



HAL
open science

ÉTATS DE BORD ET CÔNES DE DIRAC DANS DES CRISTAUX BIDIMENSIONNELS

Pierre André Louis Delplace

► **To cite this version:**

Pierre André Louis Delplace. ÉTATS DE BORD ET CÔNES DE DIRAC DANS DES CRISTAUX BIDIMENSIONNELS. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paris Sud - Paris XI, 2010. Français. NNT: . tel-00607781

HAL Id: tel-00607781

<https://theses.hal.science/tel-00607781v1>

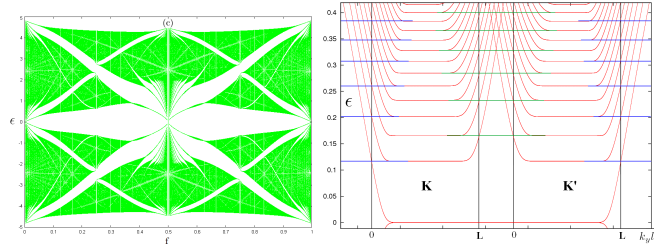
Submitted on 11 Jul 2011

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.

THÈSE DE DOCTORAT

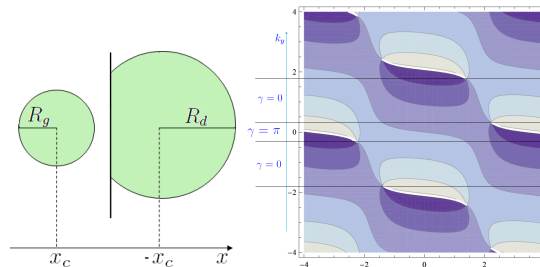
Pour obtenir le grade de
Docteur ès sciences de l'Université Paris-Sud 11



ÉTATS DE BORD ET CÔNES DE DIRAC DANS DES CRISTAUX BIDIMENSIONNELS

par

Pierre Delplace



Soutenue le 22 Octobre 2010 devant le jury composé de :

| | |
|-------------------|--------------|
| Christian Glattli | Président |
| Yshai Avishai | Rapporteur |
| Stephan Roche | Rapporteur |
| Denis Ullmo | Examineur |
| Gilles Montambaux | Directeur |
| Christophe Texier | Co-Directeur |

Remerciements

Cette thèse s'est déroulée d'Octobre 2007 à Septembre 2010 au Laboratoire de Physique des Solides d'Orsay. Je tiens tout d'abord à remercier Jean-Paul Pouget, directeur du laboratoire lors de mon arrivée, pour m'y avoir accueilli.

Je remercie chaleureusement Yshai Avishai et Stephan Roche pour avoir spontanément accepté d'être rapporteurs de cette thèse ainsi que pour leurs commentaires pertinents sur ce travail. Je remercie également Denis Ullmo et Christian Glattli qui ont eu la gentillesse d'être respectivement examinateur et président du jury.

Mes remerciements vont ensuite tout naturellement à mon directeur de thèse, Gilles Montambaux. En trouvant le juste équilibre entre le travail d'équipe et la liberté d'initiative, l'exigence et la patience, il a su donner le rythme nécessaire à ces trois années de course de fond. Je le remercie sincèrement de son soutien, de son enseignement et de sa disponibilité. Je lui suis extrêmement reconnaissant pour son encadrement irréprochable tant sur le plan humain que scientifique.

Je remercie chaleureusement Christophe Texier, mon co-directeur de thèse, pour m'avoir épaulé et accompagné avec patience pour toute la partie *décohérence* de la thèse. Si ce travail n'est résumé ici que dans le seul chapitre 7, il nous aura toutefois occupé pendant près de la moitié de la thèse. Je lui suis très reconnaissant pour son enseignement rigoureux et ses conseils, en particulier pour avoir improvisé des cours d'une grande clarté sur des aspects des plus techniques de la physique mésoscopique.

Je voudrai dire combien j'ai aimé travailler dans le groupe Théorie où j'ai trouvé un climat détendu et d'excellence scientifique. J'en remercie tous les membres pour leur accueil chaleureux, leur bonne humeur et leur amitié. Je souhaite en particulier dire toute ma reconnaissance à Jean-Noël Fuchs, Frédéric Piéchon et Mark-Oliver Goerbig pour leur disponibilité inconditionnelle. J'ai beaucoup appris à leurs côtés.

Je remercie également tous les membres du groupe Mésoscopie pour toutes les discussions et échanges depuis le stage qui a précédé cette thèse.

Je remercie les doctorants et post-doctorants du laboratoire avec qui j'ai passé de formidables moments, parfois studieux, parfois moins, autour d'un café, d'une bière, à la bibliothèque ou devant un tableau la craie à la main, à savoir Fabien Corre, Nicolas Bergéard, Claudia Ojeda, Alexei Chepelianskii, Julien Basset, Francesca Chiodi, Raphael De Gail, Edwin Kermarrec, Yannis Laplace, Alvaro Rojo, Laurie Saulnier, Doru Sticlet, Nicolas Charpentier, Raphael Roldan, et Mikhail Polianski dont je souhaite saluer la mémoire. Je remercie tout particulièrement Jean-Yves Chauleau pour nos longues discussions sur le jazz modale, ainsi que François Crépin et Guillaume Boudarham pour tous les bons moments passés ensemble à l'intérieur comme en dehors du laboratoire. Je souhaite leur témoigner à tous ma plus sincère amitié.

Je n'aurai bien sûr pas eu cette trajectoire sans les conditions initiales que m'ont communiqués ma mère et mon père disparu trop tôt. Je souhaite également saluer ici la mémoire de mon grand-père André qui s'est éteint peu de temps avant l'aboutissement de ce travail. Je leur dédie ces années d'efforts.

Je remercie enfin celle qui m'accompagne et me supporte quotidiennement dans tous les sens du terme, celle qui partage désormais mon nom, Laëtitia, pour son amour et son soutien indéfectible. Elle est la constante sur laquelle je me hisse.

Introduction

Hofstadter's Law : It always takes longer than you expect, even when you take into account Hofstadter's Law.

Gödel, Escher, Bach : An Eternal Golden Braid,

Douglas Hofstadter

Avec plus de cinq mille publications entre 2005 et 2009 [1], le graphène, monocouche de graphite, s'est très rapidement imposé comme un système incontournable en physique de la matière condensée [2]. Cet engouement exceptionnel, tant théorique qu'expérimental, a été marqué par l'observation en 2005, d'un effet Hall quantique *anormal*, dans le groupe d'André Geim [3] de l'Université de Manchester ainsi que dans ceux de Philip Kim et Horst Stormer [4] respectivement de l'Université de Princeton et de l'Université de Columbia. Dans le graphène, la quantification inhabituelle de la conductance de Hall, sur laquelle nous reviendrons au chapitre 3, est le résultat combiné de deux ingrédients : la nature bidimensionnelle du graphène d'une part, et l'émergence de fermions de Dirac sans masse qui y portent la charge électrique d'autre part. En effet, à basse énergie, tout se passe dans le graphène comme si les électrons usuels de la physique du solide avaient été remplacés par des particules de même charge mais sans masse, et possédant un degré de liberté interne supplémentaire, à la manière d'un spin. Par conséquent, la relation de dispersion est composée de deux bandes qui se touchent linéairement en deux points distincts (figure 1) : on parle de *cônes de Dirac* [5].

Toutefois, le graphène n'a pas le monopole de cette particularité. Il existe en effet d'autres systèmes en matière condensée qui présentent eux aussi des cônes de Dirac dans leur relation de dispersion, comme certains supraconducteurs à haute température critique [6] ou le **réseau carré** traversé d'un **demi quantum** de **flux** par plaquette que nous désignerons par l'acronyme *RCDQF*. Nous ne parlerons pas des supraconducteurs ici. En revanche, le réseau carré à demi flux sera largement discuté tout au long de cette thèse et nous chercherons à l'étudier en parallèle avec le graphène. La physique du RCDQF a trait originellement à l'étude théorique des électrons de Bloch sur un réseau sous champ magnétique. Pour des flux magnétiques suffisamment grands, des effets de réseau apparaissent dans le spectre d'énergie des électrons et donnent lieu aux structures fractales du célèbre *papillon de Hofstadter* [7] qui révèle la grande complexité de ce système. Depuis les premiers travaux en 1976, le spectre de Hofstadter n'a cessé d'être l'objet de nombreuses études, essentiellement théoriques, car les champs magnétiques requis à son investigation expérimentale dans les cristaux usuels sont hors de portée. Des progrès expérimentaux récents dans le domaine des atomes froids offriront

la première réalisation du problème de Hofstadter [8, 9, 10]. Le RCDQF offre donc une alternative à la manipulation de fermions de Dirac sans masse à deux dimensions. Un effet particulièrement intéressant lié à la présence de ces cônes est

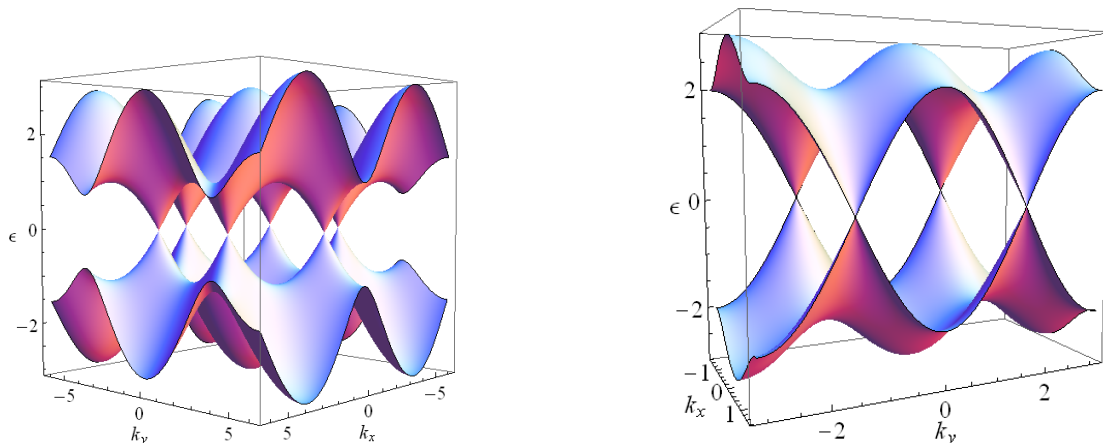


FIGURE 1: Relation de dispersion du graphène (gauche) et du réseau carré avec un demi quantum de flux par plaquette (droite). Ces deux relations de dispersion possèdent des cônes de Dirac.

la possibilité de les faire se déplacer jusqu'à ce qu'ils fusionnent [11]. Cette fusion marque une transition au delà de laquelle le système devient isolant de bandes. De façon tout à fait surprenante, à la transition, la relation de dispersion n'est plus linéaire que dans une direction, et est devenue quadratique dans l'autre, comme pour des particules massives. Cet effet, étudié dans le réseau nid d'abeilles (comme le graphène), est induit par une modification des paramètres de maille. Toutefois, les cônes du RCDQF demeurent quant à eux insensibles à cette manipulation. Nous montrerons que la fusion des cônes y est cependant rendue possible par un mécanisme totalement différent.

Si le RCDQF reste peu étudié dans la littérature, le graphène, quant à lui, fait l'objet de plusieurs publications quotidiennes. En particulier, un engouement très prononcé pour l'étude de l'effet des bords s'est manifesté assez récemment. D'innombrables travaux se sont en effet portés sur les propriétés de structures confinées de graphène. En particulier, les nano-rubans de graphène ont été proposés comme candidats potentiels à la réalisation de futurs composants en nano-électronique [12] et en spintronique [13]. Dans cette perspective, la compréhension du rôle des bords s'avère essentielle. D'autre part, sur un plan plus fondamental, la description des états de bords constitue un enjeu scientifique majeur. En présence d'un fort champ magnétique, les états de bord sont connus pour être responsables de la conductivité quantifiée de Hall [14]. Dans le graphène, la structure de ces états est beaucoup plus complexe que dans les gaz bidimensionnels habituels [15, 16]. Ceci est dû d'une part au comportement pseudo-spinoriel et non-massif des porteurs de charges, et d'autre part à la sensibilité qu'ont ces derniers à la nature du bord, comme le montre les figures 2 (a) et 2 (b). Une large partie de cette thèse porte donc sur la description fine, qualitative et quantitative, de la structure des niveaux de basse énergie des états de bord, pour différents types de bord. De façon surprenante, le RCDQF exhibe des états de bord dont la structure fine montre certaines similitudes avec le graphène, comme illustré sur les figures 2 (c) et 2 (d). Les états de bord de ces deux systèmes seront comparés en détails et analy-

sés quantitativement à l'aide d'un formalisme semiclassique. Une autre propriété

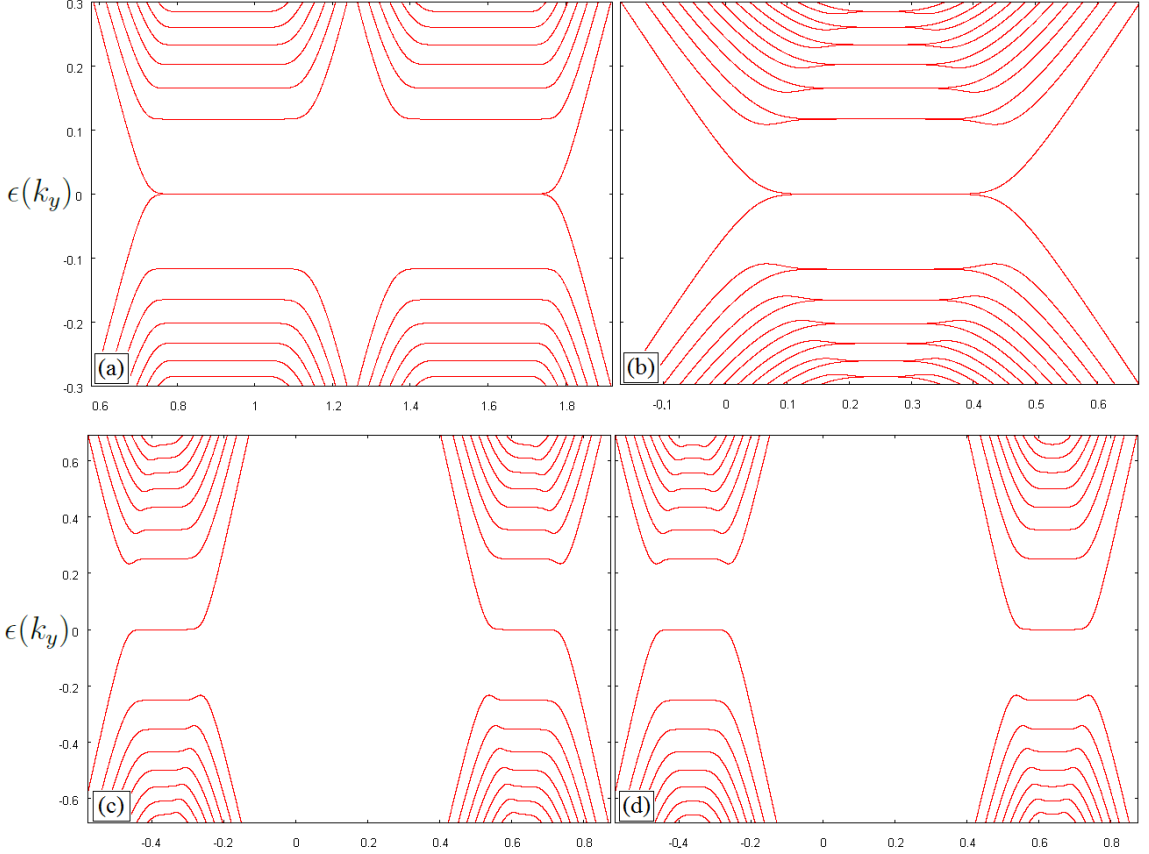


FIGURE 2: Niveaux d'énergie des états de bord de fermions de Dirac sans masse sous champ magnétique, pour différentes conditions aux limites. Les spectres (a) et (b) ont été obtenus pour des rubans de graphène dits respectivement *zigzag* et *armchair*, alors que les spectres (c) et (d) ont été obtenus pour le RCDQF découpé en rubans dont la largeur comporte un nombre pair ou impair de sites.

fascinante du graphène, est qu'il peut y exister des états de bord en l'absence de champ magnétique [17, 18]. À la différence des états de bords de l'effet Hall quantique dont nous venons de parler, ceux-ci sont non dispersifs et ne transportent donc pas de courant le long des bords. Des liens entre l'existence de tels états et des propriétés topologiques de la fonction d'onde en volume peuvent être établis [19]. Nous présenterons une étude préliminaire qui explicite cette correspondance, et développerons un modèle simple reposant sur cette propriété et qui génère de tels états de bord.

La première partie de cette thèse, consacrée à la physique des cônes de Dirac, est composée de six chapitres.

Dans le **chapitre 1**, nous introduisons plus en détails les deux systèmes que nous étudions dans le reste de la thèse, à savoir le graphène et le réseau carré avec un demi quantum de flux par plaquette (RCDQF). La présentation de ce dernier nécessite un rappel sur le problème de Hofstadter. Ce chapitre introductif a pour but de familiariser le lecteur avec ces deux réseaux, et en particulier avec leurs relations de dispersion qui présentent la particularité commune d'exhiber des cônes de Dirac.

Le chapitre 2 présente un travail effectué pendant cette thèse portant sur la fusion des cônes de Dirac dans le RCDQF. Nous y montrons un mécanisme nouveau de fusion des cônes et vérifions l'universalité du comportement original des niveaux de Landau à la transition, en calculant le spectre de Hofstadter pour un réseau carré avec un potentiel alterné sur sites. Ces résultats ont donné lieu à une publication [20].

Le chapitre 3 porte sur une étude numérique, par la méthode des liaisons-fortes, des spectres d'énergie du graphène et du RCDQF découpés en rubans. L'effet d'un champ magnétique sur ces spectres y est discuté en détails. Si certains aspects sont connus dans la littérature du graphène, nous mettons en évidence certaines structures que nous expliquerons plus loin. Les spectres du RCDQF ne sont en revanche pas connus dans la littérature. Nous les commentons en les comparant à ceux connus pour le graphène. Tous ces spectres seront décrits analytiquement dans les chapitres 4 et 5.

Le chapitre 4 propose une approche analytique de la description des états de bord sous champ magnétique à basse énergie. Plutôt que de considérer l'Hamiltonien de Dirac, nous considérons son carré qui est diagonal et qui a la structure d'un Hamiltonien de Schrödinger. La prise en compte du champ magnétique et des différents types de bord rencontrés au chapitre 3 nous permet de décrire les états de bord à l'aide d'un Hamiltonien de Schrödinger avec un potentiel effectif, propre au bord considéré. Nous montrons que ce potentiel peut être vu comme un double puits harmonique symétrique pour un certain type de bord, et asymétrique pour les autres bords discutés ici. La méthode utilisée pour obtenir ces problèmes effectifs a d'abord été suggérée par Brey et Fertig [15]. Nous la détaillons et la généralisons au cas du RCDQF. Cette approche nous permet de comprendre les caractéristiques des niveaux d'énergie présentées sur la figure 2 qui auront été mises en exergue au chapitre 3. La résolution des équations de Schrödinger effectives ainsi obtenues est effectuée dans le chapitre 5.

Le chapitre 5 présente la résolution analytique des équations de Schrödinger effectives de basse énergie obtenues au chapitre 4 et qui décrivent les états de bord discutés au chapitre 3. Nous utilisons pour cela un formalisme semiclassique en utilisant deux niveaux d'approximation que nous présentons l'un après l'autre. Le premier consiste en la quantification par la règle de Bohr-Sommerfeld de l'action du problème. Cette méthode nous permet d'interpréter les spectres en terme d'orbites cyclotron et de leur quantification. Le second niveau d'approximation repose sur le formalisme Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) et tient compte d'effets de couplage entre les deux puits du potentiel qu'ignore la première méthode. On parvient ainsi à reproduire quantitativement les calculs numériques liaisons-fortes présentés au chapitre 3. Ces résultats ont été publiés dans Phys. Rev B [21].

Le chapitre 6 consiste en un travail préliminaire sur le lien entre l'existence d'états de bord sans champ magnétique et une propriété de topologie d'une phase de la fonction de Bloch, appelée phase de Zak. On développe un modèle simple de chaînes de dimères qui rend parfaitement compte de cette correspondance. Ce modèle nous permet entre autre d'interpréter l'existence d'états de bord d'énergie nulle présents dans un certain type de ruban de graphène en termes de phase de Zak, et de rediscuter les résultats d'une étude similaire précédente [19]. Une extension de ce modèle est proposée, où les états de bord, toujours en l'absence de champ magnétique, acquièrent cette fois de la dispersion.

Par ailleurs, un autre sujet a été examiné pendant cette thèse. Il s'agit d'une étude du rôle de la géométrie sur la décohérence par les interactions électroniques dans les conducteurs mésoscopiques diffusifs, qui est présentée en deuxième partie de ce manuscrit. Cette partie, beaucoup plus courte que la première peut être lue indépendamment de la première.

À basse température, la nature quantique des électrons se manifeste et donne lieu à des phénomènes d'interférence qui modifient le transport électronique [22, 23]. La correction quantique à la conductivité qui en découle, est appelée *correction de localisation faible*. Les processus cohérents à l'origine de cette correction ne peuvent toutefois avoir lieu que sur une échelle caractéristique, appelée *longueur de cohérence de phase* L_ϕ . C'est cette longueur qui caractérise la décohérence du système. Ainsi, la correction de localisation faible est donc un outil pour étudier la décohérence car elle dépend explicitement de L_ϕ . Dans le cas qui nous intéresse où la décohérence est due aux interactions électroniques, il a été montré récemment que le comportement en température de L_ϕ dépend de la *géométrie* du système [24, 25, 26]. La géométrie fait ici non seulement référence à la dimension du système, mais aussi à la possibilité qu'à l'électron d'explorer entièrement le système, comme dans un anneau.

Le **chapitre 7** présente l'étude de la localisation faible sur un cylindre diffusif en présence d'interactions électroniques. On rappelle d'abord les mécanismes à l'origine de la localisation faible, puis on présente le modèle microscopique décrivant la décohérence induite par les interactions [27]. On résume ensuite les calculs des harmoniques de la correction de localisation faible sur le cylindre. On montre alors qu'il existe plusieurs régimes, pilotés par des longueurs caractéristiques distinctes. Celles-ci reflètent la sensibilité du processus de décohérence à différents aspects de la géométrie du cylindre (sa longueur, sa circonférence ou sa surface). Ces résultats ont été intégrés dans une étude plus vaste de la dépendance de la géométrie sur la décohérence due aux interactions dans les conducteurs diffusifs [28].

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| I ÉTATS DE BORD ET CÔNES DE DIRAC DANS DES CRISTAUX BIDIMENSIONNELS | 13 |
| 1 Fermions de Dirac sans masse à deux dimensions | 14 |
| 1.1 Le graphène | 15 |
| 1.2 Le spectre de Hofstadter au demi quantum de flux par plaquette . . | 19 |
| 1.3 Conclusion du chapitre | 24 |
| 2 Fusion des cônes de Dirac dans le réseau carré à demi quantum de flux | 25 |
| 2.1 Le réseau nid d'abeilles déformé : un modèle simple pour la fusion des cônes | 26 |
| 2.2 La fusion des cônes dans le RCDQF | 28 |
| 2.3 Une même transition pour les différents systèmes | 30 |
| 2.4 Niveaux de Landau anormaux et déplacement des cônes | 30 |
| 3 Fermions de Dirac sans masse sur un ruban - une étude numérique | 36 |
| 3.1 Des rubans en liaisons-fortes | 38 |
| 3.2 États de bord et champ magnétique | 46 |
| 3.3 Conclusions du chapitre et perspectives | 55 |
| 4 Description des états de bord sous champ magnétique par un Hamiltonien effectif de basse énergie | 57 |
| 4.1 Hamiltonien de volume sous champ magnétique fort | 58 |
| 4.2 Hamiltonien effectif : bord zigzag | 63 |
| 4.3 Hamiltonien effectif : bord armchair | 67 |
| 4.4 Hamiltonien effectif : bords plats du réseau carré à demi quantum de flux | 72 |
| 4.5 Conclusions du chapitre | 75 |
| 5 Étude semiclassique des états de bord sous champ magnétique fort | 77 |
| 5.1 Quantification de l'action | 78 |
| 5.2 Quantification de l'orbite cyclotron | 84 |
| 5.3 Approximation WKB : méthodologie | 90 |
| 5.4 Calculs des niveaux d'énergie des états de bord par la méthode WKB | 93 |
| 5.5 Résultats analytiques quantitatifs | 104 |
| 5.6 Conclusions du chapitre et perspectives | 107 |

| | |
|---|------------|
| 6 États de bord en l'absence de champ magnétique et topologie | 110 |
| 6.1 Transition topologique dans une chaîne de dimères | 111 |
| 6.2 Application aux rubans de graphène | 121 |
| 6.3 États de bord dispersifs dans des chaînes couplées de dimères | 126 |
| 6.4 Conclusions du chapitre et perspectives | 129 |
| | |
| II DÉCOHERENCE ET INTERACTIONS ÉLECTRONIQUES SUR UN CYLINDRE DIFFUSIF | 133 |
| 7 Décohérence et interactions électroniques sur un cylindre diffusif | 135 |
| 7.1 Motivations et contexte | 136 |
| 7.2 Transport quantique dans les métaux faiblement désordonnés : la localisation faible | 137 |
| 7.3 Les interactions électron-électron comme source de décohérence : le modèle d'Altshuler, Aronov et Khmelnitsky | 142 |
| 7.4 Application au cylindre creux diffusif | 146 |
| 7.5 Discussion et conclusion | 150 |
| | |
| A États de bords des rubans zigzag par l'Hamiltonien de Dirac | 155 |
| | |
| B Action classique et aire cyclotron | 158 |
| | |
| C Symétrie d'inversion et phase de Zak | 160 |
| | |
| Bibliographie | 163 |

Première partie

ÉTATS DE BORD ET CÔNES DE
DIRAC DANS DES CRISTAUX
BIDIMENSIONNELS

Chapitre 1

Fermions de Dirac sans masse à deux dimensions

*Gardez-vous leur dit-il, de vendre l'héritage
Que nous ont laissé nos parents.
Un trésor est caché dedans.
Je ne sais pas l'endroit ; mais un peu de courage
Vous le fera trouver, vous en viendrez à bout.*
Le laboureur et ses enfants, Fable IX,
Jean de La Fontaine.

Sommaire

| | | |
|------------|---|-----------|
| 1.1 | Le graphène | 15 |
| 1.1.1 | Généralités | 15 |
| 1.1.2 | Les cônes de Dirac | 16 |
| 1.2 | Le spectre de Hofstadter au demi quantum de flux par plaquette | 19 |
| 1.2.1 | Le problème de Hofstadter | 19 |
| 1.2.2 | Le réseau carré avec un demi quantum de flux par plaquette (RCDQF) | 21 |
| 1.3 | Conclusion du chapitre | 24 |

1.1 Le graphène

1.1.1 Généralités

Allotrope bidimensionnel du carbone, le graphène est le successeur des cristaux carbonés synthétiques que sont les fullerènes (molécules où les atomes de carbone sont arrangés sur une sphère) [29], et les nanotubes de carbone [30, 31]. Ces derniers peuvent être vus comme des feuilles de graphène enroulées en cylindres.

Le graphène est fabriqué soit par exfoliation [32], soit par épitaxie [33, 34]. La première technique consiste à arracher manuellement des feuillets de graphite avec du scotch et à les déposer sur un substrat comme le SiO_2 . Cette extraction est rendue possible par les faibles liaisons Van der Waals qui relient les différentes couches de graphène entre elles. En répétant l'opération plusieurs fois, on peut espérer parvenir à déposer une unique feuille de graphène, qu'il faudra ensuite savoir distinguer des autres feuillets plus épais, par spectroscopie Raman par exemple. L'autre technique consiste à exposer un cristal de SiC épitaxié à une température de 1300°C dans le but de faire sublimer les atomes de silicium de la surface, ceux-ci laissant alors place à une ou quelques monocouches de graphène en surface. On peut ainsi obtenir du graphène sur un substrat de SiC.

D'un point de vue structural, une feuille de graphène est un cristal bidimensionnel de carbone sur un réseau nid d'abeilles (figure 1.1). En effet, l'hybridation sp_2 entre l'orbitale $2s$ et les deux orbitales $2p_x$ et $2p_y$ de chaque atome de carbone conduit à la formation de liaisons chimiques fortes σ . Celles-ci sont écartées d'un angle de 120° et séparent les atomes de carbone d'une distance de $a = 1,42$ Angström ce qui confère au réseau une géométrie trigonale plane. L'orbitale $2p_z$, perpendiculaire au plan (x, y) , n'est pas affectée par cette hybridation et demeure à demi remplie. Les propriétés électroniques du graphène seront donc déterminées par la relation de dispersion de ces électrons $2p_z$.

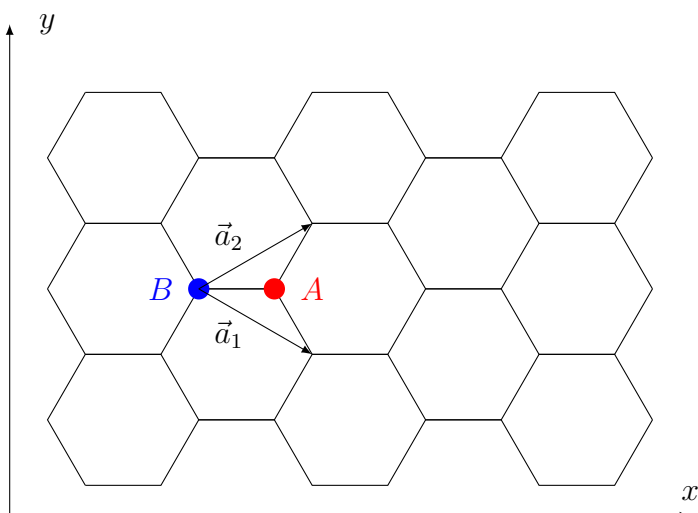


FIGURE 1.1: Structure cristalline nid d'abeilles d'une feuille de graphène. Le graphène est un réseau de Bravais triangulaire de vecteur de base \vec{a}_1 et \vec{a}_2 , et comprenant deux atomes A et B par maille.

1.1.2 Les cônes de Dirac

On étudie ici la structure électronique des électrons $2p_z$ du graphène en adoptant le modèle liaisons-fortes. Comme le réseau nid d'abeilles possède deux atomes par maille, que nous dénoterons par A et B , l'équation de Schrödinger, pour une maille de coordonnées (m, n) quelconque s'écrit, en prenant $\hbar = 1$:

$$\epsilon\phi_{m,n}^A = -t(\phi_{m,n}^B + \phi_{m+1,n}^B + \phi_{m,n+1}^B) \quad (1.1)$$

$$\epsilon\phi_{m,n}^B = -t(\phi_{m,n}^A + \phi_{m-1,n}^A + \phi_{m,n-1}^A) \quad (1.2)$$

où $t \approx 2,5$ eV est le paramètre de saut entre plus proches voisins. Dans tout ce chapitre, on ne s'intéresse qu'à des propriétés de volume. On considère donc que la feuille de graphène présente la périodicité du réseau cristallin dans les directions x et y , de sorte que les fonctions d'ondes du problème sont les fonctions de Bloch que l'on écrit :

$$|\Psi_{\vec{k}}\rangle = \sum_j e^{i\vec{k}\vec{R}_j} [\Psi_A |A_j\rangle + \Psi_B |B_j\rangle] \quad (1.3)$$

où les vecteurs \vec{R}_j appartiennent au réseau de Bravais triangulaire. L'Hamiltonien liaisons-fortes, écrit dans la base des deux sous-réseaux (Ψ_A, Ψ_B) , prend la forme suivante :

$$H = t \begin{pmatrix} 0 & f(\vec{k}) \\ f^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

avec

$$f(\vec{k}) = -1 - \exp(i\vec{k} \cdot \vec{a}_1) - \exp(i\vec{k} \cdot \vec{a}_2) \quad (1.5)$$

où \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont les vecteurs de base du réseau de Bravais triangulaire, avec $\|\vec{a}_1\| = \|\vec{a}_2\| \equiv a_0$. Le pas du réseau a_0 est relié à la distance carbone-carbone $a = 0,142$ nm par $a_0 = \sqrt{3}a$. La relation de dispersion du graphène s'obtient alors facilement et vaut $\epsilon(\vec{k}) = \pm t |f(\vec{k})|$. Cette relation de dispersion, tracée sur la figure 1.2, consiste en deux bandes qui se touchent en deux points inéquivalents. À dopage nul, un seul électron $2p_z$ est disponible par site, par conséquent le niveau de Fermi ϵ_F passe exactement par ces points. À température nulle, seule la bande d'énergie négative est donc remplie, c'est la bande de valence. L'autre bande est la bande de conduction. Les positions \vec{K} et \vec{K}' des points où la bande de valence et la bande de conduction se touchent s'obtiennent par la condition $f(\vec{K}^{(l)}) = 0$ soit :

$$\left| 1 + e^{i\vec{K}^{(l)} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{K}^{(l)} \cdot \vec{a}_2} \right| = 0$$

d'où l'on tire les conditions :

$$\vec{K}^{(l)} \cdot \vec{a}_1 = \xi \frac{2\pi}{3} \quad , \quad \vec{K}^{(l)} \cdot \vec{a}_2 = -\xi \frac{2\pi}{3} \quad (1.6)$$

à un multiple de 2π près, et où $\xi = +$ pour le point \vec{K} et $\xi = -$ pour le point \vec{K}' . Finalement, en décomposant $\vec{K}^{(l)}$ sur les vecteurs de base \vec{a}_1^* et \vec{a}_2^* du réseau réciproque, on trouve :

$$\vec{K} = \frac{1}{3}(\vec{a}_1^* - \vec{a}_2^*) \quad , \quad \vec{K}' = -\frac{1}{3}(\vec{a}_1^* - \vec{a}_2^*) \quad (1.7)$$

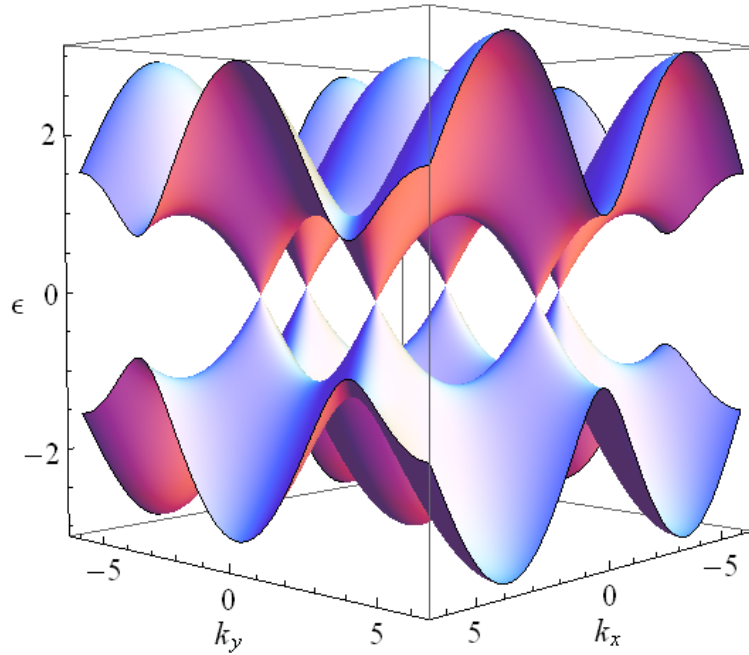


FIGURE 1.2: Relation de dispersion du graphène dans le modèle liaisons-fortes avec un paramètre de saut t entre les plus proches voisins. L'énergie est donnée en unité de t , k_x et k_y sont donnés en unité de a .

Dans chaque *vallée*, c'est-à-dire dans le voisinage de ces deux points, la fonction $f(\vec{k})$ de l'Hamiltonien liaisons-fortes se linéarise comme suit :

$$f(\vec{K}^{(\prime)} + \vec{q}) = \xi \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{q} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2) + \frac{i}{2} \vec{q} \cdot (\vec{a}_1 + \vec{a}_2) , \quad (1.8)$$

où $\xi = \pm$ est maintenant appelé *indice de vallée*. En utilisant le choix de base de la figure 1.1, on obtient l'Hamiltonien du premier ordre en \vec{q} qui présente la structure d'un *Hamiltonien de Dirac* :

$$\hat{H}_{\vec{K}, \vec{K}'} = t \frac{3a}{2} \begin{pmatrix} 0 & iq_x - \xi q_y \\ -iq_x - \xi q_y & 0 \end{pmatrix} . \quad (1.9)$$

La relation de dispersion qui en découle, $\epsilon(\vec{K}^{(\prime)} + \vec{q}) = \pm v_F |\vec{q}|$ où $v_F \equiv 3ta/2 \approx 10^6 m s^{-1}$ est la vitesse de Fermi, est linéaire pour les particules et les trous. La théorie effective de basse énergie est donc une théorie de fermions non massifs ou ultra-relativistes. Le spectre d'énergie du graphène présente donc un gap qui ne se ferme qu'aux deux *points de Dirac* \vec{K} et \vec{K}' situés aux coins de la zone de Brillouin (figure 1.3). Pour cette raison, on qualifie souvent le graphène de semiconducteur à gap nul ou de semimétal. Cette originalité avait déjà été soulignée dans des travaux théoriques précurseurs de Wallace en 1947 [5], dans un contexte historique toutefois différent, puisqu'il s'agissait à l'époque de considérer le graphène comme un point de départ à l'étude du graphite, un matériau jouant un rôle d'importance dans les réacteurs des centrales nucléaires au lendemain de la seconde guerre mondiale.

Les conséquences de la linéarité de la relation de dispersion du graphène sont nombreuses, et nous nous intéresserons en particulier au comportement original des électrons en présence d'un champ magnétique. En effet, alors qu'il est bien connu qu'un gaz de particules massives à deux dimensions possède, dans un champ magnétique B , le même spectre que celui de l'oscillateur harmonique à une dimension

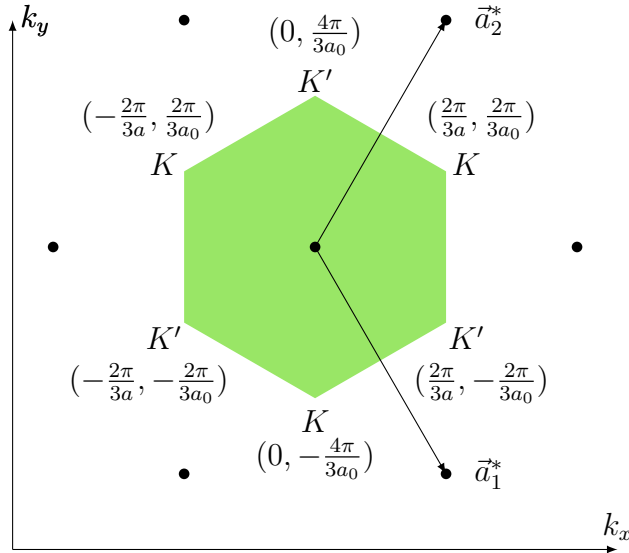


FIGURE 1.3: Réseau réciproque du graphène. Les points noirs représentent les noeuds du réseau, et \vec{a}_1^* et \vec{a}_2^* les vecteurs de base. La zone de Brillouin est représentée par un hexagone de couleur. La relation de dispersion s'annule linéairement en K et K' , les coins de la zone de Brillouin ; on parle de points de Dirac.

$\epsilon_n = \hbar\omega_{cycl}(n + \frac{1}{2})$, où la fréquence cyclotron $\omega_{cycl} = eB/m$ est linéaire en champ magnétique et inversement proportionnelle à la masse de la particule, McClure [35] montra que dans le cas de particules sans masse, les niveaux de Landau varient en \sqrt{nB} . Plus précisément, on verra en détails dans le chapitre 4 que dans la limite continue, le spectre des niveaux de Landau dans le graphène est donné par :

$$\epsilon_n = \pm t\sqrt{2\pi\sqrt{3}}\sqrt{\frac{\phi}{\phi_0}n} \quad n \in \mathbb{N} \quad (1.10)$$

où $\phi_0 = h/e$ est le quantum de flux magnétique et où $\phi = B\frac{3}{2}aa_0$ est le flux magnétique à travers une maille élémentaire.¹ Les deux différences importantes avec le cas massif bien connu sont, d'une part, la dépendance en \sqrt{Bn} des niveaux et, d'autre part, l'existence d'un niveau de Landau d'énergie nulle qui en découle pour $n = 0$. Ces deux propriétés sont donc des conséquences directes de l'existence de cônes de Dirac, et ont été observées par différentes mesures de spectroscopie sous champ magnétique : mesures d'absorption optique dans l'infrarouge [36, 37], et plus récemment, mesures de conductance différentielle tunnel dans du graphène épitaxié. Ces résultats expérimentaux montrent sans ambiguïté l'existence de porteurs de charges sans masse dans le graphène, à travers l'observation de la manifestation de niveaux de Landau en \sqrt{nB} (aussi qualifiés de relativistes). Des mesures semblables, un peu plus anciennes, portant sur des échantillons de graphite [38], avaient été moins concluantes.

Il existe un autre système bidimensionnel qui, pour les mêmes raisons que le graphène, présente un comportement identique en \sqrt{Bn} des niveaux d'énergie. Il

1. Notons que cette expression n'est valide que pour des flux faibles devant le quantum de flux, ce qui recouvre toutefois sans problème la gamme de champ magnétique utilisable en laboratoire ($< 100T$). Pour des champs plus forts, des effets de réseaux apparaissent, et l'on parle de spectre de Hofstadter, dont les niveaux de Landau ne sont qu'une limite.

s'agit du réseau carré avec un demi quantum de flux magnétique par plaquette. Le flux Ba^2 représente ici l'écart au demi quantum de flux. Afin de présenter ce système, que nous étudierons en parallèle avec le graphène tout au long de cette thèse, nous commençons par introduire le problème de Hofstadter dont il est issu.

1.2 Le spectre de Hofstadter au demi quantum de flux par plaquette

Au cours des années 1970, Douglas Hofstadter a étudié le problème des électrons de Bloch sur un réseau carré soumis à un flux magnétique [7]. Le spectre ainsi obtenu, aussi appelé papillon de Hofstadter, fait apparaître des structures fractales (figure 1.5) d'une grande complexité que nous n'aborderons pas dans cette thèse. Le but de cette section est de présenter le problème de Hofstadter pour insister sur une région particulière du spectre qui nous intéressera dans la suite de cette étude.

1.2.1 Le problème de Hofstadter

Considérons le problème en liaisons-fortes d'un électron itinérant sur un réseau carré dont chaque maille est traversée par un flux magnétique ϕ . Dans ce problème, un électron « saute » d'un site de coordonnées (m, n) au site voisin le plus proche avec une énergie de saut t . Par ailleurs, l'électron étant une particule quantique chargée, il est sensible au potentiel vecteur \vec{A} associé au champ magnétique par $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$, et accumule donc, lors de son mouvement, une phase Aharonov-Bohm (AB) donnée par [39] :

$$\gamma = \frac{2\pi}{\phi_0} \int d\vec{l} \cdot \vec{A} \quad (1.11)$$

où $\phi_0 = h/e$ est le quantum de flux magnétique. Bien sûr, en pratique, le choix d'une jauge est indispensable pour effectuer les calculs, celle-ci pouvant être fixée par la géométrie du système. Pour un réseau carré, nous utiliserons la jauge de Landau $A_y = Bx$ et $A_x = 0$, mais d'autres choix sont possibles. Dans cette jauge, la fonction d'onde de l'électron se voit affectée d'une phase γ ($-\gamma$) lors d'un saut dans le sens des y croissants (décroissants), et d'une phase nulle dans les deux autres directions, le déplacement étant dans ce dernier cas perpendiculaire au potentiel vecteur. Ainsi, lorsqu'un électron saute du site (m, n) au site $(m, n + 1)$, la phase AB accumulée $\gamma(m)$ se calcule aisément :

$$\begin{aligned} \gamma(m) &= \frac{2\pi}{\phi_0} \int_{(m,n)}^{(m,n+1)} d\vec{l} \cdot \vec{A} \\ &= \frac{2\pi}{\phi_0} \int_0^a dy Bx = \frac{2\pi}{\phi_0} Bma^2 \\ \gamma(m) &= 2\pi f m \end{aligned} \quad (1.12)$$

Ainsi, dans la jauge de Landau, la phase AB accumulée le long de la direction y ne dépend que de la position $x = ma$ sur le réseau et du flux magnétique adimensionné $f = \frac{Ba^2}{\phi_0}$ à travers une maille du réseau. L'Hamiltonien liaisons-fortes s'écrit donc :

$$H\phi_{m,n} = -t\phi_{m-1,n} - t\phi_{m+1,n} - te^{i\gamma(m)}\phi_{m,n+1} - te^{-i\gamma(m)}\phi_{m,n-1} \quad (1.13)$$

L'étape suivante consiste à utiliser le théorème de Bloch afin d'exploiter la périodicité du réseau. Or, dans la direction x , celle-ci est modifiée et dépend maintenant du flux appliqué. En particulier, pour des flux rationnels $f = p/q$, le problème a une nouvelle périodicité qa dans la direction x , au lieu de a en l'absence de flux magnétique, alors que celle-ci reste inchangée dans la direction y . En posant $m = m'q + j$, les fonctions de Bloch s'écrivent :

$$\phi_{m,n} = \phi_{m',n}^j = \psi_{k_x,k_y}^j e^{iaqk_x m'} e^{iak_y n} \quad (1.14)$$

avec la condition de périodicité $\psi_{k_x,k_y}^j = \psi_{k_x,k_y}^{j+q}$, où m' est l'indice de maille et j celui de l'atome au sein de la maille. Ecrit ainsi, le théorème de Bloch exploite bien l'invariance par translation d'un motif de q atomes, et non d'un seul atome. D'autre part, la phase AB peut se récrire $\gamma(m) = \gamma(m'q + j)$ de sorte que pour des flux rationnels $f = p/q$, on a $e^{i\gamma(m)} = e^{i\gamma(j)}$, comme illustré sur la figure 1.4. L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$\epsilon \phi_{m',n}^j = -t \left(\phi_{m',n}^{j-1} + \phi_{m',n}^{j+1} + e^{-i\gamma(j)} \phi_{m',n+1}^j + e^{i\gamma(j)} \phi_{m',n-1}^j \right) . \quad (1.15)$$

En utilisant la forme de Bloch (1.14) des fonctions d'onde, on obtient le système

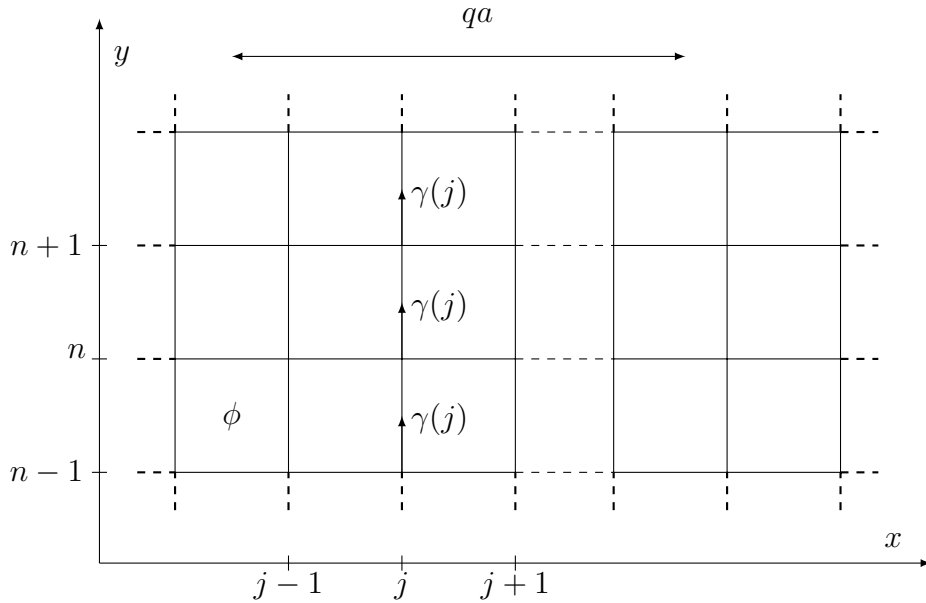


FIGURE 1.4: Réseau carré de pas a traversé par un flux magnétique $\phi = Ba^2$ par plaquette. Pour un flux rationnel fixé $\frac{p}{q}$ en unités de ϕ_0 , la périodicité du réseau devient qa dans la direction x .

suivant :

$$\begin{aligned} j = 1 \quad \epsilon \Psi^1 &= -t \left(\Psi_k^q e^{-iaqk_x} + \Psi_k^2 + 2 \cos(ak_y - 2\pi \frac{p}{q}) \Psi_k^1 \right) \\ j \in [2; q-1] \quad \epsilon \Psi_k^j &= -t \left(\Psi_k^{j-1} + \Psi_k^{j+1} + 2 \cos(ak_y - 2\pi j \frac{p}{q}) \Psi_k^j \right) \\ j = q \quad \epsilon \Psi_k^q &= -t \left(\Psi_k^{q-1} + \Psi_k^1 e^{iaqk_x} + 2 \cos(ak_y - 2\pi p) \Psi_k^q \right) \end{aligned} \quad (1.16)$$

Ainsi, pour chaque valeur rationnelle du flux $f = \frac{p}{q}$, l'Hamiltonien du système est une matrice $q \times q$ de la forme :

$$\begin{pmatrix} 2 \cos(ak_y - 2\pi\frac{p}{q}) & 1 & 0 & \dots & 0 & e^{-iaq} \\ & & 1 & 2 \cos(ak_y - 2\pi j\frac{p}{q}) & 1 & \\ & e^{iaq} & 0 & \dots & 0 & 1 & 2 \cos(ak_y - 2\pi p) \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

Le spectre d'énergie ainsi obtenu en fonction du flux magnétique, aussi appelé papillon de Hofstadter, est représenté sur la figure 1.5. Pour une valeur de flux égale à p/q en unité de ϕ_0 , le spectre de Hofstadter possède q bandes, ce qui donne lieu à une structure fractale des niveaux d'énergie lorsque le flux varie.

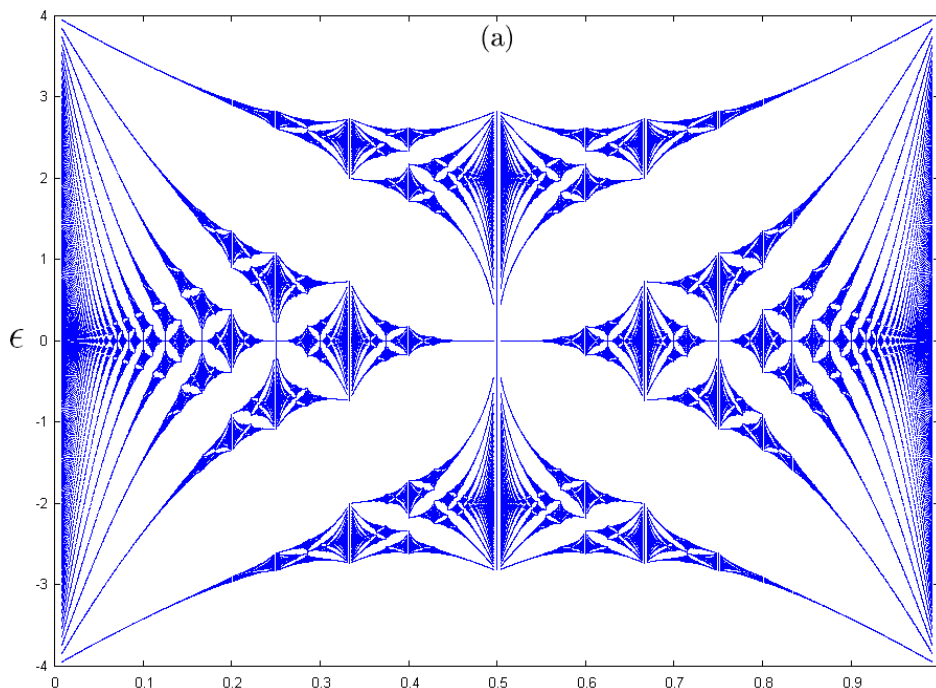


FIGURE 1.5: Spectre de Hofstadter du réseau carré. L'énergie $\epsilon(f)$ est donnée en unité de t et le flux magnétique f en unité du quantum de flux h/e .

1.2.2 Le réseau carré avec un demi quantum de flux par plaquette (RCDQF)

Sans rentrer dans les détails de la structure remarquable du papillon de Hofstadter, une région particulière attire notre attention : au voisinage de $f = 1/2$, les niveaux d'énergie varient comme $\epsilon_n \propto \sqrt{n\varphi}$ où $\varphi = |f - 1/2|$, exactement comme pour le graphène, révélant ainsi l'existence de cônes de Dirac pour le réseau carré traversé d'un demi quantum de flux magnétique par plaquette. Dans la suite de cette thèse, nous nous intéresserons donc à ce système comme un autre système 2D exhibant des points de Dirac, et chercherons à le comparer au graphène.

Dans la jauge de Landau que nous avons utilisée plus haut pour obtenir le spectre de Hofstadter complet, l'Hamiltonien liaisons-fortes (1.13) donne, pour $f = 1/2$ l'équation de Schrödinger suivante :

$$\epsilon \phi_{m,n} = -t [(-1)^m \phi_{m,n+1} + (-1)^m \phi_{m,n-1} + \phi_{m+1,n} + \phi_{m-1,n}] . \quad (1.18)$$

Nous devons donc distinguer deux types de sites selon la parité de m : ceux couplés aux premiers voisins par un paramètre de saut $-t$ (m pair) et ceux dont le paramètre de saut a changé de signe dans la direction y à cause du déphasage AB $\gamma = \pi$ (m impair). Ainsi le déphasage AB peut être ici interprété comme un changement de signe du paramètre de saut. Le système RCDQF, représenté sur la figure 1.6 a donc vu sa périodicité doubler dans la direction x par rapport au réseau carré sans flux ; il possède maintenant deux atomes par maille que nous dénoterons par A et B . Comme précédemment, on peut ré-indéxer la fonction d'onde

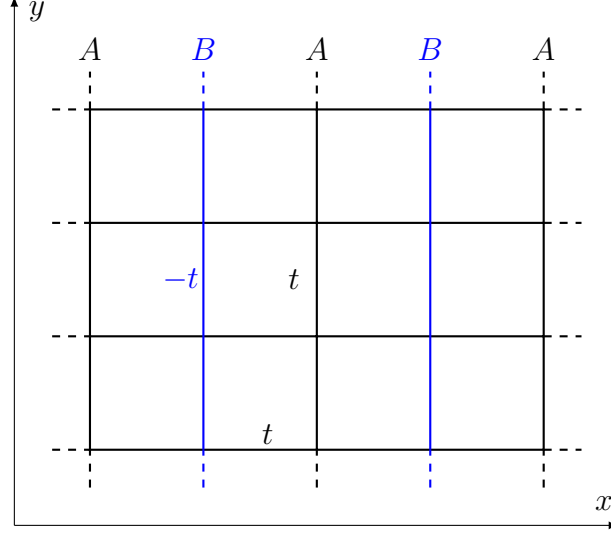


FIGURE 1.6: Réseau carré de pas a avec un demi quantum de flux par plaquette. L'énergie est donnée en unité de t et \vec{k} en unité de $1/a$. Le flux engendre un déphasage de π que l'on peut interpréter comme un changement de signe du paramètre de saut $t \rightarrow -t$. Les lignes noires (resp. bleues) représentent un couplage t (resp. $-t$) entre les noeuds du réseau, distinguant ainsi les sites A des sites B .

comme $\phi_{m,n} = \phi_{m',n}^{A/B}$ où m' désigne la maille contenant deux atomes et A (resp. B) désigne les sites pour lesquels m est pair (resp. impair). L'équation de Schrödinger devient :

$$\begin{aligned} \epsilon_{m',n} \phi_{m',n}^A &= -t [\phi_{m',n+1}^A + \phi_{m',n-1}^A + \phi_{m',n}^B + \phi_{m'-1,n}^B] \\ \epsilon_{m',n} \phi_{m',n}^B &= -t [-\phi_{m',n+1}^B - \phi_{m',n-1}^B + \phi_{m',n}^A + \phi_{m'+1,n}^A] \end{aligned} \quad (1.19)$$

En cherchant des solutions sous la forme d'ondes de Bloch $\phi_{m',n}^{A/B} = e^{i(2k_x am' + k_y na)} \Psi_{m'}^{A/B}$, l'Hamiltonien liaisons-fortes, dans la base (Ψ^A, Ψ^B) devient alors

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = -t \begin{pmatrix} 2 \cos ak_y & 1 + e^{-2iak_x} \\ 1 + e^{2iak_x} & -2 \cos ak_y \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

Les valeurs propres $\epsilon(\vec{k}) = \pm 2t \sqrt{\cos^2 ak_x + \cos^2 ak_y}$ forment un spectre constitué de deux bandes qui se touchent en deux points inéquivalents $\vec{C} = (\pi/2a, \pi/2a)$ et $\vec{C}' = (\pi/2a, -\pi/2a)$ situés en bord de zone de Brillouin comme indiqué sur la figure 1.7. Au voisinage de ces deux points, on effectue un développement en $\vec{k} = \vec{C} + \vec{q}$ au premier ordre. L'Hamiltonien linéarisé s'écrit alors :

$$\mathcal{H}(\vec{C} + \vec{q}) = 2ta \begin{pmatrix} \xi q_y & -iq_x \\ iq_x & -\xi q_y \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

où $\xi = \pm$ est l'indice de vallée. Dans chacune des vallées, la relation de dispersion est linéaire :

$$\epsilon(\vec{C}^{(\prime)} + \vec{q}) = \pm 2t a q , \quad (1.22)$$

de sorte que le RCDQF possède aussi deux cônes de Dirac aux positions \vec{C} et \vec{C}' .

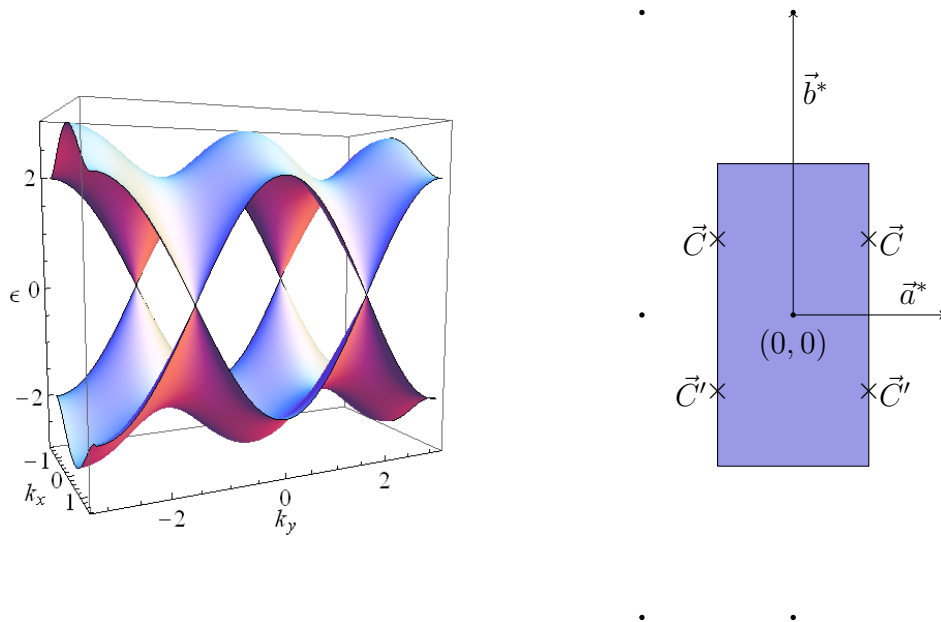


FIGURE 1.7: Relation de dispersion du réseau carré avec un demi quantum de flux par plaquette. Les deux bandes se touchent en bord de zone de Brillouin (rectangulaire) en deux points $\vec{C} = (\pm\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a})$ et $\vec{C}' = (\pm\frac{\pi}{2a}, -\frac{\pi}{2a})$. Au voisinage de ces points de Dirac, représentés par des croix, la relation de dispersion est linéaire. Les noeuds du réseau réciproque sont représentés par des points. Les vecteurs \vec{a}^* et \vec{b}^* forment une base du réseau réciproque.

Notons que la réalisation expérimentale du problème de Hofstadter est inenvisageable dans les cristaux usuels, car les champs magnétiques requis qui permettraient aux effets de réseaux de se manifester sont hors de portée. Seule la région de bas flux, où l'on retrouve les niveaux de Landau, peut être explorée. La comparaison établie jusqu'ici entre le RCDQF et le graphène semble donc purement théorique. Toutefois, les progrès spectaculaires récents dans le piégeage et la manipulation des atomes froids offriraient la possibilité de réaliser les conditions du problème de Hofstadter. La réalisation de réseaux atomiques bidimensionnels piégés optiquement est une réalité depuis plusieurs années ; reste la question du champ magnétique. Les atomes étant neutres, ils ne sont pas couplés au champ magnétique. Néanmoins, un « champ magnétique fictif » peut être réalisé de différentes manières, soit en faisant tourner le système (le rôle du champ magnétique est alors joué par la force de Coriolis), soit par l'ajout d'un autre type de champ de jauge auxquels sont sensibles les degrés de liberté internes des atomes [8]. Des schémas expérimentaux ont alors été proposés pour simuler des fermions de Dirac sans masse dans le réseau carré traversé d'un demi quantum de flux par plaquette [9, 10].

1.3 Conclusion du chapitre

Nous venons d'établir un lien entre deux problèmes différents : le graphène d'une part et le réseau carré traversé d'un demi quantum de flux magnétique par plaquette (RCDQF) d'autre part. Ces deux systèmes présentent deux cônes de Dirac dans leur relation de dispersion. Dans la suite, le graphène et le RCDQF sont étudiés en parallèle. Nous nous intéresserons d'abord à une propriété commune en volume, que nous présentons au chapitre 2. Les chapitres 3, 4 et 5 sont consacrés à la description des états de bord sous champ magnétique qui émergent dans ces deux systèmes.

Chapitre 2

Fusion des cônes de Dirac dans le réseau carré à demi quantum de flux

L'Histoire le prouve, la physique ne nous a pas seulement forcés de choisir entre les problèmes qui se présentaient en foule ; elle nous en a imposé auxquels nous n'aurions jamais songé sans elle.

La valeur de la science,
Henri Poincaré.

Sommaire

| | | |
|------------|---|-----------|
| 2.1 | Le réseau nid d'abeilles déformé : un modèle simple pour la fusion des cônes | 26 |
| 2.2 | La fusion des cônes dans le RCDQF | 28 |
| 2.3 | Une même transition pour les différents systèmes . . . | 30 |
| 2.4 | Niveaux de Landau anormaux et déplacement des cônes | 30 |
| 2.4.1 | Le spectre de Hofstadter modifié | 31 |
| 2.4.2 | Analyse semiclassique des niveaux de Landau le long de la transition | 33 |

Une étude récente portant sur le graphène a montré qu'il est possible, en agissant sur les paramètres de maille, de faire bouger les cônes de Dirac jusqu'à ce que ceux-ci se confondent [11]. De manière tout à fait inattendue, cette *fusion* des cônes donne lieu à une relation de dispersion hybride : linéaire dans une direction et quadratique dans l'autre [11]. De plus, la fusion des cônes marque une transition dite *topologique* entre une phase semi-métallique et une phase isolante de bandes. Une telle transition de phase conserve les symétries du système, contrairement aux transitions de phase à la Landau de la physique statistique. Les deux états séparés par cette transition se distinguent alors, outre par leurs propriétés physiques (semi-métal \leftrightarrow isolant ici), par la valeur *finie* que peut prendre une certaine phase associée à la fonction d'onde. Il s'agit ici de la phase de Berry [40], qui vaut π lorsque le système possède des cônes de Dirac (avant la transition), et 0 quand le gap s'est ouvert (après la transition) [11].

Dans ce chapitre, nous présenterons d'abord les idées et les résultats principaux de cet effet remarquable qui furent d'abord développés dans le cadre du graphène, quelques mois avant le début de cette thèse [11]. Puis nous montrerons que la fusion des cônes peut aussi être réalisée dans le RCDQF par un mécanisme très différent et peut-être plus réaliste que celui suggéré dans le graphène, qui ne fait pas intervenir les paramètres de maille du réseau.

On prend $\hbar = 1$

2.1 Le réseau nid d'abeilles déformé : un modèle simple pour la fusion des cônes

On considère ici le réseau nid d'abeilles avec une asymétrie, de sorte que le paramètre de saut reliant deux sites orientés dans une direction donnée prend une valeur t' différente de celle du paramètre t dans les autres directions. Prenons l'exemple où t' relie les sites A et B alignés dans la direction x de la figure 1.1. L'Hamiltonien liaisons-fortes (1.4) devient :

$$H_{modif} = \begin{pmatrix} 0 & g(\vec{k}) \\ g^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

$$g(\vec{k}) = -t' - t \exp(i\vec{k} \cdot \vec{a}_1) - t \exp(i\vec{k} \cdot \vec{a}_2) .$$

Le spectre $\epsilon(\vec{k}) = \pm |g(\vec{k})|$ obtenu est représenté sur la figure 2.1 pour différentes valeurs de $t'/t > 1$. Lorsque ce rapport varie, les cônes de Dirac se rapprochent le long de la direction k_y jusqu'à fusionner pour $t' = 2t$ en un point $\vec{D}_0 = (\vec{a}_1^* + \vec{a}_2^*)/2$. Cette valeur critique marque la transition semi-métal \leftrightarrow isolant de bandes. Il est intéressant de regarder la relation de dispersion au voisinage du point de fusion \vec{D}_0 . En effectuant un développement en $\vec{k} = \vec{D}_0 + \vec{q}$, l'Hamiltonien modifié de basse énergie s'écrit :

$$H_{modif} = \begin{pmatrix} 0 & -icq_x + \frac{q_y^2}{2m} \\ icq_x + \frac{q_y^2}{2m} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

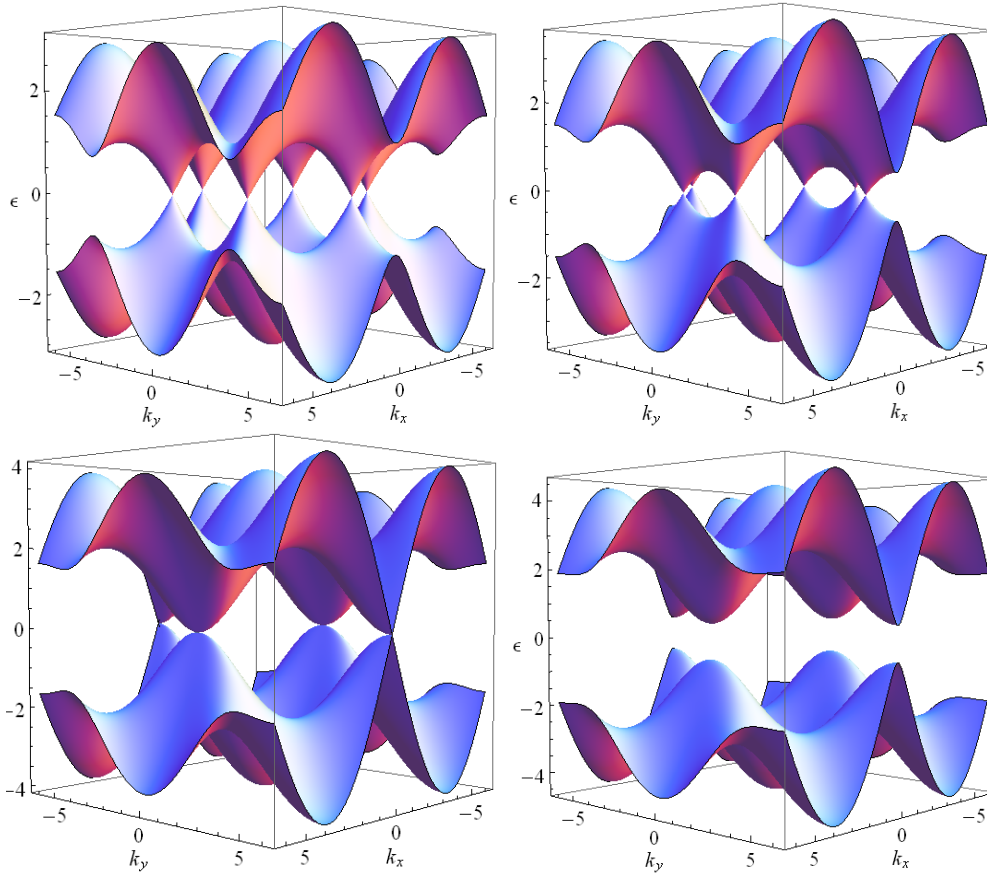


FIGURE 2.1: Relations de dispersion pour le réseau nid d'abeilles modifié avec $t' = t$, $t' = 1,5t$, $t' = 2t$ et $t' = 2.5t$. Quand le rapport t'/t varie de 1 à 2, les cônes de Dirac se rapprochent le long de l'axe k_y jusqu'à fusionner quand $t' = 2t$. Au delà, un gap s'ouvre. Les énergies sont données en unité de t .

où l'on a défini les termes effectifs de masse $m \equiv \frac{2}{3ta^2}$ et de célérité $c \equiv 3ta$. Les valeurs propres s'écrivent donc :

$$\epsilon = \pm \sqrt{c^2 q_x^2 + \frac{q_y^4}{4m^2}}. \quad (2.3)$$

De façon surprenante, *la relation de dispersion est donc linéaire dans une direction et quadratique dans l'autre*. On parle alors de relation de dispersion *hybride*, ou *semi-Dirac*. Certaines conséquences originales de ce comportement inhabituel ont été prédites, comme une densité d'états variant en $\sqrt{\epsilon}$, une dépendance en $T^{3/2}$ de la chaleur spécifique ou encore un comportement en $(nB)^{2/3}$ des niveaux de Landau. Ces quantités ont été calculées tout au long de la transition, dans un cadre général [41]. Toutefois, si la mesure de ces quantités peut révéler la fusion des points de Dirac, il n'est pas évident que le régime $t' = 2t$ soit atteignable en pratique dans le graphène, puisqu'il nécessiterait une déformation de la feuille telle que celle-ci serait détruite bien avant que l'effet ne puisse être vu. Les sels organiques quasi 2D α -(BEDT-TTF)₂I₃ constituent également un candidat potentiel. Il y est prédit que des cônes de Dirac y apparaîtraient et seraient susceptibles de bouger sous forte pression [42, 43]. Notons que la fusion des cônes a aussi été discutée dans le contexte des supraconducteurs à haute température critique, où le mécanisme de la transition est cette fois pilotée par des ondes de densité de charge [44]. À ce jour, la fusion des cônes de Dirac n'a pas encore été observée expérimentalement.

2.2 La fusion des cônes dans le RCDQF

Nous avons vu au chapitre précédent que la relation de dispersion du réseau carré avec un demi quantum de flux magnétique par maille (RCDQF) :

$$\epsilon(\vec{k}) = \pm 2\sqrt{\cos^2 ak_x + \cos^2 ak_y} \quad (2.4)$$

possède, comme le graphène, deux cônes de Dirac (figure 1.6). La question de savoir si la fusion des cônes y est possible semble alors naturelle. À vrai dire, celle-ci est double, puisqu'une réponse par l'affirmative exige que l'on propose un mécanisme de déplacement des cônes. Notons en effet qu'une manipulation naïve des paramètres de saut ne change en rien la position des points de Dirac ici. En revanche, la position des points de Dirac étant donnée par $\epsilon(\vec{k}) = 0$, on remarque qu'il suffit d'ajouter un terme r sous la racine de l'expression (2.4) pour décaler la position des points de Dirac. Puisque les points \vec{C} et \vec{C}' sont alignés suivant l'axe k_y , la relation de dispersion devient alors :

$$\epsilon(\vec{k}) = \pm 2t\sqrt{\cos^2 ak_x + (\cos ak_y - r)^2} \quad (2.5)$$

où r est un paramètre qui modifie la distance entre les points de Dirac. Des spectres d'énergie sont représentés figure 2.2 pour différentes valeurs de r , la fusion des cônes étant atteinte pour $r = 1$. Nous donnons maintenant une interprétation physique

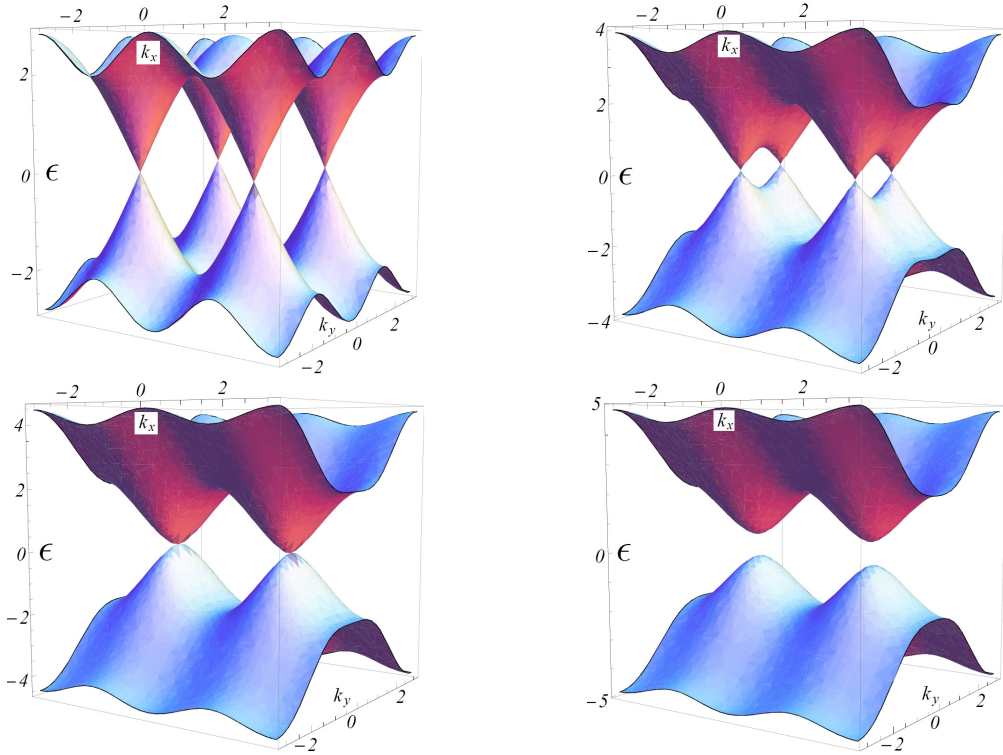


FIGURE 2.2: Évolution du spectre d'énergie en unité de t du RCDQF quand un potentiel alterné uniaxial est appliqué $(-1)^m \delta$. Les quatre figures montrent la relation de dispersion pour des valeurs $r = \delta/2t = 0, r = 0,7, r = 1$ et $r = 1,2$. Deux zones de Brillouin sont représentées dans la direction k_x .

du paramètre r en récrivant l'Hamiltonien liaisons-fortes du système :

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = -t \begin{pmatrix} 2(\cos ak_y - r) & 1 + e^{-2iak_x} \\ 1 + e^{2iak_x} & 2(r - \cos ak_y) \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Ce nouvel Hamiltonien décrit en fait le RCDQF avec un potentiel alterné uniaxial sur site d'amplitude δ , et où $r = \pm\delta/2t$. Ce système est schématisé sur la figure 2.3. En présence du potentiel alterné, les points de Dirac sont maintenant situés

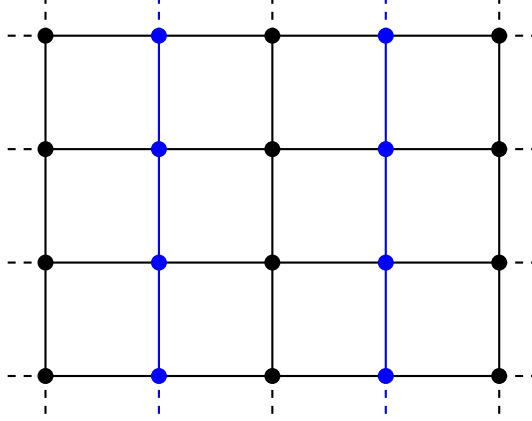


FIGURE 2.3: Réseau carré avec un demi quantum de flux par plaquette et un potentiel sur site alterné d'amplitude $\pm\delta$ représenté par des points bleus et noirs. La relation de dispersion d'un tel système présente des cônes de Dirac qui peuvent fusionner.

en $\vec{D}_\xi = (\pi/2a, \xi \arccos r/a)$. Un développement au second ordre de l'Hamiltonien autour de ces points donne :

$$\mathcal{H}(\vec{D}_\xi + \vec{q}) = 2ta \begin{pmatrix} \xi\sqrt{1-r^2}q_y + r\frac{q_y^2}{2} & -iq_x \\ iq_x & -\xi\sqrt{1-r^2}q_y - r\frac{q_y^2}{2} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

ce qui mène à la relation de dispersion aux petits \vec{q} suivante (on néglige les termes d'ordre 2 dans l'Hamiltonien) :

$$\epsilon(\vec{D}_\xi + \vec{q}) = \xi \sqrt{c_x^2 q_x^2 + c_y^2 q_y^2} \quad (2.8)$$

où les célérités ont été redéfinies comme $c_x = 2ta$ et $c_y = 2ta\sqrt{1-r^2}$. Quand r augmente, les deux cônes deviennent anisotropes à cause du terme de célérité c_y dans la direction y le long de laquelle sont alignés les cônes. Pour $r = 1$, les cônes ont fusionné en un seul point $\vec{D}_0 = (\pi/2a, 0)$, le terme c_y est alors nul. Il faut donc tenir compte des termes d'ordre q_y^2 dans l'Hamiltonien. Au point de fusion, l'Hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H}_0(\vec{q}) = 2 \begin{pmatrix} \frac{q_y^2}{2m} & -ic_x q_x \\ c_x q_x & -\frac{q_y^2}{2m} \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

où le terme de masse vaut $m \equiv 1/2ta^2$. Cet Hamiltonien engendre une relation de dispersion semi-Dirac, parce qu'elle est linéaire suivant x et quadratique suivant y , soit :

$$\epsilon(\mathbf{q}) = \pm \sqrt{c_x^2 q_x^2 + \frac{q_y^4}{4m^2}}, \quad (2.10)$$

qui est de la même forme que celle trouvée pour le graphène en (2.3).

2.3 Une même transition pour les différents systèmes

Nous venons de montrer que comme pour le graphène, il est possible de faire bouger les cônes de Dirac et de les faire fusionner dans le RCDQF. Toutefois, le mécanisme de fusion y est tout à fait différent et original : dans le cas du graphène [11] (comme dans celui des sels organiques [42]), il s'agit de créer une asymétrie en déformant le système de façon à augmenter la valeur d'un paramètre de saut dans une direction, la fusion des cônes étant alors atteinte pour $t' = 2t$ dans le cas du graphène. Dans le RCDQF, nous avons montré que la transition est pilotée par un potentiel extérieur alterné d'amplitude $\pm\delta$ qui ne change pas la symétrie du problème. Toutefois, près de la transition, les deux systèmes se comportent de la même façon et peuvent être décrits avec le même Hamiltonien effectif qui a été développé ailleurs [41]. En effet, il a été montré que la fusion des cônes de Dirac pouvait être décrite à basse énergie par l'Hamiltonien effectif adimensionné \mathcal{H}_{fc} général suivant :

$$\mathcal{H}_{fc}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta + \frac{q_{\parallel}^2}{2m^*} - ic_{\perp}q_{\perp} \\ \Delta + \frac{q_{\parallel}^2}{2m^*} + ic_{\perp}q_{\perp} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

En faisant varier le produit $m^*\Delta$ des valeurs négatives aux valeurs positives (on prend $m^* > 0$), cet Hamiltonien décrit une transition qui sépare une phase semi-métallique avec deux cônes de Dirac d'une phase isolante de bandes. A la transition, $\Delta = 0$, les cônes ont fusionné et la relation de dispersion est de type semi-Dirac. Au delà de la transition, un gap 2Δ s'ouvre. Cet Hamiltonien est très général, puisqu'il ne dépend pas de la structure même du cristal ; ses différents paramètres peuvent être reliés aux paramètres microscopiques de n'importe quel système 2D. De façon similaire à un travail récent [41], nous pouvons écrire un tel Hamiltonien pour le RCDQF sous la forme (on prend $t = a = 1$) :

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \Delta + \frac{q_{\parallel}^2}{2m^*} & -ic_{\perp}q_{\perp} \\ ic_{\perp}q_{\perp} & -\Delta - \frac{q_{\parallel}^2}{2m^*} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

avec $q_{\parallel} = q_y$ et $q_{\perp} = q_x$. Cet Hamiltonien est en fait tout à fait similaire à l'Hamiltonien (2.11) après une rotation \mathcal{R} dans l'espace des pseudo-spins :

$$\mathcal{R} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbb{I} - i\sigma_y) \quad \text{où} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

est une matrice de Pauli. La comparaison de (2.12) avec le développement de (2.6) autour du point $\vec{D}_0 = (\pi/2, 0)$ implique $\Delta = 2(r - 1)$. Quand $m^*\Delta < 0$, le spectre présente deux points de Dirac séparés de $2\sqrt{-2m^*\Delta}$ et la célérité c_{\parallel} au voisinage de ces points est $c_{\parallel} = \sqrt{-2\Delta/m^*}$.

2.4 Niveaux de Landau anormaux et déplacement des cônes

Dans cette section, nous discutons le comportement original des niveaux de Landau le long de la transition que nous étudierons numériquement dans le cadre

du spectre de Hofstadter. Une analyse quantitative analytique peut être menée à l'aide de l'Hamiltonien de transition précédemment introduit. Nous en donnerons ici les grandes lignes.

2.4.1 Le spectre de Hofstadter modifié

On cherche à calculer le spectre de Hofstadter pour le réseau carré en présence d'un potentiel uniaxial alterné $\pm\delta$. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\begin{aligned} \epsilon\phi_{m,n} = & -t\phi_{m,n+1}e^{-2i\pi mf} - t\phi_{m,n-1}e^{2i\pi mf} \\ & -t\phi_{m+1,n} - t\phi_{m-1,n} + (-1)^m\delta\phi_{m,n} \end{aligned} \quad (2.14)$$

où $\phi_{m,n}$ est l'amplitude de la fonction d'onde au site (m, n) , t est le paramètre de saut entre plus proches voisins et f est le flux magnétique à travers une plaquette élémentaire du réseau carré en unité du quantum de flux magnétique h/e . Considérons dans un premier temps le cas des flux de la forme $f = p/q$ où q est pair. Il y a donc q sites inéquivalents par cellule unité, celle-ci étant dorénavant q fois plus grande dans la direction x , de sorte que le théorème de Bloch implique :

$$\phi_{m,n} = \phi_{l,n}^j = \psi_{\vec{k}}^j e^{i(k_x l q + k_y n) n a} \quad (2.15)$$

avec la condition de périodicité :

$$\psi_{\vec{k}}^{q+1} = \psi_{\vec{k}}^1. \quad (2.16)$$

L'équation de Schrödinger devient :

$$\begin{aligned} j = 1 \quad \epsilon\psi_{\vec{k}}^1 &= -t \left(\psi_{\vec{k}}^q e^{-iaqk_x} + \psi_{\vec{k}}^2 + 2 \cos(k_y a - 2\pi \frac{p}{q}) \psi_{\vec{k}}^1 - \delta \psi_{\vec{k}}^{(1)} \right) \\ j \in [2; q-1] \quad \epsilon\psi_{\vec{k}}^j &= -t \left(\psi_{\vec{k}}^{j-1} + \psi_{\vec{k}}^{j+1} + 2 \cos(k_y a - 2\pi j \frac{p}{q}) \psi_{\vec{k}}^j + (-1)^j \delta \psi_{\vec{k}}^{(j)} \right) \\ j = q \quad \epsilon\psi_{\vec{k}}^q &= -t \left(\psi_{\vec{k}}^{q-1} + \psi_{\vec{k}}^1 e^{iaqk_x} + 2 \cos(k_y a - 2\pi p) \psi_{\vec{k}}^q + (-1)^q \delta \psi_{\vec{k}}^{(q)} \right) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Pour un flux $f = p/q$, nous avons donc un système $q \times q$ à diagonaliser pour obtenir q valeurs propres. Si q est impair, les sites indexés par un m pair ou impair sont inéquivalents, et la cellule unité a une taille deux fois plus grande dans la direction x , soit $2qa$. Le système d'équations (2.17) reste inchangé par substitution $q \rightarrow 2q$, puisque dans ce cas $j = 1, \dots, 2q$, et la périodicité du théorème de Bloch s'écrirait alors $\psi_{\vec{k}}^{2q+1} = \psi_{\vec{k}}^1$. En pratique, la résolution du problème pour q pair uniquement est suffisante, puisque l'écart entre deux valeurs de flux est arbitrairement petit.

Les figures 2.4 (a), (b) et (c) montrent l'évolution du spectre de Hofstadter quand l'amplitude du potentiel alterné δ augmente. La figure 2.4 (a) représente le spectre de Hofstadter déjà introduit au chapitre précédent, pour lequel aucun potentiel n'a été appliqué. Ainsi, pour $\delta = 0$, la région du spectre au voisinage du demi quantum de flux est très similaire à celle du graphène à bas champ comme déjà discuté au chapitre 1. À cause de la présence de deux points de Dirac, le spectre, au voisinage de $f = 1/2$, consiste en une série de niveaux de Landau doublement dégénérés variant comme $\sqrt{n\varphi}$, où $\varphi = |f - 1/2|$ et n est un entier positif. Pour obtenir le spectre de la figure 2.4 (b), un potentiel d'amplitude $\delta = t$ a été appliqué, (soit $r = 0,5$). Une différence qualitative remarquable avec le papillon de Hofstadter du dessus est que le spectre est maintenant beaucoup plus

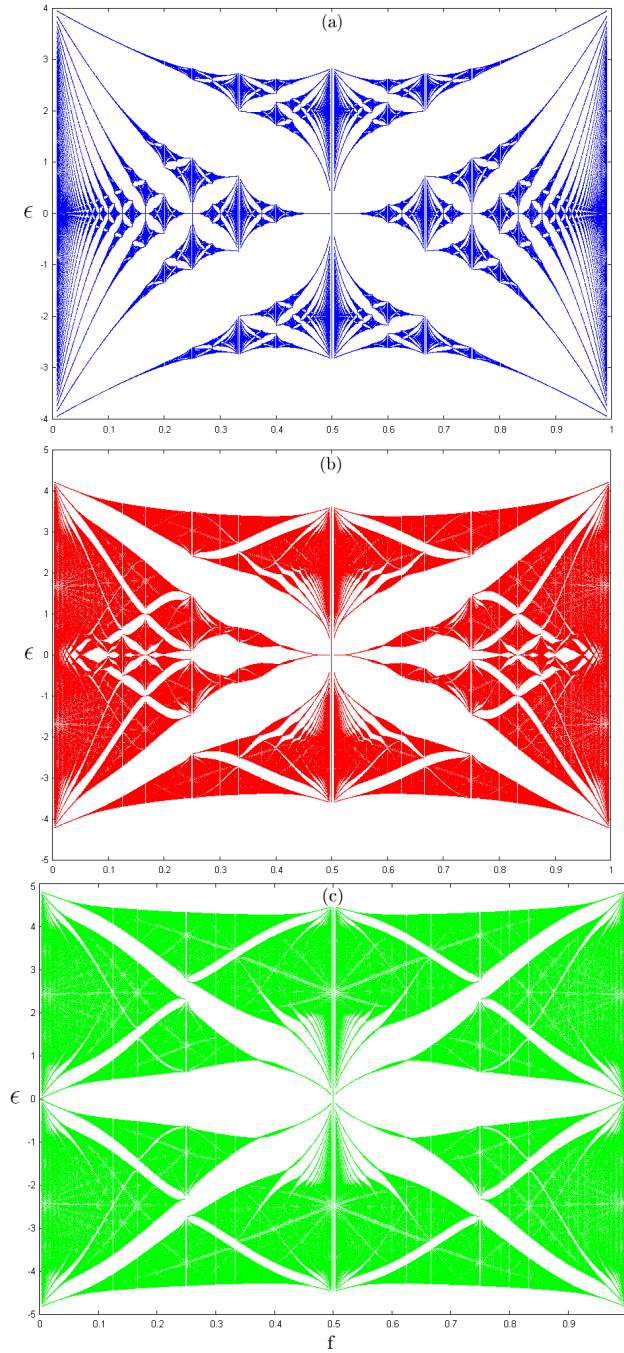


FIGURE 2.4: Évolution du spectre de Hofstadter en présence d'un potentiel alterné uniaxial sur site caractérisé par le paramètre $r = \delta/2t$. (a) $r = 0$, le spectre est le papillon de Hofstadter habituel. En centre de bande ($\epsilon = 0$) près de $f = 1/2$, les niveaux d'énergie varient comme $\sqrt{n\varphi}$, où $\varphi = |f - 1/2|$. (b) $r = 1/2$, la dégénérescence des niveaux de Landau près de $\epsilon = 0$ et $f = 1/2$ a été levée. (c) $r = 1$, les cônes de Dirac du RCDQF ont fusionné. Les niveaux au voisinage de $\epsilon = 0$ et $f = 1/2$ ont le comportement $[(n + 1/2)\varphi]^{2/3}$ typique de la transition. On a pris $t = 1$.

dense, nombre de gaps ayant été remplis. À bas champ, les niveaux de Landau provenant des énergies positives et négatives se croisent. La partie du spectre qui nous intéresse particulièrement est la région proche du demi quantum de flux par plaquette ($f \sim 0,5$), pour laquelle les points de Dirac se sont rapprochés. L'ajout du potentiel alterné a levé la dégénérescence de vallée dans cette région. Très près

de $f = 1/2$, les niveaux sont encore dégénérés. Pour $r = 1$ (2.4 (c)), les deux cônes du RCDQF ont fusionné. Les niveaux de Landau ont totalement perdu leur dégénérescence de vallée. Une analyse quantitative plus fine de cette région montre que les niveaux se comportent exactement en $[(n + 1/2)\varphi]^{2/3}$, comme attendu à la transition [11]. En fait, le calcul des niveaux de Landau peut être mené grâce à l'Hamiltonien \mathcal{H}_{fc} qui décrit la fusion des cônes, et ce pour n'importe quelle valeur de r . Dans la section suivante, nous dressons les grandes lignes du calcul analytique des niveaux de Landau à l'approche de la transition.

2.4.2 Analyse semiclassique des niveaux de Landau le long de la transition

Afin de décrire quantitativement la fusion des points de Dirac depuis le spectre de Hofstadter $r = 0$ jusqu'à la transition topologique $r = 1$, nous fixons les célérités $c_{\parallel} = c_y = 2\sqrt{1 - r^2}$ et $c_{\perp} = c_x = 2$. Ensuite, le terme de masse m^* doit être fixé comme $m^* = -2\Delta/c_{\parallel}^2 = 1/(1 + r)$ (voir la référence [41], pour une discussion de ce choix). La position approchée des points de Dirac est alors donnée par $q_D = \pm 2\sqrt{\frac{1-r}{1+r}}$ qui diffère peu de la position exacte $q_D = \pm \arccos r$. Ensuite, nous utilisons l'Hamiltonien de transition (2.11) dont les propriétés en champ magnétique sont connues [11], pour décrire l'évolution du spectre à l'approche de la fusion des cônes. Quand r est petit, le spectre près de $\epsilon = 0$ peut toujours être décrit par deux cônes indépendants avec les célérités modifiées $c_{\perp} = 2$ et $c_{\parallel} = 2\sqrt{1 - r^2}$. Dans ce cas, le spectre est quantifié en deux séries de niveaux de Landau dégénérés de vallée avec la relation de dispersion $\epsilon_n = \pm\sqrt{2nc_{\parallel}c_{\perp}eB}$ [35], ce qui se réécrit :

$$\epsilon_n(\varphi) = \pm 4(1 - r^2)^{1/4} \sqrt{\pi n \varphi} \quad (2.18)$$

comme confirmé sur la figure 2.5 (a). Quand r augmente, le domaine de validité de cette expression se réduit. Les figures 2.5 (b) et 2.5 (c) illustrent la levée de dégénérescence de tous les niveaux de Landau avec l'augmentation du champ magnétique. Ainsi, quand r augmente, les deux vallées se couplent et la dégénérescence est progressivement levée. Le spectre au voisinage du demi quantum de flux peut alors être obtenu par des considérations semiclassiques, en quantifiant l'aire \mathcal{S} des orbites cyclotron par la règle de Bohr-Sommerfeld $\mathcal{S} = 2\pi(n + \gamma)eB$. Ces méthodes seront détaillées et réutilisées au chapitre 5. Le facteur γ qui intervient dans cette quantification a pour expression [45] :

$$\gamma = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma} d\vec{k} \langle u_{\vec{k}} | i\nabla | u_{\vec{k}} \rangle \quad (2.19)$$

où le deuxième terme est une *phase géométrique*, appelée phase de Berry, qu'accumule la particule lors d'une évolution adiabatique du système sur un circuit fermé (ici une orbite cyclotron). Le ket $|u_{\vec{k}}\rangle$ représente un état de Bloch, et Γ est le contour d'une orbite classique dans l'espace réciproque. Dans le problème simple d'un oscillateur harmonique à une dimension, la phase de Berry est nulle, et γ vaut $1/2$. Dans le graphène, comme dans le réseau carré à demi flux, la structure

spinorielle des fonctions de Bloch¹, implique $\oint_{\Gamma} d\vec{k} \langle u_{\vec{k}} | i\nabla | u_{\vec{k}} \rangle = \pm\pi$ autour d'un point de Dirac, et donc $\gamma = 0$. Lorsque la fusion des cônes a lieu, on retrouve la valeur usuelle $\gamma = 1/2$, les cônes de Dirac ayant disparu. C'est pour cette raison que la fusion des cônes marque une transition qualifiée de topologique. Il est donc important de distinguer la région en dessous du point selle $\epsilon < -\Delta$ pour laquelle on peut définir un contour autour d'un point de Dirac, de la région au-dessus du point selle $\epsilon > -\Delta$, pour laquelle on ne le peut plus. En identifiant dans les deux cas, l'aire cyclotron ainsi quantifiée avec son expression explicite calculée par ailleurs [41], on obtient une équation sur l'énergie, en fonction du flux magnétique et du potentiel alterné :

1. $\epsilon < -\Delta = 2(1-r)$, on a $\gamma = 0$ et l'on trouve :

$$\sqrt{\epsilon - \Delta} \left\{ (\epsilon + \Delta) K \left[R \left(\frac{\epsilon}{\Delta} \right) \right] - \Delta E \left[R \left(\frac{\epsilon}{\Delta} \right) \right] \right\} = 6\pi^2 \sqrt{\frac{1+r}{2}} n\varphi \quad (2.20)$$

2. $\epsilon > -\Delta$, on a $\gamma = 1/2$ et l'on trouve :

$$\sqrt{\epsilon} \left\{ (\epsilon + \Delta) K \left[\frac{1}{R(\epsilon/\Delta)} \right] - 2\Delta E \left[\frac{1}{R(\epsilon/\Delta)} \right] \right\} = 3\pi^2 \sqrt{1+r} \left(n' + \frac{1}{2} \right) \varphi \quad (2.21)$$

où $K(x)$ et $E(x)$ sont des intégrales elliptiques respectivement de première et de seconde espèce, et où l'on a posé $R(x) = \sqrt{2x/(x-1)}$. Dans la limite $\epsilon \ll -\Delta$ la première expression redonne bien le comportement en racine carrée (2.18) typique d'un système à cônes de Dirac. À la transition, c'est à dire dans la limite $\Delta \rightarrow 0$, on trouve le comportement des niveaux de Landau suivant :

$$\epsilon = \pm\alpha \left[\left(n' + \frac{1}{2} \right) \varphi \right]^{2/3} \quad (2.22)$$

avec la constante numérique $\alpha = 2[36 \pi^5 / \Gamma(1/4)^4]^{1/3} \simeq 7.99$. La loi de puissance donnée par le résultat (2.22) est une signature de la fusion des cônes, qui avait d'abord été découverte dans le contexte du graphène [11]. Nous révélons ici ce phénomène dans un système de nature tout à fait différente. Pour finir, les figures 2.5 (a-d) montrent que ces résultats analytiques sont tout à fait en accord avec les résultats numériques, du moins dans leur région de validité, c'est à dire en dehors du voisinage du point selle $\epsilon = -\Delta = 2(1-r)$. On peut trouver l'ensemble de ces résultats dans l'article [20].

1. Dans le graphène, les fonctions de Bloch sont de la forme $|u_{\vec{k}}\rangle = 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi(\vec{k})} \end{pmatrix}$ pour la bande de conduction et $|u_{\vec{k}}\rangle = 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi(\vec{k})} \\ 1 \end{pmatrix}$ pour la bande de valence.

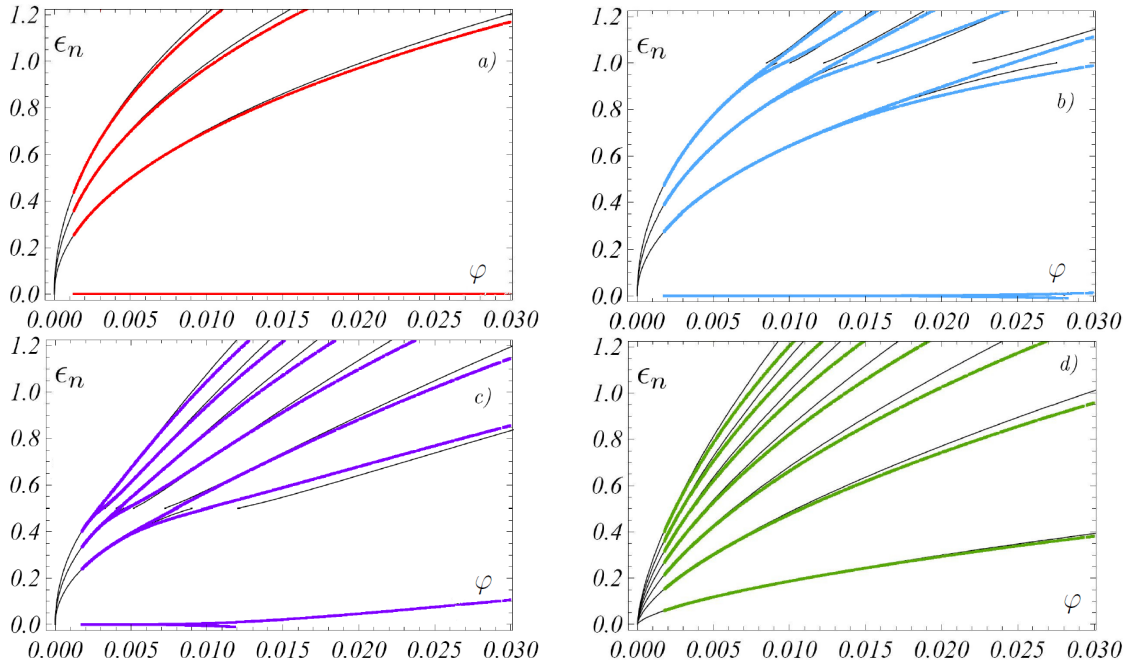


FIGURE 2.5: Dépendance en flux des niveaux d'énergie du modèle liaisons-fortes sur le RCDQF avec un potentiel uniaxial alterné caractérisé par $r = \delta/2t$. (a) $r = 0$, les niveaux varient $\sqrt{n\varphi}$. (b) $r = 0,5$, et c) $r = 0,75$: la dégénérescence de vallée des niveaux d'énergie est progressivement levée. (d) $r = 1$, les cônes de Dirac de la relation de dispersion du RCDQF ont fusionné, les niveaux d'énergie varient en $(n + 1/2)\varphi^{2/3}$. Les lignes noires sont les résultats semiclassiques analytiques obtenus par la quantification des orbites cyclotron.

Chapitre 3

Fermions de Dirac sans masse sur un ruban - une étude numérique

On se surprend à marcher sur le bord du trottoir comme on faisait enfant, comme si c'était la marge qui comptait, le bord des choses.

La première gorgée de bière,

Philippe Delerme

Sommaire

| | | |
|------------|---|-----------|
| 3.1 | Des rubans en liaisons-fortes | 38 |
| 3.1.1 | Des rubans de graphène | 38 |
| | Les rubans zigzag | 38 |
| | Les rubans armchair | 39 |
| 3.1.2 | Des rubans à bords plats pour le RCDQF | 41 |
| 3.1.3 | Relation de dispersion de volume et structure de bande des rubans | 45 |
| 3.2 | États de bord et champ magnétique | 46 |
| 3.2.1 | Des rubans sous champ magnétique fort | 46 |
| 3.2.2 | Discussion qualitative | 47 |
| | États de bord : cas zigzag | 49 |
| | États de bord : cas armchair | 50 |
| | États de bord : cas du réseau carré au demi quantum de flux | 51 |
| | Les états de bord et l'effet Hall quantique | 54 |
| 3.3 | Conclusions du chapitre et perspectives | 55 |

Les propriétés électroniques étonnantes du graphène font de ce matériau un candidat pour de futurs composants en nano-électronique [3, 12, 46] et en spintronique [13]. Dans ce contexte, la compréhension de l'effet des bords devient indispensable. De nombreuses études récentes se sont alors penchées sur différents aspects de l'effet des bords dans le graphène, en considérant par exemple, des points quantiques, des anneaux ou des rubans. En particulier, une forte activité s'est développée sur les questions de transport dans les nanorubans de graphène, ces derniers possédant des propriétés de transport originales et différentes de celles connues dans les nanotubes de carbone [47]. Par exemple, différents travaux théoriques et expérimentaux ont montré qu'un ruban de graphène propre dont la largeur L est très grande devant sa longueur l , et connecté à deux réservoirs comportant un grand nombre de canaux de conduction, se comporte du point de vue du transport comme un conducteur diffusif cohérent (sa conductance est $G = 4e^2/h\pi \times L/l$ et le facteur de Fano $F = 1/3$), pourvu que l'on explore la région proche du point de Dirac [48, 49, 50, 51]. L'origine de cette surprenante coïncidence reste à ce jour une question ouverte. Par ailleurs, si ce phénomène a été observé clairement dans des rubans très larges pour lesquels les effets des bords sont négligeables, d'autres effets apparaissent pour des rubans plus étroits pour lesquels il convient de considérer la *nature du bord*, c'est-à-dire la façon dont celui-ci est découpé. En effet, chaque type de bord impliquant des contraintes spécifiques à la fonction d'onde, la structure de bande qui en découle en est elle aussi affectée, et par conséquent les propriétés électroniques comme le transport. Diverses études sur ce sujet révèlent par exemple que les rubans aux bords dits *zigzag* sont moins sensibles que les rubans aux bords dits *armchair* à un faible désordre d'Anderson ou un désordre de bord [52, 53]. Nous reviendrons sur ces types de bord en détail un peu plus loin.

Un aspect très important qui nous occupera dans les prochains chapitres est l'existence d'états de bord dans le graphène (et dans le RCDQF), entendons par là d'états localisés aux bords. En présence d'un champ magnétique fort, des états de bord dispersifs cette apparaissent [15, 54], et se propagent le long des bords sans possibilité de rétro-diffusion. Si ces états propagatifs, aussi appelés canaux de bord, sont bien connus dans les gaz bidimensionnels conventionnels pour être à l'origine de l'effet Hall quantique,[14, 55] leur structure dans le graphène tout comme dans le RCDQF est plus compliquée et dépend de la nature des bords [15]. De façon surprenante, il existe aussi dans ces systèmes des états de bord en l'absence de champ magnétique, mais cette existence même dépend cette fois de la nature du bord [17, 18]. La compréhension de ces états est indispensable pour appréhender correctement les propriétés électroniques comme le transport dans les nanorubans. Nous y reviendrons au chapitre 6.

Dans la suite de cette thèse, nous nous consacrerons donc exclusivement à la description des états de bord. Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux effets de bord à la fois pour le graphène et pour le réseau carré au demi quantum de flux par plaquette (RCDQF), en étudiant, dans le cadre du modèle liaisons-fortes, les spectres d'énergie de rubans de largeur finie et de longueur infinie. Trois types de bords sont étudiés : les bords dits *zigzag* et *armchair* pour le graphène, et des bords que nous qualifions de *plats* pour le RCDQF. Nous commenterons d'abord les spectres obtenus pour différentes largeurs de ruban en l'absence de champ magnétique. Ensuite, nous étudierons l'effet d'un champ magnétique fort sur les niveaux d'énergie et nous discuterons en détails l'allure des différents états de bord qui y émergent. En particulier, nous mettrons en évidence une répartition

remarquable des états de bord zigzag sous champ magnétique, et montrerons que dans le RCDQF, les états de bord présentent des caractéristiques à la fois propres aux cas zigzag et armchair.

3.1 Des rubans en liaisons-fortes

3.1.1 Des rubans de graphène

Nous commençons par nous concentrer sur les rubans de graphène, en considérant deux types de bord, *zigzag* et *armchair*, qui sont respectivement représentés sur les figures 3.1 (a) et 3.1 (b). Dans les deux cas, les bords s'étendent le long de l'axe y .

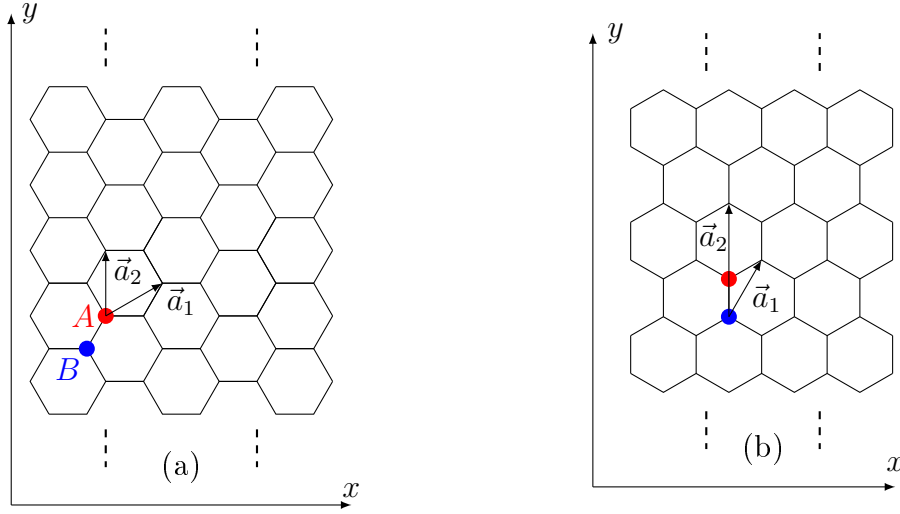


FIGURE 3.1: (a) Ruban zigzag de graphène. (b) Ruban armchair de graphène. Les deux rubans sont considérés de longueur infinie dans la direction y . Les atomes A (rouge) et B (bleu) appartiennent à la même maille. Ce choix de maille, tout comme les vecteurs de base du réseau de Bravais \vec{a}_1 et \vec{a}_2 , sont adaptés aux bords de chaque ruban.

Les rubans zigzag

La figure 3.1 (a) représente un ruban de graphène à bords zigzag s'étendant le long de l'axe y . Nous considérons un ruban comportant M mailles dans la largeur. Dans le modèle liaisons-fortes, l'équation de Schrödinger s'écrit, pour une maille de coordonnées (m, n) :

$$\begin{aligned} \epsilon \phi_{m,n}^A &= -t (\phi_{m,n}^B + \phi_{m+1,n}^B + \phi_{m,n+1}^B) \\ \epsilon \phi_{m,n}^B &= -t (\phi_{m,n}^A + \phi_{m-1,n}^A + \phi_{m,n-1}^A) \end{aligned} \quad (3.1)$$

où t est le paramètre de saut vers les plus proches voisins. Le ruban étant infini dans la direction y , le théorème de Bloch implique que les fonctions d'onde sont de la forme $\phi_{m,n} = \psi_{m,k_y} e^{i\vec{k}\vec{a}_2 n}$, où le vecteur \vec{a}_2 est représenté sur la figure 3.1 (a). On a donc simplement $\vec{k}\vec{a}_2 = k_y a_0$. L'équation de Schrödinger d'un ruban zigzag s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \epsilon(k_y) \psi_m^A &= -t (\psi_m^B + \psi_{m+1}^B + \psi_m^B e^{ik_y a_0}) \\ \epsilon(k_y) \psi_m^B &= -t (\psi_m^A + \psi_{m-1}^A + \psi_m^A e^{-ik_y a_0}) . \end{aligned} \quad (3.2)$$

L'indice m variant de 1 à M , le problème revient à diagonaliser une matrice $2M \times 2M$, ce qui s'effectue numériquement sans difficulté. Notons que le choix de maille n'est pas anodin, car il permet, par des translations sur le réseau de Bravais le long de l'axe y , de décrire exactement les bords zigzag. Cela n'aurait pas nécessairement été le cas avec d'autres choix de maille. La figure 3.2 montre les spectres d'énergie $\epsilon(k_y)$ obtenus pour des valeurs de M variant de 10 à 17. Ces spectres présentent différentes symétries déjà présentes dans l'Hamiltonien de volume discuté dans le premier chapitre. Il s'agit de la symétrie par renversement du temps, de la symétrie particule-trou et de la symétrie de sous-réseaux. L'effet sur le spectre d'énergie est noté symboliquement comme :

$$\begin{aligned}
\text{renversement du temps :} & \quad \epsilon(k_y) = \epsilon(-k_y) \\
\text{particule-trou :} & \quad \epsilon(k_y) = -\epsilon(-k_y) \\
\text{sous-réseau :} & \quad \epsilon(k_y) = -\epsilon(k_y) .
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Cette notation signifie que les spectres d'énergie de la figure 3.2 sont symétriques par rapport aux axes : vertical passant par $k_y = 0$, diagonaux, et horizontal passant par $\epsilon = 0$.

Pour chaque spectre, on peut distinguer deux bandes, chacune constituée de M sous-bandes : l'une d'énergie positive (bande de conduction), l'autre d'énergie négative (bande de valence), car le niveau de Fermi passe par $\epsilon = 0$ à dopage nul. Les spectres contiennent donc $2 \times M$ niveaux, le facteur 2 provenant du nombre d'atomes par maille et le facteur M du nombre de mailles dans la largeur du ruban. En bord de zone de Brillouin, les bandes se resserrent en un seul point à l'énergie de la singularité de Van-Hove $\epsilon = \pm t$. Pour les rubans zigzag, le seul effet de l'augmentation de la largeur des rubans, outre l'augmentation du nombre de sous-bandes, réside dans la diminution de l'écart en énergie entre les deux bandes en $K_y = -2\pi/3a_0$ et $K'_y = 2\pi/3a_0$. Dans la limite d'une largeur macroscopique, les deux bandes se touchent de façon linéaire, et l'on retrouve les deux cônes de Dirac du graphène en volume.

Une autre information importante que nous donnent ces spectres est l'apparition de deux états d'énergie nulle. Ces deux niveaux relient les points de Dirac vers l'extérieur de la zone de Brillouin [17, 18]. Ces états ne sont pas prévus par le calcul de structure de bande du volume (voir chapitre 1) et ne disparaissent pas quand la largeur du système augmente. Il ne s'agit donc pas d'un effet de taille, mais d'un effet de bord : ces deux niveaux d'énergie correspondent à des *états de bord* [17, 18], c'est à dire que la fonction d'onde qui leur est associée est confinée sur les bords. Un tel résultat peut être établi dans le cadre de l'équation de Dirac [56] ; nous reprenons la démonstration dans l'annexe A. Par ailleurs, l'existence de ces états de bord n'est pas sans lien avec une propriété topologique des fonctions de Bloch en volume [19], qui sera l'objet du chapitre 6.

Les rubans armchair

La figure 3.1 (b) représente un ruban de graphène à bords armchair, s'étendant le long de l'axe y , et possédant M mailles dans la largeur. De même que pour le cas zigzag, le choix de la maille A - B permet de décrire intégralement les bords du ruban armchair par des translations sur le réseau de Bravais le long de l'axe y . Dans le modèle liaisons-fortes, l'équation de Schrödinger pour une maille de

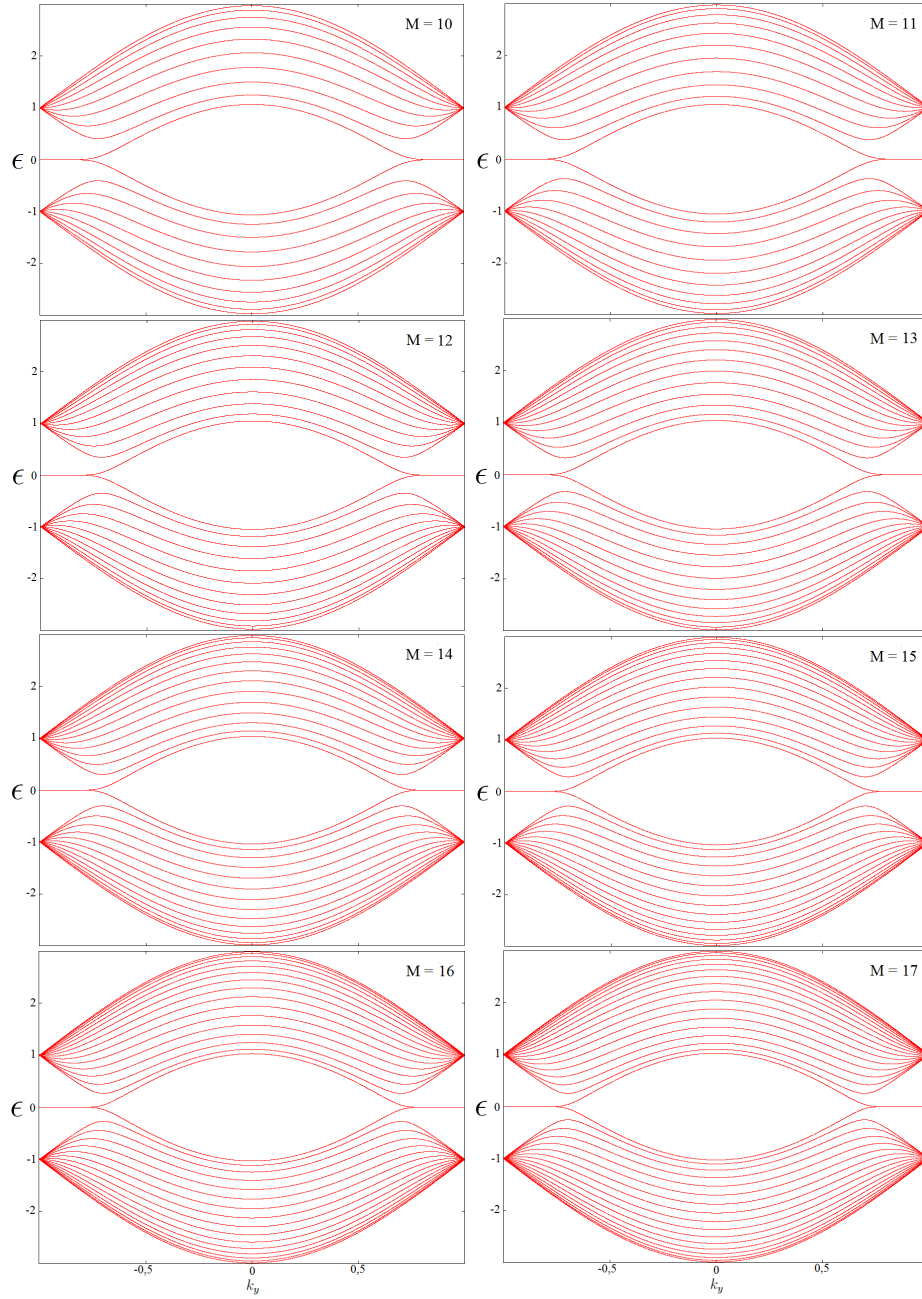


FIGURE 3.2: Spectres d'énergie liaisons-fortes de rubans de graphène zigzag, le nombre M de mailles dans la largeur variant de 10 à 17. Les énergies sont donnée en unité de t et k_y en unité de π/a_0 .

coordonnées (m, n) a donc une forme différente de celle du ruban zigzag :

$$\begin{aligned}\epsilon\phi_{m,n}^A &= -t(\phi_{m,n}^B + \phi_{m+1,n}^B + \phi_{m-1,n+1}^B) \\ \epsilon\phi_{m,n}^B &= -t(\phi_{m,n}^A + \phi_{m-1,n}^A + \phi_{m+1,n-1}^A) .\end{aligned}\quad (3.4)$$

Le ruban étant périodique dans la direction y , le théorème de Bloch implique des fonctions d'onde de la forme $\phi_{m,n} = \psi_{m,k_y} e^{i\vec{k}\vec{a}_2 n}$ où le vecteur \vec{a}_2 est représenté sur la figure 3.1(b). Le choix des vecteurs de bases nous donne cette fois $\vec{k} \cdot \vec{a}_2 = k_y 3a$. L'équation de Schrödinger d'un ruban armchair s'écrit enfin :

$$\begin{aligned}\epsilon(k_y)\psi_m^A &= -t(\psi_m^B + \psi_{m+1}^B + \psi_{m-1}^B e^{i3ak_y}) \\ \epsilon(k_y)\psi_m^B &= -t(\psi_m^A + \psi_{m-1}^A + \psi_{m+1}^A e^{-i3ak_y}) .\end{aligned}\quad (3.5)$$

Les spectres d'énergie sont obtenus numériquement et montrés sur la figure 3.3 pour des valeurs de M variant de 10 à 17, comme pour les rubans zigzag. Les spectres présentent les mêmes symétries $\epsilon(k_y) = \epsilon(-k_y)$, $\epsilon(k_y) = -\epsilon(-k_y)$ et $\epsilon(k_y) = -\epsilon(k_y)$. Ils se composent également de deux bandes, l'une de conduction, l'autre de valence, elles-mêmes constituées de M sous bandes. L'allure générale est toutefois très différente de celle des spectres zigzag. En particulier, les états de bord d'énergie nulle ont disparu. Les spectres présentent un gap de confinement en $k_y = 0$ qui tend à s'annuler quand la largeur du système augmente. Dans la limite macroscopique, les deux bandes se touchent de façon linéaire de sorte qu'il n'apparaît qu'un cône de Dirac au lieu de deux, comme c'est le cas en volume ainsi que pour les rubans zigzag. Une autre spécificité demeure dans la fermeture du gap pour des valeurs très particulières de M . En effet, des états ferment le gap de façon linéaire pour toutes les valeurs de M de la forme $M = 3m - 1$. Nous comprenons que dans la limite de grande largeur, ces états deviennent indistinguables des autres états, dans la mesure où le gap s'est refermé ; par conséquent, ces états ne sont pas des états de bord, comme il en existe pour les rubans zigzag, mais résultent d'un effet de taille du système. Leur existence peut également être comprise dans le cadre de l'équation de Dirac [56].

Notons enfin que des travaux expérimentaux ont mis en évidence l'existence de bords de type zigzag et armchair à la surface du graphite par des mesures de microscopie STM. L'existence d'états de bord dans le cas zigzag, et non dans celui armchair, a été confirmée par des mesures locales de spectroscopie STS [57, 58]. Une étude plus récente montre que ces deux types de bord ne sont pas les plus stables, le bord zigzag "reconstruit", aussi appelé *reczag*, demeurant alors le plus stable dans le graphène [59, 60]. Une activité expérimentale conséquente s'est développée pour réaliser des rubans aux bords les mieux définis possibles. Une piste prometteuse consiste à ouvrir un nanotube de carbone dans le sens de la longueur [61]. Très récemment, une collaboration franco-germano-suisse est parvenue à synthétiser par voie organique des nanorubans dont la largeur et le type de bord est contrôlable [62], faisant de la physique des rubans de graphène une réalité expérimentale.

La piste des cristaux photoniques pour simuler le modèle liaisons-fortes dans le graphène a très récemment été explorée, et des pics dans la densité d'états au voisinage des bords zigzag ont été observés, (contrairement aux bords armchair), révélant ainsi l'existence d'états de bord [63]. De nombreux travaux théoriques récents se sont également attelés à l'étude des états de bord dans le graphène en l'absence de champ magnétique, en tenant par exemple compte d'un potentiel alterné sur site [64], de perturbations de surface [65], du dopage aux bords [66], du couplage spin-orbite [67], d'un terme de saut au second voisin [68] ou encore de bords dont la structure est plus complexe que ceux zigzag ou armchair [69, 70, 71, 72, 73].

Dans la suite, nous discutons les spectres d'énergie du RCDQF découpé en rubans.

3.1.2 Des rubans à bords plats pour le RCDQF

Nous considérons maintenant des rubans pour le RCDQF en imaginant des bords *plats*, comme illustrés sur la figure 3.4 Nous avons insisté dans le chapitre 1 sur le fait que le RCDQF possède deux atomes par maille, ce qui restreint les rubans à un nombre pair de chaînes dans la largeur. Afin de s'intéresser aussi au cas où

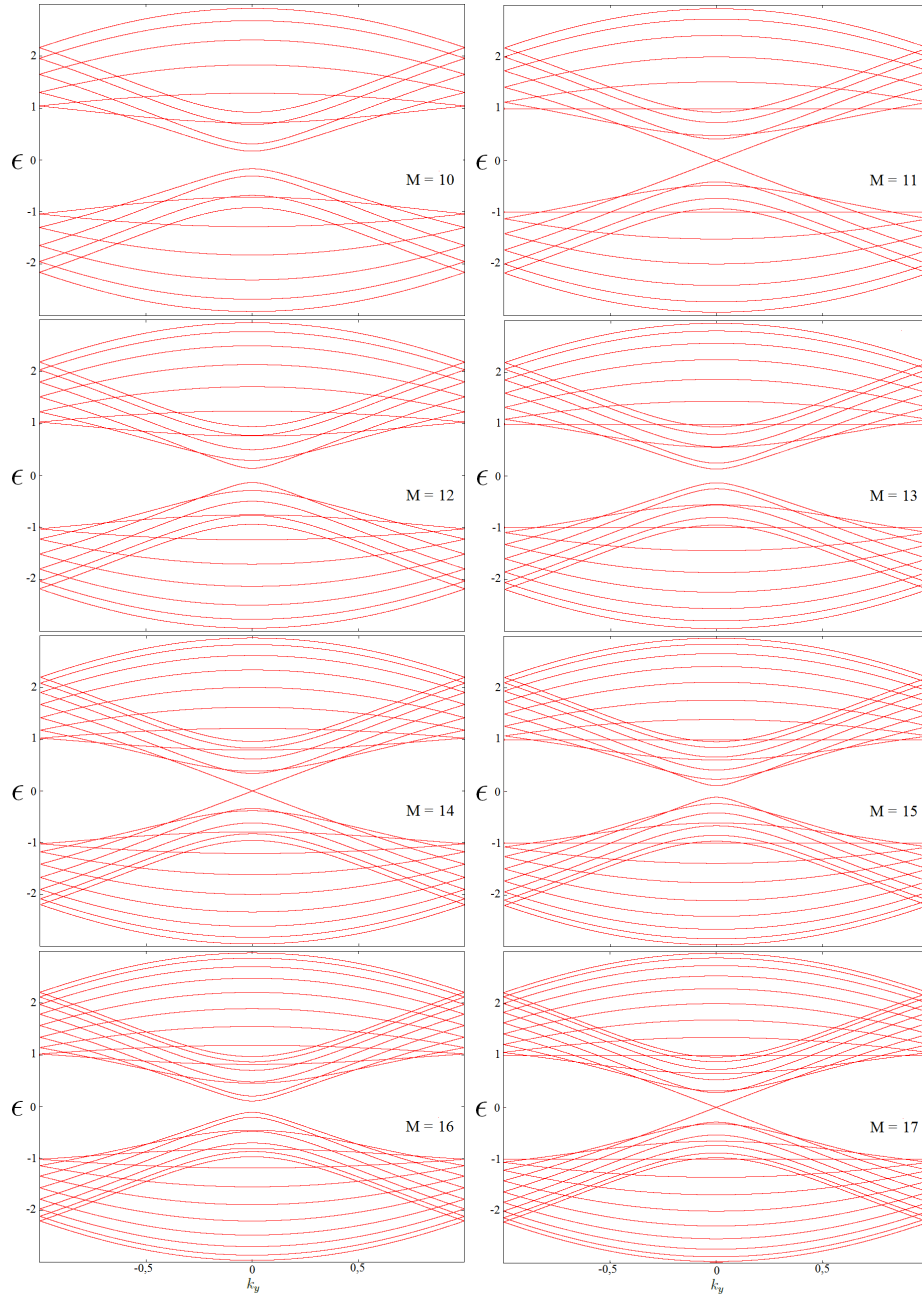


FIGURE 3.3: Spectre d'énergie liaisons-fortes de rubans de graphène armchair, le nombre M de mailles dans la largeur variant de 10 à 17. Le gap se ferme pour les valeurs $M = 3m - 1$ soit $M = 11, M = 14$ et $M = 17$ ici. Les énergies sont données en unité de t et k_y en unités de $\pi/3a$.

le nombre de chaînes est impair, nous revenons sur le problème de Hofstadter présenté dans le chapitre 1, en gardant la même jauge de Landau, puisqu'elle assure la périodicité du système dans la direction y . Ainsi, le nombre de sites dans la largeur peut être pair ou impair. Nous rappelons l'équation de Schrödinger pour une maille de coordonnées (m, n) :

$$\epsilon\phi_{m,n} = -t((-1)^m\phi_{m,n+1} + (-1)^m\phi_{m+1,n-1} + \phi_{m+1,n} + \phi_{m-1,n}) . \quad (3.6)$$

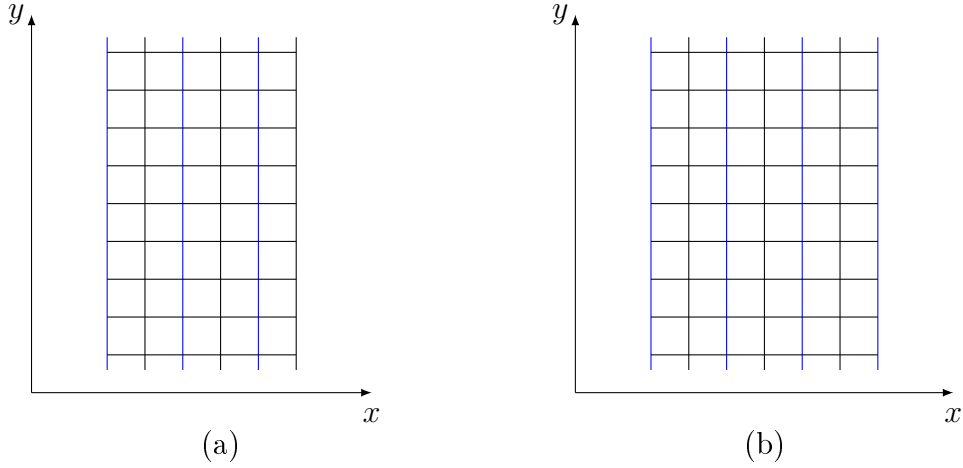


FIGURE 3.4: Réseau carré au demi flux découpé en rubans avec un nombre (a) pair et (b) impair de chaînes dans la largeur. Les traits bleus relient les sites B entre eux par un terme de saut $-t$ au lieu de $+t$ à cause du déphasage Aharonov-Bohm induit par le demi quantum de flux par plaquette.

Nous utilisons le théorème de Bloch dans la seule direction y pour obtenir l'équation de Schrödinger sur un ruban :

$$\epsilon(k_y)\psi_m = -t(\psi_{m-1} + \psi_{m+1}) - 2t(-1)^m\psi_m \cos k_y a . \quad (3.7)$$

La diagonalisation de l'équation (3.7) est effectuée numériquement pour un nombre de chaînes C variant de 20 à 25. Les spectres d'énergie ainsi calculés sont représentés sur la figure 3.5. Ils se composent de deux bandes : celle d'énergie positive que nous appelons bande de conduction, et celle d'énergie négative que nous appelons bande de valence. Lorsque C est pair, chacune des bandes possède $C/2$ sous-bandes. Si l'on ajoute une chaîne au ruban, on ajoute alors une sous-bande au spectre. Ainsi, lorsque C est impair, la sous-bande supplémentaire se partage entre la bande de valence et la bande de conduction, et voyage de l'une à l'autre en traversant les deux gaps de confinement. Les symétries de sous-réseaux $\epsilon(k_y) = -\epsilon(k_y)$ et particule-trou $\epsilon(k_y) = -\epsilon(-k_y)$ sont alors brisées. Ces états dans le gap ne correspondent donc pas non plus à des états de bord : lorsque la taille du système augmente, ils deviennent indistinguables du reste des états. Toutefois, contrairement aux états qui apparaissent dans le gap des spectres armchair, leur existence est accompagnée de brisures de symétrie du système. Celles-ci sont permises par le fait que lorsque C est impair, le ruban ne possède pas un nombre entier de mailles à deux atomes dans sa largeur, ce qui n'est ni le cas lorsque C est pair, ni en volume dans le RCDQF, ni dans toutes les autres situations discutées ici dans le graphène. Leur apparition peut sembler moins mystérieuse après quelques manipulations algébriques. Prenons l'exemple d'un ruban possédant cinq chaînes dans la largeur. La diagonalisation de l'Hamiltonien liaisons-fortes H revient à résoudre l'équation $\det(H - \mathbb{1}E) = 0$ où \det désigne le déterminant. Dans notre exemple,

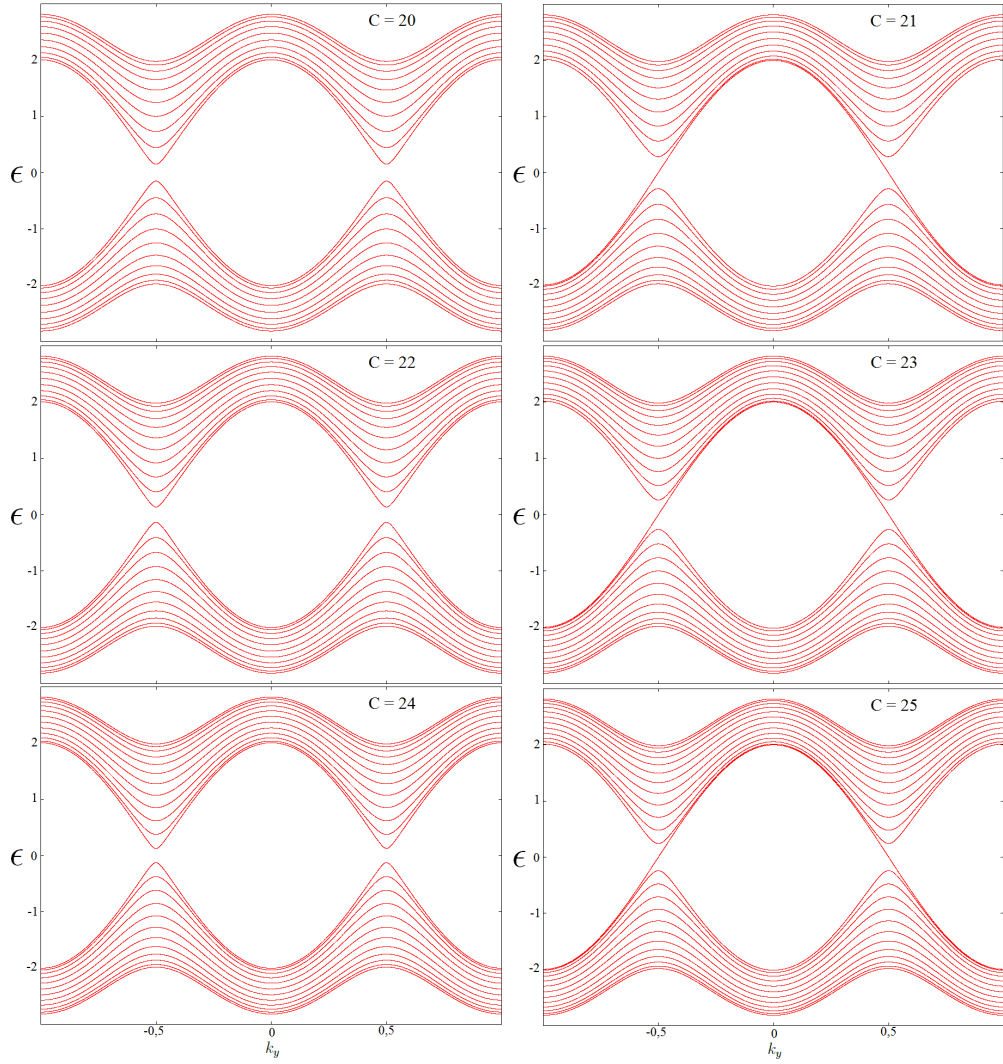


FIGURE 3.5: Spectres d'énergie liaisons-fortes du réseau carré découpé en rubans avec des bords plats, le nombre C de chaînes variant de 20 à 25. L'énergie est donnée en unité de t , et k_y en unité de π/a .

celui-ci s'écrit :

$$\det(H - \mathbb{1}E) = \begin{vmatrix} 2t \cos k_y a - \epsilon & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & -2t \cos k_y a - \epsilon & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & 2t \cos k_y a - \epsilon & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & -2t \cos k_y a - \epsilon & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & 2t \cos k_y a - \epsilon \end{vmatrix} \quad (3.8)$$

On peut alors développer ce déterminant suivant la première colonne $C1$. Plutôt que de faire le calcul directement, on cherche d'abord à faire disparaître le terme $-t$ de la deuxième ligne. Une façon de procéder est de substituer la colonne $C1$ par $C1 - C3$, soit $C1 \rightarrow C1 - C3$, de façon à compenser les deux termes $-t$ des colonnes $C1$ et $C3$. En faisant ainsi, on élimine certes le deuxième terme de la colonne $C1$, mais on ajoute aussi les termes $-2t \cos(k_y a) - \epsilon$ à la troisième ligne et $-t$ à la quatrième ligne. Il faut donc à nouveau simplifier ce terme $-t$ de

la quatrième ligne en ajoutant cette fois la colonne $C5$. Au bilan, on a effectué l'opération $C1 \rightarrow C1 - C3 + C5$, et la première colonne du déterminant devient :

$$\det(H - \mathbb{1}E) = \begin{vmatrix} 2t \cos k_y a - \epsilon & & & \\ 0 & & & \\ 2t \cos k_y a - \epsilon & \cdots & & \\ 0 & & & \\ 2t \cos k_y a - \epsilon & & & \end{vmatrix}. \quad (3.9)$$

Ainsi écrit, le développement du déterminant par la première colonne permet de factoriser le terme $2t \cos k_y a - \epsilon$. Par conséquent, l'équation $\det(H - \mathbb{1}E) = 0$ donne immédiatement la valeur propre $\epsilon(k_y) = 2t \cos(k_y a)$, qui est le niveau qui traverse le gap dans le cas où le nombre de chaînes est impair. Cet exemple se généralise facilement pour des largeurs de ruban quelconques, l'opération à effectuer devenant : $C1 \rightarrow \sum_{i \text{ pair}} C_{2i+1} - \sum_{i \text{ impair}} C_{2i+1}$. Remarquons que la factorisation du terme $\epsilon(k_y) = 2t \cos(k_y a)$ n'est possible que pour C impair, puisque dans le cas où C est pair, il subsiste toujours un terme $-t$ dans la première colonne. Il n'y a donc pas d'état qui traverse le gap lorsque le ruban possède un nombre pair de chaînes.

3.1.3 Relation de dispersion de volume et structure de bande des rubans

Avant d'aller plus loin, il est intéressant de comparer les structures de bande des différents rubans étudiés jusqu'ici, avec les relations de dispersion calculées en volume au chapitre 1. L'Hamiltonien liaisons-fortes est le même pour le volume que pour les rubans, mais dans le premier cas, le théorème de Bloch est utilisé dans les deux directions, alors que dans le second cas, il n'est utilisé que selon la longueur du ruban, sa largeur étant finie.

Commençons avec le graphène. La relation de dispersion de volume $\epsilon(\vec{k})$ a été obtenue au chapitre 1 avec le choix de base de la figure 1.1. Sur cette figure, les bords armchair (resp. zigzag) s'étendent le long de l'axe x (resp. y). Ainsi, la projection de la relation de dispersion de volume sur l'axe k_x (resp. k_y) est très semblable aux spectres d'énergie des rubans de nature correspondante (figure 3.6). Cette projection est utile pour se convaincre qu'il s'agit bien des mêmes cônes de Dirac dans les chapitres 1 et 3. Mieux, il apparaît que les points \vec{K} et \vec{K}' se confondent lorsqu'ils sont projetés sur l'axe k_x , c'est-à-dire dans le cas des bords armchair, mais restent bien distincts quand ils sont projetés sur l'autre axe, qui correspond au cas zigzag. Ainsi, on conçoit mieux pourquoi il apparaît deux cônes de Dirac dans les spectres des rubans zigzag, et un seul dans le cas armchair. Dans ce dernier cas, les cônes ont été en quelque sorte "superposés" lors de la projection. Cet effet de *mélange des vallées*, uniquement dû à la nature des bords, aura des répercussions importantes dans la suite.

Le cas du réseau carré est un peu plus simple, puisqu'on ne projette la relation de dispersion du volume que sur l'axe y . La comparaison des deux profils, montrés sur la figure 3.7, est semblable au cas zigzag en ce sens que l'on compte deux cônes bien distincts et qu'il n'y a donc pas de mélange des vallées pour ce type de bord.

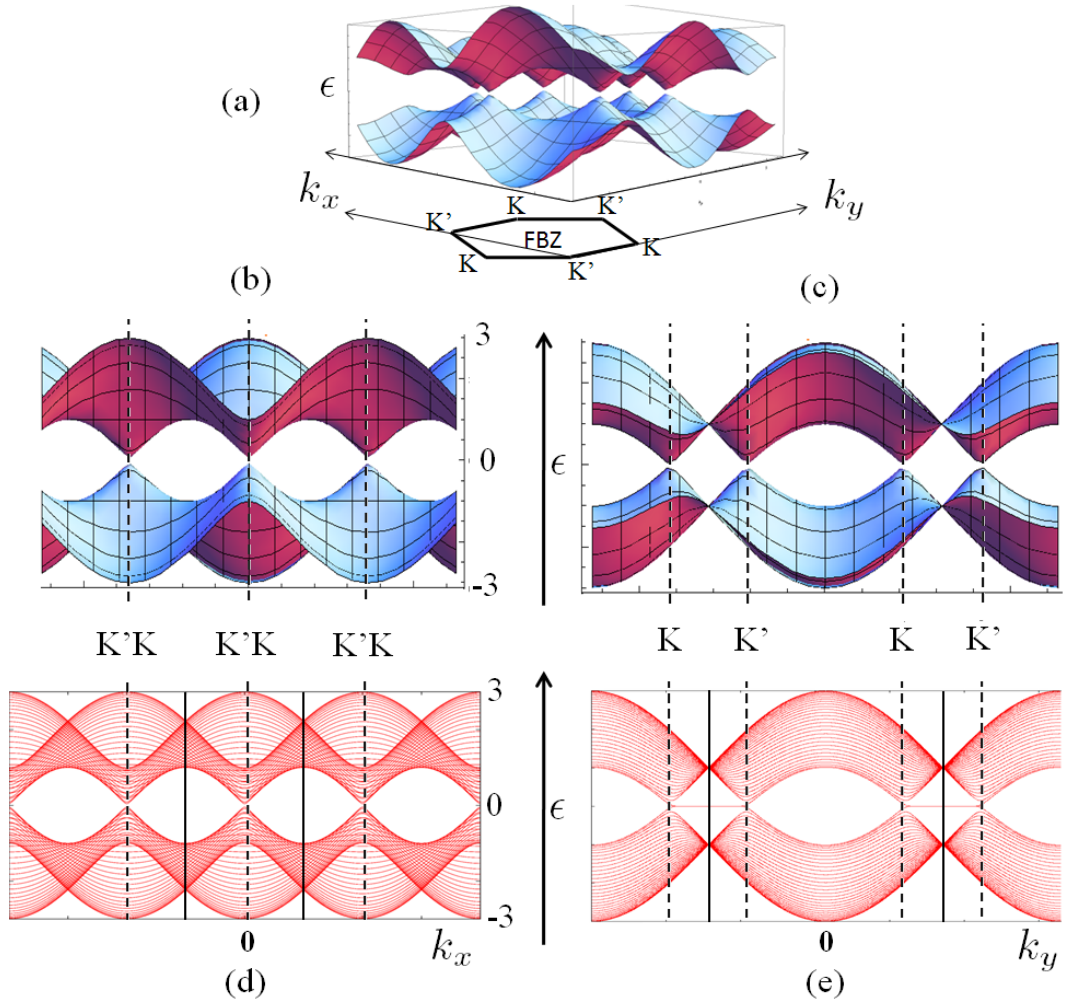


FIGURE 3.6: (a) Relation de dispersion du graphène en unité de t . (b) et (c) Projections de la relation de dispersion du graphène en volume sur les axes k_x et k_y . Les deux projections obtenues sont comparées aux spectres des rubans zigzag (e) et armchair (d). La première zone de Brillouin est délimitée par des traits continus verticaux. Les traits pointillés indiquent la position des points de Dirac

3.2 États de bord et champ magnétique

3.2.1 Des rubans sous champ magnétique fort

Nous appliquons maintenant un flux magnétique à travers chaque maille du réseau. Les électrons accumulent une phase Aharonov-Bohm γ déjà introduite au chapitre 1 page 19 pour le problème de Hofstadter. Certains paramètres de saut t se voient alors promus d'une phase $t \rightarrow te^{i\gamma}$. Ce travail ayant déjà été effectué pour le réseau carré au chapitre 1, nous détaillons ici l'Hamiltonien dans le cas des rubans armchair uniquement, le cas zigzag étant similaire. Ainsi, l'équation de Schrödinger d'un ruban armchair (3.5) se modifie sous champ magnétique comme :

$$\begin{aligned} \epsilon(k_y)\psi_m^A &= -t (\psi_m^B e^{-i\gamma_1(x_m)} + \psi_{m+1}^B e^{i\gamma_3(x_m)} + \psi_{m-1}^B e^{i3ak_y} e^{i\gamma_2(x_m)}) \\ \epsilon(k_y)\psi_m^B &= -t (\psi_m^A e^{i\gamma_1(x_m)} + \psi_{m-1}^A e^{i\gamma_3(x_{m-1})} + \psi_{m+1}^A e^{-i3ak_y} e^{-i\gamma_2(x_{m+1})}) \end{aligned} \quad (3.10)$$

où les γ_1 , γ_2 et γ_3 sont les phases Aharonov-Bohm accumulées entre deux sites A et B comme indiqué sur la figure 3.8. Plus précisément, en travaillant dans la

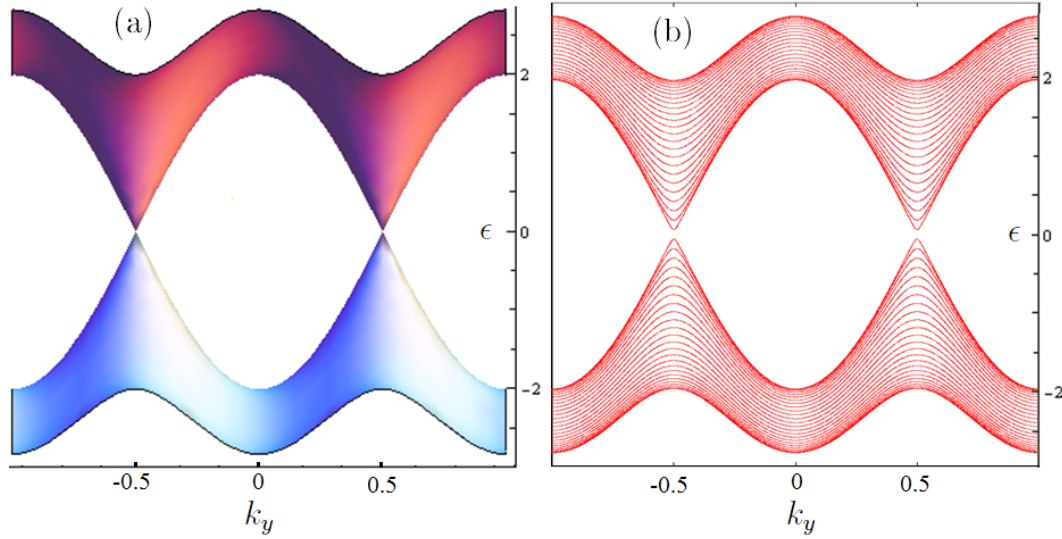


FIGURE 3.7: (a) Projection de la relation de dispersion du RCDQF en volume sur l'axe k_y . (b) Structure de bande du réseau carré à demi flux sur un ruban. L'énergie est donnée en unité de t et l'impulsion en unité de π/a .

jauge de Landau $\vec{A} = -By\vec{e}_x$, celles-ci valent :

$$\begin{aligned}
 \gamma_1(x_m) &= -\frac{2\pi}{\phi_0} a B x_m \\
 \gamma_2(x_m) &= -\frac{2\pi}{\phi_0} B \frac{a}{2} x_m \\
 \gamma_3(x_m) &= -\frac{2\pi}{\phi_0} B \frac{a}{2} x_m .
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

On peut alors vérifier que le flux magnétique ϕ à travers une plaquette est bien égal à :

$$\begin{aligned}
 \phi &= \frac{\phi_0}{2\pi} (-\gamma_2(x_{m+1}) + \gamma_3(x_{m-1}) + \gamma_1(x_{m-1}) + \gamma_2(x_m) - \gamma_3(x_m) - \gamma_1(x_{m+1})) \\
 &= B \left(\frac{a}{2} + a \right) (x_{m+1} - x_{m-1}) \\
 \phi &= B \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

qui est bien le champ appliqué multiplié par la surface d'un hexagone de côté a .

Dans la suite, nous nous intéresserons à la limite de faible flux pour laquelle les effets de réseaux (cf. spectre de Hofstadter) disparaissent, mais considérerons un champ magnétique suffisamment fort pour faire apparaître des plateaux d'énergie.

3.2.2 Discussion qualitative

En présence d'un fort champ magnétique, les cônes de Dirac sont progressivement élargis de sorte que les sous-bandes qui les constituent forment des plateaux d'énergie tels que $\epsilon_n = \pm t \sqrt{2\pi\sqrt{3}n\phi/\phi_0}$ (voir figures 3.9, 3.10 et 3.11). Le comportement en $\sqrt{n\phi}$ est typique des fermions de Dirac.

Nous nous intéressons ici à la région de basse énergie, c'est-à-dire au voisinage des points de Dirac, où l'on considère le développement $k_y = K_y^{(l)} + q_y$. Puisque

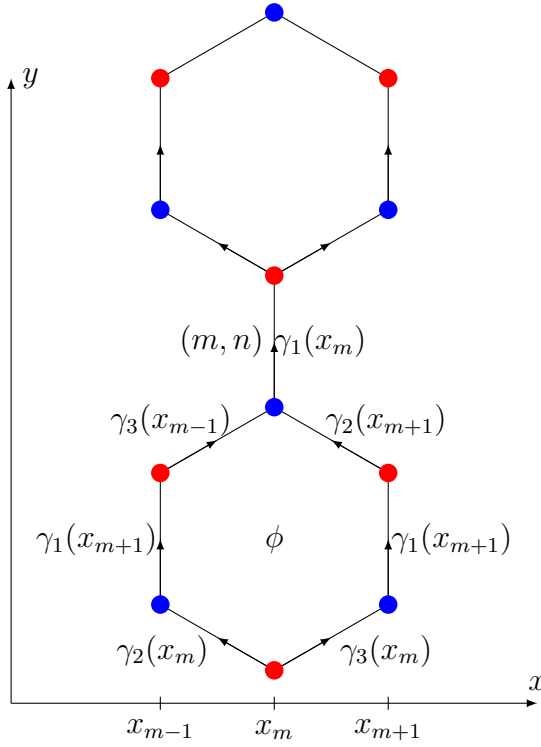


FIGURE 3.8: Illustration des phases Aharonov-Bohm accumulées entre deux sites A (en rouge) et B (en bleu) dans la jauge de Landau.

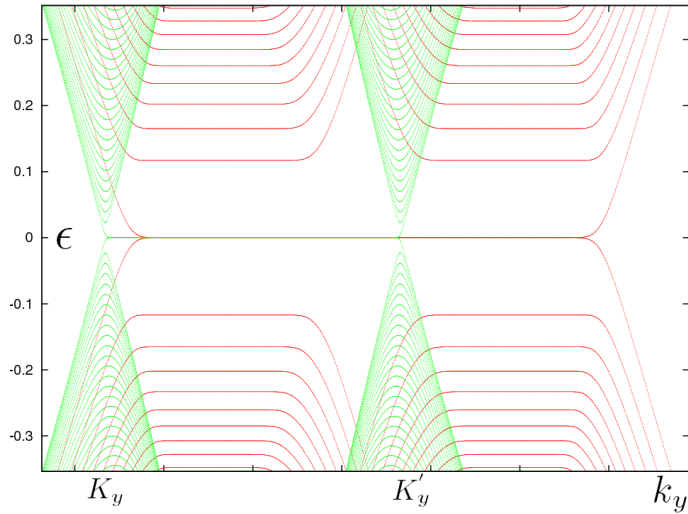


FIGURE 3.9: Spectres d'énergie liaisons-fortes en unité de t sans (vert) et avec (rouge) un flux magnétique, pour les rubans zigzag comprenant $M = 200$ mailles dans la largeur. La position des points de Dirac est $K_y = -2\pi/3a_0$ et $K'_y = 2\pi/3a_0$. L'énergie est donnée en unité de t et la valeur du flux appliqué est $\phi = 0,00126 \phi_0$.

dans la jauge de Landau, un état d'impulsion q_y est centré à la position $q_y \ell_B^2$ le long de la direction x , la modification des niveaux d'énergie peut être interprétée en fonction de cette position.¹ Il est donc ainsi possible de donner la position des bords du ruban le long de la direction x et de réinterpréter les spectres sous champ dans l'espace réel. La position d'un bord est fixée par la position d'un cône de

1. Cette position n'est autre que celle du centre de l'orbite cyclotron au bord, comme nous le verrons aux chapitres 4 et 5.

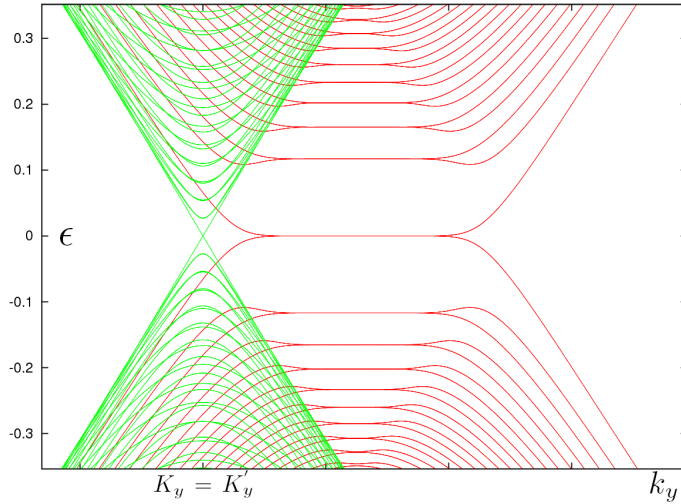


FIGURE 3.10: Spectres d'énergie liaisons-fortes en unité de t sans (vert) et avec (rouge) un flux magnétique, pour les rubans armchair comprenant $M = 200$ mailles dans la largeur. La position des points de Dirac est $K_y = K'_y = 0$. L'énergie est donnée en unité de t et la valeur du flux appliqué est $\phi = 0,00126 \phi_0$.

Dirac en l'absence de champ, puisque dans ce cas $q_y \ell_B^2 = 0$. La position de l'autre bord est alors située à une distance $\Delta q_y = L/\ell_B^2$ du premier bord. Dans les cas des bords zigzag et ceux du réseau carré, les deux cônes sont distincts, et l'on doit donc procéder à cette opération deux fois. Il apparaît alors clairement que la dispersion des états se produit près des bords, alors qu'en volume, les niveaux restent plats. Nous distinguerons donc les états des niveaux de Landau appartenant implicitement au volume, des états de bords ; ces derniers présentant un comportement dispersif.

États de bord : cas zigzag

La symétrie de sous-réseaux des spectres nous permet de limiter la discussion aux énergies positives (figure 3.12). Si nous prêtons maintenant attention au spectre dans une seule vallée, nous remarquons que celui-ci *n'est pas symétrique par renversement du bord* : bord droit \leftrightarrow bord gauche. Autrement dit, les niveaux d'énergie au voisinage du bord gauche sont différents de ceux au voisinage du bord droit. De plus, il s'établit une correspondance entre l'énergie d'un niveau de Landau en volume ϵ^v et l'énergie d'un état de bord ϵ^b dont on lit la valeur exactement sur la position d'un des deux bords. Cette correspondance, mise en exergue par des lignes horizontales bleues et vertes sur la figure 3.12, se produit alternativement pour un bord ou l'autre. Plus précisément, pour la vallée \vec{K} par exemple, nous constatons la relation $\epsilon_n^b = \epsilon_{2n+1}^v$ avec $n \geq 0$ sur le bord gauche (lignes bleues), et la relation $\epsilon_n^b = \epsilon_{2n}^v$ avec $n > 0$ sur le bord droit (lignes vertes). Une distribution semblable des états de bord est observée dans la vallée \vec{K}' , pourvu que l'on permute chacun des bords. Cette distribution remarquable des états de bord n'avait pas été mise en évidence auparavant, et constitue donc un résultat nouveau, qui sera expliqué dans la section (4.2.2) du chapitre suivant.

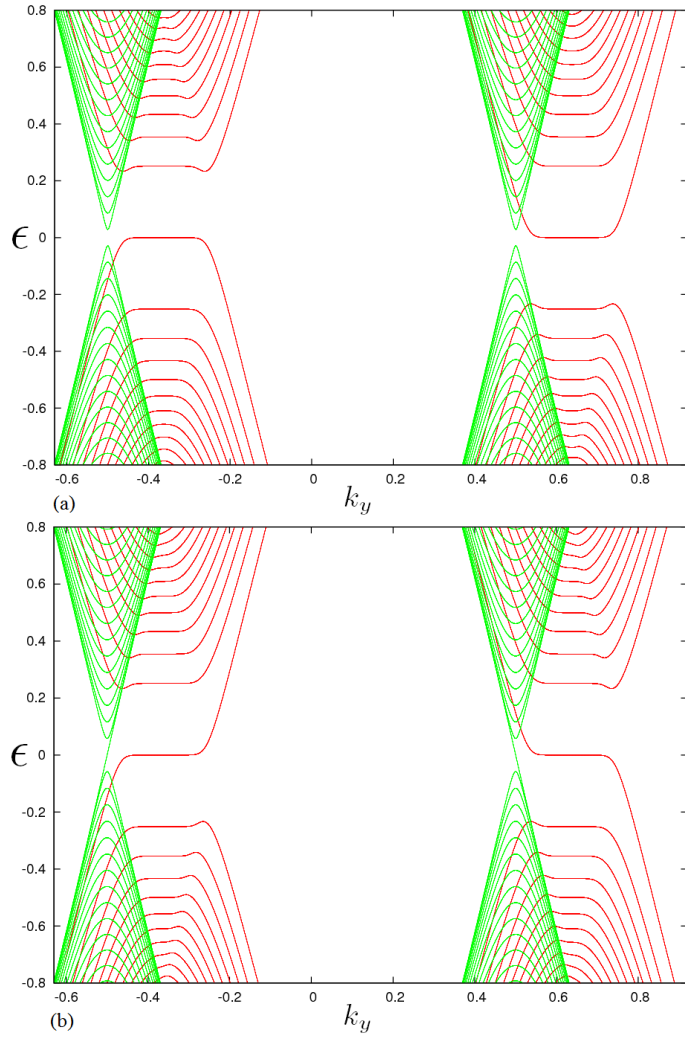


FIGURE 3.11: Spectres d'énergie liaisons-fortes en unité de t sans (vert) et avec (rouge) un flux magnétique additionnel, pour le réseau carré au demi quantum de flux découpé en rubans à bords droits. Les rubans possèdent (a) 108 chaînes et (b) 107 chaînes. Le flux additionnel vaut $0,00126 \phi_0$.

États de bord : cas armchair

Pour le cas armchair, les spectres présentent la même symétrie $\epsilon(k_y) = -\epsilon(k_y)$ que dans le cas zigzag, ce qui nous permet de limiter la discussion aux énergies positives (figure 3.13). Toutefois, nous avons vu que de tels bords mélangent les vallées, de sorte que l'on ne peut plus distinguer le cône de la vallée \vec{K} du cône de la vallée \vec{K}' . Ceci donne lieu à des niveaux de Landau dégénérés de vallée en volume pour une valeur donnée de k_y (figure 3.13). Cette dégénérescence est levée près des bords, avec deux comportements dispersifs bien distincts. De façon surprenante, il existe donc deux types d'états de bord dans les rubans armchair : ceux dont l'énergie $\epsilon_n^+(x_c)$ varie de façon monotone, et ceux dont l'énergie $\epsilon_n^-(x_c)$ peut diminuer en approchant un bord. Ces derniers indiquent alors une vitesse de dérive $v_d^n = \partial\epsilon_n/\partial k_y \propto \partial\epsilon_n/\partial x_c$ négative des électrons à une certaine distance du bord. En d'autres termes, il peut donc exister des états contra-propageants, ce qui est tout à fait inhabituel dans le régime de l'effet Hall quantique que nous regardons ici [14]. Nous en reparlerons dans la section 3.2.2. Si cet effet est constaté numériquement dans la littérature [15, 54], nous tâcherons d'en donner une explication

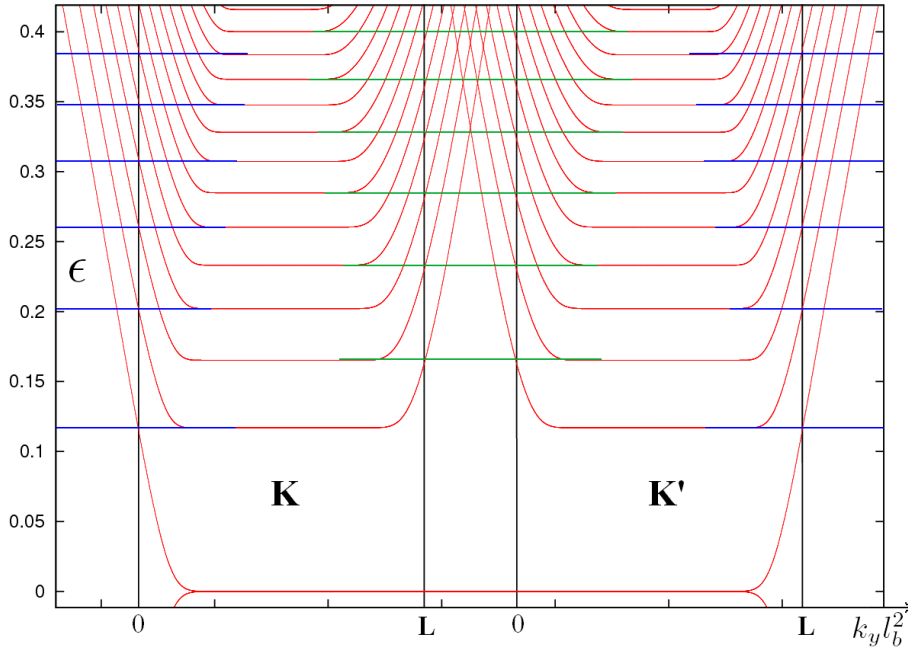


FIGURE 3.12: Spectre d'énergie liaisons-fortes en unité de t sous fort champ magnétique pour les rubans zigzag (rouge). Le ruban comporte $M = 200$ mailles dans la largeur. La valeur du flux magnétique est $\phi = 0,00126 \phi_0$. La position des bords est indiquée par des lignes noires verticales. On distingue les niveaux de Landau en volume des états de bord dispersifs. Une répartition bien spécifique entre l'énergie des états de bord et l'énergie des niveaux de Landau est mise ici en relief par des traits de couleur horizontaux. Ces traits représentent le prolongement d'un niveau de Landau en volume, et coïncident exactement sur le bord avec l'énergie d'un état de bord issu d'un niveau de Landau inférieur. L'énergie est donnée en unité de t .

analytique, qualitative et quantitative aux chapitres 4.5 et 5.

Par ailleurs, nous remarquons que la variation d'énergie $\Delta\epsilon_n^-$ qu'ont les niveaux dont la pente s'inverse, est assez faible. Pour l'état de bord issu du niveau de Landau $n = 1$, cette variation est estimée à 8% environ de l'écart $\epsilon_1 - \epsilon_0$ entre les deux premiers niveaux de Landau. Cet effet remarquable de non monotonie de la dispersion des états de bord risque donc en pratique d'être noyé par les effets de désordre. Nous proposons donc ici un moyen simple, et pourtant non proposé jusqu'à maintenant, d'augmenter significativement l'écart $\Delta\epsilon_n^-$. Le but de l'opération est d'abaisser l'énergie de ces états. Le moyen le plus simple est donc d'ajouter naïvement un terme $-V$ dans l'Hamiltonien qui décrit le ruban armchair. Pour que seuls les états de bord soient concernés par cet abaissement de l'énergie, il suffit donc d'ajouter un potentiel $-V_{\text{bord}}$ uniquement aux bords. Le spectre obtenu est montré sur la figure 3.14. On constate que l'écart $\Delta\epsilon_n^-$ est déjà considérablement augmenté pour les niveaux d'énergie positive, avec l'application d'un potentiel $V_{\text{bord}}/t = 0,5$, alors que les niveaux de Landau en volume restent inchangés. Une étude très récente non publiée, montre que les interactions électron-électron peuvent conduire au même effet [74].

États de bord : cas du réseau carré au demi quantum de flux

On considère maintenant le réseau carré au demi quantum de flux (RCDQF), auquel on ajoute un flux ϕ faible devant $\phi_0 = h/e$. Les spectres d'énergie obtenus

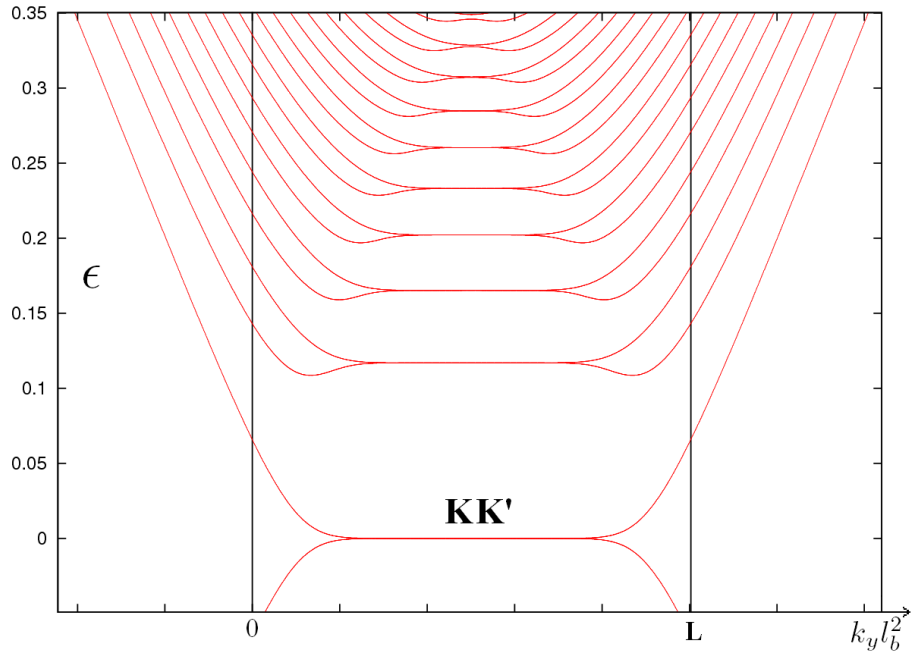


FIGURE 3.13: Spectres d'énergie liaisons-fortes sous fort champ magnétique pour les rubans armchair. Le ruban comporte $M = 200$ mailles dans la largeur. La valeur du flux magnétique est $\phi = 0,00126 \phi_0$. La position des bords est indiquée par des lignes noires verticales. Les niveaux de Landau, dégénérés de vallée, donnent naissance à deux types d'états de bord. L'un des deux, d'énergie ϵ_n^- varie de façon non-monotone avec la distance aux bords.

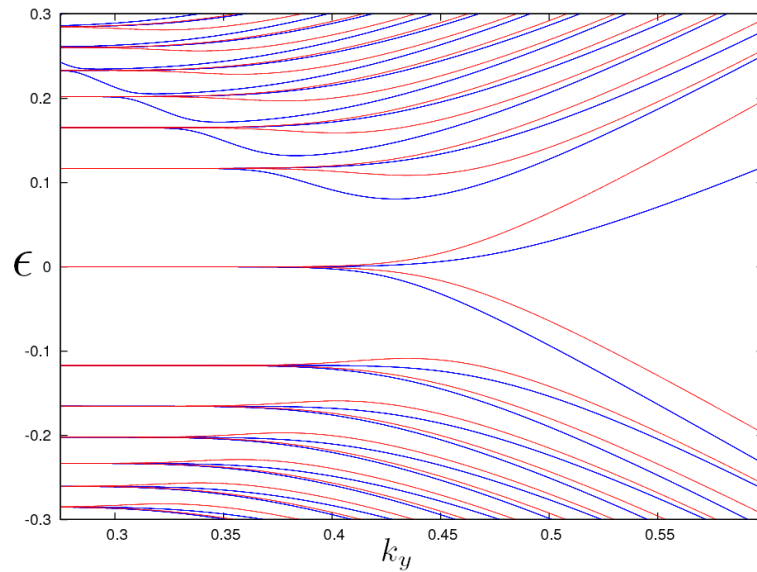


FIGURE 3.14: Spectres d'énergie liaisons-fortes sous champ magnétique fort pour les rubans armchair ($M = 200$ et $\phi = 0,00126 \phi_0$) avec un potentiel sur site aux bords $V_{\text{bord}}/t = 0,5$ (bleu) et $V_{\text{bord}} = 0$ (rouge). L'énergie est donnée en unité de t et k_y en unité de $\pi/3a$. L'ajout du potentiel de bord a aussi pour effet de décaler la position du minimum des niveaux ϵ^- .

s'avèrent plus complexes que ceux connus pour les rubans zigzag et armchair (figure 3.15). Tout d'abord, notons que la symétrie de sous-réseaux ($\epsilon(k_y) = -\epsilon(k_y)$) a été brisée, et ce, quelque soit la parité du nombre de chaînes. Ensuite, même si les

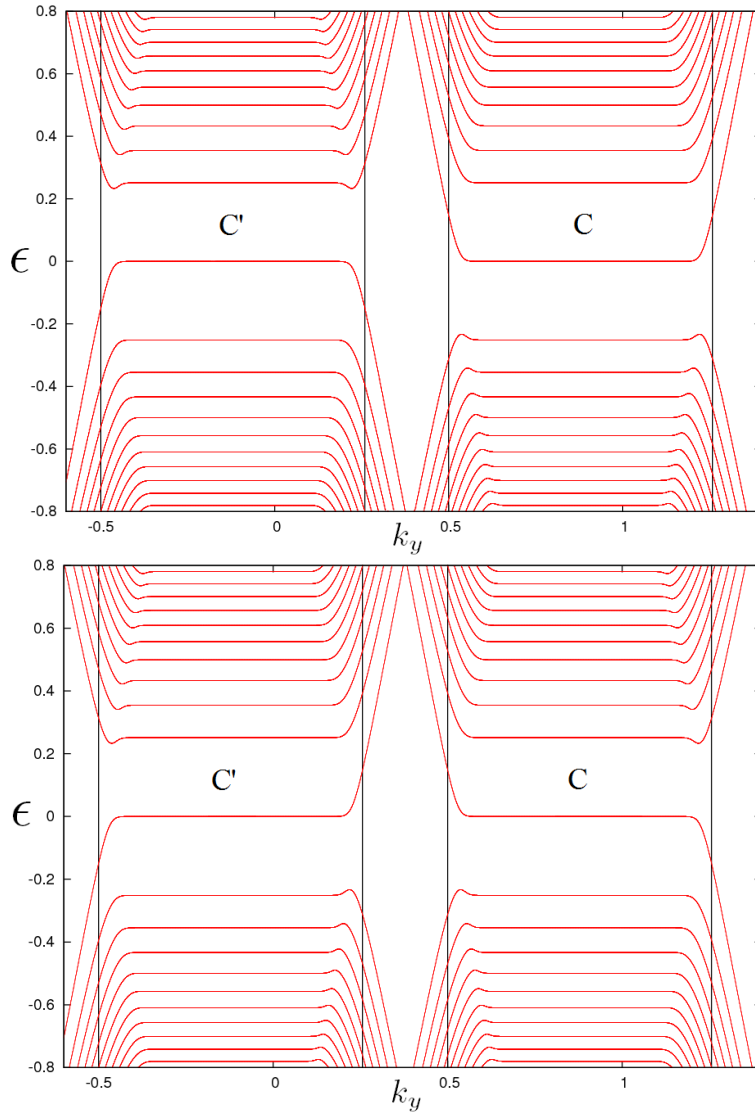


FIGURE 3.15: Spectres liaisons-fortes d'énergie sous champ magnétique pour les rubans du RCDQF avec : (a) un nombre impair de chaînes ($C = 300$) et (b) un nombre pair de chaînes ($C = 299$). L'énergie est donnée en unité de t et k_y en unité de π/a . Le flux additionnel vaut $\phi = 0,00126 \phi_0$. Les lignes noires verticales indiquent la position des bords pour chaque vallée. Les bords gauches sont constitués de sites B couplés par un terme $-t$, les bords droits sont constitués (a) de sites B , et (b) de sites A (couplés par un terme $= t$).

deux vallées sont bien distinctes, nous ne constatons aucune relation particulière entre les énergies des états de bord et les énergies des états de volume comme c'était le cas pour les rubans zigzag. En revanche, il apparaît deux types d'états de bords : ceux dont les niveaux $\epsilon^+(x_c)$ varient de façon monotone, et ceux dont l'énergie $\epsilon^-(x_c)$ présente une inversion de pente à l'approche des bords, comme pour les rubans armchair. Toutefois, la présence d'un type d'état de bord ou d'un autre dépend à la fois de la vallée, du bord et du signe de l'énergie. Le cas du RCDQF sous champ magnétique présente donc des situations différentes de celles proposées dans le graphène, et enrichit la zoologie des états de bords dans ces systèmes bidimensionnels à cônes de Dirac.

De telles structures seront expliquées au chapitre suivant et les niveaux d'éner-

gie seront calculés analytiquement dans le chapitre 5.

Les états de bord et l'effet Hall quantique

L'effet Hall quantique a été découvert en 1980 par Klaus von Klitzing en effectuant des mesures de transport dans des gaz bidimensionnels d'électrons sous champ magnétique [75, 76] : pour certaines plages de densités de porteurs de charge, la résistance longitudinale s'annule, alors que la résistance transverse (ou de Hall) devient constante et prend les valeurs $R_H = h/ie^2$ où i est un entier. L'effet Hall quantique a ainsi permis de mesurer avec précision la constante de structure fine α , puisque celle-ci est reliée au quantum de conductance e^2/h par $\alpha = \frac{\mu_0 c}{2} \frac{e^2}{h}$ où μ_0 est la permittivité du vide. L'effet Hall quantique est notamment utilisé pour déterminer l'étalon de résistance avec une grande précision, la valeur mesurée à l'époque par von Klitzing étant $h/e^2 = 25812,807 \Omega$.

La compréhension de l'effet Hall quantique requiert la description quantique de la dynamique des électrons sous fort champ magnétique. En particulier, Halperin [14] puis Büttiker [55] révélèrent le rôle crucial joué par les états de bord dans la quantification de la conductance, en montrant que ceux-ci étaient seuls responsables du transport de charges, les états de volume se localisant par le désordre.² Plus précisément, il a été montré que la conductance de Hall était proportionnelle au nombre d'états de bord : $G = sn \frac{e^2}{h}$ où n est le nombre de niveaux de Landau sous le niveau de Fermi et où le facteur $s = 2$ provient de la dégénérescence de spin. Le nombre d'états de bord \mathcal{N} étant alors donné par $\mathcal{N} = 2n$. Ainsi, un simple comptage des états de bord à partir du spectre d'énergie du gaz 2D sous champ (figure 3.16) donne, pour une énergie de Fermi donnée, la valeur de la conductance de Hall.

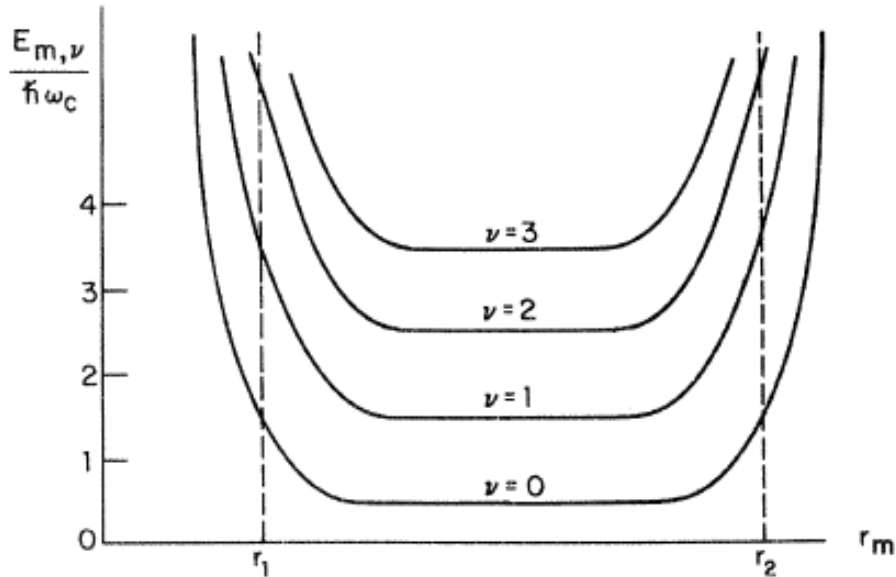


FIGURE 3.16: Etats de bord d'un système bidimensionnel d'électrons massifs en régime d'effet Hall quantique. (Figure extraite de l'article de Halperin [14].)

L'observation de l'effet Hall quantique dans le graphène en 2005 a révélé une quantification de la conductance de Hall différente de celle observée dans les gaz bi-

². Une observation expérimentale directe de la localisation en volume a été réalisée en 2008 [77].

dimensionnels [3, 4]. La conductance y prend désormais les valeurs $G = 2(2n+1)\frac{e^2}{h}$, n'autorisant pas de valeur nulle. Cet effet Hall quantique est, pour cette raison, parfois qualifié de *demi-entier* ou de *relativiste* car cette quantification particulière de la conductance est une conséquence directe du caractère non massif des porteurs de charge dans le graphène. Les spectres que nous avons présentés dans la deuxième partie de ce chapitre, par exemple ceux des figures 3.12, 3.13 et 3.15, illustrent autant de situations où des états de bord émergent dans des systèmes bidimensionnels à fermions de Dirac sans masse. La complexité des spectres obtenus est due au caractère non massif des porteurs de charge combiné aux effets de sous-réseaux et de vallées. Bien que ces spectres soient en apparence très différents, ils présentent une propriété importante commune : lorsque l'énergie de Fermi est comprise entre les niveaux de Landau n et $n + 1$, (le niveau $n = 0$ étant celui à l'énergie $\epsilon = 0$), le système possède $\mathcal{N} = s(2n + 1)$ états de bord où $s = 2$ est la dégénérescence de spin. Ainsi, quelque soit la nature du bord envisagé, le nombre d'états de bord est toujours le même,^{3 4} ce qui implique une quantification de la conductance de Hall de la forme $G = s(2n + 1)\frac{e^2}{h}$.

Une propriété importante du graphène est que l'écart entre niveaux de Landau au voisinage de $\epsilon = 0$ est suffisamment grand devant l'énergie thermique $k_B T$ pour que l'effet Hall quantique y apparaisse à température ambiante. Des efforts expérimentaux importants sont consacrés à la mesure du quantum de résistance $R_H = h/e^2$ avec la plus grande précision possible. Un résultat publié en 2010 améliore d'ailleurs d'au moins trois ordres de grandeur la valeur trouvée par von Klitzing en 1980, avec $h/e^2 = 25812,807557(18)$ [78].

3.3 Conclusions du chapitre et perspectives

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'effet des bords sur les spectres en énergie de systèmes 2D dont la relation de dispersion en volume présente des cônes de Dirac. Les exemples étudiés sont les bords zigzag et armchair pour le graphène, et plats avec un nombre pair ou impair de chaînes pour le réseau carré avec un demi quantum de flux par plaquette. Ces bords, de nature très simple, sont difficilement réalisables expérimentalement sur de grandes échelles. Pour le graphène, si des efforts expérimentaux permettent aujourd'hui la manipulation de nanorubans, la nature des bords est en réalité souvent plus complexe que les cas idéaux envisagés ici. Le but du travail présenté dans cette thèse est de comprendre parfaitement un problème "idéal" avec des bords parfaitement réguliers, avant de considérer des complexifications dans des études ultérieures.

3. Dans le cas particulier discuté plus haut où le niveau de Fermi croise deux fois un niveau non monotone ϵ^- , le système possède des états de bord contra-propageants, ce qui a pour effet de détruire la quantification de la conductance [14, 74]

4. Une petite différence de la structure globale de tous ces états de bord peut cependant être relevée. Lorsque qu'il n'y a qu'un état de bord par bord, c'est-à-dire quand $|\epsilon_F| < |\epsilon_1|$, les différents rubans réalisent des polarisations en vallée différentes pour les électrons aux bords. En effet, dans le cas armchair d'abord, à cause du mélange des vallées, les deux états de bord ont un poids dans chacune des vallées, il n'y a aucune polarisation particulière. Dans le cas zigzag en revanche, les deux états de bord appartiennent à une vallée spécifique et distincte d'un bord à l'autre, tout comme pour le RCDQF avec un nombre pair de chaînes. Un cas atypique qui n'apparaît pas ici dans le graphène, est celui où les deux états de bord sont dans la même vallée. Cette situation est rencontrée dans le RCDQF avec un nombre impair de chaînes.

Nous avons rediscuté et synthétisé des résultats connus dans la littérature pour le graphène, et étendu l'étude au cas du réseau carré. L'accent a été mis sur l'apparition d'états de bord, en l'absence et en présence d'un champ magnétique. Dans le second cas, des structures particulières ont été mises en évidence. Pour le cas zigzag, une répartition remarquable des états de bord, non discutée dans la littérature, a été observée. Elle sera expliquée dans le chapitre suivant. Ensuite, deux types d'états de bord ont été observés dans le cas armchair. L'un de ces deux types indique que la vitesse de dérive de certains électrons est inversée. Nous avons montré que l'effet, qui semble faible, peut être augmenté considérablement par l'ajout d'un potentiel aux bords. Nous avons ensuite mis en évidence des états de bord très semblables dans le réseau carré au demi quantum de flux. La différence étant, que dans ce dernier, les deux vallées restent distinguables. Ces différentes structures seront aussi analysées en détail par une approche analytique dans le prochain chapitre.

Chapitre 4

Description des états de bord sous champ magnétique par un Hamiltonien effectif de basse énergie

La création, comme la vie, est par définition un processus hors équilibre qui nécessite un certain degré de confinement.

La recherche passionnément,

Pierre Joliot

Sommaire

| | | |
|------------|--|-----------|
| 4.1 | Hamiltonien de volume sous champ magnétique fort | 58 |
| 4.1.1 | Le graphène | 58 |
| 4.1.2 | Le réseau carré à demi quantum de flux | 60 |
| 4.1.3 | Hamiltonien effectif de volume commun aux deux systèmes sous champ magnétique | 61 |
| 4.2 | Hamiltonien effectif : bord zigzag | 63 |
| 4.2.1 | Potentiel effectif | 63 |
| 4.2.2 | Correspondance bord - volume des niveaux d'énergie | 65 |
| 4.3 | Hamiltonien effectif : bord armchair | 67 |
| 4.3.1 | Hamiltonien de volume | 67 |
| 4.3.2 | Potentiel effectif et couplage des vallées | 68 |
| 4.3.3 | Allure des états de bord | 70 |
| 4.3.4 | Potentiel effectif pour le bord de droite | 72 |
| 4.4 | Hamiltonien effectif : bords plats du réseau carré à demi quantum de flux | 72 |
| 4.4.1 | Potentiel effectif et couplage des sous-réseaux | 72 |
| 4.4.2 | Allure des niveaux d'énergie | 74 |
| 4.5 | Conclusions du chapitre | 75 |

Ce chapitre est consacré à la description analytique des niveaux d'énergie des états de bord de fermions de Dirac sans masse à deux dimensions sous fort champ magnétique.

Le graphène et le réseau carré au demi quantum de flux (RCDQF) ont en commun de présenter des cônes de Dirac dans leur relation de dispersion au voisinage de $\epsilon = 0$ (voir chapitre 1). Ainsi, les différents types de rubans étudiés au chapitre 3, impliquent autant de conditions aux limites différentes sur les fermions de Dirac sans masse. Sous fort champ magnétique, les spectres d'énergie font apparaître des états dispersifs près des bords. Ces états de bord présentent des profils différents selon la nature du bord considéré : zigzag, armchair, RCDQF avec un nombre pair ou impair de chaînes. Malgré cette diversité, nous montrons dans ce chapitre que tous ces spectres, à basse énergie, peuvent être décrits simplement par une équation de Schrödinger (massive) effective.

Nous procédons de la manière suivante : nous commençons par développer un Hamiltonien de Schrödinger effectif de volume, commun aux différents systèmes de fermions de Dirac sans masse sous fort champ magnétique. Puis, nous considérons une à une les différentes conditions aux limites imposées par les rubans zigzag, armchair et carré à bords plats rencontrés au chapitre 3. Nous obtenons ainsi une équation de Schrödinger effective dont le potentiel est un double puits harmonique. Les différentes conditions aux limites introduisent des effets de couplage de vallée ou de sous-réseaux, qui entraînent une asymétrie de ce potentiel à l'origine des différences observées au chapitre 3 entre les états de bord. Cette analyse nous permet de comprendre complètement la diversité des spectres calculés numériquement précédemment. Une étude analytique quantitative est menée au chapitre 5.

Dans tout ce chapitre, on garde $\hbar = 1$.

4.1 Hamiltonien de volume sous champ magnétique fort

4.1.1 Le graphène

Comme nous l'avons vu au chapitre 1, l'Hamiltonien liaisons-fortes du graphène peut être linéarisé à basse énergie autour de chaque point de Dirac \vec{K} et \vec{K}' par un développement en $\vec{k} = \vec{K}^{(\prime)} + \vec{q}$. On obtient ainsi deux Hamiltoniens 2×2 de Dirac, $\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'}$ et $\hat{H}_{\vec{K}',\vec{K}}$, décrivant les deux vallées découplées du graphène :

$$\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'} = \gamma a_0 \begin{pmatrix} 0 & iq_x - \xi q_y \\ -iq_x - \xi q_y & 0 \end{pmatrix} = \gamma a_0 (-\xi \sigma_x q_y + \sigma_y q_x) \quad (4.1)$$

avec

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

où le choix de maille est indiqué sur la figure 1.1. On a posé $\gamma \equiv \frac{\sqrt{3}}{2}t$, $a_0 = a\sqrt{3}$ est le pas du réseau et $\xi = \pm 1$ est l'indice de vallée. L'Hamiltonien $\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'}$ est ainsi écrit dans la base (φ_A, φ_B) pour $\xi = 1$, et (φ'_A, φ'_B) pour $\xi = -1$. Ainsi, dans chaque vallée, la fonction d'onde d'un électron de basse énergie a une structure

(pseudo)-spinorielle.¹ Ce degré de liberté supplémentaire n'est pas dû à l'existence du spin de l'électron, que nous n'avons d'ailleurs introduit nulle part, mais est une conséquence de l'existence des deux sous-réseaux A et B dans le graphène. En prenant en compte les deux vallées, la fonction d'onde s'écrit donc comme une combinaison linéaire de deux spineurs provenant chacun d'une vallée différente. Puisque nous sommes intéressés par l'effet des bords, il semble naturel de travailler dans l'espace réel. On cherchera donc des fonctions d'onde de la forme :

$$\Psi(\vec{r}) = \alpha e^{i\vec{K}\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi_A(\vec{r}) \\ \varphi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} + \beta e^{i\vec{K}'\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi'_A(\vec{r}) \\ \varphi'_B(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

où α et β sont des constantes. L'introduction d'un champ magnétique $\vec{B} = -B\vec{e}_z$ dans le problème s'effectue par la substitution de Peierls $q_y \rightarrow q_y + eA_y$. L'invariance par translation du ruban dans la direction y nous suggère de travailler dans la jauge de Landau $A_y = -Bx$, $A_x = 0$. On effectue alors la substitution $q_y \rightarrow q_y + eA_y = q_y - eBx$ dans l'Hamiltonien de Dirac (4.1). Afin d'alléger les notations, on adimensionne les variables de la façon suivante : $x/\ell_B \rightarrow x$, and $x_c = q_y\ell_B$, où $\ell_B = \sqrt{1/eB}$ est la longueur magnétique. En utilisant le remplacement $q_x = -i\partial_x$, l'Hamiltonien de Dirac du graphène sous champ magnétique s'écrit dans l'espace réel de la façon suivante :

$$\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'} = \frac{\gamma a_0}{\ell_B} \begin{pmatrix} 0 & \partial_x + \xi(x - x_c) \\ -\partial_x + \xi(x - x_c) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

En introduisant les opérateurs création $\hat{a} = x - x_c + iq_x = x - x_c + \partial_x$ et annihilation $\hat{a}^\dagger = x - x_c - iq_x = x - x_c - \partial_x$, on remarque que les composantes $\varphi_{A/B}^{(i)}$ de la fonction d'onde vérifient :

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \varphi_A &= \epsilon \varphi_B & -\hat{a} \varphi'_A &= \epsilon \varphi'_B \\ \hat{a} \varphi_B &= \epsilon \varphi_A & -\hat{a}^\dagger \varphi'_B &= \epsilon \varphi'_A. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Ainsi, les composantes $\varphi_{A/B}^{(i)}$ de la fonction d'onde en volume sont reliées aux fonctions propres de l'oscillateur harmonique Φ_n de la façon suivante :²

$$\begin{array}{ccc} & \vec{K} & \vec{K}' \\ \epsilon > 0 & \begin{aligned} \varphi_A &= \Phi_{n-1} & \varphi'_A &= \Phi_n \\ \varphi_B &= \Phi_n & \varphi'_B &= -\Phi_{n-1} \end{aligned} & (4.6) \\ \epsilon < 0 & \begin{aligned} \varphi_A &= -\Phi_{n-1} & \varphi'_A &= \Phi_n \\ \varphi_B &= \Phi_n & \varphi'_B &= \Phi_{n-1}. \end{aligned} \end{array}$$

Par la suite, il s'avèrera très utile de travailler avec l'Hamiltonien $\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'}^2$, qui est diagonal, plutôt qu'avec $\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'}$, soit :

$$\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'}^2 = \left(\frac{\gamma a_0}{\ell_B} \right)^2 \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \frac{1}{2}(x - x_c)^2 + \frac{\xi}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \frac{1}{2}(x - x_c)^2 - \frac{\xi}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

1. Dans la suite, on omettra le préfixe "pseudo", le spin magnétique n'étant pas introduit, aucune confusion n'est possible.

2. On a pris la convention de signe telle que $\Phi_n(x) = \frac{\exp(-x^2/4)}{\pi^{1/4} 2^n n!} H_n(x)$, où $H_n(x)$ est le polynôme d'Hermite d'ordre n .

Le problème d'électrons de Dirac sous champ magnétique dans le graphène est donc équivalent à un problème à une dimension de deux potentiels harmoniques indépendants décalés en énergie d'un niveau de Landau. Le facteur $\xi/2$ provient de la non-commutation des opérateurs x et ∂_x . Cette astuce de diagonalisation en élevant l'Hamiltonien au carré est rendue possible par la structure particulière de l'Hamiltonien du graphène à basse énergie : celui-ci s'écrit comme une matrice 2×2 qui ne présente aucun élément diagonal, son carré est donc nécessairement diagonal.

4.1.2 Le réseau carré à demi quantum de flux

Comme nous l'avons vu dans les chapitres précédents, le réseau carré traversé d'un demi quantum de flux magnétique par plaquette (RCDQF) constitue un autre exemple de système bidimensionnel exhibant des cônes de Dirac dans sa relation de dispersion. Dans cette section, on s'intéresse à l'Hamiltonien de ce système auquel on ajoute un champ magnétique.

Comme pour le graphène, on linéarise au premier ordre en \vec{k} l'Hamiltonien liaisons-fortes du réseau carré au voisinage des points de Dirac $\vec{C} = (\pi/2a, \pi/2a)$ et $\vec{C}' = (\pi/2a, -\pi/2a)$. On obtient alors deux Hamiltoniens 2×2 , $\hat{H}_{\vec{C}}$ et $\hat{H}_{\vec{C}'}$, qui s'écrivent dans la base des $(\varphi_A^{(j)}, \varphi_B^{(j)})$:

$$\hat{H}_{\vec{C}, \vec{C}'} = 2ta \begin{pmatrix} \xi q_y & -iq_x \\ iq_x & -\xi q_y \end{pmatrix} = 2ta (q_x \sigma_y + \xi q_y \sigma_z) \quad (4.8)$$

où $\xi = \pm 1$ est l'indice de vallée. Contrairement à l'Hamiltonien de Dirac du graphène $\hat{H}_{\vec{K}, \vec{K}'}$, l'Hamiltonien $\hat{H}_{\vec{C}, \vec{C}'}$ possède une composante sur sa diagonale, proportionnelle à la matrice de Pauli σ_z , qui empêche l'Hamiltonien carré $\hat{H}_{\vec{C}, \vec{C}'}^2$ d'être diagonal. Comme nous cherchons à décrire le graphène et le RCDQF simultanément, nous effectuons une rotation \mathcal{R} dans l'espace des pseudo-spins :³

$$\mathcal{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{I} - i\sigma_y) \quad , \quad \mathcal{R}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{I} + i\sigma_y). \quad (4.9)$$

Ainsi, l'Hamiltonien transformé \hat{h} s'écrit :

$$\hat{h}_{\vec{C}, \vec{C}'} = \mathcal{R} \hat{H}_{\vec{C}, \vec{C}'} \mathcal{R}^{-1} \quad (4.10)$$

et ne présente des composantes que selon σ_x et σ_y . L'Hamiltonien $\hat{h}_{\vec{C}, \vec{C}'}$ s'écrit :

$$\hat{h}_{\vec{C}, \vec{C}'} = 2ta \begin{pmatrix} 0 & \xi q_y - iq_x \\ \xi q_y + iq_x & 0 \end{pmatrix} = 2ta (q_x \sigma_y + \xi q_y \sigma_x) \quad (4.11)$$

dans la nouvelle base $(\tilde{\varphi}_A^{(j)}, \tilde{\varphi}_B^{(j)})$, avec :

$$\tilde{\varphi}_A^{(j)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_A^{(j)} - \varphi_B^{(j)}) \quad , \quad \tilde{\varphi}_B^{(j)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_A^{(j)} + \varphi_B^{(j)}) \quad (4.12)$$

Notons qu'une telle transformation n'affecte pas les valeurs propres. L'Hamiltonien $\hat{h}_{\vec{C}, \vec{C}'}$ est maintenant assez semblable à l'Hamiltonien (4.1) du graphène. L'introduction du champ magnétique $\vec{B} = -B\vec{e}_z$ se traite donc de façon similaire, c'est à

³. Il s'agit de la même rotation que celle utilisée au chapitre 2 pour décrire la fusion des cônes de Dirac à l'aide d'un Hamiltonien développé à l'origine pour le modèle du graphène, page 30.

dire en utilisant la substitution de Peierls dans la jauge de Landau $q_y \rightarrow q_y + eA_y$ dans (4.11). L'Hamiltonien $\hat{h}_{\vec{C},\vec{C}'}$ devient :

$$\hat{h}_{\vec{C},\vec{C}'} = \frac{2ta}{\ell_B} \begin{pmatrix} 0 & -iq_x - \xi(x - x_c) \\ iq_x - \xi(x - x_c) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

On peut maintenant utiliser les opérateurs création $\hat{a} = x - x_c + iq_x$ et annihilation $\hat{a}^\dagger = x - x_c - iq_x$, de sorte qu'en volume, les composantes de la fonction d'onde vérifient :

$$\begin{aligned} -\hat{a}^\dagger \tilde{\varphi}_A &= \epsilon \tilde{\varphi}_B & \hat{a} \tilde{\varphi}'_A &= \epsilon \tilde{\varphi}'_B \\ -\hat{a} \tilde{\varphi}_B &= \epsilon \tilde{\varphi}_A & \hat{a}^\dagger \tilde{\varphi}'_B &= \epsilon \tilde{\varphi}'_A \end{aligned} \quad (4.14)$$

Ainsi, les composantes $\tilde{\varphi}_{A/B}^{(\prime)}$ sont reliées aux fonctions propres de l'oscillateur harmonique Φ_n de la façon suivante :

$$\begin{array}{ccc} & \vec{C} & \vec{C}' \\ \epsilon > 0 & \begin{aligned} \tilde{\varphi}_A &= -\Phi_{n-1} & \tilde{\varphi}'_A &= \Phi_n \\ \tilde{\varphi}_B &= \Phi_n & \tilde{\varphi}'_B &= \Phi_{n-1} \end{aligned} & (4.15) \\ \epsilon < 0 & \begin{aligned} \tilde{\varphi}_A &= \Phi_{n-1} & \tilde{\varphi}'_A &= \Phi_n \\ \tilde{\varphi}_B &= \Phi_n & \tilde{\varphi}'_B &= -\Phi_{n-1} \end{aligned} & \end{array}$$

Nous avons vu dans la section 4.1.1 que l'Hamiltonien $\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'}$ du graphène est diagonal. Une telle diagonalisation est rendue possible pour l'Hamiltonien du RCDQF maintenant que la rotation \mathcal{R} a été effectuée. En effet, en élevant $\hat{h}_{\vec{C},\vec{C}'}$ au carré, on obtient :

$$\hat{h}_{\vec{C},\vec{C}'}^2 = 2 \left(\frac{2ta}{\ell_B} \right)^2 \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \frac{1}{2}(x - x_c)^2 + \frac{\xi}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\partial_x^2 + \frac{1}{2}(x - x_c)^2 - \frac{\xi}{2} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

qui est identique à $\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'}$ à une constante multiplicative près.

Dans le paragraphe suivant, on développe une équation de Schrödinger effective qui décrit en volume à la fois le graphène et le RCDQF sous fort champ magnétique, à basse énergie.

4.1.3 Hamiltonien effectif de volume commun aux deux systèmes sous champ magnétique

Les carrés des Hamiltoniens de volume du graphène et du RCDQF sous fort champ magnétique étant similaires, on introduit l'Hamiltonien effectif de basse énergie adimensionné \mathcal{H}_{eff} par :

$$\begin{aligned} \text{graphène :} & \quad \hat{H}^2 = 2 \left(\frac{\gamma a_0}{\ell_B} \right)^2 \mathcal{H}_{eff} \\ \text{carré à demi flux :} & \quad \hat{h}^2 = 2 \left(\frac{2ta}{\ell_B} \right)^2 \mathcal{H}_{eff} \end{aligned} \quad (4.17)$$

ce qui définit quatre équations de Schrödinger effectives

$$\mathcal{H}_{eff}\Psi = E\Psi \quad (4.18)$$

où l'Hamiltonien \mathcal{H}_{eff} s'écrit sous la forme matricielle :

$$\mathcal{H}_{eff} = -\frac{\mathbb{1}}{2}\partial_x^2 + \begin{pmatrix} V_h(x) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_b(x) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_b(x) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_h(x) \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

dans la base $(\varphi_A, \varphi_B, \varphi'_A, \varphi'_B)$ pour le graphène et dans la base "tournée" $(\tilde{\varphi}_A, \tilde{\varphi}_B, \tilde{\varphi}'_A, \tilde{\varphi}'_B)$ pour le réseau carré. Les potentiels $V_h(x)$ et $V_b(x)$ sont donnés par

$$\begin{aligned} V_h(x) &\equiv \frac{1}{2}(x - x_c)^2 + \frac{1}{2} \\ V_b(x) &\equiv \frac{1}{2}(x - x_c)^2 - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (4.20)$$

et sont représentés sur la figure 4.1. L'Hamiltonien effectif \mathcal{H}_{eff} décrit donc deux oscillateurs harmoniques différents. A cause de la non-commutation de x avec ∂_x , ces deux oscillateurs sont décalés en énergie d'exactly un niveau de Landau. Ceci est une conséquence directe de la structure de l'équation de Dirac. Ainsi, d'après (4.18) et (4.19), on obtient deux équations de Schrödinger différentes : l'une avec le potentiel $V_h(x)$ pour les composantes φ_A et φ'_B du graphène, et $\tilde{\varphi}_A$ et $\tilde{\varphi}'_B$ du RCDQF, et l'autre avec le potentiel $V_b(x)$ pour les composantes φ'_A et φ_B du graphène et $\tilde{\varphi}'_A$, $\tilde{\varphi}_B$ du RCDQF. La résolution d'une de ces deux équations donne directement accès au spectre de l'autre équation.

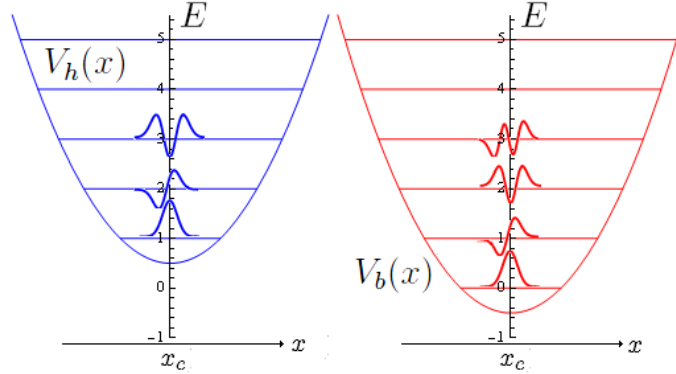


FIGURE 4.1: Potentiels harmoniques V_h et V_b de l'Hamiltonien effectif de volume \mathcal{H}_{eff} . Les fonctions propres Φ_{n-1} and Φ_n de l'oscillateur harmonique, associées au niveaux d'énergie $E_n = n$ sont représentées sur la figure.

Les valeurs propres ϵ_n des Hamiltoniens de Dirac originaux sont obtenues à partir des énergies propres adimensionnées $E_n = n$ de l'Hamiltonien effectif par :

$$\begin{aligned} \text{graphène :} & \quad \epsilon_n = \pm \frac{\gamma a_0}{\ell_B} \sqrt{2E_n}. \\ \text{carré à demi-flux :} & \quad \epsilon_n = \pm \frac{2ta}{\ell_B} \sqrt{2E_n} \end{aligned} \quad (4.21)$$

où l'on retrouve le comportement en \sqrt{nB} des niveaux de Landau relativistes déjà mentionné à plusieurs reprises.

Dans la jauge de Landau utilisée ici, la fonction d'onde des électrons de basse énergie est une onde plane dans la direction infinie du ruban y de sorte qu'elle prend la forme :

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{r}) \\ \Psi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= e^{iq_y y} \left[\alpha e^{i\vec{K}\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi_A(x) \\ \varphi_B(x) \end{pmatrix} + \beta e^{i\vec{K}'\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi'_A(x) \\ \varphi'_B(x) \end{pmatrix} \right].\end{aligned}$$

Dans la suite, nous montrons comment les bords introduits au chapitre 3 peuvent être pris en compte par un potentiel construit à partir des potentiels harmoniques de volume V_h et V_b . En effet, en spécifiant les conditions aux limites imposées par les différents types de bords sur la fonction d'onde $\Psi(\vec{r})$, on obtient immédiatement des relations entre les composantes $\varphi_{A/B}^{(i)}$, de sorte que celles-ci ne sont plus les fonctions propres des potentiels harmoniques de volume $V_h(x)$ et $V_b(x)$, mais de nouveaux *potentiels effectifs de bord* qu'il s'agira de déterminer. Ces potentiels décrivent le système à basse énergie quand la particule se rapproche du bord et acquiert de la dispersion. Nous reprenons d'abord soigneusement une méthode suggérée par Brey et Fertig dans le cas du graphène [15], que nous étendrons au réseau carré à demi flux.

4.2 Hamiltonien effectif : bord zigzag

Dans cette section, nous cherchons à décrire les niveaux d'énergie au voisinage des bords zigzag sous fort champ magnétique.

4.2.1 Potentiel effectif

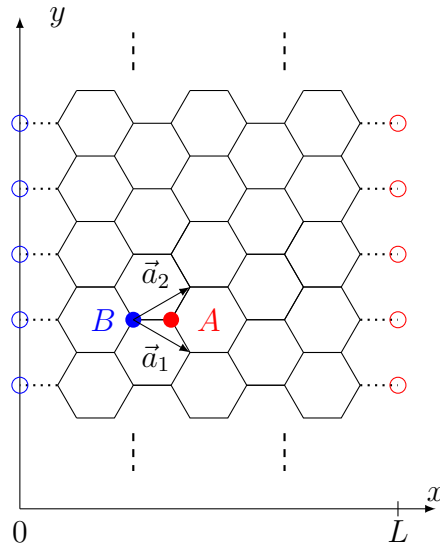


FIGURE 4.2: Ruban de graphène à bords zigzag. Les cercles en $x = 0$ et en $x = L$ représentent les sites vides en dehors du ruban sur lesquels on impose à la fonction d'onde de s'annuler.

Le ruban aux bords zigzag que nous considérons est représenté sur la figure 4.2. Les rubans zigzag ont ceci de particulier que tous les atomes de carbone sur un

des bords appartiennent au même sous-réseau. Les atomes sur l'autre bord appartiennent alors nécessairement à l'autre sous-réseau. L'invariance par translation dans la direction y nous permet d'écrire la fonction d'onde des électrons à basse énergie comme :

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{r}) \\ \Psi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= e^{iq_y y} \left[\alpha e^{i\vec{K}\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi_A(x) \\ \varphi_B(x) \end{pmatrix} + \beta e^{i\vec{K}'\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi'_A(x) \\ \varphi'_B(x) \end{pmatrix} \right]\end{aligned}\quad (4.22)$$

où les composantes $\varphi_{A/B}^{(j)}(x)$ ne sont plus, a priori, les fonctions propres de l'oscillateur harmonique. Pour un bord donné, l'obtention des états de bord requiert deux conditions aux limites. Ceci est dû à la structure spinorielle de l'équation de Dirac du problème de départ. Puisque le bord gauche n'est constitué que de sites A , (figure 4.2), on impose à la fonction d'onde de s'annuler sur les premiers sites vides B à l'extérieur du ruban en $x = 0$, soit $\Psi_B(x = 0, y) = 0$. La situation est renversée sur le bord droit, si bien que la fonction d'onde doit cette fois s'annuler sur les sites vides du sous-réseau A en $x = L$, et l'on a $\Psi_A(x = L, y) = 0$. De plus, nous nous souvenons que pour les rubans zigzag, les cônes de Dirac ne se superposent pas, c'est-à-dire que $K_y \neq K'_y$. Nous en déduisons ainsi les conditions aux limites zigzag sur les composantes de la fonction d'onde :

| | | | | |
|---------------|--------------------|----|-----------------------|--------|
| bord droit : | $\varphi_A(L) = 0$ | et | $\varphi'_A(L) = 0$ | (4.23) |
| bord gauche : | $\varphi_B(0) = 0$ | et | $\varphi'_B(0) = 0$. | |

Celles-ci peuvent être satisfaites en tronquant les potentiels de volume $V_b(x)$ et $V_h(x)$ par une barrière infinie de potentiel en $x = 0$ ou en $x = L$ selon le bord considéré. Nous obtenons alors quatre équations de Schrödinger découplées, soit une par sous-réseau (A ou B) et par vallée (\vec{K} ou \vec{K}'), avec les potentiels $V_{A/B}^{(j)}(x)$ correspondant. Les quatre spectres d'énergie $\epsilon_n(x_c)$ qui en découlent sont reliés par une simple translation de L des positions x_c et/ou par un décalage des niveaux comme déjà discuté plus haut. Comme ces quatre problèmes sont très similaires, on prend ici l'exemple du bord de droite dans la vallée \vec{K} , pour lequel la fonction d'onde doit satisfaire $\varphi_A(L) = 0$. Le potentiel $V_A(x)$ correspondant, qui tient compte de cette condition aux limites, s'écrit alors :

$$V_A(x) = \begin{cases} V_h(x) & \text{pour } x < L \\ \infty & \text{pour } x > L . \end{cases}\quad (4.24)$$

Le potentiel $V_A(x)$ est tracé sur la figure 4.3.

Dans la suite, plutôt que de considérer le potentiel $V_A(x)$ seul, nous le considérerons en présence de son image par rapport au bord. Les états propres du double puits $\mathcal{V}_A(x)$ ainsi obtenu sont deux fois plus nombreux que dans le problème original, et se distinguent par leur parité. Seules les fonctions d'onde antisymétriques s'annulent alors sur le bord, et satisfont donc les conditions aux limites zigzag (4.23). Ainsi, on pourra tout à fait considérer le potentiel de bord zigzag comme un double puits symétrique ($V_A +$ son image) illustré sur la figure 4.4, et ne garder que les états antisymétriques. Formellement, le problème du bord droit zigzag dans

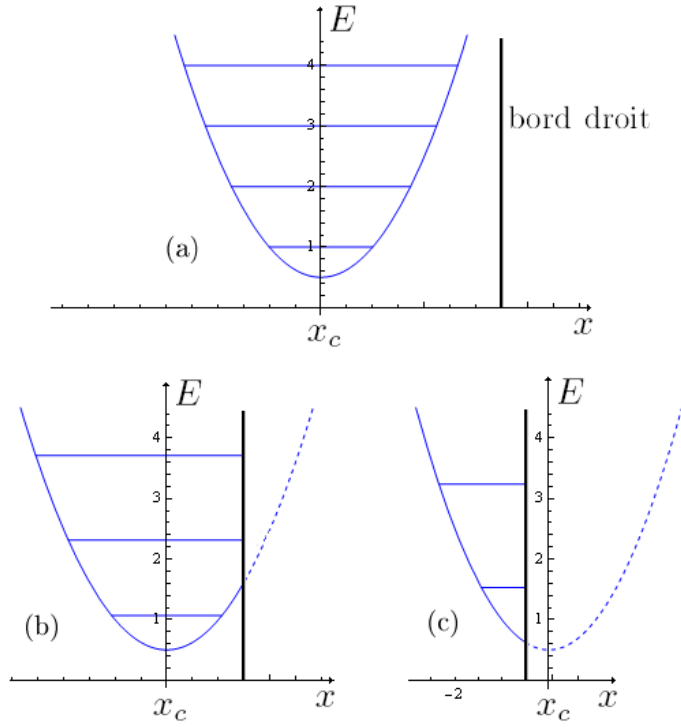


FIGURE 4.3: Potentiel $V_A(x)$ qui décrit la composante $\varphi_A(x)$ de la fonction d'onde au voisinage d'un bord droit zigzag sous fort champ magnétique pour différentes valeurs de x_c . Afin de satisfaire la condition $\varphi_A(x = L) = 0$, le bord est modélisé par une barrière infinie de potentiel. Au fur et à mesure que x_c se rapproche du bord, l'énergie de chaque niveau augmente. Les niveaux représentés ici ont été calculés analytiquement par une méthode détaillée au chapitre 5.

la vallée \vec{K} s'écrit donc

$$\left(-\frac{1}{2}\partial_x^2 + \mathcal{V}_A(x) \right) \Phi_{AS}(x) = E_n^{AS}(x_c) \Phi_{AS}(x) \quad (4.25)$$

$$\mathcal{V}_A(x) = \frac{1}{2}(|x| + x_c)^2 + \frac{1}{2}$$

où l'indice AS fait référence aux solutions antisymétriques et où l'on a effectué les translations $x - L \rightarrow x$ et $x_c - L \rightarrow x_c$, de sorte que le bord droit soit toujours fixé en $x = 0$ (et l'on a également $x_c < 0$). L'intérêt de considérer un double puits symétrique plutôt qu'un simple puits coupé par une barrière infinie est à la fois esthétique et pratique : esthétique parce que nous verrons dans les prochaines sections que le problème des bords de type armchair ou du RCDQF se ramènent tous deux, mais pour des raisons différentes, à un même problème de double puits, mais *asymétrique* cette fois. Pratique, car l'étude quantitative semiclassique du chapitre 5 tirera profit du cas « simple » du potentiel symétrique avant d'être généralisée au cas asymétrique plus technique.

4.2.2 Correspondance bord - volume des niveaux d'énergie

Dans la section 3.2.2 du chapitre 3, nous avons établi une relation entre les niveaux d'énergie ϵ_n^b exactement au bord et les niveaux de Landau en volume ϵ_n^v .

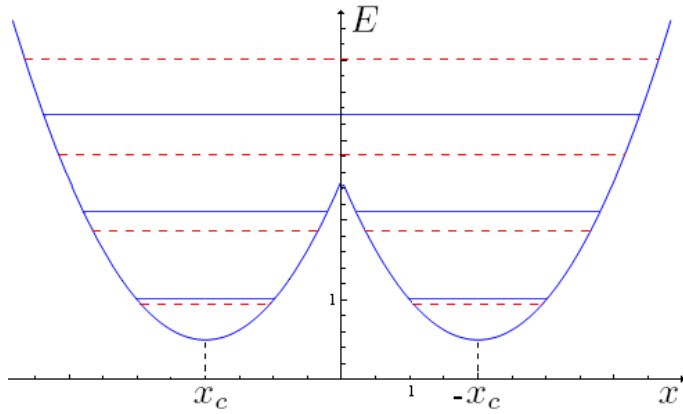


FIGURE 4.4: Potentiel $\mathcal{V}_A(x)$. Le bord droit est positionné en $x = 0$. Les niveaux d'énergie sont deux fois plus nombreux que pour le simple puits $V_A(x)$, et il ne faut garder que ceux des fonctions d'onde antisymétriques (bleu). Les niveaux représentés en pointillés sont ceux des états symétriques. Tous ces niveaux ont été calculés analytiquement, c'est l'objet du chapitre suivant.

Cette répartition des niveaux, propre aux bords zigzag, est de la forme $\epsilon_n^b = \epsilon_{2n+1}^v$ avec $n \geq 0$ pour le bord gauche dans la vallée \vec{K} ainsi que pour le bord droit dans la vallée \vec{K}' , alors qu'elle est de la forme $\epsilon_n^b = \epsilon_{2n}^v$ avec $n > 0$ lorsque l'on change de bord ou de vallée. Tout ceci avait été mis en relief sur la figure 3.12 par des traits horizontaux de couleur. Nous avons maintenant tous les éléments pour comprendre ces relations très particulières à partir de ce qui a été développé dans ce chapitre.

En effet, nous venons de montrer que les niveaux d'énergie $E_n(x_c)$ à l'approche du bord zigzag sont ceux des états antisymétriques d'un double puits harmonique symétrique. En particulier, les niveaux dans la vallée \vec{K} à l'approche du bord droit sont donnés par le potentiel $\mathcal{V}_A(x)$ de la figure 4.4. Or, lorsque x_c touche le bord, c'est à dire exactement en $x_c = 0$, le potentiel $\mathcal{V}_A(x)$ est un simple puits harmonique identique à $V_h(x)$ (figure 4.5). Les états antisymétriques que l'on garde sont donc ceux de l'oscillateur harmonique $V_h(x)$, d'où la correspondance entre les niveaux d'énergie (cette propriété étant conservée par la transformation (4.21) $E_n \rightarrow \epsilon_n \propto \sqrt{E_n}$ entre les énergies du problème effectif et celles du problème initial). Le bord gauche se traite de façon très similaire au bord droit, la seule différence étant que la fonction d'onde s'annule maintenant sur le sous-réseau B . On retrouve alors un problème de double puits symétrique $\mathcal{V}_B(x)$, qui diffère de $\mathcal{V}_A(x)$ en ce qu'il est décalé en énergie vers le bas d'un niveau de Landau exactement (le signe de x_c étant également changé) :

$$\mathcal{V}_B(x) = \frac{1}{2}(|x| - x_c)^2 - \frac{1}{2} \quad (4.26)$$

Pour le reste, tout ce qui a été dit plus haut demeure valable, en particulier la correspondance entre l'énergie sur les bords ϵ^b et en volume ϵ^v . En effet, lorsque x_c touche le bord gauche, le potentiel $\mathcal{V}_B(x)$ est égal au potentiel de volume $V_b(x)$, et les états antisymétriques qu'il faut garder sont ceux du potentiel harmonique. La répartition des niveaux d'énergie est donc exactement décalée dans son ensemble d'un niveau de Landau entre le bord droit et le bord gauche, ce qui crée l'alternance de la correspondance bord-volume d'un bord à l'autre.

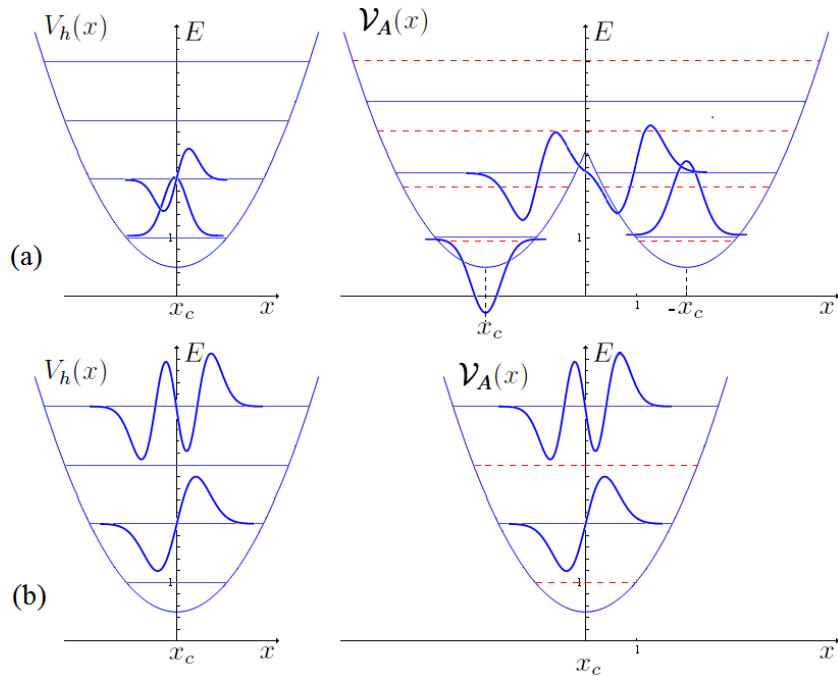


FIGURE 4.5: Allure des états antisymétriques du potentiel $\mathcal{V}_A(x)$ et de quelques niveaux d'énergie pour deux différentes valeurs de x_c pour (a) $x_c \neq 0$ et (b) $x_c = 0$. Lorsque $x_c = 0$, les potentiels $\mathcal{V}_A(x)$ et $V_h(x)$ coïncident. Les états anti-symétriques à garder sont donc exactement les états antisymétriques de l'oscillateur harmonique $V_h(x)$.

4.3 Hamiltonien effectif : bord armchair

Dans cette section, nous cherchons à décrire les niveaux d'énergie au voisinage des bords armchair sous fort champ magnétique.

4.3.1 Hamiltonien de volume

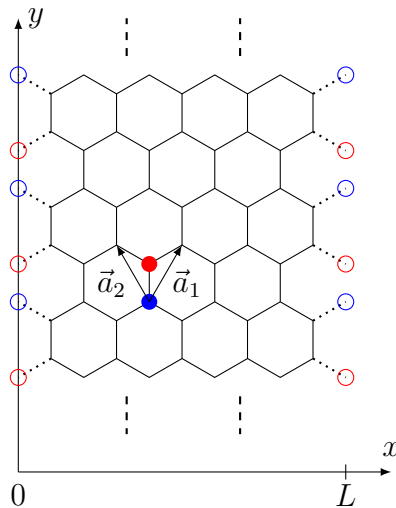


FIGURE 4.6: Ruban de graphène à bords armchair. Les cercles en $x = 0$ et $x = L$ représentent les sites vides sur lesquels on impose à la fonction d'onde de s'annuler.

Nous nous intéressons ici aux bords armchair qui s'étendent le long de l'axe y

sur la figure 4.6. Le repère que nous utilisons n'est donc plus le même que pour les bords zigzag, si bien que nous devons d'abord récrire l'Hamiltonien de volume sous champ magnétique à basse énergie. Avec le choix d'axes et de maille de la figure 4.6, l'Hamiltonien de Dirac s'obtient à partir de l'Hamiltonien (1.9) en y faisant les substitutions $q_y \rightarrow -q_x$ et $q_x \rightarrow q_y$. On garde ensuite la jauge de Landau $A_y = -Bx$ et $A_x = 0$, pour introduire, grâce à la substitution de Peierls, le champ magnétique perpendiculaire $\vec{B} = -B\vec{e}_z$, l'Hamiltonien s'écrit alors :

$$\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'} = i\frac{\gamma a_0}{\ell_B} \times \begin{pmatrix} 0 & -\partial_x - (x - x_c) & 0 & 0 \\ -\partial_x + x - x_c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \partial_x - (x - x_c) \\ 0 & 0 & \partial_x + x - x_c & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Cette rotation des axes n'affecte en rien les valeurs propres du système en volume, et l'on vérifie que l'on a bien :

$$\hat{H}_{\vec{K},\vec{K}'}^2 = 2 \left(\frac{\gamma a_0}{\ell_B} \right)^2 \mathcal{H}_{eff}$$

où l'Hamiltonien adimensionné \mathcal{H}_{eff} a été défini plus haut par (4.19). Les composantes de la fonction d'onde, en revanche, vont prendre des expressions légèrement différentes. En utilisant les opérateurs création $\hat{a} = x - x_c + iq_x$ et annihilation $\hat{a}^\dagger = x - x_c - iq_x$, on obtient les relations :

$$\begin{aligned} i\hat{a}^\dagger\varphi_A &= \epsilon\varphi_B & i\hat{a}\varphi'_A &= \epsilon\varphi'_B \\ i\hat{a}\varphi_B &= -\epsilon\varphi_A & i\hat{a}^\dagger\varphi'_B &= -\epsilon\varphi'_A. \end{aligned} \quad (4.28)$$

De la même façon que précédemment, nous pouvons immédiatement déterminer les expressions des composantes $\varphi_{A/B}^{(\prime)}$ à un facteur de phase près ce qui nous donne, selon le signe de l'énergie ϵ , les relations :

$$\begin{array}{cc} \vec{K} & \vec{K}' \\ \epsilon > 0 & \begin{aligned} \varphi_B &= \Phi_n & \varphi'_B &= -\Phi_{n-1} \\ \varphi_A &= -i\Phi_{n-1} & \varphi'_A &= i\Phi_n \end{aligned} \\ \epsilon < 0 & \begin{aligned} \varphi_B &= \Phi_n & \varphi'_B &= \Phi_{n-1} \\ \varphi_A &= i\Phi_{n-1} & \varphi'_A &= i\Phi_n \end{aligned} \end{array} \quad (4.29)$$

où le facteur i provient de la rotation des axes, mais n'a aucune conséquence sur le spectre d'énergie. Ces expressions vont nous être très utiles dans la suite pour construire qualitativement les solutions en présence des bords.

4.3.2 Potentiel effectif et couplage des vallées

Nous explicitons maintenant les conditions aux limites pour les rubans de type armchair. On se souvient que pour de tels rubans, les cônes de Dirac se superposent

de sorte que l'on a $K_y = K'_y$. Ainsi, à basse énergie, la fonction d'onde électronique s'écrit cette fois :

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{r}) \\ \Psi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= e^{i(K_y+q_y)y} \left[\alpha e^{iK_x x} \begin{pmatrix} \varphi_A(x) \\ \varphi_B(x) \end{pmatrix} + \beta e^{iK'_x x} \begin{pmatrix} \varphi'_A(x) \\ \varphi'_B(x) \end{pmatrix} \right].\end{aligned}\quad (4.30)$$

Par ailleurs, les bords armchair sont constitués à la fois de sites A et de sites B . Par conséquent, on impose aux deux composantes Ψ_A et Ψ_B de s'annuler sur les sites vides en $x = 0$ et $x = L$, c'est à dire $\Psi^\pm(x = 0, y) = 0$ et $\Psi^\pm(x = L, y) = 0$. Comme la situation est complètement équivalente pour un bord ou pour l'autre, nous n'explicitons pour l'instant que les conditions aux limites en $x = 0$, ce qui donne :

$$\begin{aligned}\alpha\varphi_A(0) &= -\beta\varphi'_A(0) \\ \alpha\varphi_B(0) &= -\beta\varphi'_B(0).\end{aligned}\quad (4.31)$$

Par conséquent, *les bords armchair couplent les vallées d'un même sous-réseau*. Il faut donc renoncer à diagonaliser le problème pour chacune des composantes indépendamment les unes des autres, et rechercher des solutions sous la forme :

$$\begin{aligned}\Psi^\pm(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} \Psi_A^\pm(\vec{r}) \\ \Psi_B^\pm(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= e^{i(K_y+q_y)y} \left[e^{iK_x x} \begin{pmatrix} \varphi_A^\pm(x) \\ \varphi_B^\pm(x) \end{pmatrix} \pm e^{iK'_x x} \begin{pmatrix} \varphi'^\pm_A(x) \\ \varphi'^\pm_B(x) \end{pmatrix} \right],\end{aligned}\quad (4.32)$$

où les conditions aux limites (4.31) s'écrivent :

$$\boxed{\begin{aligned}\varphi_A^\pm(0) &= \mp\varphi'^\pm_A(0) \\ \varphi_B^\pm(0) &= \mp\varphi'^\pm_B(0)\end{aligned}}\quad (4.33)$$

et où les indices \pm font référence aux raccordements « symétrique » et « anti-symétrique » qu'impliquent les conditions aux limites entre les composantes. Le couplage des vallées a doublé le nombre de variables. Par conséquent nous devons doubler le nombre de conditions aux limites. On insère alors les relations de continuité (4.33) dans l'équation de Dirac afin d'extraire des conditions aux limites portant sur la dérivée des composantes. Toujours pour le bord gauche ($x = 0$), on obtient ainsi :

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_x\varphi_A^\pm\Big|_0 &= \pm\partial_x\varphi'^\pm_A\Big|_0 \\ \partial_x\varphi_B^\pm\Big|_0 &= \pm\partial_x\varphi'^\pm_B\Big|_0.\end{aligned}}\quad (4.34)$$

À cause du couplage entre vallées imposé par les conditions aux limites (4.33) et (4.34), il n'est plus si aisé de construire une équation de Schrödinger effective qui décrive les états de bord. Une telle gymnastique est toutefois possible en suivant la procédure suggérée par Brey et Fertig [15] et Abanin et Levitov [16]. Nous reprenons ici rigoureusement et en détails cette méthode, en construisant alors deux nouvelles fonctions Φ^\pm comme suit :

$$\begin{aligned}\Phi^\pm(x) &\equiv \varphi_B^\pm(-x)\theta(-x) \mp \varphi'^\pm_B(x)\theta(x) \\ &= -i(\varphi'^\pm_A(-x)\theta(-x) \mp \varphi_A^\pm(x)\theta(x))\end{aligned}\quad (4.35)$$

où θ est la fonction de Heaviside. Les fonctions Φ^\pm sont solutions d'une équation de Schrödinger avec un potentiel en double puits asymétrique $V_g(x)$ qui vaut $V_h(x)$ pour $x > 0$ et $V_b(x)$ pour $x < 0$:

$$\left(-\frac{1}{2}\partial_x^2 + V_g(x) \right) \Phi^\pm(x) = E_n^\pm(x_c)\Phi^\pm(x) \quad (4.36)$$

$$V_g(x) = \frac{1}{2} [(|x| - x_c)^2 + \theta(x) - \theta(-x)] \quad (4.37)$$

Le potentiel $V_g(x)$ (l'indice g se référant au bord gauche) est représenté sur la figure (4.7). L'asymétrie de ce potentiel est le résultat combiné du couplage des vallées induit par les conditions aux limites armchair d'une part, et du décalage en énergie, entre les potentiels harmoniques de volume $V_h(x)$ et $V_b(x)$ d'autre part. On rappelle que ce décalage, égal à l'écart entre deux niveaux de Landau, est fixé par le commutateur $[q_x, x]$ qui apparaît lors de l'élévation au carré de l'Hamiltonien de Dirac. Pour que ce nouveau problème satisfasse les conditions aux limites armchair

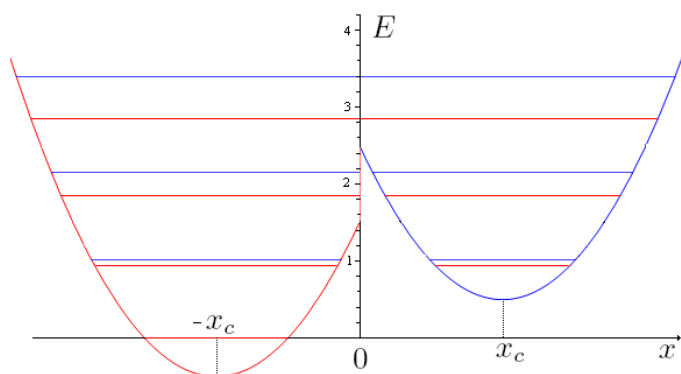


FIGURE 4.7: Potentiel $V_g(x)$ décrivant les états de bord gauche armchair sous fort champ magnétique. Les niveaux d'énergie E^\pm sont représentés en bleu et rouge. Ils sont calculés analytiquement au chapitre 5.

(4.33) et (4.34), on impose aux fonctions Φ^\pm de respecter les équations de continuité suivantes :

$$\begin{cases} \Phi^\pm(0^-) = \Phi^\pm(0^+) \\ \partial_x \Phi^\pm \Big|_{0^-} = \partial_x \Phi^\pm \Big|_{0^+} \end{cases} \quad (4.38)$$

4.3.3 Allure des états de bord

On discute ici l'allure des solutions de l'équation de Schrödinger (4.36). À basse énergie, les fonctions d'onde s'écrivent comme une somme des contributions de spineurs provenant de chaque vallée. Les conditions aux limites armchair ont pour effet de coupler les composantes φ_A aux composantes φ'_A et les composantes φ_B aux composantes φ'_B . Les différentes composantes φ ne peuvent donc plus être traitées séparément, mais peuvent être considérées à travers les nouvelles fonctions Φ . L'équation de Schrödinger (4.36) à laquelle ces fonctions Φ obéissent, possède le spectre d'énergie des états de bord armchair (une fois la transformation des énergies (4.21) effectuée). En outre, les fonctions Φ étant construites à partir des

composantes φ , il apparaît clairement deux types de solutions Φ^\pm que nous avons pris soin d'indexer dès le début de cette section.

En effet, considérons tout d'abord le cas simple où la particule est loin du bord. Dans ce cas, les deux puits qui composent le potentiel asymétrique V_g sont découplés, et les deux composantes φ et φ' à partir desquelles on a défini Φ prennent leurs expressions du volume (4.29), soit par exemple, $\varphi_B(-x) = \Phi_n(-x)$ et $\varphi'_B(x) = -\Phi_{n-1}(x)$ dans le cas où $\epsilon > 0$. Au fur et à mesure que x_c se rapproche du bord, ces deux composantes sont progressivement modifiées et donnent lieu aux états de bord qui respectent les conditions de continuité énoncées plus haut. Or, ces conditions de continuité autorisent deux types de solutions que l'on obtient en connectant en $x = 0$ les deux composantes $\varphi_B(-x)$ et $\varphi'_B(x)$ de deux manières différentes, comme illustré sur la figure 4.8.

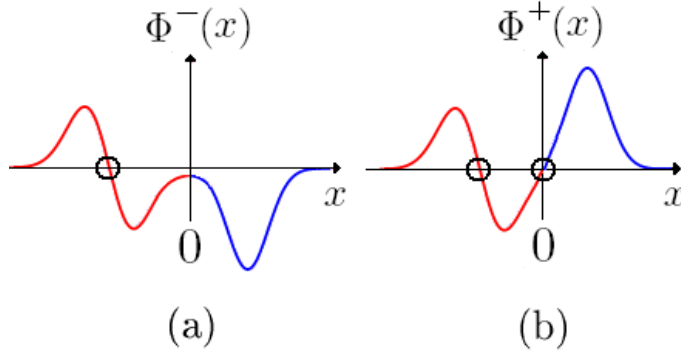


FIGURE 4.8: Illustration, pour $n = 1$, de l'allure de $\Phi^+(x)$ et $\Phi^-(x)$, fonctions propres de l'équation de Schrödinger effective pour les bords armchair. Ces fonctions n'exhibent pas le même nombre de nœuds (cercles noirs), ce qui donne lieu à deux types d'états de bords d'énergie $\epsilon_n^+(x_c)$ ou $\epsilon_n^-(x_c)$. (a) Les équations de continuité génèrent une fonction $\Phi^-(x)$ avec $2n - 1 = 1$ nœud. Les composantes $\varphi_B^-(x)$ et $-i\varphi_A^-(x)$ sont représentées en rouge alors que les composantes $\varphi_B^+(x)$ et $-i\varphi_A^+(x)$ sont représentées en bleu. (b) Les équations de continuité génèrent une fonction $\Phi^+(x)$ avec $2n = 2$ nœuds. Les composantes $\varphi_B^-(x)$ et $-i\varphi_A^-(x)$ sont représentées en rouge alors que les composantes $\varphi_B^+(x)$ et $-i\varphi_A^+(x)$ sont représentées en bleu.

Ainsi, les deux fonctions Φ^- et Φ^+ se distinguent par leur nombre de nœuds et donc par leurs énergies E_n^- et E_n^+ . Ces deux raccords ne modifient pas tout à fait les composantes $\varphi_B^{(j)}$ de la même façon, et l'on doit alors distinguer les composantes $\varphi_B^{(j)+}$ des composantes $\varphi_B^{(j)-}$, les premières étant associées aux fonctions Φ^+ possédant $2n$ nœuds, alors que les secondes sont associées aux fonctions Φ^- possédant $2n - 1$ nœuds. La différence d'un nœud provient du raccordement en $x = 0$ (figure 4.8).

Afin de déterminer complètement la fonction d'onde des états de bords, la discussion doit se poursuivre en considérant maintenant les composantes $\varphi_A^{(j)}$. Loin des bords, et pour $\epsilon > 0$, leur expression est donnée en (4.29). Les fonctions $\Phi(x)$ définies en (4.35) sont donc construites par une combinaison des fonctions $\Phi_n(-x)$ pour $x < 0$ et $\Phi_{n-1}(x)$ pour $x > 0$, exactement comme précédemment avec les composantes $\varphi_B^{(j)}$, le reste de la discussion étant donc strictement identique. La figure 4.8 illustre donc tant l'allure des composantes $\varphi_B^{(j)}$ que celle des composantes $\varphi_A^{(j)}$. Autrement dit, ainsi définies, les fonctions $\Phi^\pm(x)$ (4.35) déterminent complètement les quatre composantes $\varphi_{A/B}^{(j)\pm}(x)$ des deux types d'états de bords armchair

$\Psi^+(x)$ et $\Psi^-(x)$, respectivement d'énergie $\epsilon_n^+(x_c)$ et $\epsilon_n^-(x_c)$, comme déjà discuté sur la figure 3.13 de la page 52.

4.3.4 Potentiel effectif pour le bord de droite

Par souci de comparaison avec le bord zigzag, la suite de l'étude se concentrera sur le bord droit. Celui-ci se traite de façon équivalente au bord gauche en imposant cette fois $\Psi(L, y) = 0$. On obtient un problème effectif similaire où le potentiel de bord gauche $V_g(x)$ a été remplacé par :

$$V_d(x) = \frac{1}{2} [(|x| + x_c)^2 + \theta(-x) - \theta(x)] \quad (4.39)$$

et où l'on a effectué les translations $x - L \rightarrow x$ et $x_c - L \rightarrow x_c$ de façon à ce que x_c ait pour origine le bord droit. Pour plus de commodité dans les calculs à venir, le potentiel $V_d(x)$ est ainsi centré en $x = 0$ plutôt qu'en $x = L$. Le potentiel $V_d(x)$ est représenté sur la figure 4.9.

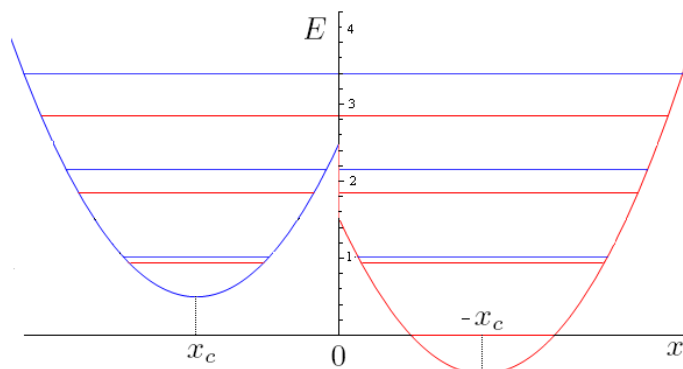


FIGURE 4.9: Potentiel $V_d(x)$ décrivant les états armchair du bord de droite sous fort champ magnétique. Les niveaux d'énergie E^+ en bleu et E^- en rouge sont calculés analytiquement au chapitre 5.

4.4 Hamiltonien effectif : bords plats du réseau carré à demi quantum de flux

Les derniers types de conditions aux bords que nous allons traiter sont ceux du réseau carré au demi quantum de flux (RCDQF), qui ne sont pas du tout discutés dans la littérature.

4.4.1 Potentiel effectif et couplage des sous-réseaux

Nous avons vu dans les sections 4.1.2 et 4.1.3 que l'Hamiltonien effectif du RCDQF en volume sous champ magnétique était, à une rotation près, le même que celui du graphène. Nous cherchons donc ici à résoudre l'équation de Schrödinger (4.21-4.19) en considérant le RCDQF sur un ruban comme illustré sur la figure 4.10. De tels types de bords imposent à la fonction d'onde de s'annuler sur un seul sous-réseau pour un bord donné. De plus, la constitution en A ou B d'un type de bord est arbitraire, ce qui fait quatre profils de spectre à considérer. Au chapitre

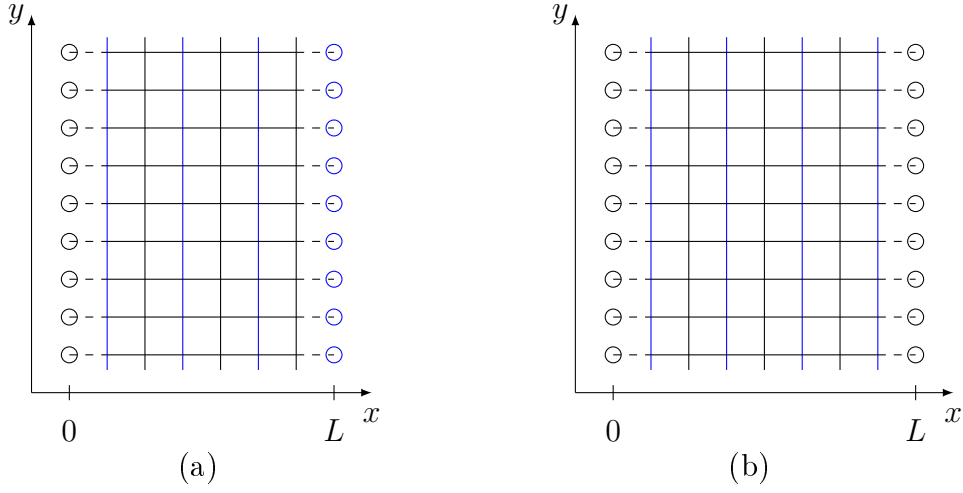


FIGURE 4.10: Réseau carré au demi quantum de flux découpé en rubans. Les traits bleus (noirs) relient deux sites par un terme de saut $+t$ ($-t$). Deux configurations sont proposées ici. Les cercles de couleur représentent les sites vides sur lesquels on impose à la fonction d'onde de s'annuler, bleu pour B et rouge pour A . La composante de la fonction d'onde sur le sous-réseau A Ψ_A doit s'annuler en $x = 0$. En $x = L$, c'est la composante (a) Ψ_B , (b) Ψ_A qui s'annule.

précédent, nous avons vu que de tels types de bord ne superposaient pas les cônes de Dirac, de sorte que $K_y \neq K'_y$, de la même façon que pour les bords zigzag. À basse énergie, la fonction d'onde s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{r}) \\ \Psi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= e^{iq_y y} \left[\alpha e^{i\vec{K}\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi_A(x) \\ \varphi_B(x) \end{pmatrix} + \beta e^{i\vec{K}'\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi'_A(x) \\ \varphi'_B(x) \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (4.40)$$

Dans les calculs numériques effectués au chapitre 3, nous avons (implicitement) toujours considéré le cas d'un bord gauche constitué de sites B , le bord droit quant à lui pouvant être constitué soit de sites A , soit de sites B . Comme précédemment, nous nous concentrons d'abord sur le bord gauche. Nous imposons donc à la fonction d'onde de s'annuler sur les sites A vacants en $x = 0$, soit $\Psi_A^\pm(0) = 0$. Nous obtenons ainsi les relations :

$$\begin{aligned} \varphi_A(0) &= 0 \\ \varphi'_A(0) &= 0. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Les deux vallées pouvant donc être traitées indépendamment et de façon équivalente, nous ne considérerons que la vallée \vec{C} . Pour ajouter ces conditions de bord au problème effectif de volume, il est nécessaire de travailler dans la base de l'Hamiltonien \mathcal{H}_{eff} , c'est à dire $\{\tilde{\varphi}_A, \tilde{\varphi}_B\}$ pour la vallée \vec{C} . En utilisant l'expression des $\tilde{\varphi}_{A/B}$ donnée par (4.12), les relations précédentes impliquent alors :

$$\boxed{\begin{aligned} \tilde{\varphi}_B(0) &= -\tilde{\varphi}_A(0) \\ \tilde{\varphi}'_B(0) &= -\tilde{\varphi}'_A(0). \end{aligned}} \quad (4.42)$$

Ainsi, une fois la rotation \mathcal{R} effectuée, les conditions de bord du ruban carré couplent les sous-réseaux d'une même vallée. Par ailleurs, à la différence des cas

étudiés précédemment, la discussion s'enrichit ici par le rôle joué par le signe de l'énergie ϵ , comme nous le verrons un peu plus loin. La démarche est assez semblable à celle suivie lors de l'étude des bords armchair. Pour tenir compte du couplage des sous-réseaux, on construit une nouvelle fonction Φ définie par :

$$\begin{aligned}\Phi(x) &= \tilde{\varphi}_B(-x)\theta(-x) - \tilde{\varphi}_A(x)\theta(x) \\ &= \tilde{\varphi}'_A(-x)\theta(-x) - \tilde{\varphi}'_B(x)\theta(x)\end{aligned}\quad (4.43)$$

à laquelle on impose la continuité en $x = 0$, $\Phi(0^-) = \Phi(0^+)$, ainsi qu'à sa dérivée $\partial_x \Phi(x) \Big|_{0^-} = \partial_x \Phi(x) \Big|_{0^+}$. Comme dans le cas armchair, cette seconde condition aux limites est obtenue en insérant la première dans l'équation de Dirac. La fonction Φ vérifie alors l'équation de Schrödinger suivante :

$$\boxed{\left(-\frac{1}{2}\partial_x^2 + V_g(x)\right)\Phi(x) = E_n^\pm(x_c)\Phi(x)}\quad (4.44)$$

$$\boxed{V_g(x) = \frac{1}{2}[(|x| - x_c)^2 + \theta(x) - \theta(-x)]}\quad (4.45)$$

où le potentiel $V_g(x)$ est exactement *le même potentiel asymétrique que pour les bords armchair* (figure 4.7). Les conditions de bord du RCDQF conduisent donc, sous champ magnétique, au même problème effectif que pour le cas armchair, à savoir une équation de Schrödinger avec un double potentiel harmonique asymétrique. On vient ainsi de montrer que les états de bords des rubans armchair et du RCDQF étaient tous deux solutions de la même équation de Schrödinger. *Toutefois, la forme de ce potentiel n'a pas la même origine dans les deux cas : alors que les bords armchair mélangent les vallées, les bords du RCDQF mélangent les sous-réseaux A et B, une fois la rotation \mathcal{R} effectuée.*

Par ailleurs, les spectres d'énergie calculés au chapitre 3 pour ces deux types de rubans (figures 3.13 page 52 pour armchair et figure 3.15 page 53 pour le RCDQF) sont manifestement différents. Les deux éléments importants pour comprendre cette différence, sont d'une part, la superposition des cônes de Dirac dans le cas armchair, et d'autre part, le fait que la fonction d'onde s'annule sur les deux sous-réseaux dans le cas armchair tandis qu'elle ne s'annule que sur un seul dans le cas du RCDQF. Par conséquent, les fonctions Φ , solutions de l'équation de Schrödinger (4.44), n'autorisent pas les mêmes possibilités de raccordement au bord entre les composantes $\tilde{\varphi}$ que pour les rubans armchair. Il faut donc maintenant discuter en détail ces différentes contraintes qui sélectionnent un seul type de raccordement et donc un seul type d'état de bord dans une vallée donnée.

4.4.2 Allure des niveaux d'énergie

Nous discutons maintenant l'allure des niveaux d'énergie $\epsilon_n(x_c)$ des états de bords du RCDQF, à partir de la forme des solutions de l'équation de Schrödinger (4.44). Cette fois, la fonction Φ est construite à partir des composantes $\tilde{\varphi}$ dont on discute ici l'allure. Ces niveaux ont été présentés au chapitre précédent (page 53). Loin des bords, les expressions des composantes $\tilde{\varphi}$ sont données par (4.15). Plaçons-nous d'abord dans la vallée \vec{C} lorsque $\epsilon > 0$. Dans ce cas, $\tilde{\varphi}_B(-x) = \Phi_1(-x)$ et $-\tilde{\varphi}_A(x) = \Phi_0(x)$, comme illustré sur la figure 4.11. Lorsque x_c se rapproche du bord, les deux puits du potentiel V_g se resserrent et les composantes $\tilde{\varphi}$ sont

modifiées, tout en respectant la condition aux limites (4.42). Cette dernière impose donc l'existence d'un nœud supplémentaire au point de raccordement en $x = 0$, comme illustré sur la figure 4.11. Le niveau d'énergie associé à cet état Φ sera donc du type ϵ_n^+ . *Contrairement au cas armchair, les conditions aux limites du RCDQF n'autorisent pas de deuxième solution* d'énergie ϵ_n^- . Ceci est dû aux conditions aux limites (4.42) qui ne tolèrent qu'un type de raccordement (signe $-$) alors que les conditions aux limites armchair (4.38) en tolèrent deux (signes \mp).

Lorsque l'énergie est négative ($\epsilon < 0$), les expressions des composantes $\tilde{\varphi}$ en volume sont différentes, et valent $\tilde{\varphi}_B(-x) = \Phi_1(-x)$ et $-\tilde{\varphi}_A(x) = -\Phi_0(x)$. La condition aux limites étant toujours la même, elle reste satisfaite sans ajouter de nœud au point de raccordement en $x = 0$ (figure 4.11). Dans ce cas, le niveau d'énergie associé sera cette fois de type ϵ_n^- . Ceci explique que pour un bord donné, les états de bord ne sont pas les mêmes pour les particules ou pour les trous au sein d'une même vallée (figure 3.15 page 53). La symétrie de sous-réseaux « $\epsilon(k_y) = -\epsilon(k_y)$ » a été brisée.

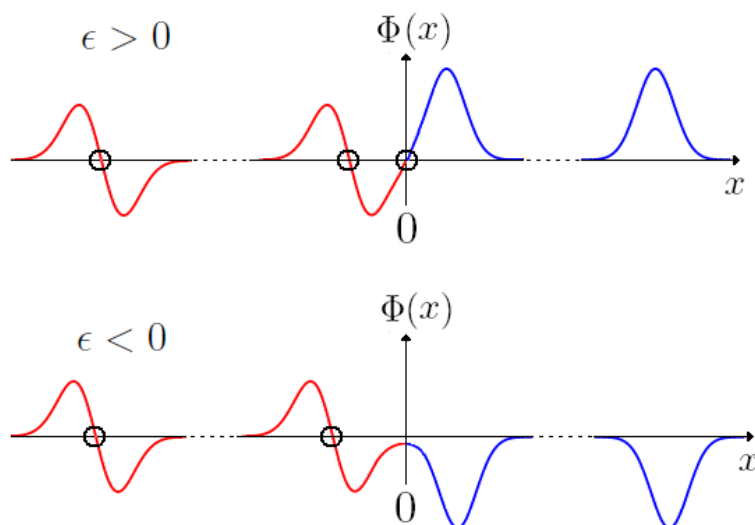


FIGURE 4.11: Allure, pour $n = 1$ des composantes $\tilde{\varphi}_{A/B}$ dans la vallée \vec{C} près du bord gauche. Pour $\epsilon > 0$, loin du bord, les composantes prennent leur valeur de volume, soit $\tilde{\varphi}_B(-x) = \Phi_1(-x)$ et $-\tilde{\varphi}_A(x) = \Phi_0(x)$. La condition aux limites $\tilde{\varphi}_B(0) = -\tilde{\varphi}_A(0)$ implique l'existence d'un nœud supplémentaire lors du raccordement de ces deux composantes. La fonction Φ possède donc $2n = 2$ nœuds et le niveau d'énergie qui lui est associé est du type ϵ^+ . Pour $\epsilon < 0$, la condition aux limites reste la même alors que des composantes en volume valent cette fois $\tilde{\varphi}_B(-x) = \Phi_1(-x)$ et $-\tilde{\varphi}_A(x) = -\Phi_0(x)$. La fonction Φ n'a donc pas de nœud supplémentaire en $x = 0$ et ne possède donc que $2n - 1 = 1$ nœud. Le niveau d'énergie est donc de type ϵ^- .

Notons que tout ceci est en parfait accord avec les spectres d'énergie calculés numériquement au chapitre précédent et présentés sur la figure 3.15 (page 53). La discussion peut ensuite être poursuivie pour la vallée \vec{C}' ainsi que pour le bord droit de façon similaire sans difficulté.

4.5 Conclusions du chapitre

Nous avons montré dans ce chapitre que les niveaux d'énergie sous fort champ magnétique des rubans zigzag, armchair et du RCDQF avec un nombre pair ou

impair de chaînes peuvent être analysés à basse énergie à l'aide d'une équation de Schrödinger effective. Celle-ci est construite en élevant au carré l'équation de Dirac sous champ magnétique ainsi qu'en tenant compte, à travers un potentiel effectif, des conditions aux limites imposées à la fonction d'onde par les différents réseaux. Ce potentiel est un double puits harmonique, dont on ne garde que les solutions autorisées par les conditions aux limites. Dans le cas zigzag, le double puits est symétrique et l'on ne garde que les solutions qui s'annulent au bord. De plus, la profondeur des puits dépend de la vallée et du sous-réseau considérés, les deux potentiels symétriques à considérer étant décalés en énergie d'un niveau de Landau. *Tous les niveaux d'énergie des états de bord zigzag sont donc les solutions antisymétriques d'un double puits harmonique symétrique.* Ces niveaux sont notés ϵ^{AS} . Nous avons de plus expliqué la correspondance entre la valeur des niveaux aux bords ϵ_n^b et des niveaux en volume ϵ_n^v . *Dans les cas des bords armchairs et de ceux du RCDQF, le potentiel est asymétrique, et les deux puits qui le composent sont décalés en énergie d'un niveau de Landau.* Les niveaux d'énergie des états de bord sont donc de deux types, que l'on dénote par $\epsilon^+(x_c)$ et $\epsilon^-(x_c)$, ces derniers étant ceux présentant une inversion de pente en fonction de x_c bien visible sur les spectres numériques du chapitre 3 (pages 52 et 53). Toutefois, *l'asymétrie du potentiel n'a pas la même origine dans les deux cas* : il s'agit d'un effet de couplage des vallées dans le cas armchair et d'un couplage des sous-réseaux une fois la rotation \mathcal{R} effectuée dans le cas du RCDQF. Par des arguments qualitatifs à partir des profils des composantes de la fonction d'onde ainsi que des différentes conditions aux limites, il a été possible de décrire correctement quel type de solution il faut garder en fonction du bord, de la vallée et du signe de l'énergie. Cette discussion peut finalement être résumée de la manière suivante : les états de bord du RCDQF sont de type $\epsilon_n^{-\xi \text{sgn}(\epsilon) \text{sgn}(\text{AB})}$, où $\xi = \pm$ est l'indice de vallée (+ pour la vallée C et - pour la vallée C'), $\text{sgn}(\epsilon)$ est le signe de l'énergie du niveau considéré, et $\text{sgn}(\text{AB})$ désigne le signe du paramètre de saut le long du bord, induit par le déphasage Aharonov-Bohm (- pour les sites B et + pour les sites A .) Nous sommes ainsi parvenus à expliquer les nombreuses différences entre les spectres d'énergie calculés numériquement au chapitre précédent pour les différents rubans.

Nous résumons les différentes structures des états de bord en fonction de la nature du bord sur le tableau ci-dessous.

| | vallées | sous-réseaux | potentiel effectif | états de bord |
|----------|---------------|--------------|--------------------|--|
| zigzag | indépendantes | indépendants | symétrique | ϵ^{AS} |
| armchair | couplées | indépendants | asymétrique | ϵ^- et ϵ^+ |
| RCDQF | indépendantes | couplés | asymétrique | $\epsilon^{-\xi \text{sgn}(\epsilon) \text{sgn}(\text{AB})}$ |

Chapitre 5

Étude semiclassique des états de bord sous champ magnétique fort

La nature ne se soucie pas de nos difficultés analytiques.

Augustin-Jean Fresnel

Sommaire

| | | |
|------------|---|------------|
| 5.1 | Quantification de l'action | 78 |
| 5.1.1 | L'action semiclassique du problème stationnaire | 78 |
| 5.1.2 | Règle de Quantification de Bohr-Sommerfeld | 80 |
| | Double puits symétrique | 82 |
| | Double puits asymétrique | 83 |
| 5.2 | Quantification de l'orbite cyclotron | 84 |
| 5.2.1 | Orbites cyclotron en présence de deux bords | 88 |
| 5.3 | Approximation WKB : méthodologie | 90 |
| 5.4 | Calculs des niveaux d'énergie des états de bord par la méthode WKB | 93 |
| 5.4.1 | Double puits symétrique harmonique | 94 |
| | Région \mathcal{A} : $R \leq x_c $ | 94 |
| | Région \mathcal{B} : $ x_c \leq R$ | 97 |
| 5.4.2 | Double puits asymétrique harmonique | 98 |
| | Région \mathcal{C} : $R_g \leq R_d \leq x_c $ | 99 |
| | Région \mathcal{D} : $R_g \leq x_c \leq R_d$ | 101 |
| | Région \mathcal{E} : $ x_c \leq R_g \leq R_d$ | 103 |
| 5.5 | Résultats analytiques quantitatifs | 104 |
| | Potentiel symétrique : le ruban zigzag | 104 |
| | Potentiel asymétrique : les rubans armchair et du réseau carré au demi quantum de flux | 106 |
| 5.6 | Conclusions du chapitre et perspectives | 107 |

Les niveaux d'énergie des différents états de bord sous champ magnétique, étudiés dans les chapitres 3 et 4, sont décrits à basse énergie par des équations de Schrödinger avec un potentiel effectif $\mathcal{V}(x)$ en double puits harmonique :

$$\left(-\frac{1}{2}\partial_x^2 + \mathcal{V}(x)\right)\Psi(x) = E_n(x_c)\Psi(x) \quad (5.1)$$

où les énergies propres adimensionnées $E_n(x_c)$ sont reliées aux énergies $\epsilon_n(x_c)$ des états de bord par une transformation du type $\epsilon_n \propto \pm t\sqrt{E_n}$ (voir les relations (4.21) page 62). Le potentiel $\mathcal{V}(x)$ est symétrique dans le cas des bords zigzag du graphène (voir la figure 4.4 de la page 66 pour le bord de droite dans la vallée \vec{K}), car ce type de bord ne couple pas les composantes $\varphi_{A/B}^{(i)}$ de la fonction d'onde. En revanche, $\mathcal{V}(x)$ est asymétrique à la fois dans le cas du bord armchair et des bords du réseau carré au demi quantum de flux (RCDQF) (voir la figure 4.9 de la page 72), car ces types de bord couplent respectivement les vallées ou les sous-réseaux. Enfin, les fonctions propres Ψ sont ici des fonctions scalaires, et non des fonctions spinorielles comme dans le problème de Dirac originel. Plus précisément, elles sont égales aux composantes $\varphi_{A/B}^{(i)}$ dans le cas zigzag, alors qu'elles sont une combinaison de ces composantes dans le cas armchair. Dans le cas du réseau carré, elles sont une combinaison des composantes ayant au préalable subi une rotation.

Le but de ce chapitre est de calculer analytiquement les niveaux d'énergie $E_n(x_c)$ des états de bord, en résolvant les différentes équations de Schrödinger adimensionnées (5.1) pour des puits symétriques et asymétriques. Pour ce faire, nous développons une approche semiclassique avec deux niveaux d'approximation différents. Dans le premier cas, nous considérons que les puits sont découplés, et on quantifie l'action associée à chaque puits par la règle de Bohr-Sommerfeld, d'où l'on peut obtenir le spectre. Ces résultats seront interprétés en terme d'un mélange d'orbites cyclotron et de leur quantification. Dans le second cas, on tient compte du recouvrement de la fonction d'onde d'un puits à l'autre en s'appuyant sur le formalisme WKB. À partir d'ici, on se concentre, sauf précision contraire, sur les bords de droite que l'on centre en $x = 0$.

5.1 Quantification de l'action

5.1.1 L'action semiclassique du problème stationnaire

Dans cette section, on rétablit la constante \hbar .

La diagonalisation exacte et analytique de l'équation de Schrödinger (5.1) avec les potentiels en double puits est un problème très compliqué. Nous nous proposons d'aborder ce problème en utilisant l'approximation semiclassique, valable lorsque les variations de la longueur d'onde de de Broglie de la particule sont petites devant la longueur d'onde elle même [79]. Cette méthode implique de travailler, non plus directement avec l'Hamiltonien de Schrödinger \mathcal{H} , mais avec une action S qui lui est reliée, et dont la quantification, pour des trajectoires d'énergies constantes E , donne accès au spectre d'énergie.

Considérons une équation de Schrödinger dépendante du temps

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \mathcal{V}(x)\right)\psi(x, t) = i\hbar \partial_t\psi(x, t) \quad (5.2)$$

et cherchons les fonctions d'onde sous la forme :

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(x)} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ &= \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} .\end{aligned}\tag{5.3}$$

En réinjectant cette expression dans l'équation de Schrödinger dépendante du temps (5.2), on obtient l'équation de Schrödinger stationnaire (5.1) qui nous intéresse (au choix d'unités près). L'approximation semiclassique suggère alors de développer l'action $\sigma(x)$ en puissances de \hbar comme [79] :

$$\sigma(x) = S(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2(x) + \dots\tag{5.4}$$

et de ne garder que les termes à l'ordre le plus bas. En injectant le développement de l'action (5.4) dans la phase de la fonction d'onde de l'équation de Schrödinger stationnaire, on obtient, à l'ordre 0 en \hbar :

$$\frac{1}{2m} (\partial_x S(x))^2 + \mathcal{V}(x) = E\tag{5.5}$$

qui donne immédiatement l'expression :

$$S(E, x) = \int dx' \sqrt{2m(E - \mathcal{V}(x'))} .\tag{5.6}$$

L'action $S(E, x)$ se relie simplement à l'action classique S_{cl} du système, laquelle est définie comme l'intégrale sur le temps du Lagrangien \mathcal{L} :

$$S_{cl} \equiv \int_0^t dt' \mathcal{L}(x, \dot{x}, t')\tag{5.7}$$

où \dot{x} est la dérivée de x par rapport au temps. Le Lagrangien $\mathcal{L}(x, \dot{x}, t')$ est relié à l'Hamiltonien $\mathcal{H}(x, p, t')$ du système par une transformation de Legendre, de sorte que l'action classique s'écrit :

$$S_{cl} = \int_0^t dt' p \dot{x} - \int_0^t dt' \mathcal{H}(x, p, t') .\tag{5.8}$$

Comme on ne s'intéresse qu'aux solutions stationnaires, on a d'autre part :

$$\mathcal{H}(x, p, t) \equiv \frac{p^2}{2m} + \mathcal{V}(x) = E\tag{5.9}$$

ce qui donne immédiatement

$$p(x) = \sqrt{2m(E - \mathcal{V}(x))} .\tag{5.10}$$

L'action classique (5.8) se réécrit alors simplement comme :

$$\begin{aligned}S_{cl}(E) &= \int dx' p(x') - Et \\ &= \int dx' \sqrt{2m(E - \mathcal{V}(x'))} - Et\end{aligned}\tag{5.11}$$

où le premier terme, appelé *action réduite*, n'est autre que l'action $S(E, x)$ (5.6) qui intervient dans la phase de la fonction d'onde stationnaire à l'ordre le plus bas en \hbar . L'approximation semiclassique consiste donc finalement à ne garder que l'action classique S_{cl} dans la phase de la fonction d'onde, la partie temporelle se factorisant lorsqu'on ne cherche que les solutions stationnaires :

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &\cong e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}(E)} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}S(E, x)} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ &= \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\end{aligned}\tag{5.12}$$

où l'on retrouve la forme générale (5.3) de la fonction d'onde et où

$$S(E, x) = \int dx' p(x').\tag{5.13}$$

est la quantité que nous appellerons *action* dans la suite de l'étude. Notons enfin que l'approximation à l'ordre 0 en \hbar (5.5) a nécessité de négliger le terme $\hbar \left| \frac{\partial_x^2 S(x)}{(\partial_x S(x))^2} \right| \ll 1$ ce qui se réécrit comme :

$$\left| \frac{1}{2\pi} \partial_x \lambda(x) \right| = \left| \partial_x \frac{\hbar}{p(x)} \right| \ll 1\tag{5.14}$$

où λ est la longueur d'onde de de Broglie. Cette condition de validité, que nous avons déjà mentionnée plus haut, est mise en défaut au voisinage des points tels que $\mathcal{V}(x) = E$. Ces points sont appelés *points de rebroussement*.

5.1.2 Règle de Quantification de Bohr-Sommerfeld

Dans la suite du chapitre on prendra $\hbar = 1$.

Nous rappelons ici l'expression des potentiels $\mathcal{V}(x)$:

$$\mathcal{V}(x) = \mathcal{V}_d(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}(x - x_c)^2 + \frac{1}{2} & \text{pour } x \leq 0 \\ \frac{1}{2}(x + x_c)^2 - \frac{1}{2} & \text{pour } x \geq 0 \end{cases}\tag{5.15}$$

pour les bords armchair ou ceux du RCDQF, et

$$\mathcal{V}(x) = \mathcal{V}_A(x) = \frac{1}{2} (|x| + x_c)^2 + \frac{1}{2}\tag{5.16}$$

pour les bords zigzag dans la vallée \vec{K} . Ces deux potentiels sont représentés sur les figures 5.1 et 5.2. Pour une énergie E fixée, nous définissons les points de rebroussement comme les points qui délimitent la zone classiquement autorisée. Leur position x_1 et x_2 est indiquée sur les figures 5.1 et 5.2 pour les puits de gauche. Les potentiels étant constitués de deux puits, on peut définir de la même façon les points de rebroussement x_3 et x_4 dans les puits de droite. Ainsi, le long d'une trajectoire fermée, l'action (5.13) de la particule est simplement donnée par :

$$S(E, x_c) = 2 \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2(E - \mathcal{V}(x))}.\tag{5.17}$$

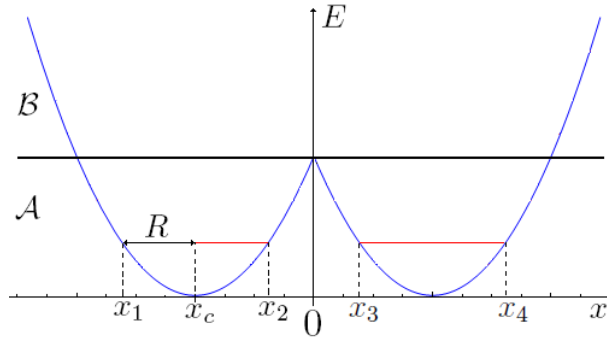


FIGURE 5.1: Potentiel symétrique. Les deux puits harmoniques sont centrés en $\pm x_c$. Les régions \mathcal{A} et \mathcal{B} nécessitent des traitements semiclassiques adéquats.

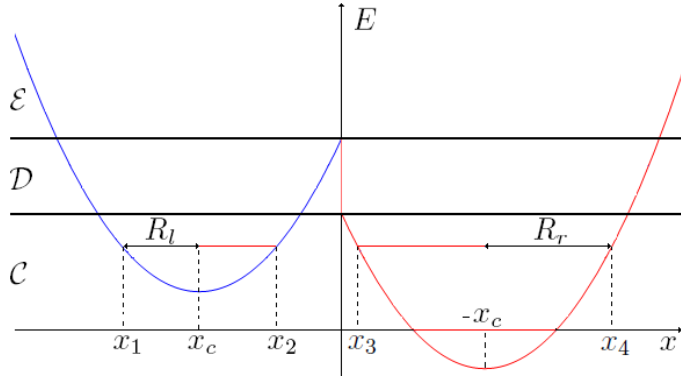


FIGURE 5.2: Potentiel asymétrique. Les deux puits harmoniques sont centrés en $\pm x_c$. Le décalage en énergie entre les deux puits implique l'existence de trois régions que l'on considérera séparément pour le traitement semiclassique.

Une telle action est quantifiée par la règle de Bohr-Sommerfeld comme [79] :

$$S(E, x_c) = 2\pi (n + \gamma(E, x_c)) \quad (5.18)$$

où $n \geq 0$ est le nombre de nœuds de la fonction d'onde et $\gamma(E, x_c)$ est une fonction telle que $0 < \gamma(E, x_c) < 1$ et qui encode toute l'information sur la procédure de connection de la fonction d'onde aux points de rebroussement. Dans le cas d'un simple potentiel harmonique isolé, γ prend la valeur constante bien connue $1/2$. Ici, dans ces problèmes de double puits, $\gamma(x_c, E)$ n'est plus une constante, mais dépend à la fois de l'énergie E et de la distance x_c au bord, à cause du recouvrement de la fonction d'onde d'un puits à l'autre.

Nous supposons dans cette section que les deux puits sont découplés, ce qui revient à négliger les effets de recouvrement de la fonction d'onde d'un puits à l'autre. De cette manière, on suppose donc que γ reste une constante. Comme l'action S , donnée par la relation (5.17), dépend des points de rebroussement, il est indispensable de distinguer différentes régions dont chacune nécessite un traitement semiclassique particulier. Ces régions, dénotées par une lettre de \mathcal{A} à \mathcal{E} , et délimitées par des lignes noires horizontales sur les figures 5.1 et 5.2, diffèrent par le nombre de points de rebroussement dans chaque puits, c'est-à-dire de points de position x_i vérifiant $\mathcal{V}(x_i) = E$. Dans la suite, nous considérerons séparément le puits de gauche ($x < 0$) ou de droite ($x > 0$), et appellerons par abus de langage *points de rebroussement* les points de position $x_i = 0$ lorsque le puits dans la région considérée est coupé en ce point (par exemple $x_2 = 0$ dans la région \mathcal{B}).

Avant de passer au calcul des niveaux d'énergie, nous introduisons ici le rayon cyclotron R qui sera utile pour la suite. Cette quantité mesure, en unités de la longueur magnétique ℓ_B , le rayon classique de la trajectoire circulaire d'une particule chargée dans un champ magnétique. Pour une énergie donnée, le rayon cyclotron est simplement relié à la largeur du potentiel harmonique à une dimension associé à ce problème, et donc à l'énergie E . Dans le cas du potentiel symétrique $\mathcal{V}_A(x)$, la relation entre R et E est donnée par $E = 1/2(R^2 + 1)$. Pour le cas du potentiel asymétrique, les deux puits n'ayant pas la même largeur, il est nécessaire de définir deux rayons cyclotrons R_g et R_d différents, (voir figure 5.2). Ces rayons sont reliés à l'énergie par $E = (R_g^2 + 1)/2 = (R_d^2 - 1)/2$.

Double puits symétrique

On considère le potentiel $\mathcal{V}_A(x)$ qui décrit les états de bords du bord de droite d'un ruban zigzag dans la vallée \vec{K} . Le potentiel $\mathcal{V}_A(x)$ étant symétrique, nous poursuivons la discussion en ne regardant, sauf mention contraire, que le puits de gauche, c'est à dire que nous nous limitons à $x < 0$. Nous distinguons alors deux régions : la région \mathcal{A} , pour laquelle $|x_c| > R$, et la région \mathcal{B} pour laquelle $|x_c| < R$.

Région \mathcal{A} : $|x_c| > R$. Les deux points de rebroussement, situés en x_1 et x_2 sont sur la parabole et vérifient donc $\mathcal{V}_A(x_1) = \mathcal{V}_A(x_2) = E$. On a donc $x_1 = x_c - R$ et $x_2 = x_c + R$, de sorte que l'action (5.17) dans le puits de gauche vaut :

$$S_{\mathcal{A}}(R) = \pi R^2 \quad (5.19)$$

Les énergies s'obtiennent simplement en quantifiant cette action par la règle de Bohr-Sommerfeld en prenant $\gamma = 1/2$. Il en découle directement les niveaux de Landau $E_n = n + 1$ avec $n \geq 0$, et donc $\epsilon_n \propto \sqrt{B(n+1)}$ pour cette région. Le terme $n + 1$ provient du décalage $+1/2$ en énergie du potentiel $\mathcal{V}_A(x)$. Le reste du spectre est donné par la contribution de la vallée \vec{K}' . Ainsi, en traitant le potentiel $\mathcal{V}'_A(x)$ de la même façon, on trouve cette fois le spectre $E_n = n$ avec $n \geq 0$. En tenant compte des deux vallées, on obtient finalement le spectre dégénéré $E_n = n$ avec $n \geq 1$ et un niveau d'énergie nulle non dégénéré, et donc les niveaux de Landau dégénérés de vallée en volume bien connus du graphène et du réseau carré à demi quantum de flux $\epsilon_n \propto \pm\sqrt{Bn}$ avec $n \geq 0$.

Région \mathcal{B} : $|x_c| < R$. Seul le point de rebroussement externe, situé en x_1 , vérifie $\mathcal{V}_A(x_1) = E$. Le point de rebroussement interne, situé en $x_2 = 0$, ne vérifie pas cette relation (il n'est plus situé sur la parabole). L'action est alors modifiée, et l'on trouve maintenant :

$$S_{\mathcal{B}}(R, x_c) = R^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \sin(2\theta) \right) \quad (5.20)$$

où nous avons introduit le paramètre $\theta \equiv \arccos \frac{x_c}{R}$. L'action dépend maintenant de la distance x_c au bord et sa quantification par la règle de Bohr-Sommerfeld n'est pas immédiate : le puits de gauche n'est plus un potentiel harmonique et il n'y a donc aucune raison d'avoir simplement $\gamma = 1/2$. En revanche, si l'on considère les deux puits du potentiel $\mathcal{V}_A(x)$, un état dans la région \mathcal{B} possède alors deux points de rebroussement x_1 et x_4 sur une parabole (c'est à dire tels que $\mathcal{V}_A(x_1) = \mathcal{V}_A(x_4) = E$), et l'on s'attend donc à $\gamma = 1/2$. Ainsi, l'action totale $S_t = 2S_{\mathcal{B}}$ dans le double puits harmonique $\mathcal{V}_A(x)$ est quantifiée par la règle de

Bohr-Sommerfeld comme $S_t = 2\pi(p + 1/2)$. Nous nous rappelons que nous ne devons garder que les solutions antisymétriques, c'est-à-dire celles dont la fonction d'onde possède un nombre impair de nœuds, ce qui implique $p = 2n + 1$. Par conséquent, une telle quantification conduit à :

$$S_{\mathcal{B}}(R, x_c) = 2\pi \left(n + \frac{3}{4} \right) . \quad (5.21)$$

On vient ainsi de retrouver la valeur $\gamma = 3/4$ pour un puits harmonique coupé par une barrière infinie de potentiel, comme discuté en détails dans une étude récente [80]. En identifiant les deux expressions (5.20) et (5.21), on obtient finalement une famille d'équations implicites en E et x_c indexées par l'entier n qui labelle ainsi les états de bord. Le spectre $E_n(x_c)$ ainsi obtenu par cette méthode pour le bord zigzag droit dans la vallée \vec{K} est tracé sur la figure 5.3. Les discontinuités dans le spectre ne sont pas physiques ; elles proviennent de l'approximation utilisée qui implique par exemple un changement brutal $\gamma = 1/2 \rightarrow \gamma = 3/4$. Ce spectre sera comparé plus loin avec celui obtenu en tenant compte du couplage entre les puits ainsi qu'avec les spectres liaisons-fortes.

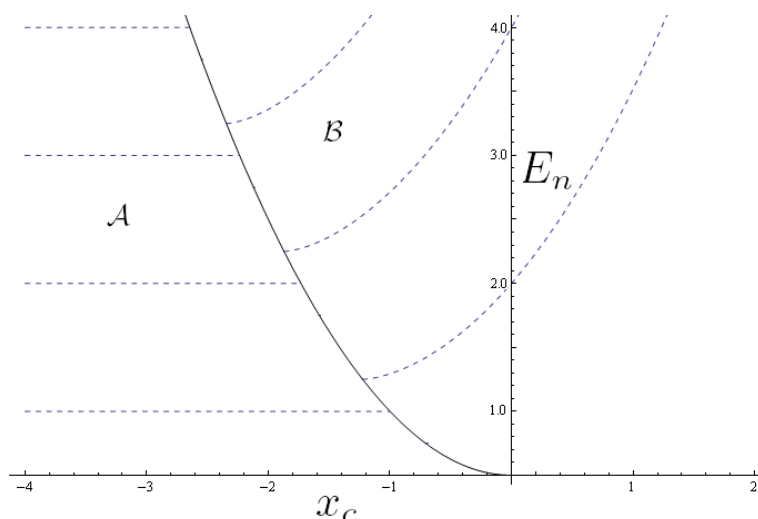


FIGURE 5.3: Niveaux d'énergie du potentiel $\mathcal{V}_A(x)$ obtenus avec la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld avec $\gamma = 1/2$ dans la région \mathcal{A} et $\gamma = 3/4$ dans la région \mathcal{B} . Les régions \mathcal{A} et \mathcal{B} sont séparées par une parabole d'équation $E = (x_c^2 + 1)/2$. La discontinuité de chaque niveau entre les régions \mathcal{A} et \mathcal{B} est due au fait que l'approximation utilisée ne tient pas compte correctement de la procédure de connection de la fonction d'onde au voisinage des points de rebroussement internes.

Double puits asymétrique

A cause de l'asymétrie du potentiel $\mathcal{V}_d(x)$, nous devons maintenant distinguer trois régions, que nous dénotons \mathcal{C} , \mathcal{D} , \mathcal{E} comme représenté sur la figure 5.2. Pour chacune de ces régions, on définit deux actions par la relation (5.17), S_g dans le puits de gauche et S_d dans le puits de droite. Ainsi, les niveaux dans chaque puits sont indexés par des entiers différents $n_g, n_d \geq 0$.

Région \mathcal{C} : $R_g \leq R_d \leq |x_c|$. Dans cette région, les quatre points de rebroussement x_i vérifient $\mathcal{V}(x_i) = E$ comme c'était le cas dans la région \mathcal{A} . Par conséquent,

l'action dans chaque puits a la même forme que celle dans la région \mathcal{A} , mais avec des rayons cyclotrons différents :

$$\begin{aligned} \text{puits de gauche :} & \quad S_g = S_{\mathcal{A}}(R_g) \\ \text{puits de droite :} & \quad S_d = S_{\mathcal{A}}(R_d) . \end{aligned} \tag{5.22}$$

En utilisant la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld où $\gamma = 1/2$ à la fois pour l'action S_g et l'action S_d , on trouve les niveaux d'énergie $E_{n_g} = n_g + 1$ dans le puits de gauche et $E_{n_d} = n_d$ dans le puits de droite, et donc finalement $n \equiv n_d = n_g + 1$. Ceci conduit à des niveaux de Landau $E_n = n$ avec $n \geq 1$ et un niveau non dégénéré $E_0 = 0$.

Région \mathcal{D} : $R_g \leq |x_c| \leq R_d$. De façon semblable à la région \mathcal{B} , à cause de la marche de potentiel, le point de rebroussement intérieur x_3 du puits de droite n'est plus sur la parabole, ce qui change la forme de l'expression de S_d à la manière de la région \mathcal{B} . L'expression de S_g reste quant à elle inchangée, et les deux actions s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \text{puits de gauche :} & \quad S_g = S_{\mathcal{A}}(R_g) \\ \text{puits de droite :} & \quad S_d = S_{\mathcal{B}}(R_d, x_c) . \end{aligned} \tag{5.23}$$

Dans le puits de gauche, la situation est identique à la région \mathcal{C} , de sorte que la quantification de S_g donne $E_n = n$ avec $n \geq 1$. Il reste à quantifier l'action S_d . Il pourrait être alors tentant de prendre $\gamma = 3/4$, comme dans la région \mathcal{B} , où le point de rebroussement interne n'était pas sur la parabole non plus. Toutefois il s'agissait là d'un cas de figure différent, où le potentiel harmonique était coupé par une barrière infinie de potentiel. Nous comprenons bien que ni $\gamma = 1/2$, ni $\gamma = 3/4$ n'est à même de décrire correctement cette région. Le recouvrement de la fonction d'onde vers le puits de gauche étant inévitable, on peut alors se convaincre que le point de rebroussement de gauche dans le puits de droite est en quelque sorte davantage en x_1 qu'en $x_3 = 0$. On s'attend donc à ce que la valeur de γ soit plus proche de $1/2$ que de $3/4$ puisque $\mathcal{V}(x_1) = E$. Bien sur, ce choix reste naïf, et seule une étude plus précise tenant compte du couplage entre les puits peut rendre compte correctement de cette région (voir section 5.3). Néanmoins, on obtient une famille d'équations implicites en énergie E et x_c , indexée par n , d'où nous pouvons extraire numériquement les niveaux d'énergie approximatifs $E_n(x_c)$ des états de bord.

Région \mathcal{E} : $|x_c| \leq R_g \leq R_d$. Dans cette dernière région, seuls les points x_1 et x_4 vérifient $\mathcal{V}(x_1) = \mathcal{V}(x_4) = E$, comme dans la région \mathcal{B} . L'action s'écrit alors :

$$S_{\mathcal{E}} = S_{\mathcal{B}}(R_g, x_c) + S_{\mathcal{B}}(R_d, x_c) . \tag{5.24}$$

Cette expression est toujours valable lorsque x_c change de signe. Puisque les deux points de rebroussement sont tous deux sur une parabole, l'action $S_{\mathcal{E}}$ se quantifie simplement par la règle de Bohr-Sommerfeld avec $\gamma = 1/2$. On obtient alors une famille d'équations implicites en E et x_c , labellée par un entier n' différent de n , qui indice deux fois plus de niveaux que dans la région \mathcal{C} .

Les niveaux d'énergie obtenus avec la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld à γ constant sont représentés sur la figure 5.4.

5.2 Quantification de l'orbite cyclotron

Cette section est consacrée à l'interprétation géométrique des spectres obtenus dans la section précédente par la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld de

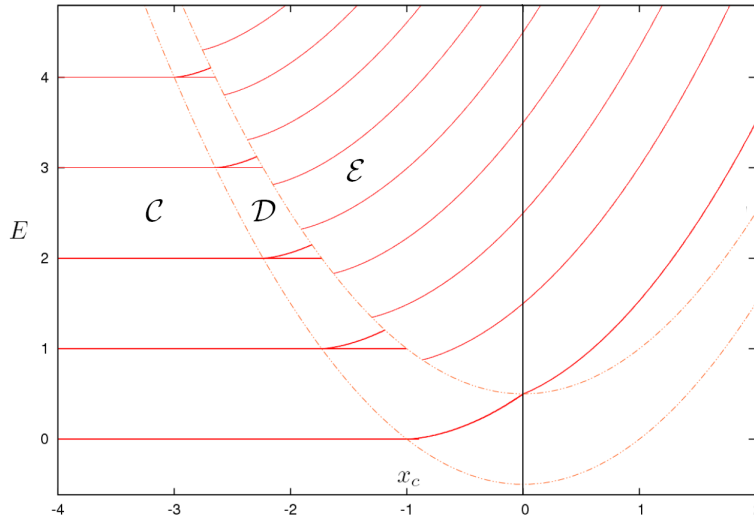


FIGURE 5.4: Niveaux d'énergies obtenus par la méthode de quantification de l'action par la règle de Bohr-Sommerfeld avec $\gamma = 1/2$ pour le potentiel asymétrique. Les trois régions \mathcal{C} , \mathcal{D} et \mathcal{E} sont séparées par les paraboles d'équations $E = (x_c^2 + 1)/2$ et $E = (x_c^2 - 1)/2$. Au voisinage de ces paraboles, l'approximation $\gamma = cste$ utilisée ici n'est plus valide, ce qui implique par exemple la discontinuité des niveaux $n > 0$ entre les régions \mathcal{D} et \mathcal{E} .

l'action à γ constant.

Ces potentiels à une dimension décrivent des particules libres sans masse à deux dimensions dans un champ magnétique. L'action de ce problème bidimensionnel est en fait proportionnelle à l'aire inscrite dans l'orbite cyclotron de la particule (voir l'annexe B dans le cas simple d'un système sans bord). Quand le système est en forme de ruban, la jauge de Landau s'impose, et le problème à deux dimensions est strictement équivalent à un problème de potentiel harmonique effectif à une seule dimension. Cette réduction du nombre de degrés de liberté n'empêche en rien l'interprétation en terme d'aire cyclotron de l'action S calculée dans la section précédente. Au contraire, l'approche par l'action S du problème réduit à une dimension, s'avère même particulièrement commode pour interpréter les résultats en présence des bords dans les différentes régions de \mathcal{A} à \mathcal{E} . C'est ce que nous nous proposons de faire ici.

Lorsque la distance du centre de l'orbite cyclotron $|x_c|$ est supérieure au rayon cyclotron R , l'action donnée en (5.19), vaut :

$$S(E) = \pi R^2 = \mathcal{A}(E) \quad (5.25)$$

où l'aire $\mathcal{A}(E)$, décrit simplement un disque en unité de ℓ_B et ne dépend que de l'énergie. La quantification de l'action impose donc la quantification de l'aire comme :

$$\mathcal{A}(E) = 2\pi(n + \gamma)\ell_B^2 \quad (5.26)$$

Cette quantification implique à son tour une quantification du rayon cyclotron. En prenant $\gamma = 1/2$, on obtient alors des rayons cyclotron prenant les valeurs quantifiées $R_n^2 = 2n+1$ assurant ainsi un spectre d'énergie en $E_n = R_n^2/2 \pm 1/2 = n$, où l'on retrouve les niveaux de Landau $E_n = n$ du volume.

Lorsque $|x_c|$ devient inférieure à R , l'orbite classique est maintenant ouverte, et la particule rebondit le long du bord que l'on a modélisé par une barrière infinie de potentiel. La particule va donc se déplacer le long du bord et acquérir

de la dispersion en k_y : l'énergie cinétique de la particule va donc augmenter et les niveaux d'énergie commencent à se courber à l'approche du bord. Comme déjà mentionné ailleurs [81, 82], la quantification de l'aire porte maintenant sur l'aire comprise entre l'orbite ouverte et le bord. En effet, l'action (5.20) calculée précédemment prend une interprétation géométrique claire, où le paramètre $\theta = \arccos \frac{x_c}{R}$ mesure l'angle d'ouverture de l'orbite (figure 5.5) :

$$\mathcal{A}(E, x_c) = R^2 \left[\theta - \frac{1}{2} \sin(2\theta) \right] . \quad (5.27)$$

Dans ce cas aussi, l'action est égale à l'aire inscrite dans la trajectoire classique de la particule. À nouveau, la quantification de l'action impose la quantification de l'aire et par conséquent, celle du rayon cyclotron. Nous pouvons maintenant interpréter géométriquement les spectres d'énergie obtenus dans la section précédente.

Pour les bords zigzag, les deux régions \mathcal{A} et \mathcal{B} du spectre de la figure 5.3 peuvent être associées aux deux comportements illustrés sur la figure 5.5. La particule y décrit alors une orbite classique fermée dans la région \mathcal{A} , et ouverte dans la région \mathcal{B} . Les aires inscrites dans ces orbites s'écrivent alors, en unité de ℓ_B :

$$\begin{aligned} \text{(a) région } \mathcal{A}, \quad \mathcal{A}(E) &= \pi R^2 = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \text{(b) région } \mathcal{B}, \quad \mathcal{A}(E, x_c) &= \frac{R^2}{2} (2\theta - \sin 2\theta) = 2\pi \left(n + \frac{3}{4} \right) \end{aligned} \quad (5.28)$$

En y insérant la relation $E = R^2/2 + 1/2$, nous avons déduit une forme approchée des niveaux d'énergie dans la vallée \vec{K} , les niveaux d'énergie dans la vallée \vec{K}' s'obtenant par la substitution $E = R^2/2 - 1/2$.

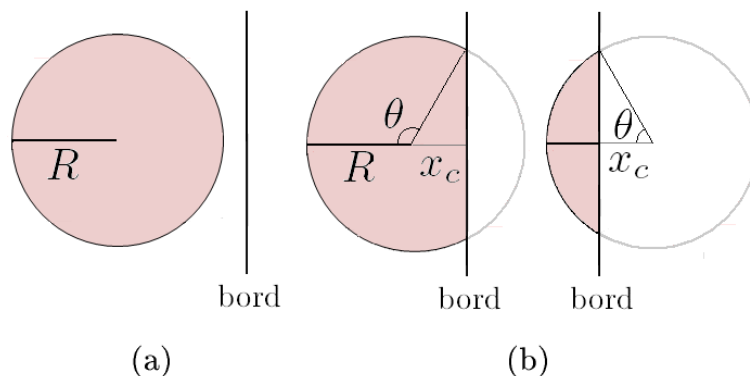


FIGURE 5.5: Orbites cyclotron associées à la particule massive décrite par le problème effectif à l'approche des bords zigzag dans une vallée. (a) L'orbite cyclotron est fermée. L'aire inscrite est quantifiée par la règle de Bohr-Sommerfeld. Il en résulte le spectre d'énergie en niveaux de Landau dans la région \mathcal{A} de la figure 5.13. (b) L'orbite est ouverte et la particule rebondit sur le bord. L'aire comprise entre la trajectoire de la particule et le bord est quantifiée par la règle de Bohr-Sommerfeld, donnant lieu aux niveaux d'énergie dispersifs dans la région \mathcal{B} de la figure 5.13.

Pour les bords armchair ou ceux de RCDQF, la situation est plus originale, puisqu'à cause du couplage des vallées ou des sous-réseaux, il faut tenir compte des deux rayons cyclotron R_g et R_d simultanément.

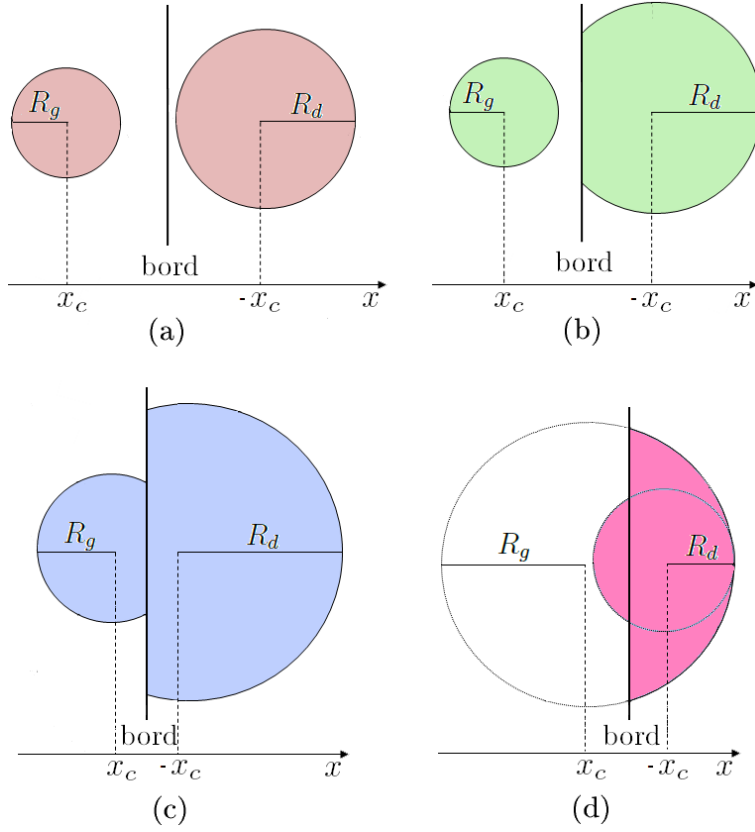


FIGURE 5.6: Orbites cyclotron associées à la particule massive décrite par le problème effectif à l'approche des bords armchair et ceux du RCDQF. (a) Dans chacune des vallées (armchair) ou des sous-réseaux (RCDQF), les orbites cyclotrons sont fermées et définissent deux aires différentes \mathcal{A}_l et \mathcal{A}_r dont chacune est quantifiée par la règle de Bohr-Sommerfeld. Un niveau d'énergie $E_n = n$ correspond aux rayons $R_g = \sqrt{2n-1}$ et $R_d = \sqrt{2n+1}$, n'autorisant pas de fondamental $n = 0$ du côté gauche. Le spectre d'énergie associé est celui des niveaux de Landau dans la \mathcal{C} de la figure 5.15. (b) L'orbite de gauche est toujours fermée alors que celle de droite s'est ouverte en touchant le bord, levant ainsi la dégénérescence dans la région \mathcal{D} du spectre. (c) et (d) Les deux orbites se sont ouvertes en touchant le bord. La quantification de l'aire totale conduit au spectre dispersif de la région \mathcal{E} .

Dans la région \mathcal{C} , pour laquelle $|x_c| > R_d > R_g$, les deux orbites sont fermées. Leur quantification

$$\begin{aligned}
 \text{puits de gauche,} \quad \mathcal{A}_g &= \pi R_g^2 = 2\pi \left(n - \frac{1}{2} \right) \\
 \text{puits de droite,} \quad \mathcal{A}_d &= \pi R_d^2 = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

conduit au spectre de Landau dégénéré $E_n = n$ avec $n \geq 1$, et au niveau non dégénéré $E_0 = 0$. Ceci implique la quantification des rayons cyclotron $R_g = \sqrt{2n-1}$ et $R_d = \sqrt{2n+1}$. On note que le niveau $n = 0$ n'autorise que le rayon cyclotron R_d .

Dans la région \mathcal{D} où $R_d > |x_c| > R_g$ l'orbite de gauche est toujours fermée

alors que celle de droite s'est ouverte. Nous avons alors :

$$\begin{aligned} \text{puits de gauche,} \quad \mathcal{A}_g &= \pi R_g^2 = 2\pi \left(n - \frac{1}{2} \right) & n > 0 \\ \text{puits de droite,} \quad \mathcal{A}_d &= R_d^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \sin 2\theta \right) = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) & n \geq 0 \end{aligned} \quad (5.30)$$

d'où nous avons obtenu le spectre de la région \mathcal{D} . La levée de dégénérescence se comprend par le fait que les deux orbites ne sont plus de même nature. Alors que l'orbite de gauche est fermée et conduit à $E_n = n+1$, celle de droite est maintenant ouverte et l'énergie qui est associée va croître avec x_c , puisque la particule acquiert de la dispersion suivant k_y .

Enfin, dans la région \mathcal{E} , où $R_d > R_g > |x_c|$, toutes les orbites sont ouvertes, et l'on quantifie l'aire totale comme :

$$\mathcal{A}_l + \mathcal{A}_r = 2\pi \left(n' + \frac{1}{2} \right) \quad n' \geq 0 \quad (5.31)$$

tous les niveaux obtenus ne peuvent maintenant que croître avec x_c . En effet les deux orbites rebondissent sur le bord ; la particule acquiert de la dispersion en k_y le long du bord.

5.2.1 Orbites cyclotron en présence de deux bords

Jusqu'ici, nous avons considéré l'évolution du spectre d'énergie au voisinage d'un bord. Si les deux bords sont suffisamment espacés par rapport à la longueur cyclotron ℓ_B , le spectre peut ainsi être appréhendé pour chaque bord indépendamment. Dans le cas d'un ruban étroit, c'est-à-dire pour des largeurs de quelques ℓ_B , le spectre fait intervenir de nouvelles régions que l'on nommera par les lettres de \mathcal{F} à \mathcal{I} , et dans lesquelles les orbites cyclotron sont modifiées par les deux bords. Nous réinterprétons ici les différents spectres liaisons-fortes des rubans en y faisant apparaître les différentes régions pour lesquelles les aires cyclotron du problème effectif sont de natures différentes. Nous prenons l'exemple de rubans pour lesquels $L = 9.6\ell_B$. Le spectre du ruban zigzag est montré sur la figure 5.7 (a) et les orbites cyclotron associées à chacune des composantes $\varphi_{A/B}^{(i)}$ sont schématisées sur la figure 5.7 (b). Le cas du réseau carré et des bords armchair sont présentés sur les figures 5.8, 5.9 (a) et 5.9 (b).

Pour les rubans zigzag, le spectre exhibe clairement trois régions dans chaque vallée, qui correspondent à des géométries différentes des orbites, comme schématisé sur la figure 5.7(b). Les régions \mathcal{A} correspondent aux orbites cyclotron circulaires en volume. Les régions \mathcal{B}_g et \mathcal{B}_d ont déjà été discutées plus haut et correspondent à des orbites cyclotron ouvertes sur un seul côté, à cause de la présence d'un bord. Dans le problème massif effectif, chaque sous-réseau est caractérisé par une orbite (dans la vallée K , la petite orbite bleue pour le sous-réseau A et la grande orbite rose pour le sous-réseau B ; l'opposé dans l'autre vallée). À plus haute énergie, une nouvelle région notée \mathcal{J} apparaît, dans laquelle les deux orbites sont modifiées chacune par un bord différent au sein d'une même vallée. Les courbes noires correspondent exactement à la situation où une orbite cyclotron touche un bord. Leur équation est donnée par :

$$\epsilon(k_y) = t \frac{\sqrt{3}a_0}{2} \sqrt{(q_y - \Delta q_y)^2 \pm 1/\ell_B^2} \quad (5.32)$$

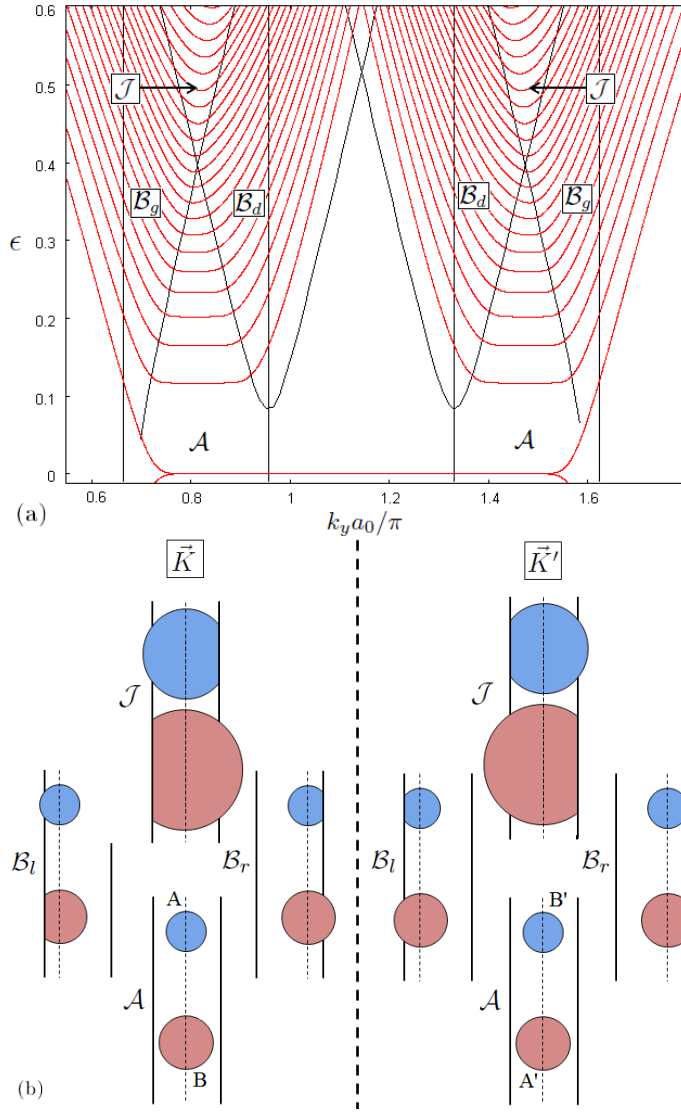


FIGURE 5.7: (a) Spectre liaisons-fortes de basse énergie pour un ruban zigzag, en unités de t . La largeur du ruban est $L = 174 a$ et le flux magnétique à travers une maille vaut $\phi = 0.00126 \phi_0$, de sorte que $L/\ell_B = 9.6$. Les courbes noires représentent la frontière où un rayon cyclotron touche un bord, et les traits verticaux les bords du ruban. (b) Représentation schématique des aires cyclotron dans les différentes régions, en fonction de la distance aux bords, comme discuté dans le texte. Les lettres A, B, A' et B' font référence aux composantes $\varphi_{A/B}^{(j)}$ de la fonction d'onde.

où $\Delta q_y = 0$ pour le bord gauche et $\Delta q_y = L/\ell_B^2$ pour le bord droit. Une simple quantification des aires exposées sur la figure 5.7 (b) permet d'obtenir le spectre avec une assez bonne approximation, à l'exception du voisinage des courbes noires. Ces figures montrent clairement que les bords de droite et de gauche ne jouent pas le même rôle au sein d'une même vallée, et que par conséquent le spectre n'y est pas symétrique, comme déjà discuté plus haut. De plus, une dissymétrie supplémentaire apparaît dans chaque vallée à haute énergie, parce que l'approximation linéaire de basse énergie de l'Hamiltonien liaisons-fortes commence à ne plus être valable.

Le cas des bords armchair (figure 5.9 (a)) et ceux du réseau carré avec un

nombre pair de chaînes (figure 5.8) est plus exotique.¹ On y dénombre neuf régions qui correspondent à autant de géométries différentes des couples d'orbites classiques représentées sur la figure 5.9 (b). Les courbes noires correspondent exactement à la situation où l'une des orbites cyclotron touche un bord. Leur équation est donnée par (5.32) dans le cas armchair, le préfacteur étant remplacé par $2ta$ pour le réseau carré. La région \mathcal{C} aux orbites cyclotron circulaires de volume. L'orbite bleue est associée à la composante du sous réseau A dans la vallée K ainsi qu'au sous-réseau B dans la vallée K' (que l'on dénotera par l'abréviation A et B'), alors que l'orbite rose est reliée aux composantes A' et B . Les régions \mathcal{E}_g et \mathcal{E}_d ont déjà été discutées plus haut ; pour celles-ci, les deux orbites sont ouvertes à cause de la présence d'un bord. Dans les régions intermédiaires \mathcal{D}_g et \mathcal{D}_d , seule l'orbite rose, plus grande que la bleue, touche le bord. A plus haute énergie, dans la région \mathcal{I} , les deux orbites cyclotron touchent cette fois les deux bords à la fois. Enfin, dans les régions plus exotiques \mathcal{F} , \mathcal{G}_g and \mathcal{G}_d , une seule des deux orbites touche les deux bords à la fois. Toutes ces interprétations géométriques des spectres sont schématisées par les différentes orbites cyclotron sur la figure 5.9 (b).

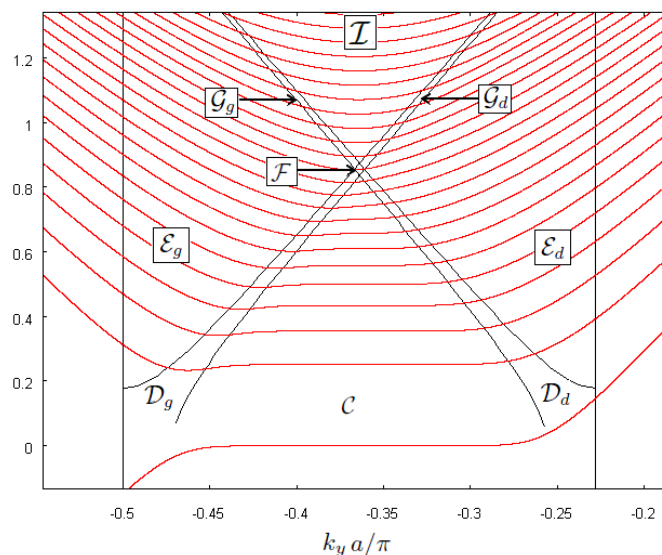


FIGURE 5.8: Spectre liaisons-fortes de basse énergie pour le RCDQF avec un nombre pair de chaînes, en unités de t . La largeur du ruban est $L = 108a$ et le flux magnétique à travers une maille vaut $\phi = 0.00126 \phi_0$, de sorte que $L/\ell_B = 9.6$. Les courbes noires montrent les frontières où un rayon cyclotron touche un des bords, ces derniers étant représentés par des traits noirs verticaux. Pour plus de clarté, nous ne montrons que la vallée K , mais les courbes noires sont exactement les mêmes dans l'autre vallée.

5.3 Approximation WKB : méthodologie

La méthode de quantification de l'action par la règle de Bohr-Sommerfeld a le mérite de rendre compte simplement de l'aspect des états de bords. Toutefois, les régions frontières pour lesquelles $x_c \approx R$ sont très mal décrites par cette méthode. Dans ces régions, l'hypothèse de puits découplés devient grossière, et il

1. Par souci de concision, seul le cas d'un nombre pair de chaînes sera discuté; les régions ainsi que l'interprétation que l'on en fait étant identiques dans le cas impair.

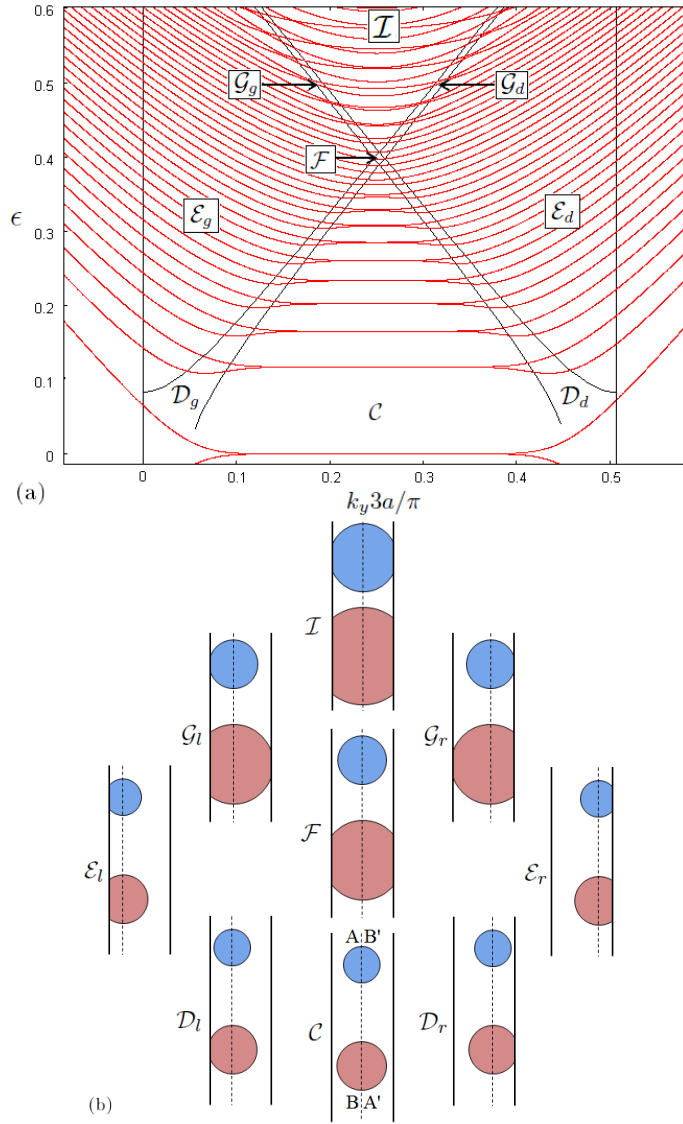


FIGURE 5.9: (a) Spectre liaisons-fortes de basse énergie pour un ruban armchair, en unités de t . La largeur du ruban est $L = 201a_0/2$ et le flux magnétique à travers une maille vaut $\phi = 0.00126 \phi_0$, de sorte que $L/\ell_B = 9.6$. Les courbes noires montrent les frontières où un rayon cyclotron touche un des bords représentés par les traits verticaux. (b) Représentation schématique des aires cyclotron dans les différentes régions comme discuté dans le texte. Les lettres A, B, A' et B' font référence aux composantes de la fonction d'onde $\varphi_{A/B}^{(l)}$ pour armchair et $\tilde{\varphi}_{A/B}^{(l)}$ pour le réseau carré.

devient nécessaire d'y décrire correctement la procédure de connection de la fonction d'onde, ce qu'une valeur constante de γ ne peut pas faire. Le but de cette partie est donc de présenter une méthode qui tienne compte de l'amortissement de la fonction d'onde dans la région classiquement interdite à proximité du second puits, ce qui implique en pratique de calculer $\gamma(E, x_c)$. Afin de résoudre l'équation de Schrödinger (5.1), on approxime, grâce au formalisme WKB (pour Wentzel-Kramers-Brillouin) la fonction d'onde du système dans des régions spécifiques qui seront précisées. Puis, en imposant des conditions de continuité ou d'égalité entre ces différentes expressions, nous obtiendrons l'action du problème sous la forme quantifiée $S = 2\pi(n + \gamma)$. Celle-ci se calculant par ailleurs explicitement en fonction de E et x_c , nous obtiendrons finalement une relation analytique implicite entre E

et x_c dont on peut extraire les niveaux d'énergie. La méthode est présentée ici de façon générale, les détails de calculs sont développés en fin de chapitre.

Concentrons-nous d'abord sur le puits de gauche que nous représentons sur la figure 5.10. Dans le cadre de l'approximation WKB, la fonction d'onde, dans un potentiel harmonique, s'écrit [79] :

$$\varphi^{\leftarrow}(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\mathcal{S}(x_1, x) + \frac{\pi}{4}\right) \quad (5.33)$$

où C est une constante et

$$\mathcal{S}(x_1, x) = \int_{x_1}^x dx' \sqrt{E - \mathcal{V}(x')} \quad (5.34)$$

est l'*action partielle* entre le point de rebroussement à la position x_1 est une position x quelconque à l'intérieur du puits de gauche. Cette expression, valable dans le puits, tient compte du point de rebroussement à gauche en x_1 (ce que l'on indique par une flèche) par le facteur $\pi/4$ dans le sinus,² mais devient fautive près du deuxième point de rebroussement en x_2 . Il nous faut donc trouver une expression

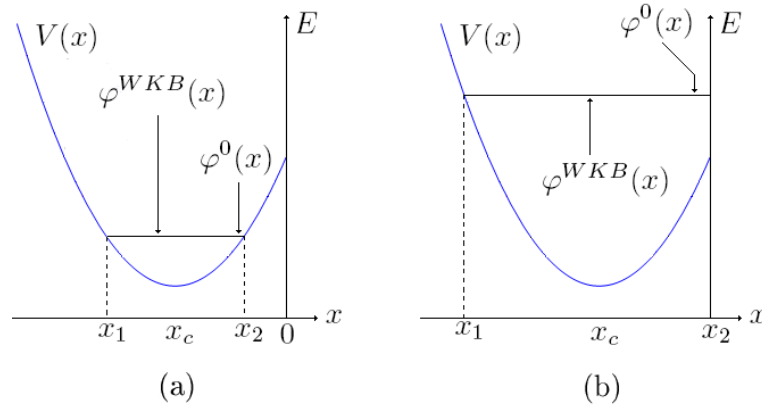


FIGURE 5.10: Illustration des deux situations typiques rencontrées dans un puits coupé et qu'il convient de distinguer. (a) Les deux points de rebroussement x_1 et x_2 sont sur la parabole. (b) Le point de rebroussement $x_2 = 0$ n'est pas sur la parabole. Ces deux cas de figure impliquent des expressions différentes de l'action dans le puits de gauche $S(E, x_c) = S_g$ ainsi que des raccordements spécifiques de la fonctions d'onde en x_2 . Des considérations similaires devront être faites pour le puits de droite.

valable de la fonction d'onde dans cette région, ce que nous obtenons en linéarisant le potentiel $\mathcal{V}(x)$ au voisinage du point de rebroussement intérieur x_2 . De cette façon, les fonctions propres de l'équation de Schrödinger s'écrivent comme une combinaison de fonctions d'Airy :

$$\varphi^{\rightarrow}(x) = \alpha_g \text{Ai}(f_g(x, E, x_c)) + \beta_g \text{Bi}(f_g(x, E, x_c)) \quad (5.35)$$

où α_g et β_g sont des constantes qu'il faudra déterminer et f_g est une fonction connue qui dépend du potentiel linéarisé et donc de la région considérée \mathcal{A} à \mathcal{E} . Il est

2. Le préfacteur en $1/\sqrt{k(x)}$ provient du développement de l'action à l'ordre 1 en \hbar (expression (5.4)) dans l'équation de Schrödinger stationnaire.

important de garder les deux types de fonctions d'Airy, c'est-à-dire non seulement Ai qui tend vers 0 loin vers l'extérieur du puits, dans la région classiquement interdite, mais aussi Bi qui diverge, car la présence de l'autre puits empêchera cette divergence non physique. En imposant l'égalité des deux fonctions $\varphi^{\leftarrow}(x)$ et du développement asymptotique de $\varphi^{\rightarrow}(x)$ à l'intérieur du puits, on obtient une relation entre les constantes et l'action S_g dans le puits de gauche. Comme l'expression de S_g dépend des points de rebroussement (définition 5.17), il est nécessaire de distinguer la nature de ces points : $\mathcal{V}(x_2) = 0$, le point est sur la parabole, ou $\mathcal{V}(x_2) \neq 0$ le point n'y est pas et l'on a $x_2 = 0$ (figure 5.10). Ces deux cas de figure impliquent des conditions de raccordement différentes. Celles-ci prennent la forme :

$$\begin{aligned} x_2 \neq 0 : & \quad \tan S_g/2 = \alpha_g/\beta_g \\ x_2 = 0 : & \quad \tan(S_g/2 + \delta_g) = \alpha_g/\beta_g \end{aligned} \quad (5.36)$$

où $\delta_g = \delta_g(E, x_c)$ est une fonction connue qui tient compte de la marche d'énergie entre la valeur $\mathcal{V}(x_2)$ du potentiel au point de rebroussement et sa valeur $\mathcal{V}(x = 0)$ où le potentiel est coupé. La même procédure doit être appliquée dans le puits de droite, où l'on obtient des relations similaires entre le rapport α_d/β_d et l'action S_d calculée entre les points de rebroussement du puits de droite :

$$\begin{aligned} x_3 \neq 0 : & \quad \tan S_d/2 = \alpha_d/\beta_d \\ x_3 = 0 : & \quad \tan(S_d/2 + \delta_d) = \alpha_d/\beta_d \end{aligned} \quad (5.37)$$

où x_3 est le point de rebroussement intérieur du puits de droite. Pour déterminer le rapport α_g/β_g , on impose alors la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée entre les deux puits. On obtient ainsi une équation où les deux inconnues sont α_g/β_g et α_d/β_d . En injectant $S_d = S_t - S_g$ dans (5.37), où l'action totale S_t est calculée explicitement en fonction de E et de x_c , on obtient une seconde équation reliant α_g/β_g à α_d/β_d . A partir de ces deux équations, on montre qu'il est toujours possible d'obtenir un polynôme du second ordre en α_g/β_g . La connaissance de α_g/β_g quantifie l'action S_g par les relations (5.36) que l'on peut désormais écrire sous la forme $S_g = 2\pi(n + \gamma_g)$ qui n'est autre que la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld. Les deux solutions du polynôme impliquent alors, pour chaque valeur de n , deux valeurs $\gamma_g^{\pm}(E, x_c)$.

Par ailleurs, en utilisant l'expression (5.17), on calcule explicitement l'action S_g en fonction de E et de x_c , expression que l'on identifie avec la forme quantifiée précédemment trouvée. Comme nous connaissons l'expression des fonctions γ_g^{\pm} , nous obtenons finalement, pour chaque valeur de n , deux équations analytiques auto-cohérentes en E et x_c , l'une avec γ_g^+ , l'autre avec γ_g^- . Les niveaux d'énergie $E_n(x_c)$ peuvent ensuite être extraits pour chaque valeur de n . La procédure développée est simple et systématique, mais quelque peu laborieuse puisque chaque région de \mathcal{A} à \mathcal{E} doit être traitée séparément, les expressions à manipuler devenant assez complexes. C'est l'objet de la suite du chapitre.

5.4 Calculs des niveaux d'énergie des états de bord par la méthode WKB

Dans cette section, nous présentons le détail des calculs des niveaux d'énergie $E_n(x_c)$ par la méthode basée sur l'approximation WKB. On considère le potentiel

$\mathcal{V}(x)$ suivant :

$$\mathcal{V}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}(x - x_c)^2 + \frac{V_0}{2} & \text{pour } x \leq 0 \\ \frac{1}{2}(x + x_c)^2 - \frac{V_0}{2} & \text{pour } x \geq 0 \end{cases} \quad (5.38)$$

Le cas $V_0 = 0$ a été introduit dans la section 4.2 pour décrire les états de bord des rubans zigzag (on s'affranchit ici du décalage global en énergie du potentiel afin d'alléger les notations), alors que le cas $V_0 = 1$ a été utilisé dans les sections 4.3 et 4.4 pour décrire les états de bord lorsque les vallées ou les sous-réseaux sont couplés par les conditions aux limites.

5.4.1 Double puits symétrique harmonique

On considère d'abord le cas $V_0 = 0$ qui est celui du double puits symétrique harmonique :

$$\mathcal{V}_{sym}(x) = \frac{1}{2}(|x| + x_c)^2 \quad (5.39)$$

À une énergie E donnée, on associe le rayon cyclotron $R = \sqrt{2E}$ (figure 5.1). Puis nous traitons les deux régions \mathcal{A} et \mathcal{B} l'une après l'autre.

Région \mathcal{A} : $R \leq |x_c|$

Cette région est caractérisée par $E \leq x_c^2/2$. Comme le potentiel est symétrique en x , nous nous concentrons pour l'instant sur le puits de gauche ($x < 0$). Pour une énergie E fixée, le puits de gauche possède deux points de rebroussement aux positions $x_1 = x_c - R$ et $x_2 = x_c + R$. Dans le cadre de l'approximation WKB, la procédure de connection au voisinage du point de rebroussement extérieur x_1 implique que la fonction d'onde dans le puits de gauche s'écrit :

$$\varphi_g^{\leftarrow}(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \sin\left(\mathcal{S}(x_1, x) + \frac{\pi}{4}\right) \quad (5.40)$$

où la flèche vers la gauche indique que cette fonction d'onde respecte la procédure de connection au point de rebroussement extérieur x_1 , C est une constante et $\mathcal{S}(x_1, x)$ est l'action partielle définie par :

$$\mathcal{S}(x_1, x) = \int_{x_1}^x dx \sqrt{E - \mathcal{V}_{sym}(x)} . \quad (5.41)$$

L'expression ci-dessus n'est plus valide près du point de rebroussement intérieur $x_2 = x_c + R$. On détermine alors l'expression de la fonction d'onde au voisinage de point, en linéarisant le potentiel comme $\mathcal{V}_{sym}(x) \approx \frac{R^2}{2} + R(x - x_2)$, de sorte que l'équation de Schrödinger devient :

$$(\partial_x^2 - 2R(x - x_2)) \varphi_g^{\rightarrow}(x) = 0. \quad (5.42)$$

Les solutions d'une telle équation sont les fonctions d'Airy, si bien que la fonction propre s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned} \varphi_g^{\rightarrow}(x) &= \bar{\alpha}_g \text{Ai}(ax + x_0) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(ax + x_0) \\ a^3 &\equiv 2R \\ x_0 &\equiv (2R)^{1/3} (R - |x_c|) \end{aligned} \quad (5.43)$$

où la flèche droite indique cette fois que cette fonction d'onde obéit aux conditions de raccordement au point de rebroussement interne (à droite) en x_2 . Les constantes $\bar{\alpha}_g$ et $\bar{\beta}_g$ devront être déterminées. À l'intérieur du puits, l'expression de cette fonction d'onde prend le développement asymptotique suivant :

$$\varphi_g^{\rightarrow}(x) \simeq \frac{\bar{\alpha}_g}{\sqrt{\pi}|z|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{\bar{\beta}_g}{\sqrt{\pi}|z|^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (5.44)$$

avec

$$|z| \equiv -x_0 - ax = \frac{k^2(x)}{a^2} . \quad (5.45)$$

L'argument des fonctions trigonométriques dans (5.44) peut alors être relié à l'action partielle entre les points x et x_2 comme :

$$\frac{2}{3}|z|^{3/2} = \int_x^{x_2} dx \sqrt{E - \mathcal{V}_{sym}(x)} = S_g - \mathcal{S}(x_1, x) \quad (5.46)$$

où S_g est l'action totale dans le puits de gauche (on entend ici un aller simple de x_1 à x_2). Par conséquent $\varphi_g^{\rightarrow}(x)$ peut être récrit sous la forme suivante :

$$\varphi_g^{\rightarrow}(x) \simeq \frac{\alpha_g}{\sqrt{k(x)}} \cos(\mathcal{S}(x_1, x) + \frac{\pi}{4} - S_g) + \frac{\beta_g}{\sqrt{k(x)}} \sin(\mathcal{S}(x_1, x) + \frac{\pi}{4} - S_g) \quad (5.47)$$

avec $\alpha_g = \bar{\alpha}_l \sqrt{\frac{a}{\pi}}$ (idem pour β_g). Ainsi, en imposant dans le puits l'égalité des deux expressions satisfaisant chacune le raccordement à des points de rebroussement différents $\varphi_g^{\leftarrow}(x) = \varphi_g^{\rightarrow}(x)$ on obtient $\alpha_g = C \sin S_g$ et $\beta_g = C \cos S_g$ ce qui conduit finalement à la relation importante :

$$\tan S_g = \frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} = \frac{\alpha_g}{\beta_g} . \quad (5.48)$$

Par symétrie du potentiel, une relation semblable est obtenue pour le puits de droite :

$$\tan S_d = \frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d} = \frac{\alpha_d}{\beta_d} \quad (5.49)$$

où la fonction d'onde satisfaisant les conditions de raccordement au point de rebroussement intérieur x_3 s'écrit :

$$\varphi_d^{\leftarrow}(x) = \bar{\alpha}_d \text{Ai}(-ax + x_0) + \bar{\beta}_d \text{Bi}(-ax + x_0) . \quad (5.50)$$

L'étape suivante consiste à imposer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée entre les puits, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \varphi_g^{\rightarrow}(0) &= \varphi_d^{\leftarrow}(0) \\ \partial_x \varphi_g^{\rightarrow}(0) &= \partial_x \varphi_d^{\leftarrow}(0) \end{aligned} \quad (5.51)$$

ce qui conduit aux deux équations suivantes :

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_g \text{Ai}(x_0) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(x_0) &= \bar{\alpha}_d \text{Ai}(x_0) + \bar{\beta}_d \text{Bi}(x_0) \\ \bar{\alpha}_g \text{Ai}'(x_0) + \bar{\beta}_g \text{Bi}'(x_0) &= -\bar{\alpha}_d \text{Ai}'(x_0) - \bar{\beta}_d \text{Bi}'(x_0) \end{aligned} \quad (5.52)$$

desquelles on peut extraire le rapport $\frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d}$ en fonction de celui $\frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g}$:

$$\frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d} = -\frac{\frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} (\text{Bi}'(x_0)\text{Ai}(x_0) + \text{Bi}(x_0)\text{Ai}'(x_0)) + 2\text{Bi}'(x_0)\text{Bi}(x_0)}{\frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} 2\text{Ai}'(x_0)\text{Ai}(x_0) + \text{Ai}'(x_0)\text{Bi}(x_0) + \text{Ai}(x_0)\text{Bi}'(x_0)}. \quad (5.53)$$

La symétrie du potentiel implique $S_g = S_d$, de sorte que, d'après les relations (5.48) et (5.49), nous avons $\frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d} = \frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} \equiv X$. La relation (5.53) prend alors la forme simple d'un polynôme du second degré en X :

$$\text{Ai}'(x_0)\text{Ai}(x_0)X^2 + (\text{Ai}'(x_0)\text{Bi}(x_0) + \text{Ai}(x_0)\text{Bi}'(x_0))X + \text{Bi}(x_0)\text{Bi}'(x_0) = 0$$

dont les solutions

$$X^S = -\frac{\text{Bi}'(x_0)}{\text{Ai}'(x_0)} \quad X^{AS} = -\frac{\text{Bi}(x_0)}{\text{Ai}(x_0)} \quad (5.54)$$

correspondent respectivement aux solutions symétriques et antisymétriques. La connaissance du rapport $X = \frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g}$ impose, d'après la relation (5.48) $\tan S_g = X^{S,AS}$, la quantification de l'action dans le puits de gauche, que l'on écrit :

$$S_g = \pi(n + \gamma) \quad (5.55)$$

où $0 \leq \gamma < 1$, avec les deux solutions suivantes pour γ :

$$\begin{aligned} \gamma^S(E, x_c) &= -\frac{1}{\pi} \arctan \frac{\text{Bi}'(x_0)}{\text{Ai}'(x_0)} \\ \gamma^{AS}(E, x_c) &= 1 - \frac{1}{\pi} \arctan \frac{\text{Bi}(x_0)}{\text{Ai}(x_0)} \end{aligned} \quad (5.56)$$

D'autre part, dans la région \mathcal{A} , l'action est simplement reliée à l'énergie par $S_g = \pi R^2/2 = \pi E$. En identifiant cette expression avec celle sous forme quantifiée (5.55) dans laquelle on insère les fonctions $\gamma^{S/AS}$ (5.56), on trouve les deux équations analytiques suivantes :

$$E_n^S = n + \frac{1}{\pi} \arctan \left(-\frac{\text{Bi}'(x_0)}{\text{Ai}'(x_0)} \right) \quad (5.57)$$

$$E_n^{AS} = n + 1 + \frac{1}{\pi} \arctan \left(-\frac{\text{Bi}(x_0)}{\text{Ai}(x_0)} \right) \quad (5.58)$$

où l'on rappelle l'expression du paramètre x_0 en fonction de l'énergie et de la distance x_c :

$$x_0 = \left(2\sqrt{2E_n} \right)^{1/3} \left(\sqrt{2E_n} - |x_c| \right)$$

Ces équations se résolvent directement numériquement, et l'on obtient alors les niveaux d'énergie $E_n(x_c)$ de la région \mathcal{A} (figure 5.11), puis la dépendance en x_c de la fonction γ que l'on a tracée sur la figure 5.12.

Région \mathcal{B} : $|x_c| \leq R$

L'expression WKB de la fonction d'onde qui satisfait la procédure de raccordement au point de rebroussement extérieur x_1 est encore donnée par :

$$\varphi_g^{\leftarrow}(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}} \sin \left(\mathcal{S}_l(x_1, x) + \frac{\pi}{4} \right) . \quad (5.59)$$

En revanche, le point de rebroussement interne n'existe plus dans le puits de gauche, et nous devons connaître l'expression de la fonction d'onde au voisinage de $x = 0$. En linéarisant le potentiel dans cette région, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \varphi_g^{\rightarrow}(x) &= \bar{\alpha}_g \text{Ai}(y_0 + ax) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(y_0 + ax) \\ y_0 &= \frac{x_c^2 - R^2}{(2|x_c|)^{2/3}} \\ a^3 &= 2|x_c| . \end{aligned} \quad (5.60)$$

À l'intérieur du puits de gauche, cette expression prend le développement asymptotique suivant :

$$\varphi_g^{\rightarrow}(x) \simeq \frac{\bar{\alpha}_g}{\sqrt{\pi}|z|^{1/4}} \sin \left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) + \frac{\bar{\beta}_g}{\sqrt{\pi}|z|^{1/4}} \cos \left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \quad (5.61)$$

où nous avons posé :

$$|z| \equiv -y_0 - ax = \frac{k^2(x)}{a^2} . \quad (5.62)$$

Les arguments des fonctions trigonométriques peuvent être reliés à l'action partielle entre une position quelconque dans le puits de gauche et $x = 0$ de la façon suivante :

$$\frac{2}{3}|z|^{3/2} = \int_x^0 dx \sqrt{R^2 - x_c^2 - 2|x_c|x} + \delta = S_g - \mathcal{S}(x_1, x) + \delta \quad (5.63)$$

où la quantité

$$\delta \equiv \frac{(R^2 - x_c^2)^{3/2}}{3|x_c|} \quad (5.64)$$

prend en compte la marche entre le potentiel $\mathcal{V}_{sym}(0)$ et l'énergie E au point de rebroussement. La fonction d'onde $\varphi_g^{\rightarrow}(x)$ peut alors être réécrite comme :

$$\begin{aligned} \varphi_g^{\rightarrow}(x) &\simeq \frac{\alpha_g}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\mathcal{S}(x_1, x) + \frac{\pi}{4} - S_g - \delta \right) \\ &+ \frac{\beta_g}{\sqrt{k(x)}} \sin \left(\mathcal{S}(x_1, x) + \frac{\pi}{4} - S_g - \delta \right) \end{aligned} \quad (5.65)$$

où

$$\alpha_g \equiv \frac{\bar{\alpha}_g}{\sqrt{\pi}} (2|x_c|)^{1/6} \quad (5.66)$$

(la même chose pour β_g). Le raccordement des fonctions d'onde $\varphi_g^{\leftarrow}(x) = \varphi_g^{\rightarrow}(x)$ à l'intérieur du puits donne cette fois :

$$\tan(S_g + \delta) = \frac{\alpha_g}{\beta_g} \quad (5.67)$$

Par symétrie du potentiel, une relation similaire peut être obtenue dans le puits de droite : $\tan(S_r + \delta) = \frac{\alpha_r}{\beta_r}$. Ensuite, en imposant comme précédemment la continuité de la fonction et de sa dérivée en $x = 0$, on obtient les deux équations :

$$\begin{aligned}\bar{\alpha}_g \text{Ai}(y_0) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(y_0) &= \bar{\alpha}_d \text{Ai}(y_0) + \bar{\beta}_d \text{Bi}(y_0) \\ \bar{\alpha}_g \text{Ai}'(y_0) + \bar{\beta}_g \text{Bi}'(y_0) &= -\bar{\alpha}_d \text{Ai}'(y_0) - \bar{\beta}_d \text{Bi}'(y_0)\end{aligned}\quad (5.68)$$

ce qui nous permet d'extraire le rapport α_d/β_d en fonction de celui α_g/β_g . Puis, en utilisant la symétrie $\alpha_g = \alpha_d$ et $\beta_g = \beta_d$, on trouve un polynôme du second degré en $X \equiv \alpha_g/\beta_g$:

$$\text{Ai}'(y_0)\text{Ai}(y_0)X^2 + (\text{Ai}'(y_0)\text{Bi}(y_0) + \text{Ai}(y_0)\text{Bi}'(y_0))X + \text{Bi}(y_0)\text{Bi}'(y_0) = 0. \quad (5.69)$$

La seule différence entre ce polynôme et celui (5.54) obtenu plus haut pour la région \mathcal{A} , réside dans la substitution $x_0 \rightarrow y_0$. Par conséquent, les solutions s'écrivent :

$$X^S = -\frac{\text{Bi}'(y_0)}{\text{Ai}'(y_0)} \quad X^{AS} = -\frac{\text{Bi}(y_0)}{\text{Ai}(y_0)} \quad (5.70)$$

L'action S_g est quantifiée par la condition $\tan S_g = X^{S,AS}$, de sorte que $S_g = \pi(n + \gamma)$ avec $0 \leq \gamma < 1$. Les deux expressions de γ sont données par :

$$\gamma^{S,AS}(E, x_c) = \sigma \left[\frac{1}{\pi} (\arctan X^{S,AS} - \delta) \right]. \quad (5.71)$$

où l'on a introduit $\sigma(x) = x - [x]$, $[x]$ étant le plus petit entier le plus proche, de sorte que par construction $0 \leq \sigma[x] < 1$. La dernière étape consiste à relier l'action et l'énergie par un calcul explicite. Contrairement à la région \mathcal{A} , cette relation n'est plus linéaire mais prend la forme :

$$S_g = E \left(\theta - \frac{1}{2} \sin 2\theta \right) \quad (5.72)$$

où $\theta = \arccos x_c/R = \arccos x_c/\sqrt{2E}$ a déjà été introduit plus haut et représente l'angle mesurant l'ouverture de l'orbite. En identifiant cette relation avec celle de la quantification de l'action

$$S_g = \pi(n + \gamma^{S,AS}) \quad (5.73)$$

où les fonctions $\gamma^{S,AS}(E, x_c)$ dépendent de E and x_c uniquement (relations (5.71)), on obtient une équation implicite dans la région \mathcal{B} dont on peut extraire numériquement les niveaux d'énergie $E_n^S(x_c)$ et $E_n^{AS}(x_c)$ ainsi que les fonctions $\gamma^{S,AS}(x_c)$.

5.4.2 Double puits asymétrique harmonique

Dans cette section on introduit une asymétrie $V_0 = 1$ dans le potentiel qui devient :

$$\mathcal{V}_{asym}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}(x - x_c)^2 + \frac{1}{2} & \text{for } x \leq 0 \\ \frac{1}{2}(x + x_c)^2 - \frac{1}{2} & \text{for } x \geq 0 \end{cases} \quad (5.74)$$

dont on cherche à calculer le spectre $E_n(x_c)$ par l'approximation WKB. On rappelle la relation entre l'énergie et les rayons cyclotrons associés à chaque puits :

$$E = \frac{R_g^2 + 1}{2} = \frac{R_d^2 - 1}{2}. \quad (5.75)$$

Nous devons distinguer trois régions semiclassiques \mathcal{C} , \mathcal{D} et \mathcal{E} délimitées par $|x_c| = R_g$ et $|x_c| = R_d$ (figure 5.2). Enfin, on définit l'action totale S_t dans chaque région comme la somme des actions des deux puits :

$$\begin{aligned} \text{Région } \mathcal{C} \quad S_t &= \frac{\pi}{2}R_g^2 + \frac{\pi}{2}R_d^2 \\ \text{Région } \mathcal{D} \quad S_t &= \frac{\pi}{2}R_g^2 + \frac{R_d^2}{2} \left[\theta_d - \frac{1}{2} \sin(2\theta_d) \right] \\ \text{Région } \mathcal{E} \quad S_t &= \frac{R_g^2}{2} \left[\theta_g - \frac{1}{2} \sin(2\theta_g) \right] + \frac{R_d^2}{2} \left[\theta_d - \frac{1}{2} \sin(2\theta_d) \right] \end{aligned} \quad (5.76)$$

où les angles $\theta_{g/d}$ paramétrisent l'ouverture des deux orbites cyclotron près du bord. Nous allons maintenant étendre aux régions \mathcal{C} , \mathcal{D} et \mathcal{E} , la méthode utilisée pour le puits symétrique. Nous traiterons les trois régions l'une après l'autre.

Région \mathcal{C} : $R_g \leq R_d \leq |x_c|$

Cette région correspond au volume, c'est-à-dire lorsqu'aucune des orbites cyclotron n'a touché le bord. Comme déjà mentionné dans la section précédente, l'action est différente dans chaque puits et s'écrit :

$$S_g = \frac{\pi}{2}R_g^2 = \pi(E - 1/2) \quad (5.77)$$

$$S_d = \frac{\pi}{2}R_d^2 = \pi(E + 1/2). \quad (5.78)$$

La fonction d'onde WKB attachée au point de rebroussement x_1 garde la même forme que dans le cas du puits symétrique, ce qui nous assure les relations :

$$\tan S_d = \frac{\alpha_d}{\beta_d} = \frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d} \quad \tan S_g = \frac{\alpha_g}{\beta_g} = \frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} \quad (5.79)$$

où nous avons gardé les notations des sections précédentes. En revanche, l'expression de la fonction d'onde au voisinage des points de rebroussement internes situés en $-|x_c| + R_g$ et en $|x_c| - R_d$ diffère d'un puits à l'autre et l'on a :

$$\varphi_g^{\rightarrow}(x) = \bar{\alpha}_g \text{Ai}(a_g x + x_g) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(a_g x + x_g) \quad (5.80)$$

$$\varphi_d^{\leftarrow}(x) = \bar{\alpha}_d \text{Ai}(-a_d x + x_d) + \bar{\beta}_d \text{Bi}(-a_d x + x_d) \quad (5.81)$$

avec

$$\begin{aligned} a_g^3 &\equiv 2R_g & a_d^3 &\equiv 2R_d \\ x_g &\equiv (2R_g)^{1/3} (R_g - |x_c|) & x_d &\equiv (2R_d)^{1/3} (R_d - |x_c|). \end{aligned} \quad (5.82)$$

En imposant la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$, nous obtenons les deux équations suivantes :

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_g \text{Ai}(x_g) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(x_g) &= \bar{\alpha}_d \text{Ai}(x_d) + \bar{\beta}_d \text{Bi}(x_d) \\ \bar{\alpha}_g a_g \text{Ai}'(x_g) + \bar{\beta}_g a_g \text{Bi}'(x_g) &= -\bar{\alpha}_d a_d \text{Ai}'(x_d) - \bar{\beta}_d a_d \text{Bi}'(x_d) \end{aligned} \quad (5.83)$$

d'où l'on sort le rapport $\bar{\alpha}_d/\bar{\beta}_d$ comme :

$$\frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d} = \frac{\frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} \left(\text{Bi}'(x_d)\text{Ai}(x_g) + \text{Bi}(x_d)\text{Ai}'(x_g) \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3} \right) + \text{Bi}'(x_d)\text{Bi}(x_g) + \text{Bi}(x_d)\text{Bi}'(x_g) \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3}}{\frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} \left(\text{Ai}'(x_d)\text{Ai}(x_g) + \text{Ai}(x_d)\text{Ai}'(x_g) \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3} \right) + \text{Ai}'(x_d)\text{Bi}(x_g) + \text{Ai}(x_d)\text{Bi}'(x_g) \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3}} \quad (5.84)$$

Désormais, puisque $S_g \neq S_d$, les rapports $\bar{\alpha}_d/\bar{\beta}_d$ et $\bar{\alpha}_g/\bar{\beta}_g$ sont aussi différents. En utilisant l'action totale $S_t = S_d + S_g = 2\pi E$, ces coefficients sont reliés par :

$$\frac{\alpha_d}{\beta_d} = \frac{\tan S_t - \alpha_g/\beta_g}{1 + \alpha_g/\beta_g \tan S_t} . \quad (5.85)$$

Puis, nous insérons la relation (5.85) dans (5.84) afin d'obtenir un polynôme en $X_g \equiv \alpha_g/\beta_g$:

$$\begin{aligned} & \left\{ \tan S_t \left(\text{Bi}'(x_d)\text{Ai}(x_g) + \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3} \text{Bi}(x_d)\text{Ai}'(x_g) \right) \right. \\ & \left. - \text{Ai}'(x_d)\text{Ai}(x_g) - \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3} \text{Ai}'(x_g)\text{Ai}(x_d) \right\} X_g^2 \\ & \left\{ \tan S_t \left(\text{Ai}'(x_d)\text{Ai}(x_g) + \text{Bi}'(x_d)\text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3} [\text{Ai}'(x_g)\text{Ai}(x_d) + \text{Bi}'(x_d)\text{Bi}(x_g)] \right) \right. \\ & \left. + \text{Bi}'(x_d)\text{Ai}(x_g) - \text{Ai}'(x_d)\text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3} [\text{Bi}(x_d)\text{Ai}'(x_g) - \text{Ai}(x_d)\text{Bi}'(x_g)] \right\} X_g^2 \\ & \tan S_t \left(\text{Ai}'(x_d)\text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3} \text{Ai}(x_d)\text{Bi}'(x_g) \right) \\ & + \text{Bi}'(x_d)\text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{R_d} \right)^{1/3} \text{Bi}(x_d)\text{Bi}'(x_g) = 0 \end{aligned} \quad (5.86)$$

où x_g et x_d peuvent s'exprimer en terme de x_c et E uniquement :

$$\begin{aligned} x_g &= 2^{1/3} (2E - 1)^{1/6} \left((2E - 1)^{1/2} - |x_c| \right) \\ x_d &= 2^{1/3} (2E + 1)^{1/6} \left((2E + 1)^{1/2} - |x_c| \right) . \end{aligned} \quad (5.87)$$

Ainsi, à cause de l'asymétrie du potentiel, les coefficients du polynôme prennent des expressions plus compliquées que dans le cas symétrique (équation 5.54). Toutefois le lecteur inquiet pourra s'assurer que le cas symétrique est bien retrouvé pour $R_d = R_g$ et $x_g = x_d = x_0$. Le polynôme (5.86) a deux solutions x_g^S and x_g^{AS} , qui imposent la quantification de l'action dans le puits de gauche, que l'on écrit donc $S_g = \pi(n + \gamma)$ avec :

$$\begin{aligned} \gamma^S(E, x_c) &= \frac{1}{\pi} \arctan X_g^S \\ \gamma^{AS}(E, x_c) &= \frac{1}{\pi} \arctan X_g^{AS} + 1 \end{aligned} \quad (5.88)$$

Une fois ces expressions obtenues, on identifie les deux expressions de l'action S_g : c'est-à-dire celle obtenue directement avec celle sous la forme quantifiée, afin d'aboutir aux deux équations implicites en E_n et x_c de la région \mathcal{C} . En effet, puisque l'action est simplement reliée à l'énergie (relation 5.78), les deux équations deviennent :

$$\begin{aligned} E_n^S &= n + \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan X_g^S \\ E_n^{AS} &= n + \frac{3}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan X_g^{AS} \end{aligned} \quad (5.89)$$

depuis lesquelles on extrait les niveaux d'énergie $E_n(x_c)$ pour la région \mathcal{C} .

Région \mathcal{D} : $R_g \leq |x_c| \leq R_d$

La région \mathcal{D} n'a pas d'équivalent dans le cas symétrique. Elle correspond à la situation hybride où une partie de la trajectoire classique est fermée (puits de gauche) alors que l'autre est ouverte (puits de droite). Les expressions des fonctions d'onde dans l'approximation WKB φ_g^{\leftarrow} et φ_d^{\rightarrow} rattachées aux points de rebroussement externes restant inchangées, on linéarise le potentiel au voisinage des points de rebroussement internes, soit en $-|x_c| + R_g$ pour le puits de gauche et en $x = 0$ pour celui de droite. La solution dans le puits de gauche s'écrit :

$$\begin{aligned} \varphi_g^{\rightarrow}(x) &= \bar{\alpha}_g \text{Ai}(a_g x + x_g) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(a_g x + x_g) \\ a_g^3 &= 2R_g \\ x_g &= (2R_g)^{1/3} (R_g - |x_c|) \end{aligned} \quad (5.90)$$

alors que celle dans le puits de droite est :

$$\begin{aligned} \varphi_d^{\leftarrow}(x) &= \bar{\alpha}_d \text{Ai}(y_d - a_d x) + \bar{\beta}_d \text{Bi}(y_d - a_d x) \\ a_d^3 &= |2x_c| \\ y_d &= \frac{x_c^2 - R_d^2}{|2x_c|^{2/3}}. \end{aligned} \quad (5.91)$$

L'étape suivante consiste à raccorder les fonctions d'onde à l'intérieur de chaque puits, en utilisant le développement asymptotique des fonctions d'Airy. Ce traitement a déjà été effectué dans le puits de gauche plus haut, et l'on trouve :

$$\tan S_g = \frac{\alpha_g}{\beta_g} = \frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} \quad (5.92)$$

tout comme pour le puits de droite :

$$\tan(S_d + \delta^d) = \frac{\alpha_d}{\beta_d} = \frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d} \quad (5.93)$$

où un décalage de l'action δ^d a été introduit :

$$\delta^d = \frac{(R_d^2 - x_c^2)^{3/2}}{3|x_c|}. \quad (5.94)$$

Ensuite, la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$ donne les deux équations suivantes :

$$\begin{aligned}\bar{\alpha}_g \text{Ai}(x_g) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(x_g) &= \bar{\alpha}_d \text{Ai}(y_d) + \bar{\beta}_d \text{Bi}(y_d) \\ \bar{\alpha}_g a_g \text{Ai}'(x_g) + \bar{\beta}_g a_g \text{Bi}'(x_g) &= -\bar{\alpha}_d a_d \text{Ai}'(y_d) - \bar{\beta}_d a_d \text{Bi}'(y_d)\end{aligned}\quad (5.95)$$

d'où l'on extrait le rapport des constantes $\bar{\alpha}_d/\bar{\beta}_d$:

$$\begin{aligned}\frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d} &= \\ &= \frac{\frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} \left(\text{Bi}'(y_d) \text{Ai}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} \text{Bi}(y_d) \text{Ai}'(x_g) \right) + \text{Bi}'(y_d) \text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} \text{Bi}(y_d) \text{Bi}'(x_g)}{\frac{\bar{\alpha}_g}{\bar{\beta}_g} \left(\text{Ai}'(y_d) \text{Ai}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} \text{Ai}(y_d) \text{Ai}'(x_g) \right) + \text{Ai}'(y_d) \text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} \text{Ai}(y_d) \text{Bi}'(x_g)}\end{aligned}\quad (5.96)$$

Afin d'obtenir une seconde équation reliant les rapports $\bar{\alpha}_d/\bar{\beta}_d$ et $\bar{\alpha}_g/\bar{\beta}_g$, on utilise l'action totale S_t dont on connaît l'expression en fonction de E et x_c . En utilisant les relations (5.92) et (5.93) on trouve alors :

$$\frac{\alpha_d}{\beta_d} = \frac{\tan(S_t + \delta^d) - \frac{\alpha_g}{\beta_g}}{1 + \tan(S_t + \delta^d) \frac{\alpha_g}{\beta_g}} = \frac{\nu - X_g}{1 + \nu X_g}, \quad (5.97)$$

où nous avons introduit la quantité $\nu \equiv \tan(S_t + \delta^d)$ afin d'alléger quelque peu les notations. Nous injectons ensuite cette dernière relation dans (5.96) et nous obtenons le polynôme du second degré en X_g suivant :

$$\begin{aligned}& \left\{ \nu \left(\text{Bi}'(y_d) \text{Ai}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} \text{Bi}(y_d) \text{Ai}'(x_g) \right) \right. \\ & \left. - \text{Ai}'(y_d) \text{Ai}(x_g) - \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} \text{Ai}'(x_g) \text{Ai}(y_d) \right\} X_g^2 \\ & + \left\{ \nu \left(\text{Ai}'(y_d) \text{Ai}(x_g) + \text{Bi}'(y_d) \text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} [\text{Ai}'(x_g) \text{Ai}(y_d) + \text{Bi}'(x_g) \text{Bi}(y_d)] \right) \right. \\ & \left. + \text{Bi}'(y_d) \text{Ai}(x_g) - \text{Ai}'(y_d) \text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} [\text{Bi}(y_d) \text{Ai}'(x_g) - \text{Ai}(y_d) \text{Bi}'(x_g)] \right\} X_g \\ & + \nu \left(\text{Ai}'(y_d) \text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} \text{Ai}(y_d) \text{Bi}'(x_g) \right) \\ & + \text{Bi}'(y_d) \text{Bi}(x_g) + \left(\frac{R_g}{|x_c|} \right)^{1/3} \text{Bi}(y_d) \text{Bi}'(x_g) = 0.\end{aligned}\quad (5.98)$$

Pour $x_c = R_d$, on a $\delta^d = 0$ et $x_d = y_d = 0$ et l'on se voit rassuré de retrouver le même polynôme (5.86) que dans la région \mathcal{C} , ce qui nous assure la continuité du spectre sur la parabole $E = \frac{1}{2}(x_c^2 - 1)$ séparant les régions \mathcal{C} et \mathcal{D} . Les deux solutions X_g^S et X_g^{AS} du polynôme (5.98) imposent la quantification de l'action dans le puits de gauche sous la forme habituelle $S_g = \pi(n + \gamma)$. Tout est maintenant

identique à la région \mathcal{C} hormis l'expression explicite de l'action totale et de l'action S_g . En identifiant les deux expressions de l'action S_g , on obtient les deux familles d'équations implicites en E et x_c dans la région \mathcal{D} , d'où l'on extrait le spectre d'énergie des états de bord.

Région \mathcal{E} : $|x_c| \leq R_g \leq R_d$

La dernière région à traiter vérifie $E > \frac{1}{2}(x_c^2 + 1)$. Comme pour la région \mathcal{B} du puits symétrique, nous découperons ce puits en deux et appellerons puits de gauche (resp. droite) la région $x < 0$ (resp. $x > 0$). Ce découpage effectué, nous obtiendrons le spectre en quantifiant l'action S_g , comme pour les régions précédentes. La méthode reste la même : la linéarisation du potentiel en $x = 0$ nous permet d'écrire les fonction d'onde comme :

$$\begin{aligned}\Psi^g(x) &= \bar{\alpha}_g \text{Ai}(a_g x + y_l) + \bar{\beta}_g \text{Bi}(a_g x + y_g) \quad \text{pour } x < 0 \\ \Psi^d(x) &= \bar{\alpha}_d \text{Ai}(y_d - a_d x) + \bar{\beta}_d \text{Bi}(y_d - a_d x) \quad \text{pour } x > 0\end{aligned}\tag{5.99}$$

où l'on a posé :

$$y_g = \frac{x_c^2 - R_g^2}{|2x_c|^{2/3}} \quad y_d = \frac{x_c^2 - R_d^2}{|2x_c|^{2/3}} \quad a_g^3 = a_d^3 = |2x_c|.\tag{5.100}$$

La différence avec la région \mathcal{B} provenant de l'asymétrie du potentiel, les relations (5.67) deviennent :

$$\begin{aligned}\tan(S_g + \delta^g) &= \frac{\alpha_g}{\beta_g} & \tan(S_d + \delta^d) &= \frac{\alpha_d}{\beta_d} \equiv X_d \\ \delta^d &= \frac{(R_d^2 - x_c^2)^{3/2}}{3|x_c|} & \delta^g &= \frac{(R_g^2 - x_c^2)^{3/2}}{3|x_c|}\end{aligned}\tag{5.101}$$

Ensuite, la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$ permet d'extraire le rapport :

$$X_d = \frac{\bar{\alpha}_d}{\bar{\beta}_d} = -\frac{X_g [\text{Bi}'(y_d)\text{Ai}(y_g) + \text{Bi}(y_d)\text{Ai}'(y_g)] + \text{Bi}'(y_d)\text{Bi}(y_g) + \text{Bi}(y_d)\text{Bi}'(y_g)}{X_g [\text{Ai}'(y_d)\text{Ai}(y_g) + \text{Ai}(y_d)\text{Ai}'(y_g)] + \text{Ai}'(y_d)\text{Bi}(y_g) + \text{Ai}(y_d)\text{Bi}'(y_g)}.$$

Une seconde expression de X_d en fonction de X_g s'obtient en insérant l'action totale dans (5.101), ce qui donne :

$$\begin{aligned}X_d &= \frac{\tan(S_t + \delta^d) - \tan S_g}{1 + \tan S_g \tan(S_t + \delta^d)} \\ &= \frac{(\nu \tan \delta^g - 1) \frac{\alpha_g}{\beta_g} + \nu + \tan \delta^g}{(\nu + \tan \delta^g) \frac{\alpha_g}{\beta_g} - (\nu \tan \delta^g - 1)} \\ &= \frac{\sigma X_g + \tau}{\tau X_g - \sigma}\end{aligned}\tag{5.102}$$

où l'on a introduit les quantités $\sigma \equiv \nu \tan \delta^g - 1$ et $\tau \equiv \nu + \tan \delta^g$ afin d'alléger l'écriture. L'identification des deux expressions de X_d (5.102) et (5.101) implique

l'équation du second degré en X_g suivante :

$$\begin{aligned}
& \{ \tau (\text{Bi}'(y_d)\text{Ai}(y_g) + \text{Bi}(y_d)\text{Ai}'(y_g)) + \sigma (\text{Ai}'(y_d)\text{Ai}(y_g) + \text{Ai}'(y_g)\text{Ai}(y_d)) \} X_g^2 \\
& + \{ \tau (\text{Ai}'(y_d)\text{Ai}(y_g) + \text{Bi}'(y_d)\text{Bi}(y_g) + \text{Ai}'(y_g)\text{Ai}(y_d) + \text{Bi}'(y_g)\text{Bi}(y_d)) \\
& - \sigma (\text{Bi}'(y_d)\text{Ai}(y_g) - \text{Ai}'(y_d)\text{Bi}(y_g) + \text{Bi}(y_d)\text{Ai}'(y_g) - \text{Ai}(y_d)\text{Bi}'(y_g)) \} X_g \\
& + \tau (\text{Ai}'(y_d)\text{Bi}(y_g) + \text{Ai}(y_d)\text{Bi}'(y_g)) - \sigma (\text{Bi}'(y_d)\text{Bi}(y_g) + \text{Bi}(y_d)\text{Bi}'(y_g)) = 0
\end{aligned} \tag{5.103}$$

Lorsque $|x_c| = R_g$, nous avons $\tau = \nu$, $\sigma = -1$ et $x_g = y_g = 0$, ce qui simplifie l'expression du polynôme (5.103) de la région \mathcal{E} en celle du polynôme (5.98) de la région \mathcal{B} , assurant ainsi la continuité des résultats entre ces deux régions. Les deux solutions de ce polynôme impliquent la quantification de S_g sous la forme $S_g = \pi(n + \gamma)$, les fonctions γ étant déterminées par les deux solutions de (5.103). En identifiant cette expression avec celle obtenue explicitement en fonction de E et x_c , nous obtenons les deux familles d'équations implicites en E et x_c , à partir desquelles nous pouvons extraire le spectre $E_n(x_c)$ des états de bord dans la région \mathcal{E} .

5.5 Résultats analytiques quantitatifs

Dans cette dernière section, nous présentons les résultats des calculs semiclassiques des états de bords $E_n(x_c)$ pour les différents systèmes étudiés. Les deux approximations utilisées ont été détaillées plus haut dans ce chapitre.

Potentiel symétrique : le ruban zigzag

Il a été montré au chapitre précédent que les états de bord zigzag sont décrits à basse énergie par des potentiels harmoniques coupés par une barrière infinie de potentiel. Il y a en tout quatre équations de Schrödinger à résoudre, une par vallée et par composante. Les spectres de ces équations étant reliés simplement, nous avons considéré le cas du bord droit (sites A dans nos conventions) dans la vallée K uniquement. Les composantes $\varphi_A(x)$ de la fonction d'onde sont alors solutions d'une équation de Schrödinger avec le potentiel harmonique modifié $\mathcal{V}_A(x)$. Par commodité, il a été décidé de considérer ce potentiel plus son image par rapport à la barrière infinie de potentiel, ces deux problèmes étant équivalents dans la mesure où l'on ne garde que les solutions s'annulant au point de symétrie en $x = 0$. Ces solutions sont les fonctions d'onde antisymétriques : elles possèdent un nombre impair de nœuds (dont un est en $x_c = 0$). Les niveaux d'énergie ont été calculés d'abord numériquement par la diagonalisation d'un problème liaisons-fortes au chapitre 3, puis analytiquement dans ce chapitre à l'aide d'un formalisme semiclassique. Dans ce dernier cas, deux approximations ont été envisagées : pour chacune d'elle, on distingue deux régions classiques notées \mathcal{A} et \mathcal{B} auxquelles on attribue des orbites cyclotron quantifiées de différentes natures (ouvertes ou fermées).

La première approximation consiste à considérer l'action dans chaque puits et à la quantifier par la règle de Bohr-Sommerfeld. Les résultats ont déjà été montrés sur les figures 5.3 et 5.4. Cette méthode simple décrit avec succès l'allure générale des niveaux. Toutefois, la frontière entre les deux régions \mathcal{A} et \mathcal{B} est très mal

décrite. Ceci est dû au fait d'avoir négligé le couplage entre les puits, qui devient pertinent quand $|x_c| \approx R$. En pratique, cette approximation revient à prendre la fonction $\gamma = cste$

La seconde approximation utilisée, plus sophistiquée, tient compte de ce couplage en considérant le recouvrement de la fonction d'onde d'un puits à l'autre dans le formalisme WKB. Les niveaux ainsi calculés sont tracés sur la figure 5.11. Une fois les niveaux connus, il est alors instructif de tracer les fonctions $\gamma(x_c)$

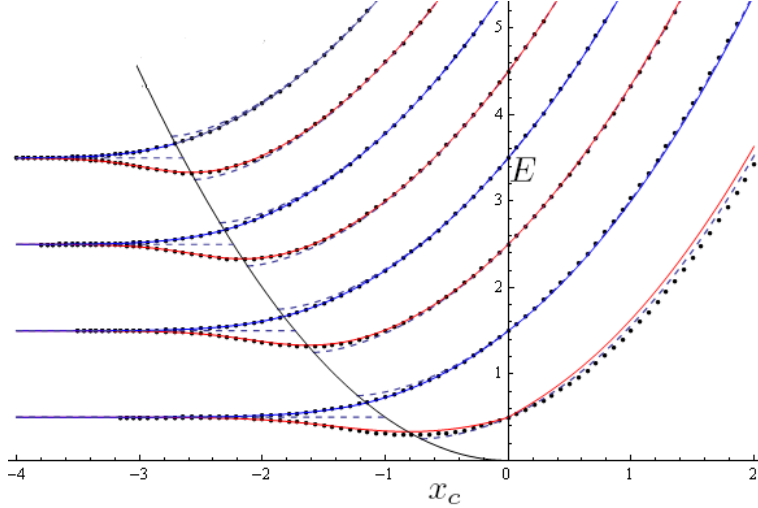


FIGURE 5.11: Niveaux d'énergie adimensionnés du double puits symétrique. Trois résultats sont montrés sur la figure. Les niveaux obtenus avec $\gamma = cste$ sont représentés en pointillés. Les lignes de couleurs constituent le résultat obtenu par la méthode WKB. Seuls les niveaux bleus (solutions anti-symétriques) sont pertinents dans le problème des états de bord zigzag. Ces résultats sont en très bon accord avec des calculs numériques liaisons-fortes (points noirs). Les deux régions sont séparées par une parabole d'équation $E = x_c^2/2$.

(figure 5.12). Nous rappelons que γ est défini par rapport à l'action dans le puits de gauche. Les calculs ayant toujours été menés dans le puits de gauche, nous obtenons dans chaque région une fonction γ définie de la même façon, ce qui nous permet maintenant de tracer un même γ continûment en fonction de la distance au bord. Loin du bord, on retrouve la valeur bien connue de $\gamma = 1/2$. Puis, la levée de dégénérescence des niveaux s'accompagne d'une levée de dégénérescence des fonctions $\gamma^{S/AS}$. Ceux-ci prennent les valeurs particulières $1/3$ et $2/3$ pour $R = |x_c|$. Enfin, ils tendent vers les deux valeurs $1/4$ et $3/4$ dès que $x_c = 0$. Les niveaux du bord de droite zigzag dans la vallée K sont tracés sur la figure 5.13. La région \mathcal{A} supporte des orbites cyclotron quantifiées fermées alors que la région \mathcal{B} , des orbites cyclotron quantifiées ouvertes contre le bord. Enfin, on montre sur la figure 5.14, les niveaux d'énergie dans la vallée \vec{K} pour les deux bords à la fois. On retrouve donc bien la distribution particulière des états de bords $\epsilon_n^b = \epsilon_{2n+1}^v$ avec $n \geq 0$ sur le bord gauche et $\epsilon_n^b = \epsilon_{2n}^v$ avec $n > 0$ pour le bord droit. Une explication de cette répartition a été donnée dans la section 4.2.2. Le décalage d'un niveau de Landau entre les potentiels $\mathcal{V}_A(x)$ et $\mathcal{V}_B(x)$ assure ensuite l'alternance de cette distribution particulière d'un bord à l'autre du système au sein d'un même vallée. Puis, les rôles des sous réseaux étant inversés dans la vallée \vec{K}' , on retrouve la symétrie miroir en énergie du spectre des rubans zigzag. Les niveaux $\epsilon_n(x_c)$ du graphène s'obtenant en prenant simplement la racine carrée des niveaux $E_n(x_c)$,

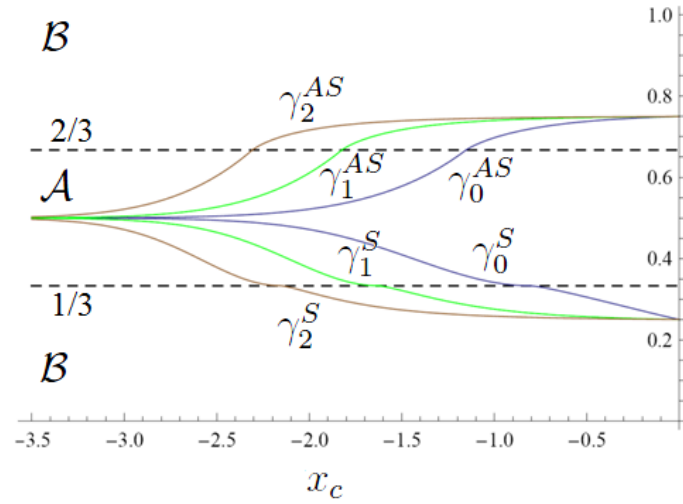


FIGURE 5.12: Dépendance en x_c des fonctions γ définies dans le puits de gauche : γ_0 (bleu), γ_1 (vert) et γ_2 (rouge). Ces fonctions décrivent le couplage des puits en fonction de leur distance.

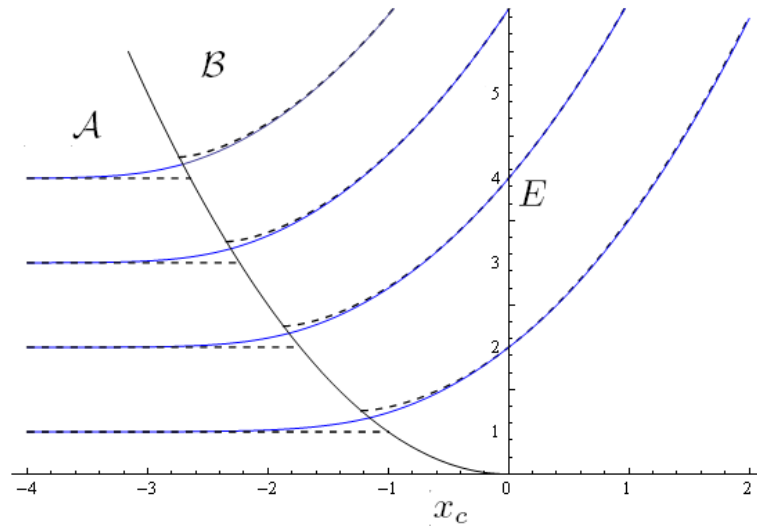


FIGURE 5.13: Niveaux d'énergie adimensionnés $E_n(x_c)$ des états de bord zigzag dans la vallée K sur le bord de droite. Les lignes continues sont le résultat WKB et les lignes en pointillés sont les résultats à $\gamma = \frac{1}{2}$ dans la région \mathcal{A} et $\gamma = \frac{3}{4}$ dans la région \mathcal{B} . Les deux régions sont séparées d'une parabole d'équation $E = x_c^2/2 + 1/2$, et le bord est positionné en $x_c = 0$.

toute cette discussion reste valable pour ϵ_n .

Potentiel asymétrique : les rubans armchair et du réseau carré au demi quantum de flux

Il a été montré au chapitre 4 que les bords armchair du graphène et plats du réseau carré à demi flux étaient décrits à basse énergie par un double potentiel asymétrique harmonique. Alors que la structure en double puits du potentiel symétrique est une commodité non indispensable pour résoudre le problème, elle résulte ici du couplage par les bords soit des vallées (armchair) soit des sous-réseaux (RCDQF). On rappelle que dans ce dernier cas, la fonction d'onde ne s'annule que pour un seul sous-réseau, il a fallu discuter quelle solution garder, celle de

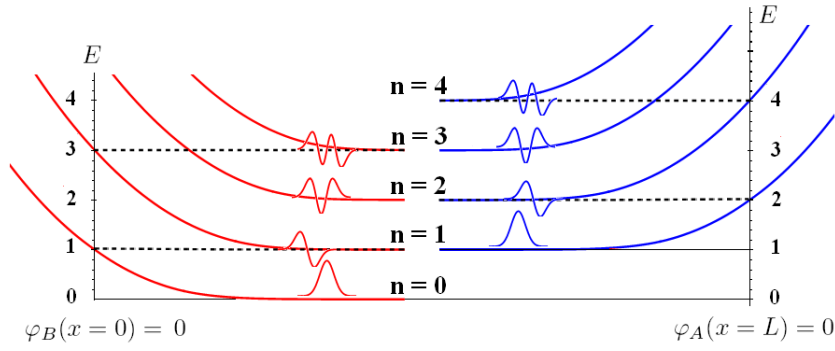


FIGURE 5.14: Niveaux d'énergie adimensionnés $E_n^{AS}(x_c)$ obtenus avec la méthode WKB dans la vallée K pour un ruban zigzag. Les niveaux en bleu (resp. rouge) sont solutions du potentiel $\mathcal{V}_A(x)$ (resp. $\mathcal{V}_B(x)$). L'allure des composantes de volume a également été représentée : φ_A en bleu et φ_B en rouge.

haute ou de basse énergie. En revanche, pour le cas armchair, la fonction d'onde s'annulant sur les deux sous-réseaux, on gardera toutes les solutions du problème.

Par ailleurs, la résolution semiclassique du problème a nécessité le découpage du potentiel en trois régions \mathcal{C} , \mathcal{D} et \mathcal{E} auxquelles on peut associer des orbites cyclotrons quantifiées ouvertes ou fermées (section 5.2). L'originalité ici étant l'apparition de la région intermédiaire \mathcal{D} où des orbites de nature différentes cohabitent, les composantes dans les deux vallées (ou sous-réseaux pour le demi-flux) ne sentant pas le bord en même temps.

La méthode de quantification de l'action par la règle de Bohr-Sommerfeld donne les résultats de la figure 5.4. Seules les régions de volume ou très près du bord sont correctement décrites par cette méthode. La méthode WKB quant à elle décrit de manière très satisfaisante tout le spectre : la région \mathcal{D} comme les frontières entre les trois régions. La figure 5.15 montre les résultats obtenus par les deux méthodes analytiques semiclassiques. Les niveaux obtenus avec la méthode WKB sont confortés par un calcul numérique exact.

5.6 Conclusions du chapitre et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons calculé analytiquement, à l'aide d'un formalisme semiclassique, les niveaux d'énergie des équations de Schrödinger effectives qui décrivent les états de bord de type zigzag, armchair et plat pour le RCDQF. L'approximation grossière de la quantification de l'action du problème par la règle de Bohr-Sommerfeld donne correctement les niveaux sauf lorsque le centre de l'orbite cyclotron $|x_c|$ est situé à une distance comparable au rayon cyclotron. Dans ce cas, le couplage entre les puits du potentiel effectif devient important, et doit être pris en compte correctement. Cet effet a alors été traité dans le cadre de l'approximation WKB. Contrairement à la première approximation, cette seconde approche décrit parfaitement les niveaux d'énergie des états de bord.

Une remarque importante est que la quantification de l'action par la règle de Bohr-Sommerfeld ne rend compte de la non monotonie de certains états de bords, que par un saut des niveaux dans le spectre. En d'autres termes, en contraignant la particule à garder une aire cyclotron constante sans changer sa nature (ouverte ou fermée). lorsqu'elle se rapproche du bord, l'énergie de la particule ne peut

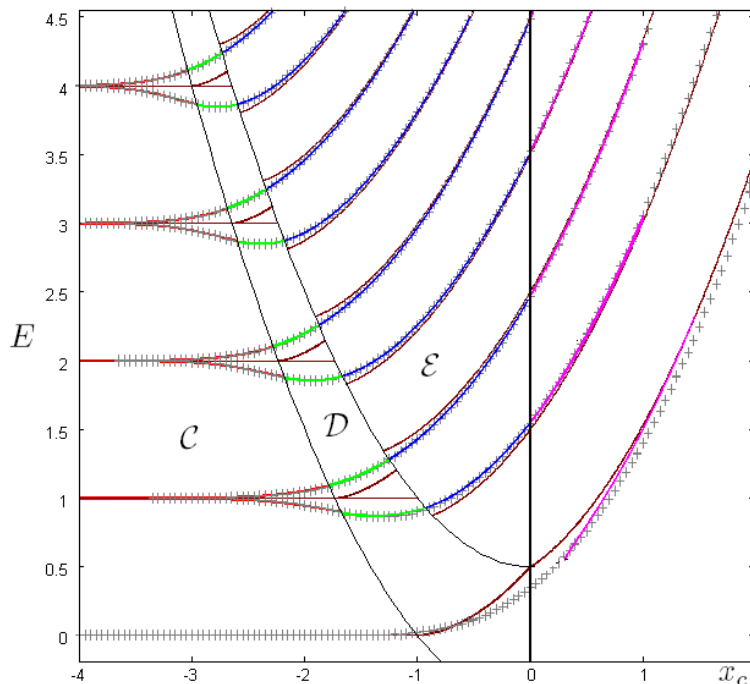


FIGURE 5.15: Niveaux d'énergie adimensionné $E_n(x_c)$ du double puits asymétrique $\mathcal{V}_{asym}(x)$ qui décrit les états de bord des rubans armchair et du réseau carré à demi flux. Trois résultats sont montrés sur la figure. Les niveaux obtenus avec $\gamma = cste$ sont représentés par des traits marron. Les lignes continues de couleurs constituent le résultat par la méthode WKB. Chaque couleur fait écho à la nature des orbites cyclotron dans la région considérée \mathcal{C} , \mathcal{D} ou \mathcal{E} comme sur la figure 5.6. Les croix grises, qui se superposent parfaitement (sauf pour $n = 0$) aux lignes de couleur, constituent le résultat numérique liaisons-fortes. Le bord est représenté en $x_c = 0$ par un trait noir vertical.

qu'augmenter ou rester constante. La prise en compte du couplage des puits par la méthode WKB, montre que la non monotonie de ces états est due à la *répulsion de niveaux*, lors de la levée de dégénérescence des niveaux dans chaque puits, quand les deux puits se rapprochent. Lorsque x_c est très proche du bord, mais également lorsqu'il a changé de signe, les niveaux sont suffisamment écartés pour ne plus se repousser; la valeur de γ est devenue constante, et l'énergie, à nouveau, ne peut donc que croître (comme avec Bohr-Sommerfeld). *La non monotonie de certains états de bord dans les rubans armchair ou du RCDQF résulte donc d'une compétition entre deux effets : la répulsion de niveaux liée au couplage entre deux puits et la valeur constante que doit garder l'aire cyclotron de la particule à l'approche du bord.* Nous avons vu au chapitre 3 que l'ajout d'un potentiel de bord peut augmenter la déviation de ces niveaux non monotones. Il serait donc intéressant d'étendre les calculs effectués dans ce chapitre en présence d'un tel potentiel, et de montrer comment celui-ci accentue la répulsion de niveaux lors de la levée de dégénérescence.

D'autre part, l'approximation de Bohr-Sommerfeld nous a permis de mettre en relief différentes régions dans lesquelles les orbites cyclotron de la particule sont quantifiées et de natures différentes. Les spectres d'énergie des particules de Dirac sur un ruban sous champ magnétique ont ainsi été ré-interprétés en termes de mélanges de ces orbites, chaque orbite étant associée à une vallée et à un sous-réseau.

La partie graphène de ces résultats a été publiée dans Phys. Rev. B [21].

Chapitre 6

États de bord en l'absence de champ magnétique et topologie

Deviner avant de démontrer ! Ai-je besoin de rappeler que c'est ainsi que ce sont faites toutes les découvertes importantes ?

La valeur de la science,
Henri Poincaré

Sommaire

| | | |
|------------|--|------------|
| 6.1 | Transition topologique dans une chaîne de dimères . . . | 111 |
| 6.1.1 | Hamiltonien de bord et Hamiltonien de volume | 111 |
| | La chaîne de dimères découplés | 112 |
| | Une chaîne de dimères couplés, la chaîne de Peierls | 114 |
| 6.1.2 | La phase de Zak | 117 |
| 6.1.3 | Stabilité des états de bords vis à vis du désordre | 119 |
| | Désordre d'Anderson | 120 |
| | Désordre de saut | 120 |
| 6.2 | Application aux rubans de graphène | 121 |
| 6.2.1 | La phase de Zak et l'existence d'états de bord dans le graphène | 121 |
| 6.2.2 | Des états de bord dans les rubans armchair | 124 |
| 6.3 | États de bord dispersifs dans des chaînes couplées de dimères | 126 |
| | Structure de bandes en volume | 127 |
| | Structure de bandes du ruban | 127 |
| 6.4 | Conclusions du chapitre et perspectives | 129 |

Nous avons vu au chapitre 3, que les rubans de graphène zigzag supportent deux états de bord en l'absence de champ magnétique. Ces états se manifestent par un niveau d'énergie nulle qui relie entre eux les deux cônes de Dirac (figure 3.2 page 40). De tels états de bord étant absents dans les rubans armchair comme dans ceux du réseau carré avec un demi quantum de flux par plaquette (RCDQF) avec des bords plats, leur existence dépend donc fortement de la nature du bord. La prédiction théorique de l'existence de ces états en 1996 [17, 18], a depuis lors suscité beaucoup de travaux théoriques et expérimentaux. En particulier, Ryu et Hatsugai [19] montrèrent en 2002 que l'existence de tel états était reliée à une propriété *topologique* de la fonction de Bloch du système en l'absence de bord. Ce lien étroit entre une propriété topologique de la fonction d'onde en volume d'une part, et l'existence d'états de bords d'autre part, n'est pas nouveau. Nous pouvons par exemple mentionner l'effet Hall quantique (chapitre 3), où le nombre d'états de bords \mathcal{N} qui intervient dans la quantification de la conductance transverse, n'est autre qu'un "nombre topologique", appelé *premier nombre de Chern*, qui est relié à une phase géométrique de la fonction d'onde du volume [83, 84]. À la différence des rubans zigzag sans champ, les états de bords de l'effet Hall quantique sont dispersifs, et assurent la conduction électrique le long des bords, même en présence de désordre. Récemment, il a été découvert des systèmes 2D et 3D possédant de tels états de bords en l'absence de champ magnétique [85, 86, 87]. Dans ce cas, il est également possible d'associer un nombre topologique à la fonction d'onde, qui, lorsqu'il est non nul, caractérise une *phase topologique* où le système cesse d'être isolant de bandes près des bords. Pour cette raison, ces systèmes sont qualifiés d'*isolants topologiques*, et font actuellement l'objet d'intenses recherches.

Afin de mieux comprendre cette relation entre états de bord et propriétés du volume, nous développons d'abord un modèle simple sur réseau à une dimension, qui décrit continûment une transition entre une phase isolante et une phase topologique dans laquelle le système possède des états de bords. Nous montrerons qu'il est alors possible d'associer un nombre topologique aux fonctions d'onde de volume dans le second cas : la *phase de Zak* [88]. Puis, après avoir brièvement discuté la stabilité de ces états en présence de désordre, nous utilisons ce modèle pour réinterpréter les résultats de Ryu et Hatsugai sur les rubans de graphène [19], et tirer de nouvelles conclusions. Ensuite, nous étendons le modèle à deux dimensions et montrons qu'il décrit un système avec des états de bords dispersifs, à la manière d'un isolant topologique. L'étude de ce système n'étant pas complète, nous concluons en proposant quelques perspectives.

6.1 Transition topologique dans une chaîne de dimères

6.1.1 Hamiltonien de bord et Hamiltonien de volume

Considérons un cristal à une dimension de longueur finie dans la direction x , et possédant deux atomes par maille A et B , comme schématisé sur la figure 6.1. Nous allons discuter les conditions d'émergence d'états de bord dans ce système et mettre en évidence un lien entre l'existence de tels états et une propriété topologique de la fonction d'onde de volume du système.

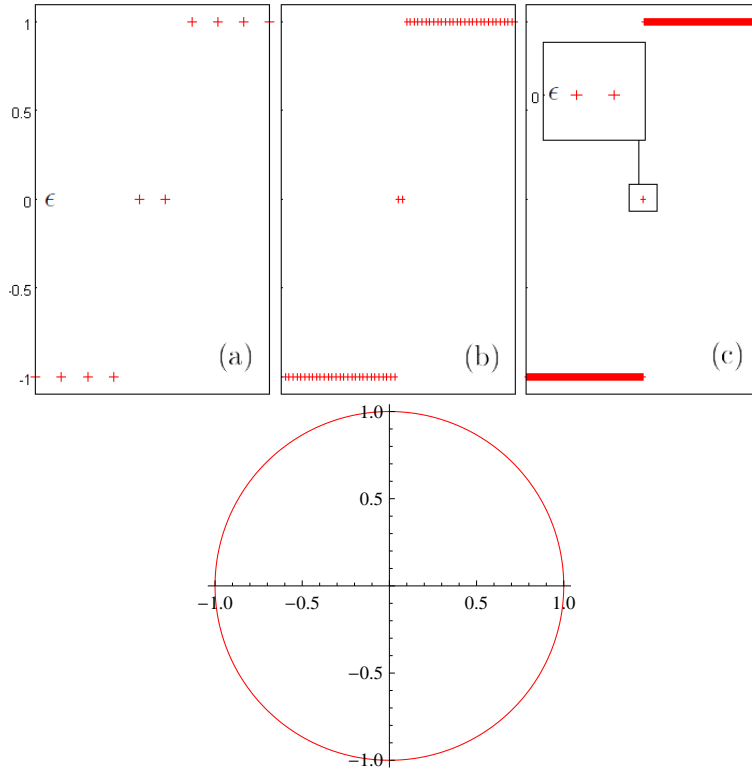


FIGURE 6.2: Energies propres de la chaîne de dimères découplés avec (a) $M = 5$, (b) $M = 30$ et (c) $M = 500$. Dans tous les cas, le spectre se constitue de valeurs propres $\epsilon/t = \pm 1$ ainsi que deux états d'énergie nulle, qui correspondent aux états localisés aux deux bords. En dessous, le cercle unité entourant l'origine \mathcal{O} est le contour que décrit le vecteur $\vec{R}(k_x)$ lorsque k_x parcourt la zone de Brillouin 1D. Le vecteur $\vec{R}(k_x)$ paramétrise l'Hamiltonien de volume H_{dim}^v associé à l'Hamiltonien H_{dim} de la chaîne finie de dimères découplés.

de sorte que l'équation de Schrödinger devient :

$$\begin{aligned} \epsilon \begin{pmatrix} \Psi^A \\ \Psi^B \end{pmatrix} &= H_{dim}^v(k_x) \begin{pmatrix} \Psi^A \\ \Psi^B \end{pmatrix} \\ H_{dim}^v(k_x) &= -t \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik_x a_0} \\ e^{ik_x a_0} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.3)$$

où l'on a volontairement omit l'indice k_x des fonctions d'onde pour alléger l'écriture. Il est clair que les seules valeurs propres sont $\epsilon = \pm t$ uniquement, les états d'énergie nulle ayant disparu, puisque les bords eux mêmes ont disparu. Toutefois, il subsiste une trace de la présence d'états de bord dans la structure de l'Hamiltonien lui-même. Pour cela, récrivons l'Hamiltonien de volume sous la forme :

$$H_{dim}^v = -t \underbrace{\begin{pmatrix} \cos k_x a_0 \\ \sin k_x a_0 \end{pmatrix}}_{\vec{R}(k_x)} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

où l'on rappelle l'expression des matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

Le vecteur $\vec{R}(k_x)$ qui paramétrise l'Hamiltonien H_{dim}^v décrit un cercle unité centré sur l'origine \mathcal{O} quand k_x parcourt la zone de Brillouin 1D, soit $k_x \in]-\pi/a_0; \pi/a_0]$. Notons que l'origine \mathcal{O} correspond à $\vec{R} = 0$ et donc à la fermeture du gap. Or, la fermeture du gap peut entraîner la délocalisation des états de bord, car ceux-ci peuvent se coupler aux états de volume. En 2002, Ryu et Hatsugai suggérèrent un modèle similaire dans le contexte de la supraconductivité où les états de spins haut et bas remplacent les deux atomes du dimère, et constatèrent ainsi une relation entre la présence d'états d'énergie nulle localisés sur les bords et une propriété topologique du volume qui se manifeste par le cercle unité qui entoure l'origine \mathcal{O} , comme le montre la figure 6.2[19]. Cet aspect est développé dans la suite.

Une chaîne de dimères couplés, la chaîne de Peierls

Nous généralisons maintenant le modèle précédent en autorisant des sauts entre mailles. Ces sauts sont paramétrés par un terme de couplage t' non nul. En liaisons-fortes, l'équation de Schrödinger s'écrit maintenant :

$$\begin{aligned} \epsilon \Phi_m^A &= -t \Phi_{m-1}^B - t' \Phi_m^B \\ \epsilon \Phi_m^B &= -t \Phi_{m+1}^A - t' \Phi_m^A \end{aligned} \quad (6.6)$$

et l'Hamiltonien de bord, que nous noterons \mathcal{H}_{dim}^b , prend la forme :

$$\mathcal{H}_{dim}^b = - \left(\begin{array}{ccc|ccc} & & & t' & \dots & \\ & & & t & t' & \\ & & & & & \ddots \\ & & 0 & & & t & t' \\ & & & & & & \ddots & \vdots \\ \hline t' & t & & & & & & t & t' \\ \vdots & \ddots & & & & & & & \\ & & t' & t & & & & & \\ & & & & \ddots & & & & \\ & & & & & t' & t & & \\ & & & \dots & & & t' & & \end{array} \right) \quad (6.7)$$

L'Hamiltonien de volume \mathcal{H}_{dim}^v qui lui est associé, s'obtient comme précédemment en périodisant le système. En appliquant le théorème de Bloch, on obtient l'équation de Schrödinger suivante :

$$\epsilon \begin{pmatrix} \Psi^A \\ \Psi^B \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & t' + te^{-ik_x a_0} \\ t' + te^{ik_x a_0} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^A \\ \Psi^B \end{pmatrix}$$

et l'Hamiltonien de volume se paramétrise alors comme :

$$\mathcal{H}_{dim}^v(k_x) = -t \vec{R}(k_x) \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

où le vecteur

$$\vec{R}(k_x) = \begin{pmatrix} t'/t + \cos k_x a_0 \\ \sin k_x a_0 \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

décrit un cercle unité centré en $(t'/t; 0)$ dans l'espace des paramètres lorsque k_x parcourt la zone de Brillouin. La figure 6.3 montre les spectres d'énergie de la chaîne de longueur finie pour différentes valeurs de t'/t . Sur la même figure, on montre les courbes décrites par le vecteur $\vec{R}(k_x)$ pour k_x variant de $]-\pi/a_0; \pi/a_0]$. Le cas $t' = 0$, en rouge, est celui des dimères découplés déjà discuté plus haut, où l'on distingue deux états de bord d'énergie nulle, les autres états se situant à une énergie $\epsilon = \pm t$. Le vecteur \vec{R} qui paramétrise l'Hamiltonien de volume décrit un cercle (rouge) de rayon unité entourant l'origine \mathcal{O} . Pour $t'/t = 0.5$ (en vert), Le spectre d'énergie est modifié mais conserve les deux états de bord d'énergie nulle, bien que les électrons aux bords soient couplés avec le reste de la chaîne.¹ Cette fois la courbe décrite par $\vec{R}(k_x)$ n'est plus centrée sur l'origine, car l'Hamiltonien de volume est différent, mais conserve son enroulement autour du point \mathcal{O} . La valeur $t'/t = 1$ est critique en ce sens que la courbe décrite par $\vec{R}(k_x)$ touche l'origine. Par conséquent, le gap se ferme. Pour des valeurs $t'/t > 1$, le gap s'ouvre à nouveau, mais les états de bord d'énergie nulle ont disparu. Les contours décrits par $\vec{R}(k_x)$ n'entourent plus l'origine : la nature topologique du système en volume a changé.

1. Pour des chaînes extrêmement petites, $M \leq 5$ ces deux états ne sont pas tout à fait à énergie nulle car les états de bord peuvent communiquer d'un bord à l'autre.

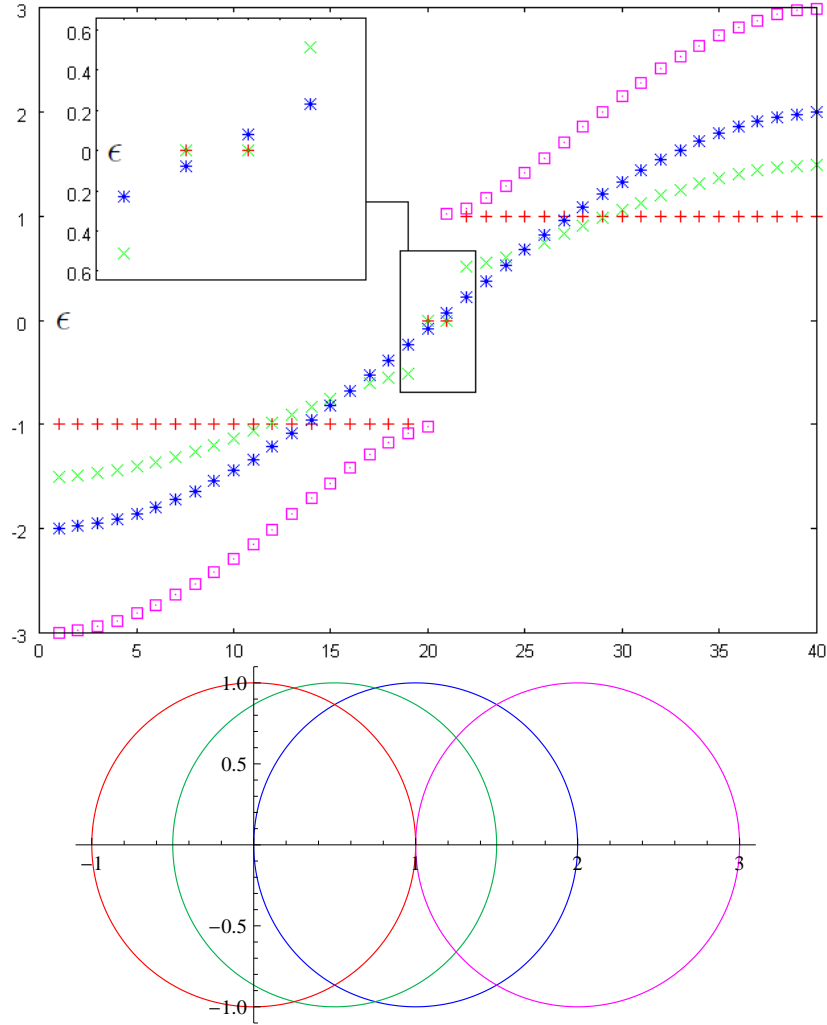


FIGURE 6.3: Spectre d'énergie en unité de t de l'Hamiltonien de bord \mathcal{H}_{dim}^b pour différentes valeurs de t'/t . Le code couleur est le suivant $t' = 0$ (rouge), $t'/t = 0.5$ (vert), $t'/t = 1$ (bleu), $t'/t = 2$ (rose). Le système comprenant vingt sites A et vingt sites B , les quarante niveaux sont classés par valeurs croissantes par soucis de lisibilité. Les cercles sont les courbes que décrit le vecteur $\vec{R}(k_x)$ quand k_x visite toute la zone de Brillouin 1D, soit $k_x \in]-\pi/a_0, \pi/a_0]$. Le rapport t'/t pilote une transition topologique entre une phase isolante $t'/t > 1$ et une phase possédant des états de bord d'énergie nulle $t'/t < 1$. Cette propriété topologique est caractérisée par des cercles entourant ($t'/t < 1$) ou n'entourant pas ($t'/t > 1$) l'origine \mathcal{O} . Ces cercles sont une représentation géométrique de la phase de Zak (voir section 6.1.2.)

Ainsi, le modèle d'une chaîne de dimères décrit la transition entre deux phases, l'une comportant des états de bord et l'autre non. Ces deux phases sont caractérisées par une propriété topologique de volume : le cercle décrit par le vecteur $\vec{R}(k_x)$ paramétrant l'Hamiltonien de volume \mathcal{H}_{dim}^v lorsque k_x visite toute la zone de Brillouin 1D, entoure ou n'entoure pas l'origine. De plus, nous pouvons piloter cette transition topologique en modifiant le rapport t'/t .

6.1.2 La phase de Zak

Nous précisons ici le sens du contour décrit par $\vec{R}(k_x)$. Pour ce faire, nous calculons l'angle balayée par $\vec{R}(k_x)$ lorsque k_x visite toute la zone de Brillouin. Celui-ci vaut :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \oint \frac{\vec{R} \times d\vec{R}}{R^2} \cdot \vec{e}_z &= \frac{1}{2} \oint dk_x \frac{\vec{R} \times \frac{d\vec{R}}{dk_x}}{R^2} \cdot \vec{e}_z \\
&= \frac{1}{2} \oint dk_x \left(\cos \phi \frac{\partial_{k_x} R \sin \phi}{R} - \sin \phi \frac{\partial_{k_x} R \cos \phi}{R} \right) \\
&= \frac{1}{2} \oint dk_x (\cos \phi \partial_{k_x} \sin \phi + \sin \phi \partial_{k_x} \cos \phi) \\
&= \frac{1}{2} \oint dk_x \partial_{k_x} \phi(k_x) \\
&= \frac{\phi_{\text{final}} - \phi_{\text{initial}}}{2}.
\end{aligned} \tag{6.10}$$

Cet angle ne peut donc prendre que les deux valeurs distinctes 0 et π . Par ailleurs, il peut être relié à la phase de Berry qu'accumule la fonction d'onde lorsqu'elle visite toute la zone de Brillouin [40]. Pour établir cette relation, nous considérons un Hamiltonien très général à deux bandes de la forme :

$$H_{2 \text{ bandes}} = \alpha_0 \mathbb{1} + \alpha_x \sigma_x + \alpha_y \sigma_y + \alpha_z \sigma_z. \tag{6.11}$$

Cet Hamiltonien peut se récrire sous la forme :

$$H_{2 \text{ bandes}} = \alpha_0 \mathbb{1} + |\vec{\alpha}| \vec{R}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \tag{6.12}$$

où $\vec{\sigma}$ est le vecteur des matrices de Pauli. Ainsi, pour chaque valeur de \vec{k} , l'Hamiltonien (6.12) est représenté par un point de la sphère de Bloch (figure 6.4), et le vecteur $\vec{R}(\vec{k})$ a pour expression :

$$\vec{R}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \tag{6.13}$$

où les angles θ et ϕ dépendent de \vec{k} . L'énergie des deux bandes est alors simplement donnée par :

$$\epsilon(\vec{k}) = \alpha_0(\vec{k}) \pm |\vec{\alpha}(\vec{k})| \tag{6.14}$$

et les vecteurs propres, dans la base des sous-réseaux ($|A\rangle; |B\rangle$) s'écrivent :

$$\begin{aligned}
\text{bande de conduction : } |u_{\vec{k}}\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |A\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |B\rangle \\
\text{bande de valence : } |u_{\vec{k}}\rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} |A\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |B\rangle
\end{aligned} \tag{6.15}$$

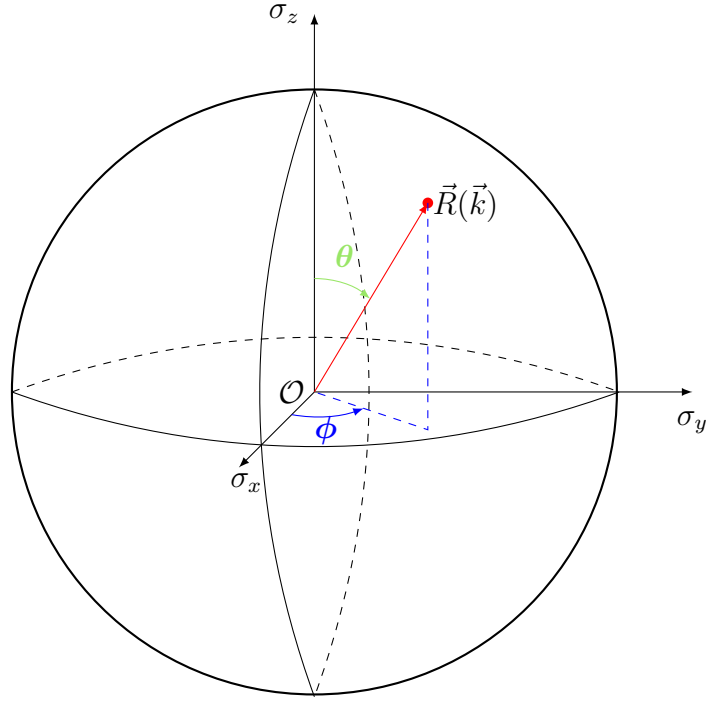


FIGURE 6.4: Sphère de Bloch de rayon unité. De façon générale, chaque point de la sphère, paramétré par le vecteur $\vec{R}(\vec{k})$, représente un état du système. Dans les cas qui nous intéressent ici $\theta = \pi/2$, $\vec{R}(\vec{k})$ est donc contraint de rester sur l'équateur.

Nous introduisons ici la *phase de Zak*, que l'on notera γ , et qui n'est autre que la phase de Berry qu'accumule la fonction d'onde lorsque k_x explore adiabatiquement toute la zone de Brillouin 1D [88] :

$$\gamma = i \oint dk_x \langle u_{k_x} | \partial_{k_x} u_{k_x} \rangle . \quad (6.16)$$

La phase de Zak exploite la nature topologique de la zone de Brillouin unidimensionnelle qui est un anneau. Le problème de la chaîne de Peierls étant purement unidimensionnel, on a simplement $|u_{\vec{k}}\rangle = |u_{k_x}\rangle$. D'autre part, dans le cas qui nous a intéressé jusque là, $\alpha_0 = 0$ et $\alpha_z = 0$. La seconde égalité implique alors $\theta = \frac{\pi}{2}$, le vecteur \vec{R} est donc purement équatorial. En se limitant à la bande de conduction, la fonction d'onde s'écrit alors :

$$\Psi_{k_x}(x) = \langle x | u_{k_x} \rangle e^{ik_x x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi(k_x)} \end{pmatrix} e^{ik_x x} \quad (6.17)$$

ce qui permet de calculer aisément γ comme :

$$\gamma = \oint dk_x \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\phi(k_x)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ ie^{i\phi(k_x)} \partial_{k_x} \phi(k_x) \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \oint dk_x \partial_{k_x} \phi(k_x) \quad (6.18)$$

qui n'est autre que l'angle (6.11) parcouru par $\vec{R}(k_x)$, donc

$$\gamma = -\frac{1}{2} \oint \frac{\vec{R} \times d\vec{R}}{R^2} \cdot \vec{e}_z . \quad (6.19)$$

Ainsi, la phase de Zak ne peut prendre que deux valeurs pour ce système :

$$\gamma = 0 \quad \text{ou} \quad \gamma = \pm\pi \quad (6.20)$$

le signe + provenant de la bande valence.² La phase de Zak est donc une quantité topologique de volume qui possède en quelque sorte la mémoire de l'existence d'états de bord. Ceci provient ici du fait que l'Hamiltonien de volume sait s'il est construit à partir d'une maille $A - B$ ou d'une maille $B - A$. *La phase de Zak, vaut π si le système fini possède deux états de bord (d'énergie nulle ici), et 0 dans le cas contraire. Ceci établit une correspondance entre les états localisés aux bords et une propriété topologique de la fonction d'onde en volume.*

Cette correspondance est constatée ici dans le modèle de la chaîne de dimères couplés, mais non démontrée mathématiquement directement, comme ça l'a été fait dans d'autres contextes [84, 89, 90, 91]. Toutefois, il est possible d'en donner une bonne intuition. Pour cela, considérons un système qui possède en volume une telle propriété topologique ($\gamma_1 = \pi$). Ce système est en contact avec le vide ou n'importe quel autre matériau ne possédant pas de propriété topologique particulière (soit $\gamma_2 = 0$). Or, nous avons vu que pour que le système passe de la phase topologique, à la phase non topologique, il est nécessaire que le gap se ferme. Par conséquent, le gap doit se fermer sur le bord, ce qui signifie qu'il existe des états d'énergie nulle sur le bord.

6.1.3 Stabilité des états de bords vis à vis du désordre

Nous venons d'établir que l'existence d'états de bord va de pair avec une phase de Zak non nulle. Par ailleurs, celle-ci ne peut prendre que deux valeurs, 0 ou π , ce qui est évident grâce à la représentation des courbes paramétrées \vec{R} à la Ryu-Hatsugai de la figure 6.3, qui entourent ou n'entourent pas l'origine \mathcal{O} . On peut montrer de façon générale, que la symétrie d'inversion du système restreint la phase de Zak à deux valeurs possibles [88]. Une démonstration de cette propriété, adaptée à la chaîne de dimères, est proposée dans l'annexe C. Par conséquent, on peut se demander dans quelle mesure la phase de Zak demeure non nulle si cette symétrie est brisée, ou mieux, si l'existence des états de bord demeure dans ce cas.

Pour répondre à cette question nous introduisons du désordre dans le modèle de la chaîne de Peierls et cherchons à savoir si des niveaux d'énergie peuvent apparaître dans le gap. Nous considérerons deux types de désordre. Le premier est un désordre sur site de type Anderson, le second est un désordre de saut entre plus proches voisins. En présence de désordre, il n'est plus possible de définir une zone de Brillouin, et donc de calculer la phase de Zak à partir des fonctions de Bloch, comme nous l'avons définie en (C.2). Il est cependant possible d'étendre cette définition en présence de désordre, en introduisant un flux φ à travers la chaîne de Peierls que l'on aura rebouclée en anneau. La phase de Zak prend alors la forme suivante [92] :

$$\gamma_{des} \propto i \oint d\varphi \langle u_\varphi | \partial_\varphi u_\varphi \rangle \quad (6.21)$$

où les $|u_\varphi\rangle$ sont les nouvelles fonctions propres en fonction du flux. Le flux φ devient alors le paramètre continu qu'il s'agit de faire varier périodiquement pour éventuellement accumuler une phase de Zak. Cette généralisation requiert la connaissance des fonctions u_φ , ce que nous ne traiterons pas ici. Nous nous contenterons donc de calculer numériquement les spectres d'énergie de chaînes de longueurs finies, pour une configuration de désordre donnée, en faisant varier l'amplitude du désordre.

2. γ étant une phase, les valeurs $\pm\pi$ sont identiques.

Désordre d'Anderson

Nous complexifions encore un peu d'avantage le modèle de la chaîne de Peierls en ajoutant un potentiel aléatoire sur site $\Delta_i \in [-\Delta/2; \Delta/2]$. L'Hamiltonien de la chaîne finie de dimère devient :

$$\mathcal{H}_{dim}^b = - \left(\begin{array}{ccc|ccc} \Delta_1 & & & t' & \dots & \\ & & & t & t' & \\ & & \dots & & & \\ & & & & & \dots \\ & & & & & t & t' \\ \hline & & & \Delta_N & & & \\ & & & & \Delta_{N+1} & & \\ & & t' & t & & & \\ \vdots & & \dots & & & & \\ & & & & & & \dots \\ & & & & & & t' & t \\ & & & & & & \dots & t' \\ & & & & & & \dots & t' \end{array} \right) \quad (6.22)$$

La diagonalisation s'obtient numériquement, et le spectre obtenu est représenté sur la figure 6.5. On constate que pour une intensité raisonnable du désordre, les états de bord persistent, quite à ne plus avoir leur énergie nulle.

Désordre de saut

À la place du désordre sur site, on considère maintenant un désordre de saut. Les paramètres t et t' se voient attribuer un terme aléatoire $\delta_{i,i+1} \in [-\delta/2; \delta/2]$ supplémentaire. Là encore, les spectres obtenus pour différentes amplitudes δ et montrés sur la figure 6.5, exhibent clairement des états dans le gap : les états de bords sont donc robustes à ce type de perturbations. Contrairement au désordre d'Anderson, la symétrie $\epsilon \rightarrow -\epsilon$ est conservée par le désordre de saut. Ceci permet de comprendre que dans ce cas, les états de bord conservent une énergie nulle.

Cette résistance des états de bord à des perturbations comme celles induites par le désordre est assez générale et se comprend par la solidité des propriétés topologiques en volume. Intéressons nous aux contours \mathcal{C} décrits par le vecteur \vec{R} d'un Hamiltonien 2×2 paramétré sur la sphère de Bloch. Ils sont de deux catégories, soit \mathcal{C} entoure l'origine, et le système a deux états de bord d'énergie nulle, soit \mathcal{C} ne l'entoure pas, et aucun état de bord n'apparaît dans le gap. Une perturbation modifie en quelque sorte la forme du contour \mathcal{C} . Mais en réalité, la forme du contour importe peu. En effet, si le contour \mathcal{C}_i pour un Hamiltonien H_i donné, entoure l'origine \mathcal{O} , alors cet Hamiltonien peut être transformé continûment de sorte que le contour \mathcal{C}_i épouse parfaitement le cercle unité, c'est-à-dire le contour associé à l'Hamiltonien \mathcal{H}_{dim}^v . Ceci garantit donc l'existence d'états de bord pour le système fini. Paramétrons cette transformation par un réel λ , et posons nous la question de savoir si le contour \mathcal{C}_λ associé à l'Hamiltonien $\mathcal{H}_{dim}^v(\lambda)$ peut être continûment déformé en le cercle unité, c'est-à-dire si les états propres vérifient $\langle \Psi(\lambda) | \Psi(\lambda + d\lambda) \rangle = 1 + O(\lambda)$. Si c'est le cas pendant toute la transformation, c'est-à-dire pour tout λ , alors l'état propre de l'Hamiltonien H_i est normalisé de

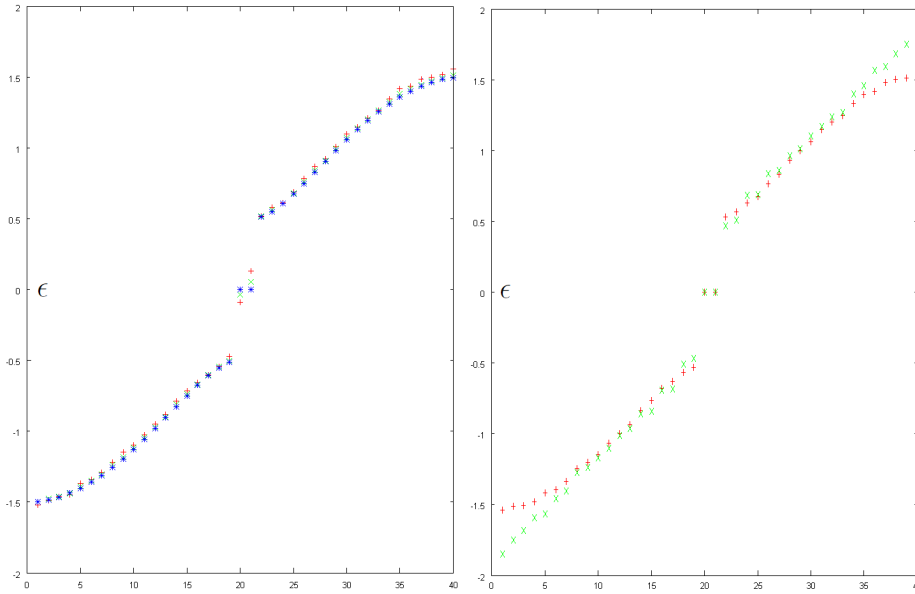


FIGURE 6.5: (Gauche) potentiel d'Anderson d'amplitude (bleu) nulle, (vert) $\Delta/t = 0,2$, (rouge) $0,5$. Le désordre fait bouger tous les niveaux, y compris ceux dans le gap. Toutefois, il est encore possible avec une amplitude de désordre égale à t' de distinguer les états de bord du reste du spectre. (Droite) désordre de saut d'amplitude (rouge) $\delta/t = 0,2$, (vert) $\delta/t = 0,8$. Un tel type de désordre, ne fait pas bouger les états de bord, qui restent fermement à l'énergie $\epsilon = 0$. Toutefois, le reste du spectre est aussi affecté, et le gap se referme progressivement. Pour des amplitudes de l'ordre de $\delta = 2t$, il n'est plus possible de distinguer le gap.

la même façon que l'état localisé $|\Psi(0)\rangle$ de l'Hamiltonien de la chaîne de dimères découplés, $|\Psi(1)\rangle$ est donc lui aussi localisé. Ainsi, ce qui compte est la propriété *topologique* d'enroulement du contour autour de l'origine \mathcal{O} et non sa forme ou sa taille qui peut être modifié par des perturbations.

6.2 Application aux rubans de graphène

Dans cette section, nous montrons que les états de bord dans les rubans zigzag en l'absence de champ magnétique, apparaissent pour une valeur de k_y telle que la fonction d'onde de Bloch en volume possède une phase de Zak $\gamma(k_y) = \pi$.

6.2.1 La phase de Zak et l'existence d'états de bord dans le graphène

Pour écrire l'Hamiltonien de volume du graphène, il est nécessaire de choisir une maille de deux atomes. Plusieurs choix sont possibles, et totalement équivalents pour décrire les propriétés spectrales en volume. Toutefois, ils ne le sont plus quand il s'agit de décrire un bord particulier, zigzag, armchair ou *barbu*³. C'est ainsi qu'au chapitre 3, nous n'avions pas fait le même choix de maille pour étudier numériquement les spectres d'énergie des rubans zigzag ou armchair (voir la figure

3. Ce type de bord est représenté sur la figure 6.6 le long de l'axe horizontal. Il s'agit d'un type de bord académique, peu pertinent expérimentalement, mais intéressant conceptuellement puisque il supporte des états de bord semblables à ceux des rubans zigzag [19]

3.1). Nous nous donnons ici la même maille que dans le cas armchair et nous la représentons par un rectangle sur la figure 6.6. Cette maille peut décrire différents types de bords : en reproduisant celle-ci suivant l'axe vertical bleu, elle épouse un bord armchair : c'est le cas rencontré au chapitre 3. En revanche, le long de l'axe horizontal rouge, elle décrit un bord barbu. Enfin, en suivant l'axe noir, elle épouse maintenant un bord zigzag. Ainsi, les trois types de bord réguliers du réseau nid d'abeilles peuvent être considérés avec ce seul choix de maille en orientant les bords parallèlement à l'un de ces trois axes.

Une fois ce choix de maille effectué, nous nous intéressons à l'Hamiltonien de volume, dont le spectre ignore les bords. En nous donnant deux vecteurs de base \vec{a}_1 et \vec{a}_2 (figure 6.6), l'Hamiltonien de volume liaisons-fortes du graphène H_g^v prend la forme suivante :

$$H_g^v = \begin{pmatrix} 0 & f_2(\vec{k}) \\ f_g^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (6.23)$$

avec

$$f_g(\vec{k}) = - \left(t_1 + t_2 e^{i\vec{k}(\vec{a}_2 - \vec{a}_1)} + t_3 e^{i\vec{k}\vec{a}_1} \right) \quad (6.24)$$

où les paramètres de saut sont pour l'instant pris tels que $t_1 = t_2 = t_3 \equiv t$. L'Hamiltonien H_g^v peut être paramétrisé sur la sphère de Bloch (expression (6.12)) avec $\alpha_0 = \alpha_z = 0$, $\cos \phi(\vec{k}) = \mathcal{R}e(f_g(\vec{k}))$ et $\sin \phi(\vec{k}) = -\mathcal{I}m(f_g(\vec{k}))$. Les fonctions d'onde prennent la forme (pour la bande de conduction) :

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | u_{\vec{k}} \rangle e^{i\vec{k}\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi(\vec{k})} \end{pmatrix} e^{i\vec{k}\vec{r}}. \quad (6.25)$$

Si le spectre de volume $\epsilon(\vec{k}) = \pm |f_g(\vec{k})|$ ne dépend pas du choix de la maille, l'angle $\phi(\vec{k})$ dans l'expression de l'Hamiltonien et des fonctions d'onde (6.25), lui, en dépend, et par conséquent, la phase de Zak aussi. Notons aussi que contrairement au cas 1D de la chaîne de Peierls, la phase de Zak dépend maintenant aussi de k_y .

Nous représentons ensuite dans le plan (k_x, k_y) , le champ de vecteurs faisant un angle $\phi(\vec{k})$ avec l'axe horizontal k_x (figure 6.6). On distingue tout d'abord des singularités situées aux points de Dirac, que l'on peut classer en deux catégories selon que les vecteurs tournent autour d'elles dans un sens ou dans l'autre. En suivant un chemin fermé autour d'un point de Dirac, on remarque que l'angle ϕ a systématiquement parcouru 2π . Ceci est une façon d'illustrer le résultat connu que la phase de Berry 2D est non nulle autour d'un point de Dirac et vaut $\pm\pi$ [4], comme déjà mentionné au chapitre 2.

L'intérêt de cette représentation est qu'elle permet aussi de lire la phase de Zak $\gamma(k_y)$. Pour cela, il suffit de suivre un chemin à k_y fixé, et de vérifier si les vecteurs ont fait ou non un tour complet. Prenons l'exemple des axes bleus. L'axe y vertical repose sur un bord de type armchair. La lecture du champ de vecteurs à k_y fixé nous donne donc directement la phase de Zak pour un ruban armchair. Nous constatons que dans ce cas, $\gamma(k_y) = 0$ quelque soit k_y . Or nous avons établi dans la section précédente qu'une phase de Zak nulle était synonyme de l'absence d'états de bord, ce qui est le cas dans les rubans armchair (figure 3.3). Ce qui fonctionne pour les bords armchair fonctionne aussi pour les autres types de bord. L'axe y rouge horizontal, repose sur un bord de type barbu. De la même manière, on fixe une valeur de k_y lui correspondant (de la même couleur rouge), ce qui

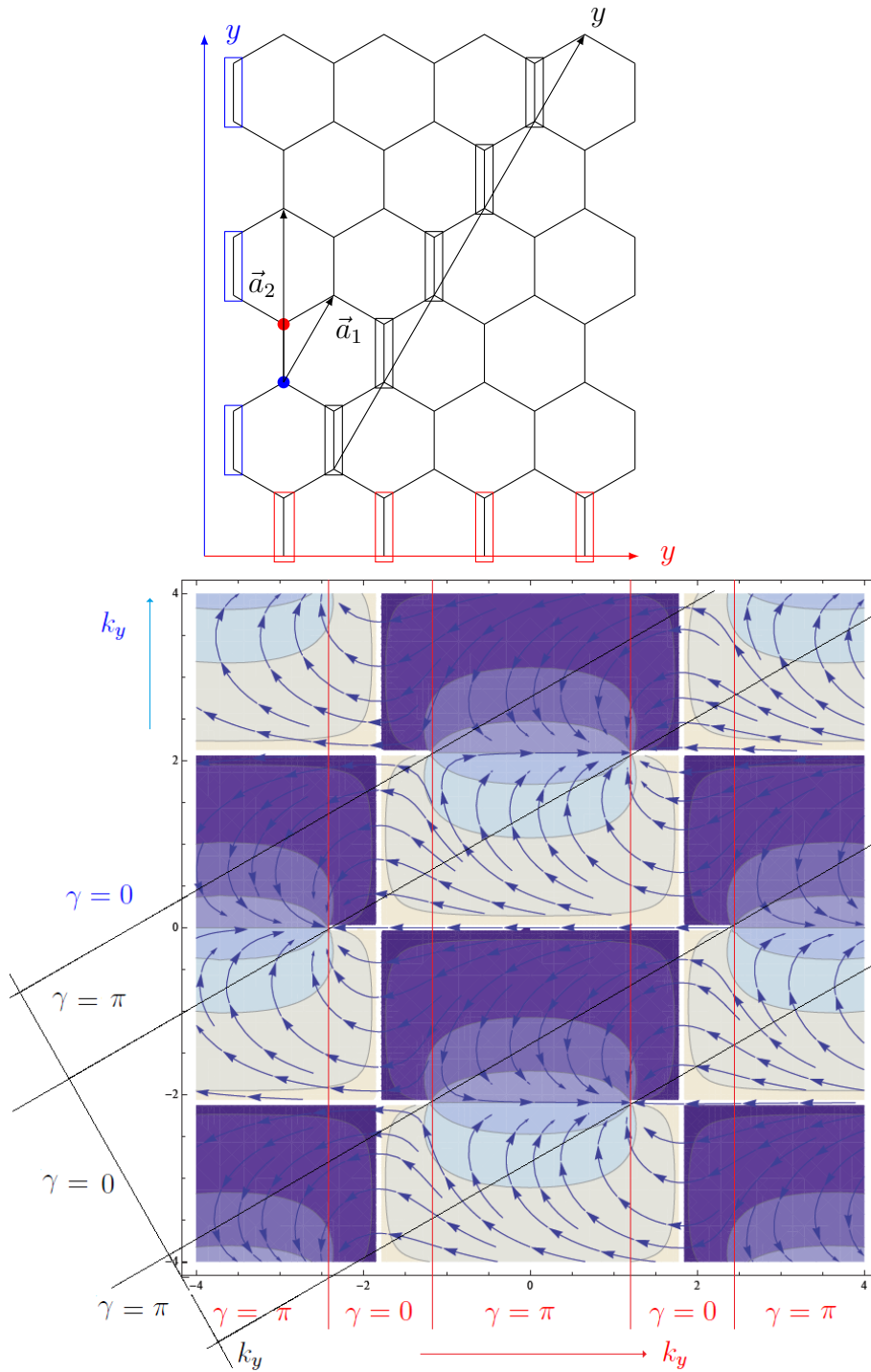


FIGURE 6.6: Choix de maille qui permet d'obtenir la phase de Zak $\gamma(k_y)$ pour les trois types de bords simultanément : zigzag (noir), armchair (bleu) et barbu (rouge). La maille est représentée par un rectangle. Les trois types de bords sont indiqués par la répétition du motif. En bas, champ de vecteurs d'angles ϕ obtenu à partir de l'Hamiltonien (6.23). Les domaines colorés sont séparés par des frontières iso- ϕ . L'axe x (resp. k_x) est implicitement orthogonal à l'axe y (resp. k_y).

nous donne directement accès à la phase de Zak dans ce cas. On distingue alors trois régions, séparées par les deux points de Dirac, où la phase de Zak prend les valeurs 0 (absence d'état de bord d'énergie nulle) ou π , ce qui signale alors l'existence d'états de bord dans cette région. Ceci est en parfait accord avec des calculs liaisons-fortes pour ce type de bord [19]. Enfin, le bord zigzag peut être découpé suivant l'axe noir. La phase de Zak prend cette fois la valeur π en bord de zone de Brillouin 1D, c'est à dire à l'extérieur des points de Dirac, là où des états de bord existent (figure 3.2) et 0 entre les points de Dirac, où il n'y a aucun état de bord.

En traçant, des courbes iso- $\phi(\vec{k})$ (plages de nuances de bleu) nous remarquons que la connaissance fine du champ de vecteurs n'est finalement pas nécessaire dans toute cette discussion, mais que seule compte la façon dont les points de Dirac s'apparient. En effet, il se forme, pour tout choix de maille, des chemins particuliers qui relient un point de Dirac "attractif" avec un "répulsif", et à travers lesquels l'angle ϕ fait un saut de 0 à 2π . La seule connaissance de ces *dipôles topologiques* suffit à connaître la phase de Zak. En effet, si le chemin à k_y constant que l'on considère traverse une discontinuité, alors la phase de Zak est non nulle et vaut π , alors qu'elle est toujours nulle dans le cas contraire. Ainsi, la connaissance de ces dipôles topologiques est suffisante pour cartographier tous les chemins de topologie $\gamma(k_y) = \pi$ ou $\gamma(k_y) = 0$, révélant ainsi l'existence et l'emplacement en k_y d'états de bord pour trois types de rubans de graphène.

La représentation de la phase de Zak proposée ici par le moyen de courbes iso- ϕ est plus compacte que celle en termes de cercles de Ryu et Hatsugai [19] utilisée dans la première section (figures 6.2 et 6.3). Dans tous les cas, il est important de retenir que l'existence d'états de bord peut être associée à une propriété de topologie 1D (la phase de Zak) de la fonction d'onde 2D en volume.

6.2.2 Des états de bord dans les rubans armchair

Nous venons de montrer que la présence d'états de bord dans les rubans zigzag (et barbus) pour une valeur de k_y donnée, était reliée à la phase de Zak $\gamma(k_y) = \pi$. Forts de ce constat, nous nous souvenons par ailleurs qu'il est possible, en modifiant les paramètres de saut du modèle liaisons-fortes du graphène, de contrôler la distance entre les points de Dirac. Cet effet peut donner lieu à la fusion des points de Dirac discutée au chapitre 2. Il est donc possible de modifier les plages de k_y sur lesquelles les états de bord existent, en intervenant sur les paramètres de saut appropriés. Un cas particulièrement intéressant est celui du ruban armchair. En effet, un tel type de ruban ne possède pas d'états de bord (figure 3.3). En modifiant les paramètres de saut entre sites dont l'alignement n'est pas parallèle au bord, c'est-à-dire t_2 ou t_3 , on déforme les dipôles topologiques de la carte iso- ϕ de façon à créer des régions sur lesquelles la phase de Zak a changé : $\gamma(k_y) = 0 \longrightarrow \gamma(k_y) = \pi$. Il s'agit d'une transition topologique comme nous l'avions introduite plus haut dans le modèle de la chaîne de Peierls, et qui se traduit ici par l'apparition d'états de bord d'énergie nulle dans les rubans armchair. La figure 6.7 met en vis à vis les cartes iso- ϕ sans et avec une asymétrie des paramètres de saut. Les spectres d'énergie des rubans armchair correspondants sont montrés à côté. Lorsque l'asymétrie est introduite, l'emplacement de la discontinuité entre $\phi = 0$ et $\phi = 2\pi$ est modifiée, de sorte que la phase de Zak $\gamma(k_y)$ ne soit plus nulle partout, ce qui entraîne l'apparition d'états de bord visibles dans le spectre d'énergie. Notons

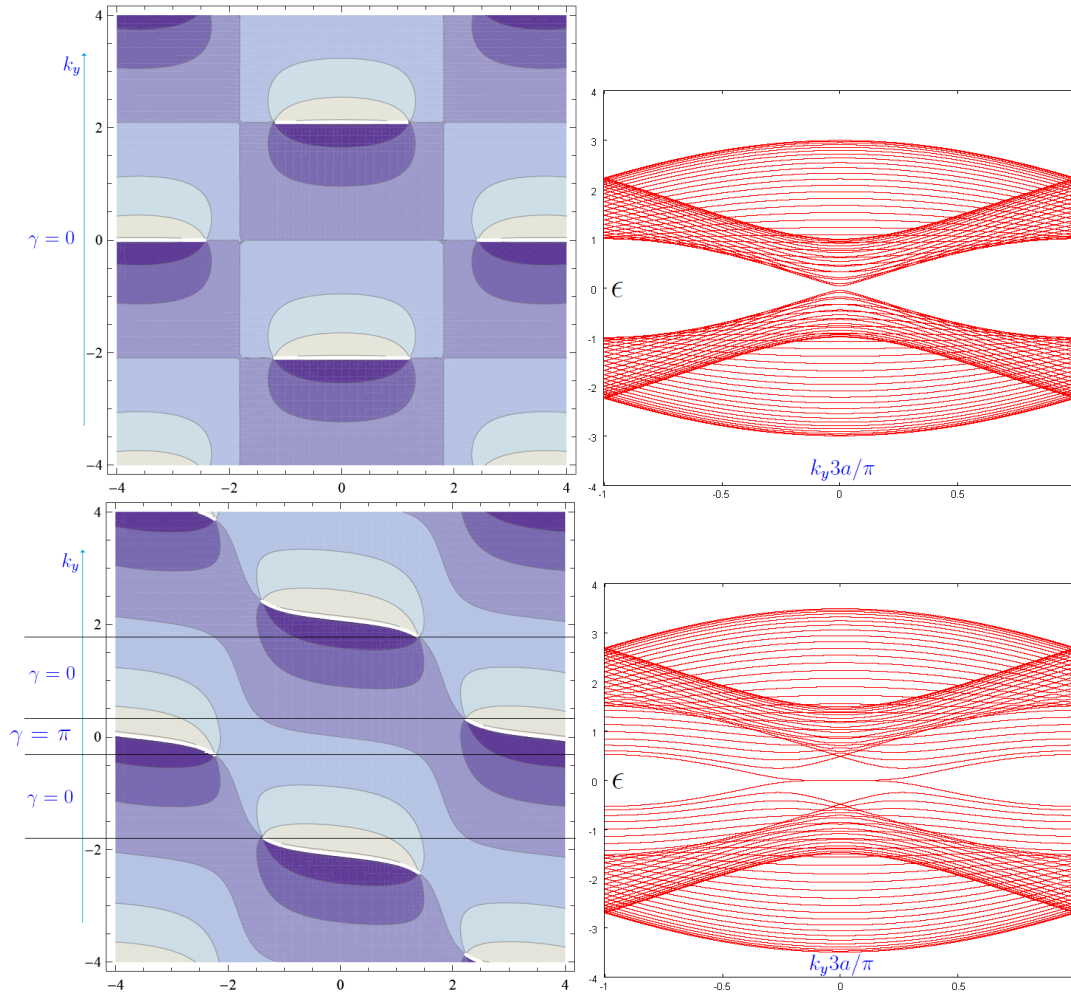


FIGURE 6.7: Courbes iso- ϕ du réseau nid d'abeilles avec $t_2 = 1,5t$ et $t_3 = t$. Spectres de rubans armchair pour $M = 40$. Bas, $t_2 = 1,5$, des niveaux d'énergie nulle que l'on attribue aux états de bord, apparaissent sur une plage Δk_y . Sur la même plage en bas à gauche, $\gamma = \pi$. L'effet est inchangé par la substitution $t_2 \leftrightarrow t_3$.

qu'il suffit de créer une asymétrie $t_2 \neq t_1$ (ou $t_3 \neq t_1$) pour obtenir la transition topologique. Plus cette asymétrie est grande, plus la région Δk_y sur laquelle les deux états localisés existent est étendue.

Signalons enfin que la nature topologique de la transition décrite dans ce chapitre est tout à fait différente de celle discutée pour la fusion des cônes de Dirac au chapitre 2. La première est caractérisée par la phase de Zak qui exploite, dans un système bidimensionnel, la topologie remarquable de la zone de Brillouin 1D qui est un anneau. La seconde est caractérisée par la phase de Berry accumulée sur un contour dans l'espace des impulsions à deux dimensions.

6.3 États de bord dispersifs dans des chaînes couplées de dimères

Dans les sections précédentes, nous avons construit un modèle simple de transition topologique à une dimension entre un isolant de bande caractérisé par $\gamma = 0$ et une phase topologique $\gamma = \pi$ dans laquelle le système possède des états de bord non dispersifs d'énergie nulle. Nous avons ensuite montré que l'apparition de ces états de bord dans les rubans de graphène peut être comprise en terme de phases de Zak $\gamma(k_y)$ pour chaque valeur de k_y . Nous étendons ici à deux dimensions, le modèle 1D de la chaîne de dimères couplés, dans l'optique de construire un système comportant des états de bord le long de la direction supplémentaire y . Nous cherchons donc, en s'inspirant du graphène, à exploiter des propriétés topologiques 1D sur un système 2D. Pour ce faire, nous considérons maintenant un ruban formé de chaînes de Peierls couplées dans la direction y par un terme de saut t'' , comme représenté sur la figure 6.8. Le système comportant deux atomes A et B par maille,

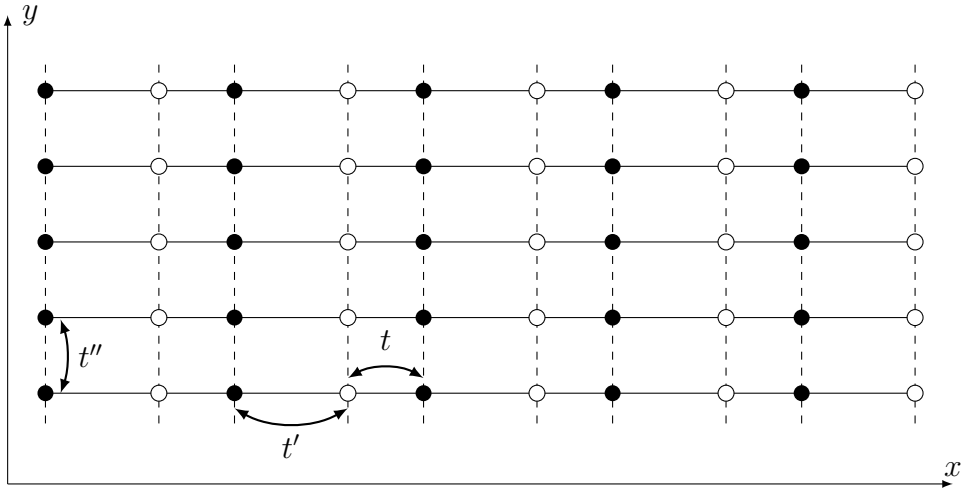


FIGURE 6.8: Schéma de chaînes de Peierls de longueurs finies suivant x , couplées par un terme de saut t'' dans la direction y . Les sites A sont représentés en noir, les sites B en blanc. Le pas du réseau est a_x dans la direction x et a_y dans la direction y .

l'équation de Schrödinger pour la maille (m, n) s'écrit en liaisons-fortes :

$$\begin{aligned} \epsilon \Phi_{m,n}^A &= - (t \Phi_{m-1,n}^B + t' \Phi_{m,n}^B + t'' (\Phi_{m,n+1}^A + \Phi_{m,n-1}^A)) \\ \epsilon \Phi_{m,n}^B &= - (t \Phi_{m+1,n}^A + t' \Phi_{m,n}^A + t'' (\Phi_{m,n+1}^B + \Phi_{m,n-1}^B)) \end{aligned} \quad (6.26)$$

où on a gardé le même choix de maille que pour la chaîne isolée.

Structure de bandes en volume

Nous cherchons tout d'abord à calculer la structure de bande en volume. En cherchant des solutions sous la forme d'ondes de Bloch $\Phi_{m,n}^{A/B} = e^{i(k_x a_x m + k_y a_y n)} \Psi_{k_x, k_y}^{A/B}$, l'Hamiltonien de volume des chaînes de Peierls couplées s'écrit sous la forme paramétrée :

$$\mathcal{H}^v(\vec{k}) = \underbrace{-2t'' \cos(k_y a_y) \mathbb{1}}_{\mathcal{H}(k_y)} - \underbrace{\begin{pmatrix} t' + t \cos k_x a_x \\ t \sin k_x a_x \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix}}_{\mathcal{H}_{dim}^v(k_x)} \quad (6.27)$$

où cette fois $\alpha_0 = -2t'' \cos(k_y a_y)$ et $\alpha_z = 0$. On reconnaît la contribution $\mathcal{H}_{dim}^v(k_x)$ de la chaîne de Peierls isolée qui contient toute l'information sur la phase de Zak, et donc les propriétés topologiques des fonctions d'onde en volume ; en particulier $\gamma = \pi$ si $t' > t$ et $\gamma = 0$ sinon. La contribution $\mathcal{H}(k_y)$ confère de la dispersion en k_y aux états, et en particulier aux états de bord. Contrairement au graphène, il apparaît donc clairement que l'existence d'états de bord ne dépend pas de k_y ici. En couplant entre elles les chaînes de longueurs finies, on peut maintenant faire apparaître des états de bord dispersifs le long de rubans. Toutefois, pour que le système ait des états de bord, il est nécessaire qu'un gap s'ouvre dans la relation de dispersion en volume. L'énergie des deux bandes est donnée par (6.14), et l'on a :

$$\epsilon^\pm(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left(4t'' \cos k_y a_y \pm \sqrt{t'^2 + 2tt' \cos k_x a_x + t^2} \right). \quad (6.28)$$

Pour qu'un gap s'ouvre, il est donc nécessaire que l'énergie des bandes vérifie $\epsilon_{min}^+ - \epsilon_{max}^- > 0$, où l'énergie minimale de la bande de conduction ϵ_{min}^+ vaut $\epsilon(\pm\pi/a_x, 0) = |t - t'|/2 - 2t''$ et l'énergie maximale de la bande de valence ϵ_{max}^- vaut $\epsilon(\pm\pi/a_x, \pm\pi/a_y) = 2t'' - |t - t'|/2$. Il en résulte la condition :

$$\text{ouverture du gap en volume : } \quad \frac{|t - t'|}{4t''} > 1. \quad (6.29)$$

La figure 6.9 illustre un cas où cette condition est satisfaite. Une fois un gap ouvert en volume, il est ensuite possible, en vérifiant $t/t' > 1$, d'induire une transition topologique où des états de bord apparaissent aux bouts des chaînes. On vérifie maintenant que des niveaux d'énergie apparaissent dans le gap en calculant numériquement la relation de dispersion de rubans.

Structure de bandes du ruban

Nous calculons maintenant le spectre d'énergie de rubans constitués d'un nombre infini de chaînes de dimères couplés. Le ruban a une largeur finie dans la direction x et est périodique dans la direction y , de sorte que les fonctions de Bloch s'écrivent $\Phi_{m,n}^{A/B} = e^{ik_y a_y n} \Psi_{k_y}^{A/B}$. Contrairement à l'Hamiltonien (6.7) de la chaîne isolée, l'Hamiltonien de bord a ici des termes diagonaux à cause du couplage entre

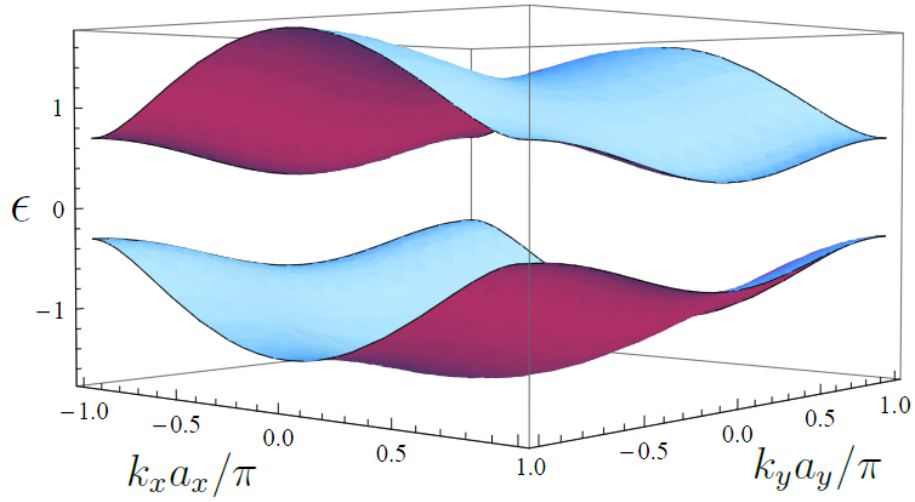


FIGURE 6.9: Relation de dispersion en volume du système de chaînes de Peierls couplées avec $t = 1$, $t' = 0,5$ et $t'' = 0,1$. Pour ces valeurs de paramètres, un gap s'ouvre en volume.

chaînes, et s'écrit, dans la base $(\Phi_1^A \dots \Phi_m^A \dots \Phi_M^A \Phi_1^B \dots \Phi_m^B \dots \Phi_M^B)$:

$$\mathcal{H}^b = - \left(\begin{array}{ccc|ccc} \ddots & & & t' & \dots & \\ & & & t & t' & \\ & & & & \ddots & \\ & & 2t'' \cos k_y a_y & & & t & t' \\ & & & & \ddots & & \ddots \\ \hline & & & & & & t & t' \\ t' & t & & & & & & \\ \vdots & \ddots & & & & & & \\ & & t' & t & & & & \\ & & & & \ddots & & & \\ & & & & & t' & t & \\ & & & \dots & & t' & & \\ & & & & & & & \ddots \end{array} \right) \quad (6.30)$$

On montre sur la figure 6.10 deux spectres typiques obtenus pour différentes valeurs de t' , les paramètres t et t'' restant fixés. On a pris soin de rester dans le domaine où un gap s'ouvre en volume (condition (6.29)) Pour le premier spectre, $t' < t$, il apparaît bien un niveau doublement dégénéré, qui correspond à l'énergie des deux états de bord. Le système est donc dans la phase topologique $\gamma = \pi$. A la différence du graphène, ces niveaux ne sont plus à énergie nulle constante, mais présentent de la dispersion. D'autre part, l'absence de points de Dirac, qui fermeraient nécessairement le gap, permet à ces états d'exister sur toute la zone de Brillouin. Le deuxième spectre a été calculé pour $t' > t$, les états de bord ont disparu, le système a transité dans la phase isolante non topologique $\gamma = 0$.

Avant de conclure ce chapitre, insistons sur le fait que la valeur de la phase de Zak caractérise la présence d'états de bord, mais ne dit rien sur leur dispersion. Le fait que dans les rubans zigzag, les états de bord sont non dispersifs et d'énergie nulle, est due à la présence d'une certaine symétrie de l'Hamiltonien du graphène

[19]. Une façon plus qualitative et très simple de comprendre cette absence de dispersion est que dans le modèle liaisons-fortes considéré, seuls les premiers voisins sont couplés par un terme de saut. Les bords zigzag n'étant constitués que d'un type de site, ceux-ci ne sont pas couplés, et l'état de bord ne peut pas se propager. En revanche, dans les rubans que nous considérons maintenant, les sites aux bords sont couplés par un terme de saut t'' , ce qui entraîne la dispersion des états de bord. Un effet semblable existe dans les rubans zigzag si l'on considère des couplages aux seconds voisins [68].

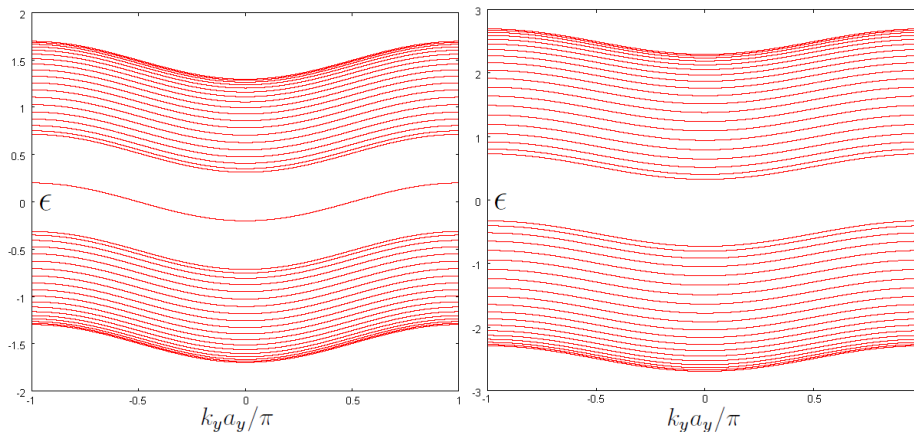


FIGURE 6.10: Niveaux d'énergie d'un ruban constitué de chaînes de 20 dimères couplées entre elles dans la direction y par un terme de saut $t'' = 0, 1$. On a pris $t = 1$, et (gauche) $t' = 0, 5$, (droite) $t' = 1, 5$. Dans le premier cas, le système est caractérisé par une phase de Zak $\gamma = \pm\pi$, des états de bord apparaissent dans le gap. Dans le second cas, la phase de Zak est nulle, et le système ne possède pas d'états de bord.

6.4 Conclusions du chapitre et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons montré que le modèle d'une chaîne de dimères couplés (chaîne de Peierls), décrit une transition entre une phase isolante de bande et une phase présentant des états localisés en bout de chaîne. Chacun de ces deux états est caractérisé par une valeur différente de la phase de Zak γ des fonctions de Bloch : celle-ci vaut π lorsque des états de bord existent et 0 dans le cas contraire. Cette transition topologique est pilotée par le rapport des deux paramètres de saut intervenant dans le modèle. Nous avons ensuite mis en évidence que le choix d'un type de bord implique un choix de maille particulier. Or, un choix de maille implique à son tour un Hamiltonien de volume spécifique qui fixe la phase de Zak des fonctions de Bloch. Nous avons ainsi pu associer l'existence d'états de bord dans les rubans zigzag de graphène à la valeur non nulle que prend la phase de Zak en volume, ré-interprétant ainsi en ces termes les résultats de Ryu et Hatsugai [19]. En particulier, nous avons montré que la phase de Zak s'obtenait dans le graphène par la seule connaissance de l'emplacement dans l'espace réciproque des coupures de l'angle ϕ (dipôles topologiques) qui paramétrise l'Hamiltonien et les fonctions de Bloch. Les bords armchair apparaissent ainsi comme les seuls ne supportant pas d'états de bord. Pour tous les autres types de bords à motifs périodiques, la phase de Zak est non nulle, et des états de bord sont attendus. Ce résultat est en accord avec des calculs numériques de spectres d'énergies réalisés par Beenakker

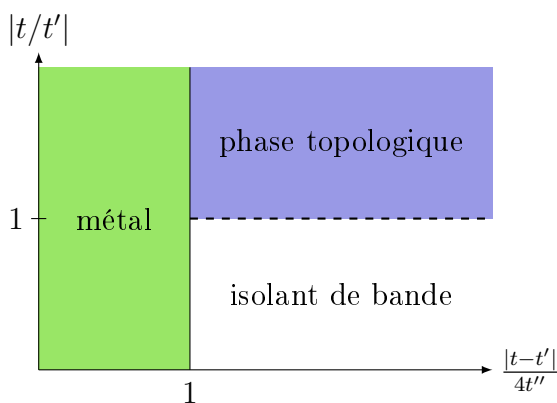


FIGURE 6.11: Diagramme de phase des chaînes de Peierls couplées. Le trait continu vertical marque l'ouverture d'un gap en volume lorsque $|t - t'|/4t'' > 1$, alors que le trait pointillé horizontal sépare la phase isolante de bande usuelle ($\gamma = 0$) de la phase topologique ($\gamma = \pm\pi$) où des états de bord dispersifs existent.

et Akhmerov [69]. Cette analyse nous a ensuite permis de comprendre comment modifier les paramètres du modèle liaisons-fortes pour faire émerger des états de bord dans les rubans armchair, bien connus dans la littérature pour ne justement pas en avoir naturellement. A la manière du graphène qui exploite une propriété topologique 1D pour posséder des états de bords, nous avons ensuite enrichi le modèle de la chaîne de Peierls en couplant entre elles les chaînes. Le système ainsi décrit présente différentes phases rappelées sur la figure 6.11, dont une phase topologique caractérisée par $\gamma = \pi$. Dans cette phase, le système possède deux états de bord dispersifs, à la manière d'un isolant topologique.

La robustesse à certaines perturbations (comme au désordre par exemple) des états de bord étudiés ici se comprend par leur nature topologique. En effet, une petite perturbation dans l'Hamiltonien ne suffirait pas à changer la valeur de la phase de Zak, ou en tout cas à fermer le gap et induire une transition topologique où les états de bord se couplent aux états de volume. Toutefois, il semble peu probable qu'en présence de désordre, ces états puissent se propager le long des bords, comme cela se produit dans les isolants topologiques usuels [86, 87]. En effet, dans les chaînes de Peierls couplées, chacun des états de bord se propage dans les deux directions, la présence d'impuretés engendre alors une localisation d'Anderson, empêchant ainsi du transport unidimensionnel le long d'un bord.

Les pistes pour poursuivre cette étude sont nombreuses. Il reste par exemple à comprendre plus précisément en quoi l'accumulation par la fonction d'onde en volume d'une phase de Zak non nulle, implique l'existence d'états de bord. Une démonstration rigoureuse de l'équivalence entre l'existence d'états de bord et $\gamma = \pi$ devrait pouvoir être menée, en s'inspirant par exemple d'études similaires menées dans les isolants topologiques 2D [89, 90, 91] ou l'effet Hall quantique entier [84]. Il serait aussi intéressant de comprendre ce qu'il faut changer au modèle pour empêcher la localisation d'Anderson des états de bord. On peut aussi se demander comment se généralise tous ces résultats à des chaînes de polymères plutôt que de dimères. Une étude numérique préliminaire des spectres d'énergie semble indiquer qu'une chaîne de trimères exhibe deux phases topologiques différentes, correspondant chacune à l'existence de deux ou quatre états de bord (figure 6.12). Dans le premier cas, les deux états de bord apparaissent dans deux gaps différents. Il

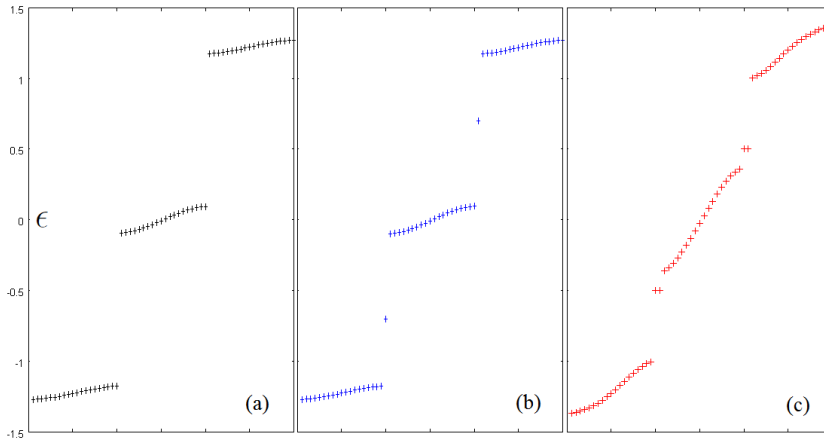


FIGURE 6.12: Spectres liaisons-fortes d'énergie en unité de t d'une chaîne de 20 trimères. Trois phases distinctes apparaissent avec pour chacune, l'ouverture de deux gaps et (a) aucun état de bord, (b) un état de bord dans chaque gap et (c) deux états de bord dans chaque gap.

serait donc intéressant de généraliser le calcul de la phase de Zak à une chaîne de N atomes par maille, reliés entre eux par autant de paramètres de saut différents. On peut alors s'attendre à l'existence de N phases topologiques différentes pour lesquels le système posséderait jusqu'à $2N$ états de bord, éventuellement séparés en énergie. À plus long terme, il faudrait poursuivre ces études en prenant en compte le désordre, de volume comme de bord, ce qui nécessiterait d'étendre la définition de la phase de Zak en l'absence de zone de Brillouin, comme cela a été fait ailleurs pour d'autres nombres topologiques [92, 91].

Pour terminer, il est important de remarquer que la phase de Zak semble être la quantité pertinente pour prédire l'existence d'états de bord dans des systèmes où cette existence même dépend justement de la forme des bords en question. Ce qui a été montré ici, en particulier pour le graphène, peut également être appliqué pour des rubans de RCDQF. En effet, seuls des rubans à bords droits ont été discutés dans les chapitres précédents de cette thèse. Dans de tels rubans, il n'existe pas d'états de bord (en l'absence d'un flux additionnel). Toutefois, pour des bords plus sophistiqués, de tels états d'énergie nulle peuvent apparaître entre les cônes de Dirac. Ce dernier point est illustré sur la figure 6.13

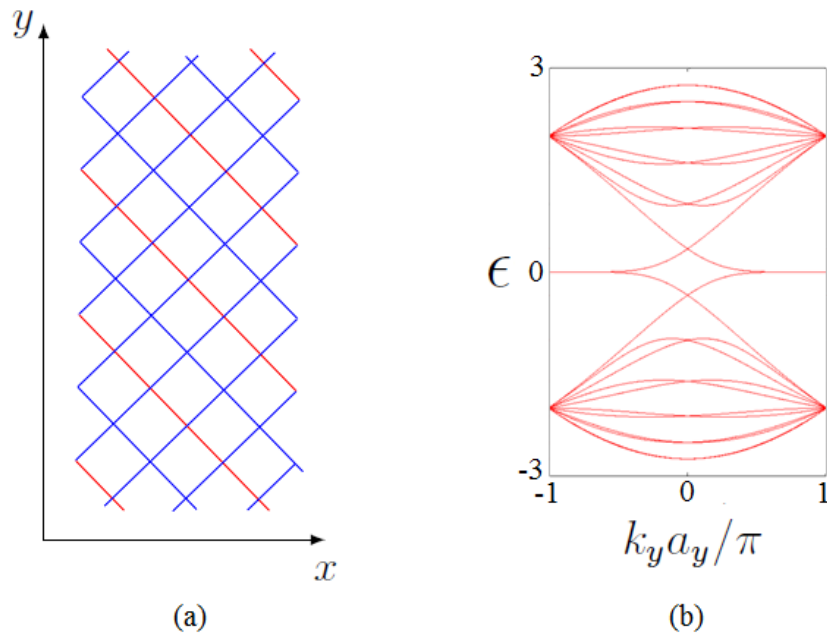


FIGURE 6.13: (a) Schéma d'un ruban du RCDQF à bords "zigzag". (b) Spectre d'énergie issu d'un calcul liaisons-fortes correspondant au type de ruban dessiné en (a). On voit apparaître une bande d'énergie nulle correspondant aux états de bord, qui, dans la limite de grande largeur occupe toute la zone de Brillouin.

Deuxième partie

DÉCOHERENCE ET
INTERACTIONS
ÉLECTRONIQUES SUR UN
CYLINDRE DIFFUSIF

Cette seconde partie est complètement indépendante de la première. Elle porte sur l'étude de propriétés de transport cohérent dans les métaux faiblement désordonnés en présence d'interactions électron-électron.

Chapitre 7

Décohérence et interactions électroniques sur un cylindre diffusif

Il faut traiter la nature par le cylindre, la sphère et le cône.

Paul Cézanne

Sommaire

| | | |
|------------|--|------------|
| 7.1 | Motivations et contexte | 136 |
| 7.2 | Transport quantique dans les métaux faiblement désordonnés : la localisation faible | 137 |
| 7.2.1 | Présentation générale | 137 |
| 7.2.2 | Effet de la géométrie et diffusion | 139 |
| | Le fil quasi-unidimensionnel | 139 |
| | Oscillations quantiques de la magnétoconductance | 140 |
| 7.2.3 | Longueur de cohérence de phase | 141 |
| 7.3 | Les interactions électron-électron comme source de décohérence : le modèle d'Altshuler, Aronov et Khmelnitsky | 142 |
| 7.3.1 | Le champ électrique fluctuant | 142 |
| 7.3.2 | La dépendance en géométrie de la décohérence | 143 |
| 7.4 | Application au cylindre creux diffusif | 146 |
| 7.4.1 | La fonction \mathcal{W}_{cyl} | 146 |
| 7.4.2 | Les harmoniques de la correction de localisation faible sur le cylindre | 147 |
| | Expression des harmoniques $n \neq 0$ et longueurs caractéristiques du problème | 147 |
| | Régime de basse température : $L \ll L_N \ll L_{2D}^{\text{cyl}}$ | 148 |
| | Régime de haute température : $L_{2D}^{\text{cyl}} \ll L_N \ll L$ | 149 |
| 7.5 | Discussion et conclusion | 150 |

7.1 Motivations et contexte

Dans les métaux normaux, à basse température, la nature quantique des électrons se révèle en donnant lieu à des phénomènes d'interférences. Ces derniers se manifestent lorsque l'électron peut emprunter plusieurs chemins, par exemple comme dans un anneau, où la situation ressemble beaucoup à l'expérience d'optique historique des fentes d'Young. De tels effets mettent en jeu la *cohérence de phase* des électrons. En pratique, cette cohérence est limitée sur une échelle caractéristique L_ϕ , appelée *longueur de cohérence de phase*, au delà de laquelle les effets d'interférence se brouillent [22, 23]. On parle alors de *décohérence* ou de *déphasage*. La compréhension des mécanismes de décohérence constitue la motivation centrale de cette étude.

Nous nous intéressons ici plus particulièrement au régime pour lequel la cohérence de phase est préservée sur des échelles où le mouvement des électrons est de nature diffusive [22, 23]. Ce *régime diffusif* est donc atteint quand la longueur de cohérence de phase est grande devant le libre parcours moyen élastique des électrons, soit $L_\phi \gg \ell_e$. Les différents chemins que peut emprunter l'électron sont alors définis par une séquence de collisions élastiques avec les impuretés du milieu. Cette vision quasi-classique du transport n'est valable que dans la limite de *faible désordre*, pour laquelle la longueur d'onde de de Broglie des électrons au niveau de Fermi λ_F est très inférieure au libre parcours moyen élastique des électrons, soit $\lambda_F \ll \ell_e$. Le régime auquel on s'intéresse est donc caractérisé par :

$$\text{régime diffusif de faible désordre : } \quad \lambda_F \ll \ell_e \ll L_\phi . \quad (7.1)$$

Quand λ_F devient comparable à ℓ_e , les interférences électroniques conduisent à une localisation par le désordre, appelée *localisation d'Anderson* : le système devient alors isolant.¹ Nous ne nous intéressons ici qu'à la limite de faible désordre, dans laquelle la nature quantique des électrons ne se manifeste que par une petite correction à la conductivité classique, appelée *correction de localisation faible*. La correction de localisation faible a donc un intérêt pratique : elle permet d'étudier les mécanismes de décohérence en sondant L_ϕ .

De façon générale, la décohérence provient de l'interaction entre le système quantique et son environnement. Les mécanismes cohérents à l'origine de la localisation faible provenant de l'appariement de certaines trajectoires électroniques, il s'agit donc de considérer l'environnement auquel l'électron ayant ces trajectoires est couplé. Pour que cet environnement induise du déphasage, il faut qu'il possède un grand nombre de degrés de libertés. Ainsi, il se compose principalement des impuretés magnétiques du milieu, des phonons et des autres électrons eux-même. Nous ne nous intéressons ici qu'à l'effet des autres électrons, c'est-à-dire que nous considérons les interactions électron-électron comme la principale source de décohérence. En 1982, Altshuler, Aronov et Khmelnitsky développèrent un modèle où le déphasage, induit sur l'électron par ses voisins, résulte des fluctuations du potentiel électrique créé par ces derniers [27]. Ce modèle prédit entre autre une dépendance en température en $T^{-1/3}$ de la longueur de cohérence de phase dans des fils. Plus récemment, il a été mis en évidence que la géométrie du système jouait un rôle sur ce mécanisme de décohérence, les fluctuations de potentiel dépendant

1. Cette transition dépend de la dimension du système. Les électrons sont localisés à une dimension mais pas à deux dimensions. La transition peut être vue à trois dimensions.

elles-même de la géométrie. Il a ainsi été prédit un comportement de la longueur de cohérence de phase en $T^{-1/2}$ dans un anneau à très basse température soumis à un flux Aharonov-Bohm, lorsque des trajectoires cohérentes explorent le système dans son ensemble, en faisant des boucles dans l'anneau [24, 25].

La correction de localisation faible est une quantité moyennée sur les configurations de désordre. Pour un petit système, dont la taille est comparable à L_ϕ , la cohérence de phase se manifeste à travers des fluctuations universelles de conductance et aussi des oscillations Aharonov-Bohm dans le cas d'un anneau soumis à un flux Aharonov-Bohm. La correction de localisation faible quant à elle est la manifestation de processus cohérents qui résistent à une moyenne sur les configurations de désordre [93]. Elle contribue donc à la conductivité *moyenne* du système. Une telle moyenne est réalisée lorsque l'on considère un système beaucoup plus grand que la longueur de cohérence de phase ; on parle de système *auto-moyennant*. Ainsi, explorer la dépendance en géométrie de la décohérence par le biais de la correction de localisation faible, implique un choix de systèmes auto-moyennants dont la géométrie, à la manière de l'anneau, autorise des trajectoires de différentes natures ; c'est-à-dire faisant ou non des boucles.² Autrement dit, il s'agit donc de considérer des ensembles d'anneaux. Une expérience récente réalisée au Laboratoire de Physique des Solides d'Orsay a ainsi porté sur un réseau carré bidimensionnel constitué de fils [26]. Des mesures de localisation faible ont révélé des comportements originaux de la longueur de cohérence de phase à basse température, différents de ceux connus dans les fils, révélant ainsi la dépendance en géométrie de l'effet des interactions électron-électron dans le processus de décohérence. Toutefois, la description théorique de ce système demeure très complexe, car elle nécessite une compréhension fine des propriétés d'enroulement des chemins de diffusion des électrons dans ce réseau. D'autres possibilités consistent à considérer une chaîne d'anneaux [93, 28] ou encore un cylindre [94, 95, 28].

L'étude présentée dans ce chapitre porte sur le rôle de la géométrie sur les interactions électron-électron dans le processus de décohérence lié à la correction de localisation faible, à travers l'exemple d'un cylindre creux faiblement désordonné. Ce système, auto-moyennant, présente, à la manière de l'anneau, des trajectoires pouvant en faire le tour et qui sondent donc différemment les interactions électroniques que dans un fil. L'étude révèle ainsi l'existence de plusieurs longueurs caractéristiques, avec différentes dépendances en température. Ces différentes longueurs reflètent la sensibilité du processus de décohérence par les interactions électroniques à différents aspects de la géométrie du cylindre. Ces longueurs peuvent être sondées par la mesure des harmoniques de la correction de localisation faible.

7.2 Transport quantique dans les métaux faiblement désordonnés : la localisation faible

7.2.1 Présentation générale

Un modèle simple décrivant la conduction électronique dans un métal est celui développé par Drude au début du XX^e siècle. Dans ce modèle, les électrons sont des corpuscules classiques qui sont accélérés par un champ électrique extérieur \vec{E}

2. À proprement parler, il s'agit donc plus ici de topologie du système que de géométrie, la forme de l'anneau important peu.

dans un milieu contenant des impuretés. En supposant que le courant d'électrons \vec{j} est proportionnel au champ électrique appliqué :

$$\vec{j}(\vec{r}) = \sigma_0 \vec{E}(\vec{r}) \quad (7.2)$$

le modèle de Drude conduit (à basse température) à une conductivité résiduelle σ_0 de la forme :

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau_e}{m} \quad (7.3)$$

où n est la densité d'électrons dans le matériau, m est la masse de l'électron et $\tau_e = \ell_e/v_F$ est le temps moyen entre deux collisions élastiques. La nature quantique des électrons entraîne des effets d'interférence responsables de petites corrections à la conductivité de Drude. Une approche quantique du transport dans les milieux désordonnés fait intervenir la probabilité de diffusion quantique $P(\vec{r}, \vec{r}')$ qui décrit l'évolution de l'électron entre les deux points r et r' . Celle-ci s'écrit comme la valeur moyenne sur tous les chemins de diffusion, notés \mathcal{C} , des produits d'amplitudes complexes $a_i(\vec{r}, \vec{r}')$ décrivant la propagation du paquet d'ondes $\sum_i a_i(\vec{r}, \vec{r}')$ sur un chemin donné (figure 7.1). La probabilité quantique de diffusion a donc la forme [23] :

$$\begin{aligned} P(\vec{r}, \vec{r}') &\propto \left\langle \sum_{i,j} a_i^*(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}, \vec{r}') \right\rangle_{\mathcal{C}} \\ &= \underbrace{\left\langle \sum_j |a_j(\vec{r}, \vec{r}')|^2 \right\rangle_{\mathcal{C}}}_{\text{classique}} + \underbrace{\left\langle \sum_{i \neq j} a_i^*(\vec{r}, \vec{r}') a_j(\vec{r}, \vec{r}') \right\rangle_{\mathcal{C}}}_{\text{interférences}}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Le premier terme est le terme classique ; il consiste en une somme des intensités sur tous les chemins. Sa contribution redonne la conductivité de Drude. Le second terme quant à lui fait intervenir des paires de trajectoires qui accumulent un déphasage. De façon remarquable, la valeur moyenne sur toutes les configurations de désordre (c'est-à-dire sur tous les chemins de diffusion), ne brouille pas complètement les interférences, et le second terme de (7.4) n'est donc pas rigoureusement nul. Il subsiste en effet des contributions dues aux appariements de trajectoires distinctes $i \neq j$ suffisamment proches l'une de l'autre pour que leur déphasage reste petit. Ceci est dû à l'existence de croisements quantiques entre trajectoires appariées [23], qui entraîne l'apparition de boucles parcourues dans les deux sens (figure 7.1 (c)). Toutefois, pour que le déphasage entre ces deux trajectoires soit le plus petit possible, il est indispensable que la boucle soit fermée, comme représenté sur la figure 7.1 (d). Ces contributions en forme de boucle, appelées *cooperons*, augmentent par un processus cohérent la rétrodiffusion de l'électron. On parle alors de *rétrodiffusion cohérente*. Ce sont ces processus qui sont à l'origine des corrections quantiques au transport de Drude.

La correction de localisation faible compte la contribution des cooperons à la probabilité quantique de retour à l'origine. On comprend alors que celle-ci abaisse la valeur de la conductivité, et s'écrit [23] :

$$\Delta\sigma \propto - \int_0^\infty dt P_c(t) e^{-t/\tau_\phi}. \quad (7.5)$$

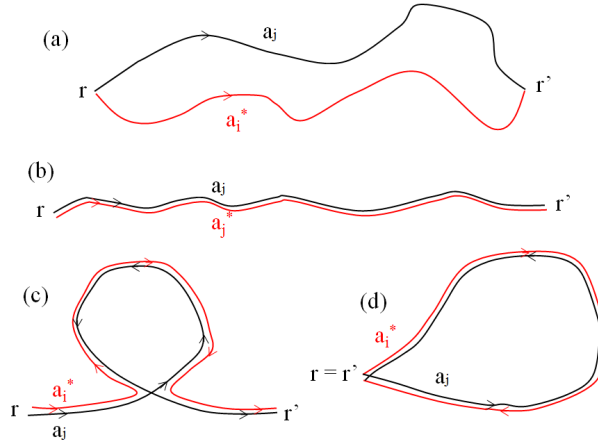


FIGURE 7.1: Illustration de chemins appariés contribuant à la probabilité de diffusion quantique $P(\vec{r}, \vec{r}')$. (a) Les deux trajectoires appariées sont quelconques, cette contribution ne survit pas à la moyenne sur les configurations de désordre. (b) Les deux trajectoires appariées sont identiques ; elles donnent une contribution classique au transport. (c) Les deux trajectoires se séparent par un croisement quantique donnant lieu à une boucle parcourue dans les deux sens. Cette boucle, représentée en (d) contribue de façon cohérente à l'augmentation de la rétrodiffusion.

Cette correction reposant sur des processus cohérents, une coupure e^{-t/τ_ϕ} a été introduite pour limiter ceux-ci sur une longueur $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$. Les deux sections suivantes sont consacrées à la discussion des deux termes de l'expression (7.5).

7.2.2 Effet de la géométrie et diffusion

Le terme $P_c(t)$ de la formule (7.5) est la contribution à la probabilité intégrée de retour à l'origine des processus de rétrodiffusion cohérente $P_c(t) = \int_\Omega d\vec{r} P_c(\vec{r}, \vec{r}, t)$; c'est ce terme que l'on appellera cooperon. Dans les régimes de diffusion et de faible désordre auxquels on se limite ici, $P_c(\vec{r}, \vec{r}, t)$ est simplement solution de l'équation de diffusion [23] :

$$(\partial_t - D\Delta) P_c(\vec{r}, \vec{r}', t) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t') \quad (7.6)$$

où $D = v_F \ell_e / d$ est le coefficient de diffusion, d étant la dimension du système. Or, cette quantité dépend non seulement de la dimension du système, mais aussi de sa géométrie, ou plutôt de sa topologie. En effet, la probabilité de retour à l'origine sur un chemin de diffusion diffère par exemple sur un fil et sur un anneau. Par conséquent, la correction de localisation faible dépend à son tour de la géométrie du système. Illustrons ces propos en rappelant les cas du fil, de l'anneau et du cylindre qui nous seront par ailleurs utiles pour la suite de l'étude.

Le fil quasi-unidimensionnel

Considérons d'abord le cas simple d'un fil quasi-unidimensionnel³ de section s et de longueur L . La contribution du cooperon à la probabilité de retour à l'origine

3. Nous nous intéressons à des fils tridimensionnels ($s \gg \lambda_F^2$) pour lesquels la diffusion est unidimensionnelle. Il en est de même dans la suite pour les films bidimensionnels d'épaisseur b . Notons que le cas purement unidimensionnel est à considérer à part : il n'existe pas de régime diffusif dans ce cas, mais il peut se produire de la localisation forte.

nécessite la résolution de l'équation (7.6), ce qui donne, en dimension d [23] :

$$P_c(\vec{r}, \vec{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} . \quad (7.7)$$

Dans le cas du fil quasi-unidimensionnel, la diffusion ne s'effectuant que dans la direction de la longueur, la probabilité intégrée de retour à l'origine vaut simplement :

$$P_c(t) = \frac{L}{\sqrt{4\pi Dt}} \quad (7.8)$$

ce qui donne la correction de localisation faible [22, 23] :

$$\Delta\sigma = -\frac{2e^2}{h} \frac{L_\phi}{s} . \quad (7.9)$$

où le facteur 2 provient de la dégénérescence de spin. Dans un fil, la correction de localisation faible dépend donc linéairement de la longueur de cohérence de phase.

Oscillations quantiques de la magnétoconductance

Une situation intéressante se présente lorsque l'on considère l'effet d'un flux Aharonov-Bohm Φ sur la correction de localisation faible, dans un système possédant un trou, comme un anneau. Le flux a un effet sur le cooperon et conduit à des oscillations de la correction de localisation faible de période $\Phi = \Phi_0/2$ [95, 23] :

$$\Delta\sigma = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \Delta\sigma_n \cos(4\pi n\Phi/\Phi_0) \quad (7.10)$$

Il est donc pertinent d'étudier les différentes harmoniques de localisation faible $\Delta\sigma_n$. Les trajectoires contribuant à l'harmonique n sont celles qui font n fois le tour du système. Les harmoniques de la conductivité s'écrivent :

$$\Delta\sigma_n = -\frac{2e^2 D}{\pi S} \int_0^{+\infty} dt P_n(t) e^{-t/\tau_\phi} \quad (7.11)$$

où $P_n(t)$ est la contribution du cooperon à la probabilité intégrée de retour à l'origine⁴ en ayant fait n tours en un temps t .

L'anneau quasi-unidimensionnel : On considère ici un anneau quasi-unidimensionnel de longueur L et de section s , traversé par un flux magnétique Φ . Le calcul des harmoniques de localisation faible (7.10) nécessite la connaissance de la probabilité $P_n(t)$. Dans le cas de l'anneau, celle-ci est donnée par :

$$P_n(t) = \frac{L}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(nL)^2/4Dt} \quad (7.12)$$

ce qui conduit aux harmoniques de conductivité :

$$\Delta\sigma_n = -\frac{2e^2}{hs} L_\phi e^{-nL/L_\phi} \quad (7.13)$$

4. L'indice "c" pour "cooperon" a été volontairement omis par souci de clarté.

et finalement, en insérant (7.13) dans (7.10), à la correction de localisation faible [23] :

$$\Delta\sigma = -\frac{2e^2}{h} \frac{L_\phi}{s} \frac{\sinh(L/L_\phi)}{\cosh(L/L_\phi) - \cos(4\pi\Phi/\Phi_0)}. \quad (7.14)$$

La correction de localisation faible dans un anneau est donc une fonction de période $\Phi = \Phi_0/2$. Ces oscillations tendent à disparaître pour des anneaux très grands $L/L_\phi \gg 1$ et l'on retrouve dans ce cas la même expression que pour le fil (7.9).

Le cylindre creux et les oscillations Altshuler-Aronov-Spivak (AAS) :

On considère maintenant un cylindre creux diffusif de hauteur H suffisamment longue pour que la diffusion soit libre le long de celle-ci. La démarche est alors identique à celle de l'anneau ; la différence avec l'anneau provenant de la dépendance temporelle de la probabilité $P_n(t)$. Les électrons dont les trajectoires contribuent aux harmoniques, diffusent sur un plan et non plus dans un fil. La probabilité de diffusion de retour à l'origine en ayant effectué n tours au bout d'un temps t s'écrit, au lieu de (7.12) :

$$P_n(t) = \frac{LH}{4\pi Dt} e^{-(nL)^2/4Dt}, \quad (7.15)$$

ce qui conduit aux harmoniques de localisation faible [95, 23] :

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_n &= -\frac{2e^2}{h\pi b} K_0\left(\frac{nL}{L_\phi}\right) \quad \text{pour } n \neq 0 \\ \Delta\sigma_0 &= -\frac{2e^2}{h\pi b} \ln\left(\frac{L_\phi}{\ell_e}\right) \end{aligned} \quad (7.16)$$

où $K_0(x)$ est une fonction de Bessel modifiée et où le libre parcours moyen élastique ℓ_e a été introduit pour empêcher l'intégrale (7.11) de diverger aux temps courts. Ces oscillations quantiques de magnétoconductance sur un cylindre ont été prédites par Altshuler, Aronov et Spivak en 1981 [95], et mesurées la même année par Sharvin et Sharvin [94, 96] dans des films cylindriques de magnésium de $1,5 \mu\text{m}$ de circonférence à 4,2 K.

7.2.3 Longueur de cohérence de phase

Le facteur e^{-t/τ_ϕ} qui intervient dans (7.5) a pour fonction de couper les contributions des chemins supérieurs à L_ϕ . Il a été introduit à la main. La question est alors de connaître cette longueur (ou ce temps) caractéristique, et de savoir si la relaxation temporelle du déphasage est effectivement une exponentielle. La localisation faible apparaît donc comme un outil pour sonder la cohérence d'un système, puisque sa mesure permet de remonter à L_ϕ . En particulier, les phénomènes quantiques se manifestant d'autant plus que la température T du système est basse, $L_\phi(T)$ tend donc naturellement vers 0 à mesure que la température augmente, avec en outre typiquement $L_\phi(T = 1\text{K}) \sim 1 \mu\text{m}$. Toutefois, la formule (7.5) de la correction de localisation faible ne dit rien sur l'expression de τ_ϕ et en particulier sur sa dépendance en température. Une telle connaissance requiert un modèle microscopique des processus de décohérence, qui de façon générale, consistent en un couplage entre les électrons du système avec leur environnement. Lorsque la décohérence est due à des impuretés magnétiques, (au couplage spin-orbite) ou

à des interactions electron-phonon, l'hypothèse d'une relaxation exponentielle de la phase dans la correction de localisation faible (7.5) s'avère convaincante [22]. À basse température ($T \lesssim 1K$), les interactions électron-électron deviennent la principale source de décohérence. Une analyse microscopique du mécanisme de décohérence sur un fil proposée par Altshuler, Aronov et Khmelnitskii [27], que nous présentons dans la section suivante, révèle une relaxation non-exponentielle de la phase et prédit une longueur de cohérence de phase en $L_\phi \propto T^{-1/3}$ dans les fils quasi-unidimensionnels.

7.3 Les interactions électron-électron comme source de décohérence : le modèle d'Altshuler, Aronov et Khmelnitsky

Dans cette section, on cherche à décrire comment les interactions coulombiennes induisent un déphasage entre les trajectoires conjuguées par renversement du temps. Pour cela, nous présentons le modèle développé par Altshuler, Aronov et Khmelnitsky (AAK) [27], et montrons qu'il implique une dépendance en géométrie de la décohérence. Ceci implique des relaxations non-exponentielles de la phase et des lois de puissance de $L_\phi(T)$ différentes selon les géométries considérées.

7.3.1 Le champ électrique fluctuant

La question des interactions coulombiennes est toujours un problème délicat. Lorsque celles-ci vont de pair avec les questions de désordre et de cohérence de phase, la difficulté de la tâche nous pousse à renoncer à la description directe et exacte du système. Une façon d'aborder le problème consiste à imaginer, un peu à la manière du champ moyen, un électron dans le champ électrique créé par les autres électrons. L'idée importante ici est que ce sont *les fluctuations du potentiel électrique* V qui induisent un déphasage entre les trajectoires appariées qui contribuent à la rétrodiffusion cohérente de l'électron, comme indiqué sur la figure 7.2. Au bout d'un temps t , l'électron plongé dans ce champ fluctuant accumule alors une phase égale à $e/\hbar \int_0^t d\tau V(r(\tau), \tau)$. L'étude de la cohérence de phase réclame la connaissance de la phase relative ϕ accumulée entre deux trajectoires diffusives appariées (figure 7.2 (c) et 7.2 (d)). Celle-ci vaut simplement :

$$\phi = \frac{e}{\hbar} \int_0^t d\tau (V(r(\tau), \tau) - V(r(\tau), t - \tau)) . \quad (7.17)$$

On peut alors montrer que ce déphasage affecte le Cooperon en modifiant la probabilité de retour à l'origine qui lui est associée comme suit :

$$P_c(\vec{r}, \vec{r}, t) \rightarrow P_c(\vec{r}, \vec{r}, t) \langle e^{i\phi} \rangle_{c,T} \quad (7.18)$$

où $\langle \dots \rangle_c$ dénote la valeur moyenne prise sur tous les chemins de diffusion qui reviennent à l'origine au bout d'un temps t et $\langle \dots \rangle_T$ désigne la valeur moyenne sur les fluctuations thermiques du potentiel électrique. Les modes du champ électrique étant quadratiques, leurs fluctuations sont gaussiennes, ce qui conduit à la simplification :

$$\langle e^{i\phi} \rangle_T = e^{-\frac{1}{2} \langle \phi^2 \rangle_T} . \quad (7.19)$$

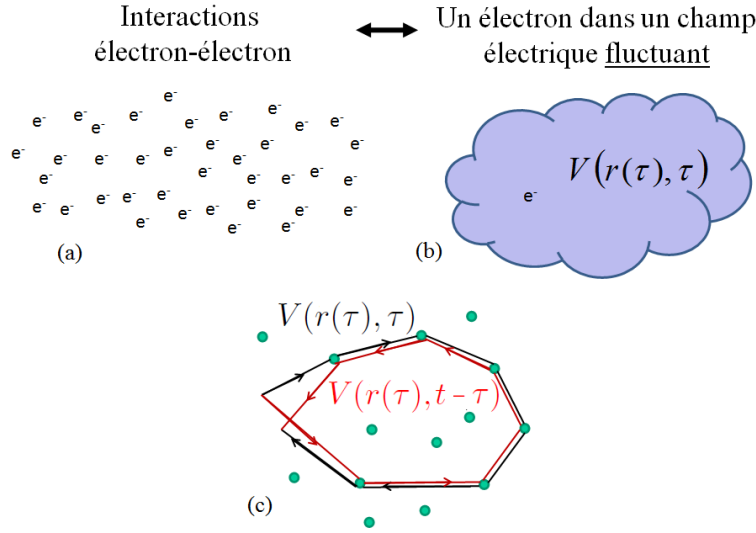


FIGURE 7.2: L'interaction coulombienne entre les électrons représentés en (a) est modélisée par un champ scalaire fluctuant $V(r(\tau), \tau)$ que voit un électron qui diffuse sur un chemin $r(\tau)$ au temps τ , comme schématisé en (b). L'électron accumule alors une phase proportionnelle à $\int_0^t d\tau V(r(\tau), \tau)$. Par conséquent, il apparaît un déphasage ϕ entre les deux trajectoires appariées qui contribuent au cooperon (c), avec $\phi = \frac{e}{\hbar} \int_0^t (V(r(\tau), \tau) - V(r(\tau), t - \tau))$.

La décohérence due aux interactions électron-électron est donc entièrement décrite par le terme de déphasage $\langle \exp -\frac{1}{2} \langle \phi^2 \rangle_T \rangle_C$.

7.3.2 La dépendance en géométrie de la décohérence

L'étape suivante consiste à récrire le terme de déphasage $\langle \phi^2 \rangle_T$. En utilisant (7.17), on fait apparaître des corrélateurs du potentiel $\langle V^2 \rangle_T$ dont la transformée de Fourier (en temps et en espace) est reliée à la constante diélectrique du gaz d'électrons $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ par le théorème fluctuation-dissipation [97] :

$$e^2 \langle V^2 \rangle_T(\vec{q}, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \right] \frac{2}{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)}. \quad (7.20)$$

Cette relation est très générale et se simplifie dans la situation qui nous concerne. D'abord, dans le régime diffusif qui nous intéresse, la constante diélectrique prend la forme [23] :

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) \underset{\text{diffusif}}{\approx} \frac{4\pi\sigma_0}{-i\omega + Dq^2}. \quad (7.21)$$

Ensuite, les processus de déphasage, entre l'électron au niveau de Fermi et son environnement (les autres électrons), sont limités par le principe de Pauli à des énergies inférieures à la température. Dans la limite $\hbar|\omega| \ll k_B T$, l'égalité (7.20) devient :

$$e^2 \langle V^2 \rangle_T(\vec{q}, \omega) = \frac{2e^2 T}{\sigma_0 q^2}. \quad (7.22)$$

Le terme $1/q^2$ peut être interprété comme la transformée de Fourier de la fonction de Green de l'équation de diffusion, que l'on notera P_d , c'est-à-dire :

$$-\Delta P_d(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (7.23)$$

de sorte que le corrélateur du potentiel s'écrit dans l'espace réel :

$$e^2 \langle V(\vec{r}, t) V(\vec{r}', t') \rangle_T = \frac{2e^2 T}{\sigma_0} P_d(\vec{r}, \vec{r}') \delta(t - t'). \quad (7.24)$$

L'expression (7.24) nous permet enfin de calculer le terme de déphasage $\langle \phi^2 \rangle_T$ dans l'espace réel. Celui-ci s'écrit, dans les cas quasi-1D du fil et quasi-2D du film :

$$\frac{1}{2} \langle \phi^2 \rangle_T = \begin{cases} \frac{2D}{L_N^3} \int_0^t d\tau \mathcal{W}(x(\tau), x(t - \tau)) & \text{fil de section } s \\ \frac{2e^2 k_B T R_{film}}{\hbar} \int_0^t d\tau \mathcal{W}(\vec{r}(\tau), \vec{r}(t - \tau)) & \text{film d'épaisseur } b \end{cases} \quad (7.25)$$

où la longueur de Nyquist :

$$L_N \equiv \left(\frac{\hbar^2 \sigma_0 D s}{e^2 k_B T} \right)^{1/3} \quad (7.26)$$

est la longueur intrinsèque caractérisant les fluctuations du potentiel électrique [27], $R_{film} = 1/\sigma_0 b$ est la résistance d'un carré d'épaisseur b , et où l'on a défini la fonction :

$$\mathcal{W}(\vec{r}, \vec{r}') \equiv \frac{P_d(\vec{r}, \vec{r}) + P_d(\vec{r}', \vec{r}') - P_d(\vec{r}, \vec{r}')}{2}. \quad (7.27)$$

Il apparaît donc clairement que *le mécanisme de décohérence dû aux interactions électron-électron dépend de la géométrie*. Cette dépendance est décrite par la fonction \mathcal{W} donnée par (7.27). La correction de localisation faible se réécrit finalement comme :

$$\Delta\sigma = -\frac{2e^2 D}{\pi \hbar} \int_0^\infty dt \underbrace{P_c(t)}_{\text{géométrie}} \underbrace{\left\langle \exp -\frac{1}{2} \langle \phi^2 \rangle_T \right\rangle_c}_{\text{interactions et géométrie}}. \quad (7.28)$$

Ainsi, la correction de localisation faible dépend doublement de la géométrie. La première origine de cette dépendance est due aux contributions du cooperon à la probabilité intégrée de retour à l'origine, comme nous l'avons déjà vu plus haut. La seconde est induite par les interactions électron-électron à l'origine de la décohérence. Autrement dit, l'expression (7.28) remplace désormais celle donnée en (7.5) lorsque la décohérence est due aux interactions électroniques, où le terme phénoménologique e^{-t/τ_ϕ} a été remplacé par $\langle \exp -\frac{1}{2} \langle \phi^2 \rangle_T \rangle_c$. La relaxation de la phase n'est donc plus a priori exponentielle et des comportements en température variés de $L_\phi(T)$ peuvent être prédits et observés selon la géométrie rencontrée.

La valeur moyenne sur tous les chemins de diffusion $\{r(\tau)\}$ dans (7.28) s'écrit :

$$\langle \dots \rangle_c = \frac{\int_{\vec{r}(0)=\vec{r}}^{\vec{r}(t)=\vec{r}} \mathcal{D}\vec{r}(\tau) \dots \exp \left(- \int_0^t d\tau \frac{\dot{r}^2}{4D} \right)}{\int_{\vec{r}(0)=\vec{r}}^{\vec{r}(t)=\vec{r}} \mathcal{D}\vec{r}(\tau) \exp \left(- \int_0^t d\tau \frac{\dot{r}^2}{4D} \right)}. \quad (7.29)$$

Le dénominateur de (7.29), décrit la probabilité de diffuser sur une boucle en un temps t . Il est exactement égal au terme $P_c(t)$ dû au cooperon dans l'expression (7.28), de sorte que le calcul de la correction de localisation faible se résume fina-

lement au calcul de l'intégrale de chemin suivante :⁵

$$\Delta\sigma = -\frac{2e^2D}{\pi\hbar} \int_0^\infty dt \int_{\vec{r}(0)=\vec{r}}^{\vec{r}(t)=\vec{r}} \mathcal{D}\vec{r}(\tau) \exp\left(-\int_0^t d\tau \frac{\dot{r}^2}{4D} + \frac{1}{2} \langle \phi^2 \rangle_T\right). \quad (7.30)$$

Celle-ci a été calculée exactement dans les cas du fil [98] et de l'anneau [25]. Pour le fil, le calcul de l'intégrale (7.30) donne la correction de localisation faible :

$$\text{fil de section } s : \quad \Delta\sigma = \frac{2e^2}{hs} L_N \frac{\text{Ai}(0)}{\text{Ai}'(0)} \quad (7.31)$$

où $\text{Ai}(0)/\text{Ai}'(0) \approx -1,37172$. Ce résultat, à comparer avec (7.9), montre que les processus cohérents qui donnent lieu à la localisation faible dans un fil, sondent la longueur de Nyquist. La longueur de cohérence de phase a donc un comportement en $T^{-1/3}$.

Cette loi de puissance peut être retrouvée de façon heuristique en considérant le terme de déphasage $\langle \phi^2 \rangle_{T,C}$. Dans le cas du fil infini, la diffusion est libre, de sorte que les électrons explorent en un temps t , une distance typique \sqrt{Dt} . Très schématiquement, on a alors $\langle \phi^2 \rangle_{T,C} \sim 1/L_N^3 \int_0^t d\tau \sqrt{\tau} \sim (t/\tau_N)^{3/2}$. On retrouve ainsi la longueur caractéristique $L_N \sim \sqrt{\tau_N} \sim T^{-1/3}$. Le cas de l'anneau est plus subtil, car certaines trajectoires, celles qui font des boucles, explorent entièrement le système en diffusant sur tout le périmètre L [24]. Le terme de déphasage varie dans ce cas comme $\langle \phi^2 \rangle_T \sim 1/L_N^3 \int_0^t d\tau L \sim t/\tau_c$. Les processus cohérents sondent donc cette fois une longueur $L_c \sim \sqrt{\tau_c} \sim L_n^{3/2}/L^{1/2} \sim T^{-1/2}$, qui présente un comportement en température différent de celui du fil. Pour les trajectoires qui ne font pas de boucle, et donc qui ne contribuent pas aux harmoniques, tout se passe comme si le système était un fil, et on retrouve une longueur caractéristique en $T^{-1/3}$. Une approche plus rigoureuse montre en effet que l'anneau sonde bien deux longueurs caractéristiques [25] ; l'une en $T^{-1/2}$ que sondent les harmoniques de magnétoconductance, l'autre en $T^{-1/3}$ donnée par l'harmonique nulle.

Toutefois, si un comportement en $T^{-1/3}$ de la longueur de cohérence de phase a bien été observé expérimentalement dans des fils, le cas de l'anneau est plus délicat, car contrairement au fil, l'anneau n'est pas auto-moyennant. Pour voir de tels comportements en température, signatures directes de la dépendance en géométrie de la décohérence par les interactions électroniques, il est donc nécessaire de considérer un ensemble d'anneaux, de façon à moyennner les configurations de désordre de chaque anneau, par exemple en les combinant en une chaîne ou en les empilant en un cylindre.

La suite du chapitre reprend les éléments principaux de l'étude de la décohérence sur un cylindre creux faiblement désordonné menée pendant cette thèse. Les harmoniques de la correction de localisation faible y sont calculées, révélant les différentes longueurs qui y caractérisent la décohérence [28].

5. Nous ne considérons ici que les fluctuations du potentiel électrique créé par les électrons. Les couplages à d'autres types d'environnement peuvent être pris en compte par l'ajout d'un terme $\exp -\gamma t$. Par ailleurs, en considérant un flux Aharonov-Bohm, nous avons ignoré la pénétration du champ magnétique dans le matériau. Celui-ci a pour effet de détruire les oscillations de magnétoconductance [94]. Cet effet peut également être pris en compte par l'ajout d'un terme $\exp -\gamma t$.

7.4 Application au cylindre creux diffusif

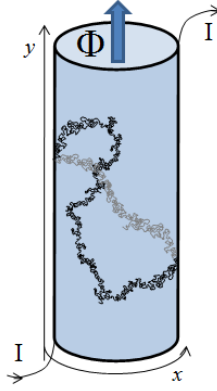


FIGURE 7.3: Cylindre creux de périmètre L , d'épaisseur b , traversé d'un flux Aharonov-Bohm Φ , sur lequel diffusent des électrons. Une trajectoire enroulant le cylindre une fois ($n = 1$) est schématisée.

On s'intéresse ici à la géométrie du cylindre creux d'épaisseur b , dans lequel diffusent des électrons (figure 7.3), comme déjà discuté pour les oscillations AAS dans la section 7.2.2. On étudie maintenant le mécanisme de décohérence due aux interactions électroniques sur ce cylindre, en calculant la correction de localisation faible. Nous cherchons donc à calculer les harmoniques de la correction de localisation faible (7.28), qui s'écrivent :

$$\Delta\sigma_n = -\frac{2e^2D}{\pi\hbar} \int_0^\infty dt \int_{\vec{r}(0)=\vec{r}}^{\vec{r}(t)=\vec{r}} \mathcal{D}\vec{r}(\tau) \delta_{n,\mathcal{N}[x(\tau)]} \exp \left\{ -\int_0^t d\tau \left(\frac{\dot{\vec{r}}^2}{4D} + \frac{2e^2k_BTR_{film}}{\hbar} \mathcal{W}_{cyl} \right) \right\} \quad (7.32)$$

où $\delta_{n,\mathcal{N}[x(\tau)]}$ sélectionne les trajectoires $\{\vec{r}(\tau)\}$ qui font n fois le tour du cylindre.

7.4.1 La fonction \mathcal{W}_{cyl}

Pour calculer la correction de localisation faible dans une géométrie donnée, il est nécessaire de connaître l'expression de la fonction \mathcal{W} qui caractérise la dépendance en géométrie des fluctuations de potentiel électrique. Celle-ci est définie en (7.27) où $P_d(\vec{r}, \vec{r}')$ est la solution de l'équation de diffusion sur un cylindre, c'est-à-dire un plan infini dans la direction y et de période L dans la direction x . Les points \vec{r} et \vec{r}' étant quelconques, on prendra $\vec{r}' = (x = 0, y = 0)$ par simplification. On peut alors montrer que la fonction \mathcal{W}_{cyl} se décompose en deux contributions, en s'écrivant :

$$\mathcal{W}_{cyl}(x, y; 0, 0) = \frac{1}{2L} |y| + \frac{1}{2\pi} \mathcal{R}e \left[\ln \left(\frac{1 - \exp \frac{2\pi}{L} (ix - |y|)}{2\pi L_T/L} \right) \right] \quad (7.33)$$

où la longueur thermique $L_T \equiv \sqrt{\hbar D/k_B T}$, supposée très inférieure à L , coupe les contributions aux petites distances. Cette expression plutôt compliquée reproduit des résultats connus dans deux limites. Lorsque l'électron diffuse sur de grandes distances devant le périmètre, $|\vec{r}| \gg L$, le premier terme domine. Or celui-ci est, à un facteur dimensionnel près, la fonction $\mathcal{W}_{fil}(y; 0)$ d'un fil infini. Dans l'autre limite, $|\vec{r}| \ll L$, le premier terme disparaît et l'on trouve $\mathcal{W}_{cyl}(\vec{r}; 0) \approx 1/(2\pi) \ln(|\vec{r}|/L_T) = \mathcal{W}_{plan}(\vec{r}; 0)$ qui est le cas d'un plan infini.

7.4.2 Les harmoniques de la correction de localisation faible sur le cylindre

Expression des harmoniques $n \neq 0$ et longueurs caractéristiques du problème

Pour calculer les harmoniques $\Delta\sigma_n$ de (7.32), nous devons considérer les chemins de diffusion qui enroulent n fois le cylindre dans la direction x . Or l'exponentielle dans le deuxième terme de \mathcal{W}_{cyl} dans (7.33) nous indique que les contributions dominantes sont données par des trajectoires telles que $y \ll L$. Ceci nous permet de simplifier l'expression de \mathcal{W}_{cyl} qui devient :

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{\text{cyl}}(x, y; 0, 0) &\approx \frac{1}{2L} |y| + \tilde{\mathcal{W}}(x) \\ \text{avec} \quad \tilde{\mathcal{W}}(x) &= \frac{1}{2\pi} \ln \frac{|\sin(\pi x/L)|}{\pi L_T/L}. \end{aligned} \quad (7.34)$$

de sorte que les contributions en y le long du cylindre et en x autour du cylindre se factorisent en :

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_n &= -\frac{2e^2 D}{\pi \hbar} \int_0^\infty dt \int_{y(0)=0}^{y(t)=0} \mathcal{D}y(\tau) \exp \left\{ -\int_0^t d\tau \left(\frac{\dot{y}^2}{4D} + D \frac{|y|}{L_N^3} \right) \right\} \\ &\quad \times \delta_{n, \mathcal{N}[x(\tau)]} \int_{x(0)=0}^{x(t)=0} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left\{ -\int_0^t d\tau \left(\frac{\dot{x}^2}{4D} + \frac{2e^2 k_B T R_{\text{film}}}{\hbar} \tilde{\mathcal{W}}(x) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (7.35)$$

où la longueur de Nyquist L_N donnée en (7.26) a servi à décrire la décohérence dans les fils de section s . Ici, on a $s = bL$. Les deux intégrales de chemin intervenant dans (7.35) sont découplées. Celle sur les chemins $y(\tau)$ est connue pour décrire la décohérence dans un fil quasi-unidimensionnel. La seconde porte sur les chemins $x(\tau)$ autour du cylindre et fait intervenir une fonction \mathcal{W} différente de celle de l'anneau. Afin de calculer cette seconde intégrale de chemin, on remplace $\tilde{\mathcal{W}}(x)$ dont la dépendance en x est logarithmique, par sa valeur moyenne $\int_0^L dx \tilde{\mathcal{W}}(x)/L$. L'argument de l'exponentielle devient :

$$\frac{2e^2 k_B T R_{\text{film}}}{\hbar} \int_0^t d\tau \tilde{\mathcal{W}}(x(\tau)) \rightarrow \frac{t}{\tau_{2D}^{\text{cyl}}} \quad (7.36)$$

où l'on a introduit le temps caractéristique :

$$\frac{1}{\tau_{2D}^{\text{cyl}}} = \frac{R_{\text{film}} T}{R_K} \ln \left(\frac{L^2}{L_T^2} \right). \quad (7.37)$$

On rappelle que $R_{\text{film}} = 1/\sigma_0 b$ est la résistance d'un film d'épaisseur b , et $R_K = h/e^2$ est le quantum de résistance. L'intégrale sur les chemins $x(\tau)$ est maintenant identique à celle calculée pour l'anneau isolé, avec toutefois un temps caractéristique τ_{2D}^{cyl} différent. Celui-ci n'est pas sans rappeler celui d'un film 2D :

$$\frac{1}{\tau_{2D}^{\text{film}}} = \frac{R_{\text{film}} T}{R_K} \ln \left(\frac{R_K}{2R_{\text{film}}} \right) \quad (7.38)$$

qui apparaîtra d'ailleurs plus loin dans l'analyse des harmoniques lorsque $L \gg L_N$. Le cas du cylindre est toutefois différent, avec une dépendance logarithmique

supplémentaire en température à travers L_T et l'intervention assez naturelle du périmètre L . Il apparaît donc deux longueurs caractéristiques dans ce problème (ou deux temps); L_N liée à la décohérence le long de l'axe y , et $L_{2D}^{cyl} = \sqrt{D\tau_{2D}^{cyl}}$ reliée à la décohérence autour du cylindre. Toutefois, ces deux longueurs ayant toutes deux pour origine les fluctuations du champ électrique qui modélisent les interactions électron-électron, elles ne sont pas indépendantes, et l'on a :

$$\frac{\tau_N}{\tau_{2D}^{cyl}} = \left(\frac{L_N}{L_{2D}^{cyl}} \right)^2 = \frac{1}{\pi} \frac{L}{L_N} \ln \left(\frac{L}{L_T} \right). \quad (7.39)$$

Les deux intégrales de chemins dans (7.35) étant désormais connues, les harmoniques de localisations faibles peuvent se calculer, et l'on trouve (pour $n \neq 0$) :

$$\Delta\sigma_n \cong -\frac{e^2\sqrt{D}}{hL_N} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sqrt{\tau_m}}{|u_m|} \exp \left(-|u_m| \frac{nL}{\sqrt{D\tau_m}} \right) \quad (7.40)$$

avec $\frac{1}{\tau_m} \equiv \frac{|u_m|}{\tau_N} + \frac{1}{\tau_{2D}^{cyl}}$

où les u_m sont les zéros de la dérivée de la fonction d'Airy. La formule (7.40) n'est pas facilement exploitable telle quelle, et on doit alors s'intéresser aux différentes limites. La comparaison des deux longueurs L_N et L_{2D}^{cyl} , permet de décrire les deux régimes de température. Ces deux longueurs étant par ailleurs reliées entre elles par le périmètre L (relation (7.39)), il s'agit alors de distinguer les deux régimes :

$$\begin{aligned} \text{basse température :} & \quad L \ll L_N \ll L_{2D}^{cyl} \\ \text{haute température :} & \quad L_{2D}^{cyl} \ll L_N \ll L. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Les harmoniques données par l'expression (7.40) sont donc gouvernées par la plus petite des deux longueurs L_N et L_{2D}^{cyl} , selon le régime considéré.

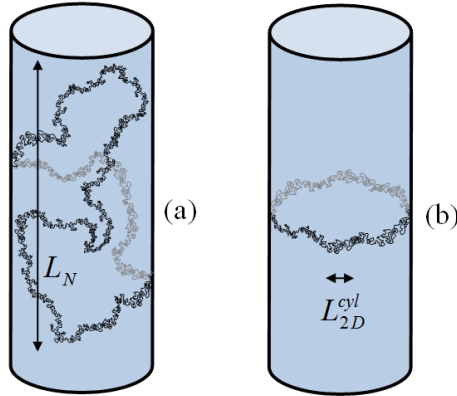


FIGURE 7.4: Illustration des trajectoires contribuant à l'harmonique $n = 1$ dans le régime (a) basse température et (b) haute température, où les longueurs L_N et L_{2D}^{cyl} , limitent respectivement la cohérence de phase.

Régime de basse température : $L \ll L_N \ll L_{2D}^{cyl}$

Dans ce régime, la décohérence est contrôlée par la longueur L_N . Cette longueur, plus grande que le périmètre L du cylindre, doit être comparée à la longueur

nL qui tient compte du nombre de tours. Dans le régime $nL \ll L_N$ très cohérent, les harmoniques s'expriment comme :

$$nL \ll L_N \quad \Delta\sigma_n \cong -\frac{2e^2}{h\pi} \left[\ln \left(\frac{L_N}{nL} \right) + C \right] \quad (7.42)$$

où la constante numérique C vaut $C \cong 0,51$. Dans ce régime, les harmoniques de localisation faible varient donc logarithmiquement avec la température. Pour des longueurs de cohérence intermédiaires $L \ll L_N \ll nL$, l'expression (7.40) se simplifie cette fois comme :

$$L_N \ll nL \quad \Delta\sigma_n \cong -\frac{2e^2}{h|u_1|^{3/2}} \exp \left(-|u_1|^{1/2} \frac{nL}{L_N} \right) \quad (7.43)$$

où $|u_1| \cong (3\pi/2)^{2/3} = 2,81$. Cette fois, les harmoniques varient exponentiellement avec la température comme $\Delta\sigma_n \sim \exp(-nLT^{1/3})$. Notons que des résultats très semblables aux deux comportements de basse température (7.42) et (7.43), ont été obtenus dans la géométrie d'une chaîne d'anneaux [28]; seuls des facteurs numériques faisant différer les résultats, les comportements en température restant les mêmes.

Régime de haute température : $L_{2D}^{\text{cyl}} \ll L_N \ll L$

Dans le régime de haute température, les harmoniques données par (7.40) sont cette fois limitées par la longueur L_{2D}^{cyl} . Celles-ci s'écrivent alors :

$$\Delta\sigma_n \cong -\frac{e^2}{h|u_1|} \frac{L_{2D}^{\text{cyl}}}{L_N} \exp \left(-\frac{nL}{L_{2D}^{\text{cyl}}} \right). \quad (7.44)$$

On trouve également une décroissance exponentielle où le préfacteur fait cette fois intervenir les deux longueurs L_{2D}^{cyl} et L_N . La loi de puissance en température qui en découle est toutefois différente avec $\Delta\sigma_n \sim \exp(-nL(T \ln T)^{1/2})$. Celle-ci n'est pas sans rappeler celle que l'on trouve pour un anneau isolé $\Delta\sigma_n^{\text{ann}} \sim \exp(-nL^{3/2}(T)^{1/2})$.

D'autre part, dans le régime de haute température, une contribution importante de la correction de localisation faible réside dans l'harmonique $n = 0$, qui est donnée par les trajectoires qui ne font pas le tour de l'anneau. Dans ce cas, la fonction \mathcal{W} donnée par (7.27) prend la forme :

$$\mathcal{W}_{\text{cyl}}(\vec{r}, 0) \cong \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{|\vec{r}|}{L_T} \right) = \mathcal{W}_{\text{film}}(\vec{r}, 0) \quad (7.45)$$

qui n'est autre que la fonction \mathcal{W} dans le cas d'un film. La contribution de l'harmonique nulle est alors donnée à une constante près par :

$$\Delta\sigma_{0-} \cong \frac{2e^2}{h\pi} \ln \left(\frac{L_{2D}^{\text{film}}}{\ell_e} \right) \quad (7.46)$$

où ℓ_e est le libre parcours moyen élastique et où $L_{2D}^{\text{film}} = \sqrt{D\tau_{2D}^{\text{film}}}$.

7.5 Discussion et conclusion

On peut comprendre l'origine de ces deux différents régimes. À basse température, le système est « très » cohérent. Les trajectoires qui contribuent aux harmoniques de la localisation faible ont donc la possibilité de visiter une grande région du système, supérieure au périmètre L du cylindre. Les processus cohérents liés à cette exploration le long du cylindre sont toutefois bien sûr limités sur la longueur caractéristique associée aux interactions électroniques dans cette direction, $L_N \propto T^{-1/3}$ (figure 7.4 (a)). À plus haute température, le système perd sa cohérence, de sorte que les trajectoires qui contribuent aux harmoniques doivent maintenant se restreindre au périmètre du cylindre, un peu comme si elles étaient sur un anneau. La cohérence de phase est donc cette fois naturellement limitée par la longueur caractéristique $L_{2D}^{\text{cy1}} \propto (T \ln T)^{-1/2}$ associée aux fluctuations de potentiel dans cette direction (figure 7.4 (b)). La principale contribution en température, en $T^{-1/2}$, a la même origine que pour un anneau isolé : cette dépendance provient des fluctuations de potentiel électrique que sentent les trajectoires qui enroulent l'anneau sur une longueur donnée par le périmètre. La contribution logarithmique $(\ln T)^{-1/2}$, absente pour l'anneau, provient en revanche de la nature bidimensionnelle de la géométrie du système dans lequel les électrons évoluent. Notons enfin que dans le régime de haute température, les trajectoires cohérentes qui enroulent une ou plusieurs fois le cylindre sont assez rares, et une contribution importante à la correction de localisation faible provient alors de l'harmonique $n = 0$, c'est-à-dire des trajectoires dont l'enroulement est nul. Tout se passe alors comme si les électrons évoluaient sur un plan ; la longueur caractéristique associée à leurs processus cohérents est donc naturellement celle du film $L_{2D}^{\text{film}} \propto T^{-1/2}$. Les différents comportements en température des harmoniques sont résumés dans le tableau 7.1.

| | | | |
|-------------------|-------------------------------------|--------------------|---|
| | $L \ll L_N \ll L_{2D}^{\text{cy1}}$ | | $L_{2D}^{\text{cy1}} \ll L_N \ll L$ |
| | $L_N \gg nL$ | $L_N \ll nL$ | |
| $-\Delta\sigma_n$ | $\ln(1/nLT^{1/3})$ | $\exp(-nLT^{1/3})$ | $\frac{\exp[-nL(T \ln(TL^2))^{1/2}]}{[LT^{1/3} \ln(LT^{1/2})]^{1/2}}$ |

TABLE 7.1: Récapitulatif du comportement des harmoniques $n \neq 0$ de la correction de localisation faible sur le cylindre dans les différents régimes discutés dans le texte, en fonction du périmètre L et de la température T .

Ainsi, les différents régimes de température permettent, à travers les harmoniques de la correction de localisation faible, de sonder différentes échelles de longueur qui caractérisent la décohérence due aux interactions électron-électron. Ces longueurs révèlent la sensibilité des processus cohérents à la géométrie, et sont caractérisées par des lois de puissance en température différentes. Le cas du cylindre est particulièrement riche, puisqu'il fait intervenir à la fois la longueur caractéristique du fil quasi-1D L_N , la longueur L_{2D}^{film} d'un film bidimensionnel et enfin une nouvelle longueur L_{2D}^{cy1} qui se rapproche assez de celle de l'anneau isolé. Ces résul-

tats ont été inclus dans dans une étude plus large comparant différentes géométries [28].

Conclusion

On résoud les problèmes qu'on se pose et non les problèmes qui se posent.
Henri Poincaré

Le but de cette thèse de doctorat était d'examiner en détails les états de bords dans des cristaux bidimensionnels dont les relations de dispersion exhibent des cônes de Dirac. Les réseaux hexagonaux et carrés étudiés permettent des découpages différents qui entraînent autant de conditions aux bords différentes sur les fermions de Dirac sans masse. Nous avons montré que sous champ magnétique, le graphène et le réseau carré traversé d'un demi quantum de flux (RCDQF) supportent des états de bord de différentes structures. Nous avons ensuite montré que les spectres se décrivent à basse énergie par un Hamiltonien de Schrödinger effectif. Le potentiel de cet Hamiltonien est symétrique pour le bord zigzag, ce qui donne lieu à des niveaux d'énergie notés ϵ^{AS} . Dans les autres cas, le potentiel est asymétrique, entraînant des états de bord de structures différentes de celles du cas zigzag, dont sont issus deux types de niveaux, notés ϵ^+ et ϵ^- . L'asymétrie du potentiel est due au couplage par les bords, des vallées dans le cas armchair, et des sous-réseaux pour le RCDQF. Les niveaux notés ϵ^- ne sont pas monotones à l'approche du bord ; ils résultent d'une compétition entre la répulsion de niveau lors de la levée de dégénérescence (de vallée ou de sous-réseaux) et le confinement près du bord qui tend à donner de l'énergie cinétique aux particules en les faisant rebondir le long du bord. Une analyse semi-classique a ensuite permis d'interpréter les différents spectres en termes d'un mélange d'orbites cyclotron quantifiées pouvant être ouvertes ou fermées. Une approche quantitative du problème, basée sur l'approximation WKB, a également permis de calculer analytiquement les niveaux d'énergie de ces différents états de bord. Nous sommes ainsi parvenus à expliquer les différentes structures des états de bords, comme par exemple la répartition remarquable des niveaux entre bord et volume dans le cas zigzag, la non monotonie des niveaux ϵ^- , ou encore la séparation en vallée et en bords des niveaux ϵ^- et ϵ^+ dans le RCDQF. La partie graphène de cette étude a donné lieu à une publication dans Physical Review B [21].

La présence d'états de bord en l'absence de champ magnétique a également été discutée. Plus particulièrement, nous avons explicité le lien entre la quantification de la phase de Zak des fonctions d'onde en volume et l'existence d'états de bord dans le système. Cette approche nous a permis de comprendre l'existence d'états de bord d'énergie nulle dans les rubans zigzag de graphène en terme de phase topologique. Mieux, cette approche donne accès à l'existence et l'emplacement dans la zone de Brillouin 1D du ruban des états de bord pour tous types de

bords réguliers. Nous avons également proposé un modèle reposant sur les mêmes concepts, qui décrit cette fois une transition topologique entre une phase isolante de bande et une phase dans laquelle le système possède des états de bord dispersifs. Toutefois, cette relation entre la valeur de la phase de Zak et l'existence de d'états de bord demeure à l'heure actuelle une conjecture.

Un autre exemple de transition topologique, tout à fait différente de la précédente, a également été étudié. Il s'agit de la fusion des cônes de Dirac dans le RCDQF. Nous avons montré que l'ajout d'un potentiel uni-axial alterné sur site conduit à une telle transition dans ce système, et nous avons étudié le comportement original des niveaux de Landau qui la caractérise. Ces résultats suggèrent de nouvelles expériences dans le domaine des atomes froids piégés dans un réseau carré où la fusion des cônes de Dirac pourrait y être observée. Ces résultats ont été publiés dans *Physical Review B* [20].

Enfin, un travail complémentaire portant sur la décohérence dans les conducteurs mésoscopiques désordonnés a été mené. La décohérence, induite par les interactions électroniques, a été étudiée via l'examen des harmoniques de la correction de localisation faible sur un cylindre. Les résultats mettent en évidence la dépendance en géométrie du processus de décohérence, en exhibant différentes longueurs caractéristiques dont on donne le comportement en température. Chacune de ces longueurs a pour origine une caractéristique de la géométrie du cylindre : son périmètre, sa longueur (caractère unidimensionnel), sa surface (caractère bidimensionnel). Ces résultats ont été inclus dans un travail plus large sur l'influence de la géométrie sur la décohérence induite par les interactions électron-électron dans les conducteurs diffusifs, qui a été publié dans *Physical Review B* [28].

Annexe A

États de bords des rubans zigzag par l'Hamiltonien de Dirac

Dans cette partie nous montrons explicitement que les bords zigzag font apparaître des états localisés sur les bords, en reprenant une étude menée dans le cadre de l'équation de Dirac par Brey et Fertig [56]. En effet, nous avons vu au chapitre 1 qu'au voisinage des points de Dirac, l'Hamiltonien du système prenait la forme (1.9) :

$$\hat{H}_{\vec{K}, \vec{K}'} = \frac{3ta}{2} \begin{pmatrix} 0 & iq_x - \xi q_y \\ -iq_x - \xi q_y & \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

dans la base des $\varphi_{A/B}^{(\prime)}$ et où $\xi = \pm$ est l'indice de vallée. Afin de traiter correctement les bords, nous comprenons qu'il est essentiel de travailler dans l'espace réel, les opérateurs impulsions se transformant alors en $q_x \rightarrow -i\partial_x$ et $q_y \rightarrow -i\partial_y$. Dans l'espace réel, les fonctions d'onde s'écrivent sous la forme d'une combinaison des deux pseudo-spineurs issus de chaque vallée :

$$\Psi^\pm(\vec{r}) = \alpha e^{i\vec{K}\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi_A(\vec{r}) \\ \varphi_B(\vec{r}) \end{pmatrix} + \beta e^{i\vec{K}'\vec{r}} \begin{pmatrix} \varphi'_A(\vec{r}) \\ \varphi'_B(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Par ailleurs, l'invariance du ruban par translation dans la direction y nous suggère de chercher des solutions sous la forme $\Psi^{(\prime)}(x, y) = e^{iq_y y} \Psi^{(\prime)}(x)$. Les composantes $\varphi_{A/B}^{(\prime)}$ de la fonction d'onde sont alors solutions du système d'équations différentielles suivant :

$$(\partial_x - \xi i q_y) \varphi_B^{(\prime)}(x) = \frac{\epsilon}{v_F} \varphi_A^{(\prime)}(x) \quad (\text{A.3})$$

$$(-\partial_x - \xi i q_y) \varphi_A^{(\prime)}(x) = \frac{\epsilon}{v_F} \varphi_B^{(\prime)}(x). \quad (\text{A.4})$$

Ce système se découple facilement en appliquant à gauche $-\partial_x - \xi q_y$ dans l'équation (A.3) et $\partial_x - \xi q_y$ dans l'équation (A.4), de sorte que l'on obtienne une même équation pour les quatre composantes, à savoir :

$$(-\partial_x^2 + q_y^2) \varphi_{A/B}^{(\prime)}(x) = \left(\frac{\epsilon}{v_F} \right)^2 \varphi_{A/B}^{(\prime)}(x) \quad (\text{A.5})$$

dont les solutions sont simplement données par :

$$\varphi_A^{(\prime)}(x) = A_1^\xi e^{zx} + A_2^\xi e^{-zx} \quad (\text{A.6})$$

$$\varphi_B^{(\prime)}(x) = B_1^\xi e^{zx} + B_2^\xi e^{-zx} \quad (\text{A.7})$$

où $z = \pm\sqrt{q_y^2 - (\epsilon/v_F)^2}$ peut être a priori réel ou imaginaire. Il nous faut maintenant préciser les conditions aux limites. La particularité des bords zigzag est qu'ils ne sont constitués que d'un type de site sur chaque bord, ces sites devant de plus être différents sur chaque bord. Dans la base que nous avons choisie, le bord gauche n'est constitué que de sites A , alors que le bord droit n'est constitué que de sites B . On impose ensuite à la fonction d'onde $\Psi^\pm(x)$ de s'annuler, non pas sur le bord du ruban, mais sur les sites suivants vacants, c'est à dire $\Psi^B(x=0) = 0$ et $\Psi^A(x=L) = 0$, d'où l'on obtient les conditions aux limites :

$$\varphi_B^{(\prime)}(x=0) = 0 \quad \varphi_A^{(\prime)}(x=L) = 0 . \quad (\text{A.8})$$

Ces conditions aux limites imposent des solutions de la forme :

$$\varphi_A^{(\prime)}(x) = A_1^\xi (e^{zx} - e^{2zL}e^{-zx}) \quad (\text{A.9})$$

$$\varphi_B^{(\prime)}(x) = B_1^\xi (e^{zx} - e^{-zx}) . \quad (\text{A.10})$$

En insérant ces expressions dans les équations Dirac (A.3) et (A.4) nous obtenons l'équation :

$$e^{-2zL} = \frac{\xi q_y - z}{\xi q_y + z} . \quad (\text{A.11})$$

Cette équation possède des solutions réelles $z = k$ pour $\xi q_y L > 1$ (figure A.1), donnant lieu à des états d'énergie $\pm\sqrt{q_y^2 - k^2}$ confinés sur les bords [56]. En particulier, lorsque $\xi q_y L \gg 1$, la solution k tend vers q_y , et l'énergie de l'état de bord tend vers 0. Notons que la région d'existence de ces états de bord correspond bien à la région entre les deux points de Dirac, q_y ayant pour origine K_y ou K'_y selon la valeur de ξ .¹ L'allure des composantes de l'état localisé est représentée sur la

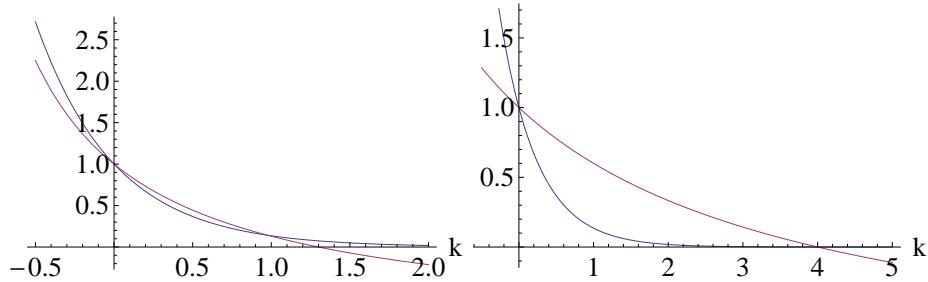


FIGURE A.1: Réprésentations graphiques des solutions $z = k$ de l'équation (A.11) avec $L = 1$ pour $q_y = 1, 3$ et $q_y = 4$. Le membre de gauche est tracé en bleu, celui de droite en rouge. Lorsque $\xi q_y L \gg 1$, la solution k tend vers q_y .

figure A.2. Notons qu'il existe une autre étude des états de bord zigzag par un modèle continu, en utilisant cette fois des champs de jauge [99].

1. On aurait tout aussi bien pu chercher les solutions imaginaires $z = ik_n$, correspondant dans ce cas aux ondes stationnaires s'établissant dans la largeur du ruban. On trouve dans ce cas que de telles ondes s'établissent dans la région $\xi q_y L < 1$ [56].

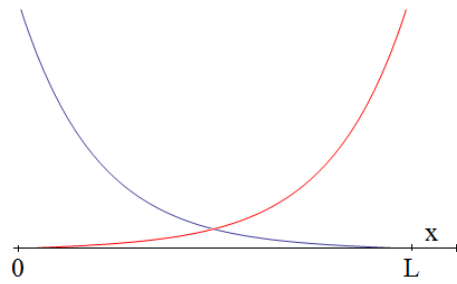


FIGURE A.2: Allure des composantes $\varphi_A(x)^{(l)}$ (bleu) et $\varphi_B(x)^{(l)}$ (rouge) de l'état localisé dans le graphène à bords zigzag.

Annexe B

Action classique et aire cyclotron

Dans cette annexe, nous explicitons le lien entre l'action réduite et l'aire enroulée par une particule chargée dans le plan.

Considérons une particule de charge $-e$ qui se déplace dans un plan. L'action réduite S qui lui est associée est donnée par :

$$S = \int dt \vec{r} \cdot \vec{p}. \quad (\text{B.1})$$

En intégrant par partie cette action entre deux instants t_i et t_f , celle-ci se réécrit :

$$S = \vec{r} \cdot \vec{p} \Big|_{t_f} - \vec{r} \cdot \vec{p} \Big|_{t_i} - \int dt \vec{r} \cdot \dot{\vec{p}}. \quad (\text{B.2})$$

L'intégrale restante peut alors se réécrire en utilisant les équations d'Hamilton-Jacobi. En effet l'Hamiltonien $\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p})$ de la particule peut se récrire en fonction de la seule variable $\vec{\Pi} = \vec{p} + e\vec{A}(\vec{r})$. Dans la jauge symétrique $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \wedge \vec{r}$, les équations d'Hamilton-Jacobi deviennent :

$$\begin{aligned} \dot{p}_x &= -\frac{eB}{2} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \Pi_y} & \dot{p}_y &= \frac{eB}{2} \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \Pi_x} \\ \dot{x} &= \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \Pi_x} & \dot{y} &= \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial \Pi_y} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

d'où l'on obtient les relations :

$$\dot{p}_x = -\frac{eB}{2} \dot{y} \quad \dot{p}_y = \frac{eB}{2} \dot{x} \quad (\text{B.4})$$

que l'on réinjecte dans l'action (B.2) qui devient :

$$S = \vec{r} \cdot \vec{p} \Big|_{t_f} - \vec{r} \cdot \vec{p} \Big|_{t_i} + \frac{eB}{2} \int (\vec{r} \wedge d\vec{r}) \cdot \vec{e}_z. \quad (\text{B.5})$$

Pour une trajectoire fermée dans l'espace des phases, les deux premiers termes se compensent et l'on trouve finalement :

$$S = \frac{\mathcal{A}}{\ell_B^2} \quad (\text{B.6})$$

où \mathcal{A} est l'aire enroulée par la trajectoire de la particule dans le plan. Notons que ce résultat ne dépend pas de la masse de la particule, et reste donc valable pour des particules de masse nulle, comme c'est le cas dans le graphène et dans le RCDQF. Dans le cas particulier où la particule a une masse, l'Hamiltonien prend la forme suivante :

$$\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 . \quad (\text{B.7})$$

En utilisant cette fois-ci la jauge de Landau $A_x = 0, A_y = -Bx$, un simple développement permet une réécriture de l'Hamiltonien sous la forme :

$$\mathcal{H}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{(p_y - eBx)^2}{2m} . \quad (\text{B.8})$$

Ainsi, dans cette jauge, l'Hamiltonien ne dépend pas de y . En posant $x_c = p_y \ell_B^2$, où $\ell_B^2 = 1/eB$ on s'affranchit alors d'un degré de liberté, et l'Hamiltonien prend finalement la forme :

$$\mathcal{H}_{x_0}(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (x - x_c)^2 \quad (\text{B.9})$$

où l'on a défini $\omega_c = \frac{eB}{m}$ et où x_c est la position sur l'axe x du centre de l'orbite cyclotron. La particule est alors décrite par l'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique à une dimension centré en x_c et de pulsation ω_c . Puisque l'Hamiltonien n'a plus qu'un degré de liberté, l'action réduite s'écrit cette fois :

$$S = \int dx p_x . \quad (\text{B.10})$$

Si l'action S n'a plus la même expression après ces manipulations, le système que l'on décrit est quant à lui toujours le même, et l'action (B.10) est toujours égale, en unité de ℓ_B , à l'aire enroulée par la trajectoire de la particule dans plan. Toutefois, cette écriture s'avère plus commode lorsqu'on étudie des rubans où la jauge de Landau s'impose. On peut ainsi calculer facilement l'action en fonction de l'énergie, y compris en présence de bord, et la relier simplement à la surface qu'enroule la particule (voir la section 5.2 du chapitre 5).

Annexe C

Symétrie d'inversion et phase de Zak

Nous attirons ici l'attention sur le rôle de la symétrie d'inversion du cristal. Comme souligné par Zak dans le cadre simple d'un cristal 1D à un atome par maille, une telle symétrie du cristal impose à la phase de Berry 1D de ne pouvoir prendre que les deux valeurs 0 ou π . Nous reprenons soigneusement ce point ici dans le cas où le système possède deux atomes par maille.

Pour cela, nous ré-écrivons la phase de Berry 1D en terme de fonctions de Wannier [citations] en utilisant la relation entre fonction de Wannier $W(x)$ et fonction de Bloch $u_{k_x}(x)$ suivante :

$$e^{ik_x x} u_{k_x}(x) = \frac{2\pi}{a_0} \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{ik_x m a_0} W(x - m a_0) . \quad (\text{C.1})$$

Ainsi, dans le cas d'un cristal à deux atomes par maille, la phase de Zak s'écrit :

$$\gamma = i \int_{-\frac{\pi}{a_0}}^{\frac{\pi}{a_0}} dk_x \langle u_{k_x} | \partial_{k_x} u_{k_x} \rangle \quad (\text{C.2})$$

avec

$$\langle x | u_{k_x} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} u_{k_x}^A(x) \\ u_{k_x}^B(x) \end{pmatrix} \quad (\text{C.3})$$

Ainsi, en introduisant une relation de fermeture dans (C.2), on obtient :

$$\gamma = i \frac{2\pi}{a_0} \int_0^{a_0} dx \int_{-\frac{\pi}{a_0}}^{\frac{\pi}{a_0}} dk_x \frac{1}{2} [u_{k_x}^{A*}(x) \partial_{k_x} u_{k_x}^A(x) + u_{k_x}^{B*}(x) \partial_{k_x} u_{k_x}^B(x)] .$$

Puis en y insérant la relation (C.1) on obtient :

$$\begin{aligned} \gamma = & \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{a_0} \right)^2 \int_0^{a_0} dx \sum_{m, m' \in \mathbb{Z}} \int_{-\frac{\pi}{a_0}}^{\frac{\pi}{a_0}} dk_x e^{ik_x a_0 (m' - m)} (x - m a_0) \\ & \times [W_A^*(x - m a_0) W_A(x - m' a_0) + W_B^*(x - m a_0) W_B(x - m' a_0)] . \end{aligned}$$

L'intégrale sur k_x se calcule aisément :

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{\pi}{a_0} \sum_{m,m' \in \mathbb{Z}} \delta_{m,m'} \int_0^{a_0} dx (x - ma_0) \\ &\quad \times [W_A^*(x - ma_0)W_A(x - m'a_0) + W_B^*(x - ma_0)W_B(x - m'a_0)]\end{aligned}$$

ainsi que la somme sur m' :

$$\gamma = \frac{\pi}{a_0} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \int_0^{a_0} dx (x - ma_0) [|W_A(x - ma_0)|^2 + |W_B(x - ma_0)|^2].$$

Enfin, par un simple changement de variable, la dernière somme change les bornes de l'intégrale et la phase de Zak devient :

$$\gamma = \frac{\pi}{a_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x [|W_A(x)|^2 + |W_B(x)|^2]. \quad (\text{C.4})$$

Une fois cette relation établie, nous utilisons les propriétés de symétrie d'inversion du cristal. Celles-ci sont préservées dans la mesure où l'on considère que les atomes A et B sont identiques (par exemple, deux atomes de carbone). Le cristal possède deux points particuliers de symétrie d'inversion, dont les positons sont $w_1 = 0$ et $w_2 = a_0/2$. (On a placé l'origine des x à équi-distance des atomes A et B . Dans ce cas, les positions w_1 et w_2 sont aussi appelées positions de Wyckoff).

La symétrie d'inversion par rapport au premier point se traduit par : $W_A(x) = W_B(-x)$. On injecte cette relation dans (C.4), la phase de Zak devient :

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{\pi}{a_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x [|W_A(x)|^2 + |W_B(x)|^2] \\ &= -\frac{\pi}{a_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' [|W_A(-x')|^2 + |W_B(-x')|^2] \\ &\stackrel{\text{sym } w_1}{=} -\frac{\pi}{a_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' x' [|W_A(x')|^2 + |W_B(x')|^2] \\ \gamma &= -\gamma\end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

La symétrie d'inversion par rapport au second point se traduit quant à elle $W_A(x) = W_B(a_0 - x)$. Cette fois, la phase de Zak se récrit :

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{\pi}{a_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x [|W_A(x)|^2 + |W_B(x)|^2] \\ &\stackrel{\text{sym } w_2}{=} \frac{\pi}{a_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x [|W_B(a_0 - x)|^2 + |W_A(a_0 - x)|^2] \\ &= \frac{\pi}{a_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' (a_0 - x') [|W_B(x')|^2 + |W_A(x')|^2] \\ \gamma &= 2\pi - \gamma \quad \Rightarrow \gamma = \pi\end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Ainsi, ces deux points de symétrie d'inversion n'autorisent que deux valeurs possibles à la phase de Zak, $\gamma = 0$ ou $\gamma = \pi$.

Bibliographie

- [1] S. D. Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, and E. Rossi, Electronic transport in two dimensional graphene, arXiv :1003.4731v1 (2010).
- [2] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, The electronic properties of graphene, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [3] K. Novoselov, A. Geim, S. Morosov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos, and A. Firsov, Two dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature* **438**, 197 (2005).
- [4] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. Stormer, and P. Kim, Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [5] P. Wallace, The band theory of graphite, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [6] P. A. Lee, Low-energy excitations in high-temperature superconductors, *Science* **277**, 50 (1997).
- [7] D. R. Hofstadter, Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [8] D. Jaksch and P. Zoller, Creation of effective magnetic fields in optical lattices : the Hofstadter butterfly for cold neutral atoms, *New Journ. Phys.* **5**, 56 (2003).
- [9] J. M. Hou, W. X. Yang., and X. J. Liu, Massless Dirac fermions in a square optical lattice, *Phys. Rev. A* **79**, 043621 (2009).
- [10] F. Gerbier and J. Dalibard, Gauge fields for ultracold atoms in optical superlattices, *New J. Phys.* **12**, 033007 (2010).
- [11] P. Dietl, F. Piéchon, and G. Montambaux, New magnetic field dependance of Landau levels in graphenelike structure, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 236405 (2008).
- [12] A. Geim and K. Novoselov, The rise of graphene, *Nature materials* **6**, 183 (2007).
- [13] Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, Half-metallic graphene nanoribbons, *Nature* **444**, 347 (2006).
- [14] 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**, 2189 (1982).

- [15] L. Brey and H. A. Fertig, Edge states and the quantized Hall effect in graphene, *Phys. Rev. B* **73**, 195408 (2006).
- [16] D. A. Abanin, P. A. Lee, and L. S. Levitov, Spin-filtered edge states and quantum Hall in graphene, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 176803 (2006).
- [17] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, Peculiar localized state at zigzag graphite edge, *J. Phys. Soc. Jpn* **65**, 1920 (1996).
- [18] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, Edge state in graphene ribbons : Nanometer size effect and edge shape dependence, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- [19] S. Ryu and Y. Hatsugai, Topological origin of zero-energy edge states in particule-hole symmetric systems, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 077002 (2002).
- [20] P. Delplace and G. Montambaux, Semi-Dirac point in the Hofstadter spectrum, *Phys. Rev. B* **82**, 035438 (2010).
- [21] P. Delplace and G. Montambaux, WKB analysis of edge states of graphene in a strong magnetic field, *Phys. Rev. B* **82**, 205412 (2010).
- [22] S. Chakravarty and A. Schmid, Weak localisation : the quasiclassical theory of electrons in a random media, *Phys. Rep.* **140**, 193 (1986).
- [23] E. Akkermans and G. Montambaux, *Physique mésoscopique des électrons et des photons*, EDP Sciences - CNRS Éditions, 2004.
- [24] T. Ludwig and A. D. Mirlin, Interaction-induced dephasing of Aharonov-Bohm oscillation, *Phys. Rev. B* **69**, 193306 (2004).
- [25] C. Texier and G. Montambaux, Dephasing due to electron-electron interaction in a diffusive ring, *Phys. Rev. B* **72**, 115327 (2005).
- [26] M. Ferrier, A. C. H. Rowe, S. Guéron, H. Bouchiat, C. Texier, and G. Montambaux, Geometrical dependance of decoherence by electronic interaction in a GaAs/GaAlAs, *Phys. Rev. Lett* **100**, 146802 (2008).
- [27] B. L. Altshuler, A. G. Aronov, and D. E. Khmelnitsky, Effects of electron-electron collisions with small energy transfers on quantum localisation, *J. Phys. C* **15**, 7367 (1982).
- [28] C. Texier, P. Delplace, and G. Montambaux, Quantum oscillations and decoherence due to electron-electron interaction in metallic networks and hollow cylinders, *Phys. Rev. B* **80**, 205413 (2009).
- [29] W. Andreoni, *The physics of fullerene-based and fullerene-related materials*, Springer, Berlin, 2000.
- [30] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*, Imperial College Press, London.
- [31] J. C. Charlier, X. Blase, and S. Roche, Electronic and transport properties of nanotubes, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 677 (2007).

- [32] K. Novoselov, D. Jiang, T. Booth, V. Khotkevich, S. Morozov, and A. Geim, PNAS **102**, 10451 (2005).
- [33] C. Berger, Z. Song, T. Li, A. Ogbazghi, R. Feng, Z. Dai, A. Marchenkov, E. Conrad, P. First, and W. de Heer, Ultrathin epitaxial graphite : 2D electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics, J. Phys. Chem. **108**, 19912 (2004).
- [34] W. de Heer, C. Berger, X. Wu, P. N. First, A. H. Conrad, X. Li, M. Sprinkle, J. Haas, M. L. Sadowski, M. Potemski, and G. Martinez, Solid State Comm. **143**, 92 (2007).
- [35] J. W. McClure, Diamagnetsim of graphite, Phys. Rev. **104**, 666 (1956).
- [36] M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, and W. A. de Heer, Landau levels spectroscopy of ultrathin graphite layers, Phys. Rev. Lett. **97**, 266405 (2006).
- [37] Z. Jiang, E. A. Henriken, L. C. Tung, Y.-J. Wang, M. E. Schwartz, M. Y. Han, P. Kim, and H. L. Stormer, Infrared spectroscopy of Landau levels of graphene, Phys. Rev. Lett. **98**, 197403 (2007).
- [38] T. Matsui, H. Kambara, Y. Niimi, K. Tagami, M. Tsukada, and H. Fukuyama, STS observation of Landau levels at graphite surfaces, Phys. Rev. Lett. **94**, 226403 (2005).
- [39] Y. Aharonov and D. Bohm, Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- [40] M. V. Berry, *Geometric phases in physics. The quantum phase, five year after*, volume 5, Advanced series in mathematical physics, World Scientific, 1989.
- [41] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M.-O. Goerbig, A universal Hamiltonian for motion and merging of Dirac points in a two-dimensional crystal, Eur. Phys. J. B. **72**, 509 (2009).
- [42] S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Pressure-induced zero-gap semiconducting state in organic conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃ salt, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 034711 (2007).
- [43] A. Kobayashi, S. Katayama, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, Massless fermions in organic conductors, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 034711 (2007).
- [44] A. C. Durst and S. Sachdev, Low temperature quasiparticle transport in a d-wave superconductor with coexisting charge order, Phys. Rev. B **80**, 054518 (2009).
- [45] G. P. Mikitik and Y. V. Sharla, Manifestation of Berry's phase in metals physics, Phys. Rev. Lett. **82**, 2147 (1999).
- [46] M. Y. Han, B. Oezylmaz, Y. Zhang, and P. Kim, Sub-poissonian shot noise in graphene, Phys. Rev. Lett. **98**, 206805 (2007).

- [47] A. Cresti, N. Nemeç, B. Biel, F. Triozon, G. Cuniberti, and S. Roche, Charge transport in disordered graphene-based low dimensional materials, *Nano Res.* **1**, 361 (2008).
- [48] F. Miao, S. Wijeratne, Y. Zhang, U. C. Coskun, W. Bao, and C. N. Lau, Phase-coherent transport in graphene quantum billiards, *Science* **317**, 1530 (2007).
- [49] L. DiCarlo, J. R. Williams, Y. Zhang, D. T. McClure, and C. M. Marcus, Shot noise in graphene, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 156801 (2008).
- [50] R. Danneau, F. Wu, M. F. Craciun, S. Russo, M. Y. Tomi, J. Salmilehto, A. Morpurgo, and P. J. Hakonen, Shot noise in ballistic graphene, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 196802 (2008).
- [51] J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, and C. W. J. Beenakker, Sub-poissonian shot noise in graphene, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 246802 (2006).
- [52] D. A. Areshkin, G. Gunlycke, and C. T. White, Ballistic transport in graphene nanostrips in the presence of disorder : importance of edge defects, *Nano Lett.* **7**, 204 (2007).
- [53] A. Cresti and S. Roche, Range and correlation effects in edge disordered graphene nanoribbons, *New J. Phys.* **11**, 095004 (2009).
- [54] D. A. Abanin, P. A. Lee, and L. S. Levitov, Charge and spin transport at the quantum Hall edge of graphene, *Solid State Comm.* **143**, 77 (2007).
- [55] M. Buttiker, Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multi-probe conductors, *Phys. Rev. B* **38**, 9375 (1988).
- [56] L. Brey and H. A. Fertig, Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation, *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006).
- [57] Y. Kobayashi, K. I. Fului, T. Enoki, K. Kusakabe, and Y. Kaburagi, Observation of zigzag and armchair edges of graphite using scanning tunneling microscopy and spectroscopy, *Phys. Rev. B* **71**, 193406 (2005).
- [58] Y. Niimi, T. Matsui, H. Kambara, K. Tagami, M. Tsukada, and H. Fukuyama, Scanning tunneling microscopy and spectroscopy of the electronic local density of states of graphite surfaces near monoatomic step edges, *Phys. Rev. B* **73**, 085421 (2006).
- [59] P. Koskinen, S. Malola, and H. Hakkinen, Self-passivating edge reconstructions of graphene, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 073401 (2008).
- [60] P. Koskinen, S. Malola, and H. Hakkinen, Evidence for graphene edges beyond zigzag and armchair, *Phys. Rev. B* **80**, 073401 (2009).
- [61] D. Kosynkin, A. Higginbotham, A. Sinitskii, J. Lomeda, A. Dimiev, B. K. Price, and J. Tour, Longitudinal unzipping of carbon nanotubes to form graphene nanoribbons, *Nature Letters* **458**, 872 (2009).

- [62] J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Mullen, and R. Fasel, Atomically precise bottom-up fabrication of graphene nanoribbons, *Nature Letters* **466**, 470 (2010).
- [63] U. Kuhl, S. Barkhofen, T. Tudorovskiy, H.-J. Stockmann, T. Hossain, L. de Forges de Parny, and F. Mortessagne, Dirac point and edge states in a microwave realisation of tight-binding graphene-like structures, *Phys. Rev. B* **82**, 094308 (2010).
- [64] W. Yao, S. Yang, and Q. Niu, Edge states in graphene : From gapped flat-band to gapless chiral modes, *Phys. Rev. Lett* **102**, 096801 (2009).
- [65] J. Klos, Surface states in zigzag and armchair nanoribbons, *arXiv :0902.0914v1* (2009).
- [66] B. Xu, J. Yin, H. Weng, Y. Xia, X. Wan, and Z. Liu, Robust Dirac point in honeycomb structure nanoribbons with zigzag edge, *Phys. Rev. B* **81**, 250419 (2010).
- [67] W. Li and R. Tao, Edge states in monolayer and bilayer graphene, *arXiv :1001.4168v2* (2010).
- [68] K. Sasaki, S. Murakami, and R. Saito, Stabilization mechanism of edge states in graphene, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 133110 (2006).
- [69] A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, Boundary conditions for Dirac fermions on a terminated honeycomb lattice, *Phys. Rev. B* **77**, 085423 (2008).
- [70] S. Ihnatsenka, I. V. Zozoulenko, and G. Kirczenow, Band-gap engineering and ballistic transport in edge corrugated graphene nanoribbons, *Phys. Rev. B* **80**, 155415 (2009).
- [71] J. Wurm, M. Wimmer, I. Adagideli, K. Richter, and H. U. Baranger, Interfaces within graphene nanoribbons, *New J. Phys.* **11**, 095022 (2009).
- [72] Z. Liu, K. Suenaga, P. J. F. Harris, and S. Iijima, Open and closed edges of graphene layers, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 015501 (2009).
- [73] S. Lakshmi, S. Roche, and G. Cunibert, Spin-valve effect in zigzag graphene nanoribbons by defect engineering, *Phys. Rev. B* **80**, 193404 (2009).
- [74] A. A. Shylau, I. V. Zozoulenko, and T. H. H. Xu, Generic suppression of conductance quantization of interacting electrons in graphene nanoribbons in a perpendicular magnetic field, *Phys. Rev. B* **82**, 121410 (2010).
- [75] K. von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on the quantized Hall resistance, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [76] K. von Klitzing, The quantized Hall effect, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 519 (1985).

- [77] K. Hashimoto, C. Sohrmann, J. Wiebe, T. Inaoka, F. Meier, Y. Hirayam, R. W. R. A. Romer, and M. Morgenstern, Quantum Hall transition in real space : from localized to extended states, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 256802 (2008).
- [78] A. Tzalenchuk, S. Lara-Avila, A. Kalaboukhov, S. Paolillo, M. Syvajarvi, R. Yakimova, O. Kazakova, V. F. T. Janssen, and S. Kubatkin, Towards a quantum resistance standard based on epitaxial graphene, *Nature Nanotechnology Letters* **5**, 186 (2010).
- [79] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics*, volume 3, Pergamon Press, 1958.
- [80] Y. Avishai and G. Montambaux, Semiclassical analysis of edge state energies in the integer quantum Hall effect, *Eur. Phys. J. B* **66**, 41 (2008).
- [81] H. van Houten, C. W. Beenakker, J. G. Williamson, M. E. I. Broekaart, P. H. M. van Loosdrecht, B. J. van Wees, J. E. Mooij, C. T. Foxon, and J. J. Harris, *Phys. Rev. B* **39**, 8556 (1989).
- [82] G. Montambaux, Semiclassical quantization of skipping orbits, arXiv :1006.5819v1 (2010).
- [83] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nij, Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [84] Y. Hatsugai, Edge states in the integer quantum Hall effect and the Riemann surface of the Bloch function, *Phys. Rev. B* **48**, 11851 (1993).
- [85] M. Z. Hasan and C. L. Kane, Topological insulators, *Rev. Mod. Phys* **82**, 3045 (2010).
- [86] B. A. Bernevig, T. A. Hughes, and S.-C. Zhang, Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [87] M. Konig, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. Hughes, C.-X. Liu, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, The quantum spin Hall effect : theory and experiment, *J. Phys Soc. Jpn* **77**, 031007 (2008).
- [88] J. Zak, Berry's phase for energy bands in solids, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2747 (1988).
- [89] N. Hao, P. Zhang, Z. Wang, W. Zhang, and Y. Wang, Topological edge states and quantum Hall effect in the Haldane model, *Phys. Rev. B* **78**, 075438 (2008).
- [90] Z. Wang, N. Hao, and P. Zhang, Topological winding properties of spin edge states in Kane-Mele graphene model, *Phys. Rev. B* **80**, 115420 (2009).
- [91] X.-L. Qi, Y.-S. Wu, and S.-C. Zhang, General theorem relating the bulk topological number to edge states in two-dimensional insulators, *Phys. Rev. B* **74**, 045125 (2006).

- [92] Q. Niu, D. J. Thouless, and Y. S. Wu, Quantized Hall conuctance as a topological invariant, *Phys. Rev. B* **31**, 3372 (1984).
- [93] C. P. Umbach, C. V. Haesendonck, R. B. Laibowitz, S. Washburn, and R. A. Webb, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 386 (1986).
- [94] Y. Sharvin and Y. V. Sharvin, Magnetic-flux quantization in a cylindrical film of a normal metal, *JETP Lett* **34**, 272 (1981).
- [95] B. L. Al'tshuler, A. G. Aronov, and B. Z. Spivak, The Aharonov-Bohm effect in disordered conductors, *JETP Lett.* **33**, 94 (1981).
- [96] B. L. Al'tshuler, A. G. Aronov, B. Z. Spivak, D. Y. Sharvin, and Y. V. Sharvin, *JETP Lett* **35**, 588 (1982).
- [97] D. Pines and P. Nozières, *The theory of quantum liquids*, volume 1, Addison-Wesley, 1989.
- [98] G. Montambaux and E. Akkermans, Nonexponential quasiparticle decay and phase relaxation in low-dimensional conductors, *Phys. Rev. Lett* **95**, 016403 (2005).
- [99] K. Sasaki, S. Murakami, and R. Saito, Gauge field for edge state in graphene, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 074713 (2006).