



HAL
open science

Quelques mécanismes non conventionnels de l'effet Hall anormal

Mathieu Taillefumier

► **To cite this version:**

Mathieu Taillefumier. Quelques mécanismes non conventionnels de l'effet Hall anormal. Physique mathématique [math-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2006. Français. NNT: . tel-00012052

HAL Id: tel-00012052

<https://theses.hal.science/tel-00012052>

Submitted on 28 Mar 2006

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.

Université Joseph Fourier - Grenoble 1

Thèse en vue de l'obtention du grade de Docteur en physique
de l'Université Joseph Fourier - Grenoble 1
spécialité Physique
Présentée et soutenue publiquement par

Mathieu Taillefumier

le 14 Mars 2006

Quelques mécanismes non conventionnels de l'effet Hall anormal

Membres du jury :

Ian Campbell : président du jury
B. Douçot : rapporteur
A. Crépieux : rapporteur
C. Lacroix : directrice de thèse
P. Bruno : directeur de thèse
B. Canals :

Thèse préparée au sein
du Laboratoire Louis Néel - CNRS
25 avenue des martyrs, BP 166, 38042 Grenoble Cedex 05
<http://www.grenoble.cnrs.fr>
et
de l'Institut Max Planck for microstructure physics
Weinberg 2, 06120 Halle, Allemagne
<http://www.mpi-halle.de>

Remerciements

Quels sont les ingrédients indispensables pour faire une thèse. Prenez deux directeurs de thèse, Claudine Lacroix et Patrick Bruno, travaillant de préférence dans deux pays distincts, deux compagnons de route Benjamin Canals et Vitalii Dugaev pour répondre aux questions, trop peu nombreuses que le thésard (moi) peut poser. Ces quatre personnes ont su gérer d'une façon exemplaire mon caractère peu maléable. N'oublions pas les rapporteurs et les membres du jury qui ont passé un temps non négligeable à étudier ce manuscrit de thèse et poser des questions sur les points litigieux.

Le choix du lieu de travail a aussi son importance. J'ai eu l'occasion de travailler dans deux laboratoires différents tant au niveau des méthodes de travail que de l'atmosphère. La vie au laboratoire Louis Néel est gouvernée par cette bonne humeur toujours latente. Toujours est-il que cette ambiance est le fruit de chacun, membres permanents et temporaires. Il n'est pas possible de faire une liste complète de ce qui rend la vie et l'intégration si facile. Peut-être sont-ce les sorties labo (organisateur principal Olivier Fruchart) organisées à la dernière minute et décidée collégalement, peut-être le fait de manger avec les collègues des autres groupes de recherche, où encore, cette passion commune à pratiquement toutes les personnes du laboratoire, la montagne. La vie à l'institut Max Planck semble plus austère comparé à Grenoble, mais une fois la glace brisée, il s'avère que travailler dans cet institut et dans la ville de Halle est aussi agréable.

J'oublie quelque chose dans l'histoire, les amis, assez nombreux qui ont su rendre la vie aussi agréable que possible. Je cite quelques noms pêle-mêle, Pim's, Box et le Fure, des amis de longue date (DEA) qui ont su être là au moment opportun (quels fêtards ces trois-là). N'oublions pas Florent et Baptiste pour nos différentes randonnées décidées la veille pour le lendemain. La famille Fruchart, pour leurs invitations à diner ou aller en ballade. Viennent ensuite les habitués du philip's, en particulier Stéphanie, Xavier et Seb, qui m'ont fait découvrir et apprécier le billard. Gwillerm, Cécile, son frère Jean-Marc, Carine, Magali et Gunnar ont su donner de leur temps pour égayer la vie lors de mes séjours à Halle. N'oublions pas les membres de Grenoble Swing, pour avoir réussi à me faire danser (ils ont des arguments convaincants, la musique) et avoir partagé des moments inoubliables pendant les derniers mois de la rédaction (le GSDF 2005, le jour de l'an, etc...); les Vinatier avec qui j'ai partagé de très bon moments et qui m'ont offert l'hospitalité pendant les derniers mois de ma thèse. Enfin ma famille qui a toujours été là lorsque j'en ai eu besoin. J'ajoute un dernier nom à la liste de noms déjà longue, Maud pour son amitié et sa gentillesse.

Toutes ces personnes ont contribué d'une façon ou d'une autre à mener ce projet à son terme. Je les en remercie.

Table des matières

I	Introduction	vii
1	Introduction : l'effet Hall anormal	1
1.1	Origine de l'effet Hall	2
1.1.1	Effet Hall classique	2
1.1.2	Effet Hall dans les matériaux magnétiques	3
1.2	Mécanismes de l'effet Hall anormal	4
1.2.1	Rôle du couplage spin-orbite	4
1.2.2	Mécanismes extrinsèques	4
	Mécanisme de skew-scattering	4
1.2.3	Effet Hall intrinsèque	5
	Mécanisme de side-jump	5
	Contribution intrinsèque (Karplus et Luttinger)	6
	Nature topologique de l'effet Hall anormal	7
1.3	Conclusion	8
2	Introduction aux phases géométriques	9
2.1	Exemple : spin-1/2 dans un champ magnétique tournant	10
2.1.1	Modèle	10
2.1.2	Limite adiabatique	11
2.1.3	Évolution non adiabatique d'un état ψ : généralisation des phases de Berry	13
2.2	Cadre général	15
2.2.1	Notion d'espace des paramètres	15
2.2.2	Évolution d'un état quantique	16
2.2.3	Définition du critère d'adiabaticité	18
2.2.4	Calcul des phases de Berry dans l'approximation adiabatique	19
2.2.5	Spin-1/2 dans la limite adiabatique : deuxième version	20
2.2.6	Invariance des phases de Berry par rapport à une transformation de jauge	22
2.2.7	Limite non-adiabatique	23
2.2.8	Généralisation au cas d'un niveau d'énergie dégénéré	23
2.3	Conclusion	23
II	Effet Hall anormal	25
3	Effet Hall anormal intrinsèque en présence du couplage spin-orbite	27
3.1	Introduction	27

3.2	Modèle employé	28
3.2.1	Origine de l'effet Rashba	28
3.2.2	Hamiltonien total	28
3.2.3	Calcul de la fonction de Green moyenne	29
	Calcul du propagateur libre	29
	Calcul de la self-énergie et de la fonction de Green	30
3.3	Effet Hall anormal et topologie du spectre énergétique	31
3.3.1	Expression générale de la conductivité transverse	31
3.3.2	Approximations de calcul	31
3.3.3	Ordre des limites $\omega \rightarrow 0$ et $N_i \rightarrow 0$	32
3.3.4	Contribution des états profonds : Terme topologique	32
3.3.5	Contribution des états proches du niveau de Fermi	33
3.3.6	Corrections à la conductivité transverse : Corrections de vertex	34
3.3.7	Comparaison des deux contributions	38
3.4	Séparation des différentes contributions...	38
3.4.1	Contribution des états proches du niveau de Fermi	39
	Contribution des éléments diagonaux de la fonction de Green	39
	Contribution des éléments non-diagonaux de la fonction de Green	39
3.4.2	Contribution des états profonds : terme topologique	40
3.5	Conclusion	41
4	Effet Hall topologique	43
4.1	Introduction	43
4.2	Électrons itinérants en présence d'une texture d'aimantation	44
4.3	Conductivité transverse dans l'approximation adiabatique	45
4.3.1	Approximation adiabatique	45
4.3.2	Calcul de l'effet Hall	47
4.3.3	Cas non-adiabatique	48
4.4	Structure modèle	48
4.4.1	Caractérisation de la distribution magnétique	50
4.4.2	Calcul du champ topologique et du potentiel effectif	52
4.4.3	Propriétés du champ topologique	54
	Quantification du flux topologique sur une maille élémentaire	54
	Détermination du flux topologique traversant une maille élémentaire	55
4.4.4	Relation entre le flux ϕ_t et le nombre de singularités de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$	55
	Effet d'un champ magnétique extérieur	58
4.4.5	Choix du semi-conducteur	59
4.5	Conclusion	61
5	Effet Hall anormal induit par la chiralité de spin sur le réseau kagomé	63
5.1	Introduction	63
5.2	Modèle	65
5.2.1	Origine de l'effet Hall induit par la texture de spin	66
5.2.2	Définition du réseau kagomé	67
5.2.3	Paramètres du modèle	67
5.2.4	Diagonalisation du hamiltonien	68

5.3	Expression de la conductivité transverse	68
5.4	Résultats numériques	70
5.4.1	Structure de Bande et nombres de Chern associés	70
5.4.2	Calcul de $\sigma_{xy}(\varepsilon_f)$	72
5.4.3	Calcul de $\sigma_{xy}(J)$	72
5.4.4	Calcul de $\sigma_{xy}(\chi)$	75
5.5	Effet de la température	76
5.6	Effet d'un champ magnétique perpendiculaire au plan kagomé	78
5.7	Conclusion	78
 III Champs magnétiques périodiques		79
 6 Introduction générale		81
6.1	Études antérieures	81
6.1.1	Modulations électriques 1D et 2D	82
6.1.2	Modulations magnétiques 1D et 2D	83
6.2	Système étudié	84
 7 Électrons dans un gradient de champ magnétique constant		85
7.1	Hamiltonien Effectif	85
7.2	Propriétés du potentiel effectif	86
7.3	Résolution numérique du hamiltonien	87
7.4	Spectre énergétique	88
7.5	Confinement et trajectoires semiclassiques d'un électron	89
7.6	Densités de courant	90
7.7	Conclusion	91
 8 Dynamique d'un électron dans un champ magnétique périodique 2D		93
8.1	Présentation du système étudié	93
8.2	Méthode de résolution du hamiltonien	94
8.3	Réalisations expérimentales d'un champ $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ périodique	95
8.4	Résultats numériques	96
8.4.1	Spectre énergétique	97
8.4.2	Nature des états de Bloch	98
8.5	Présence de courants permanents	100
8.5.1	Courants permanents induits par l'effet Aharonov-Bohm	101
8.5.2	Relation entre un spectre chiral et l'existence de courants permanents	101
8.5.3	Retour sur les courants portés par des états de Bloch	103
8.6	Conclusion et perspectives	104
 9 Conclusion		107

IV	Annexes et bibliographie	109
A	Calculs divers	111
A.1	Calcul de la self-énergie	111
A.2	Calcul de σ_{xy}^I et σ_{xy}^{II}	112
A.3	Calcul de σ_{xy}^{II}	115
A.4	Conductivité transverse : Cas général	117
B	Calcul de ϕ_t	119
C	Transformation de jauge	125
C.1	Première méthode	125
C.2	Deuxième méthode	126

Plan du manuscrit

Ce manuscrit est divisé en huit chapitres distincts répartis en trois parties. Deux parties sont dédiées à l'effet Hall anormal tandis que la dernière partie discute la dynamique d'un gaz d'électrons dans un champ magnétique inhomogène.

Le premier chapitre de cette thèse est introduction à l'effet Hall anormal. Il décrit les mécanismes les plus connus et présente quelques points non encore résolus. Le deuxième chapitre présente la notion de phase de géométrie et plus particulièrement de phase de Berry. Il commence par un exemple pour lequel il est possible de faire les calculs analytiques puis finit par une présentation générale et plus formelle des phases de Berry.

Dans le troisième chapitre, nous étudions le rôle des impuretés dans l'effet Hall anormal. En utilisant un modèle de gaz d'électrons libres en présence de couplage spin-orbite, nous montrons, à l'aide du formalisme de Kubo, que les impuretés sont responsables d'une contribution supplémentaire à l'AHE qui ne dépend pas de la concentration en impuretés.

Dans le quatrième chapitre, nous étudions un modèle où l'effet Hall anormal est issu d'une texture magnétique contrôlable par application d'un champ magnétique extérieur. L'effet Hall induit par cette texture est caractérisé par des sauts de conductivité qui dépendent explicitement de la texture magnétique. Une expérience et quelques estimations numériques sont proposées.

Le rôle du mécanisme de chiralité de spin dans le composé pyrochlore $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ est discuté dans le chapitre 5. Le modèle proposé est un modèle d'électrons itinérants en interaction avec une texture magnétique non coplanaire et non colinéaire (chirale). Nous avons calculé la conductivité transverse par rapport à la chiralité de spin, au remplissage et la constante d'échange local et avons obtenu différents comportements par rapport à la chiralité de spin, au remplissage et la constante de couplage local.

Les trois derniers chapitres sont consacrés à la dynamique d'un gaz d'électrons en présence de champ magnétique inhomogène. Le sixième chapitre est une brève introduction sur les phénomènes observés expérimentalement dans les systèmes où une modulation électrique ou magnétique est appliquée. Dans le chapitre 7 nous décrivons la dynamique d'un gaz d'électrons soumis à un gradient de champ magnétique constant et montrons que les états électroniques sont localisés au voisinage des lignes de champ magnétique constant. Enfin le dernier chapitre décrit la dynamique d'un gaz d'électrons 2D en présence d'un champ magnétique $B(\mathbf{r})$ périodique et de valeur moyenne nulle. En calculant quelques états de Bloch aux points de haute symétrie, nous obtenons des états localisés au voisinage de lignes de champ $B(\mathbf{r}) = 0$ qui sont porteurs de courants permanents alors que la valeur moyenne de $B(\mathbf{r})$ est nulle.

Première partie

Introduction

Chapitre 1

Introduction : l'effet Hall anormal

Sommaire

1.1	Origine de l'effet Hall	2
1.1.1	Effet Hall classique	2
1.1.2	Effet Hall dans les matériaux magnétiques	3
1.2	Mécanismes de l'effet Hall anormal	4
1.2.1	Rôle du couplage spin-orbite	4
1.2.2	Mécanismes extrinsèques	4
1.2.3	Effet Hall intrinsèque	5
1.3	Conclusion	8

L'effet Hall, plus d'un siècle après sa découverte, est toujours un phénomène à l'étude autant d'un point de vue théorique qu'expérimental. Cet effet, correspondant à la présence d'une tension perpendiculaire à la direction du champ électrique et du champ magnétique (fig. 1), est un outil important pour la caractérisation des matériaux conducteurs ferromagnétiques ou non. Il permet de déterminer notamment la nature des porteurs de charge et leur concentration.

Le principe de base d'une mesure d'effet Hall est simple et consiste à mesurer une tension V_H , appelée tension de Hall, dans la direction perpendiculaire à la direction d'application du champ magnétique B et du courant I traversant l'échantillon (fig. 1-a). On définit la résistivité transverse $\rho_{xy} = V_H/I$ et la conductivité transverse σ_{xy} qui est liée à la résistivité transverse par la relation $\rho_{xy} = \sigma_{xy}/(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2)$ dans le cas d'un conducteur bidimensionnel. Un modèle simple, exposé dans la sec. 1.1.1, montre que la résistivité de Hall est proportionnelle au champ magnétique appliqué : $\rho_{xy} = R_0 B$. La constante R_0 , appelée constante de Hall, est proportionnelle à la concentration en porteurs et son signe dépend uniquement de la nature des porteurs à savoir des électrons ou des trous. Enfin la dépendance linéaire de la résistivité de Hall par rapport au champ magnétique B est valable uniquement pour les matériaux non magnétiques dans la limite d'un champ magnétique faible.

L'effet Hall dans les matériaux magnétiques, est généralement caractérisé par deux contributions dont l'origine est différente. Une loi empirique vérifiée sur un grand nombre de composés, décrit les variations de la résistivité transverse comme la somme de deux termes :

$$\rho_{xy} = R_0 B + R_s M. \tag{1.1}$$

Le premier terme, proportionnel au champ magnétique B , décrit l'effet Hall normal tandis que le

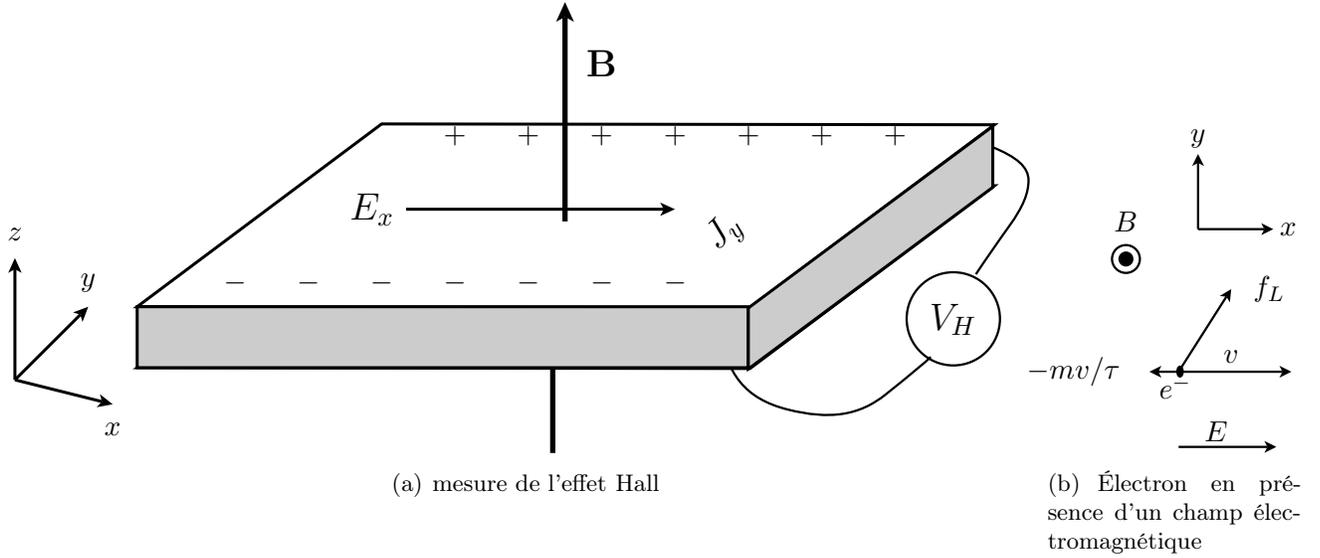


FIG. 1.1: (a) Principe de mesure de l'effet Hall. (b) Bilan des forces agissant sur un électron lorsqu'il est soumis à un champ électromagnétique et une force de frottement

deuxième terme, proportionnel à l'aimantation M décrit l'effet Hall anormal, la composante R_s dépendant du matériau considéré.

L'origine de l'effet Hall anormal a fait l'objet de discussions pendant plus de six décades. Il est admis maintenant que deux types de mécanismes contribuent à l'effet Hall anormal, les mécanismes extrinsèques (voir sec. 1.2.2), basés sur la diffusion des porteurs de charges par des impuretés ou des défauts et les mécanismes intrinsèques dans lesquels le concept de phase de Berry (voir chap. 2) joue un rôle important (cf sec. 1.2.3).

1.1 Origine de l'effet Hall

1.1.1 Effet Hall classique

Cet effet peut être compris en utilisant le modèle classique suivant aussi appelé modèle de Drude. Considérons un électron se déplaçant dans un plan soumis à l'action combinée d'un champ électrique constant \mathbf{E} , appliqué suivant l'axe $O\mathbf{x}$ par exemple et un champ magnétique \mathbf{B} de module constant, appliqué dans la direction $O\mathbf{z}$ (cf fig. 1-a). Pour compléter ce modèle, nous simulons la présence d'impuretés et de défauts par l'intermédiaire d'une force visqueuse proportionnelle à la vitesse de l'électron, $\mathbf{f} = -m\mathbf{v}/\tau$ où τ est un temps de relaxation dépendant du mécanisme de diffusion par des impuretés ou des défauts. Les champs électrique et magnétique agissent sur l'électron par l'intermédiaire de la force de Lorentz $\mathbf{f} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$. Elle influence le mouvement de l'électron en le déviant perpendiculairement à la direction de propagation. Après avoir fait le bilan des forces agissant sur la particule (fig. 1-b), nous obtenons l'équation différentielle suivante :

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B} - m\mathbf{v}/\tau, \quad (1.2)$$

où m est la masse de l'électron et e le quantum de charge (défini positivement). En régime stationnaire ($d\mathbf{v}/dt = 0$), l'éq. (1.2) admet une solution donnée par :

$$v_y = -\frac{e\tau E}{m} \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}, \quad (1.3)$$

où $\omega_c = eB/m$ est la pulsation cyclotron de l'électron. La composante v_x de la vitesse est donnée par l'expression suivante

$$v_x = -\frac{e\tau}{m} \frac{E}{1 + \omega_c^2 \tau^2}. \quad (1.4)$$

Le tenseur conductivité $\bar{\sigma}$ est défini par la relation $\mathbf{j} = \bar{\sigma}\mathbf{E}$ où $\mathbf{j} = -nev$ est la densité de courant. La conductivité transverse $\sigma_{xy}(B)$ est donc définie par

$$\sigma_{xy}(B) = \frac{j_y}{E_x} = \frac{ne^2\tau}{m} \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} = \sigma_0 \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}, \quad (1.5)$$

avec $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$. En calculant le tenseur résistivité $\bar{\rho} = \bar{\sigma}^{-1}$ nous trouvons que

$$\rho_{xy} = \rho_0 \frac{e\tau}{m} B = R_0 B, \quad (1.6)$$

avec $\rho_0 = \sigma_0^{-1}$ est la résistivité du matériau et $R_0 = \rho_0 \frac{e\tau}{m}$ la constante de Hall.

Le modèle décrit précédemment ne peut pas être appliqué directement aux matériaux usuels. Un calcul plus complet peut être réalisé en utilisant l'équation semi-classique de Boltzmann [67] ou la théorie quantique de la réponse linéaire [30]. Cependant, dans la limite d'un champ magnétique faible, les expressions obtenues en utilisant l'équation de Boltzmann ou la théorie de la réponse linéaire coïncident avec l'éq. (1.6).

1.1.2 Effet Hall dans les matériaux magnétiques

Les mesures de l'effet Hall dans les films et les matériaux massifs magnétiques, ne suivent pas la loi de l'effet Hall classique, en raison principalement de la présence d'une aimantation spontanée qui modifie le transport. Les mesures de résistivité de Hall dans ces composés, a permis de mettre en évidence deux contributions distinctes. La première contribution décrit l'effet Hall classique tandis que le deuxième terme dépend explicitement de la nature magnétique du composé. La loi empirique obtenue dans les matériaux ferromagnétiques a la forme suivante :

$$\rho_{xy} = R_0 B + R_s M, \quad (1.7)$$

où R_0 est la constante de l'effet Hall classique définie précédemment et R_s la constante de Hall anormale. La constante R_s , dans les matériaux usuels tel que le fer, suit une loi empirique de la forme

$$R_s = a\rho_{xx} + b\rho_{xx}^2, \quad (1.8)$$

ou a et b sont des constantes caractéristiques du matériau. Cette loi a été vérifiée expérimentalement sur un certain nombre de composés, mais n'est pas toujours applicables aux composés dont la structure magnétique est non triviale comme par exemple les manganites, les verres de spin où les composés ferromagnétiques frustrés tel que les composés pyrochlore ($\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$).

Les coefficients a et b dépendent du mécanisme responsable de l'effet Hall anormal. Les mécanismes d'origine diffusives tel que le mécanisme de diffusion asymétrique (aussi appelé skew-scattering) donnent une contribution linéaire et quadratique en ρ_{xx} [40, 39, 41, 4] tandis que le mécanisme de side-jump [52, 86, 53] qui est lui aussi un mécanisme diffusif donne une contribution quadratique uniquement. Enfin une troisième classe de mécanismes basés sur les phases de Berry donne une contribution quadratique en ρ_{xx} [76]. Les mécanismes les plus importants sont décrits un peu plus loin dans ce chapitre.

Dans cette thèse, nous abordons le problème des mécanismes caractéristiques de l'effet Hall anormal en utilisant une classification basée sur la contribution due à différents mécanismes lorsque la concentration en impuretés ou en défauts tend vers zéro. Comme indiqué un peu plus haut, il existe deux familles de mécanismes ; les mécanismes extrinsèques dont la contribution à la conductivité tend vers zéro lorsque la concentration en impuretés tend vers zéro et les mécanismes intrinsèques dont la contribution à la conductivité tend vers une valeur finie non nulle.

1.2 Mécanismes de l'effet Hall anormal

1.2.1 Rôle du couplage spin-orbite

L'origine du couplage spin-orbite est relié au déplacement faiblement relativiste des électrons dans le champ électrique créé par le noyau. Cela se traduit par la présence d'un champ magnétique supplémentaire $\mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \mathbf{E} \times \mathbf{v}$ dans la limite faiblement relativiste. Le champ magnétique créé se couple au spin de l'électron par l'intermédiaire de l'effet Zeeman. Le couplage spin-orbite s'écrit :

$$H_{S0} = -\frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}), \quad (1.9)$$

où m est la masse de l'électron et $\boldsymbol{\sigma}$ le vecteur de Pauli. Dans les solides, il existe deux sources de champ électrique, le champ électrique créé par le potentiel cristallin et le champ électrique créé par les impuretés. C'est le deuxième terme qui est responsable du mécanisme de skew-scattering.

1.2.2 Mécanismes extrinsèques

Les mécanismes extrinsèques sont des mécanismes donnant une contribution à la conductivité transverse qui dépend de la concentration en impuretés. La prise en compte de la diffusion des électrons par des impuretés est donc nécessaire pour calculer σ_{xy} .

Mécanisme de skew-scattering

Le mécanisme extrinsèque le plus connu est le mécanisme de diffusion asymétrique, aussi appelé mécanisme de skew-scattering. Il fut introduit par Smit en 1958 [40, 41] et a fait l'objet d'un nombre d'études importantes par la suite [39, 51]. Ce mécanisme, basé sur la diffusion de Mott (diffusion élastique) d'un électron par une impureté en présence de couplage spin-orbite, donne une contribution à ρ_{xy} de degré deux en ρ_{xx} [4].

Pour comprendre le mécanisme de skew-scattering, il faut considérer l'action du couplage spin-orbite sur la diffusion des électrons par des impuretés. En présence de couplage spin-orbite, la probabilité de diffusion d'un électron dépend de l'orientation relative de son spin et des vecteurs

d'ondes incident et diffusé. Il est possible d'illustrer ce résultat en partant du potentiel couplant un électron libre de spin σ et une impureté :

$$\langle \mathbf{k}, \alpha | W | \mathbf{k}', \beta \rangle = V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(1 + \frac{i\bar{\lambda}_c^2}{4} (\sigma_{\alpha\beta} \times \mathbf{k}') \cdot \mathbf{k} \right), \quad (1.10)$$

où $\bar{\lambda}_c = \hbar/mc$, $|k, \alpha\rangle$ sont les ondes planes décrivant un électron de spin α , $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ la transformée de Fourier du potentiel $V(\mathbf{r})$ créé par une impureté et

$$W(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}). \quad (1.11)$$

Le deuxième terme de l'éq (1.11) décrit le couplage spin-orbite entre l'électron et le champ électrique $\mathbf{E} = -\nabla V$ créé par l'impureté. En calculant la section différentielle efficace de diffusion $d\sigma/d\Omega$ à l'ordre un en $V(\mathbf{r})$ (approximation de Born), nous trouvons que celle-ci ne dépend pas de la polarisation du spin de l'électron. Dans ce cas, la diffusion est isotrope par rapport au degré de liberté de spin. Pour obtenir une section différentielle efficace de diffusion dépendante du spin de l'électron, il faut aller à l'ordre supérieur et calculer les corrections d'ordre deux en $V(\mathbf{r})$.

Il est possible de comprendre intuitivement ce qu'il se passe en considérant le schéma suivant : Prenons le vecteur d'onde incident et diffusé dans le plan xOy et le spin de l'électron dans la direction perpendiculaire au plan xOy . Le potentiel donné par l'éq. (1.10), est proportionnel au produit mixte $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k} \times \mathbf{k}') \cdot \mathbf{z}$ où $\sigma = \pm$. De part l'expression obtenue, la différence $W - V$ a un signe opposé pour les électrons de spin \uparrow et \downarrow , ce qui veut dire que la probabilité de diffusion sera différente pour les électrons de spin \uparrow et \downarrow dans une direction de diffusion donnée.

1.2.3 Effet Hall intrinsèque

Un mécanisme intrinsèque est un mécanisme dont la contribution à la conductivité transverse est finie et non nulle lorsque la concentration en impuretés tend vers zéro. La définition précédente ne donne pas de précisions supplémentaires quant au rôle des impuretés. En fait, il existe deux types de modèles pouvant décrire l'effet Hall intrinsèque, les modèles pour lesquels les impuretés ne sont pas nécessaires dans le calcul, tel que le modèle de chiralité de spin ou les modèles utilisant les phases de Berry et les modèles où la diffusion par les impuretés est un élément important (le side-jump par exemple).

Mécanisme de side-jump

Le mécanisme de side-jump a été proposé par Berger [52, 53, 86] pour expliquer la dépendance quadratique de la composante anormale de la résistivité de Hall R_s par rapport à ρ_{xx} . Ce mécanisme correspond physiquement à un décalage latéral du centre du paquet d'onde lors de la diffusion d'un électron par une impureté ou un défaut.

Le mécanisme de side-jump peut s'expliquer classiquement en considérant le modèle suivant. Prenons un électron de vitesse \mathbf{v} de spin σ évoluant dans un espace séparé en deux régions, dont une d'entre elle contient un champ électrique \mathbf{E} (cf fig. 1.2). Lorsque l'électron se déplace dans la région contenant le champ électrique, son spin se couple au champ électrique par l'intermédiaire du couplage spin-orbite. En utilisant l'éq. (1.9), nous trouvons que le Hamiltonien \mathcal{H} contient un terme proportionnel à l'impulsion :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(\mathbf{p}) + H_{SO}, \quad (1.12)$$

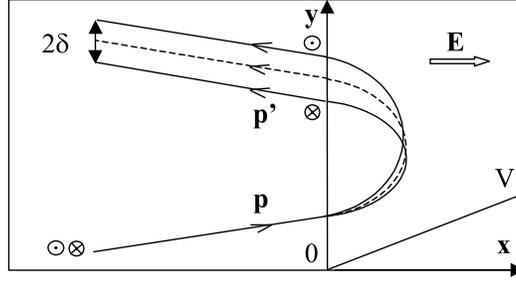


FIG. 1.2: Schéma classique illustrant le mécanisme de side-jump [4].

où \mathcal{H}_0 décrit le déplacement de l'électron en présence du champ électrique et H_{SO} est le terme de couplage spin-orbite. La vitesse de l'électron étant donnée par la relation $\mathbf{v} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}$, nous trouvons après remplacement de \mathcal{H} par l'éq. (1.12) que la vitesse contient un terme supplémentaire dépendant du spin de l'électron :

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{m} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{E}). \quad (1.13)$$

D'après l'expression (1.13), la vitesse contient un terme anormal perpendiculaire à la direction du spin et du champ électrique. Le décalage induit par le couplage spin-orbite, peut être estimé en calculant la quantité suivante :

$$\begin{aligned} \delta &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta v dt = -\frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E} dt = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} \\ &= -\frac{\bar{\lambda}_c^2}{4\hbar} \boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \end{aligned} \quad (1.14)$$

où $\bar{\lambda}_c = \hbar/mc$ est la longueur d'onde de Compton. Le calcul quantique du décalage du centre du paquet d'onde donne un résultat identique à l'éq (1.14) après avoir moyenné sur la direction finale \mathbf{p}' [4].

Enfin, il faut prendre en compte le couplage spin-orbite induit par le potentiel cristallin pour avoir le bon ordre de grandeur dans les matériaux réels, ce qui a pour effet d'augmenter le décalage induit d'un facteur de l'ordre de 10^4 [52].

Contribution intrinsèque (Karplus et Luttinger)

Ce mécanisme fut proposé pour la première fois par Karplus et Luttinger en 1954 [76]. En utilisant un modèle d'électrons de Bloch en présence d'aimantation et de couplage spin-orbite, ils montrent que la conductivité transverse contient un terme dépendant uniquement de la nature des états de Bloch. En traitant perturbativement le couplage entre le champ électrique et les électrons, ils montrent que la conductivité transverse s'écrit :

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{KL} &= \frac{ie^2}{\hbar V} \sum_{n\mathbf{k}} n_f(\varepsilon_{n\mathbf{k}}) \nabla_{\mathbf{k}} \times \langle n, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | n, \mathbf{k} \rangle \\ &= \frac{ie^2}{\hbar} \int [\nabla_{\mathbf{k}} \times \langle n, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | n, \mathbf{k} \rangle] \frac{d^3\mathbf{k}}{8\pi^3}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

où V est le volume, $|n, \mathbf{k}\rangle$ décrit un état de Bloch d'énergie $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ et n_f est la distribution de Fermi. De par la forme de l'éq. (1.15), cette contribution ne dépend pas seulement des états proches du niveau de Fermi comme dans le transport classique, mais de tous les états occupés situés en dessous du niveau de Fermi.

Le résultat obtenu par Karplus et Luttinger a connu un regain d'intérêt ces vingt dernières années grâce notamment à la découverte de l'effet Hall quantique entier et fractionnaire ainsi que l'effet Hall de spin et la découverte des phases géométriques (chap. 2).

Nature topologique de l'effet Hall anormal

L'interprétation de l'effet Hall anormal en termes de topologie de bande [60, 61] (c.-à-d. dans l'espace réciproque) et/ou topologie de l'aimantation (c.-à-d. dans l'espace réel) a été proposée tardivement. Le premier modèle introduisant la notion de topologie par l'intermédiaire des phases de Berry, fut proposé par Ye *et al* [48] pour expliquer l'effet Hall anormal dans les manganites. Le modèle nécessite un état magnétique métastable c.-à-d. une aimantation non colinéaire et le couplage spin-orbite pour que l'effet Hall anormal soit non nul. En présence de cette aimantation, la fonction d'onde d'un électron se déplaçant le long d'un contour fermé, acquiert une phase de Berry (dans l'espace réel) qui agit sur le transport comme un champ fictif comparable au champ magnétique habituel. En calculant l'effet Hall usuel en présence de ces deux champs, le champ magnétique extérieur et le champ induit par les phases de Berry, ils obtiennent un comportement de la résistivité en fonction de la température qui est en bon accord avec les expériences.

Le concept de champ fictif fut repris par Ohgushi *et al* [50] pour expliquer l'origine de l'effet Hall anormal dans le composé pyrochlore $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$. Ils décrivent le transport électronique par l'intermédiaire d'un modèle d'électrons itinérants couplés localement aux moments magnétiques portés par les atomes de Mo et obtiennent un effet Hall anormal non nul lorsque les moments de Mo sont dans une configuration non coplanaire. En étudiant la conductivité transverse dans $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$, Taguchi *et al* [100, 98, 34] proposent un mécanisme, appelé mécanisme de chiralité de spin, faisant intervenir directement la structure non coplanaire des moments magnétiques. Dans ce modèle, le champ fictif, que nous appellerons champ topologique dans la suite, est directement relié à l'orientation des moments de Mo par l'intermédiaire de la relation

$$b_t \propto \sum_{ijk} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k \rangle \mathbf{n}_{ijk},$$

où \mathbf{S}_i sont les moments magnétiques de Mo sur chaque site i , $\langle \dots \rangle$ la valeur moyenne du produit mixte sur l'ensemble des triangles, et \mathbf{n}_{ijk} un vecteur unitaire perpendiculaire au triangle formé par les sommets i, j et k . Ce mécanisme fut repris plus tard par Tatara et Kawamura [29, 33], qui l'ont appliqué aux verres de spin. Ce mécanisme est discuté dans le chap. 5.

Plusieurs problèmes demeurent toutefois et sont liés à l'identification de ce mécanisme. Mis à part dans les verres de spin où le mécanisme semble être clairement identifié [70], le cas des composés pyrochlores est plus complexe à cause de la présence des autres mécanismes responsables de l'effet Hall. Nous avons apporté des éléments de réponse en proposant un modèle théorique et une réalisation expérimentale où le mécanisme de chiralité de spin est identifiable ([68], chap. 4). Dans ce modèle, la texture de spin est remplacée par un champ magnétique inhomogène qui est couplé à un gaz d'électrons bidimensionnel par l'intermédiaire de l'interaction Zeeman. En calculant le champ topologique pour la distribution choisie, nous avons montré que la conductivité transverse présente des variations brutales lorsqu'un champ magnétique extérieur est appliqué.

1.3 Conclusion

L'effet Hall anormal est un phénomène dont l'origine est encore mal comprise et sujette à discussions. L'étude de l'effet Hall anormal dans les matériaux ferromagnétiques est d'autant plus complexe qu'il existe deux types de mécanismes dont l'origine est reliée à la diffusion des porteurs de charge par des impuretés ou des défauts ou à la topologie de l'état ferromagnétique.

Il est conventionnellement admis que deux types de mécanismes sont responsables de l'effet Hall anormal, les mécanismes extrinsèques tel que le mécanisme de skew-scattering, issus de la diffusion des porteurs de charge par des impuretés ou des défauts et les mécanismes intrinsèques, pour lesquels le concept de phase géométrique joue un rôle important. Plusieurs questions subsistent toutefois. Le rôle des impuretés et des défauts dans les mécanismes intrinsèques proposés ces dernières années et l'identification des contributions intrinsèques à l'effet Hall ne sont toujours pas éclaircis.

Chapitre 2

Introduction aux phases géométriques

Sommaire

2.1 Exemple : spin-1/2 dans un champ magnétique tournant	10
2.1.1 Modèle	10
2.1.2 Limite adiabatique	11
2.1.3 Évolution non adiabatique d'un état ψ : généralisation des phases de Berry	13
2.2 Cadre général	15
2.2.1 Notion d'espace des paramètres	15
2.2.2 Évolution d'un état quantique	16
2.2.3 Définition du critère d'adiabaticité	18
2.2.4 Calcul des phases de Berry dans l'approximation adiabatique	19
2.2.5 Spin-1/2 dans la limite adiabatique : deuxième version	20
2.2.6 Invariance des phases de Berry par rapport à une transformation de jauge	22
2.2.7 Limite non-adiabatique	23
2.2.8 Généralisation au cas d'un niveau d'énergie dégénéré	23
2.3 Conclusion	23

La notion de phase de Berry [11,56] et plus généralement de phase géométrique [97] a connu un développement important depuis ces vingt dernières années. Elle prend toute son importance dans les systèmes évoluant périodiquement dans le temps. Lorsque le système est dans un état quantique pur $|\psi(t)\rangle$ (c'est à dire un état qui est solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps) et évolue périodiquement dans le temps avec une période T , l'état $\psi(T)$ diffère de l'état initial par un terme de phase totale, composé d'un terme de *phase dynamique* dépendant de l'évolution des valeurs propres du hamiltonien au cours du temps et d'un terme de *phase géométrique* ne dépendant pas de la durée de l'évolution.

Il est possible d'avoir une idée intuitive des phases géométriques en considérant l'exemple suivant [58]. Prenons un stylo et disposons-le au pôle nord d'une sphère de telle façon à ce qu'il pointe dans la direction d'un méridien ; puis déplaçons le stylo parallèlement au méridien jusqu'à l'équateur. Une fois arrivé sur l'équateur, nous changeons de méridien en faisant attention de garder le stylo perpendiculaire à l'équateur, puis nous remontons le long de ce méridien jusqu'au pôle Nord. En faisant cette opération, Nous trouvons que le stylo pointe dans une direction différente de la direction initiale. L'angle séparant les deux directions, appelé aussi angle de Hannay (c'est la

quantité équivalente des phases géométriques en mécanique classique), ne dépend pas de la vitesse de déplacement du stylo, mais uniquement de sa trajectoire.

Les phases géométriques ne sont pas un phénomène purement quantique et ont été détectées en optique à partir de 1956. Trois ans après, Y. Aharonov et D. Bohm soulignent l'importance du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ en mécanique quantique, en montrant qu'il est possible d'obtenir des interférences électroniques avec l'application d'un champ magnétique [96]. Ce phénomène d'interférences, appelé aussi effet Aharonov-Bohm, est issu d'un terme de phase acquis par la fonction d'onde d'un électron lorsqu'il se déplace suivant deux parcours distincts joints à leurs extrémités en présence d'un potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Ce résultat est un cas particulier de phase géométrique. Bien que les phases géométriques aient été mesurées plusieurs fois notamment en optique, il faudra attendre le début des années 80, avec les travaux de Berry [56], pour en mesurer l'importance en mécanique quantique.

Les phases géométriques ont des applications dans divers domaines de la physique et de la chimie. Les applications sont nombreuses par exemple en matière condensée dans les domaines tel que le transport électronique quantique (effet Hall quantique et effet Hall anormal par exemple) et semi-classique [65,28] dans les métaux et les semiconducteurs et dans les propriétés piézoélectriques, ferroélectriques et diélectriques de certains composés [62].

Ce chapitre, basé pour l'essentiel sur les deux premiers chapitres de la référence [3], commence par un exemple où les phases de Berry sont calculables analytiquement à partir de l'équation de Schrödinger. L'exemple développé dans la section suivante est un modèle de spin-1/2 au repos soumis à un champ magnétique dont la direction dépend du temps.

La dernière partie de ce chapitre présente le cadre général des phases géométriques. Le sujet étant très vaste, nous nous limiterons uniquement au calcul des phases géométriques dans l'approximation adiabatique. Nous n'aborderons pas les différentes relations entre les phases géométriques et les mathématiques et ne traiterons pas les méthodes de calculs permettant d'évaluer les corrections non adiabatiques [11,57,8].

2.1 Exemple : spin-1/2 dans un champ magnétique tournant

Afin d'illustrer la notion de phase de Berry, nous considérons un exemple simple pour lequel le calcul est faisable analytiquement. L'exemple que nous considérons est un système quantique constitué d'un spin-1/2 au repos en interaction avec un champ magnétique de module constant dont la direction dépend du temps. Le schéma de principe de ce modèle est représenté sur la figure 2.1.

2.1.1 Modèle

Considérons un électron de spin-1/2 au repos soumis à un champ magnétique tournant de période ω dépendant du temps $\mathbf{B}(t) = B_0 (\sin \alpha \cos(\omega t), \sin \alpha \sin(\omega t), \cos \alpha)$ (Fig 2.1). Le hamiltonien décrivant l'interaction entre le champ magnétique et le spin est donné par :

$$\mathcal{H}(t) = \frac{ge}{2m} \mathbf{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar\omega_L}{2} \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha e^{-i\omega t} \\ \sin \alpha e^{i\omega t} & -\cos \alpha \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

où $\omega_L = geB_0/2m$ est la fréquence de Larmor et $\boldsymbol{\sigma}$ le vecteur de Pauli. Les valeurs propres de $\mathcal{H}(t)$ en chaque instant sont égales à $\pm \hbar\omega_L$ et les vecteurs propres associés sont donnés par les vecteurs

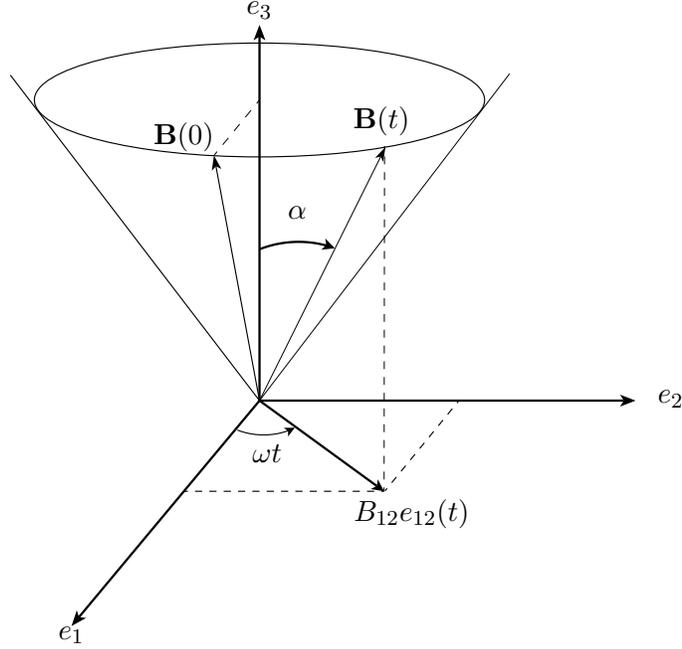


FIG. 2.1: Schéma de principe d'un moment magnétique en présence d'un champ magnétique tournant $\mathbf{B}(t)$.

suivants :

$$|\phi_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} e^{i\omega t} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |\phi_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\alpha}{2} \\ -\cos \frac{\alpha}{2} e^{i\omega t} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Clairement les vecteurs propres du hamiltonien $\mathcal{H}(t)$ donnés par l'éq. (2.2) *ne sont pas* solutions de l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \mathcal{H}(t)|\psi(t)\rangle. \quad (2.3)$$

Pour résoudre l'éq (2.3) nous allons calculer l'évolution d'un état quantique $|\psi(t)\rangle$ dans la limite adiabatique (sec. 2.1.2), c.-à-d. dans la limite où $\omega_L \gg \omega$. Nous trouverons que l'état $|\psi(T)\rangle$ ($T = 2\pi/\omega_L$) diffère de $|\psi(0)\rangle$ par un terme de phase composé d'une phase reliée à la dépendance temporelle du hamiltonien, la phase dynamique, et d'une phase dont l'origine est purement géométrique, la *phase de Berry*.

Enfin, nous résoudrons l'éq. (2.3) exactement, et calculerons la phase acquise par la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ après une période de révolution pour une condition initiale donnée. Nous trouverons que la phase totale acquise par l'état $|\psi(t)\rangle$ est toujours composée de deux phases, la *phase dynamique* et un terme de *phase géométrique* généralisant la notion de *phase de Berry* pour un système dont l'évolution est cyclique [97].

2.1.2 Limite adiabatique

Pour calculer l'état $|\psi(t)\rangle$ à un instant t quelconque, nous décomposons $|\psi(t)\rangle$ sur la base des vecteurs propres de $\mathcal{H}(t)$,

$$|\psi(t)\rangle = c_+(t)|\phi_+(t)\rangle + c_-(t)|\phi_-(t)\rangle, \quad (2.4)$$

et nous imposons $|\psi(t=0)\rangle = |\phi_+(0)\rangle$ comme condition initiale. En remplaçant l'éq. (2.4) dans l'éq. (2.3) puis après projection sur la base $\{|\phi_+(t)\rangle, |\phi_-(t)\rangle\}$, nous trouvons que les coefficients $c_{\pm}(t)$ vérifient le couple d'équations suivant :

$$i \begin{pmatrix} \dot{c}_+(t) \\ \dot{c}_-(t) \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} \omega_L & 0 \\ 0 & -\omega_L \end{pmatrix} - \mathcal{A}(t) \right] \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

où les éléments de matrice de $\mathcal{A}(t)$ sont donnés par

$$\mathcal{A}_{\pm,\pm}(t) = i \langle \phi_{\pm}(t) | \frac{d}{dt} | \phi_{\pm}(t) \rangle. \quad (2.6)$$

Dans ce cas précis, nous trouvons que la matrice $\mathcal{A}(t)$ est en fait indépendante du temps, mais ce résultat est spécifique au modèle développé¹. En remplaçant l'éq. (2.2) dans l'éq. (2.6), nous trouvons que

$$\mathcal{A}(t) = -\frac{\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 - \cos \alpha & -\sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha + 1 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Il faut résoudre le système d'équations différentielles couplées pour obtenir les solutions de l'éq. (2.3). Toutefois, le système d'équations (2.5) peut se simplifier lorsque $\omega_L \gg \omega$. Cette approximation, aussi appelée approximation adiabatique, décrit la situation physique où le spin de la particule précesse dans la direction du champ magnétique en chaque instant t , ou en d'autres termes, que la direction moyenne du spin de l'électron est alignée dans la direction du champ magnétique. On peut donc négliger les termes proportionnels à la composante $c_-(t)$ dans le système d'équations différentielles (2.5) :

$$i\dot{c}_+(t) = (\omega_L + \frac{\omega}{2}(1 - \cos \alpha))c_+(t). \quad (2.8)$$

Les solutions de cette équation sont de la forme

$$c_+(t) = e^{-i\omega_L t} e^{-i\frac{\omega}{2}(1 - \cos \alpha)t}. \quad (2.9)$$

ce qui nous donne la solution finale après remplacement de l'éq. (2.9) dans l'éq. (2.4) :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\omega_L t} e^{-i\frac{\omega}{2}(1 - \cos \alpha)t} |\phi_+(t)\rangle \\ &= e^{-i\omega_L t} e^{-i\gamma \frac{t}{T}} |\phi_+(t)\rangle, \end{aligned} \quad (2.10)$$

avec

$$\gamma = \pi(1 - \cos \alpha) \quad (2.11)$$

est une phase définie *modulo* 2π , qui dépend uniquement du chemin parcouru par l'état $\psi(t)$. En particulier, nous trouvons que la phase totale acquise par l'état $|\psi(t)\rangle$ après une période complète $T = \frac{2\pi}{\omega}$, est égale à un terme de phase dynamique $2\pi\omega_L/\omega$ décrivant l'évolution temporelle de l'état ψ plus un terme de phase $\gamma = \pi(1 - \cos \alpha)$ dont l'origine est purement géométrique. Le deuxième terme de phase, appelée *phase de Berry* dépend ni de la vitesse ni de la façon dont le champ magnétique a varié, dès l'instant que le spin de l'électron reste aligné dans la direction du champ magnétique.

¹Nous montrerons un peu plus loin dans ce chapitre que la matrice $\mathcal{A}_{n,n'}(t)$ peut être mise sous la forme d'un terme indépendant du temps, multiplié par la vitesse $d\mathbf{R}/dt$

Revenons sur l'hypothèse faite au début de cette section. Pour résoudre l'éq. (2.5), nous avons supposé que $\omega_L \gg \omega$. Cette hypothèse correspond physiquement à la situation où le champ magnétique change lentement de direction dans l'espace par rapport au temps mis par la direction moyenne du spin pour s'aligner dans la direction du champ. Comme nous allons le voir dans la suite, la limite adiabatique n'est qu'une approximation, et les corrections non adiabatiques peuvent être importantes dans certains cas. L'avantage de ce modèle est qu'il est possible d'obtenir les solutions exactes de l'équation de Schrödinger et de voir quelles sont les conséquences physiques des corrections non adiabatiques.

2.1.3 Évolution non adiabatique d'un état ψ : généralisation des phases de Berry

Le calcul de la phase géométrique effectué dans la sec. 2.1.2 est valable uniquement dans la limite adiabatique ($\omega_L \gg \omega$). Lorsque cette limite n'est plus valide, il faut résoudre l'éq. (2.3) et calculer la phase totale acquise par l'état $|\psi\rangle$ après une période T , en tenant compte des composantes $c_-(t)$ que nous avons négligé jusqu'à présent.

Les solutions $|\psi(t)\rangle$ de l'éq. (2.3) peuvent être calculées analytiquement en se mettant dans le référentiel tournant associé au champ magnétique $\mathbf{B}(t)$. Cette transformation s'écrit :

$$|\psi'(t)\rangle = e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} |\psi(t)\rangle. \quad (2.12)$$

En substituant l'éq. (2.12) dans l'éq. (2.3), nous trouvons que $|\psi'(t)\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger (2.3) avec le hamiltonien transformé

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \mathcal{H}(t) e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} - i\hbar e^{i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \\ &= \frac{\hbar\omega_L}{2} \left(\sin\alpha \sigma_x + \left(\cos\alpha - \frac{\omega}{\omega_L} \right) \sigma_z \right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Le Hamiltonien (2.13) peut s'écrire sous une forme différente mettant en évidence un axe particulier de quantification :

$$\mathcal{H}' = \frac{\hbar\Omega}{2} (\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (2.14)$$

avec

$$\Omega = \sqrt{\omega_L^2 + \omega^2 - 2\omega\omega_L \cos\alpha}, \quad (2.15)$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{e} &= \frac{\omega_L}{\Omega} \left(\cos\alpha - \frac{\omega}{\omega_L} \right) \mathbf{z} + \frac{\omega_L \sin\alpha}{\Omega} \mathbf{x} \\ &= \cos\tilde{\alpha} \mathbf{z} + \sin\tilde{\alpha} \mathbf{x}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

où l'angle $\tilde{\alpha}$ est l'angle entre le vecteur \mathbf{e} et \mathbf{z} :

$$\cos\tilde{\alpha} = \frac{\omega_L}{\Omega} \left(\cos\alpha - \frac{\omega}{\omega_L} \right) = \frac{\cos\alpha - \nu}{\sqrt{1 - 2\nu \cos\alpha + \nu^2}} \quad (2.17)$$

$$\sin\tilde{\alpha} = \frac{\omega_L}{\Omega} \sin\alpha = \frac{\sin\alpha}{\sqrt{1 - 2\nu \cos\alpha + \nu^2}}, \quad (2.18)$$

où $\nu = \omega/\omega_L$ est un paramètre sans dimension. Dans ces conditions, le spin de la particule précesse autour de la direction d'un champ magnétique effectif $B_{\text{eff}}(t)$ dont la direction est donnée par le vecteur \mathbf{e} et l'amplitude proportionnelle à Ω . Dans la limite adiabatique $\nu \rightarrow 0$, nous retrouvons que le vecteur \mathbf{e} tend vers la direction du champ magnétique $\mathbf{B}(t)$ et que les états stationnaires de l'équation de Schrödinger tendent vers les états propres du hamiltonien (2.1).

Le hamiltonien \mathcal{H}' étant indépendant du temps, les solutions de l'éq. (2.3) sont données dans le repère tournant par

$$|\psi'(t)\rangle = e^{-i\hbar^{-1}\mathcal{H}'t} |\psi'(0)\rangle. \quad (2.19)$$

En appliquant l'opérateur $e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}$ à l'éq. (2.19), nous obtenons la solution générale de l'éq. (2.3) dans le repère fixe :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} e^{i\frac{\Omega}{2}(\mathbf{e}\cdot\boldsymbol{\sigma})t} |\psi(0)\rangle, \quad (2.20)$$

où $|\psi(0)\rangle$ est la fonction d'onde de l'état à $t = 0$. Physiquement, les solutions de l'éq. (2.3) sont obtenues en appliquant une rotation d'angle Ωt suivant l'axe \mathbf{e} suivie d'une rotation d'angle ωt suivant l'axe Oz à $|\psi(0)\rangle$.

L'éq. (2.20) est solution de l'éq. (2.3) pour un état $|\psi(0)\rangle$ quelconque. Considérons l'état quantique décrit à l'instant $t = 0$ par

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\tilde{\alpha}}{2} \\ \sin \frac{\tilde{\alpha}}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Cet état est un état propre du hamiltonien (2.14) associé à la valeur propre $\Omega/2$. En remplaçant l'éq. (2.21) dans l'éq. (2.20), nous trouvons après une période $T = 2\pi/\omega$ que

$$|\psi(T)\rangle = e^{i\phi_{\text{tot}}} |\psi(0)\rangle. \quad (2.22)$$

Le terme de phase $\phi_{\text{tot}} = \pi(1 + \frac{\Omega}{\omega})$ apparaissant dans l'éq. (2.22) est la phase totale acquise après d'une période complète du champ magnétique. Elle contient deux contributions correspondant à la *phase dynamique* que l'on peut définir par [97]

$$\phi_{\text{dyn}} = \int_0^T \langle \psi(t) | \mathcal{H}(t) | \psi(t) \rangle dt, \quad (2.23)$$

et la phase géométrique que l'on déduit en soustrayant la phase dynamique ϕ_{dyn} à ϕ_{tot} . En utilisant les équations (2.14) (2.20) et (2.23), nous trouvons que

$$\phi_{\text{dyn}} = \pi \left(\frac{\Omega}{\omega} + \cos \tilde{\alpha} \right). \quad (2.24)$$

La phase géométrique se déduit alors par soustraction de ϕ_{dyn} à ϕ_{tot} :

$$\phi_{\text{geom}} = \pi(1 - \cos \tilde{\alpha}). \quad (2.25)$$

D'après l'éq. (2.25), la phase géométrique a la même forme que la phase de Berry donnée par l'éq. (2.11) dans la limite adiabatique mis à part le fait que α est remplacé par $\tilde{\alpha}$. Cette phase est la généralisation de la phase de Berry pour des systèmes évoluant cycliquement [97]. En prenant, la limite $\nu \rightarrow 0$, nous retrouvons le résultat obtenu dans la sec. 2.1.2 :

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \phi_{\text{geom}} = \gamma_{\text{Berry}}. \quad (2.26)$$

Cependant, il faut garder à l'esprit que la phase donnée par l'éq. (2.25), n'est pas une *phase de Berry* dans le sens où elle dépend à la fois de la géométrie du système et du paramètre ν .

La phase de Berry est un cas particulier de phase géométrique et est définie uniquement dans la limite adiabatique.

2.2 Cadre général

Cette section présente le cadre général lorsque le hamiltonien n'a pas de forme déterminée et dépend d'un ensemble de paramètres $\mathbf{R}(t)$. Avant de calculer explicitement la formule générale donnant la phase de Berry dans la limite adiabatique, nous allons définir la notion d'espace des paramètres, car cette notion revient tout au long de ce manuscrit.

2.2.1 Notion d'espace des paramètres

La dynamique quantique d'un système peut être décrite par un espace de Hilbert de dimension finie ou infinie, formé à partir de tous les états accessibles au système (ces états sont décrits par des fonctions d'ondes) et par un ensemble d'opérateurs linéaires agissant sur les états quantiques, tel que l'impulsion \mathbf{p} ou la position \mathbf{r} . Si le système quantique est décrit par un hamiltonien paramétré $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ où $\mathbf{R} = (R_1, R_2, \dots, R_n)$ est un ensemble de paramètres décrivant une configuration donnée, alors les opérateurs linéaires décrivant les quantités physiques dépendent de cet ensemble de paramètres. Les paramètres du hamiltonien peuvent être le champ magnétique ou électrique appliqué ou encore toute autre quantité qui peut être contrôlée de l'extérieur.

Nous posons la définition suivante :

Définition : l'espace des paramètres que nous noterons \mathcal{M} dans la suite, est l'ensemble regroupant toutes les configurations *possibles* de l'environnement extérieur que l'on notera par \mathcal{M} dans toute la suite de ce chapitre.

Un point $\mathbf{R} \in \mathcal{M}$ décrit donc une configuration donnée de l'environnement extérieur. En particulier, lorsque l'environnement extérieur évolue dans le temps, le point $\mathbf{R}(t)$ décrivant les variations de l'environnement, décrit une courbe $\mathcal{C} : [0, t] \rightarrow \mathcal{M}$ avec $\mathbf{R}(t) \in \mathcal{C}$. Dans ce chapitre, nous nous intéressons particulièrement à des systèmes dont l'évolution est cyclique, c.-à-d. aux courbes fermées \mathcal{C} définies par $R(0) = R(T)$ où T est la période d'un cycle.

Prenons quelques exemples afin d'illustrer cette définition.

1. Le premier exemple que nous considérons, est la généralisation du modèle développé dans la sec. 2.1.1 pour un spin-1/2. Le hamiltonien décrivant l'évolution d'un spin quantique \mathbf{S} dans un champ magnétique $\mathbf{B}(t) = B_0 \mathbf{R}(t)$ où $\mathbf{R}(t)$ est un vecteur unitaire pointant dans la direction du champ magnétique, est donné par

$$\mathcal{H} = H_0 - g\mu_B \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = H_0 - g\mu_B B_0 \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{R}}, \quad (2.27)$$

où H_0 est la partie du hamiltonien indépendante du champ magnétique \mathbf{B} et $\mu_B = e\hbar/2m$ le magnéton de Bohr. En posant $b = g\mu_B B_0$, nous pouvons écrire la partie dépendante de \mathbf{B} $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ comme

$$\mathcal{H}(\mathbf{R}) = g\mu_B B_0 \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{R}} = b \mathbf{S} \cdot \mathbf{R}, \quad (2.28)$$

et en déduire que l'espace des paramètres du hamiltonien est la sphère unité \mathcal{S}^2 car le vecteur \mathbf{R} est unitaire. la sphère \mathcal{S}^2 est définie par

$$\mathcal{S}^2 = \{\mathbf{R} \in \mathbb{R}^3 \mid \|\mathbf{R}\| = 1\}. \quad (2.29)$$

2. Le deuxième exemple est basé sur le hamiltonien décrivant l'interaction entre un gaz d'électrons bidimensionnel et un champ magnétique inhomogène $\mathbf{B}(\mathbf{r})$:

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 - g\mu_B \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.30)$$

où $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ est de module constant et a une direction qui dépend du point $\mathbf{r} = (x, y)$. L'espace des paramètres du hamiltonien semble donc être le plan \mathbb{R}^2 . Cependant, compte tenu de la forme de l'interaction, seule la direction du champ magnétique indiquée par le vecteur unitaire $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, est importante dans ce problème. $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ étant unitaire, il est possible d'utiliser les coordonnées sphériques pour repérer la direction de celui-ci et en déduire qu'à tout point $\mathbf{r} = (x, y)$ correspond un point sur la sphère unité \mathcal{S}^2 .

Dans la suite nous considérons un hamiltonien $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ dépendant d'un ensemble de paramètres \mathbf{R} qui évoluent dans un espace des paramètres \mathcal{M} quelconque.

2.2.2 Évolution d'un état quantique

Considérons un état $|\psi(t)\rangle$ représentant l'état quantique d'un système à l'instant t couplé à l'environnement extérieur. Le système est décrit par le hamiltonien $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ où \mathbf{R} est un ensemble de paramètres permettant de contrôler l'action de l'environnement extérieur sur le système quantique. L'équation d'évolution de l'état quantique $|\psi(t)\rangle$ est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \mathcal{H}(\mathbf{R}(t))\psi(t). \quad (2.31)$$

Ici l'état quantique $\psi(t)$ décrit un état quantique pur. L'équation d'évolution d'un état quantique quelconque (mélange statistique d'états) que l'on décrit souvent par l'opérateur densité [15, 9], est donnée par l'équation de Liouville-Von-Neumann [15]

$$i\hbar \frac{dW(t)}{dt} = [\mathcal{H}(\mathbf{R}(t)), W(t)], \quad (2.32)$$

où $W(t) = \sum_n p_n |u_n\rangle\langle u_n|$ est l'opérateur densité. p_n est la probabilité de trouver le système dans l'état u_n , et u_n est une famille d'états normés décrivant l'espace des états accessibles au système. L'éq. (2.32) est aussi applicable à un état quantique pur, à condition de remplacer l'opérateur densité par l'opérateur de projection $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$.

L'évolution d'un état décrivant un système non conservatif est gouvernée par l'éq. (2.31) ou (2.32) ainsi que par la dynamique de l'environnement par l'intermédiaire des paramètres \mathbf{R} que nous supposons dépendants du temps. Nous nous intéressons ici à un cas particulier où l'ensemble des paramètres \mathbf{R} évolue cycliquement dans le temps avec une période T ($\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$). En termes géométriques, le point $\mathbf{R}(t)$ décrit une courbe fermée \mathcal{C} dans l'espace des paramètres \mathcal{M} :

$$\mathcal{C} : \mathbf{R}(0) \rightarrow \mathbf{R}(t) \rightarrow \mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0) \quad (2.33)$$

Pour calculer l'évolution de l'état quantique $|\psi\rangle$, nous supposons d'une part qu'il est possible de définir une base de vecteurs propres $|n, \mathbf{R}\rangle$ de $\mathcal{H}(\mathbf{R}(t))$ définie implicitement en chaque instant t :

$$\mathcal{H}(\mathbf{R})|n, \mathbf{R}\rangle = E_n(\mathbf{R})|n, \mathbf{R}\rangle \quad (2.34)$$

$$\langle m, \mathbf{R}|n, \mathbf{R}\rangle = \delta_{nm}. \quad (2.35)$$

n est un nombre quantique (ou un ensemble de nombres quantiques) permettant de classer les états propres de $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ en chaque point \mathbf{R} . Nous supposons d'autre part que le spectre énergétique est discret et non dégénéré en chaque point $\mathbf{R} \in \mathcal{M}$. Enfin, les observables dépendantes de \mathbf{R} sont

prises univaluées ; ce qui veut dire que si une même valeur de \mathbf{R} est rencontrée plusieurs fois en des temps différents au cours du processus d'évolution, alors les *observables sont identiques* pour chaque occurrence.

Lorsque les paramètres $\mathbf{R}(t)$ de l'environnement extérieur évoluent cycliquement avec une période T , nous avons

$$\mathcal{H}(\mathbf{R}(T)) = H(\mathbf{R}(0)), \quad (2.36)$$

$$E_n(\mathbf{R}(T)) = E_n(\mathbf{R}(0)) \quad (2.37)$$

$$|n, \mathbf{R}(T)\rangle\langle n, \mathbf{R}(T)| = |n, \mathbf{R}(0)\rangle\langle n, \mathbf{R}(0)|, \quad (2.38)$$

où $|n, \mathbf{R}\rangle\langle n, \mathbf{R}|$ est l'opérateur de projection associé au vecteur $|n, \mathbf{R}\rangle$. La relation (2.38) implique seulement que

$$|n, \mathbf{R}(T)\rangle = e^{i\eta_n} |n, \mathbf{R}(0)\rangle, \quad (2.39)$$

où $e^{i\eta_n}$ est un facteur de phase arbitraire. Il est possible de définir une nouvelle base de vecteurs propres en appliquant la transformation de phase

$$|n, \mathbf{R}\rangle \rightarrow |n, \mathbf{R}'\rangle = e^{i\eta_n(R)} |n, \mathbf{R}\rangle, \quad (2.40)$$

où $e^{i\eta_n(R)}$ est une phase arbitraire, que l'on appelle souvent *transformation de jauge*. Cette nouvelle base vérifie bien la relation (2.38) et constitue une nouvelle base propre du hamiltonien $\mathcal{H}(\mathbf{R})$, que l'on peut utiliser pour étudier l'évolution de l'état $|\psi(t)\rangle$. En d'autres termes nous ne changeons pas la physique du problème en appliquant une transformation de jauge aux vecteurs de base $|n, \mathbf{R}\rangle$.

Plus généralement, une transformation de jauge est définie comme une opération unitaire U (conservant le produit scalaire) permettant de passer d'une base orthonormée \mathcal{B} à une autre base orthonormée \mathcal{B}' . Ici nous considérons uniquement les transformations de jauge $U(\mathbf{R})$ vérifiant les propriétés $U(\mathbf{R}(t_1)) = U(\mathbf{R}(t_2))$ avec $\mathbf{R}(t_1) = \mathbf{R}(t_2)$ pour $t_1 \neq t_2$. nous supposons de plus que les vecteurs de la nouvelle base sont aussi vecteurs propres du Hamiltonien $\mathcal{H}(\mathbf{R}(t))$, comme par exemple la transformation (2.40). Dans ce cas, la transformation de jauge appliquée est appelée transformation de jauge univaluée.

Pour calculer l'évolution de l'état $|\psi(t)\rangle$, nous le décomposons sur la base des vecteurs propres de $\mathcal{H}(\mathbf{R}(t))$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n, \mathbf{R}(t)\rangle, \quad (2.41)$$

Après avoir remplacé l'éq. (2.41) dans l'éq. (2.31), puis projeté sur les vecteurs $|m, \mathbf{R}(t)\rangle$, nous trouvons que les coefficients $c_n(t)$ sont solutions d'un système d'équations différentielles couplées :

$$\begin{aligned} i\dot{c}_m(t) &= \frac{E_m(R(t))}{\hbar} c_m(t) + i \sum_n c_n(t) \langle m, \mathbf{R}(t) | \frac{d}{dt} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad \forall m \\ &= \frac{E_m(R(t))}{\hbar} c_m(t) + \sum_n c_n(t) A_{mn}(t) \end{aligned} \quad (2.42)$$

où $\dot{c}_n(t) = \frac{dc_n(t)}{dt}$ et

$$\begin{aligned} A_{mn}(t) &= i \langle m, \mathbf{R}(t) | \frac{d}{dt} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \\ &= i \langle m, \mathbf{R}(t) | \frac{\partial}{\partial R_i} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \frac{dR_i(t)}{dt} \\ &= i \langle m, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

L'éq. (2.43) montre que les coefficients $A_{mn}(t)$ sont donnés par le produit d'un terme *indépendant du temps*; faisant intervenir le gradient des vecteurs de base $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$ par rapport \mathbf{R} ; multiplié par la dérivée de chaque composante $R_i(t)$ par rapport au temps. La dépendance temporelle de $A_{mn}(t)$ est contenue uniquement dans le terme de vitesse $\frac{d\mathbf{R}(t)}{dt}$ et non dans la dépendance des vecteurs de bases $|n, \mathbf{R}\rangle$ par rapport à \mathbf{R} . L'intégrale $\int_{t_2}^{t_1} A_{mn}(t) dt$ ne dépend pas de la vitesse d'évolution des paramètres $\mathbf{R}(t)$, mais uniquement du chemin suivi par \mathbf{R} et des valeurs $\mathbf{R}(t_1)$ et $\mathbf{R}(t_2)$.

En général, les termes proportionnels à $A_{mn}(t)$ ne peuvent pas être négligés excepté lorsque les vecteurs $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$ sont indépendants du temps. Dans ce cas, il est simple de montrer que $|\psi(t)\rangle$ s'écrit

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{i\hbar^{-1} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t)) dt} |n, \mathbf{R}(0)\rangle. \quad (2.44)$$

Le terme de phase apparaissant dans la somme (2.44) est appelé terme de *phase dynamique*. L'approximation précédente est trop restrictive et ne correspond généralement pas aux diverses situations rencontrées en physique. Il faut donc résoudre l'éq. (2.42), en tenant compte *a priori* de tous les coefficients $c_n(t)$, chose qui peut s'avérer très complexe en pratique.

Pour résoudre l'éq. (2.43) nous considérons une approximation moins restrictive, appelée *approximation adiabatique*. Considérons un état quantique $|\psi(\mathbf{R})\rangle$ se trouvant dans l'état quantique initial $|n, \mathbf{R}(0)\rangle$ constituant la base d'un sous espace vectoriel. Dans l'approximation adiabatique, l'état $|\psi(\mathbf{R}(t))\rangle$ reste dans le même sous-espace vectoriel qu'initialement, c.-à-d.

$$|\psi(\mathbf{R}(t))\rangle \langle \psi(\mathbf{R}(t))| = |n, \mathbf{R}(t)\rangle \langle n, \mathbf{R}(t)|, \quad \forall t \quad (2.45)$$

où $|\psi(t)\rangle$ est l'état quantique du système. L'éq. (2.45) dit que $|\psi(t)\rangle$ diffère de l'état $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$ par un terme de phase. Dans ce cas, il est possible négliger les termes en $c_m(t)$ avec $m \neq n$ dans l'éq. (2.41) :

$$|\psi(t)\rangle = c_n(t) |n, \mathbf{R}(t)\rangle. \quad (2.46)$$

En remplaçant l'éq. (2.46) dans l'éq. (2.31), nous trouvons que

$$\dot{c}_n(t) = -i \left(\frac{E_n(\mathbf{R}(t))}{\hbar} + \langle n, \mathbf{R}(t) | \frac{d}{dt} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \right) c_n(t). \quad (2.47)$$

L'approximation adiabatique peut être formulée autrement en comparant les termes non diagonaux $|A_{nm}(t)|$ par rapport à la quantité $|E_n - E_m|/\hbar$. Si $|A_{nm}(t)| \ll |E_n - E_m|/\hbar$, alors les termes couplant les coefficients $c_m(t)$ peuvent être négligés dans le système d'équations (2.42). En toute rigueur, l'expression (2.47) est valable uniquement dans la limite où $|A_{nm}(t)| \ll |E_n - E_m|/\hbar$, $\forall m \neq n$.

2.2.3 Définition du critère d'adiabaticité

La remarque précédente permet de définir précisément le critère d'adiabaticité. L'approximation adiabatique est une bonne approximation tant que $\hbar |A_{mn}(t)| / |E_n - E_m| \ll 1$, $\forall m \neq n$. On peut montrer que les coefficients $A_{mn}(t)$ s'écrivent,

$$A_{mn}(t) = \frac{\langle m, \mathbf{R}(t) | \frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} |n, \mathbf{R}(t)\rangle}{E_n(\mathbf{R}(t)) - E_m(\mathbf{R}(t))} \quad \forall m \neq n, \quad (2.48)$$

et en déduire que le paramètre d'adiabaticité ν peut être défini par

$$\nu = \sup \left[\frac{\hbar |A_{nm}(t)|}{|E_m(t') - E_n(t')|} \text{ tq } n \neq m, t' \in [0, t] \right]. \quad (2.49)$$

Le critère d'adiabaticité $\hbar |A_{mn}(t)| / |E_n - E_m| \ll 1$ peut donc être remplacé par [8] :

$$\nu \ll 1. \quad (2.50)$$

L'approximation adiabatique est une bonne approximation si et seulement si la relation (2.50) est vérifiée. Dans le cas contraire il faut tenir compte de tous les coefficients $c_m(t)$ pour calculer les solutions de l'éq. (2.31).

Pour illustrer ce qu'est le critère d'adiabaticité, nous considérons l'exemple du spin-1/2 traité dans la sec. 2.1.1. Le calcul des coefficients $A_{nm}(t)$ est relativement simple et l'on trouve que $A_{nm}(t) = -i\frac{\omega}{2} \sin \alpha$ pour $n \neq m$. Les valeurs propres de $E_m(t)$ sont indépendantes du temps et la différence entre les valeurs propres $E_+ - E_-$, est égale à $\hbar\omega_L$. En utilisant l'éq. (2.49), nous trouvons la même expression que l'expression obtenue précédemment pour le spin-1/2 évoluant dans un champ magnétique tournant : $\nu = \omega/\omega_L$. L'approximation adiabatique est applicable lorsque la fréquence de rotation du champ magnétique est petite devant la fréquence de Larmor.

2.2.4 Calcul des phases de Berry dans l'approximation adiabatique

Dans la suite nous considérons que le critère (2.50) est vérifié. L'équation décrivant l'évolution la composante $c_n(t) = \langle n, \mathbf{R}(t) | \psi(t) \rangle$ est donnée par l'éq. (2.47) et les solutions s'écrivent :

$$c_n(t) = e^{-i \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t)) dt} e^{i\gamma_n(t)}. \quad (2.51)$$

En remplaçant l'éq. (2.51) dans l'éq. (2.46), nous trouvons finalement que

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t)) dt} e^{i\gamma_n(t)} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (2.52)$$

avec

$$\gamma_n(t) = \int_0^t \langle n, \mathbf{R}(t') | \frac{d}{dt'} |n, \mathbf{R}(t')\rangle dt'. \quad (2.53)$$

Le terme de phase apparaissant dans l'éq. (2.52) a deux contributions. La première contribution $\int_0^t E_n(\mathbf{R}(t)) dt$ est le terme de phase dynamique usuel, qui décrit l'évolution temporelle de l'état quantique. Le deuxième terme $\gamma_n(t)$ peut s'écrire sous une forme faisant intervenir uniquement le chemin \mathcal{C} parcouru par le point $\mathbf{R}(t)$ dans l'espace des paramètres \mathcal{M} :

$$\gamma_n(t) = \int_0^t \langle n, \mathbf{R}(t') | \frac{d}{dt'} |n, \mathbf{R}(t')\rangle dt' \quad (2.54)$$

$$= \int_0^t \langle n, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt'} dt' \quad (2.55)$$

$$= \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} \langle n, \mathbf{R}(t') | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |n, \mathbf{R}(t')\rangle \cdot d\mathbf{R} \quad (2.56)$$

$$= \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} \mathbf{A}^n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \quad (2.57)$$

où

$$\mathbf{A}^n(\mathbf{R}) = i \langle n, \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \quad (2.58)$$

est une quantité appelée potentiel de jauge.

L'expression de l'état $\psi(T)$ après une évolution cyclique de période T , s'obtient facilement en posant $t = T$ dans l'éq. (2.52) :

$$|\psi(T)\rangle = e^{-i \int_0^T E_n(\mathbf{R}(t)) dt} e^{i\gamma_C} |n, \mathbf{R}(0)\rangle, \quad (2.59)$$

où γ_C , appelée phase de Berry est définie par

$$\gamma_C = \oint_C \mathbf{A}^n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}. \quad (2.60)$$

Considérons le cas particulier où l'espace des paramètres \mathcal{M} est l'espace \mathbb{R}^3 . L'intégrale (2.60) étant une intégrale curviligne, il est possible d'appliquer le théorème de Stokes pour transformer l'intégrale curviligne en une intégrale de surface. La phase γ_C s'écrit donc :

$$\gamma_C = \oint_C \mathbf{A}^n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \int_S \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S}, \quad (2.61)$$

où S est une surface s'appuyant sur le contour C , $d\mathbf{S}$ un élément de surface normal à \mathbf{S} et orienté dans le sens direct et \mathbf{F} est le rotationnel du potentiel de jauge $\mathbf{A}(\mathbf{R})$:

$$\mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \times \mathbf{A}(\mathbf{R}). \quad (2.62)$$

le résultat donné par l'éq. (2.61) est généralisable au cas où l'espace \mathcal{M} est quelconque [3]. L'expression (2.61) montre que la phase de Berry ne dépend pas de la jauge utilisée pour calculer $\mathbf{A}(\mathbf{R})$. Plus généralement, la phase de Berry est invariante par rapport à la transformation suivante

$$\mathbf{A}'(\mathbf{R}) = \mathbf{A}(\mathbf{R}) + U(\mathbf{R})^\dagger \nabla_{\mathbf{R}} U(\mathbf{R}),$$

où U est une transformation unitaire.

2.2.5 Spin-1/2 dans la limite adiabatique : deuxième version

Le but de cette section est de calculer les quantités $\mathbf{A}^n(\mathbf{R})$ définie par l'éq. (2.58) et la quantité \mathbf{F}^n donnée par l'éq. (2.67) pour le modèle du spin-1/2 développé dans la section 2.1.2.

De façon générale, le hamiltonien décrivant l'interaction entre un spin au repos et un champ magnétique de module constant B et de direction \mathbf{R} (nous supposons que le vecteur \mathbf{R} est unitaire) est donné par :

$$\mathcal{H}(\mathbf{R}) = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar\omega_L}{2} \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.63)$$

D'après l'expression (2.63), on se convainc facilement que l'espace des paramètres de ce problème est la sphère unité S^2 . Enfin, en posant $\mathbf{R}(t) = (\sin \alpha \cos \omega t, \sin \alpha \sin \omega t, \cos \alpha)$ nous retrouvons bien l'expression (2.1) du hamiltonien utilisé dans la sec. 2.1.1.

Pour calculer la phase de Berry de l'état $\psi(0) = |\phi_+\rangle$, nous utilisons le fait que celui-ci peut se déduire des états propres de S_z (états $|+\rangle$ et $|-\rangle$) par une rotation d'angle $-\varphi$ suivant l'axe Oz

suivi d'une rotation d'angle θ suivant l'axe Oy suivi d'une troisième rotation d'angle $-\varphi$ suivant Oz où (φ, θ) sont les coordonnées sphériques du vecteur \mathbf{R} . On a :

$$\mathbf{R} = \mathcal{R}_3(\varphi)\mathcal{R}_2(\theta)\mathcal{R}_1(-\varphi)\mathbf{z}, \quad (2.64)$$

et

$$|\pm, \varphi, \theta\rangle = e^{-i\frac{\varphi}{2}\sigma_z} e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_y} e^{i\frac{\varphi}{2}\sigma_z} |\pm\rangle \quad (2.65)$$

$$= U(\theta, \varphi) |\pm\rangle. \quad (2.66)$$

En remplaçant l'éq. (2.64) dans l'éq. (2.63) nous trouvons que les états $|\pm, \varphi, \theta\rangle$ sont les états propres de $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ associés aux valeurs propres $\pm\hbar\omega_L$. Il faut noter qu'il est possible de calculer directement les états propres de $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ en le diagonalisant. L'avantage de cette méthode est qu'il est possible de généraliser les résultats obtenus à un spin \mathbf{S} de valeur arbitraire.

Pour calculer la phase de Berry, nous devons évaluer la matrice $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ dont les éléments de matrice sont définis par l'éq (2.48). En utilisant l'éq. (2.58) et l'éq. (2.65) nous trouvons que

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}) = (U(\theta, \varphi)^\dagger) \frac{\partial U(\theta, \varphi)}{\partial \mathbf{R}}. \quad (2.67)$$

En remplaçant l'éq. (2.65) dans l'éq. (2.67), nous trouvons que

$$A_\theta^{k,k'} = i \langle k', \theta, \varphi | \frac{\partial}{\partial \theta} | k, \theta, \varphi \rangle \quad (2.68)$$

$$= \frac{1}{2} \langle k' | \sigma_y \cos \varphi - \sigma_x \sin \varphi | k \rangle \quad (2.69)$$

et

$$A_\varphi^{k,k'} = i \langle k', \theta, \varphi | \frac{\partial}{\partial \varphi} | k, \theta, \varphi \rangle \quad (2.70)$$

$$= \frac{1}{2} \langle k' | (-\sigma_x \cos \varphi + \sigma_y \sin \varphi) \sin \theta + \sigma_z (\cos \theta - 1) | k \rangle, \quad (2.71)$$

avec $k, k' = \pm$. Nous intéressent uniquement à la phase de Berry dans la limite adiabatique, nous négligeons tous les termes où k et k' sont différents. Nous trouvons finalement les composantes diagonales du potentiel de jauge \mathbf{A} sont égales à :

$$A_\theta^{k,k} = 0 \quad (2.72)$$

$$A_\varphi^{k,k} = -\frac{1}{2}k(1 - \cos \theta). \quad (2.73)$$

Il ne reste plus qu'à calculer les composantes du vecteur \mathbf{F}^k définies par l'éq. (2.62), et utiliser l'éq. (2.60) pour calculer la phase de Berry le long d'un contour quelconque \mathcal{C} :

$$\gamma_k(\mathcal{C}) = - \oint_S \mathbf{F}^k \cdot d\mathbf{S} = -\frac{k}{2} \oint_S \sin \theta d\theta d\varphi = -\frac{k}{2} \oint_{\mathcal{C}} d\Omega = -\frac{k}{2} \Omega(\mathcal{C}), \quad (2.74)$$

où $k = \pm$, S est une surface orientée s'appuyant sur le contour \mathcal{C} et $\Omega(\mathcal{C})$ est l'angle solide délimité par le contour \mathcal{C} sur la sphère \mathcal{S}^2 .

D'après la forme du hamiltonien étudié dans la sec. 2.1.1, la direction du champ magnétique décrit un cercle sur la sphère \mathcal{S}^2 dont le rayon est égal à $\cos \alpha$. La surface S délimitée par le contour \mathcal{C} et nécessaire au calcul de la phase de Berry est une calotte paramétrée par $S = \{(\theta, \varphi) \in [0, \alpha] \times [0, 2\pi[\}$. En remplaçant la paramétrisation de S dans l'éq. (2.74), nous trouvons que

$$\begin{aligned} \gamma^k(\mathcal{C}) &= -\frac{1}{2} \left(k \int_0^\alpha \sin \theta d\theta \right) \left(\int_0^{2\pi} d\varphi \right) \\ &= -\pi k (1 - \cos \alpha). \end{aligned} \quad (2.75)$$

Ce résultat est identique au résultat obtenu en résolvant l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Une remarque est nécessaire toutefois. L'éq. (2.11) a été obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger dépendante du temps, ce qui n'est pas le cas ici. Le calcul des phases de Berry ne nécessite pas la résolution de l'éq (2.31) mais demande par contre de calculer les vecteurs propres de $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ ce qui n'est pas toujours réalisable analytiquement.

2.2.6 Invariance des phases de Berry par rapport à une transformation de jauge

D'après l'éq. (2.58), le potentiel de jauge \mathbf{A}^n est une quantité dépendante de la jauge choisie ce qui n'est pas le cas de la phase de Berry. Pour le voir, il suffit de calculer $(\mathbf{A}^n)'$ dans la base $|n, \mathbf{R}\rangle'$ en utilisant la transformation de jauge (2.40) et l'éq. (2.58) :

$$(\mathbf{A}^n(\mathbf{R}))' = i \langle n, \mathbf{R}' | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (|n, \mathbf{R}\rangle)' = \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \frac{\partial \eta_n(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}}, \quad (2.76)$$

où $\eta_n(\mathbf{R})$ est fonction continue univaluée de \mathbf{R} . En remplaçant l'éq. (2.61) dans l'éq. (2.52) nous trouvons le facteur de phase $\gamma_n(t)$ se transforme comme :

$$\gamma_n'(t) = \gamma_n(t) + \eta_n(R(t)) - \eta_n(R(0)). \quad (2.77)$$

$\gamma_n(t)'$ peut être aussi calculée en utilisant la base $|n, \mathbf{R}\rangle'$. En utilisant l'éq. (2.39), nous trouvons que

$$e^{i\gamma_n'(t)} |n, \mathbf{R}(t)\rangle' = e^{i\gamma_n(t) + i\eta_n(R(t))} |n, \mathbf{R}(t)\rangle. \quad (2.78)$$

si $\eta_n(\mathbf{R})$ est une fonction arbitraire de \mathbf{R} , alors il est possible de choisir $\eta_n(\mathbf{R})$ de façon à compenser $(\gamma_n)'$ pour obtenir

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hbar^{-1} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t)) dt} |n, \mathbf{R}(t)\rangle. \quad (2.79)$$

L'état donné par l'éq. (2.79) satisfait aussi la condition (2.45). La base $|n, \mathbf{R}\rangle'$ étant également une base de vecteurs propres de $\mathcal{H}(\mathbf{R})$, il est possible de l'utiliser pour décrire l'évolution d'un état $|\psi(t)\rangle$ et tenir compte uniquement du terme de phase dynamique, en choisissant la phase arbitraire $\eta_n(\mathbf{R})$ convenablement.

Le résultat (2.79) suppose que la phase $\eta_n(\mathbf{R})$ est arbitraire. Si après une période T , l'environnement revient dans son état initial $R(0)$ (\mathbf{R} décrit un chemin fermé \mathcal{C} dans l'espace des paramètres), alors il est impossible de choisir $\eta_n(\mathbf{R})$ librement pour supprimer la phase de Berry $\gamma_{\mathcal{C}}$. En effet, la propriété d'univalueur de $e^{i\eta_n(\mathbf{R})}$ pour $R(T) = R(0)$ implique seulement que

$$e^{i\eta(\mathbf{R}(T))} = e^{i\eta(\mathbf{R}(0))} \quad \text{ou} \quad \eta(\mathbf{R}(T)) = \eta(\mathbf{R}(0)) \quad \text{mod } 2\pi. \quad (2.80)$$

En remplaçant l'éq (2.76) dans l'éq. (2.61), nous trouvons que

$$\begin{aligned}
 \gamma'_n(T) &= \int_{\mathcal{C}} (\mathbf{A}^n)'(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \\
 &= \int_{\mathcal{C}} \mathbf{A}^n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} + 2\pi\alpha \\
 &= \gamma_n(T) + 2\pi\alpha,
 \end{aligned} \tag{2.81}$$

avec $\alpha \in \mathbb{Z}$. La phase de Berry $\gamma_{\mathcal{C}}$, définie *modulo* 2π , est une quantité invariante par rapport à tout changement de jauge U , ce qui n'est pas le cas du potentiel de jauge $\mathbf{A}^n(\mathbf{R})$.

2.2.7 Limite non-adiabatique

Tous les résultats exposés précédemment sont généralisables au cas où le critère d'adiabaticité n'est plus vérifié. Dans ce cas, le calcul exact des phases géométriques est plus compliqué et le traitement perturbatif par rapport au paramètre ν ne peut être utilisé.

Plusieurs méthodes ont été proposées ces dernières années afin de tenir compte des corrections non adiabatiques en introduisant la plupart du temps des hamiltoniens effectifs [3, 57, 8]. L'exposé de ces méthodes dépasse largement l'objectif de ce chapitre.

2.2.8 Généralisation au cas d'un niveau d'énergie dégénéré

La notion de phase de Berry peut être étendue au cas où l'état initial est un état dégénéré en énergie [3, 27]. Dans ce cas, l'évolution cyclique et adiabatique du système impose seulement que l'état quantique reste dans le sous-espace propre pendant toute la durée d'évolution, mais ne contraint pas le système à revenir dans le même état quantique qu'initialement. Dans le cas général, l'état final sera une combinaison linéaire des états propres dégénérés en énergie. La notion de phase de Berry se généralise et est remplacée par un opérateur U_{Berry} défini par

$$U_{\text{Berry}} = \mathcal{P}_t \exp \left(i \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}^n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \right),$$

où $A^n(\mathbf{R})$ est une matrice généralisant le potentiel de jauge défini par l'éq. (2.58) et \mathcal{P}_t l'opérateur d'ordonnement dans le temps.

2.3 Conclusion

Le concept de phase géométrique et plus particulièrement de phase de Berry a connu un développement important ces dernières années avec des applications dans tous les domaines de la physique en particulier dans la matière condensée.

Les phases de Berry sont une des notions les plus utilisées dans ce manuscrit et interviennent plus ou moins directement dans le calcul de la conductivité transverse. Nous verrons notamment que certaines contributions de la conductivité transverse peuvent s'interpréter en terme de phase de Berry ou plus généralement dépendent des propriétés topologiques du spectre énergétique et des états propres du hamiltonien considéré.

Deuxième partie

Effet Hall anormal

Chapitre 3

Effet Hall anormal intrinsèque en présence du couplage spin-orbite

Sommaire

3.1	Introduction	27
3.2	Modèle employé	28
3.2.1	Origine de l'effet Rashba	28
3.2.2	Hamiltonien total	28
3.2.3	Calcul de la fonction de Green moyenne	29
3.3	Effet Hall anormal et topologie du spectre énergétique	31
3.3.1	Expression générale de la conductivité transverse	31
3.3.2	Approximations de calcul	31
3.3.3	Ordre des limites $\omega \rightarrow 0$ et $N_i \rightarrow 0$	32
3.3.4	Contribution des états profonds : Terme topologique	32
3.3.5	Contribution des états proches du niveau de Fermi	33
3.3.6	Corrections à la conductivité transverse : Corrections de vertex	34
3.3.7	Comparaison des deux contributions	38
3.4	Séparation des différentes contributions...	38
3.4.1	Contribution des états proches du niveau de Fermi	39
3.4.2	Contribution des états profonds : terme topologique	40
3.5	Conclusion	41

3.1 Introduction

Jusqu'à récemment [66,92], il était conventionnellement admis que la diffusion des électrons par des impuretés ne pouvaient pas être à l'origine de mécanisme intrinsèque. En conséquence, tous les mécanismes dérivés de la diffusion étaient classés comme étant de nature purement extrinsèque et étaient omis pour le calcul de l'effet Hall anormal dans les composés où les mécanismes de phase de Berry sont dominants.

Dans ce chapitre, nous proposons un modèle où les contributions induites par la diffusion entre les électrons et les impuretés ne peuvent pas être négligées lorsque la concentration en impuretés

tend vers zéro. Pour cela, nous utilisons un modèle où le couplage spin-orbite subi par les électrons est induit par le réseau cristallin et nous prenons en compte la diffusion des électrons par des impuretés réparties aléatoirement. Par souci de simplification des calculs, nous supposons que le potentiel décrivant l'interaction entre un électron et une impureté ne dépend pas du spin de l'électron.

3.2 Modèle employé

Le modèle employé dans ce chapitre décrit la dynamique d'un gaz d'électrons bidimensionnel en présence d'une aimantation M_0 perpendiculaire au plan xOy contenant les électrons et nous supposons qu'il existe un couplage spin-orbite induit par le réseau cristallin. Le hamiltonien décrivant ce système est donné par :

$$\mathcal{H}_0 = \varepsilon_k - M\sigma_z + V_{SO}(\mathbf{k}), \quad (3.1)$$

où $V_{SO}(\mathbf{k})$ est le potentiel décrivant l'interaction spin-orbite induite par le réseau cristallin, $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ et $M = g\mu_S M_0$, M_0 étant l'amplitude de l'aimantation. Dans la suite, nous prenons la forme suivante $V_{SO}(\mathbf{k}) = \alpha \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}$ pour le couplage spin-orbite, décrivant l'effet Rashba.

3.2.1 Origine de l'effet Rashba

La forme du terme d'interaction Rashba peut être obtenue en considérant un gaz d'électrons confiné dans le plan xOy se déplaçant à une vitesse \mathbf{v} en présence d'un champ électrique $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{noyaux}} + \mathbf{E}_{\text{confinement}}$, contenant le champ électrique créé par les noyaux et le champ électrique servant au confinement des électrons dans l'hétérostructure. En appliquant les transformations de Lorentz pour passer du repère attaché à l'hétérostructure au repère local de l'électron, il est possible de voir que le champ électrique crée un champ magnétique local $\mathbf{B} = \mathbf{v} \times \mathbf{E}/c$ qui interagit avec le spin de l'électron par l'intermédiaire du couplage Zeeman. En conséquence, l'interaction entre le champ électrique \mathbf{E} et le spin d'un électron a la forme suivante

$$V_{SO}(\mathbf{k}) = \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{E},$$

où λ est une constante caractéristique dépendant du matériau. En supposant que le champ électrique servant au confinement des électrons, est constant et appliqué dans la direction Oz , le terme décrivant effet Rashba peut s'écrire :

$$V_{SO}(\mathbf{k}) = \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y), \quad (3.2)$$

où α est une constante dépendant de la nature du matériau et de ses symétries [80].

3.2.2 Hamiltonien total

Le hamiltonien du modèle que nous considérons dans ce chapitre, s'obtient facilement en remplaçant l'éq. (3.2) dans l'éq. (3.1) :

$$\mathcal{H}_0 = \varepsilon_k + \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) - M\sigma_z. \quad (3.3)$$

Les composantes de l'opérateur vitesse \mathbf{v} , données par la relation

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{H}, \quad (3.4)$$

se déduisent facilement après remplacement de l'éq. (3.3) dans (3.4) :

$$v_x = \frac{\hbar k_x}{m} - \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_y, \quad v_y = \frac{\hbar k_y}{m} + \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_x. \quad (3.5)$$

En plus du hamiltonien décrit précédemment, nous prenons en compte la diffusion des électrons par des impuretés réparties aléatoirement dans l'espace. Nous notons $V(\mathbf{r})$ le potentiel décrivant l'interaction entre un électron et une impureté et nous supposons qu'il agit à courte portée; qu'il est de faible amplitude (modèle gaussien) et qu'il ne dépend pas du spin. Le hamiltonien total de ce modèle est donné par $\mathcal{H}(\{\mathbf{r}_i\}) = H_0 + \sum_{\mathbf{r}_i} V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ où r_i sont les positions de chaque impuretés. Toutes les quantités physiques doivent être calculées pour une configuration $\{r_i\}$ décrivant un désordre donné, puis moyennées sur un grand nombre de configurations différentes. Le calcul de chaque quantité physique étant impossible à faire pour une configuration physique donnée; nous tenons compte du désordre par l'intermédiaire d'un opérateur Σ aussi appelé self-énergie. Cet opérateur intervient dans le calcul de la fonction de Green moyenne G du hamiltonien \mathcal{H} .

3.2.3 Calcul de la fonction de Green moyenne

Pour évaluer la conductivité transverse σ_{xy} , nous devons calculer les fonctions de Green du hamiltonien \mathcal{H} moyennées sur le désordre. Le propagateur¹ G du hamiltonien \mathcal{H} est relié à la fonction de Green G_0 du hamiltonien \mathcal{H}_0 par la relation formelle suivante aussi appelée équation de Dyson [79, 30] :

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G = G_0 (1 - \Sigma G_0)^{-1}, \quad (3.6)$$

où l'opérateur Σ , appelé opérateur de self-énergie, dépend explicitement du potentiel décrivant le désordre. La partie imaginaire de l'opérateur $\Sigma(\varepsilon)$ représente le temps de vie moyen d'une particule d'énergie ε , tandis que la partie réelle de Σ donne une correction à l'énergie de l'état considéré qui est généralement négligée. Le calcul de la partie imaginaire de la self-énergie, notée $\Sigma_i(\varepsilon)$ est exposé dans l'appendice A.

Calcul du propagateur libre

En l'absence d'impuretés, la fonction de Green non perturbée peut être calculée directement à partir du hamiltonien (3.3)

$$G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu + \alpha(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) - M \sigma_z}{(\varepsilon - E_{\mathbf{k}+} + \mu + i\delta \operatorname{sgn} \varepsilon)(\varepsilon - E_{\mathbf{k}-} + \mu + i\delta \operatorname{sgn} \varepsilon)}, \quad (3.7)$$

où μ est le potentiel chimique et $E_{\mathbf{k},\pm}$ sont les valeurs propres de \mathcal{H}_0 :

$$E_{\mathbf{k}\pm} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \mp \lambda(\mathbf{k}), \quad (3.8)$$

avec $\lambda(\mathbf{k}) = \sqrt{M^2 + \alpha^2 k^2}$.

Dans la suite nous considérons le cas général où le niveau de Fermi coupe les deux bandes d'énergie $E_{\mathbf{k}+}$ et $E_{\mathbf{k}-}$, ce qui correspond à la situation où le potentiel chimique μ est supérieur à M (fig 3.1). Dans le cas contraire seuls les états associés à la valeur propre $E_{\mathbf{k}+}$ doivent être pris en compte.

¹La fonction de Green G dans l'espace réel est définie par :

$$\hat{G} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H} \right) G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = 0,$$

(voir réf. [79]).

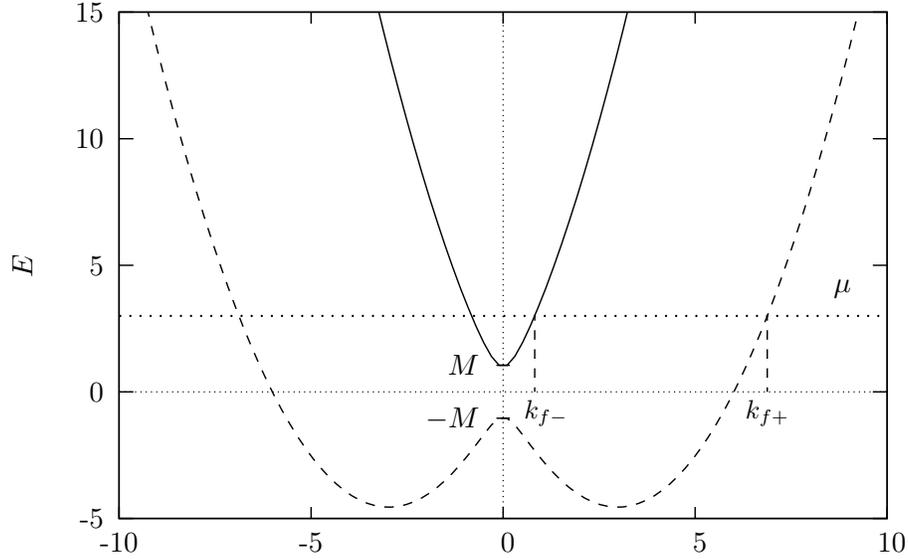


FIG. 3.1: Spectre énergétique d'un gaz d'électrons soumis à une interaction spin-orbite de type Rashba.

Calcul de la self-énergie et de la fonction de Green

La fonction de Green du hamiltonien total \mathcal{H} peut être calculée perturbativement lorsque le potentiel de désordre est de faible amplitude. Dans ce cas, le désordre intervient par l'intermédiaire de l'opérateur de self-énergie $\Sigma_i(\varepsilon)$, qui est calculé perturbativement par rapport au potentiel V (voir la référence [30], pour de plus amples détails). En calculant $\Sigma_i(\varepsilon)$ au deuxième ordre en V , nous obtenons

$$\Sigma_i(\varepsilon) = \Im(\Sigma(\varepsilon)) = N_i V_0^2 \int G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon) \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (3.9)$$

où V_0 est la composante de Fourier du potentiel $V(\mathbf{r})$ à $q = 0$ et N_i la densité d'impuretés. Après remplacement de l'éq. (3.7) dans l'éq. (3.9) et intégration sur \mathbf{k} nous trouvons que

$$\Sigma_i(\varepsilon) = -\hbar \frac{\text{sgn} \varepsilon}{2} \left(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{\tilde{\tau}} \sigma_z \right), \quad (3.10)$$

avec

$$\frac{1}{\tau} = \pi N_i V_0^2 (\nu_+ + \nu_-), \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{\tilde{\tau}} = \pi N_i V_0^2 M \left(\frac{\nu_+}{\lambda_+} - \frac{\nu_-}{\lambda_-} \right), \quad (3.12)$$

$\lambda_{\pm} \equiv \lambda(k_{f,\pm})$ et

$$\nu_+ = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| 1 - \frac{m\alpha^2}{\hbar^2\lambda_+} \right|^{-1} \quad (3.13)$$

$$\nu_- = \theta(\mu - M) \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left| 1 - \frac{m\alpha^2}{\hbar^2\lambda_-} \right|^{-1}, \quad (3.14)$$

sont les densités d'états au niveau de Fermi des deux bandes pour $\mu > M$. $\theta(\epsilon)$ est la fonction de Heaviside et $k_{f\pm}$ les moments de Fermi des bandes majoritaire et minoritaire. La fonction de Green approchée de \mathcal{H} s'obtient en utilisant l'équation de Dyson [30] et l'éq. (3.10) pour $\Sigma_i(\epsilon)$:

$$G_{\mathbf{k}}(\epsilon) = \frac{\epsilon + i\Gamma - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu + \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) - (M + i\tilde{\Gamma})\sigma_z}{(\epsilon - E_{\mathbf{k},+} + \mu + i\hbar\text{sgn}\epsilon/2\tau_+)(\epsilon - E_{\mathbf{k},-} + \mu + i\hbar\text{sgn}\epsilon/2\tau_-)}, \quad (3.15)$$

où

$$\Gamma = \frac{\hbar}{2\tau}\text{sgn}\epsilon, \quad \tilde{\Gamma} = \frac{\hbar}{2\tilde{\tau}}\text{sgn}\epsilon, \quad \frac{1}{\tau_{\pm}} = \frac{1}{\tau} \pm \frac{M}{\tilde{\tau}\lambda_{\pm}}. \quad (3.16)$$

Les constantes τ_{\pm} données par l'éq. (3.16), sont les temps de relaxation des électrons calculés pour chacune des bandes.

3.3 Effet Hall anormal et topologie du spectre énergétique

Dans ce chapitre, nous évaluons la conductivité transverse en utilisant la théorie de la réponse linéaire.

3.3.1 Expression générale de la conductivité transverse

Le tenseur de conductivité peut être calculé en utilisant le formalisme de Kubo [81] :

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{e^2\hbar}{V\omega} \text{Tr} \int \langle \hat{v}_i \hat{G}(\epsilon + \hbar\omega) \hat{v}_j \hat{G}(\epsilon) \rangle \frac{d\epsilon}{2\pi}, \quad (3.17)$$

où \hat{G} la fonction de Green causale² associée au hamiltonien \mathcal{H} , qui inclut la diffusion des électrons par les impuretés et \hat{v}_i est la composante $i = x, y$ de l'opérateur vitesse. L'opérateur Tr est la trace sur l'ensemble des états propres de l'opérateur \mathcal{H} et $\langle \dots \rangle$ est la moyenne sur le désordre. Dans la limite statique, la formule de Kubo (3.17) peut s'écrire sous une forme faisant apparaître deux termes [71, 4]; σ_{ij}^I caractérisant la contribution des transitions intrabandes des états proches du niveau de Fermi et σ_{ij}^{II} qui représente la contribution de tous les états situés en dessous du niveau de Fermi. Bien qu'il soit possible de calculer chaque contribution en utilisant les formules de Středa [71, 4], nous utilisons une approche différente basée sur le calcul direct de la conductivité transverse en utilisant la formule (3.17).

3.3.2 Approximations de calcul

Le calcul de la conductivité transverse $\sigma_{xy}(\omega)$, donnée par l'éq. (3.17), suppose que l'on soit capable de calculer la moyenne sur le désordre d'un produit de quatre opérateurs dont deux d'entre eux sont les fonctions de Green G du hamiltonien \mathcal{H} . Ce calcul étant difficile voire impossible en pratique, nous remplaçons le produit $\langle v_x G v_y G \rangle$ par le produit des valeurs moyennes de chaque

²La fonction de Green causale (avancée) \hat{G} dans l'espace réel est définie par :

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H} \right) \hat{G}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'),$$

avec la condition $\hat{G}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = 0$ pour $t < t'$ (voir réf. [79]). La fonction de Green $\hat{G}(\epsilon)$ apparaissant dans l'éq. (3.17) est la transformée de Fourier temporelle de la fonction de Green $\hat{G}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$

propagateur. En d'autres termes, nous calculons la conductivité transverse en remplaçant $\langle v_x G v_y G \rangle$ par $v_x \langle G \rangle v_y \langle G \rangle$ dans la formule (3.17). Nous reviendrons sur cette approximation dans la sec. 3.3.6 où nous prendrons certaines corrections en compte.

Pour simplifier les notations, nous remplaçons la fonction de Green $\langle G \rangle$ moyennée sur le désordre par $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ où l'effet des impuretés est décrit par la self-énergie. Bien qu'il soit possible de calculer les fonctions de Green dans l'espace réel, il est plus simple de faire les calculs dans l'espace réciproque car celles-ci sont diagonales en \mathbf{k} (la moyenne sur le désordre restaure l'invariance par translation [93]). L'expression finale de la conductivité transverse est donnée par l'équation suivante :

$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{\omega} \text{Tr} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} v_x G_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \hbar\omega) v_y G_{\mathbf{k}}(\varepsilon), \quad (3.18)$$

où Tr est la trace dans l'espace des spins.

3.3.3 Ordre des limites $\omega \rightarrow 0$ et $N_i \rightarrow 0$

Dans la suite, nous nous intéressons uniquement à la conductivité transverse statique $\sigma(\omega = 0)$ calculée dans la limite d'un système où la concentration en impuretés et en défauts est faible mais reste non nulle. Cela inclut aussi la limite où le système est dit «parfait», c.-à-d. la limite où la concentration en impuretés et défauts tend vers zéro ($N_i \rightarrow 0$).

Le calcul de σ_{xy} fait intervenir deux limites ; la limite statique qui intervient directement dans l'éq. (3.18) par l'intermédiaire de ω et la limite $N_i \rightarrow 0$ intervenant dans l'éq. (3.18) par l'intermédiaire de la moyenne sur le désordre. L'ordre dans lequel sont prises les deux limites, est important. Jusqu'à récemment [66, 92, 87], il était conventionnellement admis que la présence d'impuretés dans le système contribuait à l'effet Hall anormal par l'intermédiaire des mécanismes de side-jump et skew-scattering, mais ne pouvaient pas être à l'origine de mécanismes intrinsèques contribuant à l'effet Hall. En conséquence, la conductivité transverse était calculée en négligeant le terme σ_{xy}^I faisant intervenir les états proches du niveau de Fermi car ils sont supposés dépendre uniquement des impuretés et seul était considéré le terme σ_{xy}^{II} que l'on obtient en prenant la limite d'un système sans défauts ($N_i \rightarrow 0$ puis $\omega \rightarrow 0$). Il faut noter toutefois que quelques travaux [90, 46, 45, 47] prennent en compte la diffusion des électrons par les impuretés pour le calcul de σ_{xy}^{II} par l'intermédiaire des temps de relaxation intra-bandes et inter-bandes, mais négligent le terme σ_{xy}^I .

Dans ce chapitre, nous considérons la situation où le nombre d'impuretés est fini mais faible et nous calculons la conductivité transverse dans la limite statique. En conséquence, nous considérons l'ordre suivant pour les limites. Nous prenons la limite $\omega \rightarrow 0$ *avant* de prendre la limite $N_i \rightarrow 0$.

3.3.4 Contribution des états profonds : Terme topologique

Pour calculer σ_{xy}^{II} nous utilisons la formule (3.18) et nous remplaçons la fonction de Green $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ (éq. (3.15)) par $G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon)$ (éq. (3.7)). En faisant cela, nous négligeons les corrections dues aux impuretés qui donnent des contributions supplémentaires s'annulant lorsque $N_i \rightarrow 0$. Nous obtenons donc

$$\sigma_{xy}^{II}(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{\omega} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left(\frac{\hbar k_x}{m} - \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_y \right) G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon + \hbar\omega) \left(\frac{\hbar k_y}{m} + \frac{\alpha}{\hbar} \sigma_x \right) G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon). \quad (3.19)$$

Le calcul de l'intégrale suivant ε étant détaillé dans l'appendice A.2, nous donnons uniquement le résultat final :

$$\sigma_{xy}^{II} = -\frac{4e^2 M \alpha^2}{\hbar} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{f(E_{\mathbf{k},+}) - f(E_{\mathbf{k},-})}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})^3}. \quad (3.20)$$

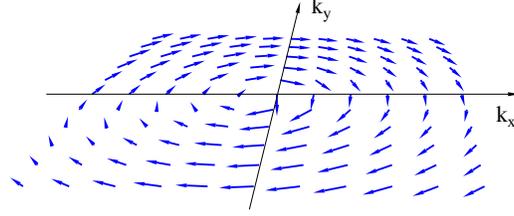


FIG. 3.2: Champ de vecteur $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ dans l'espace des moments

L'expression précédente, coïncide avec l'expression obtenue par Culcer *et al* [19] dans la limite des basses température et peut être écrite sous une forme faisant intervenir uniquement les densités d'états au niveau de Fermi. Après avoir calculé l'intégrale sur \mathbf{k} , nous trouvons que

$$\sigma_{xy}^{II} = \frac{e^2}{2h} \left[1 - \frac{M}{\lambda_+} - \theta(\mu - M) \left(1 - \frac{M}{\lambda_-} \right) \right]. \quad (3.21)$$

σ_{xy}^{II} peut être présentée sous une forme mettant en évidence le caractère topologique de cette contribution. Pour montrer ceci, nous introduisons un vecteur unitaire $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ défini en chaque point de l'espace réciproque par :

$$\mathbf{n}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\alpha k_y}{\lambda(k)}, -\frac{\alpha k_x}{\lambda(k)}, -\frac{M}{\lambda(k)} \right). \quad (3.22)$$

En utilisant le vecteur $\mathbf{n}(\mathbf{k})$, on montre facilement que le hamiltonien (3.3) s'écrit $H_0 = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \lambda(\mathbf{k}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{k})$. Le vecteur $\mathbf{n}(\mathbf{k})$ définit une transformation de l'espace réciproque vers la sphère unité \mathcal{S}^2 . En utilisant les éq. (3.19) et (3.22), nous trouvons que la contribution σ_{xy}^{II} s'écrit :

$$\sigma_{xy}^{II} = -\frac{e^2}{2h} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} [f(E_{\mathbf{k},+}) - f(E_{\mathbf{k},-})] \epsilon_{\alpha\beta\gamma} n_\alpha \frac{\partial n_\beta}{\partial k_x} \frac{\partial n_\gamma}{\partial k_y}, \quad (3.23)$$

où $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ est le tenseur antisymétrique. En utilisant les coordonnées sphériques (φ_k, θ_k) pour décrire le vecteur unitaire $\mathbf{n}(\mathbf{k})$, il est possible de montrer que

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{II} &= -\frac{e^2}{2h} \left(\oint_{L_+} \sin \theta_k d\theta_k d\varphi_k - \oint_{L_-} \sin \theta_k d\theta_k d\varphi_k \right) \\ &= -\frac{e^2}{2h} (\Omega_+ - \Omega_-), \end{aligned} \quad (3.24)$$

où L_+ et L_- sont les images des surfaces de Fermi définies par $E_{\mathbf{k},\pm} = \mu$ sur \mathcal{S}^2 . Chaque intégrale représente l'angle solide Ω_{\pm} délimité par l'image du contour L_{\pm} sur la sphère unité \mathcal{S}^2 .

3.3.5 Contribution des états proches du niveau de Fermi

En prenant les équations (3.18)(3.16)(3.15) (voir annexe A.2), nous trouvons que la conductivité transverse contient un terme additionnel σ_{xy}^I donnant la contribution des états proches du niveau

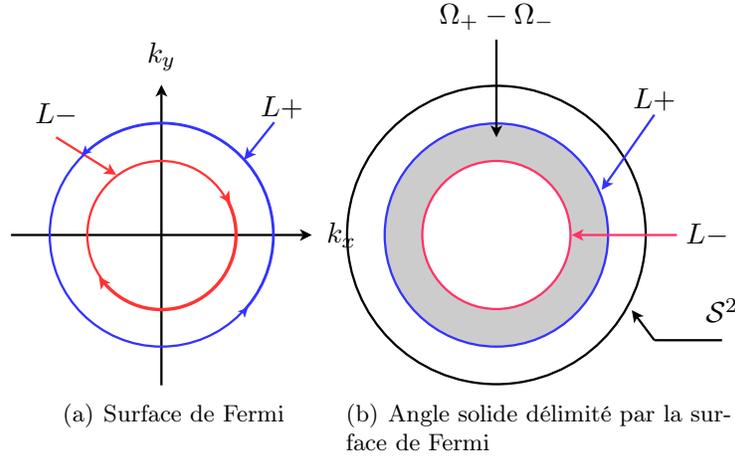


FIG. 3.3: (a) Surface de Fermi L_{\pm} définie par $E_{\mathbf{k},\pm} = \mu$. (b) Vue de dessus de l'angle solide délimité par les surfaces de Fermi, représenté sur la sphère unité S^2 .

de Fermi :

$$\sigma_{xy}^I = -\frac{e^2 M \alpha^2}{\hbar} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})^2} \left[\left(1 - \frac{\tau_+}{\tau_-}\right) \times \left(-\frac{\partial f(E_{\mathbf{k},+})}{\partial \varepsilon}\right) + \left(1 - \frac{\tau_-}{\tau_+}\right) \left(-\frac{\partial f(E_{\mathbf{k},-})}{\partial \varepsilon}\right) \right], \quad (3.25)$$

la présence du terme $(-\partial f/\partial \varepsilon)$ restreint l'intégrale (3.25) aux états proches du niveau de Fermi. Dans la limite des basses températures, l'éq. (3.25) devient

$$\sigma_{xy}^I = -\frac{e^2 \alpha^2 M}{4h} \left[\left(1 - \frac{\tau_+}{\tau_-}\right) \frac{\nu_+}{\lambda_+^2} + \left(1 - \frac{\tau_-}{\tau_+}\right) \frac{\nu_-}{\lambda_-^2} \right]. \quad (3.26)$$

Malgré la présence des temps de relaxation τ_+ et τ_- dans l'éq. (3.26), σ_{xy}^I ne dépend pas de la concentration en impuretés contenues dans le système. Ceci peut s'illustrer en remplaçant les temps de relaxation τ_+ et τ_- par leur expression (3.16). Après remplacement, nous obtenons :

$$\sigma_{xy}^I = -\frac{e^2 \alpha^2 M^2 (\xi_+ - \xi_-)}{2h} \left\{ \frac{\xi_+}{\lambda_+ [\nu_+ + \nu_- + M(\xi_+ - \xi_-)]} + \frac{\xi_-}{\lambda_- [\nu_+ + \nu_- - M(\xi_+ - \xi_-)]} \right\} \quad (3.27)$$

avec $\xi_{\pm} = \nu_{\pm}/\lambda_{\pm}$.

La correction σ_{xy}^I peut être vue comme la contribution des transitions inter-bandes médiées par les impuretés au voisinage du niveau de Fermi.

3.3.6 Corrections à la conductivité transverse : Corrections de vertex

En remplaçant la moyenne sur le désordre $\langle \hat{v}_i \hat{G} \hat{v}_j \hat{G} \rangle$ par $v_x \langle G \rangle v_y \langle G \rangle$, nous négligeons certains termes de diffusion multiple qui ne sont pas inclus dans le calcul perturbatif de la self-énergie, tels que les corrections de vertex \mathcal{T}_x qui sont du même ordre que les corrections de self-énergie, c-à-d en N_i^{-1} ou les diffusons et les coopérons qui sont reliés aux problèmes de localisation faible [91, 22].

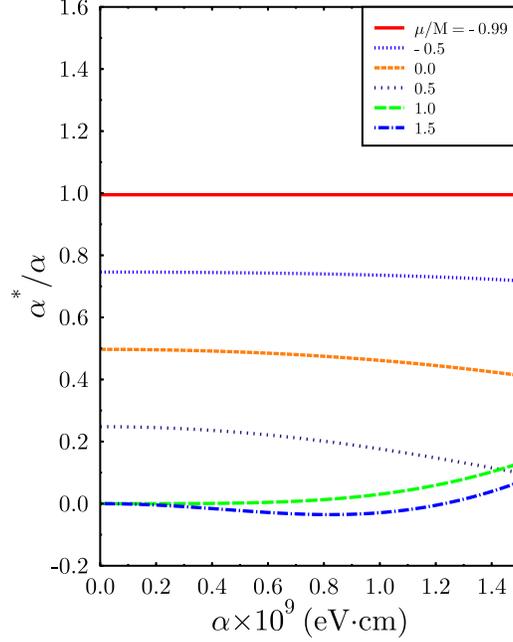


FIG. 3.4: Constante de couplage spin-orbite α^* renormalisée par les corrections de vertex \mathcal{T}_x calculées à la surface de Fermi pour différentes positions du niveau de Fermi.

Dans ce chapitre, nous considérons uniquement les corrections de vertex que l'on notera \mathcal{T}_x issues des diagrammes dits en échelle et négligeons toutes les autres corrections.

Les corrections de vertex \mathcal{T}_x apparaissent dans la formule de Kubo par l'intermédiaire d'une renormalisation de l'opérateur vitesse v_x . Ces corrections peuvent être calculées en utilisant la formule suivante [30, 2] lorsque le potentiel est à courte portée :

$$\mathcal{T}_i(\varepsilon, \omega) = v_i + N_i V_0^2 \int G_{\mathbf{k}}(\varepsilon) \mathcal{T}_i(\varepsilon, \omega) G_{\mathbf{k}}(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (3.28)$$

Dans la limite $\omega \rightarrow 0$, l'intégrale sur \mathbf{k} est non nulle seulement au voisinage du niveau de Fermi, c.-à-d. pour des énergies $\varepsilon \ll \hbar\tau_{\uparrow\downarrow}^{-1}$. Cette simplification est justifiée car nous considérons un système où la concentration en impuretés est petite, ce qui correspond à de grands temps de relaxation $\tau_{\uparrow\downarrow}$. Nous calculons $\mathcal{T}_i(\varepsilon, \omega)$ en posant $\varepsilon = 0$ dans (3.28) et prenons $\mathcal{T}_x = v_x$ lorsque $\varepsilon \neq 0$.

Dans la limite $\varepsilon \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$, il est possible d'écrire $\mathcal{T}_x = \mathcal{T}_x(\varepsilon \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0)$ sous la forme

$$\mathcal{T}_x = ak_x + b\sigma_x + c\sigma_y + d\sigma_z, \quad (3.29)$$

où a, b, c et d sont des coefficients a priori complexes. En substituant l'éq. (3.29) et (3.15) dans l'éq. (3.28), nous obtenons $a = \hbar/m$, $d = b = 0$ et

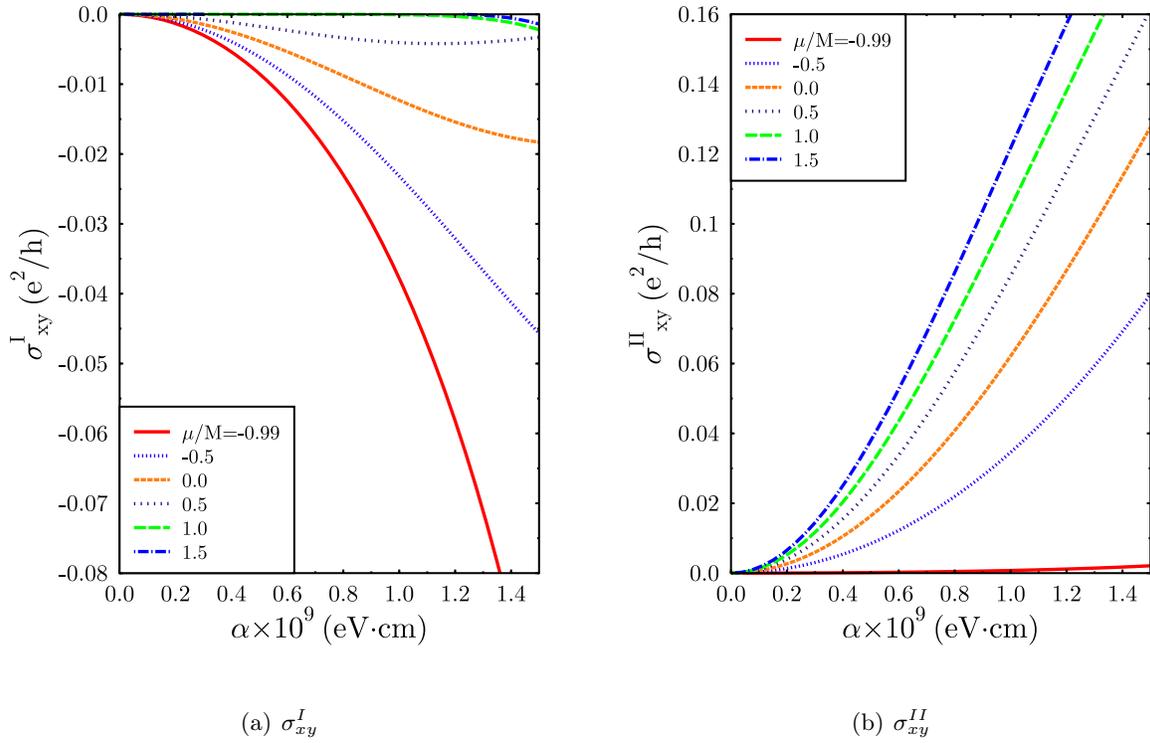


FIG. 3.5: (a) : σ_{xy}^I tracée en fonction de α pour différentes positions du niveau de Fermi. (b) : σ_{xy}^{II} en fonction de α calculée pour différentes positions du niveau de Fermi.

$$c \left[1 - N_i V_0^2 \int \frac{(\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 - M^2}{D_+ D_-} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \right] = -\alpha \left[1 + 2N_i V_0^2 \int \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} (\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}})}{D_+ D_-} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \right], \quad (3.30)$$

où $D_{\pm} = (\mu - E_{\mathbf{k},+} \pm i\hbar/2\tau_+)(\mu - E_{\mathbf{k},-} \pm i\hbar/2\tau_-)$.

Après substitution de l'éq. (3.30) dans l'éq. (3.29) puis dans l'éq. (3.18), nous trouvons que les corrections de vertex modifient la constante de couplage spin-orbite α pour les états proches du niveau de Fermi par

$$\alpha^* = \alpha \left[1 + 2N_i V_0^2 \int \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} (\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}})}{D_+ D_-} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \right] \left[1 - N_i V_0^2 \int \frac{(\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 - M^2}{D_+ D_-} \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \right]^{-1}. \quad (3.31)$$

Les intégrales de l'éq. (3.31) peuvent être calculées en faisant le changement de variables suivant $\int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \dots = \int \nu_0(\varepsilon_k) d\varepsilon_k$ avec $\nu_0(\varepsilon) = (m/2\pi\hbar^2)\theta(\varepsilon)$ la densité d'états des électrons libres. Nous

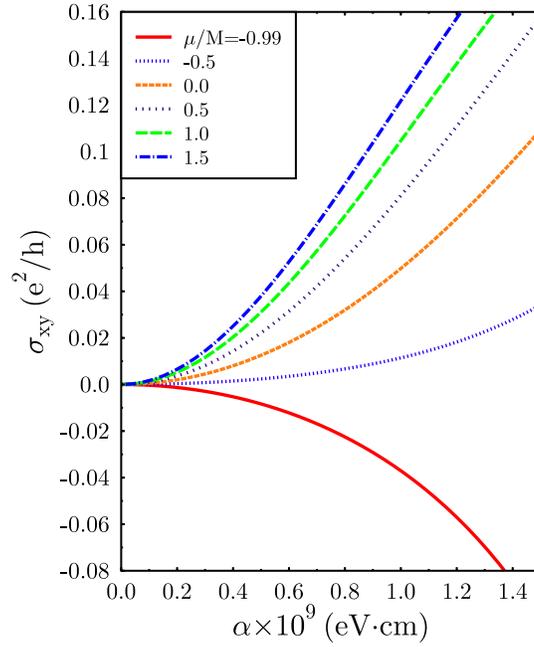


FIG. 3.6: Conductivité totale $\sigma_{xy}(\alpha) = \sigma_{xy}^I(\alpha) + \sigma_{xy}^{II}(\alpha)$ calculée pour différentes valeurs du niveau de Fermi.

obtenons finalement

$$\alpha^* = \alpha \left\{ 1 + \frac{2\pi N_i V_0^2}{(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2)^2} \left[\nu_0(\mathcal{E}_1) \frac{\mathcal{E}_1(\mu - \mathcal{E}_1)}{\hbar\Gamma_1} + \nu_0(\mathcal{E}_2) \frac{\mathcal{E}_2(\mu - \mathcal{E}_2)}{\hbar\Gamma_2} \right] \right\} \times \left\{ 1 - \frac{\pi N_i V_0^2}{(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2)^2} \left[\nu_0(\mathcal{E}_1) \frac{(\mu - \mathcal{E}_1)^2 - M^2}{\hbar\Gamma_1} + \nu_0(\mathcal{E}_2) \frac{(\mu - \mathcal{E}_2)^2 - M^2}{\hbar\Gamma_2} \right] \right\}^{-1}, \quad (3.32)$$

où

$$\mathcal{E}_{1,2} = \mu + \frac{m\alpha^2}{\hbar^2} \pm \sqrt{\frac{m^2\alpha^4}{\hbar^4} + 2\mu\frac{m\alpha^2}{\hbar^2} + M^2} \quad (3.33)$$

et

$$\Gamma_{1,2} = \mp \frac{\mu - \mathcal{E}_{1,2} - \sqrt{M^2 + 2\frac{m\alpha^2}{\hbar^2}\mathcal{E}_{1,2}}}{2\tau_+(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2)} \mp \frac{\mu - \mathcal{E}_{1,2} - \sqrt{M^2 + 2\frac{m\alpha^2}{\hbar^2}\mathcal{E}_{1,2}}}{2\tau_-(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2)}. \quad (3.34)$$

D'après les éq. (3.33) et (3.34), les corrections de vertex ne dépendent pas de la concentration en impuretés contenues dans le système. La limite $N_i \rightarrow 0$ ne pose pas de problèmes ici.

Si le niveau de Fermi coupe les deux bandes (cf fig 3.1) α^*/α tend vers 0 lorsque α tend vers zéro. Si le niveau de Fermi coupe uniquement la bande de plus basse énergie $E_{\mathbf{k}+}$, le rapport α^*/α tend vers

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\alpha^*}{\alpha} = 1 - \frac{\mu + M}{2M}. \quad (3.35)$$

Deux limites sont possibles :

- Lorsque $\mu \rightarrow -M$, α^*/α tend vers 1.
- Lorsque $\mu \rightarrow M$, α^*/α tend vers 0.

La dépendance de α^* par rapport à α est représentée sur la fig 3.4. Cette figure montre que le rapport α^* dépend assez peu de α , mais dépend beaucoup de la position du niveau de Fermi dans les bandes. En particulier, la figure 3.4 montre que α^*/α est proche de zéro pour une grande plage de variation de α lorsque $\mu > M$, voire peut changer de signe lorsque α varie. La contribution σ_{xy}^I décrivant la contribution des états proches du niveau de Fermi, risque d'être fortement influencée par les corrections de vertex.

La prise en compte des corrections de vertex dans le calcul de la conductivité transverse est équivalente pour ce modèle à remplacer le produit α^2 dans l'expression de σ_{xy}^I (éq. (3.26)) par $\alpha\alpha^*$. La substitution ne doit pas être reportée dans l'expression de σ_{xy}^{II} car les corrections de vertex donnent une contribution non nulle au voisinage du niveau de Fermi.

3.3.7 Comparaison des deux contributions

Chaque contribution σ_{xy}^I et σ_{xy}^{II} a été évaluée numériquement pour le jeu de paramètres suivant : $M = 0.01$ eV et $m = m_0$ la masse de l'électron libre. Il faut noter toutefois que la contribution σ_{xy}^I dépend uniquement du quotient entre les temps de relaxation intra et inter-bande.

Les figures 3.5-a et 3.5-b représentent les variations de chaque contribution pour différentes valeurs du niveau de Fermi. Elles montrent notamment que la contribution σ_{xy}^I peut être du même ordre de grandeur voir dominer σ_{xy}^{II} . Enfin la fig 3.6 montre que la conductivité transverse peut changer de signe suivant la valeur du niveau de Fermi.

3.4 Séparation des différentes contributions de la conductivité transverse

Dans cette section, nous considérons le cas général où le Hamiltonien H_0 a la forme d'une matrice diagonale dans une certaine base de fonctions d'ondes. Dans ce cas, la conductivité transverse peut être calculée en utilisant la formule suivante

$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \sum_{nn'mm'} v_x^{nm} G_{\mathbf{k}mm'}(\varepsilon + \hbar\omega) v_y^{m'n'} G_{\mathbf{k}n'n}(\varepsilon), \quad (3.36)$$

où n, m, m', n' sont les indices de bande. Cette formule se déduit facilement en introduisant une relation de fermeture entre chaque produit d'opérateurs dans la formule de Kubo (3.18).

Pour calculer σ_{xy} , nous pouvons utiliser la base des fonctions d'ondes propres du Hamiltonien H_0 et supposer que le rôle des impuretés est pris en compte dans le calcul de l'opérateur vitesse par l'intermédiaire des corrections de vertex que nous considérons uniquement sur une des composantes de l'opérateur vitesse (par exemple v_x) et dans le terme de self-énergie. L'avantage de se mettre dans la base des fonctions propres de H_0 est que la fonction de Green $G_{\mathbf{k}}^0$ est diagonale dans cette représentation. Cependant, à cause de la diffusion, la fonction de Green du hamiltonien total \mathcal{H} , contient des éléments non diagonaux issus du couplage induit par le potentiel V entre les différentes bandes.

Afin de mettre en évidence les différentes contributions de l'effet Hall, nous séparons la somme sur les différentes bandes apparaissant dans l'éq. (3.36), en trois contributions :

$n = m = m' = n$ Cette contribution décrit la composante intrabande notée σ_{xy}^{Ia} . Elle dépend explicitement de la concentration en impuretés contenues dans le système et fait intervenir uniquement les états proches du niveau de Fermi.

$n = m$ et $n' = m'$ Cette contribution, notée σ_{xy}^{Ib} est induite par les termes non diagonaux des fonctions de Green perturbées.

$n \neq m, n' \neq m', m = m'$ et $n = n'$ Cette contribution, notée σ_{xy}^{II} donne le terme obtenu par Karplus et Luttinger. Il dépend uniquement de la topologie du spectre énergétique et de la nature des états propres de \mathcal{H}_0 .

Il existe un quatrième terme où tous les indices sont différents. Ce terme décrit la situation physique où plus de deux transitions inter-bandes ont lieu et sera négligé.

3.4.1 Contribution des états proches du niveau de Fermi

Le choix de la base des fonctions propres de H_0 implique que la fonction de Green $G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon)$ est diagonale dans cette base, mais n'implique pas que la fonction de Green $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ est diagonale. Les éléments non diagonaux de l'opérateur de self-énergie sont non nuls à cause des transitions induites par le potentiel V entre deux états d'énergie différente. La fonction de Green $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ admet des éléments non diagonaux couplant ainsi deux bandes d'indices différents.

Contribution des éléments diagonaux de la fonction de Green

Nous nous intéressons dans un premier temps aux contributions des états proches du niveau de Fermi. Pour calculer la conductivité transverse σ_{xy} , nous considérons les termes diagonaux de l'éq. (3.36), c.-à-d. les termes $n = n'$ et $m = m'$. Dans la limite statique, les contributions non nulles viennent des états proches du niveau de Fermi appartenant à la même bande (nous devons prendre $n = m$). Nous trouvons que :

$$\sigma_{xy}^{Ia} = e^2 \hbar \sum_n \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} \left(-\frac{\partial f(E_{n\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon} \right) (v_x)_{nn} (v_y)_{nn} \tau_n. \quad (3.37)$$

La contribution (3.37) est proportionnelle au temps de relaxation des électrons et est semblable aux contributions originaires du mécanisme de skew-scattering [52,4]. Cependant lorsque le spectre énergétique $E_{n\mathbf{k}}$ a les symétries $k_x \rightarrow -k_x$ ou $k_y \rightarrow -k_y$, l'intégrale (3.37) s'annule et la contribution du skew scattering ne peut exister que par l'intermédiaire d'un mécanisme plus compliqué faisant intervenir l'interaction spin-orbite induite par les impuretés.

Contribution des éléments non-diagonaux de la fonction de Green

Les éléments non diagonaux de la fonction de Green $G_{\mathbf{k}}$ peuvent se déduire après un développement par rapport aux éléments non diagonaux de la matrice de self-énergie Σ_i .

$$G_{\mathbf{k}nn'}(\varepsilon) \approx G_{\mathbf{k}nn}^{(0)}(\varepsilon) \Sigma_{nn'}^{(off)}(\varepsilon) G_{\mathbf{k}n'n'}^{(0)}(\varepsilon) = \frac{i \text{sign } \varepsilon}{\tilde{\tau}_{nn'}} \frac{P_{nn'}(\mathbf{k})}{D_{\mathbf{k}}(\varepsilon)}, \quad n \neq n',$$

où $\tilde{\tau}_{nn'}$ est le temps de relaxation inter-bande, $P_{nn'}(\mathbf{k})$ est un coefficient déterminé par la forme spécifique du Hamiltonien, $D_{\mathbf{k}}(\varepsilon) = \prod_n (\varepsilon - E_{n\mathbf{k}} + i\hbar \text{sgn} \varepsilon / 2\tau_n)$. $E_{n\mathbf{k}}$ est la relation de dispersion des électrons de la bande n et τ_n est le temps de relaxation décrivant les transitions intrabandes de la bande n .

Dans le modèle précédent, le temps de relaxation $\tilde{\tau}_{12}$ est égal à $\tilde{\tau}$ (éq. 3.11) et $P_{12}(\mathbf{k}) = \alpha k/\lambda$. Il doit être mentionné que les temps de relaxation $\tilde{\tau}_{nn'}$ et τ_n sont inversement proportionnels à la densité et aux éléments de matrices du potentiel créé par les impuretés.

Considérons maintenant les corrections induites par les éléments non diagonaux de $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ en prenant les termes $n = m$ et $n' = m'$ dans l'éq. (3.36). Après intégration de l'éq. (3.38) par rapport à ε et en prenant la limite $\omega \rightarrow 0$, nous trouvons qu'il existe une seconde contribution σ_{xy}^{IB} venant des états proches du niveau de Fermi :

$$\sigma_{xy}^{IB} = e^2 \hbar \sum_{n \neq n'} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} \left(-\frac{\partial f(E_{n\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon} \right) (v_x)_{nn} (v_y)_{n'n'} \frac{\tau_n}{\tilde{\tau}_{nn'}} \frac{P_{nn'}(\mathbf{k})}{\prod_{m \neq n} (E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})}. \quad (3.38)$$

Comme le montre l'éq. (3.37), cette contribution dépend ni de la concentration de la densité d'impuretés, ni du potentiel diffuseur, car les temps $\tilde{\tau}_n$ et $\tau_{nn'}$ sont tous les deux inversement proportionnels à la densité d'impuretés et à l'amplitude de diffusion. Ainsi, le rapport $\tilde{\tau}_n/\tilde{\tau}_{nn'}$ peut être exprimé en utilisant uniquement les paramètres de bandes comme dans le cas du modèle développé dans la sec. 3.2.

En conséquence, la contribution donnée par l'éq. (3.38) doit aussi être identifiée comme un mécanisme intrinsèque, même si elle a été obtenue en utilisant la diffusion par les impuretés. Ce résultat est similaire au résultat obtenu avec le mécanisme de side-jump [4] à une différence près. Dans le mécanisme de side-jump, le couplage spin-orbite est pris en compte dans le potentiel décrivant le désordre, tandis qu'il est inclus directement dans le hamiltonien non perturbé \mathcal{H}_0 .

3.4.2 Contribution des états profonds : terme topologique

La conductivité transverse σ_{xy} contient un terme supplémentaire σ_{xy}^{II} se déduisant de l'éq. (3.36) par les conditions $n \neq m$ et $n' \neq m'$. Nous considérons uniquement les éléments diagonaux ($m = m'$ et $n = n'$) des opérateurs de Green et négligeons les corrections induites par la diffusion des électrons sur les impuretés. En partant de l'expression (3.38), nous obtenons :

$$\sigma_{xy}^{II}(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{\omega} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} \sum_{n \neq m} (v_x)_{nm} G_{\mathbf{k}mm}^0(\varepsilon + \hbar\omega) (v_y)_{mn} G_{\mathbf{k}nn}^0(\varepsilon), \quad (3.39)$$

ce qui donne après intégration sur ε et $\omega \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{II} &= e^2 \hbar \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} \sum_n f_{n,\mathbf{k}} \sum_{m \neq n} \frac{(v_x)^{nm} (v_y)^{mn} - (v_x)^{mn} (v_y)^{nm}}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})^2} \\ &= \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} f_{n,\mathbf{k}} \sum_{m \neq n} \frac{(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial k_x})^{nm} (\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial k_y})^{mn} - (\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial k_y})^{nm} (\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial k_x})^{mn}}{(E_{n,\mathbf{k}} - E_{m,\mathbf{k}})^2} \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$= \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} f_{n,\mathbf{k}} \langle n, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | n, \mathbf{k} \rangle \quad (3.41)$$

$$= \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} f_{n,\mathbf{k}} [\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_{n,\mathbf{k}}]_z, \quad (3.42)$$

avec

$$\mathbf{A}_{n\mathbf{k}} = -i \langle n, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | n, \mathbf{k} \rangle, \quad (3.43)$$

est le potentiel de jauge exprimé dans l'espace des moments et lié à la diagonalisation du Hamiltonien \mathcal{H}_0 . Pour passer de l'éq. (3.40) à l'éq. (3.41) nous avons employé la relation suivante :

$$\langle m, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | n, \mathbf{k} \rangle = \frac{\langle n, \mathbf{k} | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{k}} | m, \mathbf{k} \rangle}{E_{n, \mathbf{k}} - E_{m, \mathbf{k}}}.$$

La contribution σ_{xy}^{II} est souvent appelée contribution topologique [16, 17, 60, 61, 75] parce qu'elle dépend explicitement de la nature des états quantiques $|n, \mathbf{k}\rangle$ par l'intermédiaire du potentiel de jauge $\mathbf{A}_{n\mathbf{k}}$. Cette expression de la conductivité transverse a fait l'objet de nombreuses études dont la plus ancienne remonte au début des années 1950 [76], mais a été réellement prise en compte qu'au début des années 80. Enfin, il faut souligner que contrairement à ce que laisse supposer l'expression (3.39), la somme sur tous les états occupés peut être réduite à une somme faisant intervenir uniquement les états proches du niveau de Fermi [24].

En calculant explicitement le potentiel de jauge $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ pour le modèle développé dans ce chapitre, nous trouvons que l'expression (3.20) s'obtient facilement en utilisant l'éq. (3.41). Les vecteurs propres de \mathcal{H}_0 sont donnés par l'expression suivante :

$$|\mathbf{k}, \pm\rangle = \sqrt{\frac{\lambda(k) \pm M}{2\lambda(k)}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{i\alpha(k_x - ik_y)}{M \pm \lambda(k)} \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Après dérivation de l'expression (3.44) par rapport à k_x et k_y , nous trouvons que le potentiel de jauge s'écrit :

$$\mathbf{A}_{\pm}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -\frac{\alpha^2 k_y}{2\lambda(k)[M \pm \lambda(k)]} \\ \frac{\alpha^2 k_x}{2\lambda(k)[M \pm \lambda(k)]} \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

L'expression finale de σ_{xy}^{II} s'obtient facilement après avoir calculé le rotationnel de $\mathbf{A}_{\pm}(\mathbf{k})$ et inséré le résultat obtenu dans l'éq. (3.40). Nous obtenons le résultat final suivant

$$\sigma_{xy}^{II} = -\frac{4e^2 M \alpha^2}{\hbar} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{f(E_{\mathbf{k},+}) - f(E_{\mathbf{k},-})}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})^3},$$

qui est bien l'expression recherchée.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons calculé la conductivité transverse en utilisant un modèle de gaz d'électrons soumis à une interaction spin-orbite de type Rashba. En partant du formalisme de Kubo, nous avons trouvé que la conductivité transverse contient deux contributions. σ_{xy}^{II} décrit l'ensemble des contributions des différents mécanismes intrinsèques et dépend uniquement de la topologie des bandes d'énergie. L'autre contribution σ_{xy}^I est reliée à la diffusion par les impuretés mais ne s'annule pas lorsque la concentration en impureté tend vers zéro.

Il faut noter que la contribution des mécanismes conventionnels de l'AHE, c.-à-d. le mécanisme de side-jump et du skew-scattering, est linéaire par rapport à la constante de couplage α [4]. Pour ces mécanismes, il faut considérer l'interaction spin-orbite incluse dans le potentiel de diffusion : $i\alpha' V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sigma \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{k}')$, où g est une constante et $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ l'élément de matrice du potentiel de désordre est invariante par inversion. On en déduit que les termes linéaires en α' venant du mécanisme de

side-jump et du skew-scattering peuvent être dominants lorsque la concentration en impuretés tend vers zéro.

Le point essentiel de ce chapitre est qu'il ne faut pas négliger la diffusion par des impuretés pour le calcul de la conductivité transverse. Dans ce cas, la transition continue vers un système sans défauts n'est possible qu'en prenant la limite $\omega \rightarrow 0$ avant de prendre $N_i \rightarrow 0$ et l'inversion des limites brise la continuité entre la limite d'un système parfait et un système contenant peu d'impuretés. Ceci ne modifie pas le terme d'origine topologique σ_{xy}^{II} , mais donne une contribution supplémentaire indépendante de la concentration en impuretés, qui entre en compétition avec le terme topologique.

Chapitre 4

Effet Hall topologique

Sommaire

4.1	Introduction	43
4.2	Électrons itinérants en présence d’une texture d’aimantation	44
4.3	Conductivité transverse dans l’approximation adiabatique	45
4.3.1	Approximation adiabatique	45
4.3.2	Calcul de l’effet Hall	47
4.3.3	Cas non-adiabatique	48
4.4	Structure modèle	48
4.4.1	Caractérisation de la distribution magnétique	50
4.4.2	Calcul du champ topologique et du potentiel effectif	52
4.4.3	Propriétés du champ topologique	54
4.4.4	Relation entre le flux ϕ_t et le nombre de singularités de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$	55
4.4.5	Choix du semi-conducteur	59
4.5	Conclusion	61

4.1 Introduction

Diverses avancées théoriques sur l’origine de l’effet Hall anormal ont été proposées ces dernières années, grâce notamment aux mesures de l’effet Hall anormal dans les manganites, les composés pyrochlores où les verres de spin. Ces composés sont caractérisés en général par une aimantation texturée qui influence drastiquement le déplacement des porteurs de charge. Elle modifie les coefficients de transport qui peuvent avoir une dépendance non conventionnelle par rapport au champ magnétique appliqué ou la température. Les résultats expérimentaux ne peuvent pas être expliqués en utilisant les mécanismes conventionnels tel que le mécanisme de side-jump ou le skew-scattering.

En 1999, Ye *et al* [48] ont proposé un nouveau mécanisme (que nous appellerons effet Hall topologique dans la suite) pour les manganites faisant intervenir explicitement les variations spatiales de l’aimantation au voisinage d’une excitation magnétique thermiquement activée. Ils relient la conductivité transverse à la *phase de Berry* acquise par les porteurs de charge se déplaçant dans la texture d’aimantation. En 2002, Tatara et Kawamura [29] étudient l’effet Hall anormal des systèmes ferromagnétiques désordonnés comme par exemple les verres de spin et trouvent en utilisant un modèle d’échange local, que la conductivité transverse est proportionnelle à la chiralité de spin

(la chiralité de spin est définie par $\langle (S_i \times S_j) \cdot S_k \rangle$ où les moments S_i sont les moments des impuretés magnétiques) dans la limite d'un couplage local faible entre les impuretés magnétique et le spin des électrons. Encore une fois la phase de Berry joue un rôle prépondérant dans ce modèle. Dans ces deux modèles, le couplage spin-orbite nécessaire pour obtenir une chiralité de spin non nulle donc un effet Hall non nul.

Afin de pouvoir observer et identifier clairement l'effet Hall topologique (ou le mécanisme de chiralité de spin), il faut développer un modèle dans lequel la texture d'aimantation est connue et contrôlable et où le couplage spin-orbite n'est pas nécessaire pour obtenir un effet Hall non nul. Pour simuler la texture d'aimantation, nous considérons une distribution de champ magnétique créée par une nanostructure magnétique. Cette nanostructure est constituée d'un arrangement triangulaire et périodique de nanocylindres magnétiques et est déposée au dessus d'un gaz d'électrons bidimensionnel, créant ainsi une distribution inhomogène de champ magnétique. La texture de champ magnétique dépend uniquement des paramètres géométriques de la nanostructure (période et forme du réseau) et peut être modifiée en appliquant un champ magnétique constant de faible amplitude.

Pour mettre en évidence l'action de la texture magnétique sur la conductivité, nous calculons σ_{xy} dans la limite semi-classique. Nous trouvons que la contribution de la texture magnétique à la conductivité transverse, présente une signature caractéristique identifiable en appliquant un champ magnétique extérieur.

4.2 Électrons itinérants en présence d'une texture d'aimantation

Pour modéliser l'effet d'une configuration magnétique inhomogène sur le transport électronique, nous considérons un modèle dans lequel un gaz d'électrons bidimensionnel évolue en présence d'une aimantation variant spatialement. Le hamiltonien décrivant ce système s'écrit :

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} - g \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}), \quad (4.1)$$

où g est la constante de couplage, m la masse effective de l'électron et $\boldsymbol{\sigma}$ est le vecteur de Pauli. Pour simplifier le problème, nous considérons que l'aimantation $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ est de module constant M et nous supposons que la direction de l'aimantation, indiquée par un vecteur unitaire $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, varie continûment dans l'espace. Pour résoudre le hamiltonien (4.1), nous appliquons une transformation de jauge $\mathcal{T}(\mathbf{r})$ qui ramène localement l'axe de quantification du spin le long de la direction de l'aimantation (cf fig 4.2). Cette transformation de jauge transforme le deuxième terme de l'éq. (4.1) en $\mathcal{T}^\dagger(\mathbf{r}) [\mathbf{n}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \mathcal{T}(\mathbf{r}) = \sigma_z$.

L'expression de la transformation $\mathcal{T}(\mathbf{r})$ se déduit en imposant un axe de rotation $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ perpendiculaire à z et $\mathbf{n}(\mathbf{r})$; l'angle de rotation est défini par $\cos \theta = n_z$ (voir appendice C). Nous obtenons finalement

$$\mathcal{T}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 + n_z(\mathbf{r})} + i \frac{n_y(\mathbf{r}) \sigma_x - n_x(\mathbf{r}) \sigma_y}{\sqrt{1 + n_z(\mathbf{r})}} \right), \quad (4.2)$$

où n_i avec $i = x, y, z$ sont les composantes du vecteur unitaire $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ et σ_i avec $i = x, y, z$ les matrices de Pauli.

En appliquant la transformation (4.2) au hamiltonien (4.1), nous trouvons que le hamiltonien transformé s'écrit :

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{i}{\phi_0} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 - gM \sigma_z, \quad (4.3)$$

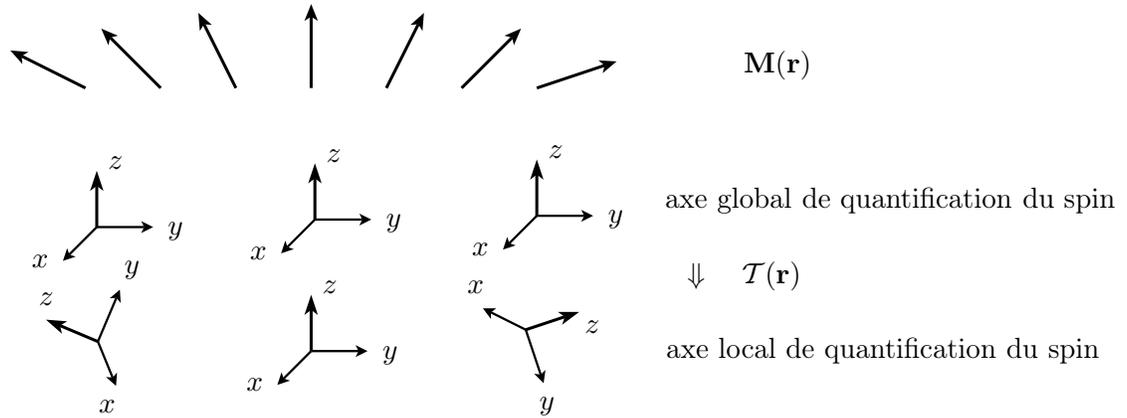


FIG. 4.1: Principe de la transformation $\mathcal{T}(\mathbf{r})$. $\mathcal{T}(\mathbf{r})$ permet de passer d'un système où le repère décrivant l'axe de quantification du spin est global (toujours orienté vers l'axe Oz), à un repère tournant où l'axe local Oz suit la direction de l'aimantation en chaque point de l'espace.

où $\phi_0 = h/e$ est le quantum de flux. Ce Hamiltonien décrit l'évolution d'un électron en présence d'un champ de jauge non abélien [27]

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -2\pi i\phi_0 \mathcal{T}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathcal{T}(\mathbf{r}), \quad (4.4)$$

dépendant des matrices de Pauli. Les composantes du champ de jauge $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ se calculent à partir des équations (4.4) et (4.2) :

$$A_i(\mathbf{r}) = \frac{\pi\phi_0}{1+n_z} \left\{ \sigma_z [n_x \partial_i n_y - n_y \partial_i n_x] + \sigma_x [(1+n_z) \partial_i n_y - n_y \partial_i n_z] - \sigma_y [(1+n_z) \partial_i n_x - n_x \partial_i n_z] \right\}, \quad (4.5)$$

avec $i = x, y$ dans cette expression.

4.3 Calcul de la conductivité transverse dans l'approximation adiabatique

4.3.1 Approximation adiabatique

Le hamiltonien (4.3) peut être réécrit sous une forme mettant en évidence les différents termes de couplage entre les électrons de même spin et de spin opposé. En développant l'éq. (4.3) par rapport à $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, nous obtenons

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{i}{\phi_0} \mathbf{a}(\mathbf{r}) \sigma_z \right)^2 + V(\mathbf{r}) - \tilde{V}(\mathbf{r}) - gM \sigma_z, \quad (4.6)$$

où

$$a_i(\mathbf{r}) = \pi\phi_0 \frac{n_x \partial_i n_y - n_y \partial_i n_x}{1+n_z} \text{ avec } i = x, y, \quad (4.7)$$

est un potentiel vecteur effectif aussi appelé potentiel de jauge, et

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m\phi_0} ((\mathbf{A}^x)^2 + (\mathbf{A}^y)^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{8m} \sum_{\mu\nu} (\partial_\nu n_\mu)^2. \end{aligned} \quad (4.8)$$

$V(\mathbf{r})$ est un potentiel scalaire effectif venant des termes proportionnels aux matrices σ_x^2 et σ_y^2 . L'avant-dernier terme de l'éq. (4.6) s'écrit :

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = i \frac{\hbar^2}{2m\phi_0} \left(\left(\mathbf{A}^x(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}^x(\mathbf{r}) \right) \sigma_x + \left(\mathbf{A}^y(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}^y(\mathbf{r}) \right) \sigma_y \right), \quad (4.9)$$

où

$$A_i^x = \frac{\pi\phi_0}{1+n_z} [(1+n_z) \partial_i n_y - n_y \partial_i n_z] \quad (4.10)$$

$$A_i^y = -\frac{\pi\phi_0}{1+n_z} [(1+n_z) \partial_i n_x - n_x \partial_i n_z], \quad (4.11)$$

et $i = x, y$. $\tilde{V}(\mathbf{r})$ est un potentiel de spin-flip.

L'approximation adiabatique peut être appliquée pour résoudre le hamiltonien (4.3) lorsque le potentiel effectif $\tilde{V}(\mathbf{r})$ a une valeur moyenne spatiale petite devant l'énergie de séparation des bandes de spin opposés (c'est compatible avec la définition donnée dans la sec. 2.2.3). En d'autres termes, le spin de l'électron s'oriente parallèlement à la direction de l'aimantation en chaque point de l'espace et toute déviation par rapport au vecteur $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ est pilotée par l'intensité du potentiel effectif $\tilde{V}(\mathbf{r})$. En faisant l'approximation adiabatique, nous négligeons les déviations de la direction du spin de l'électron par rapport à l'aimantation.

Pour que cette approximation soit valide, il faut que

- la direction de l'aimantation varie lentement dans l'espace,
- la séparation entre les bandes de spin opposé doit être aussi grande que possible (le gaz de porteurs doit être fortement polarisé).

D'après l'expression (4.9), le potentiel effectif $\tilde{V}(\mathbf{r})$ est proportionnel à l'opérateur $\mathbf{P} \cdot (\mathbf{A}^x(\mathbf{r})\sigma_x + \mathbf{A}^y(\mathbf{r})\sigma_y)$ où $\mathbf{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ est l'impulsion de la particule. La valeur moyenne $\langle \tilde{V}(\mathbf{r}) \rangle$ peut s'écrire en première approximation comme le produit des valeurs moyennes de \mathbf{P} et des composantes du potentiel de jauge \mathbf{A} proportionnelles à σ_x et σ_y . $\langle \mathbf{P} \rangle \approx \hbar k_F$ ($\hbar k_F$ est l'impulsion d'un électron au niveau de Fermi et ε_F est l'énergie de Fermi) tandis que la valeur moyenne des composantes $\mathbf{A}^x(\mathbf{r})$ et $\mathbf{A}^y(\mathbf{r})$ est proportionnelle à l'inverse d'une distance ξ . ξ est définie ici comme la distance moyenne séparant deux points où l'aimantation passe de la direction $+\mathbf{z}$ à la direction $-\mathbf{z}$. Après regroupement, nous obtenons finalement

$$\langle V_{\text{sf}} \rangle \approx \frac{\hbar k_F}{m\xi}. \quad (4.12)$$

En notant ε_0 l'énergie de splitting Zeeman séparant les bandes d'électrons de spin opposé, nous obtenons le critère d'adiabaticité suivant

$$\lambda = \frac{\langle V_{\text{sf}} \rangle}{\varepsilon_0} = \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_0 k_F \xi} \ll 1. \quad (4.13)$$

Lorsque le critère d'adiabaticité (4.13) est vérifié, le hamiltonien effectif (4.4) se simplifie et s'écrit :

$$\tilde{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{i}{\phi_0} \mathbf{a}(\mathbf{r}) \sigma_z \right)^2 + V(\mathbf{r}) - gM\sigma_z, \quad (4.14)$$

où $a_i(\mathbf{r})$ et $V(\mathbf{r})$ sont donnés par les éq. (4.7) et (4.8). Le Hamiltonien effectif étant diagonal dans l'espace des spins, nous pouvons traiter séparément les électrons de spin \uparrow et \downarrow et définir deux champs fictifs pour chaque bande électronique :

$$b_t(\mathbf{r}) = \sigma \operatorname{rot} \mathbf{a}(\mathbf{r}) = -\frac{\phi_0 \sigma}{4\pi} \epsilon_{\mu\nu\lambda} n_\mu \partial_x n_\nu \partial_y n_\lambda \quad \text{et} \quad e_t(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}), \quad (4.15)$$

avec $\sigma = +1$ pour les électrons de spin \uparrow et $\sigma = -1$ pour les électrons de spin \downarrow . Les champs définis par l'éq. (4.15) $b_t(\mathbf{r})$ et $e_t(\mathbf{r})$ jouent le rôle d'un champ magnétique et d'un champ électrique respectivement. Afin de différencier les différents champs intervenant dans le problème, nous appellerons le champ de jauge $b_t(\mathbf{r})$ champ topologique.

Les conséquences physiques des champs fictifs $b_t(\mathbf{r})$ et $e_t(\mathbf{r})$ sont les même que leur analogue électromagnétiques et peuvent être classés en deux catégories :

- Les effets locaux tel que la force de Lorentz [95] qui est responsable entre autre de l'effet Hall classique.
- Les effets non locaux tel que l'effet Aharonov-Bohm [96] et les courants permanents. Ces effets sont purement quantiques et nécessitent d'avoir une cohérence de phase contrairement au premier cas.

4.3.2 Calcul de l'effet Hall

Dans l'approximation adiabatique (4.13), le hamiltonien initial (4.1) se transforme en un hamiltonien effectif (4.14) décrivant le mouvement d'un électron sans spin en présence de champs de jauge $b_t(\mathbf{r})$ et $e_t(\mathbf{r})$ jouant le rôle de champ magnétique et de champ électrique. Les deux champs $b_t(\mathbf{r})$ et $e_t(\mathbf{r})$ exercent une force locale sur l'électron qui est similaire à la force de Lorentz [95]. Il est donc possible d'obtenir un effet Hall dérivant directement de la présence des deux champs $b_t(\mathbf{r})$ et $e_t(\mathbf{r})$.

Pour calculer l'effet Hall, nous faisons les hypothèses suivantes :

- nous traitons le transport électronique en utilisant l'équation de Boltzmann,
- nous considérons uniquement la valeur moyenne du champ topologique $b_t(\mathbf{r})$. La valeur moyenne du champ topologique est calculée en s'appuyant sur une surface S délimitant une région de l'espace où l'aimantation varie significativement (si l'aimantation est périodique, la surface S sera alors la maille élémentaire du réseau magnétique).
- nous considérons l'effet des impuretés par l'intermédiaire d'un temps de relaxation $\tau_{\uparrow,\downarrow}$ dépendant du spin.
- nous négligeons le potentiel scalaire $V(\mathbf{r})$ qui est supposé ne pas affecter significativement le transport électronique dans l'approximation adiabatique.

La validité des hypothèses deux et quatre seront discutées un peu plus loin.

Dans l'approximation semi-classique, σ_{xy} est donnée par la formule de Drude [67]

$$\sigma_{xy}^{\uparrow,\downarrow} = \frac{n_{\uparrow,\downarrow} e^2 \tau_{\uparrow,\downarrow}}{m} \frac{\omega_c^{\uparrow,\downarrow} \tau_{\uparrow,\downarrow}}{1 + (\omega_c^{\uparrow,\downarrow} \tau_{\uparrow,\downarrow})^2}, \quad (4.16)$$

où

$$\omega_c^{\uparrow,\downarrow} = \frac{\sigma e}{m} \oint_S b_t(\mathbf{r}) d\mathbf{S}, \quad (4.17)$$

est la pulsation cyclotron des électrons de spin \uparrow ($\sigma = +1$) et \downarrow ($\sigma = -1$). $\tau_{\uparrow,\downarrow}$ et $n_{\uparrow,\downarrow}$ sont les temps de relaxation et les densités d'électrons de spin \uparrow et \downarrow .

Dans la limite des champs faibles ($\omega_c \rightarrow 0$), la conductivité transverse pour les électrons de spin \uparrow et \downarrow s'écrit [67, 30] :

$$\sigma_{xy}^{\uparrow} = \frac{n_{\uparrow} e^3 \tau_{\uparrow}^2}{m^2} \oint_S b_t(\mathbf{r}) d\mathbf{S} \quad (4.18)$$

$$\sigma_{xy}^{\downarrow} = -\frac{n_{\downarrow} e^3 \tau_{\downarrow}^2}{m^2} \oint_S b_t(\mathbf{r}) d\mathbf{S}. \quad (4.19)$$

La conductivité transverse totale, donnée par la somme de chaque contribution, varie linéairement avec la valeur moyenne du champ topologique.

$$\sigma_{xy} = \sigma_{xy}^{\uparrow} + \sigma_{xy}^{\downarrow}. \quad (4.20)$$

La valeur moyenne du champ topologique $b_t(\mathbf{r})$ peut être reliée à la phase de Berry acquise par un électron se déplaçant le long du contour délimitant la surface S . Comme indiqué dans le chapitre 2 la phase de Berry est donnée par la relation :

$$\begin{aligned} \gamma_S &= \sigma \frac{2\pi}{\phi_0} \oint_C \mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} \\ &= \sigma \frac{2\pi}{\phi_0} \oint_S b_t(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} \\ &= \frac{\sigma}{2} \oint_s \epsilon_{\mu\nu\lambda} n_{\mu} \partial_x n_{\nu} \partial_y n_{\lambda} d\mathbf{S} \\ &= \sigma \frac{\Omega(\mathcal{C})}{2}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

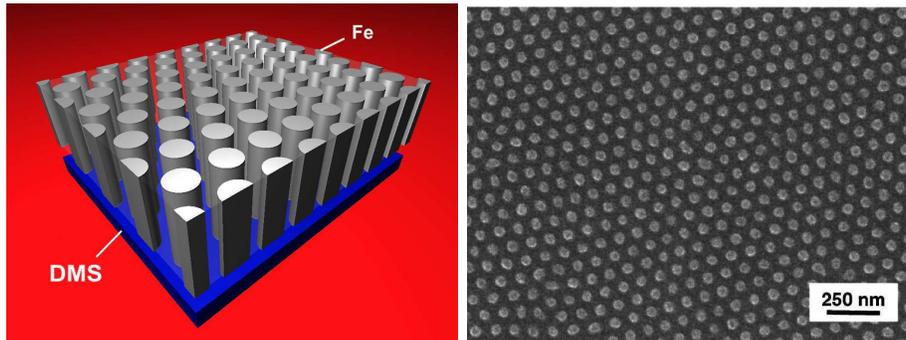
où \mathcal{C} est le contour image sur la \mathcal{S}^2 du contour délimitant la surface S et $\sigma = \pm$ (+ pour les spins \uparrow , – pour les spins \downarrow). D'après l'éq. (4.21) il existe une relation simple entre la conductivité transverse et la phase de Berry induite par la texture magnétique.

4.3.3 Cas non-adiabatique

Lorsque l'approximation adiabatique donnée par l'éq. (4.13) n'est plus respectée, les termes de spin-flip ne peuvent plus être négligés et doivent être pris en compte dans le calcul du transport et du champ topologique. Il faut donc résoudre le Hamiltonien 4.6 en traitant les termes de spin-flip perturbativement par exemple.

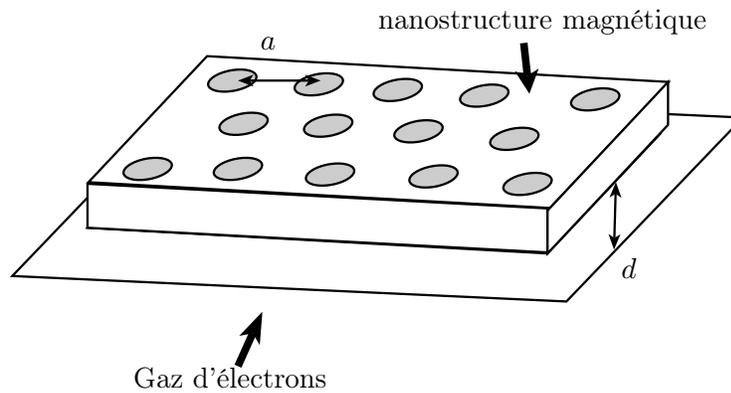
4.4 Structure modèle

Jusqu'à récemment, tous les modèles discutés dans la littérature où l'effet Hall anormal est induit par une texture de spin [48, 100, 29, 89], considèrent une texture de spin à l'échelle atomique. Ce mécanisme est difficile à observer expérimentalement car la contribution de la texture de spin



(a) Schéma de principe

(b) Nano-structure magnétique



(c) Définition des distances caractéristiques

FIG. 4.2: (a) Structure magnétique composée d'un arrangement triangulaire de nano-cylindres de fer placé au dessus d'un gaz d'électrons 2D. (b) Exemple d'un arrangement triangulaire de nano-cylindres magnétiques en Ni dans une matrice d'alumine [49]. (c) Schéma définissant les différents paramètres géométriques. a est la période du réseau et d est la distance séparant le gaz d'électrons de la nano-structure magnétique.

est difficile à contrôler et est masquée par les contributions dues au mécanisme de side-jump et de skew-scattering.

Récemment, nous avons proposé de mesurer l'effet Hall anormal dans des systèmes où la texture de spin est créée artificiellement ; en utilisant une structure magnétique constituée d'un arrangement triangulaire de nano-cylindres en fer placée au dessus d'un gaz d'électrons 2D [68]. Le schéma de cette structure magnétique est représenté sur la fig 4.2. Ce système a plusieurs avantages liés d'une part à la nano-structure magnétique et d'autre part à l'utilisation d'un gaz d'électrons. Il est possible de contrôler la topologie et l'amplitude du champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ en jouant sur les paramètres géométriques tels que la période et/ou la forme du réseau. D'autre part, l'utilisation d'un gaz d'électrons permet de s'affranchir (dans une certaine mesure) du couplage spin-orbite qui est responsable des mécanismes de side-jump et de skew-scattering.

Le but de cette section est d'étudier les propriétés magnétiques de cette nano-structure et de calculer le champ topologique induit dans le gaz de porteurs. σ_{xy} est calculée en fonction d'un champ magnétique extérieur et quelques estimations de l'amplitude des champs magnétique et topologique sont données.

4.4.1 Caractérisation de la distribution magnétique

Lorsque l'aimantation de chaque nanocylindre est orientée dans le même sens, le réseau de nanocylindres crée une distribution de champ magnétique périodique dont la période et l'amplitude sont contrôlables à partir des paramètres géométriques de la structure magnétique. Les paramètres de cette structure sont d , la distance séparant le gaz d'électrons de la nano-structure magnétique, a la période du réseau et p le taux d'occupation qui est donné par le rapport entre la section d'un nanocylindre et la surface de la maille élémentaire (voir fig 4.2-c). Sauf mention explicite contraire, l'unité de distance choisie est la période du réseau.

Le champ magnétique créé par un cylindre magnétique peut être calculé en utilisant l'analogie avec les charges électriques. Le cylindre est remplacé par deux disques uniformément chargés espacés d'une distance h . Il est donc égal au champ magnétique créé par les deux disques de charge opposée :

$$\mathbf{B}_c(x, y, z) = B_d^r(x, y, h + z) - B_d^r(x, y, z), \quad (4.22)$$

avec \mathbf{B}_c le champ magnétique créé par un cylindre magnétique de rayon r et \mathbf{B}_d^r le champ magnétique créé par un disque de rayon r uniformément chargé placé en $z = 0$. Les expressions de $B_d^r(x, y, z)$ peuvent être obtenues analytiquement [20]. Le champ magnétique total est donné par :

$$\mathbf{B}(x, y, z) = \sum_{\mathbf{R}_i} \mathbf{B}_c(x - x_i, y - y_i, z), \quad (4.23)$$

où $\mathbf{R}_i = (x_i, y_i)$ est un vecteur du réseau direct. Un problème subsiste et est lié à l'évaluation de la somme sur le réseau direct. Pour résoudre ce problème, nous faisons les approximations suivantes :

- Le réseau de disques placé à la hauteur h est remplacé par un plan uniformément chargé de même signe,
- pour tenir compte des effets de bord, nous prenons en compte tous les disques situés dans un rayon R et remplaçons les disques extérieurs par une distribution uniformément chargée de même signe.

La distribution de champ est donc donnée par :

$$\mathbf{B}(x, y, z) = B_d^R(x, y, z) - \sum_{|\mathbf{R}_i| < R} B_d^r(x - x_i, y - y_i, z). \quad (4.24)$$

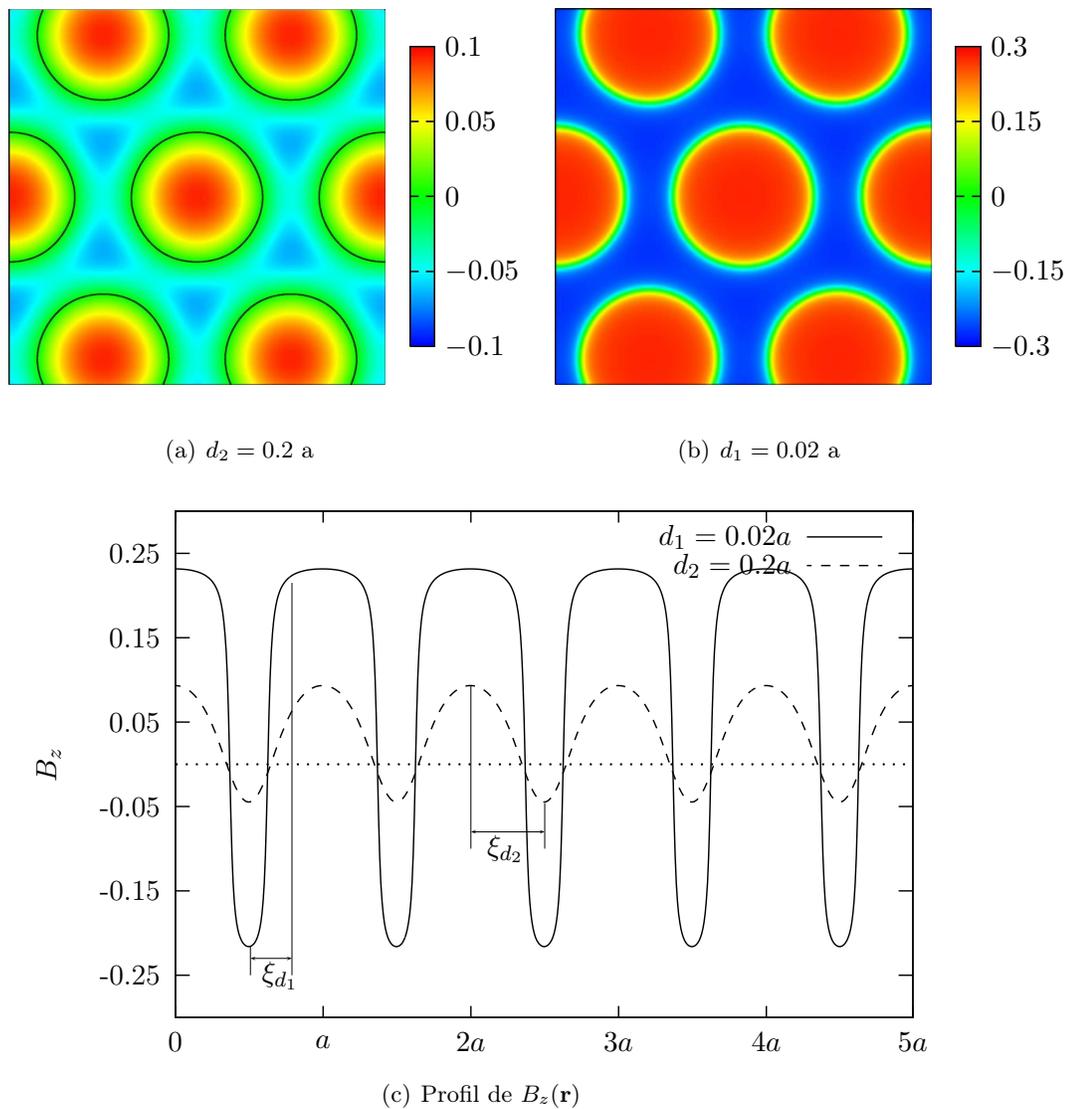


FIG. 4.3: (a,b) composante B_z du champ dipolaire (en $\mu_0 M$) créé par un réseau triangulaire de nanocylindres magnétiques calculée pour un facteur de remplissage $p = 0.5$ et $d = 0.2$ (figure a) et $d_1 = 0.02$ (figure b). Les lignes continues noires indiquent les lignes de champ magnétique $B_z(\mathbf{r}) = 0$. (c) profil de la composante $B_z(\mathbf{r})$ calculée dans la direction $y = 0$ pour $d_1 = 0.02$ et $d_2 = 0.2$. ξ est la distance caractéristique séparant deux points où le champ magnétique est de direction opposée. Cette figure montre que la distance ξ dépend fortement de d et est d'autant plus petite que d est petite.

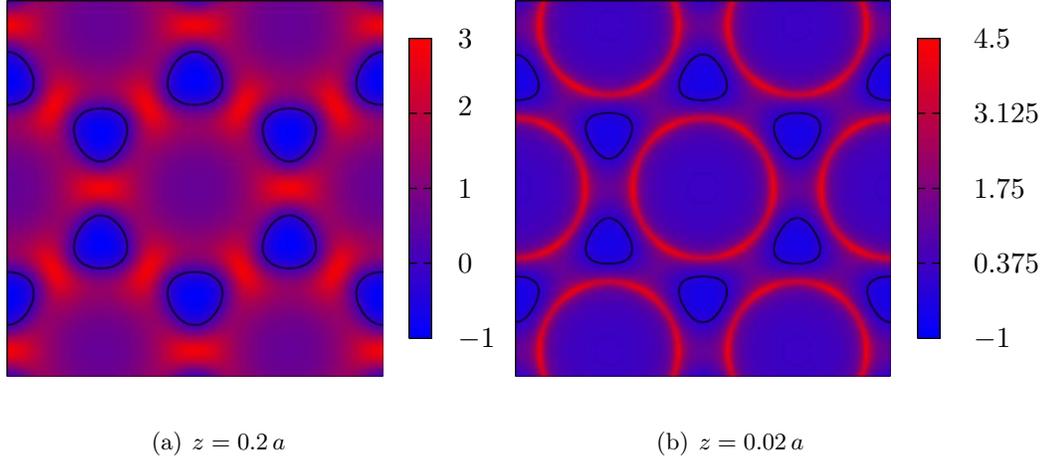


FIG. 4.4: *Champ topologique (en unité de ϕ_0/S) créé par un réseau triangulaire de nanocylindres magnétiques pour un taux d'occupation de $p = 1/2$.*

Le rayon R est un paramètre ajustable qui s'obtient en étudiant la convergence du champ magnétique \mathbf{B} par rapport à R .

Sur la fig 4.3 est représentée la composante z du champ magnétique créé par le réseau de nanocylindres magnétiques pour une distance d de 0.02 (fig. 4.3-b) et 0.2 (fig. 4.3-a) et un rapport $p = 0.5$. Nous voyons sur la figure 4.3 que l'amplitude du champ magnétique diminue rapidement lorsque la distance d augmente. En fait, il est possible de montrer que les composantes de Fourier de la distribution magnétique décroissent exponentiellement avec la distance [85,1]. Lorsque la distance d séparant la nanostructure magnétique du gaz d'électrons est petite, l'amplitude et le nombre de composantes de Fourier seront plus importants. Les variations spatiales du champ magnétique sont plus rapides (voir fig 4.3-c (ligne continue)) et la distance moyenne de variation du champ magnétique ξ est plus petite. Le critère d'adiabaticité peut donc ne pas être vérifié lorsque d est très faible même si l'amplitude du champ magnétique est importante.

Si d augmente, seules les premières composantes de Fourier sont importantes et les variations du champ magnétique deviennent plus régulières (voir fig 4.3-c (ligne pointillée)). ξ augmente et devient proche de la demi-période du réseau pour une distance d suffisamment grande (typiquement pour $d = 0.2 a$). Par contre, l'amplitude du champ magnétique est moins élevée donc l'énergie de splitting Zeeman est plus faible et le gaz d'électrons est moins polarisé, facteur sur lequel il est possible jouer en choisissant convenablement le semiconducteur et le type de porteurs.

En prenant des nano-cylindres en fer ($\mu_0 M \approx 2$ T), une période $a = 100$ nm et un facteur de remplissage $p = 0.5$, nous obtenons une amplitude de champ de l'ordre de 0.5 T pour une distance d de 2 nm et de l'ordre de 0.2 T pour une distance d de 20 nm. Comme l'indiquent les estimations, l'amplitude du champ magnétique est relativement faible, ce qui veut dire que le gaz d'électrons où de trous sera faiblement polarisé en spin si le semiconducteur choisi est non magnétique.

4.4.2 Calcul du champ topologique et du potentiel effectif

Nous avons calculé numériquement le champ topologique $b_t(\mathbf{r})$ (4.15) et le potentiel scalaire (4.8) dans la limite adiabatique pour la distribution magnétique considérée plus haut.

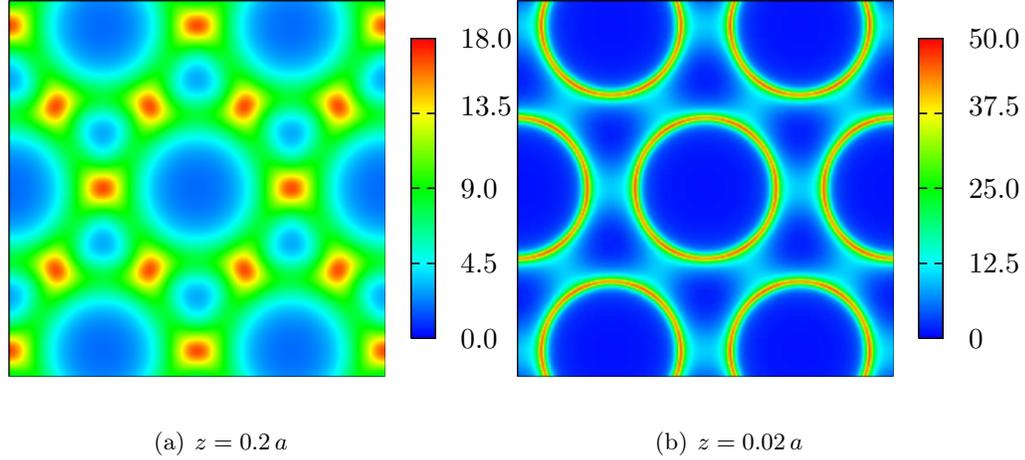


FIG. 4.5: *Potentiel scalaire effectif ($\frac{\hbar^2}{mS}$) calculé pour deux valeurs différentes de la distance séparant le gaz de porteurs de l'arrangement de nanocylindres magnétiques. le taux de recouvrement est égal à 0.5. La valeur moyenne $\langle V(\mathbf{r}) \rangle$ du potentiel scalaire est de 1 meV (amplitude d'environ 2.63 meV) pour $d = 20$ nm et $\langle V(\mathbf{r}) \rangle \approx 1.36$ meV (amplitude d'environ 7.3 meV) pour $d = 2$ nm et une période de 100 nm dans chacun des cas. Pour calculer la valeur moyenne nous avons pris la masse de l'électron dans GaAs.*

Le champ topologique est représenté sur les deux figures 4.4-a,b pour le même jeu de paramètres que précédemment. L'amplitude de $b_t(\mathbf{r})$ est de l'ordre de 2 T avec une valeur moyenne de l'ordre 0.48 T pour $d = 20$ nm et une période de 100 nm (fig 4.4-a). Elle augmente lorsque la distance d diminue (nous obtenons une amplitude de l'ordre 4.5 T pour $d = 2$ nm) mais le flux traversant une maille élémentaire reste constant et égal à 0.48 T. Comme nous le verrons un peu plus loin, le flux du champ topologique $b_t(\mathbf{r})$ ne dépend pas des paramètres géométriques du réseau.

Le potentiel scalaire $V(\mathbf{r})$ est représenté sur la fig 4.5 pour le même jeu de paramètres que précédemment. En considérant un gaz d'électrons avec une masse effective de $0.06 m_e$ ($0.06 m_e$ est la masse effective d'un électron dans GaAs) nous obtenons une moyenne du potentiel effectif de l'ordre de 1 meV pour $d = 20$ nm et de 1.36 meV pour $d = 2$ nm tandis que l'amplitude est de l'ordre de 2.63 meV pour $d = 20$ nm et de 6.5 meV pour une distance $d = 2$ nm. En comparant l'amplitude du potentiel effectif au niveau de Fermi ε_F calculé pour une concentration typique de $n_0 = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ($\varepsilon_F \approx 8$ meV), nous trouvons que l'amplitude du potentiel effectif est du même ordre de grandeur que le niveau de Fermi. Cela veut dire que l'approximation faite dans la sec. 4.3.2, n'est pas valable dans le cas présent.

En comparant le potentiel effectif (fig 4.5) et le champ topologique (fig 4.4) qui est à l'origine de l'effet Hall, nous remarquons que les régions où le potentiel effectif est maximum sont corrélées aux régions où le champ topologique est aussi maximum. Le potentiel effectif $V(\mathbf{r}) > 0$ étant répulsif, l'effet Hall induit par le champ topologique sera moins important parce que les électrons ne pourront pas explorer les régions où l'amplitude du champ topologique est importante. Ceci ne remet pas en cause l'approximation adiabatique, mais un calcul plus précis de la conductivité doit tenir compte du potentiel $V(\mathbf{r})$ et des inhomogénéités du champ topologique.

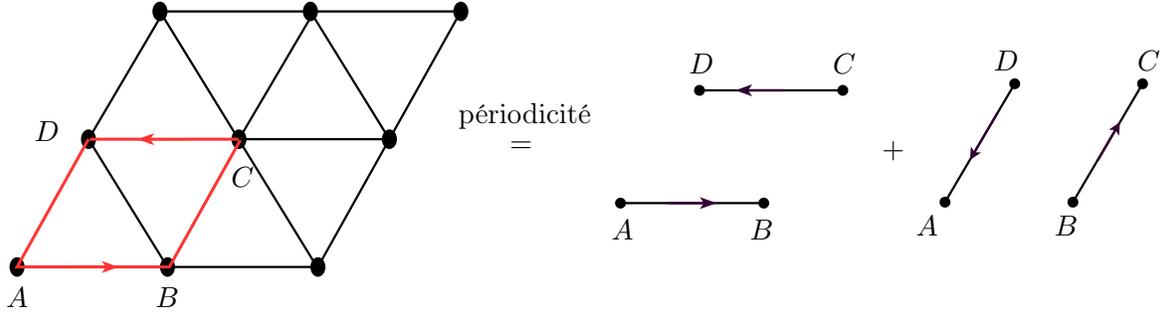


FIG. 4.6: D'après le théorème de Stokes, $\oint_S b_t d\mathbf{S} = \oint_C \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l}$. La surface que nous considérons ici est la surface délimitée par la maille élémentaire ABCD du réseau triangulaire. Le contour délimitant cette maille est orienté dans le sens $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow A$. L'intégrale le long du contour C est décomposable en une somme d'intégrales calculées le long des segments $[A, B]$, $[B, C]$, $[C, D]$ et $[D, A]$. Enfin les intégrales le long de $[A, B]$, $[B, C]$ et $[C, D]$, $[D, A]$ sont de signe opposé car ces segments sont tous équivalents par translation du réseau.

4.4.3 Propriétés du champ topologique

Il existe plusieurs méthodes pour calculer le flux ϕ_t du champ topologique traversant la maille élémentaire du réseau triangulaire. La première méthode consiste à calculer le champ topologique $b_t(\mathbf{r})$ numériquement puis ensuite calculer le flux de $b_t(\mathbf{r})$ traversant la maille élémentaire du réseau. Cette méthode est pratique pour calculer le flux du champ topologique sur une surface quelconque par exemple. La deuxième méthode utilise la construction dite de Berry, qui consiste à calculer l'angle solide délimité par le contour bordant la maille élémentaire dans l'espace des paramètres du hamiltonien (la sphère unité \mathcal{S}^2 pour le cas qui nous intéresse). Elle permet entre autre de montrer que ϕ_t est quantifié et que le nombre de quantum de flux traversant la maille élémentaire notée S dans la suite, dépend uniquement du nombre de régions délimitées par les contours $B_{\text{ext}} = 0$ contenues dans une maille élémentaire et du signe de la composante B_z du champ magnétique total à l'intérieur de ces régions.

Quantification du flux topologique sur une maille élémentaire

Pour calculer le flux ϕ_t traversant une maille du réseau triangulaire, nous définissons le parcours délimité par les segments joignant les points A, B, C et D placés aux nœuds du réseau (fig 4.6) et nous orientons le parcours en tournant dans le sens trigonométrique. En utilisant le théorème de Stokes, il est possible d'écrire

$$\phi_t = \oint_S b_t d\mathbf{S} = \oint_C \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} \mod \phi_0, \quad (4.25)$$

où $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ est donné par l'éq. (4.7) et relié à $b_t(\mathbf{r})$ par l'éq. (4.13). L'intégrale curviligne (4.25) le long du contour C se décompose en une somme de quatre intégrales

$$\oint_C \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} = \int_{\overrightarrow{AB}} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} + \int_{\overrightarrow{BC}} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} + \int_{\overrightarrow{CD}} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} + \int_{\overrightarrow{DA}} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} \mod \phi_0, \quad (4.26)$$

où la notation \overrightarrow{AB} indique que le segment $[A, B]$ est orienté dans le sens A vers B .

La périodicité du réseau implique que

- Les points A, B, C et D sont équivalents par translation d'un vecteur du réseau direct donc la direction du champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ est la même en chaque nœud du réseau (les points A, B, C et D sont confondus dans l'espace des paramètres de l'opérateur \mathcal{H}).
- Tout déplacement le long du segment $[A, B]$ est équivalent à un déplacement sur le segment $[D, C]$. En d'autres termes, chaque point du segment $[A, B]$ admet une image sur le segment $[D, C]$ par translation d'un vecteur du réseau direct.
- Les intégrales curvilignes le long de \overrightarrow{AB} et \overrightarrow{CD} sont de signe opposé (le segment $[C, D]$ se déduit du segment $[A, B]$ par une translation d'un vecteur du réseau direct). Il en est de même pour les intégrales curvilignes le long de \overrightarrow{BC} et \overrightarrow{DA} .

En utilisant toutes les propriétés citées précédemment, nous obtenons le résultat final suivant

$$\phi_t = 0 \text{ mod } \phi_0, \quad (4.27)$$

montrant que le flux du champ topologique est quantifié.

Détermination du flux topologique traversant une maille élémentaire

Le raisonnement précédent montre que le flux ϕ_t est quantifié, mais il ne donne pas le nombre de quantum de flux traversant la maille élémentaire \mathcal{S} .

Pour déterminer le nombre de quantum de flux traversant une maille élémentaire, il faut déterminer les régions délimitées par les lignes de champ magnétique $B_z = 0$ et le signe de $B_z(\mathbf{r})$ à l'intérieur de chaque région (nous dirons par abus de langage qu'une région est de signe positif lorsque $B_z > 0$ à l'intérieur de cette région). Comme expliqué dans l'appendice B, chaque région contribue pour $\pm\phi_0$ au flux topologique total, le signe \pm dépendant du signe de $B_z(\mathbf{r})$ à l'intérieur de chaque région. Le flux topologique traversant une maille élémentaire est donc égal au nombre de régions où le signe de B_z est positif moins le nombre de régions où le signe de B_z est négatif.

En appliquant cette règle à la configuration magnétique étudiée dans ce chapitre, nous trouvons que $\phi_t = +\phi_0$.

4.4.4 Relation entre le flux ϕ_t et le nombre de singularités de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$

Pour calculer le flux ϕ_t à travers une maille élémentaire, nous avons employé le théorème de Stokes afin de transformer l'intégrale curviligne de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ au flux du champ topologique $b_t(\mathbf{r})$ modulo ϕ_0 . En fait le théorème de Stokes ne peut pas être appliqué directement car $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ admet des singularités contenues dans le contour délimitant la maille élémentaire. Dans ce cas, la circulation de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ le long d'un contour \mathcal{C} s'écrit :

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} = \oint_S b_t(\mathbf{r}) d\mathbf{S} + \mathcal{N}\phi_0, \quad (4.28)$$

où \mathcal{C} est un contour quelconque \mathcal{N} un entier relatif dépendant des singularités contenues dans \mathcal{C} et S la surface s'appuyant sur \mathcal{C} .

Pour démontrer ce résultat, nous faisons le raisonnement suivant. Nous considérons un contour \mathcal{C} et une surface S bordée par \mathcal{C} . Nous supposons de plus qu'il y a une singularité en un point quelconque de S . La surface S peut être décomposée en un disque D centré au point où $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ est singulier et $S' = S \setminus D$, la surface S privée du disque D (cf fig.4.8). Pour tout $\mathbf{r} \in S'$, $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ et $b_t(\mathbf{r})$

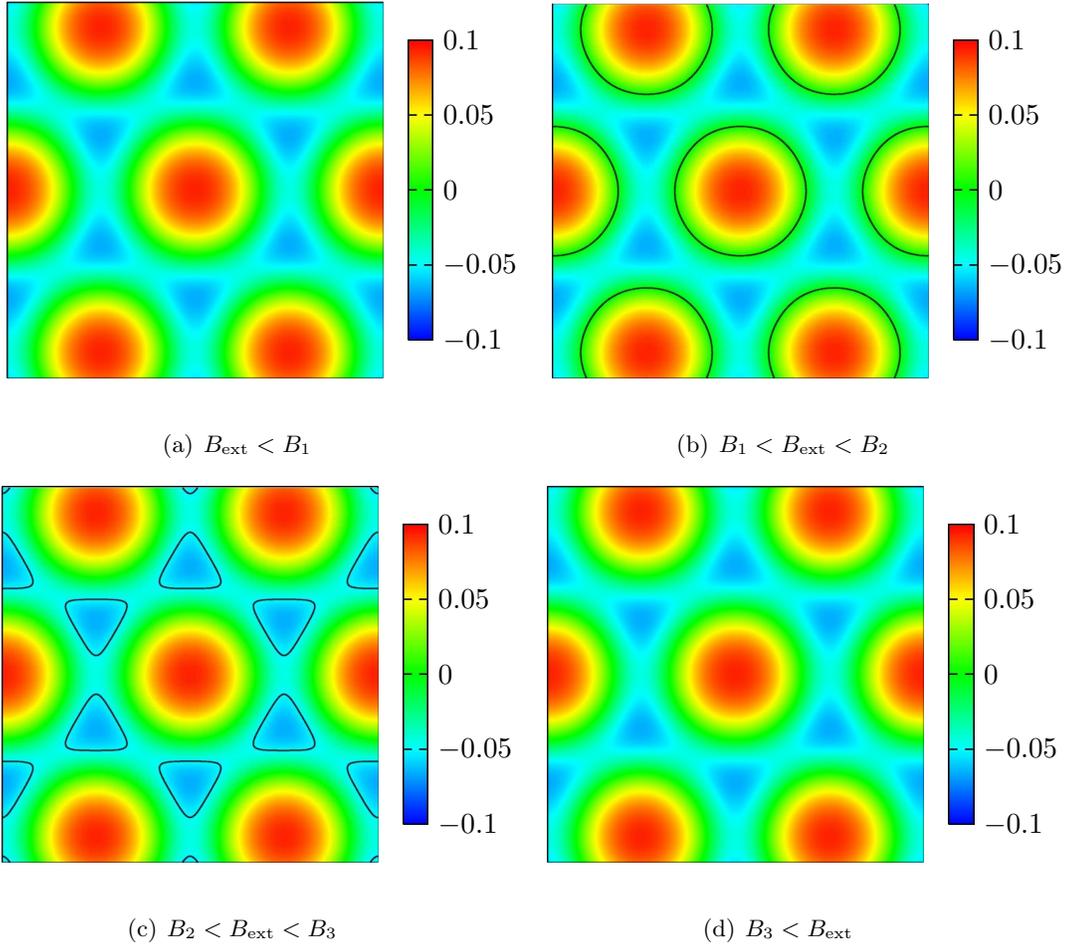


FIG. 4.7: Composante z du champ magnétique et lignes de champ définies par $B_{\text{ext}} + B_z(\mathbf{r}) = 0$ calculées pour différentes valeurs de B_{ext} . (a) $B_{\text{ext}} < B_1$. les lignes de champ magnétique $B_z + B_{\text{ext}} = 0$ sont absentes et $\phi_t = 0$. (b) $B_1 < B_{\text{ext}} < B_2$, les lignes de champ $B_z + B_{\text{ext}} = 0$ forment un réseau triangulaire. La région délimitée est de signe positif et $\phi_t = +\phi_0$. (c) $B_2 < B_{\text{ext}} < B_3$ les lignes de champ $B_z + B_{\text{ext}} = 0$ forment le réseau dual du réseau triangulaire. Les régions délimitées sont de signe $B_z < 0$ et $\phi_t = -2\phi_0$. (d) $B_3 < B_{\text{ext}}$ les lignes de champ $B_z + B_{\text{ext}} = 0$ disparaissent et $\phi_t = 0$

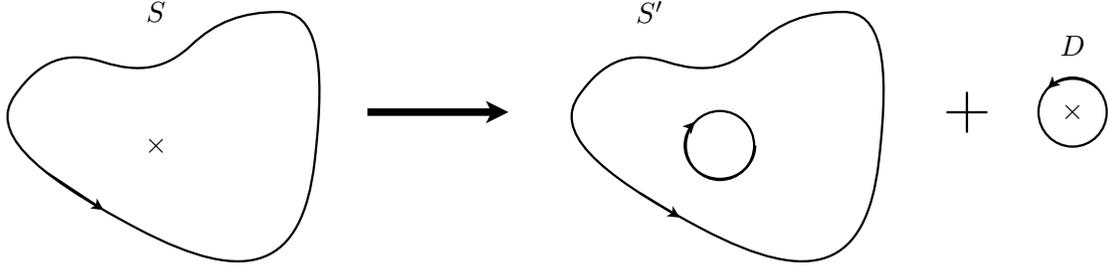


FIG. 4.8: Surface S quelconque contenant une singularité. Pour calculer le flux de b_t à travers cette surface, nous décomposons celle-ci comme la somme de deux surfaces, $S' = S \setminus D$ et d'un disque D . L'orientation de chaque surface est indiquée par une flèche.

sont continus et dérivables. Le flux de $b_t(\mathbf{r})$ à travers S' peut donc être calculée en utilisant le théorème de Stokes. Nous avons

$$\oint_{\partial S'} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} = \int_{S'} b_t(\mathbf{r}) d\mathbf{S}, \quad (4.29)$$

où $\partial S'$ sont les bords de S' . L'intégrale curviligne de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ le long de $\partial S'$ est égale à

$$\oint_{\partial S'} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} = \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} + \oint_{\partial D} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l}, \quad (4.30)$$

avec ∂D le contour du disque D . L'orientation du contour ∂D est indiquée sur la fig.4.8. En utilisant l'éq. 4.29 et l'éq. 4.30, nous obtenons

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{a}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{l} = \int_{S'} b_t(\mathbf{r}) d\mathbf{S} - \oint_{\partial D} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l}. \quad (4.31)$$

L'intégrale curviligne de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ le long de ∂D peut se calculer en utilisant la paramétrisation suivante :

$$\mathbf{n} = (n_x = \rho \cos \theta, n_y = \rho \sin \theta, n_z = -\sqrt{1 - \rho^2}), \quad (4.32)$$

avec $\theta \in [0, 2\pi]$ et $\rho \in [0, R]$ ou R est le rayon du disque D . Nous trouvons dans ce cas que

$$\int_{\partial D} \frac{1}{2\sqrt{1+n_z}} \begin{pmatrix} n_x \partial_x n_y - n_y \partial_x n_x \\ n_x \partial_y n_y - n_y \partial_y n_x \end{pmatrix} \cdot d\mathbf{l} = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{R^2}{1 - \sqrt{1 - R^2}} d\theta = 2\pi + f(R), \quad (4.33)$$

où $f(R)$ est une fonction régulière tendant vers zéro lorsque $R \rightarrow 0$. En conséquence, en prenant la limite $R \rightarrow 0$ nous trouvons que

- le flux du champ topologique $b_t(\mathbf{r})$ à travers S' tend vers le flux du champ topologique à travers S ($S' \rightarrow S$ lorsque $R \rightarrow 0$),
- la circulation de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ le long de ∂D tend vers $\pm \phi_0$ lorsque $R \rightarrow 0$,
- l'intégrale curviligne de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ le long de \mathcal{C} est donnée par

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} = \int_S b_t(\mathbf{r}) d\mathbf{S} \pm \phi_0, \quad (4.34)$$

le signe étant donné par le signe du champ topologique au voisinage de la singularité.

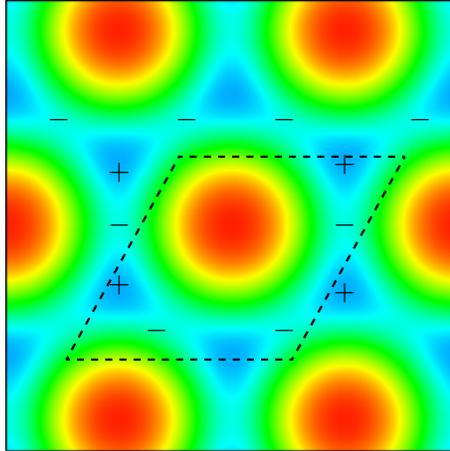


FIG. 4.9: Composante B_z du champ magnétique. La maille élémentaire est indiquée par les traits pointillés noirs et les singularités de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ sont localisées au voisinage des signes + et - indiquant le signe du champ topologique.

Pour calculer le flux du champ topologique à travers une maille élémentaire délimitée par le contour \mathcal{C} , il suffit de déterminer le nombre de points où le champ magnétique pointe dans la direction du pôle sud et de regarder le signe du champ topologique dans le voisinage immédiat de chaque singularité. Dans le cas de la fig., l'intégrale curviligne de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ le long de \mathcal{C} est égale à zéro. La distribution magnétique considérée a cinq points par maille élémentaire où le champ magnétique pointe vers le pôle sud (cf fig. 4.9). Le champ de jauge $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ étant singulier en ces points, il faut tenir compte de ces singularités pour calculer le flux ϕ_t . Nous trouvons dans ce cas que trois singularités ont une contribution négative et que deux singularités ont une contribution positive. En conséquence, nous trouvons que

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} = \oint_S b_t(\mathbf{r}) d\mathbf{S} - \phi_0. \quad (4.35)$$

En utilisant le calcul précédant montrant que l'intégrale curviligne de $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ le long de la maille élémentaire est nulle, nous obtenons le résultat obtenu précédemment par construction géométrique : $\phi_t = 0$.

Effet d'un champ magnétique extérieur

L'application d'un champ magnétique constant selon l'axe Oz déforme les lignes de champ $B_z = 0$.

1. Si le champ extérieur appliqué est négatif, les lignes de champ $B_z + B_{ext} = 0$ se déforment jusqu'à former un point puis disparaissent pour une valeur donnée de $B_{ext} = B_1$ (fig 4.7-a). Pour $B_{ext} < B_1$, $B_z + B_{ext}$ garde un signe constant et ϕ_t est égal à 0.
2. Pour $B_{ext} > B_1$, les lignes de champ $B_z + B_{ext} = 0$ se déforment et se touchent pour une valeur donnée de $B_{ext} = B_2$ (fig 4.7-b). Le champ magnétique total a une composante suivant

Oz qui est positive à l'intérieur de la région délimitée par $B_z + B_{ext} = 0$. Dans ce cas, le flux ϕ_t est égal à $\phi_t = +\phi_0$ car il y a une région par cellule élémentaire.

3. Enfin, si $B_{ext} > B_2$ alors les lignes de champ $B_z + B_{ext} = 0$ changent de topologie. Les régions délimitées par $B_z + B_{ext} = 0$ se répartissent sur le réseau dual du réseau triangulaire (lignes continues sur la fig 4.7-c) puis disparaissent au dessus d'une valeur B_3 du champ extérieur. Il est simple de voir que le flux ϕ_t est égal à $-2\phi_0$ lorsque $B \in [B_2, B_3]$ et est égal à zéro pour $B_{ext} > B_3$ (fig 4.7-d).

L'amplitude des différents champs critiques B_1 , B_2 et B_3 a été estimée pour la distribution magnétique précédente. En prenant les mêmes paramètres, nous trouvons que $B_1 \approx -0.2$ T, $B_2 \approx 0.09$ T et $B_3 \approx 0.2$ T.

$\sigma_{xy}(B_{ext})$ contient deux termes venant du champ topologique b_t et du champ magnétique extérieur B_{ext} . Le premier terme est donné par le couple d'équations (4.20,4.21) tandis que le deuxième terme est l'effet Hall normal induit par le champ extérieur. En champ faible, la composante induite par le champ magnétique extérieur est linéaire tandis que la composante topologique (induite par le champ b_t) varie proportionnellement au flux $\phi_t(B_{ext})$ qui est une fonction discontinue de B_{ext} . La conductivité transverse totale varie linéairement par rapport à B_{ext} et présente des discontinuités induites par les variations de ϕ_t ayant lieu à des valeurs précises de B_{ext} . Ces variations de σ_{xy} sont schématisées sur la figure 4.10.

Dans un cas réel, les variations de la conductivité transverse au voisinage des champs magnétiques B_1 , B_2 et B_3 sont arrondies car le critère d'adiabaticité n'est pas vérifié au voisinage de ces points (le module du champ magnétique s'annule en certains points de l'espace). Néanmoins, les variations de la conductivité transverse permettent d'identifier le mécanisme de chiralité de spin sans ambiguïté.

4.4.5 Choix du semi-conducteur

Les résultats obtenus dans les sections précédentes supposent que l'approximation adiabatique (4.10) est applicable. Pour qu'elle soit valable, il faut un splitting Zeeman important et une faible densité de porteurs de charge. Le premier paramètre est fortement influencé par le choix du semi-conducteur et le type de porteurs de charge. Il est possible d'employer des semi-conducteurs magnétiques dilués et de remplacer le gaz d'électrons par un gaz de trous car les constantes d'échange pour les trous sont plus grandes que pour les électrons dans les semi-conducteurs tel que $Cd_{1-x}Mn_xSe$ ou $Zn_{1-x}Mn_xSe$.

Pour estimer le champ topologique agissant sur les trous, nous utilisons le hamiltonien de Luttinger [38]

$$H_h = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \nabla^2 - 2\gamma_2 (\mathbf{J} \cdot \nabla)^2 \right] + E_{ex} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r}), \quad (4.36)$$

où $J_{\mu=x,y,z}$ sont les matrices de moment angulaire $J = 3/2$, γ_1 et γ_2 sont des paramètres dépendant de la structure de bande, m_e la masse de l'électron libre, $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ le vecteur pointant dans la direction du champ d'échange agissant sur le gaz de trous et E_{ex} la valeur moyenne du champ d'échange créé par les impuretés magnétiques,

$$E_{ex} = -JSxN_0\beta \mathcal{B}_S(g_L\mu_B B/k_B T), \quad (4.37)$$

β la constante d'échange, S le moment magnétique de l'impureté, xN_0 la concentration d'atomes magnétiques, $\mathcal{B}_S(z)$ la fonction de Brillouin modifiée et g_L le facteur de Landé effectif de l'atome magnétique.

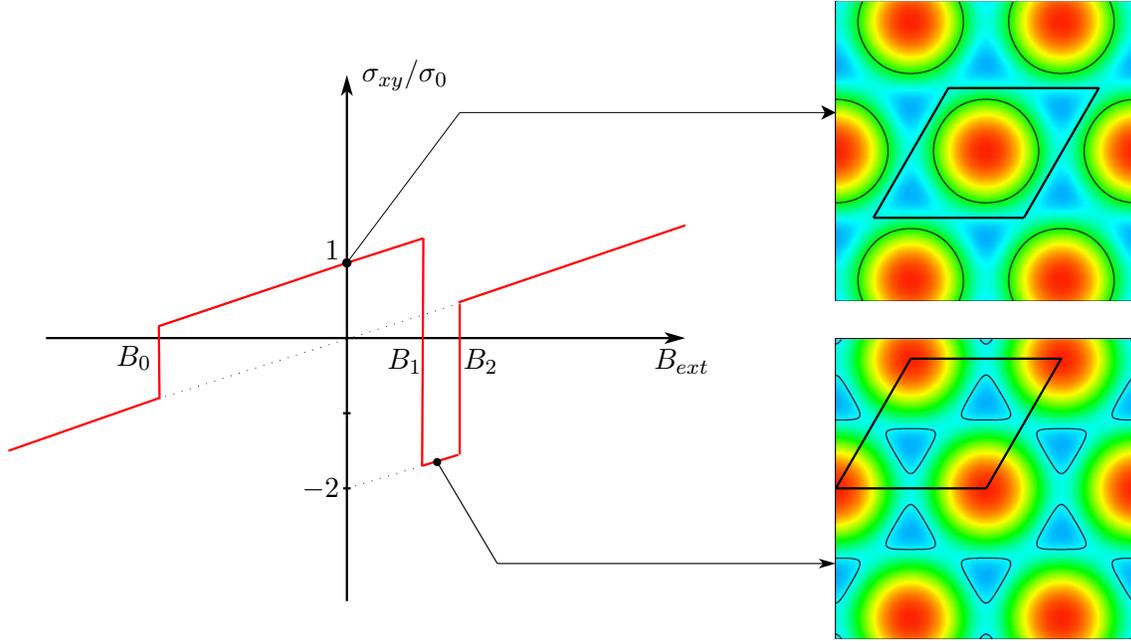


FIG. 4.10: Schéma de variation de la conductivité de Hall en présence d'un champ magnétique extérieur appliqué suivant la direction z . σ_{xy}^0 est la conductivité de Hall lorsque le champ topologique a un flux par maille élémentaire égal ϕ_0 . Sur la figure de droite sont représentées les lignes de champ $B_z + B_{ext} = 0$ correspondant aux différentes valeurs du flux du champ topologique.

Le champ topologique b_t pour des trous décrits par l'hamiltonien 4.36, s'obtient en appliquant la transformation $T(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{J} \cdot \mathbf{\Omega}(\mathbf{r})/2)$, où $\mathbf{\Omega}(\mathbf{r})$ est le vecteur rotation [3]. En supposant que le splitting d'échange induit par les impuretés magnétiques est fort, nous trouvons que le champ topologique et le potentiel scalaire pour des trous dans la bande de valence, sont proportionnels à J et sont donnés par les mêmes formules (4.15) et (4.8) que pour électrons à un facteur trois près. Après avoir appliqué la transformation $T(\mathbf{r})$ sur le hamiltonien 4.21 et en se limitant aux trous de spin $J_z = -3/2$, nous obtenons le même hamiltonien que pour les électrons avec $-1/m$ remplacé par $1/m^* = (\gamma_1 + \gamma_2)/m_0$.

Le splitting Zeeman dans les semiconducteurs peut être assez grand pour que le gaz de trous soit complètement polarisé sous un champ magnétique de 0.2 T. Pour voir ceci, nous faisons quelques estimations du couplage d'échange E_{ex} en prenant $N_0\beta = -1.2$ eV, qui est l'amplitude typique de la constante d'échange dans différents semi-conducteurs ($\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$, $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$) et une densité d'impuretés magnétiques $x = 0.05$. Pour un champ magnétique de 0.2 T, $g_L = 2$ et une température de $T = 4.2$ K, nous obtenons une énergie d'échange de $E_{ex} = 11$ meV. Le niveau de Fermi d'un gaz de trous pour une bande splittée est égal à $\varepsilon_F = 2\pi\hbar^2 n_p/m^*$, où m^* est la masse effective des trous et n_p la concentration des porteurs dans la bande de valence. En prenant $m^* = 0.5 m_0$ et $n_p = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, nous obtenons un niveau de Fermi $\varepsilon_f \approx 1$ meV. Le critère d'adiabaticité pour ce choix de paramètres est vérifié car $\lambda \approx 0.01 \leq 1$ (éq. (4.13)).

Pour les électrons, il faut une densité de porteurs très faible et une température très basse pour

que la condition d'adiabaticité soit vérifiée. En prenant une constante d'échange pour l'interaction d'échange $s - d$ $N_0\alpha$ de l'ordre de 0.22 eV, une masse effective de $m^* = 0.22m_0$, une température de $T = 4.2$ K et une concentration d'électrons $n_0 = 10^{11}$ cm⁻², nous obtenons $\varepsilon_f \approx 4.4$ meV, $E_{ex} \approx 2$ meV et un paramètre λ de l'ordre de un. En conséquence, il faut calculer l'effet Hall en tenant compte des termes non-adiabatiques et de la polarisation partielle du gaz d'électrons.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous proposons un modèle théorique et une réalisation expérimentale mettant en évidence le mécanisme de chiralité de spin en se basant sur les propriétés de transport de gaz d'électrons bidimensionnel soumis à des modulations magnétiques périodiques.

La mise en évidence de ce mécanisme est basée sur les propriétés du champ topologique induit par le couplage entre le spin des porteurs de charge et la distribution de champ. En calculant la conductivité transverse, nous avons vu qu'elle contient un terme additionnel proportionnel au flux du champ topologique.

Dans le cas des distributions magnétiques périodiques à deux dimensions, nous avons montré que le flux du champ topologique est quantifié et discontinu lorsqu'un champ magnétique extérieur est appliqué. Enfin, les estimations numériques des différents paramètres montrent qu'il est possible d'observer ce phénomène expérimentalement.

Chapitre 5

Effet Hall anormal induit par la chiralité de spin sur le réseau kagomé

Sommaire

5.1	Introduction	63
5.2	Modèle	65
5.2.1	Origine de l'effet Hall induit par la texture de spin	66
5.2.2	Définition du réseau kagomé	67
5.2.3	Paramètres du modèle	67
5.2.4	Diagonalisation du hamiltonien	68
5.3	Expression de la conductivité transverse	68
5.4	Résultats numériques	70
5.4.1	Structure de Bande et nombres de Chern associés	70
5.4.2	Calcul de $\sigma_{xy}(\varepsilon_f)$	72
5.4.3	Calcul de $\sigma_{xy}(J)$	72
5.4.4	Calcul de $\sigma_{xy}(\chi)$	75
5.5	Effet de la température	76
5.6	Effet d'un champ magnétique perpendiculaire au plan kagomé	78
5.7	Conclusion	78

5.1 Introduction

Le composé pyrochlore $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ est un composé ferromagnétique frustré ayant une transition magnétique à 90 K. Les moments de Mo s'ordonnent ferromagnétiquement et les moments de Nd, faiblement couplés aux moments de Mo par une interaction antiferromagnétique, possèdent une forte anisotropie uniaxe [103]. Les variations de l'aimantation en fonction de la température sont caractérisées par une saturation de l'aimantation au voisinage de $T_1 = 30$ K puis une décroissance de $M(T)$ lorsque $T \rightarrow 0$. En dessous de cette température, les moments du néodyme s'ordonnent progressivement dans la direction opposée aux moments de Mo à cause de l'interaction anti-ferromagnétique $J_{\text{Mo-Nd}}$. En contrepartie, les moments de Mo initialement orientés ferromagnétiquement, ont une direction tiltée de quelques degrés lorsque la température est en dessous de 30 K [103, 88].

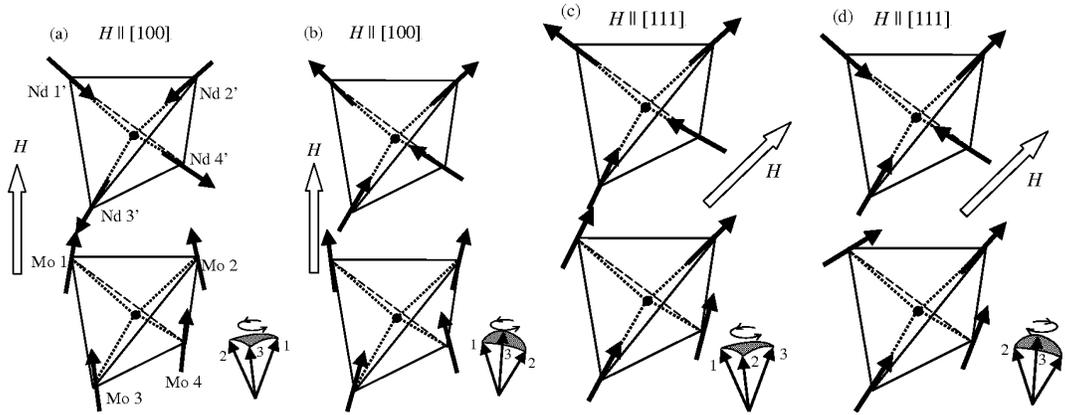


FIG. 5.1: Configuration magnétique des moments de Mo et de Nd pour deux directions d'application différentes du champ magnétique [98]

En présence de champ magnétique, les moments de néodyme s'ordonnent dans une configuration qui dépend explicitement de la direction d'application du champ magnétique. Lorsque le champ magnétique est appliqué dans la direction [100], les moments de néodyme mettent dans une configuration 2in-2out (fig 5.1-a) tandis que les moments de Mo s'orientent dans la direction du champ appliqué avec une direction tiltée. Lorsque le champ est appliqué dans la direction [111], les moments de néodyme passent d'une configuration 2in-2out en champ faible à une configuration 1in-3out en champ fort, alors que les moments de Mo restent dans une configuration tiltée [103,102,98].

L'effet Hall dans ce composé a un comportement atypique par rapport au champ magnétique et à la température. Lorsque la température de mesure est comprise entre 90 K et 40 K, la résistivité transverse suit la loi $\rho_H = R_0 B + R_s M$ car les moments de Mo sont orientés ferromagnétiquement et les moments de néodyme sont désordonnés. En dessous de 30 K, ρ_H augmente lorsque la température de mesure diminue alors que l'aimantation tend vers zéro. D'autre part, Le comportement de ρ_H dépend de la direction du champ magnétique. La résistivité transverse est de signe constant lorsque le champ appliqué est dans la direction [100] alors qu'elle change de signe en champ fort lorsque le champ magnétique est appliqué dans la direction [111] [83,88].

Ohgushi *et al* [50] développent une théorie basé sur le modèle de Haldane [23], dans lequel la configuration magnétique des moments de Mo est remplacée par un flux ϕ traversant une maille élémentaire. En se limitant au réseau kagomé, ils montrent que l'effet Hall peut être non nul lorsque le flux ϕ est non nul. Taguchi *et al* [99] proposent le mécanisme de chiralité pour expliquer le changement de signe obtenu par application du champ magnétique dans la direction [111]. Dans la direction [100] la chiralité de spin portée par les moments de Mo, définie par le produit mixte de trois moments S_1, S_2 et S_3 ($\chi = \langle \mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3) \rangle$), ne change pas de signe car les moments de Nd restent dans une configuration 2in-2out quelle que soit l'amplitude du champ appliqué. Ce n'est pas le cas lorsque le champ magnétique est appliqué dans la direction [111], car les moments de néodyme passent de la configuration 2in-2out en champ faible a la configuration 1in-3out en champ fort. La chiralité portée par les moments de Mo change de signe ce qui induit un changement de signe de σ_{xy} (cf Fig. 5.2). Cet argument fait toujours l'objet de discussions à ce jour [98,82,102].

Dans ce chapitre, nous apportons quelques éléments de réponse sur la pertinence du mécanisme de chiralité de spin dans le composé $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$. Le modèle développé dans ce chapitre n'est pas

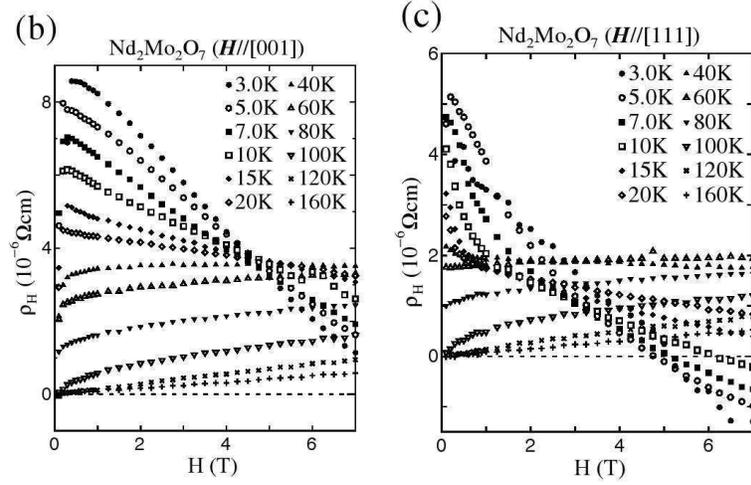


FIG. 5.2: Résistivité de Hall mesurée dans deux directions différentes du champ magnétique appliqué $[102]$. La résistivité de Hall est caractérisée par une valeur finie lorsque la température tend vers zéro. Ce résultat ne dépend pas de la direction du champ magnétique. Enfin Ces deux figures montrent que le signe de la résistivité transverse dépend de la direction d'application du champ magnétique.

applicable directement à ce composé, mais a l'avantage d'avoir un nombre de paramètres restreints. Il est basé sur le transport d'un gaz d'électrons en interaction avec une configuration magnétique non coplanaire et non colinéaire ayant les symétries du réseau kagomé.

5.2 Modèle

Dans ce chapitre, nous considérons des électrons sur un réseau kagomé, interagissant avec une texture magnétique par l'intermédiaire d'un couplage local entre les moments localisés \mathbf{S}_i du réseau kagomé et le spin d'un électron se déplaçant sur le réseau. Le hamiltonien décrivant ce système est donné par :

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \right) - J \sum_{i\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger (\sigma_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{S}_i) c_{j\beta}. \quad (5.1)$$

Le premier terme de l'hamiltonien décrit le terme de saut de l'électron entre un site i et un site j . t_{ij} est l'intégrale de recouvrement des fonctions d'ondes du site i et du site j et peut être interprétée comme la probabilité de voir l'électron se déplacer du site i au site voisin j . $c_{i\sigma}^\dagger$ et $c_{i\sigma}$ sont les opérateurs création et annihilation d'un électron de spin σ sur le site i . Le deuxième terme de l'éq. (5.1) est un terme d'échange local couplant les moments \mathbf{S}_i au spin de l'électron. Enfin, J est la constante d'échange local que nous supposons identique pour chaque moment, $\sigma_{\alpha\beta}$ sont les matrices de Pauli et \mathbf{S}_i est le moment magnétique porté par le site i .

5.2.1 Origine de l'effet Hall induit par la texture de spin

La texture de spin est prise en compte dans le hamiltonien par l'intermédiaire des moments localisés \mathbf{S}_i que nous supposons classiques. Elle agit sur le déplacement des électrons par l'intermédiaire d'une modulation des constantes de saut entre les sites i et j . Pour mettre en évidence cette modulation, nous diagonalisons le deuxième terme de l'éq. (5.1) en chaque site du réseau. Ce terme est représenté par la matrice

$$M = J \cos \theta_i \sigma_z + \sin \theta_i (\cos \varphi_i \sigma_x + \sin \varphi_i \sigma_y), \quad (5.2)$$

θ_i, φ_i sont les coordonnées sphériques du moment \mathbf{S}_i . Les valeurs propres de M sont égales à $\pm J$ et les opérateurs d'annihilation associés aux états propres de M sont donnés par la transformation suivante :

$$\begin{pmatrix} c_{i+} \\ c_{i-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_i}{2} e^{-i\varphi_i} & -\sin \frac{\theta_i}{2} \\ \sin \frac{\theta_i}{2} & \cos \frac{\theta_i}{2} e^{i\varphi_i} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Les signes + et - font référence aux états propres associés aux valeurs propres $\pm J$. Les opérateurs de création correspondants sont donnés par l'expression conjuguée de l'éq. (5.3). En exprimant le hamiltonien dans cette nouvelle base, nous trouvons que le terme d'échange local est diagonal, mais le terme de saut devient complexe et couple les états de spin + et - :

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \epsilon \epsilon'} \tilde{t}_{ij\epsilon\epsilon'} \left(c_{i\epsilon}^\dagger c_{j\epsilon'} + h.c. \right) + \sum_{i\lambda=\pm} \lambda J n_{i\lambda}, \quad (5.4)$$

où \tilde{t}_{ij} est une matrice donnée par

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{ij} &= t_{ij} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} e^{i(\varphi_j - \varphi_i)} + \sin \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} & \sin \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} e^{i\varphi_j} + \sin \frac{\theta_j}{2} \cos \frac{\theta_i}{2} e^{i\varphi_i} \\ \sin \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} e^{-i\varphi_j} + \sin \frac{\theta_j}{2} \cos \frac{\theta_i}{2} e^{-i\varphi_i} & \cos \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} e^{i(\varphi_i - \varphi_j)} + \sin \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} \end{pmatrix} \\ &= t_{ij} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{ij}}{2} e^{i\phi_{ij}} & \sin \frac{\theta_{ij}}{2} e^{i\lambda_{ij}} \\ \sin \frac{\theta_{ij}}{2} e^{-i\lambda_{ij}} & \cos \frac{\theta_{ij}}{2} e^{-i\phi_{ij}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

où θ_{ij} est l'angle entre les moments \mathbf{S}_i et \mathbf{S}_j et ϕ_{ij} et λ_{ij} deux facteurs de phase dépendant de l'orientation de \mathbf{S}_i et \mathbf{S}_j . La transformation appliquée au hamiltonien (5.1) est identique à la transformation continue appliquée dans le chap. 4. Cependant, il n'est pas possible de définir un potentiel de jauge en chaque points du réseau contrairement au modèle employé dans le chap. 4. Dans ce modèle, le potentiel de jauge est remplacé par un terme de saut complexe dont la phase joue un rôle similaire au potentiel de jauge.

Considérons le cas d'un réseau dont la maille est constituée de trois sites i, j et k (cas du réseau kagomé). Lorsqu'un électron se déplace le long d'un parcours fermé contenant des sites i, j et k non équivalents, sa fonction d'onde acquiert une phase donnée par

$$\phi_{1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1} = \phi_{12} + \phi_{23} + \phi_{31}, \quad (5.6)$$

où ϕ_{12}, ϕ_{23} et ϕ_{31} sont les phases du terme de saut entre les sites un, deux et trois. Ce résultat est valable quelle que soit la valeur de la constante de couplage J . Dans la limite adiabatique ($J \rightarrow \infty$), la phase de Berry $\phi_{1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1}$ peut être calculée explicitement. Elle est égale au produit mixte des trois moments $\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j$ et \mathbf{S}_k [94], qui est aussi nommé chiralité de spin :

$$\chi_{ijk} = \mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k). \quad (5.7)$$

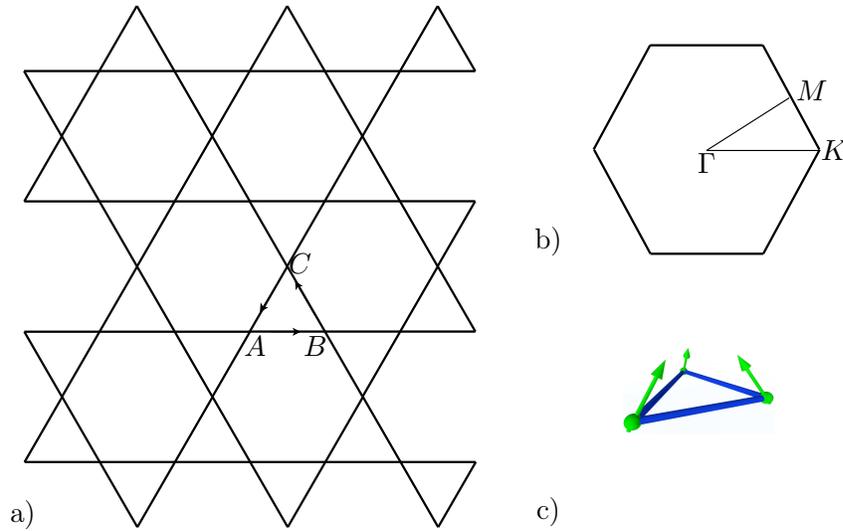


FIG. 5.3: (a) Réseau kagomé : Les points A, B et C représentent le motif de la maille élémentaire. (b) Zone de Brillouin. (c) Configuration en ombrelle des moments magnétiques.

Lorsque J est fini, la phase de Berry peut ne plus être proportionnelle à la chiralité de spin à cause des termes de couplage entre les électrons de spin opposés.

Dans la suite, nous nous intéressons au modèle du double échange (5.1) appliqué au réseau kagomé, sur lequel est placée une structure magnétique périodique et non coplanaire et nous calculons la conductivité transverse en utilisant le modèle développé précédemment.

5.2.2 Définition du réseau kagomé

Le réseau kagomé est formé par un assemblage de triangles équilatéraux de côté a ayant un sommet en commun (fig 5.3) que nous décrirons cristallographiquement comme étant un réseau triangulaire de période $2a$ dont le motif est constitué de trois sites répartis sur un triangle équilatéral de côté a . Dans la suite, nous choisissons la distance a comme unité de distance. Il est avantageux de décrire la position des différents sites du réseau kagomé à partir des trois vecteurs de base

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = (1, 0) \\ \mathbf{a}_2 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \\ \mathbf{a}_3 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \end{cases} \quad (5.8)$$

décrivant le déplacement du site A vers le site B , du site B vers le site C et du site C vers le site A respectivement. Avec ces conventions, la zone de Brillouin, représentée sur la fig 5.3, est un hexagone dont les sommets sont en $\frac{2\pi}{3}\mathbf{a}_i$ où $i = 1, 2, 3$ (cf fig 5.3).

5.2.3 Paramètres du modèle

De par sa géométrie, le réseau kagomé (comme le réseau pyrochlore) favorise les configurations magnétiques non colinéaires telle que la configuration en ombrelle. Cette configuration peut être

obtenue en considérant l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya [55] entre les moments magnétiques. Elle est décrite par les coordonnées de moments suivantes $(\pi/6, \theta)$, $(5\pi/6, \theta)$ et $(-\pi/2, \theta)$, l'angle θ pouvant prendre toutes les valeurs comprises entre 0 et π . En remplaçant les différentes coordonnées dans l'éq. (5.7) définissant la chiralité de spin, nous obtenons l'expression suivante

$$\chi = \frac{3\sqrt{3}}{2} \cos \theta \sin^2 \theta. \quad (5.9)$$

Le deux derniers paramètres de ce modèle sont le niveau de Fermi et la constante de couplage J que nous supposons identique en chaque site du réseau. Enfin nous considérons que le module des moments magnétiques est constant et indépendant du site considéré.

5.2.4 Diagonalisation du hamiltonien

Pour résoudre le hamiltonien (5.4), nous considérons uniquement un terme de saut entre les premiers voisins et nous posons $t_{i,j} = t$ comme unité d'énergie. Le Hamiltonien (5.1) s'écrit dans l'espace réciproque

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (5.10)$$

où $\Psi_{\mathbf{k}} = (c_{ka\uparrow}, c_{kb\uparrow}, c_{kc\uparrow}, c_{ka\downarrow}, c_{kb\downarrow}, c_{kc\downarrow})$. Les opérateurs $c_{ki\sigma}$ sont les transformées de Fourier des opérateurs création $c_{i,\alpha,\sigma}$ (l'indice i fait référence à la maille du réseau et α est le site α de la maille i) :

$$c_{k,\alpha,\sigma} = \sum_i c_{i,\alpha,\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}, \quad (5.11)$$

\mathbf{R}_i est un vecteur du réseau direct. Enfin $h_{\mathbf{k}}$ est une matrice 6×6 donnée par

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -J \cos \theta & p_k^1 & p_k^3 & -J \sin \theta e^{i\frac{\pi}{6}} & 0 & 0 \\ p_k^1 & -J \cos \theta & p_k^2 & 0 & -J \sin \theta e^{i\frac{5\pi}{6}} & 0 \\ p_k^3 & p_k^2 & -J \cos \theta & 0 & 0 & iJ \sin \theta \\ -J \sin \theta e^{-i\frac{\pi}{6}} & 0 & 0 & J \cos \theta & p_k^1 & p_k^3 \\ 0 & -J \sin \theta e^{-i\frac{5\pi}{6}} & 0 & p_k^1 & J \cos \theta & p_k^2 \\ 0 & 0 & -iJ \sin \theta & p_k^3 & p_k^2 & J \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

avec $p_k^i = 2t \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i$, \mathbf{k} un vecteur dont les valeurs sont limitées à la première zone de Brillouin. $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ et $|n, \mathbf{k}\rangle$ sont les valeurs propres et les vecteurs propres associés à la matrice (5.12).

Il n'est pas possible de déterminer analytiquement les valeurs propres de la matrice (5.12) pour un point quelconque de la zone de Brillouin excepté aux points de haute symétrie. Il faut donc avoir recours aux méthodes numériques pour obtenir les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice (5.12).

5.3 Expression de la conductivité transverse

Pour calculer la conductivité transverse, nous nous plaçons dans la limite de la réponse linéaire et nous ne considérons pas les mécanismes liés à la diffusion des électrons par des impuretés. Nous

nous limitons donc à l'étude de l'effet de la chiralité de spin sur le terme de Karplus et Luttinger. Dans la limite statique, la conductivité transverse s'écrit :

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= e^2 \hbar \sum_n \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} f_{n,\mathbf{k}} \sum_{m \neq n} \frac{(v_x)^{nm} (v_y)^{mn} - (v_x)^{mn} (v_y)^{nm}}{(\varepsilon_{n,\mathbf{k}} - \varepsilon_{m,\mathbf{k}})^2} \\ &= \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} f_{n,\mathbf{k}} [\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_{n,\mathbf{k}}]_z,\end{aligned}\quad (5.13)$$

où $f_{n\mathbf{k}}$ est la distribution de Fermi-Dirac et $v_{\alpha}^{nm} = \langle n, \mathbf{k} | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hbar \mathbf{k}}{\partial k_{\alpha}} | m, \mathbf{k} \rangle$ avec $\alpha = x, y$ les éléments de matrices de l'opérateur vitesse calculés entre les états $|n, \mathbf{k}\rangle$ et $|m, \mathbf{k}\rangle$. Enfin $\mathcal{A}_{n,\mathbf{k}} = -i \langle n\mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | n\mathbf{k} \rangle$ est le potentiel de jauge associé aux états $|n, \mathbf{k}\rangle$. L'expression (5.13) peut être écrite sous une forme plus compacte en posant la quantité suivante

$$\Omega_{n,\mathbf{k}} = [\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_{n,\mathbf{k}}]_z, \quad (5.14)$$

aussi appelée courbure de Berry. Nous obtenons finalement

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} f_{n,\mathbf{k}} \Omega_{n,\mathbf{k}}, \quad (5.15)$$

où la somme sur n et k est étendue à l'ensemble des états d'énergie inférieure au niveau de Fermi.

Les courbures de Berry ont des propriétés intéressantes :

1. Lorsque le niveau de Fermi coupe une ou plusieurs bandes d'énergie, la somme sur tous les niveaux situés en dessous du niveau de Fermi se réduit à une somme faisant intervenir uniquement les états proches du niveau de Fermi (On obtient ce résultat en faisant une intégration par partie de l'éq. (5.15)). Ce résultat est général et ne dépend pas de la dimensionalité de l'espace [24].
2. Pour chaque bande m , la somme de $\Omega_{m,\mathbf{k}}$ étendue sur toute la zone de Brillouin est égale à un nombre entier n , appelé nombre de Chern, multiplié par 2π [36]. Cela implique que la conductivité transverse est quantifiée lorsque le niveau de Fermi est dans un gap.
3. Les courbures de Berry vérifient l'équation locale suivante :

$$\sum_n \Omega_{n,\mathbf{k}} = 0 \quad \forall \mathbf{k}, \quad (5.16)$$

où n est l'indice de bande. En sommant sur l'ensemble des états de la première zone de Brillouin, nous trouvons que $\sigma_{xy} = 0$ [65, 28].

4. Lorsque le Hamiltonien dépend de plusieurs paramètres, il est possible d'obtenir un croisement de deux ou de plusieurs bandes en des points particuliers de la zone de Brillouin [3]. Les propriétés topologiques de la courbure de Berry Ω_n sont modifiées et un changement des nombres de Chern peut se produire suivant la nature de la relation de dispersion [36, 11, 56] au voisinage du point de croisement. Lorsque deux bandes se croisent, leur nombre de Chern vérifient la relation

$$(\nu_n + \nu_m)_a = (\nu_n + \nu_m)_b, \quad (5.17)$$

où les indices a et b indiquent la valeur des nombres de Chern des bandes n et m avant (b) et après (a) le croisement de bande. La variation de chaque ν_i est égale au nombre de points de

croisement (il faut prendre en compte les symétries du réseau) multiplié par un entier relatif α dont la valeur dépend de la relation de dispersion de chaque bande au voisinage du point de croisement [101, 59, 60].

Sauf quelques cas particuliers, le seul moyen d'obtenir les nombres de Chern est de les évaluer numériquement en utilisant la définition (5.13) ou (5.14) des courbures de Berry, puis de sommer chaque $\Omega_{n\mathbf{k}}$ sur l'ensemble de la zone de Brillouin.

5.4 Résultats numériques

Cette section est divisée en trois parties. Dans un premier temps, nous étudions la structure de bandes pour différentes valeurs des paramètres J et θ . Dans la seconde partie, nous nous intéressons plus particulièrement à la conductivité transverse à température nulle. Après une étude de $\sigma_{xy}(J)$, nous montrerons que la chiralité de spin peut être un paramètre pertinent du problème pour des plages de valeur importantes de la constante de couplage J pour un remplissage $p = 1/2$. Enfin, nous terminerons par une discussion sur des effets de la température sur la conductivité transverse.

5.4.1 Structure de Bande et nombres de Chern associés

En absence d'interaction d'échange ($J = 0$), le spectre énergétique du hamiltonien (5.1) est caractérisé par une bande plate [5] en $E = 2t$ et deux bandes dispersives se touchant au point K de la zone de Brillouin (fig 5.4-a).

Lorsque la constante J est finie, le spectre énergétique se scinde en deux parties à cause de la dépendance en spin du terme d'échange. Pour de grandes valeurs de J , le spectre énergétique se divise en deux groupes de trois bandes et l'expression analytique de la relation de dispersion peut être obtenue dans la limite $J \rightarrow \infty$ [50].

Lorsque J est compris entre zéro et l'infini, le spectre énergétique ne peut pas être calculé analytiquement sauf en quelques points particuliers de la zone de Brillouin et quelques valeurs particulières de θ ($\theta = 0, \pi/2, \pi$). Par exemple, le calcul des valeurs propres au point M montre qu'il y a un croisement de bande en ce point entre les bandes 2 et 3 (4 et 5) pour une valeur précise de la constante de couplage :

$$J_c(\theta) = \frac{2t}{\sqrt{1 + 3 \cos^2 \theta}}. \quad (5.18)$$

Cette valeur de la constante de couplage jouera un rôle important dans les propriétés de la conductivité transverse σ_{xy} .

Enfin en calculant les valeurs propres de (5.12) aux points K et Γ , nous trouvons que le minimum de la bande quatre situé au point K et le maximum de la bande trois situé au point Γ sont égaux pour $J = 3t/2$. En dessus de $J = 3t/2$, Il existe un gap indirect entre les bandes trois et quatre qui disparaît lorsque $J < 3t/2$. Cette propriété sera importante pour le remplissage $p = 1/2$ et ne jouera pratiquement pas de rôle pour les autres valeurs du remplissage.

L'organisation du spectre énergétique dépend uniquement de J . Pour $J < 3t/2$ le spectre se scinde en trois groupes de deux bandes (fig 5.4-b) séparés par une bande d'énergie interdite. Lorsque $J > 3t/2$, le spectre se divise en deux groupes de trois bandes, séparés par une bande d'énergie interdite (fig 5.4-c). Mis à part le gap central séparant les bandes trois et quatre, les autres gaps dépendent eux de θ .

L'existence d'un croisement de bande permet de distinguer deux régimes distincts caractérisés par des nombres de Chern différents.

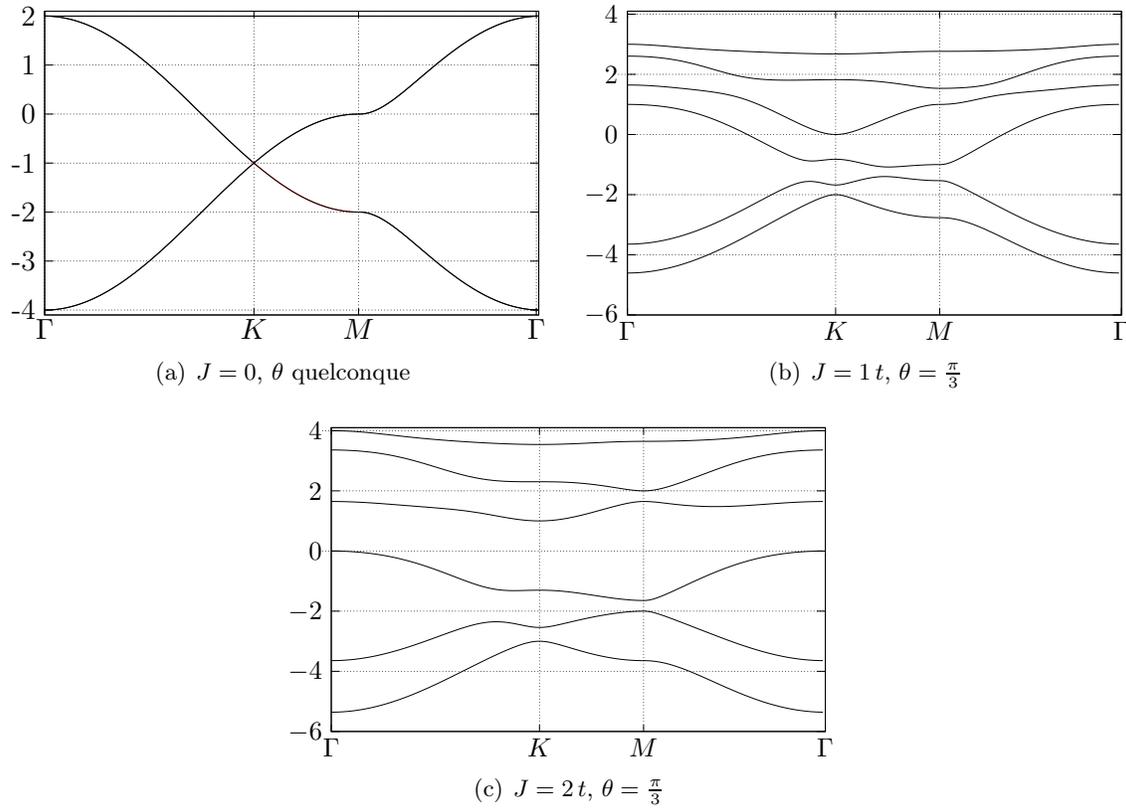


FIG. 5.4: Spectre énergétique du hamiltonien (5.12) (en unités de ε/t)

- Pour $J > J_c$, les nombres de Chern, classés par ordre d'énergie croissante, sont égaux à $-1, 0, 1, 1, 0, -1$ et identiques aux valeurs obtenues par Ohgushi *et al* [50] dans la limite $J \rightarrow \infty$.
- Lorsque $J < J_c$, les nombres de Chern sont égaux à $-1, 3, -2, -2, 3, -1$.

Les nombres de Chern obtenus numériquement pour $J < J_c$, peuvent se calculer analytiquement à partir des nombres de Chern obtenus dans la limite $J \rightarrow \infty$. En étudiant la relation de dispersion, nous trouvons que les bandes deux et trois ainsi que les bandes quatre et cinq du spectre énergétique, se croisent au point M de la première zone de Brillouin. Dans ce modèle, chaque point de croisement contribue ± 1 au nombre de Chern de chaque bande, car leur relation de dispersion est linéaire en \mathbf{k} au voisinage de M [59, 60]. Nous obtenons donc deux solutions possibles pour les nombres de Chern des bandes deux et trois soit $(3, -2)$ ou $(-3, 4)$ (les solutions sont identiques pour les bandes quatre et cinq). Pour obtenir ce résultat, nous avons employé une propriété des nombres de Chern :

- la somme des nombres de Chern de deux bandes qui se croisent, ne dépend ni du nombre de point de croisement [11] ni de la relation de dispersion au voisinage de ces points.
- les variations de chaque nombre de Chern dépend explicitement du nombre de point de croisement (compte tenu des symétries, nous obtenons trois points de croisement).

Par contre le choix entre ces deux solutions dépend explicitement de la relation de dispersion au voisinage de M , qui est linéaire [101, 59, 60].

L'ensemble des résultats énoncés précédemment est résumé sur la fig. 5.5 où la ligne continue est

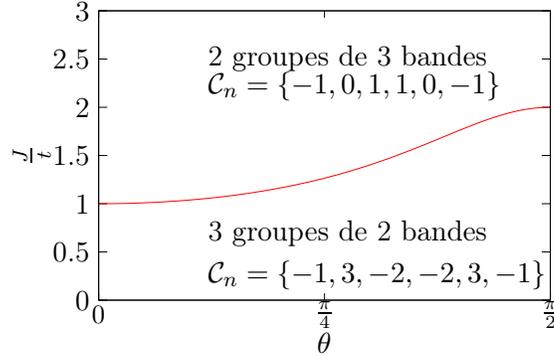


FIG. 5.5: Diagramme de phase $J - \theta$. La ligne continue est donnée par l'éq. (5.16) et correspond à un croisement des bandes 2 et 3 et 4 et 5.

définie par l'éq. (5.18). La partie haute du diagramme regroupe les résultats obtenus pour $J > J_c$ et la partie basse ceux pour $J < J_c$.

En résumé, les variations du paramètre J induisent une modification de la structure de bande qui se traduit par un changement des propriétés topologiques des bandes mises en cause dans le croisement. Le changement des propriétés topologiques du spectre énergétique a des répercussions sur la conductivité transverse. Elles dépendent quantitativement des paramètres J et θ .

5.4.2 Calcul de $\sigma_{xy}(\varepsilon_f)$

Les propriétés de la conductivité transverse sont gouvernées essentiellement par la constante de couplage J et par l'angle θ de l'ombrelle à remplissage fixé. Pour illustrer ceci, prenons un remplissage correspondant à un niveau de Fermi situé dans une bande d'énergie interdite. D'après les remarques faites dans la sec. 5.3, la conductivité transverse est quantifiée, donc indépendante de J et θ dès l'instant qu'il n'y a pas de croisement de bande (voir fig. 5.6-(a,b)). L'étude du spectre énergétique en fonction de J et θ montre qu'il existe un croisement de bande pour $J = J_c(\theta)$. Il est donc possible de distinguer deux cas, suivant la valeur de J :

- Pour $J < J_c(\theta)$, la conductivité transverse (Fig. 5.6-a) admet des plateaux de quantification qui ont pour valeur respective $\pm \frac{2e^2}{h}$ pour un remplissage de deux électrons (signe +) ou de quatre électrons (signe -) par cellule élémentaire.
- Pour $J > J_c(\theta)$, la conductivité transverse (Fig. 5.6-b) admet deux plateaux de quantification en $\pm \frac{e^2}{h}$ correspondant à un remplissage de deux (signe -) ou quatre (signe +) électrons par cellule élémentaire.

Lorsque le niveau de Fermi coupe une ou plusieurs bandes, σ_{xy} admet toutes les valeurs comprises entre les plateaux de quantification. Enfin comme le montre la figure 5.6, $\sigma_{xy}(\varepsilon_f)$ n'est pas une fonction monotone.

5.4.3 Calcul de $\sigma_{xy}(J)$

Les variations de la conductivité transverse en fonction du paramètre dépendent principalement de la position du niveau de Fermi par rapport aux différentes bandes d'énergie interdite existant dans le spectre de bandes. Les figures 5.7 montrent différents types de variation de $\sigma_{xy}(J)$ pour diverses valeurs du remplissage p . Pour $p = 1/3$ (fig. 5.7-a), la conductivité est quantifiée car le

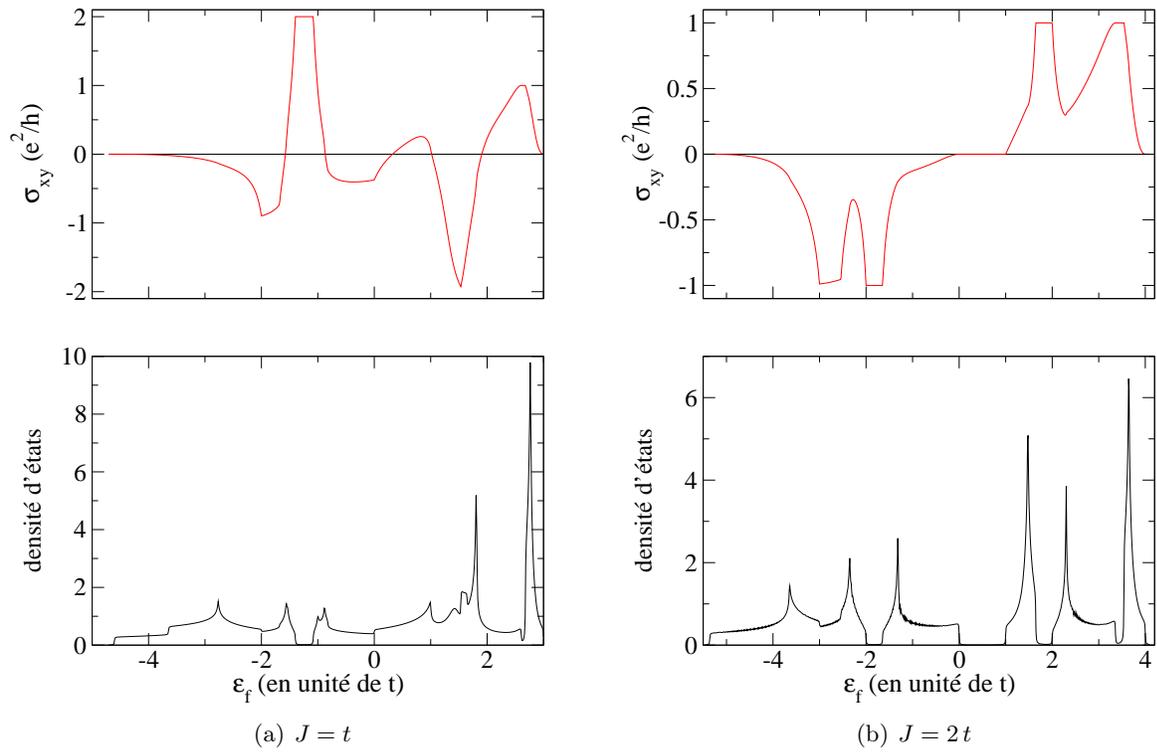


FIG. 5.6: Conductivité transverse à température nulle et densité d'états calculées en fonction du niveau de Fermi pour $\theta = \pi/3$ et différentes valeurs de J . Les deux figures montrent que la conductivité transverse est quantifiée lorsque le niveau de Fermi est dans un gap.

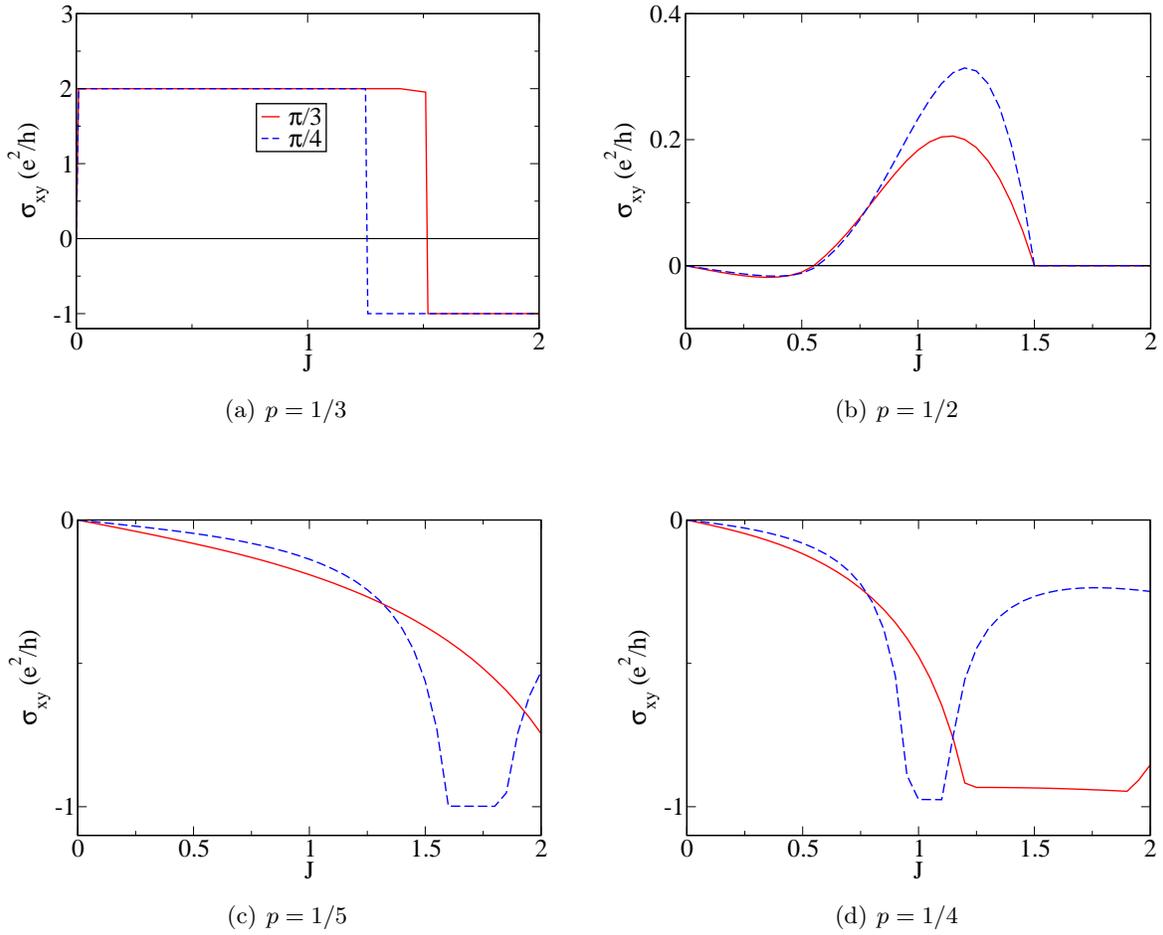


FIG. 5.7: $\sigma_{xy}(J)$ (e^2/h) calculée à température nulle pour différentes valeurs du remplissage électronique p , de $\theta = \pi/3$ (lignes pointillées) et $\theta = \pi/4$ (lignes continues)

niveau de Fermi est dans un gap quelle que soit la valeur de J . Le changement de valeur observé autour de $J \approx 1.51t$ est induit par le croisement de bande des bandes deux et trois.

Sur la figure 5.7-b, nous avons représenté $\sigma_{xy}(J)$ calculée avec un facteur de remplissage $p = 1/2$. Pour $J < 3t/2$, la conductivité transverse est continue et non nulle car le niveau de Fermi coupe plusieurs bandes. Les variations de $\sigma_{xy}(J)$ ne sont pas monotones et dépendent essentiellement des courbures de Berry des bandes partiellement occupées. Enfin on observe un changement de signe de σ_{xy} au voisinage de $J = 0.6t$, que nous attribuons à une répartition différente des états occupés dans chaque bande. Lorsque $J > 3t/2$, le niveau de Fermi est dans un gap et σ_{xy} est quantifiée et égale à zéro car la somme des trois premiers nombres de Chern est égale à zéro.

Lorsque le remplissage a une valeur quelconque ; $\sigma_{xy}(J)$ peut avoir toutes les variations possibles comprises entre les différents plateaux de quantification, voire peut saturer à une valeur proche de la valeur de quantification $-e^2/h$. Ceci est illustré sur la figure 5.7-c et la fig 5.7-d, où σ_{xy} a été

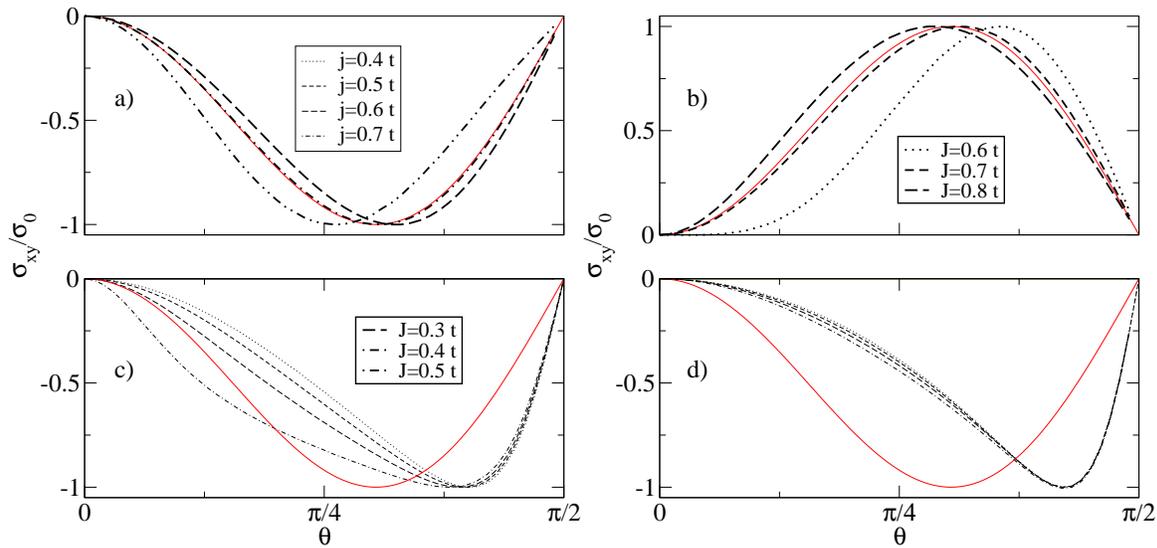


FIG. 5.8: σ_{xy}/σ_0 avec $\sigma_0 = \max(\|\sigma_{xy}\|)$ versus θ , calculée pour un facteur de remplissage $p = 1/2$ (figure a et b) et $p = 1/5$ (figure c et d). La ligne continue représente la chiralité $\chi/\max(|\chi|)$ donnée par l'éq. (5.9).

calculé pour deux valeurs distinctes du remplissage $p = 1/5$ et $p = 1/4$ et de l'angle θ . Dans les deux cas considérés, le niveau de Fermi coupe les bandes une et deux quelle que soit la valeur de J . La figure 5.7 montre que σ_{xy} sature à une valeur proche de $-e^2/h$ (le nombre de Chern de la première bande est égal à -1), lorsque J augmente. Les états de la première bande sont tous occupés et les états occupés de la deuxième bande, centrés au voisinage du point Γ , contribuent assez peu à la conductivité transverse car $\Omega_{n\mathbf{k}}$ est proche de zéro. Lorsque $J \rightarrow \infty$, σ_{xy} tend vers la limite que l'on obtient lorsque l'approximation adiabatique est appliquée.

5.4.4 Calcul de $\sigma_{xy}(\chi)$

Nous avons calculé la conductivité transverse en fonction de la chiralité de spin donnée par l'éq. (5.9) pour des valeurs faibles de J et un facteur de remplissage $p = 1/2$ (c'est le facteur de remplissage considéré par Tataru et Kawamura [29]). Les résultats obtenus sont représentés sur la fig. 5.8 où les lignes continues noires indiquent la chiralité. Nous voyons sur cette figure que la conductivité transverse dévie peu de la chiralité de spin pour une large plage de valeurs du paramètre J , ce qui confirme et étend les résultats obtenus par Tataru et Kawamura [29] dans la limite J faible. Enfin, la conductivité transverse change de signe lorsque J est supérieur à 0.6. Ce changement de signe est probablement dû à une répartition différente des états occupés dans chaque bande située au voisinage du niveau de Fermi.

En dehors de $p = 1/2$, σ_{xy} a une dépendance complexe par rapport à la chiralité de spin et aucune relation simple entre ces deux quantités peut être déduite. Toutefois, il est possible de distinguer deux cas :

- Le niveau de Fermi est dans un gap quelle que soit la valeur de J (un remplissage avec deux électrons par maille élémentaire remplit cette condition). Dans ce cas, σ_{xy} est quantifiée et les

variations par rapport à θ seront discontinues lorsque $J = J_c(\theta)$. Si $J > 2t$, la conductivité transverse ne dépend pas de θ .

- Lorsque le niveau de Fermi n'est pas dans un gap. Les variations de la conductivité transverse dépendent fortement du remplissage et de la valeur choisie pour J . sur la fig 5.8-b, est représentée la conductivité transverse $\sigma_{xy}(\theta)$ calculée pour différentes valeurs de J et un remplissage $p = 1/5$. Cette figure montre que σ_{xy} n'est pas proportionnelle à la chiralité de spin, même lorsque J est faible, contrairement au cas précédent.

Le calcul de la conductivité transverse en fonction de θ montre que $\sigma_{xy}(\theta)$ dépend du remplissage choisi. Lorsque $p = 1/2$; la conductivité transverse est proportionnelle à la chiralité de spin χ pour une grande plage de valeurs du paramètre J , confirmant et étendant les résultats obtenus par Tataru et Kawamura dans la limite J faible [29]. En dehors de ce remplissage, la conductivité transverse n'est pas reliée de façon simple à la chiralité de spin.

5.5 Effet de la température

Pour décrire l'évolution de $\sigma_{xy}(T)$, il faut tenir compte des excitations magnétiques de basse énergie et de la diminution de l'aimantation avec la température. Il est possible cependant de développer un modèle plus simple négligeant les fluctuations de spin (voir la référence [89] pour une étude détaillée des effets de la fluctuation de spin sur l'effet Hall anormal appliquée à $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$) tenant compte au moins partiellement de la dépendance en température de l'aimantation et du niveau de Fermi.

Afin de rendre la discussion plus simple, nous supposons d'une part que l'aimantation suit une loi de champ moyen

$$M(T) = |\mathbf{S}_i| = M_0 \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}, \quad (5.19)$$

où T_c est la température critique et M_0 l'aimantation à saturation à température nulle. Nous supposons d'autre part que T_c et M_0 sont indépendants et que θ est indépendant de la température. La constante de couplage effectif entre le spin de l'électron et les moments localisés est proportionnelle à l'aimantation $M(T)$:

$$J(T) = J_0 \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}, \quad (5.20)$$

avec $J_0 = JM$. Enfin nous supposons que la chiralité de spin ne dépend pas de la température. Le calcul de $\sigma_{xy}(T)$ est pratiquement identique au calculs de $\sigma_{xy}(J)$ à la différence près que le niveau de Fermi dépend de la température. Cela permet de prendre en compte les transitions interbandes thermiquement activées. D'après l'éq. (5.20), une diminution de la température vers zéro revient à augmenter la constante de couplage J jusqu'à J_0 , ce qui correspond à un déplacement vertical sur la fig. 5.5. La conductivité transverse peut donc avoir des variations brutales avec la température lorsque $J(T)$ croise $J_c(\theta)$.

Pour illustrer nos propos, nous avons calculé la conductivité transverse pour différentes valeurs du remplissage et de θ . Nous commençons cette discussion avec le remplissage $p = 1/2$. Nous avons vu dans la sec. 5.4.3 que ce remplissage est un peu particulier dans le sens où le gap indirect séparant les bandes trois et quatre dépend uniquement de J . En dessous de $J = 3t/2$, le niveau de Fermi coupe les deux bandes et la conductivité transverse est non nulle, tandis qu'au dessus de $J = 3t/2$, le niveau de Fermi est dans le gap et $\sigma_{xy} = 0$. $\sigma_{xy}(T)$ (fig 5.9-b) aura qualitativement les mêmes variations que $\sigma_{xy}(J)$ lorsque la température sera supérieure à T_1 ($J(T_1) = 3t/2$) avec

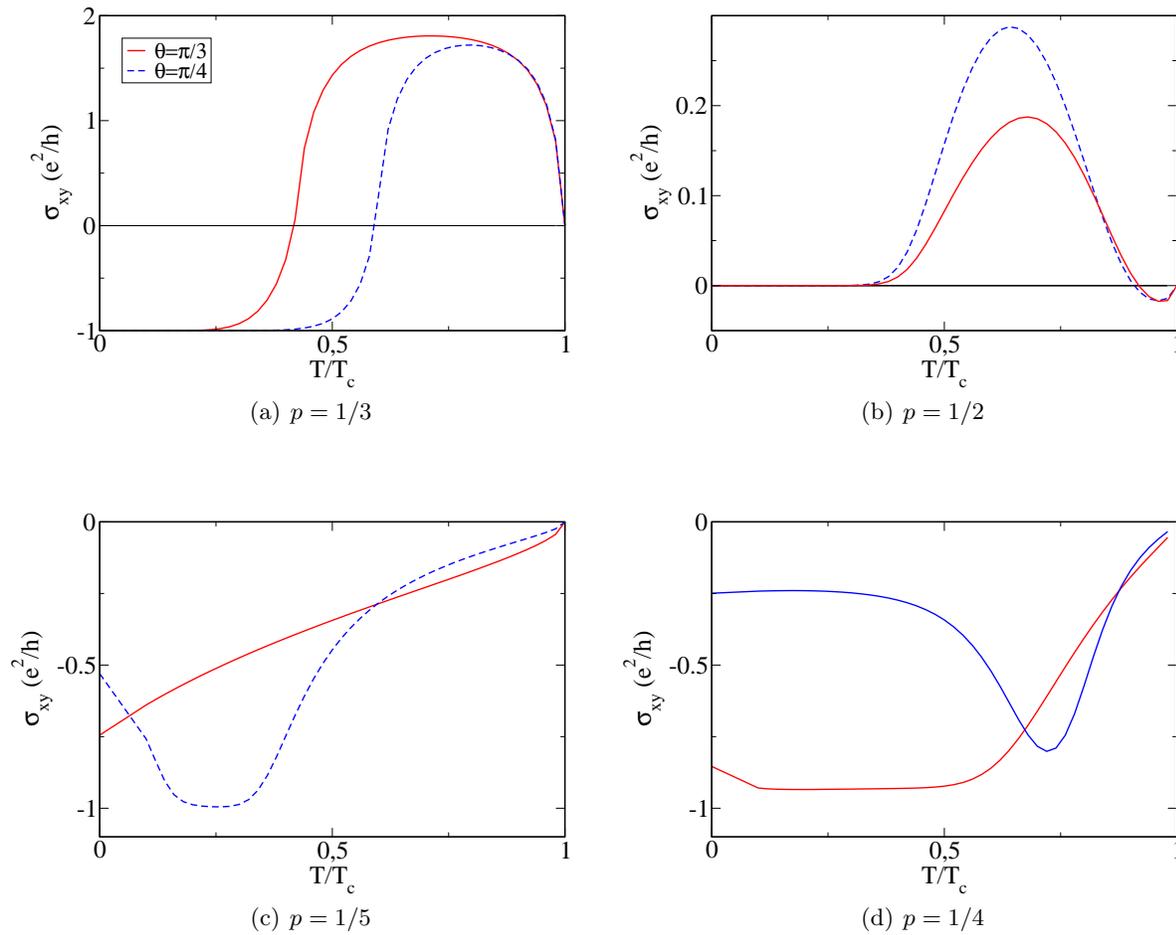


FIG. 5.9: $\sigma_{xy}(T)$ calculée pour différentes valeurs du remplissage p et de l'angle θ .

un changement de signe dont l'origine semble liée à une modification de la topologie du spectre énergétique.

Considérons maintenant le remplissage $p = 1/3$ (fig 5.9-a). À température nulle (sec. 5.4.3), la conductivité transverse est quantifiée mais ces variations en fonction de J sont discontinues au voisinage de $J_c(\theta)$. Nous retrouvons une partie des résultats obtenus dans la sec. 5.4.3, lorsqu'on calcule $\sigma_{xy}(T)$. À basse température, nous trouvons que $\sigma_{xy}(T)$ est quantifiée sur une grande plage de variation de la température. Lorsque la température augmente et atteint la température T_* définie par $J(T_*) = J_c(\theta)$, la conductivité transverse augmente à cause des transitions interbandes qui sont favorisées par l'activation thermique et la diminution de la largeur de la bande d'énergie interdite située entre les bandes un et deux. Passé T_* , $\sigma_{xy}(T)$ change de signe à cause du croisement de bandes qui induit un changement des nombres de Chern des bandes deux et trois, puis augmente jusqu'à former un plateau proche de $2e^2/h$ pour redescendre ensuite vers zéro lorsque T tend vers T_c .

Finalement, nous avons calculé $\sigma(T)$ pour deux valeurs du remplissage correspondant à un niveau de Fermi coupant deux bandes (fig 5.9-c,d). Il n'est en général pas possible de déterminer un comportement commun pour tous les remplissages et toutes les valeurs possibles de θ .

5.6 Effet d'un champ magnétique perpendiculaire au plan kagomé

Un champ magnétique, appliqué perpendiculairement au plan contenant le réseau kagomé, modifie la structure magnétique en modifiant l'angle θ . Il est possible d'obtenir un changement de signe de la conductivité transverse sans que la chiralité de spin change de signe, si θ est proche de la valeur critique.

5.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé un modèle simple, dans lequel l'effet Hall anormal est induit par une texture magnétique caractérisée par une chiralité de spin non nulle. En calculant la conductivité transverse, nous avons obtenu divers comportements de σ_{xy} tel que des changements de signe, lorsque la chiralité de spin, la constante de couplage J ou le remplissage varient. Les variations de σ_{xy} par rapport à la chiralité de spin dépend du remplissage et de la constante de couplage J , ce qui rend l'étude de l'effet Hall complexe.

Ces résultats montrent qu'il est nécessaire d'élaborer un modèle plus proche du composé pyrochlore $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ pour interpréter la résistivité de Hall dans ce système.

Troisième partie

Champs magnétiques périodiques

Chapitre 6

Introduction générale

Sommaire

6.1 Études antérieures	81
6.1.1 Modulations électriques 1D et 2D	82
6.1.2 Modulations magnétiques 1D et 2D	83
6.2 Système étudié	84

Dans le chapitre 4, nous avons étudié l'évolution d'un électron de spin 1/2 couplé à un champ magnétique inhomogène par l'intermédiaire du terme d'échange local. Nous avons vu qu'une distribution de champ magnétique périodique 2D de flux moyen nul, induit un effet Hall anormal non nul en absence de champ magnétique extérieur. En outre, nous avons vu que l'effet Hall anormal présente des discontinuités lorsqu'on applique un champ magnétique supplémentaire. Cependant, les calculs effectués dans le chap. 4 se basent sur une hypothèse ; la force de Lorentz $\mathbf{F} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r})$ induite par les modulations magnétiques est négligée et seule l'interaction Zeeman a été considérée.

La troisième partie de cette thèse est consacrée à l'étude de quelques phénomènes physiques nouveaux induits par la force de Lorentz créée par la distribution magnétique périodique. Dans le chapitre suivant, nous faisons un rappel sur l'action d'un champ magnétique inhomogène sur un gaz d'électrons 2D, en prenant une distribution magnétique dont le gradient de champ est constant. Enfin, le dernier chapitre traite des distributions magnétiques périodiques 2D. Nous verrons notamment que les électrons peuvent être localisés et qu'il existe des états de Bloch porteurs de courants permanents.

6.1 Études antérieures

L'étude des effets induits par un champ électromagnétique sur un gaz d'électrons a connu un intérêt croissant ses dernières années, en particulier avec la découverte de nouveaux phénomènes tel que l'effet Hall quantique entier et fractionnaire. Depuis, d'autres effets ont été découverts dans des systèmes où le gaz d'électrons est modulé par l'application d'un champ électrique [77, 12] ou magnétique périodique dans une ou deux directions.

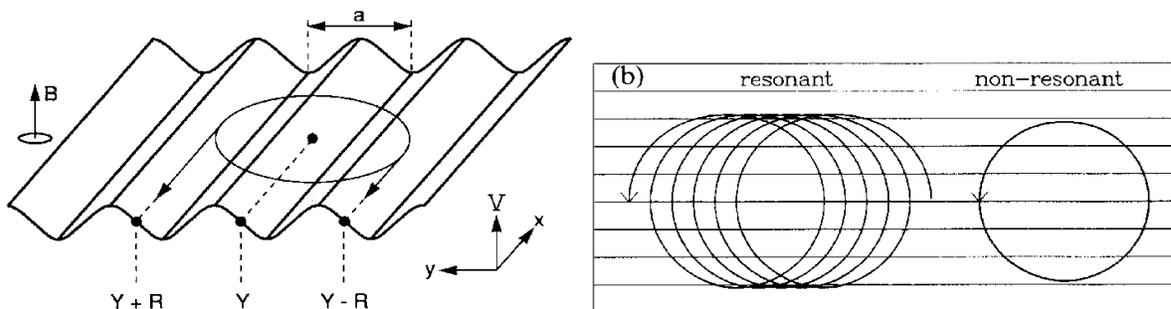


FIG. 6.1: (a) Potentiel électrostatique avec une orbite cyclotron superposée dessus. Lorsque l'électron est prêt des extrêmes $Y \pm R$, le centre Y de la trajectoire acquiert une vitesse de dérive proportionnelle à $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ dans la direction des flèches. Il y a résonance lorsque le mouvement de dérive à un extremum, renforce le mouvement de dérive de l'autre extremum. (b) Trajectoires calculées numériquement pour un potentiel sinusoïdal faible. Les lignes horizontales sont les équipotentiels pour $y/a \in \mathbb{Z}$.

6.1.1 Modulations électriques 1D et 2D

L'étude des modulations du champ électrique 1D et 2D ont fait l'objet d'un nombre très important de travaux théoriques et expérimentaux, en raison principalement de la relative facilité à réaliser expérimentalement de telles distributions. Les premières études expérimentales remontent à la fin des années 80 où Weiss *et al* [77] et Winkler *et al* [78] ont étudié expérimentalement la magnéto-résistance d'un gaz d'électrons soumis une modulation électrique unidimensionnelle périodique et un champ magnétique constant. Ils ont trouvé que la magnéto-résistance oscille en fonction du champ magnétique avec une période $1/B$ différente des oscillations Shubnikov-De Haas (la période des oscillations Shubnikov-De Haas est égale à $T = e/\hbar k_f^2$). Gerhardtts *et al.* [77] relie les oscillations de la magnéto-résistance aux effets de commensurabilité entre l'extension spatiale des niveaux de Landau et la période du potentiel électrostatique. En utilisant la théorie des perturbations, ils trouvent que les minima de ρ_{xx} ont lieu lorsque le rayon cyclotron vérifie la relation $2R_c = a(\lambda - \frac{1}{4})$ où a est la période du potentiel effectif et $\lambda \in \mathbb{N}^{*1}$. Beenakker [14] propose une autre interprétation des oscillations de Weiss, basée sur la résonance entre le mouvement de dérive du centre de l'orbite de l'électron ($v \propto \mathbf{E} \times \mathbf{B}$) et le mouvement cyclotron de l'électron (Fig. 6.1).

En 1999, Albrecht *et al.* [12] mesurent la magnéto-résistance d'un gaz d'électrons libres modulés par un potentiel électrostatique périodique 2D. Dans ce cas, la magnéto-résistance a trois régimes d'oscillations distincts (fig 6.2). En champ fort, ce sont les oscillations de Shubnikov-De Haas qui dominent, tandis qu'en régime intermédiaire, les oscillations de Weiss se superposent aux oscillations Shubnikov-De Haas. En champ faible par contre, les oscillations mesurées ont une période ne correspondant ni à la période des oscillations de Weiss ni aux oscillations Shubnikov-De Haas. Les oscillations obtenues en champ faible sont issues d'une compétition entre les effets de la structure de bande et le mécanisme de breakdown [72].

¹Ce sont les oscillations de la largeur de bandes qui sont à l'origine des modulations de ρ_{xx} . Elles se produisent lorsque l'extension spatiale des fonctions d'ondes est de l'ordre de la période du potentiel électrostatique, leur permettant de ressentir la valeur moyenne du potentiel électrostatique.

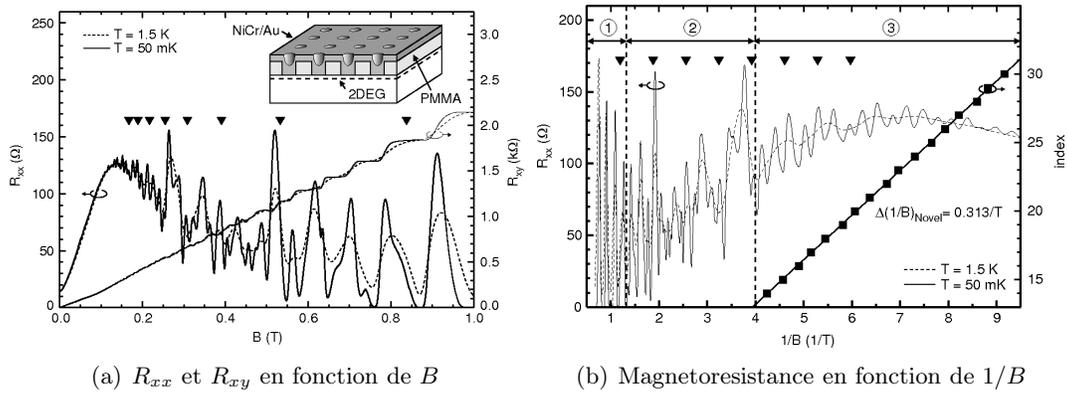


FIG. 6.2: (a) Résistance longitudinale R_{xx} et résistance de Hall R_{xy} pour un superréseau de période $a = 120$ nm et deux températures [12]. (b) Magnéto-résistance en fonction de $1/B$. Cette figure montre trois régimes d'oscillations différents avec des oscillations régulières dans la région trois [12].

6.1.2 Modulations magnétiques 1D et 2D

Plusieurs études ont montré que les oscillations de Weiss sont aussi présentes dans les gaz d'électrons où le champ magnétique est modulé périodiquement dans une direction [18, 73, 25, 26]. Les mesures de la magnéto-résistance dans ces systèmes montrent que les oscillations obtenues sont de la même nature que les oscillations de Weiss [84, 32, 69]. La position des minimums de ρ_{xx} est donnée par une relation différant d'un signe par rapport à la relation obtenue dans les gaz d'électrons modulés électrostatiquement.

Ibrahim et Peeters [35] ont étudié le spectre et les propriétés de transport dans les gaz d'électrons soumis à un champ magnétique périodique 1D de moyenne nulle. Les propriétés de transport et le spectre énergétique sont profondément modifiées en raison de la dépendance du potentiel effectif en fonction du vecteur d'onde k (k est le vecteur d'onde de l'électron pris dans la direction perpendiculaire aux modulations magnétiques).

Les propriétés de transport des gaz d'électrons soumis à des modulations magnétiques périodiques 2D ont fait l'objet d'un nombre plus restreint d'études. Seulement quelques études expérimentales ont été réalisées [85, 1] et les études théoriques se sont généralement limitées au cas où les modulations magnétiques sont considérées comme des perturbations par rapport à un champ magnétique constant [64, 54, 31]. La dynamique classique des électrons a été étudiée par différentes équipes [7, 42]. Rom *et al* [7] ont montré que les trajectoires classiques d'un électron soumis à une modulation magnétique périodique 2D sont chaotiques. Yoshida *et al* [42] ont confirmé ce résultat et ont obtenu deux types de trajectoires supplémentaires ; certaines étant localisées au voisinage du maximum des modulations magnétiques et des trajectoires ouvertes où l'électron saute d'un site à un autre régulièrement.

Dans le chapitre 8, nous complétons les travaux précédents en étudiant le spectre énergétique ainsi que les états de Bloch d'un électron soumis à une distribution magnétique inhomogène.

6.2 Système étudié

Le système que nous considérons, est constitué d'un gaz d'électrons sans spin confiné dans le plan xOy soumis à l'action du champ magnétique périodique $\mathbf{B}(x, y) = B(x, y)\mathbf{z}$ appliqué perpendiculairement au gaz d'électrons. Classiquement, l'application d'un champ magnétique se traduit par la présence d'une force supplémentaire appelée force de Lorentz dans l'équation du mouvement. Quantiquement, l'action du champ magnétique se traduit par la présence d'un moment supplémentaire proportionnel au potentiel vecteur $\mathbf{A}(x, y)$ dans le terme d'énergie cinétique du hamiltonien. Le hamiltonien décrivant ce système est donné par

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(-i\nabla + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2, \quad (6.1)$$

où m^* est la masse effective de l'électron. Le potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, relié au champ magnétique $\mathbf{B}(x, y)$ par la relation $\mathbf{B}(x, y) = \nabla \times \mathbf{A}(x, y)$ est défini au gradient d'une fonction arbitraire près. Pour fixer ce degré de jauge, nous choisissons la jauge de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$.

Nous nous limiterons dans les deux prochains chapitres à décrire les propriétés du hamiltonien (6.1) pour deux types de distributions particulières. Nous commencerons par un rappel sur la dynamique d'un électron soumis à une distribution magnétique inhomogène dont le gradient de champ magnétique est constant et appliqué suivant Oy .

Le chapitre 8 est consacré aux modulations magnétiques périodiques bidimensionnelles caractérisées par un flux par cellule unité égal à zéro. Nous montrerons qu'il est possible d'obtenir d'une part des états localisés quelle que soit l'amplitude de la modulation et d'autre part que ces états créent des courants permanents suivant la géométrie des régions de localisation.

Chapitre 7

Électrons dans un gradient de champ magnétique constant

Sommaire

7.1	Hamiltonien Effectif	85
7.2	Propriétés du potentiel effectif	86
7.3	Résolution numérique du hamiltonien	87
7.4	Spectre énergétique	88
7.5	Confinement et trajectoires semiclassiques d'un électron	89
7.6	Densités de courant	90
7.7	Conclusion	91

Ce chapitre est un bref rappel sur la physique des électrons soumis à une distribution de champ magnétique inhomogène. Le modèle que nous allons décrire, est basé sur le modèle d'un électron sans spin évoluant dans une distribution magnétique de gradient constant. Ce modèle s'inspire fortement du modèle proposé initialement par Müller [37] puis généralisé au cas d'un électron avec spin par Hofstetter *et al.* [21].

7.1 Hamiltonien Effectif

Nous considérons un gaz d'électrons bidimensionnel en présence d'une distribution magnétique inhomogène orientée suivant l'axe \mathbf{z} et caractérisée par un gradient de champ magnétique $\nabla B(x, y) = B'_1 \mathbf{y}$ constant. L'expression du champ magnétique est donnée par la formule suivante

$$\mathbf{B}(x, y) = (B'_1 y) \mathbf{z}.$$

Nous avons vu dans le chapitre précédent que le hamiltonien décrivant les propriétés quantiques d'un électron en présence d'un champ magnétique quelconque est donné par l'eq 6.1. Dans cette équation, le champ magnétique intervient par l'intermédiaire du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ qui s'écrit

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{B'_1}{2} y^2 \mathbf{x}, \tag{7.1}$$

dans la jauge de Coulomb ($\nabla \cdot A(\mathbf{r}) = 0$). En remplaçant l'éq (7.1) dans l'éq (6.1), nous obtenons :

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\left(-i \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB'_1}{2\hbar} y^2 \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right), \quad (7.2)$$

où m^* est la masse effective de l'électron. Le hamiltonien étant invariant par translation du système suivant l'axe \mathbf{x} , nous cherchons des solutions de la forme

$$\psi(x, y) = \chi_{k_x}(y) \exp(ik_x x). \quad (7.3)$$

Les fonctions d'ondes $\chi_{k_x}(y)$ sont solutions de l'équation différentielle

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - V_{\text{eff}}(k_x, y)) \right) \chi_{k_x}(y) = 0, \quad (7.4)$$

avec

$$V_{\text{eff}}(k_x, y) = \frac{1}{2m^*} \left(\hbar k_x - \frac{eB_1}{2} y^2 \right)^2 \quad (7.5)$$

est un potentiel effectif dépendant de l'impulsion de l'électron suivant l'axe \mathbf{x} .

Afin d'étudier cette équation, nous effectuons les changements de variables suivants, $y = l_c \tilde{y}$, $k_x = \frac{k}{l_c}$ et $\varepsilon = E/\varepsilon_c$, avec $l_c = \sqrt[3]{\frac{\hbar}{eB_1}}$ la longueur magnétique et $\varepsilon_c = \hbar^2/2m^*l_c^2$ l'unité d'énergie de notre problème. En reportant les différents changements de variables dans l'éq (7.4), nous obtenons l'équation sans dimensions :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} + (\varepsilon - V_{\tilde{y}}(k, \tilde{y})) \right) \chi_k(\tilde{y}) = 0, \quad (7.6)$$

avec

$$V_{\text{eff}}(k, \tilde{y}) = \left(k - \frac{\tilde{y}^2}{2} \right)^2. \quad (7.7)$$

L'hamiltonien décrivant le mouvement d'un électron dans un champ magnétique de gradient constant est similaire au problème d'un électron soumis à un potentiel quartique en \tilde{y} dont la forme dépend du signe et de la composante de la vitesse de l'électron suivant l'axe x .

7.2 Propriétés du potentiel effectif

Le potentiel effectif incorporant l'effet du champ magnétique est représenté sur la fig. 7.1 pour différentes valeurs du paramètre k . Nous voyons sur cette figure que le potentiel effectif dépend fortement du signe de k .

- Pour $k \leq 0$, le potentiel effectif a la forme d'un simple puits de potentiel dont le minimum centré en $\tilde{y} = 0$ varie en k^2 .
- Pour $k > 0$, $V_{\text{eff}}(\tilde{y})$ est un double puits de potentiel dont les minima sont en $\tilde{y} = \pm\sqrt{2k}$. Enfin, les minima du potentiel effectif sont séparés par une barrière de potentiel centrée en zéro dont l'amplitude varie en k^2 .

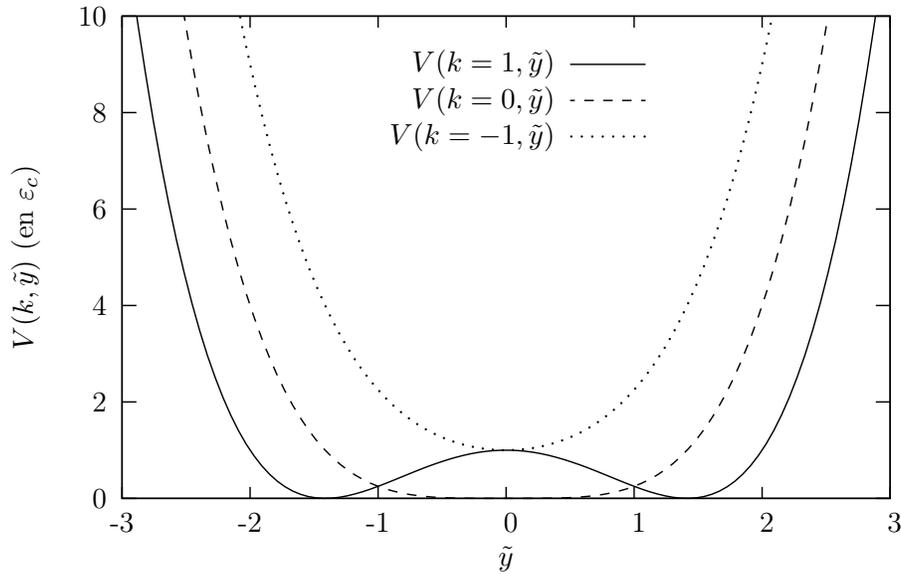


FIG. 7.1: Potentiel effectif vu par un électron évoluant dans un champ magnétique de gradient constant. Pour $k > 0$ (traits continus), le potentiel effectif a la forme d'un double puits de potentiel dont les minima sont en $\tilde{y} = \pm\sqrt{2k}$. Pour $k \leq 0$ le potentiel effectif est un puits de potentiel de forme quartique, dont le minimum centré en zéro varie en k^2 . Cette différence de forme du potentiel effectif induit une forte asymétrie par rapport k dans le spectre énergétique.

7.3 Résolution numérique du hamiltonien

La résolution numérique de l'eq (7.6) a fait l'objet d'un nombre important d'études basées généralement sur un développement de l'eq (7.6) sur la base des fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique (cette base a été utilisée par exemple par Hofstetter *et al.* [21] et par Müller [37]). Cette approche donne de bon résultats lorsque le potentiel effectif est un puits de potentiel centré en zéro, mais n'est pas très adaptée lorsque le potentiel effectif a la forme d'un double puits de potentiel ($k > 0$) en particulier lorsque la position des minima dépend de k .

Pour résoudre numériquement l'eq (7.6), nous utilisons la méthode des différences finies qui est très souvent employée en mécanique et en micromagnétisme. Cette méthode, simple à mettre en oeuvre dans le cas 1D, consiste à faire un maillage régulier de l'espace de départ puis exprimer les dérivées de la fonction d'onde en chaque point du maillage par une somme pondérée de la fonction d'onde aux points voisins (voir les références [74] pour de plus amples détails). Dans le cas 1D, on peut voir que la dérivée première s'écrit

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2\delta} + O(\delta^3), \quad (7.8)$$

où δ est le pas du maillage tandis que la dérivée seconde s'écrit

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{\delta^2} + O(\delta^4). \quad (7.9)$$

Après avoir repporté les eq (7.8,7.9) dans l'eq (7.6), nous obtenons un système d'équations linéaires

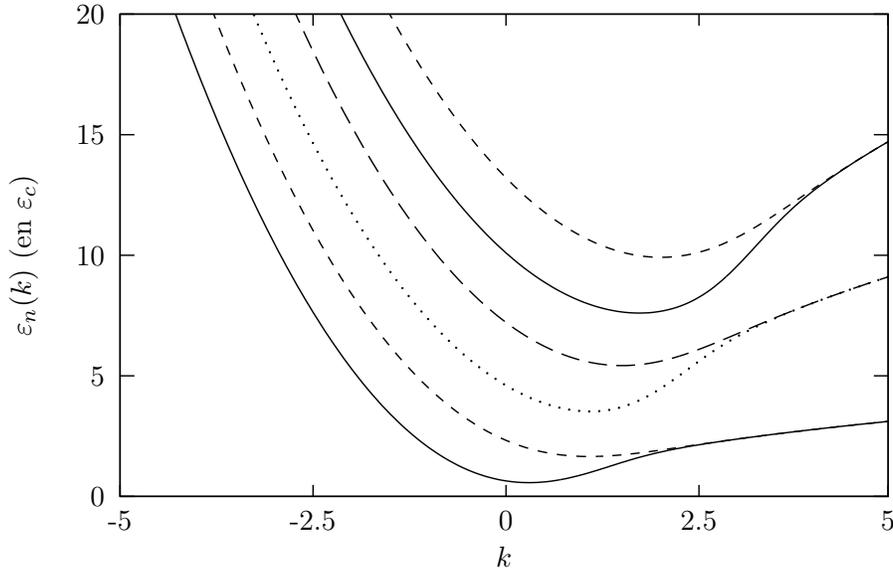


FIG. 7.2: *Spectre énergétique d'une particule chargée en présence d'un champ magnétique linéaire. Le spectre est constitué de bandes continues en k , caractérisées par une asymétrie et un minimum dépendants de k .*

couplées que l'on peut résoudre en diagonalisant l'opérateur équivalent.

L'avantage de cette méthode est qu'elle est applicable facilement pour un simple puits de potentiel comme un double puits. Elle nécessite uniquement le calcul du potentiel effectif en chaque point du réseau.

7.4 Spectre énergétique

Le spectre du hamiltonien (7.6) est constitué de bandes d'énergies continues en k (l'indice de bande n indique le niveau de l'oscillateur quartique). Chaque bande est caractérisée par une asymétrie par rapport à k . La chiralité du spectre est reliée directement à la chiralité du potentiel effectif par rapport à k . Il faut noter que le minimum en énergie des états de l'oscillateur quartique n'est pas en $k = 0$ mais en une valeur positive de $k > 0$ tel que l'état quantique peut avoir un moment et une vitesse de signe opposé. Lorsque k est positif et proche de zéro, le potentiel effectif est plus grand que pour $k < 0$ ce qui a pour effet de diminuer l'énergie de chaque état.

Pour $k > 0$, la barrière de potentiel scinde chaque niveau de Landau en un état symétrique et anti-symétrique centrés en $\tilde{y} = \pm\sqrt{2k}$, qui deviennent dégénérés par paire lorsque k est grand (fig 7.2).

Il faut noter que les propriétés du spectre énergétique (chiralité, minimum situé en une valeur non nulle de k) ne sont pas spécifiques à la forme du champ magnétique choisi. Foden *et al* [13] ont obtenu un résultat similaire en considérant l'action d'un champ magnétique constant un gaz d'électrons libres distribués sur une surface sphérique.

Ces résultats peuvent être généralisés en incluant l'interaction Zeeman entre le spin de l'électron et le champ magnétique. Les résultats obtenus précédemment changent quantitativement, mais les conséquences physiques sont sensiblement identiques [21].

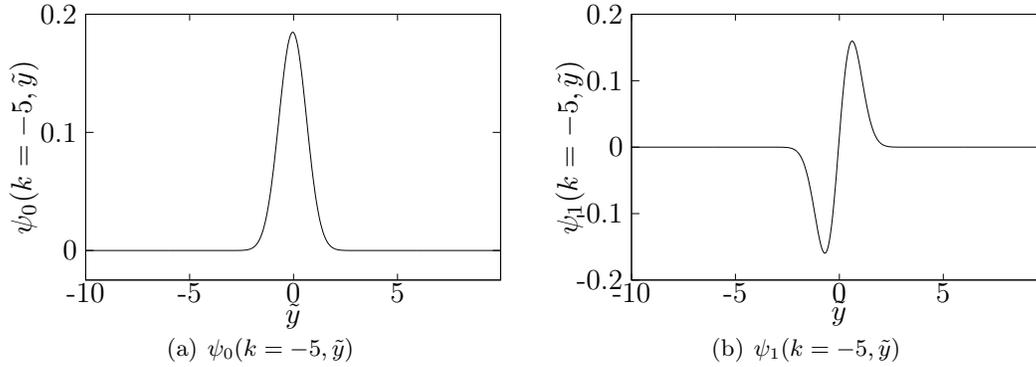


FIG. 7.3: Fonction d'onde de l'état fondamental et du premier état excité calculées pour $k = -5$.

7.5 Confinement et trajectoires semiclassiques d'un électron

Dans la section 7.2, nous avons vu que le potentiel effectif est asymétrique par rapport à k .

Pour $k \leq 0$, le potentiel effectif est un potentiel quartique simple dont le minimum est centré en $\tilde{y} = 0$. Compte tenu de la forme du potentiel, les fonctions d'ondes décrivant les états quantiques de plus basse énergie, sont des fonctions d'ondes localisées spatialement autour de $\tilde{y} = 0$.

Ce résultat est illustré sur la fig 7.3 où nous avons représenté les fonctions d'ondes de l'état fondamental et du premier état excité de l'oscillateur quartique pour $k = -5$. Physiquement, les électrons de $k_x < 0$ sont confinés spatialement dans la direction du gradient de champ, mais ont la possibilité de se déplacer librement dans la direction perpendiculaire au gradient.

Pour k positif, les fonctions d'ondes (fig 7.4) décrivant les états de plus basse énergie se scindent en deux ondes symétriques et antisymétriques par rapport à $\tilde{y} = 0$ à cause de la présence d'une barrière de potentiel centrée en $\tilde{y} = 0$. Lorsque k augmente, les fonctions d'ondes se scindent en deux parties et deviennent centrées au voisinage des minimums de V_{eff} placés en $\tilde{y} = \pm\sqrt{2k}$. À k grand, les deux parties des fonctions d'ondes se séparent spatialement avec un recouvrement quasi nul (fig. 7.4). Il y a formation de deux canaux indépendants dans lesquels l'électron se déplace librement dans la direction perpendiculaire au gradient de champ. Cette description est valable uniquement pour les états de plus basse énergie, c.-à-d. pour l'état fondamental et les premiers états excités dont l'énergie est inférieure à la hauteur de barrière. La séparation des fonctions d'onde induite par la barrière de potentiel devient de plus en plus faible pour les états d'énergie plus élevée que la hauteur de barrière. La largeur des canaux augmente jusqu'à recouvrir la région où les électrons de $k < 0$ sont localisés.

Pour résumer, le mouvement d'un électron en présence d'un champ magnétique inhomogène de gradient constant est confiné dans la direction du gradient, mais reste libre dans la direction des lignes de champ $B(x, y)$ constant. Les électrons de $v_x < 0$ sont confinés au voisinage des lignes de champ $B(x, y) = 0$ tandis que les électrons de vitesse négative sont repoussés dans les régions de champ magnétique plus intense.

Il est possible d'associer des trajectoires semiclassiques aux états de plus basse énergie. Les trajectoires semiclassiques d'un électron de $k < 0$ sont des trajectoires oscillant autour des lignes de Champ magnétique $B(y) = 0$.

Les trajectoires semiclassiques associées aux états de $k > 0$, sont repérées par l'indice d (dérive)

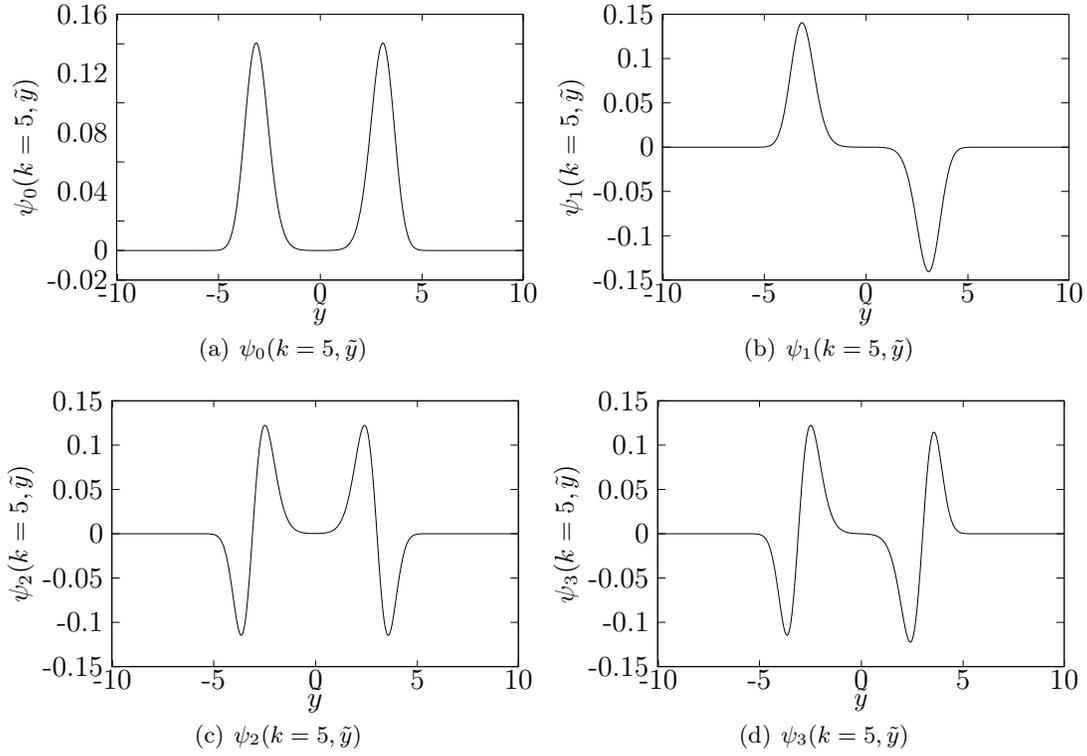


FIG. 7.4: Fonction d'onde de l'état fondamental et des trois premiers états excités calculée pour $k = 5$. Les états électroniques représentés par les fonctions d'ondes ψ_n sont des états localisés et centrés en $\tilde{y} = \pm\sqrt{2k}$.

sur la fig 7.5. La trajectoire est issue d'une combinaison entre le mouvement de dérive le long des lignes de champs $B(y)$ constant et le mouvement cyclotron de l'électron.

7.6 Densités de courant

Pour calculer le courant total porté par le gaz d'électrons, Hofstetter *et al* [21], ont étudié un modèle où le gaz d'électrons est infini suivant la direction x et fini dans la direction d'application du gradient de champ magnétique. En calculant les densités de courants suivant l'axe Ox

$$\begin{aligned}
 J_{nk_x}(y) &= -\frac{e}{m} \Re \left[\chi_n^\dagger(k_x, y) (\hbar k_x + eA(y)) \chi_n(k_x, y) \right] \\
 &= -\frac{e\hbar}{m^* l_c} \Re \left[\chi_n^\dagger(k, \tilde{y}) \left(k - \frac{\tilde{y}^2}{2} \right) \chi_n(k, \tilde{y}) \right], \tag{7.10}
 \end{aligned}$$

où n est l'indice de bande, ils ont trouvé que le courant porté par les états en dessous du niveau de Fermi

$$I(y) = \int_{\varepsilon_n < \varepsilon_f} J_{nk_x}(y) dk_x,$$

où k_f est le niveau de Fermi, oscille en fonction de y . Le courant total pour un remplissage donné,

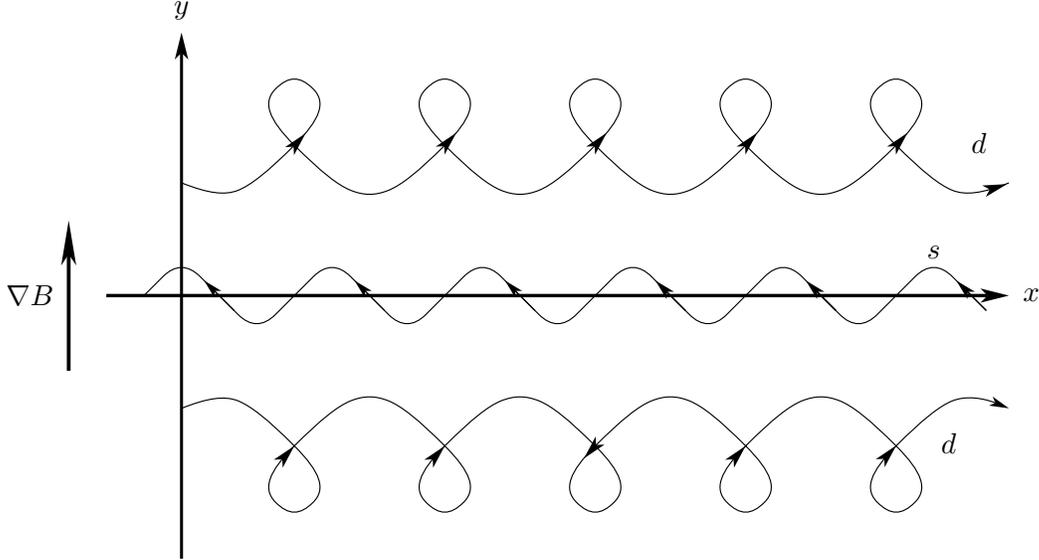


FIG. 7.5: Trajectoires semiclassiques d'un électron soumis à un gradient de champ magnétique constant. Les trajectoires *s* (trajectoires en forme de serpent) sont les trajectoires d'un électron de $k < 0$ tandis que les trajectoires *d* (trajectoires de dérive) représentent la trajectoire d'un électron de $k > 0$

peut se calculer directement en évaluant la somme suivante :

$$I_{total} = \sum_n \left(\int v_n(k) dk \right) \quad (7.11)$$

$$= \sum_n \left(\int_{\varepsilon_n(k) < \varepsilon_F} \frac{\partial \varepsilon_n(k)}{\partial k} dk \right) \quad (7.12)$$

$$= \sum_n \left(\int_{k_{F-}^n}^{k_0^n} \frac{\partial \varepsilon_n(k)}{\partial k} dk + \sum_n \int_{k_0^n}^{k_{F+}^n} \frac{\partial \varepsilon_n(k)}{\partial k} dk \right) \quad (7.13)$$

$$= \sum_n \left(\int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_0^n} d\varepsilon_n + \int_{\varepsilon_0^n}^{\varepsilon_F} d\varepsilon_n \right) \quad (7.14)$$

$$= 0, \quad (7.15)$$

où n représente l'indice des bandes occupées. Pour obtenir ce résultat, nous avons fait le changement de variable suivant $\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} dk = d\varepsilon$. Nous avons défini trois constantes $k_{F+}^n, k_{F-}^n, k_0^n$ et ε_0^n . k_0^n est le moment de l'état de plus basse énergie de la bande n , ε_0^n est le minimum de la bande d'énergie n et k_{F+}^n et k_{F-}^n sont les solutions de l'équation $\varepsilon_n(k_{F\pm}^n) = \varepsilon_F$.

7.7 Conclusion

En conclusion, l'application d'un champ magnétique inhomogène sur un gaz d'électrons libres influence leur mouvements en les confinant dans la direction parallèle au gradient du champ ma-

gnétique, les laissant libre de se déplacer dans la direction perpendiculaire au gradient de champ. Le déplacement de l'électron est unidimensionnel.

La région de confinement dépend du signe de la vitesse de l'électron dans la direction des lignes de champ magnétique. Si la vitesse est de signe négatif, l'électron est confiné au voisinage des lignes de champ magnétique nul. Dans le cas contraire, il est repoussé dans les régions où le champ magnétique est de signe constant.

La chiralité du potentiel effectif vu par l'électron se traduit par un spectre énergétique continu et chiral en k_x . Cependant cette propriété peut ne pas être vérifiée pour des formes plus compliquées du champ magnétique [35]. Enfin, la chiralité et la continuité du spectre énergétique par rapport à k_x n'induit pas de courants permanents.

Chapitre 8

Dynamique d'un électron dans un champ magnétique périodique 2D

Sommaire

8.1	Présentation du système étudié	93
8.2	Méthode de résolution du hamiltonien	94
8.3	Réalisations expérimentales d'un champ $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ périodique	95
8.4	Résultats numériques	96
8.4.1	Spectre énergétique	97
8.4.2	Nature des états de Bloch	98
8.5	Présence de courants permanents	100
8.5.1	Courants permanents induits par l'effet Aharonov-Bohm	101
8.5.2	Relation entre un spectre chiral et l'existence de courants permanents . .	101
8.5.3	Retour sur les courants portés par des états de Bloch	103
8.6	Conclusion et perspectives	104

Ce chapitre est consacré à l'étude des propriétés physiques d'un gaz d'électrons soumis à une modulation magnétique périodique 2D. Nous nous limiterons cependant aux distributions magnétiques dont le flux moyen par cellule élémentaire est égal à zéro. Après avoir exposé le problème et la méthode choisie pour calculer le spectre énergétique et les états de Bloch, nous décrirons la structure des états de Bloch dans l'espace direct ainsi que les densités de courant portées par ces états.

8.1 Présentation du système étudié

Dans tout ce chapitre, nous considérons un gaz d'électrons bidimensionnel confiné dans le plan xOy , soumis à une modulation magnétique $\mathbf{B}(x, y) = B(x, y)\mathbf{z}$ appliquée suivant l'axe \mathbf{z} . Nous avons vu dans le chapitre d'introduction que le hamiltonien décrivant ce système s'écrit :

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(-i\nabla_{\mathbf{r}} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2, \quad (8.1)$$

où $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est le potentiel vecteur.

Résoudre l'éq. (8.1) s'avère être une tâche difficile dans la pratique, il n'existe pas de solutions générales à l'éq. (8.1) mise à part quelques cas particuliers. Le problème est d'autant plus compliqué pour les distributions de champ magnétique périodique, car le potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ n'est pas nécessairement périodique. En fait, deux cas de figures sont possibles suivant la valeur du flux magnétique traversant une cellule élémentaire :

- $\langle B(x, y) \rangle \neq 0$: Dans cette situation, il n'est pas possible d'utiliser le théorème de Bloch tel quel car le potentiel vecteur n'est généralement pas périodique. Ce résultat est indépendant de la jauge régulière choisie pour calculer le potentiel vecteur. Plusieurs études ont montré que le hamiltonien (8.1) peut être résolu en utilisant par exemple des jauges singulières [6] ou ce qui est équivalent, les opérateurs de translation magnétique [43, 44]. Ces deux techniques permettent d'utiliser le théorème de Bloch, moyennant une condition sur le flux du champ magnétique qui doit être égal à $\phi = p/q\phi_0$ avec $p, q \in \mathbb{Z}$ premiers entre eux et sur la taille de la maille élémentaire.
- $\langle B(x, y) \rangle = 0$: Dans ce cas, il est possible de trouver une jauge convenable dans laquelle le potentiel vecteur est périodique et utiliser le théorème de Bloch pour résoudre le hamiltonien (8.1).

Dans ce chapitre, nous considérons que le champ magnétique a un flux égal à zéro par cellule unité. En utilisant les composantes de Fourier du champ magnétique et la jauge de Coulomb ($\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$), il est possible de montrer que les composantes de Fourier du potentiel vecteur s'écrivent :

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}) = -i \frac{B(\mathbf{q})}{q^2} \mathbf{q} \times \mathbf{z} \text{ pour } q \neq 0. \quad (8.2)$$

Le potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ étant périodique, nous utilisons le théorème de Bloch pour résoudre l'éq. (8.1) et nous écrivons les solutions sous la forme $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ où $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ vérifie l'équation différentielle suivante :

$$\frac{1}{2m^*} (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (8.3)$$

avec \mathbf{k} le moment cristallin pris dans la première zone de Brillouin, n l'indice de bande et $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ les valeurs propres associées à $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

8.2 Méthode de résolution du hamiltonien

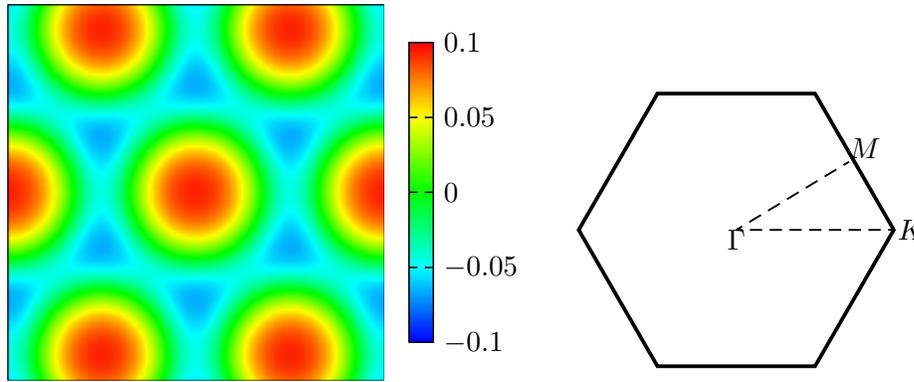
Après projection de l'éq. (8.3) sur la base des ondes planes, nous trouvons que les composantes de Fourier $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{q})$ ¹ de $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ vérifient l'équation :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \sum_{\mathbf{q}'} h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{q}') = \varepsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{q}'), \quad (8.4)$$

avec

$$\begin{aligned} h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} &= (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \\ &+ \frac{e}{\hbar} (2\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \\ &+ \sum_{\mathbf{q}_1} \mathbf{A}(\mathbf{q}_1) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q} - \mathbf{q}' - \mathbf{q}_1). \end{aligned} \quad (8.5)$$

¹ $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{S}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}$



(a) B_z d'un réseau triangulaire de nanocylindres magnétiques (unité $\mu_0 M$) (b) Zone de Brillouin du réseau triangulaire

FIG. 8.1: (a) Champ magnétique $B(x, y)$ (en $4\pi M$). Les lignes noires indiquent les lignes de champ magnétique $B(x, y) = 0$. (b) zone de Brillouin du réseau triangulaire

$\mathbf{A}(\mathbf{q})$ est la transformée de Fourier du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}''$ sont les vecteurs du réseau réciproque. Les solutions du hamiltonien s'obtiennent après diagonalisation de l'opérateur (8.4) dont les éléments de matrice donnés par l'éq. (8.5), dépendent du réseau considéré. Dans la suite, nous nous proposons d'étudier les propriétés de l'éq. (8.1) pour une distribution magnétique ayant les symétries du réseau triangulaire. Afin de calculer les vecteurs propres et les valeurs propres du hamiltonien (8.5), nous considérons uniquement un nombre fini d'ondes planes. Le nombre d'ondes planes prises en compte est fixé par la convergence des valeurs propres et des vecteurs propres de plus basse énergie. Dans la suite, nous remplaçons le nombre d'ondes planes par le paramètre ε_c que nous appellerons énergie de coupure. En d'autres termes, nous considérons uniquement les ondes planes d'énergie inférieure à ε_c .

8.3 Réalisations expérimentales d'un champ magnétique périodique 2-D

Plusieurs solutions ont été proposées dans le passé pour réaliser expérimentalement des distributions périodiques de champs magnétiques. Les techniques les plus connues sont basées sur l'utilisation de films minces de supraconducteurs de type II, servant de grille aux hétéro-structures semi-conductrices dans lesquelles les gaz d'électrons bidimensionnels [85, 1] sont créés. Une fois le film plongé dans un champ magnétique uniforme supérieur au champ critique B_{c1} , il crée une distribution de champ magnétique de flux non nul à l'intérieur du gaz d'électrons par l'intermédiaire du réseau de vortex (appelé réseau de Abrikosov [63]).

Grâce aux progrès réalisés en croissance organisée et en dépôt de matériaux magnétiques, il est désormais possible de réaliser des micros et nanostructures d'îlots magnétiques et de nanocylindres magnétiques [49] arrangés périodiquement. Lorsque l'aimantation de chaque îlot ou de nanocylindre est orienté dans le même sens, le réseau de nano-objets crée un champ magnétique périodique caractérisé par un flux magnétique égal à zéro par cellule unité. Une fois déposée à une distance d de l'interface contenant le gaz d'électrons, la nano-structure magnétique crée une

distribution magnétique inhomogène et périodique, dont les composantes de Fourier du champ magnétique décroissent exponentiellement avec la distance d séparant le gaz d'électrons de la nano-structure. Chaque composante de Fourier du champ magnétique vérifie la relation suivante :

$$B_i(\mathbf{q}, d) = B_i(\mathbf{q}, 0) \exp(-|\mathbf{q}|d), \quad (8.6)$$

où $B_i(\mathbf{q}, 0)$ avec $i = x, y, z$ est la composante de Fourier de la composante i du champ magnétique calculée en $d = 0$.

En prenant les mêmes paramètres géométriques que dans le chapitre 4, c.-à-d. une période de 100 nm, un facteur de remplissage de $p = 0.5$ et une distance de 20 nm entre la nano-structure magnétique et le gaz d'électrons, nous obtenons une amplitude de l'ordre de 0.2 T pour des nanocylindres de fer. En utilisant l'éq. (8.6), il est possible de voir que l'essentiel de l'amplitude est porté par la première composante de Fourier. Dans la suite, nous nous plaçons dans le cas où seule la première composante de Fourier du champ magnétique a des valeurs appréciables.

8.4 Résultats numériques

Nous restreignons l'étude de l'éq. (8.1) au cas du réseau triangulaire car c'est le réseau le plus souvent obtenu lors de la fabrication des nanostructures magnétiques obtenues par croissance [49]. Pour décrire les déplacements sur le réseau triangulaire, nous définissons deux vecteurs de base $\mathbf{a}_1 = (1, 0)$ et $\mathbf{a}_2 = (-1/2, -\sqrt{3}/2)$ et nous posons $\mathbf{a}_3 = -\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. Les vecteurs du réseau réciproque sont définis par la relation :

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

avec $i, j = 1, 2$. Avec ces conventions, la zone de Brillouin est délimitée par un hexagone (fig. 8.1-b) dont les sommets sont en $\pm(2/3)\mathbf{a}_i$, $i = 1, 2, 3$

D'après l'hypothèse faite précédemment, la composante B_z du champ magnétique est composée uniquement de la première composante de Fourier :

$$B(x, y) = B_0 \left(\cos\left(\frac{\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{r}}{a}\right) + \cos\left(\frac{\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{r}}{a}\right) + \cos\left(\frac{\mathbf{b}_3 \cdot \mathbf{r}}{a}\right) \right), \quad (8.7)$$

où \mathbf{b}_1 et \mathbf{b}_2 sont les vecteurs du réseau réciproque du réseau triangulaire, $\mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2$. B_0 , de l'ordre de 0.2 T pour le fer à une distance $d = 0.2a$ a étant la période, est l'amplitude de la première composante de Fourier de la distribution magnétique. Les composantes de Fourier du potentiel vecteur peuvent être calculées en utilisant la relation (8.2).

Afin de simplifier les notations, nous posons

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \quad (8.8)$$

$$\alpha = \frac{B_0 S}{2\pi\phi_0}, \quad (8.9)$$

avec $S = \sqrt{3}a^2/2$ la surface de la maille élémentaire. Après remplacement de l'éq. (8.8) dans les éq. (8.7)(8.4)(8.5), nous obtenons

$$\begin{aligned} h_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} &= \varepsilon_0 \left((\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \right. \\ &+ 2\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{a}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \\ &\left. + \alpha^2 \sum_{\mathbf{q}_1} \mathbf{a}(\mathbf{q}_1) \cdot \mathbf{a}(\mathbf{q} - \mathbf{q}' - \mathbf{q}_1) \right) \end{aligned} \quad (8.10)$$

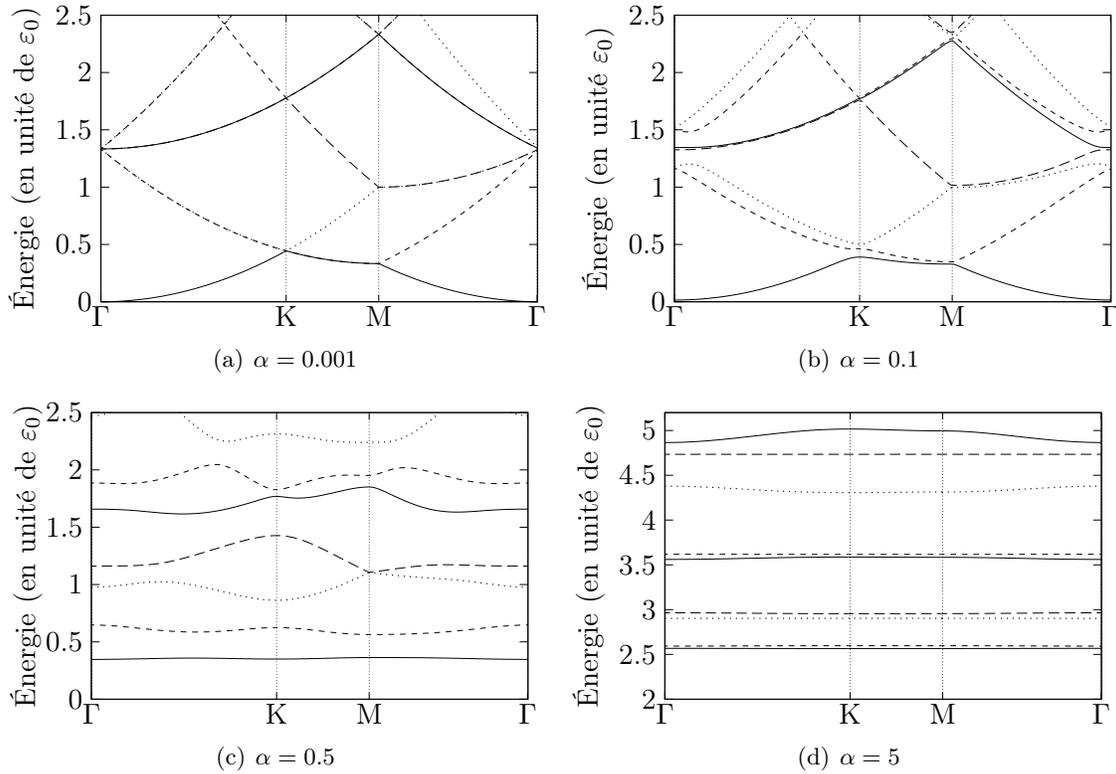


FIG. 8.2: Spectre énergétique d'un électron dans un champ magnétique périodique 2-D. (a) champ faible (b,c) champ d'amplitude moyenne (d) champ fort

où $\mathbf{a}(\mathbf{q}) = \mathbf{A}(\mathbf{q})/A_0$ avec $A_0 = B_0 a/2\pi$.

Les paramètres de ce problème sont le paramètre α représentant l'amplitude du champ magnétique et l'énergie de coupure ε_c limitant le nombre de fonctions d'ondes. Le deuxième paramètre dépend du réseau et de la valeur de α . Afin d'assurer une convergence optimale des états de plus basse énergie, nous fixons ε_c à $50\varepsilon_0$, ce qui correspond à cinq mille ondes planes environ.

Enfin, nous choisissons la période du réseau comme unité de longueur, ce qui veut dire que le seul paramètre de ce problème est l'amplitude du champ magnétique c.-à-d. le paramètre α (ϕ/ϕ_0).

8.4.1 Spectre énergétique

Nous avons calculé le spectre énergétique de l'éq. (8.4) pour différentes valeurs du paramètre α , allant du régime de couplage faible (α petit) à un régime de fort couplage ($\alpha > 1$).

Pour de faibles valeurs du paramètre α , la relation de dispersion de l'éq. (8.4) est similaire à la relation de dispersion des électrons libres. Le spectre n'a pas de croisement de bande aux points k contenus sur les lignes de Bragg car le terme quadratique en $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ lève la dégénérescence des bandes en ces points. Cet effet est plus visible sur la figure 8.2-b que sur la figure 8.2-a. Enfin, il n'y a pas de formation de bande d'énergie interdite pour de faibles valeurs du paramètre α . Le système est métallique.

À plus haut champ, les bandes de plus basse énergie se séparent énergétiquement en formant

une bande d'énergie interdite dans le spectre (fig. 8.2-c). Elle s'accompagne d'une réduction de

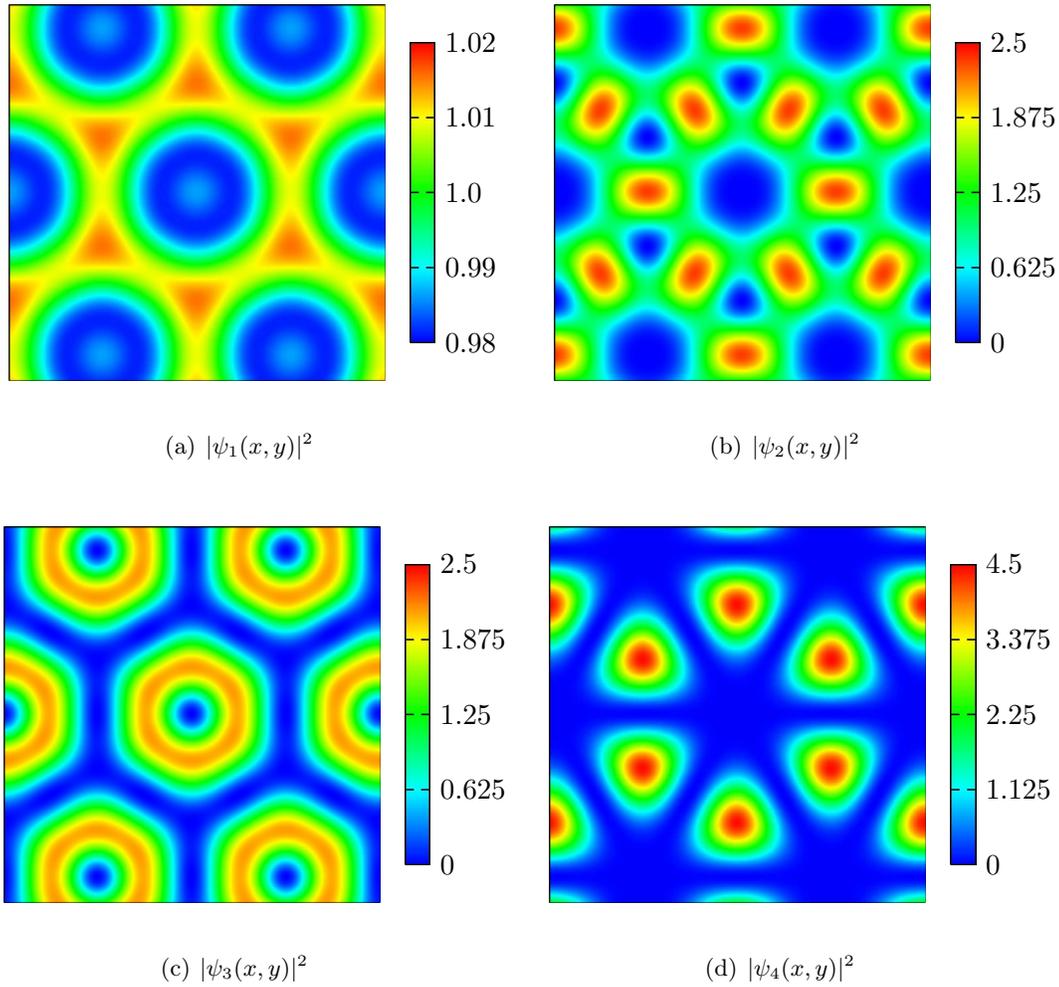


FIG. 8.3: *Module des fonctions d'ondes calculées en $\mathbf{k} = \Gamma$ pour $\alpha = 0.1$. Cette figure montre que les états possibles peuvent être délocalisés (fig. a et b) ou localisés (fig c et d).*

la largeur de chaque bande lorsque le paramètre α augmente. Dans la limite de modulations très importantes, les bandes de plus basse énergie deviennent peu dispersives (fig. 8.2-d) indiquant la présence d'états localisés dans l'espace réel.

8.4.2 Nature des états de Bloch

Nous avons vu dans la section précédente, que le spectre énergétique avait des bandes peu dispersives voir plates lorsque la constante de couplage α est grande. Ce résultat suggère que les états de Bloch peuvent être des états localisés dans l'espace réel.

Le calcul des états de Bloch au point Γ pour différentes valeurs du paramètre α permet de distinguer différents types d'états. Les états délocalisés sont surtout présent lorsque α est faible.

La fig 8.3-(a,b) montre deux états délocalisés sur une grande partie de la maille élémentaire.

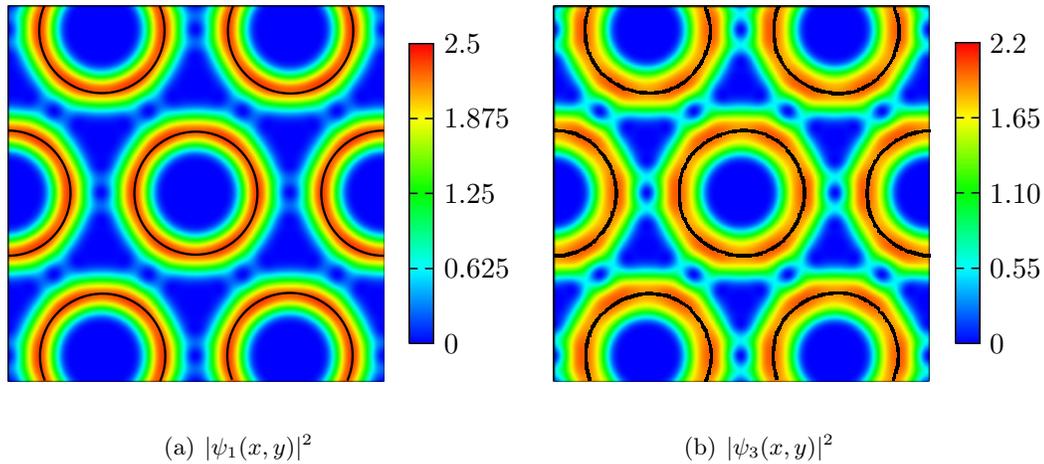


FIG. 8.4: Module des fonctions d'ondes des bandes 1 et 3 calculées au centre de la zone de Brillouin pour $\alpha = 5$. Les fonctions d'ondes sont localisées au voisinage des lignes de champ magnétique $B(x, y) = 0$.

L'état représenté sur la figure 8.3-a est un état fortement délocalisé sur l'ensemble de la maille élémentaire (l'échelle de couleur varie de 0.98 à 1.02), avec une structure semblable à celle du champ magnétique. La figure 8.3-b représente le deuxième état de Bloch calculé au point Γ pour $\alpha = 0.1$. La structure de cet état montre que l'électron reste délocalisé sur une grande partie de la maille, mais évite les régions où le champ magnétique est extremum pour occuper préférentiellement les régions où le champ magnétique est proche de zéro.

Les figures 8.3-(c,d) montrent qu'il existe des états localisés lorsque α est faible. L'électron se trouvant dans l'état de la figure 8.3-c est localisé au voisinage des lignes de champ magnétique $B(x, y) = 0$, tandis que la figure 8.3-d montre un état où l'électron est localisé dans une des régions où le champ magnétique est extremum. Dans le chapitre 7.2, nous avons vu qu'un champ magnétique inhomogène repousse les électrons de vitesse positive dans les régions où le champ magnétique est intense et confine les électrons de vitesse négative au voisinage des lignes de champ $B(x, y) = 0$. Cet effet est relié à la forme du potentiel effectif senti par les électrons, et existe aussi lorsque le champ magnétique a une structure plus compliquée telle que celle qui est envisagée dans ce chapitre. L'état de la figure 8.3-c peut être associé aux états où l'électron a une vitesse négative tandis que l'état de la fig 8.3-d est plus proche des états de vitesse positive.

Enfin, la figure 8.4 montre quelques états pour $\alpha = 5$. Les états obtenus sont fortement localisés au voisinage des lignes de champ $B(x, y) = 0$. Ces états ont une structure similaire aux états localisés obtenus pour $\alpha = 0.1$. La région de localisation de la figure 8.4 a la même forme que sur la fig 8.3-c, mais la largeur est un peu plus étroite que sur la figure 8.3-c.

Pour conclure, le calcul des états de Bloch montre qu'il existe des états localisés et délocalisés pour tous les valeurs du paramètre α . Nous avons vu que les régions de localisation des états localisés ont diverses formes qui dépendent de la forme des lignes de champ $B(x, y) = 0$. Les états délocalisés ont une structure assez complexe qu'il est difficile de caractériser simplement.

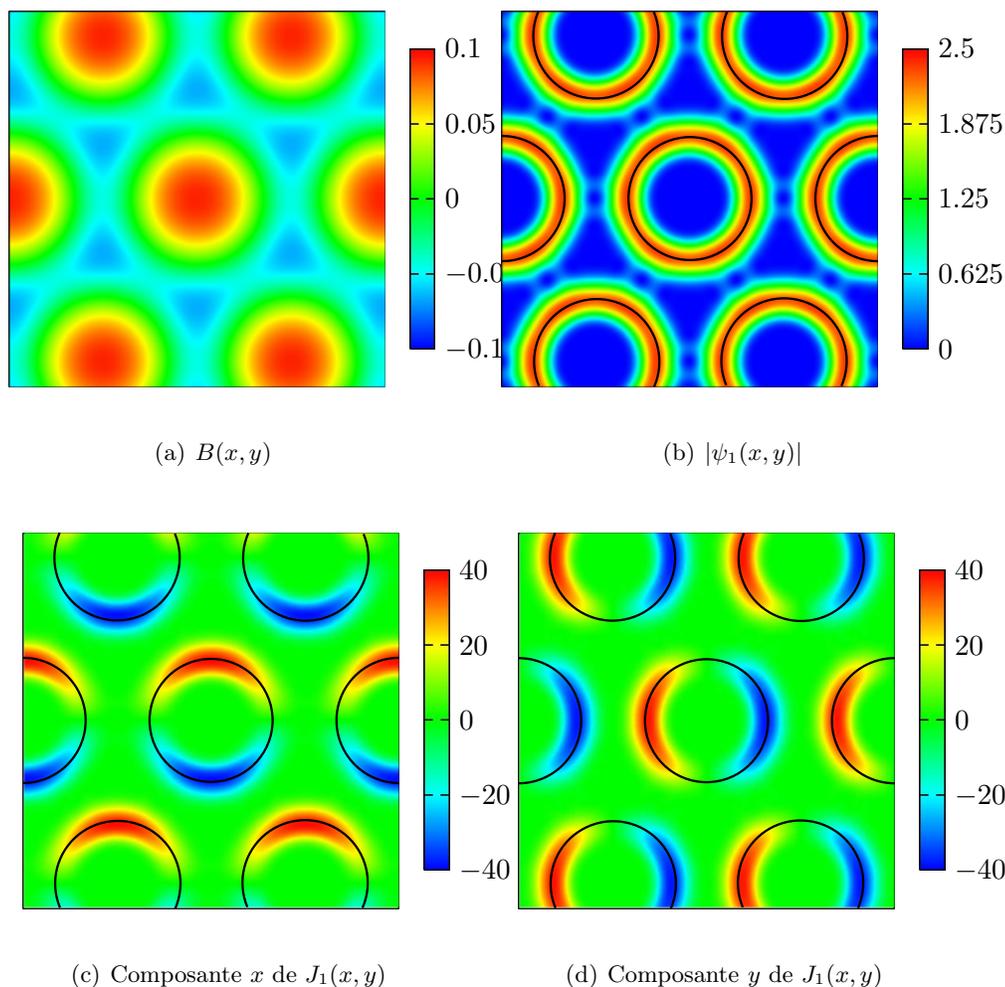


FIG. 8.5: (a) champ magnétique. (b) Module de $\psi_1(x,y)$ calculé au point Γ . (c) et (d) Composantes de la densité de courant.

8.5 Présence de courants permanents

En étudiant les états de Bloch d'un électron soumis à un champ magnétique périodique, nous avons vu qu'ils pouvaient être localisés où délocalisés quelle que soit l'amplitude du couplage choisie. En outre, nous avons vu que les états localisés sont de nature différente c.-à-d. que la région de localisation diffère d'un état à un autre, ce résultat étant en accord avec les résultats obtenus dans le chapitre 7.2. Pour certaines bandes d'énergie, nous avons obtenu des états quantiques où l'électron est localisé soit dans des régions où le signe du champ magnétique est constant soit le long des lignes de champ magnétique $B(x,y) = 0$.

Pour la distribution magnétique représentée sur la fig. 8.1, les lignes de champ magnétique forment un cercle autour duquel l'électron est localisé. La forme des autres régions de localisation est plus difficile à déterminer et dépend essentiellement des équipotentielles de la distribution magnétique.

Le calcul des densités de courant, définies par [15],

$$\mathbf{J}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar e}{m} \Re \left[\psi_{n\mathbf{k}}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-i\nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right], \quad (8.11)$$

pour ces états de Bloch représentés sur la fig 8.4.2, montre que $J_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ a des valeurs non nulles uniquement dans les régions où l'électron est localisé 8.4.2. Dans la suite, nous montrons que le courant permanent porté par l'état de Bloch de la fig. 8.4.2, a deux sources, l'effet Aharonov-Bohm et les inhomogénéités du champ magnétique au voisinage des lignes de champ $B(x, y) = 0$.

8.5.1 Courants permanents induits par l'effet Aharonov-Bohm

Dans cette section, nous revenons sur l'origine des courants permanents mesurés dans des anneaux mésoscopiques lorsqu'ils sont soumis à un flux magnétique ϕ les traversant. Nous notons κ , l'impulsion d'un électron le long de l'anneau \mathcal{C} , et L la longueur de \mathcal{C} . Le champ magnétique traversant l'anneau modifie les conditions de quantification de l'impulsion κ :

$$\kappa = \frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{\phi}{\phi_0} \right), \quad (8.12)$$

où $n \in \mathbb{Z}$. Le spectre énergétique est quantifié à cause de la quantification de l'impulsion. Nous noterons dans la suite $\varepsilon_n(\phi)$ l'énergie d'un état $|n, \phi\rangle$. L'impulsion κ de cet état est donnée par l'éq. (8.12). Enfin la vitesse d'un état $|n, \phi\rangle$ est donnée par la relation suivante [10] :

$$v_n(\phi) = \frac{L\phi_0}{h} \frac{\partial \varepsilon_n(\phi)}{\partial \phi}. \quad (8.13)$$

En absence de champ magnétique, le déplacement des électrons est libre et le spectre énergétique est parabolique (points noirs sur la fig. 8.6-a). La quantification du vecteur d'onde implique que les états $|n, \phi = 0\rangle$ et les états $|-n, \phi = 0\rangle$ ont la même énergie : $\varepsilon_n(\phi = 0) = \varepsilon_{-n}(\phi = 0)$. La vitesse d'un état $|n, \phi = 0\rangle$ est proportionnelle à n (dans ce cas $v = \hbar\kappa/m$), ce qui veut dire qu'un état à N électrons ne génère pas de courant permanent I car les états $\varepsilon_n(\phi = 0) < \varepsilon_F$ et $\varepsilon_{-n}(\phi = 0) < \varepsilon_F$ sont occupés et de vitesse opposée.

Lorsque le flux magnétique est non nul, les états $|n, \phi\rangle$ et $|-n, \phi\rangle$ n'ont plus la même énergie (points noirs sur la fig. 8.6-b) et leur vitesse $|v_{-n}(\phi)|$ $|v_n(\phi)|$ sont différentes en norme et en signe. En conséquence, un état à N électrons est porteur d'un courant permanent car il n'y a plus compensation des vitesses entre les états n et $-n$.

8.5.2 Relation entre un spectre chiral et l'existence de courants permanents

Dans cette section, nous considérons le cas où un électron se déplace le long d'un contour fermé \mathcal{C} de longueur finie L . De plus nous imposons les contraintes suivantes :

- le spectre énergétique est chiral par rapport à l'impulsion,
- il n'y a pas de champ magnétique traversant le contour \mathcal{C} . Nous reviendrons sur l'effet du champ magnétique un peu plus tard.

Comme dans le cas précédent, les conditions aux limites imposent que l'impulsion est quantifiée par valeur de $\frac{2\pi}{L}$. Le spectre énergétique est donc quantifié. Enfin la relation de dispersion n'ayant pas de symétrie particulières, la vitesse, donnée par le gradient de l'énergie par rapport à l'impulsion,

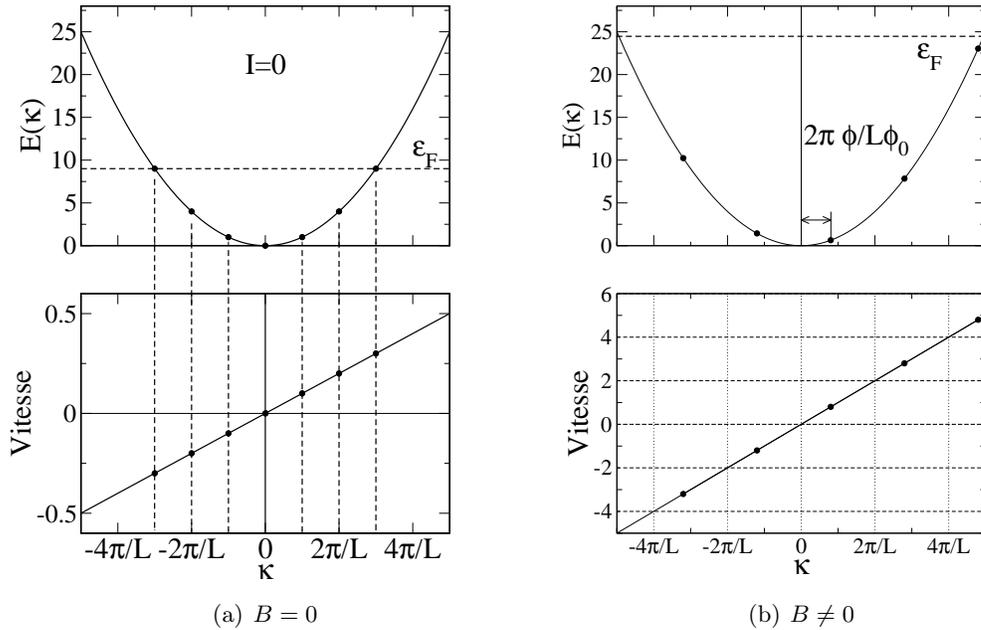


FIG. 8.6: (a) schéma du spectre énergétique et de la vitesse d'un électron sur un anneau en absence de champ magnétique. Les points noirs représentent les états occupés par sept électrons. Le courant total est nul car les vitesses des états $|n, 0\rangle$ et $|-n, 0\rangle$ ont le même module mais sont de signe opposé. (b) schéma du spectre énergétique et de la vitesse d'un électron sur un anneau en présence de champ magnétique ϕ . L'impulsion des états électroniques accessibles est décalée de $\frac{2\pi\phi}{L\phi_0}$ par rapport au cas précédent. Les points noirs représentent les états occupés par sept électrons avec leur vitesse respective. En faisant la somme sur l'ensemble des états occupés, nous trouvons que le courant est non nul dans ce cas

n'aura aucune symétrie. En d'autres termes, si le spectre énergétique $\varepsilon(\kappa) \neq \varepsilon(-\kappa)$ alors $|v_\kappa| \neq |v_{-\kappa}|$.

La propriété précédente a une conséquence importante; l'existence de courants permanents non nuls induits par la chiralité du spectre énergétique en absence de champ magnétique extérieur. Pour montrer ce résultat, nous considérons le spectre énergétique représenté sur la fig. 8.6-a et la vitesse représenté sur la fig. 8.6-b. Supposons qu'il y ait trois électrons se déplaçant le long de \mathcal{C} et calculons le courant permanent transporté par cet état à trois électrons. L'état de plus basse énergie $|\Psi\rangle$ est composé des trois états $\kappa = 0, 2\pi/L, 4\pi/L$ (trois points rouges sur la fig. 8.6-a). Ainsi le calcul du courant total est simple et donne un résultat non nul pour ce modèle. Pour cela, il suffit d'additionner la vitesse de chaque état occupé (les points rouges sur la fig. 8.6-b correspondent aux états occupés). Nous avons pris trois électrons à titre d'exemple, mais le raisonnement est le même pour montrer qu'un courant, porté par un état quantique à N électrons, peut être non nul. Enfin l'application d'un champ magnétique de flux ϕ appliqué au centre de \mathcal{C} ne modifie pas le

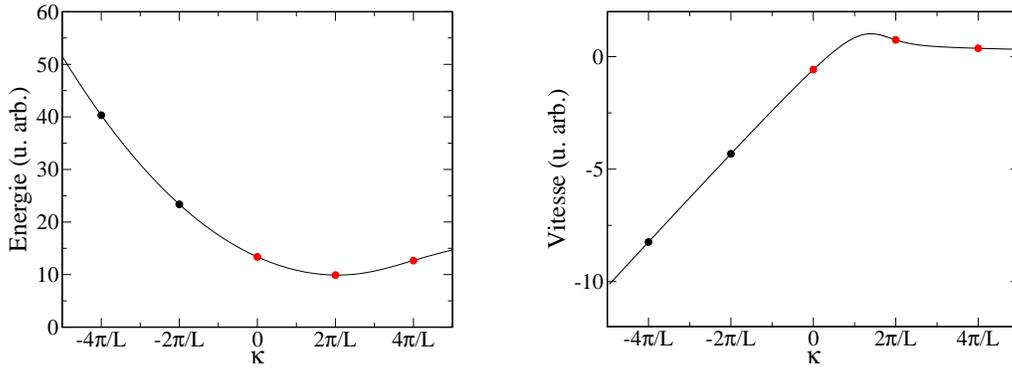


FIG. 8.7: (a) spectre énergétique chiral. Les points noirs et rouges indiquent les niveaux d'énergie accessibles à un électron. Les points rouges indiquent les états occupés lorsque trois électrons se déplacent sur \mathcal{C} . (b) courbe représentant la vitesse correspondant au spectre de la figure (a). Les points rouges indiquent les états occupés par les trois électrons. En additionnant chaque valeur de la vitesse nous trouvons que la vitesse totale est non nulle. Il y a donc un courant permanent.

résultat obtenu. Dans ce cas, le courant total a deux composantes, une composante provenant de la chiralité du spectre et une composante induite par l'effet Aharonov-Bohm.

Lorsque \mathcal{C} est une courbe ouverte, l'impulsion est une variable continue et il n'est pas possible d'obtenir un courant permanent même lorsque le spectre est chiral. Pour montrer ce résultat, il suffit de calculer le courant total pour une position donnée du niveau de Fermi. Le courant total est donné par :

$$I_{total} = \left(\int v(k) dk \right) \quad (8.14)$$

$$= \left(\int_{\varepsilon(k) \ll \varepsilon_F} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} dk \right) \quad (8.15)$$

$$= \left(\int_{k_{F-}}^{k_0} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} dk + \int_{k_0}^{k_{F+}} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} dk \right) \quad (8.16)$$

$$= \left(\int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_0} d\varepsilon + \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \right) \quad (8.17)$$

$$= 0, \quad (8.18)$$

où $\varepsilon(k)$ est la relation de dispersion, k_0 , k_{F+} , k_{F-} sont définis sur la fig. 8.8.

8.5.3 Retour sur les courants portés par des états de Bloch

Les différents modèles développés dans les sec. 8.5.1 et sec. 8.5.2 permettent d'expliquer la présence de courants permanents portés par les états de Bloch obtenus dans la sec. 8.4.2. Les

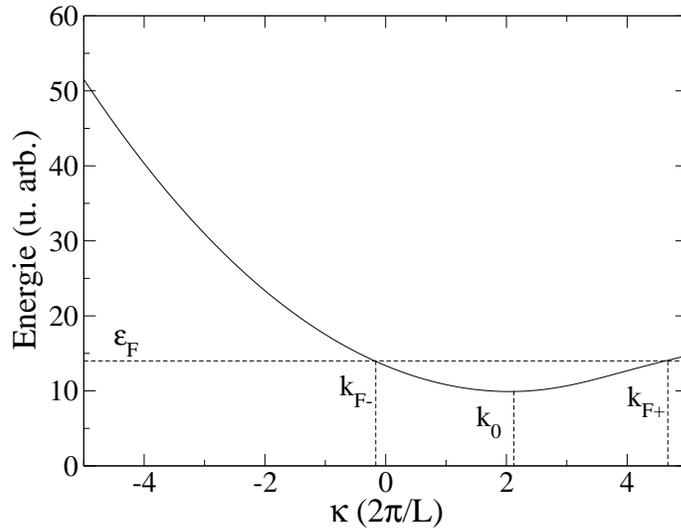


FIG. 8.8: figure définissant les quantités k_{F+} , k_{F-} , et k_0 .

électrons sont localisés au voisinages de lignes de champ magnétique $B(x, y) = 0$. Les lignes de champ magnétique étant fermées, l'impulsion de l'électron, prise dans la direction tangente aux lignes de champ magnétique, est quantifiée.

De plus, le champ magnétique est inhomogène et varie linéairement au voisinage des lignes de champ nul. Le spectre énergétique d'un électron se déplaçant le long des lignes de champ nul est asymétrique et discret. Bien que le champ magnétique $B(x, y)$ ait un flux nul par cellule unité; le flux piégé dans les lignes de champ $B(x, y) = 0$ est non nul. Nous sommes donc dans le cas des modèles développés dans la sec. 8.5.1 et 8.5.2. Les inhomogénéités du champ magnétique induisent un courant permanent

Le courant permanent porté par l'état de Bloch de la fig. 8.4, a deux composantes, une composante originaire de l'effet Aharonov-Bohm et une composante qui dépend explicitement des inhomogénéités du champ magnétique au voisinages de lignes de champ nul.

8.6 Conclusion et perspectives

La dynamique d'un électron soumis à une distribution de champ magnétique périodique est caractérisée par un spectre énergétique dépendant fortement de l'amplitude du champ magnétique et par des états de nature différente pouvant être porteurs de courants permanents.

Le spectre énergétique en champ faible diffère peu de la relation dispersion d'un gaz d'électrons libres, alors qu'il est peu dispersif en champ fort. En étudiant les états de Bloch pour différentes amplitudes de champ magnétique, nous avons obtenu des états de Bloch complètement délocalisés ainsi que certains états localisés au voisinage des lignes de champ magnétique $B(x, y) = 0$. Ces états sont porteurs de courants permanents dont l'origine est liée entre autre aux variations spatiales du champ magnétique au voisinage des lignes fermées de champ $B(x, y) = 0$.

Enfin, nous avons montré qu'il est possible d'obtenir un courant permanent en absence d'un

champ magnétique extérieur lorsque le spectre énergétique d'un électron est chiral et son impulsion est quantifiée.

Chapitre 9

Conclusion

L'effet Hall dans les matériaux ferromagnétiques, bien que connu et étudié depuis plus d'un siècle, fait de nouveau l'objet de nouvelles études théoriques et expérimentales qui sont motivées par la découverte de nouveaux matériaux et effets quantiques. Les mécanismes qui sont à l'origine de l'effet Hall, peuvent être classés en deux catégories, les mécanismes extrinsèques qui dépendent explicitement de la diffusion des porteurs par des impuretés magnétiques ou non et les mécanismes intrinsèques pour lesquels le concept de phase de Berry a un grand rôle.

Dans ce manuscrit, nous apportons quelques éléments de réponse à plusieurs questions encore en suspend. Le premier point mis en avant dans ce manuscrit est la contribution des impuretés à l'effet Hall anormal. En utilisant un modèle simple de gaz d'électrons bidimensionnel en présence de couplage spin-orbite et d'une aimantation, nous avons mis en évidence que la diffusion par les impuretés intervient à deux niveaux différents, en donnant une contribution extrinsèque habituelle faisant intervenir les états proches du niveau de Fermi et une contribution intrinsèque qui ne dépend pas de la concentration en impuretés contenues dans le système. Celle-ci est différente par la forme et son origine de la contribution intrinsèque obtenue dans ce modèle, qui est basée sur la topologie des bandes énergétiques et des états quantiques.

Dans un deuxième temps, nous nous sommes intéressés aux mécanismes intrinsèques ou deux modèles sont proposés. Dans le premier modèle, nous étudions l'effet d'une texture de champ magnétique placée au dessus d'un gaz d'électrons libres et couplée aux électrons par l'intermédiaire de l'interaction Zeeman. Nous avons montré que les électrons sont soumis à un champ topologique fictif issu des variations spatiales du champ magnétique. L'existence de champ topologique se traduit par la présence d'une force, similaire à la force de Lorentz, qui agit sur les électrons en les déviant perpendiculairement à leur trajectoire. Lorsque la distribution de champ magnétique est périodique, le champ topologique a des propriétés particulières telles que le flux traversant un contour C quelconque est proportionnel à la phase de Berry acquise par la fonction d'onde d'un électron se déplaçant le long de ce contour.

En calculant la conductivité transverse dans l'approximation de Drude, nous avons trouvé que celle-ci est proportionnelle au flux moyen par cellule unité du champ topologique créé par la distribution magnétique. L'application d'un champ magnétique supplémentaire se traduit par des variations discontinues de la conductivité transverse, que nous avons relié à un changement de topologie de la distribution magnétique totale. Les discontinuités observées dans les variations de σ_{xy} sont une signature caractéristique de l'existence d'un mécanisme intrinsèque induit par les phases de Berry. Enfin, nous avons proposé une expérience dans laquelle cet effet peut être observé.

Dans le dernier modèle proposé dans ce manuscrit, nous étudions l'effet de la chiralité de

spin sur la conductivité transverse permettant de répondre si le mécanisme de chiralité de spin est le mécanisme pertinent de l'effet Hall anormal dans le composé pyrochlore $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$. Le modèle proposé bien que n'étant pas applicable directement au composé, a mis en évidence que la conductivité transverse est une fonction complexe de la chiralité de spin. En particulier, nous avons montré que σ_{xy} peut changer de signe à chiralité fixée et peut-être quantifiée lorsque le niveau de Fermi est dans une bande d'énergie interdite. Une étude simple de la conductivité transverse en fonction de la température a montré que toutes les variations de la conductivité transverse sont possibles sans que la chiralité de spin change. Les différents résultats obtenus en faisant varier divers paramètres telle que la chiralité le remplissage ou la constante de couplage, suggèrent que le mécanisme de chiralité de spin n'est pas le seul mécanisme responsable de l'effet Hall anormal dans le composé pyrochlore. Diverses études peuvent être proposées pour décrire quantitativement l'effet Hall anormal dans $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ en tenant compte de la structure magnétique réelle de ce composé.

Enfin, la dernière partie de ce manuscrit expose une physique différente de l'effet Hall anormal. Dans cette partie, nous décrivons l'action d'un champ magnétique inhomogène interagissant avec un gaz d'électrons sans spin par l'intermédiaire de la force de Lorentz. En étudiant les distributions magnétiques périodiques, nous avons deux familles d'états de Bloch, des états de Bloch délocalisés sur l'ensemble de la maille élémentaire et des états de Bloch localisés au voisinage des champ magnétique constant. Parmi les états de Bloch étudiés, nous avons obtenu des états localisés au voisinage des lignes de champ magnétique nul qui sont des courbes fermées pour la distribution magnétique considérée. Ces états sont porteurs d'un courant permanent dont l'origine est liée uniquement à l'inhomogénéité du champ magnétique au voisinage des lignes de champ $B(x, y) = 0$.

Quatrième partie

Annexes et bibliographie

Annexe A

Calculs divers

Cet appendice contient certains détails de calculs qui ne sont pas exposés dans le chapitre 3. Nous prenons la convention $\hbar = 1$.

A.1 Calcul de la self-énergie

Dans le cadre de modèle développé dans le chapitre 3, nous devons calculer la self-énergie $\Sigma_i(\varepsilon)$ au deuxième ordre en V . Dans ce cas, il est possible de montrer que la self-énergie est donnée par :

$$\Sigma_i(\varepsilon) = N_i V_0^2 \int G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon) \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (\text{A.1})$$

où $G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon)$ est la fonction de Green du hamiltonien \mathcal{H}_0 :

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu + \alpha(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) - M \sigma_z}{(\varepsilon - E_{\mathbf{k}+} + \mu + i\delta \text{sign } \varepsilon)(\varepsilon - E_{\mathbf{k}-} + \mu + i\delta \text{sign } \varepsilon)}, \quad (\text{A.2})$$

avec $E_{k\pm} = \varepsilon_k \mp \lambda(\mathbf{k})$ et $\lambda(\mathbf{k}) = \sqrt{M^2 + \alpha^2 k^2}$. La fonction de Green $G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon)$ peut être écrite sous une forme plus simple que l'expression (A.2) :

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu + \alpha(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) - M \sigma_z}{E_{\mathbf{k}-} - E_{\mathbf{k}+}} \\ &\times \left[\frac{1}{\varepsilon - E_{\mathbf{k}+} + \mu + i\delta \text{sign } \varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon - E_{\mathbf{k}-} + \mu + i\delta \text{sign } \varepsilon} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

En remplaçant l'éq. (A.3) dans l'éq. (A.1), nous trouvons que

$$\begin{aligned} \Sigma_i(\varepsilon) &= \lim_{\delta \rightarrow 0} N_i V_0^2 \text{sign } \varepsilon \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu - M \sigma_z}{E_{\mathbf{k}-} - E_{\mathbf{k}+}} [\delta(\varepsilon - E_{\mathbf{k}+} + \mu) - \delta(\varepsilon - E_{\mathbf{k}-} + \mu)] \\ &= -i\pi \lim_{\delta \rightarrow 0} N_i V_0^2 \text{sign } \varepsilon \int \frac{M \sigma_z + \lambda(\mathbf{k})}{2\lambda(\mathbf{k})} [\delta(\varepsilon - E_{\mathbf{k},+} + \mu) + \delta(\varepsilon - E_{\mathbf{k},-} + \mu)] \frac{d\mathbf{k}^2}{(2\pi)^2} \\ &\approx -\pi N_i V_0^2 \frac{\text{sign } \varepsilon}{2} \left[(\nu_+ + \nu_-) + M \left(\frac{\nu_+}{\lambda_+} + \frac{\nu_-}{\lambda_-} \right) \sigma_z \right], \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$\lambda_{\pm} = \lambda(k_{f,\pm})$ et ν_+ et ν_- sont les densités d'états au niveau de Fermi définies par les éq. (3.13) et (3.14) respectivement. En posant

$$\frac{1}{\tau} = \pi N_i V_0^2 (\nu_+ + \nu_-), \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{1}{\bar{\tau}} = \pi N_i V_0^2 M \left(\frac{\nu_+}{\lambda_+} - \frac{\nu_-}{\lambda_-} \right), \quad (\text{A.6})$$

nous retrouvons l'expression de $\Sigma_i(\varepsilon)$ donnée par l'éq. (3.10).

A.2 Calcul de σ_{xy}^I et σ_{xy}^{II}

Pour calculer σ_{xy}^I et σ_{xy}^{II} nous utilisons les éq. (3.5)(3.15)(3.16) et (3.17) :

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(\omega) &= \frac{ie^2}{\omega} \text{Tr} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left(\frac{k_x}{m} - \alpha\sigma_y \right) G(\varepsilon + \omega) \left(\frac{k_y}{m} + \alpha\sigma_x \right) G(\varepsilon) \\ &= \frac{ie^2}{\omega} \text{Tr} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left(\frac{k_x}{m} - \alpha\sigma_y \right) \\ &\quad \times \frac{\varepsilon + \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu + \frac{i}{2\tau} \text{sign}(\varepsilon + \omega) + \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) - \tilde{M}\sigma_z}{(\varepsilon + \omega - E_{\mathbf{k},+} + \mu + \frac{i}{2\tau_+} \text{sign}(\varepsilon + \omega))(\varepsilon + \omega - E_{\mathbf{k},-} + \mu + \frac{i}{2\tau_-} \text{sign}(\varepsilon + \omega))} \\ &\quad \left(\frac{k_y}{m} + \alpha\sigma_x \right) \\ &\quad \times \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu + \frac{i}{2\tau} \text{sign}(\varepsilon) + \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) - \tilde{M}\sigma_z}{(\varepsilon - E_{\mathbf{k},+} + \mu + \frac{i}{2\tau_+} \text{sign}(\varepsilon))(\varepsilon - E_{\mathbf{k},-} + \mu + \frac{i}{2\tau_-} \text{sign}(\varepsilon))}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

L'éq. (A.7) peut se simplifier en prenant en compte la trace sur les états de spin ($\text{Tr}(\sigma_i\sigma_j\sigma_k) = 2i\varepsilon_{ijk}$ où ε_{ijk} est le tenseur antisymétrique) et l'intégration sur \mathbf{k} (tous les termes proportionnels à k_x ou k_y s'annulent après intégration sur \mathbf{k}). Il faut donc calculer les deux termes suivants

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{-e^2\alpha^2}{\omega} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \sigma_y \frac{\varepsilon + \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu + \frac{i}{2\tau} \text{sign}(\varepsilon + \omega) - \tilde{M}\sigma_z}{D_+(\varepsilon + \omega)D_-(\varepsilon + \omega)} \sigma_x \\ &\quad \times \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu + \frac{i}{2\tau} \text{sign}(\varepsilon) - \tilde{M}\sigma_z}{D_+(\varepsilon)D_-(\varepsilon)} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

avec

$$D_{\pm}(\varepsilon) = \varepsilon - E_{\mathbf{k}\pm} + \mu + i/2\tau_{\pm} \text{sign}(\varepsilon). \quad (\text{A.9})$$

L'intégrale sur l'énergie peut se calculer en utilisant le théorème des résidus. Le contour d'intégration est composé de la droite $y = 0$ et d'un demi-cercle dans le plan supérieur. Les résidus sont en

$\varepsilon = E_{\mathbf{k},\pm} - \omega + i/2\tau_{\pm}$ et $\varepsilon = E_{\mathbf{k},\pm} + i/2\tau_{\pm}$. Après calcul nous obtenons

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} = & \frac{-ie^2\alpha^2}{\omega} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \sigma_y \left[f(E_{\mathbf{k},+}) \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau_-})} \sigma_x \right. \\
& \times \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} - \omega + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau_-})(-\omega)} \\
& + f(E_{\mathbf{k},-}) \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau_+})} \sigma_x \\
& \times \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} - \omega + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau_+})(-\omega)} \\
& + f(E_{\mathbf{k},-}) \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \frac{i}{2\tau_-} + \frac{i \operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},-} + \omega + \mu)}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \omega + \frac{i}{2\tau_-} + \frac{i \operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},-} + \omega + \mu)}{2\tau_+})(\omega + \frac{i}{2\tau_-} + \frac{i \operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},-} + \omega + \mu)}{2\tau_-})} \sigma_x \\
& \times \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau_+}} \\
& + f(E_{\mathbf{k},+}) \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \frac{i}{2\tau_+} + \frac{i \operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},+} + \omega + \mu)}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \omega + \frac{i}{2\tau_+} + \frac{i \operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},+} + \omega + \mu)}{2\tau_-})(\omega + \frac{i}{2\tau_+} + \frac{i \operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},+} + \omega + \mu)}{2\tau_+})} \sigma_x \\
& \times \left. \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau_-}} \right]. \tag{A.10}
\end{aligned}$$

Pour simplifier les dernières lignes faisant intervenir $\operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},\pm} + \omega - \mu)$ il faut distinguer deux cas :

- $E_{\mathbf{k},\pm} < \mu - \omega$ dans ce cas, il faut remplacer $f(E_{\mathbf{k},\pm})$ par $f(E_{\mathbf{k},\pm} + \omega)$ et remplacer $\operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},\pm} + \omega - \mu)$ par un signe $-$. Cela limite l'intégration sur \mathbf{k} aux états de $E_{\mathbf{k},\pm} < \mu - \omega$.
- $\mu - \omega < E_{\mathbf{k},\pm} < \mu$ dans ce cas, il faut remplacer $f(E_{\mathbf{k},\pm})$ par $f(E_{\mathbf{k},\pm}) - f(E_{\mathbf{k},\pm} + \omega)$ et remplacer $\operatorname{sign}(E_{\mathbf{k},\pm} + \omega - \mu)$ par un signe $+$. L'intégration sur \mathbf{k} se limite à l'intervalle $\mu - \omega < E_{\mathbf{k},\pm} < \mu$.

Compte tenu de ces modifications, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} = & \frac{-ie^2\alpha^2}{\omega} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \sigma_y \left[f(E_{\mathbf{k},+}) \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau_-})} \sigma_x \right. \\
& \times \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} - \omega + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau_-})(-\omega)} \\
& + f(E_{\mathbf{k},-}) \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau_+})} \sigma_x \\
& \times \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} - \omega + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau_+})(-\omega)} \\
& + f(E_{\mathbf{k},-} + \omega) \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \omega + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau_+})(\omega)} \sigma_x \\
& \times \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau_+}} \\
& + f(E_{\mathbf{k},+} + \omega) \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \omega + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau_-})(\omega)} \sigma_x \\
& \times \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau_-}} \\
& + \left\{ f(E_{\mathbf{k},-}) - f(E_{\mathbf{k},-} + \omega) \right\} \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \frac{i}{2\tau_-} + \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \omega + \frac{i}{2\tau_-} + \frac{i}{2\tau_+})(\omega + \frac{i}{\tau_-})} \sigma_x \\
& \times \frac{E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \frac{i}{2\tau_-} - \frac{i}{2\tau_+}} \\
& + \left\{ f(E_{\mathbf{k},+}) - f(E_{\mathbf{k},+} + \omega) \right\} \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \frac{i}{2\tau_+} + \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \omega + \frac{i}{2\tau_+} + \frac{i}{2\tau_-})(\omega + \frac{i}{\tau_+})} \sigma_x \\
& \times \left. \frac{E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau} - \tilde{M}\sigma_z}{E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \frac{i}{2\tau_+} - \frac{i}{2\tau_-}} \right]. \tag{A.11}
\end{aligned}$$

Quelques simplifications s'imposent. Nous négligeons tous les termes en $\frac{1}{2\tau}$ dans les dénominateurs sauf le terme en $(\omega + \frac{i}{\tau_{\pm}})$. Ceci est justifié car nous nous intéressons uniquement à la limite $N_i \rightarrow 0$. Enfin, nous remplaçons \tilde{M} par M car $\tilde{M} = M + i\Gamma$ tend vers M lorsque la concentration tend vers

zéro. La conductivité transverse s'écrit donc :

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} = & \frac{-ie^2\alpha^2 M}{\omega} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \left[-f(E_{\mathbf{k},+}) \frac{1}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} - \omega)(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})} \right. \\
& - f(E_{\mathbf{k},-}) \frac{1}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} - \omega)(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+})} \\
& + \{f(E_{\mathbf{k},-} + \omega) - f(E_{\mathbf{k},-})\} \frac{1}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \omega)(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+})} \\
& + f(E_{\mathbf{k},-}) \frac{1}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \omega)(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+})} \\
& + \left. \left\{ f(E_{\mathbf{k},+} + \omega) - f(E_{\mathbf{k},+}) \right\} \frac{1}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \omega)(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})} \right\} \\
& + f(E_{\mathbf{k},+}) \frac{1}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \omega)(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})} \\
& + \{f(E_{\mathbf{k},-}) - f(E_{\mathbf{k},-} + \omega)\} \frac{\omega + \frac{i}{\tau_-}}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \omega)(\omega + \frac{i}{\tau_-})(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+})} \\
& + \left. \{f(E_{\mathbf{k},+}) - f(E_{\mathbf{k},+} + \omega)\} \frac{\omega + \frac{i}{\tau_+}}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \omega)(\omega + \frac{i}{\tau_+})(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})} \right] \\
& \times \text{Tr}(\sigma_y \sigma_x \sigma_z). \tag{A.12}
\end{aligned}$$

En prenant la limite $\omega \rightarrow 0$ nous obtenons :

$$\sigma_{xy} = -4e^2\alpha^2 M \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \frac{f(E_{\mathbf{k},+}) - f(E_{\mathbf{k},-})}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})^3} \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})^2} \left[\left(1 - \frac{\tau_+}{\tau_-}\right) \right. \\
& \times \left. \left(-\frac{\partial f(E_{\mathbf{k},+})}{\partial \varepsilon} \right) + \left(1 - \frac{\tau_-}{\tau_+}\right) \left(-\frac{\partial f(E_{\mathbf{k},-})}{\partial \varepsilon} \right) \right]. \tag{A.14}
\end{aligned}$$

il suffit de poser

$$\sigma_{xy}^{II} = -4e^2\alpha^2 M \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \frac{f(E_{\mathbf{k},+}) - f(E_{\mathbf{k},-})}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})^3},$$

et

$$\sigma_{xy}^I = -e^2\alpha^2 M \int \frac{d\mathbf{k}^2}{4\pi^2} \frac{1}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})^2} \left[\left(1 - \frac{\tau_+}{\tau_-}\right) \left(-\frac{\partial f(E_{\mathbf{k},+})}{\partial \varepsilon} \right) + \left(1 - \frac{\tau_-}{\tau_+}\right) \left(-\frac{\partial f(E_{\mathbf{k},-})}{\partial \varepsilon} \right) \right].$$

pour obtenir les expressions recherchées ((eq. (3.20)) pour σ_{xy}^{II} et (eq. (3.25)) pour σ_{xy}^I).

A.3 Calcul de σ_{xy}^{II}

Pour calculer la contribution des états situés en dessous du niveau de Fermi, nous utilisons la formule (3.18) couplées aux formules (3.5) et (3.7) pour les fonctions de Green. Cette contribution

est donnée par

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy}^{II}(\omega) &= \frac{ie^2}{\omega} \text{Tr} \sum_{\mathbf{k}} \left[\int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left(\frac{k_x}{m} - \alpha\sigma_y \right) G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon + \omega) \left(\frac{k_x}{m} + \alpha\sigma_x \right) G_{\mathbf{k}}^0(\varepsilon) \right] \\
&= \left(\frac{k_x}{m} - \alpha\sigma_y \right) \frac{(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \mu + \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) - M\sigma_z)}{(\varepsilon - E_{\mathbf{k}+} + \mu + \omega + i\delta \text{sign } \varepsilon)(\varepsilon - E_{\mathbf{k}-} + \mu + \omega + i\delta \text{sign } \varepsilon)} \\
&\times \left(\frac{k_x}{m} + \alpha\sigma_x \right) \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \mu + \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) - M\sigma_z}{(\varepsilon - E_{\mathbf{k}+} + \mu + \omega + i\delta \text{sign } \varepsilon)(\varepsilon - E_{\mathbf{k}-} + \mu + \omega + i\delta \text{sign } \varepsilon)} \right) \quad (\text{A.15})
\end{aligned}$$

où la trace se limite à la somme sur les états des spin. L'éq. (A.15) peut se simplifier en remarquant que seuls les termes faisant intervenir les produits $\sigma_i\sigma_j\sigma_k$ avec $i \neq j \neq k$, ont une trace non nulle :

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy}^{II}(\omega) &= \frac{Me^2\alpha^2}{\omega} \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \text{Tr} \left[\frac{((\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega)\sigma_y\sigma_x\sigma_z + (\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})\sigma_y\sigma_x\sigma_z)}{(\varepsilon - E_{\mathbf{k}+} + \mu + \omega + i\delta \text{sign } \varepsilon)(\varepsilon - E_{\mathbf{k}-} + \mu + \omega + i\delta \text{sign } \varepsilon)} \right. \\
&\times \left. \frac{1}{(\varepsilon - E_{\mathbf{k}+} + \mu + \omega + i\delta \text{sign } \varepsilon)(\varepsilon - E_{\mathbf{k}-} + \mu + \omega + i\delta \text{sign } \varepsilon)} \right]. \quad (\text{A.16})
\end{aligned}$$

Pour calculer l'intégrale sur ε , nous choisissons un contour passant dans le demi-plan supérieur. Les seuls pôles intervenant sont donc les pôles où $\text{sign}(\varepsilon) < 0$. En utilisant le théorème des résidus, nous trouvons que l'éq. (A.16) s'écrit finalement

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy}^{II}(\omega) &= \frac{iMe^2\alpha^2}{\omega} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left[f(E_{\mathbf{k},+} - \omega) \frac{((E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\sigma_y\sigma_z\sigma_x + (E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega)\sigma_y\sigma_x\sigma_z)}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k}-})(-\omega)(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k}-} - \omega)} \right. \\
&+ f(E_{\mathbf{k},-} - \omega) \frac{((E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\sigma_y\sigma_x\sigma_z + (E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega)\sigma_y\sigma_x\sigma_z)}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k}+})(-\omega)(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k}+} - \omega)} \\
&+ f(E_{\mathbf{k},-}) \frac{((E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega)\sigma_y\sigma_x\sigma_z + (E_{\mathbf{k},-} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\sigma_y\sigma_x\sigma_z)}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k}+})(\omega)(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k}+} + \omega)} \\
&\left. + f(E_{\mathbf{k},+}) \frac{((E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega)\sigma_y\sigma_x\sigma_z + (E_{\mathbf{k},+} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\sigma_y\sigma_x\sigma_z)}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k}-})(\omega)(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k}-} + \omega)} \right], \quad (\text{A.17})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy}^{II}(\omega) &= \frac{iMe^2\alpha^2 \text{Tr}(\sigma_y\sigma_z\sigma_x)}{\omega} \left[\frac{-f(E_{\mathbf{k},+} - \omega)}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} - \omega)} \right. \\
&+ \frac{-f(E_{\mathbf{k},-} - \omega)}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+})(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} - \omega)} \\
&+ \frac{f(E_{\mathbf{k},+})}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-} + \omega)} \\
&\left. + \frac{f(E_{\mathbf{k},-})}{(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+})(E_{\mathbf{k},-} - E_{\mathbf{k},+} + \omega)} \right]. \quad (\text{A.18})
\end{aligned}$$

En prenant la limite $\omega \rightarrow 0$ nous trouvons finalement que

$$\sigma_{xy}^{II} = -4Me^2\alpha^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(E_{\mathbf{k},+}) - f(E_{\mathbf{k},-})}{(E_{\mathbf{k},+} - E_{\mathbf{k},-})^3}, \quad (\text{A.19})$$

qui est identique à l'expression (3.20).

A.4 Conductivité transverse : Cas général

Dans cette section, nous donnons une démonstration des formules (3.40) et (5.13) décrivant la contribution de tous les états occupés en absence d'impuretés. Pour cela, nous allons utiliser les fréquences de Matsubara qui ont l'avantage d'inclure les effets de la température. La conductivité transverse dans ce formalisme est donné par :

$$\sigma_{xy}(i\omega) = \frac{e^2}{\beta i\omega} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \sum_{n \neq m} \sum_{ip} v_x^{nm} G_m^0(ip + i\omega) v_y^{mn} G_n^0(ip), \quad (\text{A.20})$$

où

$$G_m^0(ip) = \frac{1}{ip - \varepsilon_{m,\mathbf{k}}}$$

avec $\varepsilon_{m,\mathbf{k}}$ les valeurs propres associées aux vecteurs $|n, \mathbf{k}\rangle$ et $v_{x,y}^{nm}$ les éléments de matrice de l'opérateur vitesse pris entre les états $|n, \mathbf{k}\rangle$ et $|m, \mathbf{k}\rangle$. L'expression (A.20) se simplifie en décomposant la fraction sous la forme

$$\sigma_{xy}(i\omega) = \frac{e^2}{\beta i\omega} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \sum_{n \neq m} \sum_{ip} v_x^{nm} v_y^{mn} \frac{1}{\varepsilon_{n,\mathbf{k}} - \varepsilon_{m,\mathbf{k}} + i\omega} (G_m^0(ip) - G_n^0(ip + i\omega)). \quad (\text{A.21})$$

En utilisant

$$\frac{1}{\beta} \sum_{ip} G_m^0(ip) = f(\varepsilon_m),$$

nous obtenons le résultat final suivant

$$\sigma_{xy}(i\omega) = \frac{e^2}{i\omega} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \sum_{n \neq m} v_x^{nm} v_y^{mn} \frac{1}{\varepsilon_{n,\mathbf{k}} - \varepsilon_{m,\mathbf{k}} + i\omega} (f(\varepsilon_{m,\mathbf{k}}) - f(\varepsilon_{n,\mathbf{k}})). \quad (\text{A.22})$$

D'après les relations de Onsager, nous avons $\sigma_{xy} = \frac{1}{2}(\sigma_{xy} - \sigma_{yx})$. En utilisant l'éq. (A.22) combinée à un changement d'indices dans σ_{yx} , nous obtenons le résultat suivant

$$\sigma_{xy}(i\omega) = e^2 \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \sum_n \sum_{n \neq m} \frac{v_x^{nm} v_y^{mn}}{(\varepsilon_{n,\mathbf{k}} - \varepsilon_{m,\mathbf{k}})^2 + (i\omega)^2} (f(\varepsilon_{n,\mathbf{k}}) - f(\varepsilon_{m,\mathbf{k}})), \quad (\text{A.23})$$

qui peut s'écrire plus simplement

$$\sigma_{xy}(i\omega) = e^2 \int \frac{d^2\mathbf{k}}{4\pi^2} \sum_n f(\varepsilon_n) \sum_{m \neq n} \frac{v_x^{nm} v_y^{mn} - v_y^{nm} v_x^{mn}}{(\varepsilon_{n,\mathbf{k}} - \varepsilon_{m,\mathbf{k}})^2 + (i\omega)^2}. \quad (\text{A.24})$$

Il suffit de remplacer $i\omega$ par $\omega + i\delta$ dans l'éq. (A.24) et prendre la limite $\omega \rightarrow 0$ pour obtenir l'expression recherchée (eq. (3.40)).

Annexe B

Calcul du flux du champ topologique à travers une maille élémentaire

Dans cet appendice, nous proposons une méthode permettant de calculer le flux du champ topologique traversant une maille élémentaire. Nous avons vu dans le chapitre 4 que l'application d'une distribution de champ magnétique sur un gaz d'électrons bidimensionnel, induit un champ topologique b_t dépendant uniquement de la direction du champ magnétique.

$$b_t(\mathbf{r}) = \frac{\phi_0}{4\pi} \varepsilon_{ijk} n_i \partial_x n_j \partial_y n_k \quad (\text{B.1})$$

où n_i avec $i = x, y, z$ sont les composantes du vecteur unitaire donnant la direction du champ magnétique et ε_{ijk} le tenseur antisymétrique¹.

Le flux de b_t à travers une surface quelconque S est donné par

$$\phi_t = \oint_S b_t d\mathbf{S}. \quad (\text{B.2})$$

En utilisant l'eq (B.2) et l'eq (B.1) et après passage des coordonnées cartésiennes aux coordonnées sphériques pour le vecteur unitaire \mathbf{n} , nous trouvons que

$$\phi_t = \frac{\phi_0}{4\pi} \oint_S \sin \theta d\theta d\phi = \frac{\phi_0}{4\pi} \Omega(\mathcal{C}), \quad (\text{B.3})$$

où (ϕ, θ) sont les coordonnées sphériques du vecteur \mathbf{n} et $\Omega(\mathcal{C})$ l'angle solide délimité par le contour \mathcal{C} sur lequel s'appuie S . Dis plus simplement, le changement de coordonnées permet de passer d'une région S du plan (\mathbb{R}^2) à une région que l'on note aussi S qui s'étend sur la sphère unité \mathcal{S}^2 .

Pour calculer le flux ϕ_t traversant une maille élémentaire, nous utilisons les symétries du réseau triangulaire afin de déterminer la plus petite région à partir de laquelle nous pouvons obtenir la maille élémentaire en appliquant les symétries du réseau. Cette région représentée sur la figure (B.1-b) est délimitée par les points A, B et C et forme un triangle dont la surface représente un douzième de la surface totale de S .

La deuxième étape consiste à calculer les coordonnées sphériques du vecteur unitaire $n\mathbf{r}$ le long du contour ABC orienté dans le sens trigonométrique, puis déterminer les lignes où la composante $B_z(\mathbf{r})$ du champ magnétique s'annule ($\theta = \pi/2$). Il suffit après de calculer l'angle solide délimité

¹Nous utilisons la convention de sommation implicite sur les indices répétés deux fois.

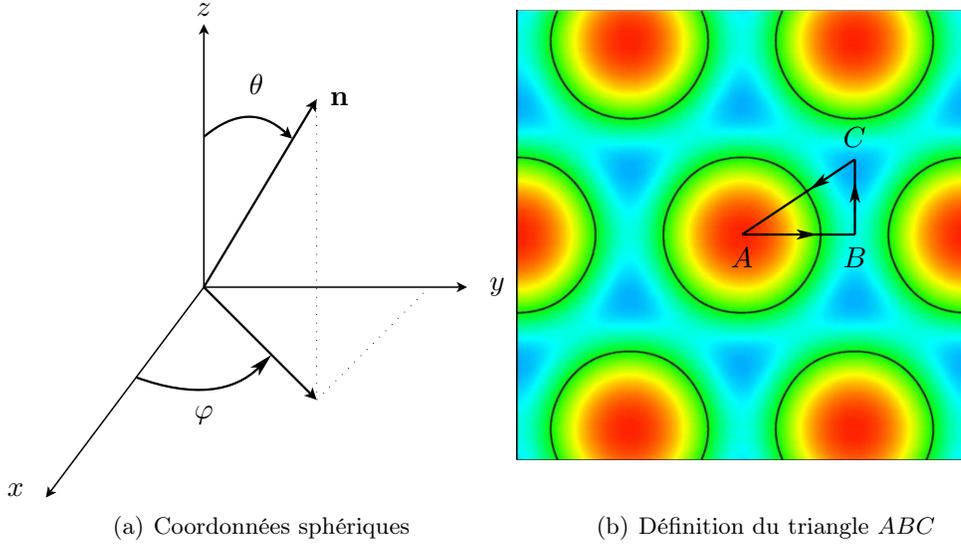


FIG. B.1: (a) Définition des coordonnées sphériques aux coordonnées cartésiennes. (b) Définition de la plus petite région ABC à partir de laquelle il est possible d'obtenir la maille élémentaire en appliquant les symétries du réseau.

par le contour ABC sur \mathcal{S}^2 . Le calcul des composantes sphériques du vecteur \mathbf{n} le long de chaque segment $[A, B]$, $[B, C]$ et $[C, A]$ montre que le vecteur \mathbf{n} se déplace le long de trois méridiens situés en $\varphi = \pi$ (segment $[A, B]$) $\varphi = -\pi/2$ (segment $[B, C]$) et $\varphi = -5\pi/6$ (segment $[C, A]$). Le trajet correspondant à chaque segment est représenté sur les figures (B.2,B.3,B.4) pour le segment $[A, B]$, $[B, C]$ et $[C, A]$ respectivement (la figure B.4 montre aussi l'angle solide $\Omega(ABC)$)

- Commençons la construction de l'angle solide en traçant le parcours ABC sur \mathcal{S}^2 . Le calcul des coordonnées sphériques du vecteur (fig B.2-c) le long du segment $[A, B]$ montre que le vecteur $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ balaie complètement le méridien situé en $\phi = \pi$ (l'angle θ varie de 0 à π) en partant du point A situé au pôle Nord jusqu'au point B qui est au pôle Sud.
- Le chemin équivalent au segment $[B, C]$ est représenté sur la figure B.3. Comme le montre la figure (B.3-c), ce chemin ne contribue pas au contour délimitant l'angle solide $\Omega(ABC)$ car le vecteur se déplace le long du méridien situé en $\phi = -\pi/2$ et les points B et C sont tous les deux confondus avec le pôle sud.
- La construction du dernier segment $[C, A]$ suit le même principe. Le vecteur se déplace le long du méridien en $\phi = -5\pi/6$ en partant du pôle sud (point C) jusqu'au pôle Nord (point A). L'angle solide délimité par le contour ABC (c'est la plus petite surface délimitée par le contour rouge sur la fig B.4-a, qui est grisée sur la figure centrale) est compris entre le méridien en $\phi = \pi$ et le méridien situé en $\phi = -5\pi/6$. On en déduit facilement que $\Omega(ABC) = \pi/3$. Le flux du champ topologique b_t traversant ABC est donc égal à $+\phi_0/12$ car le parcours ABC représenté sur la sphère \mathcal{S}^2 tourne dans le même sens que le parcours ABC dans l'espace de départ.

Le flux total traversant une maille élémentaire se déduit facilement en tenant compte des symétries du réseau. Nous trouvons finalement $\phi_t = \phi_0$.

Il faut noter ici que les détails sur la forme des lignes de champ $B_z = 0$ n'intervient pas dans

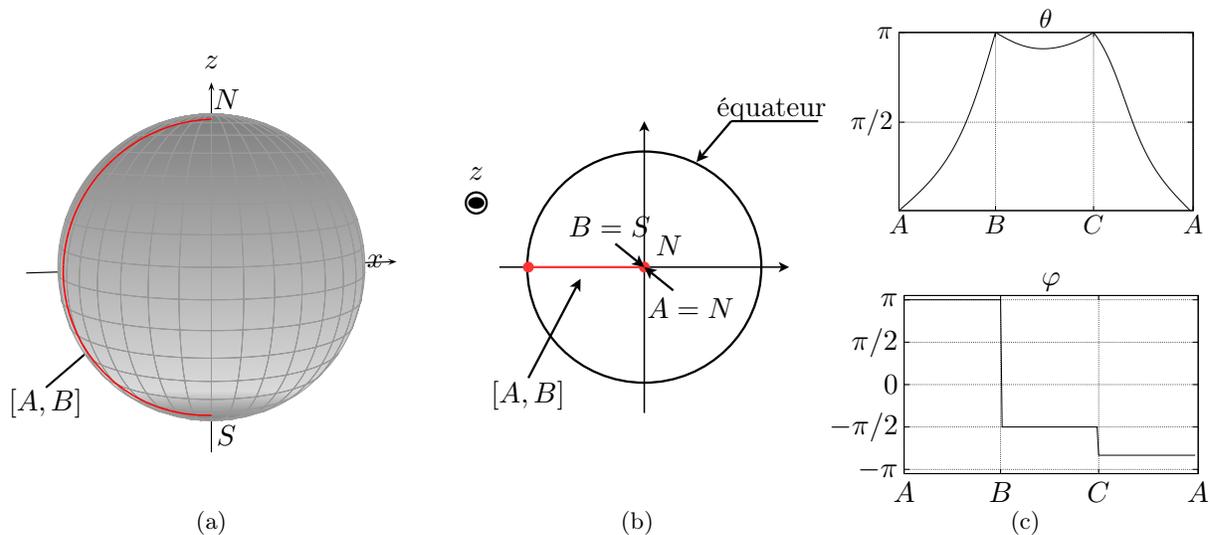


FIG. B.2: *Figure de gauche : Trajet le long du segment $[A, B]$ représenté sur S^2 . figure centrale : vue équatoriale du trajet $[A, B]$ (ligne rouge). Figure de droite : composantes sphériques du vecteur \mathbf{n} . Lors d'un déplacement sur le segment $[A, B]$, la direction du vecteur unitaire \mathbf{n} suit le méridien $\phi = \pi$ en partant du pôle Nord (Point N sur la figure de droite) jusqu'au pôle Sud (point S sur la figure de droite) en coupant l'équateur.*

la construction de l'angle solide $\Omega(ABC)$.

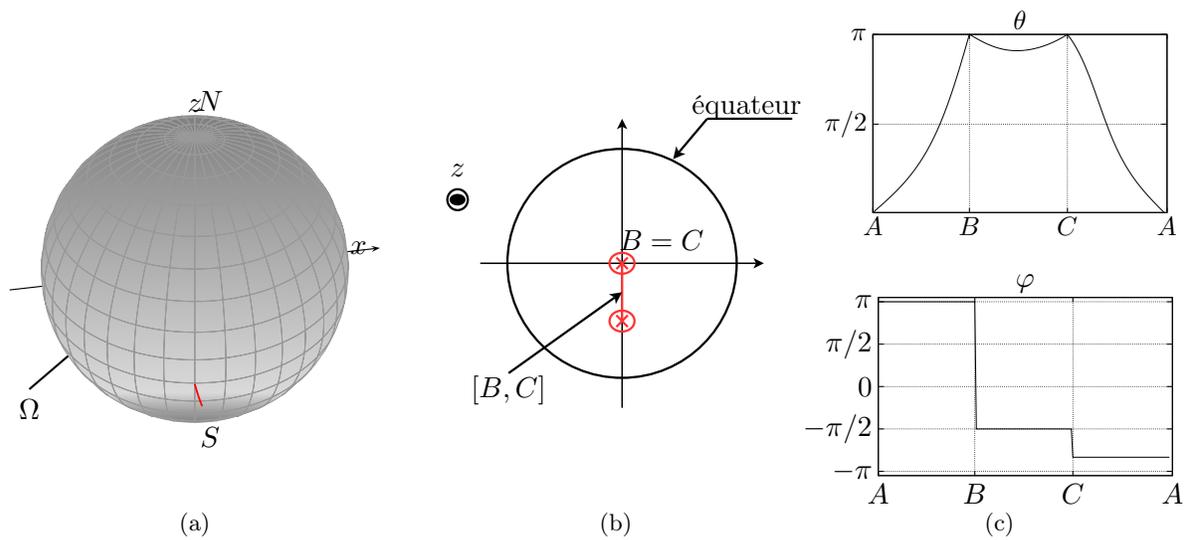


FIG. B.3: *Figure de gauche : Trajet le long du segment $[B, C]$ représenté sur \mathcal{S}^2 . figure centrale : vue équatoriale du trajet $[B, C]$ (ligne rouge). figure de droite : composantes sphériques du vecteur \mathbf{n} . Le vecteur unitaire $n\mathbf{r}$ suit le méridien ($\phi = -\pi/2$), mais ne coupe l'équateur $\theta > \pi/2$ sur tout le parcours et revient au pôle Sud. Ce parcours ne contribue pas à l'angle solide délimité par le contour ABC car les points B et C sont confondus.*

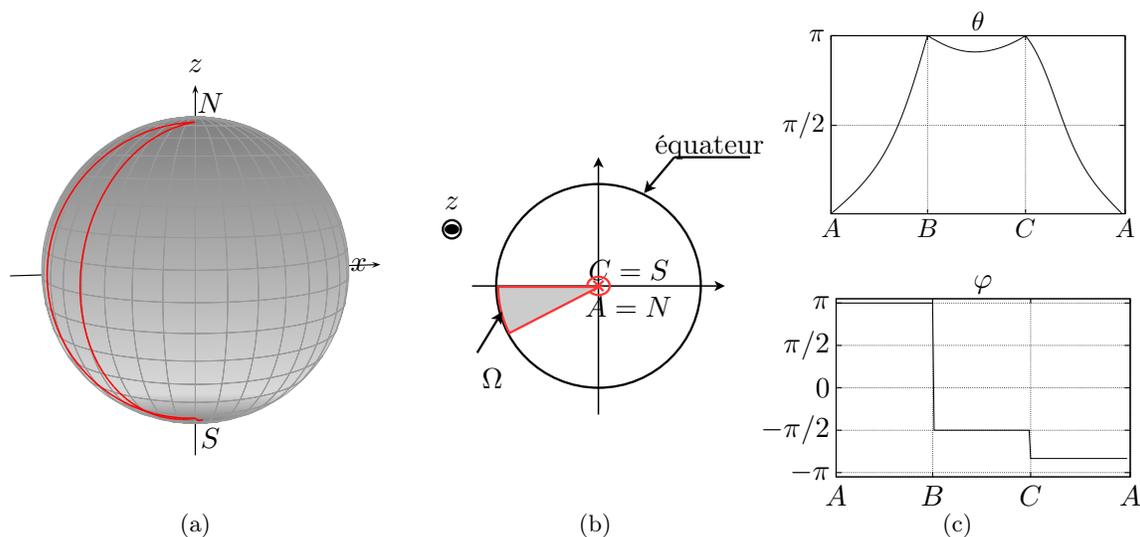


FIG. B.4: *Figure de gauche : Angle solide délimité par le contour ABC (l'angle solide est délimité par la petite région bornée par les lignes rouges). Figure du milieu : vue équatoriale de l'angle solide Ω . L'angle solide est délimité par le contour rouge sur cette figure. Figure de droite : Coordonnées sphériques. Le trajet le long du segment $[C, A]$ suit le méridien $\varphi = -5\pi/6$ et coupe l'équateur (θ passe par $\pi/2$). L'angle solide, délimité par le contour ABC, est égal à $\Omega = \pi/3$*

Annexe C

Transformation de jauge

C.1 Première méthode

Le but de cet appendix est de démontrer que la transformation de jauge utilisée dans le chapitre 4 peut s'écrire sous la forme d'une rotation. En fait, nous effectuons la démarche inverse, c.-à-d., nous partons de l'expression générale d'une rotation d'un spin 1/2 et nous montrons, moyennant quelques contraintes sur l'axe de la rotation que l'expression de la transformation unitaire utilisée au chapitre 4 est bien une rotation.

L'expression générale de la rotation d'un spin 1/2 autour d'un axe indiqué par un vecteur unitaire \mathbf{u} et d'angle θ , a la forme suivante :

$$\mathcal{T} = e^{\frac{i}{2}\theta\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos\frac{\theta}{2} + i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{u})\sin\frac{\theta}{2}. \quad (\text{C.1})$$

Afin d'obtenir l'expression voulue, nous imposons la condition suivante à la transformation \mathcal{T} :

$$\mathcal{T} [\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}] \mathcal{T} = \sigma_z. \quad (\text{C.2})$$

En remplaçant l'éq. (C.1) dans l'éq. (C.2), nous obtenons

$$\mathcal{T}^\dagger [\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}] \mathcal{T} = (\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\cos\theta - \epsilon^{ijk}n_iu_j\sigma_k\sin\theta = \sigma_z, \quad (\text{C.3})$$

où ϵ^{ijk} est le tenseur antisymétrique¹. n_α et u_β sont les coordonnées cartésiennes des vecteurs \mathbf{n} et \mathbf{u} . La condition d'orientation de l'axe de quantification le long du vecteur \mathbf{n} impose une condition sur l'axe de la rotation \mathbf{u} qui est $\mathbf{u}\cdot\mathbf{n} = 0$. Après combinaison de l'éq. (C.2) et de la condition $u_z = 0$ sur le vecteur \mathbf{u} , nous obtenons un système de trois équations à trois inconnues

$$\begin{cases} n_x \cos\theta - n_z u_y \sin\theta = 0 \\ n_y \cos\theta - n_z u_x \sin\theta = 0 \\ n_z \cos\theta - (n_x u_y - n_y u_x) \sin\theta = 1 \end{cases}, \quad (\text{C.4})$$

reliant les coordonnées du vecteur \mathbf{u} aux coordonnées du vecteur \mathbf{n} . Les solutions de ce système sont données par

$$\begin{cases} u_x = \frac{n_y}{n_z} \coth\theta \\ u_y = -\frac{n_x}{n_z} \coth\theta \\ \cos\theta = n_z \end{cases}. \quad (\text{C.5})$$

¹Sommation implicite sur les indices répétés deux fois

L'expression finale de \mathcal{T} se calcule aisement en remplaçant les expressions des différentes composantes du vecteur u et de l'angle θ dans l'expression (C.1). Après remplacement, nous obtenons finalement

$$\mathcal{T} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 + n_z(\mathbf{r})} + i \frac{n_y(\mathbf{r}) \sigma_x - n_x(\mathbf{r}) \sigma_y}{\sqrt{1 + n_z(\mathbf{r})}} \right). \quad (\text{C.6})$$

C.2 Deuxième méthode

Il est possible de calculer directement $\mathcal{T}(\mathbf{r})$ en diagonalisant le deuxième terme de l'éq (4.1) qui s'écrit

$$\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} = M \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}, \quad (\text{C.7})$$

où n_x, n_y et n_z sont les coordonnées du vecteur unitaire $\mathbf{n} = \mathbf{M}/M$ et M est le module de l'aimantation. La dépendance spatiale est sous-entendue. Les valeurs propres sont égales à $\pm M$ et les vecteurs propres sont donnés par

$$v_- = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+n_z}} \begin{pmatrix} n_x - in_y \\ -(1+n_z) \end{pmatrix} \text{ et } v_+ = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+n_z}} \begin{pmatrix} 1+n_z \\ n_x + in_y \end{pmatrix}. \quad (\text{C.8})$$

En posant

$$\mathcal{T} = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+n_z}} \begin{pmatrix} 1+n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -(1+n_z) \end{pmatrix}, \quad (\text{C.9})$$

nous trouvons que cette expression est identique à l'expression (C.6).

Il faut noter que les deux transformations décrites dans cet appendice sont applicables à un système continu. La première méthode ne peut pas être appliquée sur un modèle tel que le modèle développé dans le chap. 5, car il n'est pas possible de définir un potentiel de jauge $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ en chaque point du réseau.

Bibliographie

- [1] S. J. Bending and K. von Klitzing and K. Ploog. Two-dimensional electron gas as a flux detector for a type-II superconducting film. Phys. Rev. B , 42(16) :9859, 1 December 1990.
- [2] A. A. Abrikosov and L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski. Method of quantum field theory in statistical Physics. Dover, 1963.
- [3] A. Bohm and A. Mostafazadeh and H. Koizumi and Q. niu and J. Zwanziger. The Geometric Phase In quantum systems. Springer, 2003. ISSN 0172-5998.
- [4] A. Crépieux and P. Bruno. Theory of the anomalous Hall effect from the Kubo formula and the Dirac equation. Phys. Rev. B , 64 :14416, 2001.
- [5] A. Mielke. Ferromagnetic ground states for the Hubbard model on line graphs. J. Phys. A, 24 :L73, 1991.
- [6] A. Trellakis. Nonperturbative Solution for Bloch Electrons in Constant Magnetic Fields. Phys. Rev. Lett. , 91(3) :56405, 2003.
- [7] A. Y. Rom and S. Fishman and R. Kosloff and T. Maniv. Dynamics of a charged particle in a magnetic-flux lattice. Phys. Rev. B , 54(14) :9819, 1996.
- [8] Ali Mostafazadeh. Quantum adiabatic approximation and the geometric phase. Phys. Rev. A , 55(3) :1653, 1997.
- [9] B. Diu and C. Guthmann and D. Lederer and B. Roulet. Physique Statistique. Hermann, 1989.
- [10] B. I. Halperin. Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. Phys. Rev. B , 25(4) :2185, 1982.
- [11] Barry Simon. Holonomy, The Quantum Adiabatic Theorem and Berry's Phase. Phys. Rev. Lett. , 51(24) :2167, 1983.
- [12] C. Albrecht and J. H. Smet and D. Weiss and K. Von Klitzing and R. Hennig and M. Langenbuch and M. Suhrke and U. Ressler and V. Umansky and H. Schweizer. Fermiology of Two Dimensional Lateral Superlattices. Phys. Rev. Lett. , 83(11) :2234, 13 September 1999.
- [13] C. L. Foden and M. L. Leadbeater and M. Pepper. Quantum magnetic confinement and transport in spherical two-dimensional electron gases. Phys. Rev. B , 52 :R8646, 1995.
- [14] C. W. J. Beenakker. Guiding-Center-Drift Resonance on a Periodically Modulated Two-Dimensional Electron Gas. Phys. Rev. Lett. , 62(17) :2020, 24 Avril 1989.
- [15] Claude Cohen-Tannoudji and Bernard Diu and Franck laloë. Mécanique Quantique, volume I et II. Hermann, 1973. ISBN : 2 7056 6121 2.

- [16] D. J. Thouless. Quantization of particle transport. Phys. Rev. B, 27(10) :6083, 1983.
- [17] D. J. Thouless and M. Kohmoto and M. P. Nightingale and M. den Nijs. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential. Phys. Rev. Lett., 49(6) :2375, 1982.
- [18] Deng Ping Xue and Gang Xiao. magnetostransport properties of two-dimensional electrons gas under a periodic magnetic field. Phys. Rev. B, 45(11) :5986, 1992.
- [19] Dimitric Culcer and Allan MacDonald and Qian Niu. Anomalous Hall effect in paramagnetic two-dimensional systems. Phys. Rev. B, 68 :45237, 2003.
- [20] E. Durand. Electrostatique. 1968.
- [21] E. Hofstetter and J. M. C. Taylor and A. MacKinnon. Two-dimensional electron gas in a linearly varying magnetic field : Quantization of the electron and current density. Phys. Rev. B, 53 :8, 1996.
- [22] Éric Akkermans and Gilles Montambaux. Physique mésoscopique des électrons et des photons. EDP Sciences, 2004.
- [23] F. D. M. Haldane. Model for a Quantum Hall effect without Landau Levels : Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly". Phys. Rev. Lett., 61(18) :2015, 1988.
- [24] F. D. M Haldane. Berry Curvature on the Fermi Surface : Anomalous Hall Effect as a Topological Fermi-Liquid Property. Phys. Rev. Lett., 93(20) :206602, 2004.
- [25] F. M. Peeters and A. Matulis. Quantum structures created by nonhomogeneous magnetic fields. Phys. Rev. B, 48(20) :15166, 1993.
- [26] F. M. Peeters and P. Vasilopoulos. Quantum Transport of a Two-dimensional electron gas in a spatially modulated magnetic field. Phys. Rev. B, 47(3) :1466, 1993.
- [27] Frank Wilczek and A. Zee. Appearance of Gauge Structure in Simple Dynamical Systems. Phys. Rev. Lett., 52(24) :2111, 1984.
- [28] Ganesh Sundaram and Qian Niu. Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals : Gradient corrections and Berry-phase effects. Phys. Rev. B, 59(23) :14915, 1999.
- [29] Gen Tatara and Hikaru Kawamura. Chirality-Driven Anomalous Hall Effect in Weak Coupling Regime. J. Phys. Soc. Jpn, 71(11) :2613, 2002.
- [30] Gerald D. Mahan. Many-particle physics. Plenum Press, 1981.
- [31] Gi-Yeong Oh. Effects of field modulation on the Hofstadter spectrum. Phys. Rev. B, 60(3) :1939, 1999.
- [32] H. A. Carmona and A. K. Geim and A. Nogaret and P. C. Main and T. J. Foster and M. Henini and S. P. Beaumont and M. G. Blamire. Two Dimensional Electrons in a lateral magnetic Superlattice. Phys. Rev. Lett., 74(15) :3009, 10 April 1995.
- [33] Hikaru Kawamura. Anomalous Hall effect as a probe of the Chiral Order in Spin Glasses. Phys. Rev. Lett., 90(4) :47202, 2003. Chiral Order, spin glasses and Anomalous Hall effect.
- [34] I. Kézsmárki and Onoda and Y. Taguchi and T. Ogasawara and M. Matsubara and Iguchi and N. Hanasaki and N. Nagaosa and Y. Tokura. Magneto-optical effect induced by spin chirality of the itinerant ferromagnet $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$. Phys. Rev. B, 72 :094427, 2005.
- [35] I. S. Ibrahim and F. M. Peeters. Two-dimensional electrons in lateral magnetic superlattices. Phys. Rev. B, 52(24) :17321, 1995.

- [36] J. E. Avron and R. Seiler and B. Simon. Homotopy and quantization in Condensed Matter Physics. Phys. Rev. Lett., 51(1) :51, 4 july 1983 1983.
- [37] J. E. Müller. Effect of a Nonuniform Magnetic Field on a Two-dimensional Electron gas in the Ballistic Regime. Phys. Rev. Lett., 68(3) :385, 1992.
- [38] J. M. Luttinger. Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors : General Theory. Phys. Rev., 102(4) :1030, 1956.
- [39] J. M. Luttinger. Theory of the Hall Effect in Ferromagnetic Substances. Phys. Rev., 112(3) :739, 1 November 1958.
- [40] J. Smit. physica (Amsterdam), 21 :877, 1954.
- [41] J. Smit. physica (Amsterdam), 23(39), 1958.
- [42] J. Yoshida and T. Ohtsuki and Y. Ono. Transport in Two dimensional Periodic Magnetic Field. J. Phys. Soc. Jpn., 67(11) :3886, 1998.
- [43] J. Zak. Magnetic Translation Group I. Phys. Rev., 134(6A) :A1602, 1964.
- [44] J. Zak. Magnetic Translation Group II. Irreducible Representations. Phys. Rev., 134(6A) :A1607, 1964.
- [45] Jairo Sinova and T. Jungwirth and X. Liu and J. K. Furdyna and W. A. Atkinson and A. H. MacDonald. Magnetization relaxation in (Ga,Mn)As ferromagnetic semiconductors. Phys. Rev. B, 69 :85209, 2004.
- [46] Jairo Sinova and T. Jungwirth and J. Kucera and A. H. MacDonald. Infrared magneto-optical properties in (III,Mn)V ferromagnetic semiconductors. Phys. Rev. B, 67 :235203, 2003.
- [47] Jairo Sinova and T. Jungwirth and John Cerne. magneto-transport and magneto-optical properties of ferromagnetic (III,Mn)V semiconductors : a review. Int. J. Mod. Phys. B, 18(8) :1083, 2004.
- [48] Jinwu Ye and Yong Baek Kim and A. J. Willis and B. I. Shraiman and P. Majumdar and Z. Tesanovic. Berry Phase Theory of the Anomalous Hall Effect : Application to Colossal magnetoresistance Magnetites. Phys. Rev. Lett., 83(18) :3737, 1999.
- [49] K. Nielsch and R. B. Wehrpohn and J. Bathel and J. Kirschner and U. Gösele and S. F. Fischer and H. Kronmüller. Hexagonally ordered 100 nm period nickel nanowire arrays. Appl. Phys. Lett., 79(9) :1360, 2001.
- [50] K. Ohgushi and S. Murakami and N. Nagaosa. Spin anisotropy and quantum Hall Effect in the kagomé lattice : Chiral spin state based on a ferromagnet. Phys. Rev. B, 62 :R6065, 2000.
- [51] L. Berger. Hall Effect of a Compensated Magnetic metal Proportional to MB^2 in the High-Field Limit. Phys. Rev., 177(2) :790, 1969.
- [52] L. Berger. Side-jump Mechanism for Hall Effect in Ferromagnets. Phys. Rev. B, 2(11) :4559, 1 December 1970.
- [53] L. Berger. Application of the Side-Jump Model to the Hall Effect and Nernst Effect in Ferromagnets. Phys. Rev. B, 5(5) :1862, 1 March 1972.
- [54] M. C. Chang and Q. Niu. Electron Band structure in a two-dimensional periodic magnetic field. Phys. Rev. B, 50(15) :10843, 1994.
- [55] M. Elhajal and B. Canals and C. Lacroix. Symmetry Breaking due to Dzyaloshinsky-Moriya interactions in the kagome lattice. Phys. Rev. B, 66 :14422, 2002.

- [56] M. V. Berry. Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. Proc. R. Soc., 392(1802) :45, 1984.
- [57] M. V. Berry. quantum Phase Corrections From Adiabatic Iteration. Proc. R. Soc., 414(1846) :31, 1988.
- [58] M. V. Berry. The Geometric Phase. Scientific American, page 46, December 1988.
- [59] Masaki Oshikawa. Quantized Hall conductivity of Bloch electrons : Topology and the Dirac fermion. Phys. Rev. B , 50(23) :17357, 1994.
- [60] Masaru Onoda and Naoto Nagaosa. Topological Nature of Anomalous Hall Effect in Ferromagnets. J. Phys. Soc. Japan, 71 :19, 1 January 2002.
- [61] Masaru Onoda and Naoto Nagaosa. Quantized Anomalous Hall Effect in Two-dimensional Ferromagnets : Quantum Hall Effect in Metals. Phys. Rev. Lett. , 90(20) :206601, 2003.
- [62] Masaru Onoda and Shuichi Murakami and Naoto Nagaosa. Hall Effect of Light. Phys. Rev. Lett. , 93(8) :083901, 2003.
- [63] Mikael Tinkham. Introduction to Superconductivity. Krieger publishing Company, 1980.
- [64] Ming-Che Chang and Min-Fong Yang. Multiband energy spectra of spin- $\frac{1}{2}$ electrons with two-dimensional magnetic field modulations. Phys. Rev. B , 57(20) :13002, 1998.
- [65] Ming-Che Chang and Qian Niu. Berry phase, hyperorbits, and the Hofstadter spectrum : Semiclassical dynamics in magnetic Bloch bands. Phys. Rev. B , 53(11) :7010, 1996.
- [66] N. A. Sinitsyn and Qian Niu and Jairo Sinova and Kentaro Nomura. Disorder effects in the anomalous Hall effect induced by Berry curvature. Phys. Rev. B , 72 :045346, 2005.
- [67] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. Physique des solides. EDP Sciences, 2002. Traduction Française.
- [68] P. Bruno and V. Dugaev and M. Taillefumier. Topological Hall effect in magnetic nanostructures. Phys. Rev. Lett. , 93(9) :96806, 27 August 2004.
- [69] P. D. Ye and D. Weiss and R. R. Gerhardtts and M. Seeger and K. von Klitzing and K. Ebert and H. Nickel. Electrons in a Periodic Magnetic Field Induced by a Regular Array of Micromagnets. Phys. Rev. Lett. , 74(15) :3013, 1995.
- [70] P. Pureur and F. W. Fabris and J. Schaf and I. A. Campbell. Chiral susceptibility in canonical spin glass and re-entrant alloys from Hall effect measurements. Europhys. Lett. , 67 :123, 2004.
- [71] P. Středa. Theory of quantized Hall Conductivity in two dimensions. J. Phys. C, 15 :L717, 1982.
- [72] P. Středa and A. H. MacDonald. Magnetic Breakdown and magnetoresistance oscillations in a periodically modulated two-dimensional electron gas. Phys. Rev. B , 41(17) :11892, 1990.
- [73] P. Vasilopoulos and F. M. Peeters. Quantum magnetotransport of a periodically modulated Two-Dimensional electron gas. Phys. Rev. Lett. , 63(19) :2120, 1989.
- [74] Pascal Viot. Méthodes d'analyse numérique Cours du DEA "Modélisation Dynamique et Statistique des Systèmes Complexes", 2003. <http://www.lptl.jussieu.fr/users/viot/>.
- [75] Qian Niu and D. J. Thouless and Yong-Shi Wu. Quantized Hall conductance as a topological invariant. Phys. Rev. B , 31(6) :3372, 1985.
- [76] R. Karplus and J.M. Luttinger. Hall Effect in Ferromagnetics. Phys. Rev., 95(5) :1154, 1954.

- [77] R. R. Gerhardtts and D. Weiss and K. v. Klitzing. Novel Magnetoresistance Oscillations in a periodically Modulated Two-Dimensional Electron Gas. Phys. Rev. Lett., 62(10) :1173, 1989.
- [78] R. W. Winkler and J. P. Kotthaus and K. Ploog. Landau-Band Conductivity in a Two-Dimensional Electron System modulated One-Dimensional Potential. Phys. Rev. Lett., 62(10) :1177, 1989.
- [79] J. Rammer. Quantum transport theory. Perseus Books, 1998.
- [80] Roland Winkler. Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electrons and Hole Systems. Springer, 2003.
- [81] Ryogo Kubo. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. J. Phys. Soc. Jpn., 12(6) :570, 1957.
- [82] S. Iguchi and D. Hashimoto and Y. Taguchi and Y. Tokura. Chemical control of spin chirality in $(\text{Nd}_{1-x}\text{Dy}_x)_2\text{Mo}_2\text{O}_7$. Phys. Rev. B, 69 :220401(R), 2004.
- [83] S. Iikubo and S. Yoshii and T. Kageyama and K. Oda and Y. Kondo and K. Murata and M. Sato. Magnetic and transport properties of pyrochlore Molybdates. J. Phys. Soc. Jpn., 70(1) :212, 2001.
- [84] S. Izawa and S. Katsumoto and A. Endo. magnetoresistance Oscillation in two dimensional electron gas under spatially modulated vector potential. J. Phys. Soc. Jpn., 64(3) :706, 1995.
- [85] S. J. Bending and K. von Klitzing and K. Ploog. Weak localization in a distribution of magnetic flux tubes. Phys. Rev. Lett., 65(8) :1060, 20 August 1990.
- [86] S. K. Lyo and T. Holstein. Side-Jump Mechanism for Ferromagnetic Hall Effect. Phys. Rev. Lett., 29(7) :423, 1972.
- [87] S. Y. Liu and X. L. Lei. Kinetic-equation approach to the anomalous Hall effect in a diffusive Rashba two-dimensional electron system with magnetization. Phys. Rev. B, 72 :195329, 2005.
- [88] S. Yoshii and S. Iikubo and T. Kageyama and K. Oda and Y. Kondo and K. Murata and M. Sato. Anomalous Hall Effect of pyrochlore Molybdate $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$. J. Phys. Soc. Jpn., 69(12) :3777, 2000.
- [89] Shigeki Onoda and Naoto Nagaosa. Spin Chirality Fluctuations and Anomalous Hall Effect in Itinerant Ferromagnets. Phys. Rev. Lett., 90(19) :196602, 2003.
- [90] T. Jungwirth and Jairo Sinova and K. Y. Wang and K. W. Edmonds and R. R. P. Campion and B. L. Gallagher and C. T. Foxon and Qian Niu and A. H. MacDonald. Dc-Transport properties of ferromagnetic (Ga,Mn)As semiconductors. Appl. Phys. Lett., 83(2) :320, 2003.
- [91] V. K. Dugaev and A. Crépieux and P. Bruno. Localization corrections to the anomalous Hall effect in a ferromagnet. Phys. Rev. B, 64 :194401, 2001.
- [92] V. K. Dugaev and P. Bruno and M. Taillefer and B. Canals and C. Lacroix. Anomalous Hall effect in a two-dimensional electron gas with spin-orbit interaction. Phys. Rev. B, 71 :224423, 2005.
- [93] W. Kohn and M. J. Luttinger. Quantum Theory of Electrical Transport. Phys. Rev., 108(3) :590, 1957.
- [94] X. G. Wen and F. Wilczek and A. Zee. Chiral spin states and superconductivity. Phys. Rev. B, 39(16) :11413, 1989.

- [95] Y. Aharonov and A. Stern. Origin of the geometric forces accompanying Berry's geometric potentials. Phys. Rev. Lett., 69(25) :3593, 21 December 1992.
- [96] Y. Aharonov and D. Bohm. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. Phys. Rev., 115(3) :485, 1959.
- [97] Y. Aharonov and J. Anandan. Phase Change during a Cyclic Quantum Evolution. Phys. Rev. Lett., 58(16) :1593, 1987.
- [98] Y. Taguchi and T. Sasaki and S. Awaji and Y. Iwasa and T. Tayama and T. Sakakibara and S. Iguchi and T. Ito and Y. Tokura. Magnetic Field Induced Sign Reversal of the Anomalous Hall Effect in a Pyrochlore Ferromagnet $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$: Evidence for a Spin Chirality Mechanism. Phys. Rev. Lett., 90 :257202, 2003.
- [99] Y. Taguchi and Y. Oohara and H. Yoshizawa and N. Nagaosa and Y. Tokura. Spin chirality, Berry Phase, and Anomalous Hall effect in a Frustrated ferromagnet. Science, 291 :2573, 2001.
- [100] Y. Taguchi and Y. Tokura. Enhancement of anomalous Hall effect in a filling-changed pyrochlore-type molybdate. Europhys. Lett., 2001.
- [101] Yasuhiro Hatsugai. Chern Number and Edge States in the Integer Quantum Hall Effect. Phys. Rev. Lett., 71(22) :3697, 1993.
- [102] Yukio Yasui and Satoshi Iikubo and Hiroshi Harashina and Taketomo Kageyama and Masafumi Ito and Masatoshi Sato and Kazuhisa Kakurai. Neutron Scattering Studies of Pyrochlore Compound $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ in Magnetic Field. J. Phys. Soc. Jpn, 72(4) :865, 2003.
- [103] Yukio Yasui and Yasuyuki Kondo and Masaki Kanada and Masafumi Ito and Hiroshi Harashina and Masatoshi Sato and Kazuhisa Kakurai. Magnetic Structure of $\text{Nd}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$. J. Phys. Soc. Jpn, 70(1) :284, 2001.