



HAL
open science

Preuves expérimentales d'un transport de surface sur un isolant topologique 3D HgTe/CdTe sus contrainte

Clément Bouvier

► To cite this version:

Clément Bouvier. Preuves expérimentales d'un transport de surface sur un isolant topologique 3D HgTe/CdTe sus contrainte. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université de Grenoble, 2013. Français. NNT : 2013GRENY078 . tel-01558284

HAL Id: tel-01558284

<https://theses.hal.science/tel-01558284>

Submitted on 7 Jul 2017

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

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

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Nanophysique**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

Clément BOUVIER

Thèse dirigée par **Laurent Patrick LEVY**
et codirigée par **Franck BALESTRO**

préparée au sein **Institut Néel**
et de **École doctorale de physique**

Preuves expérimentales d'un transport de surface sur un isolant topologique 3D HgTe/CdTe sous contrainte

Thèse soutenue publiquement le **11 Juillet 2013**,
devant le jury composé de :

M. Ulf GENNSER

Directeur de recherche, LPN, CNRS, Rapporteur

M. Christian GLATTLI

Directeur de recherche, ENS, IRAMIS/SPEC, CNRS, Rapporteur

M. David CARPENTIER

Directeur de recherche, Laboratoire de physique, CNRS/ENS Lyon, Examineur

M. Tristan MEUNIER

Chargé de recherche, Institut Néel, CNRS/UJF, Examineur

M. Laurent Patrick LEVY

Professeur, Institut Néel, CNRS/UJF, Directeur de thèse

M. Franck BALESTRO

Maître de conférence, Institut Néel, CNRS/UJF, Co-Directeur de thèse



Table des matières

| | |
|---|----------|
| Table des matières | iii |
| Liste des tableaux | vii |
| Table des figures | ix |
| Introduction | 1 |
| 1 Les isolants topologiques | 3 |
| 1.1 Le premier isolant topologique | 4 |
| 1.1.1 L'effet Hall classique | 4 |
| 1.1.2 Effet Hall Quantique Entier | 5 |
| 1.1.2.1 Quantification des niveaux de Landau | 5 |
| 1.1.2.2 Les états de bords | 6 |
| 1.2 La topologie et l'effet Hall quantique entier | 8 |
| 1.2.1 Notion de topologie | 8 |
| 1.2.1.1 Genre des surfaces fermées | 8 |
| 1.2.1.2 Notion d'espace fibré et indice topologique | 9 |
| 1.2.2 L'Effet Hall Quantique Entier comme isolant topologique | 10 |
| 1.3 L'invariance par renversement du temps et un nouvel ordre topologique . . | 12 |
| 1.3.1 Les isolants topologiques 2D | 12 |
| 1.3.1.1 L'invariance par renversement du temps | 12 |
| 1.3.1.2 L'invariant \mathbb{Z}_2 | 13 |
| 1.3.1.3 L'interaction spin-orbite | 14 |
| 1.3.1.4 L'Effet Hall Quantique de Spin | 15 |
| 1.3.2 Les isolants topologiques 3D | 17 |
| 1.3.2.1 Les indices topologiques pour les isolants 3D | 17 |
| 1.3.2.2 Les premiers isolants topologiques 3D | 18 |
| 1.3.2.3 Expériences sur le transport | 19 |
| 1.3.2.4 Intérêt de l'étude des isolants topologiques | 19 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2 | Le système HgTe/CdTe | 23 |
| 2.1 | Structure de bandes électroniques des semiconducteurs à gap étroit | 24 |
| 2.1.1 | Modèle à deux bandes et équation $\vec{k} \cdot \vec{p}$ | 24 |
| 2.1.2 | Modèle de Kane | 26 |
| 2.1.2.1 | Bandes près du point Γ pour les composés de type Zinc blende : sans interaction spin-orbite | 27 |
| 2.1.2.2 | Modèle de Kane avec interaction spin-orbite | 27 |
| 2.1.2.3 | Matériaux à gap d'énergie négatif | 30 |
| 2.2 | Structures de bandes HgTe et CdTe | 30 |
| 2.2.1 | Les bandes électroniques HgTe et CdTe | 31 |
| 2.2.2 | Ouverture d'un gap dans HgTe par désaccord de maille | 32 |
| 2.2.3 | Jonction HgTe/CdTe et états de surfaces topologiques | 34 |
| 2.3 | La croissance HgTe par MBE | 36 |
| 2.3.1 | Introduction | 36 |
| 2.3.2 | Croissance et caractéristiques des matériaux | 36 |
| 2.3.2.1 | Les substrats de croissance HgTe/CdTe pour MBE | 36 |
| 2.3.2.2 | L'orientation cristalline de la surface | 36 |
| 2.3.2.3 | Contrôle de température durant la croissance | 37 |
| 2.3.3 | Structure type et caractérisation par rayon X | 37 |
| 2.3.3.1 | Paramètre de maille et gap d'énergie de HgCdTe | 37 |
| 2.3.3.2 | Caractérisation de la structure par rayon X | 38 |
| 2.3.3.3 | Les structures HgTe/CdTe conçue au CEA LETI | 42 |
| 2.3.3.4 | Structures sous contrainte uniforme | 44 |
| 2.4 | Mesures de structures de bandes ARPES | 46 |
| 2.4.1 | Principes de l'ARPES | 46 |
| 2.4.1.1 | Profondeur de la surface d'étude par ARPES | 48 |
| 2.4.1.2 | Intensité du signal | 49 |
| 2.4.1.3 | Reconstruction de la structure de bande | 50 |
| 2.4.2 | États de surfaces sur les isolants topologiques 3D | 51 |
| 2.4.3 | États de surfaces sur les structures HgTe/CdTe | 51 |
| 2.4.3.1 | Échantillons de mesure et traitement des surfaces sous ARPES | 51 |
| 2.4.3.2 | Structures de bande de surface de HgTe | 52 |
| 2.4.3.3 | Comportement du spectre ARPES avec la température et point de Dirac | 52 |
| 2.4.3.4 | Localisation des états de surface HgTe | 53 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3 | Échantillons et dispositif de mesure. | 55 |
| 3.1 | Fabrications échantillons | 57 |
| 3.1.1 | Les barres de Hall | 57 |
| 3.1.1.1 | Fabrication des échantillons | 57 |
| 3.1.1.2 | Application aux structures HgTe/CdTe | 59 |
| 3.1.2 | Effet de grilles | 60 |
| 3.1.2.1 | Fabrication des grilles | 60 |
| 3.1.2.2 | Test de grille | 61 |
| 3.2 | Mesures | 63 |
| 3.2.1 | Cryogénie | 63 |
| 3.2.2 | Mesures magnétique | 64 |
| 3.2.2.1 | Canne de mesures | 64 |
| 3.2.2.2 | Acquisition | 65 |
| 4 | Magnétotransport | 67 |
| 4.1 | Résistance et évolution avec la température. | 69 |
| 4.1.1 | Résistance en fonction de la température pour HgTe avec contrainte cristallographique maximale | 69 |
| 4.1.2 | Résistance en fonction de la température pour HgTe avec contrainte cristallographique de 0,146% | 70 |
| 4.2 | Magnétorésistance et effet Hall bas champ | 70 |
| 4.2.1 | Comportement ambipolaire | 70 |
| 4.2.2 | Conductivité et effet d'écrantage | 73 |
| 4.2.2.1 | partie électronique | 74 |
| 4.2.2.2 | zone de saturation | 75 |
| 4.2.2.3 | partie trou | 76 |
| 4.3 | Oscillation Shubnikov de Haas et comportement 2D | 77 |
| 4.3.1 | Introduction | 77 |
| 4.3.2 | Oscillation de résistance pour une structure de type Dirac | 77 |
| 4.3.3 | Oscillation de Shubnikov de Haas en résistance dans les isolants topologiques 3D et dans les structures HgTe | 78 |
| 4.3.3.1 | Oscillation de surface dans les isolants topologiques 3D | 78 |
| 4.3.3.2 | Oscillation de surface dans les structures HgTe développé au CEA LETI | 78 |
| 4.3.3.3 | Phase de Berry | 81 |
| 4.4 | Antilocalisation faible | 84 |

| | | |
|---|--|------------|
| 4.4.1 | Introduction | 84 |
| 4.4.2 | Soustraction de la composante classique | 86 |
| 4.4.2.1 | Modèle de Drude à un porteur de charge | 86 |
| 4.4.2.2 | Modèle de Drude à deux types de porteurs | 87 |
| 4.4.2.3 | Soustraction du comportement classique par le modèle de Drude à deux porteurs | 87 |
| 4.4.3 | Évolution en température | 89 |
| 4.4.4 | Évolution en tension de grille | 90 |
| 4.5 | Effet Hall Quantique | 93 |
| 4.5.1 | Les niveaux de Landau d'une relation de dispersion linéaire | 93 |
| 4.5.2 | Les états de Hall quantique dans les structures HgTe/CdTe | 94 |
| 4.5.3 | Observations des états de Hall quantique dans les structures HgTe/CdTe du CEA LETI | 95 |
| 4.5.4 | Possible quantification des surfaces topologique dans HgTe/CdTe | 97 |
| 4.5.5 | un état isolant à fort champ magnétique. Ouverture d'un gap en énergie de l'état $n = 0$? | 99 |
| Conclusion | | 101 |
| A Modèle de Kane | | 103 |
| A.1 | La renormalisation de Löwdin | 103 |
| A.2 | Matrice de Kane sans interaction spin-orbite | 104 |
| A.3 | Matrice de Kane avec interaction spin-orbite | 108 |
| A.3.1 | Nouvelle base | 108 |
| A.3.2 | Modèle de Kane | 108 |
| B Canne de rotation et porte échantillon Kyocera-LCC32 | | 111 |
| B.1 | Canne de rotation | 111 |
| B.2 | Porte échantillon Kyocera | 113 |
| C Effet géométrique de la grille | | 115 |
| Bibliographie | | 117 |

Liste des tableaux

| | | |
|-----|--|-----|
| 2.1 | Valeurs du terme spin-orbite en eV pour quelques éléments de la classification périodique trouvées en référence [Herman <i>et al.</i> , 1963] | 28 |
| 2.2 | Paramètres de bande du modèle de Kane pour les structures HgTe/CdTe | 34 |
| 2.3 | Ensemble de structures à base de HgTe/CdTe conçues | 43 |
| 4.1 | Valeurs des constantes de déplétion pour chaque composante des périodes des oscillations de Shubnikov de Haas, $n = \alpha V_g$. B_0 correspond aux pentes des différentes courbes de la figure 4.9 | 80 |
| 4.2 | Loi de puissance pour la longueur de cohérence | 90 |
| A.1 | Paramètres de bandes pour certains composés covalents cubique face centrée | 107 |
| C.1 | Permittivité diélectrique de $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ | 116 |

Table des figures

| | | |
|------|--|----|
| 1.1 | Représentation de l'effet Hall classique | 4 |
| 1.2 | Mesures des résistances de Hall et longitudinale sous l'effet Hall Quantique Entier | 5 |
| 1.3 | Bandes de niveaux de Landau dans une section transverse d'un gaz d'électron | 6 |
| 1.4 | Classification des surfaces fermées orientées suivant leur genre | 8 |
| 1.5 | Représentation d'un ruban classique et d'un ruban de Moebius | 9 |
| 1.6 | Représentation de la zone de Brillouin en 2D | 13 |
| 1.7 | Illustration des différents type de topologie possible dans le cas de la conservation de la symétrie par renversement du temps en 2D. | 14 |
| 1.8 | Structures de bandes en énergie d'un puits quantique CdTe/HgTe/CdTe . | 15 |
| 1.9 | Evolution des bandes en énergie dans le puits quantique en fonction de l'épaisseur du puits | 16 |
| 1.10 | Résistance longitudinale quatre points dans le cas d'un puits quantique CdTe/HgTe/CdTe dans le régime normal ou dans le régime inversé | 17 |
| 1.11 | Cercles de Fermi dans la zone de Brillouin de la surface | 18 |
| 1.12 | Expérience ARPES montrant les états de surfaces dans $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ | 19 |
| 1.13 | Mesures d'ARPES d'une dispersion de bandes de surface électroniques sur Bi_2Se_3 | 20 |
| 1.14 | Mesures ARPES réalisées sur des surfaces Bi_2Se_3 et Bi_2Te_3 | 21 |
| 2.1 | Modèle à deux bandes d'un semi-conducteur à gap étroit | 25 |
| 2.2 | Bandes d'énergies suivant le modèle de Kane sans couplage spin-orbite . . | 28 |
| 2.3 | Bandes d'énergies suivant le modèle de Kane avec couplage spin-orbit . . . | 30 |
| 2.4 | Maille élémentaire de HgTe et zone de Brillouin d'un empilement cubique face centrée | 31 |
| 2.5 | Bandes électroniques de HgTe et CdTe | 32 |
| 2.6 | Numérisation bandes de volume et de surface sur HgTe | 35 |
| 2.7 | Bâti de croissance HgTe/CdTe | 36 |

| | | |
|------|--|----|
| 2.8 | paramètre de maille et valeur du gap en énergie en fonction de la fraction Cd | 38 |
| 2.9 | Réflexion de Bragg | 39 |
| 2.10 | Figure de diffraction X pour une croissance HgTe sur substrat CdZnTe selon l'orientation [211] | 40 |
| 2.11 | Figure de diffraction X pour un substrat CdTe et Cd _{0,959} Zn _{0,041} Te | 41 |
| 2.12 | Schéma de différentes contraintes pour une couche épitaxiée sur un substrat | 44 |
| 2.13 | Cartographie de rayon X, HgTe contraint | 45 |
| 2.14 | Modèle de photoémission à trois pas | 46 |
| 2.15 | Schéma d'une expérience ARPES | 47 |
| 2.16 | Libre parcours moyen inélastique d'un électron photoémis dans un cristal . | 49 |
| 2.17 | Rotation de la surface | 50 |
| 2.18 | Structure de bande des états de surface sous spectre ARPES | 52 |
| 2.19 | Effet de la température sur les spectres ARPES des états de surface | 53 |
| 2.20 | Spectres ARPES des états de surfaces en fonction de l'énergie incident $h\nu$ des photons | 54 |
| 3.1 | Structures typiques des échantillons avec grille CdTe amorphe sur HgTe/CdTe | 57 |
| 3.2 | Barres de Hall réalisée par lithographie optique | 58 |
| 3.3 | Principe de lithographie optique, gravure chimique et évaporation | 59 |
| 3.4 | Étape de gravure et dépôt métallique pour les contacts ohmiques | 59 |
| 3.5 | Étape de lithographie pour la conception de la grille | 60 |
| 3.6 | Schéma électrique de tests de grille | 61 |
| 3.7 | Mesure du courant de fuite des grilles | 62 |
| 3.8 | Dispositif cryogénique : Bobine 17 T et VTI Oxford | 64 |
| 3.9 | Calibration de l'angle de la canne de rotation | 65 |
| 3.10 | Schéma électrique sur les barres de Hall mesurées | 66 |
| 4.1 | Loi en température des structures en HgTe/CdTe avec contrainte cristallo-graphique maximale | 70 |
| 4.2 | Évolution en température de la conductivité pour des structures CdTe/HgTe avec une contrainte cristallographique de 0,146% | 71 |
| 4.3 | Comportement ambipolaire de l'état de surface. | 72 |
| 4.4 | Évolution $\frac{1}{R_H}$ en fonction de la grille V_g | 73 |
| 4.5 | conductivité de la surface HgTe | 74 |
| 4.6 | Mise en évidence d'un gaz d'interface | 75 |
| 4.7 | Proportion des charges dans le gaz d'électron d'interface et sur la surface de HgTe | 76 |

| | | |
|------|---|-----|
| 4.8 | Oscillations Shubnikov de Haas à différentes tensions de grille. | 79 |
| 4.9 | Fréquence des oscillations Shubnikov de Haas à différentes tensions de grille | 80 |
| 4.10 | Fréquence des oscillations Shubnikov de Haas à différents angles | 81 |
| 4.11 | cartographie (B, V_g) de la dérivée de la magnétoconductance par rapport au champ magnétique | 82 |
| 4.12 | Diagramme des indices de Landau | 83 |
| 4.13 | Chemin de boucles des fonctions d'ondes électroniques | 84 |
| 4.14 | Conductance longitudinale et de Hall pour un ensemble de température et de tensions de grille | 88 |
| 4.15 | conductance longitudinale et de Hall et modèle de Drude à deux bandes . . | 89 |
| 4.16 | Magnétoconductance soustraite de la composante | 90 |
| 4.17 | Pic d'antilocalisation de la conductance | 91 |
| 4.18 | paramètres du modèle d'antilocalisation pour une tension de 6V | 92 |
| 4.19 | paramètres numériques α et B_ϕ provenant du modèle théorique pour l'an- tilocalisation faible. | 92 |
| 4.20 | Niveau de Landau en fonction du champ magnétique B pour une vitesse de fermi $v_F = 4,06 \cdot 10^5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ | 93 |
| 4.21 | schéma d'un empilement d'isolant topologique 3D | 94 |
| 4.22 | cartographie couleur de la résistance longitudinale ρ_{xx} dans le plan (B, V_g) | 96 |
| 4.23 | cartographie couleur de la résistance de Hall ρ_{xy} dans le plan (B, V_g) | 97 |
| 4.24 | résistance de Hall en fonction de V_g pour différentes valeurs de champ magnétique | 98 |
| 4.25 | résistivité longitudinale et de Hall en fonction de la tension de grille | 99 |
| 4.26 | conductance de Hall et résistivité longitudinale en fonction de la tension de grille V_g à plusieurs valeurs de champ magnétiques | 100 |
| B.1 | Bas de la canne de rotation mécanique | 112 |
| B.2 | Photographie de la partie supérieure du module de rotation | 112 |
| B.3 | Porte échantillon Kyocera LCC32 | 113 |
| C.1 | Shéma du modèle capacitif de grille | 115 |

Introduction

L'un des thèmes fondamentaux que nous rencontrons en matière condensée, quelque soit le domaine, est la classification des phases de la matière que nous étudions. Quand bien même la plupart des matériaux que nous observons sont constitués des mêmes éléments, à savoir d'électrons et de noyaux atomiques, leurs propriétés peuvent être totalement différentes. Comment se fait-il que l'aluminium en dessous d'une certaine température devient supraconducteur, alors que le fer est ferromagnétique à température ambiante ? Comment définir ces phases, et même, de manière générale, comment les caractériser dans un cadre général ?

L'une des idées premières qui a émergé afin de classer les états de la matière et leurs transitions que les expérimentateurs observaient, était de considérer que chaque phase possédait une certaine symétrie et qu'une transition ne se produisait seulement par l'apparition d'une brisure spontanée de symétrie. Ce concept initié par Landau a permis de mieux comprendre les différents phénomènes observés comme par exemple le ferromagnétisme ; un matériau transite d'une phase paramagnétique en une phase plus ordonnée dite ferromagnétique en brisant la symétrie $SU(2)$ des moments magnétiques propres au matériau. Les moments magnétiques n'ayant, en moyenne, pas de direction propre dans la phase paramagnétique (la phase est donc invariante par la symétrie de rotation), choisissent une directions privilégiée une fois dans la phase ferromagnétique, la symétrie de rotation n'est plus conservée, elle est brisée. Cette brisure spontanée de symétrie explique également la transition normal-supraconducteur (brisure spontanée de symétrie $U(1)$) existant dans certain matériau comme l'aluminium.

Pourtant, cette image où chaque phase est gouvernée par une certaine relation d'ordre et que les transitions entre phases ne sont que des brisures de ces symétries, a commencé à trouver sa limite avec la découverte d'une nouvelle phase, celle de l'effet Hall quantique par Klitzing *et al.* [1980]. Durant une trentaine d'années, l'étude de cette phase a abouti à reconsidérer le paradigme de classification non plus sur un ordre symétrique mais plutôt comme un ordre *topologique* (Thouless *et al.* [1982]), Kohmoto [1985]). En effet, l'état responsable de l'effet Hall quantique ne brise aucune symétrie, mais par contre définit un ordre topologique dans le sens que les propriétés fondamentales qui le caractérisentⁱ ne sont pas perturbées par des changements locaux du matériaux excepté durant une transition de phase.

i. Les phases de l'effet Hall quantique ne sont ni plus ni moins des isolants avec la particularité d'avoir des états de bords conducteurs particulièrement robustes puisqu'ils ne disparaissent pas en présence de désordre.

L'effet Hall Quantique est resté une phase relativement unique puisqu'elle était la seule pouvant être décrite par un ordre topologique. Cependant, depuis cinq ans, de nouvelles phases topologiques ont émergées dans le domaine de la matière condensée (Kane et Mele [2005], Kane et Mele [2005], Bernevig *et al.* [2006], Moore et Balents [2007], Roy [2009]) avec une confirmation expérimentale de leur existence (Hsieh *et al.* [2008a], Xia *et al.* [2009], König *et al.* [2007], Brüne *et al.* [2011], Sacépé *et al.* [2011]). Ces phases sont étroitement reliées à l'effet Hall quantique, dans le sens où leurs observations sont réalisées sur des isolants avec l'existence d'états aux bords (canaux de conduction 1D pour des système 2D et surface métallique pour des systèmes 3D) particulièrement robustes aux déformations. La nuance, toutefois, par rapport aux phases de Hall quantique vient de la conservation de la symétrie par renversement du temps dans ces nouvelles phases.

L'étude de ces phases est d'un grand intérêt tant au point de vue fondamental, puisqu'elle permettrait de réaliser des quasiparticules encore non observées à ce jour comme les fermions de Majorana (Hasan et Kane [2010]), qu'applicatif, puisque les états de bords conducteurs par leur robustesse topologique et leur propriétés intrinsèques concernant le spin permettraient de faire émerger de nouvelles possibilités en spintronique. Toutefois, l'étude expérimentale et la caractérisation de ces nouveaux isolants topologiques restent encore jeunes et des défis de mesures restent à réaliser ; notamment dans l'élaboration et la caractérisation des isolants topologiques dits 3D. Ces isolants dont la surface est conductrice avec des propriétés électroniques ressemblant à celle du graphène est prometteuse puisqu'une famille riche de matériaux a déjà été élaborée ; mais les expériences de transports électroniques sous champ magnétique ne donnent pas toutes les prédictions attendues.

C'est pour celà que durant cette thèse, je me suis concentré sur la caractérisation du transport sous champ magnétique d'un des matériaux prédit être isolant topologique, une jonction à base de CdTe/HgTe. Nous verrons dans un premier temps les propriétés intrinsèques qui caractérisent un isolant topologique en partant de l'effet quantique entier. J'aborderai ensuite la conception et l'élaboration des états de surfaces présents dans les structures CdTe/HgTe conçu aux CEA Leti, ainsi que la caractérisation de ces bandes de surfaces. Je traiterai par la suite l'élaboration des échantillons nécessaires à la caractérisation ainsi que la mise en oeuvre expérimentale pour la mesure des propriétés de magnéto-transport dans ces structures. Je finirai ensuite par les propriétés de magnéto-transport obtenues sur ces échantillons afin de tenter de donner quelques réponses sur les états de surfaces topologiques présents sur les structures CdTe/HgTe.

Chapitre 1

Les isolants topologiques

Si nous devions simplement classer les matériaux suivant leurs propriétés électriques, nous pourrions, dans les grandes lignes, les réduire à deux grandes familles : les isolants et les conducteurs du courant électrique. L'un permettra un déplacement de charges lorsque l'on impose une différence de potentiel électrique tandis que les éléments de l'autre famille en sont tout simplement incapables. Le classement des matériaux dans l'une de ces familles trouve son explication dans la mécanique quantique des solides. Cette dernière considère les propriétés de l'électron par une fonction d'onde $\Psi_{\vec{k}}$ soulignant les symétries de translation du cristal. On se retrouve donc à justifier ces deux grandes familles par les propriétés des bandes d'énergies du cristal ; est isolant un matériau dont les bandes d'énergies sont complètement remplies ou complètement vides ; est conducteur un matériau dont les bandes ne sont que partiellement remplies. Cependant, cette image est fort bien réductrice et ne décrit pas entièrement la diversité de certains matériaux exotiques. Cette image ne tient pas compte, par exemple, des propriétés de la fonction d'onde $\Psi_{\vec{k}}$ aux bords de la zone de Brillouin d'un cristal. En effet, comment la phase de la fonction d'onde se recolle-t-elle à la limite de cette zone ? Ce recollement est-il robuste si on déforme légèrement la périodicité du cristal ? En 1980, la découverte d'un nouvel état de la matière a changé la donne. La découverte de l'Effet Hall Quantique Entier [EHQE] contredit la classification précédente en montrant que sous l'application d'un champ magnétique, certains matériaux avaient la possibilité d'être isolant excepté en leur interface. Cette propriété intrinsèque ne dépend pas de la structure de bandes elle-même mais des propriétés topologiques de la fonction d'onde $\Psi_{\vec{k}}$. L'une des particularités de l'Effet Hall Quantique Entier [EHQE] est l'absence de symétrie par renversement du tempsⁱ. La question qui se pose par la suite est : existe-t-il un tel ordre topologique qui respecte la conservation de la symétrie par renversement du temps ?

Dans cette partie introductive, nous verrons tout d'abord comment adapter l'interprétation de l'EHQE sous la formulation topologique. Je présenterai alors de quelle manière un nouvel ordre topologique peut être obtenu en considérant la conservation par renversement du temps. Finalement, je discuterai des différentes réalisations d'isolant topologique dit 3D et des différentes implications qui en découlent.

i. L'ajout d'un champ magnétique brise cette symétrie.

1.1 Le premier isolant topologique

1.1.1 L'effet Hall classique

L'effet Hall classique fut observé en 1879 par E. Hall. On observe une différence de potentielle [ddp] entre 2 bords d'un échantillon parcouru par une intensité I sous un champ magnétique B . Cette ddp vient de l'accumulation de charges sur les faces latérales (figure 1.1). Cette dernière a pour origine la force de Lorentz que subissent les électrons porteurs du courant électrique. Cette force va tendre à courber la trajectoire des électrons et les accumuler sur une certaine face. Il s'ensuit un champ électrique résultant entre les faces latérales. La tension électrique, dite de Hall, V_H mesurée va dépendre de la quantité de charges accumulées pour un métal simple. Il en résulte donc une résistance électrique transverse $R_{xy} = V_H/I$.

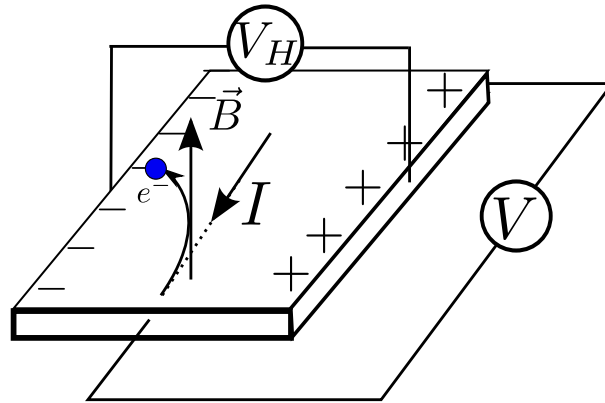


FIGURE 1.1 – Représentation de l'effet Hall classique d'un gaz métallique 2D sous l'effet d'un champ magnétique \vec{B} perpendiculaire à la surface. La force de Lorentz tend à courber la trajectoire des électrons engendrant une accumulation de charges de signes opposées sur les bords en vis-à-vis, provoquant une différence de potentiel V_H appelée tension de Hall.

Comment se comporte dans le régime stationnaire le mouvement des porteurs de charges dans les systèmes bidimensionnel ? Au centre de l'échantillon, l'électron possède une trajectoire cyclotron, puisque seule la force de Lorentz agit. Pour les électrons près des bords de l'échantillon, ils subissent également l'effet du champ électrique. Il en résulte une vitesse de dérive $v \approx \frac{E}{B}$. Bien entendu, suivant le sens du champ magnétique, la vitesse de dérive est inversée. Les électrons près du bords parcourent donc l'échantillon dans un sens ou dans l'autre suivant l'orientation du champ magnétique. Cette image classique constitue une excellente image de ce qui va se produire lorsque la valeur du champ magnétique augmentera et donc quand il faudra considérer les effets quantiques. En effet, plus le champ magnétique augmente, plus le rayon cyclotron des électrons diminue. Il devient alors impossible d'un point de vue quantique que l'électron ait une vitesse et une position bien définies. Il convient donc de quantifier le mouvement de l'électron dans un champ magnétique.

1.1.2 Effet Hall Quantique Entier

Comme dit précédemment, l'interprétation classique du mouvement des électrons à plus fort champ magnétique n'est plus valable ; il s'ensuit que des effets quantiques apparaissent et notamment la surprenante quantification de la résistance de Hall en des valeurs $h/e^2 i$ avec i entier. Cet effet fut la première fois observé par Klitzing *et al.* [1980]. Le tenseur de résistivité de l'échantillon devient hors diagonal puisqu'à la position des valeurs quantifiées de la résistance de Hall, la résistance longitudinale R_{xx} s'annule ; ce qui signifie que la rétrodiffusion des charges par les impuretés dans ces régimes est totalement absente. Plus surprenant encore, cet effet est robuste puisqu'il ne dépend pas directement du taux d'impuretés de l'échantillon. Il est toujours présent.

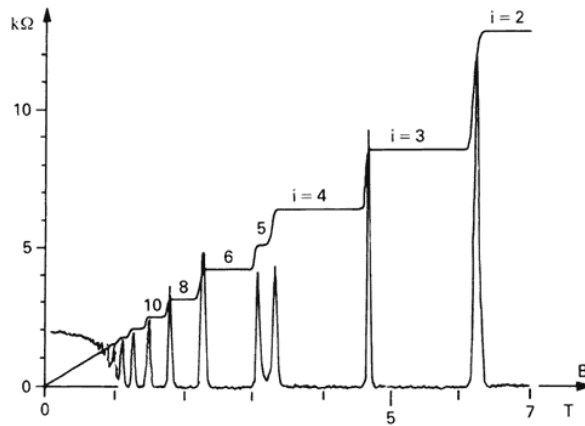


FIGURE 1.2 – Mesures des résistances de Hall et longitudinale mettant en évidence l'Effet Hall Quantique Entier. On observe l'apparition des plateaux dans la résistance de Hall à des valeurs de $h/e^2 i$ avec i entier. La résistance longitudinale s'annule sous les valeurs de champ magnétique où les plateaux de Hall apparaissent. La figure montre les plateaux pour $i = 2, 3, 4, 5, 6, 8, 10$. Donnée issue de Laughlin et al. [1998]

Nous allons voir que ces propriétés découlent de la quantification du mouvement des électrons dans un champ magnétique, et de l'apparition de canaux de conduction sur les bords de l'échantillon.

1.1.2.1 Quantification des niveaux de Landau

Pour un gaz 2D dans le plan (x, y) et en écrivant le potentiel vecteur \vec{A} du champ magnétique normal à l'échantillon \vec{B} suivant la jauge de Landau, l'Hamiltonien de l'électron s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m} ((p_x - eBy)^2 + p_y^2) + V(y) \quad (1.1)$$

où $V(y)$ est le potentiel aux bords l'échantillon. L'Hamiltonien H commute avec l'opérateur p_x , ce qui fait que $k_x = p_x/\hbar$ un bon nombre quantique. Ainsi, les fonctions d'onde propres de cet Hamiltonien peuvent s'écrire comme $\Psi(x, y) = e^{ik_x x} \psi_{k_x}(y)$.

On peut chercher les états propres de l'Hamiltonien qui vérifient l'équation (1.2) en réécrivant (1.1) avec $\omega_c = eB/m$ la pulsation cyclotron et $y_0 = -\hbar k_x/m\omega_c$ qui est, comme on le verra le centre du mouvement cyclotron de l'électron.

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{m}{2} \omega_c^2 (y - y_0)^2 + V(y) \right) \psi_{k_x, n}(y) = E_{k_x, n} \psi_{k_x, n}(y) \quad (1.2)$$

Cette équation (1.2) est celle d'un oscillateur harmonique de centre y_0 et de pulsation ω_c . Par conséquent $E_{k_x, n} = \hbar\omega_c(n + 1/2)$ avec n entier dans le cas où $V(y)$ est nulle (c'est-à-dire loin des bords). Les niveaux de Landau loin des bords sont régulièrement espacés en énergie de $\hbar\omega_c$ comme présentée à la figure 1.3.

Que se passe-t-il au niveau des bords? En première approximation, le potentiel moyen de l'opérateur $V(y)$ va augmenter en énergie les niveaux de Landau $E_{k_x, n} \approx \hbar\omega_c(n + 1/2) + \langle V(y_0) \rangle$, lorsque le centre du mouvement cyclotron y_0 sera près des bords de l'échantillon. Le spectre des niveaux de Landau suivant la tranche de l'échantillon, ressemblera à ce qui représenté à la figure 1.3.

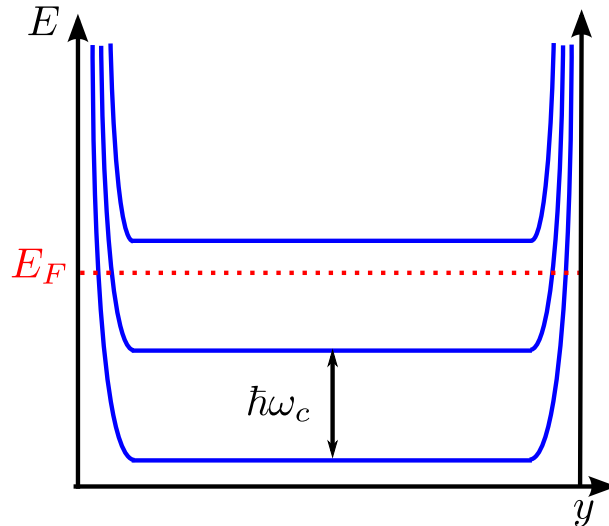


FIGURE 1.3 – Bandes de niveaux de Landau dans une section transverse d'un gaz d'électron. Si l'énergie de Fermi E_F est placée entre les niveaux de Landau, la surface devient isolante excepté aux bords où apparaissent des canaux de conduction.

La vitesse des électrons s'écrit comme

$$v_{n, k_x} = \frac{1}{\hbar} \frac{d E_{k_x, n}}{d k_x} = \frac{1}{\hbar} \frac{d E_{k_x, n}}{d y_0} \frac{d y_0}{d k_x} \quad (1.3)$$

Il en résulte que la vitesse de dérive des électrons sera nulle au centre de l'échantillon, non nulle aux bords et chirale (le signe de la vitesse est opposé suivant les faces en vis-à-vis du gaz d'électron). On retrouve l'image classique des électrons évoquée précédemment.

1.1.2.2 Les états de bords

Le courant électrique, dans le régime de l'Effet Hall Quantique Entier, est transporté uniquement par les canaux aux bords. Ces canaux ne peuvent rétrodiffuser les électrons et

donc créer une résistance longitudinale non nulle ; en effet, pour ce faire, il faudrait que la charge électrique après diffusion sur l'impureté, passe sur la face opposée. Cette séparation spatiale assure la robustesse des états de bords au désordre. L'une des autres propriétés de ces canaux, c'est qu'ils possèdent une conductance quantifiée en valeur entière de e^2/h . La conductance à l'énergie de Fermi du système correspondra à ie^2/h où n sera le nombre de niveaux de Landau remplis.

1.2 La topologie et l'effet Hall quantique entier

L'EHQE entier nous permet d'introduire la notion d'ordre de topologie, et une nouvelle interprétation de cet état de la matière. Nous allons voir quelles sont les propriétés qui en découlent pour ensuite se focaliser sur l'interprétation topologique du EQHE.

1.2.1 Notion de topologie

Le concept de Topologie en physique pour considérer les états de la matière a été introduit par Thouless. La topologie se soucie peu de la conservation des longueurs, des angles durant certaines transformations. Elles se focalisent sur des quantités globales qui restent invariantes par des déformations continues.

1.2.1.1 Genre des surfaces fermées

Par exemple, un tore peut être continuellement déformé en une tasse avec une anse, un ballon de football, en un ballon de rugby mais pas en tore. On remarque ainsi que l'ensemble des surfaces fermées et orientées peuvent être classé suivant leur genre (figure 1.4), c'est-à-dire par le nombre de trous qu'elles possèdent et qu'il est impossible par des déformations continues de passer de l'une à l'autre famille.

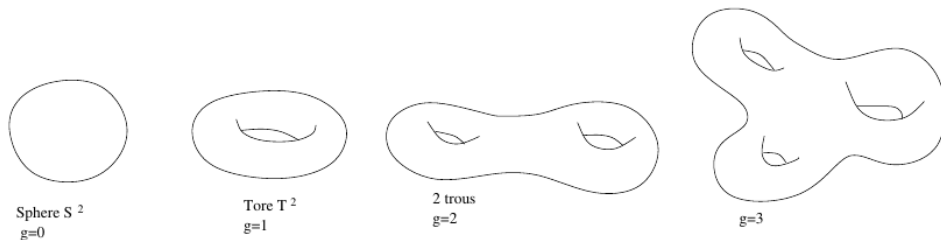


FIGURE 1.4 – Classification des surfaces fermées orientées suivant leur genre. $g = 0$ on obtient une sphère, $g = 1$ on obtient un tore.

La formule de Gauss–Bonnet (1.4) relie l'intégrale de courbure d'une surface au genre de la surface fermée. La courbure est une quantité géométrique qui varie si on change la surface en la déformant ; toutefois, son intégrale est reliée à une quantité qui est invariante par ses déformations.

$$2 - 2g = \frac{1}{2\pi} \iint_S \frac{1}{R} ds^2 \quad (1.4)$$

où g est le genre et $1/R$ la courbure locale de la surface.

L'un des cas simple est celui de la sphère, la courbure d'une sphère de rayon R est $1/R^2$, la forme intégrale donne donc l'angle solide d'une sphère entière 4π ; on trouve ainsi $g = 0$, la sphère n'a pas de trou.

1.2.1.2 Notion d'espace fibré et indice topologique

Afin de comprendre la notion d'indice topologique, imaginons les formes géométriques telles que celles d'un ruban simple et d'un ruban de Moebius. Ces formes géométriques peuvent être modélisées comme un cercle fermé que l'on peut paramétrer par un angle θ et à chaque angle θ on "colle" une droite (un espace vectoriel à une dimension) comme illustré sur la figure 1.5.

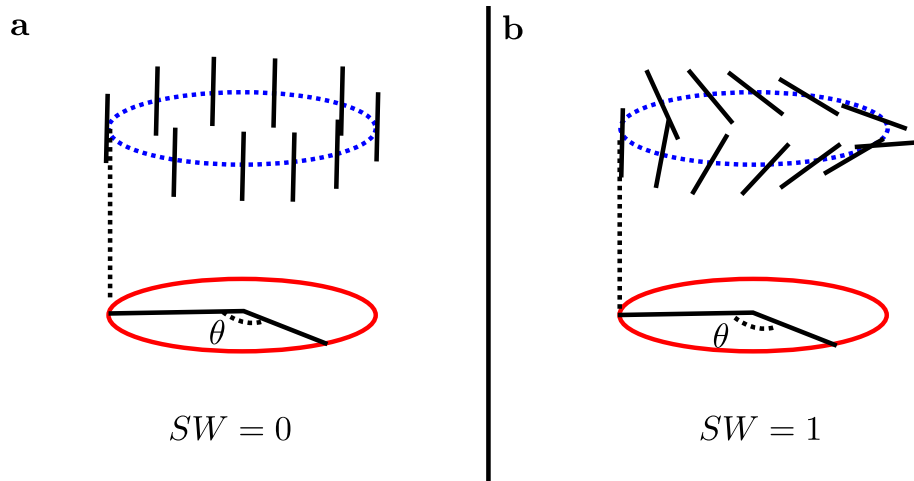


FIGURE 1.5 – **a** : Représentation d'un ruban classique. Chaque droite noire correspond à un espace vectoriel 1D. Tout ruban faisant un nombre pair de tour est topologiquement équivalent à un ruban classique $SW = 0$. **b** : Représentation d'un ruban de Moebius. Tout ruban faisant un nombre impair de demi-tour est topologiquement équivalent à un ruban de Moebius $SW = 1$.

A chacune des droites, on peut définir une base de dimension 1 \vec{u}_θ . Les différentes bases à chaque angle θ sont connectées entre elle par une fonction qu'on impose continue et différentiable dans l'exemple d'un ruban classique (figure 1.5 **a**), la fonction sera celle qui laisse le vecteur identique).

La question que l'on peut se poser est comment recoller les droites après un tour de cercle ($\theta \rightarrow \theta + 2\pi$) ? Dans ce cas,

- On peut imaginer recoller les droites identiquement. On se retrouve avec la forme d'un ruban classique, figure 1.5 **a**.
- On peut imaginer que la base définissant la droite à changer de signe après un tour complet, on se retrouve avec la forme d'un ruban de Moebius, figure 1.5 **b**.

Existe-t-il d'autres formes de ruban ?

On pourrait supposer que la droite a fait un trou complet après un tour complet pour θ , un tour et demi, etc... Cependant, d'un point de vue topologique, il a été montré par Stiefel-Whitney, que l'ensemble des rubans possibles ne pouvaient se classer qu'en deux grandes familles :

- celle d'un ruban classique
- celle d'un ruban de Moebius

L'ensemble des rubans est défini par ce qu'on appelle l'indice de Stiefel-Whitney. Celui-ci ne prend comme valeur que 0 ou 1. Il compte la parité du nombre de demi-tour que fait

un ruban. Si on recolle deux extrémités d'un ruban en faisant faire un tour complet, il est à nouveau possible de le déformer pour en faire un ruban avec aucun tour. Par contre si on recolle les extrémités après un demi-tour, on obtient un ruban de Moebius et il est impossible de le déformer pour en faire un ruban classique.

L'indice de Stiefel-Whitney tire son origine d'un outil mathématique que l'on nomme espace fibré (dans notre cas, il faut imaginer au dessus d'un espace de base, ici le cercle paramétré par θ , sur lequel on "colle" des fibres, les droites vectorielles de la figure 1.5).

Cette idée peut être étendue pour des espaces beaucoup plus génériques où par exemple l'espace de base est une sphère et les fibres, des espaces vectoriels de dimension quelconques. Il est ainsi possible de classer ces espaces avec un ensemble d'indices topologiques que l'on nomme les indices de Chern.

L'indice de Chern est crucial pour donner une interprétation topologique à des états de la matière comme l'EHQE.

1.2.2 L'Effet Hall Quantique Entier comme isolant topologique

Ce qui est surprenant, c'est que les propriétés de transport électrique peuvent être reliées à une quantité topologique de l'espace des états sous-jacents. La robustesse des états de bords de l'effet Hall Quantique peut être justifiée par un indice topologique, le premier indice de Chern.

En effet, la conductivité de Hall est reliée à l'intégrale d'une forme de "courbure" de l'espace sous-jacent. La formule de Kubo relie cette conductivité à l'intégrale de la courbure de Berry.

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} d\tilde{\mathbf{k}} \mathcal{F}(\tilde{\mathbf{k}}) = \frac{e^2}{h} n \quad (1.5)$$

A l'instar de la formule de Gauss reliant l'intégrale de courbure en genre des surfaces fermées les classifiant topologiquement, la conductivité de Hall donne une indication sur la topologie de l'espace sous-jacent. Thouless *et al.* [1982] [TKNN] ont montré que ce nombre n est quantifié en valeur entière dans le cas de l'effet Hall Quantique Entier et est relié au premier indice de Chern. L'espace fibré s' imagine en considérant la zone de Brillouin paramétrée par les vecteurs (k_x, k_y) sur laquelle on colle l'espace de Hilbert défini par la base des états propres des niveaux de Landau.

Ce nombre est relié à la quantité de niveaux de Landau rempli. Il peut être montré que chaque niveau de Landau possède un indice de Chern à 1. Si on remplit complètement n niveaux de Landau, le système possède un indice de Chern à n . Il est important de remarquer que le système se comporte comme un isolant mais non classique; l'isolant classique a les mêmes propriétés de bandes, c'est-à-dire que les bandes sont complètement remplies et séparées par un gap d'énergie, mais les bandes des niveaux de Landau possèdent un indice de Chern non triviale.

L'existence des canaux bords vient de l'impossibilité de déformer continuellement un isolant topologiquement non trivial en un trivial (les isolants conventionnels). Pour pouvoir continuellement passer de l'un à l'autre, il est nécessaire de faire disparaître le gap d'énergie

quelque part ; c'est ce qui se produit à l'interface entre le gaz d'électrons bidimensionnel dans une phase de Hall Quantique Entier et l'interface qui est isolant classique. Le fait que les bandes se relèvent à l'interface vient de la nécessité de casser le gap de volume entre l'isolant classique et l'isolant topologique.

La question suivante est de savoir s'il existe d'autres types d'isolants topologiques caractérisés par un indice topologique différent.

1.3 L'invariance par renversement du temps et un nouvel ordre topologique

L'isolant topologique tel l'EHQE a une contrainte supplémentaire ; il brise la symétrie par renversement du temps. L'existence d'un champ magnétique brise cette symétrie. Cette dernière change le signe de l'opérateur quantité de mouvement $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, et celui de spin $\vec{S} \rightarrow -\vec{S}$. Pour pouvoir retrouver un Hamiltonien identique à celui en (1.1) après ce changement de symétrie, il convient de changer $B \rightarrow -B$. Est-il donc possible de créer un isolant topologique qui converse cette symétrie ? Est-il possible d'obtenir des propriétés similaires de l'EHQE sans champ magnétique ?

Kane et Mele [2005] ont montré qu'il est possible d'obtenir un autre ordre topologique conservant la symétrie par renversement du temps en considérant un couplage spin-orbite. La clé pour comprendre cette nouvelle classe de topologie est d'examiner les propriétés qu'impose la symétrie \hat{T} par renversement du temps.

1.3.1 Les isolants topologiques 2D

1.3.1.1 L'invariance par renversement du temps

L'opérateur \hat{T} est un opérateur antiunitaire qui agit sur la fonction d'onde de l'électron sous la forme $\hat{T} = \exp i\pi/2\sigma_y\hat{K}$ où σ_y est une matrice de Pauli et \hat{K} l'opérateur complexe conjugué.

Pour des électrons de spin 1/2, nous obtenons une propriété essentielle : $\hat{T}^2 = -1$, ce qui veut dire que tous les états propres d'un Hamiltonien respectant cette symétrie sont doublement dégénérés. Pour s'en convaincre, imaginons un état propre ψ qui respecte cette symétrie. Dans ce cas, $\hat{T}\psi = \lambda\psi$ et $\hat{T}^2\psi = |\lambda|^2\psi = -\psi$, ce qui oblige $|\lambda|^2 = -1$ qui est impossible ; les états propres ne sont donc pas simplement dégénérés ; c'est la propriété de la dégénérescence de Kramer.

Dans le cas d'une fonction d'onde de spin 1/2 de la forme $\psi = (u_\uparrow, u_\downarrow)$ l'opérateur agit comme

$$\begin{cases} \hat{T}u_\uparrow = -u_\downarrow \\ \hat{T}u_\downarrow = u_\uparrow \end{cases} \quad (1.6)$$

Egalement un Hamiltonien de Bloch invariant sous \hat{T} doit respecter la propriété

$$\hat{T}H(\vec{k}) = H(-\vec{k})\hat{T} \quad (1.7)$$

ce qui implique d'une part que les états propres pour $-\vec{k}$ sont conjugués avec ceux \vec{k} et qu'ainsi les bandes d'énergie sont des images miroirs l'une de l'autre ; d'autre part, qu'en des points particuliers de la zone de Brillouin, les points Γ_i , les états sont doublement dégénérés. Pour ces points Γ_i (où $\vec{k} = \vec{0}$) définis au vecteur du réseau réciproque du cristal près, les états sont doublement dégénérés puisque $\hat{T}H(\vec{0}) = H(\vec{0})\hat{T}$, et donc que \hat{T} et H commutent.

La figure 1.6 montre la forme de la zone de Brillouin avec les points particuliers $\Gamma_0, \Gamma_1, \Gamma_2$ et Γ_3 où la dégénérescence est conservée.

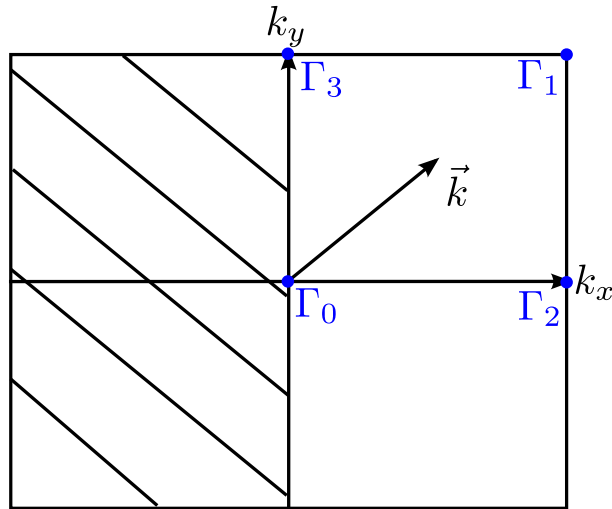


FIGURE 1.6 – Représentation de la zone de Brillouin en 2D. La zone hachée correspond aux états conjugués avec ceux en \vec{k} . Les points bleus correspondent aux points particuliers de la zone de Brillouin où les états sont doublements dégénérés.

1.3.1.2 L'invariant \mathbb{Z}_2

Dans le cas où la relation (1.7) est respectée, il est possible de classer les Hamiltoniens satisfaisant cette contrainte en deux classes distinctes topologiquement. Kane et Mele [2005] ont montré qu'il existait un invariant topologique prenant $\nu = 0$ ou 1 comme valeur pour caractériser les classes de topologie en 2 dimensions.

- Pour $\nu = 0$, l'isolant est tout simplement classique.
- Pour $\nu = 1$, l'isolant est alors topologique avec des états de bords dans le gap d'énergie.

Cet invariant est directement relié à la parité du nombre d'états de surface qui coupe l'énergie de Fermi. Les états de surfaces sont protégés topologiquement, pour s'en convaincre, on peut l'illustrer avec la figure 1.7.

Dans le cas de la figure figure 1.7 **a**, on obtient un isolant classique car on peut translater en énergie les bandes dans le gap d'énergie vers, soit la bande de conduction, soit de valence tout en respectant la contrainte de la dégénérescence aux point Γ_i . Il n'y a pas d'échange entre les doublets de Kramer.

Dans le cas de la figure figure 1.7 **b**, il est impossible par déformation de faire disparaître toute les bandes du gap d'énergie tout en respectant la contrainte de dégénérescence aux points Γ_i . Il y a échange des doublets de Kramer et c'est ce qui fait que les bandes de surface restent robustes topologiquement.

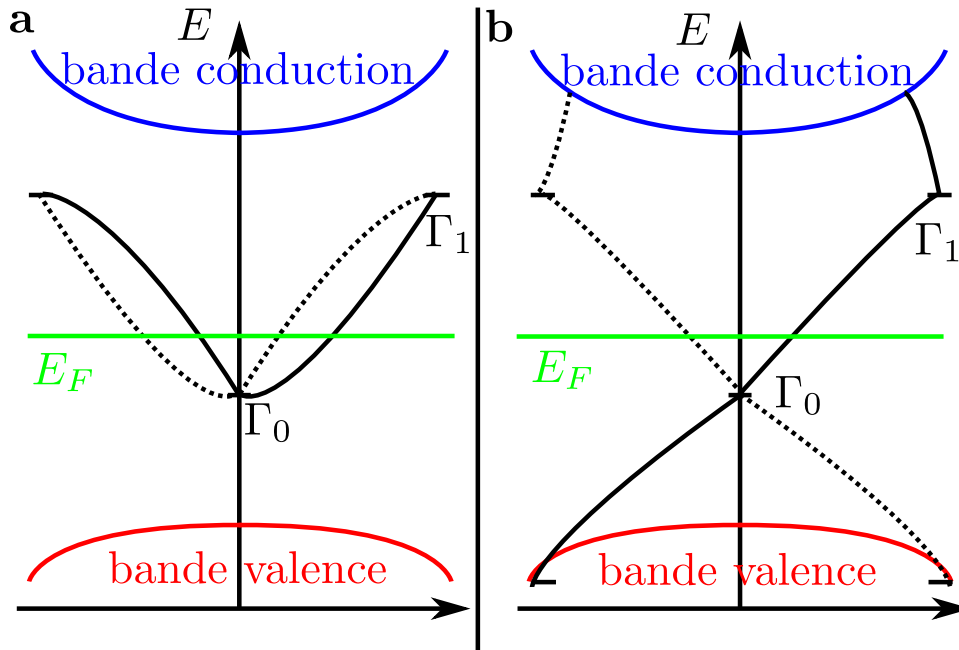


FIGURE 1.7 – Illustration des différents type de topologie possible dans le cas de la conservation de la symétrie par renversement du temps en 2D. Les bandes bleues sont les bandes de conduction. Les bandes rouges sont les bandes de valence. La ligne verte illustre la position en énergie de l'énergie de Fermi. **a** : Cas où le nombre de bandes croisant l'énergie de Fermi est paire. Les bandes dans le gap de volume ne seront pas protégées topologiquement. Il s'agit d'un isolant classique. **b** : Cas où le nombre de bandes croisant l'énergie de Fermi est impaire. Les bandes dans le gap de volume seront protégées topologiquement. Il s'agit d'un isolant topologique.

1.3.1.3 L'interaction spin-orbite

L'interaction spin-orbite est un élément crucial pour obtenir des isolants topologiques.

L'interaction spin-orbite est issue de l'approximation de l'équation de Dirac pour des vitesses faiblement relativistes (c'est-à-dire $v \ll c$). Il s'exprime comme :

$$H_{SO} = \frac{-\hbar}{2m^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\nabla} V) \quad (1.8)$$

où m est la masse de l'électron, \vec{p} sa quantité de mouvement et $\vec{\nabla} V$ la variation spatiale d'un potentiel électrique due aux atomes de la structure cristalline.

Plus le terme $\vec{\nabla} V$ sera grand et plus le couplage spin-orbite sera important. Plus le numéro atomique Z sera élevé, plus fort sera le couplage spin-orbite. Il est donc important de chercher des éléments lourds pour la conception d'isolants topologiques.

L'Hamiltonien d'interaction spin-orbite respecte bien la symétrie par renversement du temps puisque sous cet opérateur $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ et $\vec{\sigma} \rightarrow -\vec{\sigma}$, ce qui donne au final $-\vec{\sigma} \cdot (-\vec{p} \wedge \vec{\nabla} V) \rightarrow \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \wedge \vec{\nabla} V)$ et nous préservons H_{SO} .

1.3.1.4 L'Effet Hall Quantique de Spin

L'effet Hall Quantique de Spin [EHQS] a été prédit théoriquement par [Kane et Mele, 2005] en prenant en compte le couplage spin-orbite dans le graphène. Le graphène étant constitué d'un réseau en nid-abeille d'éléments carbone, le couplage spin-orbite est relativement faible (de l'ordre de 10^{-2} meV) et difficilement mesurable. Toutefois, Bernevig *et al.* [2006] donne un moyen expérimental de réaliser une transition de phase topologique entre un isolant normal et le régime de l'EHQS en faisant varier l'épaisseur d_c d'un puits quantique à base de HgTe.

La figure 1.8 **A** de Bernevig *et al.* [2006] montre les structures de bande électronique près du point Γ de la zone de Brillouin de volume d'un cristal CdTe isolant conventionnel, et d'un cristal HgTe semimétal à gap inversé.

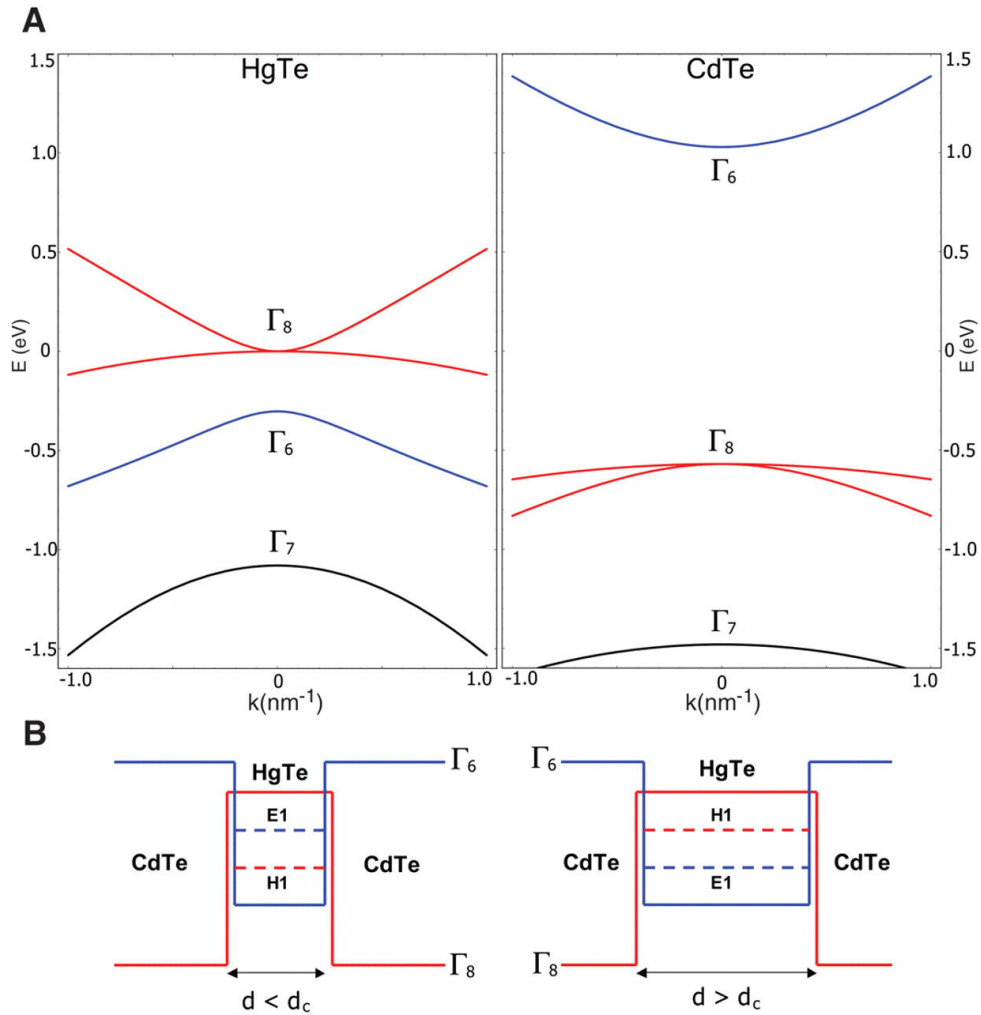


FIGURE 1.8 – Structures de bandes en énergie d'un puits quantique CdTe/HgTe/CdTe. **A** : structures de bandes électroniques d'un cristal CdTe et HgTe autour du point Γ de la zone de Brillouin. Ces bandes vont s'hybrider dû au confinement du puits quantique. **B** : ordres des structures de bandes E_1 et H_1 suivant l'épaisseur du puits. Pour $d < d_c$, le puits est dans le régime normal. Pour $d > d_c$, le puits est dans le régime inversé : il est alors isolant topologique 2D.

Dans le cas d'un puits quantique, les bandes Γ_6 et Γ_8 s'hybrident en deux sous-bandes E_1 et H_1 . La position de ces bandes en énergie dépend de la largeur du puits. Si la largeur du puits est inférieure à d_c , la bande E_1 se trouve au-dessus de la bande H_1 , ce qui constitue un puits quantique CdTe/HgTe/CdTe dans le régime normal. Par contre, pour une épaisseur supérieure à d_c , les bandes E_1 et H_1 s'inversent, ce qui forme le régime inversé. La figure 1.8 B schématise l'ordre des bandes en énergie suivant l'épaisseur du puits.

Ainsi en jouant sur l'effet du confinement sur la structure HgTe il est possible de faire transiter cette dernière entre isolant classique et un isolant topologique avec apparition de canaux de conduction polarisés en spin sur les bords de la structure et ce sans champ magnétique. Ce changement de régime est prédit pour une épaisseur $d_c = 6,3$ nm. Comme montré sur la figure 1.9 issue de [Bernevig *et al.*, 2006], une inversion en énergie de symétrie de bande s'obtient si l'épaisseur du puits dépasse d_c .

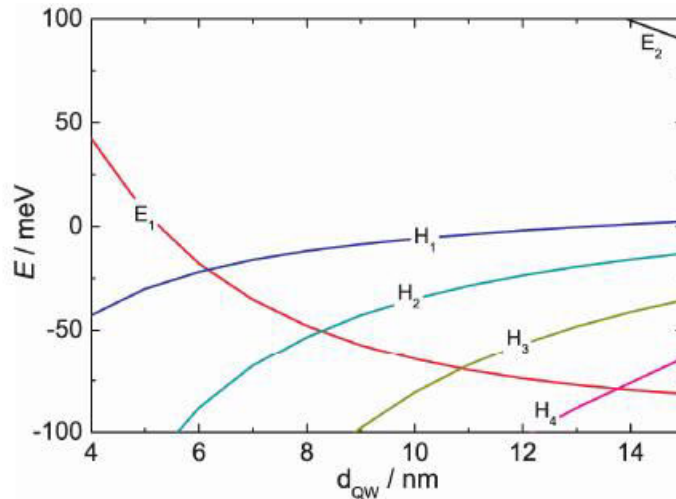


FIGURE 1.9 – Evolution des bandes en énergie dans le puits quantique en fonction de l'épaisseur du puits. H_1 et E_1 s'inverse en énergie pour une épaisseur critique $d_c = 6,3$ nm.

König *et al.* [2007] ont observé l'EHQS dans les puits quantiques HgTe. L'expérience montre l'existence d'un état isolant dont les bords conduisent le courant électrique avec une conductance quantifiée en valeur de $2e^2/h$.

La figure 1.10 montre l'évolution de la résistance longitudinale en 4 points en fonction de la tension de grille modulant l'énergie de Fermi à travers le puits pour différentes épaisseurs de celui-ci.

La courbe I noire pour une épaisseur de puits $d = 5,5$ nm, montre la saturation de la résistance à la limite du seuil de détection des appareils de mesures ce qui signifie un état isolant classique.

Les courbes II,III,IV (bleue, verte et rouge respectivement) pour une épaisseur $d = 7$ nm. Seul le rapport largeur sur épaisseur change et montre à mesure de la diminution de ces tailles, l'apparition d'une résistance résiduelle saturant à une valeur de conductance de $2e^2/h$, valeur attendue due aux canaux de conduction présents dans le régime de l'EHQS.

Le régime de l'état de Hall Quantique de Spin est une parfaite illustration d'un isolant topologique respectant la symétrie par renversement du temps en 2D. Cependant, puisque

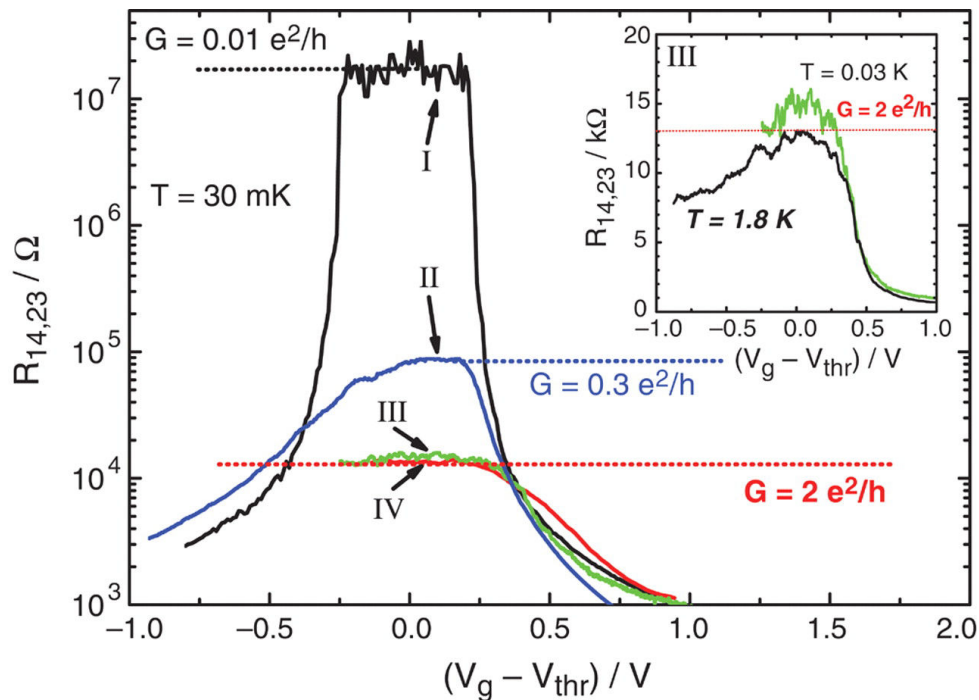


FIGURE 1.10 – Résistance longitudinale quatre points dans le cas d'un puits quantique CdTe/HgTe/CdTe dans le régime normal où dans le régime inversé en fonction de la tension grille. La courbe noire est la résistance pour une épaisseur de puits de $d = 5,5$ nm ce qui place le puits dans le régime normal. Les autres courbes sont pour une épaisseur de puits $d = 7$ nm plaçant le puits dans le régime inversé et faisant apparaître l'EHQS. En effet, plus la longueur et largeur des échantillons diminuent, plus la conductance 4 points tend vers une valeur limite de $2e^2/h$ signature de deux canaux de conduction.

l'ingrédient principal d'obtention d'un isolant topologique est l'inversion de bandes en énergie, rien ne pourrait contredire la possibilité de considérer l'existence d'isolants topologiques en 3D. C'est ce que nous allons par la suite développer.

1.3.2 Les isolants topologiques 3D

1.3.2.1 Les indices topologiques pour les isolants 3D

A partir de 2006, des analyses théoriques indépendantes ont découvert qu'il était possible d'étendre les considérations 2D des isolants topologiques à 3D ([Fu *et al.*, 2007], [Moore et Balents, 2007], [Roy, 2009]). L'extension à 3D définit un volume isolant et des surfaces conductrices.

Un isolant topologique 3D se caractérise par 4 invariants de type \mathbb{Z}_2 ($\nu_0, (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$).

La question est de savoir combien de fois la surface de Fermi va croiser les droites reliant chaque paire Γ_i , points où la dégénérescence des états est présente (il y a en a 8 dans le cas d'une zone de Brillouin en 3D). Entre chaque paires Γ_i , la surface de Fermi peut croiser soit un nombre pair, soit un nombre impair de fois la ligne les joignant comme illustré en figure 1.11

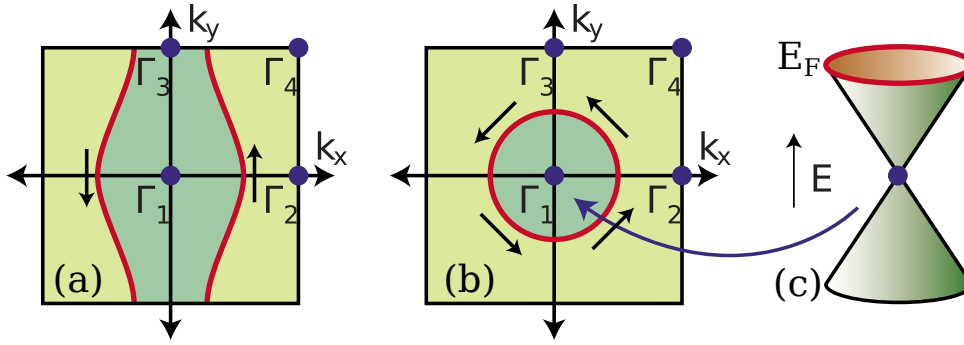


FIGURE 1.11 – **a** : Cercles de Fermi dans la zone de Brillouin de la surface dans le cas d'un isolant topologique faible. **b** : Cercles de Fermi dans la zone de Brillouin de la surface dans le cas d'un isolant topologique fort. **c** : relation de dispersion électronique de la surface autour d'un point de Dirac dans le cas d'un isolant topologique fort.

Dans le cas d'un nombre impair, les surfaces sont protégées (figure 1.11 **b**) ; dans le cas pair, non (figure 1.11 **a**).

Si les quatre indices ν_i sont nuls, nous nous retrouvons avec un isolant classique. Dans le cas où $\nu_0 = 1$, le nombre d'états de surfaces est impairs ; $\nu_0 = 0$ dans le cas contraire. Si $\nu_0 = 0$ et que l'un des autres indices est non nul, on peut représenter les états de surfaces comme un empilement élémentaire de phases de Hall Quantique de Spin dont la direction est définie par les trois indices (ν_1, ν_2, ν_3) tels les indices de Miller d'un plan cristallin. Ces états sont considérés comme des isolants topologiques faibles.

Dans le cas d'un isolant topologique fort, la surface de Fermi encercle un nombre impair de points de Dirac. Dans le cas le plus simple, les états de surfaces peuvent être décrit par un Hamiltonien de la forme suivante :

$$H_{\text{surface}} = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \wedge \vec{\nabla} \quad (1.9)$$

Il a été aussi souligné ([Fu *et al.*, 2007]) que les bandes électroniques de surface d'un isolant topologique sont similaires à celles du graphène avec la particularité que les états ne sont pas spin-dégénérés. La symétrie par renversement du temps impose que les états \vec{k} et $-\vec{k}$ aient leurs spins opposés. Ainsi, le spin tourne avec \vec{k} autour de la surface de Fermi comme montré en figure 1.11 **a,b**.

1.3.2.2 Les premiers isolants topologiques 3D

La première proposition théorique d'un isolant topologique 3D a été établie dans le $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ par Fu et Kane [2007a] où la théorie des bandes prédit un indice topologique non nul pour ν_0 . Les premières expériences sur l'ARPES ont été faites sur $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ (Hsieh *et al.* [2008a]) et ont montré la présence d'un nombre impair de cônes de Dirac à la surface.

D'autres expériences se sont basées sur Bi_2Se_3 et Bi_2Te_3 montrant non seulement la relation de dispersion d'un cône de type de Dirac à la surface (figure 1.13) mais également la polarisation en spin des états de surfaces (Xia *et al.* [2009], Hsieh *et al.* [2009a]) montrée à la figure 1.14.

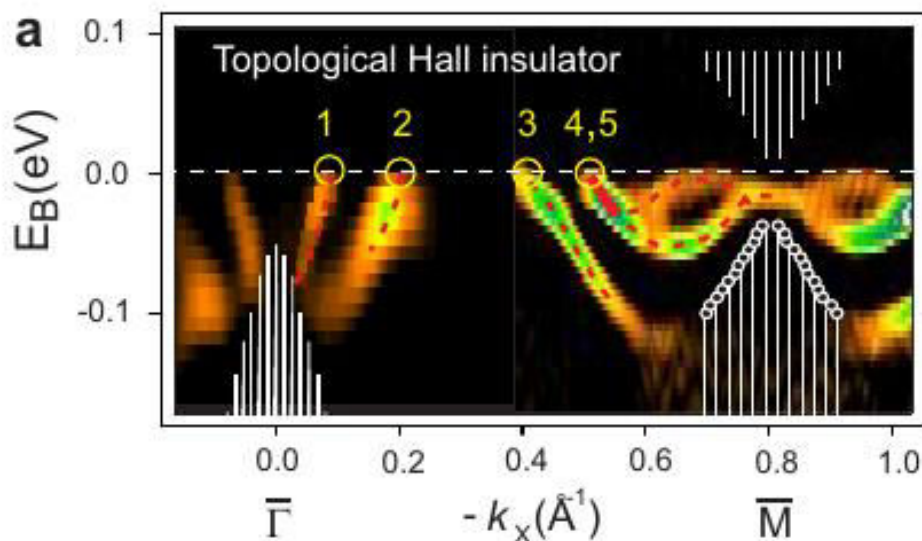


FIGURE 1.12 – Spectre ARPES montrant les états de surfaces dans $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$. Les bandes blanches correspondent aux bandes de volume. Les ronds jaunes définissent les états de surfaces croisant la surface de Fermi. On en compte 5, prouvant le caractère topologique du cristal. Les données sont issues de [Hsieh et al., 2008a]

En effet les états de surfaces obéissent à un Hamiltonien de la forme (1.9), le moment cristallin \vec{k} et le spin sont couplés. La polarisation du spin étant orthogonale à la direction du vecteur \vec{k} . Cette polarisation est visualisable à la figure 1.14 **e** et **g** où la fluctuation de l'intensité du signal ARPES résolu en spin le long d'une section à énergie constante du cône illustre la polarisation de l'état de surface.

1.3.2.3 Expériences sur le transport

Des expériences de transport ont également été réalisées montrant certaines propriétés spécifiques de certains isolants topologiques 3D comme une phase de Berry non triviale des états de surfaces (Sacépé *et al.* [2011], Kong *et al.* [2011a], Brüne *et al.* [2011]).

Cependant, ces expériences n'ont pas encore montré de manière nette que seule la surface contribue au transport électrique; le volume contribuant encore de manière non négligeable du à l'impossibilité de placer l'énergie de Fermi dans le gap de volume dans les structures à base de Bi_2Se_3 ou bien Bi_2Te_3 par exemple. L'apparition de plateaux de Hall quantique avec une quantification en $\sigma_{xy} = (n + 1/2)e^2/h$ prouvant la présence d'un cône de Dirac non dégénéré sur la surface topologique n'a pas encore été observé à ce jour.

1.3.2.4 Intérêt de l'étude des isolants topologiques

Les isolants topologiques ont un intérêt substantiel concernant la spintronique; en effet, la possibilité d'obtenir des états de surface robuste et dont la polarisation en spin est conservée permettrait de la réaliser à température ambiante (celà dépendrait seulement du gap en énergie de la structure, les états de surfaces étant toujours présents).

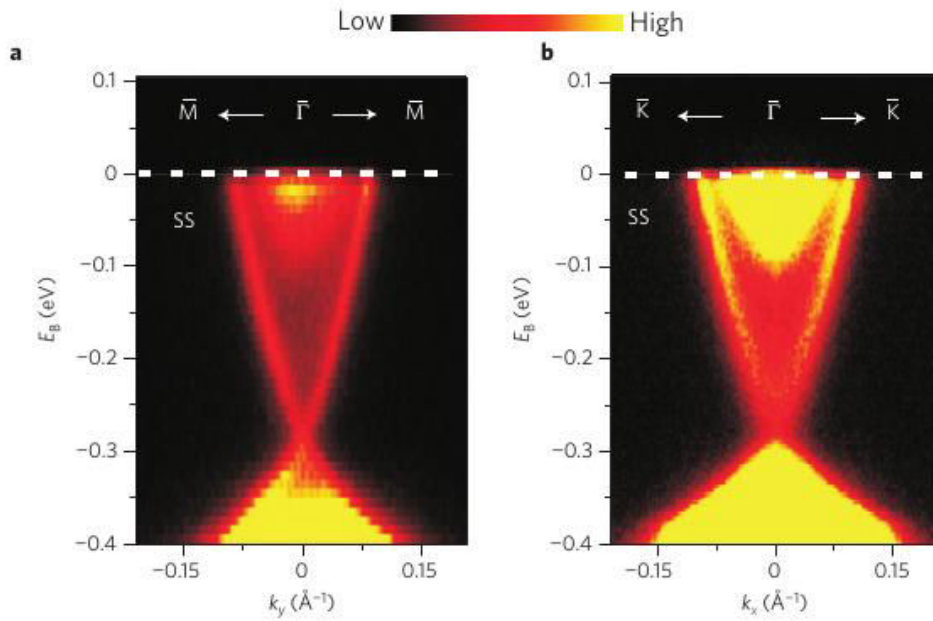


FIGURE 1.13 – Mesures d’ARPES d’une dispersion de bandes de surface électroniques sur Bi_2Se_3 . On observe les états de surface conique dans le gap d’énergie du semiconducteur ainsi que les bandes de volume pour $E_B > -0,1 \text{ eV}$ et $E_B < -0,3 \text{ eV}$. Les données sont issues de [Xia et al., 2009]

Mieux, le transport cohérent d’un électron unique entre deux boîtes quantiques serait également envisageable. En effet à l’heure actuelle, il est possible de transporter un électron unique à travers un canal reliant deux boîtes quantiques au moyen d’une onde sonore (Hermelin *et al.* [2011]). La réalisation d’un tel système avec un isolant topologique permettra le transport du spin de l’électron, sans relaxation, entre ces deux boîtes quantiques.

Mon travail a été de mettre en évidence que des structures à base de HgTe/CdTe se comportaient de telle façon à obtenir une surface topologique respectant la symétrie par renversement. Ce travail illustrera la présence d’une surface robuste topologiquement à la jonction entre un isolant classique CdTe et un isolant topologique HgTe et donnera les premiers résultats en magnéto-transport obtenus sur cette famille d’isolants topologiques.

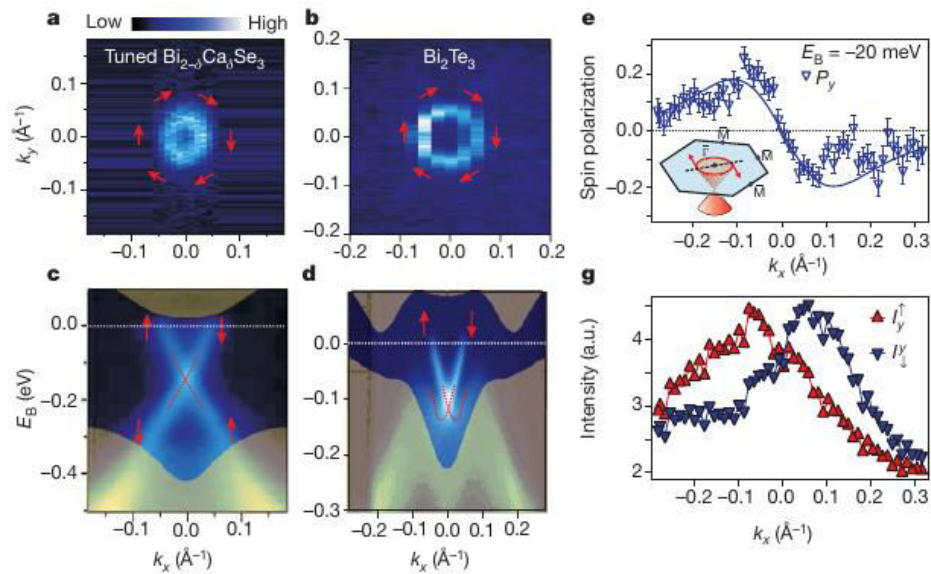


FIGURE 1.14 – Mesures ARPES réalisées sur des surfaces Bi_2Se_3 et Bi_2Te_3 . **a,b** : section en énergie de l'état de surface autour du point Γ de la zone de Brillouin pour Bi_2Se_3 et Bi_2Te_3 . Les flèches rouges illustrent la polarisation du spin autour du cône. **c,d** : structures de bandes de surface électronique pour les deux cristaux. En jaune sont montrés les bandes de volumes des cristaux. **e,g** : fluctuation de l'intensité du signal ARPES autour d'une section de cône en considérant un faisceau de photons incidents polarisés circulaires gauche ou droite. Cette fluctuation est une signature de la polarisation en spin du cône de surface.

Chapitre 2

Le système HgTe/CdTe

Les structures à base de HgTe/cdTe s'avèrent être de bons candidats pour l'élaboration d'un isolant topologique 3D. En effet, prédit par Fu et Kane [2007a], HgTe étant un matériau à gap inversé, il serait possible par continuité des bandes à l'interface avec un isolant classique de type CdTe de créer des états de surface protégés topologiquement à l'interface. Toutefois, HgTe en l'état est un semimétal, et les états de surface ne seraient pas vraiment protégés puisque ces derniers seraient écrantés par les contributions des bandes de volume. Il est cependant possible de générer un gap de volume dans HgTe en appliquant une contrainte uniaxiale qui permettrait d'obtenir des états de surface à l'interface protégés topologiquement. Dans ce chapitre, nous allons développer le modèle théorique de Kane afin de comprendre le comportement des structures de bandes en volume des structures de type Zinc-blende. Nous allons voir que ce modèle permet de prédire les structures de surface à l'interface de HgTe. Par la suite nous allons voir comment sont fabriquées les structures à base HgTe/CdTe nécessaire à l'élaboration d'un isolant topologique 3D. Nous verrons enfin, par des expériences d'ARPES, la confirmation de l'existence d'un état de surface à l'interface de nos structures réalisées.

2.1 Structure de bandes électroniques des semiconducteurs à gap étroit

On définit couramment les semiconducteurs à gap étroit comme étant les semiconducteurs dont le gap en énergie est inférieur à 0,5 eV. Le regain d'intérêt de ces systèmes est du à la découverte en 1952 des propriétés particulières des composés III-V. Les techniques de croissance cristalline s'améliorant, la qualité des cristaux a permis des expériences plus poussées et ces semiconducteurs à gap étroit sont donc intensivement étudiés depuis les années 70. Des semiconducteurs à gap étroit dans la famille III-V (InSb), II-VI (HgTe), IV-VI (PbTe) et II-V (Cd₃As₂) ont alors été développés et permirent de mieux appréhender les structures de bandes électroniques de ces matériaux. Les études théoriques pour la détermination des structures de bande des semiconducteurs à gap étroits se basent sur le modèle de Kane (Kane [1956]) qui a été développé pour déterminer la structure de bande de l'Indium-Antimoine, InSb. Kane [1957] a également utilisé ce modèle pour les structures Ge et Si. Ce modèle se base sur l'approximation $\vec{k} \cdot \vec{p}$ autour du point Γ de la zone de Brillouin.

2.1.1 Modèle à deux bandes et équation $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Je vais dans cette partie m'intéresser à un modèle à deux bandes ; celui-ci permet d'extraire certaines propriétés physiques des semiconducteurs à gap étroit tout en utilisant d'une manière simplifiée l'approximation $\vec{k} \cdot \vec{p}$ et l'idée générale du modèle de Kane.

Les états électroniques dans un cristal se décrivent par les fonctions de Bloch.

$$\Psi_{n\vec{k}} = u_{n\vec{k}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (2.1)$$

La fonction (2.1) est solution de l'équation de Schrödinger

$$H_0 = \Psi_{n\vec{k}} = E_n(\vec{k})\Psi_{n\vec{k}} \quad \text{où } H_0 \text{ est le Hamiltonien du cristal} \quad (2.2)$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \quad \text{où } V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_{hkl}) \quad (2.3)$$

\vec{R}_{hkl} est le vecteur du réseau cristallin. En intégrant la fonction (2.1) dans (2.2), on obtient la relation $\vec{k} \cdot \vec{p}$

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + V(\vec{r}) \right) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \left(E_{n\vec{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.4)$$

Pour $\vec{k} = \vec{0}$, la relation (2.4) se simplifie en la relation (2.2) et les solutions u_{n0} forment une base complète. Cette base peut être prise comme une base orthogonale et normale représentant les solutions de (2.4) :

$$u_{n\vec{k}} = \sum_j c_{nj} u_{j0} \quad (2.5)$$

Tous ces états interagissent entre eux. Pour simplifier, nous nous ramènerons à un modèle à deux bandes. Cette approximation est valable si la différence en énergie E_g entre le plus haut niveau de la bande de valence E_1 et le plus bas niveau de la bande de conduction E_2 est la plus petite des autres différences en énergie, d'au moins un ordre de grandeur. Dans la limite, l'équation (2.5) se limite à (2.6).

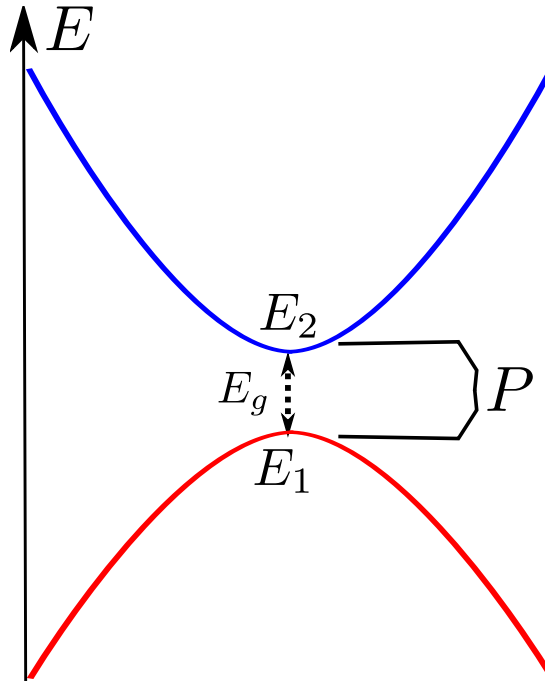


FIGURE 2.1 – Modèle à deux bandes d'un semiconducteur à gap étroit. Le seul couplage entre bandes à considérer sera celui entre la bande de conduction et la bande de valence.

$$\begin{cases} u_{1\vec{k}} = c_{11}u_{10} + c_{12}u_{20} \\ u_{2\vec{k}} = c_{21}u_{10} + c_{22}u_{20} \end{cases} \quad (2.6)$$

avec,

$$\begin{aligned} c_{21}(E_1 - E) + c_{22}H_{12} &= 0 \\ c_{21}H_{12}^* + c_{22}(E_2 - E) &= 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

où $|H_{12}|^2 = \frac{\hbar^2 k^2 P^2}{m_0^2}$ et P est un terme de couplage cinétique (P a la dimension d'une quantité de mouvement) entre les deux états : $P = -i\hbar \langle u_{10} | \nabla u_{20} \rangle$

On peut essayer de déterminer l'ordre de grandeur du terme P^2/m_0 en considérant par exemple un pas cristallin $a \approx 0,5$ nm. Dans ce cas :

$$P^2/m_0 \approx \hbar^2 (2\pi/a)^2 / m_0 \approx 12 \text{ eV} \quad (2.8)$$

Le déterminant de l'ensemble du système (2.7) :

$$(E_1 - E)(E_2 - E) - H_{12}^2 = 0 \quad (2.9)$$

Les échelles d'énergie étant définies à une constante près, nous pouvons choisir $E_2 = 0$ et $E_1 = -E_g$. Ainsi, les énergies des bandes de conduction et de valence sont données par (2.10) :

$$E = -\frac{E_g}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_g}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2 P^2}{m_0^2} k^2} \quad (2.10)$$

Il me faut de plus introduire la masse effective qui s'écrit comme :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2 k} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{m_0} \frac{E_P}{E_g + 2E} \quad (2.11)$$

avec $E_P = 2P^2/m_0$

E_P est de l'ordre de 20 eV (suivant le calcul d'ordre de grandeur (2.8)). Pour des états dans la bande de valence $E = 0$ la masse effective des quasiparticules sera $m^*/m_0 = E_g/E_P \approx 10^{-2}$. On s'attend donc à avoir des masses effectives très petites dans ces systèmes et également des mobilités relativement grandes (la mobilité de Drude s'exprimant comme $\mu \approx e\tau/m^*$, avec τ le temps du libre parcours moyen et m^* la masse effective de l'électron).

Le modèle simple permet d'obtenir les propriétés élémentaires des semiconducteurs à gap étroit, mais reste un modèle trop limité. En effet, il ne tient nullement compte de l'interaction spin-orbite et se limite de plus uniquement au couplage entre les bandes de conduction et de valence en négligeant les couplages aux autres bandes. Nous allons maintenant voir comment le modèle de Kane précise les limitations du modèle que je viens de présenter.

2.1.2 Modèle de Kane

Dans le modèle développé pour étudier la structure de bande de l'indium-antimoine, Kane [1957] utilise l'approximation $\vec{k} \cdot \vec{p}$ pour déterminer près du point Γ , sa structure de bande. Pour cela, on doit prendre en compte essentiellement quatre bandes :

- 3 bandes de type p .
- une bande de type s .

Si on reprend la base des équations (2.4) de la § 2.1.1, les éléments matriciels s'écriront dans une base $u_{n\vec{k}_0}$ pour la représentation

$$\begin{cases} H_{nn'}^{\vec{k}} = (E_{n\vec{k}_0} + \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_0^2))\delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m}(\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{p}_{nn'} \\ \vec{p}_{nn'} = \int u_{n\vec{k}_0} \vec{p} u_{n'\vec{k}_0} \end{cases} \quad (2.12)$$

L'ensemble donne une description complète de toutes les bandes d'énergie sur tout l'espace réciproque. L'approximation de Kane est de réduire l'étude à un ensemble de bandes bien définies et de traiter le couplage des autres bandes par la théorie des perturbations. Il est possible par le biais de la méthode dite de *renormalisation de Lödwin* de séparer en deux ensembles les bandes précédentes. Celles que l'on désire étudier de manière précise et les autres. Dans le cas d'une étude près du point Γ , on s'intéressera à la bande de conduction de type s et aux trois bandes de type p . Si on tient compte du spin, la bande de conduction est doublement dégénérée, tandis que la bande de valence est 6 fois dégénérée. Ces bandes sont couplées aux autres bandes de plus hautes ou de plus basses énergies. Ces couplages pourront être traités de manière perturbative.

2.1.2.1 Bandes près du point Γ pour les composés de type Zinc blende : sans interaction spin-orbite

Les cas les plus intéressants à étudier pour les matériaux à gap étroit sont les matériaux de structure de type zinc-blende. Si on se focalise près du point Γ , l'ensemble des bandes que l'on étudiera précisément seront donc, comme dit précédemment une bande type s (de symétrie Γ_1) et les bandes de type p (de symétrie Γ_{15}). Ces bandes seront fortement couplées dû à l'élément de matrice P que l'on a présenté dans la partie 2.1.1 :

$$P = -i \frac{\hbar}{m} \langle s | p_i | x_i \rangle \quad \text{avec} \quad x_i = x, y, z \quad (2.13)$$

Le développement et la forme de l'Hamiltonien ainsi que l'expression de ses coefficients se trouvent à l'appendice A. Les coefficients contenus dans le hamiltonien (2.14) sont des termes cinétiques qui dépendent directement de P (voir appendice A).

En reprenant l'Hamiltonien A.5 et en considérant le plan $k_z, k_y = 0$, on obtient :

$$\begin{pmatrix} Ak^2 + E_c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Lk_x^2 + E_v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Mk_x^2 + E_v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Mk_x^2 + E_v \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Le résultat (2.14) montre la dégénérescence de la bande de valence au point Γ et une formation de deux bandes l'une dite trous lourds (HH) et l'autre dite trou léger (LH). Dans ce cas, la bande de conduction aura la forme $Ak^2 + E_c$, et on aura une bande de valence de la forme Lk_x^2 et deux autres bandes de la forme Mk_x^2 comme il est visible sur la figure 2.2.

2.1.2.2 Modèle de Kane avec interaction spin-orbite

Dans la partie précédente, j'ai négligé l'interaction spin-orbite. Cependant, pour des composés dont la masse atomique Z est importante, l'interaction spin-orbite est à prendre en compte. Le tableau 2.1 référence les valeurs de cette interaction pour les composés à base de Hg, Te et Cd. Les valeurs obtenues varient entre 200 meV et 1 eV.

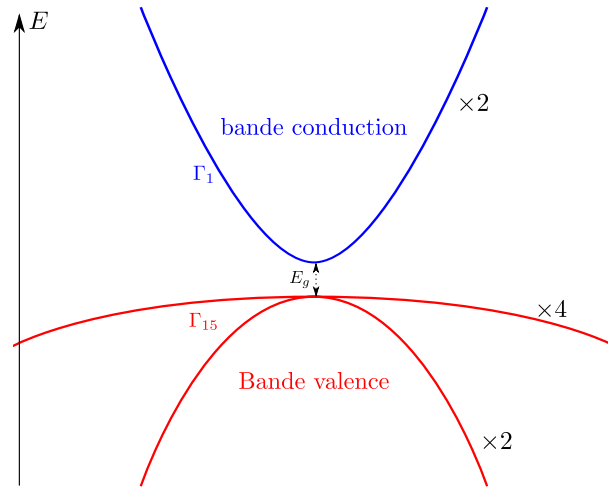


FIGURE 2.2 – Bandes d'énergie suivant le modèle de Kane sans couplage spin-orbite. Les chiffres correspondent à la dégénérescence des états de bande.

| | | | | |
|--------|--------|--------|--------|--------|
| Mg | Al | Si | P | S |
| 0.0072 | 0.0217 | 0.0441 | 0.0753 | 0.1162 |
| Zn | Ga | Ge | As | Se |
| 0.074 | 0.171 | 0.290 | 0.426 | 0.582 |
| Cd | In | Sn | Sb | Te |
| 0.227 | 0.458 | 0.709 | 0.973 | 1.26 |
| Hg | Tl | Pb | Bi | Po |
| 0.860 | 1.614 | 2.377 | 3.131 | 3.908 |

Tableau 2.1 – Valeurs du terme spin-orbite en eV pour quelques éléments de la classification périodique trouvées en référence [Herman et al., 1963]

Le couplage spin-orbite est de la forme :

$$H_{s0} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V \wedge \vec{p}) \cdot \sigma \quad (2.15)$$

où σ sont les matrices de Pauli.

En ajoutant (2.15) à le Hamiltonien (2.3), on obtient deux termes qui s'ajoutent à le Hamiltonien $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (2.2) :

$$H_{s0} + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [\nabla V \wedge \vec{k}] \cdot \sigma \quad (2.16)$$

Le deuxième terme est petit par rapport au premier dans la relation (2.16) car en général pour les bandes de type s et p , $\hbar k \ll p$.

i. la vitesse de l'électron dans l'atome est reliée au rayon de Bohr et à la masse effective : $\Delta p \approx \hbar/2.Z/a_0$ et $\hbar k \approx \hbar/a$ où a est le pas du réseau de l'ordre de 10 nm, ce qui donne $\hbar k/\Delta p \approx a_0/(Za) \ll 1$

Les états $|s\rangle$, $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ sont dégénérés en spin. Si on doit tenir compte des états de spin, la base initiale de 4 états devient une base à 8 états. Le spin et le moment cinétique ne sont pas de bons nombres quantiques pour définir les états en tenant compte de l'interaction spin-orbite. Il convient de changer de base et de prendre en compte le moment cinétique total J . Le changement de base est montré en annexe A.

Le couplage spin-orbite va lever la dégénérescence des 6 états de type p de la bande de valence à $k = 0$ en un ensemble 4 fois dégénéré ($J = 3/2$) et 2 fois dégénéré ($J = 1/2$) séparés par le terme de séparation spin-orbite Δ .

On obtient aussi une matrice 8×8 représentant le Hamiltonien obtenu en utilisant le modèle de Kane. Si ce système matriciel peut aisément être traité numériquement, il s'avère difficile de l'étudier analytiquement sans réaliser quelques approximations comme présentées en annexe A

Si nous ajoutons maintenant l'interaction spin-orbite à le Hamiltonien simplifié (voir équation A.5), on obtiendra un Hamiltonien diagonal par bloc : un bloc 4×4 correspondant aux états dégénérés $J = 3/2$ et deux blocs 2×2 correspondant l'un aux états $J = 1/2$ de la bande de conduction, l'autre aux états $J = 1/2$ de la bande de valence séparés par l'interaction spin-orbite. Cet Hamiltonien fut diagonalisé par Dresselhaus *et al.* [1955] et conduit à la structure de bande (2.17). La forme des bandes est présentée sur la figure 2.3 (a).

Enfin, en prenant en compte le groupe de rotation pour le spin, les symétries des bandes seront modifiées. Γ_1 deviendra Γ_6 , et Γ_{15} se décomposera en bande Γ_7 et Γ_8 .

$$\begin{aligned}
 E_{\text{cond}} &= E_{c0} + \frac{\hbar k^2}{2m} + \tilde{A}k^2 \\
 E_{v3/2} &= E_{v\Delta_0} + \frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{L + 2M}{3}k^2 \\
 &\quad \pm \sqrt{\frac{(L - M)^2}{9}k^4 + \frac{1}{3}(N^2 - (L - M)^2)(k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2)} \\
 E_{v1/2} &= E_{v\Delta_0} - \Delta + \frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{\tilde{L} + 2M}{3}k^2
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

$E_{v\Delta_0} = E_{v0} + \Delta_0$ et les paramètres N , L , M restent les mêmes termes que ceux dans (A.5) de l'annexe A.

\tilde{A} et \tilde{L} correspondent aux termes A et L en considérant le couplage spin-orbite Δ , $\tilde{A} \approx P^2(2/3E_g + 1/3(E_g + \Delta))$ et $\tilde{L} \approx P^2/(E_g + \Delta)$.

La forme générale des bandes pour les semiconducteurs à gap étroit de structure zincblende sera identique à celle que l'on vient de décrire. Une bande de conduction Γ_6 séparée de la bande de valence Γ_8 par un gap en énergie $E_g = E_{c0} - E_{v\Delta}$. La bande de valence Γ_8 sera constituée d'une bande de valence trous lourds Γ_8 (HH) et d'une bande de valence trou légers Γ_8 (LH). Une bande séparée par le terme spin-orbite Δ , Γ_7 .

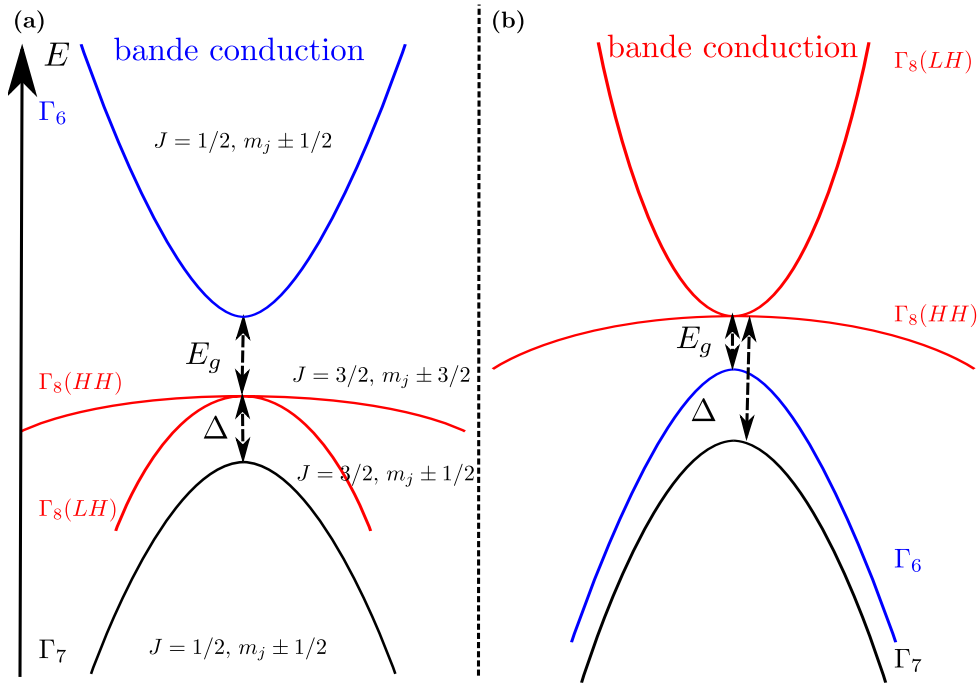


FIGURE 2.3 – Bandes d'énergies suivant le modèle de Kane avec couplage spin-orbite. **(a)** : Forme des structures de bande dans le cas $E_g > 0$. La bande de conduction sera Γ_6 , les bandes de valences se décomposeront en bandes Γ_8 trous léger (LH), Γ_8 trous lourds (HH) et en bande Γ_7 . Δ est la levée de dégénérescence due au couplage spin-orbite. **(b)** : Forme des structures de bande dans le cas $E_g < 0$. Il n'y a pas de gap d'énergie, le système est semi-métallique. La bande de conduction devient Γ_8 et la bande Γ_6 se trouve inférieure en énergie à Γ_8 .

2.1.2.3 Matériaux à gap d'énergie négatif

Pour des semiconducteurs avec des atomes lourds, l'énergie du bas de la bande de conduction E_{c0} est inférieure à l'énergie du haut de la bande de valence $E_{v\Delta 0}$. Ces effets ont été remarqués par [Groves et Paul, 1963]. Ce genre de cas se retrouve également dans HgS, dans HgSe et HgTe. Les formules établies précédemment restent valables, seule le signe du gap en énergie changera. Les énergies des états de type s s'étendront en dessous des états de type p , leur masse est négative tandis que celles des états de type p de masse légère aura une valeur positive. L'ordre des bandes en énergie est illustrée en figure 2.3 (b).

2.2 Structures de bandes HgTe et CdTe

Le tellure de cadmium CdTe et le tellure de mercure HgTe sont tous les deux des matériaux de type zinc-blende de la famille II-VI. L'étude par le modèle de Kane des systèmes à gap étroit répond bien aux bandes électroniques de ces matériaux. Je vais donc développer dans cette partie la structure de bande de HgTe et CdTe. Nous allons voir qu'il est nécessaire, afin d'obtenir une surface topologique dans HgTe/CdTe, d'ouvrir un gap d'énergie en volume dans HgTe. Nous verrons aussi qu'en prenant en compte le

modèle de Kane complet, ajouté du terme générant le gap de volume dans HgTe par contrainte uniaxiale, qu'il est possible d'obtenir des bandes de surface à l'interface entre HgTe et un isolant conventionnel comme CdTe.

2.2.1 Les bandes électroniques HgTe et CdTe

Le tellure de cadmium CdTe et le tellure de mercure HgTe ont un empilement de type zinc-blende, c'est-à-dire un empilement de type cubique face centrée pour chacun des éléments comme illustré dans la figure 2.4 (a).

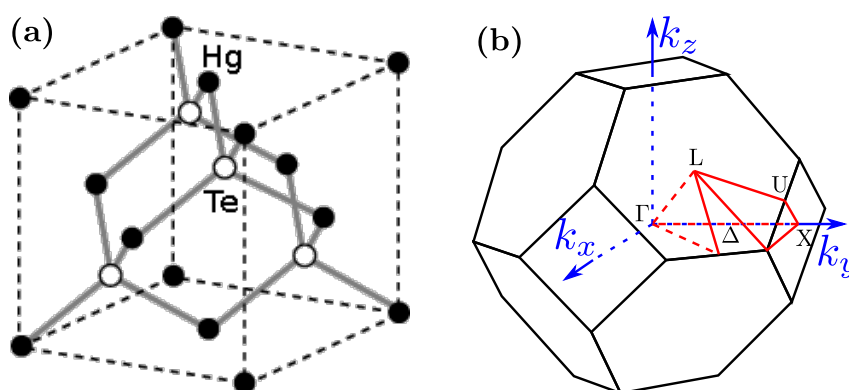


FIGURE 2.4 – (a) : Maille élémentaire de la structure HgTe. HgTe s'empile suivant un agencement cubique face centrée pour chaque élément Hg et Te avec un décalage d'un quart de pas de maille entre les deux sous-réseaux. (b) : Zone de Brillouin d'un réseau cubique face centrée

Pour des semiconducteurs comme CdTe, le gap de bande est entre le minimum de la bande de conduction de type s Γ_6 et le maximum des bandes de valence de type p Γ_8 et correspond à $E_g = 1,6$ eV. La bande Γ_7 est séparée des bandes Γ_8 par le terme de couplage spin-orbite Δ par une valeur de 0,9 eV selon le tableau A.1.

La particularité de HgTe est d'avoir un ordre des états au point Γ de la zone de Brillouin inversé par rapport à une zinc-blende classique. C'est un semiconducteur à gap négatif, de valeur $E_g = -0,303$ eV, comme exposé dans la § 2.1.2.3. La bande Γ_6 est en dessous de celles Γ_8 en énergie. La bande Γ_6 est complètement remplie tandis que les bandes Γ_8 sont à moitié remplies. Ainsi, l'énergie de Fermi se trouve fixée entre les deux bandes Γ_8 , rendant HgTe semi-métallique. La bande Γ_6 et la bande Γ_7 se retrouvent séparées en énergie par $\Delta = 1$ eV

Les bandes électroniques des matériaux HgTe et CdTe sont illustrées sur la figure 2.5

Pour obtenir un isolant topologique 3D à l'interface entre HgTe et CdTe, il convient avant d'au moins d'obtenir un isolant de volume ; hors HgTe est un semimétal, il est ainsi nécessaire d'ouvrir un gap d'énergie en volume dans HgTe afin d'obtenir un comportement semiconducteur.

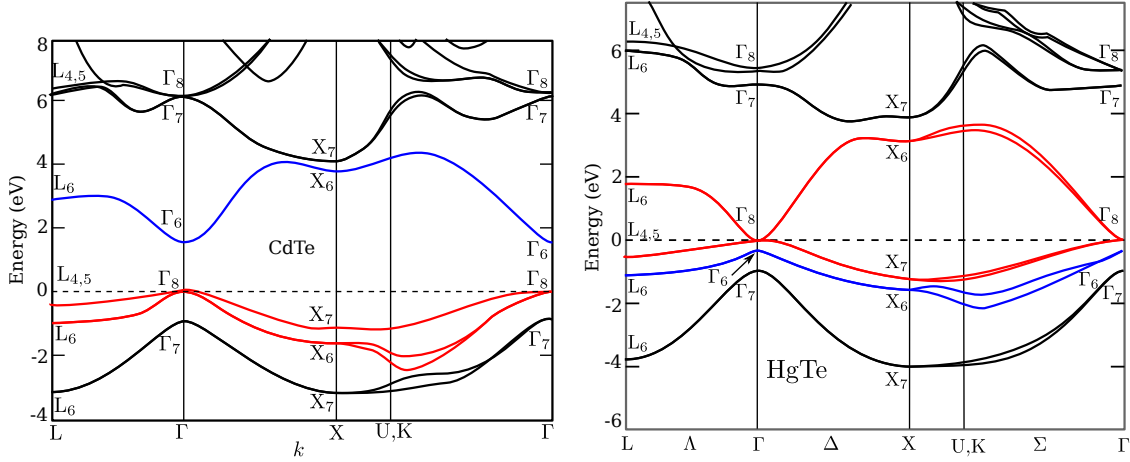


FIGURE 2.5 – (a) : Bande électronique CdTe (b) : Bande électronique HgTe.

2.2.2 Ouverture d'un gap dans HgTe par désaccord de maille

Une contrainte par compression d'une structure HgTe suivant l'axe [100] et [211] ouvrira un gap entre les bandes Γ_8 trous lourds et Γ_8 trous légers. En effet, les états Γ_8 étant six fois dégénérés dus à la symétrie du cristal de type zinc-blende, exercer une contrainte va modifier suivant une direction le pas du réseau et donc modifier cette symétrie. Cette perte de symétrie lèvera la dégénérescence de Γ_8 . L'étude de cette levée de dégénérescence des bandes Γ_8 dans les structures zinc-blende a été étudiée tout d'abord sur l'étain gris par Roman et Ewald [1972] en partant des modèles des contraintes sur les semiconducteurs obtenus par Kleiner et Roth [1959] et Pikus et Bir [1960].

La déformation du cristal par contrainte va agir sur plusieurs opérateurs de le Hamiltonien (2.4). Le vecteur position \vec{r} , le vecteur quantité de mouvement \vec{p} et le vecteur moment cristallin \vec{k} se voient changer en un nouveau jeu de coordonnées pour respecter le changement de position des atomes du cristal :

$$\begin{aligned}\vec{r}' &= (1 + \bar{\epsilon})\vec{r} & \vec{p}' &= (1 + \bar{\epsilon})\vec{p} \\ \vec{k}' &= (1 + \bar{\epsilon})\vec{k}\end{aligned}\tag{2.18}$$

$\bar{\epsilon}$ est le tenseur des contraintes du cristal. Le potentiel V du cristal va également changer et en se limitant au premier ordre, on obtient :

$$V(\vec{r}') = V((1 + \bar{\epsilon})\vec{r}) \approx V(\vec{r}) + \bar{\epsilon}\vec{r} \cdot \nabla_{\vec{r}}V\tag{2.19}$$

Ce travail ayant été développé en détails par Winkler [2003], je vais uniquement reprendre le résultat obtenu dans la base à 8 états du modèle de Kane et considérer une contrainte uniaxiale suivant l'orientation cristalline [001]. Une contrainte uniaxiale va simplement rendre le tenseur des contraintes (2.20) diagonal et dépendant de la déformation du cristal suivant un axe. On obtient ainsi :

$$\bar{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & -2\frac{C_{12}}{C_{11}}\delta \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

où C_{12} , C_{11} sont les coefficients de rigidité du cristal et $\delta = (a_{\text{ZnCdTe}} - a_{\text{HgTe}})/a_{\text{HgTe}}$ le désaccord de maille entre le substrat et le cristal HgTe.

Dans ce cas, le Hamiltonien de Bir-Pikus se simplifie en matrice diagonale par bloc, deux bloc 2×2 , contenant chacun les états $|\Gamma_{6,1/2, \pm 1/2}\rangle$ et $|\Gamma_{8,3/2, \pm 3/2}\rangle$ et un bloc 4×4 contenant les autres états comme montré en (2.21). La bande Γ_8 (HH) est représentée par les états $|\Gamma_{8,3/2, \pm 3/2}\rangle$ et la bande Γ_8 (LH) par les états $|\Gamma_{8,3/2, \pm 1/2}\rangle$. Cet Hamiltonien lèvera la dégénérescence entre ces deux bandes puisque les termes diagonaux de ces états sont séparés en énergie par $2V_{BP}$ sans compter le terme de couplage qui s'exerce entre la bande Γ_8 (LH) et la bande Γ_7 .

$$\left[\begin{array}{cccc} |\Gamma_{6,1/2,1/2}\rangle & |\Gamma_{6,1/2,-1/2}\rangle & |\Gamma_{8,3/2,3/2}\rangle & |\Gamma_{8,3/2,1/2}\rangle \\ \left[\begin{array}{cccc} T_{BP} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T_{BP} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_{BP} + V_{BP} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U_{BP} - V_{BP} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}V_{BP} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right. & & & \\ & |\Gamma_{8,3/2,-1/2}\rangle & |\Gamma_{8,3/2,-3/2}\rangle & |\Gamma_{7,1/2,1/2}\rangle & |\Gamma_{7,1/2,-1/2}\rangle \\ & \left[\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}V_{BP} & 0 \\ U_{BP} - V_{BP} & 0 & 0 & -\sqrt{2}V_{BP} \\ 0 & U_{BP} + V_{BP} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_{BP} & 0 \\ -\sqrt{2}V_{BP} & 0 & 0 & U_{BP} \end{array} \right. & & & \end{array} \right] \quad (2.21)$$

$$T_{BP} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) 2\epsilon$$

$$U_{BP} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) 2\epsilon$$

$$V_{BP} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 \left(1 + \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) 2\epsilon$$

Les valeurs de gap d'énergie obtenues par contrainte uniaxiale ont été étudiées par Novik *et al.* [2005] dans les structures à base de HgMnTe. La valeur du gap s'exprime comme

$$E_g = -2b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \delta \quad (2.22)$$

Dans le cas d'une contrainte uniaxiale $b = -1,5 \text{ eV}$, le rapport de rigidité pour HgTe vaut $C_{12}/C_{11} = 0.68$ et le taux de déformation est visible sur le tableau 2.3. L'ouverture d'un gap d'énergie en volume dans HgTe dépendra de la contrainte maximale que l'on puisse obtenir. La contrainte maximale obtenue, comme on le verra, se fait sur un substrat CdTe et ainsi le gap d'énergie maximal vaudra $E_g^{\text{max}} = 21 \text{ meV}$

2.2.3 Jonction HgTe/CdTe et états de surfaces topologiques

Une fois l'ouverture d'un gap de volume réalisée dans la structure HgTe, la réalisation de bandes de surface à l'interface entre un matériau semiconducteur conventionnel de type CdTe, et HgTe, se devine facilement. En effet, la bande Γ_6 et la bande Γ_8 (LH) n'appartiennent pas à la même classe de symétrie, ce qui fait qu'il est possible de croiser ces bandes sans réaliser d'anticroisement. Par continuité des bandes, Γ_8 (LH) et Γ_6 doivent se croiser à l'interface d'une jonction entre CdTe et HgTe. Ce croisement est à l'origine d'un point de Dirac à l'interface de CdTe et à la réalisation d'un isolant topologique 3D. L'existence d'une surface topologique est prédite Fu et Kane [2007b] et a été également observée par Brüne *et al.* [2011] dans les structures HgTe/CdTe. Bien entendu, les paramètres des bandes du modèle de Kane utilisés sont regroupés dans le tableau 2.2

| | $E_g[\text{eV}]$ | $\Delta[\text{eV}]$ | $E_P[\text{eV}]$ | F | γ_1 | γ_2 | γ_3 | κ | μ | $\bar{\gamma}$ |
|------|------------------|---------------------|------------------|-------|------------|------------|------------|----------|-------|----------------|
| HgTe | -0,303 | 1,08 | 18,8 | 0 | 4,1 | 0,5 | 1,3 | -0,4 | 0,4 | 0,9 |
| CdTe | 1,606 | 0,91 | 18,8 | -0,09 | 1,47 | -0,28 | 0,03 | -1,31 | 0,155 | -0,125 |

Tableau 2.2 – Paramètres de bande du modèle de Kane pour les structures HgTe/CdTe avec $\mu = (\gamma_3 - \gamma_2)/2$ et $\bar{\gamma} = (\gamma_3 + \gamma_2)/2$

Nous avons réalisé une simulation numérique de ces états de surface en collaboration avec David CARPENTIER et Pierre DELPLACE [Crauste *et al.*]. Elle permet d'observer l'apparition d'états de surface à l'interface entre HgTe et un isolant classique. La modélisation se base sur le Hamiltonien de Kane (A.7) dans l'annexe A en prenant en compte l'ouverture d'un gap de volume dans HgTe par contrainte uniaxiale avec le modèle de Pikus et Bir [1960](2.21) et en supposant que les paramètres des bandes des matériaux pouvaient évoluer suivant l'axe de croissance (pris en [001]).

La modélisation a été réalisée en considérant des plans infinis suivant \hat{x}, \hat{y} (et dans ce cas, k_x et k_y restent de bons nombres quantiques et permet aucun changement dans le Hamiltonien de base). Suivant l'axe \hat{z} , direction de croissance des structures, les composantes ont été discrétisées suivant un pas de réseau a et avec un nombre de plan entre 1 et 100; une variation des paramètres du modèles de Kane à l'interface entre HgTe et un isolant classique est prise en compte.

La simulation numérique permet d'obtenir sur la tranche de l'interface entre HgTe et le vide, des états de surfaces. La relation de dispersion est clairement linéaire comme on peut le constater sur la figure 2.6. La simulation a toute de même un inconvénient; si

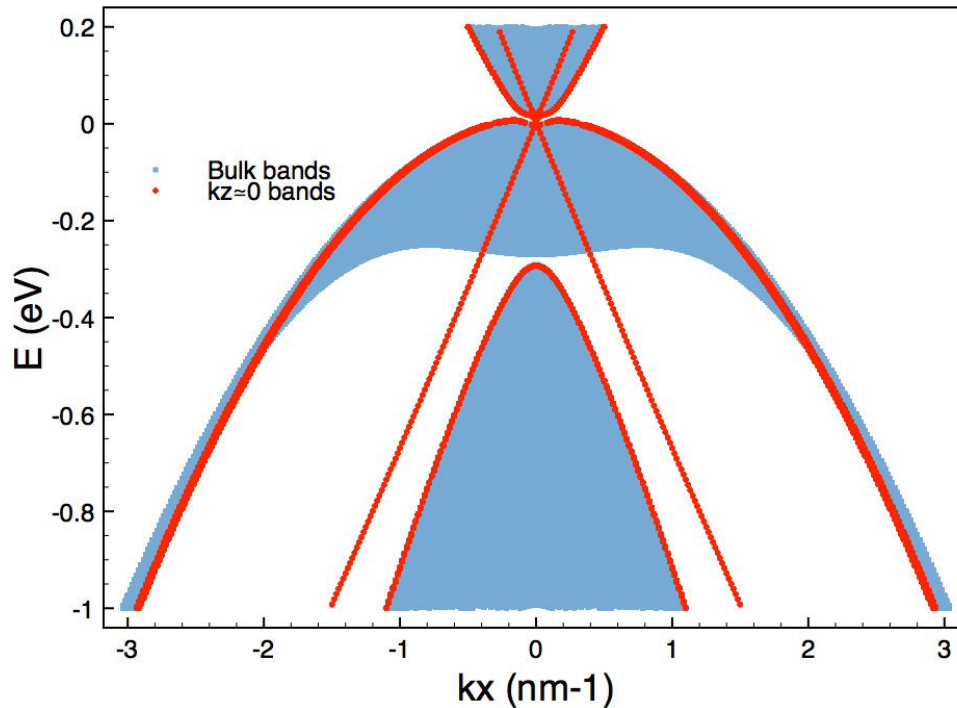


FIGURE 2.6 – En bleu, bandes de volumes d’une structure HgTe sous contrainte uniaxiale. En rouges : bandes de surfaces et de volume en considérant une discrétisation sur 50 tranches. On aperçoit clairement une relation de bandes de surface linéaire.

on zoome sur le gap de volume en énergie, on aperçoit clairement un non croisement des états de surfaces comme on devrait s’y attendre. Il est à noter que ce non-croisement se produit si on exerce une contrainte de type Bir-Bikus sur HgTe. La fermeture du gap en volume laisse apparaître les états de surface avec un croisement au point de Dirac. Ce non-croisement est probablement dû à la limitation du modèle numérique ; en effet, le modèle de Kane fonctionne correctement pour des valeurs de \vec{k} petit, c’est-à-dire pour des valeurs du moment cristallin près du point Γ de la zone de Brillouin, mais la surface se trouve localisée ce qui donnerait des contributions pour des valeurs de \vec{k} grandes. Il conviendrait donc d’adapter le code numérique afin de compenser cet effet de “localité” de la surface.

2.3 La croissance HgTe par MBE

2.3.1 Introduction

Les structures HgTe/CdTe pour les isolants topologiques 3D se basent sur les techniques d'épithaxie par jet moléculaire [MBE] utilisé pour la conception de système infrarouge. Les appareils infrarouge typiques consistent en une jonction de type $n-p$. La différence par rapport aux structures d'isolant topologique comme on le verra, sera une question d'épaisseur d'échantillon et d'orientation cristalline. Les techniques de croissance seront donc assez identiques par rapport à ce qui est réalisé dans le milieu industriel.

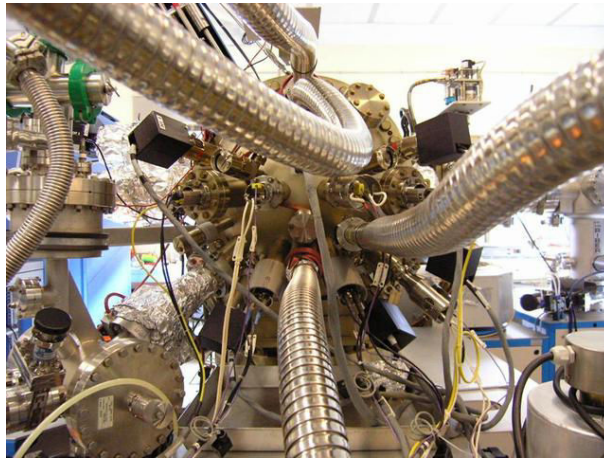


FIGURE 2.7 – Bâti de croissance HgTe/CdTe

2.3.2 Croissance et caractéristiques des matériaux

2.3.2.1 Les substrats de croissance HgTe/CdTe pour MBE

Il est possible par MBE de pouvoir faire croître HgTe au dessus d'un tampon CdTe sur des substrats avec des désaccords de mailles très importants comme GaAs [Arias *et al.*, 1991], InSb [Noreika *et al.*, 1986] ou Si [Sporken *et al.*, 1991]. Cependant, le paramètre de maille est tellement important que, sur ce genre de substrat, la couche HgTe contiendra un grand nombre de dislocations (de l'ordre de 10^7 cm^{-1}). Ces dislocations sont dues à la relaxation des contraintes du tampon CdTe provoquant des dislocations en son sein et se propageant dans HgTe. Elles altèrent les propriétés thermo-électriques des structures. Pour un meilleur résultat des substrats type $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ou bien même CdTe seulement sont utilisés.

2.3.2.2 L'orientation cristalline de la surface

La croissance par MBE est cinétique, elle se fait surtout le long des surfaces cinétiques ([Sivananthan *et al.*, 1986]). La croissance MBE pour HgCdTe se fait à des températures faibles (autour de 180°C) ce qui implique des faibles mobilités de surface, il faut donc

une forte densité de marches pour favoriser une croissance 2D. Les croissances sont, ainsi, plus facile à réaliser sur des surfaces cristalline où le nombre de marches est relativement importante. Les vitesses de croissance les plus élevées pour les structures HgTe sont obtenues pour l'orientation [211]. Sous cette orientation, il est possible avec des paramètres optimisés de croissance de limiter des défauts dits "microtwins".

La croissance suivant [100] se réalise plus difficilement car le nombre de marches est plus faible que sur l'orientation [211]. Cela favorise l'apparition des défauts précédemment introduits engendrant une dégradation importante de la qualité des structures et donc des propriétés de transport.

La croissance HgTe sur CdTe est très délicate puisqu'elle se réalise surtout à basse température. Les matériaux réalisés par cette technique peuvent contenir un nombre non négligeable de dislocations (de l'ordre de 10^6 cm^{-2} à 10^7 cm^{-2}). Afin de réduire le nombre de ces dislocations et pour obtenir des structures de bonne qualité cristallographique, les croissances peuvent se faire principalement sur des substrats $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$. Suivant la concentration de Zinc, il est possible d'adapter le désaccord de maille du substrat sur lequel croît HgTe. Cette adaptation de maille permet de réduire le nombre de dislocations.

2.3.2.3 Contrôle de température durant la croissance

La fenêtre de température est étroite afin d'éviter l'apparition de défauts étendus. Sous des flux réguliers Hg et Te l'intervalle de température se situe à 180°C avec une fenêtre de température de 5°C . En dessous de cette température, la pression de mercure est trop forte ce qui ralentit la cinétique de croissance formant des micro-défauts et une surface moins uniforme ([Capper, 1994]). Au contraire, si la température est au-dessus de 180°C , il y a séparation de phase entre le mercure et le tellure ce qui engendre des précipités localisés de tellure.

Suivant les dépôts, les températures varient notablement. Pour CdTe, on procède avec des températures avoisinant 350°C , et HgCdTe 180°C . Cette forte variation rend la conception toujours délicate.

2.3.3 Structure type et caractérisation par rayon X

2.3.3.1 Paramètre de maille et gap d'énergie de HgCdTe

Plusieurs échantillons ont été réalisés avec différents substrats de type CdTe ou bien $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$. Les désaccords de mailles ont permis de contraindre l'empilement HgTe (contrainte normale uniaxiale) et ainsi ouvrir un gap.

La maille élémentaire pour le $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ suit une loi de la forme

$$a_{\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}} = 6.4815x + 6.4615(1 - x) \quad (2.23)$$

dont l'évolution est présentée à la figure 2.8 (a). Le $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ suivant la fraction de cadmium est soit un semimétal, soit un semiconducteur à gap direct, et son gap en énergie évolue comme :

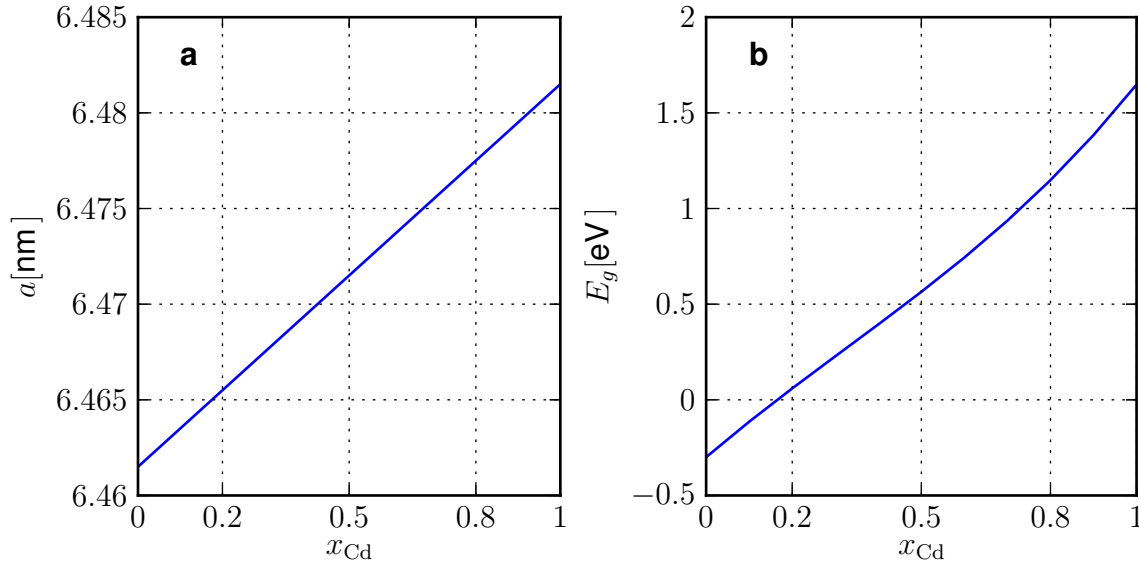


FIGURE 2.8 – **a** : paramètre de maille en nm du cristal $Cd_xHg_{1-x}Te$ en fonction de la fraction de Cd. **b** : valeur du gap en eV du cristal $Cd_xHg_{1-x}Te$ en fonction de la fraction de Cd. Le gap est à valeur négative jusqu'à $x = 0,15$

$$E_g[\text{eV}] = -0,302 + 1,93x - 0,810x^2 + 0,832x^3 + 0,535(1 - 2x)\frac{T[\text{K}]}{1000} \quad (2.24)$$

La transition se produit donc pour une fraction de cadmium à $x_{Cd} = 0,15$, comme montré à la figure 2.8 (**b**).

2.3.3.2 Caractérisation de la structure par rayon X

L'agencement cristallographique de la surface HgTe sur CdZnTe peut être caractérisé par diffraction à rayon X. Les figures de diffraction observées sont présentées en figure 2.10 et figure 2.11.

La diffraction de Bragg se base sur la relation suivante pour déterminer l'espace entre les plans d'empilement réticulaires. Elle provient de la différence de chemin optique entre la réfraction des rayons entre plans comme observé sur figure 2.9.

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda \quad (2.25)$$

θ étant l'angle de diffraction, λ la longueur d'onde des photons X incidents (dans mon cas la longueur d'onde sera de $\lambda = 1,5405 \text{ \AA}$) et d_{hkl} l'espacement entre plans réticulaires.

Le substrat étant suffisamment épais (plusieurs micromètres d'épaisseur), son pic ressort étroit. Le paramètre de maille de l'empilement HgTe suivant l'axe de croissance sera plus petit que celui du substrat (suivant l'axe de croissance HgTe n'est pas contraint, il respecte donc son propre paramètre de maille). Le pic de diffraction de la surface sera

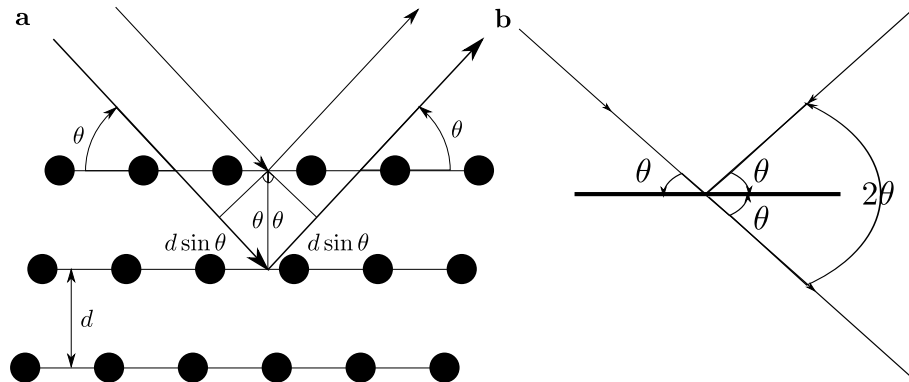


FIGURE 2.9 – Réflexion de Bragg et rayons incidents et réfléchis. **a** : Réflexion de Bragg pour une famille particulière de plans du réseau espacés d’une distance d . La différence de longueur de chemins et les rayons réfléchis pour deux plans voisins correspond à $2d \sin \theta$. **b** : L’angle de Bragg θ correspond à la moitié de l’angle total entre le rayon incident et réfléchi.

donc à plus grand angle. Il se trouvera aussi plus élargi car son signal de diffraction sera convolué avec l’épaisseur de la couche ($\propto 100$ nm).

La figure 2.10 correspond au réseau de diffraction obtenu pour des structures HgTe/CdTe ayant fournis des résultats en magnétotransport présentés au chapitre 4. Elles correspondent à un enrichissement en Zn de 2,8%. Les réseaux de diffraction X en figure 2.11, sont ceux pour un substrat avec un enrichissement en Zn de 4,1% et un substrat en CdTe (le substrat CdTe est le substrat dont le paramètre de maille est le plus grand et correspond donc à la contrainte maximale).

Les pics étroits correspondent aux pics de diffraction du substrat, soit CdTe soit CdZnTe (figure 2.11), la maille étant plus courte sur le substrat CdZnTe que sur le substrat CdTe, le pic ressortira à plus grand angle.

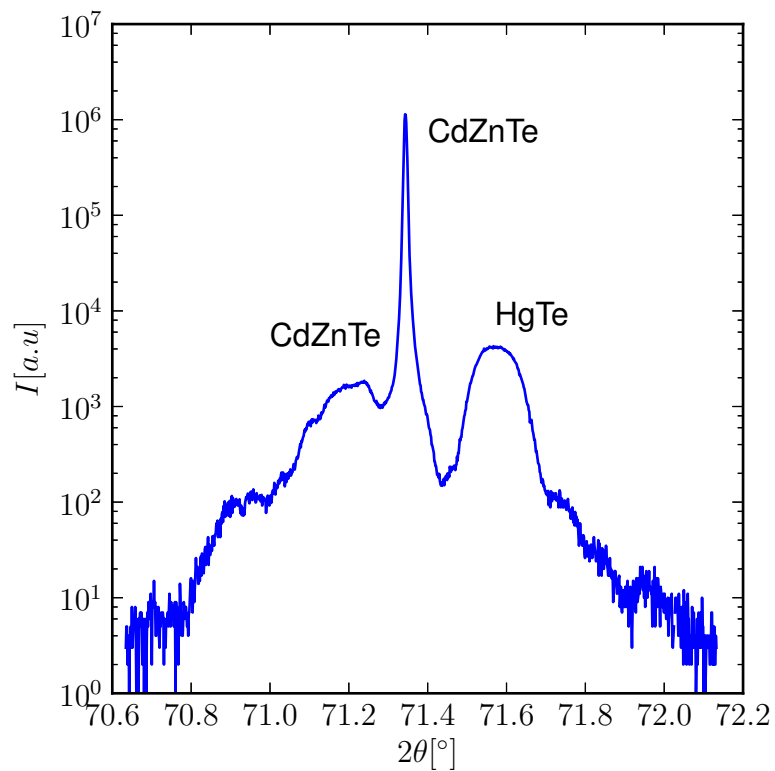


FIGURE 2.10 – Figure de diffraction X pour une croissance HgTe sur substrat CdZnTe selon l'orientation [211]. La longueur d'onde des rayons X est de $\lambda = 1,5405 \text{ \AA}$. Le pic étroit correspond à la maille du substrat. Le pic plus large correspond à la structure HgTe croit selon l'orientation [211].

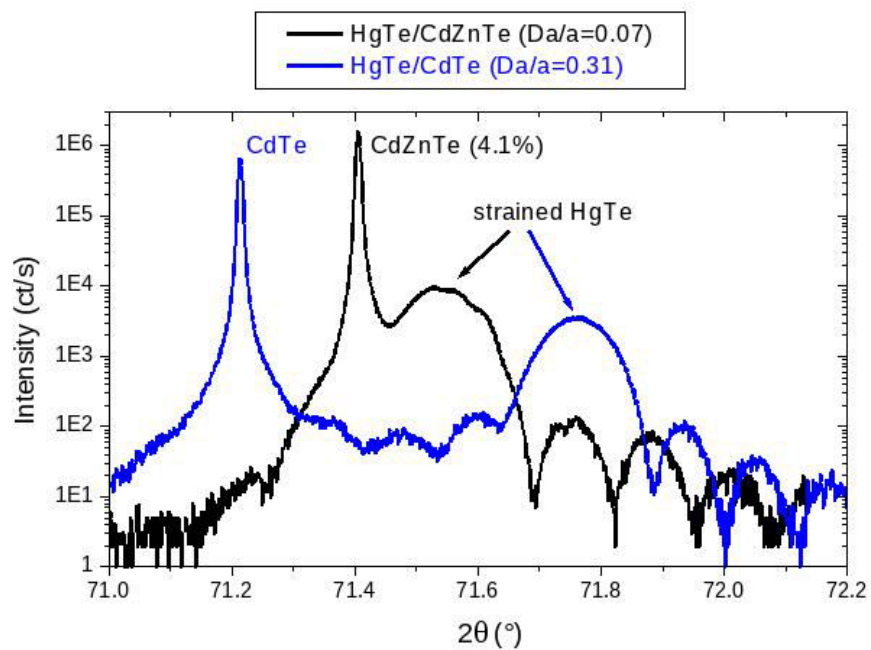


FIGURE 2.11 – Figure de diffraction X pour un substrat CdTe (en bleu) et $Cd_{0,959}Zn_{0,041}Te$ (en noir). Les pics fins correspondent aux pics de diffraction des substrats respectifs. La structure en bosse met en évidence l'empilement de HgTe au dessus de ces substrats.

2.3.3.3 Les structures HgTe/CdTe conçue au CEA LETI

Plusieurs types de structures ont été élaborées au CEA LETI avec différentes interfaces tampons, ou barrières, substrat et même différentes épaisseurs de HgTe. L'ensemble des structures fabriquées est exposé dans le tableau 2.3.

Il est noté en bleu, la structure cristalline dont je présente des résultats en magnéto-transport au chapitre 4.

Les structures avec barrières sont symétriques, c'est-à-dire qu'elles ont été déposées de part et d'autre de la structure HgTe épitaxiée. Elles permettent de protéger HgTe du substrat et de l'oxydation extérieure. Les buffers permettent d'obtenir une meilleure qualité d'épitaxie. En général, les substrats ne sont pas uniformes ou réguliers en surface ; il est ainsi plus convenable de démarrer une croissance d'épitaxie sur une surface plus régulière.

La vitesse de croissance moyenne des couches est de l'ordre de $1,3 \mu\text{m} \cdot \text{h}^{-1}$.

| substrat Zn [%] | taux de déformation da/a[%] | structures | | tampons |
|--------------------|--------------------------------|---------------------|---|-------------|
| | | épaisseur HgTe [nm] | barrières | |
| 3.15 | 0.125 | 100 | non | non |
| CdTe | 0.307 | 100 | non | non |
| 3.55 | 0.101 | 100 | non | non |
| CdTe | 0.307 | 100 | non | non |
| 3.67 | 0.095 | 100 | non | non |
| 3.78 | 0.088 | 100 | non | non |
| 4.08 | 0.07 | 100 | non | non |
| 4.12 | 0.068 | 100 | non | non |
| 4.21 | 0.063 | 100 | non | non |
| 2.8 | 0.146 | 100 | $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ 30 nm | non |
| CdTe | 0.307 | 100 | $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ 30 nm | CdTe 300 nm |
| CdTe | 0.307 | 100 | $\text{Cd}_{0.7}\text{Hg}_{0.3}\text{Te}$ 30 nm | non |
| CdTe | 0.307 | 70 | non | CdTe 300 nm |
| CdTe | 0.307 | 130 | non | CdTe 300 nm |
| CdTe | 0.307 | 100 | non | CdTe 300 nm |
| 2.36 | 0.17 | 90 | non | non |

Tableau 2.3 – Tableau regroupant les différentes structures à base de HgTe/CdTe réalisées. Le type de substrat (avec l'enrichissement en Zn) est énuméré en 1ère colonne. Si CdTe est nommé, le substrat ne contient pas de zinc. La deuxième colonne donne le désaccord de maille. La troisième colonne correspond à l'épaisseur de la pile HgTe déposée. La quatrième donne l'épaisseur de la structure autour de la pile HgTe s'il y en a une. La dernière colonne donne l'épaisseur de la couche tampon entre le substrat et la pile de HgTe.

2.3.3.4 Structures sous contrainte uniforme

La contrainte sur les couches épitaxiées peut s'analyser par les réseaux de diffraction de rayon X. La constante de réseau d'un film mince qui est cru de manière régulière sur un substrat cristallin est modifiée suivant l'axe de croissance. Du à cette contrainte, les propriétés cristallographiques du film cristallin devient anisotrope. Les réseaux de diffraction des rayons X permettent de déduire le changement des paramètres de maille due à la contrainte.

Lorsque l'épaisseur du film contraint augmente, son énergie élastique également. Au delà d'une valeur limite d'épaisseur, des dislocations se forment afin de réduire cette énergie et la contrainte se relâche au moins partiellement ([Merwe, 1963] et [van der Merwe et Jesser, 1988]).

Les épaisseurs limites dans le cas d'une croissance HgTe sur des substrats CdZnTe, où la contrainte est tenue sur toute la structure sont de l'ordre de 130 nm.

Dans le cas d'un film complètement contraint, le pas du réseau du film, suivant les directions perpendiculaires à l'axe de croissance suivra celui du substrat. Dans le cas où le film est complètement relâché, le substrat et le film auront des pas de réseau cristallin qui leur sont propres. La figure 2.12 illustre un film mince épitaxié sur un substrat dans le cas contraint (**a**) et dans le cas complètement relâché (**b**). Dans le cas contraint, il n'y a qu'une seule période dans la direction du plan de croissance. On s'attend donc suivant cette direction à n'avoir qu'un seul pic sur le réseau de diffraction. Dans le cas relâché, le film a sa périodicité propre, on s'attend donc à avoir un réseau de diffraction suivant une certaine direction.

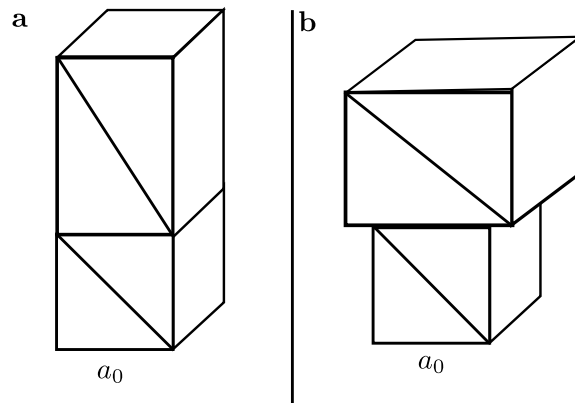


FIGURE 2.12 – Schéma de différentes contraintes pour un film épitaxié sur un substrat. **a** : couche épitaxiée complètement contrainte par le substrat de paramètre de maille a_0 . **b** : couche épitaxiée complètement relâchée où elle adopte son propre paramètre de maille différent du substrat.

La cartographie de diffraction suivant l'axe de croissance et un axe dans le plan de croissance pour un film HgTe sur un substrat CdZnTe est donnée en figure 2.13. Le réseau de diffraction est obtenu seulement sur la direction correspondant à l'axe de croissance ; ce qui prouve que le film est uniformément contraint.

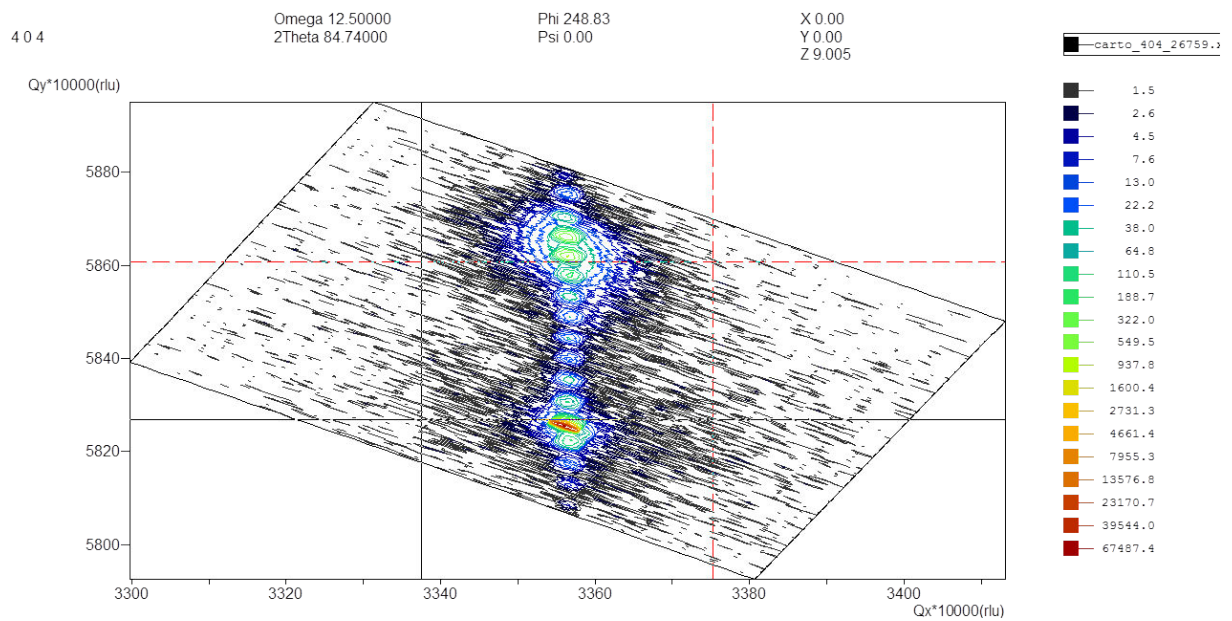


FIGURE 2.13 – HgTe contraint. Cartographie rayon X suivant les axes Q_x et Q_y du réseau réciproque du cristal. Q_y correspond à la direction de croissance de la structure CdTe/HgTe. Le pic le plus intense correspond au pic du substrat CdZnTe. L'ensemble de la cartographie couleur en bleu illustre la structure du réseau de diffraction X de la couche épitaxiée HgTe. Le fait que la figure de diffraction soit complètement alignée avec l'axe Q_y implique une contrainte uniforme sur l'ensemble de la structure HgTe [Bauer et Richter, 1996].

2.4 Mesures de structures de bandes ARPES

2.4.1 Principes de l'ARPES

L'Angle Resolved PhotoEmission Spectroscopy [ARPES] est basée sur l'effet photo-électrique observé initialement par [Hertz, 1887] et expliqué plus tard par [Einstein, 1901]. Un photon incident sur une surface peut être absorbé par un électron qui aura la faculté de s'extraire de l'échantillon avec une énergie cinétique $E_{\text{cin}} = h\nu - \Phi - E_{\text{liaison}}$ (avec $h\nu$ l'énergie du photon incident, Φ la fonction de travail de l'échantillon qui quantifie le potentiel de barrière de la surface empêchant les électrons de valence de s'extraire; pour les métaux elle vaut typiquement entre 4 eV-5 eV, et E_{liaison} l'énergie de l'électron lorsqu'il était lié à la structure de bande). Cet effet peut fournir une connaissance détaillée de la structure électronique des solides étudiés par ARPES.

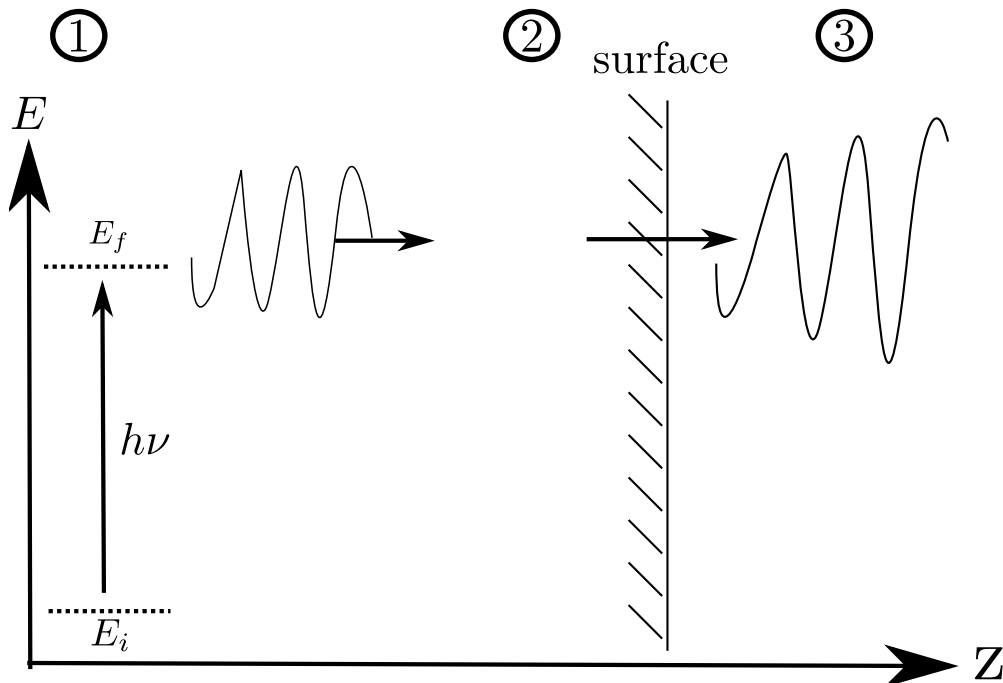


FIGURE 2.14 – Modèle à trois pas pour la photoémission. (1) : transition de l'électron d'un état d'énergie E_i vers un état d'énergie E_f après absorption d'un photon d'énergie $h\nu$. (2) : propagation de l'électron vers la surface (3) : extraction de l'électron à travers la barrière de potentiel de la surface.

Le processus de photoémission d'un électron hors d'un échantillon est relativement complexe; cependant un modèle simplifié, appelé *modèle à 3 pas* ([Damascelli, 2004]) permet raisonnablement de comprendre ce processus. Ce modèle sépare le processus de photoémission en trois étapes majeures :

1. le photon incident excite l'électron du cristal le faisant transiter d'un état initial d'énergie E_i vers un état excité E_f des états de Bloch dans le cristal.
2. l'électron dans l'état excité se propage jusqu'à la surface du matériau.
3. l'électron s'échappe de l'échantillon vers le vide après avoir franchi la barrière de potentiel de la surface Φ .

L'ensemble de ces étapes sont illustrées dans la figure 2.14.

Les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement imposent une contrainte entre le photon incident et les états d'énergie sondés dans le cristal :

$$E_f - E_i = h\nu \quad (2.26)$$

$$\vec{k}_f - \vec{k}_i = \vec{k}_\nu \quad (2.27)$$

Avec $h\nu$ l'énergie du photon incident, \vec{k}_ν sa quantité de mouvement. Cependant puisque la quantité de mouvement du photon est très petite devant celle du moment cristallin de l'électron dans un cristal, on pourra supposer la conservation de la quantité de moment cristallin de la transition dans l'équation (2.27) ($\vec{k}_f = \vec{k}_i$)

Les expériences d'ARPES comme celle illustrée en figure 2.15, récupèrent 2 données principales par l'analyseur :

- l'énergie cinétique E_{cin} de l'électron éjecté hors du cristal
- la direction d'éjection de l'électron

Ainsi, l'ARPES fournit une information sur le moment cristallin \vec{k} de l'électron éjecté et l'énergie de liaison de l'électron E_B comme on va le voir (la résolution des analyseurs actuels est entre 2 meV-10 meV pour l'énergie et de 0,2° en angle). On peut, alors, remonter à la relation de dispersion électronique des électrons dans le réseau réciproque à l'intérieur du solide. Pour ce faire, il suffit de mesurer l'angle à partir duquel les électrons sont émis depuis l'échantillon (figure 2.15).

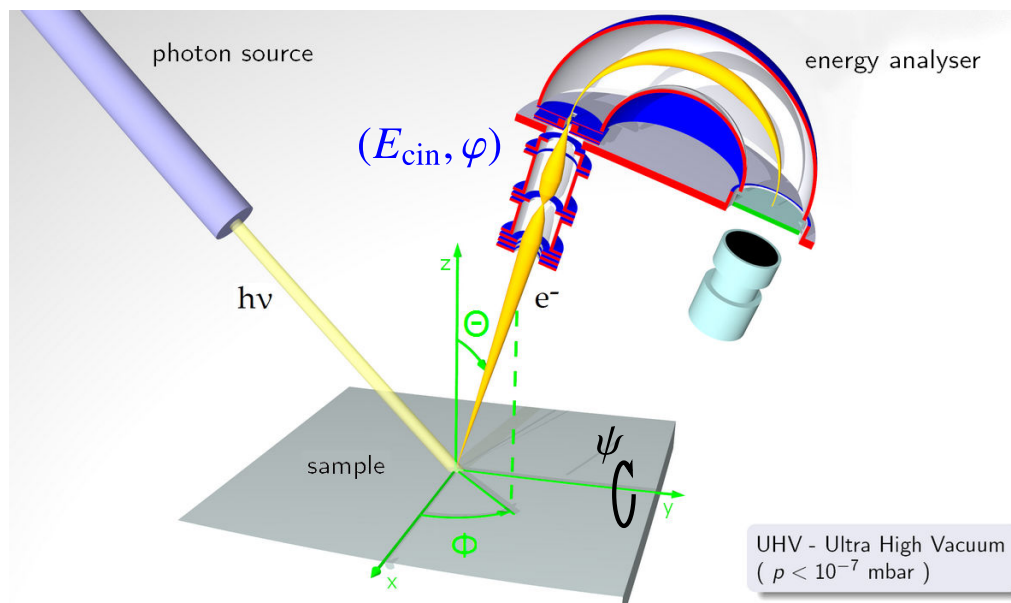


FIGURE 2.15 – Schéma d'une expérience ARPES. Depuis une source, un photon est émis avec une énergie $h\nu$. Les électrons émis par photoémission ont une direction de sortie bien définie par les angles (θ, Φ) , ces électrons sont focalisés à l'entrée de l'analyseur. Au sein de l'analyseur un champ magnétique constant courbe la trajectoire de ces derniers. Le rayon de courbure est fonction de l'énergie cinétique des électrons, l'angle d'entrée des électrons dépend de l'angle θ . L'impact sur le détecteur détermine l'énergie cinétique de l'électron E_{cin} et son vecteur k_{\parallel} comme expliqué dans le texte.

L'énergie cinétique est reliée par la loi de conservation de l'énergie à l'énergie de liaison E_B de l'électron dans le solide, à la fonction de travail de la surface du solide ϕ et à l'énergie initiale du photon incident $h\nu$.

$$E_{\text{cin}} = h\nu - \Phi - E_B \quad (2.28)$$

Dans le vide, l'amplitude du vecteur \vec{K} est reliée à l'énergie cinétique E_{cin} : $K = P/\hbar = \sqrt{2mE_{\text{cin}}}/\hbar$. En décomposant cette amplitude suivant une base sphérique on obtient en fonction de l'angle d'orientation du détecteur par rapport à la direction d'émission :

$$\begin{aligned} K_x &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_{\text{cin}}} \sin \theta \cos \phi \\ K_y &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_{\text{cin}}} \sin \theta \sin \phi \\ K_z &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_{\text{cin}}} \cos \theta \end{aligned} \quad (2.29)$$

La composante dans le plan (\hat{x}, \hat{y}) de \vec{K} s'écrit $\vec{K}_{\parallel} = \vec{K}_x + \vec{K}_y$ et la composante normale au plan $\vec{K}_{\perp} = \vec{K}_z$. Si la surface est suffisamment lisse, on peut considérer que celle-ci ne brise pas la symétrie de translation dans le plan. Dans ce cas, le vecteur d'onde parallèle de l'électron est conservée à la traversée de la surface de l'échantillon, et $\vec{k}_{\parallel} = \vec{K}_{\parallel}$. Au contraire le vecteur d'onde normale à la surface ne l'est pas (k_z n'est plus un bon nombre quantique à la traversée de la surface).

Au final, il est possible d'extraire le moment cristallin \vec{k}_{\parallel} pour une énergie E_{cin} donnée à partir du détecteur. On obtient donc :

$$\begin{cases} E_B = h\nu - \Phi - E_{\text{cin}} \\ k_{\parallel} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_{\text{cin}}} \sin \theta \end{cases} \quad (2.30)$$

2.4.1.1 Profondeur de la surface d'étude par ARPES

La propagation de l'électron excité jusqu'à la surface est décrite par un libre parcours moyen. Ce libre parcours moyen donne la distance sur laquelle l'électron ne subit pas de diffusions inélastiques. Cette diffusion est causée soit par de la diffusion électron-phonon, soit par de la diffusion électron-électron dans l'échantillon. Les électrons diffusés inélastiquement ont une énergie cinétique inférieure à celle attendue depuis l'état initial E_i . Cela a pour conséquence l'apparition d'un fond diffus dans les expérience d'ARPES et qui est décroissant avec l'augmentation de l'énergie cinétique E_{cin} .

La courbe de la figure 2.16 a une tendance « universelle » dans le sens où celle-ci garde ses valeurs de longueur de diffusion inélastique pour un ensemble de données expérimentales touchant différents types d'échantillons et ce avec la même tendance. Cette courbe possède un minimum entre 5 Å-10 Å pour une énergie des photons incident entre 20 eV-100 eV.

Les faibles profondeurs sondées font que l'ARPES reste une technique privilégiée pour l'étude des structures de bandes en surface des échantillons. Elles expliquent également pourquoi les spectres ARPES ne permettent pas de remonter à la projection suivant k_z (k_z n'est pas un bon nombre quantique à travers la surface).

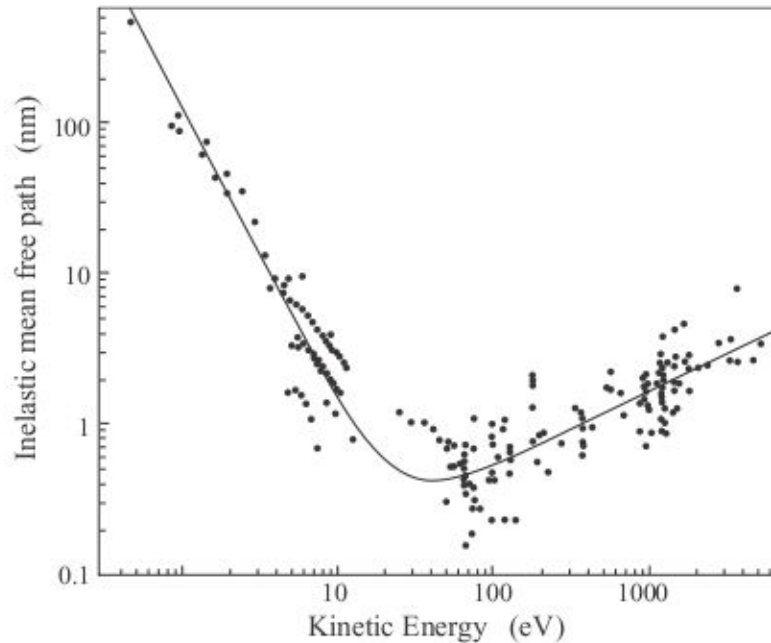


FIGURE 2.16 – Libre parcours moyen inélastique d'un électron photoémis dans un cristal en [nm] en fonction de l'énergie du photon d'incident [eV]. La courbe a une tendance générale et permet de connaître la profondeur sur laquelle la surface est sondée.

2.4.1.2 Intensité du signal

L'intensité de photoémission déterminée par l'analyseur des expériences ARPES va dépendre de 3 termes principalement (Damascelli [2004]) :

$$I(\vec{k}_{\parallel}, E) = I_0(\vec{k}_{\parallel}, E) \cdot f(E) \cdot A(\vec{k}_{\parallel}, E) \quad (2.31)$$

- Le terme I_0 dans (2.31) est proportionnel à l'élément de matrice du Hamiltonien d'interaction dipolaire entre une onde électromagnétique et un électron.
 $I_0(\vec{k}_{\parallel}, E) \propto |\langle \Psi_f(\vec{k}_{\parallel}) | H_{\text{int}} | \Psi_i(\vec{k}_{\parallel}) \rangle|^2$ avec $H_{\text{int}} = e/m\vec{A} \cdot \vec{p}$ où \vec{A} est le potentiel vecteur du photon incident et \vec{p} le vecteur quantité de mouvement de l'électron.
- $f(E) = 1/(\exp(E/kT) + 1)$ est la fonction de Fermi qui va prendre en compte le fait, qu'en ARPES, seuls les électrons en dessous de l'énergie de Fermi sont sondés.
- $A(\vec{k}_{\parallel}, E)$ est la fonction spectrale à un électron ; elle relie la probabilité d'un état électronique à l'énergie E et au moment cristallin \vec{k}_{\parallel} .

2.4.1.3 Reconstruction de la structure de bande

Si on souhaite pouvoir cartographier la structure de bande d'un cristal suivant le moment cristallin parallèle à la surface, il est nécessaire de changer l'inclinaison du cristal par rapport à l'angle de mesure de l'analyseur. Cela est réalisé en changeant l'angle ψ visible sur la figure 2.15 et sur la figure 2.17.

Si on considère le système de coordonnées de **(a)** sur la figure 2.17 (x_0, y_0, z_0) la rotation d'un angle ψ va changer ce jeu de coordonnées en (x_1, y_1, z_1) par une opération de rotation autour de l'axe y_0 .

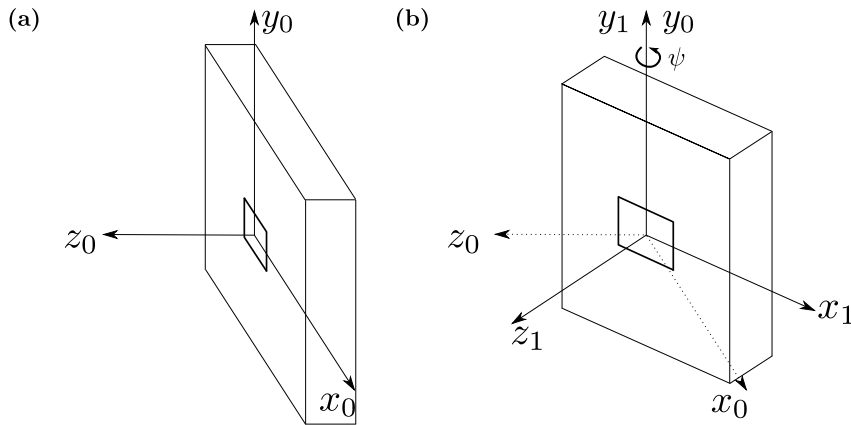


FIGURE 2.17 – Rotation de la surface d'un angle ψ autour de l'axe y_0 . **(a)** : base initiale (x_0, y_0, z_0) de la surface avant une rotation d'axe. **(b)** : changement de base (x_1, y_1, z_1) réalisé après rotation.

Dans la base initiale, le vecteur d'onde parallèle \vec{k}_{\parallel} s'écrit comme $(0, k \sin \theta, k \cos \theta)$. Si l'on cherche à définir \vec{k}'_{\parallel} suivant ce nouveau jeu de coordonnées pour tenir compte de l'angle d'inclinaison ψ du cristal, il convient de faire agir la matrice de rotation sur \vec{k}_{\parallel} comme réalisé en (2.32).

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \psi & 0 & -\sin \psi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \psi & 0 & \cos \psi \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ k \sin \theta \\ k \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

ce qui donne :

$$\begin{cases} k'_{x\parallel} = -k \sin \theta \sin \psi \\ k'_{y\parallel} = k \cos \theta \sin \psi \end{cases} \quad (2.33)$$

L'échantillonnage est à pas constant pour la rotation de l'échantillon suivant l'angle ψ . L'énergie cinétique E_{cin} et l'angle θ sont à pas constant d'échantillonnage. Ils dépendent de la résolution du photodétecteur. A chaque angle d'inclinaison de la surface ψ , le détecteur compte le nombre de coup reçu pour un ensemble de E_{cin} et θ . L'échantillonnage suivant l'échelle k_x et k_y ne sera pas à pas constant

2.4.2 États de surfaces sur les isolants topologiques 3D

Les mesures ARPES ont constitué un excellent moyen pour sonder les états de surfaces des isolants topologiques 3D. Les premières observations des isolants topologiques 3D ont été réalisées en ARPES sur BiSe par [Hsieh *et al.*, 2008b]. D'autres systèmes ont également révélé leur propriété topologique, Bi₂Te₃ ([Chen *et al.*, 2009]), Bi₂Se₃ ([Zhang *et al.*, 2010b]), BiSb ([Hsieh *et al.*, 2009c]), ou encore Sb₂Te₃ ([Hsieh *et al.*, 2009b]). L'avantage de ces systèmes pour l'ARPES est de pouvoir offrir un gap d'énergie en volume suffisamment grand pour observer les points de Dirac à la surface (typiquement 200 meV) avec une résolution suffisante pour observer la polarisation en spin des cônes de Dirac sous-jacents.

Des mesures ARPES ont également été réalisées sur des structures HgTe/CdTe par [Brüne *et al.*, 2011] quand bien même l'absence d'un gap d'énergie de volume (la structure HgTe n'a pas été contrainte pour les mesures ARPES et le dopage n'a pas été suffisant pour positionner l'énergie de Fermi au dessus du point de Dirac), une bande de surface linéaire est observée. Le point de Dirac n'est pas visible et la mesure de la polarisation en spin des états de surfaces est absente.

Dans la partie suivante, je reporte également des mesures similaires réalisées sur des structures HgTe contrainte par un substrat CdTe. On observera également l'apparition d'une bande de surface linéaire avec un point de croisement des bandes, le point de Dirac.

2.4.3 États de surfaces sur les structures HgTe/CdTe

2.4.3.1 Échantillons de mesure et traitement des surfaces sous ARPES

Les mesures ARPES ont été réalisés sur un ensemble de structures dont la surface cristallographique était soit [100], soit [211]. HgTe était maximalelement contraint car déposé sur un substrat CdTe (ce qui donne un gap de 21 meV selon (2.22)). Les surfaces HgTe étaient éventuellement protégées par une surcouche de CdTe pour l'éviter l'oxydation. Avant toutes mesures, les surfaces subissaient un traitement par *sputtering* Ar (dosage de 0,5 keV pendant 30 s) afin de désoxyder la surface. L'état de la surface était vérifié par une analyse RHEED dans la même chambre que la préparation sous ultra-vide. Les échantillons étaient ensuite transférés, toujours sous ultra-vide dans la chambre d'analyse ARPES. Les photons du faisceau incident étaient polarisés linéairement.

L'épaisseur de la surcouche de CdTe était trop épaisse pour pouvoir sonder l'interface CdTe/HgTe et d'en vérifier les états de surfaces. Les échantillons protégés par une surcouche de CdTe ont alors été gravé plus longtemps afin que l'interface HgTe soit accessible aux mesures ARPES. Cela a été mis en œuvre par traitement de *sputtering* Ar à 0,5 keV durant 15 min. Il convient aussi de noter que seules les surfaces dont l'orientation cristalline était [100] ont permis d'obtenir un signal. La cause peut être justifiée par le fait que la surface d'orientation [211] est constitué un plus grand nombre de marches atomiques que l'orientation [100] et que le nombre de marches atomiques sur la section du faisceaux incident (mesurant quelques μm) doit être limité pour obtenir un spectre correct.

2.4.3.2 Structures de bande de surface de HgTe

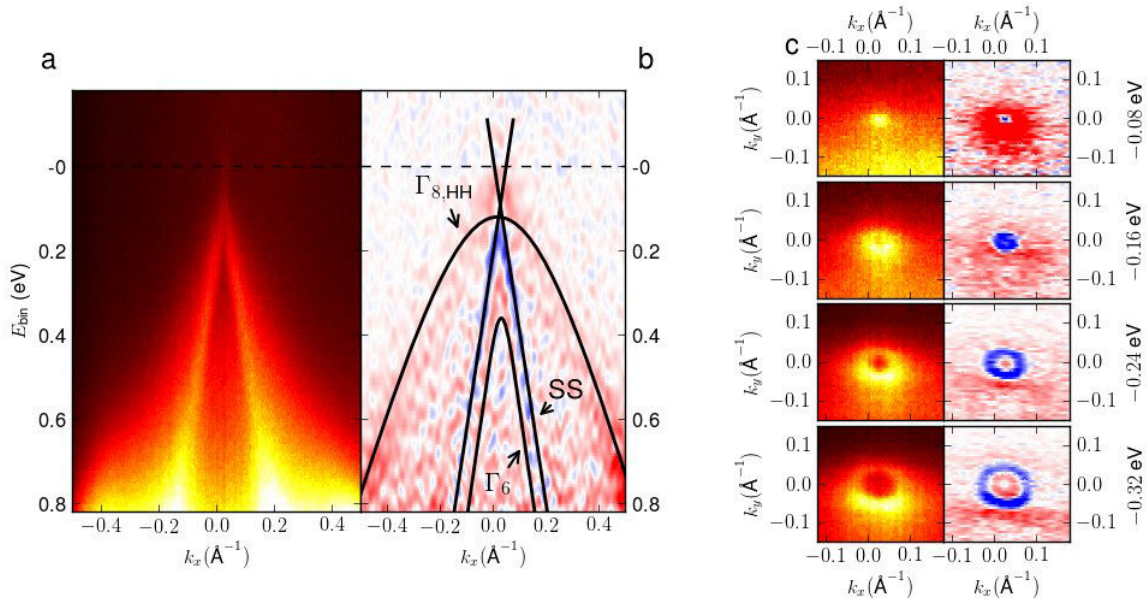


FIGURE 2.18 – Structure de bande des états de surface sous spectre ARPES **a** : Bandes de surface et bandes de volume sous spectre ARPES à température ambiante autour du point Γ de la zone de Brillouin. Les mesures ont été prises pour des k_{\parallel} compris entre $-0,5 \text{\AA}^{-1}$ et $0,5 \text{\AA}^{-1}$ et une énergie de liaison allant de 0 à 800 meV. Plus la couleur du spectre est intense, plus la densité d'état est importante. **b** : Traitement numérique par dérivée seconde de **a** pour éliminer le fond diffus. Les bandes de volumes Γ_8 (HH), Γ_6 ainsi que les états de surfaces (SS) ont été soulignés. **c** : Coupe en énergie de $-0,32$ eV, $-0,24$ eV, $-0,16$ eV et $-0,08$ eV dans le plan (k_x, k_y) autour du point Γ .

La figure 2.18 montre les données observées près du point Γ de la zone de Brillouin, à température ambiante sur une surface HgTe traitée comme précédemment et avec une surface suivant une orientation $[100]$. Les données ARPES brutes ont été traitées numériquement par une dérivée seconde afin d'amplifier les effets des structures de bande par rapport à un fond diffus. Selon la figure 2.18, nous observons clairement une bande électronique de dispersion linéaire que l'on attribue aux états de surface de HgTe. Suivant la figure 2.18 **b**, les bandes de volume Γ_8 (HH) et Γ_6 et les bandes de surfaces (SS) ont été mis en évidence.

Les états de surface montre clairement une dispersion conique autour du point Γ de la zone de Brillouin. Cette dispersion conique est visible si nous observons à des tranches d'énergie données la forme des états de surface dans le plan (k_x, k_y) . Pour des tranches d'énergie près de l'énergie de Fermi (entre $-0,32$ eV et $-0,08$ eV), la bande de surface est circulaire avec un rayon diminuant lorsque l'on se rapproche du point de Dirac.

2.4.3.3 Comportement du spectre ARPES avec la température et point de Dirac

Les mesures ARPES ne permettent d'observer que les états électroniques du cristal en dessous de l'énergie de Fermi. Dans les données déjà présentées, il s'avère que l'énergie de

Fermi ne se situe pas au-dessous du point de Dirac en énergie, ce qui limite son observation. Toutefois, l'intensité des signaux ARPES (2.31) est reliée à la fonction de Fermi. Cette fonction de Fermi a une variation brute autour de l'énergie de Fermi de l'ordre de $k_B T$. Si la position du point de Dirac en énergie est de l'ordre de l'énergie de Fermi (au moins de l'ordre de $k_B T \approx 25$ meV), il serait alors possible d'observer le croisement des bandes de surface autour du point de Dirac.

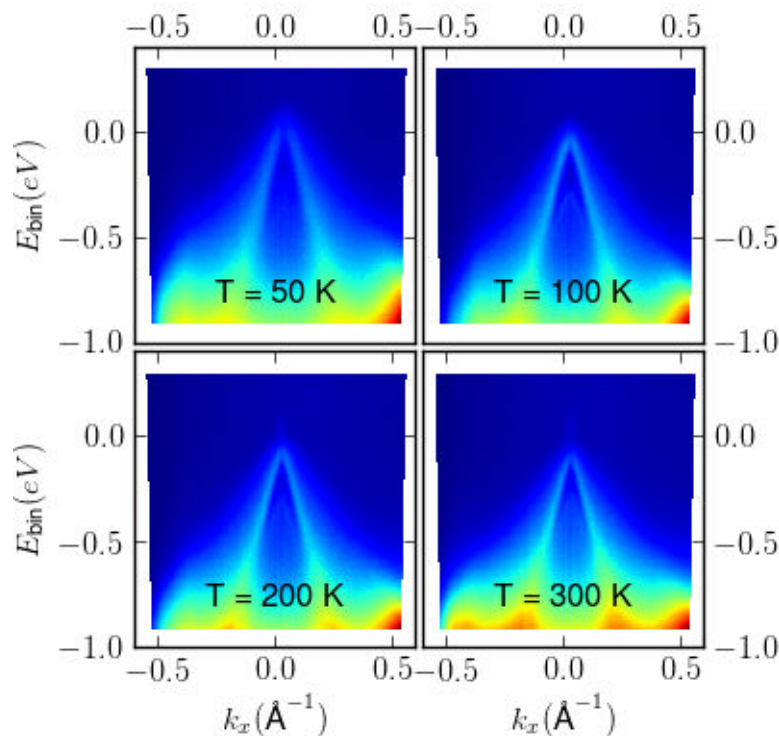


FIGURE 2.19 – Effet de la température sur les spectres ARPES des états de surface. Les spectres présentés ont été acquis pour des températures de 50 K, 100 K, 200 K, 300 K comme indiqué sur les figures. Les spectres sont localisés autour du point Γ de la zone de Brillouin pour un k_{\parallel} entre $-0,5 \text{ \AA}^{-1}$ et $0,5 \text{ \AA}^{-1}$ et pour une énergie de liaison E_B allant de 0 eV à -800 meV. Les états de surfaces au-dessus du point de Dirac sont visibles pour des températures au-dessus de 100 K.

La figure 2.19 montre que si la température augmente de 50 K jusqu'à 300 K, on observe toujours un croisement de bande autour du point Γ près de l'énergie de Fermi. A partir de 100 K, le spectre au-dessous du point de Dirac disparaît laissant place à un fond diffus. Nous avons bien la confirmation d'un point de recouvrement de bandes de surface.

2.4.3.4 Localisation des états de surface HgTe

La courbe 2.16 montre qu'il est seulement possible de sonder les états de surfaces d'un matériau sur des épaisseurs limite d'une dizaine de \AA pour des valeurs d'énergie des photons incidents à une dizaine de eV.

Les états de surfaces sont bien localisés à la surface sur une épaisseur d'une dizaine de \AA comme le montre la figure 2.20. En modifiant l'énergie du photon incident, on sonde

des électrons qui seront émis à différentes profondeurs (figure 2.16). Les structures qui correspondent à la surface du matériau seront forcément sondés et ces électrons auront la même énergie de liaison E_B . À l'inverse, les électrons de volume, qui doivent parcourir l'épaisseur de l'échantillon, auront une énergie de liaison qui dépendra de la profondeur du fait des interactions inélastiques en parcourant le matériau. Le cône de surface mis en valeur par les droites noires sur la figure 2.20 reste indépendant de l'énergie du photon incident ; à l'inverse des autres structures dans le spectre ARPES ce qui prouve que ce cône correspond à l'état de surface topologique.

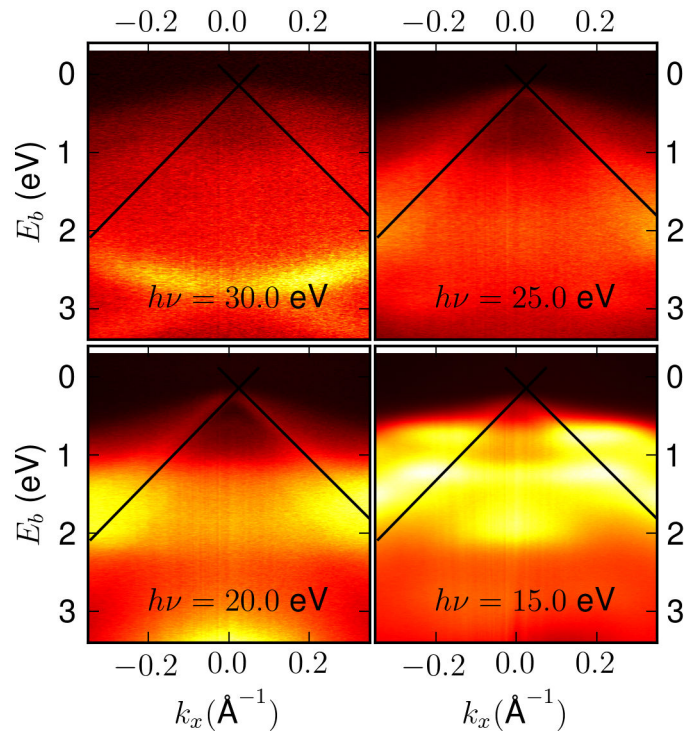


FIGURE 2.20 – Spectres ARPES des états de surfaces en fonction de l'énergie incident $h\nu$ des photons. Les spectres présentés ont été acquis pour des énergies de photon de 15 eV, 20 eV, 25 eV, 30 eV comme indiqué sur les figures. Les spectres sont localisés autour du point Γ de la zone de Brillouin pour un k_{\parallel} entre $-0,5 \text{ \AA}^{-1}$ et $0,5 \text{ \AA}^{-1}$ et pour une énergie de liaison E_B allant de 0 eV à 3 eV.

Chapitre 3

Échantillons et dispositif de mesure.

Les isolants topologiques ont des propriétés de surface caractéristique uniques tant au niveaux de la relation de dispersion électronique *linéaire* que par leur mobilité. Ces caractéristiques intrinsèques aux porteurs de charges sont mesurables avec des structures simples de types barres de Hall. Avec ces systèmes, il est possible d'extraire la résistance longitudinale et la résistance de Hall. L'évolution de ces quantités en fonction des paramètres tels que la température, l'amplitude du champ magnétique extérieur, permet de remonter aux propriétés intrinsèques de ces porteurs de charges. Plusieurs groupes ont utilisé ces dispositifs de barre de Hall pour déterminer le comportement des isolants topologiques 3D. Citons, notamment, pour Bi_2Se_3 , Chen *et al.* [2011, 2010], aussi Sacépé *et al.* [2011] en utilisant des contacts de type supraconducteur et une grille arrière sur SiO_2 pour dépléter les charges ; également dans $\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x}\text{Te}_3$ [Kong *et al.*, 2011a] ; et même dans HgTe [Brüne *et al.*, 2011] bien que l'évolution des propriétés physiques en fonction d'une grille ne furent pas publiées. Les structures que je présenterai ont été conçues dans le cadre d'une collaboration avec le CEA LETI. Notre but est de parvenir à réaliser les mesures de transport sur ces structures, afin de caractériser pour la première fois leur évolution en fonction de l'application d'une tension de grille.

Les échantillons pour les mesures de magnéto-transport ont été dessinés sous forme de barres de Hall. Différentes tailles, longueur L et largeur W , ont été fabriqués ; cependant toutes ont gardé le même rapport d'aspect (L/W constant) afin d'obtenir une résistance carrée comparable. Différents types de grille ont été réalisés afin de pouvoir convenablement moduler la quantité de charge électrique dans la barre. Différentes épaisseurs furent réalisées (d'une centaine de nanomètre à une dizaine de nanomètre), et différents diélectriques (CdTe amorphe et Al_2O_3 principalement) furent testés afin d'obtenir un bon compromis entre une capacité par unité de surface efficace et un courant de fuite minimal. Les mesures électriques des barres de Hall ont été réalisées dans un cryostat muni d'un module permettant de faire varier la température de l'ambiante à 1,5 K [VTI], les basses températures permettant de facilement limiter l'énergie d'activation des structures HgTe et aussi de limiter les transitions thermiques entre les différents niveaux de Landau. Ce cryostat était également muni d'une bobine supraconductrice permettant d'obtenir des valeurs de champ magnétique allant de 0 T à 18 T. De plus, j'ai participé à la conception et à la réalisation d'une canne de mesure adaptable au VTI. Cette dernière, dont l'orien-

tation est contrôlable mécaniquement, m'a permis de réaliser les mesures en fonction de l'orientation du champ magnétique.

3.1 Fabrications échantillons

3.1.1 Les barres de Hall

Le schéma de la figure 3.1 illustre les dépôts successifs réalisés au CEA LETI pour l'élaboration des grilles sur les structures HgTe/CdTe. Le but étant d'obtenir au final ce type d'empilement.

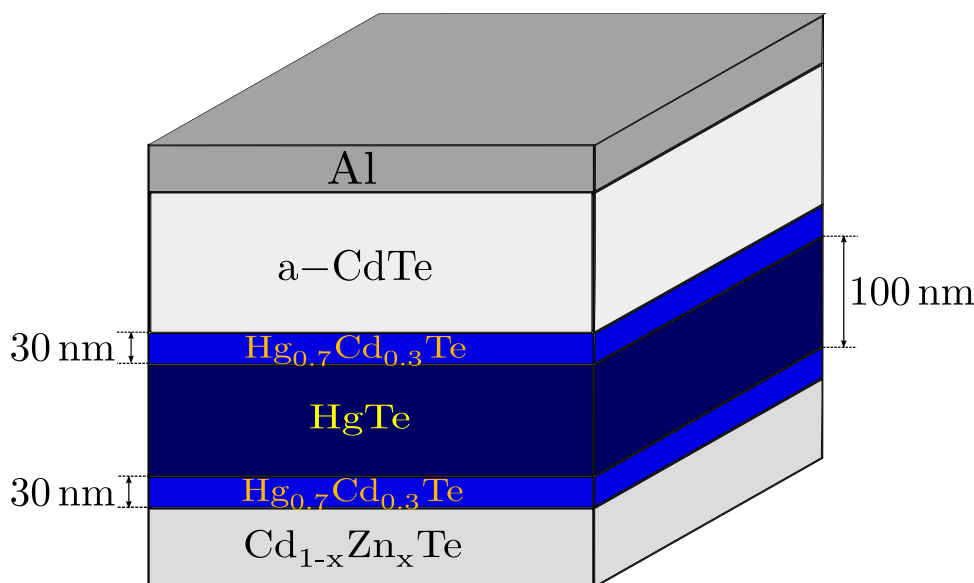


FIGURE 3.1 – Structures typiques des échantillons avec grille CdTe amorphe sur HgTe/CdTe. $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ correspond au substrat sur lequel la structure type HgTe/CdTe est déposée. La couche $\text{Hg}_{0.7}\text{Cd}_{0.3}\text{Te}$ est un isolant qui sert de tampon pour isoler les interfaces HgTe soit du substrat, soit du dépôt de grille. Celui-ci se place de part et d'autre de la structure HgTe afin également de « symétriser » le comportement des surfaces HgTe. Ces dépôts tampons ont une épaisseur de 30 nm. L'isolant de grille est en général en CdTe amorphe avec une épaisseur d'une centaine de nanomètre. La pile HgTe est épaisse de 100 nm.

Afin de caractériser les échantillons d'isolant topologique 3D, des barres de Hall furent réalisées. Celles-ci comportent 2 contacts courants (I^+ et I^-) et 4 contacts tensions. Différents rapports d'aspect ont été testés, mais les résultats que je présenterai ont été obtenus pour des barres ayant une longueur $L \approx 200 \mu\text{m}$ et une largeur $W \approx 50 \mu\text{m}$. Un exemple typique des barres obtenues sont montrées en figure 3.2. Les contacts courants sont définis suivant I^\pm et les contacts de tension suivant $V_{1,2}^\pm$. Pour une mesure de tension longitudinale, il suffit de prendre des contacts parallèles à l'injection de courant comme V_1^+ et V_1^- , puis pour une mesure de tension de Hall, V_1^+ et V_2^+ .

3.1.1.1 Fabrication des échantillons

Pour réaliser des échantillons de taille micrométrique, nous avons utilisé les méthodes standards de lithographie optique. L'étape de fabrication s'est déroulée pas à pas comme suit :

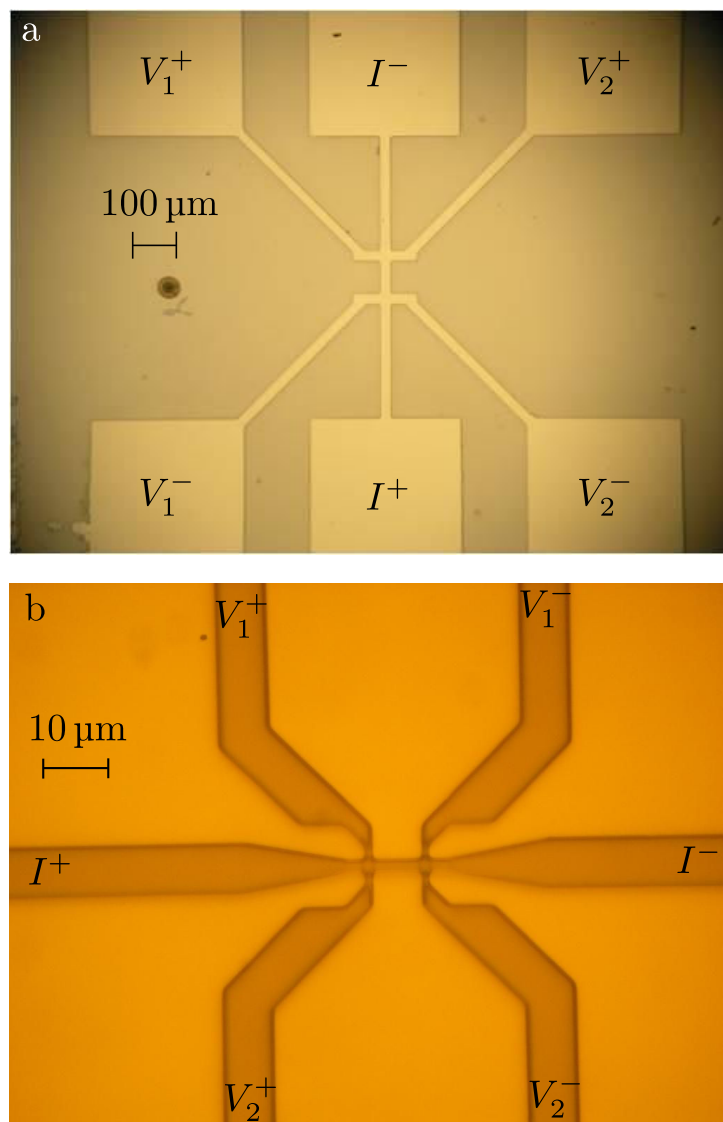


FIGURE 3.2 – Exemples de barres de Hall réalisées par lithographie optique. **a** : Photographie d'un échantillon barre de Hall $L = 200 \mu\text{m}$, $W = 50 \mu\text{m}$. **b** : Barres de Hall $L = 10 \mu\text{m}$, $W = 2,5 \mu\text{m}$.

lithographie : Une étape de lithographie optique où une résine photosensible est déposée à la surface. Un masque définissant la structure à dessiner est posé à la surface de l'échantillon avant l'exposition par ultra-violet. La résine est alors développée : les parties exposées, insolées, de la résine sont dissoutes par la solution de développement.

attaque chimique : Une attaque chimique est réalisée afin de retirer les couches de HgTe et HgCdTe et permettant la réalisation de la barre de Hall.

évaporation : La couche métallique qui servira aux électrodes est déposée par évaporation d'aluminium sur une autre résine développée. Cette résine est ensuite enlevée par de l'acétone et seul le métal directement en contact avec la structure reste, c'est le *lift-off*.

Sur la figure 3.3, les différentes étapes sont détaillées. Les étapes **a**, **b**, **c**, **d** correspondent à la lithographie optique. Les étapes **e** et **f** dans le cas d'une gravure par attaque chimique; cette série d'étapes fut réalisée pour la création des structures en forme de barres de Hall. Les étapes **e'** et **f'** pour une évaporation métallique utilisée dans le cas de la fabrication des contacts ohmiques et de la grille comme je le présenterai ultérieurement.

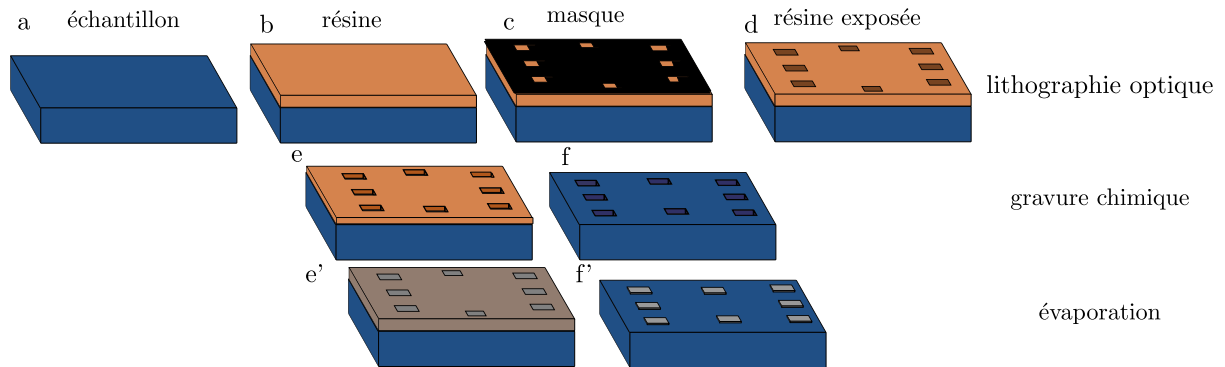


FIGURE 3.3 – Principe de lithographie optique, gravure chimique et évaporation. Comme expliqué dans le texte, **(a)**, **(b)**, **(c)**, **(d)** constituent les étapes de la lithographie donc la structure de type barre de Hall et contacts sont exposés à la résine. Les étapes **(e)**, **(f)** et **(e')**, **(f')** sont réalisées par deux étapes différentes : soit pour graver, soit pour déposer des contacts métalliques.

3.1.1.2 Application aux structures HgTe/CdTe

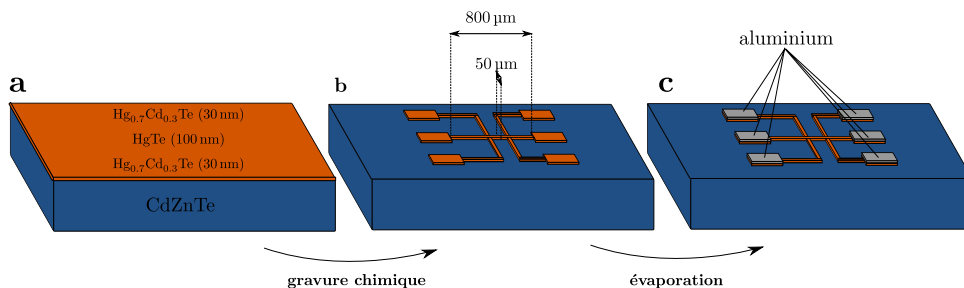


FIGURE 3.4 – Étape de gravure et dépôt métallique pour les contacts ohmiques. **a** : structure à graver. La zone bleue correspond au substrat initial, ici CdZnTe. La zone orangée correspond aux structures épitaxiées, interface tampons HgCdTe et pile HgTe. **b** : gravure chimique. **c** : évaporation métallique.

La figure C.1 décrit le déroulement général de la photolithographie sur les structures type HgTe.

- Couche de structure type à lithographier.
- La gravure chimique dessine la barre de Hall et les plots des contacts ohmiques de taille caractéristique de 100 nm.
- Une évaporation d'aluminium est réalisée sur les plots afin de concevoir les contacts ohmiques.

Les premiers échantillons furent conçus de la sorte, l'inconvénient était le manque possible de déplétion de charge à la surface des structures HgTe/CdTe. Il a fallu donc réaliser une étape supplémentaire pour fabriquer des grilles.

3.1.2 Effet de grilles

3.1.2.1 Fabrication des grilles

Des grilles ont été conçues afin de pouvoir, par effet de champ, modifier la quantité de charge à la surface de HgTe. La fabrication des grilles se déroule comme suit : À partir de la barre de Hall lithographiée, une couche de diélectrique (Al_2O_3 ou CdTe) est déposée par ALD, puis une grille est lithographiée avant de réaliser une déposition d'aluminium d'une épaisseur de 100 nm. L'échantillon est ensuite plongé dans un bain d'acétone afin de retirer la résine.

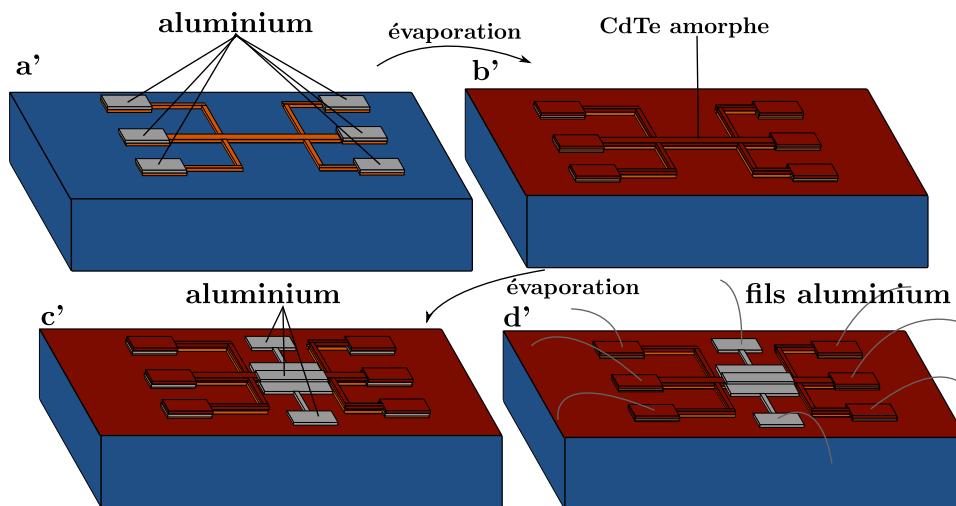


FIGURE 3.5 – *Étape de lithographie pour la conception de la grille. Les différentes étapes de fabrication a', b', c', d', sont expliquées dans le texte en 3.1.2.1*

L'ensemble du processus de fabrication est illustrée par la figure 3.5

- a' Barre de Hall où les contacts ohmiques sont déjà réalisés.
- b' La barre de Hall est recouverte par évaporation d'une couche de diélectrique d'épaisseur variable (100 nm dans le cas du CdTe amorphe et 10 nm dans le cas de Al_2O_3).
- c' Une couche d'une centaine de nanomètre d'aluminium est ensuite évaporée sur la structure de la grille lithographiée ; pour ensuite être éliminée en partie par un bain d'acétone.
- d' Les contacts ohmiques et les contacts de grille sont ensuite microsoudés avec des fils d'aluminium connectés sur la céramique du porte-échantillon.

Deux types de diélectriques furent testés :

- CdTe amorphe
- Al_2O_3 amorphe

Chacun présentant des avantages et des inconvénients. Dans le cas de la réalisation d'une grille en Al_2O_3 , l'inconvénient majeur réside dans le procédé de dépôt. Il est nécessaire de chauffer les structures au delà d'une centaine de degrés ; à partir de ces températures, la stabilité de la structure HgTe n'est plus garantie, le coefficient de migration du mercure devient non fiable et nous perdons la régularité de la surface. La création d'une grille en CdTe est plus délicate mais elle nécessite une température moindre et permet donc de conserver les structures HgTe/CdTe intactes.

Différentes épaisseurs de grille furent également réalisées notamment en Al_2O_3 . Des épaisseurs entre une dizaine de nanomètre à quelques centaines de nanomètres furent testées. L'important est de pouvoir moduler les charges à la surface de HgTe efficacement, pour cela il faut une capacité surfacique grande $C_s \propto \epsilon/d$ et une épaisseur de diélectrique faible. La contrepartie est la diminution de la résistance de fuite (au premier ordre, $R_L \propto d/S$).

La valeur de la capacité des grilles est donnée en annexe C.

3.1.2.2 Test de grille

Enfin le tout est microsoudé entre l'échantillon et le porte-échantillon. Les tests de fuite de grille sont réalisés avec un amplificateur de courant bas bruit DLPCA-200 fem de Femtoⁱ. L'intérêt est d'observer l'effet Schottky de la grille afin de calibrer l'intervalle de tension effective que peut subir la grille.

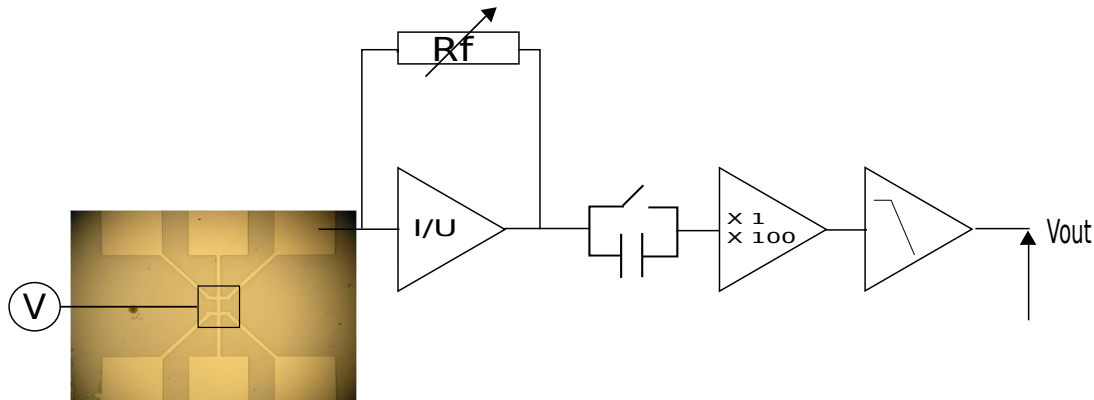


FIGURE 3.6 – Schéma électrique de tests de grille. Une tension est appliquée sur la grille avec un générateur de tension de type Yokogawa, tandis que chaque contact ohmique est flottant excepté celui contacté à l'appareil de détection DLPCA-200 lequel convertit le courant mesuré en tension par le principe de la chaîne de mesure fournit.

Tant que la grille est isolante, les courants mesurés ne dépassaient pas 10 fA à 4,2 K, seuil de mesure du DLPCA-200 fem. Lorsqu'on atteignait le seuil de changement régime de la diode (partie exponentielle), on obtenait la gamme de tension admissible par la grille. La figure 3.6 donne le schéma électrique du test. La tension de sortie V_{out} est mesurée sur un voltmètre Agilent interfacé par GPIB pour acquisition. La tension de grille était balayée pour des vitesses de l'ordre de $0,5 \text{ V} \cdot \text{min}^{-1}$ progressivement afin d'éviter tout

i. <http://www.femto.de/products/dlpc.html>

changement de régime brusque. Les résultats de mesure de test de fuite sont présentés en figure 3.7.

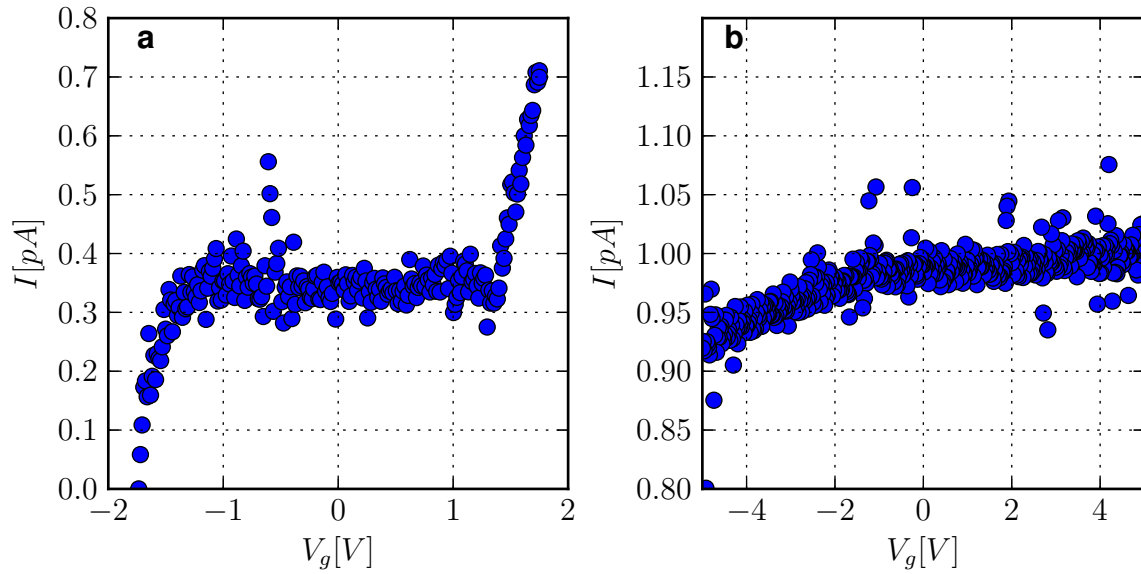


FIGURE 3.7 – Mesures du courant de fuite typique par les contacts ohmiques obtenues en imposant une tension de grille V_g non nulle. **a** : Mesure d'un courant de fuite pour un échantillon ne dépassant pas -2 V, 2 V de tension de grille. On aperçoit l'effet Schottky de la barrière isolante aux tensions limites. **b** : Mesure d'un courant de fuite pour la grille de l'échantillon dont je présenterai les résultats de transport. On observe un début de courant de fuite en dessous de -2 V.

3.2 Mesures

3.2.1 Cryogénie

Les mesures de transports électriques ont été réalisées sur un cryostat commercial Oxford. Un module de type *Variable Temperature Insert* [VTI] permet de faire varier la température de la température ambiante jusqu'à 1,5 K.

Grâce à une micro-vanne, le débit d'hélium est contrôlé et une résistance chauffante connectée à un contrôleur PID permet de réguler la température depuis l'ambiante jusqu'à 4 K. Pour des températures moins élevées, une pompe primaire étanche permet de réaliser une dépression au-dessus du bain afin de descendre jusqu'à 1,4 K.

Le bas du module VTI est entouré d'une bobine supraconductrice NbTi permettant d'obtenir des champs magnétiques atteignant 18 T.

Le schéma 3.8 décrit le module VTI et la bobine fort champ :

- a Bobine Supraconductrice NbTi.
- b Plaque lambda séparant le réservoir principal du réservoir contenant la bobine supraconductrice.
- c Point d'entrée du VTI depuis le bain principal.
- d Réservoir principal d'hélium.
- e Canne de mesure (la partie haute et basse sont illustrées en annexe B).
- f Vanne manuelle contrôlant le débit d'Hélium dans le VTI.
- g Point de sortie Helium vers pompe primaire.

Le pompage est réalisé par une pompe monophasée LeyBold. Le débit dans le VTI est contrôlé manuellement par une vanne froide.

La transition Normal-Supraconducteur de la bobine est une fonction du champ et de la température. Selon le manuel technique d'Oxford [RI] pour une température du bain en Hélium à 4,2 K, il n'est pas possible de dépasser les valeurs de 16 T. Afin d'obtenir des plus forts champ magnétique, il possible d'isoler le bain de la bobine du réservoir totale par une plaque ayant une faible conductivité thermique : la plaque lambda [Robert C. Richardson, 1988]. Cette isolation permet de pomper le bain, et de diminuer la température de la bobine à 2,2 K. À cette valeur, le champ accessible atteint 18,0 T [RI].

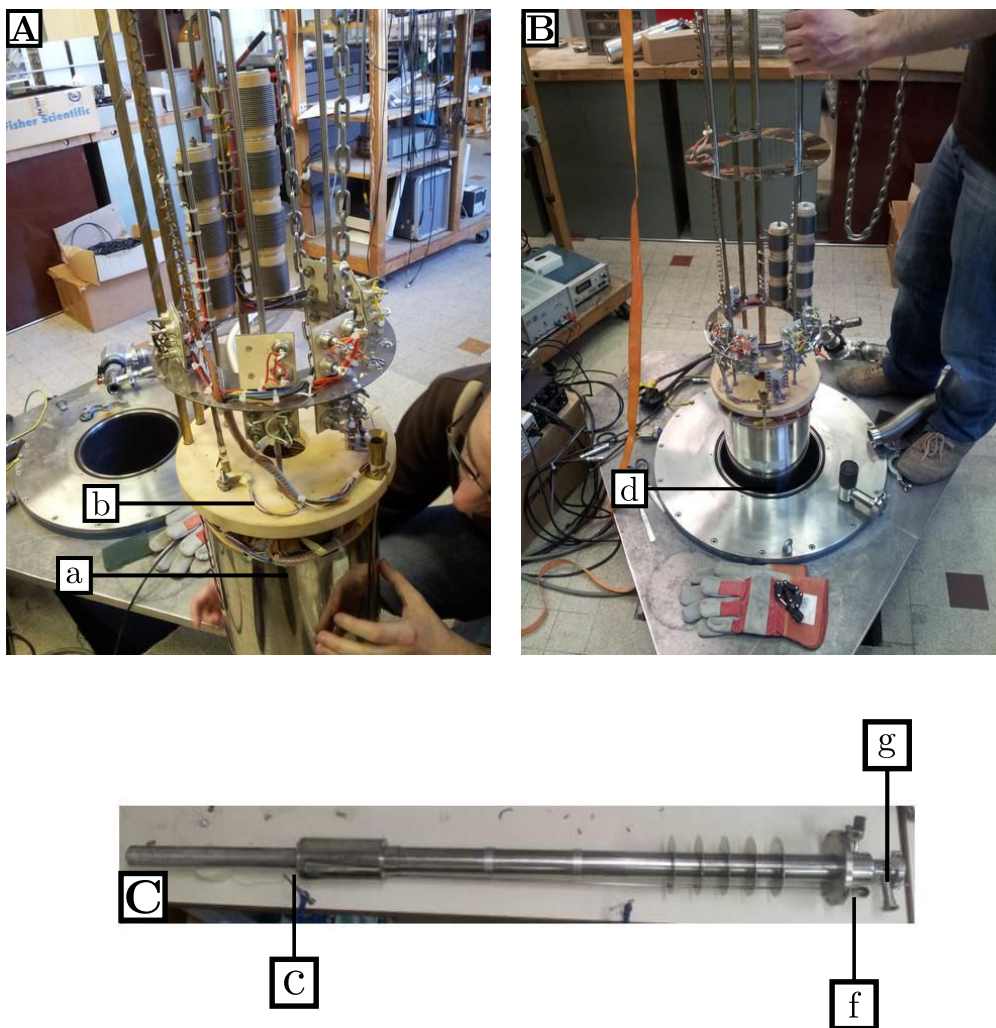


FIGURE 3.8 – *Dispositif cryogénique. A : Module bobine 17 T et cryostat. B : Bobine 17 T avec plaque lambda. C : VTI Oxford. La signification des lettres est donnée dans le texte dans la § 3.2.1*

3.2.2 Mesures magnétique

3.2.2.1 Canne de mesures

Les échantillons sont installés sur un porte-échantillon de type Kyocera LCC-32 (figures B.3 en annexe B). Chaque paires de tension et courant partant depuis le porte-échantillon vers les contacts en haut de la canne sont torsadées afin de limiter le bruit. Ce dernier est contacté sur une canne de mesure munie d'une petit module mécanique permettant la rotation du porte échantillon par rapport à la normale du champ magnétique. Ce module est représenté sur les figures B.1 et B.2 en annexe B.

On peut obtenir une calibration de l'angle par rapport à la normale avec la valeur de

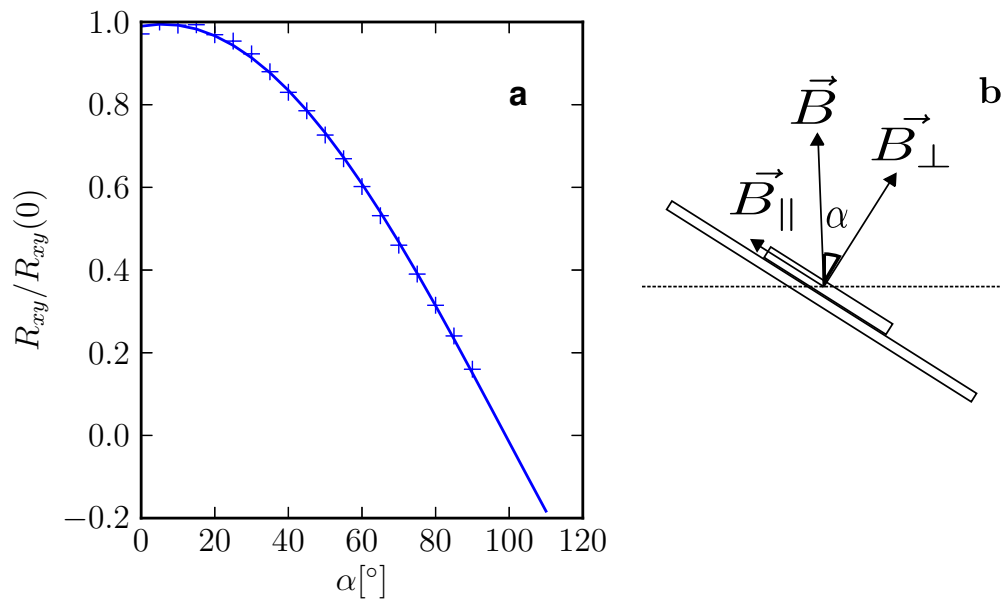


FIGURE 3.9 – Calibration de l’angle de la canne de rotation. **a** : Calibration de l’angle par résistance de Hall. **b** : Schéma de projection du champ magnétique en fonction de l’angle d’inclinaison de l’échantillon.

la résistance de Hall à faible champ magnétique dans le cas d’un système monoporteur (avec n sa densité de charge) :

$$R_{Hall} = \frac{B_{\perp}}{ne} = \frac{B \cos \alpha}{ne} \quad (3.1)$$

ce qui donne (voir figure 3.9)

$$\cos \alpha = \frac{R_{Hall} \cdot ne}{B} = \frac{R_{Hall}}{R_{Hall}(\alpha = 0)} \quad (3.2)$$

3.2.2.2 Acquisition

Les mesures sont obtenues par des méthodes types Lock-in. Chaque tension longitudinale et chaque tension de Hall sont connectées à un amplificateur de tension LI-75A de NF electronic instruments [NF]. Ces amplificateurs offrent une impédance d’entrée bien meilleurs que l’entrée des Lock-in eux même et permettent donc un courant de sortie bien moindre à travers les contacts. Qui plus est, le gain d’amplification $G = 100$ permet de se placer dans les gammes de mesures adéquates pour l’entrée des Lock-in [SRS; Sig].

Les barres de Hall sont polarisées en courant en plaçant, à température ambiante, en série avec une source de tension une résistance de $10 \text{ M}\Omega$ (résistance bien plus grande que celle de l’échantillon en lui même $R_s \gg R_{long}$). En appliquant une tension de 100 mV , on obtient un courant de 10 nA . Ce courant est suffisamment faible pour éviter tout effet de chauffe de l’échantillon.

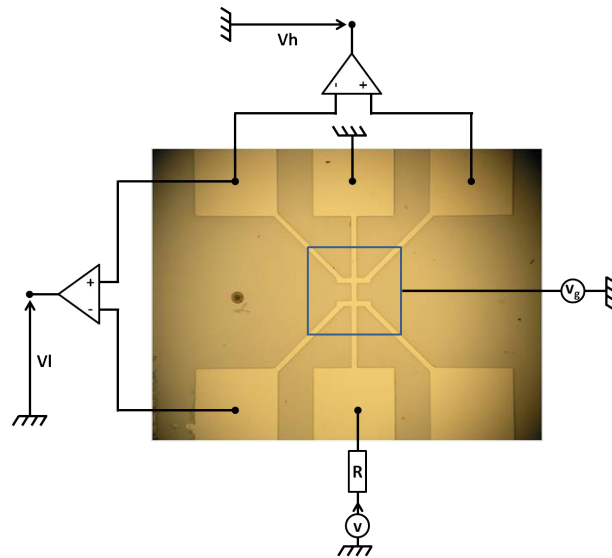


FIGURE 3.10 – Schéma électrique sur les barres de Hall mesurées

La figure 3.10 illustre la technique de mesure. La tension longitudinale et de Hall sont mesurées simultanément en fonction de la tension de grille. Les deux Lock-in sont synchronisés sur l'horloge du Stanford SR-830.

L'acquisition des mesures est réalisée par bus GPIB et ISO-Bus. L'ensemble est interfacé et automatisé par des scripts LabView 2009. Deux grands principes ont été utilisés pour les mesures :

- Les valeurs de champ magnétiques sont balayées à une tension de grille fixe. Cette méthode était pratiquée pour les faibles valeurs de champ.
- Les valeurs de grilles étaient balayées à une valeur de champ fixe. Cette méthode permettait de faire passer la bobine en mode persistant et ainsi limiter la consommation d'hélium et le bruit en champ appliqué.

Chapitre 4

Magnétotransport

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats expérimentaux concernant le transport sous champ magnétique dans des structures basées sur HgTe. Plusieurs groupes se sont attelés à la tâche sur les structures Bi_2Se_3 (Analytis *et al.* [2010], Cheng *et al.* [2010]), $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ et sur HgTe Brüne *et al.* [2011]. Les mesures de magnétotransport dans ces systèmes sont très délicates ; en effet pour les systèmes à base de Bi_2Se_3 par exemple, la réalisation des cristaux engendre une bande d'impuretés qui dope naturellement le système et empêche de placer convenablement l'énergie de Fermi dans le gap de volume. Ainsi certains groupes ont tenté différentes méthodes par dopages afin de contrôler cette énergie de Fermi (Kong *et al.* [2011b], Ren *et al.* [2011]). Cependant, il a été également constaté un « vieillissement » des structures et donc l'apparition d'un dopage en fonction du temps à la surface des cristaux. Pour les structures HgTe, le gap en énergie est assez faible, il est donc difficile d'empêcher les contributions de volume, bien qu'en diminuant l'épaisseur de la structure, on peut en limiter son effet. De plus, une question essentielle reste encore à éclaircir pour ces systèmes : quelle est la contribution des effets de bords aux contacts ? (Brüne *et al.* [2011]). Le courant parasite véhiculé par ces bords de structure peut rendre l'observation des états de Hall quantique entier ardue.

Il est à noter aussi que le facteur de Landé dans ces systèmes est important ($g^* \approx 20 - 50$) ; il est donc à prévoir une possible levée de dégénérescence, en effet l'effet Zeeman $H_Z = \mu_B g^* B S / \hbar$ varierait de 6 meV à 10 meV. L'énergie cyclotron des électrons de Dirac est assez importante (il faut compter pour une vitesse de Fermi $v_F \approx 4 \cdot 10^5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\hbar\omega_c \approx 50 \text{ meV}$ à 10 T), le couplage Zeeman sera assez faible pour la plupart des niveaux de Landau excepté pour le niveau $n = 0$ qui reste invariant sous champ. On peut également noter pour nos structures avec une contrainte de maille de 0,146% que le gap de volume est prévu à 10 meV. On peut donc prévoir des difficultés de mesure d'état de Hall Quantique Entier dans le gap de volume à 10 T.

Afin d'étudier ces structures, il est essentiel de pouvoir contrôler la densité des porteurs. Ainsi, grâce à la présence d'une grille, on peut parvenir à modifier cette densité à la surface des structures HgTe/CdTe étudiées. Ainsi en réalisant des mesures de transport sous l'influence d'une grille, trois régimes sont identifiables : une partie exclusivement composée de trous, une partie près du voisinage de la neutralité de charge où les charges se compensent [CNP], et une partie entièrement électronique.

Des mesures de ce type ont déjà été réalisées (Sacépé *et al.* [2011]) où le passage entre les électrons–trous autour du point de Dirac est clairement visible. Ce comportement ambipolaire est également observé par Lang *et al.* [2013] dans les films minces de $(\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x})_2\text{Te}_3$. Ce comportement ambipolaire fut également observé dans des puits quantiques à base de HgTe/CdTe par Kvon *et al.* [2011]. Mais à ma connaissance, cet effet n'a encore jamais été mesuré dans des structures topologiques 3D à base de HgTe/CdTe.

4.1 Résistance et évolution avec la température.

L'évolution de la résistance en fonction de la température a été largement étudié sur des échantillons de type $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ Ren *et al.* [2010] et Bi_2Se_3 Ren *et al.* [2011] considérés comme des isolants topologiques 3D. En théorie, les isolants topologiques sont isolants en volume et la surface se comporte comme étant métallique. Malheureusement, la réalité est tout autre, et parmi les isolants topologiques actuellement disponibles, le volume est partiellement conducteur, et sa conductivité dépend de plus du type de structure étudiée

Je présenterai ici les évolutions de la résistance en température mesurées sur des structures HgTe/CdTe type 3D où la contrainte cristallographique du substrat sur HgTe est différente, et notamment deux :

- l'une avec une contrainte maximale de 0,307% avec un substrat CdTe.
- une dont les évolutions en magnétotransport ont été visibles, avec une contrainte de 0,146% sur un substrat $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$

4.1.1 Résistance en fonction de la température pour HgTe avec contrainte cristallographique maximale

Les structures HgTe employées ont toute un gap de volume d'énergie faible (entre 6 meV et 25 meV), on s'attend donc à obtenir des énergies d'activation dans cette gamme.

Tout d'abord, on observe clairement une augmentation de la résistance avec la diminution de la température comme on peut le voir sur l'encadré de la figure 4.1 **(a)**. Le volume de ce système se comportant comme un semiconducteur, à haute température, il respecte une loi de type Arrhénius. Pour des échantillons HgTe prévus pour un gap de 25 meV (échantillons de contrainte cristallographique maximale), la loi d'Arrhénius à haute température (intervalle entre 300 K et 110 K) permet d'extraire cette barrière d'énergie (que l'on observe sur la figure 4.1(a)) et est en accord avec les paramètres de croissance.

On peut également dégager une dépendance en température d'une transition isolante, telle que celle VRH (4.1) (*Variable Range Hopping*) de type 3D pour une gamme de température intermédiaire. La loi de type 3D VRH se comporte comme telle :

$$\sigma_{xx} = \sigma_0 \exp\left(-\frac{T}{T_0}\right)^{-1/4} \quad (4.1)$$

où σ_0 est la conduction intrinsèque du semiconducteur à haute température et T_0 une température caractéristique.

Pour des températures en dessous 110 K, le transport peut se comprendre comme une contribution parallèle entre le comportement isolant du volume caractérisé par un comportement de type 3D VRH et la composante métallique de la surface, avec une saturation de la résistance en dessous de 20 K (figure 4.1 **(b)**).

La saturation de la résistance de la température implique une conductivité finie et donc métallique à $T = 0\text{K}$ (figure 4.1 **(b)**).

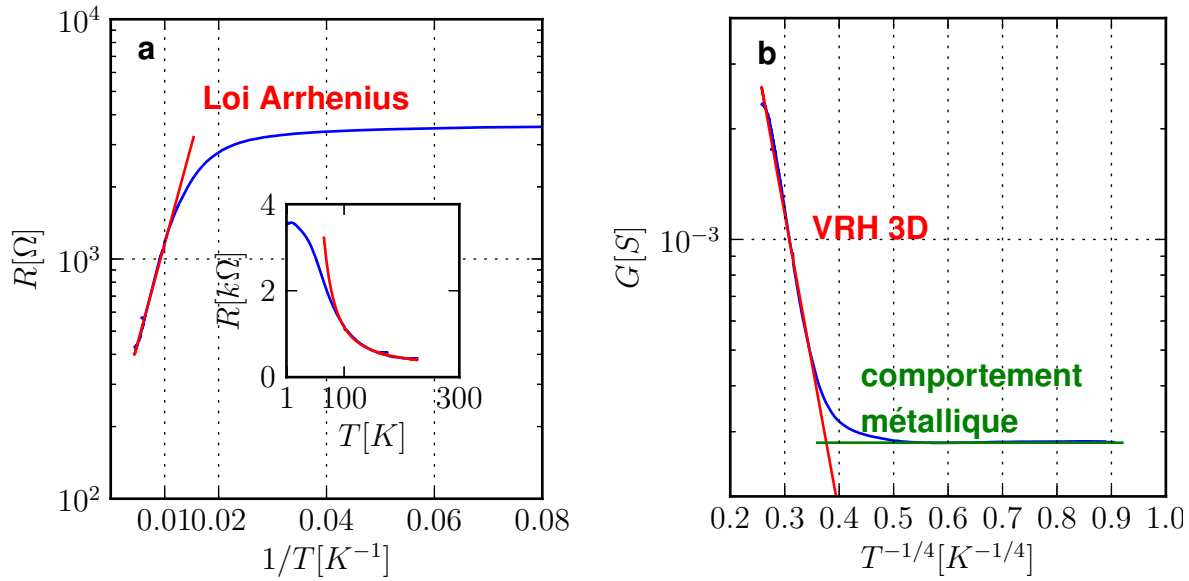


FIGURE 4.1 – Loi en température des structures en HgTe/CdTe avec contrainte cristallographique maximale. **(a)** résistance R en fonction de l'inverse de la température allant de l'ambiante jusqu'à 1,5 K. La droite en rouge est le modèle d'Arrhénius valable à haute température avec une barrière d'activation $\Delta = 25$ meV. L'encadré montre l'évolution de la résistance en fonction de la température avec en rouge la loi de type Arrhénius. **(b)** Modélisation de la conductance G par une loi de type VRH 3D dans la gamme 110 K-20 K. La droite rouge correspond à ce modèle. En dessous de 20 K il y a saturation de la conductance synonyme d'un comportement métallique de surface, modélisée par une droite verte.

4.1.2 Résistance en fonction de la température pour HgTe avec contrainte cristallographique de 0,146%

La structure avec une contrainte cristallographique de 0,146% possède la même évolution dans l'intervalle de températures 60 K-1,5 K. Une correspondance avec une loi en 3D VRH est possible pour des températures supérieures à la saturation de la conductance. La figure 4.2 montre l'évolution de la conductance avec la température pour une tension de grille fixant le minimum de conductance à 1,5 K.

4.2 Magnétorésistance et effet Hall bas champ

L'ensemble des résultats expérimentaux suivants ont été obtenus sur la base d'un échantillon de HgTe dont la contrainte était de 0.146% sur une barre de Hall comme celle présentée dans le chapitre précédent.

4.2.1 Comportement ambipolaire

Le comportement ambipolaire des surfaces des isolants topologiques 3D a été observé par Sacépé *et al.* [2011] et Checkelsky *et al.* [2011] (par mesure de la constante de Hall)

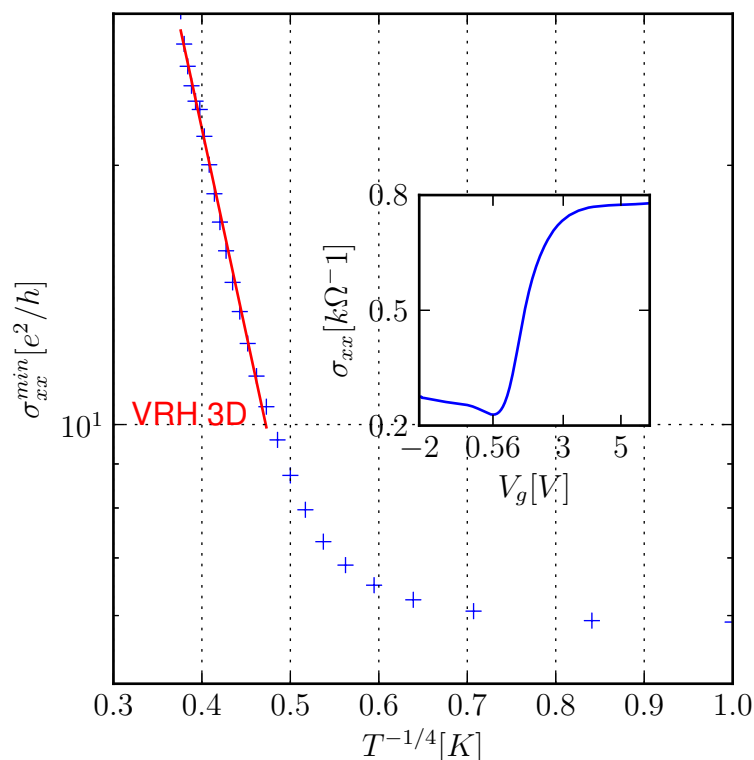


FIGURE 4.2 – Évolution en température de la conductivité minimale en une loi de puissance $T^{1/4}$ correspondant à une modélisation de type 3D VRH. On observe également une saturation de la conductance à basse température. L’encadré montre la position du minimum de conduction à 1,5 K pour une tension de grille à $V_g = 0,56$ V.

dans Bi_2Se_3 , par Kong *et al.* [2011b] dans les systèmes $(\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x})_2\text{Te}_3$.

La constante de Hall R_H fut obtenue, en fixant la valeur de la tension de grille et en prenant la pente de la résistance de Hall en fonction du champ magnétique. Les courbes de résistance longitudinales et de Hall obtenues, définissent 3 zones limites visibles sur les figures 4.3 (a) et (b).

électrons : une zone où les électrons sont majoritaires,

trous : une zone où les trous sont majoritaires,

électrons + trous : une zone d’équilibre de charges où la densité de trous et d’électrons sont similaires.

L’évolution de la constante de Hall en fonction de la tension de grille a une forte analogie avec ce qui est observé dans le graphène exfolié (Novoselov *et al.* [2005], Novoselov *et al.* [2004]).

Le comportement linéaire de la constante de Hall en fonction de V_g de la figure 4.3 s’explique bien en considérant cette zone comme étant une zone d’équilibrage de charge. En effet, pour un système à deux porteurs de charges de type trous (densité p et mobilité μ_p) et électrons (densité n et mobilité μ_e) (modèle standard à deux bandes pour un métal),

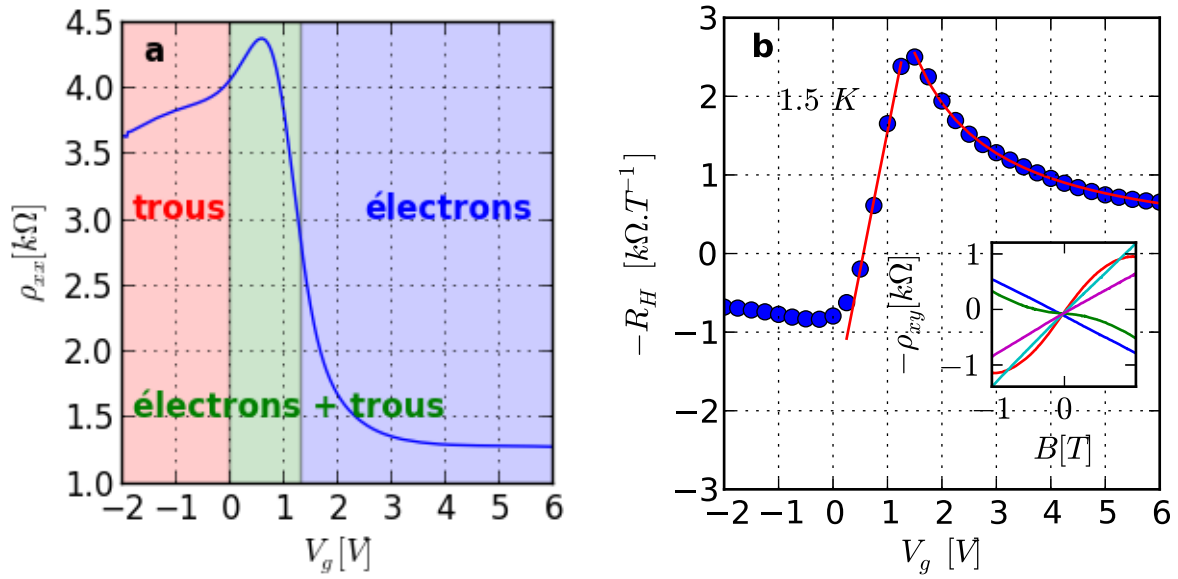


FIGURE 4.3 – Comportement ambipolaire de l'état de surface. **(a)** Résistance longitudinale en fonction de la tension de grille V_g . Trois zones se définissent en fonction du comportement de la constante de Hall R_H . Une zone entièrement d'électrons (zone bleue), une zone entièrement de trous (zone rouge) et une zone de compensation de charges (zone verte). **(b)** Constante de Hall R_H en fonction de la tension de grille V_g . Les points bleus définissent les valeurs obtenues d'après les tensions de Hall à bas champ $R_{xy} = R_H B$. Les courbes rouges sont des modélisations hyperbolique pour la partie électronique et linéaire pour la zone ambipolaire. La courbe hyperbolique permet d'extraire le facteur de déplétion de charge α de la grille ($n = \alpha V_g$).

R_H s'exprime :

$$R_H = \frac{p\mu_p^2 - n\mu_e^2}{e(n\mu_e + p\mu_p)^2} \quad (4.2)$$

Les charges induites vérifie l'équation

$$p - n = \frac{\epsilon_0 \epsilon}{de} V_g = \alpha V_g \quad (4.3)$$

Dans le régime où les porteurs trous et électrons sont du même ordre n_0 , la conductivité σ varie peu signifiant la substitution d'un type de porteurs par un autre. En substituant 4.3 dans l'équation 4.2 (avec l'hypothèse d'une conductance variant peu), on se retrouve avec

$$R_H = \frac{\alpha V_g \mu_p^2 + n_o (\mu_p^2 - \mu_e^2)}{\sigma_0} \quad (4.4)$$

comportement complètement linéaire.

Dans le cas où seul des électrons (ou des trous) sont majoritaires, la constante de Hall R_H et la conductance longitudinale σ_{xx} se simplifient.

$$\sigma_{xx} = en\mu_e \text{ et } R_H = \frac{1}{ne} \quad (4.5)$$

La partie hyperbolique de R_H est facilement modélisable (courbe hyperbolique en rouge dans la figure 4.3) et donne le paramètre α de l'équation 4.3, $\alpha = 1,628 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{V}^{-1}$

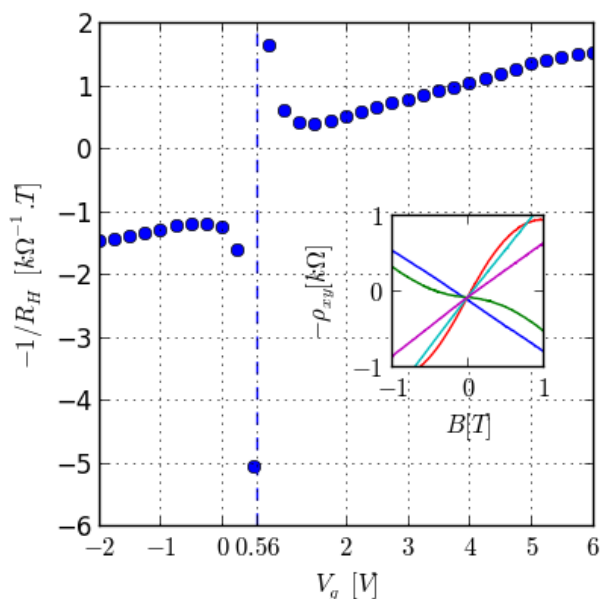


FIGURE 4.4 – Évolution $\frac{1}{R_H}$ en fonction de la grille V_g , pour un type monoporteur, $\frac{1}{R_H}$ varie linéairement avec la grille $R_H^{-1} \propto ne$. La zone divergente symbolisée par une droite verticale en pointillée place la position de la zone de compensation de charge et du possible point de Dirac de la surface topologique à $V_g = 0,56$ V.

(cette valeur reste inférieure à la valeur obtenu par les facteurs de forme géométrique de la grille en appendice C).

La particularité ici est que la partie trou est complètement différente. Dans le cas des isolants topologiques 3D à base HgTe, la partie trou du cône de Dirac est complètement plongé dans les bandes de volume. La conséquence que la mobilité des porteurs trous ne sera pas la même que celle des électrons.

4.2.2 Conductivité et effet d'écrantage

Les caractéristiques de la conductance en fonction de l'évolution d'une grille pour un système de type graphène donnent une bonne indication ce qui peut se passer autour du point de Dirac. Ce comportement a bien été analysé dans le graphène exfolié par Novoselov *et al.* [2005] et Novoselov *et al.* [2004].

Autour du point $V_g = 0,56$ V, nous sommes dans un minimum de conductivité avec une constante de Hall R_H nulle. On peut donc, légitimement, positionner à cette valeur de grille, le point de Dirac de la surface HgTe en vis-à-vis de la grille. Autour de ce point la densité de trous et d'électrons sont pratiquement identiques, et peut se modéliser par un modèle à deux bandes connues dans les semimétaux. Si on place la tension de grille au delà de ce régime, le transport sera dominé par un seul type de porteur, défini par l'équation 4.5. Il en résultera une évolution linéaire de la conductivité avec l'évolution de la grille.

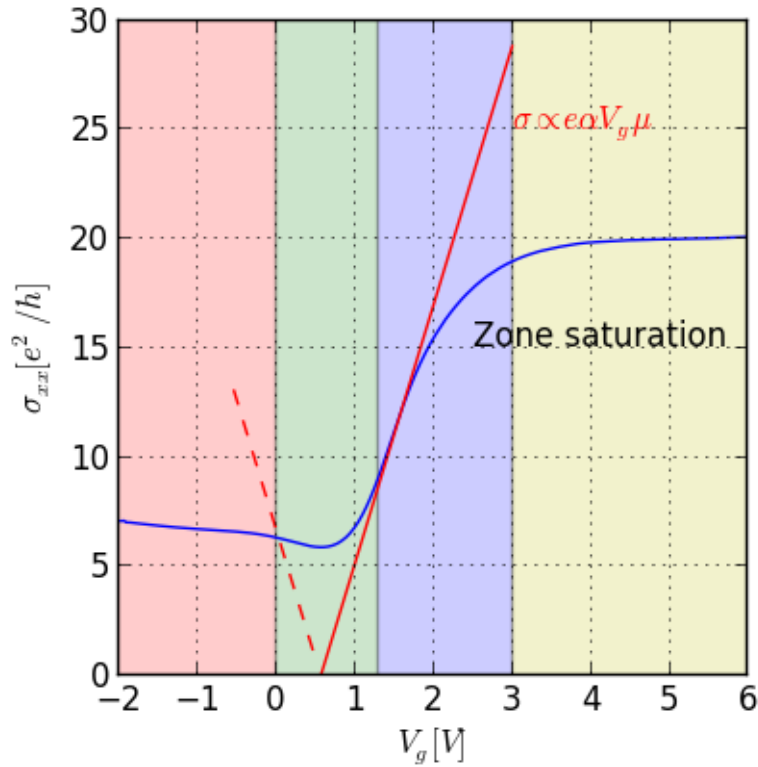


FIGURE 4.5 – conductivité de la surface HgTe. Les zones bleue, rouge et verte ont été précédemment énoncées dans la figure 4.3 (b). La zone jaune décrit un domaine où un possible gaz d'électrons d'interface a une contribution non négligeable au transport. La courbe rouge est une modélisation linéaire de la mobilité pour un porteur de charge de surface $\sigma = en_e \cdot \mu_e = e\alpha V_g \mu_e$ à partir de la tension correspondant au point de Dirac $V_g = 0,56$ V. La droite en pointillée correspondrait à ce même modèle pour la partie trou des charges de surface. L'écart à l'idéalité de la conductance à ce modèle permet de suspecter pour la partie électron un possible gaz d'électrons à l'interface.

4.2.2.1 partie électronique

Afin de déterminer la mobilité des électrons de surface, une modélisation linéaire de type $\sigma \propto e\alpha V_g \mu$ est réalisée (droite rouge sur la figure 4.5). Cette droite s'accorde bien dans l'intervalle de tension de grille située entre 1,0 V et 2,0 V. La mobilité correspondante est $\mu_e = 1,76 \cdot 10^4 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. Cependant, au delà de $V_g = 2,0$ V, on observe un écart entre le modèle et la conductivité mesurée. Cet écart peut s'expliquer par la formation d'un puits de potentiel à l'interface entre l'isolant de grille et la structure HgCdTe. En effet, la grille déplete correctement les charges dans l'intervalle de tension 1,5 V et 6,0 V (le comportement de $1/R_H$ est linéaire comme montré sur la figure 4.4) ; la seule alternative pour expliquer cet écart est le peuplement d'un gaz bidimensionnel [2DEG] à l'interface isolant de grille CdTe et la structure HgCdTe (figure 4.6). L'apparition d'un gaz d'interface a déjà été observé dans les puits quantiques à base de HgTe/CdTe (Hinz *et al.* [2006]), il en résulte un effet d'hysteresis dû au piégeage de charges dans le puits d'interfaceⁱ. Dans

i. Également dans mes échantillons, un effet d'hysteresis mesurable a été observé pour des tensions de grille à partir ≈ 3 V

cette zone, la densité de charge est de l'ordre de $8,0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ et la mobilité moyenne serait de $\mu \approx 5600 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

4.2.2.2 zone de saturation

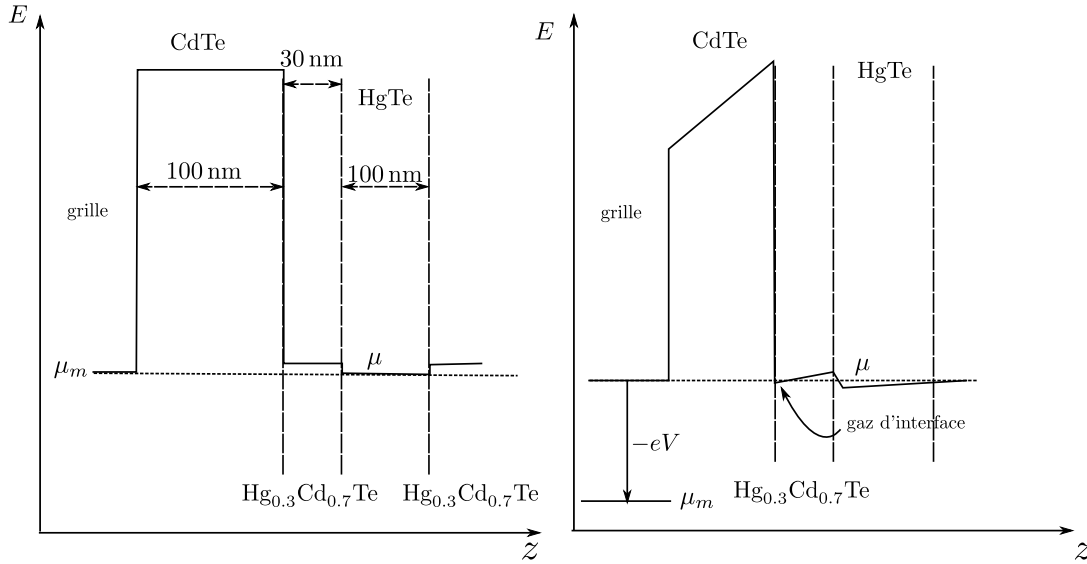


FIGURE 4.6 – Profile du potentiel de mes structure à tension de grille nulle. μ_m correspond au potentiel chimique de la grille tandis que μ est le potentiel chimique à l'interface entre HgTe et HgCdTe. Si on applique une tension de grille positive, la courbure du potentiel à l'interface entre le CdTe-amorphe et CdHgTe forme un puits dans lequel les charges peuvent s'accumuler.

Il est possible d'analyser la contribution de ce gaz d'interface au transport. En effet nous savons par les courbes des constante de Hall et en $1/R_H$ que la grille déplete régulièrement des charges entre les tensions de grilles 1,6 V et 6 V. Nous observons une zone de saturation et un écart au modèle d'une conductivité variant linéairement avec la grille. On peut donc supposer que les charges apportées par la grille vont se distribuer entre les états de surface topologique et ce gaz d'électrons. Si on appelle μ_S et n_S la mobilité et la densité des états de surface topologique, μ_G et n_G la mobilité et la densité du gaz d'électrons, l'ensemble doit vérifier les relations suivante

$$\alpha V_g = n_S + n_G \quad (4.6a)$$

$$\sigma_{xx} = e(n_S \cdot \mu_S + n_G \cdot \mu_G) \quad (4.6b)$$

αV_g contrôle la densité totale de charge et σ_{xx} est une somme des deux contributions. La mobilité μ_S a été déterminée à $1,76 \cdot 10^4 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. La mobilité du gaz d'électron supplémentaire serait égale à la valeur de la mobilité obtenue à $V_g = 6 \text{ V}$ domaine de saturation où l'on suppose la contribution de ce gaz prépondérant, $\mu_G \approx 5600 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. Connaissant σ_{xx} , les relations (4.6) sont celles d'un système barycentrique; il est donc aisé d'extraire la densité relative des deux types de porteurs.

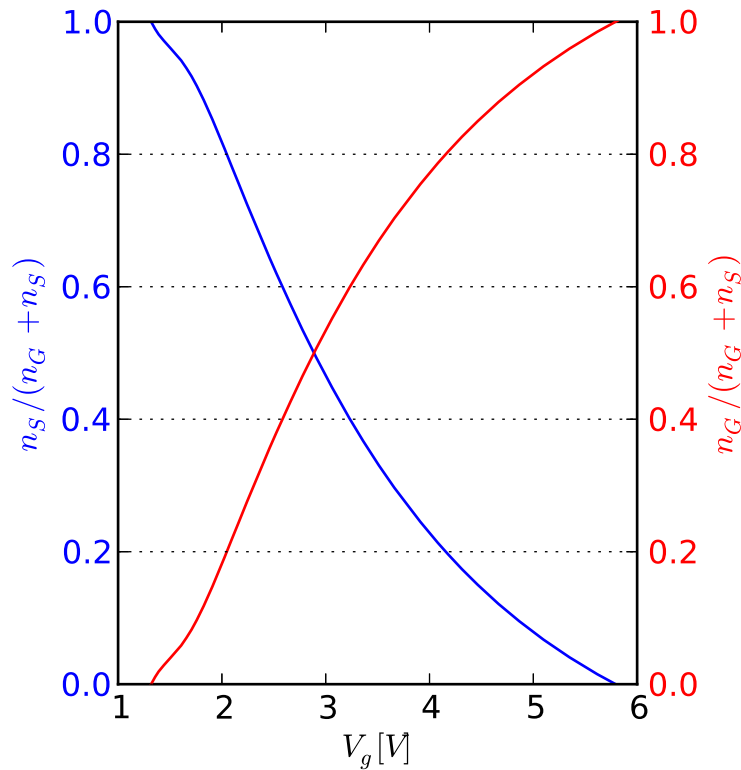


FIGURE 4.7 – En rouge, la proportion de charges sur la surface de HgTe. En bleu, la proportion de charges dans le gaz d'électrons d'interface. La proportion de vient comparable pour une tension de grille $V_g \approx 3$ V.

La figure 4.7 illustre la contribution des différents porteurs en fonction de la position de la grille. La courbe bleue relate l'évolution de la densité n_S des charges sur les états de surface. Celle-ci décroît continument depuis 1,3 V jusqu'à 6 V où sa contribution devient négligeable. La courbe rouge décrit, quant à elle, l'évolution de la densité n_G du gaz d'électron d'interface. Sa contribution croît continument jusqu'à 6 V où dans cette zone, sa contribution est majoritaire. On peut remarquer qu'à 2,8 V, la contribution des deux porteurs sont pratiquement identiques. Il en résulte ainsi un seuil de grille où le transport des états de surface pourrait être occulté par ce gaz d'électrons d'interface.

4.2.2.3 partie trou

La droite rouge en pointillée sur la figure 4.5 est la droite avec les mêmes paramètres du modèle que celle du côté électronique. Si on suppose un cône de Dirac comme relation de dispersion à la surface, la mobilité μ_p des trous devrait être égale à celle des électrons. Cependant, la partie en dessous de $V_g = 0,56$ V est également une somme de contribution de volume et de surface. En effet, il est montré par ARPES que la partie trou de la bande de surface est complètement immergée dans la bande de volume Γ_8 trou lourd. La densité d'une bande de volume est telle, que la contribution de surface est écrantée. C'est ce qu'on aperçoit dans la figure 4.5. La grille entre -2 V et 0 V, déplète linéairement les charges (figure 4.4). A $V_g = -2$ V, la densité de surface serait de $8,0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, ce qui donnerait une mobilité de trous à $\mu_p = 2000 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

4.3 Oscillation Shubnikov de Haas et comportement 2D

4.3.1 Introduction

Les oscillations de Shubnikov de Haas s'expliquent très bien dans une description semi-classique comme décrit dans Ashcroft et Mermin [1976]. Elles tirent leur source dans la quantification des niveaux de Landau. Les oscillations sont dues au passage des niveaux de Landau à travers la surface de Fermi. La périodicité des oscillations est directement reliée à la surface de Fermi des électrons sous-jacents. Les amplitudes de résistance régulièrement espacées en $\frac{1}{B_n}$ devraient dépendre de la densité des niveaux à l'énergie de Fermi E_F elle même reliée à la surface de Fermi S_F . Cette périodicité permet expérimentalement d'extraire une fréquence d'oscillation B_F reliée à la densité de charge n .

$$\Delta \left(\frac{1}{B_n} \right) = \frac{2\pi e}{\hbar} \frac{1}{S_F} \quad (4.7)$$

De manière générale, la résistance suit une loi générale de la forme :

$$R_{xx} = R(B,T) \cos \left(2\pi \frac{B_F}{B} + \frac{1}{2} + \beta \right) \quad (4.8)$$

où

$$R(B,T) = R_D \cdot R_T = \exp \left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau} \right) \cdot \frac{2\pi^2 k_B T / \hbar \omega_c}{\sinh(2\pi^2 k_B T / \hbar \omega_c)} \quad (4.9)$$

Chaque terme permet d'extraire une information sur le système.

- β dans 4.8 est reliée à la phase de Berry, pour $\beta = 0$ nous avons une phase triviale et ainsi un métal normal ; dans le cas où $\beta = \frac{1}{2}$, la phase est non triviale et une nouvelle physique apparait et notamment elle implique l'existence des particules de Dirac (Mikitik et Sharlai [1999])
- R_T dans 4.9 est le facteur d'amortissement relié à la masse cyclotronique des charges par le biais de la pulsation cyclotron ω_c .
- R_D dans 4.9 est le facteur de Dingle et permet d'extraire le temps de diffusion τ des particules.

4.3.2 Oscillation de résistance pour une structure de type Dirac

De nombreux résultats ont été obtenus grâce à l'étude du graphène sur les particules de types Dirac avec Novoselov *et al.* [2005] et Zhang *et al.* [2005]. La relation de dispersion électronique est linéaire $E(\vec{k}) = \hbar v_f k$ et implique donc des quasiparticules sans masse effective. Le point de recoupement des bandes, point de Dirac, a une particularité géométrique intéressante, en effet la phase de Berry pour ces particules est non triviale ($\beta = \frac{1}{2}$).

L'ensemble de l'étude menée par Novoselov *et al.* [2005] a permis d'isoler le caractère 2D des quasiparticules ; en effet, la périodicité des oscillations de Shubnikov de Haas est

directement reliée à la surface de Fermi par 4.7 et cette surface obéit à une loi de puissance en $n^{2/D}$ de la densité (D étant la dimension dans laquelle les charges évoluent).

Novoselov *et al.* [2005] et Zhang *et al.* [2005] ont caractérisé la masse effective des porteurs de charges en étudiant la pulsation cyclotron ω_c en fonction des amplitudes des oscillations. Cette masse est reliée à la position de l'énergie de Fermi (balayée par une grille). Il a été montré que cette masse s'annule près du point de Dirac.

Zhang *et al.* [2005] a caractérisé la phase de phase de Berry autour du point de Dirac par l'étude d'un diagramme reliant l'indice des niveaux de Landau pour les minima en résistance et la position en valeur inverse du champ magnétique de ces minima. La caractéristique forte d'une phase non triviale est le passage à $\frac{1}{2}$ de la droite reliant ces points lorsque celle-ci est étendue à $\frac{1}{B} = 0$. Une étude similaire fut réalisée dans les structures d'isolant topologique 2D dans les structures à puits quantique à base de HgTe par Büttner *et al.* [2011].

Dans ce travail, je vais présenter quelques résultats permettant de suspecter l'existence d'une relation de Dirac à la surface, tout en développant les inconvénients d'analyse qui ont été observés durant l'étude en magnétotransport.

4.3.3 Oscillation de Shubnikov de Haas en résistance dans les isolants topologiques 3D et dans les structures HgTe

4.3.3.1 Oscillation de surface dans les isolants topologiques 3D

Des mesures de transport dans Bi_2Se_3 et dans Bi_2Te_3 ont montré qu'il était relativement difficile d'obtenir des oscillations de surface (Analytis *et al.* [2010]); notamment à cause des contributions de volume. Il convient également de noter que le facteur de Landé dans ces systèmes est très élevé ($g \approx 50$) ce qui implique un couplage Zeeman non négligeable à fort champ. L'inconvénient du couplage Zeeman est de modifier la structure de bande en champ magnétique des niveaux de Landau et donc de modifier la position des points dans le diagramme reliant les indices de Landau et la valeur inverse des champs où l'énergie de Fermi croise ces niveaux. Les bandes des niveaux de Landau n'obéissent plus à la structure de Dirac sous-jacente et modifient donc la mesure de la phase de Berry comme correctement observée dans le graphène (Taskin et Ando [2011]).

Des mesures similaires ont été réalisés sur HgTe prédit être un isolant topologique 3D par Brüne *et al.* [2011]. Ici, les oscillations de surfaces seraient composites, et feraient intervenir les densités des deux surfaces. Il y aurait un couplage Zeeman ($g = 20$) et une hybridation à tenir compte dans les structures de bandes des surfaces. Le modèle ressorti ferait intervenir une phase de Berry non triviale $\beta = \frac{1}{2}$.

4.3.3.2 Oscillation de surface dans les structures HgTe développé au CEA LETI

Des oscillations de Shubnikov de Haas ont été observées dans nos structures HgTe, cependant l'origine reste encore à débattre. L'apparition de ces oscillations se fait à forte

tension de grille entre 3,0 V et 6,0 V (figure 4.8). Comme souligné précédemment, il n'est pas à exclure, dans ce domaine de tension de grille, un piégeage de charges à l'interface entre la grille et la structure, produisant un gaz 2DEG se quantifiant en niveau de Landau à plus fort champ.

Il convient également de noter que les données ARPES obtenues expriment une vitesse de Fermi de surface de l'ordre de $v_F = 1,06 \cdot 10^5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ce qui correspondrait à une énergie du premier niveau de Landau de 50 meV à 10 T, ce qui place les niveaux de Landau dans la bande de conduction où les contributions de volume ne devraient pas être négligeables. En effet, le gap en énergie est estimé à 10,3 meV (à considérer avec la forme de l'équation 4.19), et il s'avère étonnant que la grille puisse modifier l'énergie de Fermi à ce point.

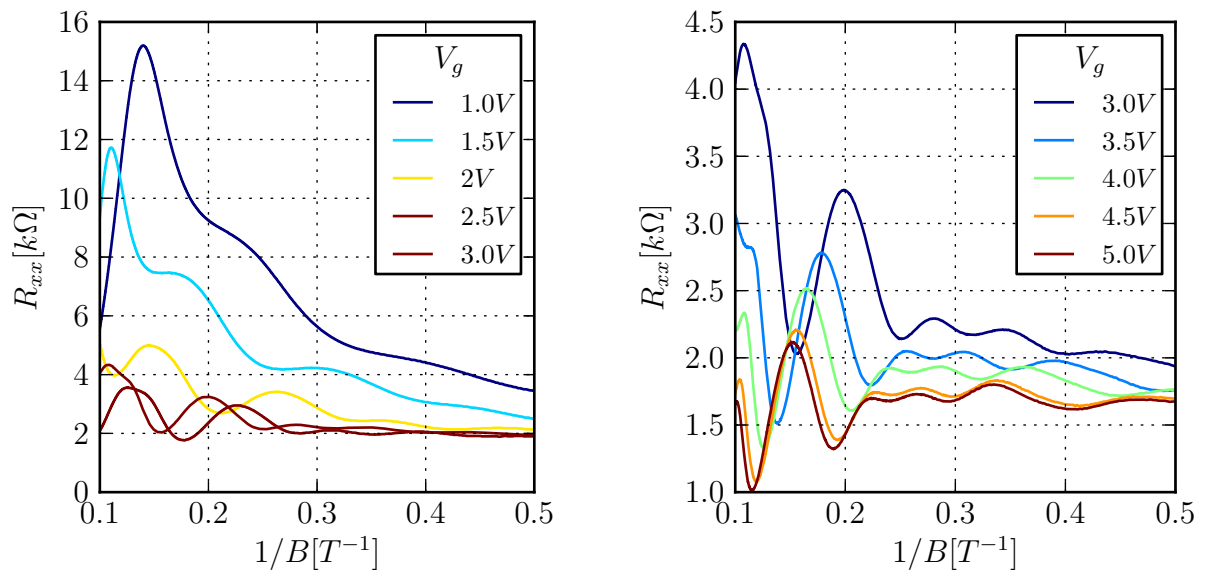


FIGURE 4.8 – Oscillations Shubnikov de Haas entre 1 V et 5 V de tension de grille. La résistance est tracée en fonction de $\frac{1}{B}$ afin d'observer une périodicité des minima et maxima en résistance.

La figure 4.8 illustre les oscillations en résistance longitudinale observées en fonction de l'inverse du champ. Les oscillations semblent apériodiques et il convient de réaliser un traitement plus poussé. Afin de recueillir les fréquences B_F qui composent le signal, un traitement par transformée de Fourier sera utilisé. On peut également noter que l'amplitude de la résistance ne suit pas la loi R_T de l'équation 4.9 avec une évolution en exponentiel croissant en $1/B$ comme on devrait s'attendre pour un système avec un seul type de charge.

Des oscillations apparaissent clairement dans l'intervalle de tension de grille de 1,5 V à 6,0 V. Afin d'augmenter le nombre de périodes dans l'intervalle de champ magnétique mesuré (entre 0 T et 15,0 T), et afin de faire disparaître toute composante quadratique accompagnant les oscillations, une dérivée seconde est appliquée sur la résistance longitudinale. Cette transformée de Fourier fait apparaître suivant la tension de grille plusieurs fréquences comme on le voit dans les encadrées de la figure 4.9. L'un des résultats intéressants de cette analyse est le comportement des fréquences B_F en fonction de la tension de grille ; L'évolution est linéaire ce qui nous permet de conclure que l'ensemble du transport est du à une surface.

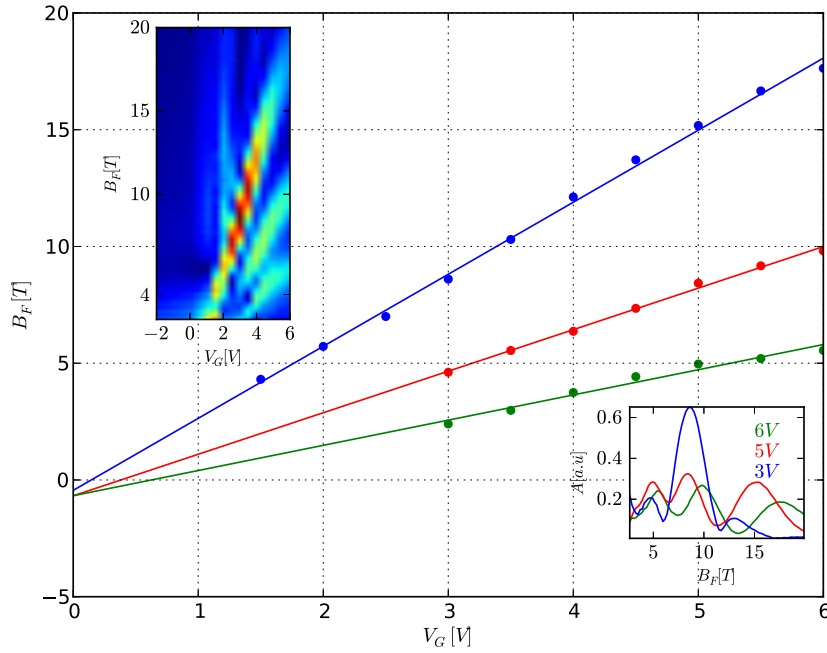


FIGURE 4.9 – Fréquence des oscillations Shubnikov de Haas à différentes tensions de grille. L’encadré inférieur montre les amplitudes des transformées de Fourier à 3 V, 5 V et 6 V. L’encadré présente une cartographie (V_g, B_F) des amplitudes des transformées de Fourier. La linéarité des pics de la transformée de Fourier en fonction de la grille révèle comportement 2D.

La relation entre la densité de charge et la période pour le cas 2D se simplifie sous la forme,

$$n = \frac{e}{\pi\hbar} B_F \quad (4.10)$$

Des trois composantes observées, une seule est visible dans le régime de grille où le piégeage de charges est absent (la courbe en bleue dans 4.9). La valeur obtenue est du même ordre que celle observée avec l’analyse par pente de la résistance de Hall.

| courbe | bleu | rouge | verte |
|----------|--|---|---|
| α | $1,45 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{V}^{-1}$ | $0,8 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{V}^{-1}$ | $0,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{V}^{-1}$ |
| B_0 | $3,00 \text{ T} \cdot \text{V}^{-1}$ | $1,65 \text{ T} \cdot \text{V}^{-1}$ | $0,82 \text{ T} \cdot \text{V}^{-1}$ |

Tableau 4.1 – Valeurs des constantes de déplétion pour chaque composante des périodes des oscillations de Shubnikov de Haas, $n = \alpha V_g$. B_0 correspond aux pentes des différentes courbes de la figure 4.9

Une étude en angle a également été réalisée pour vérifier ce caractère 2D. L’analyse en angle s’est faite pour une tension de grille $V_g = 3 \text{ V}$, avec un balayage en champ magnétique à différentes valeurs d’angle suivant la normale du champ magnétique. Dans ce cas, la fréquence B_F d’un système 2D devrait suivre une évolution en $\frac{1}{\cos \alpha}$. La figure 4.10 garantit ce critère pour toute la fréquence B_F déjà extraite. L’ensemble du transport se fait donc par le biais d’une surface. La fréquence B_F des pics à $\theta = 0^\circ$, ont un écart de 3 T

par rapport à la figure 4.10. Cette observation s'explique par un cyclage de l'échantillon à l'ambiante avant ces mesures sous angle.

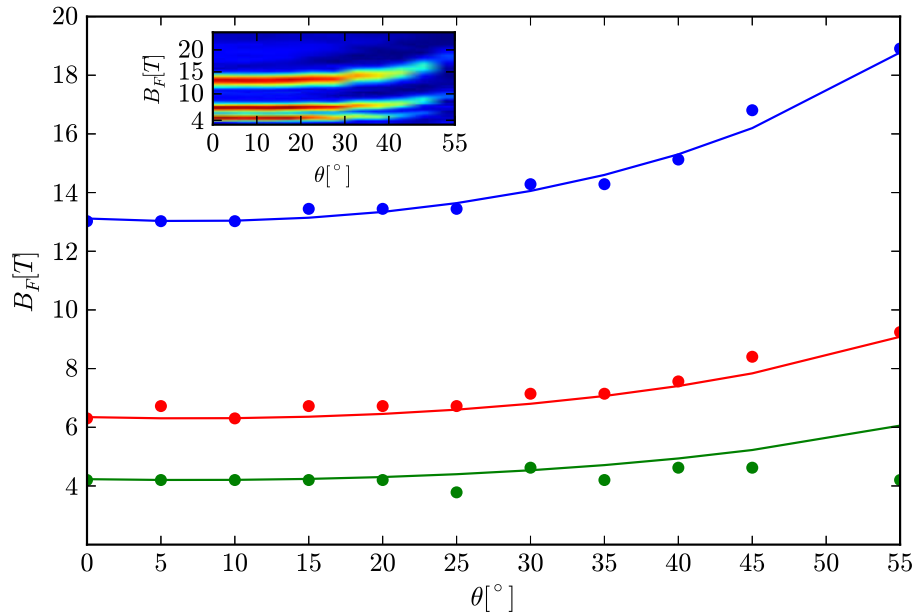


FIGURE 4.10 – Fréquence des oscillations Shubnikov de Haas à différents angles d'orientation de l'échantillon par rapport au champ magnétique normal. L'encadré est une cartographie (θ, B_F) des amplitudes des transformées de Fourier. Un comportement en $1/\cos\theta$ pour chaque composante confirme le caractère 2D du transport.

4.3.3.3 Phase de Berry

La mesure de la phase de Berry s'avère difficile car le nombre de périodes d'oscillations dans la magnétorésistance est assez faible. Il est possible d'en augmenter le nombre en dérivant par rapport au champ magnétique B la magnétorésistance comme aperçue précédemment en figure 4.9. La figure 4.11 est une cartographie couleur en champ magnétique B et tension de grille V_g de la dérivée en champ magnétique de la magnétoconductance. Les lignes blanches symbolisent une pente nulle et donc les extrema de la magnétoconductance.

Ainsi, la position des minima de la magnétoconductance se fait en prélevant les points d'intersections en champ par une droite horizontale fixant la tension de grille V_g . Ces minima sont indexés suivant les indices de niveaux de Landau remplis n .

Les diagrammes $(n, 1/B_n)$ permettent de déterminer la phase de Berry du système. En effet l'évolution de la magnétorésistance est périodique en $\cos(2\pi \cdot (B_F/B + 1/2 + \beta))$ selon la relation (4.8). Chaque minimum vérifie

$$2\pi \cdot \left(\frac{B_F}{B_n} + \frac{1}{2} + \beta \right) = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.11)$$

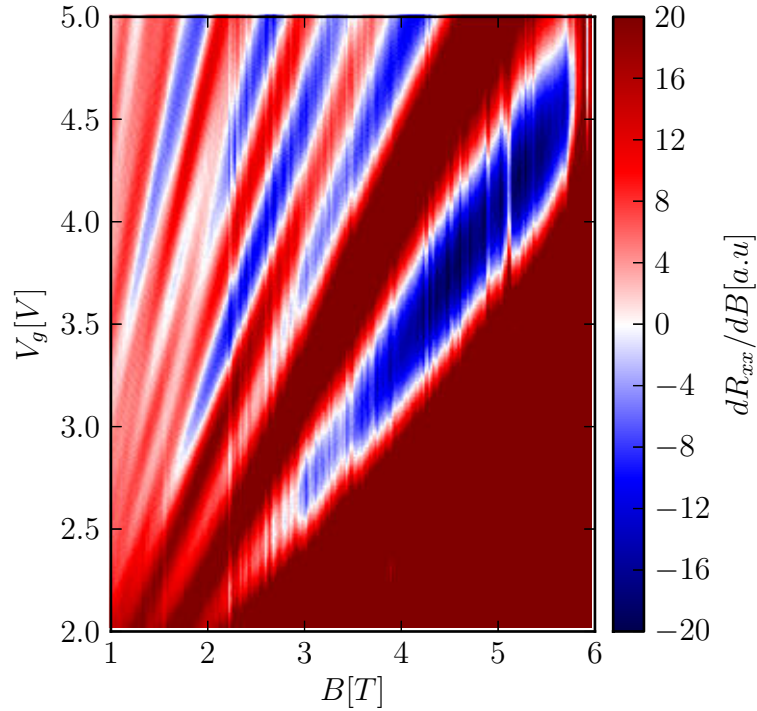


FIGURE 4.11 – cartographie (B, V_g) de la dérivée de la magnétoconductance par rapport au champ magnétique à 1,5 K. Les couleurs rouges ont une pente positive, les couleurs bleues, une pente négative. Les extrema sont repérables par les courbes en blanc

ce qui donne un diagramme linéaire vérifiant $n = B_F/B_n + \beta$. L'ordonnée à l'origine donne une indication sur la valeur de la phase de Berry. Quelques faisceaux pour des tensions de grille entre 2,6 V et 4 V sont fournis sur la figure 4.12. On remarquera d'une part qu'au dessus de 3 V, l'agencement des points ne se fait pas suivant une droite régulière, ce qui donne une extrapolation de la droite à l'origine de l'abscisse qui s'étend entre des valeurs entières et demi-entières. Ce phénomène peut s'expliquer par la présence du gaz d'électron d'interface dont la contribution au-dessus de 3 V n'est pas négligeable (figure 4.7) et peut donc venir perturber l'analyse. Également, il a été noté l'apparition de plusieurs fréquences B_F au delà de 3 V ; si nous traçons les droites $n = B_F/B_n + 1/2$ (droites pleines de la figure 4.12) pour les différentes tensions de grille relevées pour le diagramme et avec la pente B_F fournit par le tableau 4.1, il y a une meilleure correspondance en dessous de 3 V avec la droite modèle reliant les points (droite en pointillées sur la figure 4.12). D'autre part, pour des valeurs de champ plus élevées, les points s'éloignent de la position d'une droite. La justification pourrait venir du fait que la dispersion des niveaux de Landau ne relate plus la propriété d'électrons de Dirac sous-jacente. En augmentant le champ magnétique, on brise la symétrie par renversement du temps, et une ouverture de gap peut se produire. Également, le terme Zeeman peut entrer en jeu et la relation (4.11) ne pourrait plus tenir (Taskin et Ando [2011]).

Il convient aussi de remarquer que la phase de Berry est non triviale pour des tensions inférieures à 3 V, ce qui nous met en présence d'une surface topologique.

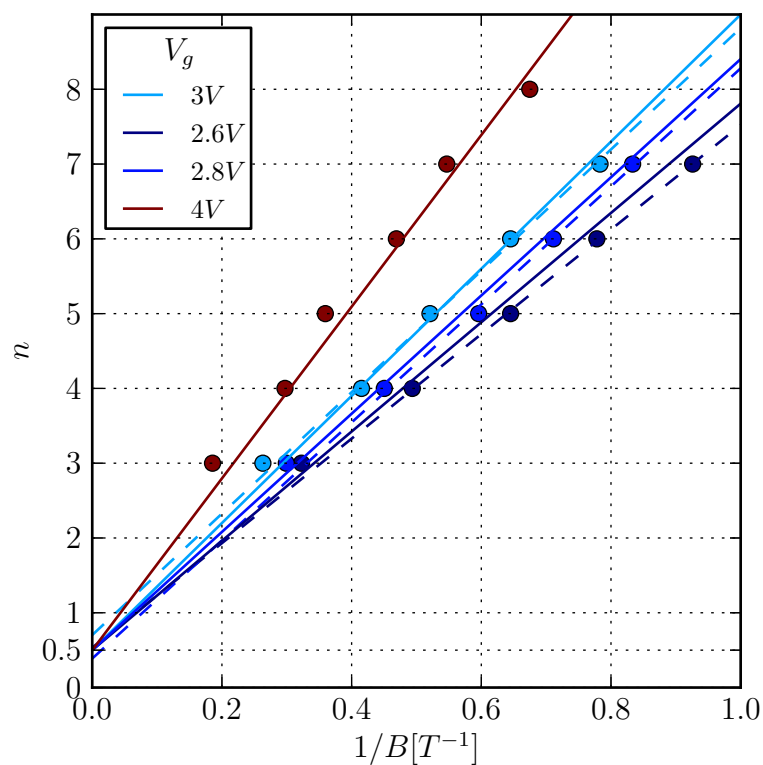


FIGURE 4.12 – Diagramme des indices de Landau ($1/B_n, n$). Les points correspondent aux valeurs de champ des minima de la magnétorésistance pour une tension de grille donnée. Les valeurs de grilles visibles sont 4V, 3V, 2,8V et 2,6V. Les droites en pointillées correspondent à une modélisation linéaire des points de mesures. Les droites pleines correspondent à la droite $B_F/B_n + 1/2$ pour les différentes B_F pris à la figure 4.9 aux tensions de grille visible.

4.4 Antilocalisation faible

4.4.1 Introduction

Il est prédit l'existence d'une antilocalisation faible pour les surfaces topologiques, c'est-à-dire que la probabilité de non retour des électrons le long d'une boucle fermée est nulle, de part la préservation de la symétrie par renversement du temps.

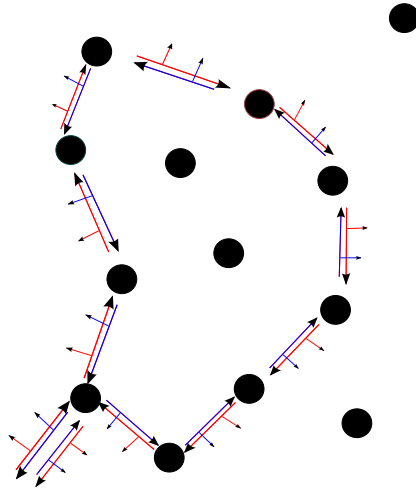


FIGURE 4.13 – *Chemin de boucles.* Les points noirs symbolisent les impuretés sur lesquelles diffusent les fonctions d'onde électroniques. Les flèches symbolisent le changement de direction \vec{p} après diffusion. La petite flèche normale à celle de \vec{p} correspond à l'orientation du spin. La boucle en bleue est la conjugué de celle en rouge par symétrie de renversement temporelle. Pour déterminer la probabilité de retour, il faudra considérer ses deux classes de chemins. Il faudra considérer les amplitudes de l'onde entrante $\Psi(\vec{p}, \uparrow)$ en rouge, celles de l'onde sortante $\Psi(-\vec{p}, \downarrow)$, et celles du chemin conjugué $T\Psi(\vec{p}, \uparrow)$, $T\Psi(-\vec{p}, \downarrow)$ en bleue.

Une résistance peut s'exprimer comme la probabilité de retour à l'origine des porteurs de charges. Cette probabilité dépend fortement des chemins en boucle. Si ces boucles ont une taille caractéristique qui ne dépasse pas la longueur de cohérence de phase, alors cette probabilité est le module de la somme des amplitudes de probabilité des chemins possibles. Cette somme d'amplitude suivant leur phase relative peut augmenter ou diminuer la probabilité de retour à l'origine. Il y a deux ensembles de chemins à considérer, la boucle et sa conjuguée par renversement du temps. Dans le cas des isolants topologiques, le spin est normal à la direction de propagation et conserve cette propriété même après diffusion sur une impureté (qui ne brise pas la symétrie par renversement du temps). Après un retour, c'est-à-dire une rotation complète, le vecteur \vec{p} d'onde aura tourné de π ($\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$) et le spin aura tourné de 2π , ce qui changera le signe de la fonction d'onde. Une illustration en est donnée sur la figure 4.13. Il faudra donc considérer pour la probabilité de retour

P l'amplitude $\Psi(\vec{p}, \uparrow)$, l'amplitude après une rotation complète, $\Psi(-\vec{p}, \downarrow)$ puis le chemin conjugué par la symétrie par renversement du temps $T\Psi(\vec{p}, \uparrow)$, $T\Psi(-\vec{p}, \downarrow)$.

$$P = |\Psi(\vec{p}, \uparrow) + \Psi(-\vec{p}, \downarrow) + T\Psi(\vec{p}, \uparrow) + T\Psi(-\vec{p}, \downarrow)|^2 = 0 \quad (4.12)$$

Cette probabilité est nulle puisque la fonction d'onde électronique est un spineur et la propriété de conservation de la symétrie par renversement du temps impose $T^2 = -1$, ce qui aura pour effet de transformer les fonctions d'ondes sous la forme :

$$T\Psi(\vec{p}, \uparrow) = -\Psi(-\vec{p}, \downarrow) \quad (4.13a)$$

$$T\Psi(-\vec{p}, \downarrow) = -\Psi(\vec{p}, \uparrow) \quad (4.13b)$$

Le champ magnétique aura pour effet de générer un flux au sein des boucles. Ce flux aura pour effet d'ajouter une phase supplémentaire sur les fonctions d'onde et donc d'augmenter la probabilité de retour P . On s'attend donc à une correction quantique d'antilocalisation faible pour les surfaces topologiques.

Il y a peu de modèles théoriques traitant de manière quantitative l'antilocalisation faible sur les états de surface topologique en considérant des électrons de type Dirac. Cependant, cet état peut être traité comme un système d'électron avec une forte interaction spin-orbite. L'équation de Hikami–Larkin–Nagaoka [HLN](Hikami *et al.* [1980] et Akkermans et Montambaux [2004]) est en générale utilisée pour prendre en compte les corrections quantiques de la magnétoconduction dans ces systèmes. Dans la limite d'une interaction spin-orbite très forte, d'une faible mobilité (c'est-à-dire que le temps de diffusion de phase est plus faible que celui-ci du spin-orbite $\tau_\phi \ll \tau_{SO}$), l'équation se réduit à :

$$\Delta\sigma = \alpha \cdot \frac{e^2}{\pi\hbar} \left(\ln \left(\frac{B_\phi}{B} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{B_\phi}{B} \right) \right) \quad (4.14)$$

B_ϕ étant le champ caractéristique relié au temps de déphasage τ_ϕ , α l'amplitude de la correction d'antilocalisation qui vaut $\frac{1}{2}$ par canaux contribuant à la correction.

Également, afin d'expliquer la correction d'antilocalisation et le changement de régime en localisation faible dans les monocouches de graphène (Wu *et al.* [2007] et Tikhonenko *et al.* [2009]) est fourni par McCann *et al.* [2006]. Cette étude correspond à celui de HLN en tenant compte de la diffusion intra-vallée et inter-vallée pour des électrons de type Dirac. Dans les isolants topologiques 3D, la diffusion inter-vallée est supprimée, et on se ramène donc à une équation du type HLN. Ce sera donc avec le modèle HLN 4.14 que je traiterai les corrections d'antilocalisation observée dans mes structures HgTe/CdTe.

Différentes études ont déjà été abordées sur différents isolants topologiques comme $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ par Taskin *et al.* [2010] (par étude de la magnétorésistance sous dépendance angulaire), dans Bi_2Se_3 par Checkelsky *et al.* [2011], Chen *et al.* [2010], Kim *et al.* [2011] (en étudiant l'épaisseur du cristal). Le changement de régime antilocalisation–localisation faible est également prédit par Lu *et al.* [2011] (en considérant des impuretés magnétiques brisant la symétrie par renversement du temps) et est observé par Liu *et al.* [2012] par

dopage d'impuretés magnétiques. L'hybridation des surfaces (ou l'ouverture d'un gap sur les états de surfaces), le couplage avec le volume (Lu et Shen [2011] et Chen *et al.* [2010]) amènent également à ce changement de régime.

L'étude de l'antilocalisation faible dans les isolants topologiques 3D à base de HgTe/CdTe n'est pas aussi extensive. Cependant des études sur les structures de puits quantique à base de HgTe/CdTe ont été réalisées Minkov *et al.* [2012]. L'effet d'antilocalisation faible est observée; cependant rien n'indique que cet effet soit seulement du à une quelconque surface topologique puisque le couplage spin-orbite étant fort dans ces systèmes, rien ne permet de distinguer la contribution d'un gaz bidimensionnel soumis à un effet spin-orbite.

4.4.2 Soustraction de la composante classique

J'ai travaillé en conductance, il a fallu donc inverser le tenseur de résistivité(4.15). La conductance a un avantage par rapport à la résistance, elle est la somme des conductances propres à chaque porteur de charge (si on suppose un nombre N de porteurs de charges différents, alors $\sigma = \sum_i^N \sigma_i$ avec σ_i la conductance propre du porteur i).

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \\ \sigma_{xy} = \frac{\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \end{cases} \quad (4.15)$$

Afin d'extraire les corrections quantiques de la magnétoconductance, j'ai soustrait la composante classique de Drude qui s'y rajoute. Pour cela, il a fallu calibrer les paramètres du modèle de Drude avec la conductance de Hall et la conductance longitudinale.

4.4.2.1 Modèle de Drude à un porteur de charge

La conductance longitudinale et de Hall dépendent de deux paramètres physiques la mobilité μ et la densité du porteur n (dans notre cas on préférera traiter avec la mobilité et la conductivité à champ nulle $\sigma = en\mu$).

$$\begin{cases} \frac{\Delta\sigma_{xx}}{\sigma_0} = \frac{-B^2}{1 + (\mu B)^2} \\ \sigma_{xy} = \frac{\sigma_0 \mu B}{1 + (\mu B)^2} \end{cases} \quad (4.16)$$

Le modèle à un porteur de Drude (4.16) ne permet pas de correctement modéliser les données. En effet les équations dans (4.16) sont couplés par les paramètres n et σ . S'il est possible de correctement adapter le modèle théorique et la courbe expérimentale de Hall, les paramètres extraits s'accordent ensuite mal pour la conductance longitudinale. Il convient, dans ce cas, d'ajouter un degré de liberté supplémentaire, par l'ajout d'un autre type de porteurs de charges.

4.4.2.2 Modèle de Drude à deux types de porteurs

Il a fallu ajuster les courbes expérimentales avec un modèle de Drude à deux bandes 4.18. La forme du modèle à un ou deux porteurs pour la conductance de Hall est identique dans l'approximation des faibles champs, seule l'interprétation des paramètres d'ajustement du modèle change. Cependant, on obtient de meilleurs résultats avec le modèle à deux porteurs qu'à un seul pour la conductance longitudinale. Ce modèle n'est pas si surprenant car on suspecte l'existence d'un gaz 2D d'électron d'interface participant au transport (voir partie sur le transport à bas champ).

La conductance totale longitudinale et de Hall est la somme des deux contributions propres des deux porteurs.

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \frac{en_1\mu_1}{1 + (\mu_1 B)^2} + \frac{en_2\mu_2}{1 + (\mu_2 B)^2} \\ \sigma_{xy} = \frac{en_1\mu_1^2 B}{1 + (\mu_1 B)^2} + \frac{en_2\mu_2^2 B}{1 + (\mu_2 B)^2} \end{cases} \quad (4.17)$$

n_1, μ_1 la densité et la mobilité du porteur 1 et n_2, μ_2 la densité et la mobilité du porteur 2

Dans l'hypothèse des champs magnétiques faibles depuis (4.17), on obtient :

$$\begin{cases} \Delta\sigma_{xx} = \frac{-\sigma^* B^2}{1 + (\mu^* B)^2} \\ \sigma_{xy} = \frac{\sigma_0^* \mu^* B}{1 + (\mu^* B)^2} \end{cases} \quad (4.18)$$

σ^* correspondant à la conductance à champ nulle $n_1\mu_1 e + n_2\mu_2 e$, $\mu^{*2} = \mu_1^2 + \mu_2^2$ et $\sigma_0^* \mu^* = e \cdot (n_1\mu_1^2 + n_2\mu_2^2)$

4.4.2.3 Soustraction du comportement classique par le modèle de Drude à deux porteurs

L'ensemble des courbes dans la figure 4.14 illustrent pour deux tensions de grille 1,5 V et 6 V, l'évolution en température de la magnétoconductance et la conductance de Hall. On observe un écart au modèle de Drude près du champ nul pour la magnétoconductance à une tension de grille de 6 V. Ce pic est visible depuis 3 V. Il correspond à un pic d'antilocalisation comme on le verra dans la partie suivante. On peut aussi noter que ce pic devient de moins en moins prononcé avec l'augmentation de la température, ce qui est prévisible, puisque la température va réduire la longueur de cohérence de phase.

On peut également noter une légère asymétrie entre la magnétoconductance à champ négatif par rapport à celle en champ positif. Cette asymétrie serait du probablement à un comportement non régulier des contacts ohmiques sous l'effet du champ.

La figure 4.15, montre pour une température de 1,5 K, l'évolution des conductance longitudinale et de Hall en fonction de la grille V_g . Pour des tensions faibles (en dessous de 3 V, le pic d'antilocalisation se veut moins prononcé et les courbes classiques de Drude à deux bandes s'écartent de plus en plus des courbes théoriques. Il est à noter qu'à faible

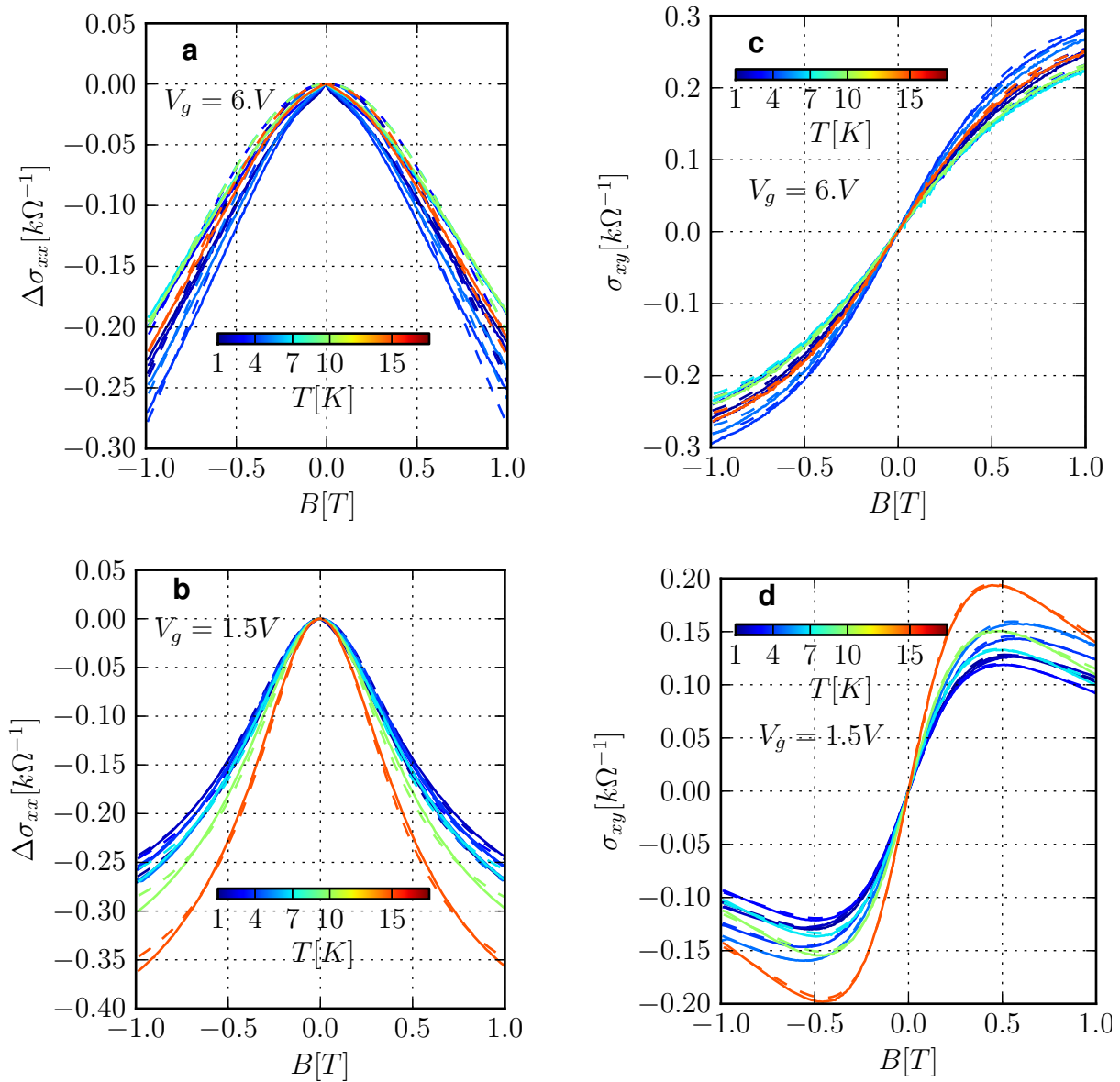


FIGURE 4.14 – Conductance longitudinale et de Hall pour un ensemble de température entre 1,5 K et 15 K pour deux tensions de grille 1,5 V et 6 V. On perçoit la correction quantique pour des faibles températures pour les courbes à 6 V. Les courbes pleines correspondent aux données expérimentales tandis que les courbes en pointillées sont l’ajustement du modèle de Drude à deux bandes. (a), (b) conductance longitudinale $\Delta\sigma_{xx} = \sigma_{xx}(B) - \sigma_{xx}(0)$ pour $V_g = 6V$ (a) et $V_g = 1,5V$. (c), (d) conductance de Hall pour $V_g = 6V$ (c) et $V_g = 1,5V$ (d)

tension (proche de 0 V), les contributions des bandes de volume peuvent entrer en jeu et donc affecter la conductance de surface. Il est possible que cet écart entre le modèle de Drude et les données expérimentales viennent de là. On peut également remarquer que le signe de la conductance de Hall s’inverse pour la courbe à $V_g = 0V$, dans le cas présent le signe des porteurs majoritaires s’inversent.

La figure 4.16 montre les différentes évolutions des corrections au modèle de Drude

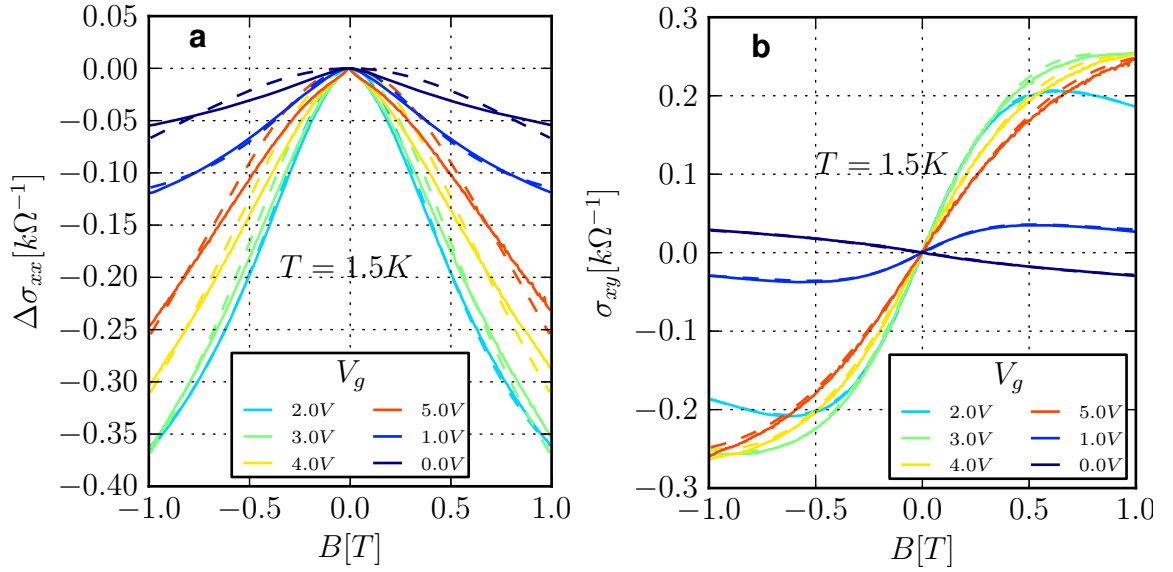


FIGURE 4.15 – conductance longitudinale et de Hall. Les courbes pleines sont les données expérimentales tandis que les courbes en pointillées sont celles du modèle de Drude à 2 porteurs. Ces courbes sont réalisées à température de 1,5 K et à différentes tensions de grilles : 0 V, 1 V, 2 V, 3 V, 4 V et 5 V. **(a)** : conductance longitudinale $\Delta\sigma_{xx} = \sigma_{xx}(B) - \sigma_{xx}(0)$. **(b)** : conductance de Hall. On remarque pour $V_g = 0$ V, le changement de signe des porteurs majoritaires.

suivant l'évolution soit de la grille, soit de la température sur un balayage en champ magnétique entre -1 T et 1 T. La correction positive que l'on observe à partir de $0,5$ T d'amplitude n'est pas synonyme de contribution de localisation faible ; en effet dans cette gamme de champ le modèle de Drude employé n'est pas nécessairement correct puisque l'on a supposé l'approximation de champ faible. Seuls les pics centraux autour de 0 T sont valides. ABS

L'ensemble de cette procédure a été réalisé pour différentes tensions de grille (de 1 V à 6 V) et pour différentes températures (de $1,5$ K à 15 K). Je vais donc par la suite étudier le comportement de la correction quantique sur ces gammes de tensions et de températures. Je pourrais ainsi extraire les paramètres d'ajustement α et l_ϕ et en donner une évolution en fonction des paramètres physiques.

4.4.3 Évolution en température

Je me suis limité au modèle HLN 4.14 pour la correction d'antilocalisation. J'ai considéré deux paramètres d'ajustements α l'amplitude et la longueur de cohérence l_ϕ (reliée à B_ϕ par $B_\phi = \hbar/(4el_\phi^2)$). L'amplitude afin de déterminer le nombre de canaux participant à l'antilocalisation et l_ϕ pour déterminer la distance sur laquelle la fonction d'onde des électrons restent cohérente. La figure 4.17 montre l'évolution en température de la correction d'antilocalisation pour une tension de 6 V.

Les paramètres d'antilocalisation α et l_ϕ pour une tension de grille de 6 V et $2,5$ V sont extraites pour la gamme de température étudiée. Les paramètres extraits ont une

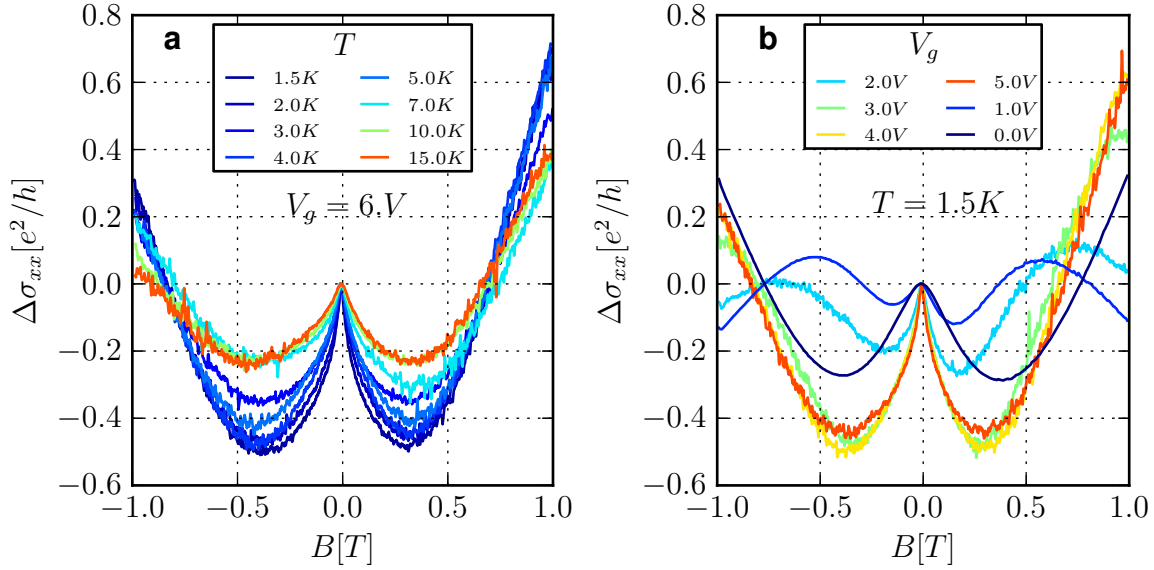


FIGURE 4.16 – Magnétoconductance soustraite de la composante

évolution générale à la décroissance avec l'augmentation de la température, cependant α reste proche de $\frac{1}{2}$ (figure 4.18). La loi de puissance en température pour l'ensemble des tensions étudiées reste inférieure à $T^{-0.5}$ comme on devrait s'y attendre pour un système bidimensionnel (Akkermans et Montambaux [2004]). Ce comportement a déjà été étudié observé dans les isolants topologiques 3D à base de $\text{Bi}_2\text{Se}_2\text{Te}$ par Bao *et al.* [2012] et dans Bi_2Se_3 par Chen *et al.* [2010] où la loi de puissance de la longueur de cohérence de cohérence avoisine $1/2$ (α valant 0.44 pour [Bao *et al.*, 2012] et 0.7 pour [Chen *et al.*, 2010]).

L'évolution de la loi de puissance pour l_ϕ ($l_\phi \propto T^\alpha$) à différentes tensions de grille V_g sont dans le tableau 4.2.

| V_g [V] | 6 | 5 | 4 | 3 | 2.5 | 1.5 |
|-----------|-------|--------|-------|-------|------|------|
| α | -0.31 | -0.245 | -0.25 | -0.26 | 0.03 | 0.85 |

Tableau 4.2 – Loi de puissance de T^α pour le paramètre l_ϕ pour la longueur de cohérence

Le changement de régime de la loi de puissance pour l_ϕ en fonction de la tension de grille ne s'explique pas pour le moment. Tout ce que nous pouvons dire, à partir des résultats du magnétotransport à faible champ qu'un gaz d'électrons d'interface peut se produire à partir de ≈ 3 V. En dessous de 1 V, le paramètre α pour l_ϕ devient également difficile à extraire, ce qui s'explique aussi notamment que le système se trouve dans un régime ambipolaire avec une présence non négligeable de trous de volume.

4.4.4 Évolution en tension de grille

L'évolution de α et l_ϕ sont également réalisées à température constante 1,5 K en balayant les valeurs accessibles par la grille V_g . L'évolution de α en fonction de la densité

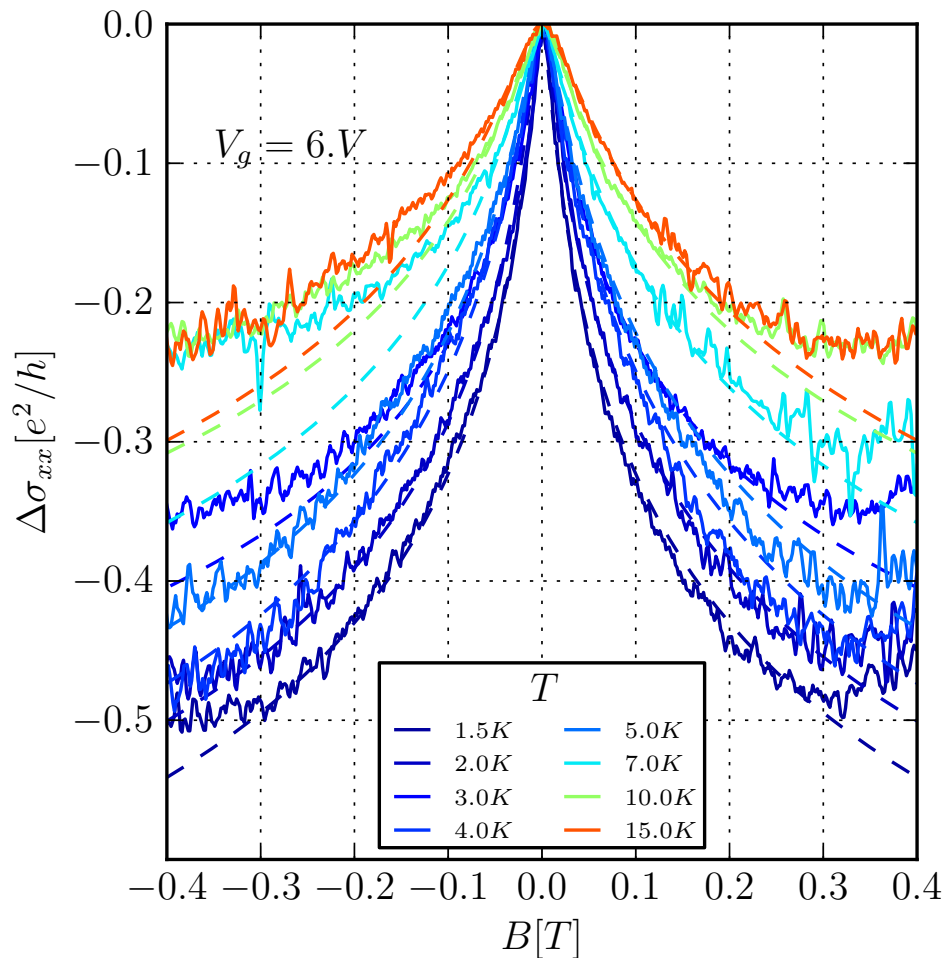


FIGURE 4.17 – Correction de la conductance longitudinale due à l’antilocalisation faible pour une tension de grille à 6 V et pour un faisceau de température allant de 1,5 K à 15 K. Les traits pleins correspondent aux données expérimentales tandis que les traits en pointillés viennent de la modélisation de l’antilocalisation faible par l’équation de HLN 4.14 avec comme paramètre d’ajustement α et B_ϕ .

de charge a déjà été réalisé par Chen *et al.* [2010] dans des cristaux de Bi_2Se_3 . On y retrouve un fait identique notamment celui de la diminution de la valeur de α lorsque la grille s’approche du point de compensation de charge ou point de Dirac ($V_g = 0,56$ V dans mon cas). Il y a une transition se produisant proche de 3 V. Le préfacteur α est croissant entre 0,56 V et 3 V croisant la facteur 1/2. Le préfacteur croit jusqu’à se stabiliser à la valeur 1/2 pour des tensions de grilles supérieures à 4 V (figure 4.19). Cette transition pourrait se justifier par la présence du gaz d’électron d’interface. Le couplage spin-orbite étant relativement important dans mes structures HgTe/CdTe, l’antilocalisation faible et le préfacteur 1/2 n’est pas surprenant pour les fortes tensions de grille.

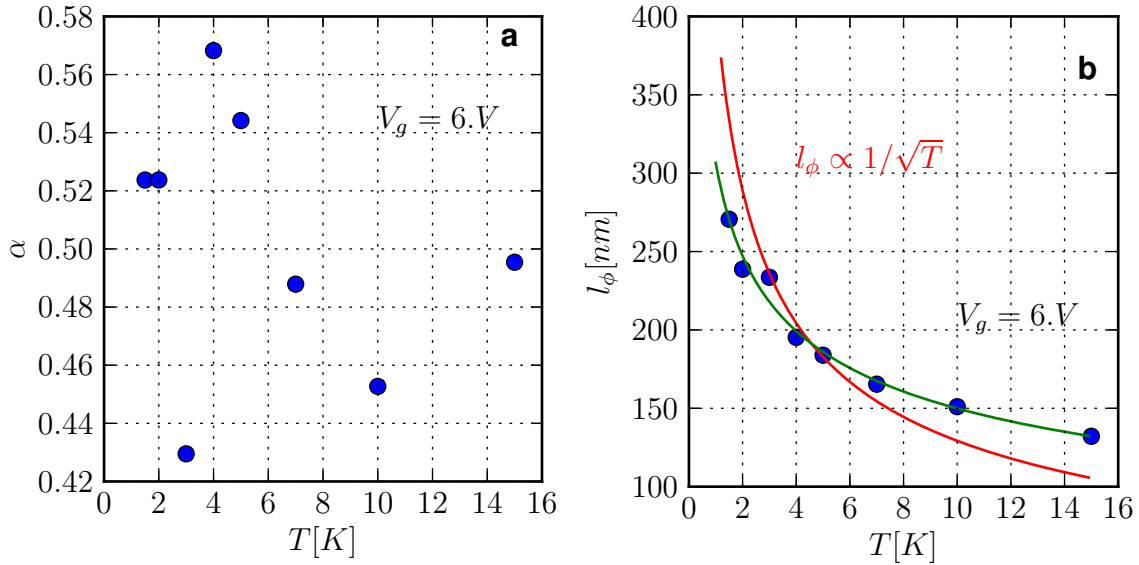


FIGURE 4.18 – paramètres du modèle d’antilocalisation pour une tension de 6V. **a** : préfacteur α en fonction de la température. La valeur avoisine 0.5 **b** : longueur caractéristique de phase l_ϕ en fonction de la température. La loi de puissance diverge par rapport à un système 2D.

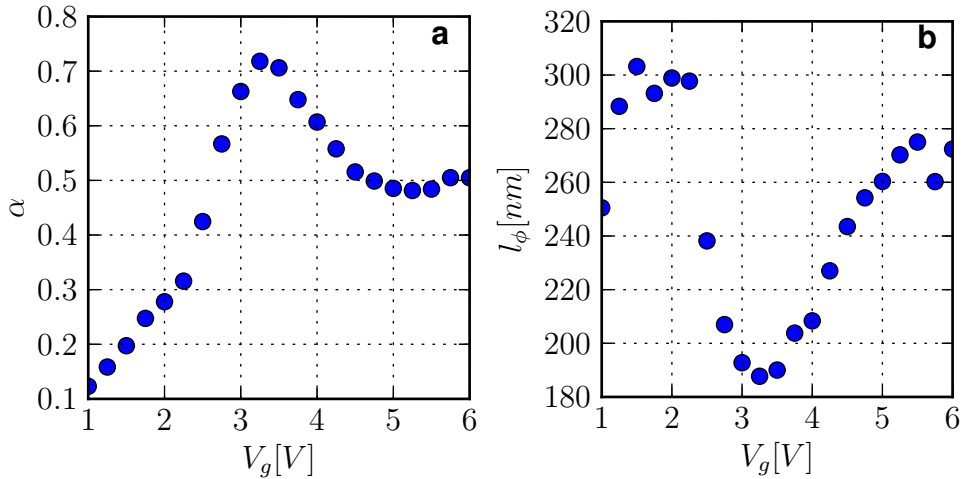


FIGURE 4.19 – paramètres numériques α et B_ϕ provenant du modèle théorique pour l’antilocalisation faible. **a** : préfacteur d’amplitude α en fonction de la tension de grille V_g . **b** : longueur de phase l_ϕ extraite de B_ϕ en considérant $B_\phi = \hbar/(4el_\phi^2)$

4.5 Effet Hall Quantique

4.5.1 Les niveaux de Landau d'une relation de dispersion linéaire

Dans le cas d'une relation de dispersion électronique linéaire $E(\vec{k}) = \hbar v_f k$, les niveaux de Landau suivent une loi en racine de B (à la différence d'un gaz bidimensionnel classique qui suivra une loi linéaire en B).

$$E_n = v_F \sqrt{2e\hbar n B} \quad (4.19)$$

La particularité de la propriété des niveaux de Landau dans les fermions de Dirac, c'est qu'il existe un niveau particulier, l'état $n = 0$ invariant en champ.

Les données ARPES sortent une vitesse de Fermi de $4,06 \cdot 10^5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

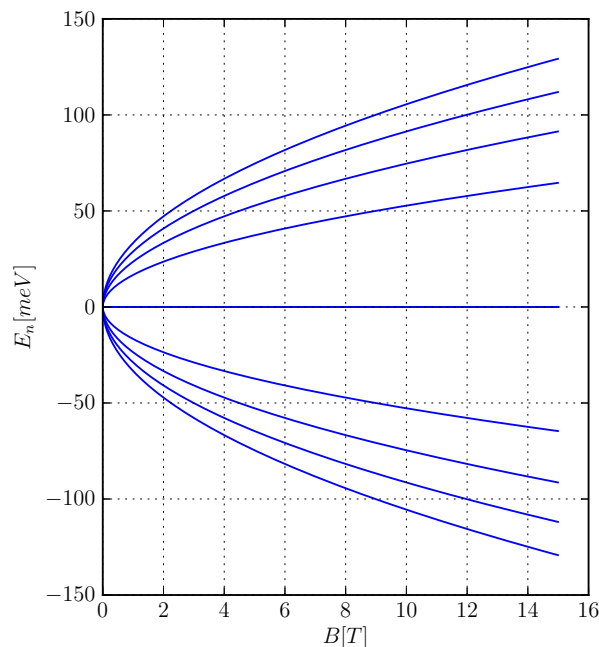


FIGURE 4.20 – Niveau de Landau en fonction du champ magnétique B pour une vitesse de fermi $v_F = 4,06 \cdot 10^5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

L'énergie cyclotron des électrons de Dirac est élevée. Si on la met en lumière face à l'ensemble des énergies telles que celle du gap de volume, ou l'effet de déplétion de la grille, il est étonnant d'apercevoir les niveaux de Landau d'un gaz d'électron de Dirac. En effet, il est à noter depuis les données d'Arpes que la structure du cône de surface expose une vitesse de fermi plus élevée que celle attendue, produisant donc une dispersion des niveaux plus importante. Il est prévu que le gap d'énergie du volume entre la Γ_8 trous lourds et la Γ_8 trous légers est de 10 meV et que le point de croisement se situe à la limite l'interface de la bande de valence Γ_8 trous lourds. Le niveau à 0 eV de la figure 4.20 délimite donc la bande de valence. Toute la partie inférieure correspond aux bandes de volumes.

4.5.2 Les états de Hall quantique dans les structures HgTe/CdTe

Du fait que les électrons de Dirac à la surface des isolants topologiques possèdent une phase de Berry non triviale, il est garantie l'existence d'un état d'énergie zéro (comme illustré dans la figure 4.20) dégénéré en moitié en état de trous et d'électrons (Jackiw [1984]). La conductance de Hall augmente d'une unité de e^2/h à chaque traversée d'un niveau de Landau; dans ce cas, à la traversée du niveau $n = 0$, la conductance croît d'une demi-unité de e^2/h , il es donct prédit que la conductance de Hall respecte une quantification de la forme $\sigma_{xy} = e^2/h(n + 1/2)$ avec n entier pour un cône de Dirac c'est à dire pour un seul plan. On s'attend donc à observer ce comportement dans les isolants topologiques 3D si les mesures de transport ne se font que sur une seule surface.

Ce type de comportement a été observé avec succès dans les plans de graphène par Novoselov *et al.* [2005] et par Zhang *et al.* [2005]. Cependant le graphène doit tenir compte de la dénéréscence de spin et de vallée ce qui donne une évolution en $\sigma_{xy} = 4 \cdot e^2/h(n + 1/2) = e^2/h(4n + 2)$. Le problème de la mesure d'une conductance demi-entière, c'est que si on considère les structures en forme de barre de Hall, un champ magnétique perpendiculaire à cette barre est normale à deux surfaces en vis à vis (figure 4.21). La localisation des courants de bords selon l'image de Landauer reste une question entière et on ne peut imaginer que la surface supérieure et inférieure ne soient pas connectées l'une à l'autre par les surface latérales et que l'on en mesure pas une contribution des deux surfaces ce qui donnerait $\sigma_{xy} = e^2/h(2n + 1)$ (Fu et Kane [2007c]).

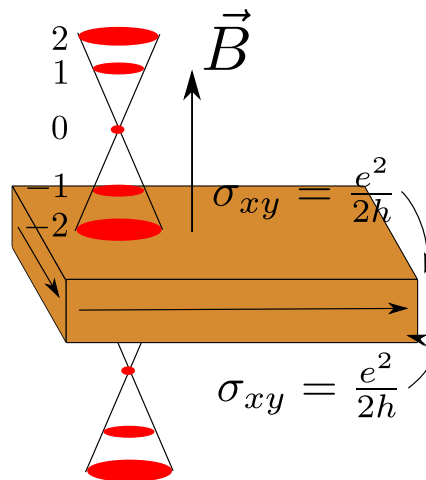


FIGURE 4.21 – schéma d'un empilement d'isolant topologique 3D. La relation de dispersion linéaire est tracée avec en rouge les position des niveaux de Landau pour la face supérieure et inférieure. Si l'énergie de Fermi se place entre le niveau $n = 0$ et $n = 1$ des niveaux de Landau de chaque face, celles-ci contribuent par $e^2/2h$ à σ_{xy} . Les canaux de bords sont dessinés par des flèches sur les bords latéraux

La quantification de la conductance longitudinale a été observée dans les structures HgTe/CdTe de type isolant topologique 3D par Brüne *et al.* [2011] sur une barre de Hall sans grille. La quantification n'est pas exactement respectée en valeur impaire ($2n + 1$) et pourrait s'expliquer par une différence de densité de charges sur les deux surface supérieure et inférieure.

4.5.3 Observations des états de Hall quantique dans les structures HgTe/CdTe du CEA LETI

Une quantification de la résistance de Hall a été observée dans mes structures CdTe/HgTe. L'observation de plateau en $\pm h/e^2$ est visible avec l'apparition d'un minimum de la résistance longitudinale. Toutefois, L'origine de la valeur des quantifications de ρ_{xy} et la non annulation de la résistance ρ_{xx} reste encore une question non vraiment résolue.

Des cartographies en échelle de couleur en résistance longitudinale ρ_{xx} et de Hall ρ_{xy} ont été réalisées dans le plan (B, V_g) . Celles-ci sont visibles sur les figures 4.22 et 4.23. La cartographie pour la résistance longitudinale permet d'observer l'apparition des possibles niveaux à des tensions de grille V_g à partir de 1 V. La cartographie pour la résistance de Hall permet de localiser la position des plateaux de quantification et également de remarquer la zone de compensation de charge correspondant à la valeur $\rho_{xy} = 0$ se déplace suivant les coordonnées (B, V_g) . La position de cette zone de compensation de charge suit une droite linéaire avec un changement de pente vers 5 T.

Ce comportement est bien différent de celui obtenu dans le graphène exfolié par Zhang *et al.* [2005]. En effet, le point de compensation de charge n'évolue pas et reste à une tension de grille donnée quelque soit la valeur de champ magnétique. Le simple fait de l'évolution dans ce plan (B, V_g) implique que la densité d'état autour de ce point évolue avec le champ magnétique. Si on considère depuis les valeurs obtenues à bas champ que le point de Dirac se situe sur la point de compensation de charge, cela implique une difficulté à correctement établir le facteur de remplissage $\nu = ne/Bh$ (avec n la densité de charge de la surface) des niveaux de Landau.

Il est également à noter qu'au dessus de 3 V, il est possible d'un gaz d'interface vient perturber la contribution de la surface topologique (comme observé dans la partie sous faible champ) et donc de modifier la quantification de la résistance de Hall et ainsi que la hiérarchie de remplissage des niveaux de Landau. Il sera difficile de considérer correctement ce qui se produit au-dessus de 3 V de tension de grille.

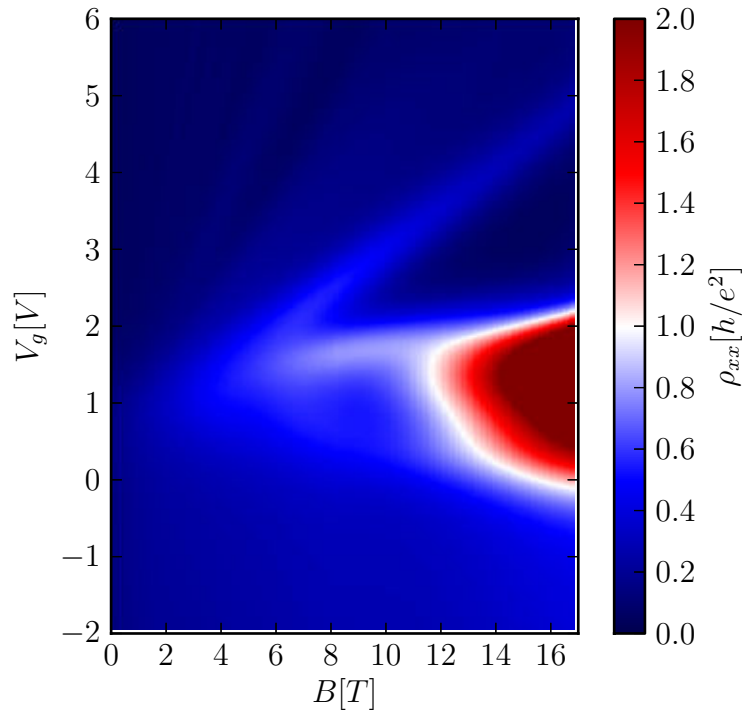


FIGURE 4.22 – cartographie couleur de la résistance longitudinale ρ_{xx} dans le plan (B, V_g) . Les maximums de résistance permettent de positionner des niveaux de Landau. On constate un état pratiquement invariant en fonction du champ magnétique. On observe également la création d'un état isolant à fort champ magnétique à partir de 12 T avec des valeurs de résistance dépassant $50 \text{ k}\Omega$. La partie de tension de grille V_g en dessous d'un demi volt correspond à la partie trous des porteurs de charge avec aucune apparition de niveau de Landau ; ce qui semble cohérent avec le fait que cette région correspond à la bande de valence du volume.

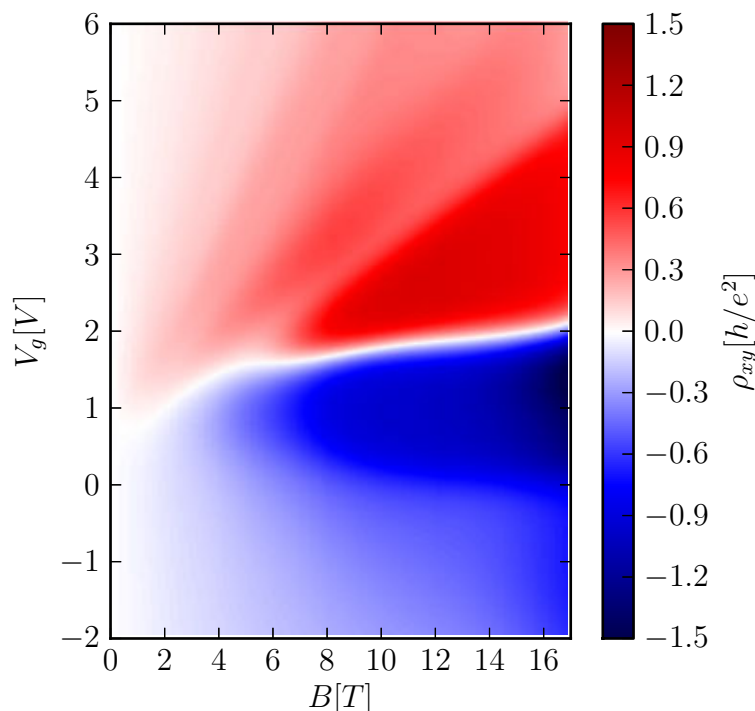


FIGURE 4.23 – cartographie couleur de la résistance longitudinale ρ_{xx} dans le plan (B, V_g) . On constate l'évolution du point de neutralité de charge dans le plan. Il y a aussi apparition de zone où la résistance de Hall est plane à une valeur quantifiée en h/e^2 . On observe pratiquement une absence de plateaux dans la partie de tension de grille en dessous de 0,5 V, dans cette région le transport est dominé par les contributions de volume.

4.5.4 Possible quantification des surfaces topologique dans HgTe/CdTe

La figure 4.25 illustre la possible quantification des surfaces topologiques dans HgTe. En effet pour des valeurs de champ magnétique pas trop important, près de la zone ambipolaire, nous observons une transition des plateaux de la résistance de Hall quantifiée allant de $-h/e^2$ à h/e^2 en dessous de 12 T sans l'observation d'un plateau intermédiaire à 0. Cette transition est très spécifique car d'une part elle ne correspond pas à une transition de plateaux de hall quantique entier visible dans les gaz électronique classique (c'est sans à avec une masse effective non nulle, obéissant à un hamiltonien non relativiste), et d'autre part elle a été observée dans les système de bicouches de graphène par Novoselov *et al.* [2006] et potentiellement prédit par Fu et Kane [2007c] dans les isolants topologiques 3D dans l'hypothèse où la barre de Hall sonde deux surfaces topologiques.

On peut encore observer entre 8 T et 12 T l'observation de pics de résistance longitudinale pour des valeurs de l'ordre de h/e^2 aux transitions des plateaux de résistance de Hall quantiques lorsque la grille est balayée en tension entre -2 V et 6 V sur la figure 4.25. Il convient également de noter que la résistance longitudinale ne s'annule pas complètement dans les états de Hall quantiques. Cela signifie qu'il existe encore une composante

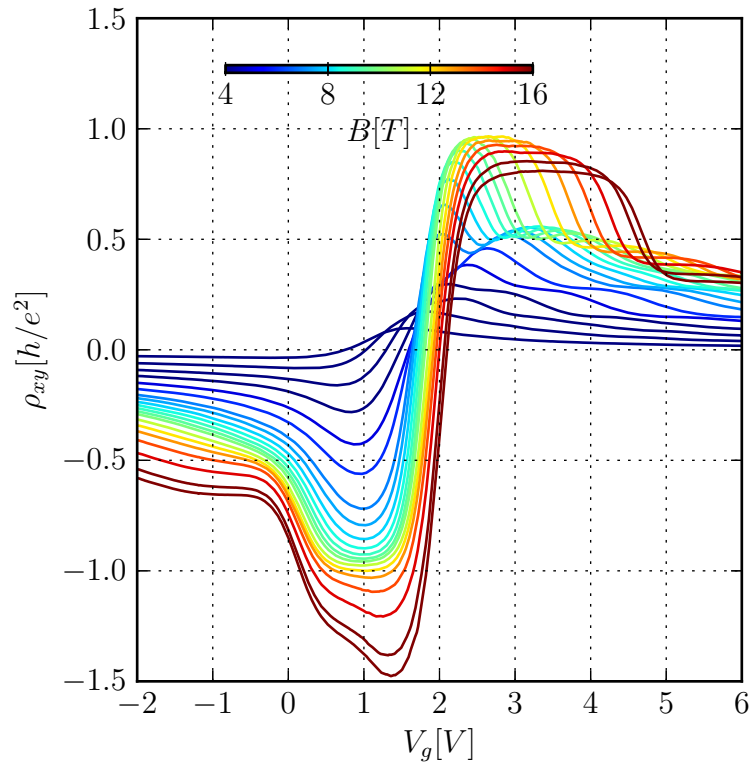


FIGURE 4.24 – résistance de Hall en fonction de V_g pour différentes valeurs de champ magnétique. La formation des plateaux de Hall Quantique entier commence à apparaître à 12 T. Un plateau type trou est visible à $-h/e^2$ à $V_g = 1$ V, un autre plateau également bien défini de type électron à h/e^2 à $V_g = 2,5$ V. Il est possible d’observer des plateaux au dessus de 3 V mais nous arrivons dans le domaine où un gaz d’interface vient perturber la quantification de la résistance de Hall de manière non négligeable. D’ailleurs la valeurs des plateaux des plateaux de quantification diminue plus le champ et plus la tension de grille augmente, indice d’une contribution parallèle parasite.

parallèle où la rétrodiffusion des charges n’est pas supprimée. L’une des explications de ce phénomène serait du au courant parasite intrinsèque des surfaces latérales des contacts (Brüne *et al.* [2011]).

Il est intéressant de connaître le nombre de niveau de Landau rempli à chaque position des plateaux de Hall. Le facteur de remplissage correspond aux nombre de charges disponibles par rapport au nombre d’états disponibles dans les niveaux de Landau. Le facteur de remplissage est proportionnel à la densité de charges, c’est à dire à la tension de grille imposée. Si on se base sur l’étude à faible champ magnétique faite précédemment on peut relier une loi linéaire entre la valeur de la tension de grille et le facteur de remplissage. La constante de déplétion de la grille correspond à $\alpha = 1,87 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{V}^{-1}$ pour un décalage de grille à $V_D = 0,56$ V. On obtient le type de courbe de la figure 4.26 pour la résistance longitudinale et de Hall en fonction du facteur de remplissage $\nu = \alpha(V - V_D) * e/hB$.

Si je compte la valeur de la conductance de Hall en fonction du remplissage ν , on aurait une loi de la forme $\sigma_{xy} = e^2/h(2 \cdot \nu - 1)$. On observe bien sur les figures en 4.26 pour des valeurs de champ pas trop importante (en dessous de 12 T), les pics de maximum de résistance ρ_{xx} au facteur ν entier ; pourtant il semblerait que l’on obtient un décalage

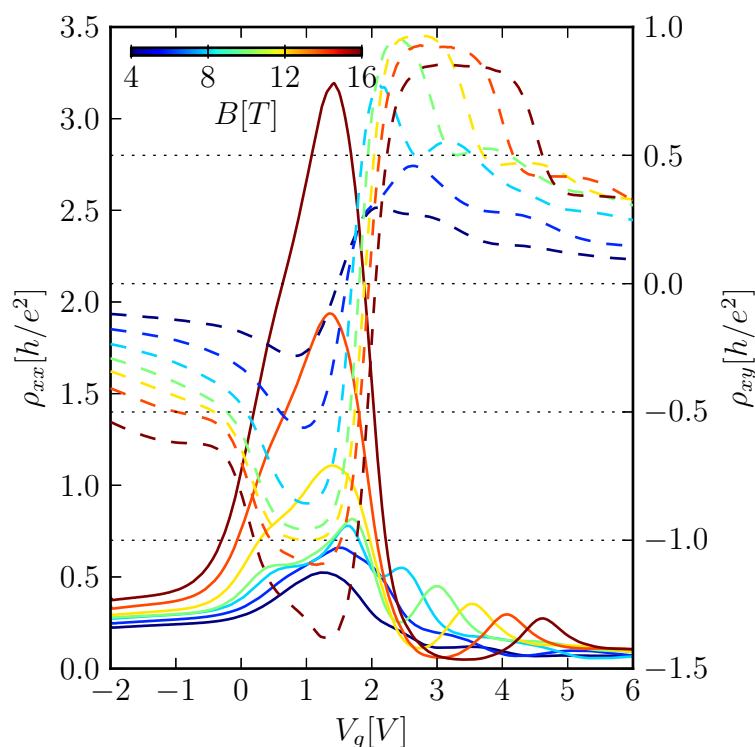


FIGURE 4.25 – résistivité longitudinale ρ_{xx} (courbes pleines avec échelle à gauche) et résistance de Hall ρ_{xy} (courbes en pointillées avec échelle à droite) en valeur de h/e^2 de résistance en fonction de la tension de grille V_g à 1,5 K pour des valeurs de champ magnétique allant de 4 T à 16 T

d'une unité de trop car la position de $\nu = 0$ serait plutôt pour une transition de σ_{xy} entre $-e^2/h$ et e^2/h .

Au dessus de 12 T, le système commence à subir une nouvelle transition d'état vers un état isolant comme nous allons le voir dans la partie suivante.

4.5.5 un état isolant à fort champ magnétique. Ouverture d'un gap en énergie de l'état $n = 0$?

Au dessus de 12 T pour des tensions de grille permettant de rester autour de l'état $n = 0$ à 1,5 K, on observe la création d'un état isolant (figure 4.22). Cette transition se voit également sur la figure 4.26 (b). Au facteur de remplissage entre $\nu = 0$ et $\nu = 1$, la conductance de Hall tend à un plateau à $\sigma_{xy} = 0$. Cependant ce plateau ne correspond pas à l'apparition d'un état de Hall quantique entier mais plutôt d'une ouverture de gap en énergie de volume ; en effet la résistivité longitudinale commence à diverger également dans cette zone pour des valeurs d'au moins 3 à 3.5 fois la valeur de h/e^2 signifie l'absence de canaux de conductance. Ce genre d'effet a déjà été observé dans le graphène avec une levée de dégénérescence de spin de l'état $n = 0$ et l'apparition d'un plateau à $\sigma_{xy} = 0$ (Zhang *et al.* [2010a], Abanin *et al.* [2007]). Le facteur de Landé dans ces systèmes est important ($g \approx 20 - 50$), et le champ magnétique brise la symétrie par renversement du

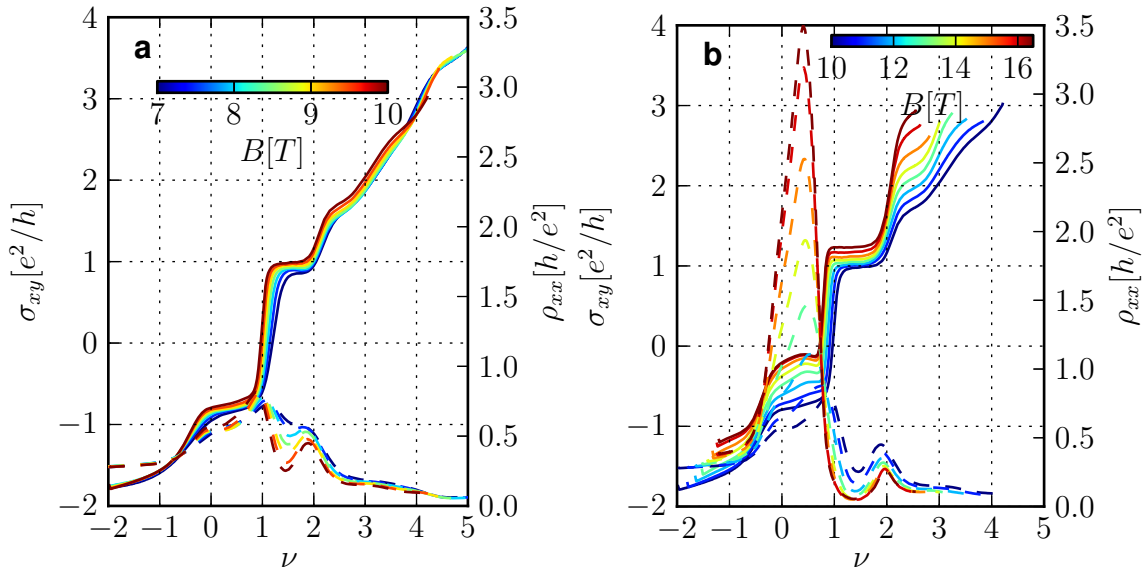


FIGURE 4.26 – conductance de Hall et résistivité longitudinale en fonction du facteur de remplissage ν à plusieurs valeurs de champ magnétiques B . **a** : conductance de hall (courbes continues) et résistivité longitudinale (courbes en pointillées) en fonction du facteur de remplissage ν à 1,5 K pour des valeurs de champ entre 4 T et 8 T. **b** : conductance de hall (courbes continues) et résistivité longitudinale (courbes en pointillées) en fonction du facteur de remplissage ν à 1,5 K pour des valeurs de champ entre 8 T et 16 T. La divergence de la résistivité longitudinale et la création d'un plateau de la conductivité de Hall à $\sigma_{xy} = 0$ implique l'existence d'un gap en énergie.

temps, ce qui ne protège plus le point de Dirac et donc la levée de dégénérescence et la création d'un gap d'énergie autour du point de Dirac.

Conclusion

Durant ce travail, nous avons confirmé la présence d'états de surface sur nos structures CdTe/HgTe par le biais de l'observation des bandes de surface par ARPES. Les expériences de transport ont montré des indices confirmant les propriétés topologiques de ces états de surface avec notamment l'observation d'une phase de Berry non triviale. Nous avons observé des plateaux de Hall quantique entiers mais dont les valeurs de quantification ne puissent pas garantir l'observation d'une surface topologique unique. La présence d'un état invariant en champ magnétique, $n = 0$ reste une bonne indication pour supposer une relation de dispersion de type Dirac à la surface. On peut également noter l'apparition d'un gap d'énergie à plus fort champ dont l'étude reste encore à approfondir.

La signature de l'état de surface topologiquement protégé est cependant parasité par l'apparition d'un gaz 2D classique à forte tension de grille. Une caractérisation supplémentaire permettra de lever l'ambiguïté de l'éventualité d'une conduction parasite par les flancs de l'échantillon. L'utilisation d'une géométrie plus spécifique comme celle en Corbino permettrait de s'affranchir de ce problème par exemple, puisque cette géométrie fixerait un potentiel électrique unique sur les bords. Une étude suivant l'orientation du champ magnétique permettrait aussi de pouvoir caractériser les termes de couplage tels que ceux de Zeeman qui peuvent se produire à fort champ, par exemple. Dans l'hypothèse où le courant se distribue sur les surfaces supérieures et inférieures d'une barre de Hall, il n'est pas exclu de pouvoir fabriquer une grille supérieure et inférieure permettant de pouvoir contrôler séparément la densité de ces deux surfaces.

Les structures HgTe/CdTe sont des matériaux très prometteurs d'une part pour la réalisation de dispositifs de spintronique (pouvant même fonctionner avec un transport cohérent à température ambiante) et d'autre part rien n'empêchera la conception de structures révélant des quasiparticules tels que les fermions de Majorana.

Annexe A

Modèle de Kane

A.1 La renormalisation de Löwdin

Nous souhaitons diagonaliser (2.4) pour un sous-ensemble de bandes. Au point Γ nous considérerons la bande de conduction type s et les bandes de valences triplement dégénérées p . En tenant compte du spin nous aurons donc 8 bandes à traiter. On utilisera les 8 états suivant comme base :

$$\begin{aligned} &|s, \uparrow\rangle, |s, \downarrow\rangle, \\ &|x, \uparrow\rangle, |x, \downarrow\rangle, \\ &|y, \uparrow\rangle, |y, \downarrow\rangle, \\ &|z, \uparrow\rangle, |z, \downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{A.1}$$

Les bandes à étudier (s et p) sont couplées à des bandes de plus hautes et de plus basses énergies par l'opérateur $p_{nn'}$ dans (2.12). On peut éliminer ces couplages en utilisant une théorie des perturbation introduite par Löwdin. On divisera les bandes en deux ensembles, un ensemble regroupant la base réduite des 8 états précédents (on nommera A cet ensemble) et l'ensemble des autres bandes (ensemble B). A est au final l'ensemble des valeurs propres que nous souhaitons obtenir de manière correcte.

À l'ordre le plus bas de la théorie des perturbation, le couplage entre A et B peut être enlevé en introduisant les fonctions :

$$u'_i = u_i + \sum_k^B \frac{H_{ki} u_k}{H_{ii} - H_{kk}} \tag{A.2}$$

Pour les u_i sont les fonctions de base dans A.

Les termes de couplages entre u'_i et u'_j seront :

$$H'_{ij} = H_{ij} + \sum_k^B \frac{H_{ik} H_{kj}}{\frac{H_{ii} + H_{jj}}{2} - H_{kk}} \tag{A.3}$$

A.2 Matrice de Kane sans interaction spin-orbite

Si on ne tient pas compte du couplage spin-orbite, le spin reste un bon nombre quantique pour définir les états électroniques. On peut donc se limiter à un ensemble d'une base à quatre états d'étude $|s\rangle$, $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$. Les bandes électroniques auront donc une double dégénérescence due au spin.

En prenant en considération le Hamiltonien général d'une structure de type zinc-blende et en appliquant l'approximation de Löwdin sur la base des quatre états, nous obtenons un hamiltonien 4×4 de la forme (A.4).

$$\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cc} |s\rangle & |x\rangle \end{array} \\
 \begin{array}{l} \langle s| \\ \langle x| \\ \langle y| \\ \langle z| \end{array} \left[\begin{array}{cc} A'k^2 + E_c & Bk_xk_y + iPk_x \\ Bk_yk_z - iPk_x & L'k_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + E_v \\ Bk_xk_z - iPk_y & N'k_xk_y \\ Bk_xk_y - iPk_z & N'k_xk_z \end{array} \right. \\
 & \begin{array}{cc} |y\rangle & |z\rangle \end{array} \\
 & \left. \begin{array}{cc} Bk_xk_z + iPk_y & Bk_xk_y + iPk_z \\ N'k_xk_y & N'k_xk_y \\ L'k_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) + E_v & N'k_yk_z \\ N'k_yk_z & L'k_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) + E_v \end{array} \right]
 \end{array} \tag{A.4}$$

avec E_c l'énergie de la bande de conduction sans perturbation $E_c = E_{c0} + \hbar^2k^2/2m$, $E_v = E_{v0} + \hbar^2k^2/2m$, l'énergie de la bande de valence. Hormis P , les autres termes reste

des termes de couplages du premier ordre avec les autres bandes.

$$\begin{aligned}
L' &= F' + 2G & M &= H_1 + H_2 \\
N' &= F' - G + H_1 - H_2 \\
F' &= \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j^{\Gamma_1} \frac{|\langle x|p_x|u_j\rangle|^2}{E_{v0} - E_j} & G &= \frac{\hbar^2}{2m^2} \sum_j^{\Gamma_{12}} \frac{|\langle x|p_x|u_j\rangle|^2}{E_{v0} - E_j} \\
H_1 &= \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j^{\Gamma_{15}} \frac{|\langle x|p_y|u_j\rangle|^2}{E_{v0} - E_j} & H_2 &= \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j^{\Gamma_{25}} \frac{|\langle x|p_y|u_j\rangle|^2}{E_{v0} - E_j} \\
A' &= \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_j^{\Gamma_{15}} \frac{|\langle s|p_x|u_j\rangle|^2}{E_{v0} - E_j} & B &= \frac{2\hbar^2}{m^2} \sum_j^{\Gamma_{15}} \frac{\langle s|p_x|u_j\rangle \langle u_j|p_y|z\rangle}{E_{v0} - E_j}
\end{aligned}$$

La somme sur j se fait sur les bandes de plus hautes symétries $\Gamma_1, \Gamma_{12}, \Gamma_{15}, \Gamma_{25}$. Tous les paramètres précédents sont réels, L', M, N' expriment des interactions avec les bandes de l'ensemble B. Celles-ci renormalisent les interactions des bandes A par la théorie des perturbations de Löwdin. Ces interactions sont faibles par rapport aux interactions directes dépendant de P .

Le hamiltonien (A.4) se simplifie pour des petites valeurs de \vec{k} et en l'approximant encore avec modèle perturbatif de Löwdin, mais cette fois entre l'état $|s\rangle$ et l'ensemble des états $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$:

$$\begin{array}{c}
\begin{array}{cc}
|s\rangle & |x\rangle \\
\langle s| \left[\begin{array}{cc}
Ak^2 + E_c & 0 \\
0 & Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + E_v \\
0 & Nk_x k_y \\
0 & Nk_x k_z
\end{array} \right. \\
\langle x| \\
\langle y| \\
\langle z|
\end{array} \\
\begin{array}{cc}
|y\rangle & |z\rangle \\
\left. \begin{array}{cc}
0 & 0 \\
Nk_x k_y & Nk_x k_z \\
Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) + E_v & Nk_y k_z \\
Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) + E_v
\end{array} \right] &
\end{array}
\end{array} \quad (A.5)$$

$$\begin{aligned} A &= A' + \frac{P^2}{E_{c0} - E_{v0}} & F &= F' + \frac{P^2}{E_{c0} - E_{v0}} \\ L &= F + 2G & N &= F - G + H_1 - H_2 \end{aligned}$$

Dans l'hypothèse de semiconducteur à gap étroit, A, F, L et N possèdent un terme relativement grand $P^2/(E_{c0} - E_{v0}) = P^2/E_0$ avec E_0 la valeur du gap en énergie. Dans ce cas, A, F, L et N au premier ordre dépendra de ce terme et $A \approx P^2/E_0$ et $F \approx -P^2/E_0$. On remarque donc que le terme de masse des bandes de conduction et de valence est directement relié au rapport du terme du couplage directe et du gap en énergie.

Bien entendu l'approximation précédente ne fonctionne que si le gap étroit séparant la bande de valence de la bande de conduction reste petit devant l'écart entre les autres bandes d'énergie (la suivante plus proche étant celle de type p liante-antiliante). Si on nomme E'_0 cette valeur, le Hamiltonien (A.5) restera valable tant que $E_0 \ll E'_0$. Dans le cas contraire, il faudra tenir compte du couplage entre les bandes plus proches voisines en énergie.

Le tableau A.1 donne les valeurs des différents paramètres de bandes du modèle de Kane. Le Hamiltonien (A.5) restera correcte pour des composés dont E_0 reste de l'ordre de 0,1 eV car en général E'_0 varie autour de 3 eV et 7 eV.

| | E_0 [eV] | Δ [eV] | E'_0 [eV] | E_p [eV] |
|------|------------|---------------|-------------|------------|
| Si | 4.07 | 0.04 | 3.4 | 21.6 |
| Ge | 0.89 | 0.29 | 3.16 | 26.3 |
| Sn | -0.413 | 0.77 | 2.40 | 23.8 |
| AlP | 5.12 | 0.05 | 5.18 | 17.7 |
| AlAs | 3.06 | 0.28 | 4.66 | 21.1 |
| AlSb | 2.30 | 0.75 | 4.73 | 18.7 |
| GaP | 2.87 | 0.08 | 5.33 | 22.2 |
| GaAs | 1.52 | 0.34 | 4.81 | 25.7 |
| GaSb | 0.81 | 0.77 | 3.69 | 22.4 |
| InP | 1.42 | 0.13 | 5.10 | 20.4 |
| InAs | 0.42 | 0.38 | 4.40 | 22.2 |
| InSb | 0.237 | 0.81 | 3.49 | 23.1 |
| ZnS | 3.80 | 0.07 | 8.47 | 20.4 |
| ZnSe | 2.82 | 0.43 | 7.67 | 24.2 |
| ZnTe | 2.39 | 0.92 | 6.23 | 19.1 |
| CdS | 2.56 | 0.07 | 7.85 | |
| CdSe | 1.84 | 0.42 | 7.39 | |
| CdTe | 1.60 | 0.91 | 6.01 | 20.7 |
| HgS | -0.15 | 0.07 | 9.56 | 18.8 |
| HgSe | -0.24 | 0.45 | 6.80 | 19.4 |
| HgTe | -0.303 | 1.00 | 5.58 | 18.0 |

Tableau A.1 – Paramètres de bandes E_0 gap entre les bande s - p , Δ_0 couplage spin-orbite, E'_0 gap entre les bandes p - p , $E_p = 2/mP^2$ paramètre de masse s - p pour certains composés covalents cubique face centrée obtenus depuis [Herman et al., 1963].

A.3 Matrice de Kane avec interaction spin-orbite

A.3.1 Nouvelle base

Le Hamiltonien (A.4) se définit avec une base à 4 états : $|s\rangle$, $|x\rangle$, $|y\rangle$ et $|z\rangle$. En tenant compte des états de spin, nous aurons au final 8 états comme définis avec (A.1). Le spin ne constitue plus un bon nombre quantique pour définir une base, il convient donc de considérer une nouvelle base avec le moment cinétique total J . J^2 et J_z constituent de bons nombres quantiques si on considère l'interaction spin-orbite. On utilisera donc une base à huit états reliés à $|J, J_z\rangle$:

$$\begin{aligned}
|\Gamma_8, 3/2, 3/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |x, \uparrow\rangle + i |y, \uparrow\rangle && ;E_{v0} + \frac{\Delta}{3} \\
|\Gamma_8, 3/2, 1/2\rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}} |z, \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (|x, \downarrow\rangle + i |y, \downarrow\rangle) && ;E_{v0} + \frac{\Delta}{3} \\
|\Gamma_7, 1/2, 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |x, \downarrow\rangle + i |y, \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |z, \uparrow\rangle && ;E_{v0} + \frac{2\Delta}{3} \\
|\Gamma_8, 3/2, -3/2\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |x, \downarrow\rangle - i |y, \downarrow\rangle && ;E_{v0} + \frac{\Delta}{3} \\
|\Gamma_8, 3/2, -1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |z, \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (|x, \uparrow\rangle - i |y, \uparrow\rangle) && ;E_{v0} + \frac{\Delta}{3} \\
|\Gamma_7, 1/2, -1/2\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{3}} |x, \uparrow\rangle - i |y, \uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |z, \downarrow\rangle && ;E_{v0} + \frac{2\Delta}{3} \\
|\Gamma_6, 1/2, 1/2\rangle &= |s, \uparrow\rangle && ;E_{c0} \\
|\Gamma_6, 1/2, -1/2\rangle &= |s, \downarrow\rangle && ;E_{c0}
\end{aligned} \tag{A.6}$$

où $\Delta = -3i \frac{\hbar}{4m^2c^2} \langle x | (\nabla V \wedge \vec{p})_y | z \rangle$ est le terme de séparation spin-orbite.

A.3.2 Modèle de Kane

Le Hamiltonien de Kane complet selon la base (A.6) s'écrit (A.7). Dans ce cas particulier, on considère que suivant la direction \vec{z} de la croissance des couches semi-conducteurs, les paramètres des bandes peuvent évoluer (cela permet de prendre en compte la transition des structures qui s'empilent suivant l'axe de croissance). Cet Hamiltonien est décrit suivant les notations des paramètres trouvés dans Winkler [2003].

$$H_{\text{Kane}} = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc} |\Gamma_6, 1/2, 1/2\rangle & |\Gamma_6, 1/2, -1/2\rangle & |\Gamma_8, 3/2, 3/2\rangle & |\Gamma_8, 3/2, 1/2\rangle \\ T & 0 & -\sqrt{\frac{1}{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z \\ 0 & T & 0 & -\sqrt{\frac{1}{6}}Pk_+ \\ -\sqrt{\frac{1}{2}}k_-P & 0 & U+V & -\bar{S}_- \\ \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & -\sqrt{\frac{1}{6}}k_-P & -\bar{S}_-^\dagger & U-V \\ \sqrt{\frac{1}{6}}k_+P & \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & R^\dagger & C^\dagger \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}k_+P & 0 & R^\dagger \\ -\sqrt{\frac{1}{3}}k_zP & -\sqrt{\frac{1}{3}}k_-P & \sqrt{\frac{1}{2}}\bar{S}_-^\dagger & \sqrt{2}V \\ -\sqrt{\frac{1}{3}}k_+P & -\sqrt{\frac{1}{3}}k_z - P & -\sqrt{2}R^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_-^\dagger \end{array} \right. \\ \left. \begin{array}{cccc} |\Gamma_8, 3/2, -1/2\rangle & |\Gamma_8, 3/2, -3/2\rangle & |\Gamma_7, 1/2, 1/2\rangle & |\Gamma_7, 1/2, -1/2\rangle \\ \sqrt{\frac{1}{6}}Pk_- & 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_z & -\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_- \\ \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \sqrt{\frac{1}{2}}Pk_- & -\sqrt{\frac{1}{3}}Pk_+ & \sqrt{\frac{1}{3}}Pk_z \\ R & 0 & \sqrt{\frac{1}{2}}\bar{S}_- & -\sqrt{2}R \\ C & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_- \\ U-V & \bar{S}_+^\dagger & -\sqrt{\frac{2}{3}}\tilde{S}_+ & -\sqrt{2}V \\ \bar{S}_+ & U+V & \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{\frac{1}{2}}\bar{S}_+ \\ -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_+^\dagger & \sqrt{2}R & U-\Delta & C \\ -\sqrt{2}V & \sqrt{\frac{1}{2}}\bar{S}_+^\dagger & C^\dagger & U-\Delta \end{array} \right] \end{array} \quad (\text{A.7})$$

où

$$k_{\parallel} = k_x^2 + k_y^2$$

$$k_{\pm} = k_x \pm ik_y$$

et

$$\begin{aligned}T &= E_c(z) + \frac{\hbar^2}{2m_0} ((2F + 1)k_{\parallel}^2 + k_z(2F + 1)k_z) \\U &= E_v(z) - \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 k_{\parallel}^2 + k_z \gamma_1 k_z) \\V &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_2 k_{\parallel}^2 - 2k_z \gamma_2 k_z) \\R &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} (\mu k_+^2 - \bar{\gamma} k_-^2) \\\bar{S}_{\pm} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} k_{\pm} (\{\gamma_3, k_z\} + [\kappa, k_z]) \\\tilde{S}_{\pm} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} k_{\pm} \left(\{\gamma_3, k_z\} - \frac{1}{3} [\kappa, k_z] \right) \\C &= \frac{\hbar^2}{m_0} k_- [\kappa, k_z].\end{aligned}$$

$E_c(z), E_v(z)$ correspond respectivement à l'énergie de conduction et de valence. Les termes $F, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \mu, \kappa$ sont les termes de masse effective dûs aux couplages par rapport aux autres bandes de plus grandes énergies.

Annexe B

Canne de rotation et porte échantillon Kyocera-LCC32

B.1 Canne de rotation

La canne de rotation est composé de cuivre non magnétique. L'étage inférieur mesure une dizaine de centimètre, muni d'un système de translation linéaire couplé à un bras permettant la rotation du support du porte échantillon Kyocera LCC32. L'étage supérieur contient une roue elliptique couplée à un ressort de rappel. La rotation de la roue appuie sur la tige de translation communiquant son mouvement dans la partie inférieure. Elle se décrit comme suit sur les figures B.1 et B.2 :

- a Bras levier permettant la rotation.
- b Support du porte-échantillon LCC32-IC.
- c Câbles torsadés par paire soudé sous le socle du support du Kyocera LCC32.
- d Position des thermomètres.
- e Tige de rotation communiquée par la roue elliptique du haut de la canne.
- f Roue de rotation permettant un rotation de l'échantillon de 0° à 90° à l'ambiante.
- g Tulipe de prises Jaeger venant des câble d'amenés de courant et tension du bas de la canne.
- h Boitier BNC.
- i Câbles d'amenés de courant, tension torsadés dans une gaine thermorétractable.

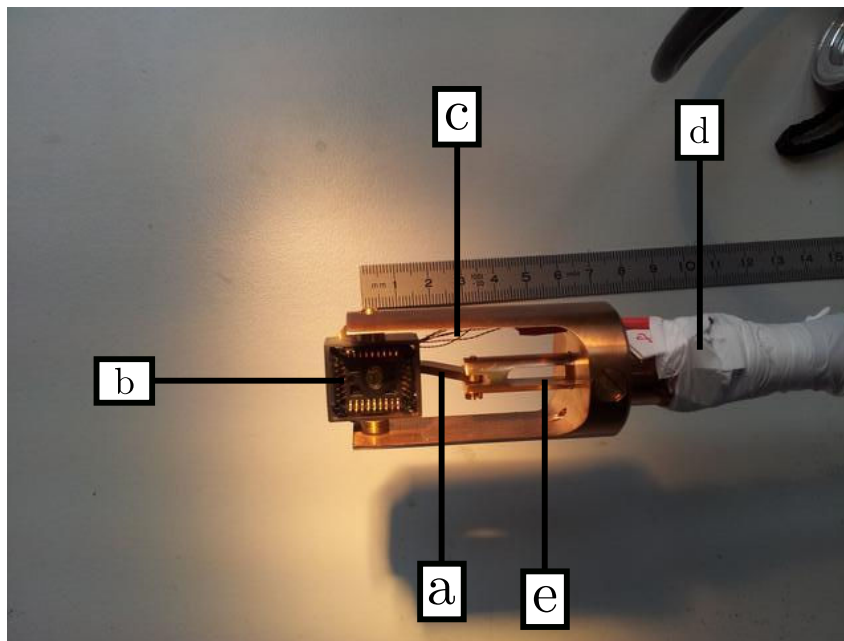


FIGURE B.1 – Photographie du bas de la canne de rotation mécanique. Les lettres sont référencées dans le texte.

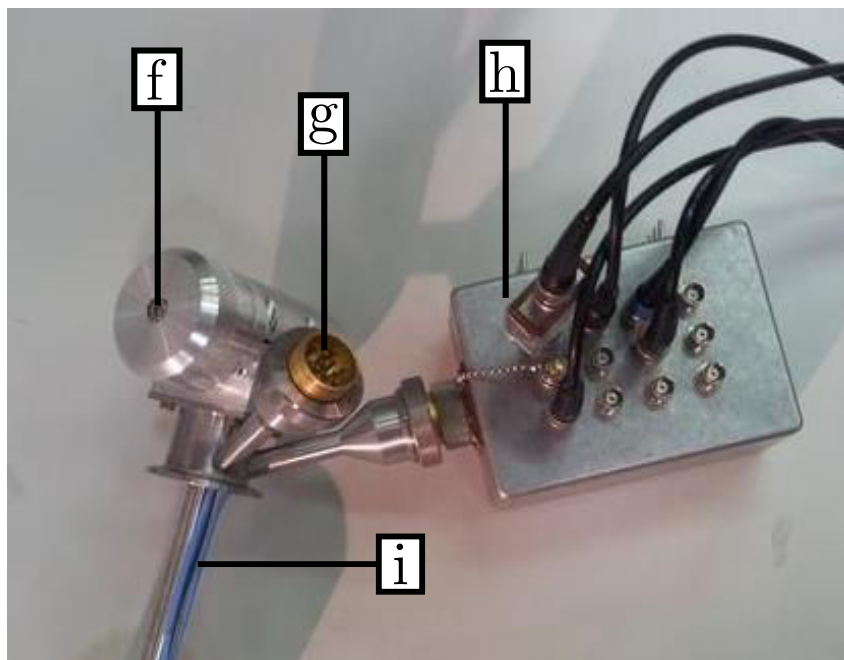


FIGURE B.2 – Photographie de la partie supérieure du module de rotation. Les lettres sont référencées dans le texte.

B.2 Porte échantillon Kyocera

Le porte échantillon Kyocera a un corps en céramique recouvert d'or sur du nickel pour les pistes de contacts. Sur la figure B.3, les numéros suivent l'ordre dans le sens inverse des aiguilles d'une montre en partant de 2. Les numéros 1, 12, 17, 26 dans le dos du Kyocera (la grande piste sert de référence à 1) ne sont pas contactés. Les numéros notés *B* sont contactés sur la base centrale sur laquelle est collé l'échantillon avec du vernis *General electric*. La zone centrale fait $7\text{ mm} \times 10\text{ mm}$.

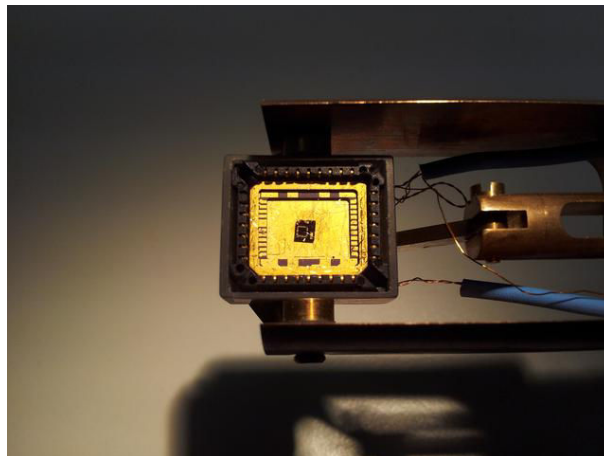
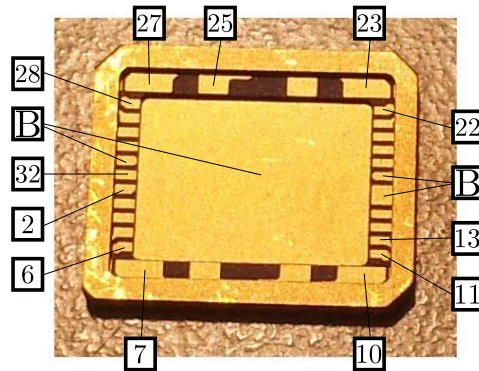


FIGURE B.3 – Porte échantillon Kyocera LCC32 et support Kyocera sur porte échantillon. La photo inférieure illustre la position d'un échantillon de test en barre de Hall type AsGa collé, microsoudé, et inséré dans le support du porte échantillon.

Annexe C

Effet géométrique de la grille

Pour déterminer l'effet capacitif de la grille sur la structure HgTe, il est nécessaire de connaître la permittivité relative des isolants se situant entre la partie métallique de la grille et la pile HgTe.

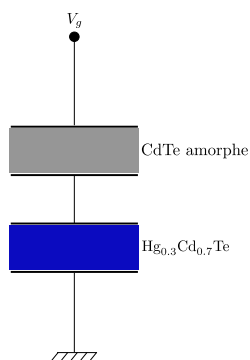


FIGURE C.1 – Schéma du modèle capacitif de la grille composée de 30 nm de HgCdTe et de 100 nm de CdTe amorphe.

La partie isolante se compose de CdTe amorphe de 100 nm et d'une structure cristalline $\text{Hg}_{0.3}\text{Cd}_{0.7}\text{Te}$ de 30 nm. Les capacités de ces deux isolants sont en série ce qui revient à écrire la capacité totale C en fonction des capacités surfaciques de HgCdTe (C_{HgCdTe}) et de CdTe (C_{CdTe}) :

$$C = \frac{C_{\text{HgCdTe}} \cdot C_{\text{CdTe}}}{C_{\text{HgCdTe}} + C_{\text{CdTe}}}$$

La capacité surfacique s'écrit comme $C = \epsilon/d = \epsilon_0\epsilon_r/d$ avec ϵ la permittivité diélectrique de l'isolant et d l'épaisseur de l'isolant.

La permittivité relative des structures à base de $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ suit une loi pour des températures entre 300 K et 77 K de la forme :

$$\epsilon_r(x) = 20.5 - 15.6x + 5.7x^2$$

| | | | | | | | |
|--------------|------|------|-------|------|------|------|------|
| x | 0 | 0.2 | 0.3 | 0.4 | 0.6 | 0.8 | 1 |
| ϵ_r | 20.5 | 17.8 | 16.33 | 15.3 | 13.2 | 11.5 | 10.5 |

Tableau C.1 – Permittivité diélectrique de $Hg_{1-x}Cd_xTe$ en fonction de certain fraction de Hg pour des température à partir de 77 K.

La capacité surfacique géométrique du couple $Hg_{0.3}Cd_{0.7}Te$, CdTe amorphe correspond à $C = 9,39 \cdot 10^{-4} \text{ F} \cdot \text{m}^{-2}$. Le facteur de déplétion géométrique α des charges de la grille ($n = \alpha V_g$) est donc égale à $\alpha = C/e = 4,9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{V}^{-1}$.

Bibliographie

- Dmitry A. ABANIN, Kostya S. NOVOSELOV, Uli ZEITLER, Patrick A. LEE, A. K. GEIM et L. S. LEVITOV : Dissipative quantum hall effect in graphene near the dirac point. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **98**, p. 196806, (May 2007), DOI : 10.1103/PhysRevLett.98.196806.
- Eric AKKERMANS et Gille MONTAMBAUX : *Physique mésoscopique des électrons et des photons*. EDP Sciences/CNRS Editions, (2004).
- J. G. ANALYTIS, J.H CHU, Y. CHEN, F. CORREDOR, R.D. McDONALD, Z. X. SHEN et I.R. FISHER : Bulk fermi surface coexistence with dirac surface state in Bi_2Se_3 : A comparison of photoemission and shubnikov de haas measurements. *Phys. Rev. B*, vol. **81**, p. 205407, (May 2010), DOI : 10.1103/PhysRevB.81.205407.
- Jose ARIAS, M. ZANDIAN, J. G. PASKO, S. H. SHIN, L. O. BUBULAC, R. E. DEWAMES et W. E. TENNANT : Molecular-beam epitaxy growth and in situ arsenic doping of p-on-n HgCdTe heterojunctions. *Journal of Applied Physics*, vol. **69**, p. 2143, (1991), DOI : 10.1063/1.348741.
- N. ASHCROFT et N. MERMIN : *Solid State Physic*. Thomson Learning Inc, (1976).
- Lihong BAO, Liang HE, Nicholas MEYER, Xufeng KOU, Peng ZHANG, Zhi gang CHENAND ALEXEI V. FEDOROV, Jin ZOU, Trevor M. RIEDEMANN, Thomas A. LOGRASSO, Kang L. WANG et Gary Tuttle adn FAXIAN XIU : Weak anti-localization and quantum oscillations of surface states in topological insulator $\text{Bi}_2\text{Se}_2\text{Te}$. *Scientific Reports*, vol. **2**, p. 726, (2012), DOI : 0.1038/srep00726.
- Günther BAUER et Wolfgang RICHTER : *Optical characterization of epitaxial semiconductor layers*. (1996).
- B. Andrei BERNEVIG, Taylor L. HUGHES et Shou-Cheng ZHANG : Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, vol. **314**, pp. 1757–1761, (2006), DOI : 10.1126/science.1133734.
- C. BRÜNE, C. X. LIU, E. G. NOVIK, E. M. HANKIEWICZ, H. BUHMANN, Y. L. CHEN, X. L. QI, Z. X. SHEN, S. C. ZHANG et L. W. MOLENKAMP : Quantum hall effect from the topological surface states of strained bulk HgTe. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **106**, p. 126803, (Mar 2011), DOI : 10.1103/PhysRevLett.106.126803.
- C. BRÜNE, C. X. LIU, E. G. NOVIK, E. M. HANKIEWICZ, H. BUHMANN, Y. L. CHEN, X. L. QI, Z. X. SHEN, S. C. ZHANG et L. W. MOLENKAMP : Quantum hall effect

- from the topological surface states of strained bulk HgTe. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **106**, p. 126803, (Mar 2011), DOI : 10.1103/PhysRevLett.106.126803.
- B. BÜTTNER, C. X. LIU, G. TKACHOV, E. G. NOVIK, C. BRÜNE, H. BUHMANN, E. M. HANKIEWICZ, P. RECHER, B. TRAUZETTEL, S. C. ZHANG et L. W. MOLENKAMP : Single valley dirac fermions in zero-gap hgte quantum wells. *Nature Physics*, vol. **7**, pp. 418–422, (2011), DOI : 10.1038/nphys1914.
- Peter CAPPER : *Properties of Narrow gap cadmium-based compounds*. (1994).
- J. G. CHECKELSKY, Y. S. HOR, R. J. CAVA et N. P. ONG : Bulk band gap and surface state conduction observed in voltage-tuned crystals of the topological insulator Bi₂Se₃. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **106**, p. 196801, (May 2011), DOI : 10.1103/PhysRevLett.106.196801.
- J. CHEN, X. Y. HE, K. H. WU, Z. Q. JI, L. LU, J. R. SHI, J. H. SMET et Y. Q. LI : Tunable surface conductivity in Bi₂Se₃ revealed in diffusive electron transport. *Phys. Rev. B*, vol. **83**, p. 241304, (Jun 2011), DOI : 10.1103/PhysRevB.83.241304.
- J. CHEN, H. J. QIN, F. YANG, J. LIU, T. GUAN, F. M. QU, G. H. ZHANG, J. R. SHI, X. C. XIE, C. L. YANG, K. H. WU, Y. Q. LI et L. LU : Gate-voltage control of chemical potential and weak antilocalization in Bi₂Se₃. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **105**, p. 176602, (Oct 2010), DOI : 10.1103/PhysRevLett.105.176602.
- Y. L. CHEN, J. G. ANALYTIS, J.-H. CHU, Z. K. LIU, S.-K. MO, X. L. QI, H. J. ZHANG, D. H. LU, X. DAI, Z. FANG, S. C. ZHANG, I. R. FISHER, Z. HUSSAIN et Z.-X. SHEN : Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi₂Te₃. *Science*, vol. **325**, pp. 178–181, (2009), DOI : 10.1126/science.1173034.
- Peng CHENG, Canli SONG, Tong ZHANG, Yanyi ZHANG, Yilin WANG, Jin-Feng JIA, Jing WANG, Yayu WANG, Bang-Fen ZHU, Xi CHEN, Xucun MA, Ke HE, Lili WANG, Xi DAI, Zhong FANG, Xincheng XIE, Xiao-Liang QI, Chao-Xing LIU, Shou-Cheng ZHANG et Qi-Kun XUE : Landau quantization of topological surface states in Bi₂Se₃. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **105**, p. 076801, (Aug 2010), DOI : 10.1103/PhysRevLett.105.076801.
- O. CRAUSTE, Y. OHTSUBO, P. BALLE, P.-A. DELPLACE, D. CARPENTIER, C. BOUVIER, T. MEUNIER, A. TALEB et L.P. LEVY : Observation of topological surface states of strained HgTe and their circular dichroism. ().
- Andrea DAMASCELLI : Probing the electronic structure of complex systems by arpes. *Physica Scripta*, vol. **2004**, n°T109, p. 61, (2004).
- G. DRESSELHAUS, A. F. KIP et C. KITTEL : Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals. *Phys. Rev.*, vol. **98**, pp. 368–384, (Apr 1955), DOI : 10.1103/PhysRev.98.368.
- A. EINSTEIN : Folgerungen aus den capillaritätserscheinungen. *Annalen der Physik*, vol. **309** (**3**), p. 513–523, (1901), DOI : doi :10.1002/andp.19013090306.
- Datasheet DLPCA-200*. femto, ().

-
- Liang FU et C. L. KANE : Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, vol. **76**, p. 045302, (Jul 2007a), DOI : 10.1103/PhysRevB.76.045302.
- Liang FU et C. L. KANE : Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, vol. **76**, p. 045302, (Jul 2007b), DOI : 10.1103/PhysRevB.76.045302.
- Liang FU et C. L. KANE : Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, vol. **76**, p. 045302, (Jul 2007c), DOI : 10.1103/PhysRevB.76.045302.
- Liang FU, C. L. KANE et E. J. MELE : Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **98**, p. 106803, (Mar 2007), DOI : 10.1103/PhysRevLett.98.106803.
- Steven GROVES et William PAUL : Band structure of gray tin. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **11**, pp. 194–196, (Sep 1963), DOI : 10.1103/PhysRevLett.11.194.
- M. Z. HASAN et C. L. KANE : *Colloquium* : Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, vol. **82**, pp. 3045–3067, (Nov 2010), DOI : 10.1103/RevModPhys.82.3045.
- Frank HERMAN, Charles D. KUGLIN, Kermit F. CUFF et Richard L. KORTUM : Relativistic corrections to the band structure of tetrahedrally bonded semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **11**, pp. 541–545, (Dec 1963), DOI : 10.1103/PhysRevLett.11.541.
- Sylvain HERMELIN, Shintaro TAKADA, Michihisa YAMAMOTO, Seigo TARUCHA, Andreas D. WIECK, Laurent SAMINADAYAR, Christopher BÄUERLE et Tristan MEUNIER : Electrons surfing on a sound wave as a platform for quantum optics with flying electrons. *Nature*, vol. **477**, pp. 435–438, (2011), DOI : 10.1038/nature10416.
- H. HERTZ : Ueber einen einfluss des ultravioletten lichtes auf die electriche entladung. *Annalen der Physik*, vol. **267 (8)**, p. 983–1000, (1887), DOI : doi :10.1002/andp.18872670827.
- Shinobu HIKAMI, Anatoly I. LARKIN et Yosuke NAGAOKA : Spin-orbit interaction and magnetoresistance in the two dimensional random system. *Progresses of theoretical physics*, vol. **63**, pp. 707–710, (1980), DOI : 10.1143/PTP.63.707.
- J HINZ, H BUHMANN, M SCHÄFER, V HOCK, C R BECKER et L W MOLENKAMP : Gate control of the giant rashba effect in HgTe quantum wells. *Semicond. Sci. Technol.*, vol. **21**, p. 501, (2006), DOI : 10.1088/0268-1242/21/4/015.
- D. HSIEH, D. QIAN, L. WRAY, Y. XIA, Y. S. HOR, R. J. CAVA et M. Z. HASAN : A topological dirac insulator in a quantum spin hall phase. *Nature*, vol. **452**, pp. 970–974, (2008a).
- D. HSIEH, D. QIAN, L. WRAY, Y. XIA, Y. S. HOR, R. J. CAVA et M. Z. HASAN : A topological dirac insulator in a quantum spin hall phase. *Nature*, vol. **452**, pp. 970–974, (2008b), DOI : 10.1038/nature06843.
- D. HSIEH, Y. XIA, D. QIAN, L. WRAY, J. H. DIL, F. MEIER, J. OSTERWALDER, L. PATTHEY, J. G. CHECKELSKY, N. P. ONG, A. V. FEDOROV, H. LIN, A. BAN-SIL, D. GRAUER, Y. S. HOR, R. J. CAVA et M. Z. HASAN : A tunable topological
-

- insulator in the spin helical dirac transport regime. *Nature*, vol. **460**, pp. 1101–1105, (2009a), DOI : 10.1038/nature08234.
- D. HSIEH, Y. XIA, D. QIAN, L. WRAY, F. MEIER, J. H. DIL, J. OSTERWALDER, L. PATTHEY, A. V. FEDOROV, H. LIN, A. BANSIL, D. GRAUER, Y. S. HOR, R. J. CAVA et M. Z. HASAN : Observation of time-reversal-protected single-dirac-cone topological-insulator states in Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 . *Phys. Rev. Lett.*, vol. **103**, p. 146401, (Sep 2009b), DOI : 10.1103/PhysRevLett.103.146401.
- D. HSIEH, Y. XIA, L. WRAY, D. QIAN, A. PAL, J. H. DIL, J. OSTERWALDER, F. MEIER, G. BIHLMAYER, C. L. KANE, Y. S. HOR, R. J. CAVA et M. Z. HASAN : Observation of unconventional quantum spin textures in topological insulators. *Science*, vol. **323**, pp. 919–922, (2009c), DOI : 10.1126/science.1167733.
- R. JACKIW : Fractional charge and zero modes for planar systems in a magnetic field. *Phys. Rev. D*, vol. **29**, pp. 2375–2377, (May 1984), DOI : 10.1103/PhysRevD.29.2375.
- C. L. KANE et E. J. MELE : Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **95**, p. 226801, (Nov 2005), DOI : 10.1103/PhysRevLett.95.226801.
- E.O. KANE : Energy band structure in p-type germanium and silicon. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. **1**, n°1-2, pp. 82–99, (September-october 1956).
- Evan O. KANE : Band structure of indium antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. **1**, n°4, pp. 249–261, (January 1957).
- Yong Seung KIM, Matthew BRAHLEK, Namrata BANSAL, Eliav EDREY, Gary A. KAPILEVICH, Keiko IIDA, Makoto TANIMURA, Yoichi HORIBE, Sang-Wook CHEONG et Seongshik OH : Thickness-dependent bulk properties and weak antilocalization effect in topological insulator Bi_2Se_3 . *Phys. Rev. B*, vol. **84**, p. 073109, (Aug 2011), DOI : 10.1103/PhysRevB.84.073109.
- W. H. KLEINER et L. M. ROTH : Deformation potential in germanium from optical absorption lines for exciton formation. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **2**, pp. 334–336, (Apr 1959), DOI : 10.1103/PhysRevLett.2.334.
- K. v. KLITZING, G. DORDA et M. PEPPER : New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **45**, pp. 494–497, (Aug 1980), DOI : 10.1103/PhysRevLett.45.494.
- Mahito KOHMOTO : Topological invariant and the quantization of the hall conductance. *Annals of Physics*, vol. **160**, pp. 343–354, (1985).
- Desheng KONG, Yulin CHEN, Judy J. CHA, Qianfan ZHANG, James G. ANALYTIS, Keji LAI, Zhongkai LIU, Seung Sae HONG, Kristie J. KOSKI, Sung-Kwan MO, Zahid HUSSAIN, Ian R. FISHER, Zhi-Xun SHEN et Yi CUI : Ambipolar field effect in the ternary topological insulator $(\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x})_2\text{Te}_3$ by composition tuning. *Nature Nanotechnology*, vol. **6**, p. 705, (2011a), DOI : 10.1038/nnano.2011.172.

-
- Desheng KONG, Yulin CHEN, Judy J. CHA, Qianfan ZHANG, James G. ANALYTIS, Keji LAI, Zhongkai LIU, Seung Sae HONG, Kristie J. KOSKI, Sung-Kwan MO, Zahid HUSSAIN, Ian R. FISHER, Zhi-Xun SHEN et Yi CUI : Ambipolar field effect in the ternary topological insulator $(\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x})_2\text{Te}_3$ by composition tuning. *Nature Nanotechnology*, vol. **6**, p. 705–709, (2011b), DOI : doi :10.1038/nnano.2011.172.
- Z. D. KVON, E.B. OLSHANETSKY, D.A. KOZLOV, E. NOVIK, N.N. MIKHAILOV et S.A. DVORETSKY : Two-dimensional semimetal in HgTe-based quantum wells. *Low Temperature Physics*, vol. **37 (3)**, p. 202, (2011), DOI : 10.1063/1.3573648.
- Markus KÖNIG, Steffen WIEDMANN, Christoph BRÜNE, Andreas ROTH, Hartmut BUHMANN, Laurens W. MOLENKAMP, Xiao-Liang QI et Shou-Cheng ZHANG : Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, vol. **318**, pp. 766–770, (2007), DOI : 10.1126/science.1148047.
- Murong LANG, Liang HE, Xufeng KOU, Pramey UPADHYAYA, Yabin FAN, Hao CHU, Ying JIANG, Jens H. BARDARSON, Wanjun JIANG, Eun Sang CHOI, Yong WANG, Nai-Chang YEH, Joel MOORE et Kang L. WANG : Competing weak localization and weak antilocalization in ultrathin topological insulators. *Nano Letters*, vol. **13 (1)**, pp. 48–53, (2013), DOI : 10.1021/nl303424n.
- Robert B. LAUGHLIN, Horst L. STÖRMER et Daniel C. TSUI : Press release : The 1998 nobel prize in physics, (October 1998). URL http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1998/press.html.
- Minhao LIU, Jinsong ZHANG, Cui-Zu CHANG, Zuocheng ZHANG, Xiao FENG, Kang LI, Ke HE, Li-li WANG, Xi CHEN, Xi DAI, Zhong FANG, Qi-Kun XUE, Xucun MA et Yayu WANG : Crossover between weak antilocalization and weak localization in a magnetically doped topological insulator. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **108**, p. 036805, (Jan 2012), DOI : 10.1103/PhysRevLett.108.036805.
- Hai-Zhou LU et Shun-Qing SHEN : Weak localization of bulk channels in topological insulator thin films. *Phys. Rev. B*, vol. **84**, p. 125138, (Sep 2011), DOI : 10.1103/PhysRevB.84.125138.
- Hai-Zhou LU, Junren SHI et Shun-Qing SHEN : Competition between weak localization and antilocalization in topological surface states. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **107**, p. 076801, (Aug 2011), DOI : 10.1103/PhysRevLett.107.076801.
- E. MCCANN, K. KECHEDZHI, Vladimir I. FAL'KO, H. SUZUURA, T. ANDO et B. L. ALTSHULER : Weak-localization magnetoresistance and valley symmetry in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **97**, p. 146805, (Oct 2006), DOI : 10.1103/PhysRevLett.97.146805.
- J. H. Van Der MERWE : Crystal interfaces. part i. semi-infinite crystals. *Journal of Applied Physics*, vol. **34**, p. 117, (1963).
- G. P. MIKITIK et Yu. V. SHARLAI : Manifestation of berry's phase in metal physics. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **82**, pp. 2147–2150, (Mar 1999), DOI : 10.1103/PhysRevLett.82.2147.
-

G. M. MINKOV, A. V. GERMANENKO, O. E. RUT, A. A. SHERSTOBITOV, S. A. DVO-RETSKI et N. N. MIKHAILOV : Weak antilocalization in hgte quantum wells with inverted energy spectra. *Phys. Rev. B*, vol. **85**, p. 235312, (Jun 2012), DOI : 10.1103/PhysRevB.85.235312.

J. E. MOORE et L. BALENTS : Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, vol. **75**, p. 121306, (Mar 2007), DOI : 10.1103/PhysRevB.75.121306.

Model LI-75A Low noise preamplifier Instruction Manual. NF electronic instruments, ().

A. J. NOREIKA, R. F. C. FARROW, F. A. SHIRLAND, W. J. TAKEI, J. GREGGI, S. WOOD et W. J. CHOYKE : Characterization of molecular beam epitaxially grown HgCdTe on CdTe and InSb buffer layers. *Journal of Vacuum Science and Technology A*, vol. **4**, p. 2081, (1986), DOI : 10.1116/1.574031.

E. G. NOVIK, A. PFEUFFER-JESCHKE, T. JUNGWIRTH, V. LATUSSEK, C. R. BECKER, G. LANDWEHR, H. BUHMANN et L. W. MOLENKAMP : Band structure of semimagnetic $\text{Hg}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$ quantum wells. *Phys. Rev. B*, vol. **72**, p. 035321, (Jul 2005), DOI : 10.1103/PhysRevB.72.035321.

K. S. NOVOSELOV, E. MCCANN, S. V. MOROZOV, V. I. FAL'KO, M. I. KATSNELSON, U. ZEITLER, D. JIANG, F. SCHEDIN et A. K. GEIM : Unconventional quantum hall effect and berry's phase of 2π in bilayer graphene. *Nature physics*, vol. **2**, pp. 177–180, (2006), DOI : 10.1038/nphys245.

K.S. NOVOSELOV, Geim A.K., S.V. MOROZOV, D. JIANG, M.I. KATSNELSON, I.V. GRIGORIEVA, S.V. DUBONOS et A.A. FIRSOV : Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, vol. **438**, pp. 197–200, (2005), DOI : 10.1038/nature04233.

K.S. NOVOSELOV, A.K. GEIM, S.V. MOROZOV, D. JIANG, Y. ZHANG, S.V. DUBONOS, I.V. GRIGORIEVA et A.A. A. A. FIRSOV : Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, vol. **306**, pp. 666–669, (2004), DOI : 10.1126/science.1102896.

G.E. PIKUS et G. L. BIR : *Soviet Physics Solid State*, vol. **1**, p. 1502, (1960).

Zhi REN, A. A. TASKIN, Satoshi SASAKI, Kouji SEGAWA et Yoichi ANDO : Large bulk resistivity and surface quantum oscillations in the topological insulator $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$. *Phys. Rev. B*, vol. **82**, p. 241306, (Dec 2010), DOI : 10.1103/PhysRevB.82.241306.

Zhi REN, A. A. TASKIN, Satoshi SASAKI, Kouji SEGAWA et Yoichi ANDO : Observations of two-dimensional quantum oscillations and ambipolar transport in the topological insulator Bi_2Se_3 achieved by Cd doping. *Phys. Rev. B*, vol. **84**, p. 075316, (Aug 2011), DOI : 10.1103/PhysRevB.84.075316.

Research Instruments Oxford Superconducting Magnet System Operator's Handbook. RI Oxford, ().

Eric N. Smith ROBERT C. RICHARDSON : *Experimental Techniques in Condensed Matter Physics at Low Temperatures*. Fontiers in Physics, (1988).

-
- B. J. ROMAN et A. W. EWALD : Stress-induced band gap and related phenomena in gray tin. *Phys. Rev. B*, vol. **5**, pp. 3914–3932, (May 1972), DOI : 10.1103/PhysRevB.5.3914.
- Rahul ROY : Topological phases and the quantum spin hall effect in three dimensions. *Phys. Rev. B*, vol. **79**, p. 195322, (May 2009), DOI : 10.1103/PhysRevB.79.195322.
- B SACÉPÉ, J.B OOSTINGA, J LI, A. UBALDINI, N. J. G. COUTO, E. GIANNINI et A.F. MORPURGO : Gate-tuned normal and superconducting transport at the surface of a topological insulator. *Nature Communications*, vol. **2**, p. 575, (December 2011), DOI : 10.1038/ncomms1586.
- Model 7265 DSP Lock-in Amplifier Manual*. Signal Recovery, ().
- S. SIVANANTHAN, X. CHU, J. RENO et J. P. FAURIE : Relation between crystallographic orientation and the condensation coefficients of Hg, Cd, and Te during molecular-beam-epitaxial growth of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ and CdTe. *Journal of Applied Physics*, vol. **60**, p. 1359, (1986), DOI : 10.1063/1.337310.
- R. SPORKEN, M. D. LANGE, S. SIVANANTHAN et J. P. FAURIE : Molecular beam epitaxy and characterization of $\text{HgCdTe}(111)\text{b}$ on $\text{Si}(100)$. *Applied Physics Letters*, vol. **59**, p. 81, (1991), DOI : dx.doi.org/10.1063/1.105530.
- Model SR830 DSP Lock-in Amplifier*. SRS Stanford Research System, ().
- A. A. TASKIN et Yoichi ANDO : Berry phase of nonideal dirac fermions in topological insulators. *Phys. Rev. B*, vol. **84**, p. 035301, (Jul 2011), DOI : 10.1103/PhysRevB.84.035301.
- A. A. TASKIN, Kouji SEGAWA et Yoichi ANDO : Oscillatory angular dependence of the magnetoresistance in a topological insulator $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$. *Phys. Rev. B*, vol. **82**, p. 121302, (Sep 2010), DOI : 10.1103/PhysRevB.82.121302.
- D. J. THOULESS, M. KOHMOTO, M. P. NIGHTINGALE et M. den NIJS : Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **49**, pp. 405–408, (Aug 1982), DOI : 10.1103/PhysRevLett.49.405.
- F. V. TIKHONENKO, A. A. KOZIKOV, A. K. SAVCHENKO et R. V. GORBACHEV : Transition between electron localization and antilocalization in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **103**, p. 226801, (Nov 2009), DOI : 10.1103/PhysRevLett.103.226801.
- Jan H. van der MERWE et W. A. JESSER : The prediction and confirmation of critical epitaxial parameters. *Journal of Applied Physics*, vol. **64**, p. 4968, (1988).
- R. WINKLER : *Spin-orbit coupling effects in two dimensional electron and hole system*. (2003).
- Xiaosong WU, Xuebin LI, Zhimin SONG, Claire BERGER et Walt A. de HEER : Weak antilocalization in epitaxial graphene : Evidence for chiral electrons. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **98**, p. 136801, (Mar 2007), DOI : 10.1103/PhysRevLett.98.136801.
-

- Y. XIA, D. QIAN, D. HSIEH, L. WRAY, A. PAL, H. LIN, A. BANSIL, D. GRAUER, Y. S. HOR, R. J. CAVA et M. Z. HASAN : Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface. *Nature Physics*, vol. **5**, p. 398, (2009), DOI : 10.1038/nphys1274.
- Liyuan ZHANG, Yan ZHANG, M. KHODAS, T. VALLA et I. A. ZALIZNYAK : Metal to insulator transition on the $n = 0$ landau level in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, vol. **105**, p. 046804, (Jul 2010a), DOI : 10.1103/PhysRevLett.105.046804.
- Yi ZHANG, Ke HE, Cui-Zu CHANG, Can-Li SONG, Li-Li WANG, Xi CHEN, Jin-Feng JIA, Zhong FANG, Xi DAI, Wen-Yu SHAN, Shun-Qing SHEN, Qian NIU, Xiao-Liang QI, Shou-Cheng ZHANG, Xu-Cun MA et Qi-Kun XUE : Crossover of the three-dimensional topological insulator Bi_2Se_3 to the two-dimensional limit. *Nature Physics*, vol. **6**, p. 584–588, (2010b), DOI : 10.1038/nphys1689.
- Yuanbo ZHANG, Yan-Wen TAN, Horst L. STORMER et Philip KIM : Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene. *Nature*, vol. **438**, pp. 201–204, (2005), DOI : 10.1038/nature04235.

RÉSUMÉ

MOT-CLEFS : Isolant Topologique, structure HgTe-CdTe, magnéto-transport, effet hall quantique entier, oscillation Subhnikov-de Haas, niveau de Landau, cône de Dirac

KEYWORDS : Topological-Insulator, HgTe-CdTe structure, magnetotransport, interger quantum Hall effect, Subhnikov-de Haas oscillation, Landau Level, Dirac cone