



HAL
open science

Nouveaux états topologiques issus d'un couplage spin-orbite inhomogène

Jean-Baptiste Touchais

► **To cite this version:**

Jean-Baptiste Touchais. Nouveaux états topologiques issus d'un couplage spin-orbite inhomogène. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paris-Saclay, 2022. Français. NNT : 2022UPASP162 . tel-03989268

HAL Id: tel-03989268

<https://theses.hal.science/tel-03989268v1>

Submitted on 14 Feb 2023

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.

Nouveaux états topologiques issus d'un
couplage spin-orbite inhomogène
*New topological states fom inhomogeneous spin-orbit
coupling*

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n° 564 : physique en Île-de-France (PIF)
Spécialité de doctorat : Physique
Graduate School : Physique, Référent : Faculté des sciences d'Orsay

Thèse préparée dans l'unité de recherche **Laboratoire de Physique des Solides** (Université Paris-Saclay, CNRS),
sous la direction de **Pascal SIMON**, Professeur des universités
et le co-encadrement de **Andrej MESAROS**, Chargé de recherche

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 14 décembre 2022, par

Jean-Baptiste TOUCHAIS

Composition du jury

Membres du jury avec voix délibérative

Hélène Bouchiat Directrice de recherche, CNRS, Université Paris-Saclay	Présidente
Jérôme Cayssol Professeur des universités, Université de Bordeaux	Rapporteur & Examineur
Pierre Delplace Chargé de recherche, ENS Lyon	Rapporteur & Examineur
Revaz Ramazashvili Chargé de recherche, CNRS, Université Toulouse III	Examineur

Titre : Nouveaux états topologiques issus d'un couplage spin-orbite inhomogène

Mots clés : Matière condensée, Graphène, Topologie, Spin-orbite, Parois de domaine, Désordre

Résumé : Alors que les techniques de synthèse de matériaux à couches atomiques s'améliorent, nous nous intéressons particulièrement à ceux basés sur le graphène. L'un des objectifs est de parvenir à induire un couplage spin-orbite conséquent dans des matériaux tels que le graphène, qui en est nativement dépourvu, afin d'exploiter les propriétés de l'effet de Hall quantique de spin. Même si l'induction d'un couplage spin-orbite dans le graphène au sein d'une hétérostructure lamellaire est désormais réalisable expérimentalement, les propriétés de ces nouveaux matériaux ne sont pas encore complètement déterminées. En particulier, l'existence de défauts cristallins dans le substrat pose la question de l'homogénéité du couplage spin-orbite induit. Cette thèse vise à mettre en lumière les effets fondamentaux de certaines inhomogénéités de spin-orbite dans le graphène. Pour ce faire, nous étudions deux types fondamentaux d'inhomogénéité : les parois de domaine et le désordre. L'existence de domaines dans le couplage spin-orbite nous incite à nous appuyer sur l'approche standard de la topologie des structures de bandes électroniques pour prédire de nouveaux types d'états électroniques robustes se propageant le long des parois de domaines. Cependant, nous montrons que l'approche standard ne s'applique pas complètement à notre

système, et plus encore, nous démontrons que bien que les électrons de basse énergie du graphène puissent être décrits par une équation de Dirac, les théorèmes d'indice habituels ne sont pas explicites. Nous étudions donc un théorème de flux spectral plus général définissant des nombres de Chern d'interface et étayant des modes propagatifs robustes. En ce qui concerne le désordre, nous nous concentrons sur le problème bien connu de l'équation de Dirac désordonnée unidimensionnelle, avec deux points de Dirac qui correspondent à deux vallées dans la structure de bande. Contrairement au modèle standard de désordre local non corrélé (dans le potentiel alterné ou les auts entre les sites) dans un système de Dirac à plusieurs canaux, les deux vallées sont ici positionnées à des moments différents et le caractère local du terme désordonné implique des corrélations entre les vallées. L'analyse révèle que dans la limite d'un bruit blanc de masse de Semenoff sur le réseau, les corrélations du bruit sont nécessaires pour expliquer le comportement du système dans cette limite. Enfin, nous mettons en évidence la résilience à la localisation due au désordre dans le couplage spin-orbite Kane-Mele en étudiant l'évolution des valeurs propres de transmission.

Title : New topological states from inhomogeneous spin-orbit coupling

Keywords : Condensed matter, Graphene, Topology, Spin-orbit, Domain-wall, Disorder

Abstract : As techniques for the synthesis of atomically layered materials are improving, we are particularly interested in those based on graphene. One of the objectives is to succeed in inducing a substantial spin-orbit coupling in materials such as graphene, which is natively devoid of it, in order to exploit the properties of the quantum spin-Hall effect. Even though the induction of spin-orbit coupling in graphene within a layered heterostructure is now experimentally feasible, the properties of such new materials are not yet fully determined. In particular, the existence of crystalline defects in the substrate leads to the question of the homogeneity of the induced spin-orbit coupling. This thesis aims at shedding light on the fundamental effects of certain spin-orbit inhomogeneities in graphene. To do so, we study two fundamental types of inhomogeneity : domain walls and disorder. The existence of domains in spin-orbit coupling motivates us to rely on the standard approach in electronic bandstructure topology to predict new types of robust electronic states propagating along domain walls. However, we show that the standard approach does not fully apply to our system, and even more, we

demonstrate that although the low energy electrons of graphene can be described by a Dirac equation, the usual index theorems are not practical. Hence we study a more general spectral flow theorem defining interface Chern numbers, and underpinning the robust propagating electron modes. As for disorder, we focus on the well-known one-dimensional disordered Dirac equation, with two Dirac points corresponding to two valleys in the bandstructure. In contrast to the standard model of uncorrelated local disorder (in on-site potentials or in inter-site hoppings) in multichannel Dirac systems, here the two valleys are positioned at different momenta and hence the local disorder has built-in intervalley correlations. The correlated disorder renders the standard analytical approaches impractical, hence we numerically diagonalize tight-binding models. The analysis reveals that in the limit of a Semenoff mass white noise on lattice the noise correlations are necessary to explain the regime. Finally, we highlight the resilience to localization due to disorder in Kane-Mele spin-orbit coupling by studying the evolution of transmission eigenvalues.

Remerciements

Dans un premier temps je souhaite remercier mes encadrants de thèse, Pascal et Andrej, qui m'ont permis de mener un travail de recherche véritablement inscrit au sein de la communauté académique. Au delà du cadre, j'ai toujours apprécié les discussions de fond que nous avons eu avec Andrej qui, même si elles portaient pour la plupart de points précis de notre projet, amenaient inévitablement à des considérations de physique plus générales permettant de prendre du recul comme on me l'a souvent conseillé. De Pascal je retiendrai une volonté franche d'aider à progresser ainsi que de donner une vision réaliste de la recherche, évitant ainsi les désillusions.

Je remercie tous les membres de mon jury : Hélène Bouchiat, Jérôme Cayssol, Pierre Delplace et Revaz Ramazashvili d'avoir accepté d'évaluer mon travail. Je souhaite mentionner en particulier Pierre Delplace dont les travaux forment une bonne partie de la base de la première partie de cette thèse et dont les remarques ont permis de nettement améliorer la qualité de ce manuscrit. Je remercie également les membres de mon comité de suivi, Fabrice Bert et Meydi Ferrier.

Bien évidemment, il me serait impossible de ne pas mentionner ici également mes camarades thésards du couloir théo. Tout d'abord Ansgar et Étienne qui progressent avec moi depuis le début et dont le soutien aura été indispensable pour arriver au bout avec autant de satisfaction que ce que j'éprouve à l'issu de cette thèse. À la fin de ma première année, Mateo, Marina et Baptiste ont rejoint le laboratoire et complété le noyau dur d'amis que je rejoignais quotidiennement. Si nous nous entraînons scientifiquement, ce sont surtout nos autres discussions que je retiendrai, autant les plus sérieuses que les plus loufoques. Je vous remercie tous les cinq pour toutes les raisons que vous connaissez déjà.

Enfin, je remercie également les chercheurs permanents du groupe théorie qui m'ont accueilli avec bienveillance durant ces trois années.

Table des matières

I	Introduction	3
1	Le graphène, un matériau aux promesses multiples	5
1.1	De la physique relativiste en matière condensée : le cas du graphène	5
1.2	Induire du spin-orbite dans le graphène	7
2	À la recherche de propriétés robustes	11
2.1	Le spin-orbite pour la topologie	11
2.2	Défauts topologiques	13
2.3	Parois de domaine dans le graphène	16
2.4	Théorème de flot spectral	18
II	Parois de domaine dans le graphène	23
3	États de parois vallée-Zeeman protégés par le théorème de flot spectral	25
3.1	Modèle général dans la limite continue	25
3.2	Parois de domaine vallée-Zeeman dans le continu et nombre de Chern d'interface	27
3.3	Liens avec les indices topologiques de volume	28
3.4	Équivalence avec le bicouche de graphène sans spin	31
3.5	Modèle sur réseau	32
3.6	Robustesse des états de paroi vallée-Zeeman	36
4	Parois de domaine dans les autres termes	43
4.1	États excités de paroi de domaine Kane-Mele	44
4.2	Paroi de domaine de masse Semenoff	47
4.3	Paroi de domaine spirale dans le spin-orbite Kane-Mele	51
4.4	Absence de modes pour les autres parois possibles	54
5	Conclusion sur les défauts unidimensionnels	57

III	Particules de Dirac désordonnées en dimension 1	59
6	L'équation de Dirac désordonnée	61
6.1	Particule de Dirac soumise à un champ de masse désordonnée . . .	62
6.2	Diffusion intervallée et corrélations	67
6.2.1	Corrélations	67
6.2.2	Diffusion intervallée	68
7	L'équation de Dirac sur réseau : la nécessaire prise en compte de la diffusion intervallée	73
7.1	Méthodes numériques	73
7.2	Suppression de la diffusion intervallée par les termes Kane-Mele et vallée-Zeeman	80
7.3	Conductance du système	81
8	Conclusion	85

Première partie

Introduction

Chapitre 1

Le graphène, un matériau aux promesses multiples

1.1 | De la physique relativiste en matière condensée : le cas du graphène

La physique des particules et la physique de la matière condensée partagent les mêmes outils pour décrire au niveau fondamental leurs objets d'études respectifs. Cette similarité peut alors être exploitée comme dans le cas célèbre du graphène pour transférer des résultats entre les deux disciplines ou bien coupler des phénomènes relevant de physiques *a priori* sans liens. Même si la première synthèse de graphène isolé, comprendre sans substrat, date de 2004 par Andre Geim et Konstantin Novoselov [1], sa structure de bande est connue depuis au moins 75 ans [2]. Cette structure de bande est particulière car la dispersion aux coins de sa zone de Brillouin hexagonale est conique (voir figure 1.1). Ainsi, la vitesse de groupe d'un électron autour de ces points est indépendante de son énergie, il se comporte comme une particule sans masse. Plus précisément encore, les équations du mouvement à basse énergie s'écrivent comme l'équation de Dirac à deux dimensions, la seule différence étant la valeur de la vitesse de Fermi v_F qui joue le rôle de la vitesse de la lumière dans l'équation de Dirac et qui lui est environ 300 fois inférieure.

$$v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Psi = E \Psi \quad (1.1)$$

où Ψ est la fonction d'onde d'un électron proche d'un des points de Dirac, v_F est la vitesse de Fermi du système, \mathbf{p} est le moment de l'électron et $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x \ \sigma_y)^T$ est le vecteur des matrices de Pauli qui représentent dans le cas du graphène le degré de liberté de sous-réseau également appelé isospin.

Pour une particule relativiste, Oskar Klein a prédit un phénomène suffisamment contre-intuitif pour qu'on lui attribue le nom de paradoxe de Klein. Alors que la densité de probabilité d'une particule massive confinée dans un puits de potentiel décroît exponentiellement en dehors du puits, une particule de Dirac traverse avec une probabilité 1 une barrière de potentiel infinie. L'échelle d'énergie

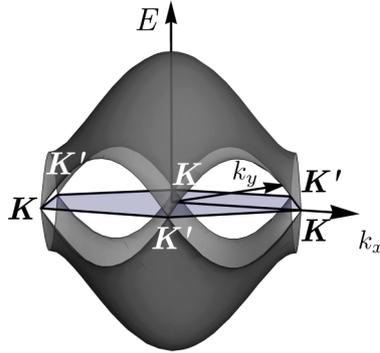


FIGURE 1.1 – Structure de bande du graphène montrant la dispersion conique aux coins de la première zone de Brillouin. Le plan bleu représente le niveau de Fermi au demi-remplissage, c'est à dire quand le niveau de Fermi passe exactement par les points de Dirac.

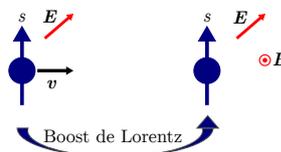
caractéristique pour le potentiel à partir de laquelle ce comportement apparaît est la masse de la particule et les parois du puits doivent avoir une largeur inférieure à la longueur d'onde Compton associée h/mc . Ceci contraint fortement la capacité à observer le phénomène avec des particules élémentaires car les champs électriques nécessaires pour l'observer sur l'électron serait supérieurs à 10^{16}Vcm^{-1} . En revanche, l'équation du mouvement de l'électron dans le graphène est une équation de Dirac sans masse, la valeur seuil de champ électrique est donc nulle! Ce phénomène devient alors observable dans les conditions de laboratoire [3, 4]. La résolution du paradoxe se fait par le passage d'un formalisme à une particule à une théorie de champ dans laquelle la barrière de potentiel peut créer des paires particule/antiparticule ou électron/trou en matière condensée. La conversion d'un électron en un trou à une interface peut également être observée dans la réflexion d'Andreev [5]. La réflexion d'Andreev s'observe dans un métal normal où il s'agit d'une rétro-réflexion (le trou se propage selon la même direction que l'électron incident en sens opposé), mais dans le cas du graphène elle peut devenir spéculaire (seule la composante de la vitesse perpendiculaire à l'interface change de signe) [6]. Une revue des deux phénomènes et le lien entre les deux est donnée dans la référence [7]. Un dernier exemple de l'impact de cette physique relativiste est que l'opacité du graphène dépend uniquement de la constante de structure fine qui est une constante fondamentale [8].

1.2 | Induire du spin-orbite dans le graphène

La richesse de la physique du graphène a naturellement mené à l'investigation d'autres matériaux 2D comme le nitrure de bore hexagonal (hBN) ou le disulfure de molybdène (MoS₂) pour citer deux des plus célèbres. La plupart de ces nouveaux candidats sont des dichalcogénures de métaux de transition plus souvent désignés par leur acronyme anglais TMD (Transition Metal Dichalcogenide). Ces matériaux sont de la forme MX₂ où M est un métal de transition (typiquement du molybdène ou du tungstène) et X est un chalcogène (comme le soufre, le sélénium ou le tellure). Cette recherche est partiellement motivée par des visées applicatives, en effet le graphène a initialement été envisagé comme un nouveau matériau pour révolutionner l'électronique. Néanmoins, cette volonté se heurte à des obstacles dont le plus fondamental est l'absence de gap dans la structure de bande du graphène, rendant très difficile l'adaptation des technologies actuelles basées sur les semi-conducteurs. Dans ce cadre de nombreux matériaux 2D sont scrutés afin de trouver un remplaçant possédant toutes les bonnes propriétés.

Une autre approche est de combiner différents matériaux entre eux afin de construire un nouveau métamatériau aux propriétés sur mesure appelé hétéro-structure de van der Waals en raison des interactions de van der Waals qui lient les différentes couches entre elles. Une application élémentaire de ces techniques est de superposer le graphène sur un substrat, typiquement un TMD. Ce montage a pour but d'induire un couplage spin-orbite dans le graphène qui est alors susceptible de devenir un isolant topologique démontrant un effet Hall quantique de spin (QSH).

On rappelle à toutes fins utiles que le couplage spin-orbite est un effet relativiste causé par le mouvement d'une particule dans un champ électrique. En effet, le passage dans le référentiel au repos de la particule induit l'apparition d'un champ magnétique qui est alors couplé au spin de la particule par effet Zeeman. En supposant un mouvement uniforme à la vitesse \mathbf{v} , le champ magnétique dans le référentiel de l'électron au repos \mathbf{B} et le décalage Zeeman résultant $\Delta\mathcal{E}$ s'écrivent



$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2} \quad (1.2)$$

$$\Delta\mathcal{E} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (1.3)$$

où \mathbf{E} est le champ électrique dans le référentiel initial, c la vitesse de la lumière et $\boldsymbol{\mu}$ le moment magnétique de l'électron. Celui-ci étant proportionnel au spin $\boldsymbol{\mu} = g\gamma\mathbf{S}$ où g et γ sont respectivement le facteur de Landé et le rapport gyromagnétique

de l'électron, le décalage Zeeman s'écrit finalement

$$\Delta\mathcal{E} = g\gamma \frac{\mathbf{E} \cdot (\mathbf{S} \times \mathbf{p})}{mc^2}. \quad (1.4)$$

Le couplage spin-orbite cristallin est proportionnel au couplage spin-orbite atomique qui augmente avec le numéro atomique. Par conséquent, pour induire du spin-orbite dans le graphène, il est nécessaire d'avoir un substrat comprenant des atomes lourds, d'où le choix des TMDs qui contiennent des métaux de transition.

Les différents termes de spin-orbite pouvant être induits dans le graphène dépendent des symétries finales du système. De manière générale, moins le système possède de symétries, plus le nombre de termes de spin-orbite autorisés est important. Cette démarche est faite en détails dans la référence [9]. Dans le cas du graphène sur un substrat possédant aussi une structure en nid d'abeille comme le nitrure de bore, on s'attend à ce que le groupe de symétrie du graphène (D_{6h}) se réduise à C_{3v} . Les approches théoriques [10, 11, 12] et expérimentales [13, 14, 15, 16] s'accordent pour considérer au moins trois des quatre termes autorisés.

Le premier est le spin orbite dit intrinsèque ou Kane-Mele [17]. Ce terme ouvre un gap dans la structure de bande dont le signe est opposé entre les deux vallées. Ce terme respecte toutes les symétries du graphène libre D_{6h} et on le représente sur réseau dans la figure 1.2(a). Le gap ouvert est topologique et induit un effet Hall quantique de spin. Malheureusement, son amplitude extrêmement faible, estimée à 12 μeV dans [18] par une méthode *ab initio*, rend impossible une détection de cet effet. L'un des objectifs initiaux de l'ajout d'un substrat au graphène est d'amplifier ce terme qui engendre des propriétés topologiques. Ce faisant, d'autres termes sont également induits.

Briser la symétrie miroir par rapport au plan du graphène (en ajoutant un substrat ou un champ électrique perpendiculaire) permet l'apparition de spin-orbite Rashba (voir figure 1.2(b)). Celui-ci vient lever la dégénérescence en spin des bandes et tend à fermer le gap Kane-Mele. L'effet Hall quantique de spin persiste toutefois tant que le gap est ouvert.

Enfin, briser l'équivalence entre les deux sous-réseaux du réseau en nid d'abeille permet l'apparition d'une asymétrie dans le spin-orbite Kane-Mele que l'on appelle spin-orbite vallée-Zeeman ou Ising (figure 1.2 (c)). Cette asymétrie entre les deux sous-réseaux se traduit par un terme Zeeman ayant un signe différent dans les deux vallées.

La brisure de symétrie entre les deux sous-réseaux engendre également l'apparition d'un terme de masse alternée. Cette masse ouvre un gap trivial en compétition avec le gap Kane-Mele. De manière générale on utilisera le mot masse pour tout terme ouvrant un gap et on utilisera alors la désignation de masse Semenoff pour nommer cette masse alternée.

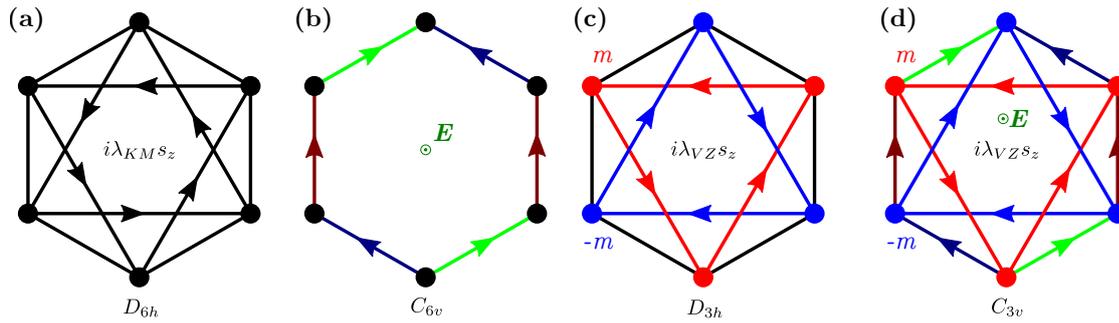


FIGURE 1.2 – Représentation des termes de spin-orbite dans le graphène avec le groupe de symétrie associé. (a) Spin-orbite Kane-Mele représenté sur réseau par un saut second voisin imaginaire pur dépendant du spin. L'orientation des sauts est identique sur les deux sous-réseaux de telle sorte que le groupe de symétrie du graphène simple D_{6h} est préservé. (b) L'ajout d'un champ électrique perpendiculaire au plan du graphène brise la symétrie miroir par rapport à ce plan. Le terme de saut premier voisin acquiert alors une phase dépendante des composantes du spin dans le plan. (c) La brisure de symétrie de sous-réseau rend les deux sites d'une maille élémentaire non équivalents, les amplitudes des sauts seconds voisins peuvent donc désormais dépendre du sous-réseau. Cette brisure de symétrie autorise aussi l'apparition d'un potentiel alterné. (d) La brisure de la symétrie dans le plan du graphène (C_{6v}) avec la brisure de la symétrie de rotation (D_{3h}) réduit le groupe de symétrie total à C_{3v} .

Chapitre 2

À la recherche de propriétés robustes

2.1 | Le spin-orbite pour la topologie

On a mentionné dans la section précédente qu'un des objectifs des hétérostructures à base de graphène est d'induire un couplage spin-orbite dans le graphène afin de créer une phase topologique dite effet Hall quantique de spin (ou son acronyme anglais QSH). La réponse du système à un champ électrique est alors un courant de spin (mais pas de charge) quantifié circulant sur les bords du système. De manière générale, le spin-orbite est souvent nécessaire à l'apparition de phase topologique comme dans le sélénure de bismuth qui présente des états de surface formant un cône de Dirac [19]. Ces deux exemples respectent la symétrie par renversement du temps, et donc en particulier ne nécessitent pas de champ magnétique. Cette symétrie particulière est importante car sa présence ou son absence permet avec la conjugaison de charge et la symétrie chirale de déterminer un invariant topologique caractérisant le volume du matériau. Aux débuts des travaux sur les isolants topologiques il a d'abord été considéré comme nécessaire de briser l'invariance par renversement du temps pour induire des phases topologiques. Cette brisure de symétrie a d'abord été réalisée grâce à un champ magnétique externe permettant la mise en évidence de l'effet Hall quantique entier [20, 21, 22] puis Haldane a proposé un modèle de réseau en nid d'abeille avec un flux magnétique net nul pour chaque hexagone mais avec des valeurs non nulles au travers de chaque triangle des deux sous-réseaux hexagonaux et des valeurs opposées sur les deux sous-réseaux [23]. Le modèle plus sophistiqué de Kane-Mele [24, 17] qui est apparu plus tard est alors la combinaison de deux modèles de Haldane mais avec des flux opposés pour les deux spins de telle sorte que le renversement du temps soit conservé.

Les matériaux lamellaires qui promettent la création de matériaux sur mesure sont alors une plateforme de choix pour développer ces nouveaux états électroniques. En intégrant les effets de toutes les couches, on peut alors modéliser ces matériaux par des matériaux effectifs 2D. La quantité topologique qui apparaît naturellement en deux dimensions est le nombre de Chern. Il s'écrit comme l'intégrale de la courbure de Berry sur la zone de Brillouin. La courbure de Berry définit la manière dont les vecteurs propres d'une bande donnée sont transportés dans la

zone de Brillouin.

$$\mathcal{C} = \frac{i}{2\pi} \int_{ZB} \mathcal{F} \quad (2.1)$$

où \mathcal{C} est le premier nombre de Chern, \mathcal{F} la courbure de Berry et l'intégrale se fait sur toute la première zone de Brillouin (ZB). Cette quantité est nécessairement un entier et la somme des nombres de Chern des bandes occupées d'un isolant 2D donne le nombre de Thouless-Kohmoto-Nightingale-den Nijs (TKNN) qui caractérise la conductance de l'effet Hall quantique entier [22]. Ce nombre de Chern vaut nécessairement 0 lorsqu'on impose la symétrie par renversement du temps car la courbure est alors une fonction impaire du moment. On pourrait alors croire (comme ce le fût initialement) que briser le renversement du temps est essentiel pour obtenir des phases topologiques, mais comme dit précédemment, ce n'est pas le cas. La quantité topologique associée aux système invariants par renversement du temps peut être vue comme la différence de nombres de Chern entre les deux projections possibles du spin lorsque l'une d'elles est préservée.

$$FK = \frac{\mathcal{C}^\uparrow - \mathcal{C}^\downarrow}{2} [2] \quad (2.2)$$

où FK désigne l'invariant de Fu-Kane des système invariants par renversement du temps [25]. Si les nombres de Chern de spin ne sont plus définis lorsqu'aucune composante du spin n'est préservée, le nombre de Fu-Kane l'est toujours.

Un ingrédient essentiel au nombre de Chern est que l'espace de base sur lequel on intègre soit compact. La zone de Brillouin remplit alors parfaitement ce critère grâce à l'invariance par translation discrète des cristaux. Mais cela impose également *a priori* de connaître la structure de bande dans son intégralité. Dans les faits, la courbure de Berry est le plus souvent très piqué autour de points particuliers dans la zone de Brillouin et la connaissance de la structure de bande dans les environs de ces points suffit à déduire la valeur du nombre de Chern. Dans le cas où plusieurs points de la zone de Brillouin contribuent fortement, comme dans le cas du graphène qui possède deux vallées à basse énergie sources de la courbure, on peut alors se demander si la connaissance de la structure de bande dans le voisinage de ces points ne suffit pas à prédire les propriétés topologiques du matériau. Nous verrons en section 2.4 qu'une caractérisation locale est en effet possible et le nombre définit ainsi peut être vue comme la caractéristique d'un défaut au sein d'un matériau et non plus simplement d'un matériau.

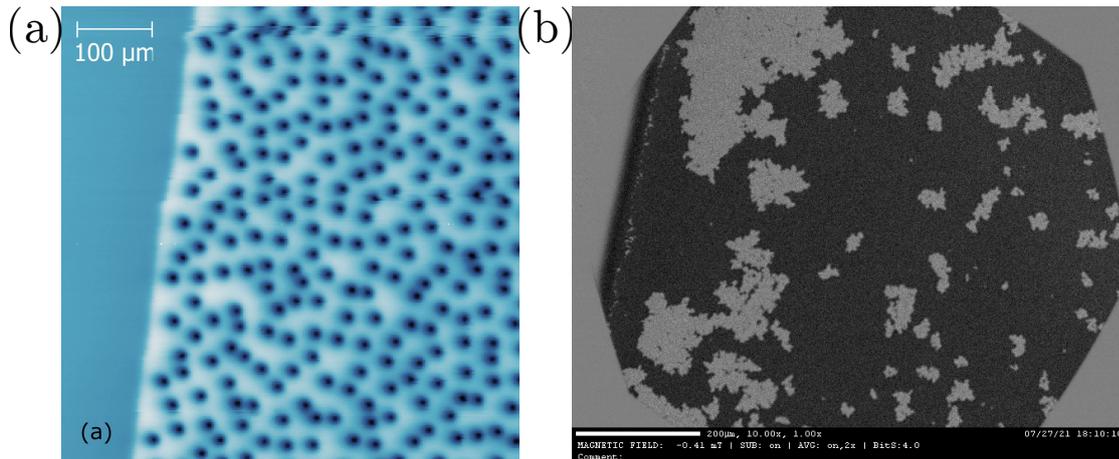


FIGURE 2.1 – (a) Vortex dans un film de 200 nm d’épaisseur de YBCO imagés par microscopie SQUID à balayage sous un champ de $6.93 \mu\text{T}$ à 4 K. Figure extraite de [33] (b) Domaines magnétiques dans un film de GdCo imagés par microscopie à effet Kerr magnéto-optique (MOKE) par le groupe IDMAG du LPS d’Orsay.

2.2 | Défauts topologiques

L’étude des défauts dans les matériaux est une considération aussi bien pragmatique sur les limites des techniques de synthèse que fondamentale. Dès le début du XX^{ème} siècle, Vito Volterra développe une théorie des dislocations dans les cristaux [26] qui sera réutilisée par Egon Orowan, Michel Polanyi et Geoffrey Ingram Taylor par la suite pour expliquer le comportement des matériaux ductiles. Les défauts magnétiques ont suivi avec les parois de domaines magnétiques étudiées entre autres par Felix Bloch et Louis Néel (voir Figure 2.1(b)) et les réseaux de vortex dans les supraconducteurs mis en évidence par Alexeï Abrikossov [27] (voir Figure 2.1(a)). En 1958, Jacques Friedel publie ses travaux sur une version quantique de l’écrantage des charges dans un métal qui donne lieu à des oscillations au lieu d’une simple décroissance exponentielle dans le cas classique de la densité de charge [28]. Enfin on peut citer les théories topologiques des défauts écrites pour la matière condensée par David Mermin [29] et Maurice Kléman [30] et pour l’hélium superfluide par Grigory Volovik et Vladimir Mineev [31, 32] à la fin des années 1970.

Cette approche topologique continue d’imprégner la physique de la matière condensée avec la théorie des bandes topologiques. Cette approche permet alors l’utilisation d’un puissant résultat de géométrie différentielle : le théorème d’indice d’Atiyah-Singer. Démontré en 1963 par Michael Atiyah et Isadore Singer [34], son application à la matière condensée relie la topologie d’un défaut à la topologie

du système. Dans ses applications usuelles, on définit des invariants topologiques caractérisant des domaines aux frontières desquels apparaissent des états d'énergie nulle ainsi qu'au niveau des défauts topologiques, un bord n'étant qu'un type de défaut particulier (voir Figure 2.2). Toutefois, la question principale se posant en matière condensée est sur l'existence de modes robustes aux niveaux des défauts, la topologie n'étant qu'une méthode de détermination de l'existence de ces modes. Dans les faits, ce sont des cas particuliers du théorème d'Atiyah-Singer qui sont utilisés en physique. Nous verrons alors dans la première partie de cette thèse un autre théorème d'indice caractérisant des parois de domaine que nous utiliserons pour l'exemple sur des systèmes obéissant à l'équation de Dirac. Si ce théorème qu'on appellera théorème de flot spectral ne permet pas d'obtenir d'information sur la physique du bord du système, il englobe et étend les résultats connus sur les défauts.

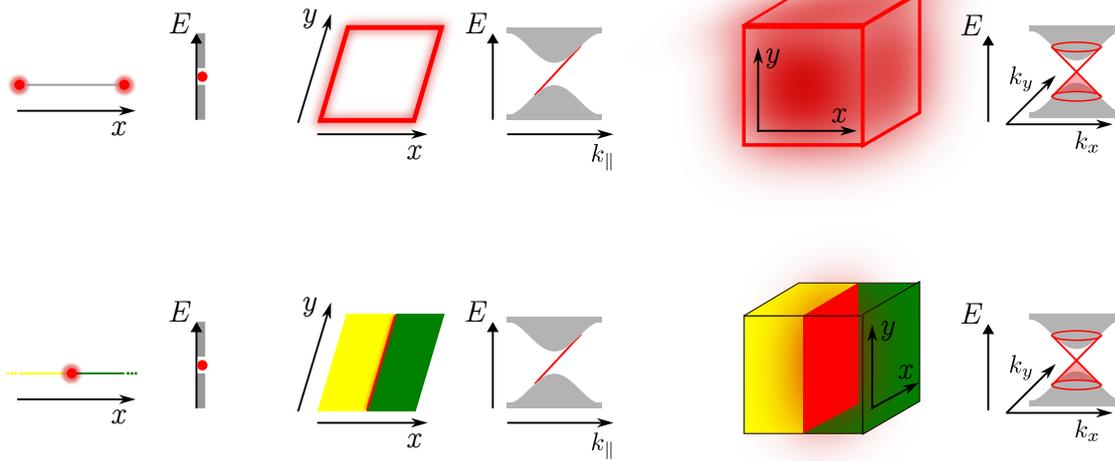


FIGURE 2.2 – (En haut) Lorsqu'un invariant topologique de volume est non trivial, des modes protégés apparaissent au bord. Pour un isolant de bande conventionnel, cela a pour conséquence de fermer le gap, d'où la description usuelle des isolants topologiques comme des matériaux isolants en volume mais conducteur sur ses bords. Il est également possible que les états protégés d'un système en dimension d se développent sur des bords de dimension plus petite que $d - 1$, on parle dans ces cas de topologie d'ordre supérieur comme dans le bismuth [35] où des modes protégés apparaissent sur les arêtes du système. (En bas) Si plusieurs domaines avec des topologies différentes coexistent dans un système, des modes protégés apparaissent à l'interface entre les domaines. Les parois de domaine sont les défauts les plus simples à imaginer mais un défaut peut *a priori* avoir une dimension arbitraire. Il faut alors prendre en compte à la fois la charge topologique du défaut et du volume pour obtenir la bonne correspondance volume/défaut.

2.3 | Parois de domaine dans le graphène

Le graphène étant bidimensionnel, les défauts peuvent être ponctuels (de dimension 0) ou linéaires (de dimension 1). Les couplages spin-orbite et la masse Semenoff décrits dans la section 1.2 peuvent tous être décrits par des paramètres réels dont les amplitudes respectives définissent l'ouverture ou non d'un gap dans la structure de bandes. Pour un défaut ponctuel, le cercle de rayon infini entourant le défaut est alors connexe et il est donc impossible de définir un défaut local qui ne provoque pas de fermeture du gap sur le cercle lorsqu'on le contracte en un point. Pour un défaut linéaire la « sphère » unidimensionnelle entourante le défaut est doublement connexe. Le défaut sépare alors le système en deux sous système, deux domaines, et l'interface, la paroi de domaine, peut héberger des modes topologiques. Seule les parois de domaine sont donc topologiquement pertinentes dans notre système.

Un type d'états électroniques conçus pour la spin- et valléetronique implique la création de canaux unidimensionnels qui peuvent être interprétés comme des parois de domaine dans un paramètre de couplage. Une des premières propositions de canaux topologiques est issue d'une paroi de domaine dans le potentiel de grille d'un bicouche de graphène [36] qui a été plus tard reliée à une paroi de domaine d'empilement [37], menant à l'observation de modes unidimensionnels [38]. D'autres parois de domaine dans la masse Semenoff ont mis en évidence des modes polarisés en vallée [39, 40]. Des parois alternatives dans des champs de contrainte ont été proposés [41, 42] tandis que les systèmes lamellaires permettent toujours plus de paramètres de couplage [43, 44, 45, 46]. Une vision unificatrice des modes topologiques unidimensionnels en tant que modes de paroi est illustrée par la compréhension à l'aide d'une paroi entre un domaine effet Hall quantique de spin (QSH) et un domaine effet Hall de la robustesse inattendue à un champ magnétique des états de bord hélicoïdaux de l'effet Hall quantique de spin [47]. La découverte récente que les modes de bord de l'effet Hall quantique de spin peuvent être transformés ou suppléés par des modes polarisés en spin ou en vallée lorsque le couplage spin-orbite dominant change montre clairement que la compréhension des parois de domaine en présence de multiples paramètres est cruciale.

Nous nous concentrerons dans un premier temps sur les parois de domaine vallée-Zeeman et Rashba dans le graphène, et nous les comparerons aux parois de domaine en une masse Semenoff et un spin-orbite Kane-Mele qui sont déjà connues. L'élément principal est l'existence de deux paires de Kramers se propageant le long d'une paroi de domaine vallée-Zeeman en présence d'un couplage Rashba homogène d'amplitude quelconque. Une différence notable est que ces modes ne sont protégés ni par un indice topologique de volume appartenant à la table périodique des invariants topologiques [48, 49, 50] ni par un indice dérivé d'une symétrie du

réseau (C_{3v}), mais pas un nombre de Chern d'interface. En substance, le nombre de Chern de vallée en volume C_{bulk}^τ , c'est-à-dire le nombre de Chern calculé avec le modèle continu du graphène avec un indice de vallée $\tau = \pm 1$ fixé, a des valeurs opposées dans les deux domaines avec des signes opposées du couplage vallée-Zeeman, mais cet indice dérivé du continu est mal défini et ne confère pas de protection topologique des modes même en l'absence de diffusion intervallée, de brisure de symétrie ou de fermeture de gap en volume [51]. Il a également été proposé que la différence de deux nombres de Chern de vallée $\delta C_{bulk}^\tau = C_{bulk,R}^\tau - C_{bulk,L}^\tau$ qui apparaît à une paroi entre deux domaines définit un invariant topologique [51]. Nous montrons cependant explicitement que δC_{bulk}^τ prédit en général les modes de manière incorrecte et n'a donc pas de correspondance volume-bord associée. Nous mettons en évidence un nombre de Chern d'interface calculé à l'aide d'un théorème de flot spectral dû à un déplacement dans l'espace des paramètres pour des monopoles de Berry-Chern [52]. À l'inverse des précédents, ce nombre prédit correctement les modes de paroi vallée-Zeeman $|C_{interface}^\tau| = 2$. Le théorème est un énoncé exact sur l'existence de modes de parois chiraux à l'aide d'un indice topologique associé à un point de dégénérescence des bandes d'un hamiltonien homogène auxiliaire. Ce point de dégénérescence correspond au point de l'espace réel où le couplage spin-orbite vallée-Zeeman change de signe. Il est donc pleinement déterminé par la paroi de domaine et non par la topologie des domaines.

Le travail présenté dans la partie sur les parois de domaine démontre l'utilité du théorème de flot spectral pour des modes topologiques dans des problèmes quantiques inhomogènes pour lesquels le nombre de méthodes disponibles est limité. Une première méthode est de traiter les coordonnées spatiales classiquement à longue distance d'un défaut topologique et d'étudier la topologie de bande résultante causée par les symétries [53, 50]. Il est également possible d'utiliser des expressions en espace réel qui donne une indication locale de topologie non triviale [54]. Une correspondance volume-défaut précise reste cependant abstraite et fait appel à des invariants topologiques de volume généralisés [55, 56] à l'origine de modes de paroi [51, 57, 58]. À l'inverse, le théorème de flot spectral [59, 60, 52] définit des invariants topologiques sur la base d'informations locales dans l'espace des paramètres [61, 36]. Dans notre cas, la paroi de domaine vallée-Zeeman est une interface au travers de laquelle les paramètres d'une équation de Dirac varie dans l'espace réel. Le théorème y est alors utile à la fois conceptuellement mais également d'un point de vue pratique puisque nous n'avons pas d'autre théorème d'indice pour notre opérateur de Dirac et que la résolution directe du spectre des modes dans le gap est fastidieuse et opaque.

Les modes de paroi vallée-Zeeman révélés diffèrent des modes de bord du graphène causés par le spin-orbite vallée-Zeeman déjà identifiés puisque ces derniers sont sensibles à l'amplitude du couplage Rashba [62] et aux conditions au bord de

l'échantillon, même en l'absence de diffusion intervallée [51] car les modes ne sont connectés qu'au nombre de Chern de vallée de volume $|C_{bulk}^\tau| = 1$ [62, 13, 63]. Nous exhibons plutôt une relation de similarité entre nos modes de paroi vallée-Zeeman et les modes liés d'une paroi de potentiel de grille dans le bicouche de graphène [36, 64] qui ont été expérimentalement détectés [38, 37] mais dont nous montrons que la protection δC_{bulk}^τ [51] est en réalité due à $C_{interface}^\tau$. Étant donné que les expériences indiquent que les effets de proximité dans le graphène induisent des termes de spin-orbite de trois types, parmi lesquels vallée-Zeeman est considérable [13, 15, 16], nous nous attendons à ce que nos modes de paroi vallée-Zeeman puissent contribuer aux propriétés spectroscopiques et de transport.

2.4 | Théorème de flot spectral

Dans un système 2D, les propriétés topologiques sont données par le premier nombre de Chern. Or, le premier nombre de Chern n'est calculable que sur des espaces compacts, limitant a priori son applicabilité aux cristaux pour lesquels la zone de Brillouin 2D est un tore. Le théorème de flot spectral (que l'on abrégera parfois en TFS) est alors une solution permettant d'étendre l'analyse topologique à des systèmes où l'espace des moments n'est pas compact comme en optique, en géophysique ou en mécanique et mécanique des fluides. Dans le cadre de la théorie des bandes, ce théorème permet de se passer de la structure de bande complète et ne requiert que sa forme à basse énergie.

Le théorème de flot spectral est présenté en détails dans les références [59, 60, 52]. Nous nous contentons ici de l'appliquer dans le cadre d'un système bidimensionnel avec un paramètre variant spatialement. Nous considérons d'abord le cas d'une paroi de domaine en le paramètre Kane-Mele $\lambda_{KM}(x)$ en présence d'un terme de masse homogène m . L'implémentation sur réseau de ces termes est illus-

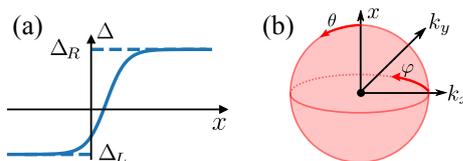


FIGURE 2.3 – Théorème de flot spectral pour une paroi de domaine dans le continu. (a) Profil générique d'une paroi de domaine dans le continu avec des valeurs asymptotiques arbitraires Δ_L, Δ_R définissant les deux domaines. (b) Un point de dégénérescence dans l'espace des paramètres est entouré d'une sphère $S^2(\theta, \phi)$ sur laquelle est calculé le nombre de Chern des projecteurs sur les états en dessous du gap.

trée dans les Figure 1.2(a) et (c). Le Hamiltonien à basse énergie d'un tel système est alors

$$H = -i\partial_x\tau_z\sigma_x + k_y\sigma_y + m\sigma_z + \lambda_{KM}(x)\tau_z\sigma_zs_z \quad (2.3)$$

où τ_i, σ_i et s_i sont des matrices de Pauli agissant respectivement dans l'espace des vallées, du sous-réseau et du spin. Pour un système homogène, l'invariant de Fu-Kane vaut 1 lorsque $|\lambda_{KM}| > |m|$ et 0 sinon. La correspondance volume-bord permet alors d'établir l'existence d'une paire de Kramers reliant les bandes de conduction et de valence et localisée entre deux domaines pour lesquels l'invariant de Fu-Kane est différent. Dans le cas d'un système préservant s_z , on peut alors scinder le système en deux copies du modèle de Haldane avec des valeurs opposés du terme de saut second voisin. Le nombre de Chern associé à chaque copie vaut alors $\text{sgn}(\lambda_{KM})s_z$ si $|\lambda_{KM}| > |m|$ et 0 sinon. Donc si de part et d'autres d'une paroi $|\lambda_{KM}| > |m|$ et que λ_{KM} change de signe alors un état par vallée et par spin se développera au bord. Nous pouvons alors appliquer le théorème de flot spectral et vérifier que les résultats concordent. L'application du théorème se fait en plusieurs étapes :

1. On remplace le hamiltonien de l'équation 2.3 $H(x, -i\partial_x, k_y)$ par une fonction à valeur matricielle $\tilde{H}(x, k_x, k_y) = k_x\tau_z\sigma_x + k_y\sigma_y + m\sigma_z + \lambda_{KM}(x)\tau_z\sigma_zs_z$ où k_x est un paramètre et commute donc avec x et $\lambda_{KM}(x)$.
2. Nous considérons des opérateurs \tilde{H} possédant un gap qui se ferme en des points isolés (x^i, k_x^i, k_y^i) indexés par l'entier i . Physiquement cela revient à imposer que le hamiltonien initial H possède un gap loin de la paroi de domaine. En notant τ, s les valeurs propres des opérateurs τ_z et s_z , le spectre de \tilde{H} est alors $E_{\tau s \pm} = \pm\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + (\tau s \lambda_{KM}(x) + m)^2}$. Nous nous intéressons au gap ouvert aux points de Dirac, c'est à dire celui obtenu à demi-remplissage. Il y a alors 4 bandes remplies $E_{\tau s -}$.
3. Il n'existe au maximum que deux points de dégénérescence fermant le gap entre les bandes de valence et de conduction. En ces points, $k_x^i = k_y^i = 0$ et

$$\lambda_{KM}^i = -\tau s m \in \{+m, -m\}. \quad (2.4)$$

En supposant une paroi de domaine monotone, cette équation peut :

- (a) n'avoir aucune solution si $|\lambda_{KM,L}|, |\lambda_{KM,R}| < |m|$ (les deux domaines ont un gap trivial),
- (b) avoir une unique solution si $|\lambda_{KM,L}| < |m| < |\lambda_{KM,R}|$ ou $|\lambda_{KM,L}| > |m| > |\lambda_{KM,R}|$ (bord entre un isolant topologique et un isolant trivial),
- (c) ou avoir deux solution si $|\lambda_{KM,L}|, |\lambda_{KM,R}| > |m|$ et $\text{sgn}(\lambda_{KM,L}\lambda_{KM,R}) < 0$ (paroi de domaine entre deux isolants topologiques ayant des signes opposés du paramètre Kane-Mele λ_{KM}).

4. On entoure chaque point de dégénérescence avec une surface fermée, typiquement une sphère $S^i(\theta, \phi)$, et on considère le projecteur P_-^i sur les bandes occupées de \tilde{H} . Le théorème de flot spectral garantit que le nombre d'états chiraux $N_{chiraux}^i$ quittant la bande de valence est donné par le premier nombre de Chern C_-^i des états occupés sur la sphère $S^i(\theta, \phi)$.

$$N_{chiraux}^i = C_-^i \quad (2.5)$$

$$C_-^i = -\frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \operatorname{Tr} P_-^i (\partial_\theta P_-^i \partial_\phi P_-^i - \partial_\phi P_-^i \partial_\theta P_-^i). \quad (2.6)$$

En utilisant la monotonie de la paroi de domaine, on peut faire un changement de variable $x \rightarrow \tau s \lambda_{KM}(x) + m = \Delta_{\tau s}$. On peut alors paramétrer la sphère de rayon 1 centrée sur un point de dégénérescence par $(\Delta, k_x, k_y) = (\cos(\theta), \sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi))$. Le projecteur sur la bande remplie à τ et s fixés est donc

$$P_{\tau s, -}^i = \frac{1}{2} (\mathbb{1} - \hat{d}_{\tau, s}^i \cdot \sigma) \quad (2.7)$$

$$\hat{d}_{\tau, s}^i = (\tau \sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi), \tau s D_{RL} \cos(\theta)) \quad (2.8)$$

où $D_{RL} = (\operatorname{sgn}(\Delta_+(x^{i+})) - \operatorname{sgn}(\Delta_+(x^{i-}))) / 2$. On obtient alors $C_{\tau s, -} = s D_{RL}$. Chaque bande contribue donc pour un mode à chaque point de dégénérescence. En particulier, lorsque le paramètre λ_{KM} traverse la valeur m , deux modes chiraux (une paire de Kramers) ayant pour nombres quantiques $\tau = -s$ se développent, tandis que lorsqu'il traverse la valeur $-m$, deux autres modes avec $\tau = s$ se développent.

Comme attendu nous retrouvons la paire de Kramers se développant au bord d'un isolant topologique ainsi que les quatre modes se développant sur une paroi de domaine séparant deux isolants topologiques ayant des valeurs opposées du paramètre λ_{KM} . En utilisant la même approche on retrouve également les modes à l'interface entre deux isolants triviaux où le signe de la masse triviale change [40, 59]. Dans la figure 2.4 on représente les états de parois et le diagramme de phase du graphène avec une masse et un spin-orbite Kane-Mele.

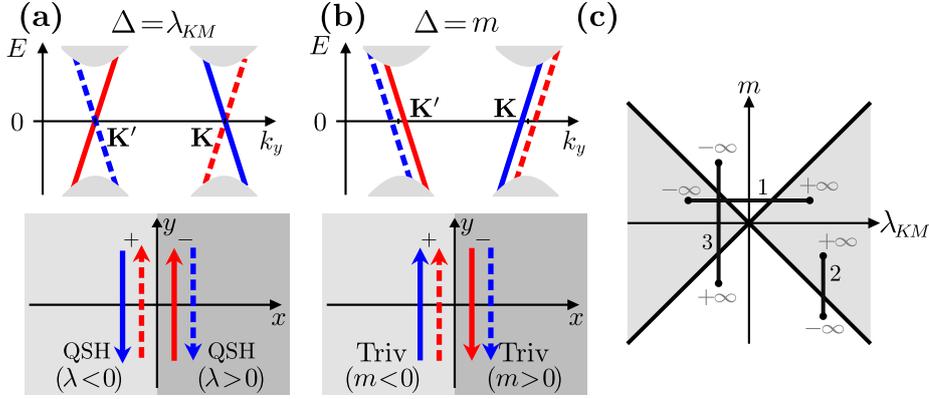


FIGURE 2.4 – Théorème de flot spectral pour des parois de domaine dans le spin-orbite Kane-Mele λ_{KM} et la masse m dans le continu. (a) Représentation schématique des modes de paroi KM dans l’espace des moments (en haut) et en espace réel (en bas). La couleur représente le spin, rouge (bleu) pour spin s_z up (down), les flèches indiquent le sens de la vitesse de groupe tandis que \pm indique la vallée. Si la paroi est un bord de domaine QSH, alors une paire de Kramers apparaît (pointillés ou traits plein) et si la paroi est entre deux domaines QSH avec une valeur opposée du paramètre λ_{KM} , les deux paires apparaissent. Les modes de bord d’un domaine QSH sont protégées par l’invariant en volume de Fu-Kane tandis que les modes de parois $\lambda_{KM} \rightarrow -\lambda_{KM}$ sont également protégés par un nombre de Chern de spin et acquièrent un gap si la conservation de s_z est brisée. (b) Comme pour (a) mais pour une paroi de masse. Le terme de masse induisant un gap trivial, la paroi de changement de signe de m n’héberge aucun mode protégé par un invariant en volume. On pourrait les justifier par des nombres de Chern de vallée mais on expliquera en section 3.3 que ces nombres de Chern sont mal définis même si on peut les relier au TFS dans certains cas. (c) Diagramme de phase du graphène avec m et λ_{KM} . Un profil de paroi est représenté par un chemin dans le diagramme. Les extrémités $\pm\infty$ des chemins indiquent les valeurs limites et donc la phase des domaines à gauche ($-\infty$) et à droite ($+\infty$) de la paroi. À chaque fois que la paroi croise une des lignes diagonales, une paire de Kramers apparaît à cet endroit. Trois chemins (choisis rectilignes) illustrent les cas (a) et (b) : un changement de signe de λ_{KM} (ligne 1 ; les 4 modes de (a) sont présents), un bord de domaine QSH (ligne 2 ; une seule des paires de Kramers de (a)) et un changement de signe de la masse (ligne 3 ; modes représentés en (b)).

Deuxième partie

Parois de domaine dans le graphène

Chapitre 3

États de parois vallée-Zeeman protégés par le théorème de flot spectral

En introduction nous avons décrit tous les termes qui peuvent être induits dans le graphène par un substrat. L'existence ou l'absence de modes à des parois de domaines pour les termes Kane-Mele et Semenoff sont parfaitement comprises grâce aux indices topologiques standards. En ce qui concerne les termes Rashba et vallée-Zeeman, ceux-ci n'ouvrent pas de gap dans le spectre à eux-seuls et sont en compétition pour fermer les gaps ouverts par les termes de masse Semenoff et spin-orbite Kane-Mele. Cependant, les deux ensembles ouvrent leur propre gap. Ce gap possède un invariant de Fu-Kane trivial, pourtant les simulations numériques suggèrent qu'il héberge des modes d'interface robustes. L'application du théorème de flot spectral confirme cette intuition.

En section 2.4 nous avons présenté le théorème de flot spectral en l'appliquant à des parois de domaine dans le couplage Kane-Mele et la masse Semenoff dont les propriétés sont déjà connues et qui permettent de tester le théorème. Nous commençons ce chapitre en définissant des parois de domaine dans le modèle continu du graphène en section 3.1 puis nous appliquons le théorème de flot spectral aux parois de domaine dans le couplage vallée-Zeeman avec un couplage Rashba homogène en section 3.2. Nous discutons ensuite des avantages et des connections du théorème de flot spectral avec une différence de nombres de Chern en volume dans la section 3.3. Nous montrons ensuite en section 3.4 la similarité de notre modèle continu avec un modèle de bicouche de graphène sans spin. Nous introduisons enfin dans la section 3.6 des parois de domaine dans un modèle de liaisons fortes du graphène et discutons de la robustesse des modes de paroi vallée-Zeeman.

3.1 | Modèle général dans la limite continue

On commence par considérer le modèle continu à basse énergie du graphène avec une paroi de domaine lisse :

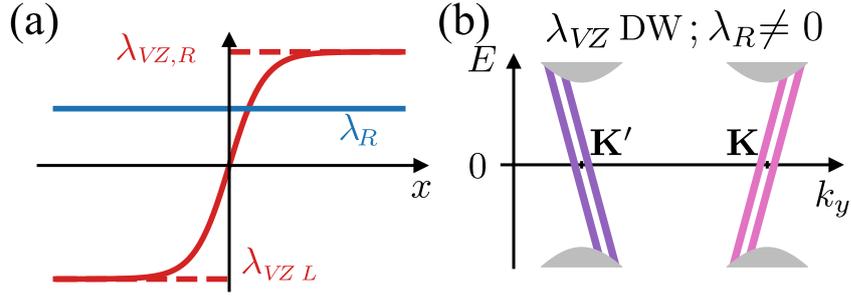


FIGURE 3.1 – Modes de paroi vallée-Zeeman (VZ) et robustesse sur le réseau. (a) Profil de paroi générique changeant le signe du couplage VZ λ_{VZ} avec une valeur arbitraire non nulle du couplage Rashba λ_R . (b) Schéma des modes dans l'espace réciproque prédit par le théorème de flot spectral pour (a). Les deux vallées K, K' sont projetées sur $k_y = 0$ mais elles sont séparées ici par souci de visibilité.

$$\begin{aligned}
H = & \tau_z \sigma_x (-i \partial_x) + k_y \sigma_y & (3.1) \\
& + m(x) \sigma_z + \lambda_{KM}(x) \tau_z \sigma_z s_z \\
& + \lambda_{VZ}(x) \tau_z s_z + \lambda_R(x) (\tau_z \sigma_x s_y - \sigma_y s_x),
\end{aligned}$$

où on impose une invariance par translation le long de la paroi de domaine dans la direction y (toutes les directions sont équivalentes dans le modèle à basse énergie), $m, \lambda_{KM}, \lambda_{VZ}$ et λ_R sont respectivement les amplitudes de la masse Semenoff, du spin-orbite Kane-Mele (KM), du spin-orbite vallée-Zeeman (VZ) et du spin-orbite Rashba (R) et les matrices de Pauli $\tau_i, \sigma_i, s_i, i = x, y, z$ agissent respectivement dans les sous espaces de vallée, sous-réseau et spin tandis que nous fixons $\hbar v_F \equiv 1$ pour la vitesse de Fermi. Tout au long de ce chapitre nous ne considérons des parois de domaine que sur un seul terme à la fois, les autres termes étant homogènes. Nous imposons également que les deux domaines aient un gap loin de la paroi, de telle sorte que tout mode de paroi se démarque à l'intérieur d'un gap de volume. Évidemment, si plusieurs parois nettement séparées apparaissent dans le système, elles se comporteront indépendamment et chacune portera ses modes. Dans cette section nous nous concentrerons sur le nouveau type de paroi dans le terme $\lambda_{VZ}(x)$ avec λ_R constant. On démontre en section 4.4 qu'une paroi de domaine dans le terme Rashba $\lambda_R(x)$ avec λ_{VZ} constant ne porte pas de modes topologiques, tandis que nous retrouvons les modes déjà connus pour les parois dans $\lambda_{KM}(x)$ et $m(x)$.

Le profil d'une paroi dans n'importe quel paramètre $\Delta \in \{m, \lambda_{KM}, \lambda_{VZ}, \lambda_R\}$ est défini par :

$$\Delta(x) \equiv \frac{\Delta_L + \Delta_R}{2} + \frac{\Delta_R - \Delta_L}{2} \eta(x), \quad (3.2)$$

caractérisé par les valeurs limites $\Delta_L \equiv \Delta(x \rightarrow -\infty)$, $\Delta_R \equiv \Delta(x \rightarrow \infty)$ qui définissent les domaines à gauche et à droite de la paroi et par une fonction lisse arbitraire $\eta(x)$ qui satisfait $\eta(x \rightarrow \pm\infty) = \pm 1$ (voir figure 3.1a). Pour une paroi unique, le profil $\eta(x)$ peut être considéré comme monotone et sa forme exacte n'impacte pas les résultats de cette section : on peut imaginer des profils typiques tels que $\eta(x) \in \{\frac{2}{\pi} \arctan(x/l), \tanh(x/l) \dots\}$ avec une taille caractéristique l . On ne considère des modes paroi que dans les cas où L et R possèdent tous les deux un gap loin de la paroi de domaine.

3.2 | Parois de domaine vallée-Zeeman dans le continu et nombre de Chern d'interface

Nous utilisons le théorème de flot spectral pour montrer qu'une paroi de domaine dans le terme vallée-Zeeman en présence d'un spin-orbit Rashba induit des modes se propageant le long de l'interface n'ayant pas déjà été identifiés. Tout d'abord, un domaine avec $\lambda_{VZ}, \lambda_R \neq 0$ a un gap $\frac{2|\lambda_R \lambda_{VZ}|}{\sqrt{\lambda_R^2 + \lambda_{VZ}^2}}$ au demi-remplissage bien qu'aucun des deux termes n'ouvre de gap dans le graphène à lui seul. Nous considérons donc une paroi dans $\lambda_{VZ}(x)$. Le théorème de flot spectral, présenté en détails en section 2.4, s'intéresse à un hamiltonien auxiliaire \tilde{H} dans lequel $-i\partial_x$ est remplacé par un paramètre k_x , donnant le spectre

$$E_{\tau, \alpha\beta} = \alpha \sqrt{k^2 + \lambda_{VZ}(x)^2 + 2\lambda_R^2} + 2\beta \sqrt{\lambda_R^4 + (\lambda_R^2 + \lambda_{VZ}(x)^2)k^2}, \quad (3.3)$$

où $\alpha, \beta = \pm$, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ avec une dégénérescence en vallée ($\tau = \pm 1$) de chaque bande. Si $\lambda_{VZ} \lambda_R \neq 0$, ce spectre possède un gap comme précédemment mentionné. Nous nous intéressons maintenant aux points de dégénérescence de fermeture du gap au demi-remplissage, c'est-à-dire aux points où les deux bandes intérieures qui sont associées à $\alpha = \pm 1$ et $\beta = -1$ se touchent. À $\lambda_R \neq 0$ constant le gap se ferme uniquement aux points $(x, k_x, k_y) = (x_c, 0, 0)$ tels que $\lambda_{VZ}(x_c) = 0$. Nous construisons alors les projecteurs 4×4 (dans l'espace de Hilbert σ, s) sur les deux bandes occupées de \tilde{H} , $P_\tau = P_\tau^{\alpha=-, \beta=+} + P_\tau^{\alpha=-, \beta=-}$ et nous calculons les projecteurs sur la n -ième bande à l'aide de : $P^{(n)} = \prod_{m \neq n} \frac{\tilde{H} - E_m}{E_n - E_m}$. Enfin, en évaluant le nombre de Chern associé à la sphère englobant le point $(x_c, k_x = 0, k_y = 0)$ nous obtenons

$$C_\tau = \tau(\text{sgn}(\lambda_{VZ,R}) - \text{sgn}(\lambda_{VZ,L})). \quad (3.4)$$

Le théorème de flot spectral garantit donc l'existence de deux modes se propageant dans chaque vallée à l'interface entre deux domaines où le paramètre λ_{VZ} change de signe tandis que la paramètre λ_R reste non nul et constant comme montré en figure 3.1a. Le sens de propagation en y est donné par le signe de C_τ (voir figure 3.1b).

3.3 | Liens avec les indices topologiques de volume

Nous partons des indices topologiques de volume. Pour une paroi de domaine lisse, les effets de la diffusion intervallée peuvent être négligés et le modèle pertinent est donc celui à basse énergie du graphène dans lequel l'indice de vallée τ est conservé. La faiblesse fondamentale d'une topologie en volume résolue en vallée a été exposé dans la référence [51] qui traite d'un modèle de bicouche de graphène soumis à un potentiel de grille présentant une paroi de domaine. Nous montrons en section 3.4 l'équivalence de ce modèle de bicouche de graphène sans spin avec notre modèle de graphène avec un spin-orbite Rashba homogène et une paroi de domaine dans le spin-orbite vallée-Zeeman. En résumé, ils montrent que le « nombre de Chern de vallée » C_{bulk}^τ , c'est-à-dire le nombre de Chern calculé dans le modèle continu avec l'indice de vallée τ fixé, ne protège pas de mode de bord. L'argument clé est qu'un nombre de Chern calculé dans le plan infini (k_x, k_y) n'est pas un invariant topologique [52]. Par conséquent, les modes de bord peuvent disparaître en fonction de détails microscopiques du bord, même en l'absence de diffusion intervallée, de brisure de symétrie ou de fermeture du gap.

C_{bulk}^τ ne peut donc prédire des modes de paroi, mais l'article [51] avance que la différence de deux valeurs non nulles $\delta C_{bulk}^\tau = C_{bulk,R}^\tau - C_{bulk,L}^\tau$ qui apparaît à l'interface entre deux domaines à droite (R) et à gauche (L) est un invariant topologique. Les modes de paroi du potentiel de grille sont alors stabilisés par cette quantité. Cet argument est illustré dans les figures 3.2(a) et (b). L'élément clé mis en avant dans cette figure est que la structure de bande des domaines R et L deviennent égales loin du point $(k_x, k_y) = (0, 0)$, il est alors possible de compactifier les deux plans en une sphère pour calculer δC_{bulk}^τ . Étant donné l'équivalence entre le bicouche de graphène soumis à une paroi de potentiel de grille et notre paroi de domaine vallée-Zeeman, il semblerait que δC_{bulk}^τ protège également nos modes de paroi.

Nous souhaitons mettre en évidence que δC_{bulk}^τ est en réalité fragile en général tandis que le nombre de Chern d'interface $C_{interface}^\tau$ et le théorème de flot spectral sont biens définis et plus performants pour les problème d'interface comme les

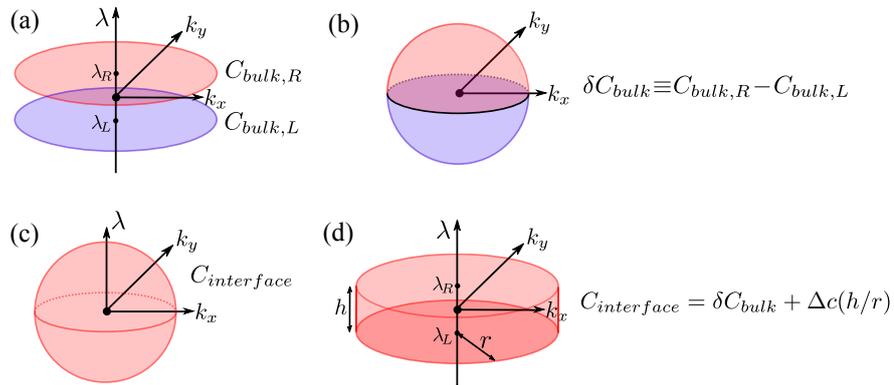


FIGURE 3.2 – (a) Deux intégrales planaires dans le continuum donnant le nombre de Chern de volume associé aux domaines de gauche (L) et de droite (R). Ces nombres de Chern sont instables et la correspondance volume-bord n'est universelle pour aucun des deux domaines. (b) Quand la différence de deux nombres de Chern δC_{bulk} est considérée, comme il est naturel de le faire pour une paroi de domaine, il est possible de compactifier les plans en (a) et d'obtenir un indice de volume stable mais qui n'est pas formellement connecté aux modes de paroi. (c) Intégrale sphérique définissant le nombre de Chern d'interface $C_{interface}$. (d) Déformation de la sphère en un cylindre. On a alors $C_{interface} = \delta C_{bulk} + \Delta c$ où Δc peut être une fonction du rapport d'aspect h/r .

parois de domaines. Ces avantages se traduisent dans notre contexte par (1) l'existence de $C_{interface}^\tau$ sans avoir à se référer à des quantités topologiques de volume où à un espace de paramètres compact qui n'existent pas dans le cadre d'une étude résolue en vallée, et (2) le théorème de flot spectral est un théorème exact sur les modes de parois à l'inverse de la correspondance volume-bord qui n'est pas clairement définie ou est justifiée *a posteriori* par de laborieux calculs explicites. Si des preuves rigoureuses existent pour certains invariants (voir [65, 66]), ces approches ne sont pas aisément généralisables à l'intégralité des invariants topologiques. Nous considérons maintenant plus précisément les relations entre $C_{interface}^\tau$ et δC_{bulk}^τ .

On rappelle ici brièvement la définition de $C_{interface}^\tau$. Soit un hamiltonien dépendant d'un paramètre λ (comme le spin-orbite) qui varie lentement le long de l'axe x (comme pour un profil de paroi de domaine $\lambda(x)$). Le théorème de flot spectral (voir section 2.4 et la référence [52] pour les détails) s'intéresse aux points de dégénérescence d'un hamiltonien auxiliaire dans lequel l'opérateur $-i\partial_x$ est remplacé par un paramètre réel k_x en fonction de $\lambda(x), k_x, k_y$. Si le profil crée une dégénérescence en un point isolé $(x, k_x, k_y) = (x_c, k_x^c, k_y^c) \equiv p_c$, il est alors nécessaire de calculer le nombre de Chern d'interface $C_{interface}^\tau$ des bandes pleines de \tilde{H} sur une sphère englobant le point p_c . Le fait que seule l'information dans un voisinage du point p_c et non l'intégralité de la zone de Brillouin soit utilisée est à l'origine du qualificatif « d'interface ».

Ayant défini $C_{interface}^\tau$, nous déformons continûment la surface d'intégration en un cylindre, comme illustrée dans les figures 3.2(c) et (d), afin d'obtenir la décomposition

$$C_{interface}^\tau = \delta C_{bulk}^\tau + \Delta c^\tau, \quad (3.5)$$

où Δc^τ est défini en prenant la limite d'un cylindre de rayon $r \rightarrow \infty$; la différence $\Delta c^\tau \equiv \lim_{h/r \rightarrow 0} \Delta c^\tau(h/r)$ est donnée par l'intégrale de Chern sur la face latérale du cylindre en conservant une hauteur h finie. h peut être arbitrairement petite tant que le cylindre englobe p_c . Pour notre modèle continu de paroi en VZ, nous trouvons explicitement $\Delta c^\tau = 0$. Dans notre modèle, $C_{interface}^\tau$ et δC_{bulk}^τ coïncident donc. Cependant, seul $C_{interface}^\tau$ garantit l'existence des modes de paroi au travers du TFS, alors que la correspondance entre δC_{bulk}^τ et les modes de paroi n'est pas garantie et n'est trouvée qu'*a posteriori* (voir par exemple la référence [51] dans laquelle une solution explicite est nécessaire). Pour concrétiser cette affirmation, nous présentons un modèle simple à une vallée dans lequel $C_{interface} = 1$ protège un mode de paroi chiral alors que $C_{bulk} = 0$ et donc $\delta C_{bulk} = 0$. Le nombre de Chern dérivé du volume prédit donc une absence de modes. Dans cet exemple, la face latérale du cylindre représenté en figure 3.2d est la contribution exclusive du nombre de Chern d'interface, donc $\Delta c = 1$. Ce modèle est basé sur la restriction à une composante du spin du modèle de Bernevig-Hughes-Zhang où on ouvre un

gap dans le cône de Dirac au point Γ :

$$H_{bulk} = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + \lambda(M - k_x^2 - k_y^2) \sigma_z, \quad (3.6)$$

où le paramètre λ varie spatialement selon x , allant de $\lambda_L \equiv \lambda(x = -\infty) = +1$ à $\lambda_R \equiv \lambda(x = +\infty) = -1$ tout en gardant $M < 0$ constant. Pour toute valeur non nulle de λ et $M < 0$, la structure de bande est triviale. Donc $C_{bulk}(\lambda = \pm 1) = 0$ et par conséquent $\delta C_{bulk} = 0$. À l'inverse, pour tout $M < 0$, $C_{interface} = 1$ à cause du point de dégénérescence $(k_x, k_y, \lambda(x)) = (0, 0, 0)$. Il y a donc un mode de paroi chiral à l'endroit où $\lambda(x)$ change de signe.

Nous discuterons de la robustesse des modes protégés par $C_{interface}$ dans la section 3.6 après avoir introduit le modèle sur réseau et la diffusion intervallée.

3.4 | Équivalence avec le bicouche de graphène sans spin

Il s'avère que le modèle basse énergie du graphène avec les spin-orbite Rashba et vallée-Zeeman est équivalent au modèle basse énergie d'un bicouche de graphène en superposition AB soumis à un potentiel de grille. Il a déjà été démontré dans la référence [36] qu'une variation spatiale du potentiel de grille liait des états sur la ligne de changement de signe du potentiel. Le hamiltonien étudié est le suivant :

$$H_{BLG} = k_x \sigma_x + k_y \tau_z \sigma_y + \frac{t_\perp}{2} (\sigma_x \eta_x + \sigma_y \eta_y) - V \eta_z, \quad (3.7)$$

où les matrices de Pauli η_i agissent dans l'espace des couches tandis que t_\perp est le terme de saut permettant de passer de l'atome A d'une couche à l'atome B de l'autre couche. On divise la relation de similitude en deux étapes. Dans un premier temps, nous cherchons à récupérer la bonne forme du terme cinétique en appliquant $U_1^\dagger = \frac{1+\tau_z}{2} + \frac{1-\tau_z}{2} \sigma_z$ qui multiplie le secteur $\tau = -1$ par σ_z , de telle sorte que

$$H_{BLG}^{(1)} = k_x \tau_z \sigma_x + k_y \sigma_y + \frac{t_\perp}{2} \tau_z (\sigma_x \eta_x + \sigma_y \eta_y) - V \eta_z. \quad (3.8)$$

Ensuite nous cherchons à transformer le terme d'échange de couches en spin-orbite Rashba et le potentiel de grille en spin-orbite vallée-Zeeman. Pour ce faire nous effectuons une rotations autour de η_z pour échanger x et y , puis nous multiplions le secteur $\tau = -1$ du résultat par η_y . Au total $U_2^\dagger = \frac{1-i\eta_z}{\sqrt{2}} \left(\frac{1+\tau_z}{2} + \frac{1-\tau_z}{2} \eta_y \right)$, ce qui donne

$$H_{BLG}^{(2)} = k_x \tau_z \sigma_x + k_y \sigma_y + \frac{t_\perp}{2} (\tau_z \sigma_x \eta_y - \sigma_y \eta_x) - V \tau_z \eta_z. \quad (3.9)$$

En réinterprétant le degré de liberté de couche du bicouche de graphène comme un degré de liberté de spin, nous obtenons bien le hamiltonien du graphène soumis aux spin-orbite Rashba et vallée-Zeeman avec la correspondance $\lambda_{VZ} = -V$ et $\lambda_R = \frac{t_\perp}{2}$.

La référence [36] qui étudie la limite $V \ll t_\perp \Rightarrow \lambda_{VZ} \ll \lambda_R$ calcule la dispersion des 4 états liés à une paroi de domaine $V(x) = \kappa V_0 \text{sgn}(x)$ avec $t_\perp > 0$, $V_0 > 0$ et $\kappa = \pm 1$:

$$E_{\tau\pm} = \pm \left(\frac{v_F k_y \tau \kappa}{2\sqrt{t_\perp}} \mp \sqrt{\frac{v_F^2 k_y^2}{4t_\perp} + \frac{V_0}{\sqrt{2}}} \right) \mp \sqrt{2}V_0. \quad (3.10)$$

La dispersion passe $E = 0$ aux moments $k_y = \mp \frac{\kappa}{v_F} \sqrt{\frac{t_\perp V_0}{2\sqrt{2}}}$ et le signe de la vélocité est donné par $-\kappa\tau$. Étant donné l'identification $\lambda_{VZ}(x) = -V(x)$, une paroi de domaine avec des valeurs négatives de λ_{VZ} à gauche et positives à droite donne naissance à des états se déplaçant vers les y croissants dans la vallée $\tau = +1$ et vers les y décroissants dans l'autre vallée, ce qui est conforme au théorème de flot spectral.

3.5 | Modèle sur réseau

Jusqu'à présent, nous avons considéré que l'indice de vallée τ était un bon nombre quantique, il nous faut donc vérifier la robustesse de nos résultats avec un modèle sur réseau qui peut générer des couplages inter-vallée. Nous utiliserons donc des méthodes de diagonalisation exactes sur un modèle de liaisons fortes afin d'accomplir deux objectifs :

- Le premier est de confirmer nos prédictions théoriques lorsque la paroi de domaine varie lentement à l'échelle du réseau.
- Le deuxième est d'estimer la robustesse des modes à la diffusion inter-vallée induite par une paroi abrupte à l'échelle atomique.

Le modèle de liaisons fortes considéré est le suivant :

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j \\ & + i \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha, \beta} \lambda_{ij}^{VZ} (-1)^i \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger s_z^{\alpha\beta} c_{j\beta} + H.c. \\ & + i \sum_{\langle ij \rangle, \alpha, \beta} \lambda_{ij}^R \hat{z} \cdot (\vec{d}_{ij} \times \vec{s}^{\alpha\beta}) c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} + H.c., \end{aligned} \quad (3.11)$$

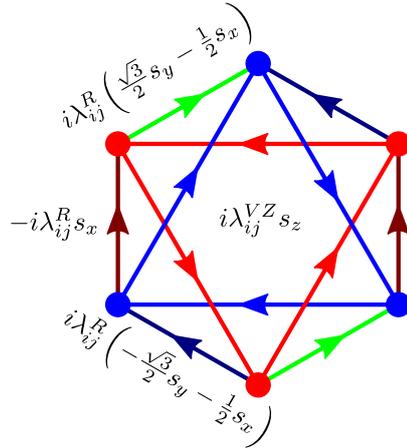


FIGURE 3.3 – Termes de saut du spin-orbite vallée-Zeeman (second voisin) et Rashba (premier voisin).

où $c_{i\alpha}^\dagger$ crée un électron au site i dont le spin S_z vaut $\alpha = \pm$, $(-1)^{l_i} = +(-)$ pour un site du sous-réseau $A(B)$, $\nu_{ij} = \text{sgn}[\hat{z} \cdot (\vec{d}_{ij}^{(1)} \times \vec{d}_{ij}^{(2)})]$ et $\vec{d}_{ij}^{(1)}, \vec{d}_{ij}^{(2)}$ sont les deux liaisons de plus proche voisin formant le chemin $j \rightarrow k \rightarrow i$ où k est le site intermédiaire entre les seconds voisins j, i utilisant la normalisation $|\vec{d}_{ij}| = 1$. Lorsque les couplages sont constants, c'est à dire indépendants des sites i, j , on trouve les relations suivantes avec les paramètres du modèle continu $\lambda_{VZ} = -3\sqrt{3}\lambda_{ij}^{VZ}$ et $\lambda_R = -3\lambda_{ij}^R/2$. On représente les termes de sauts Rashba et vallée-Zeeman dans la Figure 3.3.

Avant de poursuivre, on rappelle que le spin orbite vallée-Zeeman brise les symétries échangeant les sous réseaux du graphène, comme l'inversion et C_6 , mais pas la symétrie miroir $z \rightarrow -z$, préservant ainsi le groupe D_{3h} , alors que le spin orbite Rashba brise cette symétrie miroir et l'inversion mais préserve C_{6v} .

Nous considérons désormais un modèle de graphène sur réseau avec deux domaines. Imposer des conditions périodiques force l'existence de deux parois de domaine, voir 3.6(c). Deux types de parois respectent les symétries cristallographiques du graphène : les parois dites zigzag et « armchair ». Dans la suite, la direction x sera la direction zigzag et y la direction armchair. En préservant l'invariance par translation le long de la paroi de domaine, les deux points de Dirac sont alors projetés sur des moments k_x distincts dans le cas d'une paroi zigzag et ils sont confondus en $k_y = 0$ dans le cas d'une paroi armchair comme illustré dans la figure 3.4. Les effets d'intervallée sont dès lors masqués par une paroi zigzag et nous trouvons les modes prédits dans la limite continue. Nous considérerons donc à partir de maintenant uniquement des parois armchair exposant pleinement les effets de diffusion intervallée sur le réseau. La taille typique l de la paroi permet de

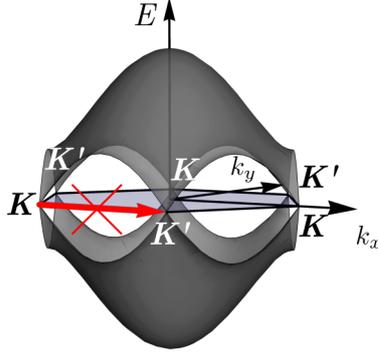


FIGURE 3.4 – Dispersion du graphène dans la première zone de Brillouin. Lorsque l’invariance par translation selon la direction zigzag (ici la direction x) est préservée, deux états de basse énergie de deux vallées distinctes ne peuvent interagir car ils sont projetés sur des moments k_x distincts.

faire varier la douceur de la paroi et donc de contrôler l’amplitude de la diffusion intervallée. On appelle une paroi abrupte lorsque $l \rightarrow 0$ et η (équation 3.2) devient un échelon (voir figure 3.6(a)). Pour une paroi abrupte nous vérifions que la valeur précise des couplages sur les sauts deuxième voisin traversant la paroi n’influent pas sur les caractéristiques principales des modes dans le gap.

Pour satisfaire les conditions aux bords présentées en figure 3.6(c), nous superposons un deuxième profil de paroi (« l’anti-paroi ») éloignée de la première :

$$\eta_{PBC}(\vec{R}_i) \equiv \eta(\vec{R}_i) \cdot \eta(\vec{R}_0 - \vec{R}_i), \quad (3.12)$$

$$\Delta_i \equiv \frac{\Delta_L + \Delta_R}{2} + \frac{\Delta_R - \Delta_L}{2} \eta_{PBC}(\vec{R}_i). \quad (3.13)$$

η est le profil pour une paroi tandis que η_{PBC} est le profil avec deux parois respectant les conditions périodiques aux bords et \vec{R}_0 est un vecteur reliant les deux parois. On appellera paroi celle pour qui Δ_i vaut Δ_L à sa gauche et Δ_R à sa droite et anti-paroi l’autre. Puisque le gap en volume est donné par le plus petit des gaps de domaine, on choisit par simplicité $-\Delta_L = \Delta_R \equiv \Delta$.

Les modes d’une paroi sont alors dégénérés avec les modes de l’autre paroi. Pour lever cette dégénérescence nous introduisons un faible potentiel chimique $\sum_{\alpha} \mu_{\alpha} c_{i\alpha}^{\dagger} c_{i\alpha}$ sur les sites le long d’une paroi de domaine. L’indice de vallée τ est déterminé par la transformée de Fourier des modes, chaque mode étant localisé autour de $\pm K$. Ce procédé est détaillé dans la Figure 3.5.

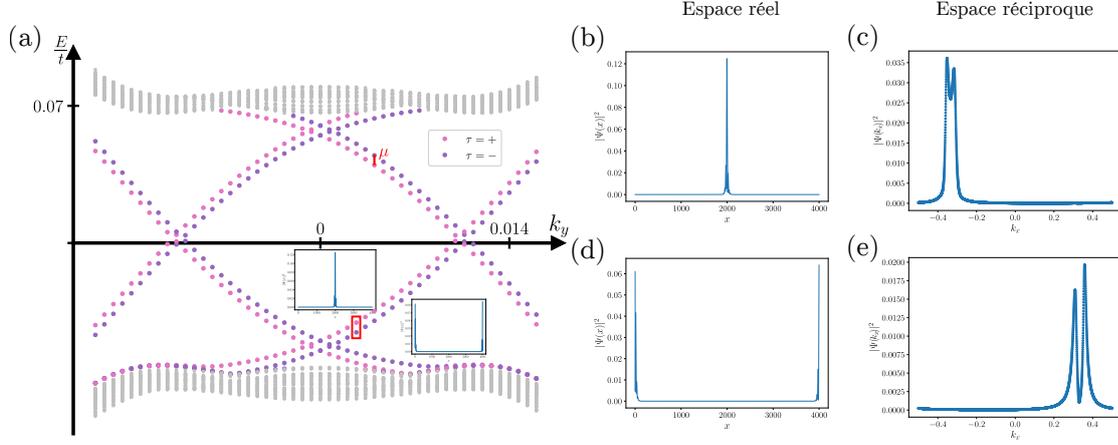


FIGURE 3.5 – (a) Spectre basse énergie d’un système de taille $N_x = 801$ et $N_y = 1000$ avec des conditions aux bords périodiques, un spin-orbite Rashba homogène et un spin-orbite vallée-Zeeman avec deux parois de domaine abruptes au travers desquelles le spin-orbite change de signe. L’amplitude des paramètres de spin-orbite dans chaque domaine vaut $\lambda_{VZ} = \pm 0,1t$ et $\lambda_R = 0,1t$. Un léger potentiel chimique local $\mu = 0,005t$ est ajouté dans une région de 400 sites autour de la paroi ayant une valeur négative de λ_{VZ} à sa gauche et positive à sa droite. L’objectif de ce potentiel local est de lever la dégénérescence entre les modes des deux parois. Nous avons coloré les modes de plus basse énergie en fonction de la vallée autour de laquelle ils sont localisés dans l’espace réciproque, le rose représentant la vallée $+\mathbf{K}$ et le violet $-\mathbf{K}$. Les encarts sont les profils (b) et (d) en espace réel qui correspondent aux deux points encadrés en rouge. L’axe k_y est en unité de $2\pi/a$ (b) Densité de probabilité dans l’espace réel de l’état encadré rose de (a) de la composante de spin $s_z = +1$ et de sous-réseau $\sigma_z = 1$. L’axe x est en unités de site, c’est à dire que $\sqrt{3}a = 1$. (c) Densité de probabilité de la même composante du même état qu’en (b) dans l’espace réciproque. Le changement d’unité replie la zone de Brillouin de telle sorte que $\mathbf{K} = 4\pi/3\sqrt{3}a$ est projeté en $k_x = -1/3$ et $-\mathbf{K}$ en $k_x = +1/3$. La fonction d’onde est donc bien localisée en espace k et on peut lui associer la vallée $+\mathbf{K}$. (d) Densité de probabilité en espace réel de la composante $s_z = 1$ et $\sigma_z = 1$ de l’état encadré violet de (a). (e) Densité de probabilité dans l’espace réciproque de l’état (d). On vérifie bien que cet état se développe dans la vallée $-\mathbf{K}$.

3.6 | Robustesse des états de paroi vallée-Zeeman

Dans la section précédente nous obtenons dans un modèle sur réseau les deux modes de paroi par vallée se propageant dans le même sens au sein d'une même vallée en accord avec la prédiction faite à partir du modèle continu et du TFS. Nous discutons à présent la robustesse de ces modes de paroi en considérant trois manières de les rendre massifs.

Dans un premier temps nous considérons une fermeture du gap. Nous ajoutons un couplage Kane-Mele homogène, qui est un choix naturel étant donné que les trois types de spin-orbite peuvent apparaître dans le graphène sur TMD [13, 15, 16, 11, 12]. Les modes de paroi restent sans gap en présence de λ_{KM} jusqu'à ce que le gap ouvert par λ_{VZ} et λ_R se ferme. La disparition des modes de bord après la fermeture et réouverture du gap s'explique par la disparition du point de dégénérescence. Ce simple effet de compétition entre les gaps (sans paroi de domaine) entre Kane-Mele, vallée-Zeeman et Rashba a déjà été identifié dans les références [62, 9]. Il est important de noter que le TFS ne requiert pas un volume isolant pour stabiliser les modes de paroi puisqu'il ne requiert que l'information comprise au voisinage du point de dégénérescence. En d'autres termes, le gap de volume peut se fermer en un point éloigné de la zone de Brillouin sans affecter les modes de paroi. À l'inverse, les invariants topologiques de volume ne sont plus définis en cas de fermeture du gap. Cette particularité est spécifiquement mise en valeur dans un système de Floquet avec une zone de Brillouin synthétique [67].

Ensuite, nous considérons l'impact de la diffusion intervallée. Nous n'observons aucun gap supérieur à la résolution en énergie de notre modèle de liaisons fortes même pour une paroi de domaine abrupte (voir figure 3.6(b) et comparer au résultat de la limite continue en figure 3.1(b)). Il s'agit cependant d'une conséquence de la faible diffusion intervallée induite par le spin-orbite qui sera détaillée dans la prochaine partie dans la section 7.2. Ainsi, bien qu'une paroi de domaine abrupte à l'échelle atomique possède de larges coefficients de Fourier intervallées, ceux-ci sont atténués par un préfacteur géométrique du couplage spin-orbite. Nous confirmons que les modes de parois peuvent être rendus massifs en ajoutant des impuretés atomiques suffisamment fortes. Cette robustesse est donc purement paramétrique.

Enfin, nous brisons la symétrie par translation le long de la paroi de domaine, c'est-à-dire nous détruisons la conservation de k_y dans le cas de la paroi armchair. Nous ajoutons à notre modèle une composante aléatoire au profil de paroi dans des régions finies centrées sur chaque paroi de domaine. Nous observons que même pour un écart-type du désordre de même amplitude que le terme de masse dans chaque domaine, la densité d'états à l'intérieur du gap de volume reste la même que pour une paroi propre (voir Figure 3.7). Les modes ne sont donc pas sensibles à la brisure de symétrie par translation le long de la paroi.

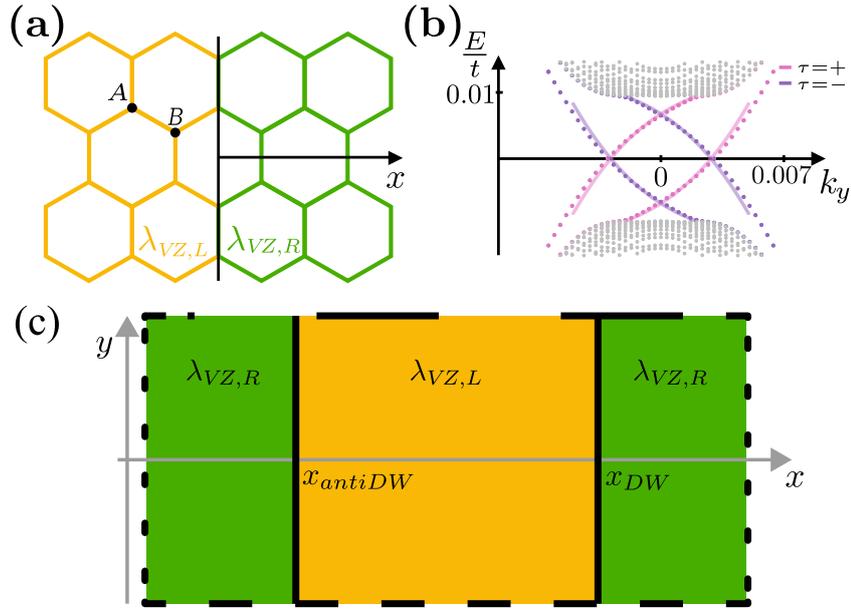


FIGURE 3.6 – Modes de paroi vallée-Zeeman (VZ) et robustesse sur le réseau. (a) Un profil de paroi armchair abrupt à l'échelle atomique. (b) Spectre du modèle de liaisons fortes pour le système esquissé en (c) avec pour paramètres $N_x = 801$, $N_y = 2000$, $\lambda_{VZ}(\pm\infty) = \pm 0,01t$ et $\lambda_R = 0,1t$. Nous ne colorons que les modes intragap localisés autour de x_{DW} (voir (c)) et la couleur violette/rose représente l'indice de vallée K/K' (les deux vallées sont projetées sur $k_y = 0$ sur le réseau). La dispersion des modes coïncide avec le spectre d'une paroi dans le potentiel de grille du bicouche de graphène (lignes pleines; voir texte). (c) Schéma du réseau avec des conditions aux bords périodiques. Les deux bords en tirets sont identifiés et de même pour les bords en pointillés. Par conséquent, une paroi en x_{DW} nécessite une « anti-paroi » d'orientation opposée en x_{antiDW} .

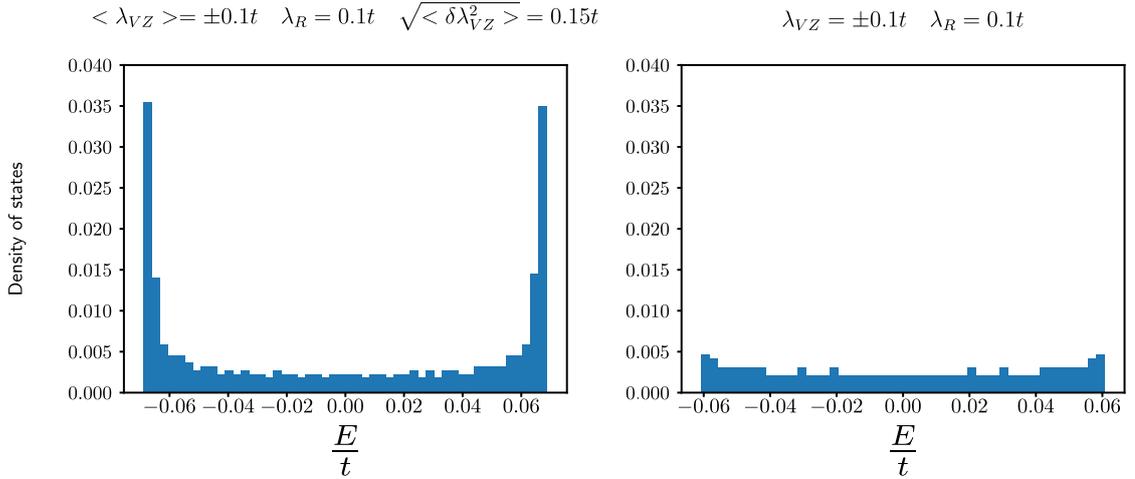


FIGURE 3.7 – À gauche : Densité d'états à basse énergie d'un système pleinement 2D avec des parois de domaine VZ armchair avec des conditions aux bords périodiques. La séparation entre les deux parois est de 100 sites et le gap en volume est de $\Delta_{SOC} = 0,14t$. De plus on superpose une bande de désordre gaussien dans le spin-orbite VZ à chaque paroi dont la déviation standard vaut $0,15t$. La densité d'états à basse énergie est identique à celle du système sans désordre présenté à droite.

Nous terminons cette section par une comparaison détaillée de nos modes de paroi VZ et les modes de bord zigzag du graphène précédemment associés à λ_{VZ} dans l'effet Hall quantique de spin et vallée (QVSHS) et étudiés par Frank *et al.* dans la référence [62]. Le modèle en volume homogène utilisé est identique au notre lorsque les spin-orbite étudiés sont vallée-Zeeman et Rashba.

Il est important de noter que deux types de modes sont révélés dans la référence [62], voir panneau de droite de la Figure 3.8 : (1) Des modes « pseudohélicoïdaux » connectant les deux vallées et qui sont au cœur des préoccupations de l'article mais qui ne nous concernent pas, et (2) des modes locaux en vallée que nous détaillons plus avant. Nous considérons des bords et parois zigzag pour éliminer la diffusion intervallée et nous concentrons sur la protection topologique à indice de vallée τ fixé. Le TFS prédit 2 modes par paroi de domaine dans chaque vallée grâce à $|C_{interface}^\tau| = 2$, tandis que le QVSHS a un mode intravallée par bord dans chaque vallée à cause du (topologiquement mal défini) nombre de Chern de vallée $|C_v| = 1$ [62, 13, 63]. Pour montrer les différents degrés de protection, nous ajoutons une dépendance paramétrique aux termes de saut traversant une paroi de domaine de telle sorte que nous puissions interpoler continûment entre un système avec deux parois de domaine zigzag (séparant deux domaines dans un réseau périodique) et un système avec quatre bords zigzag (lorsque les deux domaines deviennent

déconnectés) en Figure 3.8. L'étude de Frank *et al.* [62] correspond donc au cas $p = 0$. Nous trouvons que les quatre modes intravallée de bord QVSHS évoluent en les quatre modes de paroi. Les modes de bords pseudohélicaux du QVSHS connectent les deux vallées et ne peuvent donc être comparés à nos modes de paroi, et en effet ces modes rejoignent les modes de volume lorsque les bords sont connectés. Surprenamment, un gap s'ouvre dans les modes QVSHS lorsque le rapport λ_R/λ_{VZ} devient trop important (en accord avec la référence [62]), bien que cela ne change pas la topologie des bandes comme on peut le voir dans la Figure 3.9. Au contraire, les modes de paroi persistent sans gap, comme prédit par le TFS et $C_{interface}^T$, pour toute valeur $\lambda_R \neq 0$. Étant donné l'équivalence avec le bicouche de graphène démontrée en 3.4, les travaux de Li *et al.* dans [51] avait déjà révélé la fragilité de ces modes de bord en considérant des bords zigzag ou zigzag barbus différents pour chaque couche, trouvant alors 0,1 ou 2 modes locaux en vallée par bord par vallée. Cependant, nous identifions leur degré de liberté de couche à notre indice de spin. Ainsi, les bords naturels de notre modèle sont nécessairement identiques pour les deux secteurs de spin. Dans ces deux cas, chaque bord héberge 1 mode par vallée, d'où notre choix de montrer la fragilité de ces modes en faisant varier l'amplitude du spin-orbite Rashba.

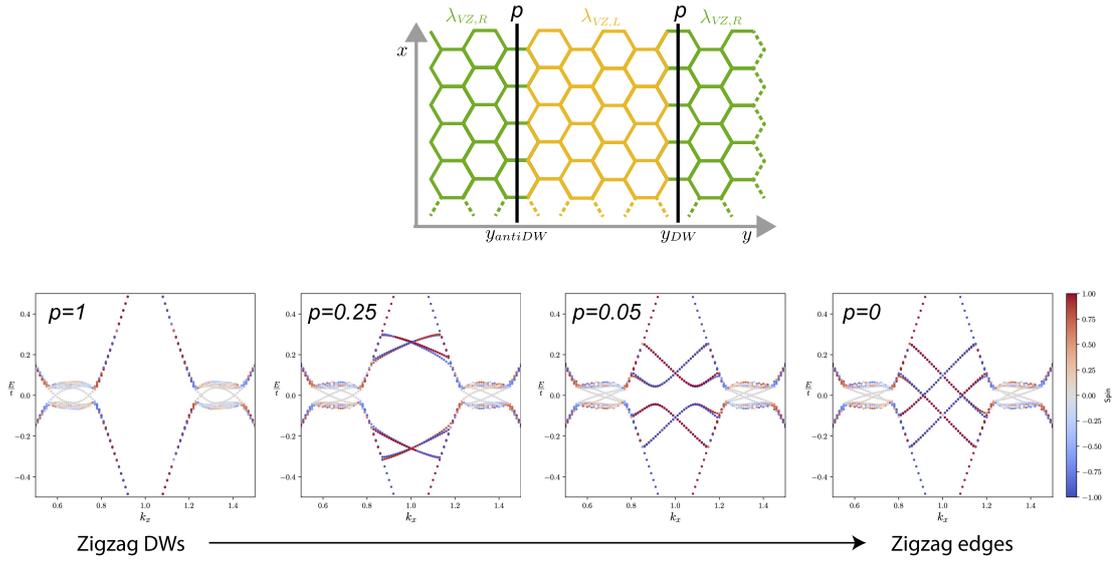


FIGURE 3.8 – (En haut) Modèle de liaisons fortes avec deux domaines de spin-orbite vallée-Zeeman et un spin-orbite Rashba homogène et des conditions aux bords périodiques (lignes pointillées). Les domaines sont en contact le long de chaînes zigzag (pas de diffusion intervallée). Tous les sauts (premier ou deuxième voisin) qui traversent les lignes noires sont pondérés par p . (En bas) Spectre pour des systèmes de grande taille construits comme le modèle montré en haut. La valeur de p décroît de gauche à droite de telle sorte que le panneau de droite représente deux domaines séparés ayant chacun deux bords zigzag. La couleur représente la valeur moyenne du spin s_z . Les modes pseudohélicoïdaux (intervallée) mis en évidence par Frank *et al.* disparaissent sur les parois de domaine. Les modes « locaux en vallée » évoluent continûment mais alors que les modes de parois sont protégés par $C_{interface}$, les modes de bord ne le sont pas.

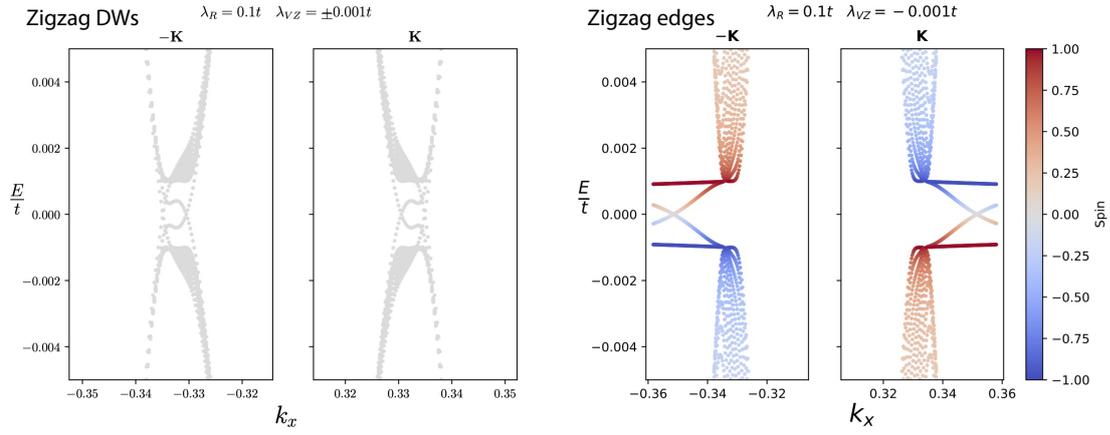


FIGURE 3.9 – Spectres d’un modèle de liaisons fortes avec deux domaines VZ comme dans la Figure 3.8 avec pour seule différence que l’amplitude du spin-orbite Rashba est augmentée. La couleur représente toujours la valeur moyenne du spin. (À gauche) Parois de domaine zigzag, c’est à dire le système le plus à gauche de la Figure 3.8 ($p = 1$). (À droite) Bords zigzag, c’est à dire système le plus à droite de la figure 3.8 ($p = 0$). Les modes localisés en vallée des parois persistent, protégés par $C_{interface}^\tau$ tandis que ceux de bords disparaissent. Les seuls modes de bord restants relient les deux vallées et ne nous intéressent pas car ils n’apparaissent pas sur les parois de domaine.

Chapitre 4

Parois de domaine dans les autres termes

Dans ce chapitre on s'intéresse aux propriétés non topologiques des parois de domaine. Dans un premier temps, étant donné que nous nous intéressons à tous les modes qui apparaissent à l'intérieur du gap de volume de notre système, en plus des états métalliques topologiquement protégés, nous observons également des états excités massifs si la paroi de domaine devient suffisamment lisse [68, 69]. Bien que non topologiques, ces modes sont une conséquence du caractère lisse de la paroi et on peut s'attendre à ce qu'ils apparaissent de manière générique.

Ensuite, ayant identifié la diffusion intervallée comme brisant les propriétés topologiques, on cherche à quantifier son effet en calculant le gap des états de paroi d'une paroi de domaine de masse abrupte.

Les modes de paroi du spin-orbit Kane-Mele étant protégés par un nombre de Chern de spin de volume nécessitant la conservation de s_z dans le cas où la paroi sépare deux domaines QSH, on cherche à confectionner une paroi changeant le signe du paramètre Kane-Mele brisant la conservation de s_z . Une possibilité est alors de faire tourner l'axe de spin privilégié du spin-orbite Kane-Mele autour de la direction perpendiculaire à la paroi. On verra alors que seuls des effets standards de diffusion sont à prendre en compte et que l'effet de la spirale de spin-orbite est de fermer le gap.

Enfin on montrera à l'aide du théorème de flot spectral qu'au vu des termes de spin-orbite considérés, seuls les parois de domaine mentionnées dans les chapitres précédents donnent lieu à des états de bord topologiques au sein d'un gap de volume.

Pour traiter les inhomogénéités nous utilisons le modèle continu à basse énergie du graphène (sauf pour calculer le gap de la paroi dans la masse Semenoff). Comme dans le chapitre précédent, nous comparons alors nos résultats à un modèle de liaisons fortes diagonalisé numériquement. Le hamiltonien de liaisons fortes contenant tous les termes présentés en introduction est alors le suivant :

$$\begin{aligned}
H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + \sum_{i,\alpha} (-1)^{l_i} m_i c_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} \\
& + i \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha, \beta} \lambda_{ij}^{KM} \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger s_z^{\alpha\beta} c_{j\beta} + H.c. \\
& + i \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha, \beta} \lambda_{ij}^{VZ} (-1)^{l_i} \nu_{ij} c_{i\alpha}^\dagger s_z^{\alpha\beta} c_{j\beta} + H.c. \\
& + i \sum_{\langle ij \rangle, \alpha, \beta} \lambda_{ij}^R \hat{z} \cdot (\vec{d}_{ij} \times \vec{s}^{\alpha\beta}) c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} + H.c.
\end{aligned} \tag{4.1}$$

où $c_{i\alpha}^\dagger$ crée un électron au site i dont le spin S_z vaut $\alpha = \pm$, $S_z^{\alpha,\beta}$ sont les éléments de la matrice de Pauli S_z agissant dans l'espace des spin, $(-1)^{l_i} = +(-)$ pour un site du sous-réseau $A(B)$, $\nu_{ij} = \text{sgn}[\hat{z} \cdot (\vec{d}_{ij}^{(1)} \times \vec{d}_{ij}^{(2)})]$ et $\vec{d}_{ij}^{(1)}, \vec{d}_{ij}^{(2)}$ sont les deux liaisons de plus proche voisin formant le chemin $j \rightarrow k \rightarrow i$ entre les second voisins j, i passant par le site intermédiaire k , avec la normalisation $|\vec{d}_{ij}| = 1$. La correspondance entre les termes de saut et les paramètres du modèle continu 3.1 lorsque tous les termes sont homogènes est la suivante $m_i = m$, $\lambda_{KM} = -3\sqrt{3}\lambda_{ij}^{KM}$, $\lambda_{VZ} = -3\sqrt{3}\lambda_{ij}^{VZ}$ et $\lambda_R = -3\lambda_{ij}^R/2$.

4.1 | États excités de paroi de domaine Kane-Mele

La physique des parois de domaine dans le spin-orbite Kane-Mele peut être intégralement comprise à l'aide de la correspondance bord-volume présentée en introduction. Nous avons cependant également vu dans la section 2.4, que le formalisme du théorème de flot spectral saisit également la physique à l'œuvre. On peut noter que cette capacité prédictive n'est pas évidente à première vue car l'invariant de volume \mathbb{Z}_2 prédit une paire d'états hélicoïdaux alors que le théorème de flot spectral prédit des états chiraux. Pour le spin-orbite Kane-Mele dans la limite de cônes découplés, la préservation du spin S_z permet de décomposer les paires hélicoïdales en états chiraux de secteurs de spin et de vallée bien définis.

Dans cette section, partant du principe que les termes intervallés n'affectent pas la physique des états de bord, nous cherchons à obtenir des résultats plus précis sur la dispersion des états excités non protégés par la topologie qui apparaissent si la paroi a un profil suffisamment lisse. Dans ce cas on peut approximer linéairement autour du zéro le profil de spin-orbite. On rappelle le hamiltonien dans la limite continue du graphène avec un couplage Kane-Mele et une masse Semenoff :

$$\mathcal{H} = -iv_F \partial_x \tau_z \sigma_x + v_F k_y \sigma_y + \lambda(x) \tau_z s_z \sigma_z + m(x) \sigma_z . \tag{4.2}$$

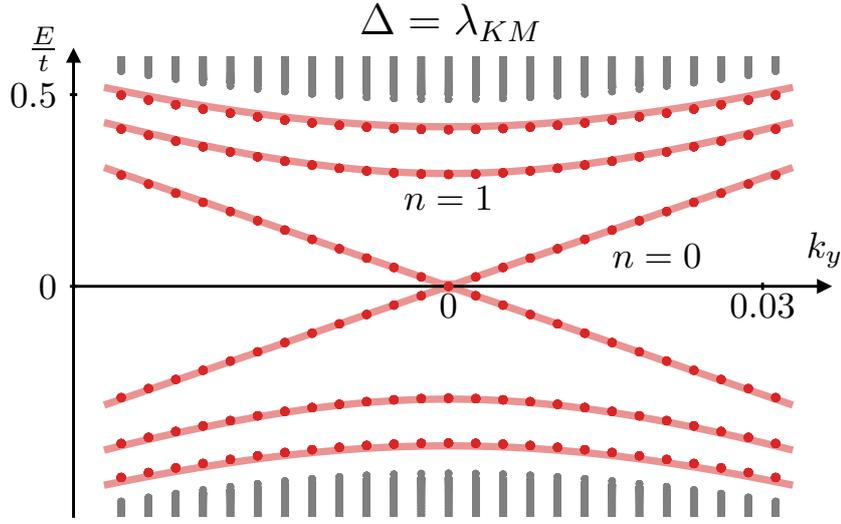


FIGURE 4.1 – États excités d’une paroi de domaine changeant le signe du spin-orbite Kane-Mele, $\lambda_{KM}(+\infty) \equiv -\lambda_{KM}(-\infty)$, comparés sur réseau et dans le continu. Le modèle de liaisons fortes (points rouges) a pour paramètre $|\lambda_{KM}(+\infty)| = 0,5t$ et une largeur de paroi $l = 20$ sites et concorde avec la solution analytique du modèle continu (lignes rouges). La solution analytique du spectre à $k_y = 0$ correspond aux niveaux de Landau dans le graphène sans spin avec un champ magnétique effectif $B_{eff} \propto \frac{1}{v_F} \left. \frac{d\lambda_{KM}}{dx} \right|_{x_0}$ donné par la pente du profil de la paroi à $\lambda_{KM}(x_0) = 0$.

Comme pour le calcul du TFS, s_z et τ_z sont préservés. On définit $\Delta_{\xi,s}(x) = m(x) + \xi s^z \lambda(x)$ où ξ et s^z sont les valeurs propres respectives de τ_z et s_z . Ainsi, le hamiltonien se réécrit dans chaque secteur :

$$\mathcal{H} = -iv_F \partial_x \tau_z \sigma_x + v_F k_y \sigma_y + \Delta(x) \sigma_z . \quad (4.3)$$

On linéarise Δ

$$\Delta = \left. \frac{d\Delta(x)}{dx} \right|_{x_0} (x - x_0) = \frac{\Delta_0}{l} (x - x_0), \quad (4.4)$$

où x_0 est la position où Δ s'annule. La pente de Δ est scindée pour plus de clarté en une énergie typique Δ_0 qui caractérise la différence entre les deux domaines et une longueur caractéristiques l de la paroi de domaine. Concentrons nous d'abord sur le cas $k_y = 0$. En prenant le carré de cet opérateur, on obtient le hamiltonien d'un oscillateur harmonique et un terme homogène :

$$\mathcal{H}^2 = -v_F^2 \partial_x^2 + \frac{\Delta_0^2}{l^2} (x - x_0)^2 - v_F \frac{\xi \Delta_0}{l} \sigma_y . \quad (4.5)$$

Les énergies propres de la partie oscillateur harmonique sont alors $2v_F |\Delta_0/l| (n + 1/2)$ avec n un entier positif. Le dernier terme de l'équation 4.5 déplace alors précisément ces énergies à $2v_F |\Delta_0/l| n$ et $2v_F |\Delta_0/l| (n + 1)$. En particulier, le sous-espace d'énergie nulle n'est pas dégénéré au contraire des autres énergies qui sont deux fois dégénérées et qui contiennent des vecteurs propres pour les deux valeurs propres de σ_y . Par conséquent, l'état d'énergie nulle est aussi état propre de σ_y et a pour valeur propre $\xi \text{sgn}(\Delta_0)$. Bien évidemment, si $m + \xi s^z \lambda$ change de signe, alors $m + (-\xi)(-s^z)\lambda$ change également de signe.

De plus, étant donné que $\mathcal{H}^2 = \mathcal{H}^2(k_y = 0) + v_F^2 k_y^2$, l'état d'énergie nulle de $\mathcal{H}(k_y = 0)$ est état propre de \mathcal{H} et a pour valeur propre $\sigma_y v_F k_y$ où σ_y est identifié à sa valeur propre. On récapitule les chiralités des différents modes dans le tableau suivant :

$m + \lambda$		$m - \lambda$	
$\Delta_0 > 0$	$\Delta_0 < 0$	$\Delta_0 > 0$	$\Delta_0 < 0$
+ \uparrow RM	- \downarrow RM	+ \downarrow RM	- \uparrow RM
- \downarrow LM	+ \uparrow LM	- \uparrow LM	+ \downarrow LM

La première ligne indique quel terme change de signe tandis que \pm est la valeur de ξ , $\uparrow\downarrow$ la valeur de s^z et RM (LM) est l'acronyme de « Right Mover » (« Left Mover ») qui indique que l'état se propage dans le sens des y croissants (décroissants). Les différentes transitions sont résumées dans le diagramme de classification des parois de domaine 2.4. Pour une paroi entre un domaine trivial et un domaine

QSH, seule une des deux quantités $m + \lambda$ ou $m - \lambda$ change de signe. Nous retrouvons alors les modes de bord standards pour lesquels le sens du mouvement, le spin et la vallée sont corrélés. Si les deux termes changent de signe, alors la paroi sépare deux domaines triviaux ou QSH. Si elle sépare deux domaines triviaux, alors $m + \lambda$ et $m - \lambda$ ont le même signe. Chaque spin est alors présent dans chaque vallée mais vallée et sens du mouvement sont toujours corrélés. Si elle sépare deux domaines QSH, alors $m + \lambda$ et $m - \lambda$ ont des signes opposés. Le sens du mouvement est alors uniquement corrélé avec le spin.

La solution explicite est donc bien en accord avec les résultats de topologie standards et le TFS.

Revenons aux modes excités. Ils sont visibles si leur énergie est comprise dans le gap d'énergie des deux domaines. Pour une paroi de domaine symétrique, par exemple lorsque m ou λ est nul, on aura usuellement $\Delta_0 = \Delta(+\infty) - \Delta(-\infty) = 2\Delta(+\infty)$. On peut donc estimer le nombre d'états à l'intérieur du gap à $n_{max} \sim \frac{|\Delta(\pm\infty)| l}{t a}$.

Pour interpréter ces modes excités, il est intéressant de noter qu'à $k_y = 0$ leur spectre est identique aux niveaux de Landau du graphène sans spin avec un champ magnétique effectif $v_F \Delta_0 / l$. Cela reflète le fait que dans notre modèle linéarisé $\Delta(x)\sigma_z \propto x\sigma_z$ (on omet s_z et τ_z qui sont conservés) tandis que pour le graphène soumis à un champ magnétique, nous avons dans la jauge de Landau $A_y(x)\sigma_y \propto x\sigma_y$. Le terme cinétique est $-i\partial_x\sigma_x$ dans les deux modèles et les relations d'anticommutation étant les mêmes, le spectre obtenu est identique. Cependant, les niveaux de Landau restent plats dans toute la zone de Brillouin à l'inverse de nos modes de parois qui dispersent sous la forme $\propto \sqrt{\text{const} + q_y^2}$ et sont donc similaires aux états de Volkov-Pankratov qui sont des états de bords excités massifs dérivés d'une équation de Dirac et possédant une relation de dispersion de la forme $\propto \sqrt{\text{const} + k^2}$. [68]

4.2 | Paroi de domaine de masse Semenoff

Les modèles continus prédisent 4 modes dans le gap avec chaque spin présent dans chaque vallée. Nous considérons ici une paroi de domaine de type armchair et nous calculons perturbativement les effets d'intervallée. Notre espace-propre initial est l'espace de dimension 4 (8 avec le spin) des états d'énergie nulle du graphène et nous considérons la paroi de domaine comme une perturbation.

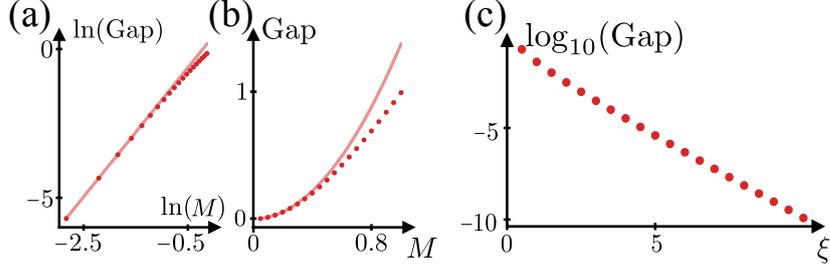


FIGURE 4.2 – Diffusion intervallée dans un modèle de liaisons fortes avec une paroi de domaine armchair changeant le signe de la masse Semenoff. Les paramètres utilisés sont $N_x = 204$, $N_y = 500$ et $m(\pm\infty) = \pm 0, 1t$. (a), (b) L'amplitude du gap à $k_y = 0$ ouvert dans les modes de parois polarisés en vallée dû à la diffusion intervallée sur une paroi abrupte à l'échelle atomique. Les points représentent la valeur mesurée dans le modèle sur réseau et les traits pleins la valeur dérivée perturbativement en fonction de $M \equiv |m(x \rightarrow \pm\infty)/t|$ en échelle log-log en (a) et lin-lin en (b). (c) Décroissance exponentielle du gap des modes de paroi (en unité de t) en fonction de l'épaisseur de la paroi (en unité du paramètre de maille).

$$H_{\text{Semenoff}} = \sum_{\beta=0}^{\frac{N_y}{2}-1} \sum_{\alpha=0}^{N_x-1} m_{\alpha} (c_{\alpha\beta,A1}^{\dagger} c_{\alpha\beta,A1} + c_{\alpha\beta,A2}^{\dagger} c_{\alpha\beta,A2} - c_{\alpha\beta,B1}^{\dagger} c_{\alpha\beta,B1} - c_{\alpha\beta,B2}^{\dagger} c_{\alpha\beta,B2}) \quad (4.6)$$

$$\text{où } m_{\alpha} = \begin{cases} +m & \text{si } \alpha < \frac{N_x}{2} \\ -m & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.7)$$

Nous utilisons ici une cellule-unité élargie comprenant 4 atomes qui appartiennent à deux cellules-unité élémentaires voisines pour obtenir un réseau orthorhombique. Nous utilisons les nombres $\{1, 2\}$ pour étiqueter ce degré de liberté interne. Cela replie la zone de Brillouin hexagonale en un rectangle où $\pm\mathbf{K}$ sont envoyés sur $\mp 2\pi/(3\sqrt{3}a)$. La première étape est de calculer les éléments de matrice du terme de masse dans l'espace de Fourier.

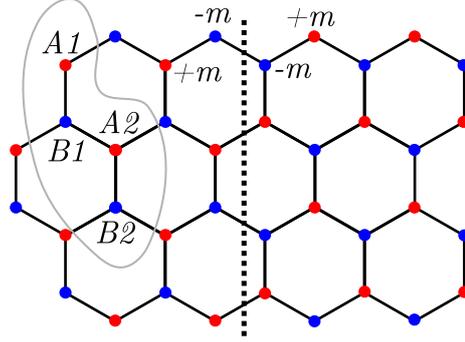


FIGURE 4.3 – Représentation schématique du hamiltonien de l'équation 4.6. Il s'agit d'une masse Semenoff changeant de signe au travers d'une paroi armchair. Pour avoir une cellule-unité rectangulaire, on utilise une cellule-unité élargie associant deux cellule-unité élémentaires contiguës.

$$\begin{aligned}
 H_{\text{Semenoff}} = \sum_{k_y=0}^{\frac{N_y}{2}-1} \sum_{\substack{k_1=0 \\ k_2=0 \\ k_1-k_2 \equiv 1[2]}}^{N_x-1} \frac{m}{N_x} \frac{4}{1 - e^{2i\pi \frac{(k_1-k_2)}{N_x}}} (c_{k_1 k_y, A1}^\dagger c_{k_2 k_y, A1} + c_{k_1 k_y, A2}^\dagger c_{k_2 k_y, A2} \\
 - c_{k_1 k_y, B1}^\dagger c_{k_2 k_y, B1} - c_{k_1 k_y, B2}^\dagger c_{k_2 k_y, B2})
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Les détails de la dérivation sont donné en annexe. Étant donné que nous considérons une paroi de domaine abrupte et des domaines symétriques, seuls les états ayant une différence de moments impaire sont couplés. Par conséquent, il n'y a aucune contribution au premier ordre de la masse sur les points de Dirac, nous poussons donc le calcul au deuxième ordre. Nous utilisons l'approximation linéaire pour les états basse énergie du graphène.

On obtient alors le hamiltonien effectif suivant dans la base $\{|A, \mathbf{K}\rangle, |B, \mathbf{K}\rangle, |A, -\mathbf{K}\rangle, |B, -\mathbf{K}\rangle\}$:

$$H^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \kappa^* \\ 0 & 0 & \kappa^* & 0 \\ 0 & \kappa & 0 & 0 \\ \kappa & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (\Re(\kappa)\tau_x + \Im(\kappa)\tau_y)\sigma_x, \quad (4.9)$$

où

$$\kappa = \frac{16m^2}{N_x^2} \sum_{p \in \mathbb{Z}} \frac{1}{(1 - e^{2i\pi \frac{2p+1}{N_x}})(j - e^{-2i\pi \frac{2p+1}{N_x}})} \frac{1}{v_x(2p+1)}, \quad (4.10)$$

$$v_x = \frac{\sqrt{3}\pi}{N_x} \quad (4.11)$$

$$j = \exp(2i\pi/3). \quad (4.12)$$

Les énergies propres de ce hamiltonien sont donc $\pm|\kappa|$. Pour calculer κ , nous supposons que la série est dominée par ses premiers termes dans la limite $N_x \rightarrow \infty$ et nous développons les exponentielles en puissance de p/N_x .

$$\kappa \approx \frac{16m^2}{N_x^2} \sum_{p \in \mathbb{Z}} \frac{1}{2i\pi \frac{2p+1}{N_x} (1 - j - 2i\pi \frac{2p+1}{N_x})} \frac{1}{v_x(2p+1)}. \quad (4.13)$$

Le terme de la série croît asymptotiquement comme N_x^2 , donc le seul terme pertinent qui survivra au préfacteur $\frac{1}{N_x^2}$ est uniquement le terme en N_x^2 de la série. Donc seul le premier ordre de l'expansion en $\frac{p}{N_x}$ est nécessaire pour la limite thermodynamique. On obtient alors

$$\kappa \approx \frac{16m^2}{(1-j)N_x^2} \sum_{p \in \mathbb{Z}} \frac{N_x^2}{2\sqrt{3}i\pi^2(2p+1)^2} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{8m^2}{i(1-j)\sqrt{3}\pi^2} \sum_{p \in \mathbb{Z}} \frac{1}{(2p+1)^2} = \frac{8m^2}{i(1-j)\sqrt{3}\pi^2} 2 \frac{\pi^2}{8} \\ &= -\frac{2m^2}{\sqrt{3}(1-j)} i. \end{aligned} \quad (4.15)$$

On obtient donc finalement

$$|\kappa| = \frac{2m^2}{3}. \quad (4.16)$$

On compare alors la valeur $2|\kappa|$ au gap obtenu par diagonalisation exacte du modèle de liaisons fortes dans les figures 4.2(a) et (b).

Enfin, si au lieu de considérer une paroi de domaine abrupte, on considère une paroi lisse, le gap est drastiquement réduit comme on peut le voir en figure 4.2(c). Dans cette figure, la paroi lisse est obtenue par convolution d'une paroi abrupte (fonction échelon) avec une gaussienne de largeur ξ . La chute de la valeur du gap est cohérente avec notre analyse du gap en tant que conséquence des couplages intervallée. En effet, plus la paroi est lisse, c'est à dire plus sa longueur caractéristique augmente, plus sa transformée de Fourier est étroite dans l'espace réciproque.

4.3 | Paroi de domaine spirale dans le spin-orbite Kane-Mele

Une paroi de domaine Kane-Mele peut induire des modes robustes (sur le bord d'un isolant topologique, par exemple entre un domaine où le couplage Kane-Mele domine et un autre où la masse Semenoff domine) ou bien des modes protégés par la conservation de la composante privilégiée du spin du spin-orbite Kane-Mele (par exemple un changement de signe du paramètre Kane-Mele). Il est alors naturel de se demander s'il est possible d'avoir une paroi de domaine qui brise la conservation de s_z à dessein mais dont les modes ne sont pas équivalents aux modes de bord d'un isolant topologique. Une idée naturelle serait une paroi au travers de laquelle la direction privilégiée du spin-orbite Kane-Mele tourne. Par ailleurs, la correspondance entre un champ magnétique en spirale et un spin-orbite homogène a été fructueuse pour la conception de modes topologiques [70, 71], il est donc naturel de se demander quels sont les modes associés à une spirale de spin-orbite.

Le modèle de liaisons fortes présenté en figure 4.4(a) se divise en deux domaines avec une direction du spin Kane-Mele bien définie, c'est-à-dire $H_{KM,rot}(x \rightarrow \pm\infty) = \lambda\tau_z\sigma_z\hat{e}_z \cdot \hat{R}(\theta_{R/L})\vec{s}$, où $\hat{R}(\theta)$ est une matrice de rotation agissant sur le vecteur de spin. La paroi de domaine entre les deux a une largeur ξ au travers de laquelle l'axe du spin tourne d'un angle linéaire en x . Le hamiltonien de spin-orbite s'écrit alors

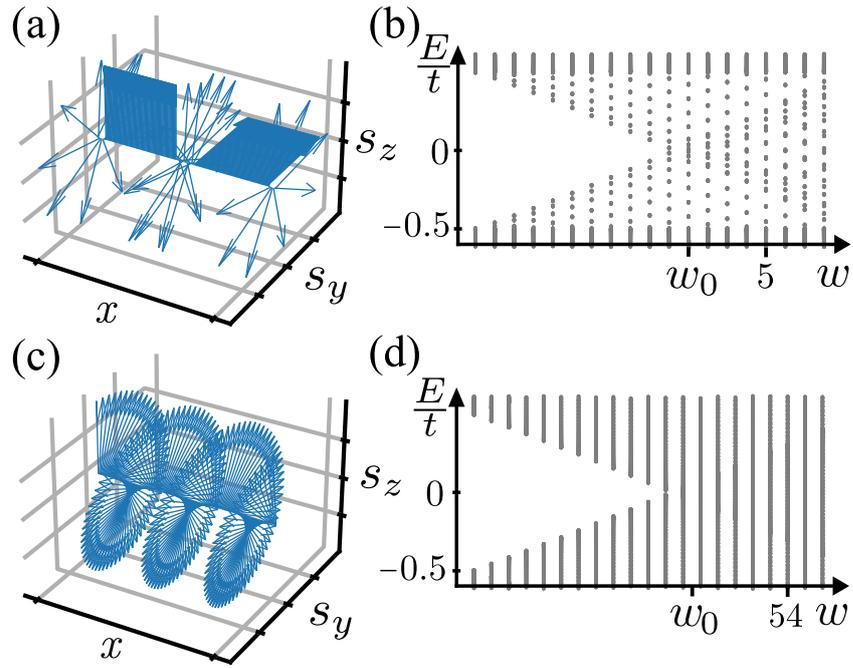


FIGURE 4.4 – Paroi de domaine en spirale pour le spin-orbite Kane-Mele. (a) Les flèches indiquent la rotation de l'axe du spin à l'intérieur de la paroi de domaine de largeur $\xi = 20$ sites (voir texte). Il y a deux domaines dans un système périodique de taille $N_x = 204$ sites. (b) États de faible énergie à $k_y = 0$ pour une paroi de domaine en spirale de Kane-Mele d'amplitude $|\vec{\lambda}| = 0,5t$. La prédiction du point de fermeture du gap est w_0 (voir texte). (c, d) Comme (a, b) mais pour une spirale s'étendant dans l'intégralité du volume du système.

$$\mathcal{H}_{spir,L/R} = \lambda \tau_z \sigma_z \begin{pmatrix} 0 \\ \sin(\theta_{L/R}) \\ \cos(\theta_{L/R}) \end{pmatrix} \cdot \vec{s} = \lambda \exp(i\theta_{L/R}s_x) \tau_z \sigma_z s_z \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{spir,DW} &= \lambda \tau_z \sigma_z \begin{pmatrix} 0 \\ \sin(2\pi wx/\xi + \theta_L) \\ \cos(2\pi wx/\xi + \theta_L) \end{pmatrix} \cdot \vec{s} \\ &= \lambda \exp((2i\pi wx/\xi + \theta_L)s_x) \tau_z \sigma_z s_z, \end{aligned} \quad (4.18)$$

où $\mathcal{H}_{spir,L}$ est utilisé si $x < 0$, $\mathcal{H}_{spir,R}$ est utilisé si $x > \xi$ et $\mathcal{H}_{spir,DW}$ est utilisé si $0 < x < \xi$. Le nombre d'enroulement w de la paroi compte le nombre de révolutions de l'axe du spin autour de l'axe x au travers de la paroi de telle sorte que $2\pi w \equiv \theta_R - \theta_L [2\pi]$. Il est toujours possible d'opérer une rotation globale autour de s_x afin d'envoyer θ_L à 0. Dans la figure 4.4(a) chaque flèche montre la direction locale de l'axe du spin $\hat{R}(\theta(x))\vec{s}$ en fonction de la coordonnée x . Nous utilisons des conditions aux bords périodiques nécessitant la présence d'une anti-paroi de domaine ayant un nombre d'enroulement opposé (voir figures 4.4(a) et 3.6(c)).

Comme le montre la figure 4.4(b), nous ne trouvons pas de modes de paroi mais une fermeture linéaire en le moment de la spirale du gap. Étant donné que le spectre dépend uniquement des paramètres de la paroi et pas de ceux des domaines, il s'agit très probablement d'un simple effet de diffusion. Nous nous concentrons maintenant sur la spirale en elle même en considérant un hamiltonien spiralé dans tout le volume (voir figure 4.4(c)) :

$$\mathcal{H}_{KM,bulk} = \lambda \tau_z \sigma_z \begin{pmatrix} 0 \\ \sin(k_0 x) \\ \cos(k_0 x) \end{pmatrix} \cdot \vec{s} = \lambda \exp(ik_0 x s_x) \tau_z \sigma_z s_z. \quad (4.19)$$

Nous défaisons la rotation de la spirale avec la transformation unitaire suivante : $U = \exp(-i\frac{k_0}{2} x s_x)$. $\mathcal{H}_{KM,bulk}$ est donc envoyé sur un spin-orbite Kane-Mele constant d'amplitude λ . Le terme cinétique du graphène est alors décalé d'un potentiel de jauge SU(2) dirigé selon x :

$$U \mathcal{H}_{tot,bulk} U^\dagger = -v_F \left(\tau_z \sigma_x \left(q_x + s_x \frac{k_0}{2} \right) + \sigma_y q_y \right) + \lambda \tau_z \sigma_z s_z. \quad (4.20)$$

On constate que la spirale de Kane-Mele induit un potentiel magnétique constant dépendant du spin. Étant donné que le hamiltonien possède toujours une symétrie chirale ($\sigma_z s_x$), on peut aisément obtenir le spectre en élevant le hamiltonien au carré.

$$\text{Sp}(\mathcal{H}_{tot,bulk}^2) = \left\{ \left(v_F \frac{k_0}{2} \pm \sqrt{\lambda^2 + v_F^2 q_x^2} \right)^2 + v_F^2 q_y^2 \right\}. \quad (4.21)$$

Le gap est donc réduit car la bande de valence et la bande de conduction bougent dans des directions opposées linéairement avec le moment de la spirale k_0 . Il y a alors deux phases selon la valeur de k_0 . Si $|k_0| < \frac{2|\lambda|}{v_F}$, le système a un gap à $(q_x, q_y) = (0, 0)$ et celui-ci vaut $2|\lambda| - v_F|k_0|$. Sinon le système n'a pas de gap. Nous retrouvons bien la fermeture linéaire du gap et sa fermeture exacte à $k_0 = \frac{2|\lambda|}{v_F}$. Pour le système représenté en figure 4.4(c), $k_0 = \frac{2\pi w}{\sqrt{3}N_x a}$ où w est le nombre d'enroulement. Nous prédisons donc une fermeture du gap à $w_0 = \frac{\sqrt{3}N_x a |\lambda|}{\pi v_F}$, ce qui donne, combiné à $|\lambda| = 0.5t$, $w_0 = \frac{N_x}{\sqrt{3}\pi} \sim 37,5$. Le modèle de liaisons fortes de la figure 4.4(d) voit son gap se fermer à $w_0^{TB} = 34$. Pour la paroi de domaine spiralée de la figure 4.4(b), l'utilisation de la formule donne $w_0 \approx 3,7$ tandis que le modèle liaisons fortes donne $w_0^{TB} = 3,4$.

Le système peut donc être décrit par trois domaines : deux domaines avec un spin-orbite Kane-Mele bien défini et un domaine spiralé. C'est ce domaine spiralé qui explique les états dans le gap des domaines Kane-Mele. Ainsi les phénomènes d'interface éventuels ne sont pas ceux entre deux domaines Kane-Mele mais entre des domaines Kane-Mele et des domaines spiralés. L'analyse numérique montre que dans les cas où le domaine en spirale ne ferme pas le gap, il n'y a pas de caractérisation spectrale de ce genre d'interface. Ce modèle ne permet donc pas d'étudier la physique d'interface entre domaines Kane-Mele et ne révèle pas non plus de nouveaux types d'états de bord.

4.4 | Absence de modes pour les autres parois possibles

On commence par considérer une paroi dans un des termes λ_{VZ} ou λ_R en présence d'une masse m constante et nous ne trouvons aucun mode de bord topologique. Dans le premier cas le spectre de \tilde{H} est $E_{\tau s} = \tau s \lambda_{VZ} \pm \sqrt{k^2 + m^2}$ qui est soit sans gap ou n'admet pas de point de dégénérescence, tandis que dans le deuxième cas $E_{\alpha\beta} = \alpha \sqrt{k^2 + m^2 + 2\lambda_R^2} + 2\beta |\lambda_R| \sqrt{k^2 + \lambda_R^2}$, où $\alpha, \beta = \pm$, n'a pas de dégénérescence quel que soit le profil $\lambda_R(x)$.

Une paroi qui semble plus prometteuse est une paroi sur le terme $\lambda_R(x)$ en présence de $\lambda_{VZ} \neq 0$ constant. Lorsque λ_R et λ_{VZ} sont constant, on rappelle que le gap est de $\frac{2|\lambda_R \lambda_{VZ}|}{\sqrt{\lambda_R^2 + \lambda_{VZ}^2}}$ qui est symétrique par interversion de λ_{VZ} et λ_R . Cependant, les parois de domaines se comportent très différemment : la paroi dans λ_{VZ} avec

λ_R constant héberge les modes robustes discutés dans le chapitre 3 alors que nous allons montrer que la paroi dans λ_R avec λ_{VZ} constant n'héberge aucun mode. Une telle paroi implique une dégénérescence sur un cercle

$$(x^\phi, k_x^\phi, k_y^\phi) = (x_c, |\lambda_{VZ}| \cos(\phi), |\lambda_{VZ}| \sin(\phi)), \quad (4.22)$$

où $\lambda_R(x_c) = 0$. Des modes se propageant ne sont donc *a priori* possible que si le couplage Rashba change de signe au travers de la paroi. On entoure alors le cercle par un tore de rayon ϵ :

$$\begin{pmatrix} \lambda_R \\ k_x \\ k_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon \cos(\theta) \\ (|\lambda_{VZ}| + \epsilon \sin(\theta)) \cos(\phi) \\ (|\lambda_{VZ}| + \epsilon \sin(\theta)) \sin(\phi) \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

L'expression du nombre de Chern est la même que dans l'équation 2.5 à la différence que l'intégrale sur θ est désormais sur l'intervalle $[0, 2\pi]$. On peut se convaincre de manière générale que l'expression du nombre de Chern a toujours la même forme quelle que soit la surface d'intégration en admettant que le nombre de Chern calculé sur une surface fermée plongée dans un espace 3d est égal au nombre de Chern calculé sur l'espace compact des paramètres de la surface. Ici, ce nombre de Chern vaut 0, il n'y a donc pas de modes sans masse sur la paroi de domaine Rashba. Nous confirmons sur le réseau l'absence de modes topologiques traversant le gap pour des parois abruptes et lisses en figure 4.5.

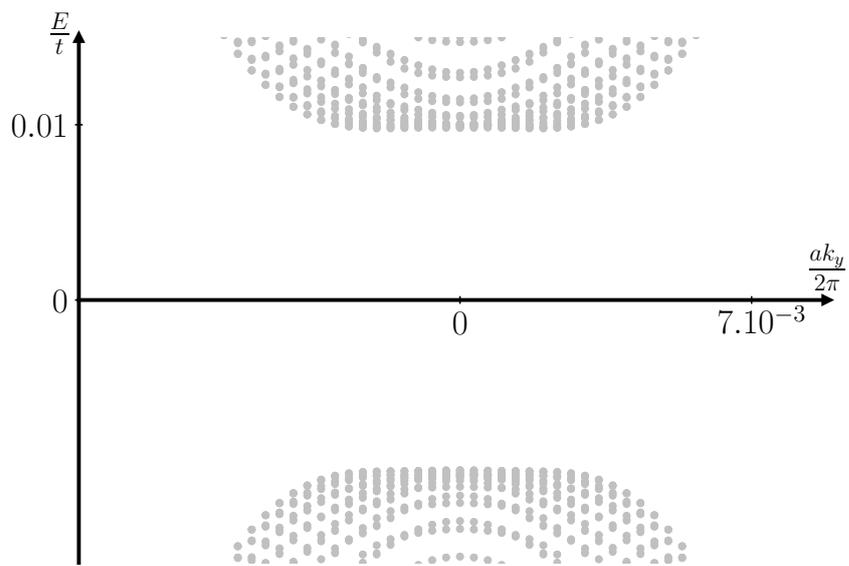


FIGURE 4.5 – Spectre basse énergie pour un système similaire à celui de la figure 3.6 mais avec une paroi de domaine dans le terme Rashba cette fois qui vaut $\lambda_R = \pm 0.1t$ avec un spin-orbite vallée-Zeeman homogène $\lambda_{VZ} = 0.01t$. Si le gap en volume est identique, aucun état de bord n’apparaît dans le gap.

Chapitre 5

Conclusion sur les défauts unidimensionnels

À l'aide du théorème de flot spectral nous avons dérivé les modes de paroi protégés et leur chiralité dans le graphène avec une masse Semenoff et les spin-orbite Kane-Mele, vallée-Zeeman et Rashba. Cependant, cette méthode ne permet pas de connaître la résilience à des brisures de symétrie ou aux effets de réseau, des considérations pour lesquelles nous avons fait usage d'un modèle de liaisons fortes.

Ces travaux ont principalement mis en évidence l'existence de paires de Kramers robustes sur une paroi de domaine vallée-Zeeman en présence d'un spin-orbite Rashba homogène. Étant donné que l'amplitude du spin-orbite vallée-Zeeman relevée dans des échantillons de graphène sur dichalcogénure de métaux de transition est élevée et que le spin-orbite Rashba est également présent, même si son amplitude est faible, il est possible que ces nouveaux modes jouent un rôle dans les efforts pour induire des phases topologiques dans ces systèmes. À cause de l'incommensurabilité du graphène et de son substrat des domaines peuvent apparaître à l'échelle du moiré dans lesquels le spin-orbite peut fortement varier voire changer de signe. Le couplage Rashba peut éventuellement être rendu homogène sur des domaines plus grands à l'aide de champs extérieurs perpendiculaires au graphène. Les parois de domaine vallée-Zeeman d'une telle réalisation pourraient créer un réseau de propagation ajustable [43, 44, 63, 72, 73, 74]. Le moiré pour du graphène non « twisté » sur substrat de TMD est à l'échelle du nanomètre, ce qui peut permettre aux états propagatifs de rester bien définis mais peut aussi mener à des effets collectifs dus à leur recouvrement dans l'espace réel. Des mesures spectroscopiques à l'échelle nanométrique pourraient permettre de chasser ces modes tandis qu'il serait intéressant d'étendre cette étude avec les effets de contraintes locales dues à l'incommensurabilité.

La connexion entre une paroi de domaine vallée-Zeeman et une paroi de domaine dans le potentiel de grille d'un bicouche de graphène sans spin suggère des possibilités d'exploitation en vallétronique. Les modes de parois vallée-Zeeman ne sont pas doublés contrairement à ceux du bicouche de graphène et ils ne présentent aucune symétrie de spin, ils devraient donc être plus résistants à la brisure

de la symétrie par renversement du temps. La configuration avec le bicouche de graphène sous potentiel de grille ayant été utilisée dans l'article [64] pour créer des modes hélicoïdaux à l'aide d'un champ magnétique, il serait intéressant d'étudier la possibilité de manipuler les modes de paroi vallée-Zeeman à l'aide de champs extérieurs.

Puisque nous nous intéressons aux modes à l'intérieur du gap en volume, nous notons qu'une paroi lisse à l'échelle nanométrique devrait également héberger des modes excités en plus des modes topologiquement protégés [68, 69]. Pour une amplitude du spin-orbite typique de l'ordre de 10meV, on s'attend à pouvoir observer ces modes massifs si la paroi s'étend sur une largeur supérieure à 70nm. Il est donc possible que cette phénoménologie soit observée dans des hétérostructures « twistées » incommensurables avec une grande période du moiré. Une paroi de domaine VZ pourrait donc héberger une tour d'états propagatifs intragap qui peuvent être contrôlés en changeant la distance typique des variations spatiales et/ou l'amplitude du spin-orbite Rashba. Cette tour d'états apparaît également dans le cas du spin-orbite Kane-Mele.

Dans la perspective plus large des modes topologiques créés par des parois de domaine de spin-orbite dans le graphène, le spin-orbite Kane-Mele induit une topologie en volume protégée par la symétrie par renversement du temps pour l'invariant \mathbb{Z}_2 ou par la symétrie de rotation de spin s_z pour le nombre de Chern de spin. Nous avons alors testé une paroi spirale qui brise la conservation de s_z par construction sans être équivalente à un bord d'isolant topologique. La correspondance entre un champ magnétique spiralé et un couplage spin-orbite homogène [75] ayant été fructueuse dans la conception de modes topologiques, un tel système semble d'intérêt. Malheureusement ces parois ne présentent pas de modes isolés car ceux-ci sont confondus avec des modes de volume.

Plus généralement, notre travail devrait motiver de plus amples recherches théoriques dans les défauts topologiques de spin-orbite puisqu'une paroi de domaine est l'exemple unidimensionnel le plus simple tandis que les défauts ponctuels de spin-orbite se sont révélés expérimentalement porteurs d'états liés [76, 77]. Du point de vue de la méthode, le théorème de flot spectral s'est révélé utile et informatif à la fois dans les systèmes à une vallée mais également dans les systèmes à deux vallées avec un défaut unidimensionnel dans un espace 2d puisque l'espace des paramètres tridimensionnel résultant possède des dégénérescences ponctuelles et curvilignes. Il nous semble donc pertinent d'appliquer cette approche aux nombreux modèles de matière condensée quantique présentant les mêmes caractéristiques.

Troisième partie

Particules de Dirac désordonnées en dimension 1

Chapitre 6

L'équation de Dirac désordonnée

Un autre type fondamental d'inhomogénéité est le désordre. Dans la majorité des systèmes unidimensionnels, le désordre, aussi infinitésimal soit-il, implique systématiquement la localisation des fonctions d'ondes. Toutefois, des exceptions existent, comme les chaînes chirales étudiées par Brouwer [78]. Les auteurs de l'article considèrent un hamiltonien de liaisons fortes couplant plusieurs chaînes de telle sorte qu'une symétrie chirale persiste. Ils mettent alors en évidence un effet de la parité du nombre de chaînes sur le comportement des fonctions d'onde. Dans le cas d'un nombre de chaînes paire, les fonctions d'ondes sont localisées comme attendu mais dans le cas d'un nombre impair, un des modes propres reste un état critique de la transition vers la localisation. Dans le cas d'une chaîne, le hamiltonien à basse énergie est un hamiltonien de Dirac avec une masse aléatoire sur lequel des travaux précédents se sont déjà penchés. Ainsi, en 1977, Ovchinnikov et Érikhman publient un article [79] calculant la densité d'état d'une particule de Dirac 1D dont le champ de masse est un bruit blanc gaussien. Plus récemment, Bartosch et Kopietz ont publié en 2000 [80, 81] des résultats numériques sur le même système mais où la masse est cette fois un bruit coloré au lieu d'un simple bruit blanc. Les auteurs identifient un unique paramètre adimensionné pertinent. Leur modèle interpole alors deux cas limites traitables analytiquement que sont le modèle de Ovchinnikov et un modèle champ moyen qui correspond à un système composé de domaines ayant une valeur aléatoire de la masse choisie selon une densité de probabilité gaussienne. Cependant, le graphène possède deux vallées et un désordre sur réseau est alors susceptible d'induire des transitions intervallées. Si des travaux sur des systèmes de Dirac à plusieurs canaux désordonnés existent déjà, comme ceux de Aurélien Grabsch et Christophe Texier en 2016 [82, 83], ils ne considèrent aucune corrélation dans les éléments de la matrice de masse désordonnée. Or, des corrélations doivent apparaître car les deux vallées appartiennent en réalité à la même zone de Brillouin. Nous adoptons alors une approche numérique sur des modèles de liaisons fortes désordonnés en introduisant une longueur de corrélation du désordre permettant de contrôler la diffusion intervallée.

Dans cette partie on présentera d'abord dans le détail la solution de Ovchinnikov et Érikhman en section 6.1. On présentera ensuite succinctement ceux de Bartosch en section 6.2.1 et ceux de Grabsch en section 6.2.2. Enfin nous présen-

terons notre propre analyse numérique en section 7.1.

On remarquera alors un fait déjà présent dans les chapitres précédent, le spin-orbite Kane-Mele semble insensible à la diffusion intervallée, à l'inverse de la masse Semenoff. En section 7.2 on montrera qu'une possible explication de cette robustesse est le caractère imaginaire pur du spin-orbite.

Pour terminer on reproduira le calcul de Brouwer en section 7.3 mais en considérant des corrélations adaptées à notre système. On montrera ainsi qu'un terme de masse désordonnée provoque une suppression de la conductance exponentielle en la taille du système alors qu'un terme Kane-Mele désordonné ne voit que l'amplitude de ses fluctuations de conductance augmenter.

6.1 | Particule de Dirac soumise à un champ de masse désordonnée

On retrace ici le raisonnement suivi par Ovchinnikov et Érikhman dans [79]. On considère l'équation de Dirac pour le spineur à deux composantes Ψ

$$(-i\partial_x\sigma_z + \Delta\sigma_x)\Psi = E\Psi \quad (6.1)$$

où Δ est un champ de masse désordonnée tel que $\langle\Delta\rangle = \Delta_0$ et $\langle(\Delta(x) - \Delta_0)(\Delta(y) - \Delta_0)\rangle = 2D\delta(x - y)$. Ce hamiltonien est bien équivalent à chaque vallée individuelle du graphène avec un terme de masse. Si le champ de masse varie sur des distances grandes devant la distance interatomique, on peut s'attendre à ce que les deux vallées soient découplées et utiliser cette équation. Pour faciliter le suivi des calculs, nous gardons pour le moment les conventions de l'article d'Ovchinnikov. Étant donné la symétrie particule-trou $\sigma_x\mathcal{K}$ et la non dégénérescence des états propres, on peut écrire les solutions sous la forme $\Psi_2 = \Psi_1^*$ où $\Psi_{1,2}$ sont les composantes du spineur Ψ . En notant f_1 la partie réelle et f_2 la partie imaginaire de Ψ , on a

$$\hat{H} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta(x) & \partial_x \\ -\partial_x & -\Delta(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

On veut maintenant calculer la densité d'états moyenne du système. On impose $f_1(0) = f_1(L) = 0$ comme conditions aux bords. Le nombre d'états dont l'énergie est comprise entre 0 et E est alors égale au nombre de nœuds $N(E)$ de f_1 sur l'intervalle $]0, L[$. Pour obtenir $N(E)$, on va s'intéresser à la dynamique de la variable de Riccati $z(x) = f_2/f_1$. Ainsi, lorsque f_1 s'annule, z diverge car f_2 ne peut s'annuler au même point (sinon Ψ s'annulerait partout). z obéit à l'équation :

$$\frac{dz}{dx} = E - \Delta(x) + (E + \Delta(x))z^2. \quad (6.3)$$

Cette forme est valable lorsque Δ est une fonction continue mais on peut la garder lorsque z suit un mouvement stochastique en utilisant la convention de Stratonovich. Pour calculer le nombre moyen de zéros, on introduit la distribution de probabilité $P(z, x) = \langle \delta(z(x) - z) \rangle$. On peut alors écrire l'équation de Fokker-Planck satisfaite par P .

$$\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} [(E - \Delta_0 + (E + \Delta_0)z^2 + 2Dz(z^2 - 1)) P] - D \frac{\partial^2}{\partial z^2} [(z^2 - 1)^2 P] = 0 \quad (6.4)$$

La vitesse de dérive de z étant constante et la dérive de z à l'infini étant égale à la densité moyenne de zéros de z qui vaut $N(E)/L$, on obtient la distribution à l'équilibre en résolvant le problème

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} P(z) dz = 1 \end{array} \right. \quad (6.5a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} E - \Delta_0 + (E + \Delta_0)z^2 - D(z^2 - 1) \frac{\partial}{\partial z} [(z^2 - 1)P(z)] = \frac{N(E)}{L} \end{array} \right. \quad (6.5b)$$

Résoudre le système permet alors de trouver $\mathcal{N}(E) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{N(E)}{L}$. On effectue dans un premier temps le changement de variable

$$t = \frac{z - 1}{z + 1}. \quad (6.6)$$

L'équation 6.5b devient alors

$$2EP'(t) + (E + \Delta_0) \frac{4t}{(1-t)^2} P'(t) - 2Dt \frac{\partial}{\partial t} \frac{4t}{(1-t)^2} P'(t) = \mathcal{N}(E) \quad (6.7)$$

où $P'(t) = P((1+t)/(1-t))$. On définit ensuite $U = P'/(1-t)^2$ de telle sorte que

$$2Et^2U(t) + 2EU(t) + 4\Delta_0 tU(t) - 8Dt \frac{\partial}{\partial t} tU(t) = \mathcal{N}(E). \quad (6.8)$$

Enfin, on passe dans l'espace de Fourier de la variable t .

$$(-2E\partial_\omega^2 + 2E + 4i\Delta_0\partial_\omega + 8iD\partial_\omega\omega\partial_\omega) \tilde{U} = \sqrt{2\pi}\mathcal{N}(E)\delta_\omega \quad (6.9)$$

où l'opérateur ∂_ω agit sur tout les éléments à sa droite.

Pour résoudre 6.9, il est nécessaire de connaître les propriétés de continuité de \tilde{U} . Or, étant donné que P est intégrable, U est intégrable :

$$\int P(z)dz = 1 = \int P' \left(\frac{z-1}{z+1} \right) dz = \int 2 \frac{P'(t)}{(1-t)^2} dt. \quad (6.10)$$

Donc sa transformée de Fourier \tilde{U} est continue. De plus, U étant une fonction réelle, \tilde{U} est hermitienne. Donc en intégrant 6.9 entre deux bornes infinitésimalement proches de $\omega = 0$ on a la première relation

$$-4E\Re(\partial_\omega \tilde{U} \Big|_0) = \sqrt{2\pi}\mathcal{N}(E). \quad (6.11)$$

On poursuit la résolution en développant complètement 6.9. On va dans un premier temps se concentrer sur l'équation homogène et réutiliser la condition de raccordement à la fin du calcul.

$$[(8iD\omega - 2E)\partial_\omega^2 + (4i\Delta_0 + 8iD)\partial_\omega + 2E] \tilde{U} = 0. \quad (6.12)$$

On effectue le changement de variable $\tilde{\omega} = \omega + \frac{iE}{4D}$

$$[8iD\tilde{\omega}\partial_{\tilde{\omega}}^2 + 4i(\Delta_0 + 2D)\partial_{\tilde{\omega}} + 2E] \tilde{U}(\tilde{\omega}) = 0. \quad (6.13)$$

Pour éviter la multiplication des notations, on a directement redéfini $\tilde{U}(\omega) = \tilde{U}(\tilde{\omega})$ comme précédemment entre P et P' . On pose $\tilde{U}(\tilde{\omega}) = \tilde{\omega}^{-\frac{\Delta_0}{4D}} \tilde{V}(\tilde{\omega})$ et on suppose $\Delta_0/(4D) \neq 1$. En injectant et simplifiant l'équation on a

$$\left[8iD\tilde{\omega}^2\partial_{\tilde{\omega}}^2 + 8iD\tilde{\omega}\partial_{\tilde{\omega}} - \frac{\Delta_0^2}{2D}i + 2E\tilde{\omega} \right] \tilde{V}(\tilde{\omega}) = 0. \quad (6.14)$$

Pour finir de faire apparaître l'équation de Bessel, il suffit de poser $\hat{\omega} = e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{E\tilde{\omega}}{D}}$ pour enfin obtenir

$$\left[\hat{\omega}^2\partial_{\hat{\omega}}^2 + \hat{\omega}\partial_{\hat{\omega}} + \hat{\omega}^2 - \left(\frac{\Delta_0}{2D} \right)^2 \right] \tilde{V}(\hat{\omega}) = 0. \quad (6.15)$$

\tilde{V} est donc une combinaison linéaire de fonctions de Hankel de premier et deuxième type d'ordre $\nu = \Delta_0/2D$. La bonne combinaison linéaire est alors obtenue grâce à la condition de normalisation de P . On a déjà déjà montré que l'intégrabilité de P équivalait à celle de U et donc que \tilde{U} était continue. L'intégrabilité de U garantit également le caractère borné de \tilde{U} . On vérifie la continuité en écrivant $\hat{\omega}$ en fonction de ω :

$$\hat{\omega} = e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{E}{D} \left(\omega + i\frac{E}{4D} \right)}. \quad (6.16)$$

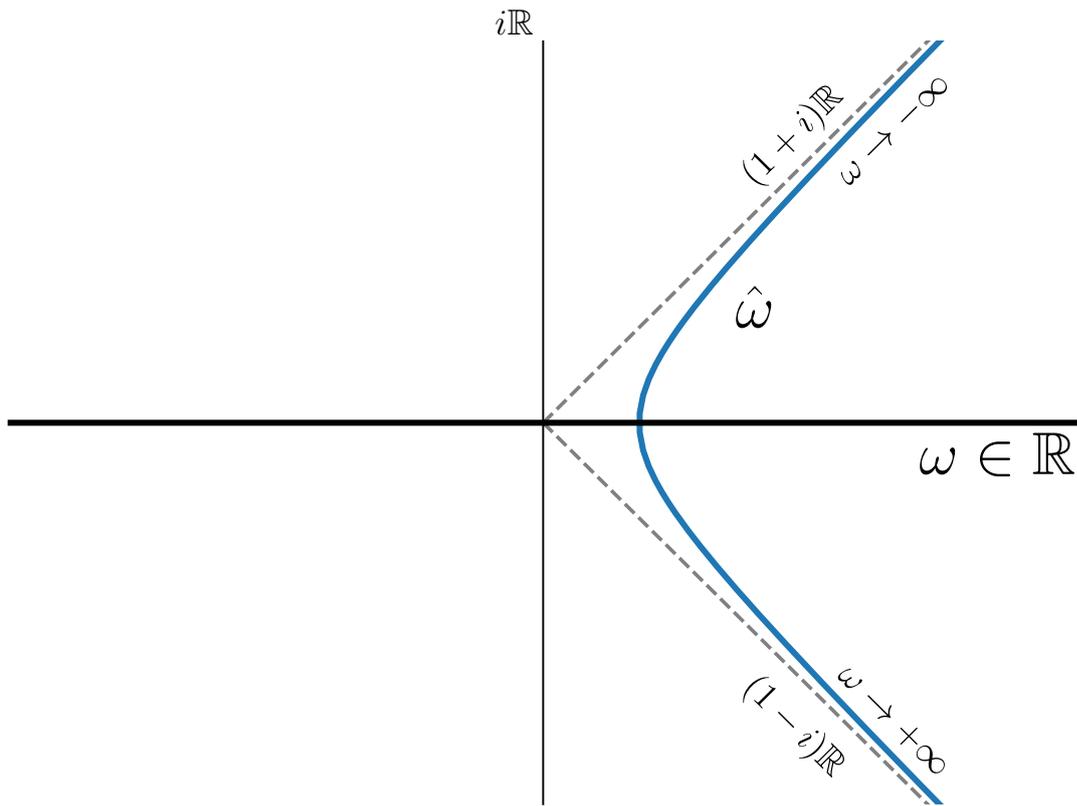


FIGURE 6.1 – Représentation schématique du changement de variable dans le plan complexe. L’axe horizontal représente l’axe réel que parcourt ω tandis que l’hyperbole bleue représente la trajectoire dans le plan complexe de $\hat{\omega}$ (voir texte) lorsque ω parcourt \mathbb{R} . Les deux lignes pointillées grises représentent les asymptotes de la ligne bleue lorsque $\omega \rightarrow \pm\infty$.

Lorsque ω parcourt \mathbb{R} , $\hat{\omega}$ parcourt l'hyperbole représentée dans la figure 6.1. Cette trajectoire ne coupe pas l'axe de coupure $]-\infty, 0]$ des déterminations principales des fonctions de Bessel et du logarithme, donc la continuité et le caractère localement borné des solutions est assuré. Lorsque $\omega \rightarrow \pm\infty$, $\hat{\omega} \rightarrow e^{\mp i\frac{\pi}{4}}\infty$. Le développement asymptotique des fonctions de Hankel est alors de la forme

$$H_\nu^{(1)}(\hat{\omega}) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\hat{\omega}}} e^{i\Omega} \quad (6.17)$$

$$H_\nu^{(2)}(\hat{\omega}) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi\hat{\omega}}} e^{-i\Omega} \quad (6.18)$$

où $H_\nu^{(1)}$ et $H_\nu^{(2)}$ sont les fonctions de Hankel respectivement de premier et deuxième type et $\Omega = \hat{\omega} - \nu\pi/2 - \pi/4$. Si $\Im(\hat{\omega}) < 0$, alors $H_\nu^{(1)}$ diverge tandis que $H_\nu^{(2)}$ tend vers 0 et inversement si $\Im(\hat{\omega}) > 0$. Ces deux tendances étant exponentielles, le préfacteur en puissance de $\hat{\omega}$ dans la définition de \tilde{V} n'altère pas ces comportements asymptotiques. Le caractère borné de \tilde{U} impose alors que la composante divergente de \tilde{V} s'annule.

$$\tilde{V}(\hat{\omega}) = \begin{cases} AH_\nu^{(2)}(\hat{\omega}) = A(J_\nu(\hat{\omega}) - iY_\nu(\hat{\omega})) & \text{si } \omega > 0 \\ A'H_\nu^{(1)}(\hat{\omega}) = A'(J_\nu(\hat{\omega}) + iY_\nu(\hat{\omega})) & \text{si } \omega < 0 \end{cases} \quad (6.19)$$

avec A et A' deux constantes. Donc l'expression finale de \tilde{U} pour $\omega > 0$, qui est suffisante pour conclure, est

$$\tilde{U}(\omega > 0) = A \left(\omega + i\frac{E}{4D} \right)^{-\frac{\Delta_0}{4D}} H_\nu^{(2)}(\hat{\omega}). \quad (6.20)$$

On a montré dans l'équation 6.10 que $\int U(t)dt = 1/2$, donc $\tilde{U}(0) = 1/(2\sqrt{2\pi})$. Nous connaissons donc maintenant la valeur de la constante A que nous injectons dans \tilde{U} :

$$\tilde{U}(\omega > 0) = \left(\omega + i\frac{E}{4D} \right)^{-\frac{\Delta_0}{4D}} \frac{H_\nu^{(2)}(\hat{\omega})}{2\sqrt{2\pi}H_\nu^{(2)}\left(\frac{E}{2D}\right) \left(i\frac{E}{4D}\right)^{-\frac{\Delta_0}{4D}}}. \quad (6.21)$$

Pour finir le calcul et trouver $\mathcal{N}(E)$ il ne reste plus qu'à calculer la dérivée de \tilde{U} en 0.

$$\partial_\omega \tilde{U} \Big|_{\omega=0} = i\frac{\Delta_0}{2E\sqrt{2\pi}} - i\frac{H_\nu^{(2)'}\left(\frac{E}{2D}\right)}{2\sqrt{2\pi}H_\nu^{(2)}\left(\frac{E}{2D}\right)} \quad (6.22)$$

On prend la partie réelle

$$\Re(\partial_\omega \tilde{U} \Big|_{\omega=0}) = \frac{-1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{W(J_\nu, Y_\nu) \left(\frac{E}{2D}\right)}{J_\nu^2 \left(\frac{E}{2D}\right) + Y_\nu^2 \left(\frac{E}{2D}\right)} \quad (6.23)$$

où $W(J_\nu, Y_\nu) = J_\nu Y'_\nu - J'_\nu Y_\nu$ est le wronskien de J_ν et Y_ν . Or le wronskien des fonctions des Bessel vaut

$$W(J_\nu, Y_\nu)(\omega) = \frac{2}{\pi\omega}. \quad (6.24)$$

Donc

$$\Re \left(\partial_\omega \tilde{U} \Big|_{\omega=0} \right) = \frac{-2D}{\sqrt{2\pi\pi E}} \frac{1}{J_\nu^2 \left(\frac{E}{2D}\right) + Y_\nu^2 \left(\frac{E}{2D}\right)} = -\frac{\sqrt{2\pi}\mathcal{N}(E)}{4E}. \quad (6.25)$$

On obtient alors enfin le résultat de Ovchinnikov et Érikhman

$$\mathcal{N}(E) = \frac{4D}{\pi^2} \frac{1}{J_\nu^2 \left(\frac{E}{2D}\right) + Y_\nu^2 \left(\frac{E}{2D}\right)} \quad (6.26)$$

où $\nu = \Delta_0/(2D)$. La densité d'états est obtenue en dérivant cette densité intégrée. Deux régimes ressortent alors, $\nu < 1/2$ et $\nu > 1/2$. Le deuxième cas est le plus intuitif. Il s'agit du régime où les fluctuations du terme de masse deviennent plus petite que sa valeur moyenne. Les fluctuations vont alors lisser la densité d'état du système en l'absence de désordre. Le premier cas, qui nous intéresse, correspond au régime où les fluctuations dominent la physique. Dans ce cas, la densité d'états à énergie nulle diverge et lorsque $\nu = 0$, la singularité est similaire à celle trouvée par Dyson en 1953 [84] dans le cadre de masses et ressorts désordonnés.

6.2 | Diffusion intervallée et corrélations

Toutefois, la densité d'états 6.26 ne peut être directement appliquée aux modèles de graphène sur réseau que nous souhaitons étudier car la présence du réseau rend incompatibles un désordre non corrélé et l'absence de diffusion intervallée. En effet, pour se débarrasser de la diffusion intervallée, il est nécessaire d'ajouter des corrélations sur des distances grandes devant la distance interatomique.

6.2.1 | Corrélations

Au début du siècle, Bartosch publie sa thèse [80] sur un modèle similaire à celui d'Ovchinnikov mais avec une distance de corrélation non nulle. Le deuxième moment du terme de masse a alors la forme suivante

$$\langle (\Delta(x) - \Delta_0)(\Delta(y) - \Delta_0) \rangle = \Delta_\sigma^2 e^{-\frac{|x-y|}{\xi}} \quad (6.27)$$

où ξ est la distance caractéristique de corrélation. Étant donné qu'on s'intéresse aux cas où le désordre est dominant, on considère $\Delta_0 = 0$ par la suite. Les cas limites $\xi \rightarrow 0$ et $\xi \rightarrow \infty$ peuvent être traités pleinement analytiquement. $\xi \rightarrow 0$ est simplement le cas de figure de Ovchinnikov. Celui où la distance de corrélation tend vers l'infini correspond à un système constitué de domaines indépendants dans lesquels la valeur de la masse est fixée. La densité d'états totale du système va donc être la moyenne des densités d'états des domaines. Or chaque domaine a une masse aléatoire donnée par une loi de probabilité gaussienne. On obtient alors pour la densité d'états quand ξ tend vers l'infini :

$$\rho_\infty(\omega) = \rho_0 \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\Delta e^{-\Delta^2/(2\Delta_\sigma^2)}}{\sqrt{2\pi\Delta_\sigma^2}} \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} \quad (6.28)$$

où $\rho_0 = 2/\pi$ est la densité d'états d'une particule de Dirac sans masse. Le résultat final est alors donné par l'équation (3.79) de [80]

$$\rho_\infty(\omega) = \rho_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega}{\Delta_\sigma} e^{-\omega^2/(4\Delta_\sigma^2)} I_0\left(\frac{\omega^2}{4\Delta_\sigma^2}\right) \quad (6.29)$$

où I_0 est la fonction de Bessel modifiée de première espèce d'ordre 0.

La distance de corrélation doit donc permettre d'interpoler cette densité d'états et celle de Ovchinnikov qui sont illustrées en Figure 6.2. Dans sa thèse Bartosch montre des résultats numériques indiquant que le minimum de densité d'états ainsi que sa position tendent tout les deux vers 0 quand ξ tends vers $+\infty$ tandis qu'un excès de densité d'états apparaît avant de rejoindre la valeur limite ρ_0 . De ses résultats numériques il déduit que le paramètre adimensionné pertinent pour l'analyse du système est $\Delta_\sigma \xi$. Dans la section 7.1 on montrera que notre modèle sur réseau exhibe qualitativement les même effets dans la limite où le désordre est corrélé sur des distances larges devant le pas du réseau.

6.2.2 | Diffusion intervallée

Pour décrire le régime du bruit blanc sur réseau, il s'avère nécessaire de prendre en compte les effets de la diffusion intervallée. Un article de 2016 de Grabsch et Texier [82] étudie le cas de plusieurs canaux de Dirac couplés entre eux par une matrice de masse aléatoire avec des corrélations purement locales. Plus de détails sont donnés dans la thèse de Grabsch [83]. Le hamiltonien étudié est le suivant :

$$\mathcal{H} = i\sigma_y \otimes \mathbf{1}_N \partial_x + \sigma_x \otimes M(x) \quad (6.30)$$

où $M(x)$ est une matrice hermitienne aléatoire. La méthode suivie généralise celle de Ovchinnikov en définissant une variable de Riccati (matricielle cette fois) dont

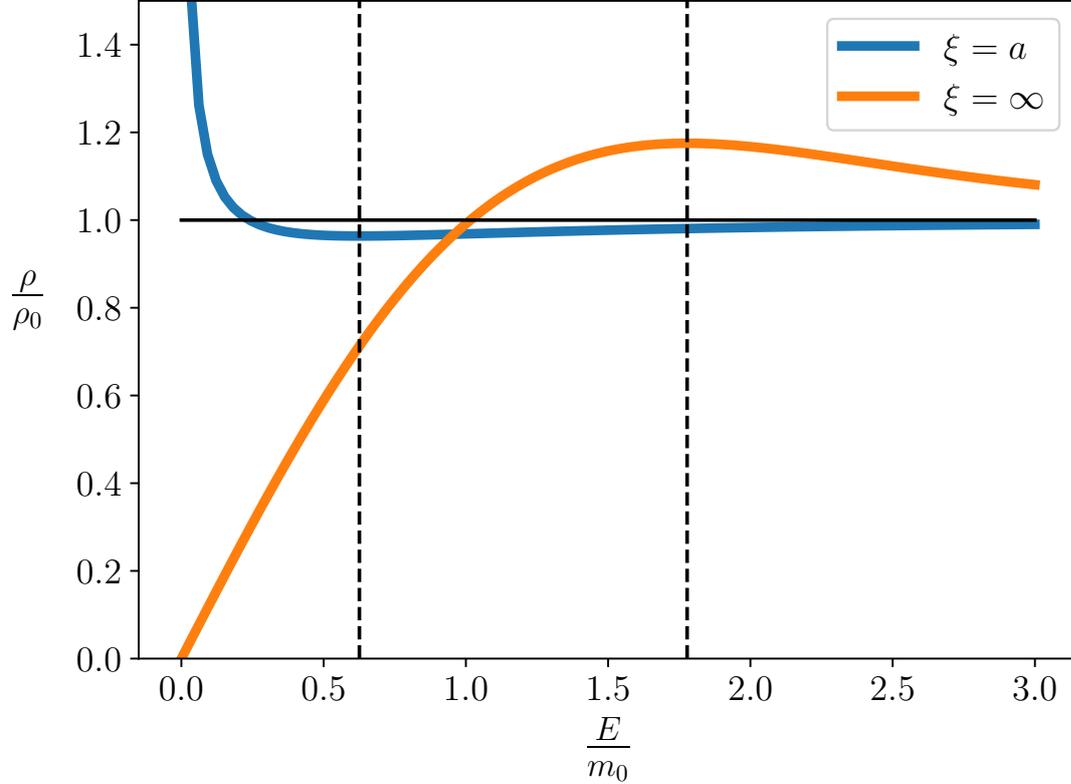


FIGURE 6.2 – Densités d'états pour le modèle de Ovchinnikov [79] (en bleu) et le modèle de Bartosch [80] lorsque $\xi \rightarrow \infty$ (en orange) normalisées par la densité d'états d'une particule de Dirac unidimensionnelle. Pour pouvoir comparer les deux modèles, il est nécessaire d'introduire une taille caractéristique au modèle de Ovchinnikov qui n'en contient pas initialement. On pose donc $2D = m_0^2 \xi$ où m_0 serait la dispersion en énergie d'un modèle sur réseau et ξ la distance de corrélation sur ce réseau. Pour le tracé on a choisi $m_0 \xi = 1$ (la vitesse de Fermi étant prise comme égale à 1 dans les deux modèles). Les lignes verticales marquent la position du minimum de la densité d'états d'Ovchinnikov et du maximum de la densité d'état de Bartosch. Lorsque $m_0 \xi \ll 1$, la densité d'états de Bartosch suit celle de Ovchinnikov. Lorsque $m_0 \xi$ augmente, la position du minimum se rapproche de 0 tout en se creusant. Nous repérons alors l'amplitude de ce minimum dans nos simulations numériques pour vérifier la loi d'échelle proposée par Bartosch.

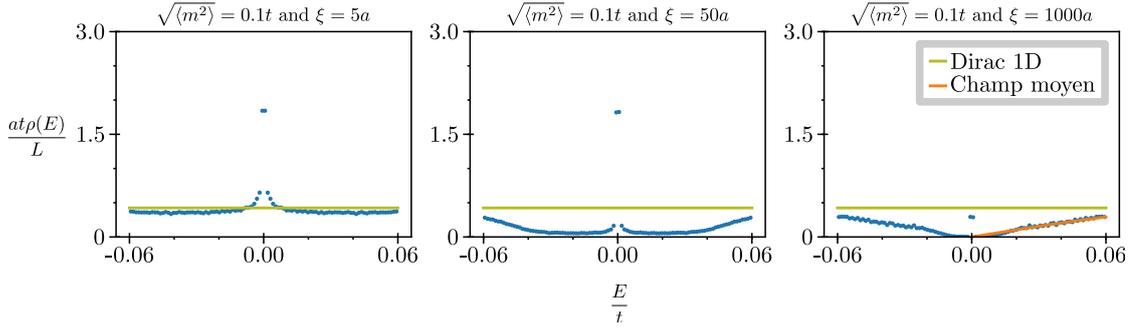


FIGURE 6.3 – Densités d'états typiques à large distance de corrélation sur le réseau avec une distance de corrélation croissante de gauche à droite. La ligne verte représente la densité d'états constante d'une particule de Dirac en dimension 1. On retrouve le comportement découvert par Bartosch [80] qui consiste en une suppression progressivement plus importante de la densité d'état après le pic à énergie nulle. On représente en orange la densité d'état de la limite $\xi \rightarrow \infty$ sur la figure de droite.

la densité de probabilité à l'équilibre est calculée, ce qui permet de déduire, entre autres, la densité d'états. Le hamiltonien 6.30 dans le cas $N = 2$ ressemble fortement au cas de figure qui nous intéresse mais il diffère par deux points. Le premier point est qu'il n'est pas possible de transformer $\sigma_x \tau_z$ en σ_x tout en préservant la structure $\sigma_x \otimes M(x)$. Le deuxième point est lié au caractère local du terme de masse. Dans le modèle de Grabsch et Texier, aucune contrainte de symétrie n'est imposée à la matrice M , or dans notre cas, les deux canaux sont en réalité deux parties de la même zone de Brillouin. Le caractère local du terme m_i dans le modèle liaisons fortes se traduisant par une invariance par translation en espace k , chaque vallée doit alors voir la même masse désordonnée. On constate cependant de manière surprenante une correspondance entre les résultats de [82] et le notre dans la limite du bruit blanc dans la figure 6.4.

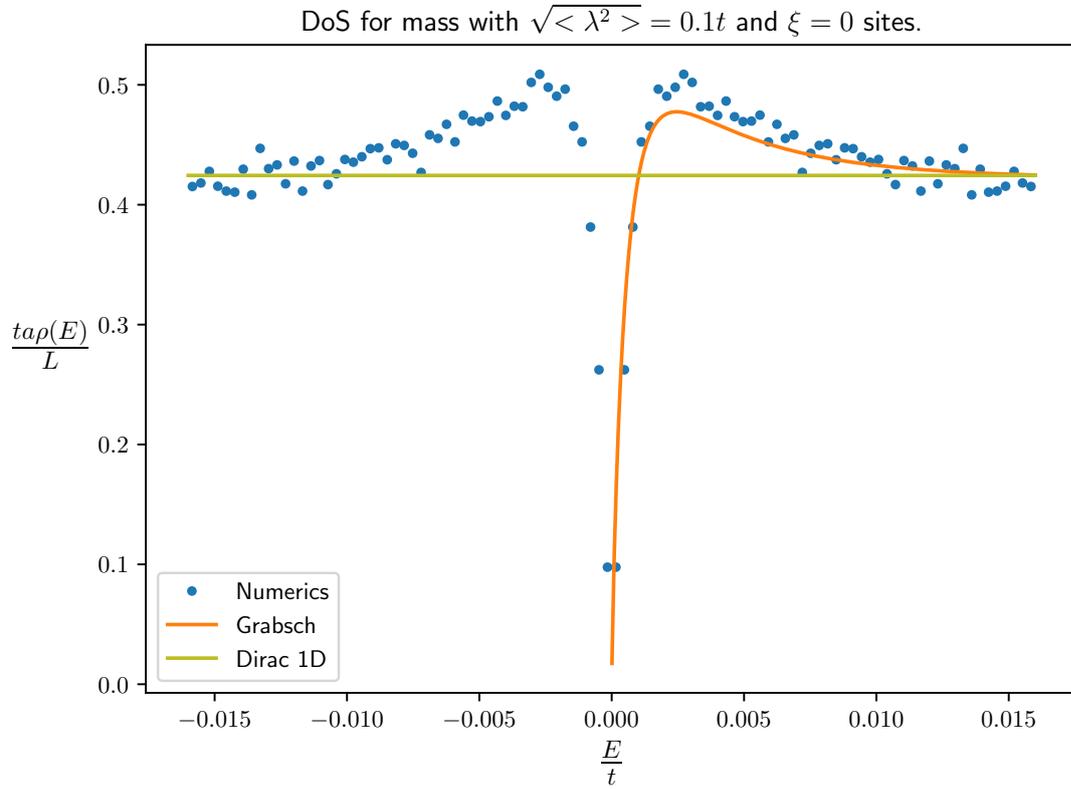


FIGURE 6.4 – Densité d’états moyennée sur 500 réalisations du désordre pour un système de 32 000 sites dans la limite du bruit blanc sur réseau comparée au modèle de Grabsch et Texier avec deux canaux. Lorsque la distance de corrélation devient suffisamment faible, la densité d’états à énergie nulle s’annule progressivement, faisant apparaître deux maxima de densité de part et d’autres de $E = 0$. On représente en trait plein la densité d’états du modèle à deux canaux de [82, 83]. Étonnamment, bien que ce modèle soit distinct du notre comme expliqué dans le texte principal, la densité d’états trouvée semble correspondre à celle du bruit blanc de masse sur réseau.

Chapitre 7

L'équation de Dirac sur réseau : la nécessaire prise en compte de la diffusion intervallée

7.1 | Méthodes numériques

Dans cette section on présente les résultats de notre propre analyse numérique d'un modèle de masse désordonnée sur réseau. On réécrit ici le hamiltonien de liaisons fortes avec les termes Kane-Mele et la masse Semenoff.

$$\begin{aligned}
 H^{TB} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle, a} c_{ia}^\dagger c_{ja} + \sum_{R,a} m(R) (c_{RAa}^\dagger c_{RAa} - c_{RBa}^\dagger c_{RBa}) \quad (7.1) \\
 & - \frac{i}{3\sqrt{3}} \sum_{R,\alpha,a} \lambda_1^\alpha(R) c_{R\alpha a}^\dagger s_z^{ab} c_{R+(1,0),\alpha b} + H.c. \\
 & - \frac{i}{3\sqrt{3}} \sum_{R,\alpha,a} \lambda_2^\alpha(R) c_{R\alpha a}^\dagger s_z^{ab} c_{R+(-1,1),\alpha b} + H.c., \\
 & - \frac{i}{3\sqrt{3}} \sum_{R,\alpha,a} \lambda_3^\alpha(R) c_{R\alpha a}^\dagger s_z^{ab} c_{R+(0,-1),\alpha b} + H.c.,
 \end{aligned}$$

où $c_{R\alpha a}^\dagger$ crée un électron dans la cellule unité R sur le sous réseau $\alpha = A, B$ de spin $a = \uparrow, \downarrow$, s_i sont les matrices de Pauli agissant dans l'espace du spin, $\langle i, j \rangle$ indique que i et j sont premiers voisins et $R + (m, n)$ désigne la cellule unité translatée de $m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ par rapport à R en appliquant des conditions périodiques aux bords (voir 7.1(a)). On rajoute une condition très importante, le ratio entre tous les termes de saut associés à une même cellule unité est fixé :

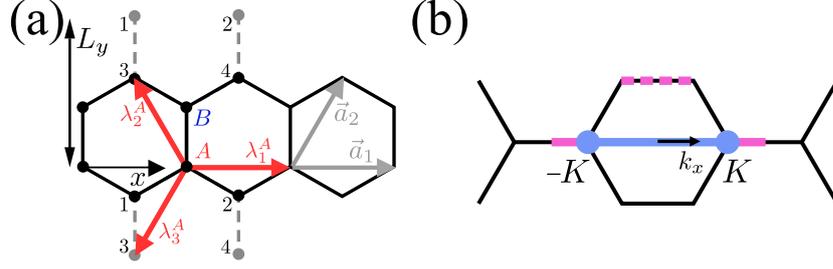


FIGURE 7.1 – Réseau quasi unidimensionnel avec un spin-orbite désordonné. (a) Les sites numérotés et les lignes pointillées illustrent les conditions aux bords périodiques le long de l'axe y . Les trois liaisons deuxième voisin orientées λ_j^A émanant du site A (flèches rouges) produisent un couplage spin-orbite au travers d'un saut imaginaire pur. Les liaisons λ_j^B sont obtenues par translation du site A au site B (bleu) au dessus. Il faut noter que λ_2 et λ_3 contribuent au terme de saut mais nous les distinguons pour faciliter le parallèle avec un système pleinement 2D. (b) Les moments correspondant au système représenté en (a) sont sur les segments bleus et roses pointillés de la première zone de Brillouin du graphène infini. Une description équivalente fixe $k_y = 0$ et étend l'intervalle k_x par les lignes roses pleines.

$$\lambda_1^\alpha(R) \equiv \lambda_1^\alpha u(R), \quad (7.2)$$

$$\lambda_2^\alpha(R) \equiv \lambda_2^\alpha u(R),$$

$$\lambda_3^\alpha(R) \equiv \lambda_3^\alpha u(R), \quad (7.3)$$

où $u(R)$ est une fonction réelle aléatoire. Si $u(R) \equiv 1$ et $m(R)$ est homogène, le modèle basse énergie au premier ordre est alors de la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{hom} = & \tau_z \sigma_x k_x + m \sigma_z + \overline{\lambda_{KM}} \tau_z \sigma_z s_z + \overline{\lambda_{VZ}} \tau_z s_z \\ & + \frac{1}{2} \hat{e}_x \cdot \left(\sum_{j=1}^3 \vec{a}_j \lambda_j^\alpha \right) s_z k_x, \end{aligned} \quad (7.4)$$

où $\vec{a}_3 \equiv -\vec{a}_1 - \vec{a}_2$. Nous gardons explicite la dépendance dans le sous réseau $\alpha = A, B$ dans le dernier terme qui produira une combinaison de σ_z et de l'identité $\mathbb{1}$ et qui agit comme un terme cinétique anisotrope dépendant du spin. Les termes Kane-Mele et vallée-Zeeman sont alors

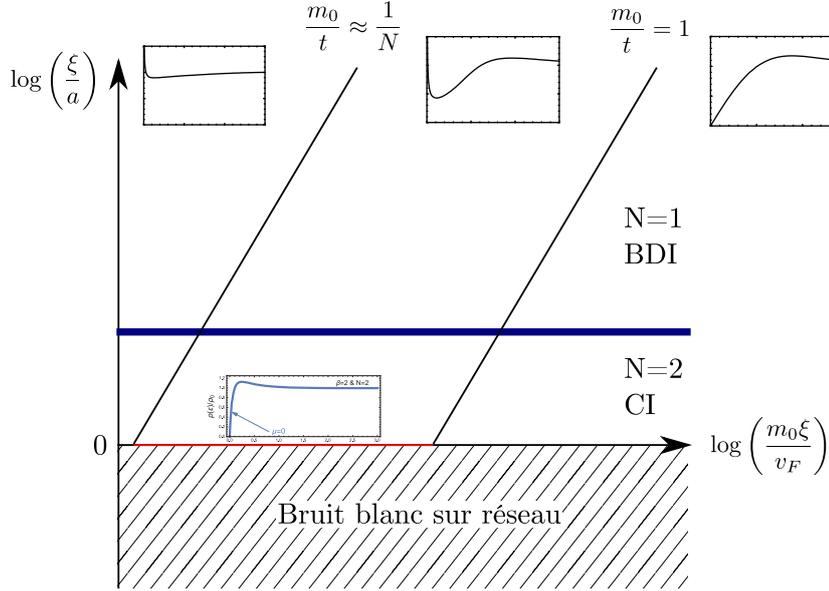


FIGURE 7.2 – Représentation schématique du diagramme de phase et des contraintes numériques. Dans un premier temps, toutes les situations où la distance de corrélation du bruit est inférieure au pas du réseau sont équivalentes, d’où la zone hachurée qui représente la limite du bruit blanc sur réseau. Ensuite, on s’attend à une transition vers un régime où la diffusion intervallée devient négligeable au fur et à mesure qu’on augmente ξ . Cette transition est représentée par la ligne bleue. On classe ensuite le système dans ses différentes phases en fonction de ses symétries. Par construction le système possède une symétrie chirale exacte $\mathcal{C} = \sigma_y$. Dans le cas où la diffusion intervallée est négligeable, on peut alors définir l’opérateur de renversement du temps à basse énergie $\mathcal{T} = \sigma_z \mathcal{K}$ tel que $\mathcal{T} = +1$. Le système est alors dans une phase BDI. Dans le cas où les deux vallées sont couplées, le seul renversement du temps possible est l’opération de conjugaison qui s’exprime à basse énergie sous la forme $\mathcal{T} = \tau_x \mathcal{K}$ et dont le carré est négatif $\mathcal{T}^2 = -1$. Le système est alors dans une phase CI. Dans le régime sans intervallée on s’attend à retrouver les résultats de Bartosch [80] tandis que dans la limite du bruit blanc sur réseau on retrouve la densité d’états de Grabsch et Texier [82, 83]. Les deux lignes diagonales représentent nos deux contraintes numériques, le terme désordonné doit être suffisamment fort pour mélanger plusieurs niveaux d’énergies mais également suffisamment faible pour pouvoir négliger la diffusion vers des états de haute énergie. Nos simulations se situent donc toutes dans la zone délimitée par en dessous par la zone hachurée et par les côtés par les lignes diagonales noires.

$$\overline{\lambda_{KM}} = \frac{1}{6} \sum_j \lambda_j^A - \lambda_j^B \quad (7.5)$$

$$\overline{\lambda_{VZ}} = \frac{1}{6} \sum_{j,\alpha} \lambda_j^\alpha. \quad (7.6)$$

Le terme désordonné $u(R)$ est créé par convolution d'un bruit blanc gaussien avec une gaussienne. Les corrélations de u sont alors de forme gaussienne et non exponentielle comme dans [80] mais on ne s'attend pas à observer de différences qualitatives puisqu'il s'agit toujours de corrélations à courte portée. Nous choisissons de repérer l'amplitude du minimum de densité d'états pour le régime $\xi \gg a$ et le maximum de densité d'états pour $\xi \sim a$. La distinction entre les deux régimes est faite lorsque les deux pics du régime $\xi \ll a$ fusionnent au vu de la résolution des simulations.

Numériquement nous avons plusieurs contraintes. Tout d'abord, lorsque la distance de corrélation devient inférieure à la distance interatomique, nous sommes effectivement dans un modèle de bruit blanc sur réseau. Ensuite, les modèles continus considérés jusqu'à présent nécessitent que le terme ouvrant un gap soit une perturbation du terme cinétique pour éviter le mélange avec des états de haute énergie cinétique, ce qui impose une limite à l'amplitude du désordre pour laquelle les résultats décrits précédemment peuvent s'appliquer $\Delta_\sigma \ll t$. Enfin le désordre doit être suffisamment fort pour pouvoir mélanger des états d'énergies voisines. Pour un système avec N cellule unité, l'espacement des niveaux cinétiques est de l'ordre de t/N , donc on doit avoir $\Delta_s \gg t/N$. Ces contraintes sont illustrées dans la figure 7.2.

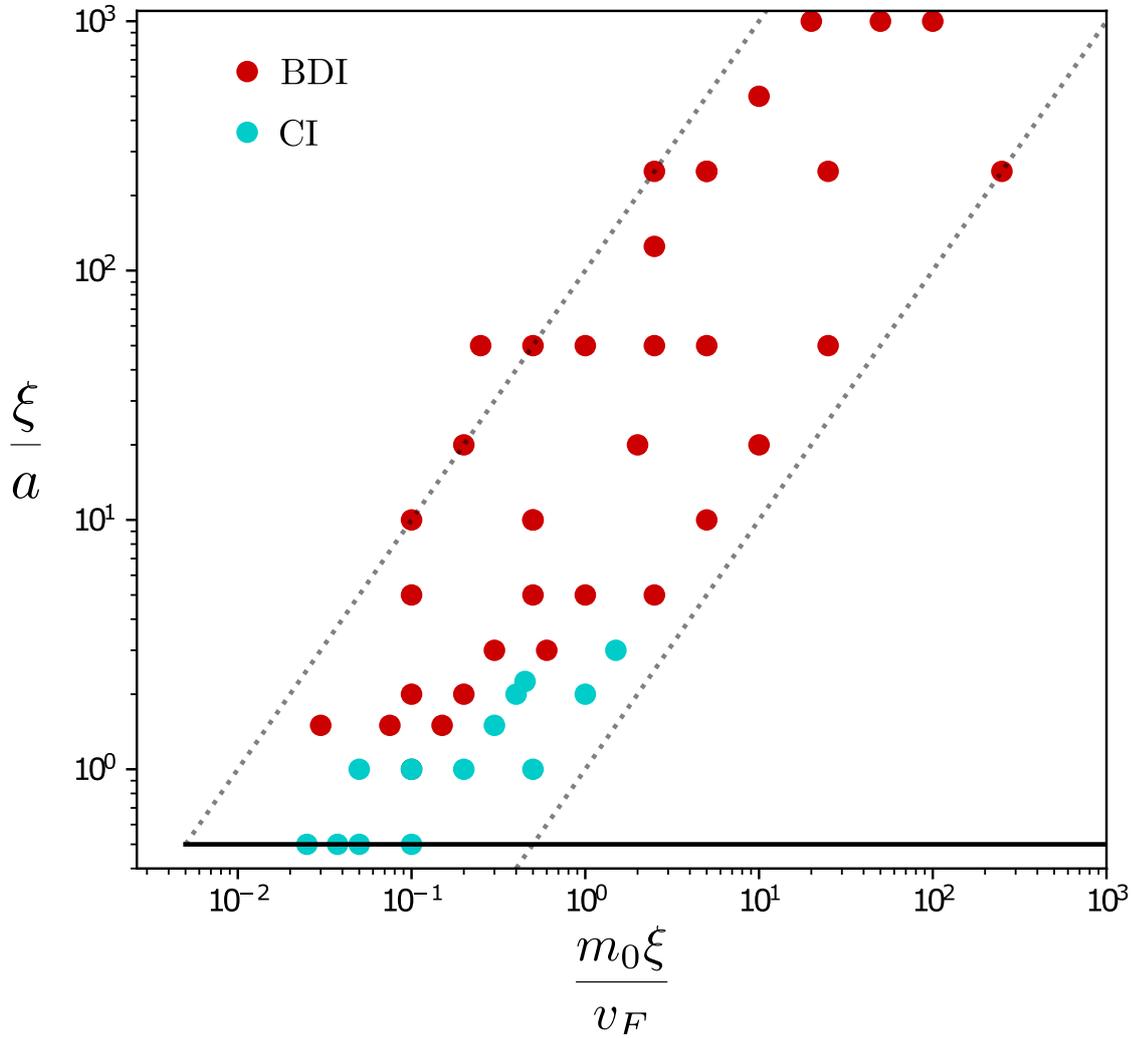


FIGURE 7.3 – Diagramme de phase numérique du système de la figure 7.1 avec une masse désordonnée sur réseau. Pour chaque point, on détermine si la densité d'état à énergie nulle (à la précision numérique prêt) est amoindrie ou maximale. En effet, si le système se trouve dans la phase CI, la figure 6.4 montre que la densité d'état à énergie nulle est réduite. Dans la phase BDI, pour toute distance de corrélation finie, la divergence de la densité d'état à énergie nulle persiste ce qui se traduit sur réseau par un maximum de densité à énergie nulle. On détermine donc la phase par le comportement de la densité d'états moyenne.

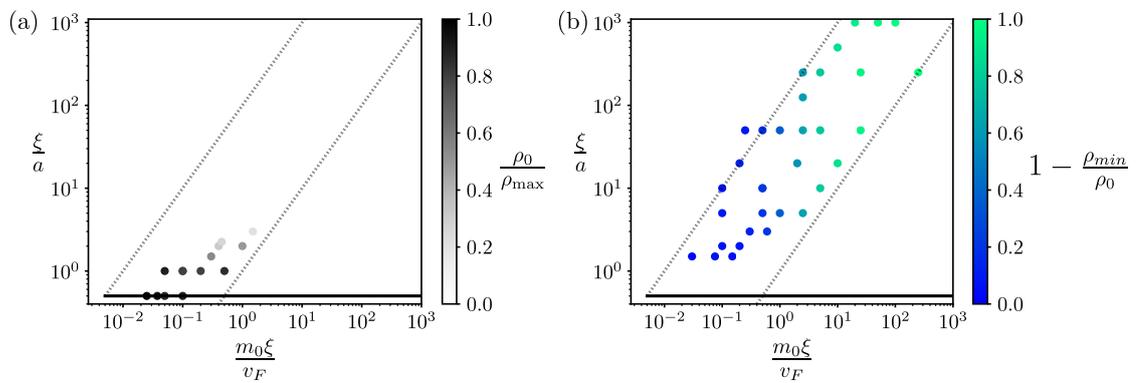


FIGURE 7.4 – (a) La nuance de gris représente l’amplitude du pic de densité d’états lorsque la densité d’états est supprimée à énergie nulle. Les points sur la ligne épaisse à $\xi = 0.5a$ sont tous dans le bruit blanc sur réseau. Dans ce régime, les deux paramètres agissent indépendamment. (b) La nuance de couleur du bleu au vert représente l’amplitude du minimum de densité d’états. L’amplitude du minimum semble bien ne dépendre que de $m_0 \xi$ comme prédit par Bartosch. [80]

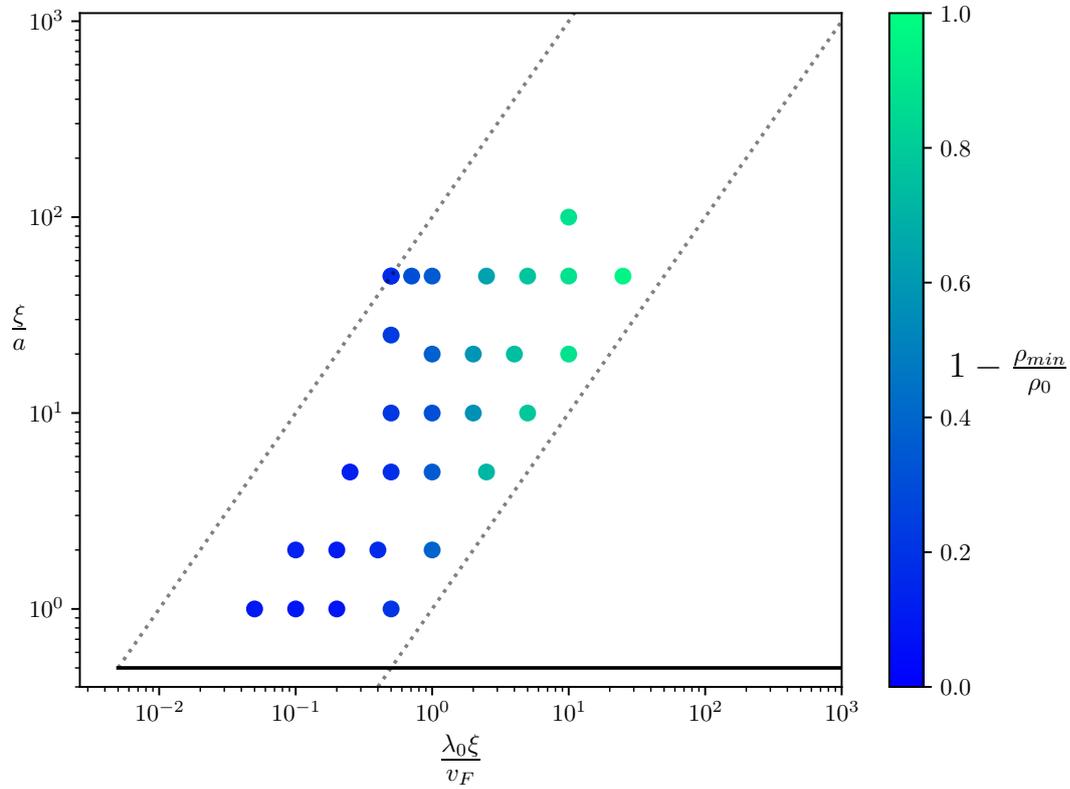


FIGURE 7.5 – Diagramme de phase numérique pour un terme de spin-orbite Kane-Mele désordonné. La couleur représente l’amplitude du minimum de densité d’états. À l’inverse de la masse, on ne décèle aucune suppression de la densité d’états à énergie nulle dans la limite du bruit blanc sur réseau dans la limite de résolution de nos simulations. Cette différence de comportement est en accord avec la suppression de la diffusion intervallée par le spin-orbite. Si on trouve analytiquement une configuration spéciale l’atténuant encore plus, sa suppression générique est suffisamment importante pour qu’aucun de ses effets ne soient décelables dans la limite du bruit blanc.

7.2 | Suppression de la diffusion intervallée par les termes Kane-Mele et vallée-Zeeman

Les diagrammes de phase désordonnée pour le spin-orbite (figure 7.5) et la masse (figures 7.3 et 7.4) diffèrent par l'existence d'un régime de fort intervallée pour la masse alors qu'il est absent pour le spin-orbite. Dans cette section nous mettons en valeur l'impact du type de terme désordonné sur les termes d'intervallée induits. On trouve qu'à cause du caractère imaginaire pur du spin orbite, un désordre sur ce terme induit nécessairement moins d'intervallée qu'une masse désordonnée. On mettra également en évidence une configuration spéciale réduisant encore plus l'amplitude de la diffusion inter-vallée, même si nous ne distinguons pas numériquement de différence entre une configuration arbitraire et cette configuration spéciale.

Nous commençons par réécrire dans l'espace de Fourier le hamiltonien 7.1 :

$$H = -t \sum_{\vec{k}, a} c_{\vec{k}Aa}^\dagger \gamma(\vec{k}) c_{\vec{k}Ba} + H.c. \quad (7.7)$$

$$+ \sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2 \\ \alpha, \beta, a, b}} c_{\vec{k}_2 \alpha a}^\dagger \left[\tilde{m}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \sigma_z^{\alpha\beta} \delta^{ab} + \frac{1}{3\sqrt{3}} \tilde{u}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \Gamma_\lambda^\alpha(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \delta^{\alpha\beta} s_z^{ab} \right] c_{\vec{k}_1 \beta b},$$

où \tilde{m} et \tilde{u} sont les transformées de Fourier des termes inhomogènes $m(R)$ et $u(R)$ et les facteurs intra-cellule-unité sont

$$\gamma(\vec{k}) = \sum_{j=1}^3 \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{d}_j) \quad (7.8a)$$

$$\Gamma_\lambda^\alpha(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = i \sum_{j=1}^3 \lambda_j^\alpha \left[\exp(i\vec{k}_1 \cdot \vec{d}_j) - \exp(-i\vec{k}_2 \cdot \vec{d}_j) \right] \quad (7.8b)$$

$$\Gamma_\lambda^\alpha(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = -2 \sum_{j=1}^3 \lambda_j^\alpha \sin(\vec{k}_+ \cdot \vec{d}_j) \exp(i\vec{k}_- \cdot \vec{d}_j),$$

avec \vec{d}_j les trois vecteurs pointant sur les premiers voisins et les moments auxiliaires $\vec{k}_\pm \equiv (\vec{k}_1 \pm \vec{k}_2)/2$. Le calcul explicite de Γ met en évidence l'interdiction de la rétrodiffusion pour le spin-orbite, $\Gamma(\vec{k}, -\vec{k}) = 0$. Cette propriété peut néanmoins être déduite des symétries de H_{KM} . En effet, $\mathcal{K}H_{KM}\mathcal{K} = -H_{KM}$ où \mathcal{K} est l'opérateur antiunitaire définit tel que $\mathcal{K}\alpha_{c_{x,a}}\mathcal{K} = \alpha_{c_{x,a}}^*$. En conséquence $\mathcal{K}|k, a\rangle = |-k, a\rangle$.

De plus H_{KM} ne mélange pas les sous-espace de spin et de pseudo-spin, on obtient alors

$$\begin{aligned}
\langle -k|H_{KM}|k\rangle &= \langle k|\mathcal{K}^\dagger\mathcal{K}H_{KM}| -k\rangle^* \\
&= -\langle k|H_{KM}| -k\rangle^* \\
&= -\langle -k|H_{KM}|k\rangle .
\end{aligned} \tag{7.9}$$

On en conclut que $\langle -k|H_{KM}|k\rangle = 0$. Les propriétés de H_{VZ} sont exactement les mêmes, ce qui explique la robustesse des états de parois vallée-Zeeman même lorsque la paroi devient abrupte dans une configuration armchair. Γ étant une fonction lisse de \vec{k}_1 et \vec{k}_2 , on en déduit que le spin-orbite est un plus mauvais diffuseur intervallée que la masse Semenoff qui possède un facteur intra-cellule-unité trivial. En notant $\pm\vec{K}$ les points de Dirac et en prenant $\vec{k}_1 = \tau\vec{K} - \vec{q}_0$ et $\vec{k}_2 = -\tau\vec{K} + \vec{q}_0 + \vec{q}$ dans des vallées opposées, on obtient au premier ordre en \vec{q}

$$\begin{aligned}
\Gamma_\lambda^{\alpha,\tau}(\vec{k}_1, \vec{k}_2) &= iz^\tau \sum_{j=1}^3 \lambda_j^\alpha [\exp(-i\vec{q}_0 \cdot \vec{a}_j) - \exp(-i(\vec{q}_0 + \vec{q}) \cdot \vec{a}_j)] \\
&\approx -z^\tau \sum_{j=1}^3 (\vec{a}_j \lambda_j^\alpha) \cdot \vec{q} + O(q^2, q_0^2, q_0 q),
\end{aligned} \tag{7.10}$$

où $z \equiv \exp(-i2\pi/3)$. On remarque alors que le premier ordre peut être annulé également si $\sum_{j=1}^3 \vec{a}_j \lambda_j^\alpha = 0$. De manière surprenante, seule la configuration respectant la symétrie C_3 centrée sur un site permet cette suppression lorsque $\lambda_1 \equiv \lambda_2 \equiv \lambda_3$

7.3 | Conductance du système

On détermine dans cette section la conductance de notre modèle en suivant l'article de Brouwer [78] traitant de chaînes chirales désordonnées dont le cas avec une chaîne correspond au modèle de Ovchinnikov. De manière similaire à Grabsch et Texier, le modèle à plusieurs chaînes de Brouwer ne considère aucune corrélation dans les éléments de la matrice de masse au delà de celles imposées par l'hermiticité des opérateurs. On reproduit donc le calcul en considérant les corrélations pertinentes. On considère dans un premier temps le modèle de la masse Semenoff avec des termes intervallées quelconques.

$$\mathcal{H} = iv_F \partial_x \sigma_x \tau_z + m_1(x) \sigma_z + m_2(x) \tau_x \sigma_z + m_3(x) \tau_y \sigma_z \tag{7.11}$$

Ce hamiltonien possède la symétrie chirale σ_y . Par simplicité, nous effectuons une rotation pour nous placer dans une base propre de la symétrie chirale ($\sigma_y \rightarrow \sigma_z \rightarrow -\sigma_y$ et σ_x est inchangée). Par conséquent, la matrice de transfert s'écrit

$$T = T_x \exp \left(\frac{1}{v_F} \int_0^{\delta L} m_1(x) \tau_z \sigma_z + i m_2(x) \tau_y \sigma_z - i m_3(x) \tau_x \sigma_z dx \right) \quad (7.12)$$

Les symétries de T sont alors

$$\sigma_z T \sigma_z = T \quad (7.13)$$

$$\tau_z \sigma_y T \tau_z \sigma_y T^\dagger (= \tau_z \sigma_x T \tau_z \sigma_x T^\dagger) = \mathbb{1} \quad (7.14)$$

L'expression entre parenthèse est déduite de la symétrie chirale et du premier courant, elle n'apporte donc aucune nouvelle information. Par conséquent, dans la base $\{|1, 1\rangle, |1, -1\rangle, |-1, 1\rangle, |-1, -1\rangle\}$ où le premier nombre est la valeur propre de σ_z et le second de τ_z , la matrice T peut s'écrire

$$T = \begin{pmatrix} M & \\ & \tau_z M^{\dagger-1} \tau_z \end{pmatrix} \quad (7.15)$$

où M est une matrice complexe inversible 2×2 . On peut alors écrire la décomposition en valeur singulière de M sous la forme

$$M = U \exp(X) V \quad (7.16)$$

où X est une matrice diagonale 2×2 réelle et U et V sont des matrices unitaires. On note $x_{1,2}$ les éléments diagonaux de X . On relie alors ces valeurs à la conductance grâce à la formule de Landauer-Büttiker

$$g = \sum_{j=1}^2 \frac{1}{\cosh(x_j)^2}. \quad (7.17)$$

Les x_j suivent un mouvement stochastique le long du système. En calculant les moments des incréments de ces valeurs, on peut alors déterminer les coefficients de l'équation de Fokker-Planck respectée par la distribution des x_j comme détaillé dans la revue de Beenakker [85]. Pour un incrément δL , on a alors au premier ordre en δL

$$\langle \delta x_i \rangle = \frac{2\sigma^2 \delta L}{3v_F^2} \coth(x_i - x_j) \quad (7.18)$$

$$\langle \delta x_i^2 \rangle = \frac{\sigma^2 \delta L}{3v_F^2} \quad (7.19)$$

$$\langle \delta x_i \delta x_j \rangle = -\frac{\sigma^2 \delta L}{2v_F^2} \quad (7.20)$$

où σ est l'écart-type de m_1 et $\sqrt{m_2^2 + m_3^2}$ et $j \neq i$. La différence avec la référence [78] sur les chaînes chirales est la présence d'une corrélation entre les δx_j .

La première équation représente l'interaction répulsive entre les x_j similaire à celle de Brouwer [78] qui est accentuée par les corrélations négatives entre les x_j de la troisième équation. L'équation de Fokker-Planck suivie est alors

$$\frac{\partial P}{\partial L} = -\frac{2\sigma^2}{3v_F^2} \sum_{j=1, i \neq j}^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \coth(x_j - x_i) P + \frac{\sigma^2}{6v_F^2} \sum_{j=1}^2 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} P - \frac{\sigma^2}{2v_F^2} \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} P \quad (7.21)$$

où P est la densité de probabilité jointe de (x_1, x_2) pour un système de taille L . On peut réécrire l'équation de Fokker-Planck sous la forme

$$\partial_L P = \vec{\nabla}_{\vec{x}} \cdot \vec{\mu} P + \vec{\nabla}_{\vec{x}}^T D \vec{\nabla} P \quad (7.22)$$

où μ est la vitesse de dérive et D la matrice de diffusion. D étant constante, réelle et symétrique, on peut diagonaliser D avec un changement de base global $\mathbf{x}' = O\mathbf{x}$ avec O orthogonale. Ici

$$D = \frac{\sigma^2}{2v_F^2} \begin{pmatrix} 1/3 & -1/2 \\ -1/2 & 1/3 \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

dont le spectre vaut $(\sigma^2/(2v_F^2))(1/3 \mp 1/2) = \{-\sigma^2/(12v_F^2), 5\sigma^2/(12v_F^2)\}$ et les vecteurs propres sont respectivement $(1 \pm 1)^T$. En faisant le changement de variable $x'_1 = x_1 + x_2$ et $x'_2 = x_1 - x_2$, l'équation s'écrit

$$\partial_L P = -\vec{\nabla}_{\vec{x}'} \cdot O \vec{\mu} P + \vec{\nabla}_{\vec{x}'}^T O D O^T \vec{\nabla}_{\vec{x}'} P, \quad (7.24)$$

ce qui donne après substitution

$$\partial_L P = -\frac{2\sigma^2}{3v_F^2} \vec{\nabla}_{\vec{x}'} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \coth(x'_2) \end{pmatrix} P + \frac{\sigma^2}{v_F^2} \left(-\frac{1}{6} \partial_{x'_1}^2 + \frac{5}{6} \partial_{x'_2}^2 \right) P. \quad (7.25)$$

La variable $x'_2 = x_1 - x_2$ suit donc un processus diffusif standard tandis que $x'_1 = x_1 + x_2$ suit un processus de concentration. La vitesse de dérive de $x_1 + x_2$

est nulle tandis que celle de $x_1 - x_2$ vaut $4\sigma^2 \coth(x_1 - x_2)/(3v_F^2)$. Le processus de diffusion maintient donc la condition initiale $x_1 = -x_2$ car $\langle x'_1 \rangle = 0$ et se concentre autour de cette valeur moyenne tandis que $x'_2 = 2x_1$ voit sa valeur moyenne dériver vers $+\infty$. Une fois x_1 suffisamment large, sa vitesse de dérive devient constante. On trouve donc que la conductance du système décroît exponentiellement avec la taille du système et l'effet des corrélations dans la matrice de masse est de garantir $x_1 = -x_2$.

La reproduction de ce calcul de telle sorte que le terme de masse intravallée soit de la forme Kane-Mele $\lambda(x)\sigma_z\tau_z$ au lieu de $m(x)\sigma_z$ donne un résultat très différent, puisque la vitesse de dérive des x_j s'annule. Le système est alors loin d'être un bon conducteur mais la valeur moyenne des x_j reste 0 tout au long du processus de diffusion et seul leur variance augmente.

La décroissance exponentielle de la conduction d'un système avec une masse Semenoff désordonnée est donc un indicateur de localisation forte en accord avec les attentes usuelles du désordre en dimension 1. Cette absence de divergence pour le spin-orbite Kane-Mele laisse donc supposer un comportement de localisation différent. Une première étape éventuelle dans la vérification de cette hypothèse serait la reproduction du calcul de conductivité avec une amplitude du désordre intervallée différente du désordre intravallée afin de vérifier que l'annulation de la vitesse de dérive n'est pas accidentelle. Si elle ne l'est pas, alors notre système serait un système unidimensionnel résistant à la localisation forte. Si cette annulation est accidentelle, notre modèle serait alors un modèle critique séparant deux phases potentiellement différentes qu'il serait alors intéressant de caractériser.

Chapitre 8

Conclusion

Usuellement, une approche continue basse énergie de modèle sur réseau désordonné amène à considérer toute distance de corrélation finie comme nulle dans la limite continue, celle-ci se contentant de renormaliser la constante de diffusion du bruit stochastique. Néanmoins, nous avons montré que lorsque la distance de corrélation devient grande devant le pas du réseau, le système garde la mémoire du réseau même à basse énergie nécessitant une distance de corrélation non nulle dans le modèle continu. Lorsque cette distance de corrélation devient comparable à la distance interatomique, la nature du terme désordonné va grandement influencer sur l'amplitude de la diffusion intervallée qui en résultera. Dans le cas où le terme désordonné est de type Kane-Mele, la suppression de la diffusion intervallée est suffisamment forte pour qu'on en observe pas les effets, même dans la limite $\xi \sim a$. Lorsque la diffusion intervallée est trop forte, au lieu d'un pic de densité à énergie nulle, on observe une suppression. La similarité de cette suppression avec des modèles désordonnés *a priori* différents laisse supposer un lien entre le modèle de [82, 83] et le notre.

Le spin-orbite Kane-Mele se révèle robuste à la diffusion intervallée induite par ses propres inhomogénéités grâce à deux phénomènes. Tout d'abord la géométrie du spin-orbite empêche la rétrodiffusion et atténue donc les transitions intervallée. Ensuite, la diffusion des valeurs propres de transmission possède une vitesse de dérive nulle en fonction de la taille de l'échantillon même lorsqu'on rajoute artificiellement un terme d'intervallée de même amplitude dans le modèle.

Dans cette thèse, nous nous sommes attelés à la description d'inhomogénéités de spin-orbite unidimensionnelles dans le graphène. Pour ce faire nous avons étudié deux modèles fondamentaux : les parois de domaine et le désordre. Dans ces deux cas nous nous sommes efforcés de tenir compte de la présence de multiples vallées dans le graphène. Les arguments topologiques usuels sont en effet suffisants mais pas nécessaires au développement de modes robustes. En particulier, les propriétés universelles des matériaux se basent sur une connaissance locale dans l'espace réciproque du matériau tandis que les états de bord ne dépendent que de leur environnement en espace réel. Le théorème de flot spectral utilisé dans la première partie satisfait alors l'intuition qu'un état de bord, localisé dans l'espace et de basse

énergie, puisse être décrit par des propriétés topologiques locales dans l'espace réciproque. On peut donc étudier la robustesse à l'intervallée en rajoutant un terme de diffusion arbitraire au hamiltonien basse énergie, le prix à payer étant le doublement de la dimension de l'espace de Hilbert. On peut ainsi imaginer qu'il soit possible de construire une classification systématique des défauts avec cet outil.

L'étude du spin-orbite Kane-Mele par le théorème de flot spectral révèle également une possible voie d'amélioration de ce théorème. En effet, comme précisé dans le paragraphe d'introduction de la section 4.1, les états d'interface du spin-orbite Kane-Mele sont des états hélicoïdaux, or le théorème de flot spectral prédit des états chiraux. Ce sont les symétries du système étudié dans cette thèse qui permettent de décomposer les paires en états chiraux de différents secteurs. Ainsi, dans le cas des états de parois vallée-Zeeman, la perte de la symétrie de spin S_z aurait pu condamner la prédiction de ces états si les deux états d'une même vallée possédaient des directions du mouvement opposées. Nous pensons donc qu'il serait intéressant de développer une version hélicoïdale du théorème de flot spectral de la même manière que l'invariant \mathbb{Z}_2 fait suite au nombre de Chern.

Entre temps, le théorème prédisant des modes non considérés jusqu'à présent pour la variante du modèle BHZ présentée à la fin de la section 3.3, son étude plus approfondie nous semble pertinente. De plus, cette section montre également que le nombre de Chern d'interface n'est pas simplement la différence de nombres de Chern de vallée mais qu'une correction est nécessaire. Si dans cette thèse la correction apportée était toujours positive, le théorème de flot spectral prédisant alors toujours plus d'états que les invariants ou pseudo-invariants de volume, il serait intéressant de vérifier si cette propriété est toujours vraie ou bien s'il existe des systèmes où le théorème prédit moins d'états de bord que les invariants de volume.

Enfin, une analyse numérique du modèle basse énergie de masse Semenoff désordonnée avec deux vallées couplées dans un système unidimensionnel permettrait de déterminer si la correspondance avec la densité d'états de Grabsch et Texier montrée en figure 6.4 est purement accidentelle ou non.

Annexe : paroi Semenoff abrupte dans l'espace réciproque sur réseau

Nous souhaitons exprimer dans l'espace réciproque le hamiltonien du graphène avec le terme de masse Semenoff suivant

$$H_{\text{Semenoff}} = \sum_{\beta=0}^{\frac{N_y}{2}-1} \sum_{\alpha=0}^{N_x-1} m_{\alpha} (c_{\alpha\beta,A1}^{\dagger} c_{\alpha\beta,A1} + c_{\alpha\beta,A2}^{\dagger} c_{\alpha\beta,A2} - c_{\alpha\beta,B1}^{\dagger} c_{\alpha\beta,B1} - c_{\alpha\beta,B2}^{\dagger} c_{\alpha\beta,B2}) \quad (8.1)$$

$$\text{où } m_{\alpha} = \begin{cases} +m & \text{if } \alpha < \frac{N_x}{2} \\ -m & \text{otherwise} \end{cases} \quad (8.2)$$

La masse étant locale et n'étant pas un terme de saut, l'homogénéité en y a pour conséquence que le terme de masse a la même expression dans l'espace réciproque k_y . Il ne reste alors que la transformation de Fourier en x à calculer. Étant donné que les quantités $\{A1, B1, A2, B2\}$ sont conservées, on se concentre sur le terme $A1$, le terme $A2$ ayant la même forme et $B1$ et $B2$ ont simplement le signe opposé.

$$H_{\text{Semenoff},A1} = \sum_{k_y=0}^{\frac{N_y}{2}-1} \sum_{\alpha,k_1,k_2}^{N_x-1} \frac{m_{\alpha}}{N_x} e^{2i\pi\alpha\frac{k_1-k_2}{N_x}} c_{k_1,k_y,A1}^{\dagger} c_{k_2,k_y,A1} \quad (8.3)$$

On décompose la somme sur α en deux $\alpha < N_x/2$ et $\alpha \geq N_x/2$ qu'on réunit ensuite.

$$H_{\text{Semenoff},A1} = \sum_{k_y=0}^{\frac{N_y}{2}-1} \sum_{\alpha,k_1,k_2}^{\frac{N_x}{2}-1} \frac{m}{N_x} e^{2i\pi\alpha\frac{k_1-k_2}{N_x}} (1 - e^{i\pi(k_1-k_2)}) c_{k_1,k_y,A1}^{\dagger} c_{k_2,k_y,A1} \quad (8.4)$$

Donc si $k_1 - k_2 \equiv 0[2]$, alors le terme de la somme est nulle et sinon la somme sur α est alors une simple somme géométrique de terme $e^{2i\pi\alpha\frac{k_1-k_2}{N_x}}$ de telle sorte qu'on obtient l'expression finale

$$H_{\text{Semenoff},A1} = \sum_{k_y=0}^{\frac{N_y}{2}-1} \sum_{k_1-k_2 \equiv 1[2]}^{\frac{N_x}{2}-1} \frac{m}{N_x} \frac{4}{1 - e^{2i\pi \frac{k_1-k_2}{N_x}}} c_{k_1,k_y,A1}^\dagger c_{k_2,k_y,A1} \quad (8.5)$$

Bibliographie

- [1] K. S. NOVOSELOV et al. « Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films ». In : *Science* 306.5696 (2004), p. 666-669. DOI : 10.1126/science.1102896.
- [2] P. R. WALLACE. « The Band Theory of Graphite ». In : *Phys. Rev.* 71 (9 mai 1947), p. 622-634. DOI : 10.1103/PhysRev.71.622.
- [3] M. KATSNELSON, K. NOVOSELOV et A. GEIM. « Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene ». In : *Nature Phys* 2 (2006), p. 620-625. DOI : 10.1038/nphys384.
- [4] V. V. CHEIANOV et V. I. FAL'KO. « Selective transmission of Dirac electrons and ballistic magnetoresistance of $n-p$ junctions in graphene ». In : *Phys. Rev. B* 74 (4 juill. 2006), p. 041403. DOI : 10.1103/PhysRevB.74.041403.
- [5] A. F. ANDREEV. « The thermal Conductivity of the Intermediate State in Superconductors ». In : *JETP* 19.5 (1964), p. 1228-1231. URL : <http://www.jetp.ras.ru/cgi-bin/e/index/e/19/5/p1228?a=list>.
- [6] C. W. J. BEENAKKER. « Specular Andreev Reflection in Graphene ». In : *Phys. Rev. Lett.* 97 (6 août 2006), p. 067007. DOI : 10.1103/PhysRevLett.97.067007.
- [7] C. W. J. BEENAKKER. « Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene ». In : *Rev. Mod. Phys.* 80 (4 oct. 2008), p. 1337-1354. DOI : 10.1103/RevModPhys.80.1337.
- [8] R. R. NAIR et al. « Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene ». In : *Science* 320.5881 (2008), p. 1308-1308. DOI : 10.1126/science.1156965.
- [9] D. KOCHAN, S. IRMER et J. FABIAN. « Model spin-orbit coupling Hamiltonians for graphene systems ». In : *Phys. Rev. B* 95 (16 avr. 2017), p. 165415. DOI : 10.1103/PhysRevB.95.165415.
- [10] A. W. CUMMINGS et al. « Giant Spin Lifetime Anisotropy in Graphene Induced by Proximity Effects ». In : *Phys. Rev. Lett.* 119 (20 nov. 2017), p. 206601. DOI : 10.1103/PhysRevLett.119.206601.
- [11] A. DAVID et al. « Induced spin-orbit coupling in twisted graphene-transition metal dichalcogenide heterobilayers: Twistronics meets spintronics ». In : *Phys. Rev. B* 100 (8 août 2019), p. 085412. DOI : 10.1103/PhysRevB.100.085412.

- [12] Y. LI et M. KOSHINO. « Twist-angle dependence of the proximity spin-orbit coupling in graphene on transition-metal dichalcogenides ». In : *Phys. Rev. B* 99 (7 fév. 2019), p. 075438. DOI : 10.1103/PhysRevB.99.075438.
- [13] B. YANG et al. « Tunable spin-orbit coupling and symmetry-protected edge states in graphene/WS2 ». In : *2D Materials* 3.3 (sept. 2016), p. 031012. DOI : 10.1088/2053-1583/3/3/031012.
- [14] Z. WANG et al. « Origin and Magnitude of ‘Designer’ Spin-Orbit Interaction in Graphene on Semiconducting Transition Metal Dichalcogenides ». In : *Phys. Rev. X* 6 (4 oct. 2016), p. 041020. DOI : 10.1103/PhysRevX.6.041020.
- [15] T. WAKAMURA et al. « Spin-orbit interaction induced in graphene by transition metal dichalcogenides ». In : *Phys. Rev. B* 99 (24 juin 2019), p. 245402. DOI : 10.1103/PhysRevB.99.245402.
- [16] S. ZIHLMANN et al. « Large spin relaxation anisotropy and valley-Zeeman spin-orbit coupling in WSe₂/graphene/h-BN heterostructures ». In : *Phys. Rev. B* 97 (7 fév. 2018), p. 075434. DOI : 10.1103/PhysRevB.97.075434.
- [17] C. L. KANE et E. J. MELE. « Z₂ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect ». In : *Phys. Rev. Lett.* 95 (14 sept. 2005), p. 146802. DOI : 10.1103/PhysRevLett.95.146802.
- [18] M. GMITRA et al. « Trivial and inverted Dirac bands and the emergence of quantum spin Hall states in graphene on transition-metal dichalcogenides ». In : *Phys. Rev. B* 93 (15 avr. 2016), p. 155104. DOI : 10.1103/PhysRevB.93.155104.
- [19] Y. XIA et al. « Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface ». In : *Nature Physics* 5.6 (mai 2009), p. 398-402. DOI : 10.1038/nphys1274.
- [20] K. v. KLITZING, G. DORDA et M. PEPPER. « New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance ». In : *Phys. Rev. Lett.* 45 (6 août 1980), p. 494-497. DOI : 10.1103/PhysRevLett.45.494.
- [21] R. B. LAUGHLIN. « Quantized Hall conductivity in two dimensions ». In : *Phys. Rev. B* 23 (10 mai 1981), p. 5632-5633. DOI : 10.1103/PhysRevB.23.5632.
- [22] D. J. THOULESS et al. « Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential ». In : *Phys. Rev. Lett.* 49 (6 août 1982), p. 405-408. DOI : 10.1103/PhysRevLett.49.405.

- [23] F. D. M. HALDANE. « Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly" ». In : *Phys. Rev. Lett.* 61 (18 oct. 1988), p. 2015-2018. DOI : 10.1103/PhysRevLett.61.2015.
- [24] C. L. KANE et E. J. MELE. « Quantum Spin Hall Effect in Graphene ». In : *Phys. Rev. Lett.* 95 (22 nov. 2005), p. 226801. DOI : 10.1103/PhysRevLett.95.226801.
- [25] C. KANE. « Chapter 1 - Topological Band Theory and the \mathbb{Z}_2 Invariant ». In : *Topological Insulators*. Sous la dir. de M. FRANZ et L. MOLENKAMP. T. 6. Contemporary Concepts of Condensed Matter Science. Elsevier, 2013, p. 3-34. DOI : <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63314-9.00001-9>.
- [26] V. VOLTERRA. « Sur l'équilibre des corps élastiques multiplement connexes ». fre. In : *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure* 24 (1907), p. 401-517. URL : <http://eudml.org/doc/81250>.
- [27] A. ABRIKOSOV. « The magnetic properties of superconducting alloys ». In : *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 2.3 (1957), p. 199-208. ISSN : 0022-3697. DOI : [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(57\)90083-5](https://doi.org/10.1016/0022-3697(57)90083-5).
- [28] J. FRIEDEL. « Metallic alloys ». In : *Il Nuovo Cimento* 7.S2 (sept. 1958), p. 287-311. DOI : 10.1007/bf02751483.
- [29] N. D. MERMIN. « The topological theory of defects in ordered media ». In : *Rev. Mod. Phys.* 51 (3 juill. 1979), p. 591-648. DOI : 10.1103/RevModPhys.51.591.
- [30] G. TOULOUSE et M. KLÉMAN. « Principles of a classification of defects in ordered media ». In : *Journal de Physique Lettres* 37.6 (1976), p. 149-151. DOI : 10.1051/jphyslet:01976003706014900.
- [31] G. E. VOLOVIK et V. P. MINEEV. « Line and point singularities in superfluid He³ ». In : *JETP letters* 24.11 (déc. 1976), p. 608-608. URL : http://jetpletters.ru/ps/1818/article_27785.pdf.
- [32] G. E. VOLOVIK et V. P. MINEEV. « Investigation of singularities in superfluid He³ in liquid crystals by the homotopic topology methods ». In : *JETP* 45.6 (juin 1977), p. 1186. URL : http://www.jetp.ras.ru/cgi-bin/dn/e_045_06_1186.pdf.
- [33] F. S. WELLS et al. « Analysis of low-field isotropic vortex glass containing vortex groups in YBa₂Cu₃O_{7-x} thin films visualized by scanning SQUID microscopy ». In : *Scientific Reports* 5.1 (mars 2015). DOI : 10.1038/srep08677.

- [34] M. F. ATIYAH et I. M. SINGER. « The index of elliptic operators on compact manifolds ». In : *Bulletin of the American Mathematical Society* 69.3 (1963), p. 422-433. DOI : 10.1090/s0002-9904-1963-10957-x.
- [35] F. SCHINDLER et al. « Higher-order topology in bismuth ». In : *Nature Physics* 14.9 (juill. 2018), p. 918-924. DOI : 10.1038/s41567-018-0224-7.
- [36] I. MARTIN, Y. M. BLANTER et A. F. MORPURGO. « Topological Confinement in Bilayer Graphene ». In : *Phys. Rev. Lett.* 100 (3 jan. 2008), p. 036804. DOI : 10.1103/PhysRevLett.100.036804.
- [37] A. VAEZI et al. « Topological Edge States at a Tilt Boundary in Gated Multilayer Graphene ». In : *Phys. Rev. X* 3 (2 juin 2013), p. 021018. DOI : 10.1103/PhysRevX.3.021018.
- [38] L.-J. YIN et al. « Direct imaging of topological edge states at a bilayer graphene domain wall ». In : *Nature Communications* 7.1 (juin 2016), p. 11760. ISSN : 2041-1723. DOI : 10.1038/ncomms11760.
- [39] W. YAO, S. A. YANG et Q. NIU. « Edge States in Graphene: From Gapped Flat-Band to Gapless Chiral Modes ». In : *Phys. Rev. Lett.* 102 (9 mars 2009), p. 096801. DOI : 10.1103/PhysRevLett.102.096801.
- [40] G. W. SEMENOFF, V. SEMENOFF et F. ZHOU. « Domain Walls in Gapped Graphene ». In : *Phys. Rev. Lett.* 101 (8 août 2008), p. 087204. DOI : 10.1103/PhysRevLett.101.087204.
- [41] K.-I. SASAKI et al. « Soliton trap in strained graphene nanoribbons ». In : *New Journal of Physics* 12.10 (oct. 2010), p. 103015. DOI : 10.1088/1367-2630/12/10/103015.
- [42] S.-R. E. YANG. « Soliton Fractional Charges in Graphene Nanoribbon and Polyacetylene: Similarities and Differences ». In : *Nanomaterials* 9.6 (2019). ISSN : 2079-4991. DOI : 10.3390/nano9060885.
- [43] P. SAN-JOSE et E. PRADA. « Helical networks in twisted bilayer graphene under interlayer bias ». In : *Phys. Rev. B* 88 (12 sept. 2013), p. 121408. DOI : 10.1103/PhysRevB.88.121408.
- [44] D. K. EFIMKIN et A. H. MACDONALD. « Helical network model for twisted bilayer graphene ». In : *Phys. Rev. B* 98 (3 juill. 2018), p. 035404. DOI : 10.1103/PhysRevB.98.035404.
- [45] I. V. LEBEDEVA et A. M. POPOV. « Energetics and Structure of Domain Wall Networks in Minimally Twisted Bilayer Graphene under Strain ». In : *The Journal of Physical Chemistry C* 124.3 (jan. 2020), p. 2120-2130. ISSN : 1932-7447. DOI : 10.1021/acs.jpcc.9b08306.

- [46] Y. H. KWAN et al. « Domain wall competition in the Chern insulating regime of twisted bilayer graphene ». In : *Phys. Rev. B* 104 (11 sept. 2021), p. 115404. DOI : 10.1103/PhysRevB.104.115404.
- [47] O. SHEVTSOV et al. « Graphene-Based Heterojunction between Two Topological Insulators ». In : *Phys. Rev. X* 2 (3 juill. 2012), p. 031004. DOI : 10.1103/PhysRevX.2.031004.
- [48] A. P. SCHNYDER et al. « Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions ». In : *Phys. Rev. B* 78 (19 nov. 2008), p. 195125. DOI : 10.1103/PhysRevB.78.195125.
- [49] A. KITAEV. « Periodic table for topological insulators and superconductors ». In : *AIP Conference Proceedings* 1134.1 (2009), p. 22-30. DOI : 10.1063/1.3149495.
- [50] C.-K. CHIU et al. « Classification of topological quantum matter with symmetries ». English. In : *Reviews of Modern Physics* 88.3 (août 2016), p. 035005. DOI : 10.1103/RevModPhys.88.035005.
- [51] J. LI et al. « Marginality of bulk-edge correspondence for single-valley Hamiltonians ». In : *Phys. Rev. B* 82 (24 déc. 2010), p. 245404. DOI : 10.1103/PhysRevB.82.245404.
- [52] P. DELPLACE. « Berry-Chern monopoles and spectral flows ». In : *SciPost Phys. Lect. Notes* (2022), p. 39. DOI : 10.21468/SciPostPhysLectNotes.39.
- [53] J. TEO et C. KANE. « Topological defects and gapless modes in insulators and superconductors ». In : *Physical Review B* 82.11 (sept. 2010), p. 115120. DOI : 10.1103/PhysRevB.82.115120.
- [54] E. PRODAN. « Non-commutative tools for topological insulators ». In : *New Journal of Physics* 12 (juin 2010), p. 5003. DOI : 10.1088/1367-2630/12/6/065003.
- [55] E. PRODAN. « Robustness of the spin-Chern number ». In : *Physical Review B* 80 (sept. 2009), p. 125327. DOI : 10.1103/PhysRevB.80.125327.
- [56] D. N. SHENG et al. « Quantum Spin-Hall Effect and Topologically Invariant Chern Numbers ». In : *Phys. Rev. Lett.* 97 (3 juill. 2006), p. 036808. DOI : 10.1103/PhysRevLett.97.036808.
- [57] M. EZAWA. « Topological Kirchhoff law and bulk-edge correspondence for valley Chern and spin-valley Chern numbers ». In : *Phys. Rev. B* 88 (16 oct. 2013), p. 161406. DOI : 10.1103/PhysRevB.88.161406.
- [58] M. EZAWA. « Spin valleytronics in silicene: Quantum spin Hall-quantum anomalous Hall insulators and single-valley semimetals ». In : *Phys. Rev. B* 87 (15 avr. 2013), p. 155415. DOI : 10.1103/PhysRevB.87.155415.

- [59] F. FAURE. *Manifestation of the topological index formula in quantum waves and geophysical waves*. 2019. DOI : 10.48550/ARXIV.1901.10592.
- [60] M. MARCIANI et P. DELPLACE. « Chiral Maxwell waves in continuous media from Berry monopoles ». In : *Phys. Rev. A* 101 (2 fév. 2020), p. 023827. DOI : 10.1103/PhysRevA.101.023827.
- [61] T. T. HEIKKILÄ, N. B. KOPNIN et G. E. VOLOVIK. « Flat bands in topological media ». In : *JETP Letters* 94.3 (oct. 2011), p. 233. ISSN : 1090-6487. DOI : 10.1134/S0021364011150045.
- [62] T. FRANK et al. « Protected Pseudohelical Edge States in \mathbb{Z}_2 -Trivial Proximitized Graphene ». In : *Phys. Rev. Lett.* 120 (15 avr. 2018), p. 156402. DOI : 10.1103/PhysRevLett.120.156402.
- [63] A. M. ALSHARARI, M. M. ASMAR et S. E. ULLOA. « Mass inversion in graphene by proximity to dichalcogenide monolayer ». In : *Phys. Rev. B* 94 (24 déc. 2016), p. 241106. DOI : 10.1103/PhysRevB.94.241106.
- [64] J. KLINOVAJA, G. J. FERREIRA et D. LOSS. « Helical states in curved bilayer graphene ». In : *Phys. Rev. B* 86 (23 déc. 2012), p. 235416. DOI : 10.1103/PhysRevB.86.235416.
- [65] Y. HATSUGAI. « Edge states in the integer quantum Hall effect and the Riemann surface of the Bloch function ». In : *Phys. Rev. B* 48 (16 oct. 1993), p. 11851-11862. DOI : 10.1103/PhysRevB.48.11851.
- [66] G. M. GRAF et M. PORTA. « Bulk-Edge Correspondence for Two-Dimensional Topological Insulators ». In : *Communications in Mathematical Physics* 324.3 (oct. 2013), p. 851-895. DOI : 10.1007/s00220-013-1819-6.
- [67] L. K. UPRETI et P. DELPLACE. « Topological chiral interface states beyond insulators ». In : *Phys. Rev. A* 102 (2 août 2020), p. 023520. DOI : 10.1103/PhysRevA.102.023520.
- [68] S. TCHOUMAKOV et al. « Volkov-Pankratov states in topological heterojunctions ». In : *Phys. Rev. B* 96 (20 nov. 2017), p. 201302. DOI : 10.1103/PhysRevB.96.201302.
- [69] T. L. van den BERG et al. « Volkov-Pankratov states in topological graphene nanoribbons ». In : *Phys. Rev. Research* 2 (2 juin 2020), p. 023373. DOI : 10.1103/PhysRevResearch.2.023373.
- [70] B. BRAUNECKER et al. « Spin-selective Peierls transition in interacting one-dimensional conductors with spin-orbit interaction ». In : *Phys. Rev. B* 82 (4 juill. 2010), p. 045127. DOI : 10.1103/PhysRevB.82.045127.

- [71] M. KJAERGAARD, K. WÖLMS et K. FLENSBERG. « Majorana fermions in superconducting nanowires without spin-orbit coupling ». In : *Phys. Rev. B* 85 (2 jan. 2012), p. 020503. DOI : 10.1103/PhysRevB.85.020503.
- [72] S. HUANG et al. « Topologically Protected Helical States in Minimally Twisted Bilayer Graphene ». In : *Phys. Rev. Lett.* 121 (3 juill. 2018), p. 037702. DOI : 10.1103/PhysRevLett.121.037702.
- [73] H. YOO et al. « Atomic and electronic reconstruction at the van der Waals interface in twisted bilayer graphene ». In : *Nature Materials* 18.5 (mai 2019), p. 448-453. ISSN : 1476-4660. DOI : 10.1038/s41563-019-0346-z.
- [74] B. TSIM, N. N. T. NAM et M. KOSHINO. « Perfect one-dimensional chiral states in biased twisted bilayer graphene ». In : *Phys. Rev. B* 101 (12 mars 2020), p. 125409. DOI : 10.1103/PhysRevB.101.125409.
- [75] B. BRAUNECKER et P. SIMON. « Interplay between Classical Magnetic Moments and Superconductivity in Quantum One-Dimensional Conductors: Toward a Self-Sustained Topological Majorana Phase ». In : *Phys. Rev. Lett.* 111 (14 oct. 2013), p. 147202. DOI : 10.1103/PhysRevLett.111.147202.
- [76] J. D. SAU et al. « Non-Abelian quantum order in spin-orbit-coupled semiconductors: Search for topological Majorana particles in solid-state systems ». In : *Physical Review B* 82.2 (déc. 2010), p. 214509. DOI : 10.1103/PhysRevB.82.214509.
- [77] G. C. MÉNARD et al. « Isolated pairs of Majorana zero modes in a disordered superconducting lead monolayer ». English. In : *Nature Communications* 10.1 (juin 2019), p. 1-7. DOI : 10.1038/s41467-019-10397-5.
- [78] P. W. BROUWER et al. « Delocalization in Coupled One-Dimensional Chains ». In : *Phys. Rev. Lett.* 81 (4 juill. 1998), p. 862-865. DOI : 10.1103/PhysRevLett.81.862.
- [79] A. A. OVCHINNIKOV et N. S. ÉRIKHMAN. « Density of states in a one-dimensional semiconductor with narrow forbidden band in the presence of impurities ». In : *JETP* 25.4 (fév. 1977), p. 197-200. URL : http://jetpletters.ru/ps/1392/article_21110.shtml.
- [80] L. BARTOSCH. « Singularities and Pseudogaps in the Density of States of the Fluctuating Gap Model ». Georg-August-Universität zu Göttingen, 2000. DOI : 10.53846/goediss-3498.
- [81] L. BARTOSCH et P. KOPIETZ. « Exact numerical calculation of the density of states of the fluctuating gap model ». In : *Phys. Rev. B* 60 (23 déc. 1999), p. 15488-15491. DOI : 10.1103/PhysRevB.60.15488.

- [82] A. GRABSCH et C. TEXIER. « Topological phase transitions in the 1D multichannel Dirac equation with random mass and a random matrix model ». In : *EPL* 116 (1 nov. 2016). DOI : 10.1209/0295-5075/116/17004.
- [83] A. GRABSCH. « Théorie des matrices aléatoires en physique statistique : théorie quantique de la diffusion et systèmes désordonnés ». Theses. Université Paris-Saclay, juill. 2018. URL : <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01849097>.
- [84] F. J. DYSON. « The Dynamics of a Disordered Linear Chain ». In : *Phys. Rev.* 92 (6 déc. 1953), p. 1331-1338. DOI : 10.1103/PhysRev.92.1331.
- [85] C. W. J. BEENAKKER. « Random-matrix theory of quantum transport ». In : *Rev. Mod. Phys.* 69 (3 juill. 1997), p. 731-808. DOI : 10.1103/RevModPhys.69.731.