d'une valeur minimum, la moitié de la conductivité minimale du graphène pur,  $\sigma_0/2$ . Simultanément, le nombre de paires croît proportionnellement à l'intensité du désordre.

## 1.4 Densité locale d'états et localisation

### 1.4.1 Localisation

Le comportement complexe observé du paquet d'onde et des propriétés particulières du courant en présence d'impuretés magnétiques polarisées ne peut être expliqué simplement par les mécanismes du transport balistique et la production de paires électrons-trous en champ électrique fort qui sont adaptés à la description du cas paramagnétique. Le fait qu'un gap s'ouvre et qu'un courant faiblement dépendant de la constante d'échange persiste à temps longs pour un désordre assez fort est un indice d'intéressantes propriétés de localisation et d'états électroniques hautement inhomogènes. Plus précisément, le courant tend vers une constante correspondant à la moitié de la conductivité minimale, qui peut être une conséquence d'une diffusion dépendance en spin et d'une localisation sélective : une des deux espèces de spin cesse éventuellement de contribuer au transport de charges.

Ce comportement, résultant de l'interaction des spins itinérants avec les moments magnétiques des impuretés, peut être étudié en utilisant la densité locale d'états,

$$\rho(i, \epsilon) = \sum_n \langle n | c_i^\dagger c_i | n \rangle \delta(\epsilon - \epsilon_n), \quad (1.48)$$

où  $\epsilon_n$  est une des valeurs propres du hamiltonien (1.14) correspondant au vecteur propre  $|n\rangle$ . De plus, les propriétés statistiques de  $\rho(i, \epsilon)$  peuvent être reliées à la localisation et aux propriétés critiques des états électroniques, et donc utilisées pour caractériser la transition métal-isolant [67, 68]. L'existence d'états localisés ou étendus est liée aux fortes fluctuations spatiales de  $\rho(i, \epsilon)$ . La distribution de probabilité de la densité locale d'états évolue de normale à log-normale, et donc sa valeur moyenne  $\langle \rho_i \rangle$ , qui coïncide avec la densité d'états, diffère de sa valeur moyenne géométrique typique  $\exp\langle \log \rho_i \rangle$  [69].

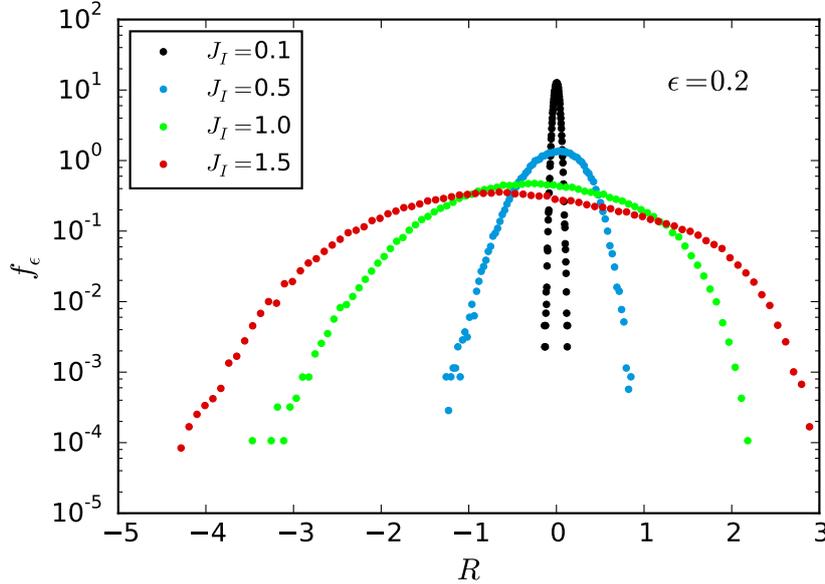


FIGURE 1.12 – Histogramme de la densité locale d'états dans le cas magnétique, montrant une distribution multi-fractale qui s'étend en accroissant l'intensité du désordre. Énergie  $\epsilon = 0.2\nu$  près du gap pour différentes valeurs de  $J_I$ . La parabole se déforme avec l'intensité du désordre et son maximum se décale vers les valeurs négatives de  $R$ , ce qui est synonyme de l'apparition d'une distribution log-normale de la densité locale d'états. L'histogramme est moyenné sur 2048 sites et 128 configurations de désordre.

Nous montrons à la Fig. 1.12 l’histogramme  $f_\epsilon[R]$  du logarithme de la densité locale d’états  $R = R(i, \epsilon) = \ln[\rho(i, \epsilon)/\rho(\epsilon)]$ , à une énergie fixée  $\epsilon$ , ainsi que la distribution spatiale d’états résolue en charge  $\rho_\pm(i, \epsilon)$ , et en spin  $\rho_{\uparrow\downarrow}(i, \epsilon)$ . La distribution log-normale caractéristique de la densité locale d’état qui devrait apparaître comme une parabole inversée dans la Fig. 1.12a se décale et se déforme avec une intensité de désordre croissante. Pour des désordres faibles l’histogramme est centré autour de  $R = 0$ , ce qui est une caractéristique d’états non localisés. Pour  $J_I = 1.0$ , près de la transition entre les régimes super-diffusif et sous-diffusif, le pic de la distribution est du côté des faibles densités, montrant une tendance à la localisation ; pour un désordre plus fort, les états proches du gap se localisent ( $J_I = 1.5$ ).

### 1.4.2 Polarons magnétiques

Le phénomène le plus frappant apparaît dans la distribution spatiale d’états électroniques montrée dans la Fig. 1.13. Les propriétés de conductivité particulières du graphène près du point de Dirac mesurées dans les expériences [33], ont été reliées avec succès à l’existence d’inhomogénéités de charges à grande échelle [70]. Les « puddles » d’électrons et trous ont été théoriquement présentés comme apparaissant dans le graphène contenant des impuretés coulombiennes (à longue portée) [71], mais peuvent également se former en présence d’impuretés à courte portée, comme dans le graphène hydrogéné [72], ou pour d’autres types d’hybridations [73]. Les impuretés antiferromagnétique aléatoirement distribuées brisent l’invariance par translation et la symétrie des sous-réseaux (en ouvrant un gap), mais préservent les symétries électrons-trous et de spins. Cependant, dans le cas critique ( $J_I \approx 1$ ), nous observons que de larges « patchs » d’électrons et de trous se forment (Fig. 1.13a), et sont fortement corrélés avec le spin des porteurs (Fig. 1.13b). Remarquablement, les « puddles » chargés sont en fait polarisés en spin comme pour les polarons magnétiques [74, 75, 54]. En l’état, quand un champ électrique est appliqué, nous trouvons que la conductivité est approximativement  $\sigma_0/2$  (Fig. 1.11e), ce qui est un résultat compatible avec une diffusion sélective charge-spin, qui élimine deux des quatre états de conduction possibles.

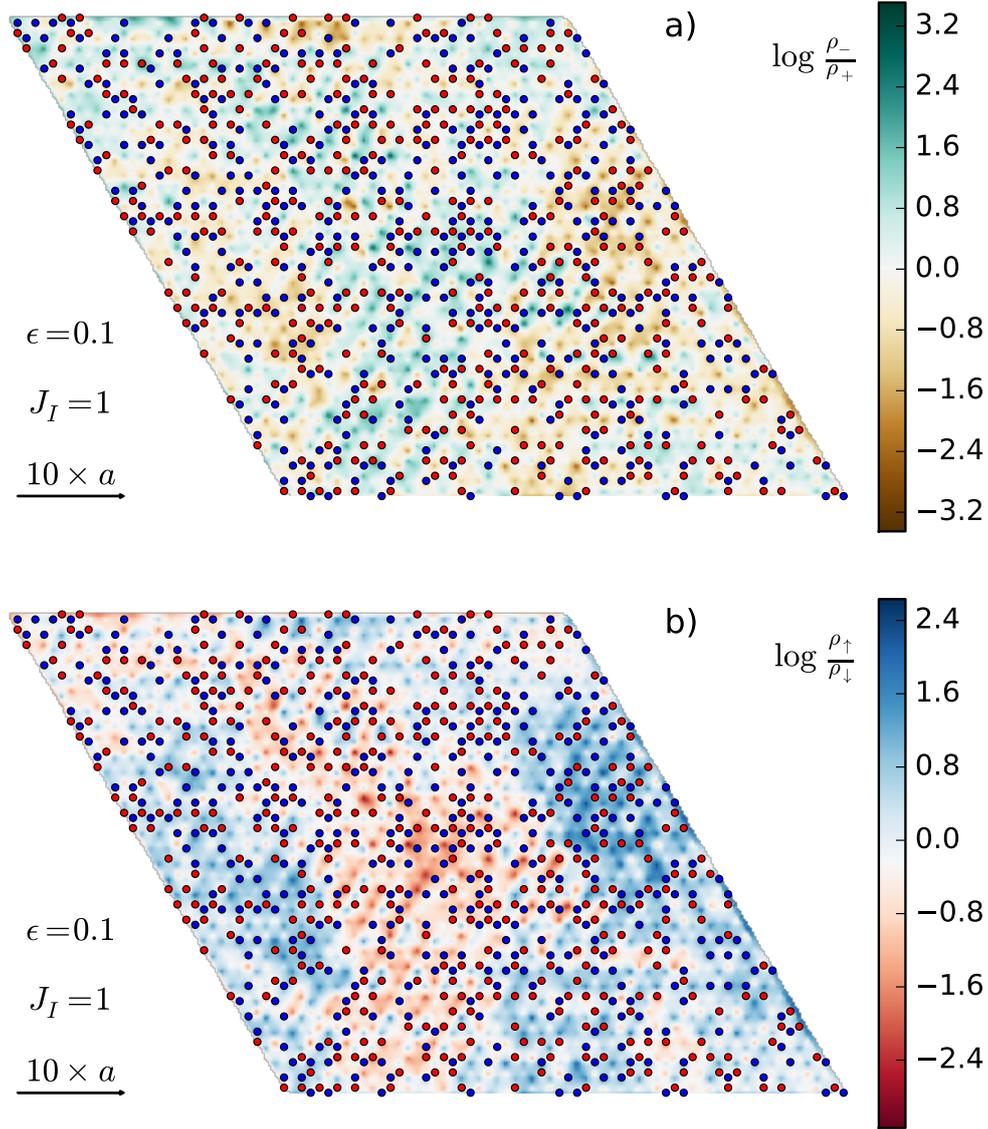


FIGURE 1.13 – Distribution spatiale de la densité locale d'états dans le cas magnétique, avec une forte corrélation spatiale charge-spin. (a) distribution d'états d'électron  $\rho_+(i, \epsilon)$ , et de trou  $\rho_-(i, \epsilon)$ , (b) de spin up  $\rho_\uparrow(i, \epsilon)$ , et de spin down  $\rho_\downarrow(i, \epsilon)$  à  $\epsilon = 0.1$ , pour  $J_I = 1.0\nu$ . Les « patches » de trous sont principalement des spins down, et les électrons des spins up, pour une configuration de désordre donnée. Les cercles localisent les impuretés aléatoirement distribuées (bleu pour spin up, rouge pour spin down). Nous montrons une région de  $2 \times 32^2$  sites.

## 1.5 Conclusion

Nous avons étudié le transport de charges dans le graphène pour deux cas de désordre. Suivant la polarisation magnétique des impuretés, nous distinguons le cas paramagnétique et le cas antiferromagnétique. Les impuretés paramagnétiques créent des états d'énergie autour du point de Dirac. L'ordre antiferromagnétique génère un gap proportionnel à la constante d'échange.

L'étalement du paquet d'onde suit une loi de puissance en temps bien définie, dont

l'exposant dépend de l'intensité du désordre et de son type. Dans le cas paramagnétique, l'accroissement du désordre mène à une transition vers un régime diffusif. À désordre faible, le cas paramagnétique est qualitativement similaire au cas pur : le courant dépend non-linéairement du champ électrique, avec l'exposant caractéristique du taux de création de paires. Au contraire, dans le cas antiferromagnétique une transition vers un régime sous-diffusif se produit. Nous avons observé que même pour un désordre relativement faible, la création de paire est fortement atténuée. Le mécanisme de Schwinger, dominant dans le cas paramagnétique, laisse place à la polarisation des charges en « patchs », et par conséquent, la réponse linéaire au champ électrique est rétablie. Cependant, tandis que dans la limite de faible désordre nous avons mesuré une conductivité en accord avec la réponse linéaire du système pur, celle-ci tend vers la moitié de la conductivité minimale  $\sigma_0$  avec un ordre antiferromagnétique.

La transition entre les régimes super-diffusif et sous-diffusif, se produisant lorsque la constante d'échange est du même ordre que l'énergie de saut, est révélatrice des effets de localisation. Nous avons considéré cette possibilité en étudiant la densité locale d'états. Dans la région de transition, la distribution de probabilité de la densité locale d'états est log-normale, avec un maximum décalé vers la région de faible densité, impliquant la localisation des états proches du gap. Ces états multi-fractals sont reliés à des « patchs » riches en électrons ou en trous, qui sont en plus polarisés en spin. Les propriétés de transport des polarons magnétiques sont caractérisées par une conductivité qui est la moitié de la conductivité minimale du graphène pur. Ceci est une conséquence de la diffusion sur les impuretés qui sélectionne des états avec une corrélation charge-spin : les « patchs » d'électrons (énergie positive) et de trous (énergie négative) acquièrent un spin opposé et forment une structure très inhomogène.

## Chapitre 2

# Désordre magnétique dans les isolants topologiques 2D

## 2.1 Introduction

### 2.1.1 Description et historique

Un isolant topologique (IT) est un matériau possédant une conductance quantifiée, une symétrie par renversement du temps et est caractérisé par un nombre entier appelé « invariant topologique ». L'intérieur (*bulk*) d'un matériau de ce type se comporte comme un isolant, tandis que sa surface contient des états de conduction. Les isolants topologiques sont donc une phase particulière de la matière qui diffère d'un isolant ordinaire possédant une topologie triviale. Un isolant ordinaire peut aussi avoir des états de surface conducteurs, mais ceux d'un isolant topologique sont protégés symétriquement par la conservation du nombre de particules et la symétrie par renversement du temps. La structure de bande du *bulk* d'un isolant topologique est similaire à celle d'un isolant standard, avec un niveau de Fermi entre la bande de conduction et la bande de valence. Mais contrairement aux semi-conducteurs les plus courants où la bande de conduction est formée par les électrons des orbitales *s* et où la bande de valence est formée par les électrons des orbitales *p*, les effets relativistes incluant le couplage spin-orbite sont tellement puissants que les bandes sont inversées : la bande de valence est poussée au dessus de la bande de conduction [26, 76].

La surface d'un isolant topologique présente une structure de bande de type métal avec des bandes croisées, ce qui est une conséquence du fait qu'à l'interface entre un isolant topologique et un isolant trivial (comme le vide ou un cristal isolant conventionnel) la structure de bande ne peut pas être interpolée continûment sans fermer le gap. Ainsi, pour un isolant topologique 2D, la structure de bande du bord correspond à un liquide de Luttinger, et pour un isolant topologique 3D la structure de bande de la surface correspond à des cônes de Dirac décrivant des fermions de Dirac.

La notion de phase topologique en matière condensée s'est développée à partir de la découverte expérimentale de l'effet Hall quantique entier en 1980 par Klaus von Klitzing [11]. Un gaz 2D d'électrons confiné dans une interface 2D entre deux semi-conducteurs et soumis à un fort champ magnétique transverse génère des plateaux de quantification dans la conductivité de Hall (qui sont des multiples de  $e^2/h$ ), tandis que la résistance longitudinale s'annule. La structure électronique du *bulk* présente des niveaux de Landau séparés par de larges gaps (voir Fig. 2.1, panneau de gauche). En termes de réponse linéaire, la quantification de la conductivité de Hall provient du nombre de niveaux de Landau sous l'énergie de Fermi. Les états de bords apparaissent quand les électrons près

des bords voient leurs orbites brisées par le potentiel de confinement et rebondissent contre ce dernier (voir Fig. 2.1, panneau de droite).

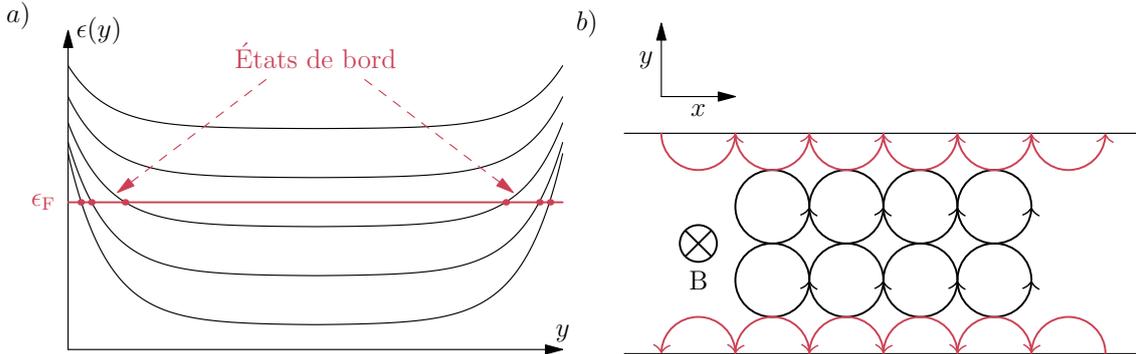


FIGURE 2.1 – (a) Niveaux de Landau dans le cas de l’effet Hall quantique dans un ruban 2D (avec un potentiel de confinement dans la direction  $y$ ). (b) Représentation classique des états de bords (et des états de Landau dans le *bulk*).

En 1981, Laughlin [77] a montré, par l’étude d’une boucle de métal 2D avec un désordre élargissant les niveaux de Landau, que la quantification de la conductivité de Hall est une conséquence de l’invariance de jauge et de l’existence d’un gap de mobilité. Dans cette configuration, il n’y a plus de bords, mais la conductance est toujours quantifiée, ce qui nous amène à penser que ce n’est pas une propriété des bords, mais une propriété du *bulk*. Le désordre spatial diffuse les électrons, brisant l’invariance par translation qui est incompatible avec une conductance quantifiée (le courant est toujours  $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}$ , avec  $\mathbf{v} = \mathbf{E} \times \mathbf{B}/B^2$ ). Le gaz 2D d’électrons devient un isolant par la localisation d’Anderson et un gap de mobilité apparaît dans la densité d’états : les états proches des niveaux de Landau restent délocalisés, tandis que ceux près des bords de bandes d’énergie se localisent. Ici, la conductivité n’est pas une propriété des excitations à la surface de Fermi comme pour la conductivité de Drude, mais dépend de tous les états remplis sous le niveau de Fermi. C’est ici qu’apparaît la nature topologique de la quantification.

Un an plus tard, Thouless et al. [78] trouvèrent des expressions explicites pour la conductance de Hall en utilisant la formule de Kubo pour un gaz 2D d’électrons sur un réseau et dans un champ magnétique uniforme. La conductance quantifiée est proportionnelle à un invariant topologique de la bande remplie nommé *nombre de Chern*  $n$ , qui est un entier du groupe  $\mathbb{Z}$ . Haldane [12] a généralisé cet argument à un système sans symétrie par renversement du temps et sans niveaux de Landau. Il a considéré un réseau hexagonal biparti de graphène muni d’une densité de flux magnétique locale normale au plan, de telle sorte que le flux par cellule soit nul. Ce type d’isolant de Chern est appelé effet Hall quantique anomal (*Quantum Anomalous Hall Effect* ou QAHE) et n’existe qu’à deux dimensions.

En 2005 une nouvelle phase topologique fut découverte par Kane et Mele [13, 14]. La symétrie par renversement du temps a été ajoutée, en considérant un modèle de graphène avec le spin des électrons et une forte interaction de spin-orbite. L’ajout d’un degré de liberté de spin est important pour obtenir l’invariance par renversement du temps et quatre canaux de bords conducteurs, chacun ayant un spin associé. Ces quatre états de bords conducteurs forment deux paires de Kramers. Ceci est une conséquence du couplage du spin au moment des électrons par l’interaction de spin-orbite. Cette phase topologique fut nommée effet Hall quantique de spin (*Quantum Spin Hall Effect* ou QSHE). Tandis que les isolants de Chern sont caractérisés par un nombre de Chern, les isolants topologiques

2D et 3D sont respectivement caractérisés par un et quatre indices du groupe  $\mathbb{Z}_2$  ( $\{0,1\}$  ou  $\{1,-1\}$ ). Ces indices représentent l'existence d'un nombre impair d'états de surface en trois dimensions ou d'un nombre pair d'états de bords hélicaux en deux dimensions et sont similaires au genre<sup>1</sup> en topologie. En 2006 Bernevig et Zhang [79] proposèrent également un modèle d'isolant topologique 2D. De façon similaire à la Fig. 2.1, nous présentons à la Fig. 2.2 une représentation classique des états de bords de l'effet Hall quantique de spin.

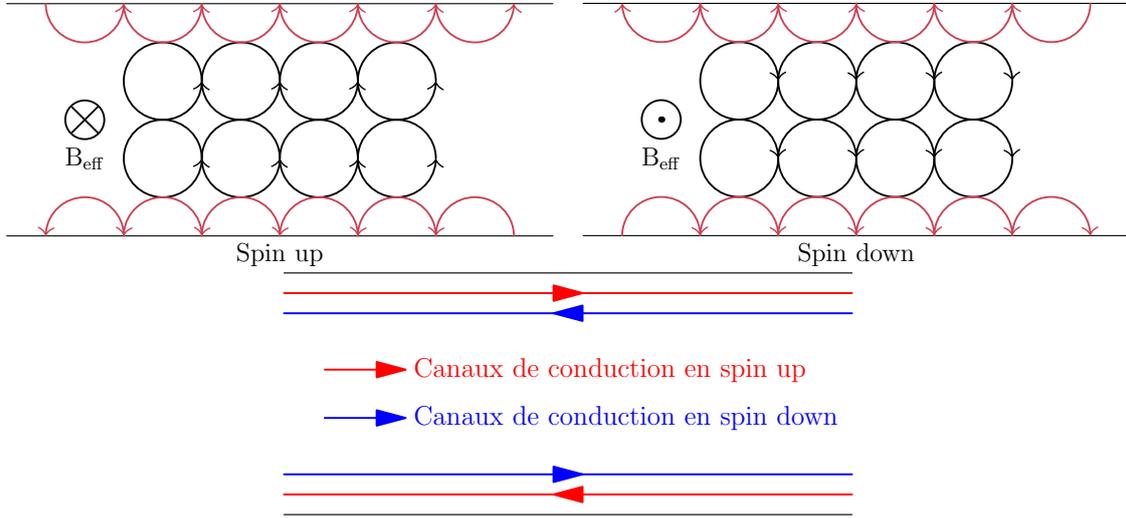


FIGURE 2.2 – Représentation classique des états de bords dans le cas de l'effet Hall quantique de spin et des canaux de conduction de bords. Les champs magnétiques effectifs pour les deux espèces de spin sont une conséquence du couplage spin-orbite.

L'effet Hall quantique de spin a ensuite été découvert expérimentalement dans des puits quantique de HgTe/CdTe par König et al. [80] en 2007 et par Roth et al. [81] en 2009. Le matériau est un isolant standard lorsque la largeur du puits quantique est en dessous d'une valeur critique et devient un isolant topologique lorsque cette valeur est dépassée. Des mesures sur un dispositif à quatre terminaux [80] ont montré que les états de bords conducteurs mènent à une conductance quantifiée de  $2e^2/h$  et cette valeur est indépendante de la largeur de l'échantillon. Nous avons reproduit théoriquement à la Fig. 2.3 les résultats des mesures de conductance obtenus dans l'article [80], en les juxtaposant à la structure de bande théorique correspondant et faisant apparaître un cône de Dirac (en noir sur la figure de gauche). Des mesures ultérieures sur les propriétés non-locales du transport dans l'état Hall quantique de spin ont confirmé l'existence des canaux de bords prédits par la théorie [81]. Plus tard, l'isolant topologique 3D fut prédit dans des alliages de  $\text{Bi}_{1-x}\text{Db}_x$  dans une certaine fourchette de concentration  $x$  [82], et des mesures de spectroscopie par photoémission résolue en angle (ARPES, *angle-resolved photoemission spectroscopy*) ont ensuite permis d'observer un nombre impair d'états de surface [83]. Des isolants topologiques 3D plus simples furent prédits dans le  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , le  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  et le  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [84, 85], avec un large gap dans le *bulk* et un cône de Dirac unique décrivant la dispersion des états de surface, que les expériences ARPES permirent d'observer [86, 85]. Nous avons reproduit à la Fig. 2.4 une figure de l'article [86] présentant les résultats d'une expérience ARPES.

1. Le genre (ou *genus* en anglais) d'une surface orientable connexe est un entier représentant le nombre maximum de courbes fermées simples sans points communs pouvant être tracées à l'intérieur de cette surface sans la déconnecter. Par exemple, le genre d'une sphère est 0 et le genre d'un tore est 1.

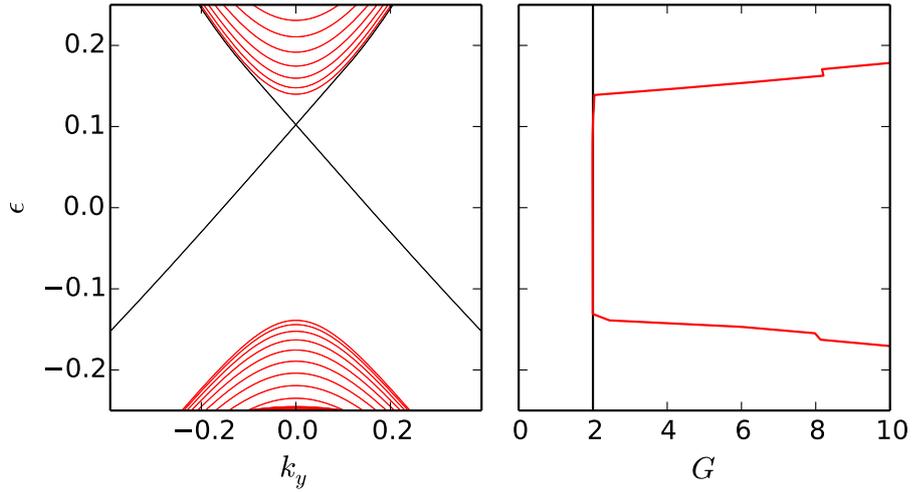


FIGURE 2.3 – Structure de bande (à gauche) et conductance  $G$  en unités de  $e^2/h$  (à droite) pour un ruban infini d’isolant topologique. Sur la structure de bande, les courbes noires sont les états de bords et les courbes rouges sont les états du *bulk*. La conductance est quantifiée à  $2e^2/h$  pour des niveaux d’énergie contenus dans le gap du *bulk*.

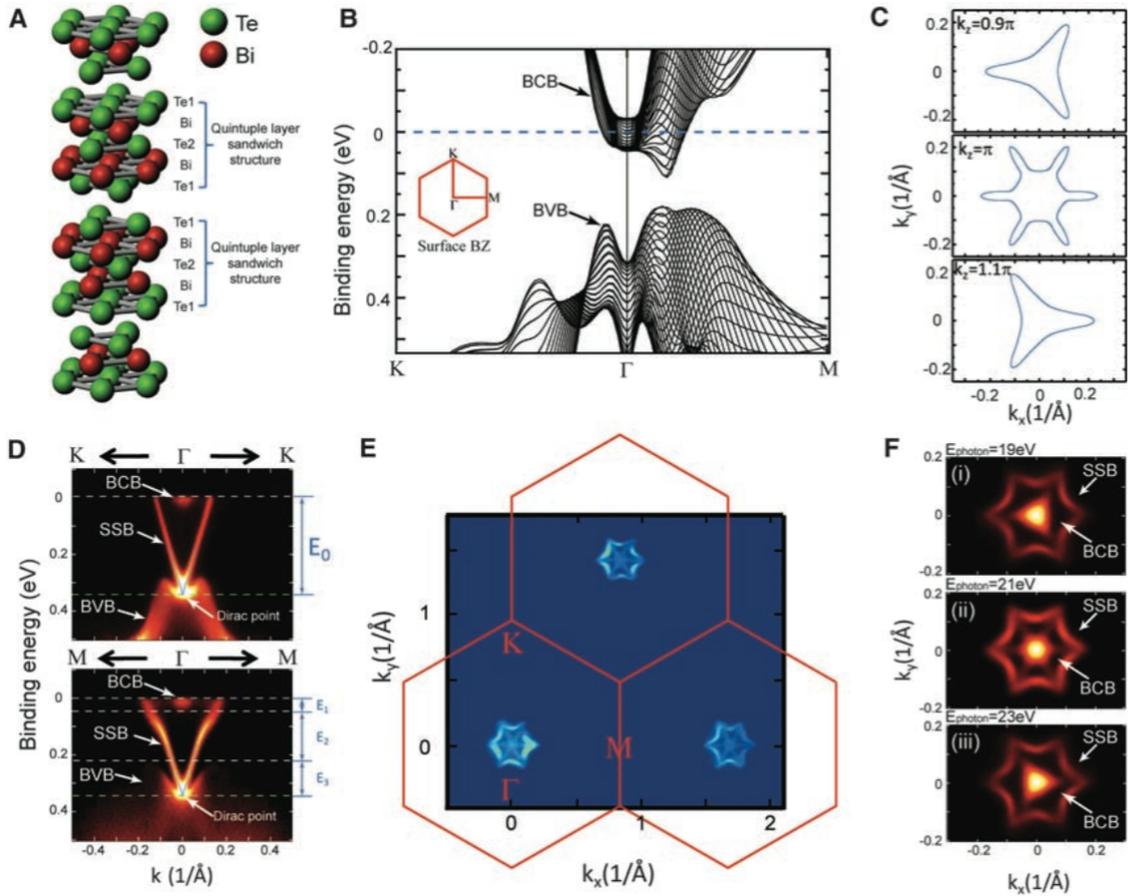


FIGURE 2.4 – Résultats d’une expérience ARPES menée sur la structure cristalline du  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tirés de l’article [86]. Nous pouvons voir le cône de Dirac à la figure D.

Ces avancées expérimentales motivent en très grande partie les travaux que nous avons mené. En effet, elles ont permis de mettre en correspondance la quantification de la conductance avec l'existence d'états de bords. Les expériences ARPES ont permis l'observation de la structure de bande de ces états de bords et la mise en évidence des cônes de Dirac, et les mesures sur la non-localité du transport ont permis de montrer que ces états de bords conducteurs créent des canaux de conduction, responsables de la conductance quantifiée.

Il existe pour l'équation de Dirac des solutions d'états de bords à l'interface entre deux milieux possédant une énergie de gap (que l'on dénotera masse) positive et négative. Ces solutions sont robustes face à la rugosité de l'interface et d'autres facteurs. Considérant que le vide est un isolant avec une énergie de gap infinie, le système avec une masse négative doit posséder des états de bords. Ceci est un premier pas vers la description d'un isolant topologique. Cependant, à cause de la symétrie de l'équation de Dirac possédant des masses positives et négatives, il n'y a aucune différence topologique entre ces deux systèmes après transformation unitaire. Il est impossible de distinguer quel système décrit une phase topologique. Ceci va nous amener à modifier l'équation de Dirac par une correction quadratique. Le hamiltonien de Dirac peut s'écrire :

$$H = c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta, \quad (2.1)$$

où

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z), \quad \alpha_i = \sigma_x \otimes \sigma_i, \quad \beta = \sigma_z \otimes \sigma_0, \quad (2.2)$$

avec  $\sigma_i$  les matrices de Pauli et  $\sigma_0$  la matrice identité. Nous introduisons le terme  $-B\mathbf{p}^2$ , et en remplaçant la vitesse de la lumière  $c$  par la vitesse effective  $v$ , nous obtenons l'équation

$$H = v\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + (mv^2 - B\mathbf{p}^2)\beta, \quad (2.3)$$

Le terme quadratique brise la symétrie entre les masses  $+m$  et  $-m$  dans l'équation de Dirac, ce qui résout le problème posé précédemment de distinction topologique.

Nous allons par la suite étudier des équations de Dirac modifiées faisant apparaître les états de bords. En cherchant les solutions, nous montrerons que la densité de probabilité de présence se concentre sur le ou les bords.

### 2.1.1.1 État de bord 1D

L'état de bord unidimensionnel est décrit par l'Eq. (2.3) à une dimension (en ne conservant que  $p_x$ ). Nous négligeons un des deux secteurs de spin dégénérés en énergie, et nous obtenons l'équation matricielle  $2 \times 2$  suivante,

$$h(x) = vp_x\sigma_x + (mv^2 - Bp_x^2)\sigma_z. \quad (2.4)$$

Nous considérons une chaîne semi-infinie avec  $x \geq 0$  avec une condition de bord ouvert à  $x = 0$ . Nous imposons une condition de bord de Dirichlet, c'est à dire qu'à  $x = 0$  la fonction d'onde s'annule. Nous nous intéressons ensuite à la solution de l'état de bord qui correspond à la solution d'énergie zéro, c'est-à-dire là où la masse topologique change de signe :

$$[vp_x\sigma_x + (mv^2 - Bp_x^2)\sigma_z]\psi(x) = 0. \quad (2.5)$$

De là on obtient l'équation de Schrödinger

$$\partial_x\psi(x) = -\frac{1}{v\hbar}(mv^2 + B\hbar^2\partial_x^2)\sigma_y\psi(x). \quad (2.6)$$

Si  $\psi(x)$  est vecteur propre de  $\sigma_y$ , alors  $\psi(x) = \chi_\eta \phi(x)$ , avec  $\sigma_y \chi_\eta = \eta \chi_\eta$  et  $\eta = \pm 1$ , soit

$$\partial_x \phi(x) = -\frac{\eta}{v\hbar}(mv^2 + B\hbar^2 \partial_x^2) \phi(x). \quad (2.7)$$

On introduit la fonction test  $\phi(x) \propto e^{-\lambda x}$  et on obtient l'équation suivante,

$$B\hbar^2 \lambda^2 - \eta v \hbar \lambda + mv^2 = 0. \quad (2.8)$$

Les deux racines de cette équation du second degré satisfont les relations  $\lambda_+ + \lambda_- = \eta v / \hbar B$  et  $\lambda_+ \lambda_- = mv^2 / B\hbar^2$ . La fonction d'onde étant à support borné, nous devons donc avoir la condition :

$$\psi(x=0) = \psi(x=+\infty) = 0. \quad (2.9)$$

Ces deux racines doivent donc être positives, et il n'existe qu'une solution  $\chi_\eta$  satisfaisant la condition de bord de Dirichlet pour  $\eta = \text{sgn}(B)$ . Il existe donc une solution d'état de bord à énergie nulle

$$\psi(x) = \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ i \end{pmatrix} (e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-}), \quad (2.10)$$

où  $1/\xi_\pm = v(1 \pm \sqrt{1 - 4mB})/2|B|\hbar$ , avec  $\xi_\pm \in \mathbb{R}_+$  (soit  $mB > 0$ ) et  $N$  est le facteur de normalisation. La densité de probabilité de présence liée à cette fonction d'onde se distribue principalement près du bord à  $x = 0$  et décroît exponentiellement quand on s'en éloigne. Les paramètres  $\xi_-$ ,  $\xi_+$  déterminent la distribution spatiale de la fonction d'onde, ce sont deux longueurs caractéristiques. Si l'on fait tendre le paramètre  $B$  vers zéro, on a  $\xi_+ \rightarrow |B|\hbar/v \rightarrow 0$  et  $\xi_- = \hbar/mv$ . Dans ce cas,  $\xi_-$  est une constante seulement déterminée par la largeur du gap  $mv^2$ . La solution d'état de bord existe donc même pour  $B = 0$ , donc pour l'équation de Dirac conventionnelle. Nous remarquons également le fait intéressant que lorsque  $m \rightarrow 0$ ,  $\xi_- \rightarrow +\infty$ , c'est à dire que l'état de bord s'étend dans tout le milieu (nous dirons que tout ce qui n'est pas le bord constitue le *bulk*). Il y a donc une transition de phase quantique à  $m = 0$ .

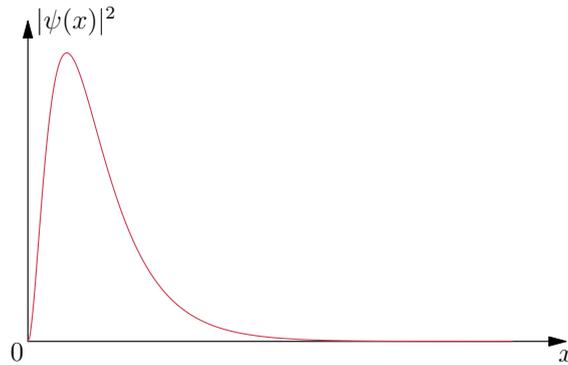


FIGURE 2.5 – Densité de probabilité de présence pour la solution d'énergie nulle à l'équation Eq. (2.4). On peut voir que celle-ci se concentre sur le bord et décroît exponentiellement dans le milieu (dans les  $x$  positifs).

En revenant au hamiltonien à quatre composantes, on obtient les deux solutions dégé-

nées en énergie

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-}), \\ \Psi_2 &= \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-}),\end{aligned}\tag{2.11}$$

### 2.1.1.2 État de bord 2D

Nous allons ici découpler l'Eq. (2.3) en deux équations indépendantes

$$h_{\pm} = v(p_x \sigma_x \pm p_y \sigma_y) + (mv^2 - Bp_x^2) \sigma_z.\tag{2.12}$$

Ces deux équations ne possèdent pas d'invariance par renversement du temps (c'est à dire par la transformation  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$  et  $p_i \rightarrow -p_i$ ). Nous pouvons voir ces deux équations comme étant les deux composantes de spin de l'équation originale à quatre composantes, qui est invariante par renversement du temps ( $h_+$  étant le symétrique temporel de  $h_-$ ).

Nous procédons de la même manière que dans la section précédente, nous considérons un plan semi-infini dont le bord est à  $x = 0$ . En posant  $p_y = 0$  on retombe sur le problème unidimensionnel présenté précédemment, nous allons donc découpler les deux dimensions et considérer la partie en  $y$  comme étant une perturbation d'un système unidimensionnel. Nous écrivons la perturbation en  $y$ ,

$$H_y = vp_y \alpha_y - Bp_y^2 \beta,\tag{2.13}$$

ce qui va nous permettre de trouver le hamiltonien effectif de l'état de bords, menant aux états de bords hélicaux. En réutilisant les fonctions d'ondes trouvées pour le cas 1D, on obtient :

$$H_{\text{eff}} = (\Psi_1^\dagger, \Psi_2^\dagger) H_y \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = vp_y \text{sgn}(B) \sigma_z.\tag{2.14}$$

La première chose que l'on remarque ici, est l'importance de la correction quadratique en  $B$  : si  $B$  est nul, les états de bords hélicaux n'existent plus. Sur les bords, la relation de dispersion est un cône de Dirac :

$$\epsilon_{p_y, \pm} = \pm vp_y,\tag{2.15}$$

dont la vitesse  $v$  donne la pente. Les solutions pour les états de bords sont similaires à celles obtenues pour le cas unidimensionnel, mais comportent une composante en onde plane dans la direction  $y$ . Elles s'écrivent finalement

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-}) e^{ip_y y/\hbar}, \\ \Psi_2 &= \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-x/\xi_+} - e^{-x/\xi_-}) e^{ip_y y/\hbar},\end{aligned}\tag{2.16}$$

et les valeurs propres correspondantes sont  $\epsilon_{p_y, \pm} = \pm vp_y \text{sgn}(B)$ . Les longueurs caractéristiques s'écrivent maintenant  $1/\xi_{\pm} = v(1 \pm \sqrt{1 - 4mB + 4B^2 p_y^2 / v^2}) / 2|B|\hbar$ .

### 2.1.1.3 Conductance de Hall, nombre de Chern et phase de Berry

La conductance décrit la facilité avec laquelle les porteurs d'un courant se propagent dans un conducteur. Elle nous renseigne donc sur les propriétés de transport d'un matériau donné. Les travaux de cette partie de la thèse sont axés sur des calculs de conductance. En effet, comme nous l'avons vu plus tôt, les isolants topologiques ne pouvant transporter des charges que sur leurs bords lorsque le remplissage électronique se situe dans le gap du *bulk*, cette conductance est quantifiée et proportionnelle au nombre de canaux.

La conductance de Hall est une mesure de la conductance générée par l'existence de canaux de bords conducteurs. Cette conductance peut être reliée au nombre de Chern  $n_c$  par  $\sigma = n_c e^2/h$  [79, 87, 88]. Ce nombre permet d'évaluer si le système est topologiquement trivial ou non. Le nombre de Chern se calcule à partir de la courbure de Berry. La courbure de Berry est elle-même calculée à partir de la phase de Berry (ou phase géométrique). Cette phase est un nombre complexe unitaire par lequel est multipliée la fonction d'onde d'un système physique quand on fait varier adiabatiquement un de ses paramètres  $\mathbf{R}$  selon un circuit fermé  $\mathcal{C}$ . Par exemple, on balaye toute la zone de Brillouin pour faire un tour complet du tore qu'elle représente, la fonction d'onde acquiert une phase. La phase de Berry s'écrit donc en faisant évoluer adiabatiquement un état propre  $|n\mathbf{R}(t=0)\rangle$  sur le lacet  $\mathcal{C}$

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle. \quad (2.17)$$

Nous définissons ici la connexion de Berry, ou potentiel de Berry

$$\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{R}) = i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle, \quad (2.18)$$

ainsi que la courbure associée

$$\mathbf{F}^{(n)}(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{R}). \quad (2.19)$$

Les théories de jauge et la géométrie différentielle nous enseignent qu'en physique les interactions sont liées à la courbure des fibrés de jauge considérés (électromagnétisme, interaction électro-faible, chromodynamique, gravitation, ...) [89]. L'équation de Maurer-Cartan  $R^I_J = d\omega^I_J + \omega^I_k \wedge \omega^k_J$  détermine la deux-forme de courbure  $R$  à partir de la une-forme de connexion  $\omega$ . Cette deux-forme de courbure peut être le tenseur de Faraday dans le cadre des théories des champs mais peut aussi être le tenseur de Riemann en relativité générale. De cette constatation nous tirons l'information que cette courbure de Berry sera à l'origine d'une interaction dans le système considéré si elle est non nulle. On pourra par exemple avoir un champ magnétique effectif émergent, c'est-à-dire une interaction de spin-orbite [87].

Nous relierons le nombre de Chern à la courbure de Berry par l'intégrale

$$n_c = -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{S}} dS \mathbf{F}^{(n)}, \quad (2.20)$$

où  $\mathcal{S}$  est la surface décrite par le lacet  $\mathcal{C}$ . Pour un hamiltonien 2D à deux bandes de la forme  $H = \mathbf{d}(p) \cdot \boldsymbol{\sigma}$  le nombre de Chern s'écrit

$$n_c = -\frac{1}{4\pi} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{p} \frac{\mathbf{d} \cdot (\partial_{p_x} \mathbf{d} \times \partial_{p_y} \mathbf{d})}{d^3}, \quad (2.21)$$

où  $d = |\mathbf{d}| = \sqrt{\sum_{\alpha} d_{\alpha}^2}$ . L'intégrale s'effectue sur la zone de Brillouin complète et dans la limite continue l'aire d'intégration devient infinie. En reprenant le système bi-dimensionnel

décrit précédemment, nous pouvons calculer le nombre de Chern pour les deux cas  $h_+$  et  $h_-$  :

$$n_{\pm} = \pm(\text{sgn}(m) + \text{sgn}(B))/2, \quad (2.22)$$

que l'on relie à la conductance de Hall  $\sigma_{\pm} = n_{\pm}e^2/h$ . On remarque maintenant que lorsque  $m$  et  $B$  ont le même signe, on a  $n_{\pm} = \pm 1$  et le système est topologiquement non trivial. En revanche, dans le cas contraire on a  $n_{\pm} = 0$  et le système est donc trivial.

Un isolant topologique pouvant être considéré comme étant constitué de deux copies d'un isolant de Chern symétriques par rapport au temps, on arrive à une conductance de Hall  $\sigma_{\pm} = \pm 2e^2/h$ . Ces deux copies d'isolants de Chern sont par exemple les deux secteurs de spin d'un isolant topologique de type HgTe. Le désordre d'Anderson appliqué à un modèle de type HgTe possédant une masse topologique<sup>2</sup> positive (donc décrivant un isolant avec une topologie triviale) agit simultanément et identiquement sur les deux secteurs de spin et peut induire une transition de phase topologique vers un isolant topologique en renormalisant la masse topologique vers une valeur négative. Un isolant topologique ainsi créé est nommé isolant topologique d'Anderson [90, 91] (*topological Anderson insulator* ou TAI). Ceci nous ouvre la voie de la problématique de la brisure de symétrie par renversement du temps : peut-on transformer un isolant topologique en isolant de Chern en rendant triviale la topologie d'un des deux secteurs de spin à l'aide d'un désordre adéquat ?

### 2.1.2 Problématique

Les isolants topologiques sont des matériaux très intéressants pour la construction de dispositifs de spintronique<sup>3</sup>. Un des buts de la spintronique est de manipuler le spin des électrons par le biais de courants électriques. Les états de conduction d'un isolant topologique pourraient donc être utilisés pour concevoir de nouveaux supports de stockage d'information. Il serait possible d'imaginer un système dont la conductance pourrait passer de  $G = 2$  (en unités de  $e^2/h$ ) dans un état topologique symétrique par renversement du temps à  $G = 1$  dans un état Hall quantique anomal (isolant de Chern sans champ magnétique extérieur), et éventuellement à  $G = 0$  dans un état isolant standard. L'existence d'une transition  $G = 2 \rightarrow G = 1$  a déjà été observée expérimentalement [92]. Nous cherchons à montrer qu'un isolant topologique 2D dopé avec des impuretés magnétiques peut accéder à ces différents états (transition de phase quantique).

Les impuretés de charge ne brisent pas la symétrie par renversement du temps. Dans un isolant topologique, les deux espèces de spin sont affectées de la même manière par le désordre d'Anderson. Les canaux de spin ne peuvent être dissociés par ce type de désordre, et il n'est donc a priori pas très intéressant pour la spintronique.

Le désordre magnétique est une voie prometteuse pour modifier les propriétés de transport d'un isolant topologique car il brise l'invariance par renversement du temps et dissocie les deux canaux de spin. On se propose d'étudier l'influence de ce type de désordre brisant la symétrie par renversement du temps, même si cette symétrie est rétablie globalement (dans le cas où les impuretés sont totalement dépolarisées). Nous regarderons dans un premier temps quelle influence ont les fluctuations spatiales sur les propriétés de conduction dans le cadre d'un désordre totalement polarisé.

Nous allons donc examiner l'effet des impuretés magnétiques sur le transport électronique d'un isolant topologique de type HgTe dans le cadre de la réponse linéaire. Nous nous intéresserons à l'influence de deux types de désordre magnétique, l'un dont le signe

2. La masse topologique n'est autre que l'énergie de gap.

3. La spintronique a pour but d'utiliser le spin des électrons (et non plus la charge comme dans l'électronique) pour stocker et manipuler de l'information.

de la constante de couplage est le même pour l'interaction impureté-trou et l'interaction impureté-électron, et l'autre dont le signe est opposé.

## 2.2 Modèle

### 2.2.1 Tight-binding BHZ

#### 2.2.1.1 Hamiltonien BHZ

Un isolant topologique 2D comme le HgTe se décrit par un hamiltonien à quatre bandes introduit par Bernevig et al. [26] :

$$H = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} H(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}},$$

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h_{\uparrow}(\mathbf{k}) & v(\mathbf{k}) \\ v(\mathbf{k})^{\dagger} & h_{\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

avec

$$h_{\uparrow}(\mathbf{k}) = A(k_x \tau_x + k_y \tau_y) + (m - Bk^2) \tau_z + (C - Dk^2) \tau_0,$$

$$v(\mathbf{k}) = i\lambda \text{diag}[k_x - ik_y, k_x + ik_y] - i\tau_y \Delta, \quad (2.24)$$

et  $h_{\downarrow}(\mathbf{k}) = h_{\uparrow}^*(-\mathbf{k})$  dans la base (spin $\otimes$ bande) =  $\sigma \otimes \tau$ ,  $\tau = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$  et  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  sont les matrices de Pauli dans l'espace des bandes et dans l'espace des spins (avec  $\tau_0$  et  $\sigma_0$  les identités),  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ ,  $k = |\mathbf{k}|$  le nombre d'onde, et  $A, m, B, C, D$  des paramètres du matériau [93].  $v(\mathbf{k})$  est le terme de couplage de spin-orbite avec la constante de couplage Rashba  $\lambda$  [94, 95] et l'asymétrie d'inversion de bande  $\Delta$  [96]. Nous pouvons écrire la matrice hamiltonienne développée

$$H(\mathbf{k}) = (C - Dk^2) \mathbb{1}_4 + \begin{pmatrix} (m - Bk^2) & Ak_- & i\lambda k_- & -\Delta \\ Ak_+ & -(m - Bk^2) & \Delta & i\lambda k_+ \\ -i\lambda k_+ & \Delta & (m - Bk^2) & -Ak_+ \\ -\Delta & -i\lambda k_- & -Ak_- & -(m - Bk^2) \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

où  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ . Ce hamiltonien effectif à quatre bandes a été introduit par Bernevig, Hughes et Zhang (BHZ) sans les termes de couplage Rashba et d'asymétrie d'inversion de bande. Il provient de la réduction dimensionnelle (théorie  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ ) du hamiltonien de Kane à six bandes (ou huit) décrivant les cristaux tridimensionnels de HgTe. Les états de ce modèle sont de la forme  $\psi = (\psi_{\uparrow\uparrow}, \psi_{\downarrow\uparrow}, \psi_{\uparrow\downarrow}, \psi_{\downarrow\downarrow})^T$ , où  $\pm$  est le signe de la bande d'énergie (positive ou négative) et la flèche  $\uparrow\downarrow$  est le spin (up ou down).

Nous remarquons qu'il existe dans la littérature plusieurs hamiltoniens avec différents signes pour les paramètres ou différentes bases. Nous choisissons la base et les signes des paramètres que l'on trouve dans le papier [26].

Dans la suite nous allons décomposer ce hamiltonien suivant une algèbre de Clifford, ce qui offre un moyen simple d'étudier les symétries du système. Tout hamiltonien  $4 \times 4$  peut se décomposer suivant une algèbre de Clifford de matrices de Dirac  $\Gamma$  :

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) \Gamma_0 + \sum_i d_i(\mathbf{k}) \Gamma_i + \sum_{ij} d_{ij}(\mathbf{k}) \Gamma_{ij}, \quad (2.26)$$

où  $\Gamma_0 = \mathbb{1}_4$  est la matrice identité  $4 \times 4$ , les  $\Gamma_i$  ( $i = 1 \dots 5$ ) sont les cinq matrices  $\Gamma$  qui satisfont la relation d'anti-commutation  $\{\Gamma_i, \Gamma_j\} = 2\delta_{ij}$ , et de commutation des matrices  $\Gamma_{ij} = [\Gamma_i, \Gamma_j]/2i$ . Nous pouvons construire la base entière de la façon suivante,

$$\begin{aligned}\Gamma_1 &= \sigma_x \otimes \tau_x, & \Gamma_2 &= \sigma_y \otimes \tau_x, & \Gamma_3 &= \sigma_z \otimes \tau_x, \\ \Gamma_4 &= \sigma_0 \otimes \tau_y, & \Gamma_5 &= \sigma_0 \otimes \tau_z, & \Gamma_{ij} &= [\Gamma_i, \Gamma_j]/2i.\end{aligned}$$

Avec cette représentation trouvée dans le papier [96], toute matrice  $\Gamma$  avec un indice égal à 5 est paire sous l'opération de renversement du temps  $\mathcal{T} = \Theta K$  (avec  $\Theta = -i\sigma_y \otimes \tau_0$  et  $K$  l'opérateur de conjugaison complexe) et tous les autres sont impairs. Ceci fait ressortir agréablement les symétries temporelles du hamiltonien. Dans notre cas, les coefficients sont :

$$\begin{aligned}\epsilon(\mathbf{k}) &= C - Dk^2, \\ d_3(\mathbf{k}) &= Ak_x, \\ d_4(\mathbf{k}) &= Ak_y, \\ d_5(\mathbf{k}) &= m - Bk^2, \\ d_{13}(\mathbf{k}) &= \lambda k_x, \\ d_{14}(\mathbf{k}) &= \lambda k_y, \\ d_{25} &= -\Delta.\end{aligned}\tag{2.27}$$

Nous allons maintenant écrire le modèle sur réseau. Pour mapper continûment le modèle basse énergie sur un modèle sur réseau dans l'approximation *tight-binding*, nous effectuons la substitution

$$k_i \rightarrow \frac{1}{a} \sin k_i a, \quad k_i^2 \rightarrow \frac{1}{a^2} (2 - 2 \cos k_i a),\tag{2.28}$$

avec  $a$  le paramètre de réseau. Notre hamiltonien devient

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})\Gamma_0 + d_3(\mathbf{k})\Gamma_3 + d_4(\mathbf{k})\Gamma_4 + d_5(\mathbf{k})\Gamma_5 + d_{13}(\mathbf{k})\Gamma_{13} + d_{14}(\mathbf{k})\Gamma_{14} + d_{15}(\mathbf{k})\Gamma_{15},\tag{2.29}$$

avec

$$\begin{aligned}\epsilon(\mathbf{k}) &= C - D(4 - 2 \cos k_x a - 2 \cos k_y a)/a^2, \\ d_3(\mathbf{k}) &= (A \sin k_x a)/a, \\ d_4(\mathbf{k}) &= (A \sin k_y a)/a, \\ d_5(\mathbf{k}) &= m - B(4 - 2 \cos k_x a - 2 \cos k_y a)/a^2, \\ d_{13}(\mathbf{k}) &= (\lambda \sin k_x a)/a, \\ d_{14}(\mathbf{k}) &= (\lambda \sin k_y a)/a, \\ d_{25} &= -\Delta.\end{aligned}\tag{2.30}$$

Nous sommes partis d'un modèle 2D continu obtenu à partir d'un modèle 3D pour créer un modèle sur réseau 2D. De ce fait, il apparait la constante de réseau  $a$  qui est un paramètre ajustable. Celui-ci est donc ajusté pour que la structure de bande du modèle sur réseau soit cohérente avec la structure de bande du modèle basse énergie et pour que la vitesse de Fermi (correspondant à la pente des cônes de Dirac des états de bords) soit celle du système physique. Dans la littérature cette valeur est donnée comme étant égale à 5 nm.

Les paramètres du hamiltonien effectif sont calculés pour un puits quantique de HgTe d'épaisseur 7 nm pris entre deux blocs de CdTe (tellurure de cadmium) [96] :

$A$ [eV · nm]	0.3645
$B$ [eV · nm <sup>2</sup> ]	-0.686
$C$ [eV]	0
$D$ [eV · nm <sup>2</sup> ]	-0.512
$m$ [eV]	$-10 \cdot 10^{-3}$

La masse topologique  $m$  est en fait un paramètre de séparation de bandes (elle définit la largeur du gap) et est donc en unités d'énergie. Nous ne nous intéresserons pas aux effets de couplage spin-orbite, nous choisissons donc de les négliger en posant  $\lambda = 0$  et  $\Delta = 0$ .

Nous pouvons maintenant discuter du signe de la masse topologique  $m$ . Quand celle-ci est positive, un gap apparait dans la structure de bande et le matériau est un isolant standard. Une masse topologique posée égale à zéro génère un métal avec une structure de bande sans gap. Le cas le plus intéressant repose sur le signe négatif de la masse topologique : une inversion de bande se produit dans le *bulk* et des cônes de Dirac apparaissent dans la structure des états de bords (lorsque les bords sont assez éloignés l'un de l'autre).

### 2.2.1.2 Unités

Pour simplifier les notations et pour effectuer des calculs numériques, nous allons définir un système d'unités. Dans la phase isolant topologique,  $A$  détermine la pente des cônes de Dirac (c'est à dire la vitesse de Fermi  $v_F$ ) et représente donc une quantité physique intéressante à poser égale à 1 pour créer notre propre système d'unités. Nous posons donc  $A = a = e = \hbar = 1$  et nous avons donc l'ensemble des paramètres :

Quantité	Unité	Valeur
$a$	1	1
$A$	1	1
$B$	$Aa$	-0.3764
$C$	$A/a$	0
$D$	$Aa$	-0.2809
$m$	$A/a$	-0.137
$\epsilon$	$A/a$	
$L$	$a$	
$k$	$1/a$	
$t$	$\hbar/Aa$	
$E$	$A/ea$	

où  $\epsilon$  est une énergie,  $L$  est une longueur,  $t$  est un temps et  $E$  est un champ électrique.

### 2.2.1.3 Hamiltonien en espace réel

Dans les sections suivantes nous aurons besoin du modèle en espace réel pour décrire un échantillon relié à deux contacts, afin de calculer la conductance. Nous allons donc réécrire le hamiltonien en espace réel, d'abord dans la direction  $x$ , puis dans la direction  $y$ .

La première étape est d'identifier l'opérateurs de translation en direction  $x$  ( $y$ ) dans les fonctions sinus et cosinus du hamiltonien. Les opérateurs de translation en espace réel pour un système de  $N_{x(y)}$  sites dans la direction  $x$  ( $y$ ) s'écrivent,

$$T_{N_{x(y)}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad T_{N_{x(y)}}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

$T_{N_x}^{-1}$  et  $T_{N_x}$  sont des matrices de dimension  $N_x \times N_x$  décrivant une translation d'un site  $x$  au site  $x + 1$  et  $x - 1$  respectivement. On effectue ensuite la substitution suivante,

$$\begin{aligned} 2 \cos \frac{2\pi k_x}{N_x} &= e^{-i2\pi k_x/N_x} + e^{i2\pi k_x/N_x} \quad \rightarrow \quad T_{N_x}^{-1} + T_{N_x} \\ 2 \sin \frac{2\pi k_x}{N_x} &= i \left( e^{-i2\pi k_x/N_x} - e^{i2\pi k_x/N_x} \right) \quad \rightarrow \quad i(T_{N_x}^{-1} - T_{N_x}), \end{aligned} \quad (2.32)$$

où  $L_x$  est la longueur de l'échantillon dans la direction  $x$  en unités de  $a$ .

Le hamiltonien décrivant un ruban de longueur  $N_x$  et périodique dans la direction  $y$  s'écrit donc

$$\begin{aligned} H(k_y) &= \mathbb{1}_{N_x} \otimes \Gamma_0[C - D(4 - 2 \cos k_y)] + (T_{N_x}^{-1} + T_{N_x}) \otimes \Gamma_0 D \\ &\quad + i(T_{N_x}^{-1} - T_{N_x}) \otimes \Gamma_3 1/2 + \mathbb{1}_{N_x} \otimes \Gamma_4 \sin k_y \\ &\quad + \mathbb{1}_{N_x} \otimes \Gamma_5 [m - B(4 - 2 \cos k_y)] + (T_{N_x}^{-1} + T_{N_x}) \otimes \Gamma_5 B. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Ce hamiltonien en espace réel suivant  $x$  et en espace de Fourier en  $y$  sera utile pour évaluer l'influence du désordre sur la structure de bande dans l'approximation de champ moyen.

Nous effectuons ensuite la même substitution pour la direction  $y$ , et nous obtenons finalement la matrice,

$$\begin{aligned} H &= \mathbb{1}_{N_x} \otimes \mathbb{1}_{N_y} \otimes \epsilon_r \\ &\quad + \mathbb{1}_{N_x} \otimes T_{N_y} \otimes t_y + \mathbb{1}_{N_x} \otimes T_{N_y}^{-1} \otimes t_y^\dagger \\ &\quad + T_{N_x} \otimes \mathbb{1}_{N_y} \otimes t_x + T_{N_x}^{-1} \otimes \mathbb{1}_{N_y} \otimes t_x^\dagger, \end{aligned} \quad (2.34)$$

avec

$$\begin{aligned} \epsilon_r &= \Gamma_0(C - 4D) + \Gamma_5(m - 4B), \\ t_x &= \Gamma_0 D + \Gamma_5 B - i\Gamma_3/2, \\ t_y &= \Gamma_0 D + \Gamma_5 B - i\Gamma_4/2, \end{aligned} \quad (2.35)$$

c'est à dire

$$\begin{aligned} \epsilon_r &= \Gamma_0(C - 4D) + \begin{pmatrix} (m - 4B) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(m - 4B) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (m - 4B) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(m - 4B) \end{pmatrix}, \\ t_x &= \begin{pmatrix} D + B & -i/2 & 0 & 0 \\ -i/2 & D - B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D + B & i/2 \\ 0 & 0 & i/2 & D - B \end{pmatrix}, \\ t_y &= \begin{pmatrix} D + B & -1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & D - B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D + B & -1/2 \\ 0 & 0 & 1/2 & D - B \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

$\epsilon_r$ ,  $t_x$  et  $t_y$  sont des matrices de dimension  $4 \times 4$ ,  $\epsilon_r$  est le potentiel sur le site en position  $\mathbf{r}$  et  $t_x$  et  $t_y$  sont les matrices de saut dans les directions  $x$  et  $y$ . Nous notons qu'il y a deux choix possibles pour  $t_x$  et  $t_y$ . Le système dont nous partons possède une topologie cylindrique et nous voulons obtenir un ruban. Le cylindre possède un intérieur et un extérieur, ce qui n'est pas le cas d'un ruban. L'ambiguïté de l'orientation de l'intérieur et de l'extérieur lors de l'ouverture du cylindre mène à un choix de signe dans la partie des matrices de saut

qui couple la direction de propagation avec la bande électronique, c'est à dire le couplage  $A$ . Nous avons calculé le hamiltonien pour l'un de ces choix, l'autre menant à

$$\begin{aligned} t_x &= \Gamma_0 D + \Gamma_5 B - i\Gamma_3/2, \\ t_y &= \Gamma_0 D + \Gamma_5 B + i\Gamma_4/2, \end{aligned} \quad (2.37)$$

ou

$$\begin{aligned} t_x &= \begin{pmatrix} D+B & -i/2 & 0 & 0 \\ -i/2 & D-B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D+B & i/2 \\ 0 & 0 & i/2 & D-B \end{pmatrix}, \\ t_y &= \begin{pmatrix} D+B & 1/2 & 0 & 0 \\ -1/2 & D-B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D+B & 1/2 \\ 0 & 0 & -1/2 & D-B \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

En pratique, ce choix n'influence que la position des canaux de conduction pour les spins up et down sur l'échantillon, ce qui revient à regarder l'échantillon d'en dessus ou d'en dessous. Dans la suite, nous choisissons la seconde possibilité pour être en accord avec la littérature.

Nous allons maintenant écrire le hamiltonien  $H$  en termes d'opérateurs création-annihilation sur les points de réseau,

$$H = \sum_{\mathbf{r}} \left[ c_{\mathbf{r}}^{\dagger} \epsilon_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}} + (c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_x}^{\dagger} t_x c_{\mathbf{r}} + c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_y}^{\dagger} t_y c_{\mathbf{r}} + \text{h.c.}) \right], \quad (2.39)$$

où  $\mathbf{r} = (i, j)$  est le vecteur position,  $\mathbf{e}_x = (1, 0)$  et  $\mathbf{e}_y = (0, 1)$  sont les vecteurs définissant les premiers voisins dans les directions  $x$  et  $y$ ,  $c_{\mathbf{r}}^{\dagger} = (c_{\mathbf{r},+\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{r},-\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{r},+\downarrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{r},-\downarrow}^{\dagger})$  ( $c_{\mathbf{r}} = (c_{\mathbf{r},+\uparrow}, c_{\mathbf{r},-\uparrow}, c_{\mathbf{r},+\downarrow}, c_{\mathbf{r},-\downarrow})$ ) est l'opérateur de création (annihilation) au site  $\mathbf{r}$  dans la bande électronique  $+$  ou  $-$  et de spin up  $\uparrow$  ou down  $\downarrow$ .

## 2.2.2 Potentiel aléatoire

Un isolant topologique peut être vu comme deux copies d'un effet Hall quantique anomal possédant un quanta de conductance de Hall opposé. Ceci est une conséquence du fait que les deux blocs constituant les deux espèces de spins dans le hamiltonien génèrent la symétrie par renversement du temps. Ce que nous cherchons à effectuer dans la suite est briser cette invariance par renversement du temps pour observer les conséquences sur la conductance et éventuellement bloquer la conduction d'une des deux espèces de spin. Pour ce faire et en première approche, un terme phénoménologique de *spin-splitting* peut être introduit dans le hamiltonien pour décrire un désordre magnétique en champ moyen qui brise l'invariance par renversement du temps [27]. Ce terme s'écrit

$$\langle V \rangle = \begin{pmatrix} G_E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & G_H & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -G_E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -G_H \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Le *splitting* pour les bandes d'électrons est de  $2G_E$  et il est de  $2G_H$  pour les bandes de trous. La largeur de gap du spin up est donnée par  $E_g^{\uparrow} = 2m + G_E - G_H$  tandis que celle du spin down est donnée par  $E_g^{\downarrow} = 2m - G_E + G_H$ . Pour obtenir l'effet Hall quantique anomal, il faut qu'un seul des deux secteurs de spin du hamiltonien de l'isolant topologique donne une structure de bande normale, non inversée. La condition est donc que  $E_g^{\uparrow} E_g^{\downarrow} < 0$ . Une

autre condition est que le système entier reste isolant, c'est à dire que les bandes d'électrons et de trous ne se croisent pas dans le *bulk*  $(2m + G_E + G_H)(2m - G_E - G_H) > 0$ . Si  $G_E$  et  $G_H$  sont de signes opposés, nous obtenons donc une nouvelle inversion de bande pour un des deux secteurs de spin lorsque l'on fait croître ces deux quantités. A contrario, s'ils sont de même signe, nous obtenons un *splitting* Zeeman standard. Le cas  $G_E G_H < 0$  est le cas qui génère une transition entre un isolant topologique et un isolant de Chern, en créant un effet Hall quantique anomal. En effet, l'inversion de bande pour un des deux secteurs de spin détruit la paire d'états de bords conducteurs associée. Nous étudierons par la suite les effets du désordre en champ moyen sur la structure de bande et montrerons la disparition des états de bords.

Ces deux types de *splitting* peuvent être générés par des impuretés magnétiques. L'étude du dopage de cristaux de HgTe avec des atomes magnétiques permet de déterminer le signe des termes  $G_E$  et  $G_H$  [97, 98]. Le dopage du HgTe avec une fraction  $y$  d'atomes de magnésium Mn donnant du  $\text{Hg}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$  mène par exemple à la condition  $G_E G_H < 0$ . Nous allons modéliser deux types de désordres générant ces deux *splitting* différents en introduisant un set  $I$  de  $N_I$  impuretés magnétiques aléatoirement distribuées. En espace réel le potentiel généré par ces impuretés possédant la constante d'échange  $J_I > 0$  s'écrit, en sommant sur l'ensemble des  $N_I$  sites d'impuretés :

$$V_{I\alpha} = J_I \sum_{i \in I} c_i^\dagger [(\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha] c_i, \quad (2.41)$$

avec  $\mathbf{n}_i = (n_i^x, n_i^y, n_i^z) = (\sin \theta_i \cos \varphi_i, \sin \theta_i \sin \varphi_i, \cos \theta_i)$  et  $c_i = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$ , soit

$$\begin{aligned} V_{I\alpha}(\mathbf{r}) &= J_I \sum_{i \in I} (\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \\ V_{I\alpha}(\mathbf{k}) &= J_I \sum_{i \in I} (\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

La concentration s'écrit  $n_I = N_I/N$ , où  $N = N_x N_y$  est le nombre total de sites du réseau. Le paramètre  $\alpha = 0, z$  détermine le type de désordre : les couplages entre impuretés et électrons et entre impuretés et trous auront le même signe avec  $\alpha = 0$ , ce qui correspond à un *splitting* Zeeman standard, et ils auront un signe opposé avec  $\alpha = z$ , ce qui correspond à un *splitting* menant à une possible inversion de bande pour une des deux espèces de spin. Nous appellerons le cas  $\alpha = 0$  l'ordre ferromagnétique, et l'ordre  $\alpha = z$  l'ordre antiferromagnétique. Les impuretés magnétiques peuvent être orientées aléatoirement dans un cône d'angle  $\theta_0$  autour de l'axe  $z$  :

$$\langle \mathbf{n} \rangle = (0, 0, M_z), \quad \langle n_z^2 \rangle = \frac{1}{3} [2M_z(2M_z - 1) + 1], \quad (2.43)$$

où  $M_z = \cos^2(\theta_0/2)$  est la magnétisation moyenne et  $\theta_0$  détermine l'ouverture du cône dans lequel les spins peuvent être orientés. En termes des matrices  $\Gamma$ , le désordre s'écrit :

$$\begin{aligned} V_{I0}(\mathbf{r}) &= J_I \sum_{i \in I} (n_i^x \Gamma_{23} + n_i^y \Gamma_{31} + n_i^z \Gamma_{12}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \\ V_{Iz}(\mathbf{r}) &= J_I \sum_{i \in I} (n_i^x \Gamma_{14} + n_i^y \Gamma_{24} + n_i^z \Gamma_{34}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Nous n'utiliserons les potentiels exprimés en fonction des matrices  $\Gamma$  qu'au sein des programmes informatiques.

Nous fixerons dans la suite la concentration à  $n_I = 0.2$  et  $n_I = 0.4$ , et les seuls paramètres que nous ferons varier seront la constante d'échange, le potentiel chimique et les dimensions  $N_x$  et  $N_y$ .

## 2.2.3 Outils numériques pour les dispositifs bi-terminaux

### 2.2.3.1 Formule de Landauer

Nous cherchons donc à décrire le couplage d'un échantillon à des réservoirs semi-infinis à l'aide des fonctions de Green, dans le but d'analyser les propriétés de transport de notre système en présence d'une différence de potentiel chimique, ou dans le cadre de la réponse linéaire. Les potentiels chimiques sont notés  $V_p$ , où  $p = R, L$  est l'indice du contact pour un système à deux terminaux. Pour ajouter des contacts à notre système, nous considérons un ruban infini dans la direction  $x$ , que l'on coupe en deux points pour créer deux contacts semi-infinis, comme nous le présentons à la Fig. 2.6.

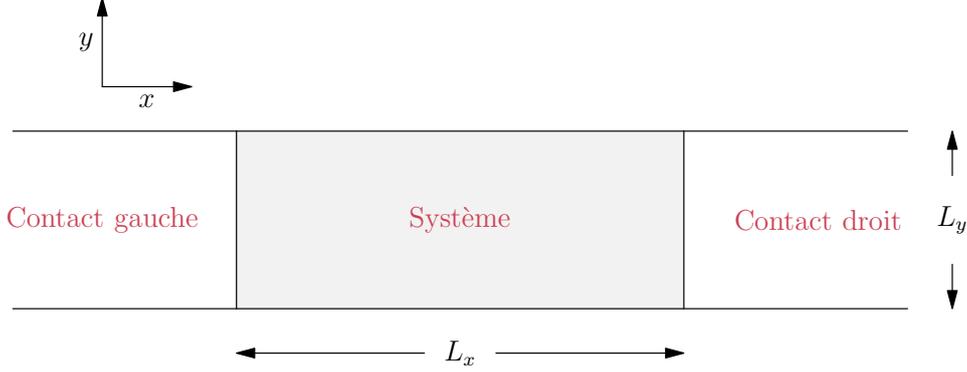


FIGURE 2.6 – Système de dimension  $L_x \times L_y$  relié à deux contacts

Pour étudier le transport, nous allons nous intéresser à la conductance qui donne la conductance d'un système. La formule de Landauer en fonction des fonctions de Green retardée  $G^r$  et avancée  $G^a$  est donnée par,

$$G = \frac{e^2}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \langle \text{Tr} [\Gamma_R(\epsilon) G^r(\epsilon) \Gamma_L(\epsilon) G^a(\epsilon)] \rangle, \quad (2.45)$$

où  $f = f(\epsilon)$  est la distribution de Fermi-Dirac, les  $\Gamma_{L,R}$  sont les élargissements des niveaux d'énergie dus aux contacts gauche (L) et droit (R) et  $\langle \dots \rangle$  est la moyenne sur le désordre. À température nulle,  $\frac{\partial f}{\partial \epsilon}$  est une distribution de Dirac et cette équation devient

$$G(\epsilon_F, J_I) = \frac{e^2}{\hbar} \langle \text{Tr} [\Gamma_R(\epsilon_F) G^r(\epsilon_F) \Gamma_L(\epsilon_F) G^a(\epsilon_F)] \rangle. \quad (2.46)$$

### 2.2.3.2 Self-énergie des contacts

Nous allons calculer les self-énergies des contacts pour obtenir les fonctions de Green retardée  $r$  ou avancée  $a$  du système connecté aux réservoirs,

$$G^{r(a)}(\epsilon) = [\epsilon - H_S - \Sigma^{r(a)}]^{-1}, \quad (2.47)$$

où  $H_S$  est le hamiltonien du système et  $\Sigma^{r(a)} = \sum_p \Sigma_p^{r(a)}$  avec  $\Sigma_p^{r(a)}$  la self-énergie retardée (ou avancée) pour le contact  $p = L, R$ .

Nous partons de l'équation définissant la fonction de Green retardée (ou avancée) du système total, définie formellement par une expression matricielle en utilisant le hamiltonien Eq. 2.34,

$$[\epsilon^\pm - H] \cdot G^{r(a)} = \mathbb{1}, \quad (2.48)$$

où  $\epsilon^\pm = \epsilon \pm i\eta$  est l'énergie décalée dans le plan complexe. La Fig. 2.6 se traduit par le découpage de la matrice hamiltonienne infinie pour obtenir deux matrices semi-infinies  $H_L$  et  $H_R$  pour les deux contacts, et une matrice finie  $H_S$  pour le système,

$$H = \begin{pmatrix} H_L & H_{LS} & 0 \\ H_{SL} & H_S & H_{SR} \\ 0 & H_{RS} & H_R \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

et

$$\begin{aligned} H_R &= \begin{pmatrix} H_{N_x+1} & t_x & 0 & \cdots & 0 \\ t_x^\dagger & H_{N_x+2} & t_x & \cdots & 0 \\ 0 & t_x^\dagger & H_{N_x+3} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & H_{N_x+n} \end{pmatrix}, \\ H_L &= \begin{pmatrix} H_{-n} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & H_{-3} & t_x & 0 \\ 0 & \cdots & t_x^\dagger & H_{-2} & t_x \\ 0 & \cdots & 0 & t_x^\dagger & H_{-1} \end{pmatrix}, \\ H_{LS} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ t_x \end{pmatrix}, \quad H_{SL} = H_{LS}^\dagger, \\ H_{SR} &= (t_x \ \cdots \ 0 \ 0), \quad H_{RS} = H_{SR}^\dagger, \end{aligned} \quad (2.50)$$

où  $n \rightarrow +\infty$  pour un contact semi-infini et  $H_n = \mathbb{1}_{N_y} \otimes \epsilon_r$  est l'énergie pour une tranche  $n \in \mathbb{N}$  située en  $x_n = n$  et  $t_x$  est la matrice de saut dans la direction  $x$  pour une tranche complete, c'est à dire  $\mathbb{1}_{N_y} \otimes t_x$ .

La self-énergie associée à un contact peut être écrite comme une solution d'une équation polynomiale matricielle du second degré. Si le problème est unidimensionnel, la solution est un nombre, ce qui peut être calculé aisément. Mais quand il y a plus d'un canal de conduction dans la direction transverse du transport, cette quantité devient une matrice dont la taille est le nombre de canaux de transport traverses.

L'Eq. 2.48 pour le contact droit s'écrit (nous commençons à partir de 0 au lieu de  $N_x + 1$  pour plus de clarté) :

$$\begin{pmatrix} (\epsilon^\pm - H_{00}) & -t_x & 0 & \cdots & 0 \\ -t_x^\dagger & (\epsilon^\pm - H_{11}) & -t_x & \cdots & 0 \\ 0 & -t_x^\dagger & (\epsilon^\pm - H_{22}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & (\epsilon^\pm - H_{nn}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_{00} & g_{01} & g_{02} & \cdots & g_{0n} \\ g_{10} & g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1n} \\ g_{20} & g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n0} & g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} = \mathbb{1}, \quad (2.51)$$

où  $\epsilon^\pm = \epsilon \pm i\eta$  ( $\eta > 0$ ) est l'énergie décalée dans le plan complexe pour la fonction de Green retardée (ou avancée). Pour les calculs hors équilibre, le potentiel chimique du contact sera ajouté par le décalage en énergie  $\epsilon^\pm - V_R$  dans les fonctions de Green. Nous pouvons réécrire l'équation précédente sous la forme,

$$\begin{pmatrix} (\epsilon^\pm - H_{00}) & -H_{0R} \\ -H_{R0} & (\epsilon^\pm - H_R) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_{00} & g_{0R} \\ g_{R0} & g_R \end{pmatrix} = \mathbb{1}, \quad (2.52)$$

avec

$$\begin{aligned} H_{0R} &= \begin{pmatrix} t_x & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}, & H_{R0} &= H_{0R}^\dagger, \\ g_{0R} &= \begin{pmatrix} g_{01} & g_{02} & \cdots & g_{0n} \end{pmatrix}, & g_{R0} &= g_{0R}^\dagger, \end{aligned} \quad (2.53)$$

ce qui est plus pratique pour trouver l'équation de Dyson (qui sera écrite sous la forme d'une équation matricielle du second ordre). Nous extrayons des équations précédentes le système suivant,

$$\begin{cases} (\epsilon^\pm - H_{00})g_{00} - H_{0R}g_{R0} &= \mathbb{1} \\ -H_{R0}g_{00} + (\epsilon^\pm - H_R)g_{R0} &= 0. \end{cases}$$

La seconde équation nous donne une expression pour  $g_{R0}$ ,

$$g_{R0} = (\epsilon^\pm - H_R)^{-1} H_{R0} g_{00}, \quad (2.54)$$

que nous injectons dans la première équation,

$$(\epsilon^\pm - H_{00})g_{00} - H_{0R}(\epsilon^\pm - H_R)^{-1} H_{R0} g_{00} = \mathbb{1}. \quad (2.55)$$

Nous avons  $g_R = (\epsilon^\pm - H_R)^{-1}$  et nous posons  $(\epsilon^\pm - H_{00}) = g_{00}^0{}^{-1}$ , où les  $g_{nn}^0$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) sont les fonctions de Green des tranches de contact déconnectées les unes des autres. Le contact étant semi-infini, nous pouvons enlever une tranche tout en conservant le même hamiltonien et les mêmes fonctions de Green, de sorte que  $H_{0R}g_R H_{R0} = t_x g_{00} t_x^\dagger$ , et nous obtenons l'équation de Dyson,

$$g_{00}^0{}^{-1} g_{00} - t_x g_{00} t_x^\dagger g_{00} = \mathbb{1}. \quad (2.56)$$

En multipliant par la droite cette équation par  $t_x^\dagger$ , nous avons,

$$g_{00}^0{}^{-1} g_{00} t_x^\dagger - t_x g_{00} t_x^\dagger g_{00} t_x^\dagger - t_x^\dagger = 0. \quad (2.57)$$

Et enfin, nous arrivons à une équation matricielle du second ordre qui peut être réécrite en utilisant la variable  $Y = g_{00} t_x^\dagger$ ,

$$t_x Y^2 - g_{00}^0{}^{-1} Y + t_x^\dagger = 0. \quad (2.58)$$

Nous allons maintenant résoudre cette équation avec la décomposition de Schur généralisée pour obtenir la solution  $Y$ . La self-énergie pour le contact de droite est donc  $\Sigma_R = t_x Y = t_x g_{00} t_x^\dagger$ . La self-énergie pour le contact de gauche est donnée par  $\Sigma_L = t_x^\dagger Y = t_x^\dagger g_{00} t_x$ , qui est la solution de l'équation  $t_x^\dagger Y^2 - g_{00}^0{}^{-1} Y + t_x = 0$ , en prenant soin d'introduire le potentiel chimique idoine dans les fonctions de Green par le décalage en énergie  $\epsilon^\pm - V_L$  pour les calculs hors équilibre.

Nous devons donc résoudre une équation matricielle du second ordre, dont les coefficients sont des matrices non auto-adjointes. Nous présentons ici une manière efficace et stable numériquement de résoudre cette équation, basée sur la décomposition de Schur en matrice compagnon de cette équation au second ordre. La décomposition de Schur nous permet d'écrire une matrice carrée  $A$  sous la forme  $A = QUQ^\dagger$ , avec  $Q$  une matrice unitaire et  $U$  une matrice triangulaire supérieure. Cette décomposition nous donne directement les valeurs propres de  $A$  qui sont sur la diagonale de  $U$ . Il est possible de généraliser cette décomposition en l'appliquant simultanément à deux matrices de taille  $n \times n$ , en imposant que l'aspect triangulaire se réduise à une propriété valide par blocs de taille  $n \times n$ . Nous pouvons donc construire  $Q$  et  $Z$  tels que [99],

$$Q^\dagger F Z = T, \quad Q^\dagger G Z = S,$$

avec  $S$  et  $T$  des matrices triangulaires supérieures par blocs de taille  $n \times n$  et  $Q$  et  $Z$  des matrices unitaires.

Nous présentons maintenant la façon de résoudre cette équation. Nous posons l'équation matricielle du second ordre,

$$\alpha Y^2 + \beta Y + \gamma = 0, \quad (2.59)$$

avec  $\alpha, \beta, \gamma$  des matrices carrées de taille  $n \times n$  avec des coefficients complexes, ici  $\alpha$  est supposée inversible. Nous définissons deux matrices  $F$  et  $G$  à partir des coefficients de l'Eq. 2.59, comme suit

$$F = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ -\gamma & -\beta \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix}. \quad (2.60)$$

$Y$  est la solution de l'Eq. 2.59, si et seulement si

$$F \begin{pmatrix} \mathbb{1} \\ Y \end{pmatrix} = G \begin{pmatrix} \mathbb{1} \\ Y \end{pmatrix} Y. \quad (2.61)$$

En conséquence, les solutions de l'Eq. 2.59 sont de la forme [99],

$$Y = Z_{21} Z_{11}^{-1} = Q_{11} T_{11} S_{11}^{-1} Q_{11}^{-1}. \quad (2.62)$$

Ceci nous permet de trouver directement les solutions de l'équation, c'est à dire les self-énergies des contacts. La dernière difficulté tient au fait que la décomposition n'est pas unique, ce qui mène à différentes solutions de l'équation. Il est donc important d'avoir un critère de sélection pour obtenir une solution physique. Un critère de sélection est d'imposer un ordre aux valeurs singulières pendant la décomposition de Schur généralisée : nous trions les valeurs qui sont contenues dans le disque unité.

Pour calculer les self-énergies des contacts dans la direction  $y$  d'un modèle à quatre terminaux nous pouvons effectuer les mêmes calculs, en remplaçant le hamiltonien  $H_n = \mathbb{1}_{N_y} \otimes \epsilon_r$  d'une tranche de largeur  $N_y$  par le hamiltonien  $H_n = \mathbb{1}_{N_x} \otimes \epsilon_r$  d'une tranche de largeur  $N_x$  et la matrice de saut  $\mathbb{1}_{N_y} \otimes t_x$  dans la direction  $x$  par la matrice de saut  $\mathbb{1}_{N_x} \otimes t_y$  dans la direction  $y$ .

### 2.2.3.3 Algorithme récursif pour les fonctions de Green

Pour étudier les propriétés de transport, nous allons avoir besoin de calculer numériquement la conductance et la distribution des courants locaux (ou courants de liens) du système, en utilisant les fonctions de Green Keldysh *lesser* hors équilibre  $G^<$ . La visualisation des courants locaux nous sera très utile pour analyser l'effet des impuretés sur les canaux de bords et leur éventuelle disparition ou déviation.

La distribution locale de courant de charge entre deux sites premiers voisins est donnée, en direction  $x$  et  $y$  par les deux composantes (voir annexe B et C) :

$$\begin{aligned} I_{(x,y)(x+1,y)} &= \langle J_{(x,y)(x+1,y)} \rangle = \sum_{\sigma\sigma'\tau\tau'} \langle J_{(x,y)(x+1,y)}^{\sigma\sigma'\tau\tau'} \rangle, \\ I_{(x+1,y)(x,y)} &= \langle J_{(x+1,y)(x,y)} \rangle = \sum_{\sigma\sigma'\tau\tau'} \langle J_{(x+1,y)(x,y)}^{\sigma\sigma'\tau\tau'} \rangle, \end{aligned} \quad (2.63)$$

où  $\langle \dots \rangle$  est la moyenne statistique quantique sur les densités de courant  $J_{(x,y)(x+1,y)}$  par rapport à la matrice densité ayant évolué sur un temps suffisamment long, de telle sorte que l'état de non équilibre et les interactions diverses au sein du système soient complètement

établis. Les densités locales de courant non sommées sur les indices de bande et de spin s'écrivent en fonction des fonctions de Green Keldysh *lesser*  $G^<$  (voir annexe C) :

$$\begin{aligned}
\langle J_{(x,y)(x+1,y)}^{\sigma\sigma'\tau\tau'} \rangle &= - \int d\epsilon \left[ t_{(x+1,y)(x,y)}^{\sigma'\sigma\tau'\tau} G_{(x,y)(x+1,y)}^{<\sigma\sigma'\tau\tau'}(\epsilon) - t_{(x,y)(x+1,y)}^{\sigma\sigma'\tau\tau'} G_{(x+1,y)(x,y)}^{<\sigma'\sigma\tau'\tau}(\epsilon) \right] \\
&= -2 \int d\epsilon \operatorname{Re} \left[ t_x^{\dagger\sigma\sigma'\tau\tau'} G_{(x,y)(x+1,y)}^{<\sigma\sigma'\tau\tau'}(\epsilon) \right], \\
\langle J_{(x,y)(x,y+1)}^{\sigma\sigma'\tau\tau'} \rangle &= - \int d\epsilon \left[ t_{(x,y+1)(x,y)}^{\sigma'\sigma\tau'\tau} G_{(x,y)(x,y+1)}^{<\sigma\sigma'\tau\tau'}(\epsilon) - t_{(x,y)(x,y+1)}^{\sigma\sigma'\tau\tau'} G_{(x,y+1)(x,y)}^{<\sigma'\sigma\tau'\tau}(\epsilon) \right] \\
&= -2 \int d\epsilon \operatorname{Re} \left[ t_y^{\dagger\sigma\sigma'\tau\tau'} G_{(x,y)(x,y+1)}^{<\sigma\sigma'\tau\tau'}(\epsilon) \right],
\end{aligned} \tag{2.64}$$

où  $\sigma, \sigma'$  et  $\tau, \tau'$  sont respectivement les indices de spin et de bande (électrons et trous).

Le système considéré est un échantillon de taille  $N_x \times N_y$  sites divisé en  $N_x$  couches de largeur  $N_y$ , et l'effet des contacts est pris en compte en ajoutant les self-énergie correspondantes aux couches 0 et  $N_x + 1$ . Ces deux couches sont considérées comme étant les premières couches principales des deux contacts.

Nous notons les blocs matriciels des fonctions de Green  $g_{k,l}^{[i,j]}$  en précisant l'intervalle de l'échantillon couvert par l'indice du haut  $[i, j]$  et en repérant le bloc considéré de la matrice par l'indice du bas  $k, l$ . Un indice en haut ou en bas ne contenant qu'un seul élément représente respectivement une couche isolée de l'échantillon et un bloc dans la diagonale de la fonction de Green matricielle.

Nous amorçons le schéma de récurrence en ajoutant la self-énergie du contact de gauche  $\Sigma_L$  (droite  $\Sigma_R$ ) à la couche correspondante, soit

$$\begin{aligned}
g_0^{[0]} &= [\epsilon^\pm - H_0^{[0]} - \Sigma_L - V_L]^{-1}, \\
g_{N_x+1}^{[N_x+1]} &= [\epsilon^\pm - H_{N_x+1}^{[N_x+1]} - \Sigma_R - V_R]^{-1}.
\end{aligned} \tag{2.65}$$

Nous notons les  $N_x + 2$  blocs hamiltoniens par l'écriture  $H_n^{[n]} = \epsilon_n$  et la fonction de Green du  $n$ -ème bloc isolé est  $g_n^{[n]} = [\epsilon^\pm - H_n^{[n]} - V_n]^{-1}$ , où  $\epsilon^\pm = \epsilon \pm i\eta$  est l'énergie décalée dans le plan complexe et  $V_n$  contient le potentiel électrique et le potentiel d'impuretés de la couche  $n$ . La matrice de saut entre deux blocs  $n$  et  $n + 1$  est [100, 101],

$$H_{n,n+1} = \begin{pmatrix} 0 & H_{n,n+1} \\ H_{n+1,n} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & t_x \\ t_x^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.66}$$

La matrice  $H_n^{[0,n]}$  est la somme des  $n + 1$  blocs hamiltoniens contenant la self-énergie du contact de gauche ajoutée au bloc 0. La fonction de Green matricielle correspondante est  $g_n^{[0,n]} = [\epsilon^\pm - H_n^{[0,n]}]^{-1}$ . Le bloc isolé suivant  $H_{n+1}^{[n+1]}$  peut être ajouté à  $H_n$  en écrivant  $H_{n+1}^{[0,n+1](0)} = H_n^{[0,n]} \oplus H_{n+1}^{[n+1]}$ . Sans les couplages entre les différentes couches nous avons,

$$\begin{aligned}
H_{n+1}^{[0,n+1](0)} &= \begin{pmatrix} H_n^{[0,n]} & 0 \\ 0 & H_{n+1}^{[n+1]} \end{pmatrix}, \\
g_{n+1}^{[0,n+1](0)} &= \begin{pmatrix} g_n^{[0,n]} & 0 \\ 0 & g_{n+1}^{[n+1]} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.67}$$

L'indice (0) sert à repérer les matrices ne contenant pas les couplages. Nous ajoutons maintenant les éléments connectant les blocs entre eux,

$$H_{n+1}^{[0,n+1]} = \begin{pmatrix} H_n^{[0,n]} & H_{n,n+1} \\ H_{n+1,n} & H_{n+1}^{[n+1]} \end{pmatrix}. \tag{2.68}$$

Grâce à l'équation de Dyson, il est maintenant possible de trouver les fonctions de Green des  $n + 2$  blocs :

$$g_{n+1}^{[0,n+1]} = g_{n+1}^{[0,n+1](0)} + g_{n+1}^{[0,n+1](0)} H_{n,n+1} g_{n+1}^{[0,n+1]}. \quad (2.69)$$

Nous utilisons donc cette équation pour obtenir la relation de récurrence permettant de calculer les blocs de fonctions de Green.

Le calcul des fonctions de Green Keldysh hors équilibre  $G^<$  peut être décomposé en trois étapes algorithmiques [102].

Le premier algorithme de la récurrence commence simultanément des contacts gauche et droit avec  $g_0^{[0]}$  et  $g_{N_x+1}^{[N_x+1]}$  pour atteindre les contacts droit et gauche (respectivement) pour obtenir  $g_{N_x+1}^{[0,N_x+1]}$  et  $g_0^{[0,N_x+1]}$  :

$$g_{n+1}^{[0,n+1]} = \left[ g_{n+1}^{[n+1]}{}^{-1} - H_{n+1,n} g_n^{[0,n]} H_{n,n+1} \right]^{-1}, \quad (2.70)$$

$$g_{n-1}^{[n-1,N_x+1]} = \left[ g_{n-1}^{[n-1]}{}^{-1} - H_{n-1,n} g_n^{[n,N_x+1]} H_{n,n-1} \right]^{-1}. \quad (2.71)$$

À présent, il est possible de calculer les fonctions de Green couplant les deux contacts à travers l'échantillon  $G_{N_x+1,0} = g_{N_x+1,0}^{[0,N_x+1]}$  et  $G_{0,N_x+1} = g_{0,N_x+1}^{[0,N_x+1]}$  avec l'algorithme suivant,

$$g_{0,n+1}^{[0,n+1]} = g_{0,n}^{[0,n]} H_{n,n+1} g_{n+1}^{[0,n+1]}, \quad (2.72)$$

$$g_{N_x+1,n-1}^{[n-1,N_x+1]} = g_{n-1}^{[n-1,N_x+1]} H_{n-1,n} g_{N_x+1,n}^{[n,N_x+1]}. \quad (2.73)$$

$G_{N_x+1,0}$  et  $G_{0,N_x+1}$  sont également utiles pour calculer la conductance en régime de réponse linéaire dans le cas du système à l'équilibre, grâce à la formule de Landauer à température nulle,

$$\begin{aligned} g(\epsilon) &= \text{Tr}[\Gamma_0(\epsilon) G(\epsilon) \Gamma_{N_x+1}(\epsilon) G^\dagger(\epsilon)] \\ &= \text{Tr}[\Gamma_0(\epsilon) G_{N_x+1,0}(\epsilon) \Gamma_{N_x+1}(\epsilon) G_{0,N_x+1}^\dagger(\epsilon)], \end{aligned} \quad (2.74)$$

avec  $\Gamma_p(\epsilon) = i[\Sigma_p(\epsilon) - \Sigma_p^\dagger(\epsilon)]$ .

Le second algorithme de récurrence commence ensuite à partir du contact de droite avec  $G_{N_x+1} = g_{N_x+1}^{[0,N_x+1]}$  et balaie l'échantillon jusqu'au contact de gauche pour obtenir  $G_0 = g_0^{[0,N_x+1]}$ ,

$$G_n = g_n^{[0,n]} + g_n^{[0,n]} H_{n,n+1} G_{n+1} H_{n+1,n} g_n^{[0,n]}. \quad (2.75)$$

Avec cette fonction de Green, il est possible de calculer la densité locale d'états résolue en spin et en bande

$$\rho_{x,y}^{\sigma\tau}(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{x,y}^{\sigma\tau}(\epsilon), \quad (2.76)$$

en prenant soin de prendre la fonction de Green correspondant à la bonne tranche  $n$  en direction  $x$ , et en prenant ses composantes correspondant à l'indice de site en direction  $y$ , de bande  $\tau$  et de spin  $\sigma$ .

Les courants locaux Eq. 2.64 requièrent le calcul des éléments de matrice des fonctions de Green Keldysh  $G_{(x,y)(x+1,y)}^<$  et  $G_{(x,y)(x,y+1)}^<$ . Dans le cas d'un système à deux terminaux, nous avons besoin de calculer les termes  $G_{n,n+1}^<$  et  $G_{n,n}^<$  qui contiennent toute l'information sur les interactions entre deux couches consécutives  $(x, x+1)$  et deux sites voisins au sein d'une couche  $(y, y+1)$ .

La troisième étape est de calculer les éléments suivants,

$$G_{n-1,N_x+1} = g_{n-1}^{[0,n-1]} H_{n,n+1} G_{n,N_x+1}, \quad (2.77)$$

$$G_{0,n+1}^\dagger = g_{n+1}^{[0,n+1]^\dagger} H_{n+1,n} G_{0,n}^\dagger, \quad (2.78)$$

dans le but d'obtenir les fonctions de Green Keldysh couplant les couches premières voisines pour les distributions de courants locaux dans la direction  $x$

$$G_{n,n+1}^< = G_{n,N_x+1} \Sigma_{N_x+1}^< G_{N_x+1,n+1}^\dagger + G_{n,0} \Sigma_0^< G_{0,n+1}^\dagger, \quad (2.79)$$

avec

$$\Sigma_p^<(\epsilon) = i\Gamma_p(\epsilon - V_p)f(\epsilon - V_p), \quad (2.80)$$

où  $f(\epsilon - V_p)$  et  $V_p$  sont respectivement la fonction de Fermi et le potentiel chimique du contact  $p$ . Ceci nous permet donc d'introduire une différence de potentiel entre deux contacts et la température des réservoirs.

La fonction de Green Keldysh sur site est donnée par

$$G_{n,n}^< = G_{n,N_x+1} \Sigma_{N_x+1}^< G_{N_x+1,n}^\dagger + G_{n,0} \Sigma_0^< G_{0,n}^\dagger. \quad (2.81)$$

et permet de déterminer la distribution des courants locaux dans la direction  $y$  et la densité de charge (ou de spin) hors équilibre, qui représente l'écart de la densité de charge (et de spin) à l'équilibre  $\Delta n_{x,y}^{\tau\sigma}$  [61, 103],

$$\Delta n_{x,y}^{\tau\sigma}(\epsilon_F) = \lim_{V \rightarrow 0} \int_{\epsilon_F - V/2}^{\epsilon_F + V/2} \frac{d\epsilon}{2\pi i} G_{x,y}^{<\tau\sigma}(\epsilon), \quad (2.82)$$

où  $V = V_R - V_L$ . En pratique, comme  $V$  sera petit dans nos simulations, nous calculerons

$$\Delta n_{x,y}^{\tau\sigma}(\epsilon_F) = \int_{\epsilon_F - V/2}^{\epsilon_F + V/2} \frac{d\epsilon}{2\pi i} G_{x,y}^{<\tau\sigma}(\epsilon). \quad (2.83)$$

Les Eq. 2.79 et Eq. 2.81 peuvent être calculées avec un algorithme condensé, qui est :

$$G_{n,n+1}^< = g_n^{[0,n]} H_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^{<R} + G_{n-1,n-1}^{<L} H_{n,n+1} g_{n+1}^{[n+1,N_x+1]\dagger}, \quad (2.84)$$

$$G_{n,n}^< = G_{n,n}^{<R} + G_{n,n}^{<L}, \quad (2.85)$$

et

$$G_{n,n}^{<R} = g_n^{[0,n]} H_{n,n+1} g_{n+1}^{[0,n+1]} H_{n+1,n+2} \dots g_{N_x+1}^{[0,N_x+1]} \Sigma_{N_x+1} g_{N_x+1}^{[0,N_x+1]\dagger} \dots H_{n+2,n+1} g_{n+1}^{[0,n+1]\dagger} H_{n+1,n} g_n^{[0,n]\dagger}, \quad (2.86)$$

$$G_{n,n}^{<L} = g_n^{[n,N_x+1]} H_{n,n-1} g_{n-1}^{[n-1,N_x+1]} H_{n-1,n-2} \dots g_0^{[0,N_x+1]} \Sigma_0 g_0^{[0,N_x+1]\dagger} \dots H_{n-2,n-1} g_{n-1}^{[n-1,N_x+1]\dagger} H_{n-1,n} g_n^{[n,N_x+1]\dagger}. \quad (2.87)$$

Les itérations consisteront donc à multiplier successivement les expressions à gauche et à droite par les matrices de saut et les fonctions de Green adéquates (contenant un intervalle donné  $[n, n']$  de l'échantillon), en partant des self-énergies des contacts.

#### 2.2.3.4 Implémentation et ensemble des paramètres

Les algorithmes décrits précédemment sont codés au sein de programmes en Fortran en utilisant les bibliothèques de calcul d'algèbre linéaire LAPACK (multiplications de matrices, inversions, diagonalisations, décomposition de Schur, etc...). Nous avons un programme générant les données pour créer des diagrammes de phases : il calcule à l'équilibre la conductance entre les deux contacts en fonction de l'énergie de Fermi  $\epsilon_F$  et de la constante de couplage des impuretés  $J_I$ . Un autre programme calcule les courants locaux ainsi que la densité de spin en mettant l'échantillon en situation hors équilibre par une

petite différence de potentiel entre les deux contacts. Le premier code est prévu pour être massivement parallélisé : les calculs de chaque point en énergie de Fermi et en constante de couplage peuvent être effectués en parallèle, de même pour les différentes configurations de désordre destinées à moyenniser les résultats. Le second code est simplement parallélisé en énergies, car il nous sert à observer la distribution des courants locaux pour une configuration de désordre et une constante de couplage données. Les diagrammes de phases ont donc été calculés à l'aide d'un cluster de calcul permettant d'avoir accès à des ressources de calcul conséquentes pour un temps d'occupation processeur de l'ordre du jour ou de la semaine, tandis que les courants locaux peuvent être obtenus avec une machine personnelle en quelques minutes.

Nous avons quatre ensembles de paramètres pour décrire l'échantillon, les deux contacts et les autres paramètres globaux. L'échantillon en lui-même est décrit par ses dimensions en sites  $N_x$  et  $N_y$ , la concentration  $n_I$  en impuretés et leur constante de couplage  $J_I$ , la graine pour le générateur de nombres aléatoires permettant d'obtenir une distribution du désordre, et par les paramètres du hamiltonien  $A, B, C, D$  et  $m$ . Les deux contacts  $p$  sont décrits par leur taille transverse  $N_y$ , leurs paramètres de hamiltonien  $A_p, B_p, C_p, D_p, m_p$  et leur potentiel électrique  $V_p$ . En pratique, les paramètres  $A_p, B_p, C_p, D_p, m_p$  seront les mêmes que pour le hamiltonien du système, c'est à dire  $A, B, C, D$  et  $m$ . Les paramètres globaux sont  $\eta$  qui définit la partie imaginaire dans le calcul des selfs-énergies des contacts,  $\epsilon_{\min}$  et  $\epsilon_{\max}$  qui définissent l'intervalle d'énergie (pour l'intégration sur les énergies dans le cas des courants locaux ou pour faire varier  $\epsilon_F$  dans le cas des diagrammes de phase),  $N_\epsilon$  qui est la résolution en énergie ( $\Delta_\epsilon = (\epsilon_{\max} - \epsilon_{\min})/N_\epsilon$  est le pas en énergie) et  $\epsilon_F$  est l'énergie de Fermi, qui définit le niveau de remplissage pour le calcul des courants locaux avec un système hors équilibre. Dans ce dernier cas, l'énergie de Fermi est introduite de la façon suivante dans le système :  $G^<(\epsilon = \epsilon' - \epsilon_F)$ ,  $\Sigma(\epsilon = \epsilon' - \epsilon_F)$ ,  $\Gamma_p(\epsilon = \epsilon' - \epsilon_F)$  etc... et  $\epsilon$  varie de  $\epsilon_{\min}$  à  $\epsilon_{\max}$  par pas de  $\Delta_\epsilon$ .

Une subtilité que l'on doit noter est le fait que ces simulations ont besoin de zones tampons ne contenant aucune impureté entre les contacts et la zone désordonnée. Ainsi, on définira une zone au centre de l'échantillon contenant des impuretés en concentration  $n_I$  entourée par deux zones tampons. Ceci permet d'éviter les problèmes d'interface entre les contacts et le matériau. En effet, en formalisme de Landauer les contacts étant censés être à l'équilibre, ces zones permettront de raccorder de façon « douce » les contacts à l'équilibre avec la zone désordonnée.

## 2.2.4 Outils numériques pour les dispositifs multi-terminaux

### 2.2.4.1 Algorithme récursif pour les fonctions de Green

Dans cette section, nous allons présenter l'algorithme multi-terminaux. Une tranche de l'échantillon n'est plus une tranche de taille  $N_y$  en un point de l'axe  $x$ , mais devient un ensemble de sites plus compliqué. Ceci signifie que nous allons devoir construire des ensembles de sites des différentes tranches en établissant la liste des sites reliés aux contacts, la liste des sites en contact avec la première tranche, puis la liste des sites en contact avec la seconde tranche mais en excluant les sites de la première tranche, et répéter l'opération jusqu'à la tranche la plus profonde de l'échantillon. Une fois cette étape effectuée, nous pourrions écrire les hamiltoniens  $H_n$  des tranches  $n$  et les matrices de saut  $H_{n,n+1}$  entre les différentes tranches.

Nous présentons l'algorithme, mais les résultats montrés dans ce manuscrit sont exclusivement centrés sur le dispositif à deux terminaux. Néanmoins, cet algorithme sera nécessaire pour les travaux à venir présentés dans les perspectives à la Sect. 3.1.3.

On commence la récurrence à partir de la matrice de Green  $g_1^{[1,1]}$  de la première tranche, à laquelle on ajoute la self-énergie des contacts et leurs potentiels,

$$g_1^{[1,1]} = g_1^{[1]} = [\epsilon^\pm - H_1^{[1]} - \Sigma_P - V_P]^{-1}, \quad (2.88)$$

où  $\Sigma_P$  est une matrice contenant toutes les self-énergies de contacts  $\Sigma_P$  et  $V_P$  est une matrice contenant le potentiel chimique  $V_P$  de tous les contacts. On prendra soin de ranger correctement ces deux matrices pour que les self-énergies et les potentiels soient attribués aux bons sites de la première tranche. On définit ensuite la fonction de Green du  $n$ -ième bloc isolé

$$g_n^{[n]} = [\epsilon^\pm - H_n^{[n]} - V_n]^{-1}, \quad (2.89)$$

où  $V_n$  est la matrice contenant le potentiel d'impuretés de la tranche  $n$  et le potentiel électrique. On calcule ensuite les matrices de Green des  $n + 1$  blocs avec la formule de récurrence :

$$g_{n+1}^{[1,n+1]} = \left[ g_{n+1}^{[n+1]} - H_{n+1,n} g_n^{[1,n]} H_{n,n+1} \right]^{-1}, \quad (2.90)$$

jusqu'à atteindre la tranche la plus profonde de l'échantillon avec  $g_N^{[1,N]}$ , où  $N$  est le nombre total de couches de l'échantillon. Une fois cette étape complétée, nous pouvons calculer les matrices des fonctions de Green *lesser* avec la récurrence suivante,

$$\begin{aligned} G_{1,1}^< &= g_1^{[1,1]} \Sigma_1^< g_1^{[1,1]\dagger}, \\ G_{2,2}^< &= g_2^{[1,2]} H_{2,1} G_{1,1}^< H_{1,2} g_2^{[1,2]\dagger}, \\ G_{n+1,n+1}^< &= g_{n+1}^{[1,n+1]} H_{n+1,n} G_{n,n}^< H_{n,n+1} g_{n+1}^{[1,n+1]\dagger}, \\ &\vdots \\ G_{N,N}^< &= g_N^{[1,N]} H_{N,N-1} G_{N-1,N-1}^< H_{N-1,N} g_N^{[1,N]\dagger}, \end{aligned} \quad (2.91)$$

où  $\Sigma_1^<$  est une matrice composée des matrices  $i\Gamma_p(\epsilon - V_p)f(\epsilon - V_p)$ , avec  $\Gamma_p = i[\Sigma_p - \Sigma_p^\dagger]$ . De même que pour  $\Sigma_P$ , on prendra soin de ranger les matrices pour que les éléments de  $\Sigma_1^<$  soient attribués aux bons sites. Cet algorithme est l'équivalent de l'algorithme condensé Eq. 2.85, Eq. 2.86 et Eq. 2.87.

Maintenant que nous avons les fonctions de Green hors équilibre de chaque tranche de l'échantillon, nous allons calculer celles qui relient les tranches consécutives les unes avec les autres. Ceci s'effectue simplement par les opérations suivantes,

$$\begin{aligned} G_{2,1}^< &= g_2^{[2]} H_{2,1} G_{1,1}^<, \\ G_{3,2}^< &= g_3^{[3]} H_{3,2} G_{2,2}^<, \\ G_{n+1,n}^< &= g_{n+1}^{[n+1]} H_{n+1,n} G_{n,n}^<, \\ &\vdots \\ G_{N,N-1}^< &= g_N^{[N]} H_{N,N-1} G_{N-1,N-1}^<. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Avec les  $G_{n,n}^<$  et les  $G_{n+1,n}^<$  ainsi calculés, nous pouvons obtenir la densité de charge (ou de spin) hors équilibre et les courants locaux. La matrice de Green  $g_N^{[1,N]}$  contient quant à elle toute l'information utile pour calculer la densité d'état à l'équilibre et la conductance linéaire entre les différents contacts.

L'algorithme de récurrence multi-terminaux ( $N_p > 2$ ) est plus simple que l'algorithme à deux terminaux décrit précédemment avec Eq. 2.85, Eq. 2.86 et Eq. 2.87. Nous n'avons pas besoin de partir simultanément des deux contacts pour atteindre le contact opposé (Eq. 2.86, Eq. 2.87) pour ensuite additionner les deux résultats (Eq. 2.85). L'algorithme de récurrence multi-terminaux démarre de tous les contacts à la fois contenus dans une tranche et va, de tranche en tranche, vers la tranche la plus profonde de l'échantillon pour ensuite revenir vers les contacts. En d'autres termes, les récurrences gauche et droite de l'algorithme bi-terminaux-terminaux ne sont maintenant effectués que par une seule formule de récurrence, qui part de la matrice de la fonction de Green contenant tous les sites de l'échantillon reliés aux contacts et va vers les sites les plus distants avant de retourner aux premiers.

Nous présentons l'implémentation dans l'annexe E. Si cet algorithme est plus simple, son implémentation est plus complexe. Ceci explique le fait que nous avons utilisé l'algorithme bi-terminaux pour effectuer nos calculs : l'implémentation a été plus rapide à réaliser, et le code a été plus simple à vérifier.

### 2.2.5 Structures électroniques dans l'approximation de champ moyen

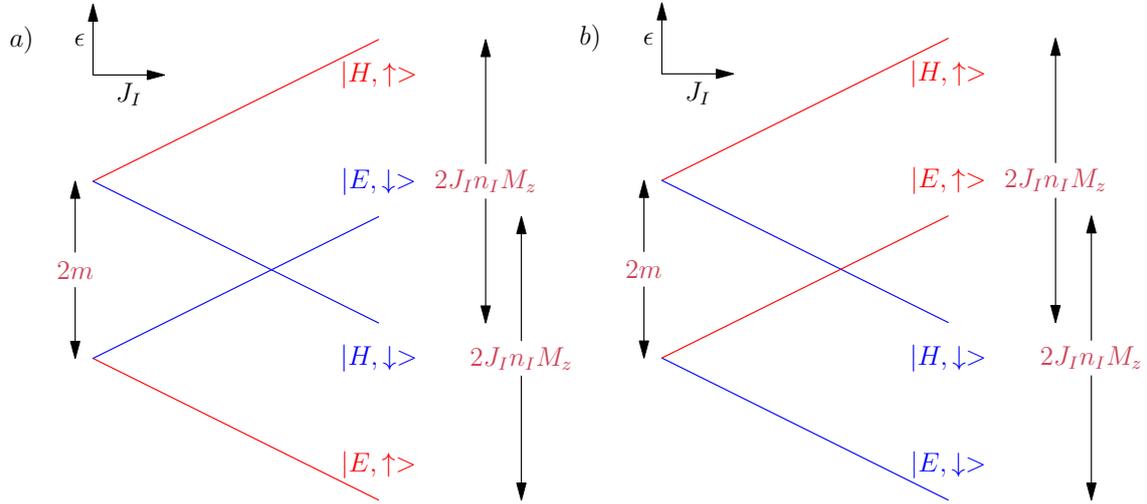


FIGURE 2.7 – Représentation de la séparation des bandes induite par les deux types de termes phénoménologiques de champ moyen  $H_{s,\alpha}$  sur le gap (de largeur  $2m$ ) dans le *bulk* : (a) antiferromagnétique ( $\alpha = z$ ), (b) ferromagnétique ( $\alpha = 0$ ). On observe que pour le cas antiferromagnétique une inversion de bandes se produit pour un des deux secteurs de spin : la bande d'électrons  $|E, \downarrow\rangle$  repasse au dessus de la bande de trous  $|H, \downarrow\rangle$ , rendant le secteur en spin down isolant (trivial). Pour le cas ferromagnétique on n'observe qu'un *splitting* Zeeman, il y a une levée de dégénérescence des secteurs de spin mais pas d'inversion de bande pour l'un d'eux. On observe toutefois que le matériau devient métallique quand  $J_I n_I M_z$  atteint un certain seuil : le gap se ferme.

En première approximation nous nous intéressons au désordre en champ moyen. Nous allons adapter le terme phénoménologique lié aux impuretés Eq. (2.40) et le réécrire sous la forme d'un champ moyen du désordre que nous avons défini à l'Eq. (2.41). On trouve la valeur du champ moyen des impuretés en effectuant la moyenne sur les positions et

l'orientation des spins comme suit,

$$\begin{aligned}
\langle V_{I\alpha}(\mathbf{r}) \rangle &= J_I \sum_{i \in I} \langle (\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rangle \\
&= J_I \sum_{i \in I} \langle (\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \rangle_{\mathbf{n}_i} \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rangle_{\mathbf{r}_i} \\
&= J_I \sum_{i \in I} \langle (\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \rangle_{\mathbf{n}_i} \int \frac{d\mathbf{r}_i}{N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \\
&= J_I \frac{1}{N} \sum_{i \in I} \langle (\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \rangle_{\mathbf{n}_i} \\
&= J_I \frac{N_I}{N} \langle (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \rangle_{\mathbf{n}} \\
&= J_I n_I M_z \boldsymbol{\sigma}_z \otimes \tau_\alpha.
\end{aligned} \tag{2.93}$$

En identifiant avec le terme phénoménologique Eq. (2.40), on a  $G_E = J_I n_I M_z$  et  $G_H = \pm J_I n_I M_z$  suivant que  $\alpha$  soit égal à 0 ou  $z$  pour un désordre dit ferromagnétique ou antiferromagnétique. Les crochets  $\langle \dots \rangle$  sont la moyenne sur les orientations des impuretés  $\mathbf{n}_i$  et sur les positions  $\mathbf{r}_i$ . Ceci nous donne ainsi les termes de champ moyen

$$\begin{aligned}
\langle V_{I0} \rangle &= \begin{pmatrix} J_I n_I M_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_I n_I M_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_I n_I M_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J_I n_I M_z \end{pmatrix}, \\
\langle V_{Iz} \rangle &= \begin{pmatrix} J_I n_I M_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J_I n_I M_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_I n_I M_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_I n_I M_z \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.94}$$

De cette façon, nous pourrions étudier la structure de bande du hamiltonien

$$H_\alpha = H + \langle V_{I\alpha} \rangle, \tag{2.95}$$

et observer l'effet de séparation des bandes (*splitting*) induit par le terme  $\langle V_{I\alpha} \rangle$ . Nous avons tracé à la Fig. 2.7 les modifications induites sur les bords de bandes, c'est à dire sur le gap dans le *bulk*. Pour les deux cas  $\alpha = 0, z$  il y a une levée de dégénérescence entre les deux secteurs de spin, mais tandis que le cas  $\alpha = 0$  ne présente qu'un effet Zeeman, le cas  $\alpha = z$  présente une inversion de bandes pour un des deux secteurs de spin. Nous nous attendons donc à ce que ce cas de désordre transforme l'isolant topologique en isolant de Chern, en détruisant une paire d'états de bords liée au spin dont la structure de bande s'inverse (en devenant celle d'un isolant trivial).

Comme nous voulons voir comment ce terme modifie les états de bords, nous allons devoir écrire ce hamiltonien en espace réel suivant une des deux directions du plan (ici en  $x$ ) comme nous l'avons fait à l'Eq. (2.33). Nous obtenons donc une expression du hamiltonien dont nous allons pouvoir rechercher les valeurs propres  $\epsilon_\alpha(k_y)$  numériquement pour les tracer :

$$\begin{aligned}
H_\alpha(k_y) &= \mathbb{1}_{N_x} \otimes \Gamma_0 [C - D(4 - 2 \cos k_y)] + (T_{N_x}^{-1} + T_{N_x}) \otimes \Gamma_0 D \\
&\quad + i(T_{N_x}^{-1} - T_{N_x}) \otimes \Gamma_3 1/2 + \mathbb{1}_{N_x} \otimes \Gamma_4 \sin k_y \\
&\quad + \mathbb{1}_{N_x} \otimes \Gamma_5 [m - B(4 - 2 \cos k_y)] + (T_{N_x}^{-1} + T_{N_x}) \otimes \Gamma_5 B \\
&\quad + \mathbb{1}_{N_x} \otimes \langle V_{I\alpha} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.96}$$

Ce hamiltonien décrit donc un cylindre possédant un champ moyen  $\langle V_{I\alpha} \rangle$  lié aux impuretés. Nous n'avons donc pas encore de désordre spatialement distribué, mais seulement une magnétisation moyenne. La recherche des valeurs propres à l'aide d'un programme simple en Fortran nous fournit les données permettant de tracer la structure de bande du *bulk* et des deux bords.

On s'intéresse tout d'abord au cas d'un matériau pur avec  $J_I n_I M_z = 0$  en faisant varier la masse topologique  $m$  pour voir l'apparition des états de bords dont les structures de bandes sont des cônes de Dirac. Nous rappelons qu'une masse topologique positive mène à un isolant de bandes standard et qu'une masse topologique négative génère un isolant topologique : l'interpolation entre un isolant topologique et un isolant trivial comme le vide ( $m = +\infty$ ) ou un isolant de bandes ( $m > 0$ ) entraîne la fermeture du gap à l'interface, produisant l'apparition des états de bords conducteurs. C'est avec la condition  $m < 0$  que l'on obtiendra une conductance  $G = 2$  liée à l'existence des quatre états de bords dégénérés en spin. Nous voyons ainsi l'influence de la masse topologique sur la structure de bande centrée autour du gap à la Fig. 2.8 avec trois cas différents :  $m = 0.137, 0, -0.137$ . Les considérations sur les propriétés de conduction du matériau (métal, isolant, isolant topologique) qui suivront seront valables pour un niveau de Fermi fixé à  $\epsilon_F = 0$ .

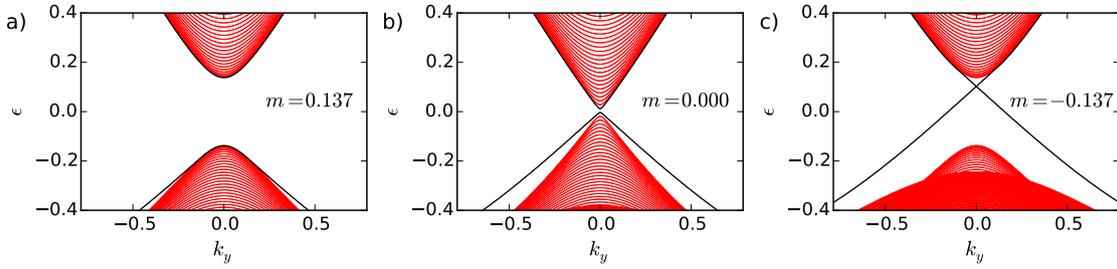


FIGURE 2.8 – Structures de bandes  $\epsilon(k_y)$  pour un échantillon pur ( $J_I n_I M_z = 0$ ) de dimension  $200N_x$  et 400 modes transverses  $k_y$  avec différentes valeurs de masse topologique :  $m = 0.137, 0, -0.137$  ((a),(b),(c)). Avec un niveau de Fermi fixé à  $\epsilon_F = 0$ , lorsque la masse topologique est positive (a) on obtient un isolant de bande standard, lorsqu'elle est nulle on obtient un matériau métallique (b), et l'isolant topologique apparaît avec une masse topologique négative : on voit l'apparition des états de bords dont les bandes se croisent dans le gap (en noir).

Lorsque l'on étudie la structure de bande de  $H_z(k_y)$  à la Fig. 2.9 avec différentes valeurs de couplage magnétique ( $J_I n_I M_z = 0.1, 0.137, 0.17$ ), nous observons d'abord un *splitting* entre les deux secteurs de spin ( $J_I n_I M_z < 0.137$ ), puis l'apparition d'une phase métallique ( $J_I n_I M_z = 0.137$ ), et enfin la disparition d'un des cônes de Dirac d'un des deux secteurs de spin, avec un gap dans le *bulk* ( $J_I n_I M_z > 0.137$ ). Cette dernière structure de bande est typique d'un matériau présentant l'effet Hall quantique anomal : la symétrie par renversement du temps est brisée et la conduction d'une des deux espèces de spin est bloquée. On s'attend donc, dans cette dernière configuration, à obtenir une conductance  $G = 1$ .

La perturbation de type  $H_0(k_y)$  donne des changements différents, comme on peut le voir à la Fig. 2.10. Pour  $J_I n_I M_z < 0.137$  nous avons toujours une levée de dégénérescence des secteurs de spin, à  $J_I n_I M_z = 0$  la structure de bande correspond à celle d'un métal, mais à  $J_I n_I M_z > 0.137$  les bandes de valance et de conduction du *bulk* se confondent et il n'y a plus de gap : le matériau reste métallique. Cela est difficile à observer sur ces figures, mais l'existence des deux états de bords persiste également. On voit toujours clairement un des deux cônes de Dirac, l'autre est noyé dans les bandes du *bulk*.

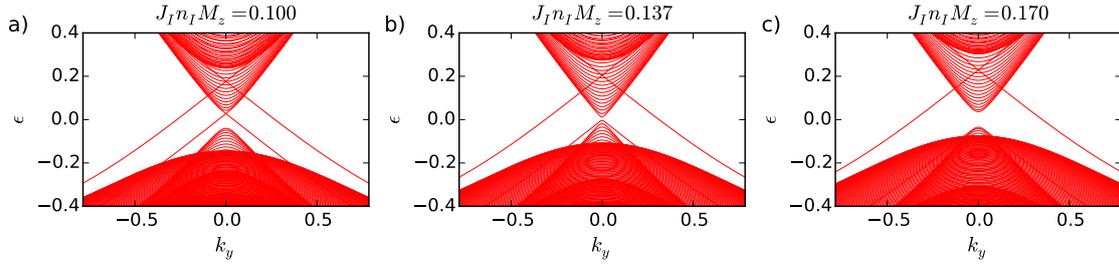


FIGURE 2.9 – On a représenté la structure de bande  $\epsilon_z(k_y)$  d'un isolant topologique avec un désordre antiferromagnétique en champ moyen et différentes valeurs de magnétisation moyenne  $J_I n_I M_z = 0.1, 0.137, 0.17$  ((a),(b),(c)). Pour  $J_I n_I M_z = 0.1$  on observe une levée de dégénérescence des niveaux d'énergie, les états de bords sont conservés, à  $J_I n_I M_z = -m = 0.137$ , le gap du *bulk* se ferme, et lorsque  $J_I n_I M_z > -m$ , on obtient la phase de l'effet Hall quantique anomal : il ne reste plus qu'un seul cône de Dirac.

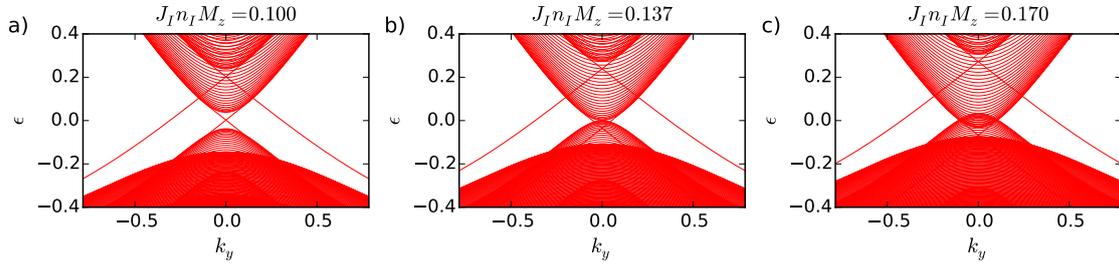


FIGURE 2.10 – On a représenté la structure de bande  $\epsilon_0(k_y)$  d'un isolant topologique avec un désordre ferromagnétique en champ moyen et différentes valeurs de magnétisation moyenne  $J_I n_I M_z = 0.1, 0.137, 0.17$  ((a),(b),(c)). Pour  $J_I n_I M_z = 0.1$  on observe comme pour le cas antiferromagnétique une levée de dégénérescence des niveaux d'énergie, les états de bords sont conservés, à  $J_I n_I M_z = -m = 0.137$ , le gap du *bulk* se ferme, et lorsque  $J_I n_I M_z > -m$ , la structure de bande reste celle d'un métal : il n'y a plus de gap dans le *bulk*.

Ainsi, on s'attend à avoir une transition possible entre un matériau possédant une conductance  $G = 2$  et un matériau possédant une conductance  $G = 1$  seulement dans le cas d'un désordre dit antiferromagnétique (avec l'indice de type de désordre  $\alpha = z$ ).

## 2.3 Résultats

### 2.3.1 Espace des phases

Les résultats numériques sont basés sur le calcul de la conductance linéaire à température nulle, donnée par,

$$G(\epsilon_F, J_I) = \frac{e^2}{\hbar} \langle \text{Tr} [\Gamma_R(\epsilon_F) G^r(\epsilon_F) \Gamma_L(\epsilon_F) G^a(\epsilon_F)] \rangle, \quad (2.97)$$

qui n'est autre que l'Eq. 2.74 moyennée sur le désordre, avec

$$\begin{aligned} \Gamma_L(\epsilon_F) &= \Gamma_0(\epsilon_F), \\ \Gamma_R(\epsilon_F) &= \Gamma_{N_x+1}(\epsilon_F), \\ G^a(\epsilon_F) &= G_{N_x+1,0}(\epsilon_F), \\ G^r(\epsilon_F) &= G_{0,N_x+1}^\dagger(\epsilon_F), \end{aligned} \quad (2.98)$$

et l'unité de conductance  $e^2/\hbar$ . Les diagrammes de conductance obtenus seront le point de départ de l'analyse phénoménologique. Les calculs numériques sont effectués sur la base d'échantillons de  $400 \times 64$  sites. La zone contenant du désordre est longue de 256 sites et est placée au milieu de l'échantillon, de sorte qu'il y ait deux zones tampons longues de 144 sites de chaque côté afin d'éliminer les effets de discontinuités. Les diagrammes montrent la conductance pour une variété de couplages allant du cas pur ( $J_I = 0$ ) à un désordre fort ( $J_I \approx 1.5$ ) et sont moyennés sur une centaine de réalisations de désordre.

### 2.3.1.1 $M_z = 1$

Contrairement à ce que laissait penser l'approximation en champ moyen, nos simulations numériques montrent que dans les deux cas de désordres et avec une polarisation totale des impuretés ( $M_z = 1$ ) nous obtenons une transition entre des états de Dirac et des états de Chern : un îlot de conductance  $G = 1$  en unités de  $e^2/\hbar$  apparaît sur les deux diagrammes de conductance Fig. 2.11 et Fig. 2.15 en bleu clair. Tous deux présentent également la phase isolant topologique de conductance  $G = 2$  en bleu foncé, disparaissant quand la constante de couplage  $J_I$  augmente.

Le diagramme de conductance dans le cas antiferromagnétique pour  $n_I = 0.2$  montre l'apparition d'une phase d'effet Hall quantique anomal pour un désordre dont l'intensité est  $J_I \approx 0.67$ . Le champ moyen prédit l'apparition de cette phase quand  $J_I \approx 0.7$  ( $J_I n_I M_z = -m = 0.137$ , avec  $n_I = 0.2$  et  $M_z = 1$ ) et décrit relativement bien le contour de la phase  $G = 2$ . Cette phase semble malgré tout assez fragile, elle est peu étendue et la Fig. 2.12 montre qu'il persiste des fluctuations autour de la valeur  $G = 1$ . Ceci est probablement dû à des effets de résolution numérique liés au nombre limité de modes transverses. En augmentant la concentration il est possible d'obtenir une région de conductance  $G = 1$  plus étendue et plus robuste (moins soumise aux fluctuations). À la Fig. 2.13 nous avons utilisé une concentration  $n_I = 0.4$  et nous pouvons voir que la phase d'effet Hall quantique anomal apparaît pour des  $J_I$  allant d'environ 0.3 à 0.5. Ceci est en assez bon accord avec le champ moyen qui prédit l'apparition de la phase quand  $J_I \approx 0.35$ . La Fig. 2.14 montre bien une disparition des fluctuations dans la région  $G = 1$ , ce qui est révélateur d'une phase topologique. On peut également voir que pour certaines valeurs de  $J_I$  fixées les deux phases topologiques peuvent coexister à différentes énergies de Fermi  $\epsilon_F$  et la conductance peut passer de  $G = 2$  à  $G = 1$  en faisant varier ce seul paramètre. Dans le cas ferromagnétique le contour de la phase  $G = 2$  est également bien décrit par le champ moyen et disparaît à  $J_I \approx 0.6$  ( $J_I \approx 0.7$  en champ moyen). Une très grande phase  $G = 1$  apparaît à fort couplage et est située principalement à des valeurs négatives d'énergie de Fermi. Ceci était totalement inattendu en champ moyen.

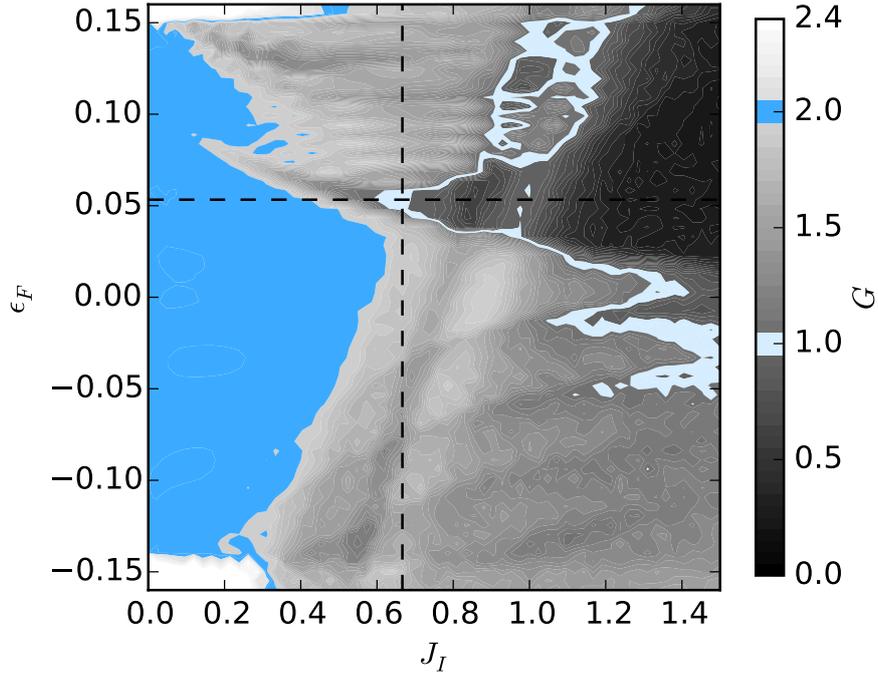


FIGURE 2.11 – Diagramme de conductance dans l’espace des paramètres d’énergie de Fermi  $\epsilon_F$  et de constante d’échange  $J_I$  pour le cas antiferromagnétique. La phase isolant topologique avec  $G = 2$  est représentée en bleu foncé et apparaît pour  $|\epsilon_F| < |m| = 0.137$  à faible désordre. À plus forte intensité, un petit îlot de conductance  $G = 1$  apparaît, représenté en bleu clair (à l’intersection des deux droites en pointillés), montrant l’apparition de la phase isolant de Chern. La polarisation des impuretés est totale avec  $M_z = 1$  et la concentration d’impuretés est  $n_I = 0.2$ . Les droites en pointillés sont des coupes dans l’espace des phases que l’on représente sur la Fig. 2.12. Taille de l’échantillon :  $400 \times 64$  sites.

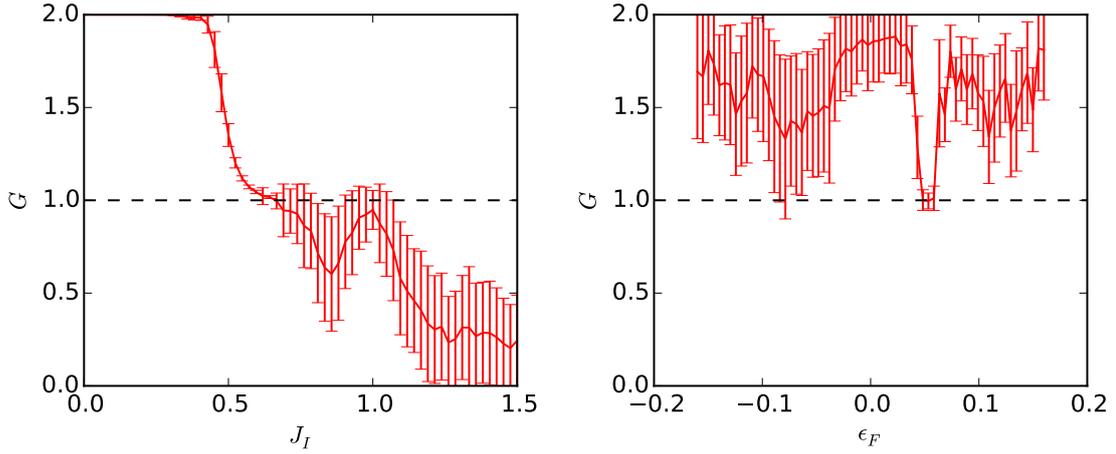


FIGURE 2.12 – On a représenté les coupes en pointillés de la Fig. 2.11 : la conductance  $G$  en fonction de la constante de couplage  $J_I$  pour  $\epsilon_F = 0.053$  à gauche, et en fonction de  $\epsilon_F$  pour  $J_I = 0.667$  à droite. L'amenuisement ou la disparition de l'écart-type représenté par les barres d'erreurs indique la position des phases topologiques. La phase  $G = 1$  est centrée autour de  $(\epsilon_F, J_I) = (0.053, 0.667)$ . On observe cependant qu'elle est peu étendue et tout de même soumise à des fluctuations.

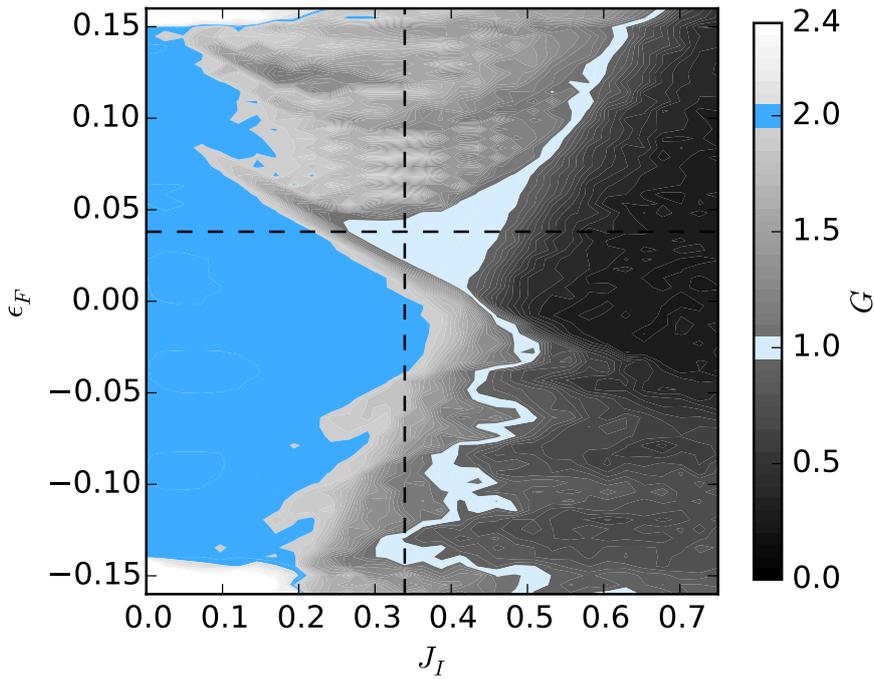


FIGURE 2.13 – Diagramme de conductance pour le cas antiferromagnétique, avec  $M_z = 1$  et une concentration d'impuretés  $n_I = 0.4$ . Nous faisons les mêmes observations que pour la Fig. 2.11, à ceci près que l'îlot de conductance  $G = 1$  est bien plus étendu. Les droites en pointillés sont des coupes dans l'espace des phases que l'on représente sur la Fig. 2.14. Taille de l'échantillon :  $400 \times 64$  sites.

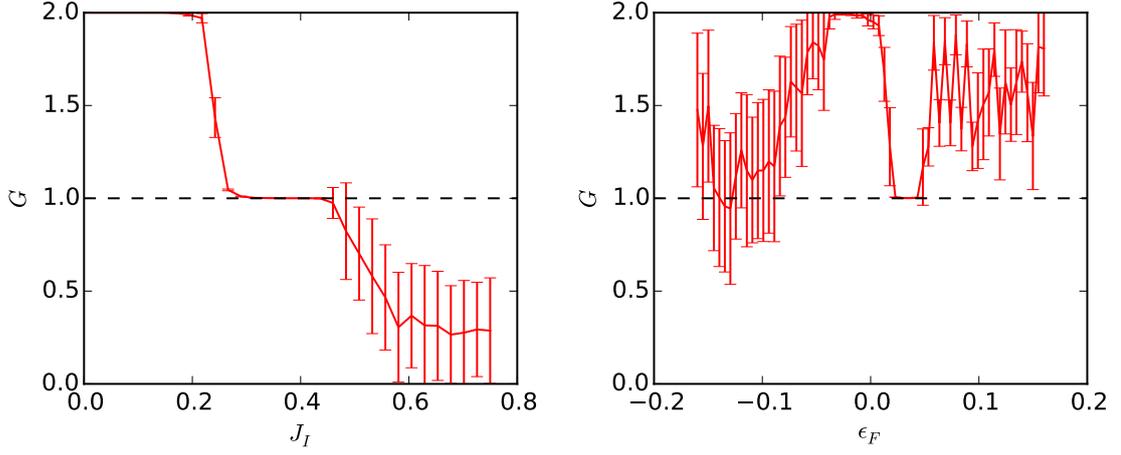


FIGURE 2.14 – On a représenté les coupes en pointillés de la Fig. 2.13 : la conductance  $G$  en fonction de la constante de couplage  $J_I$  pour  $\epsilon_F = 0.038$  à gauche, et en fonction de  $\epsilon_F$  pour  $J_I = 0.339$  à droite. La phase isolant de Chern est ici bien visible, avec un plateau à  $G = 1$  sans fluctuations.

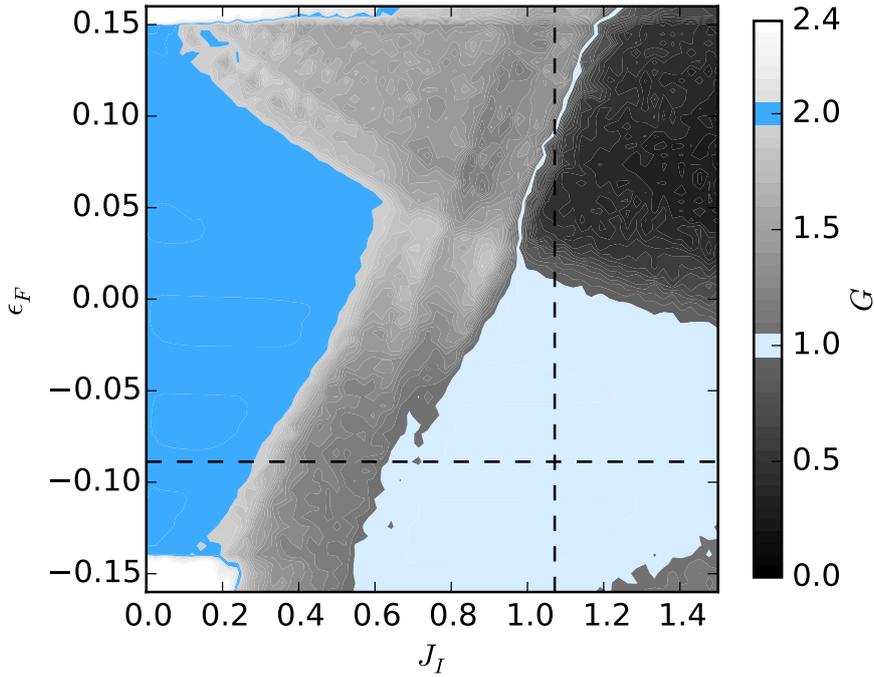


FIGURE 2.15 – Diagramme de conductance dans l'espace des paramètres d'énergie de Fermi  $\epsilon_F$  et de constante d'échange  $J_I$  pour le cas ferromagnétique. La phase isolant topologique avec  $G = 2$  est représentée en bleu foncé et apparaît pour  $|\epsilon_F| < |m| = 0.137$  à faible désordre. À plus forte intensité, un îlot de conductance  $G = 1$  de taille conséquente apparaît, représenté en bleu clair, montrant l'apparition de la phase isolant de Chern. La polarisation des impuretés est totale avec  $M_z = 1$  et la concentration d'impuretés est  $n_I = 0.2$ . Les droites en pointillés sont des coupes dans l'espace des phases que l'on représente sur la Fig. 2.16. Taille de l'échantillon :  $400 \times 64$  sites.

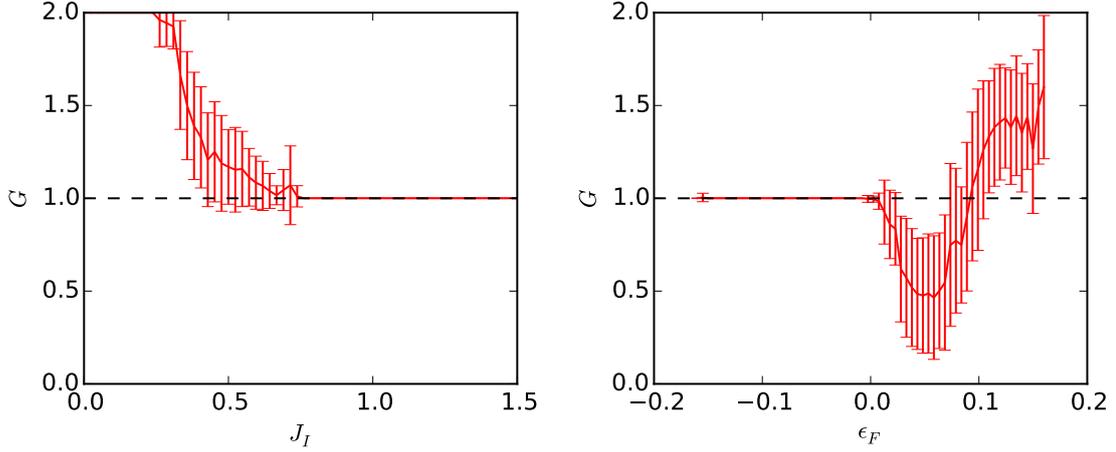


FIGURE 2.16 – On a représenté les coupes en pointillés de la Fig. 2.15 : la conductance  $G$  en fonction de la constante de couplage  $J_I$  pour  $\epsilon_F = -0.089$  à gauche, et en fonction de  $\epsilon_F$  pour  $J_I = 1.071$  à droite. La phase  $G = 1$  est ici facilement discernable, avec un écart-type nul.

### 2.3.1.2 $M_z < 1$

Lorsque l'on fait décroître la polarisation des impuretés ( $M_z < 1$ ), on autorise leur moment magnétique à fluctuer dans le plan  $(x, y)$ , ce qui brise la conservation de l'orientation du spin des porteurs : le hamiltonien ne commute plus avec la composante verticale ( $z$ ) du spin, ce qui se traduit par un couplage entre les spins up et down. La rétrodiffusion et le *spin flipping* induits sur les états de bords font ainsi se rétrécir (Fig. 2.19 et Fig. 2.18) ou disparaître (Fig. 2.17 et Fig. 2.20) la phase isolant topologique. Les diagrammes de phase pour les désordres antiferromagnétique et ferromagnétique faiblement dépolarisés ( $M_z = 0.8$ ) montrent ainsi une zone de conductance  $G = 2$  beaucoup plus petite que dans le cas totalement polarisé. Les simulations moyennées sur différentes configuration de désordre (position des impuretés et orientation des spins) montrent que la phase isolant de Chern est plus robuste dans le cas ferromagnétique : même si sa taille a diminué par rapport au cas  $M_z = 1$ , elle est toujours présente, comme on peut le voir dans la Fig. 2.19 et la Fig. 2.20. Les coupes dans l'espace des phases montrent qu'il n'existe plus de plateau sans fluctuations autour de  $G = 1$  dans la Fig. 2.18, au contraire de la Fig. 2.20. Ces deux figures montrent en revanche qu'il n'existe plus de plateau à  $G = 2$ , ce qui nous montre que les canaux de bords se couplent même avec un désordre très faible.

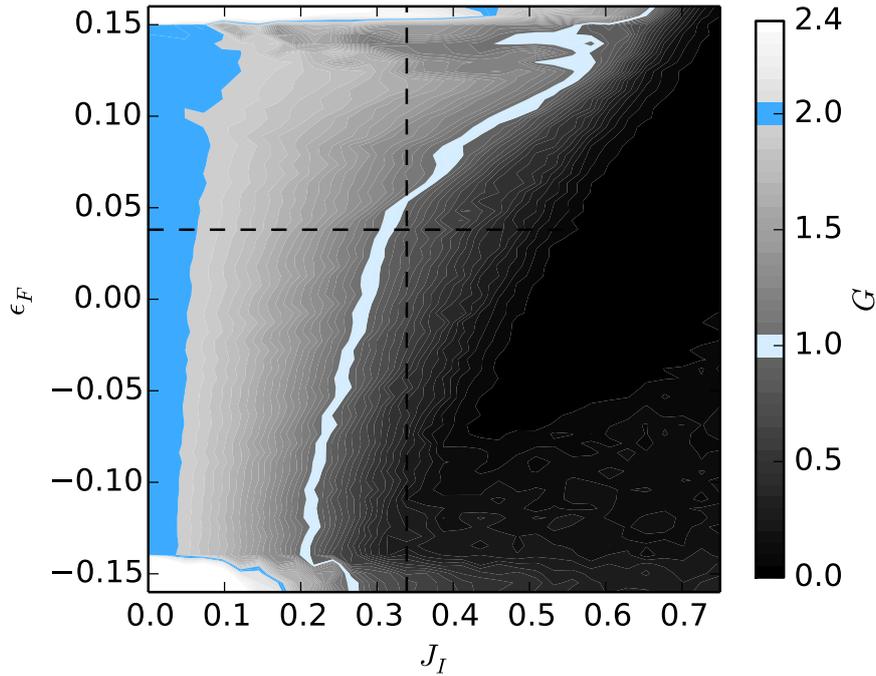


FIGURE 2.17 – Diagramme de conductance pour le cas antiferromagnétique, avec  $M_z = 0.8$  et une concentration d'impuretés  $n_I = 0.4$ . Les droites en pointillés sont des coupes dans l'espace des phases que l'on représente sur la Fig. 2.18. L'îlot de conductance  $G = 1$  visible dans le cas où  $M_z = 1$  a disparu et la taille de la zone où  $G = 2$  s'est fortement réduite. Taille de l'échantillon :  $400 \times 64$  sites.

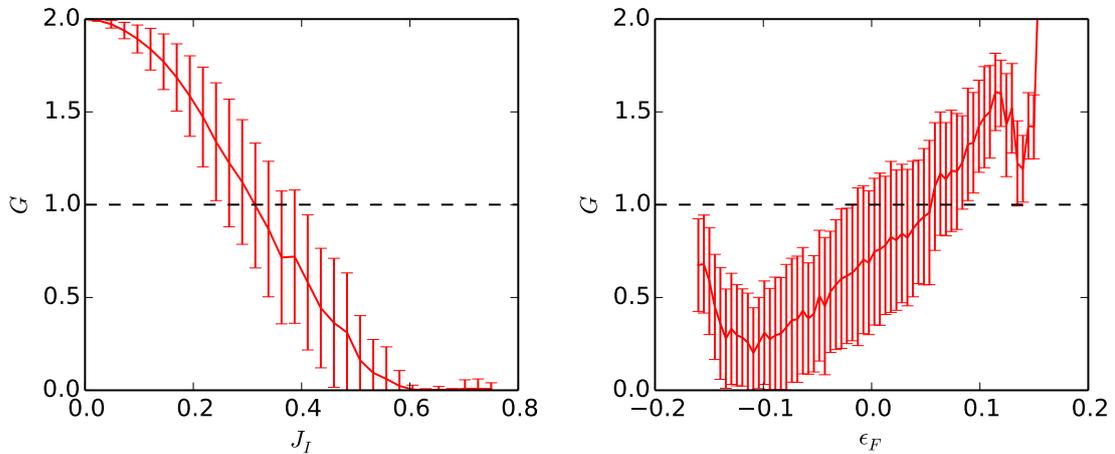


FIGURE 2.18 – On a représenté les coupes en pointillés de la Fig. 2.17 : la conductance  $G$  en fonction de la constante de couplage  $J_I$  pour  $\epsilon_F = 0.038$  à gauche, et en fonction de  $\epsilon_F$  pour  $J_I = 0.339$  à droite. On n'a représenté ici que deux coupes dans le diagramme de conductance, mais en étudiant l'espace des phases complet représenté par la Fig. 2.17 on ne trouve aucune zone où la conductance se stabilise à  $G = 1$  sans fluctuations, et il n'existe aucun plateau à  $G = 2$ .

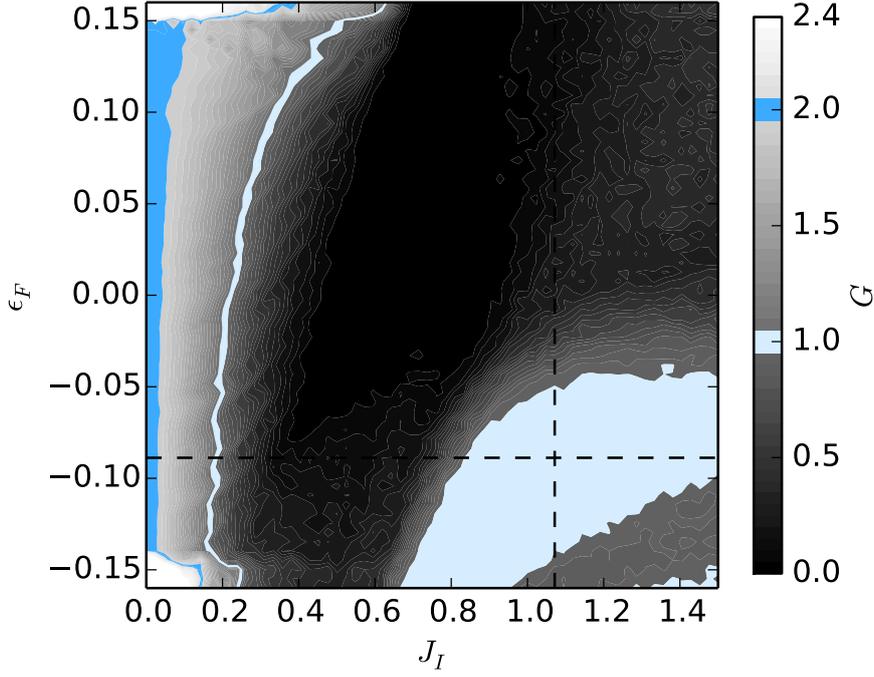


FIGURE 2.19 – Diagramme de conductance pour le cas ferromagnétique, avec  $M_z = 0.8$  et une concentration d'impuretés  $n_I = 0.2$ . Les droites en pointillés sont des coupes dans l'espace des phases que l'on représente sur la Fig. 2.20. L'îlot de conductance  $G = 1$  visible dans le cas où  $M_z = 1$  est toujours présent, bien que moins étendu, et la taille de la zone où  $G = 2$  s'est fortement réduite comme dans le cas antiferromagnétique. Taille de l'échantillon :  $400 \times 64$  sites.

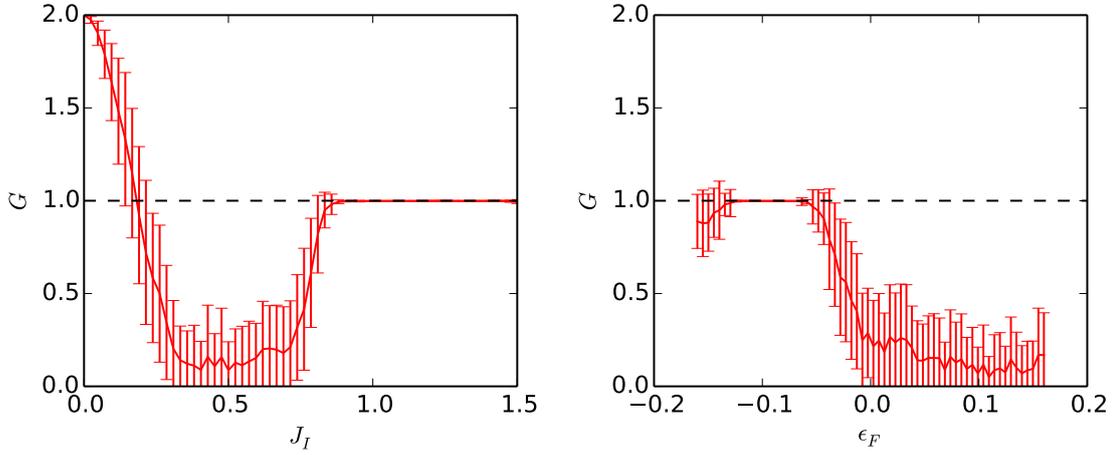


FIGURE 2.20 – On a représenté les coupes en pointillés de la Fig. 2.19 : la conductance  $G$  en fonction de la constante de couplage  $J_I$  pour  $\epsilon_F = -0.089$  à gauche, et en fonction de  $\epsilon_F$  pour  $J_I = 1.071$  à droite. On observe qu'il subsiste une zone de conductance  $G = 1$  sans fluctuations, et il n'existe aucun plateau à  $G = 2$ .

### 2.3.2 Courants locaux et densité locale d'états

Pour comprendre le mécanisme de transition entre les différents régimes de conductance pour une polarisation totale, nous allons tracer les courants locaux (voir annexe B et C) :

$$I_{ij} = -2 \int d\epsilon \operatorname{Re} \left[ t_{ij} G_{ji}^<(\epsilon) \right], \quad (2.99)$$

où  $i$  et  $j$  sont les indices de deux sites voisins. Nous utilisons la méthode présentée dans le papier [104], qui permet d'observer les conséquences sur les courants de charges locaux de la transition entre un isolant et un isolant topologique, induite par un désordre d'Anderson dans un matériau de type HgTe. Nous avons vu à l'Eq. 2.63 et l'Eq. 2.64 que ces courants locaux se calculent dans les directions  $x$  et  $y$  de l'espace par les équations suivantes,

$$\begin{aligned} I_{(x,y)(x+1,y)} &= -2 \int d\epsilon \operatorname{Re} \left[ t_x G_{(x,y)(x+1,y)}^<(\epsilon) \right], \\ I_{(x,y)(x,y+1)} &= -2 \int d\epsilon \operatorname{Re} \left[ t_y G_{(x,y)(x,y+1)}^<(\epsilon) \right]. \end{aligned} \quad (2.100)$$

Nous allons en parallèle nous servir de la densité hors équilibre de spin

$$\Delta n_{x,y\uparrow\downarrow}(\epsilon_F) = \int_{\epsilon_F-V}^{\epsilon_F+V} \frac{d\epsilon}{2\pi i} G_{x,y\uparrow\downarrow}^<(\epsilon), \quad (2.101)$$

où  $V$  est la petite différence de potentiel appliquée entre les deux contacts. Cette équation est une réécriture de l'Eq. 2.83 où l'on somme sur les charges pour n'avoir que l'information de la densité de spin. On définit l'excédent de densité de spin up par

$$d_{\uparrow} = \frac{\Delta n_{\uparrow}}{\Delta n_{\uparrow} + \Delta n_{\downarrow}}, \quad (2.102)$$

qui est une quantité indépendante de la différence de potentiel  $V$  imposée au système lorsque  $V$  est petit.

Les courants locaux et l'excédent de densité de spin up sont représentés à la Fig. 2.21 et Fig. 2.22 respectivement par des flèches et une échelle de gris. Les flèches représentant les courants locaux sont en échelle logarithmique, ceci nous permet de mieux distinguer les canaux de bords (en les élargissant visuellement vers l'intérieur du matériau) et d'atténuer les grosses différences de longueur de flèches lorsqu'il y a de la diffusion sur des impuretés (certains courants locaux peuvent dans ce cas être bien plus intenses en certains points). On applique également un cut-off que l'on choisit arbitrairement pour ne pas tracer les flèches en dessous d'une certaine taille, ce qui nous permet de rendre la figure plus lisible tout en conservant assez d'information sur le transport au sein de l'échantillon désordonné.

La diffusion des porteurs sur les impuretés peut mener à une grande variété de modifications des états de bords, suivant la polarisation du désordre, la valeur de sa constante de couplage et son type (antiferromagnétique ou ferromagnétique). On peut comparer les chemins qu'empruntent les canaux de bords en diffusant sur les impuretés dans diverses cas de conductance ( $G = 2$ ,  $G = 1$  et  $G \ll 1$ ) pour le cas antiferromagnétique à la Fig. 2.21 et pour le cas ferromagnétique à la Fig. 2.22. Les trajets sont qualitativement similaires dans les deux cas en adaptant le jeu de paramètres : pour  $G = 2$  les deux canaux de bords traversent la zone désordonnée, pour  $G = 1$  un des deux canaux correspondant à une espèce de spin donnée (spin up dans les figures) fait demi-tour et ne traverse plus le désordre, et pour  $G \ll 1$  on observe des courants d'orientation aléatoire, avec la disparition des deux canaux de bords. On observe en revanche une grande différence dans la

largeur des états de bords dans la zone désordonnée, en particulier dans la phase isolant topologique ( $G = 2$ ) où les deux canaux de conduction traversent l'échantillon. Dans le cas antiferromagnétique le canal en spin up s'enfonce profondément dans le *bulk*, tandis que le canal en spin down s'affine en étant repoussé contre le bord. Dans la phase isolant de Chern ( $G = 1$ ), le blocage du canal en spin up est bien plus important et visible dans le cas ferromagnétique. En effet, tandis que le canal pénètre assez profondément la région désordonnée avant de faire demi-tour dans le contact dans le cas antiferromagnétique, le cas ferromagnétique montre un canal qui ne pénètre pratiquement pas le désordre : l'interface entre le milieu pur et le milieu contenant des impuretés semble agir comme un bord, contre lequel le canal fait demi-tour. On montre également une phase où la conductance n'est pas quantifiée et proche de zéro, où l'on peut également observer une différence de comportement : les courants locaux au sein du désordre sont plus intenses dans le cas antiferromagnétique, et le cas antiferromagnétique montre des courants plus intenses dans les zones tampons, mais ceux-ci font demi-tour et retournent dans les contacts. Dans les deux cas, le courant traversant l'échantillon tend à s'annuler.

En se concentrant maintenant sur l'excès de densité hors équilibre de spin up  $d_{\uparrow}$ , on peut observer que les deux types de désordre peuvent agir comme un filtre de spin. Une forte diffusion sur le désordre permet aux deux canaux de bords de se connecter, et il en résulte un filtrage total d'une des deux composantes de spin (spin up dans nos figures). On observe ainsi une accumulation du spin opposé (spin down dans nos figures) du côté du contact de drainage (du côté où le potentiel est le plus faible, c'est à dire du côté droit sur nos simulations :  $V_L > V_R$ ). Ce filtrage se produit pour  $G = 1$  dans le cas ferromagnétique, et pour  $G < 1$  pour le cas antiferromagnétique.

Nous supputons suite à ces observations que le mécanisme menant à l'effet Hall quantique anomal est différent dans les deux cas de désordre. Pour le désordre antiferromagnétique il s'agit de la conséquence de l'ouverture d'un gap dans la structure de bande d'une espèce de spin pour les états de bords, tandis que pour le désordre ferromagnétique il s'agit plutôt de l'apparition d'un gap de mobilité pour une des deux espèces de spin menant à la localisation des états, associée à une inversion de bandes. Nous allons mettre en évidence l'apparition d'états localisés grâce à la densité locale d'états :

$$\rho_{\uparrow\downarrow}(i, \epsilon) = \sum_n \langle n | c_{\uparrow\downarrow}(i) c_{\uparrow\downarrow}^\dagger(i) | n \rangle \delta(\epsilon - \epsilon_n), \quad (2.103)$$

où  $i$  est l'indice de site et les  $|n\rangle$  sont les états propres associés aux valeurs propres  $\epsilon_n$ . Il est possible d'évaluer la densité locale d'états en utilisant la fonction de Green retardée comme on l'a montré à l'Eq. 2.76 :

$$\rho_{x,y\uparrow\downarrow}(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} G_{x,y\uparrow\downarrow}^r(\epsilon). \quad (2.104)$$

On a tracé les densités locales d'états correspondantes aux figures de courants locaux à la Fig. 2.23 (antiferromagnétique) et Fig. 2.24 (ferromagnétique) en échelle logarithmique. Les paramètres utilisés sont les mêmes que pour les courants locaux, à la différence près que nous n'appliquons plus de différence de potentiel car nous étudions ici la densité locale d'états (à l'équilibre donc). Chaque panneau correspondant à un jeu de paramètres dans un cas de désordre précis comporte la densité locale d'états en spin up  $\rho_{\uparrow}$  (panneaux du haut) et en spin down  $\rho_{\downarrow}$  (panneaux du bas). On a ainsi tracé les densités locales d'états pour les trois différents régimes de conductance dans les deux cas de désordre :  $G = 2$  pour les panneaux du haut,  $G = 1$  pour les panneaux du milieu, et  $G \ll 1$  pour les panneaux du bas. Les canaux de conduction sont bien visibles dans chaque cas : lorsque  $G = 2$  les deux canaux de bords pour chaque spin sont visibles (les états de bords vont

d'un bout à l'autre de l'échantillon) et lorsque  $G = 1$  seule une des deux espèces de spin possède des canaux de bords traversant l'échantillon. On observe avec ces figures ce que l'on pouvait supposer avec l'étude de l'excédent de densité de spin up hors équilibre, le mécanisme menant à l'effet Hall quantique anomal dans les deux cas de désordre est différent (sous figures du lieu dans les Fig. 2.23 et Fig. 2.24). Le cas antiferromagnétique montre la présence d'états d'énergie toujours disponibles pour les deux espèces de spin. Dans le cas ferromagnétique on observe en revanche l'absence totale d'états disponibles en spin up à l'intérieur de la zone contenant du désordre. L'effet Hall quantique anomal pour le couplage ferromagnétique est ainsi lié à des propriétés de localisation sélective en spin de la fonction d'onde, et donc à un gap de mobilité plutôt qu'à un gap de *bulk*. Pour le couplage antiferromagnétique on observe l'apparition de localisation à des couplages plus importants (sous figure du bas dans la Fig. 2.23).

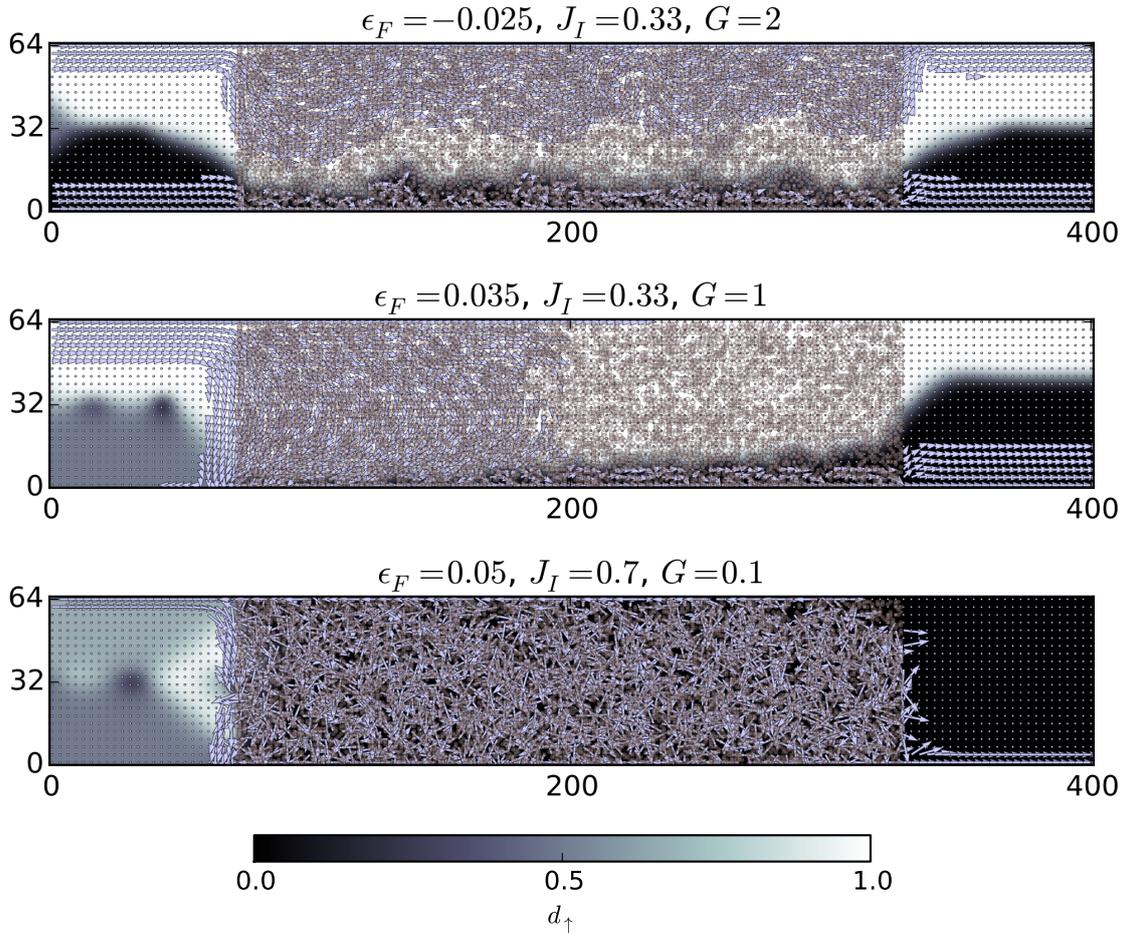


FIGURE 2.21 – Courants locaux dans le cas antiferromagnétique montrant trois différents cas de conductance :  $G = 2$  en haut,  $G = 1$  au milieu,  $G \ll 1$  en bas. La figure du milieu correspondant à la phase isolant de Chern montre qu'un canal de bord persiste (celui du bas), correspondant au spin down. L'échelle de gris en fond représente l'excès de densité hors équilibre de spin up  $d_\uparrow$ . Le blanc correspond à une polarisation up complète, tandis que le noir correspond à une densité down complète. Taille de l'échantillon :  $400 \times 64$  sites. On a affiché une donnée sur trois pour plus de lisibilité.

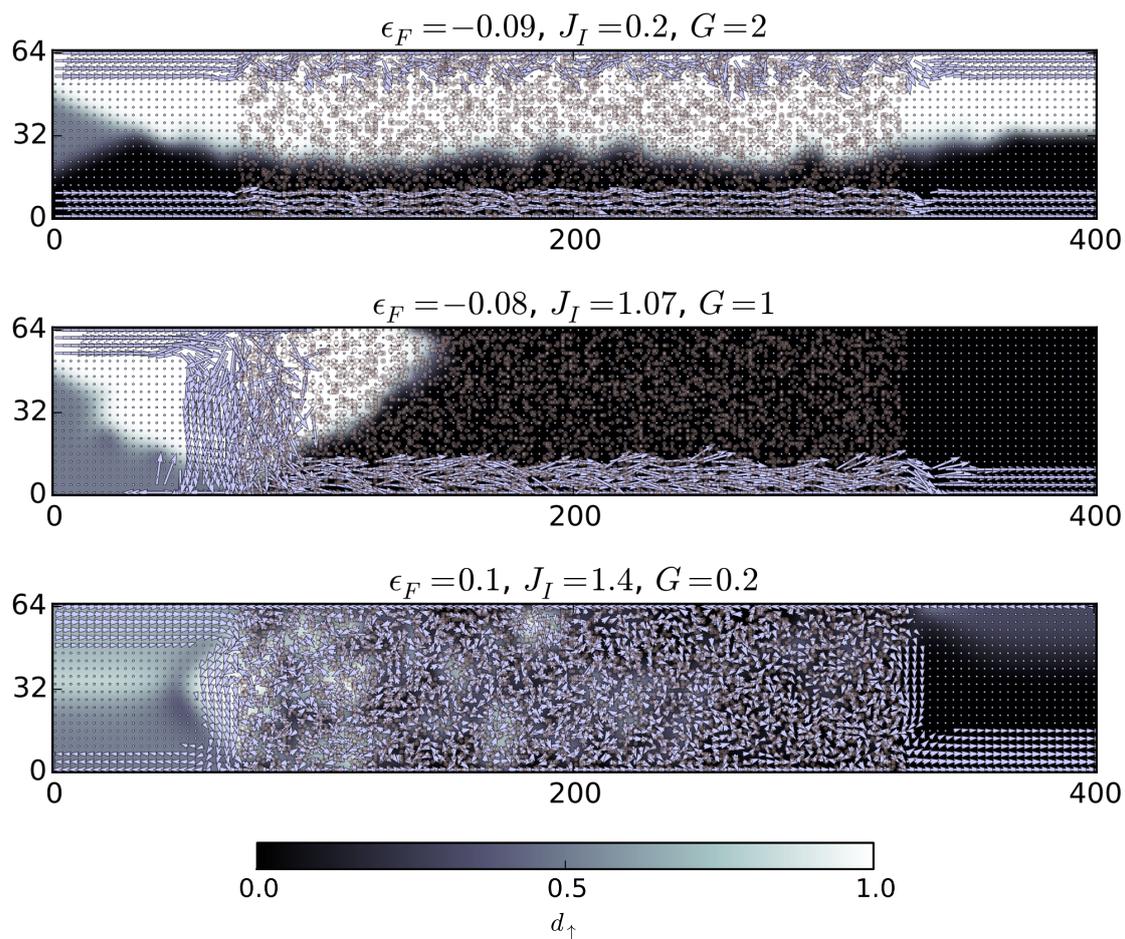


FIGURE 2.22 – Courants locaux dans le cas ferromagnétique montrant trois différents cas de conductance :  $G = 2$  en haut,  $G = 1$  au milieu,  $G \ll 1$  en bas. Ces trois cas sont qualitativement similaires à ce que l'on peut observer à la Fig. 2.21, et on montre de même l'excès de densité hors équilibre de spin up  $d_{\uparrow}$  en échelle de gris. Taille de l'échantillon :  $400 \times 64$  sites. On a affiché une donnée sur trois pour plus de lisibilité.

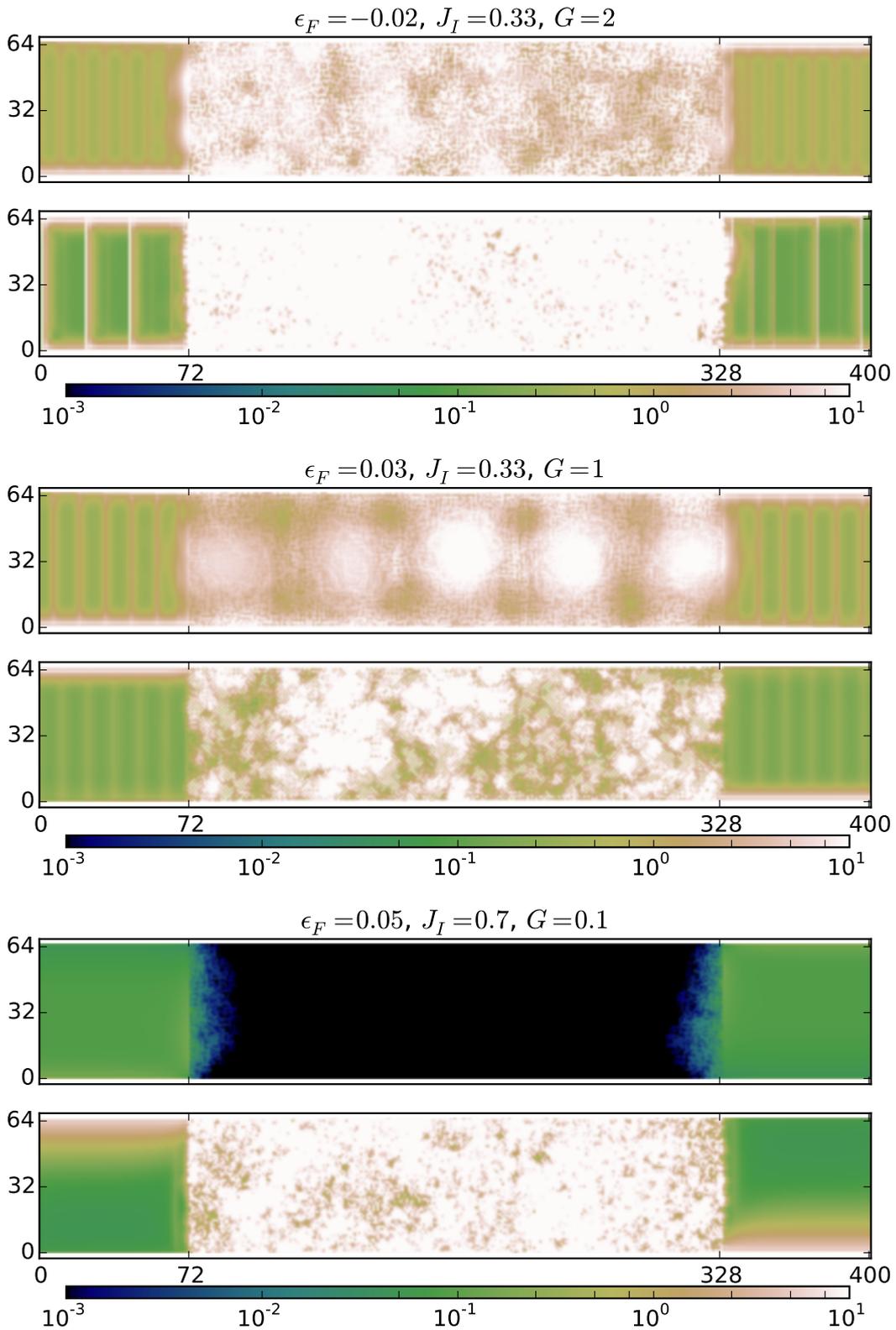


FIGURE 2.23 – Densités locales d'états pour le cas antiferromagnétique, associées à la Fig. 2.21. Les deux composantes de spin sont représentées pour les différentes conductances ( $G = 2$  en haut,  $G = 1$  au milieu,  $G \ll 1$  en bas), les densités de spin up et down étant représentées respectivement en haut et en bas de chaque sous figure. Taille de l'échantillon :  $400 \times 64$  sites.

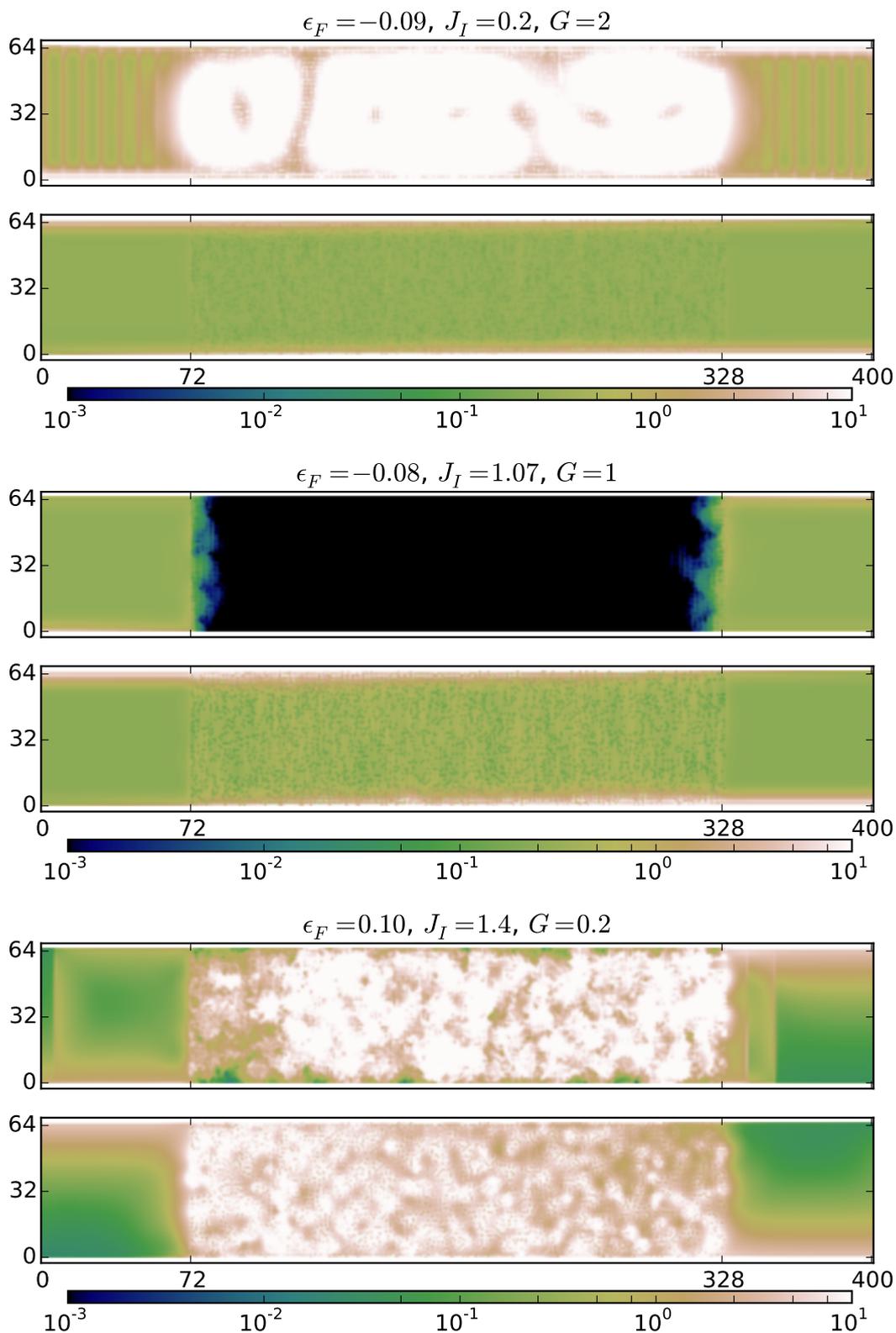


FIGURE 2.24 – Densités locales d'états pour le cas ferromagnétique, associées à la Fig. 2.22. Les deux composantes de spin sont représentées pour les différentes conductances ( $G = 2$  en haut,  $G = 1$  au milieu,  $G \ll 1$  en bas), les densités de spin up et down étant représentées respectivement en haut et en bas de chaque sous figure. Taille de l'échantillon :  $400 \times 64$  sites.

## 2.4 Discussion : l'approximation de Born

Dans cette section nous allons aborder la renormalisation de l'énergie de Fermi et de la masse topologique en fonction de l'intensité du désordre (concentration, polarisation et constante de couplage) par le calcul de l'approximation de Born. Le comportement de ces deux quantités nous permettra de mieux comprendre l'effet du désordre magnétique sur la structure de bandes du matériau et donc ses propriétés de transport. Cette approche a permis de montrer qu'un désordre d'Anderson dans un isolant de type HgTe pouvait induire une transition vers un isolant topologique [105, 91, 90], nous allons donc observer de la même manière les transitions entre isolant topologique et isolant, en fonction du spin.

### 2.4.1 Perturbation en champ moyen

Nous allons reprendre le hamiltonien basse énergie Eq. 2.29 et y ajouter le désordre Eq. 2.42. On écrit donc le hamiltonien

$$H = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} [H(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} c_{\mathbf{q}}^{\dagger} V_{I\alpha}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \quad (2.105)$$

où l'on a ajouté le potentiel chimique  $\mu$ . On rappelle l'expression du désordre exprimé en espace des  $\mathbf{k}$ ,

$$V_{I\alpha}(\mathbf{k}) = J_I \sum_{i \in I} (\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_{\alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}. \quad (2.106)$$

La diagonale de  $H(\mathbf{k})$  est donnée par les deux secteurs de spin,

$$\begin{aligned} h_{\uparrow}(\mathbf{k}) &= (m - Bk^2)\tau_z - Dk^2\tau_0 + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}, \\ h_{\downarrow}(\mathbf{k}) &= (m - Bk^2)\tau_z - Dk^2\tau_0 - \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}^*, \end{aligned} \quad (2.107)$$

où  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ .

Pour obtenir la renormalisation de la masse topologique  $m$  et du potentiel chimique  $\mu$  nous allons devoir calculer la self-énergie du désordre  $\Sigma_{\alpha}(\epsilon)$ . En effet, comme nous le verrons,  $m$  et  $\mu$  s'obtiennent grâce à la partie réelle de  $\Sigma_{\alpha}(\epsilon)$ . Nous verrons également que la renormalisation de  $m$  et de  $\mu$  est dépendante du spin du fait de la levée de dégénérescence induite par le désordre magnétique.  $\Sigma_{\alpha}(\epsilon)$  sera calculée à l'aide de l'approximation de Born au second ordre en champ moyen que nous décrivons dans l'annexe D. On écrit la fonction de Green contenant la valeur moyenne du potentiel aléatoire  $\langle V_{I\alpha} \rangle$  dont nous avons donné l'expression à l'Eq. (2.93) :

$$G_{\alpha}(\epsilon, \mathbf{k}) = [\epsilon + \mu - H(\mathbf{k}) - \langle V_{I\alpha} \rangle]^{-1}, \quad (2.108)$$

où  $\epsilon$  contient une petite partie complexe  $i\eta$  que nous n'écrivons pas pour simplifier les notations. Nous définissons des potentiels chimiques  $\mu_{\uparrow\downarrow}$  et des masses topologiques  $m_{\uparrow\downarrow}$  dépendants du spin afin d'en étudier la renormalisation dans chaque secteur de spin. Dans le cas antiferromagnétique, on écrit

$$\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = \mu, \quad m_{\uparrow} = m + v, \quad m_{\downarrow} = m - v, \quad (2.109)$$

avec  $v = J_I n_I M_z$ , et dans le cas ferromagnétique

$$\mu_{\uparrow} = \mu - v, \quad \mu_{\downarrow} = \mu + v, \quad m_{\uparrow} = m_{\downarrow} = m. \quad (2.110)$$

On remarque que le bruit  $v$  s'injecte respectivement dans le terme de masse et le potentiel chimique pour le cas antiferromagnétique et pour le cas ferromagnétique. La fonction de Green en champ moyen peut être écrite sous la forme d'une matrice diagonale par blocs,

$$G_\alpha(\epsilon, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} G_\uparrow(\epsilon, \mathbf{k}) & 0 \\ 0 & G_\downarrow(\epsilon, \mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.111)$$

avec

$$\begin{aligned} G_\uparrow(\epsilon, \mathbf{k}) &= \frac{1}{\Delta_\uparrow} \left[ (\epsilon + \mu_\uparrow + Dk^2)\tau_0 + (m_\uparrow - Bk^2)\tau_z + \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau} \right], \\ G_\downarrow(\epsilon, \mathbf{k}) &= \frac{1}{\Delta_\downarrow} \left[ (\epsilon + \mu_\downarrow + Dk^2)\tau_0 + (m_\downarrow - Bk^2)\tau_z - \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}^* \right]. \end{aligned} \quad (2.112)$$

Les  $\Delta_{\uparrow\downarrow}$  sont les déterminants des matrices  $\epsilon + \mu_{\uparrow\downarrow} - h_{\uparrow\downarrow}(m_{\uparrow\downarrow})$  et

$$\Delta_{\uparrow\downarrow}(\epsilon, k) = (\epsilon + \mu_{\uparrow\downarrow} - k^2)^2 - (m_{\uparrow\downarrow} - Bk^2)^2 - k^2. \quad (2.113)$$

La fonction de Green moyennée sur le désordre peut s'écrire avec la self-énergie  $\Sigma_\alpha(\epsilon)$

$$\langle G_\alpha(\epsilon, \mathbf{k}) \rangle = \langle (\epsilon - H - V_{I\alpha})^{-1} \rangle = [G^{-1}(\epsilon, \mathbf{k}) - \Sigma_\alpha(\epsilon)]^{-1}. \quad (2.114)$$

Au second ordre, la self-énergie s'écrit

$$\Sigma_\alpha(\epsilon) = \sum_{\mathbf{q}} \langle \Delta V_{I\alpha}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) G(\epsilon, \mathbf{q}) \Delta V_{I\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \rangle, \quad (2.115)$$

où  $\Delta V_{I\alpha}(\mathbf{k}) = V_{I\alpha}(\mathbf{k}) - \langle V_{I\alpha}(\mathbf{k}) \rangle$  représente les fluctuations du désordre autour de son champ moyen.

Nous allons maintenant effectuer les multiplications matricielles et calculer les moyennes. On donne  $\Delta V_{I\alpha}(\mathbf{k})$  :

$$\Delta V_{I\alpha}(\mathbf{k}) = J_I \sum_{i \in I} (\mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} - J_I n_I M_z \sigma_z \otimes \tau_\alpha \delta(\mathbf{k}). \quad (2.116)$$

On a imposé  $\langle \Delta V_{I\alpha}(\mathbf{k}) \rangle = 0$ , ce qui simplifie le calcul de  $\Sigma_\alpha$ . En effet, dans l'expression

$$\langle \Delta V_{I\alpha} G \Delta V_{I\alpha} \rangle = \langle \langle \Delta V_{I\alpha}(\mathbf{n}_i, i) G \Delta V_{I\alpha}(\mathbf{n}_j, j) \rangle_{\mathbf{n}_i, \mathbf{n}_j} \rangle_{i, j}, \quad (2.117)$$

les contributions où  $i \neq j$  sont nulles. On se limite donc au calcul de

$$\langle \Delta V_{I\alpha} G \Delta V_{I\alpha} \rangle = \langle \langle \Delta V_{I\alpha}(\mathbf{n}) G \Delta V_{I\alpha}(\mathbf{n}) \rangle_{\mathbf{n}} \rangle_i, \quad (2.118)$$

soit

$$\begin{aligned} \Sigma_\alpha(\epsilon) &= \sum_{\mathbf{q}} J_I^2 \left[ \langle (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha G(\epsilon, \mathbf{q}) (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \rangle_{\mathbf{n}} \frac{1}{N} \left\langle \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_i + i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_i} \right\rangle \right. \\ &\quad - n_I M_z \langle (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \rangle_{\mathbf{n}} G(\epsilon, \mathbf{q}) \sigma_z \otimes \tau_\alpha \frac{1}{N} \left\langle \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_i} \right\rangle \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \\ &\quad - n_I M_z \sigma_z \otimes \tau_\alpha G(\epsilon, \mathbf{q}) \langle (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \rangle_{\mathbf{n}} \frac{1}{N} \left\langle \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_i} \right\rangle \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \\ &\quad \left. + n_I^2 M_z^2 \sigma_z \otimes \tau_\alpha G(\epsilon, \mathbf{q}) \sigma_z \otimes \tau_\alpha \right]. \end{aligned} \quad (2.119)$$

On a  $\langle \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_i + i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_i} \rangle = N_I$  et  $\langle \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_i} \rangle = N_I \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k})$ , donc on obtient finalement

$$\Sigma_\alpha(\epsilon) = \sum_{\mathbf{q}} J_I^2 \left[ \langle (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha G(\epsilon, \mathbf{q}) (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \otimes \tau_\alpha \rangle_{\mathbf{n}} - n_I^2 M_z^2 \sigma_z \otimes \tau_\alpha G(\epsilon, \mathbf{q}) \sigma_z \otimes \tau_\alpha \right]. \quad (2.120)$$

Nous allons par la suite nous placer dans la limite continue pour transformer la somme sur les  $\mathbf{q}$  en intégrale. Lorsque l'on calcule la moyenne sur le désordre et que l'on intègre sur l'angle polaire du vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ , tous les termes en dehors de la diagonale s'annulent. On peut donc écrire la self-énergie en termes d'une intégrale sur le module de  $\mathbf{q}$

$$\Sigma_\alpha(\epsilon) = J_I^2 n_I \int_0^{k_*} \frac{q dq}{2\pi} [v_z G_z(\epsilon, q) + v_\perp G_\perp(\epsilon, q)], \quad (2.121)$$

où l'on a introduit un cutoff de réseau  $k_* = \pi$  correspondant au bord de la zone de Brillouin. On définit les matrices diagonales  $G_z$  et  $G_\perp$ ,

$$G_z(\epsilon, k) = \text{diag} \left[ \frac{(\epsilon + \mu_\uparrow + Dk^2)}{\Delta_\uparrow} \tau_0 + \frac{(m_\uparrow - Bk^2)}{\Delta_\uparrow} \tau_z, \frac{(\epsilon + \mu_\downarrow + Dk^2)}{\Delta_\downarrow} \tau_0 + \frac{(m_\downarrow - Bk^2)}{\Delta_\downarrow} \tau_z \right], \quad (2.122)$$

et

$$G_\perp = \sigma_0 \otimes \tau_x G_z \sigma_0 \otimes \tau_x, \quad (2.123)$$

qui est la matrice  $G_z$  avec les secteurs de spin échangés. On écrit les facteurs  $v_z$  et  $v_\perp$ ,

$$\begin{aligned} v_z &= \langle n_z^2 \rangle - n_I^2 M_z^2 = (1 - n_I^2) M_z^2 + \frac{1}{3} (1 - M_z)^2, \\ v_\perp &= 1 - \langle n_z^2 \rangle = \frac{2}{3} (1 - M_z) (1 + 2M_z). \end{aligned} \quad (2.124)$$

$v_\perp G_\perp$  est le terme de fluctuation de polarisation des impuretés. En effet, il s'annule lorsque  $M_z = 1$  et seul le terme  $v_z G_z$  reste. Similairement au calcul de renormalisation pour le désordre d'Anderson [105, 90], l'intégrale sur  $q$  Eq. 2.121 est logarithmiquement divergente. Cette intégrale se décompose en une partie réelle et une partie imaginaire  $\Sigma = -i/2\tau + \text{Re}\Sigma$ , où  $\tau$  est le temps de libre parcours moyen. On calcule d'abord la partie imaginaire et on retrouve la partie réelle grâce aux relations de Kramers-Kronig

$$\text{Re}\Sigma(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int d\epsilon' \frac{\text{Im}\Sigma(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'}, \quad (2.125)$$

où  $\mathcal{P}$  est la valeur principale de Cauchy. Au voisinage de l'énergie de Fermi, les deux secteurs de spin de la partie réelle de  $\Sigma_\alpha$  sont donnés par

$$\text{Re}\Sigma_{\uparrow\downarrow} = \frac{J_I^2 n_I}{8\pi} \frac{B\tau_z - D\tau_0}{B^2 - D^2} \left[ v_z \ln \left| \frac{(B^2 - D^2)k_*^4}{\Delta_{\uparrow\downarrow}(\epsilon_F, 0)} \right| + v_\perp \ln \left| \frac{(B^2 - D^2)k_*^4}{\Delta_{\downarrow\uparrow}(\epsilon_F, 0)} \right| \right]. \quad (2.126)$$

On note que le type de désordre  $\alpha$  est contenu dans le déterminant  $\Delta_{\uparrow\downarrow}$  à travers les paramètres  $m_{\uparrow\downarrow}$  et  $\mu_{\uparrow\downarrow}$ . Cette expression comprend deux termes, l'un en  $\tau_0$  qui renormalise le potentiel chimique  $\mu$ , et l'autre en  $\tau_z$  qui renormalise la masse topologique  $m$ . Les fluctuations longitudinales et transverses (respectivement  $v_z$  et  $v_\perp$ ) introduisent une correction du gap et des niveaux d'énergie dépendamment du spin. Le terme de fluctuations transverses  $v_\perp$  couple les deux spins, ce qui est rendu possible par la diffusion contre des impuretés n'étant pas totalement polarisées suivant  $z$ , en faisant tourner le spin des porteurs.

Nous avons vu dans la section 2.1.1.2 comment calculer les longueurs caractéristiques de pénétration des états de bord et que la condition de leur existence était que  $m/B > 0$ . La renormalisation des paramètres est donnée par

$$m_{\uparrow\downarrow} = m + \text{Re}\Sigma_{\uparrow\downarrow z}, \quad \mu_{\uparrow\downarrow} = \epsilon_F - \text{Re}\Sigma_{\uparrow\downarrow 0}, \quad (2.127)$$

où  $\Sigma_{\uparrow\downarrow z}$  et  $\Sigma_{\uparrow\downarrow 0}$  sont la partie en spin up ou down de la self-énergie projetée sur  $\sigma_z$  et  $\sigma_0$ . Nous pouvons dès lors donner les conditions d'existence des états de bords avec les paramètres renormalisés

$$\frac{m_{\uparrow\downarrow}}{B} = \frac{m \pm v}{B} + \frac{J_I^2 n_I}{8\pi(B^2 - D^2)} \left[ v_z \ln \left| \frac{(B^2 - D^2)k_*^4}{\epsilon_F^2 - (m \pm v)^2} \right| + v_{\perp} \ln \left| \frac{(B^2 - D^2)k_*^4}{\epsilon_F^2 - (m \mp v)^2} \right| \right] > 0 \quad (2.128)$$

pour le cas antiferromagnétique, et

$$\frac{m_{\uparrow\downarrow}}{B} = \frac{m}{B} + \frac{J_I^2 n_I}{8\pi(B^2 - D^2)} \left[ v_z \ln \left| \frac{(B^2 - D^2)k_*^4}{(\epsilon_F \mp v)^2 - m^2} \right| + v_{\perp} \ln \left| \frac{(B^2 - D^2)k_*^4}{(\epsilon_F \pm v)^2 - m^2} \right| \right] > 0, \quad (2.129)$$

pour le cas ferromagnétique. Dans le cas antiferromagnétique, la longueur de pénétration de l'état de bord en spin up augmente, ce qui a pour effet de faire entrer les canaux de conduction correspondants dans le bulk. Parallèlement, la longueur de pénétration de l'état de bord en spin down diminue, ce qui a pour effet de localiser l'état un peu plus vers le bord. On peut utiliser le paramètre  $m_{\uparrow}$  pour tracer qualitativement à la Fig. 2.25 l'effet du désordre sur la pénétration de l'état de bord en spin up dans le bulk. Dans le cas ferromagnétique le potentiel chimique subit un décalage dont le sens dépend du spin, et les longueurs caractéristiques tendent à décroître pour les deux secteurs.

On note que l'Eq. 2.126 peut mener à un changement de signe de la masse topologique renormalisée pour un désordre suffisamment fort ( $v \gg B$ ), mais ceci se produit en dehors du domaine de validité de la théorie des perturbations. Ceci nous amène à penser que les transitions observées sur les diagrammes de phase sont liées à un effet non trivial des fluctuations, comme pour la transition décrite dans les papiers [105, 90], où le désordre d'Anderson entraîne une transition entre un isolant et un isolant topologique.

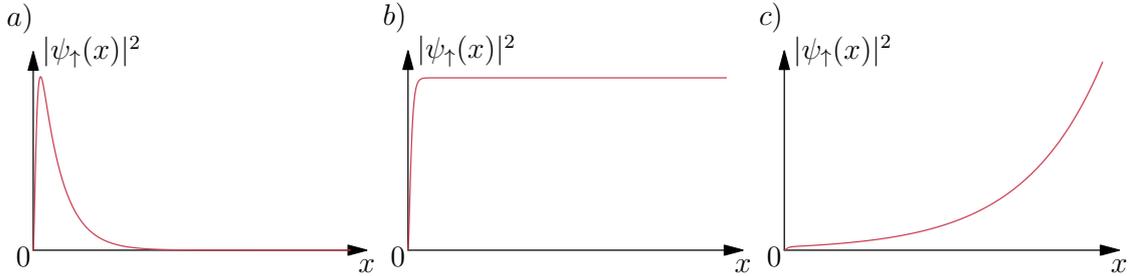


FIGURE 2.25 – Représentation d'une coupe en  $x$  de l'état de bord en spin up pour différentes valeurs de désordre antiferromagnétique totalement polarisé ( $M_z = 1$ ) : (a) avec  $0 < J_I n_I < -m$ , (b) avec  $J_I n_I = -m$  et (c) avec  $J_I n_I > -m$ . À la figure (b) l'état de bord est détruit et pénètre totalement le matériau. Ces figures sont qualitatives, elles sont tracées pour des valeurs de désordre en dehors du domaine de validité de la théorie des perturbations.

## 2.4.2 Auto-cohérence

### 2.4.2.1 $M_z = 1$

Même en prenant en compte la séparation des états induites par le champ moyen, on ne peut étendre l'approximation perturbative à un désordre fini. On a de plus négligé des termes non dominants dans le calcul de l'intégrale Eq. 2.121 qui possèdent des propriétés de symétrie différentes des termes que l'on a conservé et qui peuvent contribuer de façon

significative à désordre fini. Il existe une façon de resommer tous les diagrammes de Feynman non croisés en calculant la self-énergie dans l'approximation auto-cohérente, par le remplacement de  $G(\epsilon, \mathbf{q})$  par la fonction de Green complète et moyennée dans l'Eq. 2.114, afin d'obtenir une renormalisation des paramètres valide à des valeurs de désordre plus grandes. Une description plus complète de l'approximation de Born auto-cohérente au second ordre se situe dans l'annexe D.

On écrit  $\bar{m}_{\uparrow\downarrow}$  et  $\bar{\mu}_{\uparrow\downarrow}$  les paramètres renormalisés que nous allons calculer de façon auto-cohérente. La résolution numérique de  $\Sigma$  s'écrit :

$$\text{Re}\Sigma = -\text{diag}[(\bar{m}_{\uparrow} - m_{\uparrow})\tau_z + (\bar{\mu}_{\uparrow} - \mu_{\uparrow})\tau_0, (\bar{m}_{\downarrow} - m_{\downarrow})\tau_z - (\bar{\mu}_{\downarrow} - \mu_{\downarrow})\tau_0], \quad (2.130)$$

soit

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_{\uparrow} &= \mu_{\uparrow} - \frac{J_I^2 n_I}{N^2} \sum_{k_x, k_y} \left[ \frac{v_z}{\Delta_{\uparrow}} (\epsilon_F + \bar{\mu}_{\uparrow} + D_k) + \frac{v_{\perp}}{\Delta_{\downarrow}} (\epsilon_F + \bar{\mu}_{\downarrow} + D_k) \right], \\ \bar{\mu}_{\downarrow} &= \mu_{\downarrow} - \frac{J_I^2 n_I}{N^2} \sum_{k_x, k_y} \left[ \frac{v_z}{\Delta_{\downarrow}} (\epsilon_F + \bar{\mu}_{\downarrow} + D_k) + \frac{v_{\perp}}{\Delta_{\uparrow}} (\epsilon_F + \bar{\mu}_{\uparrow} + D_k) \right], \end{aligned} \quad (2.131)$$

et

$$\begin{aligned} \bar{m}_{\uparrow} &= \mu_{\uparrow} - \frac{J_I^2 n_I}{N^2} \sum_{k_x, k_y} \left[ \frac{v_z}{\Delta_{\uparrow}} (\bar{m}_{\uparrow} - B_k) + \frac{v_{\perp}}{\Delta_{\downarrow}} (\bar{m}_{\downarrow} - B_k) \right], \\ \bar{m}_{\downarrow} &= m_{\downarrow} - \frac{J_I^2 n_I}{N^2} \sum_{k_x, k_y} \left[ \frac{v_z}{\Delta_{\downarrow}} (\bar{m}_{\downarrow} - B_k) + \frac{v_{\perp}}{\Delta_{\uparrow}} (\bar{m}_{\uparrow} - B_k) \right], \end{aligned} \quad (2.132)$$

où  $B_k = B(4 - 2 \cos k_x - 2 \cos k_y)$ ,  $D_k = D(4 - 2 \cos k_x - 2 \cos k_y)$  et  $\Delta_{\uparrow\downarrow} = (\epsilon_F + \bar{\mu}_{\uparrow\downarrow} - D_k)^2 - (\bar{m}_{\uparrow\downarrow} - B_k)^2 - \sin^2 k_x - \sin^2 k_y$ . Ici encore nous pouvons voir que les fluctuations de magnétisation dans le plan  $(x, y)$  introduisent un couplage entre les paramètres décrivant les secteurs de spin up et de spin down qui s'annule lorsque la polarisation est totale ( $v_{\perp} = 0$ ).

À la Fig. 2.26 nous représentons les bords de gap  $\mu_{\uparrow\downarrow} = \pm m_{\uparrow\downarrow}$  de la structure de bande des électrons ( $E \uparrow, E \downarrow$ ) et des trous ( $H \uparrow, H \downarrow$ ), pour le cas antiferromagnétique (en haut) et le cas ferromagnétique (en bas), ainsi que le seuil d'inversion de bandes pour le spin up ( $m_{\uparrow} = 0$ ) et down ( $m_{\downarrow} = 0$ ) et le potentiel chimique dépendant du spin ( $\mu_{\uparrow}, \mu_{\downarrow}$ ).

Dans le cas antiferromagnétique, le croisement entre  $H \uparrow$  et  $E \uparrow$  qui coïncide avec le seuil  $m_{\uparrow} = 0$  signale l'ouverture d'un gap, et la restauration d'un état topologiquement trivial des bandes en spin up. La phase  $G = 2$  devrait se trouver à gauche de la ligne verticale correspondant à  $m_{\uparrow} = 0$ , tandis que la phase  $G = 1$  devrait se trouver à droite (comme on l'a représentée dans le quadrilatère bleu, autour de la ligne de potentiel chimique  $\mu_{\downarrow}$ ).

Dans le cas ferromagnétique, nous pouvons observer un fait remarquable : les bords de gap  $E \uparrow$  et  $E \downarrow$  se courbent tous deux vers les énergies positives. Ceci amène la possibilité pour les bords de gap correspondant aux électrons et aux trous de se croiser pour les deux espèces de spin. La courbe  $m_{\uparrow} = 0$  coupe les courbes  $E \uparrow$  et  $H \uparrow$  en leur croisement, et une région où  $G = 1$  peut apparaître du côté où le désordre est le plus fort. Cette région est délimitée par le croisement des bords de gap pour le spin down et la courbe  $m_{\downarrow} = 0$ .

Ces résultats nous suggèrent que, bien que les mécanismes menant à une transition de phase soient différents, la structure de bande effective menant à l'effet Hall quantique anomal est qualitativement la même pour les deux types de couplage ( $\alpha = 0, z$ , soit un désordre ferromagnétique et antiferromagnétique). Nous avons superposé les résultats obtenus précédemment à la Sect. 2.3.1.1 et les résultats de l'approximation de Born auto-cohérente au second ordre dans la Fig. 2.27. Nous pouvons constater une correspondance qualitative entre les résultats : les phases  $G = 2$  sont assez bien délimitées par les bords de

gap, et les phases  $G = 1$  apparaissent majoritairement à droite des courbes  $m_{\uparrow} = 0$ . Nous pouvons supposer que ces résultats se superposeraient de façon plus précise en utilisant une approximation de Born d'ordre supérieur, prenant en compte d'autres diagrammes de Feynman que nous avons négligé.

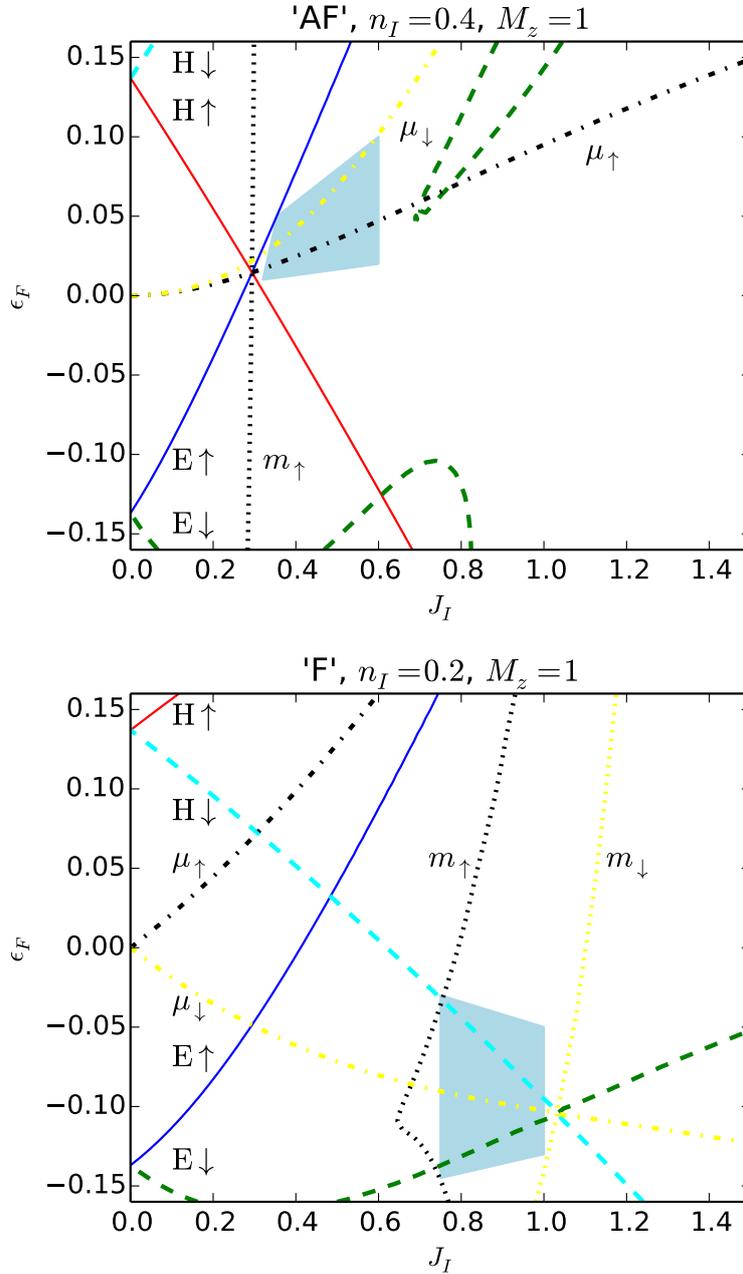


FIGURE 2.26 – Diagrammes de phase calculés à partir de l'approximation de Born auto-cohérente au second ordre. Nous présentons les désordres antiferromagnétique (en haut) et ferromagnétique (en bas) avec une polarisation totale ( $M_z = 1$ ). Les quadrilatères bleus sont une représentation qualitative des régions où apparaissent les phases  $G = 1$ . Les lignes continues (rouge et bleu) donnent l'évolution des bords de gap pour le spin up et les lignes interrompues (cyan et vert) sont pour le spin down. Les pointillés donnent le changement de signe des masses topologiques renormalisées  $m_{\uparrow, \downarrow}$ , et les traits mixtes donnent l'évolution des potentiels chimiques renormalisées  $\mu_{\uparrow, \downarrow}$ .

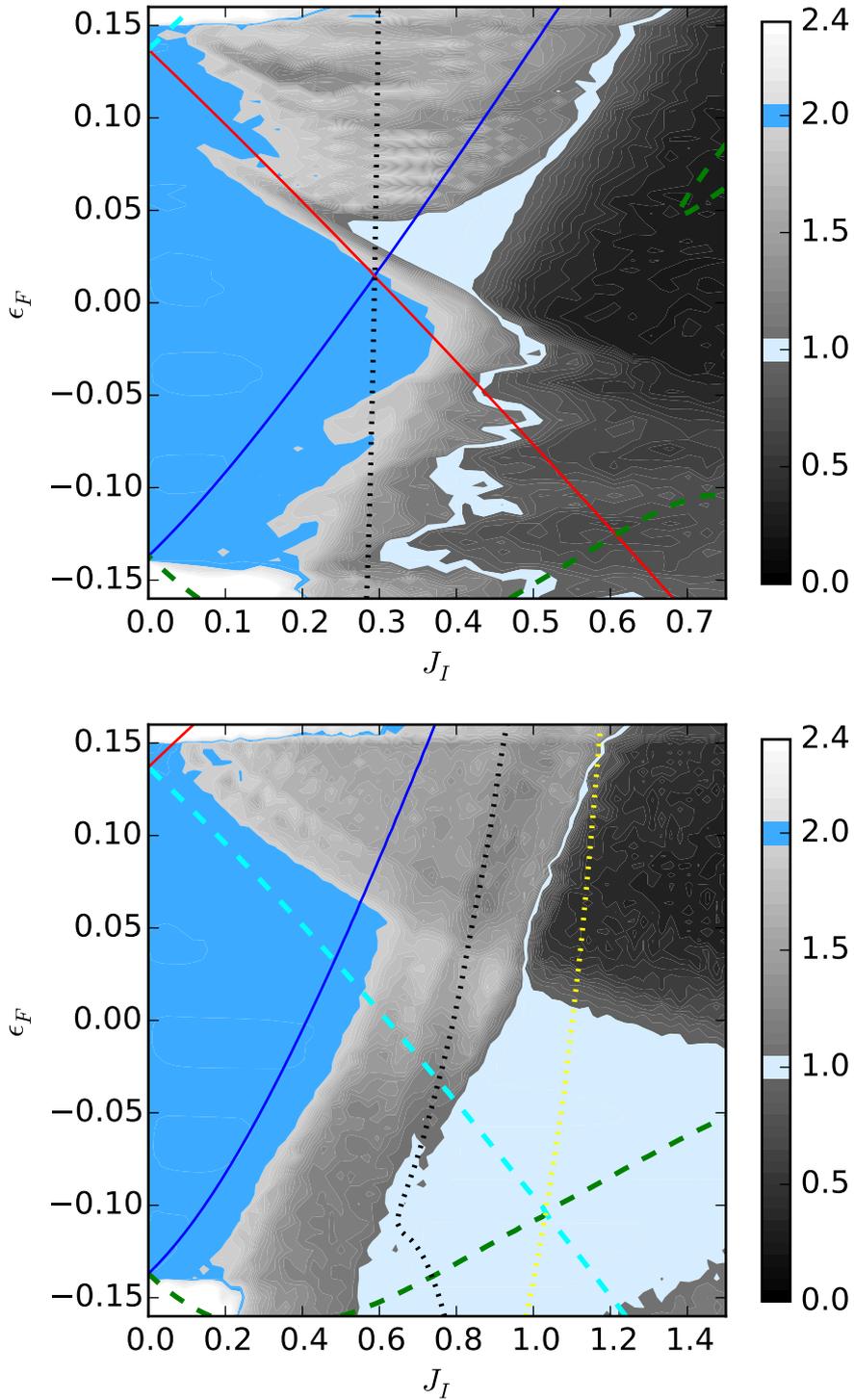


FIGURE 2.27 – Nous superposons dans ces figures les diagrammes des Fig. 2.13 et Fig. 2.15 avec les résultats de l’approximation de Born auto-cohérente au second ordre de la Fig. 2.26. La figure du haut représente les résultats pour un désordre antiferromagnétique de concentration  $n_I = 0.4$  et la figure du bas représente les résultats pour un désordre ferromagnétique de concentration  $n_I = 0.2$ . Les deux désordres sont totalement polarisés.

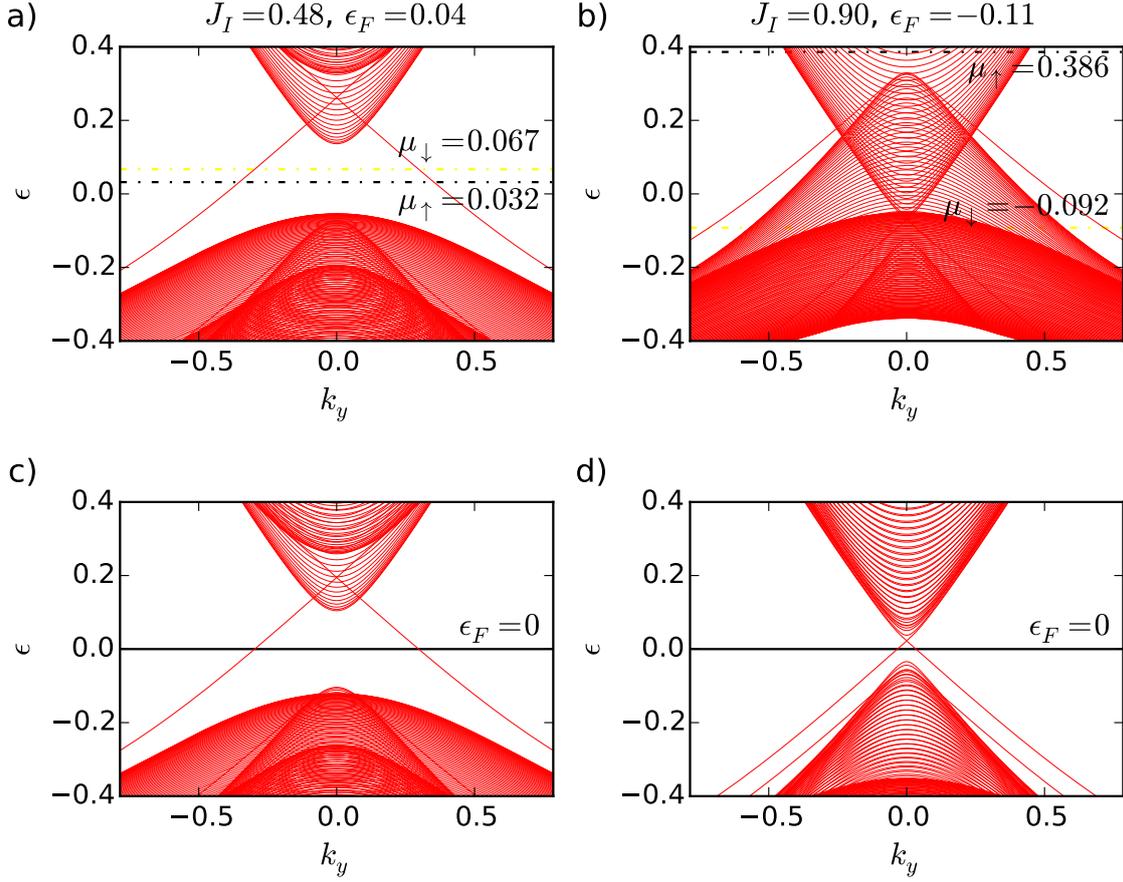


FIGURE 2.28 – Structure de bande  $\epsilon(k_y)$  d'un isolant topologique avec un désordre antiferromagnétique (a) et ferromagnétique (b) en insérant dans le modèle Eq. (2.33) les paramètres  $m_{\uparrow\downarrow}$  et  $\mu_{\uparrow\downarrow}$  renormalisés obtenus par l'approximation de Born auto-cohérente de la Fig. 2.26 (les paramètres renormalisés sont pris pour des valeurs de  $J_I$  et  $\epsilon_F$  situées dans les rectangles bleus :  $J_I = 0.48$  et  $\epsilon_F = 0.04$  pour le cas antiferromagnétique,  $J_I = 0.90$  et  $\epsilon_F = -0.11$  pour le cas ferromagnétique). Les figures (c) et (d) correspondent respectivement aux figures (a) et (b) pour lesquelles on a posé  $\mu_{\uparrow}$  et  $\mu_{\downarrow}$  égaux à zéro afin de voir le gap et les états de bord restants.

Ces observations se font sur les bords de gap, et pour nous donner une idée de l'allure des structures de bandes effectives, nous pouvons utiliser les paramètres renormalisés  $m_{\uparrow\downarrow}$  et  $\mu_{\uparrow\downarrow}$  et les injecter dans l'Eq. (2.33) afin d'obtenir la Fig. 2.28. Les paramètres renormalisés sont pris pour des valeurs de  $J_I$  et  $\epsilon_F$  contenues dans les quadrilatères bleus de la Fig. 2.27. Sur les deux cas de désordre ((a, c) et (b, d)) nous pouvons observer qu'une des deux paires d'états de bords a disparue. Les bords de gap se situent bien là où on les attend dans les deux cas, bien que les bandes des secteurs de spin up et down se superposent dans le cas ferromagnétique (rendant de ce fait la lecture de la figure un peu plus difficile sur (a) et (b)). En effet, comme nous pouvons le voir sur la Fig. 2.27, les bords de gap  $H \downarrow$  et  $E \uparrow$  se croisent à  $J_I \approx 0.5$ , ceci se traduisant par une superposition des bandes up et down. La structure de bande effective pour le cas ferromagnétique est donc a priori celle d'un métal, mais nous devons prendre en compte la renormalisation du remplissage des électrons : les paramètres renormalisés  $\mu_{\uparrow}$  et  $\mu_{\downarrow}$  restent au milieu des gaps des deux secteurs de spin (on a ramené les potentiels chimiques à zéro sur les figures (c) et (d) pour permettre de voir plus aisément le gap et les états de bord). Nous avons étendu l'espace

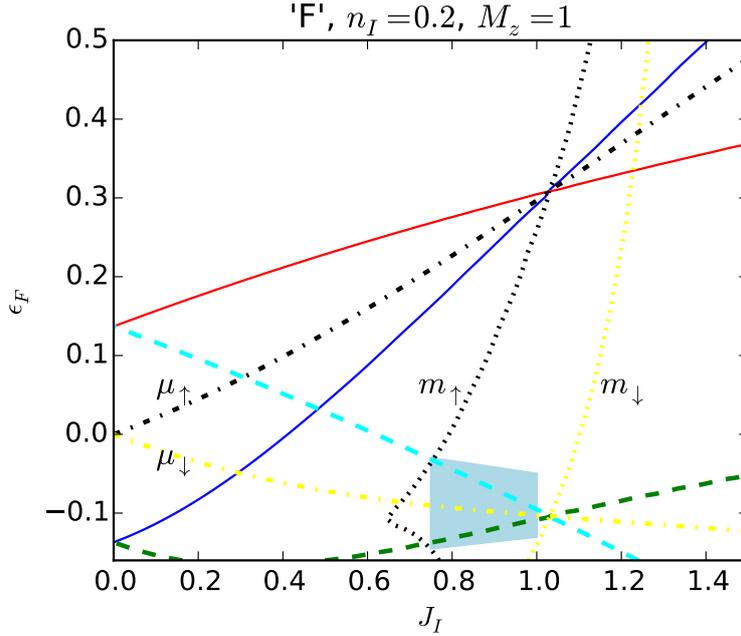


FIGURE 2.29 – Diagramme de phase étendu pour le cas ferromagnétique. On note que les potentiels chimiques renormalisés  $\mu_{\uparrow\downarrow}$  restent au milieu des gaps et coupent les courbes  $E_{\uparrow\downarrow}$  (bleu et vert) et  $H_{\uparrow\downarrow}$  (rouge et cyan) en leur intersection.

des paramètres en  $\epsilon_F$  dans la Fig. 2.29 pour avoir une vue plus complète sur l'évolution des potentiels chimiques renormalisés. Ainsi, si l'on choisit un potentiel chimique initialement situé dans le gap, le désordre renormalisera celui-ci de façon différente suivant l'espèce de spin considérée. Avec un désordre suffisamment fort, le potentiel chimique pour le spin up  $\mu_{\uparrow}$  se retrouvera au milieu du gap d'un isolant trivial, tandis que le potentiel chimique pour le spin down  $\mu_{\downarrow}$  sera au milieu du gap d'un isolant de Chern. Ceci est donc compatible avec les observations faites dans la Sect. 2.3.1.1 où le cas ferromagnétique présente une large zone de conductance  $G = 1$ .

#### 2.4.2.2 $M_z < 1$

L'approximation de Born auto-cohérente au second ordre devient malheureusement totalement imprécise et ne permet plus d'aborder qualitativement les résultats observés à la Fig. 2.17 et à la Fig. 2.19. Dans la Fig. 2.30 nous superposons les résultats que nous avons obtenu avec les résultats de l'approximation de Born correspondants. Nous pouvons voir que la phase  $G = 2$  n'est plus du tout délimitée par les bords de gap, et seule l'apparition de la phase  $G = 1$  du cas antiferromagnétique peut correspondre au changement de signe de  $m_{\uparrow}$  (courbe noire en pointillés), bien qu'elle soit bien plus large que prévu en débordant très largement après le changement de signe de  $m_{\downarrow}$  (courbe jaune en pointillés).

On suppose que l'approximation de Born auto-cohérente au second ordre ne suffit plus pour rendre compte des mécanismes mis en jeu. La prise en compte de diagrammes d'ordres supérieurs pourrait éventuellement ajouter plus de précision sur l'influence du couplage des canaux de spin différent par la diffusion sur les impuretés.

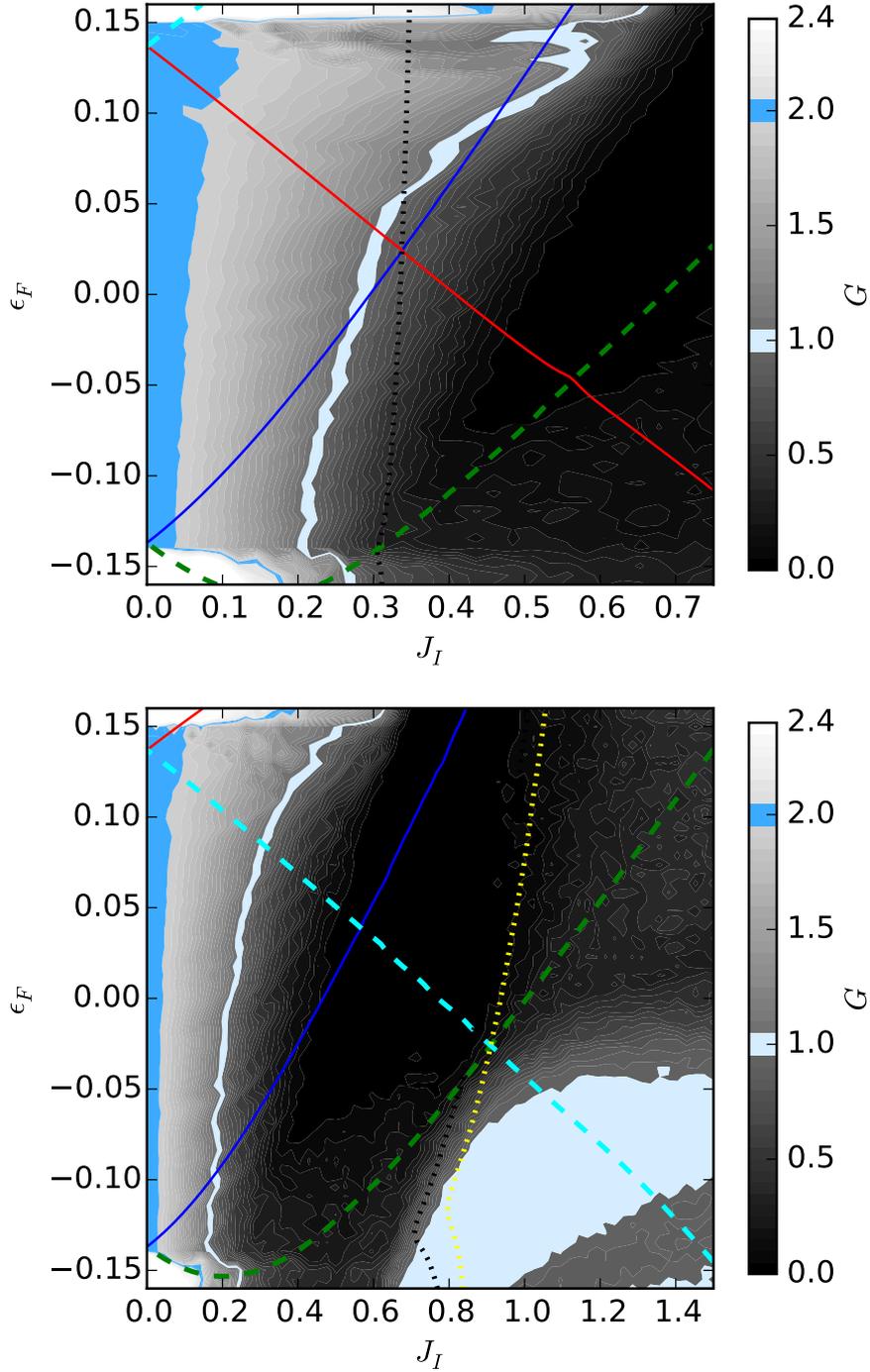


FIGURE 2.30 – Superposition des diagrammes de phase de la Fig. 2.17 et la Fig. 2.19 avec les approximations de Born auto-cohérentes respectives. Antiferromagnétique en haut, avec  $n_I = 0.4$  et  $M_z = 0.8$ , ferromagnétique en bas, avec  $n_I = 0.2$  et  $M_z = 0.8$ .

## 2.5 Conclusion

Le résultat principal de l'étude que nous avons menée est qu'un isolant topologique bidimensionnel de type HgTe dopé avec des impuretés magnétiques présente différents régimes de transport quantifiés en fonction de l'intensité du désordre. La transition entre

une phase d'isolant topologique, caractérisée par la présence de deux paires de canaux polarisés en spin, et entre une phase d'isolant de Chern, avec une seule paire de canaux polarisés en spin, est liée à la suppression d'un des états de spin. En particulier, nous avons observé l'émergence de cet effet Hall quantique anomal dans le cas où le couplage entre électrons et impuretés et trous et impuretés possède le même signe (cas ferromagnétique). Ceci est un effet du désordre, qui apparaît au delà de la validité de l'approximation en champ moyen. Si les fluctuations sont totalement négligées, ce désordre entraîne une simple renormalisation du potentiel chimique, sans avoir d'incidence sur la masse topologique  $m$ . Au contraire du cas ferromagnétique, cette approximation suffit pour rendre compte de l'ouverture d'un gap dans la structure de bande d'un état de spin pour le cas antiferromagnétique (signe du couplage opposé pour les électrons et les trous).

Plus généralement, l'effet du désordre se manifeste par une renormalisation de la masse topologique et du potentiel chimique dépendante en spin, du fait de la contribution des fluctuations. Dans le cas ferromagnétique, le désordre fort provoque une courbure dans l'évolution des bords de gap en fonction du désordre qui permet un croisement non trivial de ceux-ci. Comme le montrent les densités locales d'états et le comportement des courants locaux, l'apparition de cette phase d'isolant de Chern est liée à la localisation d'une des deux espèces de spin. En conséquence, le dispositif agit comme un filtre de spin, et on observe une accumulation de l'espèce de spin dont la conduction est permise sur le contact opposé.

Ces résultats sont principalement valables pour une polarisation totale du désordre. Nous avons en effet observé qu'une légère dépoliarisation ( $M_z = 0.8$ ) entraîne déjà un fort couplage des canaux de spin opposé, ce qui a pour effet de détruire la quantification de la conductance à un désordre relativement faible ( $J_I < 0.1$  pour le cas antiferromagnétique et pour le cas ferromagnétique, avec respectivement  $n_I = 0.4$  et  $n_I = 0.2$ ). Nous n'avons pas présenté de résultats portant sur l'étude d'un désordre totalement dépoliarisé car les calculs numériques n'ont pas convergé avec une quantité conséquente d'échantillons désordonnés, les fluctuations sur les données obtenues restaient bien trop importantes pour que nous tirions une quelconque conclusion des résultats.

# Chapitre 3

## Perspectives

### 3.1 Idées de travaux pour poursuivre

#### 3.1.1 Couplage en série de rubans de HgTe avec différents désordres magnétiques

Dans l'optique de réaliser des dispositifs à trois niveaux de conductance ( $G = 2$ ,  $G = 1$  et  $G = 0$ ), nous pouvons imaginer deux zones désordonnées : une contenant un désordre polarisé up et l'autre contenant un désordre polarisé down. Avant de nous lancer dans l'étude de systèmes couplés, il conviendra d'effectuer une étude sur l'influence du rapport d'aspect des zones contenant le désordre. Comme on peut le voir principalement à la Fig. 2.21, l'état de bord bloqué possède une certaine longueur de pénétration dans la zone désordonnée : les courants locaux s'enfoncent dans la zone de désordre avant de faire demi-tour vers le contact. Nous sommes ici face à un problème de percolation [106], le blocage du canal dépend de la longueur de la zone désordonnée et de l'espacement entre les deux bords de l'échantillon.

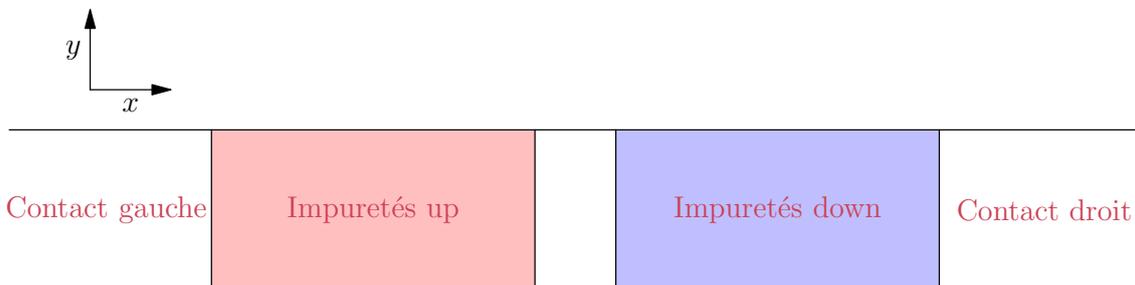


FIGURE 3.1 – Schéma du dispositif à modéliser : deux zones désordonnées sont couplées et reliées entre elles par une zone tampon. Les zones rouge et bleue contiennent respectivement un désordre polarisé en spin up et en spin down. La zone tampon insérée entre les deux zones désordonnées a pour but d'éviter les éventuels problèmes de discontinuités.

Nous imaginons en première approximation que la seconde zone désordonnée pourra bloquer le canal que la première zone a laissé passer, et ainsi obtenir une phase  $G = 0$  avec un désordre relativement faible. On se propose donc de vérifier cette hypothèse à l'aide du modèle que nous avons déjà créé dans cette thèse. Une modification mineure de notre code pour ajouter une seconde zone désordonnée est aisée à réaliser et des diagrammes de phase devraient pouvoir être obtenus rapidement. En premiers résultats nous pouvons montrer les courants locaux à la Fig. 3.2 qui montrent un blocage total des canaux de conduction pour des paramètres menant au blocage du canal de spin up dans les Fig. 2.21

et Fig. 2.22 (avec une seule zone désordonnée). Ce dispositif semble donc permettre de créer des systèmes à trois niveaux de conductance et des spin valves en bloquant sélectivement les courants de spin up, les courants de spin down, ou les deux.

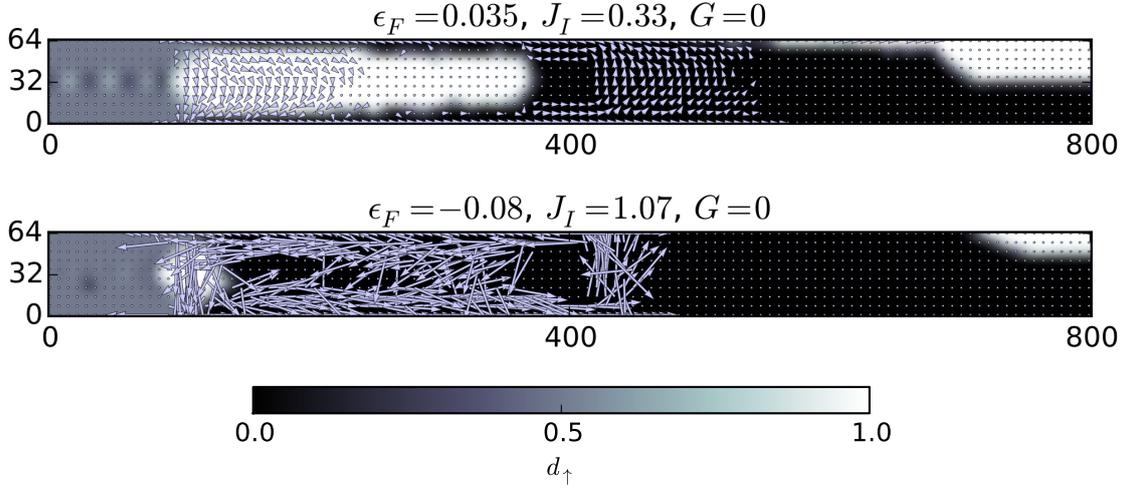


FIGURE 3.2 – Courants locaux dans un système à deux zones désordonnées couplées en série. Les cas antiferromagnétique (en haut) et ferromagnétique (en bas) mettent en évidence le blocage de tous les canaux de conduction. L'échelle de gris en fond représente l'excès de densité hors équilibre de spin up  $d_\uparrow$ . Le blanc correspond à une polarisation up complète, tandis que le noir correspond à une densité en spin down complète. Taille de l'échantillon :  $800 \times 64$  sites, les zones désordonnées font chacune 256 sites de longueur et une zone tampon longue de 64 sites les sépare. On a affiché une donnée sur sept pour plus de lisibilité.

### 3.1.2 Modélisation de dispositifs à base de graphène avec réservoirs

Dans nos travaux sur le transport électronique dans le graphène nous n'avons pas calculé de conductance. Nous avons étudié un modèle périodique dans lequel nous avons ajouté un potentiel vecteur  $\mathbf{A} = t\mathbf{E}$  dépendant du temps nous permettant de calculer des conductivités. Si nous voulons calculer des conductances et décrire des modèles plus réalistes, nous pouvons utiliser tous les outils développés pour l'étude du transport dans les isolants topologiques. Il sera ainsi possible d'étudier des systèmes de taille finie avec des réservoirs permettant d'ajuster le remplissage du système. Il serait intéressant de voir comment le transport électronique se comporte avec un désordre polarisé et ouvrant un gap dans la structure de bande (voir Fig. 1.8).

Les difficultés résident ici dans l'implémentation du hamiltonien du graphène en espace réel au sein du code, dans la description d'un réservoir couplé avec un réseau hexagonal (deux configurations de bords sont possibles : *zigzag* ou *armchair* [47, 48]), et dans la façon dont on colle les self-énergies des contacts (le réseau est hexagonal et non plus carré, il faut donc faire attention aux sites où l'on ajoute la self-énergie suivant la configuration des bords).

### 3.1.3 Dispositifs multi-terminaux

Pour proposer des dispositifs de spintronique, nous pouvons étudier l'influence du désordre magnétique sur des dispositifs expérimentaux. Parmi ces dispositifs, nous pouvons citer les dispositifs à trois terminaux en T, les dispositifs à quatre terminaux en H ou en

croix, et la barre de Hall à six terminaux [80, 107]. La modélisation de ces dispositifs connus et maîtrisés permettra de prédire des valeurs de conductance, afin de mettre en évidence expérimentalement le blocage des canaux de conduction par le désordre. Le dispositif à quatre terminaux en H représenté à la Fig. 3.3 est utilisé pour des mesures non locales de transport, destinées à mettre en évidence l'existence des états de bord hélicaux. Deux contacts servent de sonde de courant, et les deux autres servent de sondes de voltage [81, 108, 109]. Il est possible de définir la résistance non locale pour un échantillon pur :

$$R_{ij,kl} = \frac{V_k - V_l}{I_{ij}}. \quad (3.1)$$

La matrice de conductance s'écrit,

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{pmatrix} = \frac{e^2}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

En posant  $V_4 = 0$  et faisant circuler un courant entre les contacts 1 et 4, avec  $I_1 = -I_4$  et  $I_2 = I_3 = 0$ , nous obtenons les valeurs de résistance prévues si les états de bord hélicaux existent :

$$\begin{aligned} R_{14,14} &= \frac{V_1 - V_4}{I_1} = \frac{h}{e^2} \frac{3}{4}, \\ R_{14,23} &= \frac{V_2 - V_3}{I_1} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Un désordre magnétique bloquant le canal en spin up mène par exemple à la matrice de conductance suivante (développée pour faire apparaître les canaux en spin),

$$\begin{pmatrix} I_{1\uparrow} \\ I_{1\downarrow} \\ I_{2\uparrow} \\ I_{2\downarrow} \\ I_{3\uparrow} \\ I_{3\downarrow} \\ I_{4\uparrow} \\ I_{4\downarrow} \end{pmatrix} = \frac{e^2}{h} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{1\uparrow} \\ V_{1\downarrow} \\ V_{2\uparrow} \\ V_{2\downarrow} \\ V_{3\uparrow} \\ V_{3\downarrow} \\ V_{4\uparrow} \\ V_{4\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Les canaux en spin up des contacts 1 et 4 sont ici coupés des contacts 2 et 3.

Le même dispositif avec deux zones contenant un désordre de polarisation opposée entre les contacts 1,4 et 2,3 peut aussi être imaginé pour couper les canaux en spin up et down.

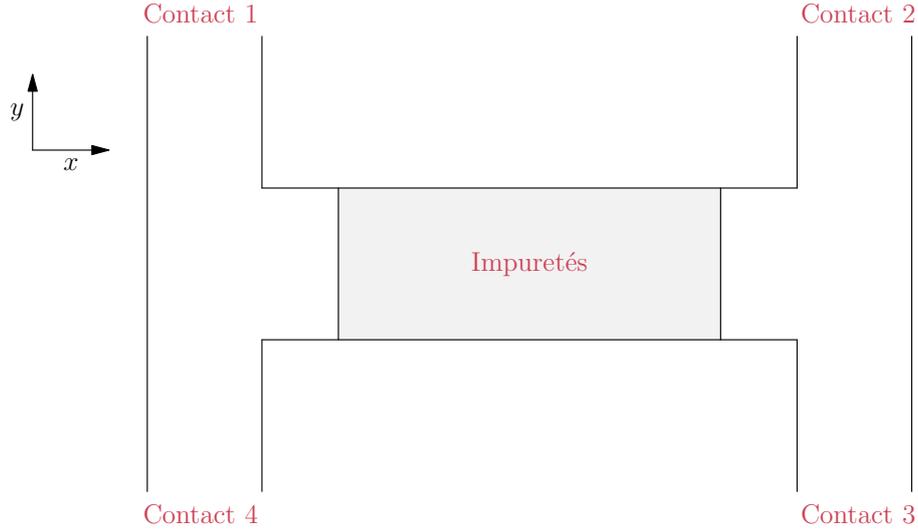


FIGURE 3.3 – Schéma d'un dispositif à quatre terminaux en H. Quatre contacts sont reliés par paires (1,2 et 2,3) à une zone désordonnée rectangulaire (en gris).

Le dispositif à trois terminaux présenté à la Fig. 3.4 est un bon point de départ pour étudier les courants de spin. Dans le cas d'un système pur, en faisant circuler un courant de charges entre les contacts gauche et droit et en ajustant les potentiels de sorte à ce qu'il n'y ait aucun courant de charges dans le contact de sonde, il est possible de mesurer un courant de spin non nul. Simultanément, un courant de spin est induit dans les contacts gauche et droit. Dans le cas de l'effet Hall quantique de spin (avec un système pur donc), les courants s'écrivent,

$$\begin{pmatrix} I_L^S \\ I_{\text{Sonde}}^S \\ I_R^S \end{pmatrix} = \frac{e}{4\pi} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_L \\ \mu_{\text{Sonde}} \\ \mu_R \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Le courant de spin dans la sonde s'écrit,

$$I_{\text{Sonde}}^S = \frac{e}{4\pi} (\mu_L - \mu_R) \neq 0. \quad (3.6)$$

À l'aide de simulations nous pourrions caractériser ce courant, et voir comment il est modifié avec le désordre magnétique en bloquant l'un ou l'autre canal de bord.

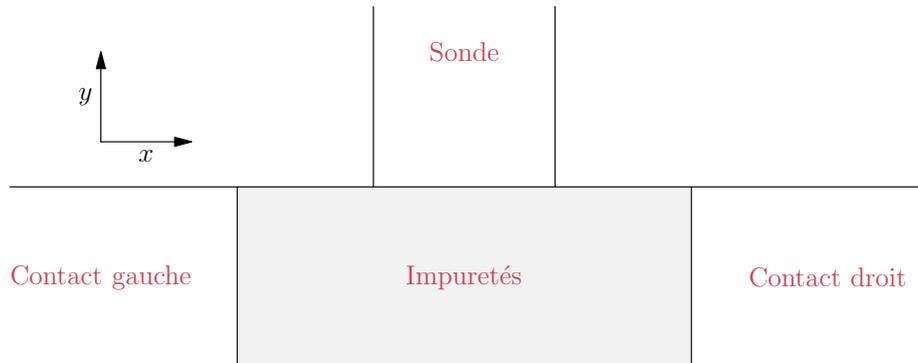


FIGURE 3.4 – Schéma d'un dispositif à trois terminaux en T. Les contacts gauche et droit servent à imposer un courant, et leur potentiel est ajusté de sorte à ce que le courant de charge soit nul dans le contact de sonde.

Une généralisation à quatre terminaux de ce dispositif peut être modélisée (voir Fig. 3.5). On s'attend à ce que le désordre magnétique introduise une dissymétrie dans les courants de spin mesurés dans le contact 2 et le contact 4.

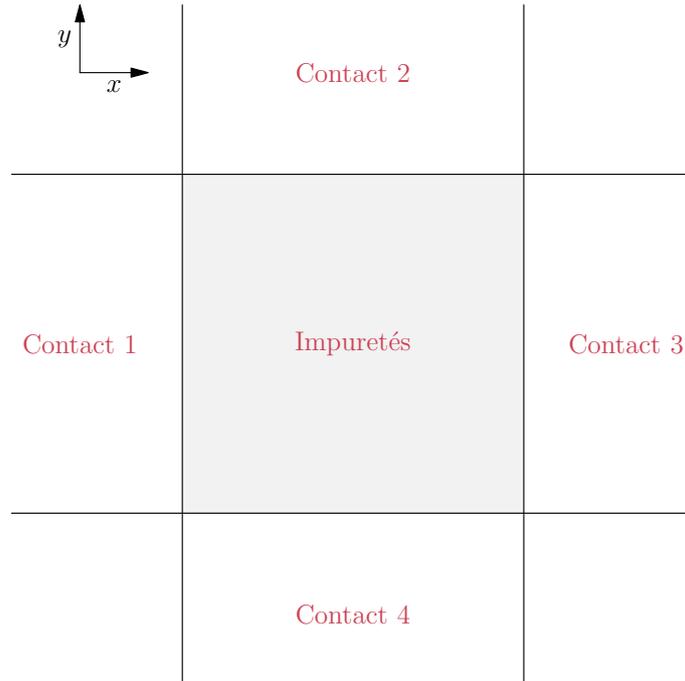


FIGURE 3.5 – Schéma d'un dispositif à quatre terminaux. Quatre contacts sont reliés à une zone désordonnée carrée (en gris). On appliquera une différence de potentiel entre les contacts 1 et 3 et on mesurera le courant circulant entre les contacts 2 et 4.

Il serait également intéressant de modéliser un dispositif de type barre de Hall qui permet habituellement de mettre en évidence expérimentalement l'effet Hall quantique de spin. On a représenté une barre de Hall à la Fig. 3.6 : celle-ci permet de mettre en évidence l'existence d'états de bord par la mesure des différences de potentiel entre les paires de contact 5,6 et 2,3 lorsqu'un courant circule entre 1 et 4. Une différence de potentiel nulle entre les paires de contact d'un même côté de l'échantillon met en exergue l'existence d'un canal de bord. Ce dispositif expérimental permettrait donc de vérifier la destruction des canaux de bords par le désordre magnétique.

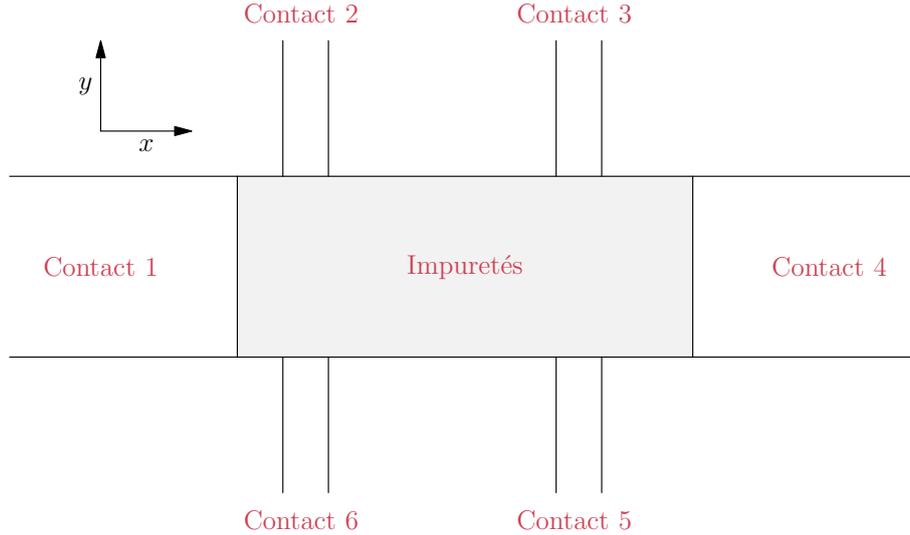


FIGURE 3.6 – Schéma d’un dispositif de type barre de Hall. Six contacts sont reliés à une zone désordonnée rectangulaire (en gris).

Nous avons développé un code permettant de simuler des dispositifs avec un nombre arbitraire de contacts positionnés et dimensionnés comme désirés. La description et l’implémentation de l’algorithme multi-terminaux se situent dans l’annexe E.

### 3.1.4 Auto-organisation des impuretés dans les isolants topologiques

Le couplage RKKY (Rudrman-Kittel-Kasuya-Yoshida) permet prendre en compte le couplage des spins des impuretés via le spin des porteurs. Cette interaction est responsable de l’auto-organisation du spin des impuretés dans les semi-conducteurs magnétiques dilués [110] et les métaux [111]. Nous pouvons étudier la stabilité de l’ordre magnétique imposé au désordre, ce qui serait un premier pas pour connaître la viabilité des dispositifs de spintronique conçus à l’aide d’isolants topologiques dopés avec des impuretés magnétiques.

On trouve dans la littérature quelques études théoriques concernant l’organisation du magnétisme d’impuretés distribuées sur la surface d’un isolant topologique 3D [112, 113]. On constate qu’un ordre ferromagnétique apparaît et dépend de la densité des porteurs (l’état ferromagnétique étant observé avec un potentiel chimique proche du point de Dirac). Faire varier le potentiel chimique permet de provoquer une transition de phase magnétique. Les mêmes études ont été menées avec des isolants topologiques 2D, sur la façon dont les spins des impuretés se couplent via les états de bords hélicaux (qui sont les seuls états conducteurs du système) [114]. De même que pour les isolants topologiques 3D, la colinéarité des spins des impuretés dépend du niveau de Fermi, à la différence que c’est un état antiferromagnétique<sup>1</sup> qui est observé lorsque le potentiel chimique est situé autour du point de Dirac. Ces résultats sont en revanche valables pour le cas où les états de bords sont tous toujours présents. Nous pouvons nous demander ce qui se produit lorsque l’isolant topologique est transformé en isolant de Chern par le désordre, en privant le système d’une paire d’états de bord.

En dernière remarque, nous précisons que nous avons pour l’instant négligé le couplage Rashba ( $\lambda$ ) et l’asymétrie d’inversion de bande ( $\Delta$ ). Nous pourrions aussi nous intéresser à la façon dont ils affectent l’ordre magnétique.

1. Nous parlons ici d’un ordre antiferromagnétique observé sur le réseau, qui n’a rien à voir avec l’appellation que nous avons adoptée pour décrire un couplage avec des signes opposés entre électron-impureté et trou-impureté.

# Conclusion générale

## Le point sur les travaux menés dans cette thèse

Nous ouvrons la conclusion par un rappel des résultats obtenus dans les différentes parties de cette thèse.

Dans le chapitre 1 qui suit l'introduction générale, nous avons pu étudier le transport de charges dans le graphène en présence d'impuretés magnétiques dans un ordre paramagnétique et antiferromagnétique. Nous avons mené cette étude à partir du courant, du taux de créations de paires et des propriétés de localisation de la fonction d'onde. Nous avons observé la formation de polarons magnétiques dans le cas d'un désordre antiferromagnétique, qui se traduisent par des îlots de densité locale d'états où la densité de spin est corrélée à la densité de charges, ce qui modifie drastiquement les propriétés de transport : le régime de réponse du courant en puissance  $3/2$  du champ électrique  $E$  est perdu. Pour arriver à ces résultats, nous avons utilisé une méthode d'intégration numérique de l'équation de Schrödinger basée sur l'opérateur d'évolution dans l'approximation des petits pas de temps, afin de calculer les quantités qui évoluent dans le temps avec l'application d'un champ électrique, et la méthode de Chebyshev pour calculer les densités (locales) d'états.

Dans le chapitre 2, nous avons montré comment les propriétés de transport d'un isolant topologique 2D de type HgTe étaient modifiées par deux types de désordres magnétiques différents. Avec les deux types de désordres nous pouvons obtenir une transition entre un isolant topologique et un isolant de Chern par suppression d'un des états de spin. L'approximation en champ moyen prédisait cette transition pour un désordre antiferromagnétique, mais nous l'avons également observée pour le cas ferromagnétique. Ceci s'explique lorsque les fluctuations du désordre sont prises en compte, et nous avons pu nous en rendre compte en calculant la masse topologique et le potentiel chimique renormalisés à l'aide d'une approximation de Born auto-cohérente au second ordre. Ces résultats sont essentiellement valables pour une polarisation totale des impuretés. Les cas légèrement dépolarisés font disparaître la phase isolant de Chern pour l'ordre antiferromagnétique, et des dépolarisations plus prononcées demandent beaucoup plus de ressources de calcul pour atteindre la convergence. Nous nous sommes servi d'un code de transport basé sur le formalisme des fonctions de Green hors équilibre qui nous a permis de calculer des diagrammes de conductance, de tracer des densités hors équilibre et des courants locaux de charge, et d'un code calculant l'approximation de Born auto-cohérente sus-citée.

Nous avons proposé dans le chapitre 3 différentes pistes pour continuer et compléter ces travaux. Pour le graphène, nous pourrions éventuellement calculer des diagrammes de conductance pour des dispositifs avec réservoirs pour obtenir le comportement de systèmes de taille finie. Concernant les isolants topologiques, nous pourrions par la suite étudier l'auto-organisation des impuretés et nous pouvons commencer à créer des dispositifs :

des rubans contenant deux zones désordonnées permettant d'obtenir des systèmes à trois niveaux de conductance et faisant office de spin valves, et des dispositifs multiterminaux permettant de manipuler plus finement les courants de spin et de charges.

## Conclusion

Nous n'avons fait qu'effleurer le sujet des matériaux dont les excitations sont décrites par des fermions de Dirac. Plus précisément, nous avons étudié les conséquences de la brisure de symétrie par renversement du temps par un désordre magnétique sur les propriétés de transport du graphène et des isolants topologiques 2D de type HgTe. La brisure de symétrie par renversement du temps par des impuretés magnétiques est intéressante car, dans le cas où la magnétisation est stable, l'état du système peut être conservé sans application d'un champ extérieur. Ceci ouvre des voies intéressantes pour la production de dispositifs d'électronique ou de spintronique nécessitant peu d'énergie et permettant de conserver un état donné sans alimentation.

Pour le graphène, le désordre magnétique permet de passer d'un matériau conducteur possédant une réponse non linéaire (cas paramagnétique) à un matériau où les états sont fortement localisés et dont la conductivité tend vers la moitié de la conductivité minimale (cas magnétique). L'intérêt de ces travaux repose principalement sur le fait que le graphène est un matériau 2D et donc facilement pollué par son environnement. L'inclusion d'atomes à grands spins ou la création de lacunes pouvant posséder elles aussi un spin était une motivation suffisante pour étudier leur influence sur le transport.

Le désordre magnétique dans les isolants topologiques 2D présente un fort intérêt pour la création de mémoires ou de dispositifs de spintronique. Nous avons commencé à voir que l'inclusion de deux zones désordonnées dans un ruban d'isolant topologique permettait de concevoir des dispositifs à trois niveaux de conductance, ce qui a un intérêt certain pour créer des mémoires. La manipulation des courants de spin est également intéressante, les dispositifs de spintronique étant par nature bien supérieurs sur le plan de la consommation énergétique à leurs homologues électroniques. Les isolants topologiques contenant du désordre magnétique sont également plus prometteurs que les semi-conducteurs magnétiques dilués de par leurs propriétés topologiques : l'existence ou non de canaux de conduction est une propriété topologique, et donc extrêmement robuste aux imperfections (on dit que les états sont topologiquement protégés). La manipulation de la magnétisation permet donc l'ouverture ou la fermeture totale d'un canal donné.

Les prochaines investigations seront menées sur la conductance du graphène, afin de proposer des diagrammes de conductance pouvant être comparés à l'expérience, et sur la création de différents dispositifs permettant de manipuler les courants de spin en jouant sur la magnétisation des impuretés, et sur la stabilité de cette magnétisation au contact du spin des porteurs.

## Annexe A

# Méthode des polynômes de Chebyshev

### A.1 Présentation des idées de base de la méthode

Nous allons ici présenter la méthode des polynômes de Chebyshev, qui est une méthode KPM (*Kernal Polynomial Method* ou méthode de décomposition en noyaux polynomiaux) à partir de l'article [64].

Plutôt que de chercher brutalement les valeurs propres d'un hamiltonien en le diagonalisant afin d'obtenir la densité d'états et la densité locale d'états

$$\rho(\epsilon) = \sum_n \langle \delta(\epsilon - \epsilon_n) \rangle, \quad \rho(i, \epsilon) = \sum_n \langle n | c_i^\dagger c_i | n \rangle \delta(\epsilon - \epsilon_n), \quad (\text{A.1})$$

nous allons utiliser une méthode moins gourmande en ressources informatiques. Cette méthode est l'évaluation stochastique de la trace de l'opérateur densité, basée sur une décomposition en polynômes de Chebyshev. La diagonalisation directe d'une matrice hamiltonienne peut devenir réellement contreproductive avec du matériel informatique moderne. Une matrice de dimension  $D$  requiert en général une quantité de mémoire d'ordre  $D^2$  et le nombre d'opérations nécessaire à la diagonalisation (proportionnel au temps de calcul) est d'ordre  $D^3$ . Nous utiliserons donc une méthode de décomposition en polynômes de Chebyshev et nous ajouterons un filtrage permettant d'éliminer les oscillations de Gibbs près des discontinuités de la fonction décomposée en une série finie de polynômes.

Nous pouvons décomposer toute fonction  $f(x)$  à l'aide d'un set  $P$  de polynômes  $p_n$  orthogonaux, de telle sorte que  $\langle p_n | p_m \rangle = \langle p_n | p_n \rangle \delta_{n,m}$ . Soit

$$f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \alpha_n p_n(x), \quad \alpha_n = \langle p_n | f \rangle / \langle p_n | p_n \rangle. \quad (\text{A.2})$$

Les polynômes de Chebyshev sont de bons candidats pour une telle décomposition ( $T_n$  pour le premier ordre et  $U_n$  pour le second ordre), car ils sont relativement proches de la transformée de Fourier et ont de bonnes propriétés de convergence.

### A.2 Décomposition en moments

Toute fonction réelle, lisse par morceaux et évoluant dans l'intervalle  $[-1, 1]$  peut être décomposée en polynômes de Chebyshev du premier ordre :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\langle f | T_n \rangle_1}{\langle T_n | T_n \rangle_1} T_n(x) = \alpha_0 + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} T_n(x), \quad (\text{A.3})$$

avec les coefficients

$$\alpha_n = \int_{-1}^1 dx \frac{f(x)T_n(x)}{\pi\sqrt{1-x^2}}. \quad (\text{A.4})$$

Nous réécrivons donc

$$f(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \left[ \mu_0 + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} \mu_n T_n(x) \right] = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\langle f|\phi_n \rangle_2}{\langle \phi_n|\phi_n \rangle_2} \phi_n(x), \quad (\text{A.5})$$

où  $f$  est maintenant décomposée à l'aide des fonctions orthogonales  $\phi$

$$\phi_n(x) = \frac{T_n(x)}{\pi\sqrt{1-x^2}}, \quad (\text{A.6})$$

satisfaisant la relation

$$\langle \phi_n|\phi_m \rangle_2 = \frac{1 + \delta_{n,0}}{2} \delta_{n,m}, \quad (\text{A.7})$$

selon la définition du produit scalaire des polynômes de Chebyshev de second type. Les moments modifiés s'écrivent maintenant

$$\mu_n = \langle f|\phi_n \rangle_2 = \int_{-1}^1 dx f(x)T_n(x). \quad (\text{A.8})$$

### A.3 Calcul des moments

Pour calculer les  $\mu_n$  nous allons utiliser les relations de récurrence des polynômes de Chebyshev. Nous devons faire attention à l'intervalle  $[-1, 1]$  dans lequel devront se situer nos quantités, sans quoi la convergence ne sera pas assurée. Nous déterminons la différence d'énergie  $\Delta\epsilon$  définie par l'énergie maximale et minimale du système. Pour être certain de ne pas dépasser l'intervalle  $[-1, 1]$ , nous introduisons un cutoff  $\eta$ , soit

$$\Delta\epsilon = \frac{\epsilon_{\max} - \epsilon_{\min}}{1 - \eta}, \quad (\text{A.9})$$

et on met donc à l'échelle le hamiltonien  $H$  et les énergies  $\epsilon$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= H/\Delta\epsilon, \\ \tilde{\epsilon} &= \epsilon/\Delta\epsilon. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Quand nous décomposons les quantités désirées nous trouvons deux formes différentes pour les moments. La première est utile lorsque l'on cherche les valeurs espérées (*expectation values*) entre deux états donnés  $|\alpha\rangle$  et  $|\beta\rangle$  et la seconde est utile lorsque nous cherchons la trace d'un opérateur à partir des polynômes de Chebyshev.

#### Valeurs espérées (*Expectation values*)

Intéressons nous d'abord aux valeurs espérées

$$\mu_n = \langle \beta|T_n(\tilde{H})|\alpha\rangle. \quad (\text{A.11})$$

Nous allons ici appliquer les relations de récurrence des polynômes de Chebyshev et construire de façon itérative les états  $|\alpha_n\rangle = T_n(\tilde{H})|\alpha\rangle$  nécessaires au calcul des moments,

$$\begin{aligned} |\alpha_0\rangle &= |\alpha\rangle, \\ |\alpha_1\rangle &= \tilde{H}|\alpha_0\rangle, \\ |\alpha_{n+1}\rangle &= 2\tilde{H}|\alpha_n\rangle - |\alpha_{n-1}\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

et obtenir finalement

$$\mu_n = \langle \beta | \alpha_n \rangle. \quad (\text{A.13})$$

Si  $|\alpha\rangle = |\beta\rangle$ , alors nous pouvons calculer deux moments simultanément par itération

$$\begin{aligned} \mu_{2n} &= 2\langle \alpha_n | \alpha_n \rangle - \mu_0, \\ \mu_{2n+1} &= 2\langle \alpha_{n+1} | \alpha_n \rangle - \mu_1. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

## Évaluation stochastique de la trace d'un opérateur

Si nous cherchons la valeur moyenne macroscopique d'un opérateur  $A$  nous devons calculer la trace des polynômes de Chebyshev sur tout l'espace de Hilbert

$$\mu_n = \text{Tr} [AT_n(\tilde{H})]. \quad (\text{A.15})$$

Au lieu d'évaluer cette trace en calculant le spectre de l'opérateur par diagonalisation des matrices des polynômes, nous allons utiliser l'approche stochastique. En considérant que la base des états est de dimension  $D$ , l'évaluation de la trace nécessiterait  $D^2$  étapes de calcul. Nous allons ici évaluer la trace sur  $R \ll D$  états aléatoires  $|r\rangle$ , soit

$$\mu_n = \text{Tr} [AT_n(\tilde{H})] \approx \frac{1}{R} \sum_{r=0}^{R-1} \langle r | AT_n(\tilde{H}) | r \rangle. \quad (\text{A.16})$$

Nous avons donc un algorithme dont le nombre de calculs est proportionnel à  $RD$  au lieu de  $D^2$ . Il est même possible de réduire  $R$  tout en gardant la convergence lorsque  $D$  augmente [64].

## A.4 Filtrage des oscillations de Gibbs

La méthode étant implémentée numériquement, nous allons devoir tronquer la série après  $M$  itérations,

$$f(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \left[ \mu_0 + 2 \sum_{n=1}^{M-1} \mu_n T_n(x) \right], \quad (\text{A.17})$$

ce qui va avoir pour effet de générer des oscillations de Gibbs près des points de discontinuités. Nous pouvons filtrer ces oscillations en multipliant les moments par des coefficients de filtrage  $\mu_n \rightarrow g_n \mu_n$ ,

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n=0}^{M-1} g_n \frac{\langle f | \phi_n \rangle_2}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle_2} \phi_n(x) \\ &= \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \left[ g_0 \mu_0 + 2 \sum_{n=1}^{M-1} g_n \mu_n T_n(x) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Il existe de nombreux filtres pour éliminer les oscillations de Gibbs, nous utiliserons le filtre de Jackson préconisé pour le calcul de densités d'états dans l'article [64], et qui s'écrit sous la forme

$$g_n^J = \frac{(M-n+1) \cos(\frac{\pi n}{M+1}) + \sin(\frac{\pi n}{M+1}) \cot(\frac{\pi}{M+1})}{M+1}. \quad (\text{A.19})$$

Son utilisation est simple car il assure une bonne convergence des résultats sans avoir de paramètre à adapter.

## A.5 Implémentation

L'implémentation de cet algorithme est assez délicate. Nous cherchons ici la quantité  $f$  pour un set discret  $x_k \in [0, MT - 1]$  avec  $M$  moments. Notons  $\tilde{\mu}_n = g_n \mu_n$ ,

$$f(x_k) = \frac{1}{\pi \sqrt{1 - x_k^2}} \left[ \tilde{\mu}_0 + 2 \sum_{n=1}^{M-1} \tilde{\mu}_n T_n(x_k) \right]. \quad (\text{A.20})$$

Le calcul complet requiert  $M \times MT$  opérations, soit un ordre de grandeur d'environ  $M^2$  car  $T$  est pris petit par rapport à  $M$ . Il est possible d'accélérer les calculs en utilisant les relations entre les polynômes de Chebyshev et la transformée de Fourier. Nous choisissons tout d'abord des points de colocalisation à partir desquels nous calculerons les quantités désirés,

$$x_k = \cos \left( \frac{k + 1/2}{M} \right). \quad (\text{A.21})$$

À partir de là, nous calculons la quantité

$$\gamma_k = \pi \sqrt{1 - x_k^2} f(x_k) = \tilde{\mu}_0 + 2 \sum_{n=1}^{M-1} \tilde{\mu}_n \exp \left( \frac{n\pi(k + 1/2)}{M - 1} \right). \quad (\text{A.22})$$

Écrivons maintenant

$$\lambda_n = \begin{cases} (2 - \delta_{n,0}) \sum_{n=0}^{MT-1} \tilde{\mu} \exp \left( \frac{i\pi n}{2M} \right) & \text{si } n < M \\ 0 & \text{si } M < n < MT \end{cases}$$

et

$$\tilde{\lambda}_n = \sum_{n=0}^{MT-1} \lambda_n \exp \left( \frac{2i\pi n k}{MT} \right), \quad (\text{A.23})$$

qui n'est autre que la transformée de Fourier discrète de  $\lambda_n$ . Nous avons donc les relations

$$\begin{aligned} \gamma_{2k} &= \lambda_k, \\ \gamma_{2k+1} &= \lambda_{MT-k-1}^*. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Cette astuce nous permet numériquement d'utiliser les bibliothèques de calcul FFTW qui sont très rapides pour effectuer des transformées de Fourier.

## Annexe B

# Introduction au transport électronique

### B.1 Présentation d'un système *tight-binding*

Les annexes B et C sont basées sur deux papiers [115, 116], qui présentent une explication claire de l'étude de la conductance linéaire et non linéaire à partir de l'approche des fonctions de Green Keldysh pour le premier, et une introduction aux fonctions de Green Keldysh hors équilibre pour le second.

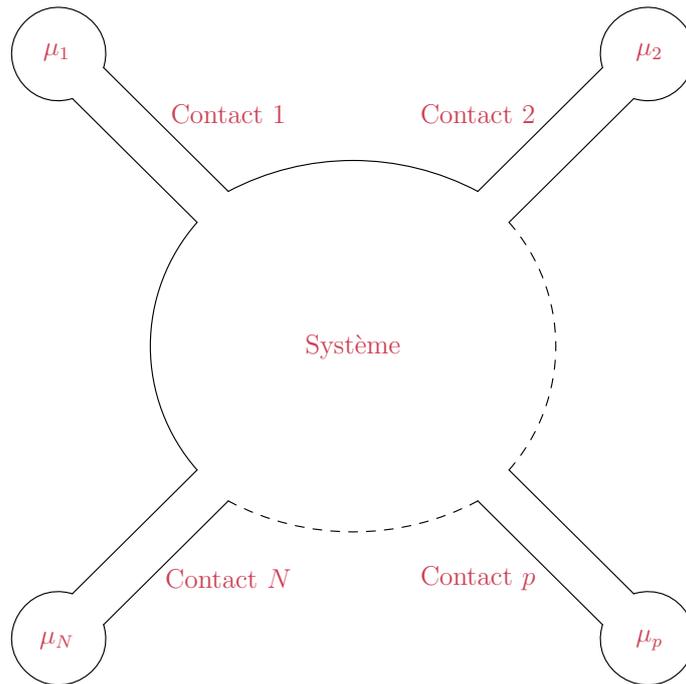


FIGURE B.1 – Représentation d'un système relié à  $N$  contacts  $p$ , eux mêmes reliés aux réservoirs  $\mu_p$ .

Nous partons d'un système général, de géométrie quelconque avec  $N$  contacts, que nous séparons en deux parties : le système  $S$  et les contacts  $L$ .

$$H = H_S + H_L + H_{LS}, \quad (\text{B.1})$$

où

$$H_S = \sum_{\mu\nu} d_\mu^\dagger h_{S\mu\nu} d_\nu = d^\dagger h_S d, \quad (\text{B.2})$$

$$H_L = \sum_{ki} c_{ki}^\dagger \epsilon_{ki} c_{ki} = c^\dagger \epsilon c, \quad (\text{B.3})$$

$$H_{LS} = \sum_{ki,\mu} \left[ c_{ki}^\dagger V_{ki,\mu} d_\mu + d_\mu^\dagger V_{\mu,ki} c_{ki} \right] = c^\dagger V d + d^\dagger V^\dagger c. \quad (\text{B.4})$$

$H_S$  est le hamiltonien du système et est une forme bilinéaire (c'est-à-dire que les interactions électron-électron sont négligées ou prises en compte par un champ moyen),  $H_L$  est le hamiltonien des contacts, et  $H_{LS}$  est le couplage entre le système et les contacts.  $d_\mu^\dagger$  ( $d_\mu$ ) est l'opérateur fermionique qui crée (annihile) un électron dans le système à l'état  $\mu$  dans une base arbitraire (un site du système, un spin, une bande électronique, etc...).  $h_{S\mu\nu}$  est un élément de matrice de  $h_S$  et peut être le potentiel d'un état donné quand  $\mu = \nu$  ou un terme de saut quand  $\mu \neq \nu$ . Les éléments hors diagonale dépendent de la géométrie du système et du matériau.  $c_{ki}^\dagger$  ( $c_{ki}$ ) crée (annihile) un électron avec un nombre d'onde transverse  $k$  dans un canal de contact  $i = (p, n)$ , où  $n$  est un canal du contact  $p$  (comprenant une bande électronique, un spin, etc...) et les relations de commutation s'écrivent  $\left[ c_{ki}^\dagger, c_{k'i'} \right]_+ = \delta_{kk'} \delta_{ii'}$ . Nous avons  $\epsilon_{ki} = \epsilon_i + \hbar^2 k^2 / 2m^*$ , avec  $m^*$  la masse effective des quasi-particules. L'élément de matrice de couplage  $V$  dépend de la nature de la jonction entre le système et le contact. Il peut être de type effet tunnel ou simplement le même couplage que l'on trouve au sein du système si les contacts sont faits du même matériau sans aucune séparation.

Le système est conduit à l'état hors équilibre quand il y a une différence dans les potentiels chimiques  $\mu_p$  des réservoirs. Sur le principe des vases communicants, un courant circule, et quand l'état stationnaire est atteint, un potentiel électrostatique auto-cohérent  $U(\mathbf{r})$  est créé. Ce potentiel est contenu dans la partie diagonale de  $h_S$ .

Dans la suite, nous calculons le courant en utilisant la technique des fonctions de Green hors équilibre, aussi connue sous le nom de fonctions de Green Keldysh.

## B.2 Écriture du courant

Nous commençons par écrire le courant dans le contact  $p$  qui est le nombre de charges élémentaires  $e$  qui le traversent par unité de temps

$$I_p(t) = -e \left\langle \frac{d}{dt} \mathcal{N}_p(t) \right\rangle, \quad (\text{B.5})$$

où  $\langle \dots \rangle = \text{Tr}[\rho \dots]$  est la moyenne thermique ( $\rho$  étant la matrice densité). Toutes les expressions des quantités physiques peuvent s'écrire comme monômes de  $c$  et  $c^\dagger$ . L'opérateur de nombre d'électrons est ainsi donné par

$$\mathcal{N}_p(t) = \sum_n \sum_k c_{kpn}^\dagger(t) c_{kpn}(t). \quad (\text{B.6})$$

Nous écrivons ensuite l'équation du mouvement

$$\frac{d}{dt} \mathcal{N}_p(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{N}_p(t), H], \quad (\text{B.7})$$

et le seul commutateur non nul est

$$[\mathcal{N}_p(t), H_{LS}] = \sum_{nk,\mu} \left[ c_{kpn}^\dagger(t) V_{kpn,\mu} d_\mu(t) - d_\mu^\dagger(t) V_{\mu,kpn} c_{kpn}(t) \right], \quad (\text{B.8})$$

ce qui nous mène à

$$I_p(t) = \frac{ie}{\hbar} \sum_{nk,\mu} \left[ \langle c_{kpn}^\dagger(t) V_{kpn,\mu} d_\mu(t) \rangle - \langle d_\mu^\dagger(t) V_{\mu,kpn} c_{kpn}(t) \rangle \right]. \quad (\text{B.9})$$

Nous portons maintenant notre attention au courant dans le conducteur. Le nombre de particules dans le conducteur est la somme sur tous les états :

$$\mathcal{N}_S(t) = \sum_{\mu} \mathcal{N}_{S\mu}(t). \quad (\text{B.10})$$

L'équation du mouvement pour l'opérateur du nombre d'électrons à l'état  $\mu$  s'écrit

$$\frac{d}{dt} \mathcal{N}_{S\mu}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{N}_{S\mu}(t), H], \quad (\text{B.11})$$

avec  $\mathcal{N}_{S\mu}(t) = d_\mu^\dagger(t) d_\mu(t)$ . Comme nous avons déjà calculé l'équation du mouvement pour un électron sautant entre le conducteur et les contacts à l'Eq. B.7 et que le commutateur  $[\mathcal{N}_{C\mu}(t), H_L]$  est nul, nous n'avons à calculer qu'un seul commutateur

$$[\mathcal{N}_{S\mu}(t), H_S] = \sum_{\mu'} \left[ d_\mu^\dagger(t) h_{S\mu\mu'} d_{\mu'}(t) - d_{\mu'}^\dagger(t) h_{S\mu'\mu} d_\mu(t) \right], \quad (\text{B.12})$$

et le commutateur avec  $H$  est donc

$$\begin{aligned} [\mathcal{N}_{S\mu}(t), H] &= \sum_{\mu'} \left[ d_\mu^\dagger(t) h_{S\mu\mu'} d_{\mu'}(t) - d_{\mu'}^\dagger(t) h_{S\mu'\mu} d_\mu(t) \right] \\ &+ \sum_{kpn} \left[ c_{kpn}^\dagger(t) V_{kpn,\mu} d_\mu(t) - d_\mu^\dagger(t) V_{\mu,kpn} c_{kpn}(t) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Nous introduisons ici l'opérateur de courant de lien

$$J_{\mu'\mu} = \frac{e}{i\hbar} \left[ d_\mu^\dagger(t) h_{S\mu\mu'} d_{\mu'}(t) - d_{\mu'}^\dagger(t) h_{S\mu'\mu} d_\mu(t) \right], \quad (\text{B.14})$$

qui décrit le courant de particules de l'état  $\mu'$  vers l'état  $\mu$ . De la même manière, nous avons le courant de lien entre l'état  $\mu$  dans le conducteur et l'état  $kpn$  dans le contact  $p$

$$J_{\mu,kpn} = \frac{e}{i\hbar} \left[ c_{kpn}^\dagger(t) V_{kpn,\mu} d_\mu(t) - d_\mu^\dagger(t) V_{\mu,kpn} c_{kpn}(t) \right]. \quad (\text{B.15})$$

L'équation de conservation s'écrit donc

$$e \frac{d}{dt} \mathcal{N}_{S\mu}(t) = \sum_{\mu'} J_{\mu'\mu} + \sum_{kpn} J_{\mu,kpn}, \quad (\text{B.16})$$

et la conservation du courant impose le fait que la somme des courants sur les contacts s'annule, de telle sorte que  $\sum_{kpn} J_{\mu,kpn} = 0$ . Nous avons finalement

$$e \frac{d}{dt} \mathcal{N}_{S\mu}(t) + \sum_{\mu'} J_{\mu\mu'} = 0. \quad (\text{B.17})$$

Dans le cas où le conducteur est un réseau carré bi-dimensionnel avec interactions entre premiers voisins ( $h_S$  est tri-diagonale) et  $\mu = (x_i, y_i)$  est un indice de site (et  $\mu' = (x_i, y_i) \pm \mathbf{e}_j$  un indice de site premier voisin avec  $\mathbf{e}_j$  un vecteur primitif du réseau et  $j = x, y$ ), nous pouvons écrire

$$e \frac{d}{dt} \mathcal{N}_{S(x_i, y_i)}(t) + \sum_{j=x, y} \left[ J_{(x_i, y_i), (x_i, y_i) + \mathbf{e}_j} + J_{(x_i, y_i), (x_i, y_i) - \mathbf{e}_j} \right] = 0, \quad (\text{B.18})$$

ou

$$e \frac{d}{dt} \mathcal{N}_{S(x_i, y_i)}(t) + \sum_{j=x, y} \left[ J_{(x_i, y_i), (x_i, y_i) + e_j} - J_{(x_i, y_i) - e_j, (x_i, y_i)} \right] = 0, \quad (\text{B.19})$$

qui est l'équation de conservation au site  $x_i, y_i$  : la variation du nombre d'électrons est la différence entre ce qui entre et ce qui sort du site. Il est également possible d'introduire des indices de bandes électroniques ou de spin, avec par exemple le courant de lien résolu en spin  $J_{\mu\mu'} = \sum_{\sigma\sigma'} J_{\mu\mu'}^{\sigma\sigma'}$ , où les  $\mu, \mu'$  sont les indices de sites et les  $\sigma, \sigma'$  sont les indices de spin.

## Annexe C

# Formalisme des fonctions de Green Keldysh

On définit la fonction de Green à une particule, temporellement ordonnée et à température nulle :

$$G(x, t; x', t') = -\frac{i}{\hbar} \frac{\langle \Psi_0 | T \{ \psi_H(x, t) \psi_H^\dagger(x', t') \} | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}. \quad (\text{C.1})$$

La mécanique quantique peut être représentée pertinemment de trois manières différentes :

- *La représentation de Schrödinger* : la dépendance temporelle est incluse dans la fonction d'onde et les opérateurs sont constants

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H\psi(t). \quad (\text{C.2})$$

- *La représentation de Heisenberg* : la dépendance temporelle est incluse dans les opérateurs et les fonctions d'ondes sont constantes

$$\mathcal{O}(t) = e^{iHt/\hbar} \mathcal{O}(0) e^{-iHt/\hbar}. \quad (\text{C.3})$$

- *La représentation d'interaction* (ou représentation de *Dirac*) : il s'agit d'une représentation intermédiaire entre les deux premières. Fonctions d'ondes et opérateurs portent chacun une partie de la dépendance temporelle des observables. Les fonctions d'ondes évoluent sous l'action de la partie « interaction » du hamiltonien

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad \psi_{\text{int}}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} \psi(0) = U(t) \psi(0), \quad (\text{C.4})$$

et les opérateurs évoluent sous l'action de la partie sans interaction du hamiltonien

$$\mathcal{O}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} \mathcal{O}(0) e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (\text{C.5})$$

La matrice  $S$  change  $\psi(t')$  en  $\psi(t)$  :

$$\psi(t) = S(t, t') \psi(t'), \quad S(t, t') = U(t) U^\dagger(t'). \quad (\text{C.6})$$

Comme les propriétés de groupe de la matrice  $S$  portent la loi de composition  $S(t, t') = S(t, t'') S(t'', t')$ , la matrice  $S$  peut être exprimée comme un produit ordonné temporellement

$$S(t, t') = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t d\tau H_{\text{int}}(\tau)}. \quad (\text{C.7})$$

Une difficulté naît de la définition de la fonction de Green : nous avons besoin de l'état fondamental du système  $|\Psi_0\rangle$  mais nous voulons le calculer avec la fonction de Green.

La solution est ici d'exprimer l'état fondamental en terme de l'état fondamental sans interaction  $|\Phi_0\rangle$ . Ceci correspond au théorème de Gell-Mann et Low

$$|\Psi_0\rangle = S(0, -\infty)|\Phi_0\rangle. \quad (\text{C.8})$$

La fonction de Green est donc

$$G(x, t; x', t') = -\frac{i}{\hbar} \frac{\langle \Phi_0 | T \{ S(\infty, -\infty) \psi_{\text{int}}(x, t) \psi_{\text{int}}^\dagger(x', t') \} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (\text{C.9})$$

À partir de là, un schéma perturbatif peut être développé pour les fonctions de Green. Pour cela, nous avons besoin de développer la matrice  $S$  en termes de  $H_{\text{int}}(t)$

$$S(\infty, -\infty) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n+1}}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots t_n T \{ H_{\text{int}}(t_1) \dots H_{\text{int}}(t_n) \}, \quad (\text{C.10})$$

Chaque  $H_{\text{int}}$  contient trois ou quatre opérateurs de champ. La valeur moyenne peut être évaluée avec

$$\langle \Phi_0 | T \{ \psi_{\text{int}}(t) \psi_{\text{int}}^\dagger(t') \psi_{\text{int}}^\dagger(t_1) \psi_{\text{int}}^\dagger(t_2) \psi_{\text{int}}(t_2) \psi_{\text{int}}(t_1) \} | \Phi_0 \rangle, \quad (\text{C.11})$$

et des termes d'ordres supérieurs similaires. Nous évaluons ces expressions avec le théorème de Wick, en sommant sur toutes les associations par paires. Les termes obtenus peuvent être exprimés à l'aide des diagrammes de Feynman.

Les diagrammes déconnectés sont exactement annulés par le dénominateur dans l'Eq. C.9. Le résultat est que les fonctions de Green peuvent être exprimées comme une somme sur les diagrammes connectés et topologiquement différents

$$G(x, t; x', t') = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots dt_n \langle \Phi_0 | T \psi_{\text{int}}(x, t) \psi_{\text{int}}^\dagger(x', t') H_{\text{int}}(t_1) \dots H_{\text{int}}(t_n) \Phi_0 \rangle_{\text{conn}}. \quad (\text{C.12})$$

Dans le régime hors équilibre, il n'y a aucune raison pour que le système revienne à son état initial pour des temps asymptotiquement longs. L'état à  $t = -\infty$  est en pratique souvent très différent de l'état à  $t = +\infty$ . En conséquence, la théorie hors équilibre ne devrait pas faire référence aux temps asymptotiquement longs.

Nous considérons un système hors équilibre dont le hamiltonien a la forme

$$H = h + H'(t). \quad (\text{C.13})$$

La partie indépendante du temps du hamiltonien peut être exprimée comme étant  $h = H_0 + H_{\text{int}}$ , où  $H_0$  peut être diagonalisé et  $H_{\text{int}}$  est la partie interaction et contient l'aspect à plusieurs corps du problème<sup>1</sup>. Nous supposons que la partie hors équilibre s'annule pour  $t < t_0$  et peut être un champ électrique, une excitation photonique, un couplage avec des contacts ayant des potentiels chimiques différents. Le transport électronique peut donc être décrit via ce formalisme, en incluant la géométrie du système dans  $h$  et le couplage avec des contacts hors équilibre dans  $H'(t)$ .

Nous prenons  $t_0 \rightarrow -\infty$  pour simplifier les calculs et pour mettre en avant la structure de la théorie hors équilibre.

Avant « d'allumer » la perturbation, le système est décrit par la matrice densité à l'équilibre thermique

$$\varrho(h) = \frac{e^{-\beta h}}{\text{Tr}[e^{-\beta h}]}. \quad (\text{C.14})$$

---

1. Les travaux exposés dans ce manuscrit ne présentent qu'un problème à une particule. On a donc  $h = H_0$ .

Pour des temps  $t \geq t_0$ , la valeur moyenne de l'observable  $O$  est donnée par

$$\langle O(t) \rangle = \text{Tr}[\varrho(h)O_H(t)]. \quad (\text{C.15})$$

$O$  est écrite en représentation de Heisenberg, en effet, l'indice  $H$  indique que la dépendance temporelle est gouvernée par le hamiltonien complet. La matrice densité à l'équilibre  $\varrho(h)$  utilisée n'est pas dépendante du temps. Ceci signifie que les degrés de liberté thermodynamiques contenus dans  $h$  ne suivent pas instantanément les variations rapides contenues dans  $H'(t)$ .

Comme dans le cas à l'équilibre, nous transformons la dépendance temporelle de  $O_H$  en une forme plus simple. Nous avons besoin d'éliminer deux opérateurs, la perturbation extérieure  $H'(t)$  et le terme d'interaction  $H_{\text{int}}$ . L'équilibre et le non équilibre peuvent être, avec les généralisations adéquates, structurellement équivalents.

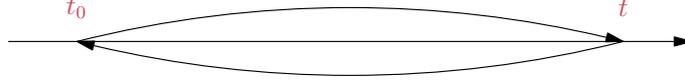


FIGURE C.1 – Contour  $C_t$

Nous modifions la dépendance temporelle de  $O_H$  par la dépendance temporelle de  $O_h$

$$O_H(t) = U_h^\dagger(t, t_0)O_h(t)U_h(t, t_0), \quad (\text{C.16})$$

où

$$U_h(t, t_0) = T \left\{ e^{-i \int_{t_0}^t dt' h(t')} \right\}, \quad (\text{C.17})$$

et  $H'_h(t)$  est la représentation d'interaction de  $H'(t)$ , c'est à dire,

$$H'_h(t) = e^{ih(t-t_0)}H'(t)e^{-ih(t-t_0)}. \quad (\text{C.18})$$

En termes de quantité ordonnées par contour, la transformation de  $O_H$  Eq. C.16 peut être réécrite

$$O_H(t) = T_{C_t} \left\{ e^{-i \int_{C_t} d\tau H'_h(\tau)} O_h(t) \right\}, \quad (\text{C.19})$$

et le contour  $C_t$  est décrit dans la Fig. C.1.

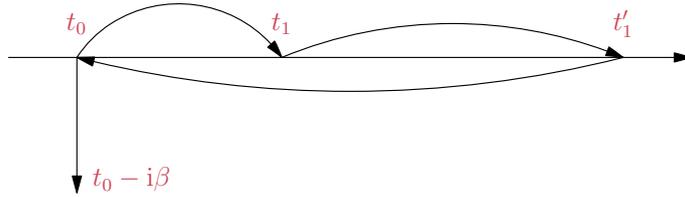


FIGURE C.2 – Contour  $C_v$

Nous introduisons la fonction de Green ordonnée par contour

$$G(x_1, t_1; x'_1, t'_1) = -i \langle T_{C_v} [\psi_H(x_1, t_1) \psi_H^\dagger(x'_1, t'_1)] \rangle, \quad (\text{C.20})$$

où  $T_{C_v}$  est l'opérateur d'ordonnancement par contour qui ordonne le temps sur le contour de Keldysh.

Une simplification est possible si nous posons  $t_0 \rightarrow -\infty$ . Si les interactions sont couplées adiabatiquement, la contribution provenant de la partie du contour  $[t_0, t_0 - i\beta]$  s'annule.

L'information perdue dans ce processus est reliée aux corrélations initiales, en effet, dans beaucoup de situations, cela se passe comme si la condition initiale avait été balayée par les interactions quand l'état stationnaire est atteint. Au contraire, si notre but est d'étudier la réponse transitoire, les corrélations initiales peuvent être importantes. Dans la suite, nous considérons la limite  $t_0 \rightarrow -\infty$ . Le contour vas donc de  $-\infty$  à  $+\infty$  ( $C_1$ ) et de  $+\infty$  à  $-\infty$  ( $C_2$ ). Dépendamment de la partie du contour où se situe le temps  $t_1$  et  $t'_1$ , la fonction de Green ordonnée par contour contient quatre fonctions différentes :

$$G(x_1, t_1; x'_1, t'_1) = \begin{cases} G_C(x_1, t_1; x'_1, t'_1), & t_1, t'_1 \in C_1 \\ G^>(x_1, t_1; x'_1, t'_1), & t_1 \in C_2, t'_1 \in C_1 \\ G^<(x_1, t_1; x'_1, t'_1), & t_1 \in C_1, t'_1 \in C_2 \\ G_{\bar{C}}(x_1, t_1; x'_1, t'_1), & t_1, t'_1 \in C_2 \end{cases} \quad (\text{C.21})$$

où  $G_C$  est la fonction de Green *causale*

$$\begin{aligned} G_C(x_1, t_1; x'_1, t'_1) &= -i\langle T[\psi_H(x_1, t_1)\psi_H^\dagger(x'_1, t'_1)] \rangle \\ &= -i\theta(t_1 - t'_1)\langle \psi_H(x_1, t_1)\psi_H^\dagger(x'_1, t'_1) \rangle + i\theta(t'_1 - t_1)\langle \psi_H^\dagger(x'_1, t'_1)\psi_H(x_1, t_1) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

$G^>$  est la fonction de Green *greater*

$$G^>(x_1, t_1; x'_1, t'_1) = -i\langle \psi_H(x_1, t_1)\psi_H^\dagger(x'_1, t'_1) \rangle, \quad (\text{C.23})$$

$G^<$  est la fonction de Green *lesser*

$$G^<(x_1, t_1; x'_1, t'_1) = +i\langle \psi_H^\dagger(x'_1, t'_1)\psi_H(x_1, t_1) \rangle, \quad (\text{C.24})$$

et  $G_{\bar{C}}$  est la fonction de Green *anti-causale*

$$\begin{aligned} G_{\bar{C}}(x_1, t_1; x'_1, t'_1) &= -i\langle \bar{T}[\psi_H(x_1, t_1)\psi_H^\dagger(x'_1, t'_1)] \rangle \\ &= -i\theta(t'_1 - t_1)\langle \psi_H(x_1, t_1)\psi_H^\dagger(x'_1, t'_1) \rangle + i\theta(t_1 - t'_1)\langle \psi_H^\dagger(x'_1, t'_1)\psi_H(x_1, t_1) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

Il y a en fait trois fonctions linéairement indépendante, car nous avons la relation  $G_C + G_{\bar{C}} = G^< + G^>$ . Nous pouvons définir les fonctions de Green avancée et retardée en termes des fonctions de Green *lesser* et *greater* comme

$$\begin{aligned} G^a(x_1, t_1; x'_1, t'_1) &= i\theta(t'_1 - t_1)\langle [\psi_H(x_1, t_1), \psi_H^\dagger(x'_1, t'_1)]_+ \rangle \\ &= \theta(t'_1 - t_1)[G^<(x_1, t_1; x'_1, t'_1) - G^>(x_1, t_1; x'_1, t'_1)], \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

et

$$\begin{aligned} G^r(x_1, t_1; x'_1, t'_1) &= -i\theta(t_1 - t'_1)\langle [\psi_H(x_1, t_1), \psi_H^\dagger(x'_1, t'_1)]_+ \rangle \\ &= \theta(t_1 - t'_1)[G^>(x_1, t_1; x'_1, t'_1) - G^<(x_1, t_1; x'_1, t'_1)]. \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

À partir de ces équations, nous avons finalement la relation  $G^r - G^a = G^> - G^<$ .

En retournant au modèle introduit dans l'annexe A, nous écrivons les fonctions de Green *lesser* couplant les contacts et le conducteur

$$G_{\mu, kpn}^<(t, t') = \frac{i}{\hbar} \langle c_{kpn}^\dagger(t') d_\mu(t) \rangle, \quad G_{kpn, \mu}^<(t, t') = \frac{i}{\hbar} \langle d_\mu^\dagger(t') c_{kpn}(t) \rangle, \quad (\text{C.28})$$

et la fonction de Green *lesser* couplant deux états dans le conducteur

$$G_{\mu\mu'}^<(t, t') = \frac{i}{\hbar} \langle d_{\mu'}^\dagger(t') d_\mu(t) \rangle, \quad G_{\mu'\mu}^<(t, t') = \frac{i}{\hbar} \langle d_\mu^\dagger(t') d_{\mu'}(t) \rangle. \quad (\text{C.29})$$

Ensuite, le courant dans le contact  $p$  Eq. B.9 devient

$$I_p(t) = \lim_{t' \rightarrow t} 2\text{Re} \left[ \sum_{nk, \mu} V_{kpn, \mu} G_{\mu, kpn}^<(t, t') \right], \quad (\text{C.30})$$

et le courant entre deux états dans le conducteur s'écrit

$$I_{\mu\mu'}(t) = \lim_{t' \rightarrow t} 2\text{Re} \left[ h_{S\mu'\mu} G_{\mu\mu'}^<(t, t') \right]. \quad (\text{C.31})$$

Comme pour l'Eq. B.18 et l'Eq. B.19, nous pouvons écrire le courant entre deux sites dans le cas où le conducteur est un réseau carré bi-dimensionnel avec interactions entre premiers voisins et  $\mu = (x_i, y_i)$  et  $\mu' = (x_i, y_i) \pm \mathbf{e}_j$  ( $j = x, y$ ) sont des indices de sites

$$I_{(x_i, y_i), (x_i, y_i) + \mathbf{e}_j}(t) = \lim_{t' \rightarrow t} 2\text{Re} \left[ h_{S(x_i, y_i) + \mathbf{e}_j, (x_i, y_i)} G_{(x_i, y_i), (x_i, y_i) + \mathbf{e}_j}^<(t, t') \right], \quad (\text{C.32})$$

et

$$G_{(x_i, y_i), (x_i, y_i) + \mathbf{e}_j}^<(t, t') = \frac{i}{\hbar} \left\langle d_{(x_i, y_i) + \mathbf{e}_j}^\dagger(t') d_{(x_i, y_i)}(t) \right\rangle. \quad (\text{C.33})$$

Nous retrouvons l'Eq. 2.64 en transformant la différence de temps en énergie. À l'état stationnaire, nous obtenons  $G_{\mu\mu'}^<(t - t', 0)$  et par transformée de Fourier nous retrouvons,

$$I_{\mu\mu'} = -2 \int d\epsilon \text{Re} \left[ h_{S\mu'\mu} G_{\mu\mu'}^<(\epsilon) \right]. \quad (\text{C.34})$$

## Annexe D

# Approximation de Born

L'approximation de Born est une approximation utile en théorie de la diffusion. Dans notre cas elle nous sert à calculer la self-énergie du désordre moyen pour déterminer la renormalisation des paramètres du hamiltonien (en particulier la masse topologique  $m$  et le potentiel chimique  $\mu$ ).

### D.1 Approximation de Born au second ordre

Nous allons décrire la façon d'obtenir l'approximation de Born au second ordre afin d'obtenir la self-énergie du désordre moyen [117]. Nous partons donc de la fonction de Green d'un système décrit par le hamiltonien  $H = H_0 + V$ , avec une configuration de désordre donnée  $V$ . Nous nous intéressons à des impuretés magnétiques, et s'il existe une magnétisation moyenne,  $\langle V \rangle$  est non nul, ce qui complique les expressions et le calcul. Le désordre auquel nous nous intéressons dans cette thèse étant donc vectoriel et non scalaire, contrairement au désordre d'Anderson, nous allons nous placer en champ moyen pour rendre la moyenne du potentiel nulle :  $\langle V \rangle = 0$ . Pour ce faire, nous effectuons le changement de variable suivant, correspondant à un système en champ moyen :

$$\begin{aligned}\tilde{H}_0 &= H_0 - \langle \tilde{V} \rangle, \\ \tilde{V} &= V + \langle \tilde{V} \rangle,\end{aligned}\tag{D.1}$$

et on ajoutera le champ moyen  $\langle \tilde{V} \rangle$  à la self-énergie obtenue à la fin du calcul,

$$\tilde{\Sigma} = \Sigma + \langle \tilde{V} \rangle.\tag{D.2}$$

La fonction de Green retardée (avancée) pour une configuration de désordre donnée s'écrit,

$$G^{r(a)}(\epsilon) = [\epsilon \pm i\eta - H]^{-1} = [\epsilon \pm i\eta - H_0 - V]^{-1}.\tag{D.3}$$

Dans la suite nous simplifions les notations en incorporant la partie imaginaire  $\pm i\eta$  dans l'énergie  $\epsilon$  et nous écrivons la fonction de Green du système libre (sans désordre),

$$G_0 = [\epsilon - H_0]^{-1}.\tag{D.4}$$

Nous avons les relations suivantes entre la fonction de Green d'un système désordonné et la fonction de Green du système libre :

$$\begin{aligned}G &= [G_0^{-1} - V]^{-1}, \\ G_0 &= [G^{-1} + V]^{-1}.\end{aligned}\tag{D.5}$$

À partir de l'identité  $(A + B)^{-1} = A^{-1} [\mathbb{1} - B(A + B)^{-1}]$  nous obtenons l'équation de Dyson suivante

$$\begin{aligned} G &= G_0 [\mathbb{1} + V(G_0^{-1} - V)^{-1}] \\ &= G_0 + G_0 V G, \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

où  $G_0$  donne le propagateur libre et  $G$  le propagateur contenant toutes les interactions possibles en termes des diagrammes de Feynman. À partir de cette dernière équation nous pouvons écrire les différents ordres de perturbation,

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(1) : \quad G_1 &= G_0 + G_0 V G_0, \\ \mathcal{O}(2) : \quad G_2 &= G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0, \\ &\dots \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Nous allons maintenant effectuer la moyenne de la fonction de Green sur les configurations de désordre

$$\langle G \rangle = \langle [\epsilon - H_0 - V]^{-1} \rangle, \quad (\text{D.8})$$

où  $\langle \dots \rangle$  est la moyenne sur les configurations de désordre (position des impuretés et orientation de leurs spins). La self-énergie du désordre  $\Sigma$  est, par définition, donnée par l'équation :

$$\langle G \rangle = [\epsilon - H_0 - \Sigma]^{-1}, \quad (\text{D.9})$$

de sorte que la self-énergie puisse être écrite comme  $\Sigma = G_0^{-1} - \langle G \rangle^{-1}$ . À partir de l'Eq. D.6 nous écrivons

$$\langle G \rangle = G_0 + G_0 \langle V G \rangle, \quad (\text{D.10})$$

ce qui devient, au second ordre en perturbation (avec  $\langle G_0 V G_0 \rangle = 0$ ),

$$\langle G \rangle = G_0 + G_0 \langle V G_0 V \rangle G_0, \quad (\text{D.11})$$

et après inversion nous obtenons

$$\langle G \rangle^{-1} = G_0^{-1} [\mathbb{1} - G_0 \langle V G_0 V \rangle G_0 (G_0 + G_0 \langle V G_0 V \rangle G_0)^{-1}]. \quad (\text{D.12})$$

Finalement, à partir de la définition  $\Sigma = G_0^{-1} - \langle G \rangle^{-1}$  nous écrivons,

$$\begin{aligned} \Sigma &= \langle V G_0 V \rangle G_0 [G_0 - G_0 \langle V G_0 V \rangle G_0]^{-1} \\ &= \langle V G_0 V \rangle G_0 \langle G \rangle^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Nous ne pouvons rien faire de cette équation telle quelle, nous allons devoir considérer la théorie des perturbations au sens des diagrammes de Feynman. Nous ne détaillerons pas les calculs mais nous allons montrer les idées principales.

Au deuxième ordre, la fonction de Green moyenne s'écrit

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(2) : \quad \langle G \rangle_2 &= G_0 + \langle G_0 V G_0 V G_0 \rangle, \\ &= G_0 + G_0 \langle V G_0 V \rangle G_0, \\ &= G_0 + G_0 \Sigma_2 G_0, \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

ce qui en terme de diagrammes de Feynman se traduit par



FIGURE D.1 – Représentation en diagrammes de Feynman de  $\langle G \rangle_2$  avec le propagateur libre  $G_0$  (le trait rouge reliant deux points) et l'interaction avec le désordre  $G_0 \langle V G_0 V \rangle G_0$ .

À l'ordre deux, la self-énergie est donc donnée par

$$\Sigma_2 = \langle VG_0V \rangle. \quad (\text{D.15})$$

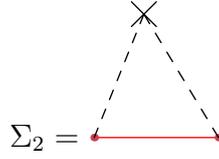


FIGURE D.2 – Représentation en diagramme de Feynman de la self-énergie  $\Sigma_2$ .

## D.2 Approximation de Born au second ordre auto-cohérente

Chaque ordre supérieur à l'ordre deux contiendra le bloc  $\Sigma_2$  trouvé précédemment, ainsi qu'une série d'autres diagrammes. Nous nous limiterons aux diagrammes contenant tous les blocs de type  $G_0\Sigma_2G_0$ ,  $G_0\Sigma_2G_0\Sigma_2G_0$ ,  $G_0\Sigma_2G_0\Sigma_2G_0\Sigma_2G_0$  etc... Ceci correspond à l'approximation des diagrammes non croisés. La fonction de Green moyenne dans cette approximation s'écrit donc, à l'aide des diagrammes de Feynman :



FIGURE D.3 – Représentation en diagrammes de Feynman de  $\langle G \rangle$  dans l'approximation des diagrammes non croisés. On obtient une infinité de termes comportant le bloc  $\Sigma_2$ .

L'expression de l'approximation de Born au second ordre peut être rendue auto-cohérente en substituant  $G_0$  par  $\langle G \rangle$  [117], soit

$$\Sigma_2 = \left\langle V \left[ G_0^{-1} - \Sigma_2 \right]^{-1} V \right\rangle. \quad (\text{D.16})$$

Cette équation peut-être ensuite évaluée numériquement en l'écrivant sous la forme itérative

$$\Sigma_2^{k+1} = \left\langle V \left[ G_0^{-1} - \Sigma_2^k \right]^{-1} V \right\rangle, \quad (\text{D.17})$$

où  $\Sigma_2^0 = 0$ . En pratique, on cherche une fonction extrêmement singulière, et nous appliquons une stratégie de résolution par méthode de sous relaxation afin d'adoucir la solution :

$$\Sigma_2^{k+1} = p\Sigma_2^{k+1} + (1-p)\Sigma_2^k, \quad (\text{D.18})$$

où  $p$  est le coefficient de sous relaxation que l'on ajuste afin d'obtenir la bonne convergence de la solution (en pratique nous prenons  $p = 0.5$ ). Avec cette méthode, il convient d'avoir une idée du résultat que nous cherchons car la convergence peut parfois être difficile à obtenir. On arrêtera l'itération lorsque le résultat (les grandeurs physiques recherchées) aura suffisamment convergé. Les calculs de la Sect. 2.4.2 ont été effectués à l'aide de cette méthode afin de rechercher les paramètres renormalisés  $\bar{\mu}_{\uparrow\downarrow}$  et  $\bar{m}_{\uparrow\downarrow}$ .

## Annexe E

# Implémentation de l'algorithme multi-terminaux

Comme nous l'avons vu précédemment, si nous voulons concevoir un programme effectuant les algorithmes décrits, il va nous falloir créer un dictionnaire des tranches d'échantillons et des sites au sein des tranches. L'idée est donc d'effectuer en premier lieu le dictionnaire des tranches, en partant des contacts, jusqu'aux sites les plus éloignés de ceux-ci. Le code devra évidemment s'adapter à la taille de l'échantillon en  $N_x$  et  $N_y$ , au nombre de contacts, à leur largeur et à leur position sur l'échantillon (on prendra soin de ne pas avoir un contact plus large que l'échantillon). De même que dans le cas à deux terminaux, nous ajoutons des zones tampons entre les contacts et l'échantillon qui pourra contenir du désordre. Nous pouvons voir à la Fig. E.1 un exemple de dictionnaire de  $N = 4$  couches.

0	0	1	1	1	1	0	0
0	0	2	2	2	2	0	0
1	2	3	3	3	3	2	1
1	2	3	4	4	3	2	1
1	2	3	4	4	3	2	1
1	2	3	4	4	3	2	1
1	2	3	3	3	3	2	1
0	0	2	2	2	2	0	0
0	0	1	1	1	1	0	0

FIGURE E.1 – Dictionnaire des tranches pour un échantillon de dimensions  $N_x = 4$  et  $N_y = 5$ , relié à quatre contacts (dont la largeur correspond à la largeur du côté de l'échantillon auquel ils sont connectés) munis de zones tampons ayant une épaisseur de deux tranches (sites indexés 1 et 2). Les 0 définissent des portions en dehors de l'échantillon et des contacts, il ne font pas partie du système.

Nous allons ensuite indexer les sites à l'intérieur de chaque tranche, ce qui nous permettra d'écrire les matrices des fonctions de Green. Indexer les sites selon une spirale permet d'obtenir facilement des matrices tri-diagonales, ce qui rend la vérification de l'algorithme plus simple et accélère éventuellement les calculs (via les optimisations des bibliothèques LAPACK). Cette méthode permet donc de ranger facilement les potentiels sur sites dans la diagonale de la matrice et de placer également très simplement les matrices de saut d'un site à un autre, comme on peut le voir dans la Fig. E.3.

```
Dictionnaire de la tranche n =      3
  0      0      0      0      0      0      0      0      0
  0      0      0      0      0      0      0      0      0
  0      0      5      6      7      8      0      0      0
  0      0      4      0      0      9      0      0      0
  0      0      3      0      0      10     0      0      0
  0      0      2      0      0      11     0      0      0
  0      0      1      14     13     12     0      0      0
  0      0      0      0      0      0      0      0      0
  0      0      0      0      0      0      0      0      0
```

FIGURE E.2 – Dictionnaire des sites au sein de la tranche numéro 3. Les sites sont indexés suivant une spirale, ce qui est utile pour obtenir des matrices tridiagonales.

Pour écrire les matrices de saut entre les couches cela est également simple : il suffit de regarder quel site de la couche  $n$  est en contact avec quel site de la couche  $n - 1$  et d'utiliser le numéro attribué aux sites pour ranger les matrices de saut afin d'écrire  $H_{n-1,n}$ . On peut vérifier cela avec la Fig. E.5 et en comparant avec les Fig. E.4 et Fig. E.2.

```
g^(-1)-E=
-e 1 -ty 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -tx
-tyT -e 2 -ty 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 -tyT -e 3 -ty 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 -tyT -e 4 -ty 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 -tyT -e 5 -tx 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 -txT -e 6 -tx 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 -txT -e 7 -tx 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 -txT -e 8 -tyT 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 -ty -e 9 -tyT 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 -ty -e10 -tyT 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 -ty -e11 -tyT 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -ty -e12 -txT 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -tx -e13 -txT
-txT 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -tx -e14
```

FIGURE E.3 – Représentation graphique effectuée via le terminal de la matrice  $(g_3^{[3,3]})^{-1} - \epsilon$  ( $\epsilon$  étant noté E dans le terminal). Les eXX (où XX est le numéro du site de la tranche) sont les matrices  $4 \times 4$  de potentiel sur site, les tx et ty sont les matrices  $t_x, t_y$  (de dimension  $4 \times 4$ ) de saut en direction  $x$  et  $y$ , et les txT et tyT sont les transposées conjuguées de ces dernières.

```
Dictionnaire de la tranche n-1 =      2
  0      0      0      0      0      0      0      0      0
  0      0      6      7      8      9      0      0      0
  0      5      0      0      0      0      10     0      0
  0      4      0      0      0      0      11     0      0
  0      3      0      0      0      0      12     0      0
  0      2      0      0      0      0      13     0      0
  0      1      0      0      0      0      14     0      0
  0      0      18     17     16     15     0      0      0
  0      0      0      0      0      0      0      0      0
```

FIGURE E.4 – Dictionnaire des sites au sein de la tranche numéro 2. De même que pour la tranche numéro 3, les sites sont indexés suivant une spirale.

```

t_hop =
tx  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
0   tx 0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
0   0  tx 0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
0   0  0  tx 0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
0   0  0  0  tx 0  0  0  0  0  0  0  0  0
0   0  0  0  0  tyT 0  0  0  0  0  0  0  0
0   0  0  0  0  0  tyT 0  0  0  0  0  0  0
0   0  0  0  0  0  0  tyT 0  0  0  0  0  0
0   0  0  0  0  0  0  0  txT 0  0  0  0  0
0   0  0  0  0  0  0  0  0  txT 0  0  0  0
0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  txT 0  0  0
0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  txT 0  0
0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  ty  0
0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  ty
ty  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0

```

FIGURE E.5 – Représentation graphique via le terminal de la matrice de saut  $H_{2,3}$  entre la couche 2 et la couche 3.

# Bibliographie

- [1] N. F. Mott, “The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals,” *Proceedings of the Physical Society. Section A*, vol. 62, no. 7, pp. 416–422, 1949.
- [2] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Physical Review*, vol. 109, no. 5, 1958.
- [3] C. Kittel, “Introduction to solid state physics,” *University of California, Berkeley*, 2005.
- [4] E. H. Hall, “On a new action of the magnet on electric currents,” *American Journal of Science*, vol. Series 3 Vol. 19, no. 111, pp. 200–205, 1880.
- [5] M. Dyakonov and V. Perel, “Possibility of orienting electron spins with current,” *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, vol. 13, p. 467, 1971.
- [6] R. Landauer, “Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 1, pp. 223–231, July 1957.
- [7] T. Martin and R. Landauer, “Wave-packet approach to noise in multichannel mesoscopic systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 45, pp. 1742–1755, Jan 1992.
- [8] G. W. Semenoff, “Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 53, pp. 2449–2452, Dec 1984.
- [9] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, “Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds,” *Phys. Rev. B*, vol. 29, pp. 1685–1694, Feb 1984.
- [10] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films,” *Science*, vol. 306, pp. 666–669, 10 2004.
- [11] K. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, “New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance,” *Physical Review Letters*, vol. 45, pp. 494–497, 08 1980.
- [12] F. D. M. Haldane, “Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels : Condensed-Matter Realization of the “Parity Anomaly”,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 61, pp. 2015–2018, Oct 1988.
- [13] C. L. Kane and E. J. Mele, “ $\mathbb{Z}_2$  Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 146802, Sep 2005.
- [14] C. L. Kane and E. J. Mele, “Quantum Spin Hall Effect in Graphene,” *Physical Review Letters*, vol. 95, no. 22, 2005.
- [15] Y.-M. Lin, K. A. Jenkins, A. Valdes-Garcia, J. P. Small, D. B. Farmer, and P. Avouris, “Operation of graphene transistors at gigahertz frequencies,” *Nano Letters*, vol. 9, no. 1, pp. 422–426, 2009. PMID : 19099364.

- [16] S. E. Skelton Spesyvtseva, S. Shoji, and S. Kawata, “Chirality-selective optical scattering force on single-walled carbon nanotubes,” *Phys. Rev. Applied*, vol. 3, p. 044003, Apr 2015.
- [17] M. Baibich, J. Broto, A. Fert, N. Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, “Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices,” *Physical Review Letters*, vol. 61, no. 21, p. 2472, 1988.
- [18] G. E. W. Bauer, A. Brataas, Y. Tserkovnyak, and B. J. van Wees, “Spin-torque transistor,” *Applied Physics Letters*, vol. 82, pp. 3928–3930, Jun 2003.
- [19] F. J. Jedema, A. T. Filip, and B. J. van Wees, “Electrical spin injection and accumulation at room temperature in an all-metal mesoscopic spin valve,” *Nature*, vol. 410, pp. 345–348, 03 2001.
- [20] C. Carbone and S. F. Alvarado, “Antiparallel coupling between Fe layers separated by a Cr interlayer : Dependence of the magnetization on the film thickness,” *Phys. Rev. B*, vol. 36, pp. 2433–2435, Aug 1987.
- [21] D. C. Ralph and M. D. Stiles, “Spin transfer torques,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 320, no. 7, pp. 1190–1216, 2008.
- [22] D. Bhowmik, L. You, and S. Salahuddin, “Spin Hall effect clocking of nanomagnetic logic without a magnetic field,” *Nat Nano*, vol. 9, pp. 59–63, 01 2014.
- [23] V. Fatemi, B. Hunt, H. Steinberg, S. L. Eltinge, F. Mahmood, N. P. Butch, K. Watanabe, T. Taniguchi, N. Gedik, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, “Electrostatic coupling between two surfaces of a topological insulator nanodevice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 206801, Nov 2014.
- [24] D. Pesin and A. H. MacDonald, “Spintronics and pseudospintronics in graphene and topological insulators,” *Nat Mater*, vol. 11, pp. 409–416, 05 2012.
- [25] K. Huang, *Statistical mechanics*. Wiley, 1987.
- [26] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, “Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells,” *Science*, vol. 314, pp. 1757–1761, 12 2006.
- [27] C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, “Quantum anomalous Hall effect in Hg(Mn)Te quantum wells,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 146802, 2008.
- [28] O. V. Yazyev, “Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 73, no. 5, p. 056501, 2010.
- [29] T. Ando, “Physics of graphene,” *Progress of Theoretical Physics Supplement*, vol. 176, pp. 203–226, 2008.
- [30] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, pp. 109–162, Jan 2009.
- [31] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, “Electronic transport in two-dimensional graphene,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 407–470, May 2011.
- [32] P. R. Wallace, “The band theory of graphite,” *Physical Review*, vol. 71, 05 1947.
- [33] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, “Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene,” *Nature*, vol. 438, pp. 197–200, 11 2005.
- [34] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, “Experimental observation of the quantum hall effect and berry’s phase in graphene,” *Nature*, vol. 438, pp. 201–204, 11 2005.

- [35] A. W. W. Ludwig, M. P. A. Fisher, R. Shankar, and G. Grinstein, “Integer quantum hall transition : An alternative approach and exact results,” *Phys. Rev. B*, vol. 50, pp. 7526–7552, Sep 1994.
- [36] J. H. Bardarson, J. Tworzydło, P. W. Brouwer, and C. W. J. Beenakker, “One-parameter scaling at the dirac point in graphene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 106801, Sep 2007.
- [37] K. Nomura, M. Koshino, and S. Ryu, “Topological delocalization of two-dimensional massless dirac fermions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 146806, Oct 2007.
- [38] C. W. J. Beenakker, “Colloquium : Andreev reflection and klein tunneling in graphene,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 80, pp. 1337–18, 10 2008.
- [39] A. Lherbier, B. Biel, Y.-M. Niquet, and S. Roche, “Transport length scales in disordered graphene-based materials : Strong localization regimes and dimensionality effects,” *Physical Review Letters*, vol. 100, pp. 036803–, 01 2008.
- [40] D. Withoff and E. Fradkin, “Phase transitions in gapless fermi systems with magnetic impurities,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 64, no. 15, p. 1835, 1990.
- [41] F. M. Hu, T. Ma, H.-Q. Lin, and J. E. Gubernatis, “Magnetic impurities in graphene,” *Physical Review B*, vol. 84, pp. 075414–, 08 2011.
- [42] V. V. Cheianov and V. I. Fal’ko, “Selective transmission of dirac electrons and ballistic magnetoresistance of n-p junctions in graphene,” *Physical Review B*, vol. 74, pp. 041403–, 07 2006.
- [43] J. Schwinger, “On gauge invariance and vacuum polarization,” *Phys. Rev.*, vol. 82, pp. 664–679, Jun 1951.
- [44] D. Allor, T. D. Cohen, and D. A. McGady, “Schwinger mechanism and graphene,” *Phys. Rev. D*, vol. 78, p. 096009, Nov 2008.
- [45] N. Vandecasteele, A. Barreiro, M. Lazzeri, A. Bachtold, and F. Mauri, “Current-voltage characteristics of graphene devices : Interplay between zener-klein tunneling and defects,” *Phys. Rev. B*, vol. 82, p. 045416, Jul 2010.
- [46] N. M. R. Peres, “*Colloquium* : The transport properties of graphene : An introduction,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, pp. 2673–2700, 2010.
- [47] D. A. Areshkin, D. Gunlycke, and C. T. White, “Ballistic transport in graphene nanostrips in the presence of disorder : Importance of edge effects,” *Nano Letters*, vol. 7, pp. 204–210, 2014/05/16 2006.
- [48] A. V. Rozhkov, G. Giavaras, Y. P. Bliokh, V. Freilikher, and F. Nori, “Electronic properties of mesoscopic graphene structures : Charge confinement and control of spin and charge transport,” *Physics Reports*, vol. 503, pp. 77–114, 6 2011.
- [49] V. K. Dugaev, V. I. Litvinov, and J. Barnas, “Exchange interaction of magnetic impurities in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 224438, Dec 2006.
- [50] L. Brey, H. A. Fertig, and S. Das Sarma, “Diluted graphene antiferromagnet,” *Physical Review Letters*, vol. 99, pp. 116802–, 09 2007.
- [51] M. Titov, “Impurity-assisted tunneling in graphene,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 79, no. 1, p. 17004, 2007.
- [52] B. Dóra and R. Moessner, “Nonlinear electric transport in graphene : Quantum quench dynamics and the schwinger mechanism,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 165431, Apr 2010.
- [53] H. C. Kao, M. Lewkowicz, and B. Rosenstein, “Ballistic transport, chiral anomaly, and emergence of the neutral electron-hole plasma in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 82, p. 035406, Jul 2010.

- [54] T. G. Rappoport, M. Godoy, B. Uchoa, R. R. dos Santos, and A. H. C. Neto, “Magnetic exchange mechanism for electronic gap opening in graphene,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 96, no. 2, p. 27010, 2011.
- [55] B. Uchoa, T. G. Rappoport, and A. H. Castro Neto, “Kondo quantum criticality of magnetic adatoms in graphene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, p. 016801, Jan 2011.
- [56] M. Hochbruck and C. Lubich, “On magnus integrators for time-dependent schrödinger equations,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 41, pp. 945–963, 01 2004.
- [57] B. Rosenstein, M. Lewkowicz, H. C. Kao, and Y. Korniyenko, “Ballistic transport in graphene beyond linear response,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 041416, Jan 2010.
- [58] T. Oka and H. Aoki, *Nonequilibrium Quantum Breakdown in a Strongly Correlated Electron System*, vol. 762, pp. 251–285. Springer Berlin / Heidelberg, 2009.
- [59] C. Zener, “Non-adiabatic crossing of energy levels,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, vol. 137, no. 833, pp. 696–702, 1932.
- [60] T. D. Cohen and D. A. McGady, “Schwinger mechanism revisited,” *Phys. Rev. D*, vol. 78, p. 036008, Aug 2008.
- [61] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge Univ Pr, 1997.
- [62] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, vol. Course of Theoretical Physics, vol. III. Oxford : Butterworth-Heinemann, 1977.
- [63] M. Lewkowicz and B. Rosenstein, “Dynamics of particle-hole pair creation in graphene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 106802, Mar 2009.
- [64] A. Weisse, G. Wellein, A. Alvermann, and H. Fehske, “The kernel polynomial method,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 78, pp. 275–306, Mar 2006.
- [65] M. Daghofer, N. Zheng, and A. Moreo, “Spin-polarized semiconductor induced by magnetic impurities in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 82, p. 121405, Sep 2010.
- [66] G. Schubert and H. Fehske, “Dynamical aspects of two-dimensional quantum percolation,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 245130, Jun 2008.
- [67] A. D. Mirlin and Y. V. Fyodorov, “Distribution of local densities of states, order parameter function, and critical behavior near the Anderson transition,” *Physical Review Letters*, vol. 72, pp. 526–529, 01 1994.
- [68] V. Dobrosavljević, A. A. Pastor, and B. K. Nikolić, “Typical medium theory of anderson localization : A local order parameter approach to strong-disorder effects,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 62, no. 1, p. 76, 2003.
- [69] G. Schubert, J. Schleede, K. Byczuk, H. Fehske, and D. Vollhardt, “Distribution of the local density of states as a criterion for anderson localization : Numerically exact results for various lattices in two and three dimensions,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 155106, Apr 2010.
- [70] J. Martin, N. Akerman, G. Ulbricht, T. Lohmann, J. H. Smet, K. von Klitzing, and A. Yacoby, “Observation of electron-hole puddles in graphene using a scanning single-electron transistor,” *Nat Phys*, vol. 4, pp. 144–148, 02 2008.
- [71] S. Adam, E. H. Hwang, V. M. Galitski, and S. Das Sarma, “A self-consistent theory for graphene transport,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 104, pp. 18392–18397, 11 2007.
- [72] G. Schubert and H. Fehske, “Metal-to-insulator transition and electron-hole puddle formation in disordered graphene nanoribbons,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 066402, Feb 2012.

- [73] J. H. Garcia, B. Uchoa, L. Covaci, and T. G. Rappoport, “Adatoms and Anderson localization in graphene,” *ArXiv e-prints*, Sept. 2013.
- [74] P. G. de Gennes, “Effects of double exchange in magnetic crystals,” *Physical Review*, vol. 118, 04 1960.
- [75] E. L. Nagaev, “Magnetic polarons (ferrons) of complicated structure,” *JETP Lett.*, vol. 74, no. 8, pp. 431–435, 2001.
- [76] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “Topological insulators and superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 1057–1110, 2011.
- [77] R. B. Laughlin, “Quantized Hall conductivity in two dimensions,” *Physical Review B*, vol. 23, 05 1981.
- [78] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, “Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, no. 6, pp. 405–408, 1982.
- [79] B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, “Quantum spin hall effect,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 106802, Mar 2006.
- [80] M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells,” *Science*, vol. 318, pp. 766–770, 11 2007.
- [81] A. Roth, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “Nonlocal Transport in the Quantum Spin Hall State,” *Science*, vol. 325, no. 5938, pp. 294–297, 2009.
- [82] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, “Topological insulators in three dimensions,” *Physical Review Letters*, vol. 98, pp. 106803–4, 03 2007.
- [83] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, “A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase,” *Nature*, vol. 452, pp. 970–974, 04 2008.
- [84] H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, “Topological insulators in Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> and Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> with a single Dirac cone on the surface,” *Nat. Phys.*, vol. 5, no. 6, pp. 438–442, 2009.
- [85] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, “Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface,” *Nat Phys*, vol. 5, pp. 398–402, 06 2009.
- [86] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J. H. Chu, Z. K. Liu, S. K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z. X. Shen, “Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, bi<sub>2</sub>te<sub>3</sub>,” *Science*, vol. 325, pp. 178–181, 07 2009.
- [87] N. Nagaosa and Y. Tokura, “Emergent electromagnetism in solids,” *Physica Scripta*, vol. 2012, no. T146, 2012.
- [88] X.-L. Qi, Y.-S. Wu, and S.-C. Zhang, “Topological quantization of the spin Hall effect in two-dimensional paramagnetic semiconductors,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 085308, Aug 2006.
- [89] T. Masson, “Geometrie differentielle, groupes et algebres de lie, fibers et connexions,” *Université Paris XI*, p. 190, 2001.
- [90] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, “Theory of the Topological Anderson Insulator,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 196805, Nov 2009.

- [91] J. Li, R.-L. Chu, J. K. Jain, and S.-Q. Shen, “Topological Anderson Insulator,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 136806, Apr 2009.
- [92] C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, “Experimental Observation of the Quantum Anomalous Hall Effect in a Magnetic Topological Insulator,” *Science*, vol. 340, no. 6129, pp. 167–170, 2013.
- [93] M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. Hughes, C.-X. Liu, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “The Quantum Spin Hall Effect : Theory and Experiment,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 77, no. 3, p. 031007, 2008.
- [94] A. Yamakage, K. Nomura, K.-I. Imura, and Y. Kuramoto, “Disorder-Induced Multiple Transition Involving  $\mathbb{Z}_2$  Topological Insulator,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 80, no. 5, p. 053703, 2011.
- [95] T. L. van den Berg, *Conductivité de spin et effets magnétiques dans les systèmes quantiques désordonnés*. PhD thesis, Université d’Aix-Marseille, 2012.
- [96] D. G. Rothe, R. W. Reinthaler, C.-X. Liu, L. W. Molenkamp, S.-C. Zhang, and E. M. Hankiewicz, “Fingerprint of different spin-orbit terms for spin transport in hgte quantum wells,” *New Journal of Physics*, vol. 12, no. 6, p. 065012, 2010.
- [97] A. Bhattacharjee, G. Fishman, and B. Coqblin, “Virtual bound state model for the exchange interaction in semimagnetic semiconductors such as  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ ,” *Physica B+C*, 1983.
- [98] J. K. Furdyna, “Diluted magnetic semiconductors,” *Journal of Applied Physics*, vol. 64, no. 4, pp. R29–R64, 1988.
- [99] N. J. Higham and H.-M. Kim, “Numerical analysis of a quadratic matrix equation,” *IMA Journal of Numerical Analysis*, vol. 20, no. 4, pp. 499–519, 2000.
- [100] B. K. Nikolic, L. P. Zarbo, and S. Souma, “Imaging mesoscopic spin hall flow : Spatial distribution of local spin currents and spin densities in and out of multiterminal spin-orbit coupled semiconductor nanostructures,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 075303, Feb 2006.
- [101] B. K. Nikolic, L. P. Zarbo, and S. Souma, “Spin Currents in Semiconductor Nanostructures : A Nonequilibrium Green-Function Approach,” *ArXiv e-prints*, July 2009.
- [102] Y. Mou, R. Xian-Jin, C. Yan, and W. Rui-Qiang, “An easy and efficient way to treat Green’s function for nano-devices with arbitrary shapes and multi-terminal configurations,” *Chinese Physics B*, vol. 20, no. 9, p. 097201, 2011.
- [103] R. Combescot, “A direct calculation of the tunnelling current. III. Effect of localized impurity states in the barrier,” 1971.
- [104] H. Jiang, L. Wang, Q.-f. Sun, and X. C. Xie, “Numerical study of the topological Anderson insulator in HgTe/CdTe quantum wells,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 165316, Oct 2009.
- [105] J. Song, H. Liu, H. Jiang, Q.-f. Sun, and X. C. Xie, “Dependence of topological Anderson insulator on the type of disorder,” *Phys. Rev. B*, vol. 85, p. 195125, May 2012.
- [106] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to percolation theory*. CRC press, 1994.
- [107] S.-Q. Shen, *Topological Insulators : Dirac Equation in Condensed Matter*, vol. 174. Springer, 2013.

- [108] Q. Meng, S. Vishveshwara, and T. L. Hughes, “Topological insulator magnetic tunnel junctions : Quantum hall effect and fractional charge via folding,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, p. 176803, Oct 2012.
- [109] J. Wang, B. Lian, H. Zhang, and S.-C. Zhang, “Anomalous Edge Transport in the Quantum Anomalous Hall State,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, p. 086803, Aug 2013.
- [110] W. Dan and X. Shi-Jie, “Influence of randomness and localization on rky interactions in diluted magnetic semiconductors,” *Chinese Physics Letters*, vol. 25, no. 3, pp. 1102–1105, 2008.
- [111] S. Chesi and D. Loss, “Rky interaction in a disordered two-dimensional electron gas with rashba and dresselhaus spin-orbit couplings,” *Physical Review B*, vol. 82, pp. 165303–, 10 2010.
- [112] Q. Liu, C.-X. Liu, C. Xu, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, “Magnetic impurities on the surface of a topological insulator,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 156603, Apr 2009.
- [113] B. Li, Q. Fan, F. Ji, Z. Liu, H. Pan, and S. Qiao, “Carrier dependent ferromagnetism in chromium doped topological insulator,” *Physics Letters A*, vol. 377, pp. 1925–1929, 10 2013.
- [114] J. Gao, W. Chen, X. C. Xie, and F.-C. Zhang, “In-plane noncollinear exchange coupling mediated by helical edge states in quantum spin hall systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 241302, Dec 2009.
- [115] A. Hernández, V. M. Apel, F. A. Pinheiro, and C. H. Lewenkopf, “Quantum electronic transport : Linear and nonlinear conductance from the Keldysh approach,” *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 385, pp. 148–160, 11 2007.
- [116] A. P. Jauho, “Introduction to the Keldysh Nonequilibrium Green Function Technique,” Oct 2006.
- [117] H. Bruus, “Introduction to many-body quantum theory in condensed matter physics,” *Oxford Graduate Texts*, 2002.

# Résumé

## Français

Dans cette thèse, nous étudions l'effet du désordre magnétique sur les propriétés de transport électronique du graphène et des isolants topologiques 2D de type HgTe. Le graphène et les isolants topologiques sont des matériaux dont les excitations électroniques sont assimilées à des fermions de Dirac sans masse. Ces matériaux présentent un grand intérêt pour remplacer le silicium dans les dispositifs électroniques, de par leurs propriétés de conduction : grande mobilité électronique (résistance nulle), possibilité de fabriquer des transistors à base de graphène fonctionnant à des fréquences de l'ordre du térahertz, manipulation du spin des porteurs avec les isolants topologiques pour fabriquer des dispositifs de spintronique. Nous nous proposons d'étudier l'influence du désordre magnétique pour deux raisons principales : la première est que les matériaux bi-dimensionnels contiennent une grande concentration de défauts et d'impuretés qui peuvent posséder un spin (une lacune dans le graphène peut par exemple acquérir un spin), la seconde est que le dopage de matériaux avec des espèces magnétiques peut être une façon de changer les propriétés de conduction (manipulation de courants de spin, modification de la conductance) à volonté en jouant sur la magnétisation du désordre.

L'influence des impuretés magnétiques sur les propriétés de transport du graphène est étudiée dans le régime de forts champs électriques. En conséquence de la production de paires électron-trou, la réponse devient non linéaire et dépend de la polarisation magnétique. Dans une phase paramagnétique, la symétrie par renversement du temps est statistiquement préservée, et les propriétés de transport sont similaires au cas sans impuretés. Au contraire, dans la phase antiferromagnétique, le système subit une transition entre un étalement super-diffusif et sous-diffusif du paquet d'ondes, mettant en évidence le développement d'états localisés. Ce régime critique est caractérisé par l'apparition d'états électroniques de géométrie multi-fractale près du gap. la densité locale d'états se concentre en larges patches ayant une corrélation charge-spin définie. Dans cet état, la conductivité tend vers la moitié de la conductivité linéaire du graphène pur.

Nous étudions une transition entre un isolant topologique bi-dimensionnel conducteur, caractérisé par une conductance  $G = 2$  (en quantum de conductance) et un isolant de Chern avec  $G = 1$ , induite par des impuretés magnétiques polarisées. Deux types de couplages, ferromagnétique et antiferromagnétique, sont considérés entre les bandes d'électrons et les bandes de trous. Nous démontrons que pour un désordre fort, une phase  $G = 1$  existe même pour l'ordre ferromagnétique, contrairement aux prédictions de l'approximation en champ moyen. Ce résultat est soutenu par des calculs numériques directs en utilisant la formule de Landauer du transport, et par des calculs analytiques sur la renormalisation du potentiel chimique et de la masse topologique en fonction de l'intensité du désordre, dans l'approximation de Born auto-cohérente au second ordre. La transition est reliée à la suppression d'un des canaux de conduction lié à un spin donné, pour un désordre assez fort, par la diffusion sélective en spin et la localisation.

## Anglais

In this thesis, we study the effect of a magnetic disorder on the electronic transport properties of graphene and HgTe-type 2D topological insulators. Graphene and topological insulators are materials whose electronic excitations are treated as massless Dirac fermions. These materials are of great interest to replace silicium in electronic devices, because of their conduction properties : great electronic mobility (zero resistance), possibility of manufacturing graphene-based transistors operating at terahertz frequencies, manipulation of the spin of carriers with topological insulators for making spintronic devices. We intend to study the influence of magnetic disorder for two main reasons : the first is that the two-dimensional materials contain a high concentration of defects and impurities that can have a spin (a defect in graphene can for example acquire a spin), the second is that doping materials with magnetic species can be a way to change conduction properties (manipulation of spin currents, modification of conductance) at will by changing the magnetization of the disorder.

The influence of magnetic impurities on the transport properties of graphene is investigated in the regime of strong applied electric fields. As a result of electron-hole pair creation, the response becomes nonlinear and dependent on the magnetic polarization. In the paramagnetic phase, time reversal symmetry is statistically preserved, and transport properties are similar to the clean case. At variance, in the antiferromagnetic phase, the system undergoes a transition between a superdiffusive to a subdiffusive spreading of a wave packet, signaling the development of localized states. This critical regime is characterized by the appearance of electronic states with a multifractal geometry near the gap. The local density of states concentrates in large patches having a definite charge- spin correlation. In this state, the conductivity tends to half the minimum conductivity of clean graphene.

We investigate a transition between a two-dimensional topological insulator conduction state, characterized by a conductance  $G = 2$  (in conductance quantum) and a Chern insulator with  $G = 1$ , induced by polarized magnetic impurities. Two kinds of coupling, ferro and antiferromagnetic, are considered with the electron and hole subbands. We demonstrate that for strong disorder, a phase  $G = 1$  exists even for ferromagnetic order, in contrast with the prediction of the mean field approximation. This result is supported by direct numerical computations using Landauer transport formula, and by analytical calculations of the chemical potential and mass renormalization as a function of the disorder strength, in the self-consistent Born approximation. The transition is related to the suppression of one of the spin conduction channels, for strong enough disorder, by selective spin scattering and localization.