Électrostatique et Transport dans des dispositifs topologiques

Electrostatics and Transport in topological devices

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay et de l'Université de Sherbrooke

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)** et à l'**Institut Quantique (Sherbrooke, Canada)**, sous la direction de **Pascal SIMON**, Professeur des universités à l'Université Paris-Saclay, et la co-direction de **Ion GARATE ARAMBERRI**, Professeur titulaire à l'Université de Sherbrooke (Canada)

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 29 septembre 2026, par

Robin DURAND

Composition du jury

Membres du jury avec voix délibérative

Sophie GUÉRON Directrice de recherche CNRS, LPS, Université Paris-Saclay	Présidente
Aurélien MANCHON Professeur des Universités, CINaM, Université Aix-Marseille	Rapporteur & Examinateur
Jérôme CAYSSOL Professeur des Universités, LOMA, Université de Bordeaux	Rapporteur & Examinateur
Louis TAILLEFER Professeur titulaire, Université de Sherbrooke Département de Physique, Institut Quantique	Examinateur
Stefanos KOURTIS Professeur agrégé, Université de Sherbrooke Département de Physique, Institut Quantique	Examinateur
Frédéric PIÉCHON Chargé de recherche CNRS, LPS, Université Paris-Saclay	Examinateur

THESE DE DOCTORAT
NNT : 2026UPASP083

université PARIS-SACLAY | ÉCOLE DOCTORALE Physique en Île-de-France (PIF)

Titre : Électrostatique et Transport dans des dispositifs topologiques
Mots clés : Théorie de la Matière condensée, Matière topologique, Transport électronique, Propriétés électrostatiques, Hétérojonctions, Interconnecteurs.

Résumé : Cette thèse étudie la manière dont la géométrie et la topologie des bandes électroniques influencent les propriétés de transport et l'équilibre électrostatique de systèmes de basse dimension. Elle s'intéresse en particulier aux situations dans lesquelles l'invariance par translation est rompue par des surfaces ou des interfaces. Dans ce contexte, la courbure de Berry et les invariants topologiques ne déterminent pas seulement des réponses globales, mais peuvent également modifier des observables locales telles que les courants, les densités de charge, les conditions de neutralité et le potentiel électrostatique. Sur le plan méthodologique, les équations de van Roosbroeck sont étendues aux matériaux présentant une géométrie de bande non triviale en tenant compte de la vitesse anomale, du moment magnétique orbital et de la mesure corrigée de l'espace des phases.

La première application concerne le transport semi-classique dans des interconnecteurs topologiques, motivé notamment par la miniaturisation des interconnexions électroniques. La théorie de Fuchs-Sondheimer est généralisée à des bandes possédant une courbure de Berry. Les surfaces diffusives y produisent une correction spatialement inhomogène de la fonction de distribution qui, combinée à la vitesse anomale, engendre un courant longitudinal non linéaire, quadratique en champ électrique. Ce courant est concentré à proximité des surfaces sur une distance de l'ordre du libre parcours moyen, tout en demeurant porté par les états de volume. Établi dans un métal de Dirac bidimensionnel puis généralisé aux semimétaux de Weyl, ce mécanisme présente une dépendance non monotone en épaisseur, avec une réponse maximale lorsque l'épaisseur du conducteur devient comparable au libre parcours moyen. Ces résultats montrent que les effets de taille peuvent révéler des contributions de géométrie de bande absentes dans un système homogène et infini.

La seconde application porte sur l'électrostatique de jonctions latérales entre isolants de Chern bidimensionnels. En présence d'un champ magnétique perpendiculaire, l'asymétrie spectrale associée aux niveaux de Landau anomaux produit une contribution de volume à la densité de charge reliée au nombre de Chern. La condition de neutralité s'en trouve modifiée : deux régions possédant des nombres de Chern différents peuvent présenter des potentiels chimiques de neutralité distincts, même en l'absence de dopage conventionnel. Leur mise en contact engendre alors spontanément un potentiel interne. Celui-ci est d'abord étudié analytiquement à partir de modèles effectifs de fermions de Dirac massifs, puis calculé numériquement à l'aide d'un modèle d'isolant de Chern sur réseau couplé de manière auto-cohérente à l'équation de Poisson. Cette approche permet de déterminer les profils de charge et de potentiel ainsi que leur dépendance au champ magnétique, à la température et aux paramètres du matériau. Elle met également en évidence une redistribution de charge à longue portée, caractéristique de la géométrie électrostatique bidimensionnelle.

Dans son ensemble, cette thèse établit un lien entre géométrie de bande, topologie et physique des dispositifs. Elle montre que les surfaces et les interfaces peuvent convertir les propriétés géométriques des états électroniques en réponses longitudinales non linéaires ou en signatures électrostatiques. La topologie intervient ainsi non seulement dans les phénomènes de transport, mais également dans les conditions de neutralité et dans la redistribution des charges au sein des hétérostructures.

Title : Electrostatics and Transport in topological devices

Keywords : Condensed matter theory, Topological matter, Electronic transport, Electrostatic properties, Heterojunctions, Interconnects.

Abstract : This thesis investigates how electronic band geometry and topology influence transport properties and electrostatic equilibrium in low-dimensional systems. Particular attention is given to situations in which translational symmetry is broken by surfaces or interfaces. In this context, Berry curvature and topological invariants determine not only global responses but can also modify local observables such as currents, charge densities, neutrality conditions, and electrostatic potentials. From a methodological perspective, the van Roosbroeck equations are extended to materials with nontrivial band geometry by accounting for the anomalous velocity, the orbital magnetic moment, and the modified phase-space measure.

The first application concerns semiclassical transport in topological interconnects, motivated in particular by the miniaturization of electronic interconnects. The Fuchs–Sondheimer theory is generalized to electronic bands with nonzero Berry curvature. Diffusive surfaces generate a spatially inhomogeneous correction to the distribution function which, when combined with the anomalous velocity, produces a nonlinear longitudinal current that is quadratic in the electric field. This current is concentrated near the surfaces over a distance of the order of the mean free path, while remaining carried by bulk states. First established in a two-dimensional Dirac metal and subsequently generalized to Weyl semimetals, this mechanism exhibits a nonmonotonic dependence on thickness, with a maximum response when the conductor thickness becomes comparable to the mean free path. These results demonstrate that finite-size effects can reveal contributions arising from band geometry that are absent in a homogeneous infinite system.

The second application addresses the electrostatics of lateral junctions between two-dimensional Chern insulators. In the presence of a perpendicular magnetic field, the spectral asymmetry associated with anomalous Landau levels produces a bulk contribution to the charge density related to the Chern number. The neutrality condition is consequently modified : two regions with different Chern numbers can have distinct charge-neutrality chemical potentials, even in the absence of conventional doping. Bringing these regions into contact therefore spontaneously generates a built-in potential. This potential is first studied analytically using effective models of massive Dirac fermions and is then calculated numerically using a lattice model of a Chern insulator self-consistently coupled to Poisson's equation. This approach determines the charge and potential profiles, together with their dependence on the magnetic field, temperature, and material parameters. It also reveals a long-range charge redistribution characteristic of two-dimensional electrostatic geometries.

Overall, this thesis establishes a connection between band geometry, topology, and device physics. It shows that surfaces and interfaces can convert the geometric properties of electronic states into nonlinear longitudinal responses or electrostatic signatures. Topology therefore plays a role not only in transport phenomena but also in charge-neutrality conditions and charge redistribution within heterostructures.

En hommage à Mark.

Remerciements

Avant toute chose, je souhaite remercier chaleureusement tous les membres de mon jury de thèse. Merci à Jérôme Cayssol et Aurélien Manchon, mes rapporteurs, d'avoir accepté d'évaluer mon manuscrit de thèse pendant le mois d'août. Merci aussi à mes examinateur·rice·s, Sophie Guéron et Frédéric Piéchon pour le côté français, ainsi que Stefanos Kourtis et Louis Taillefer pour le côté sherbrookois.

Un immense merci à mes deux directeurs de thèse. Pour commencer, Pascal, merci de t'être lancé avec moi dans cette aventure qu'est la cotutelle. Certes, il y a eu beaucoup de démarches administratives et de questions, mais je ne regrette en aucun cas d'avoir fait tout cela. Cet an et demi passé à te côtoyer a été extrêmement instructif et plaisant. J'ai adoré toutes ces discussions scientifiques que nous avons eues, mais aussi celles, non scientifiques, concernant la course à pied, la montagne et le rugby.

Enfin, Ion, merci d'avoir diffusé cette annonce de stage de M2 dans ma promotion de master à Grenoble. Le projet d'aller faire ce stage puis la thèse de l'autre côté de l'Atlantique semblait fou, mais qu'est-ce que je suis content de l'avoir fait ! J'ai énormément appris sous ta direction. Ta compréhension physique et ton intuition m'impressionnent toujours. Ton dévouement envers tes étudiants est exemplaire (merci pour ces réunions Teams à 5 h du matin pour toi) et, si un jour je deviens chercheur, j'aimerais pouvoir m'inspirer de ton modèle.

Je tiens aussi à remercier toutes les personnes avec qui j'ai discuté de science et qui m'ont aidé dans mon travail. Fred, merci pour ta grande (très grande) franchise et ton honnêteté. À chaque fois que je suis sorti d'une discussion avec toi, j'oscillais entre la joie d'avoir appris plein de nouveaux concepts et la panique, car tout ce que j'avais fait était soit faux, soit dans tes vieux tiroirs. Merci également, Étienne. Nos chemins se sont croisés assez brièvement à l'Institut Quantique, mais chaque interaction avec toi était d'un grand intérêt et très agréable.

Je souhaite aussi remercier les autres permanents avec lesquels j'ai interagi régulièrement (ou même occasionnellement) : André-Marie, Louis et Stefanos à l'IQ, puis Corentin, Andrej, Marcello, Luis et Chunxiao au LPS.

J'aimerais tout particulièrement rendre hommage à Mark. Le temps que j'ai passé au LPS lorsqu'il y était m'a profondément marqué, tant d'un point de vue scientifique, par son expertise à couper le souffle sur une pléthore de sujets, que d'un point de vue humain. Je n'oublierai jamais ces moments de partage autour des (nombreuses) pauses café et des quelques passages au bar autour d'une bonne bière.

Il est temps de passer aux autres, et sûrement aux plus importants : l'entourage. Du côté du LPS, merci à tous les non-permanents du labo qui le font vivre chaleureusement. Merci notamment à Greis, Ettore, Antoine, Louis et Edgar, la *team* babyfoot, qui ne manquent aucun rendez-vous de 16 h pour en découdre. Merci aussi au running club : Sara, Hafsa, Manu et Lucie. Ces petites courses le midi ont été vitales à certains moments

pour décompresser.

Bien sûr, merci aux étudiants du groupe THEO : Thibaut, Mario, Axel, Reda, Andrii, Benoît, Florian, Lena, Olivier, Numa, Abdu et Richard. Mention spéciale à Thibaut, Mario, Axel et Reda, avec qui j'ai tellement ri que j'en oubliais parfois que j'étais au travail (il me semble que c'est une bonne chose). Je n'oublierai pas non plus tous ces moments passés ensemble, comme à la DPG ou à Cargèse : c'était incroyable. Mario, j'espère que tu trouveras un bureau qui te conviendra (et qui t'acceptera...).

Passons de l'autre côté de l'Atlantique. Un immense merci à tous les copains de l'IQ à Sherbrooke. Vous avez permis de réchauffer mon cœur malgré les $-20/-30$ degrés québécois. Benjamin, Lucas, Martin, quel plaisir d'avoir fait ces matchs et ces sessions de passes de rugby devant l'institut ! Sâm, BAPT, Rodi, Toggi, vous êtes comme une famille pour moi. Grâce à vous, je me suis senti chez moi pendant toute cette période québécoise. Je n'oublierai jamais tous ces barbecues, ces chalets perdus dans la nature et surtout tous ces moments au bar à boire des bières et à manger des poutines, quelle vie ! Bien sûr, gros *big up* à Alex, Bastien, Élio, Laurine et Madelaine.

Il me paraît tout aussi important de remercier mes amis que j'ai connus avant la thèse et qui ont, pour sûr, contribué au bon déroulement de celle-ci. Tout d'abord, merci à la *team* de Toulouse, Jules, Maxou, Léo, Maïa, Pao et Titi, avec qui j'ai eu la chance de passer des semaines mémorables à Canet. Grâce à vous, j'ai pu développer mes talents de pétanqueur et de joueur de tarot, ce qui est très important dans la recherche.

Ensuite, je ne remercierai jamais assez les copains du master à Grenoble. Mention particulière pour Romy et Maxime : merci pour toutes ces discussions passionnantes, ces courses de trail, ces moments passés en montagne et au bar. Sans vous, ma thèse aurait vraiment été différente.

Plus loin dans le temps, merci aux copains du lycée avec qui j'ai gardé contact : Oelker, Colobert, Bertheas, Longy et Binet. Un grand merci aussi à toi, Clément. On se connaît depuis l'âge de 3 ans et j'espère que cette amitié durera encore longtemps. Tu es un ami précieux.

Enfin, bien évidemment, je tiens à remercier du fond du cœur ma famille, qui m'a toujours soutenu et encouragé dans mes choix (même si cela impliquait d'aller vivre trois ans au Québec).

Et pour finir, Chloé, merci de me supporter au quotidien, merci pour toutes ces sorties en montagne et ces voyages fabuleux à l'autre bout de l'Europe. Tu es la personne qui m'inspire le plus, tant humainement que scientifiquement. Sache que tu es un modèle pour moi. J'espère vivre encore beaucoup d'aventures hautes en couleur avec toi.

Robin Durand

Usage des outils d'intelligence artificielle

Ni l'Université Paris-Saclay ni l'Université de Sherbrooke n'imposent de déclaration concernant l'utilisation d'outils d'intelligence artificielle (IA) dans le cadre de cette thèse. Néanmoins, compte tenu du contexte actuel en science, il me paraît personnellement important d'être transparent et honnête quant à l'utilisation de tels outils d'IA dans le cadre de la recherche.

Ces outils d'IA, tels que *ChatGPT* par exemple, ont été utilisés dans le cadre de ce manuscrit et de mes activités quotidiennes de recherche aux fins suivantes :

- **Revue de littérature scientifique :** l'IA a été utilisée pour proposer et identifier des articles et revues scientifiques pertinents pour le sujet de recherche. Chaque référence a été soigneusement vérifiée avant toute utilisation et incorporation dans le manuscrit.

- **Assistance de programmation :** l'IA a été utilisée à des fins de programmation, notamment pour l'optimisation de codes existants ainsi que pour la suggestion de nouveaux outils et de nouvelles méthodes de résolution numérique. Les codes produits ou optimisés à l'aide de l'IA ont systématiquement été vérifiés.

- **Outil linguistique :** l'IA a été utilisée pour corriger des fautes dans des textes, suggérer de meilleures formulations et proposer des résumés de concepts. Aucun texte ainsi produit n'a été inséré dans le manuscrit sans avoir été préalablement vérifié, adapté et réécrit.

L'IA n'a pas été utilisée pour générer les résultats scientifiques présentés dans cette thèse. J'ai examiné de manière critique les contributions produites avec l'aide de l'IA et assume l'entière responsabilité du contenu de cette thèse.

Table des matières

Remerciements **v**

Usage des outils d'intelligence artificielle **vii**

Liste des publications **xv**

Table des figures **xv**

Introduction générale **xix**

1 Des matériaux topologiques aux dispositifs : un nouveau défi **1**
1.1 L'électronique moderne face à ses limites 2
1.1.1 Miniaturisation, interconnecteurs et dissipation 2
1.1.2 Effets de taille, surfaces et interfaces à l'échelle nanométrique 3
1.1.3 Jonctions, potentiels internes et contrôle électrostatique 4
1.2 L'avènement de la topologie en physique du solide 5
1.2.1 De l'effet Hall quantique aux phases topologiques 5
1.2.2 Conséquences physiques de la géométrie de bande 5
1.2.3 Isolants topologiques, isolants de Chern et semi-métaux topologiques 7
1.2.4 Quelques réalisations expérimentales marquantes 8
1.3 Des matériaux prometteurs mais complexes à exploiter 9
1.3.1 Du laboratoire au dispositif : un saut non trivial 9
1.3.2 Contacts, interfaces et dopage : la topologie mise à l'épreuve 10
1.3.3 Matériaux bidimensionnels et hétérostructures de van der Waals . . 10
1.3.4 Contrôler localement une phase topologique 11
1.4 Observer la géométrie de bande dans des dispositifs 11
1.4.1 Transport Hall, réponses non locales et états de bord 11
1.4.2 Spectroscopie ARPES et états de surface topologiques 12
1.4.3 Compressibilité, capacité et potentiel électrostatique local 12
1.5 Vers des outils de modélisation adaptés aux dispositifs topologiques 13
1.5.1 Les équations de van Roosbroeck : l'outil standard des dispositifs semi-conducteurs 13
1.5.2 Pourquoi les descriptions classiques doivent être enrichies 14
1.5.3 La théorie semi-classique comme pont entre géométrie de bande et transport 14
1.6 Organisation de la thèse 14
1.7 Conclusion du chapitre 15

2 Géométrie de bande et topologie **17**
2.1 Introduction et problématique physique 18
2.2 Structure de bande dans les solides cristallins 19
2.2.1 Cristal, réseau réciproque et zone de Brillouin 19

2.2.2 Théorème de Bloch . . . 21
2.2.3 Structure de bandes et classification isolant/conducteur . . . 22
2.3 Géométrie des états de Bloch . . . 23
2.3.1 Liberté de jauge et espace des états de Bloch . . . 23
2.3.2 Berry-ologie . . . 24
2.4 Invariants topologiques et nombre de Chern . . . 27
2.4.1 Intégrale de la courbure de Berry sur la zone de Brillouin . . . 27
2.4.2 Le nombre de Chern : un entier topologique . . . 28
2.4.3 Robustesse aux perturbations . . . 29
2.4.4 Conséquences physiques : conductivité de Hall et formule de Středa 30
2.5 Un modèle minimal : fermions de Dirac massifs . . . 31
2.5.1 Hamiltonien de Dirac 2D . . . 31
2.5.2 Calcul explicite de la courbure et du nombre de Chern . . . 33
2.5.3 Transition de phase topologique . . . 35
2.6 Isolants de Chern sur réseau et correspondance *bulk-edge* . . . 36
2.6.1 Modèle sur réseau et limite de basse énergie . . . 37
2.6.2 Cônes de Dirac effectifs et phases topologiques . . . 38
2.6.3 Géométrie de ruban et états de bord chiraux . . . 40
2.6.4 Correspondance *bulk-edge* . . . 42
2.7 Conclusion du chapitre . . . 43

3 Théorie semi-classique moderne 45
3.1 Aux origines du semi-classique moderne . . . 46
3.1.1 Semi-classique standard : position et impulsion . . . 46
3.1.2 Pourquoi il faut aller au-delà : rôle de la géométrie de bande . . . 47
3.1.3 Domaine de validité du formalisme . . . 48
3.2 Construction du paquet d'ondes et principe variationnel . . . 49
3.2.1 Hypothèses d'adiabaticité et Hamiltonien local . . . 49
3.2.2 Définition et localisation du paquet d'ondes . . . 50
3.2.3 Lagrangien effectif . . . 51
3.2.4 Courbures généralisées et équations du mouvement . . . 52
3.3 Équations du mouvement avec corrections de Berry . . . 53
3.3.1 Perturbation électromagnétique uniforme . . . 53
3.3.2 Perturbation électromagnétique non uniforme . . . 54
3.4 Moment magnétique orbital et énergie corrigée . . . 54
3.4.1 Origine physique du moment orbital . . . 54
3.4.2 Lien avec la courbure de Berry . . . 56
3.5 Une densité d'états modifiée par la géométrie . . . 57
3.5.1 Description symplectique de l'espace des phases . . . 57
3.5.2 Cas uniforme . . . 58
3.5.3 Cas non uniforme et courbures mixtes . . . 59
3.6 Transport électronique et effet Hall anomal . . . 60
3.6.1 Équation de Boltzmann semi-classique . . . 60
3.6.2 Courant anomal et conductivité de Hall . . . 61
3.6.3 Lien avec le nombre de Chern . . . 63
3.7 Champ magnétique et niveaux de Landau . . . 63

3.7.1 Orbites cyclotrons et règle d'Onsager . . . 63
3.7.2 Correction du moment orbital à la quantification . . . 64
3.7.3 Dégénérescence des niveaux et densité de charge . . . 65
3.8 Conclusion du chapitre . . . 66

4 Équations de dérive-diffusion topologiques 69
4.1 Introduction et problématique physique . . . 70
4.2 Équations de van Roosbroeck conventionnelles . . . 71
4.2.1 Équations de continuité, dérive-diffusion et Poisson . . . 71
4.2.2 Champs quasi-électriques dans un semi-conducteur non uniforme . . . 72
4.2.3 Hypothèses et convention d'énergie . . . 74
4.3 Système non uniforme à champ magnétique nul . . . 74
4.3.1 Équations du mouvement et courbures mixtes . . . 74
4.3.2 Courant local, courant d'aimantation et courant de transport . . . 75
4.3.3 Équilibre et potentiel interne d'une jonction . . . 77
4.3.4 Gap variable, champ quasi-électrique et courbure locale . . . 77
4.4 Ordres supérieurs et effet Hall Magnus diffusif . . . 79
4.4.1 Organisation du développement hors équilibre . . . 79
4.4.2 Modèle de Dirac massif incliné . . . 79
4.4.3 Courant transverse et effet Hall Magnus . . . 81
4.4.4 Pourquoi le courant s'annule bien à l'équilibre . . . 81
4.5 Système non uniforme à champ magnétique non nul . . . 82
4.5.1 Équations du mouvement et mesure de l'espace des phases . . . 82
4.5.2 Potentiel chimique à densité ou neutralité imposée . . . 82
4.5.3 Fonction de distribution en champ faible . . . 83
4.5.4 Courant de transport et contrôle de l'équilibre . . . 85
4.5.5 Bandes de conduction et de valence . . . 86
4.5.6 Courants de charge et de vallée . . . 87
4.6 Système final de van Roosbroeck généralisé . . . 87
4.7 Conclusion du chapitre . . . 88

5 Interconnecteurs topologiques : une alternative aux métaux conventionnels 91
5.1 Introduction et problématique physique . . . 92
5.2 Diffusion de surface dans un métal ordinaire . . . 93
5.2.1 La théorie de Fuchs-Sondheimer . . . 93
5.2.2 Conductivité longitudinale et effet de taille . . . 94
5.2.3 Bilan physique : une distribution inhomogène près des bords . . . 99
5.3 Généraliser Fuchs-Sondheimer aux matériaux topologiques . . . 99
5.3.1 Géométrie du système et hypothèses de travail . . . 99
5.3.2 Équation de Boltzmann en présence de courbure de Berry . . . 100
5.3.3 Conditions de bord et développement perturbatif . . . 100
5.4 Apparition d'un courant géométrique de bord . . . 102
5.4.1 À l'ordre linéaire : retour au résultat de Fuchs-Sondheimer . . . 102
5.4.2 À l'ordre deux : le terme source géométrique . . . 103
5.4.3 Localisation du courant près des surfaces . . . 104
5.5 Métal de Dirac bidimensionnel . . . 105

5.5.1 Modèle effectif, courbure de Berry et structure de vallées 105
5.5.2 Distribution spatiale du courant non linéaire 106
5.5.3 Symétries et compensation entre vallées 106
5.5.4 Rôle de l'inclinaison transverse de la dispersion 108
5.5.5 Courant moyen et régimes limites 108
5.6 Extension tridimensionnelle : semi-métaux de Weyl 110
5.6.1 Modèle de Weyl et courbure de Berry monopolaire 110
5.6.2 Conditions de symétrie pour un courant moyen non nul 110
5.6.3 Dépendance en épaisseur et comparaison avec le cas Dirac 111
5.7 Signatures physiques, limites et perspectives 112
5.7.1 Courant de bord géométrique ou courant d'états de surface ? 112
5.7.2 Dépendance en épaisseur, densité et champ électrique 113
5.7.3 Accumulation de charge et polarisation de vallée 114
5.7.4 Comparaison avec la littérature existante 115
5.7.5 Perspectives : fils inhomogènes et coexistence avec des états de surface 116
5.8 Conclusion du chapitre 117

6 Jonctions d'isolant de Chern : nouvelles propriétés électrostatiques 119
6.1 Introduction et problématique physique 120
6.2 Jonction latérale et modèle électronique 121
6.2.1 Géométrie et conventions 121
6.2.2 Rappel du modèle half-BHZ 122
6.2.3 Spectre sous champ magnétique 123
6.3 Asymétrie spectrale et neutralité de volume 124
6.3.1 Décomposition de la densité de charge 124
6.3.2 Lien avec le nombre de Chern 125
6.3.3 Neutralité et dopage effectif 126
6.3.4 Interprétation thermodynamique de la neutralité 126
6.4 Potentiel interne intrinsèque 127
6.4.1 Potentiel chimique de neutralité à champ faible 127
6.4.2 Mise en contact et potentiel interne 128
6.4.3 Contribution topologique et paramètres de bande 129
6.4.4 Champ fort et saturation 130
6.5 Électrostatique d'une jonction latérale bidimensionnelle 131
6.5.1 Équation de Poisson pour une monocouche 131
6.5.2 Solution asymptotique et queue algébrique 131
6.6 Formulation auto-cohérente et méthode numérique 132
6.6.1 Potentiel électrochimique et équation d'état locale 132
6.6.2 Domaine, conditions aux limites et convergence 132
6.6.3 Raccordement entre niveaux de Landau et modèle liaisons fortes . . 133
6.6.4 Contrôles numériques 134
6.7 Profils électrostatiques et rôle de l'interface 135
6.7.1 Profils auto-cohérents et potentiel interne 135
6.7.2 Largeur effective de déplétion 136
6.7.3 Lecture des différents régimes 137
6.7.4 Comparaison avec une jonction conventionnelle dopée 138

6.7.5 Contribution des états d'interface . . . 139
6.7.6 Dépendance en température . . . 140
6.8 Signature capacitive . . . 141
6.8.1 Charge transférée et capacité différentielle . . . 141
6.8.2 Protocole quasi-statique . . . 141
6.8.3 Réponse autour d'une tension continue . . . 142
6.9 Discussion, signatures expérimentales et limites . . . 143
6.9.1 Séparer topologie de volume et physique d'interface . . . 143
6.9.2 Observables possibles . . . 144
6.9.3 Ordres de grandeur et stratégie de mesure . . . 144
6.9.4 Limites du modèle . . . 145
6.10 Conclusion du chapitre . . . 145

Conclusion générale **147**

Annexes **149**
A Démonstration de l'identité de Bianchi pour les courbures mixtes . . . 149
A.1 Connexions et courbures dans l'espace étendu . . . 149
A.2 Forme générale de l'identité de Bianchi . . . 150
A.3 Vérification algébrique explicite . . . 150
B Correction de gradient à l'énergie du modèle de Dirac . . . 152
B.1 Projection sur la seconde bande . . . 152
B.2 Résultat pour une masse non uniforme . . . 153
B.3 Annulation après intégration . . . 153
C Dérivation de la décomposition de la densité de charge . . . 154
D Dégénérescence de Landau et centres-guides . . . 156
E Dérivation de la capacité différentielle . . . 158

Bibliographie **159**

Liste des publications

Les travaux présentés dans cette thèse ont donné lieu aux publications suivantes :

1. **R. Durand**, P. Simon et I. Garate, *Electrostatics of Chern insulator junctions*, Soumis à SciPost Physics (2026).

2. **R. Durand**, L.-T. Gendron, T. Dionne et I. Garate, *Nonlinear Longitudinal Current of Band-Geometric Origin in Wires of Finite Thickness*, Physical Review Letters **133**, 226302 (2024). 10.1103/PhysRevLett.133.226302.

3. P.-A. Graham, S. Bertrand, M. Bédard, **R. Durand** et I. Garate, *Van Roosbroeck's Equations with Topological Terms : The Case of Weyl Semimetals*, Physical Review B **108**, 024301 (2023). 10.1103/PhysRevB.108.024301.

Table des figures

Chapitre 1 – Des matériaux topologiques aux dispositifs : un nouveau défi

1.1 Effets de taille dans les interconnecteurs métalliques . . . 3
1.2 Première mesure de l'effet Hall quantique . . . 6
1.3 Comparaison entre un isolant de Chern et un isolant topologique . . . 7
1.4 Quelques réalisations expérimentales marquantes concernant l'étude des matériaux topologiques . . . 8
1.5 Comparaison entre un matériau topologique idéal et un dispositif expérimental réaliste . . . 10
1.6 Observation par ARPES d'états de surface topologiques . . . 13

Chapitre 2 – Géométrie de bande et topologie

2.1 Schéma d'un cristal bidimensionnel carré à face centrée . . . 19
2.2 Réseau nid d'abeille réel et son réseau réciproque associé . . . 20
2.3 Premières zones de Brillouin des réseaux nid d'abeille et carré . . . 21
2.4 Représentation schématique du passage de l'espace de Hilbert $\mathscr{H}$ à l'espace projectif de Hilbert $\mathcal{P}(\mathscr{H})$ . . . 24
2.5 Dispersion d'un fermion de Dirac massif et sans masse . . . 32
2.6 Représentation de la sphère de Bloch pour un fermion de Dirac massif . . . 33
2.7 Répartition de la courbure de Berry au sein d'un cône de Dirac . . . 34
2.8 Transition de phase topologique d'un fermion de Dirac massif décrit par le Hamiltonien (2.45) . . . 36
2.9 Schéma du modèle half-BHZ sur réseau carré . . . 37
2.10 Première ZB du réseau carré associé au modèle half-BHZ et spectre en énergie total . . . 39
2.11 Diagramme de phase topologique du modèle Half-BHZ pour $B_m < 0$ . . . 40
2.12 Géométrie de ruban du modèle half-BHZ . . . 41
2.13 Spectre en énergie du modèle half-BHZ dans une géométrie de ruban ouverte selon x et périodique selon y . . . 42

Chapitre 3 – Théorie semi-classique moderne

3.1 Paquet d'ondes semi-classique dans un cristal lentement perturbé . . . 48
3.2 Rotation d'un paquet d'ondes de Bloch . . . 55
3.3 Moment magnétique orbital d'un paquet d'ondes de Bloch . . . 57
3.4 Déformation de l'espace des phases induite par le champ magnétique et la courbure de Berry . . . 59
3.5 Interprétation semi-classique de l'effet Hall anomal intrinsèque. . . . 62

Chapitre 4 – Équations de dérive-diffusion topologiques

4.1 Schéma des contributions de diffusion et de dérive au transport électronique 72

4.2 Profil spatial de la masse et de la courbure de Berry dans une interface de Dirac. 78
4.3 Dispersion d'un cône de Dirac massif incliné dans deux vallées opposées . . 80
4.4 Effet Hall Magnus diffusif dans une jonction. 81

Chapitre 5 – Interconnecteurs topologiques : une alternative aux métaux conventionnels

5.1 Schéma des conditions aux bords dans la théorie de Fuchs-Sondheimer . . . 95
5.2 Profil spatial de la densité de courant longitudinale $j_x^{(1)}(z)$ dans un film métallique 96
5.3 Conductivité et résistivité normalisées d'un fil mince de cuivre dans le cadre de la théorie de Fuchs-Sondheimer 98
5.4 Densité de courant longitudinal non linéaire induite par la courbure de Berry dans un métal de Dirac bidimensionnel à deux vallées reliées par symétrie de renversement du temps 107
5.5 Courant longitudinal non linéaire moyen dans un métal de Dirac bidimensionnel en fonction de l'épaisseur 109
5.6 Courant longitudinal non linéaire dans un semi-métal de Weyl tridimensionnel 113

Chapitre 6 – Jonctions d'isolant de Chern : nouvelles propriétés électrostatiques

6.1 Jonction latérale entre deux isolants de Chern 121
6.2 Spectre du modèle half-BHZ sous champ magnétique 123
6.3 Éventail de Landau du modèle half-BHZ 124
6.4 Potentiel chimique de neutralité à champ faible 128
6.5 Potentiel chimique de neutralité à champ fort 130
6.6 Profil électrostatique auto-cohérent d'une jonction Chern-Chern $\mathcal{C}_L = +1 \,|\, \mathcal{C}_R = -1$ dans le modèle half-BHZ. 135
6.7 Saturation de la densité de charge au voisinage de l'interface. 136
6.8 Largeur effective de déplétion x_c en fonction du champ magnétique B . . . 137
6.9 Comparaison entre une jonction topologique propre et une jonction conventionnelle dopée 138
6.10 Influence des états microscopiques d'interface sur la densité auto-cohérente 139
6.11 Dépendance en température de la densité surfacique et du potentiel électrostatique 140
6.12 Capacité différentielle de la jonction en fonction du champ magnétique B . 142
6.13 Capacité différentielle en fonction de la tension continue 143

Introduction générale

La structure de bandes d'un solide ne se résume pas à la dispersion reliant l'énergie au vecteur d'onde cristallin. Les états de Bloch possèdent également une géométrie propre, dont la courbure de Berry constitue l'une des manifestations les plus importantes [1, 2]. Intégrée sur la zone de Brillouin pour l'ensemble des bandes occupées, cette information géométrique peut définir des invariants topologiques et distinguer des phases qui ne peuvent pas être reliées continûment sans fermeture du gap d'énergie [3,4]. À l'échelle d'un dispositif, elle intervient cependant de manière plus locale : elle modifie la dynamique des porteurs, le comptage des états disponibles et leur réponse aux champs extérieurs.

Cette thèse s'intéresse au passage entre ces deux niveaux de description. Sa question directrice peut être formulée simplement : comment la géométrie et la topologie des bandes se traduisent-elles dans les propriétés de transport et dans l'équilibre électrostatique de dispositifs de taille finie ? Ce passage n'est pas immédiat. Les invariants topologiques sont le plus souvent introduits dans le cadre de systèmes homogènes et infinis, tandis qu'un dispositif réel possède des surfaces, des interfaces, des contacts et des paramètres variant dans l'espace. Les grandeurs pertinentes n'y sont plus seulement les énergies et les états propres, mais aussi les fonctions de distribution, les courants locaux, les densités de porteurs et le potentiel obtenu après redistribution des charges.

Pour établir ce lien, la thèse s'appuie principalement sur la théorie semi-classique moderne [2, 5]. Elle décrit les porteurs par des paquets d'ondes localisés, tout en gardant la mémoire de la bande dans laquelle ils évoluent. La courbure de Berry corrige alors leur vitesse, le moment magnétique orbital modifie leur énergie en champ magnétique et la mesure de l'espace des phases acquiert elle-même une contribution géométrique. Ces effets, d'origine microscopique, se retrouvent dans les quantités intégrées qui gouvernent le transport et l'électrostatique. Ce formalisme permet ainsi d'introduire les corrections géométriques de bande dans les fonctions de distribution, les densités et les courants.

Cette thèse développe deux applications principales de ce cadre. La première contribution concerne le transport électronique. Les modèles macroscopiques usuels reposent sur des équations de conservation, complétées par des relations constitutives reliant les courants aux champs électriques et aux gradients de densité. Ces lois de dérive-diffusion supposent le plus souvent que la structure de bande intervient essentiellement par la dispersion, la densité d'états et quelques paramètres effectifs. Cette hypothèse devient incomplète lorsque la courbure de Berry est non nulle. À partir de la dynamique semi-classique et de l'équation de Boltzmann, nous examinons donc comment les densités et les courants sont modifiés, tout en identifiant les éléments du cadre de van Roosbroeck qui demeurent inchangés [6, 7]. La conservation locale des porteurs garde sa forme habituelle, mais les relations de transport acquièrent des contributions géométriques, notamment lorsque des champs ou des paramètres de bande varient dans l'espace.

Cette approche est ensuite appliquée à un conducteur de taille finie. Dans un film mince conventionnel, la diffusion aux surfaces rend la fonction de distribution inhomogène près des bords et réduit la conductivité lorsque l'épaisseur devient comparable au libre parcours moyen [8, 9]. En présence d'une courbure de Berry, cette même inhomogénéité produit un effet supplémentaire. La vitesse anomale se combine aux conditions aux limites

pour engendrer un courant longitudinal non linéaire, localisé au voisinage des surfaces mais porté par les états de volume [10]. Ce mécanisme généralise la théorie de Fuchs-Sondheimer aux métaux de Dirac bidimensionnels et aux semi-métaux de Weyl. Les surfaces rendent ainsi observable une contribution géométrique qui disparaîtrait dans un système homogène et infini.

La seconde contribution porte sur une question complémentaire. La topologie peut-elle modifier non seulement un courant hors équilibre, mais également l'état électrostatique d'un système à l'équilibre ? Nous l'étudions dans une jonction latérale entre deux isolants de Chern soumise à un champ magnétique perpendiculaire. Dans chaque région, la structure particulière des niveaux de Landau produit une différence entre le nombre d'états électroniques dans les bandes de conduction et de valence. Cette asymétrie spectrale est reliée au nombre de Chern et se comporte, du point de vue de la neutralité de charge, comme une densité effective de dopants. Deux phases de nombres de Chern différents peuvent par conséquent posséder des potentiels chimiques de neutralité distincts, bien qu'aucun dopage conventionnel ne les différencie [11].

Lors de la mise en contact, le potentiel électrochimique doit être uniforme à l'équilibre. Une redistribution de charge s'établit donc près de l'interface et engendre un potentiel interne intrinsèque. Son origine diffère de celle d'une jonction dopée ordinaire : ici, le déséquilibre initial est imposé par l'asymétrie spectrale des deux phases et dépend du champ magnétique ainsi que de leurs nombres de Chern. Cette construction fournit ainsi un lien direct entre un invariant de bande et une grandeur électrostatique.

L'analyse combine plusieurs niveaux de description. Des modèles effectifs de fermions de Dirac massifs permettent d'isoler le mécanisme physique et de déterminer analytiquement le potentiel chimique de neutralité dans les régimes de champ faible et de champ fort. Un modèle microscopique half-BHZ sur réseau est ensuite utilisé pour décrire la structure spectrale et les états proches de l'interface. Enfin, la densité de charge est couplée à l'équation de Poisson dans une procédure auto-cohérente adaptée à la géométrie bidimensionnelle. Cette démarche permet de passer de l'asymétrie spectrale aux profils spatiaux de charge et de potentiel, puis à des signatures accessibles par des mesures électrostatiques, en particulier la réponse capacitive de la jonction.

Les deux problèmes étudiés reposent ainsi sur une même idée. Dans le premier, une frontière physique crée une distribution hors équilibre non uniforme qui convertit la courbure de Berry en courant longitudinal. Dans le second, une interface entre phases topologiques distinctes convertit une asymétrie du spectre en redistribution de charge et en potentiel interne. Les surfaces et les interfaces ne sont donc pas de simples détails géométriques ajoutés à un matériau de volume. Elles sélectionnent la manière dont l'information géométrique ou topologique contenue dans les bandes devient une réponse locale du dispositif.

Le chapitre 1 présente le contexte physique et expérimental de ces problématiques. Les chapitres 2, 3 et 4 introduisent successivement la géométrie et la topologie des bandes, la dynamique semi-classique et leur intégration dans une description macroscopique du transport. Le chapitre 5 est consacré aux effets de taille et au courant longitudinal non linéaire d'origine géométrique. Le chapitre 6 étudie enfin l'électrostatique des jonctions d'isolants de Chern, depuis l'asymétrie spectrale jusqu'aux profils de charge, de potentiel et aux signatures capacitives.

Chapitre 1

Des matériaux topologiques aux dispositifs : un nouveau défi

Résumé

Ce chapitre introductif replace les travaux de cette thèse dans leur contexte physique, expérimental et bibliographique. L'objectif est de motiver l'étude de la géométrie de bande, de la dynamique semi-classique ou du transport pour la physique des dispositifs. Nous commençons par rappeler les limites rencontrées par l'électronique conventionnelle à l'échelle nanométrique, en particulier dans les interconnecteurs, les jonctions et les dispositifs miniaturisés. Nous présentons ensuite l'émergence des phases topologiques en physique du solide, depuis l'effet Hall quantique jusqu'aux isolants de Chern et aux semi-métaux topologiques. Une attention particulière est portée aux dispositifs concrets, aux difficultés associées au passage du matériau idéal au composant réel, ainsi qu'aux signatures expérimentales de la géométrie de bande. Ce chapitre permet ainsi de montrer pourquoi une description théorique des effets topologiques sur les courants, les densités de charge et les potentiels électrostatiques est utile pour mieux comprendre des dispositifs réalistes.

Sommaire

1.1 L'électronique moderne face à ses limites 2
1.2 L'avènement de la topologie en physique du solide 5
1.3 Des matériaux prometteurs mais complexes à exploiter . . . 9
1.4 Observer la géométrie de bande dans des dispositifs 11
1.5 Vers des outils de modélisation adaptés aux dispositifs topologiques 13
1.6 Organisation de la thèse 14
1.7 Conclusion du chapitre 15

1.1 . L'électronique moderne face à ses limites

L'électronique moderne repose sur une idée simple, mais extrêmement puissante : diminuer les dimensions caractéristiques des composants permet d'augmenter leur densité, leur vitesse et leur efficacité énergétique. À l'échelle microscopique, cette évolution repose sur la description des électrons dans un potentiel cristallin périodique et sur la théorie des bandes, qui relie la structure électronique aux propriétés de transport [12, 13]. Ce cadre théorique a soutenu le développement de la microélectronique pendant plusieurs décennies, depuis la formulation de la loi de Moore [14] jusqu'aux règles de mise à l'échelle des transistors MOSFET [1] [15]. Elle reste une référence importante, même si les limites de la miniaturisation classique et la complexité croissante des technologies les plus avancées sont aujourd'hui bien connues [16–18]. Poursuivre cette mise à l'échelle demande donc l'introduction de nouveaux matériaux et de nouvelles architectures de composants [19]. Parmi eux figurent notamment les matériaux topologiques, dont certaines propriétés électroniques sont déterminées par la topologie de leur structure de bandes et peuvent conduire à l'apparition d'états de bord ou de surface robustes par exemple. C'est à cette classe de matériaux que cette thèse s'intéressera dans les prochains chapitres.

Lorsque que les dimensions deviennent nanométriques, le matériau ne peut plus être considéré comme un milieu dicté par son volume. La fraction d'atomes situés près des interfaces augmente, les contacts et les conditions aux limites deviennent déterminants, et la dissipation thermique impose des contraintes de plus en plus fortes. Cette évolution ne concerne pas seulement les transistors. Elle affecte également les interconnecteurs métalliques, les jonctions, les hétérostructures et, plus généralement, toutes les architectures dans lesquelles les densités de courant et les gradients électrostatiques sont concentrés sur de très petites distances. Dans les circuits intégrés, la miniaturisation des interconnecteurs est devenue une limitation à part entière [20, 21]. Le passage du matériau de volume au dispositif nanométrique impose donc de tenir compte de phénomènes qui étaient autrefois négligeables à grande échelle, tout en conservant le cadre général de la physique des dispositifs microélectroniques [22].

1.1.1 . Miniaturisation, interconnecteurs et dissipation

Les interconnecteurs constituent un exemple particulièrement clair des limites de la miniaturisation. Dans un fil métallique macroscopique, la résistivité est essentiellement contrôlée par les mécanismes de diffusion dans le volume : phonons, impuretés, défauts cristallins [12]. Lorsque l'épaisseur ou la largeur du conducteur devient comparable au libre parcours moyen des électrons, les collisions avec les surfaces [8, 9] et les joints de grains [2] [23] deviennent dominantes. La résistivité n'est alors plus une quantité intrinsèque du matériau, mais dépend explicitement de la géométrie du fil et de la qualité de ses interfaces [24, 25]. Cette augmentation de résistivité limite progressivement les performances des interconnecteurs conventionnels, notamment ceux à base de cuivre [26, 27] (*cf.* figure 1.1).

Le problème se pose à deux niveaux. D'une part, l'augmentation de la résistance entraîne un retard de propagation et une perte de performance dans les circuits [20, 21].

1. Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor.
2. Un joint de grain est la frontière entre deux cristallites d'orientations différentes dans un matériau polycristallin. Il peut agir comme un défaut étendu et influencer le transport électronique.

D'autre part, elle augmente la puissance dissipée localement, ce qui renforce les problèmes thermiques. Les effets de taille ne sont donc pas seulement une correction microscopique à la conductivité : ils participent directement aux limites physiques de l'électronique dans les circuits intégrés. Les recherches récentes portent ainsi à la fois sur la maîtrise de la diffusion aux interfaces et sur la sélection de matériaux alternatifs dont la résistivité reste favorable à petite taille [27, 28].

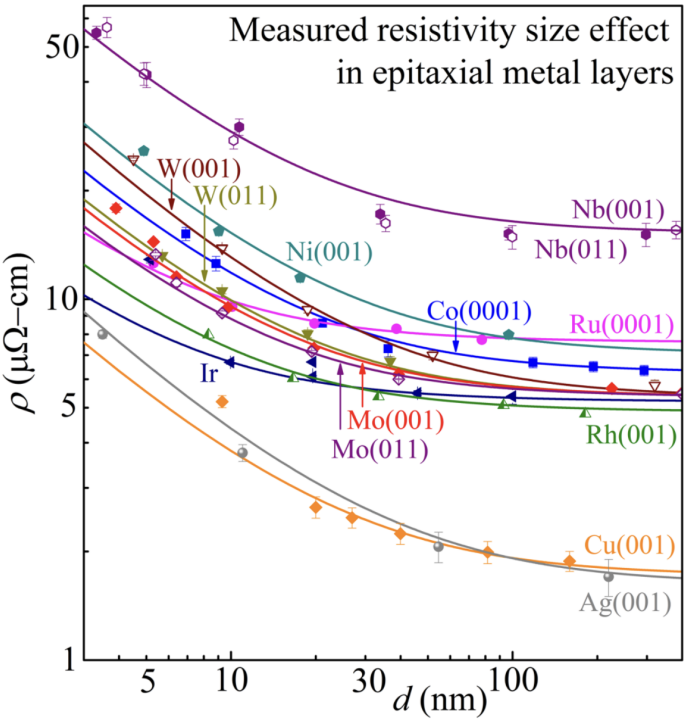

FIGURE 1.1 – Effets de taille dans les interconnecteurs métalliques. Lorsque la dimension transverse devient comparable ou inférieure au libre parcours moyen électronique, la diffusion par les surfaces augmente la résistivité effective. Cette figure est issue de [26].

Cette situation explique l'intérêt porté à de nouveaux matériaux pour les interconnecteurs [26, 27]. Les métaux alternatifs, les semi-métaux et certaines phases topologiques sont étudiés non seulement pour leur faible résistivité de volume, mais aussi pour leur comportement lorsque les dimensions deviennent très petites [28, 29]. Par exemple, une conductivité particulièrement élevée a été rapportée dans des nanorubans à base du semi-métal de Weyl NbAs [30]. Toutefois, cette observation ne suffit pas à garantir à elle seule une intégration technologique. Dans ce contexte, on peut se demander si la géométrie des bandes électroniques est susceptible de faire émerger de nouveaux mécanismes de transport ou, à défaut, de modifier les lois d'échelle classiques dans les systèmes de taille finie.

1.1.2 . Effets de taille, surfaces et interfaces à l'échelle nanométrique

Historiquement, la théorie de Fuchs-Sondheimer a permis d'expliquer l'augmentation de la résistivité dans les films métalliques minces [8, 9]. Elle repose sur une idée physique simple : lorsqu'un électron atteint une surface rugueuse, sa trajectoire est diffusée et sa contribution au courant longitudinal est modifiée [8]. La fonction de distribution élec-

tronique devient alors inhomogène près des bords [9]. Si le système est épais devant le libre parcours moyen, cette perturbation reste localisée près des surfaces. *A contrario*, s'il est mince, les régions perturbées occupent une fraction importante du conducteur et la conductivité est réduite [8, 9]. Dans les films polycristallins, cette diffusion de surface se combine en outre à la réflexion aux joints de grains décrite par le modèle de Mayadas-Shatzkes [23].

À l'échelle nanométrique, les surfaces et les interfaces ne doivent donc pas être vues comme de simples imperfections. Elles définissent les conditions aux limites du problème de transport et peuvent modifier la distribution électronique dans tout le système. Dans les matériaux topologiques, cette importance est encore renforcée. Les bords peuvent agir comme sources de diffusion, mais ils peuvent aussi héberger des états électroniques spécifiques reliés à la topologie du volume [4, 31]. Il faut distinguer deux situations. D'une part, les bords portent directement un canal de transport d'origine topologique. D'autre part, ils modifient la distribution des états de volume, ce qui peut engendrer une contribution de courant localisée près des surfaces sans être portée par un état de bord purement topologique.

Cette distinction est essentielle pour la suite de la thèse. Le chapitre consacré aux interconnecteurs topologiques ne se limite pas à l'étude d'un canal de bord protégé. Il traite plutôt comment une inhomogénéité de la fonction de distribution, induite par la diffusion de surface, peut se combiner à la courbure de Berry pour produire une contribution géométrique au courant longitudinal [10]. Le système fini devient alors un objet physique à part entière, dans lequel géométrie réelle et géométrie de bande se rencontrent.

1.1.3 . Jonctions, potentiels internes et contrôle électrostatique

Les dispositifs électroniques ne reposent pas uniquement sur le transport dans des matériaux homogènes. Une grande partie de leur fonctionnement vient du contrôle spatial du potentiel électrostatique. Dans une jonction p-n, une hétérojonction, un transistor, une cellule photovoltaïque ou un photodétecteur, les grandeurs pertinentes sont notamment les densités de porteurs, les courants et le champ électrique interne [22, 32]. La théorie classique des dispositifs semi-conducteurs décrit ces grandeurs à l'aide des équations de continuité, des lois de dérive-diffusion et de l'équation de Poisson [6, 33, 34]. Dans la modélisation des transistors, les équations de dérive-diffusion constituent notamment un outil standard [35]. Dans les équations de continuité, les termes de génération-recombinaison reposent, entre autres, sur le mécanisme de Shockley-Read-Hall [36, 37].

Dans une jonction p-n conventionnelle, la mise en contact de deux régions dopées différemment entraîne une redistribution des porteurs de charge [22, 32]. Les électrons et les trous diffusent depuis les régions où ils sont majoritaires vers les régions où leur densité est plus faible. Cette diffusion laisse derrière elle une charge fixe de dopants ionisés et crée un champ électrique interne. À l'équilibre, ce champ s'oppose à la diffusion et conduit à un potentiel interne [32] (*built-in potential* en anglais). Ce processus physique est l'un des fondements de l'électronique des semi-conducteurs.

L'un des objectifs de cette thèse est de poser une question analogue dans un contexte topologique. Peut-il exister un potentiel interne dans une jonction où la différence entre les deux régions ne vient pas d'un dopage extrinsèque, mais de leurs propriétés topologiques ? Dans un matériau topologique soumis à un champ magnétique, la densité d'états, les niveaux de Landau et les conditions de neutralité peuvent être modifiés par la géométrie

de bande [2,38]. Il devient alors naturel d'étudier comment ces corrections se manifestent dans un problème électrostatique auto-cohérent [11].

1.2 . L'avènement de la topologie en physique du solide

La notion de topologie a profondément modifié la manière de classer les phases électroniques [4,31,39]. Dans une description conventionnelle, deux solides sont souvent comparés à partir de leurs symétries, de leur structure cristalline et de leur spectre d'énergie. L'étude des phases topologiques a montré que cette description peut être incomplète : deux systèmes peuvent avoir des spectres apparemment similaires tout en possédant des états propres organisés de manière globalement différente dans l'espace des vecteurs d'onde [31, 39]. La classification moderne exploite également les symétries cristallines et les représentations de bandes pour identifier des matériaux topologiques [40]. Cette organisation peut contrôler des grandeurs mesurables, notamment des réponses de transport quantifiées.

1.2.1 . De l'effet Hall quantique aux phases topologiques

L'effet Hall, découvert à la fin du XIXe siècle [41], a révélé qu'un champ magnétique pouvait produire une réponse électrique transverse. Dans les ferromagnétiques, Karplus et Luttinger ont ensuite identifié une contribution intrinsèque reliée à la structure électronique [42], aujourd'hui comprise dans le cadre général de l'effet Hall anomal [43]. L'effet Hall quantique constitue un exemple expérimental majeur où une grandeur de transport apparaît quantifiée avec une précision remarquable (*cf.* figure 1.2). Dans un gaz d'électrons bidimensionnel soumis à un fort champ magnétique perpendiculaire, la conductance Hall prend des valeurs discrètes, tandis que la résistance longitudinale s'annule sur des plateaux [44]. La robustesse de cette quantification vis-à-vis de nombreux détails microscopiques a rapidement suggéré qu'elle trouvait son origine dans un principe plus fondamental, plutôt que dans les propriétés particulières du matériau considéré.

La compréhension théorique de cette robustesse a mis en évidence le rôle d'un invariant topologique associé aux états électroniques occupés. Dans un potentiel périodique bidimensionnel, la conductance Hall peut être reliée à un nombre de Chern, *i.e.* à l'intégrale d'une courbure géométrique sur la zone de Brillouin [3]. La phase géométrique introduite par Berry [1] et son interprétation comme holonomie [45] ont ensuite fourni un langage général, dont les conséquences dans les solides sont synthétisées dans la revue de Xiao *et al.* [2]. La relation entre invariant de volume et états de bord a été clarifiée dans le contexte de l'effet Hall quantique entier par Hatsugai [46, 47].

Cette histoire est importante pour la logique de la thèse. Elle montre qu'une propriété globale des états électroniques peut se manifester dans une grandeur macroscopique mesurable. Le chapitre suivant introduira formellement les objets mathématiques nécessaires : phase de Berry, connexion de Berry, courbure de Berry et nombre de Chern.

1.2.2 . Conséquences physiques de la géométrie de bande

Dans un cristal, un électron n'est pas seulement caractérisé par son énergie $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ [12]. Son état de Bloch possède une structure interne, décrite par la partie périodique $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$. Lorsque le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ parcourt la zone de Brillouin, cet état peut évoluer de manière non triviale. Il peut accumuler une phase géométrique [1], présenter une texture de spin

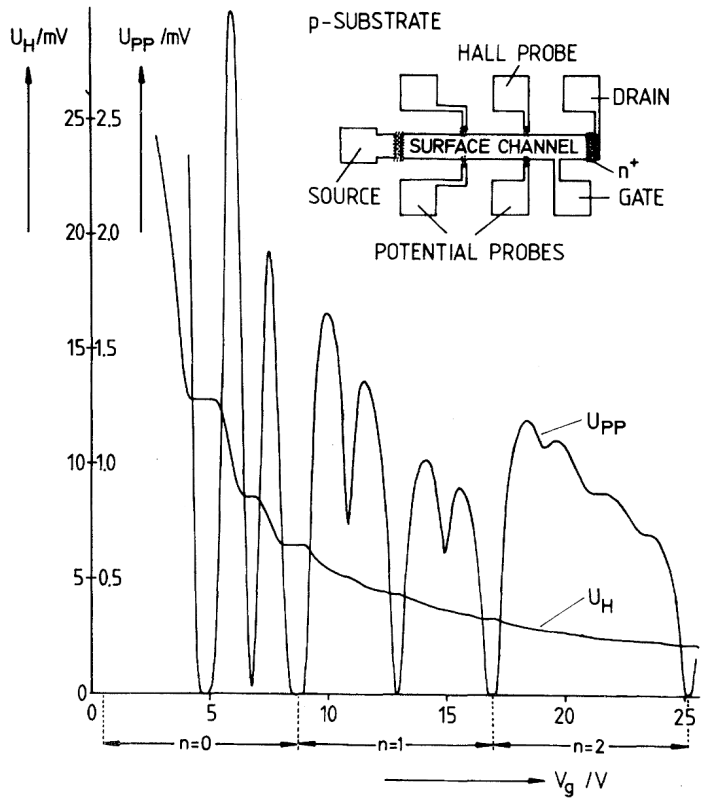

FIGURE 1.2 – Première mesure de l'effet Hall quantique où l'on constate les célèbres plateaux de l'effet Hall quantique dans la courbe U_{H}. Lorsqu'on atteint un plateau, la tension longitudinale U_{pp} chute à zéro. L'expérience a été réalisée sous un champ magnétique de 18 T et à une température de 1.5 K. Figure issue de l'article historique [44].

ou de pseudo-spin, et porter une courbure de Berry [2].

Cette information géométrique peut avoir des conséquences sur la dynamique électronique. Dans une description semi-classique moderne, la courbure de Berry agit comme un champ magnétique effectif dans l'espace des vecteurs d'onde [2]. Elle modifie la vitesse du paquet d'ondes et produit une contribution transverse appelée vitesse anomale [2, 5]. C'est cette vitesse anomale qui intervient notamment dans l'effet Hall anomal intrinsèque [42, 43]. En champ magnétique, elle modifie aussi la mesure [3] de l'espace des phases et interagit avec le moment magnétique orbital du paquet d'ondes [2]. Ainsi, la géométrie de bande ne se réduit pas à une classification abstraite ; elle modifie concrètement la dynamique des porteurs.

La topologie impose également des contraintes sur les interfaces. Lorsque deux phases topologiques distinctes sont mises en contact, il n'est pas toujours possible de passer continûment de l'une à l'autre sans fermer le gap d'énergie [31, 39]. Des états localisés à l'interface peuvent alors apparaître [46, 47]. Cette correspondance entre propriété de volume et états de bord ou d'interface sera l'un des fils conducteurs des chapitres suivants, en particulier dans l'étude des isolants de Chern.

3. Ici, on parle de mesure au sens mathématique.

1.2.3 . Isolants topologiques, isolants de Chern et semi-métaux topologiques

Les phases topologiques se déclinent en plusieurs familles [4, 31, 39]. Les isolants topologiques bidimensionnels et tridimensionnels possèdent un volume isolant, mais peuvent héberger des états conducteurs aux bords ou aux surfaces (*cf.* figure 1.3) [4]. Les travaux fondateurs sur l'effet Hall quantique de spin ont montré qu'un couplage spin-orbite fort peut conduire à une phase protégée par la symétrie de renversement du temps [48–50]. Sa mise en évidence dans des puits quantiques HgTe/CdTe a fourni une réalisation expérimentale emblématique [51]. La classification tridimensionnelle des isolants topologiques a ensuite été formulée dans un cadre invariant par renversement du temps [52, 53]. Les revues de Hasan et Kane [4], puis de Qi et Zhang [54], ont joué un rôle important dans la synthèse de ce domaine.

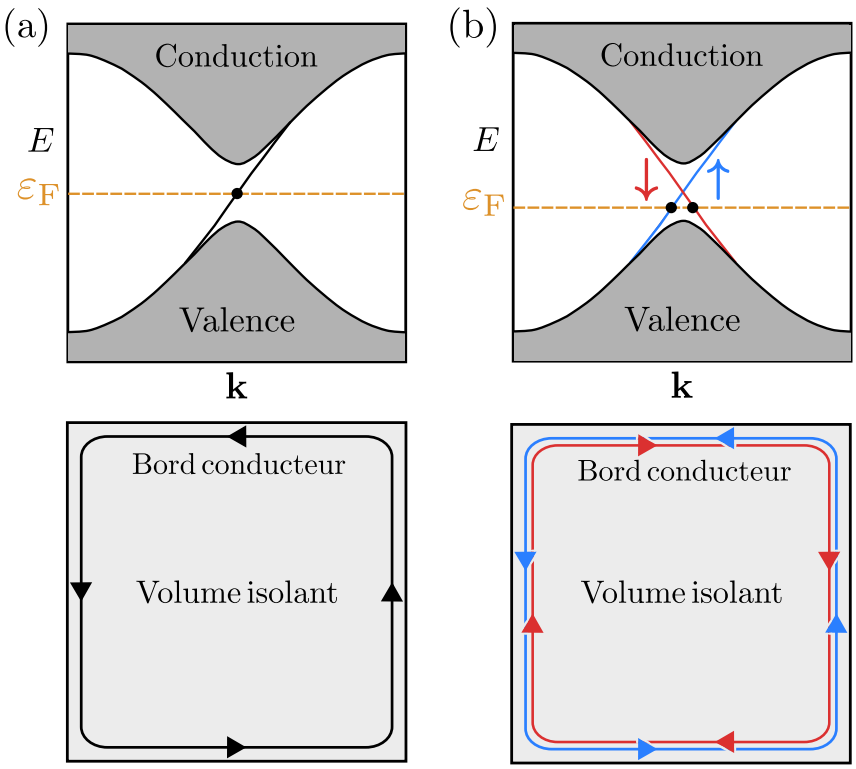

FIGURE 1.3 – Comparaison schématique entre deux phases topologiques bidimensionnelles. (a) Isolant de Chern (brise la symétrie par renversement du temps) : le volume est isolant, tandis qu'un unique état de bord chiral traverse le gap entre les bandes de valence et de conduction. Le canal de bord associé se propage dans un seul sens le long du bord de l'échantillon. (b) Isolant topologique préservant la symétrie de renversement du temps : le gap de volume est traversé par une paire d'états de bord hélicoïdaux. Les deux modes contre-propageants portent des spins, ou pseudo-spins, opposés, donnant lieu à un bord conducteur tout en ayant un volume isolant. La ligne pointillée indique l'énergie de Fermi ε_F.

Les isolants de Chern occupent une place particulière dans cette thèse. Ils se caractérisent par un nombre de Chern non nul et par des états de bord chiraux. L'existence d'une phase de Chern nécessite une brisure de la symétrie par renversement du temps. Le modèle de Haldane a montré qu'une conductivité de Hall quantifiée pouvait apparaître sans niveaux de Landau et avec un flux magnétique net nul par maille primitive du cristal.

Dans ce modèle, des sauts complexes entre seconds voisins brisent la symétrie par renversement du temps et ouvrent un gap topologique caractérisé par un nombre de Chern non nul [55]. Des réalisations dans des systèmes magnétiques plus récentes ont montré qu'une phase de Chern peut être contrôlée électriquement [56]. Au-delà du matériau isolé, des jonctions et réseaux de Chern sont aujourd'hui envisagés comme briques élémentaires pour des dispositifs, par exemple pour diviser ou rediriger des courants chiraux [57, 58].

Les semi-métaux de Dirac et de Weyl montrent que la topologie peut aussi apparaître dans des systèmes sans gap. Dans ces matériaux, les points de contact entre bandes peuvent porter une charge topologique, et la courbure de Berry près de ces points peut produire des réponses de transport anomales [59]. Ils sont particulièrement prometteurs pour le transport métallique, comme l'illustre la conductivité élevée observée dans des nanorubans de NbAs [29, 30], même si les questions liées aux contacts, au désordre et à leur intégration restent ouvertes.

1.2.4 . Quelques réalisations expérimentales marquantes

Les phases topologiques ne sont plus seulement des constructions théoriques. Elles ont été observées ou fortement indiquées dans une variété de systèmes expérimentaux. Les puits quantiques HgTe/CdTe ont fourni une réalisation emblématique de l'effet Hall quantique de spin, après sa prédiction dans le modèle BHZ [50, 51] (*cf.* figure 1.4 (a)). Les isolants topologiques tridimensionnels ont été identifiés par leurs états de surface, notamment au moyen de spectroscopies résolues en vecteur d'onde [4]. L'observation expérimentale de l'effet Hall anomal quantique constitue un autre jalon majeur [60] (*cf.* figure 1.4 (b)). Les semi-métaux de Weyl ont ensuite élargi le paysage des phases topologiques [59], avec des propriétés de transport remarquables dans certains nanorubans [30].

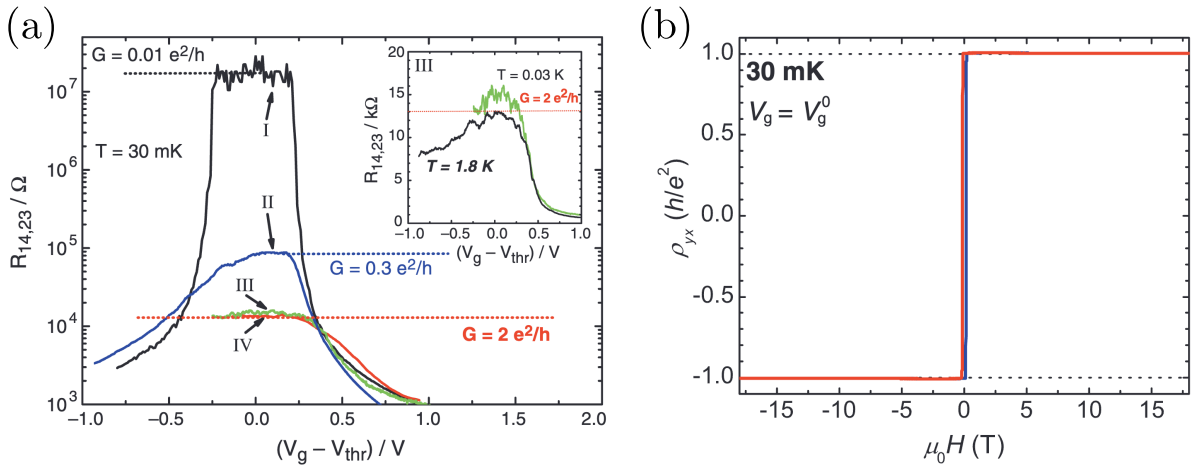

FIGURE 1.4 – Quelques réalisations expérimentales marquantes concernant l'étude des matériaux topologiques : (a) observation de l'effet Hall quantique de spin dans les puits HgTe/CdTe. Figure issue de l'article historique [51]. (b) Observation de l'effet Hall anomal quantique dans un isolant topologique magnétique. Figure issue de l'article historique [60].

Les matériaux bidimensionnels ont récemment ouvert une autre voie, depuis l'isolement de monocouche de graphène [61] jusqu'aux hétérostructures contrôlées par grille électriques. Dans ces plateformes, l'empilement et les champs électriques permettent de mo-

difier fortement la structure de bande. Une phase de Chern magnétique peut notamment être contrôlée électriquement [56]. En parallèle, la classification fondée sur les symétries cristallines accélère l'identification de nouvelles familles de matériaux topologiques [40]. Ces avancées montrent que la topologie en matière condensée est devenue une réalité expérimentale dans des familles de matériaux très différentes.

Ces réalisations expérimentales ne doivent toutefois pas masquer les difficultés. Les températures d'observation peuvent être très basses, le désordre peut masquer les réponses quantifiées, et les contacts peuvent modifier le comportement attendu des états de bord. Le contrôle du niveau de Fermi est souvent délicat, en particulier lorsque des bandes parasites coexistent avec le gap topologique. Ces obstacles expliquent pourquoi le passage d'une phase topologique observée en laboratoire à un composant fonctionnel reste un défi majeur [29].

1.3 . Des matériaux prometteurs mais complexes à exploiter

L'intérêt des matériaux topologiques pour les dispositifs vient de leur capacité à produire des réponses robustes ou inhabituelles [29, 58]. Cependant, un dispositif réel n'est pas décrit par un Hamiltonien de volume idéal. Il possède des contacts, des bords, des interfaces, des imperfections, des grilles et un environnement électrostatique. L'enjeu est alors de comprendre comment les propriétés topologiques des bandes se manifestent dans la géométrie concrète d'un dispositif.

1.3.1 . Du laboratoire au dispositif : un saut non trivial

Observer une phase topologique dans un matériau ne garantit pas immédiatement son exploitation dans un dispositif. Entre l'échantillon idéal et le composant fonctionnel, plusieurs conditions doivent être réunies : croissance contrôlée, faible désordre, interfaces propres, contacts reproductibles, contrôle du potentiel chimique et compatibilité avec une architecture de mesure ou d'intégration. Ces difficultés sont bien identifiées dans les perspectives sur l'électronique topologique [29, 58].

La distinction entre le matériau idéal et le dispositif réel est particulièrement importante dans une approche théorique. Un invariant topologique tel que le nombre de Chern est généralement introduit dans la limite d'un système infini et périodique, où il peut être défini comme une intégrale de la courbure de Berry sur la zone de Brillouin. Dans un système fini à bords ouverts, cette définition dans l'espace des moments n'est plus directement applicable, puisque l'invariance par translation est rompue. La nature topologique du bulk subsiste néanmoins : pour un système suffisamment grand, ses propriétés locales convergent vers celles du système infini, tandis que la présence de frontières se manifeste notamment par l'apparition d'états de bord conformément à la correspondance bulk-edge. Des formulations en espace réel, telles que le marqueur de Chern local [62], permettent par ailleurs de caractériser directement la topologie de systèmes finis. Un dispositif, au contraire, est fini, connecté à des réservoirs [4], soumis à des champs électriques et parfois à des gradients de densité [63]. Il faut donc relier la description microscopique du système à des grandeurs caractéristiques des dispositifs : courant, densité de charge, potentiel électrostatique, capacité, conductance effective. C'est précisément dans cette transition que

4. Ces réservoirs peuvent modéliser l'environnement extérieur, des contacts, etc.

les outils semi-classiques [2] et les théories de transport mésoscopique [63] jouent un rôle important.

1.3.2 . Contacts, interfaces et dopage : la topologie mise à l'épreuve

Les contacts métalliques sont indispensables aux mesures de transport, mais ils peuvent modifier la physique qu'ils cherchent à sonder. Ils peuvent déplacer localement le potentiel chimique, introduire une diffusion supplémentaire ou hybrider les états localisés aux bords. Dans les systèmes présentant l'effet Hall quantique de spin et, plus généralement, dans les hétérostructures topologiques, le couplage aux contacts et la qualité des interfaces peuvent fortement influencer les signaux mesurés et leur interprétation [29, 64] (*cf.* figure 1.5).

Les interfaces jouent un rôle tout aussi important. Elles peuvent héberger les états imposés par la correspondance *bulk-edge* [46, 47], mais elles peuvent aussi induire une redistribution de charge, modifier les symétries locales ou créer une hybridation entre degrés de liberté. Un contrôle électrique peut également modifier une phase de Chern, voire faire basculer le système d'une phase topologique à une autre dans certaines hétérostructures magnétiques [56]. Le dopage ajoute une difficulté supplémentaire : il peut permettre de placer le niveau de Fermi dans une région intéressante du spectre, mais il peut aussi masquer la réponse isolante ou introduire du désordre.

Cette discussion prépare directement les deux applications principales de la thèse. Dans les interconnecteurs topologiques, les surfaces modifient la distribution hors équilibre et peuvent créer une contribution géométrique au courant [10]. Dans les jonctions d'isolants de Chern, l'interface entre deux phases distinctes peut guider des canaux chiraux [57] et s'accompagner d'une redistribution de charge et d'un potentiel interne, même en l'absence de dopage extrinsèque [11].

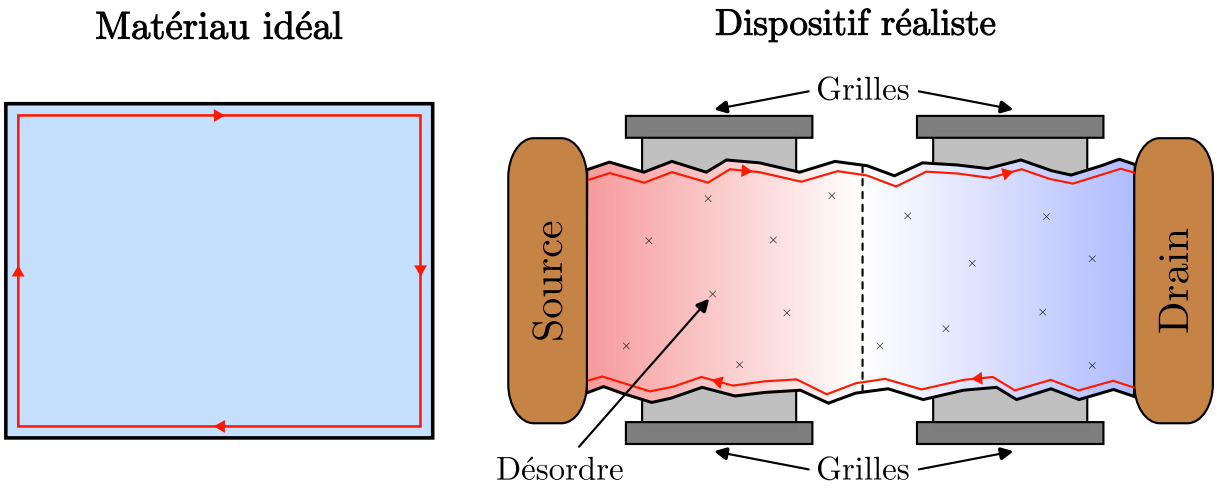

FIGURE 1.5 – Comparaison entre un matériau topologique idéal et un dispositif expérimental réaliste. Les contacts, les grilles, le désordre, le dopage et les interfaces peuvent modifier la manière dont les signatures topologiques se manifestent dans une mesure [29].

1.3.3 . Matériaux bidimensionnels et hétérostructures de van der Waals

Les matériaux bidimensionnels et les hétérostructures de van der Waals offrent un terrain particulièrement riche depuis l'isolement de monocouches de graphène [61]. Ils permettent de contrôler l'environnement diélectrique, d'appliquer des potentiels de grille et

de créer des interfaces latérales ou verticales. Les jonctions coplanaires bidimensionnelles présentent une redistribution de charge plus délocalisée que leurs analogues tridimensionnels [65, 66]. Des jonctions *p*-*n* fondées sur des dichalcogénures de métaux de transition ont également montré des réponses photovoltaïques marquées [67], et leurs développements optoélectroniques récents sont synthétisés dans la revue d'Elahi *et al.* [68]. Au-delà de ces jonctions conventionnelles, le contrôle électrique d'une phase de Chern illustre la possibilité de combiner topologie et électrostatique locale [56].

Pour cette thèse, l'aspect bidimensionnel est essentiel. Dans une monocouche ou une hétérostructure mince, la charge est confinée dans le plan du matériau, tandis que le champ électrostatique se propage dans l'espace tridimensionnel environnant [65,66]. L'électrostatique d'une jonction latérale bidimensionnelle n'est donc pas équivalente à celle d'une jonction tridimensionnelle conventionnelle.

1.3.4 . Contrôler localement une phase topologique

Une phase topologique peut être contrôlée par plusieurs paramètres expérimentaux [40, 56]. Le champ magnétique peut quantifier le spectre en niveaux de Landau [38], tandis qu'un potentiel de grille peut déplacer le niveau de Fermi ou contrôler une densité de porteurs. La composition locale, les symétries cristallines et les champs externes peuvent ainsi modifier l'organisation du spectre et provoquer une transition topologique [31, 40].

Dans les modèles effectifs, cette possibilité est souvent représentée par une masse de Dirac (*i.e.* le gap) dépendant de la position. Lorsque cette masse change de signe, le système peut passer d'une phase topologique à une autre. C'est précisément le mécanisme à l'origine des états de bord dans les modèles de type BHZ ou Dirac massif [50, 54]. Cette image est aussi utile pour décrire une jonction latérale entre deux isolants de Chern comme nous le verrons dans chapitre 6. Dans ce cas, les deux régions ne sont pas seulement séparées par une interface géométrique, elles possèdent des propriétés de volume différentes, qui peuvent conduire à des conditions de neutralité distinctes en présence d'un champ magnétique [11].

1.4 . Observer la géométrie de bande dans des dispositifs

L'un des intérêts des matériaux topologiques est que leur géométrie de bande peut être détectée par des mesures expérimentales [2, 29]. Les signatures les plus connues sont les réponses de Hall et les états de bord/surface. Cependant, les sondes spectroscopiques, les mesures de capacité, la compressibilité ou le potentiel local peuvent également fournir des informations importantes. Cette variété d'observables est essentielle pour relier la théorie des bandes à la physique des dispositifs.

1.4.1 . Transport Hall, réponses non locales et états de bord

Les mesures de transport sont les signatures historiques des phases topologiques. La quantification de la conductance Hall dans un cristal bidimensionnel est reliée au nombre de Chern des bandes occupées [3]. Dans les isolants de Chern, la présence d'états de bord chiraux est reliée au nombre de Chern du volume [46, 47, 55]. Dans les isolants topologiques préservant le renversement du temps, les états de bord peuvent conduire à une conductance compatible avec des canaux hélicoïdaux [50, 51].

Il faut néanmoins éviter une identification trop rapide entre toute réponse géométrique

et un transport de bord topologique. La courbure de Berry peut modifier aussi les porteurs de charge dans le volume. Elle produit une vitesse anomale [2] et contribue à l'effet Hall anomal intrinsèque [42, 43] (*cf.* figure 1.4 (b)). Dans un système fini, une distribution hors équilibre non uniforme peut alors se combiner à cette vitesse anomale pour produire une réponse longitudinale localisée près des surfaces [10]. Ce mécanisme est différent du transport par un état de bord chiral : il s'agit d'une contribution d'états de volume rendue possible par la géométrie finie [10].

1.4.2 . Spectroscopie ARPES et états de surface topologiques

Les signatures topologiques ne se limitent pas aux mesures de transport. Les techniques spectroscopiques permettent d'accéder directement à la structure électronique des matériaux. Parmi elles, la spectroscopie de photoémission résolue en angle, ou ARPES, mesure la dispersion des états électroniques en fonction de leur énergie et de leur vecteur d'onde parallèle à la surface.

Dans les isolants topologiques tridimensionnels, l'ARPES a notamment permis de mettre en évidence des états de surface présentant une dispersion approximativement linéaire. Dans Bi_2Te_3, les mesures de Chen *et al.* ont ainsi révélé un cône de Dirac de surface au voisinage du point Γ [69]. Cette observation fournit une signature directe des états métalliques présents à la surface d'un matériau dont le volume est isolant.

L'ARPES permet également de sonder les états de surface des semi-métaux de Weyl. Dans ces systèmes, les nœuds de Weyl de chiralités opposées sont reliés, à la surface, par des contours électroniques ouverts appelés arcs de Fermi. Dans le matériau TaAs, Xu *et al.* ont observé par ARPES ces structures de surface en forme d'arcs [70].

Ces deux expériences illustrent deux manifestations distinctes de la correspondance entre le volume et la surface. Dans un isolant topologique, les états de surface forment un cône de Dirac dans l'espace des vecteurs d'onde. Dans un semi-métal de Weyl, les états de surface forment au contraire des arcs ouverts, dont les extrémités coïncident avec les projections surfaciques des nœuds de Weyl du volume.

1.4.3 . Compressibilité, capacité et potentiel électrostatique local

La géométrie de bande peut aussi se manifester dans des grandeurs électrostatiques. La compressibilité électronique, la capacité quantique, la capacité différentielle ou le potentiel local sont sensibles à la densité d'états et aux conditions de neutralité du matériau [32]. Ces observables sont particulièrement importantes dans les systèmes bidimensionnels, car l'environnement diélectrique et les grilles modifient directement le coût électrostatique associé à une redistribution de charge [65, 66].

Cette perspective est centrale pour la dernière partie de la thèse. Dans une jonction d'isolants de Chern soumise à un champ magnétique, l'asymétrie spectrale peut déplacer la condition de neutralité du volume [72, 73]. Lorsque deux régions avec des nombres de Chern différents sont mises en contact, leurs potentiels chimiques de neutralité ne coïncident pas nécessairement. À l'équilibre, le potentiel électrochimique doit pourtant être uniforme, ce qui entraîne une redistribution de charge et un potentiel interne [11]. Un tel effet pourrait être relié à des mesures électrostatiques locales, comme la microscopie à sonde de Kelvin [74], la capacité différentielle ou les mesures de compressibilité.

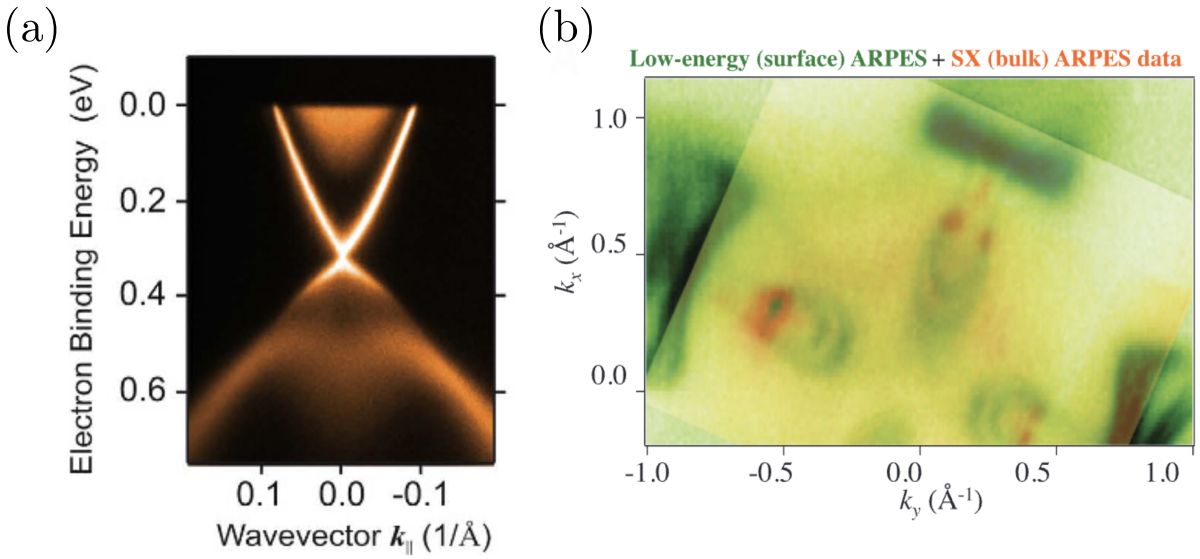

FIGURE 1.6 – Observation par ARPES d'états de surface topologiques. (a) Dispersion électronique de surface mesurée dans Bi_2Se_3, mettant en évidence un cône de Dirac au voisinage du point Γ. Figure issue de l'article [71]. (b) Carte de la surface de Fermi mesurée dans TaAs, montrant des arcs de Fermi (arcs verts) sur la surface ainsi que les nœuds de Weyl dans le volume (points orange). Figure issue de l'article historique [70].

1.5 . Vers des outils de modélisation adaptés aux dispositifs topologiques

Les sections précédentes montrent que les matériaux topologiques ne posent pas seulement des questions de classification. Ils posent aussi des questions de modélisation. Comment passer d'une structure de bande géométriquement non triviale à des densités, des courants et des potentiels mesurables dans un dispositif ? Comment tenir compte des bords, des interfaces, des champs et des gradients ? Ces questions motivent l'utilisation de théories effectives capables de relier la physique microscopique aux grandeurs macroscopiques.

1.5.1 . Les équations de van Roosbroeck : l'outil standard des dispositifs semi-conducteurs

Les équations de van Roosbroeck constituent l'un des cadres fondamentaux pour décrire les dispositifs semi-conducteurs [6]. Elles couplent les équations de continuité pour les électrons et les trous, les lois de dérive-diffusion pour les courants, et l'équation de Poisson pour le potentiel électrostatique [33, 35]. Elles permettent ainsi de relier les mécanismes microscopiques de transport et de recombinaison à des grandeurs macroscopiques comme la densité de charge et le courant électrique [32, 34].

Dans un semi-conducteur ordinaire, cette description repose sur des paramètres effectifs : mobilité, coefficient de diffusion, masse effective, densité d'états et temps de relaxation [13, 32]. Elle est suffisamment générale pour décrire un grand nombre de dispositifs. Cependant, elle suppose implicitement que la structure de bande intervient principalement par la dispersion en énergie et par la densité d'états usuelle. Or, dans un matériau topologique, les états de Bloch possèdent une géométrie propre qui peut modifier la dynamique

des porteurs et la mesure de l'espace des phases [2].

1.5.2 . Pourquoi les descriptions classiques doivent être enrichies

La dynamique semi-classique moderne montre que la vitesse d'un paquet d'ondes de Bloch contient, en plus de la vitesse de groupe, une contribution anomale proportionnelle à la courbure de Berry [2,5]. Cette vitesse est transverse au champ électrique et constitue l'origine intrinsèque de nombreuses réponses Hall anomales [42, 43]. En présence d'un champ magnétique, la courbure de Berry modifie également la densité d'états dans l'espace des phases, tandis que le moment magnétique orbital décale l'énergie des porteurs [2].

Ces corrections affectent précisément les grandeurs utilisées dans les théories de dispositif. Les courants peuvent recevoir des contributions géométriques. Les densités peuvent être modifiées par le facteur de mesure de l'espace des phases. Le potentiel chimique de neutralité peut dépendre du champ magnétique et de la topologie. Il ne s'agit donc pas de remplacer les équations de conservation ni l'équation de Poisson : la conservation locale de la charge et les lois de l'électrostatique demeurent fondamentales. L'enjeu est plutôt d'enrichir les équations qui relient les courants, les densités, les champs et les potentiels, comme dans les extensions topologiques des équations de van Roosbroeck [7].

1.5.3 . La théorie semi-classique comme pont entre géométrie de bande et transport

La théorie semi-classique moderne fournit un cadre théorique naturel pour effectuer ce passage. Elle décrit un porteur de charge comme un paquet d'ondes localisé à la fois en espace réel et en espace des vecteurs d'onde. Ce paquet d'onde conserve l'information géométrique de la bande dans laquelle il évolue [2,5]. Elle relie ainsi des objets géométriques comme la phase de Berry [1], la courbure de Berry ou le tenseur géométrique quantique à des grandeurs dynamiques comme la vitesse, la densité d'états et à des grandeurs plus macroscopiques comme les courants et les densités [2]. Ces objets interviennent aussi dans des réponses non linéaires, notamment celles associées au dipôle de courbure de Berry [75] ou à d'autres contributions géométriques [10, 76].

Dans cette thèse, cette théorie joue un rôle de pont. Elle permet d'abord de comprendre comment la géométrie de bande modifie la dynamique des porteurs. Elle sert ensuite de point de départ pour discuter une généralisation des équations de van Roosbroeck à des matériaux topologiques [7]. Enfin, elle fournit l'intuition nécessaire pour comprendre les effets de bord dans des conducteurs finis [10] et les effets électrostatiques intrinsèques dans des jonctions de Chern.

1.6 . Organisation de la thèse

Le chapitre 2 introduit les outils fondamentaux de la géométrie de bande et de la topologie dans les solides cristallins. On y part du théorème de Bloch et de la structure de bandes pour introduire la phase de Berry, la connexion de Berry, la courbure de Berry, le nombre de Chern et la correspondance *bulk-edge*. Ces notions fournissent le socle théorique nécessaire à l'étude des isolants de Chern.

Le chapitre 3 présente la dynamique semi-classique moderne des paquets d'ondes de Bloch. Il montre comment la courbure de Berry modifie les équations du mouvement, comment le moment magnétique orbital corrige l'énergie de bande, et comment la densité

d'états dans l'espace des phases est modifiée en présence d'un champ magnétique. Ce chapitre établit le lien entre géométrie de bande et dynamique réelle des porteurs de charge.

Le chapitre 4 discute ensuite l'extension des équations de van Roosbroeck à des matériaux possédant une géométrie de bande non triviale [7]. Il examine ce qui reste inchangé, comme les équations de continuité et l'équation de Poisson, et ce qui doit être modifié, notamment les courants et les relations entre densité et potentiel chimique.

Le chapitre 5 étudie les effets de surface dans des systèmes finis. À partir de la théorie de Fuchs-Sondheimer, il analyse comment une inhomogénéité de la distribution électronique près des surfaces peut se combiner à la courbure de Berry pour produire une contribution géométrique au transport électrique longitudinal [10].

Enfin, le chapitre 6 est consacré à l'électrostatique d'une jonction latérale entre isolants de Chern sous champ magnétique. Il montre comment l'asymétrie spectrale associée au niveau de Landau anomal modifie les conditions de neutralité de volume et peut conduire à l'apparition d'un potentiel interne intrinsèque, même en l'absence de dopage extrinsèque [11]. Le contexte des interfaces de Chern et des jonctions bidimensionnelles est notamment illustré par les travaux sur les diviseurs de courant topologiques [57] et sur les jonctions coplanaires [65, 66].

Contributions principales. Deux contributions structurent ce manuscrit. La première généralise la théorie de Fuchs-Sondheimer à des conducteurs possédant une courbure de Berry et met en évidence un courant longitudinal non linéaire localisé près des surfaces [8–10]. La seconde étudie une jonction latérale entre isolants de Chern sous champ magnétique : elle relie l'asymétrie spectrale et les conditions de neutralité à l'apparition d'un potentiel interne, puis traite l'électrostatique de manière auto-cohérente. Cette contribution s'inscrit dans le contexte plus large des jonctions et réseaux de Chern [57,58], mais les résultats électrostatiques présentés dans cette thèse sont originaux.

1.7 . Conclusion du chapitre

Ce chapitre a montré que les questions abordées dans cette thèse s'inscrivent dans un contexte expérimental plus large que la seule classification topologique des bandes. La miniaturisation des dispositifs, le rôle de plus en plus important des surfaces et interfaces, l'émergence des matériaux bidimensionnels et la possibilité de contrôler localement les phases électroniques rendent nécessaire une compréhension plus fine des réponses de transport et d'électrostatique.

Les matériaux topologiques offrent dans ce contexte une nouvelle perspective. Leur géométrie de bande peut modifier la dynamique des porteurs, produire des courants anomaux, changer la densité d'états effective et influencer les conditions de neutralité. Ces effets ne se limitent pas à des signatures idéales comme la conductance Hall quantifiée ou la présence d'états de bord protégés. Ils peuvent aussi intervenir dans des géométries de dispositif, où les densités, les courants et les potentiels doivent être déterminés de manière locale et parfois auto-cohérente.

Les chapitres suivants introduisent les outils théoriques nécessaires pour formuler ces idées quantitativement. Ils montrent comment passer d'une description géométrique des bandes à une théorie semi-classique des porteurs de charge, puis à des applications

concrètes concernant le transport dans des systèmes finis et l'électrostatique de jonctions topologiques.

Chapitre 2

Géométrie de bande et topologie

Résumé

Ce chapitre introduit les outils nécessaires à l'étude de la géométrie et la topologie des bandes électroniques dans les solides cristallins. Après un rappel du théorème de Bloch et de la notion de structure de bandes, nous présentons la géométrie des états de Bloch à travers la phase, la connexion et la courbure de Berry, ainsi que le tenseur géométrique quantique. Nous montrons ensuite comment l'intégrale de la courbure de Berry sur la zone de Brillouin définit un invariant topologique entier : le nombre de Chern. Le fermion de Dirac massif fournit un exemple minimal permettant d'illustrer l'origine des transitions topologiques et le rôle de l'inversion de bande. Enfin, nous introduisons un modèle d'isolant de Chern sur réseau et discutons l'apparition d'états de bord chiraux à travers la correspondance *bulk-edge*.

Sommaire

2.1 Introduction et problématique physique 18
2.2 Structure de bande dans les solides cristallins 19
2.3 Géométrie des états de Bloch 23
2.4 Invariants topologiques et nombre de Chern 27
2.5 Un modèle minimal : fermions de Dirac massifs 31
2.6 Isolants de Chern sur réseau et correspondance *bulk-edge* . . 36
2.7 Conclusion du chapitre 43

2.1 . Introduction et problématique physique

La description des propriétés électroniques d'un solide cristallin repose traditionnellement sur sa structure de bandes [12]. Dans l'approximation des particules indépendantes, celle-ci permet notamment de distinguer les matériaux conducteurs des isolants et de déterminer les états accessibles aux porteurs de charge [1]. Cependant, la seule connaissance des niveaux d'énergie ne suffit pas toujours à caractériser complètement un système. Deux matériaux peuvent présenter des spectres similaires tout en possédant des propriétés physiques profondément différentes en raison de la manière dont leurs états propres s'organisent dans l'espace des paramètres [77], par exemple dans l'espace des vecteurs d'onde.

Au-delà de leur énergie, les états de Bloch possèdent une structure géométrique liée à leur variation dans la zone de Brillouin. Lors d'une évolution adiabatique, cette géométrie peut se manifester par l'acquisition d'une phase, introduite par Berry [1]. Dans la théorie moderne des bandes, la connexion de Berry décrit localement la variation des états de Bloch, tandis que la courbure de Berry caractérise la géométrie qui en résulte [78,79]. Cette dernière joue un rôle particulièrement important en physique de la matière condensée : elle modifie la dynamique semi-classique des porteurs de charge et peut engendrer des nouvelles réponses de transport [2, 80].

Dans les systèmes bidimensionnels, l'intégrale de la courbure de Berry sur l'ensemble de la zone de Brillouin définit un invariant topologique entier : le nombre de Chern [3,81]. Cet invariant permet de distinguer des phases isolantes qui ne peuvent pas être reliées continûment les unes aux autres sans fermeture du gap [39]. Il détermine également l'existence d'états de bord chiraux lorsque le matériau est placé dans une géométrie finie [46]. Les isolants de Chern constituent ainsi un exemple simple et particulièrement instructif de matériaux dont les propriétés macroscopiques dépendent directement de la géométrie et de la topologie des états électroniques [55].

Dans un panorama plus large, les isolants topologiques sont des phases gappées, ils se distinguent des semi-métaux de Dirac et de Weyl tridimensionnels. En effet, leurs excitations de basse énergie sont sans gap autour de points nodaux stabilisés par la topologie et, selon le cas, par les symétries cristallines [59]. La classification moderne des matériaux topologiques exploite également les symétries cristallines et les représentations de bandes pour rechercher de nouvelles phases [40].

L'objectif de ce chapitre est d'introduire les outils nécessaires à l'étude de ces phénomènes. Nous commencerons par rappeler les notions de réseau cristallin, de zone de Brillouin et de structure de bandes à partir du théorème de Bloch. Nous introduirons ensuite la géométrie des états de Bloch à travers la phase, la connexion et la courbure de Berry, ainsi que le tenseur géométrique quantique. Nous définirons alors le nombre de Chern et discuterons sa quantification et sa robustesse. Enfin, nous illustrerons ces concepts à l'aide d'un fermion de Dirac massif en dimension deux, puis d'un modèle d'isolant de Chern sur réseau, afin de mettre en évidence les transitions topologiques et la correspondance *bulk-edge*.

Les notions développées dans ce chapitre serviront de fondement aux chapitres sui-

1. Cette classification doit être nuancée en présence d'interactions électroniques fortes. Par exemple, un isolant de Mott peut présenter un comportement isolant alors qu'une théorie de bandes à particules indépendantes prédirait un état métallique.

vants. Nous verrons notamment que la courbure de Berry peut modifier les propriétés de transport d'un système fini et que le nombre de Chern peut également influencer l'équilibre électrostatique d'une jonction entre matériaux topologiques.

2.2 . Structure de bande dans les solides cristallins

2.2.1 . Cristal, réseau réciproque et zone de Brillouin

Réseau de Bravais. Un système est dit cristallin lorsque l'arrangement de ses constituants présente une structure périodique et ordonnée dans l'espace. On dit que le cristal est caractérisé par une symétrie par translation discrète. Pour formaliser cette périodicité, la façon la plus intuitive est de définir une base de vecteurs dits *primitifs*. La position de chaque point du réseau peut alors être décrite comme une combinaison linéaire de ces vecteurs. Mathématiquement, si $\mathbf{R}$ est un vecteur reliant l'origine du réseau à un autre nœud, alors il peut se décomposer comme

$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \, \mathbf{a}_i, \qquad n_i \in \mathbb{Z}, \tag{2.1}$$

où l'on a supposé un réseau tridimensionnel. L'ensemble des vecteurs $\mathbf{R}$ forme ce que l'on appelle un *réseau de Bravais* [12].

On appelle *maille primitive* le plus petit volume engendré par les vecteurs primitifs qui, par translation selon tous les vecteurs du réseau, permet de paver l'espace sans recouvrement. À noter, qu'il est important de distinguer le terme de *nœud* de celui d'*atome*. En effet, ce sont les nœuds qui forment un réseau périodique et ordonné. Les atomes sont les constituants d'un nœud, par exemple dans un cristal monoatomique, chaque nœud est composé d'un atome. Dès lors, le vecteur position d'un atome dans le cristal est donné par

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \boldsymbol{\tau}, \tag{2.2}$$

où $\boldsymbol{\tau}$ est le vecteur position de l'atome au sein de la maille.

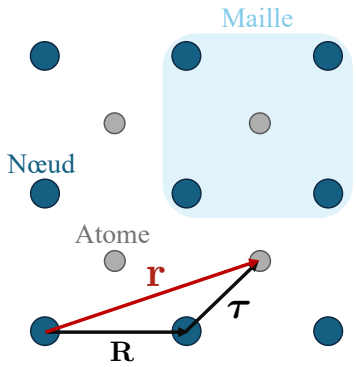

FIGURE 2.1 – Schéma d'un cristal bidimensionnel carré à face centrée. La position d'un atome est la combinaison de la position du nœud correspondant avec la position de l'atome à l'intérieur de la maille.

Réseau réciproque. L'existence d'un réseau de Bravais dans l'espace direct (réel) engendre automatiquement l'existence d'un nouveau réseau que l'on défini dans l'espace des moments (espace-$\mathbf{k}$). Ce réseau est appelé *réseau réciproque* et est défini par des vecteurs $\mathbf{G}$ vérifiant la relation [12]

$$e^{i\,\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}} = 1. \tag{2.3}$$

Par analogie aux vecteurs de base du réseau de Bravais $\mathbf{a}_i$, les vecteurs $\mathbf{G}$ peuvent se décomposer en fonction des vecteurs de base du réseau réciproque notés $\mathbf{b}_i$. Ces vecteurs vérifient la relation

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}, \tag{2.4}$$

ou, de manière équivalente, peuvent être construits grâce aux relations

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \tag{2.5a}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}, \tag{2.5b}$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}. \tag{2.5c}$$

Prenons deux réseaux comme exemples. Le réseau réciproque d'un réseau carré est également un réseau carré. Le cas du réseau en nid d'abeille [2] demande davantage de précautions. Ce dernier n'est pas lui-même un réseau de Bravais : il est obtenu en associant une base de deux sites à chaque nœud d'un réseau de Bravais triangulaire. Son réseau réciproque est donc celui du réseau de Bravais triangulaire sous-jacent, *i.e.* un autre réseau triangulaire, tourné de $\pi/6$ avec le choix d'axes adopté sur la figure 2.2. À noter, que le réseau réciproque est aussi un réseau de Bravais dans son espace, par conséquent, si on prend le réseau réciproque du réseau réciproque, on retombe sur le réseau de Bravais originel.

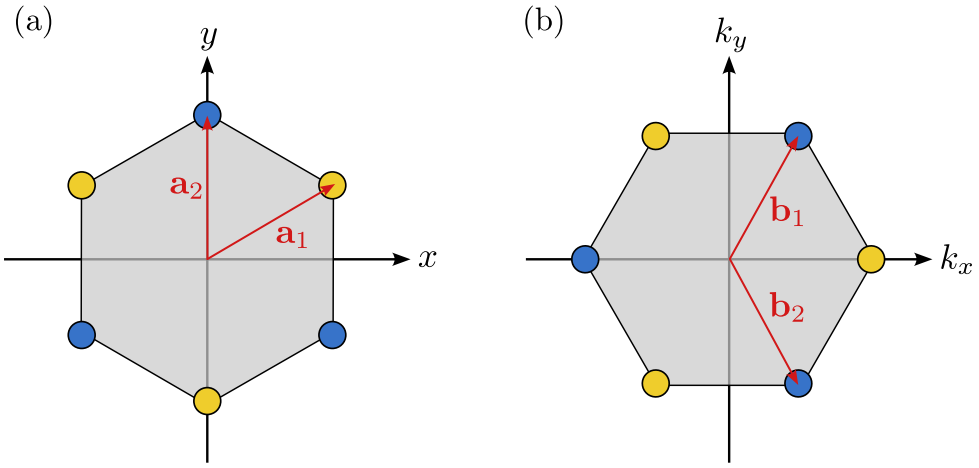

FIGURE 2.2 – (a) Réseau nid d'abeille dans l'espace réel avec ses vecteurs primitifs $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$. Les couleurs distinguent les deux sous-réseaux de Bravais triangulaires. (b) Réseau réciproque équivalent, également nid d'abeille mais pivoté de $\pi/6$ avec ses nouveaux vecteurs de base $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2)$.

2. Le graphène, l'un des matériaux emblématiques de la matière condensée, présente une structure cristalline en nid d'abeille.

Zone de Brillouin. La périodicité du réseau réciproque dans l'espace-**k** implique que certains vecteurs d'ondes **k** sont équivalents. En effet, deux vecteurs **k** et $\mathbf{k}+\mathbf{G}$ correspondent au même état cristallin à un facteur de phase près. Dès lors, il devient naturel de définir un domaine fondamental contenant tous les vecteurs d'ondes inéquivalents. Ce domaine est appelé première *zone de Brillouin* (ZB) et elle est construite comme l'ensemble des points de l'espace-**k** plus proches de l'origine que de tout autre nœud du réseau réciproque [3] [12].

Deux exemples simples sont représentés sur la figure 2.3. Pour un réseau nid d'abeille, la première ZB possède une forme hexagonale. Pour un réseau carré, elle prend la forme d'un carré centré sur l'origine. Sur les frontières de la ZB, on peut définir des *points de haute symétrie* partagés avec les zones voisines.

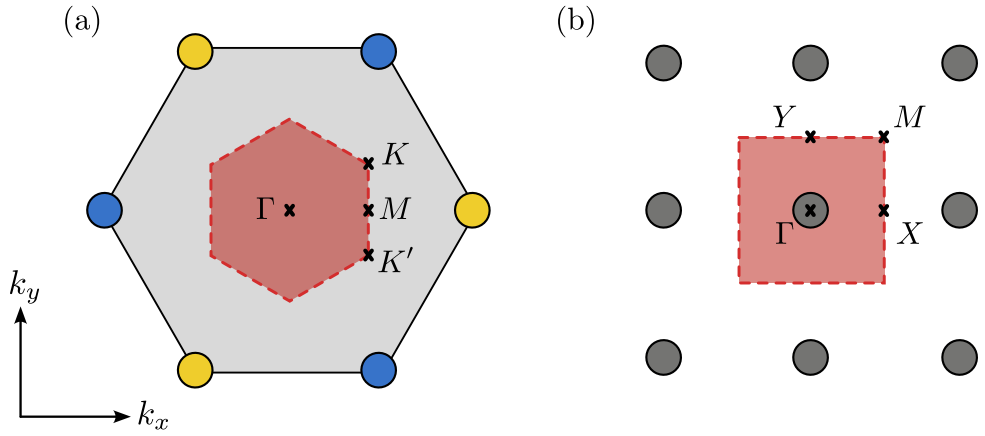

FIGURE 2.3 – Premières zones de Brillouin et points de haute symétrie pour (a) un réseau nid d'abeille et (b) un réseau carré. Les zones rouges, délimitées par les lignes rouges pointillées, correspondent aux premières zones de Brillouin. Le centre est noté Γ, tandis que K et K' désignent les deux vallées non équivalentes du réseau nid d'abeille, et X, Y et M les points de haute symétrie du réseau carré. Les disques bleus représentent les points du réseau réciproque.

2.2.2 . Théorème de Bloch

Le Hamiltonien d'un électron dans un cristal périodique est

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}), \tag{2.6}$$

où m est la masse de l'électron et $V(\mathbf{r})$ un potentiel décrit par une fonction périodique possédant la même période que le réseau direct, *i.e.* $V(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$. Si l'on note $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}$ l'opérateur translation d'un vecteur **R** du réseau de Bravais, alors la périodicité de $V(\mathbf{r})$ induit

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}] = 0. \tag{2.7}$$

Comme le Hamiltonien commute avec tous les opérateurs translation du réseau de Bravais, les états propres de $\hat{\mathcal{H}}$ sont aussi les états propres de $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}$ [4], *i.e.*,

$$\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}). \tag{2.8}$$

3. Ce domaine est appelé *cellule de Wigner-Seitz* du réseau réciproque.

4. Les valeurs propres de ces opérateurs ne sont pas arbitraires car elles doivent satisfaire l'unitarité et la loi de composition de $\hat{\mathcal{T}}_{\mathbf{R}}$. Les seules fonctions qui satisfont cela sont les fonctions du type $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$.

Les états propres ne sont donc pas périodiques : ils acquièrent une phase après la translation. L'équation (2.8) est l'une des formulations du *théorème de Bloch* [82]. Cependant, à dessein d'étudier par la suite les propriétés géométriques et topologiques du système, il convient d'utiliser une autre formulation du théorème de Bloch. Pour la faire apparaître, on peut partir de (2.8) [5] et décomposer en séries de Fourier les deux côtés de l'expression

$$\sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \tag{2.9}$$

Par identification terme à terme, $c_{\mathbf{q}} \neq 0$ seulement si $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad \forall \mathbf{R}$. Autrement dit, grâce à (2.3), les vecteurs d'ondes $\mathbf{q}$ et $\mathbf{k}$ sont nécessairement liés par un vecteur primitif $\mathbf{G}$ du réseau réciproque, *i.e.* $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$. Ainsi, l'état propre peut s'écrire

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \equiv e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{2.10}$$

La fonction $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ est périodique en $\mathbf{R}$, elle vérifie en effet la relation $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. De fait, cette $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ est appelée *partie périodique de la fonction de Bloch*. À noter que cette fonction est indicée par n et $\mathbf{k}$. L'indice n sert à dénombrer les solutions de l'équation de Schrödinger qui en possède une infinité lorsqu'elle est appliquée sur l'espace des fonctions périodiques (sur les fonctions $u_{\mathbf{k}}$). Concernant l'indice $\mathbf{k}$, grâce à (2.10), le Hamiltonien dépend maintenant explicitement de $\mathbf{k}$ et donc pour chaque $\mathbf{k}$, l'équation possède des solutions différentes. L'autre formulation du théorème de Bloch est donc [12, 82]

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{2.11}$$

2.2.3 . Structure de bandes et classification isolant/conducteur

Après application du théorème de Bloch sur les états propres de $\hat{\mathcal{H}}$, la partie périodique $u_{n\mathbf{k}}$ est solution d'un nouvel Hamiltonien dit *Hamiltonien de Bloch* [6] [12] agissant sur l'espace des fonctions périodiques

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}). \tag{2.12}$$

Pour chaque $\mathbf{k}$, le Hamiltonien possède une famille discrète de valeurs propres notées $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ et indicées par $n \in \mathbb{N}$. Lorsque le paramètre $\mathbf{k}$ varie continûment dans la ZB, les valeurs propres « tracent » ce que l'on appelle des *bandes d'énergie* et l'ensemble total est appelé la *structure de bandes* [12, 83].

C'est grâce à cette structure de bandes que l'on peut caractériser l'état électrique d'un matériau. En effet, si le niveau de Fermi ε_{F} (énergie du dernier état occupé [7]) traverse une bande, alors il existe des états non occupés arbitrairement proches en énergie, rendant possible le transport de charge, le matériau est dit *conducteur*. Au contraire, si ε_{F} ne traverse aucune bande d'énergie, on dit que ε_{F} est dans un *gap* d'énergie, il n'y a aucune charge disponible pour le transport. Le matériau est alors dit *isolant* [83].

5. Il existe une démonstration qui permet de s'affranchir de (2.8) et de directement trouver l'expression (2.11) [12].

6. La dérivation est assez directe en utilisant $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\partial_{\mathbf{r}}$ puis en appliquant $\hat{\mathcal{H}}$ sur $\psi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}$.

7. Cette définition est valable à $T = 0\,\mathrm{K}$. À $T > 0\,\mathrm{K}$, on parle de potentiel chimique car l'énergie thermique $k_{\mathrm{B}}T$ rentre en jeu.

La classification isolant/conducteur repose donc entièrement sur la structure de bandes $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$, *i.e.* sur le *spectre* de $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}$. Cependant, cette information énergétique n'est pas la seule contenue dans le problème de Bloch. Pour chaque $\mathbf{k}$, la résolution de l'équation aux valeurs propres fournit également les *états propres* $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$, qui évoluent continûment à mesure que $\mathbf{k}$ parcourt la ZB [8] Deux isolants peuvent ainsi partager le même gap et la même structure de bandes tout en différant par la façon dont leurs états de Bloch s'organisent dans la ZB, une information invisible au niveau spectral [77, 84]. C'est précisément ce constat qui motive l'introduction d'une structure *géométrique* sur l'espace des états de Bloch, dont l'étude fait l'objet de la section suivante.

2.3 . Géométrie des états de Bloch

2.3.1 . Liberté de jauge et espace des états de Bloch

À l'origine une notion purement mathématique, la géométrie de l'espace des états quantiques s'est progressivement révélée d'une grande utilité en physique et, en particulier, en matière condensée. La structure riemannienne [9] de l'espace des états quantiques avait déjà été formalisée par Provost et Vallée [85], avant que l'article de Berry de 1984 [1] ne popularise la phase géométrique. Dans cette section, nous introduisons les concepts clefs de cette théorie : la phase géométrique, la connexion et la courbure de Berry, ainsi que la notion de métrique quantique qui leur est associée [78, 79].

Avant cela, précisons un abus de langage courant en mécanique quantique. Un état physique d'un système ne correspond pas directement à un vecteur dans l'espace de Hilbert $\mathscr{H}$. Cela se comprend à partir de la règle de Born : la probabilité qu'un état $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ se trouve dans un état $|\phi\rangle \in \mathscr{H}$ est

$$P(\psi, \phi) = \frac{|\langle\psi|\phi\rangle|^2}{|\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle|}, \tag{2.13}$$

(le dénominateur vaut 1 pour des états normalisés). On vérifie immédiatement que $P(c\psi, \phi) = P(\psi, \phi)$ pour tout $c \in \mathbb{C}^*$, et en particulier que $P(c\psi, \psi) = 1$: les vecteurs $c|\psi\rangle$ et $|\psi\rangle$ décrivent donc le même état physique. Autrement dit, la phase globale d'un vecteur de $\mathscr{H}$ n'est pas observable. L'objet adapté pour représenter un état physique est le *rayon*, défini comme la classe d'équivalence

$$|\psi\rangle \sim |\phi\rangle \iff |\psi\rangle = e^{i\varphi}|\phi\rangle\,, \tag{2.14}$$

à une phase complexe près. L'espace des états physiques n'est donc pas $\mathscr{H}$ lui-même, mais l'*espace projectif de Hilbert* $\mathcal{P}(\mathscr{H})$, constitué des rayons de $\mathscr{H}$ [85, 86]. La figure 2.4 résume ce concept. Cette distinction, bien qu'anodine en apparence, est au cœur de la géométrie des états de Bloch que nous développons à partir de la section suivante.

8. À noter qu'il existe des cas pathologiques où des singularités apparaissent dans $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$. C'est le cas par exemple quand le nombre de Chern (quantité topologique que nous définirons plus tard) s'annule.

9. Une structure riemannienne consiste à munir localement un espace d'un produit scalaire permettant de définir des longueurs, des angles et des distances entre des états voisins.

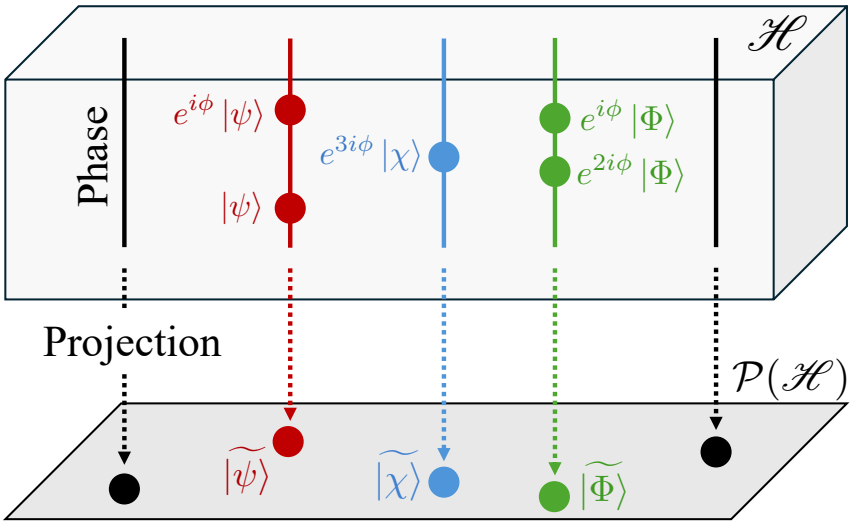

FIGURE 2.4 – Représentation schématique du passage de l'espace de Hilbert $\mathscr{H}$ à l'espace projectif de Hilbert $\mathcal{P}(\mathscr{H})$. Dans $\mathscr{H}$, les vecteurs d'état reliés par une phase globale, tels que $|\psi\rangle$ et $e^{i\phi}|\psi\rangle$, appartiennent à une même fibre. La projection vers $\mathcal{P}(\mathscr{H})$ identifie tous ces représentants en un unique état physique, noté $\widetilde{|\psi\rangle}$. Les différentes couleurs représentent des classes d'équivalence distinctes, correspondant à des états physiques différents.

2.3.2 . Berry-ologie

Tout le paradigme de l'approche de Berry repose sur l'existence d'une holonomie [10] non nulle lorsque les paramètres d'un système évoluent adiabatiquement le long d'un chemin fermé : certaines grandeurs ne retrouvent pas leur valeur initiale après que les paramètres ont décrit un lacet dans leur espace [1, 45]. Pour quantifier ce phénomène, introduisons les différentes grandeurs dites de Berry.

Considérons un système quantique décrit par un Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}[\boldsymbol{\xi}]$ dépendant d'un paramètre continu $\boldsymbol{\xi}(t) \in \mathbb{R}^d$, et vérifiant

$$\hat{\mathcal{H}}[\boldsymbol{\xi}]\,|\psi_n[\boldsymbol{\xi}]\rangle = E_n[\boldsymbol{\xi}]\,|\psi_n[\boldsymbol{\xi}]\rangle\,. \tag{2.15}$$

Soit $|\psi(t)\rangle$ l'état du système au temps t. On suppose que le paramètre $\boldsymbol{\xi}(t)$ évolue adiabatiquement dans l'espace des paramètres, *i.e.* que si le système est décrit par un état initial $|\psi_i\rangle$ alors il le restera au cours de son évolution temporelle, d'où $E_n[\boldsymbol{\xi}(t)] \approx E_n(t)$. On décompose l'état $|\psi(t)\rangle$ sur les états propres du Hamiltonien

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|\psi_n[\boldsymbol{\xi}(t)]\rangle\,. \tag{2.16}$$

Puis en injectant dans l'équation de Schrödinger dépendante du temps, on montre que le coefficient $c_i(t)$ vérifie

$$\dot{c}_i = -\frac{i}{\hbar}\,c_i E_i - c_i\,\dot{\boldsymbol{\xi}}\cdot\langle\psi_i|\,\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\xi}}\,|\psi_i\rangle\,, \tag{2.17}$$

dont l'intégration donne

$$c_i(t) = c_i(0)\,e^{i\Phi_{\text{dyn}}(t)}\,e^{i\Phi_{\text{géo}}(t)}, \tag{2.18}$$

10. Quantité qui mesure la façon dont une grandeur géométrique évolue par transport parallèle le long d'une boucle fermée.

avec les deux phases

$$\Phi_{\text{dyn}}(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt'\, E_i[\boldsymbol{\xi}(t')], \tag{2.19a}$$

$$\Phi_{\text{géo}}(t) = i\int_{\boldsymbol{\xi}(0)}^{\boldsymbol{\xi}(t)} d\boldsymbol{\xi}\cdot\langle\psi_i(\boldsymbol{\xi})|\,\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\xi}}\,|\psi_i(\boldsymbol{\xi})\rangle\,. \tag{2.19b}$$

La phase Φ_{dyn} est la *phase dynamique* : elle encode l'évolution temporelle ordinaire de la fonction d'onde. La phase $\Phi_{\text{géo}}$ est la *phase de Berry* (ou *phase géométrique*) [1, 79] : elle ne dépend pas de la vitesse à laquelle $\boldsymbol{\xi}$ parcourt son chemin, mais uniquement de la trajectoire elle-même dans l'espace des paramètres. D'un point de vue géométrique, c'est l'holonomie associée à cette trajectoire [87].

Une application importante de cette phase géométrique apparaît dans la quantification magnétique. Dans un champ magnétique, la phase de Berry accumulée le long d'une orbite cyclotron modifie la condition de quantification semi-classique et le décalage des niveaux de Landau [88]. Plus généralement, les relations de quantification généralisées font intervenir, outre la phase de Berry, des corrections liées à la géométrie des états de Bloch et au moment magnétique orbital [38]. Le formalisme détaillé de ces corrections sera repris dans les chapitres consacrés à la dynamique semi-classique et aux jonctions d'isolants de Chern.

Connexion de Berry. La phase géométrique s'exprime naturellement à l'aide d'une forme différentielle sur l'espace des paramètres, la *connexion de Berry* [78, 79]

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}_i(\boldsymbol{\xi}) = i\,\langle\psi_i(\boldsymbol{\xi})|\,\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\xi}}\,|\psi_i(\boldsymbol{\xi})\rangle\,, \tag{2.20}$$

de sorte que

$$\Phi_{\text{géo}}(t) = \int_{\boldsymbol{\xi}(0)}^{\boldsymbol{\xi}(t)} d\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}_i(\boldsymbol{\xi}). \tag{2.21}$$

Cette expression est formellement analogue à la phase d'Aharonov-Bohm, où la connexion de Berry joue le rôle du potentiel vecteur magnétique [45]. Comme lui, $\boldsymbol{\mathcal{A}}_i$ n'est pas invariante de jauge : elle dépend du choix de phase de $|\psi_i\rangle$.

Courbure de Berry. Par analogie avec le champ magnétique associé au potentiel vecteur, on définit la *courbure de Berry* comme le rotationnel de la connexion (en dimension $d = 3$) [2, 78]

$$\boldsymbol{\Omega}_i(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\xi}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}_i(\boldsymbol{\xi}). \tag{2.22}$$

Contrairement à $\boldsymbol{\mathcal{A}}_i$, la courbure de Berry est invariante de jauge et constitue donc une quantité géométrique bien définie [79]. On peut noter que la somme des courbures sur l'ensemble des états propres est nulle :

$$\sum_i \boldsymbol{\Omega}_i = 0. \tag{2.23}$$

Enfin, en appliquant le théorème de Stokes sur un chemin fermé $\gamma = \partial\Sigma$, la phase de Berry s'exprime comme le flux de la courbure à travers la surface Σ délimitée par γ [1, 45] :

$$\Phi_{\text{géo}} = \oint_\gamma d\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}_i(\boldsymbol{\xi}) = \iint_\Sigma dS\;\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\Omega}_i(\boldsymbol{\xi}), \tag{2.24}$$

où $\boldsymbol{n}$ est le vecteur normal à l'élément de surface dS. Ces expressions se généralisent en dimension quelconque [79], mais nous nous limitons ici au cas tridimensionnel.

Dans le cadre du théorème de Bloch, l'espace des paramètres s'identifie naturellement à la ZB, avec $\boldsymbol{\xi} \to \mathbf{k}$ [79, 89]. Les grandeurs de Berry s'appliquent alors aux états $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$, et la connexion et la courbure de la n-ième bande s'écrivent respectivement $\boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\mathbf{k}) = i\,\langle u_{n\mathbf{k}}|\,\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\,|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ et $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\mathbf{k})$.

Une application majeure de ce formalisme est la théorie moderne de la polarisation cristalline : la variation de polarisation produite par une évolution adiabatique peut être exprimée à partir d'une phase de Berry des bandes occupées [90]. Cette application illustre comment une information géométrique portée par les états de Bloch se traduit en une observable macroscopique.

Métrique quantique. La courbure de Berry caractérise la *courbure* de l'espace des états de Bloch. On peut aller plus loin en lui associant également une notion de *distance* [85, 86]. Considérons deux états de Bloch voisins $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ et $|u_{n,\mathbf{k}+d\mathbf{k}}\rangle$ dans la ZB. Une mesure naturelle de leur écart est

$$ds^2 = \big\||u_{n,\mathbf{k}+d\mathbf{k}}\rangle - |u_{n\mathbf{k}}\rangle\big\|^2 = \langle \partial_a u_{n\mathbf{k}} | \partial_b u_{n\mathbf{k}} \rangle \; dk_a\, dk_b, \tag{2.25}$$

où l'on a introduit la notation $\partial_a \equiv \partial/\partial k_a$. En décomposant le tenseur $\langle \partial_a u | \partial_b u \rangle$ en ses parties réelle (symétrique) γ_{ab} et imaginaire (antisymétrique) ξ_{ab}, seule la partie symétrique contribue à la contraction avec $dk_a\, dk_b$, si bien que $ds^2 = \gamma_{ab}\, dk_a\, dk_b$.

Cependant, γ_{ab} n'est pas invariante de jauge : elle dépend du choix de phase de $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ et ne constitue donc pas une métrique sur l'espace des états physiques $\mathcal{P}(\mathscr{H})$. Pour y remédier, on introduit la *métrique quantique* (ou *métrique de Fubini-Study*) [85, 86] :

$$g_{ab} = \gamma_{ab} - \mathcal{A}_{n,a}\, \mathcal{A}_{n,b}, \tag{2.26}$$

où $\mathcal{A}_{n,a} = i\,\langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_a u_{n\mathbf{k}} \rangle$ est la a-ième composante de la connexion de Berry définie plus haut. Cette correction, qui soustrait la contribution de la phase, rend g_{ab} invariante de jauge. Il s'agit, à une normalisation près, de la métrique riemannienne naturelle sur $\mathcal{P}(\mathscr{H})$ et qui est compatible avec l'invariance de jauge.

Tenseur géométrique quantique. La métrique quantique et la courbure de Berry ne sont pas deux objets indépendants : elles sont les deux faces d'un même tenseur, le *tenseur géométrique quantique* [85, 86], défini par

$$\begin{aligned} Q_{ab} &= \langle \partial_a u_{n\mathbf{k}} | \partial_b u_{n\mathbf{k}} \rangle - \langle \partial_a u_{n\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_b u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= g_{ab} - \frac{i}{2}\,\Omega_{ab}, \end{aligned} \tag{2.27}$$

où $\Omega_{ab} = \partial_a \mathcal{A}_{n,b} - \partial_b \mathcal{A}_{n,a}$ est la forme de courbure de Berry en notation tensorielle. Ainsi, par construction,

$$g_{ab} = \operatorname{Re} Q_{ab}, \qquad \Omega_{ab} = -2 \operatorname{Im} Q_{ab}. \tag{2.28}$$

Le tenseur Q_{ab} condense donc en un unique objet l'intégralité de la géométrie de l'espace des états de Bloch [78, 85]. Bien qu'abstrait, il est directement lié à des phénomènes observables. La géométrie des bandes est également liée à la localisation des états : la construction de fonctions de Wannier maximalement localisées permet d'obtenir une représentation localisée d'un sous-espace de bandes et d'en contrôler l'étalement

spatial [84, 91]. Elle peut aussi intervenir dans certaines réponses optiques et optoélectroniques, selon les symétries et la structure multibande du matériau [76]. Dans la suite de ce manuscrit, nous nous intéresserons surtout à la notion de courbure de Berry dans la description des propriétés de transport topologique.

2.4 . Invariants topologiques et nombre de Chern

2.4.1 . Intégrale de la courbure de Berry sur la zone de Brillouin

Dans les sections précédentes, nous avons vu que la description d'un cristal ne se limite pas à sa structure de bandes $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$. Pour chaque point $\mathbf{k}$ de la ZB, la résolution de l'équation de Schrödinger fournit également un état propre périodique $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$. La manière dont cet état évolue lorsque $\mathbf{k}$ parcourt la ZB permet de définir les grandeurs géométriques introduites précédemment [78, 79].

Pour une bande isolée n, la courbure de Berry en dimension deux (disons le plan (x, y)) s'écrit [78, 79]

$$\Omega_{n,z}(\mathbf{k}) = \partial_{k_x}\mathcal{A}_{n,y}(\mathbf{k}) - \partial_{k_y}\mathcal{A}_{n,x}(\mathbf{k}), \tag{2.29}$$

où

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\mathbf{k}) = i\,\langle u_{n\mathbf{k}}|\,\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\,|u_{n\mathbf{k}}\rangle \tag{2.30}$$

est la connexion de Berry de la bande considérée.

La courbure de Berry dépend donc localement de la manière dont les états propres varient dans l'espace des impulsions. Elle peut être vue comme un champ effectif défini dans la ZB. Dans certaines régions, sa valeur peut être très faible. À l'inverse, elle peut devenir importante autour de points particuliers, par exemple à proximité d'un point de Dirac massif.

Cependant, pour tout cristal périodique, la ZB possède une propriété importante : elle est fermée et bornée donc *compacte*. En effet, les vecteurs d'onde $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}+\mathbf{G}$ sont équivalents, où $\mathbf{G}$ est un vecteur du réseau réciproque. Les bords opposés de la ZB doivent donc être identifiés. Par exemple pour un cristal bidimensionnel, d'un point de vue topologique, la ZB possède ainsi la topologie d'un tore $\mathbb{T}^2$ [39, 83].

Il devient alors naturel de ne plus seulement considérer la valeur locale de la courbure de Berry, mais également son flux total à travers l'ensemble de la ZB. On définit ainsi le nombre de Chern de la bande n par [3, 81]

$$\mathcal{C}_n = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathrm{BZ}} d^2k\,\Omega_{n,z}(\mathbf{k}). \tag{2.31}$$

Le nombre de Chern est une quantité sans dimension. Il mesure le flux total de courbure de Berry à travers la ZB, en unités de 2π. Contrairement à la courbure de Berry, qui dépend localement des détails du Hamiltonien, le nombre de Chern fournit une information globale sur l'ensemble de la bande [39]. Dans les calculs numériques, il peut être évalué sur une ZB discrétisée au moyen d'une formulation invariante de jauge, sans imposer un choix de phase global aux états propres [92, 93]. Nous n'en détaillons pas ici l'algorithme.

L'expression (2.31) rappelle le théorème de Gauss-Bonnet en géométrie différentielle. Dans ce théorème, l'intégrale de la courbure d'une surface fermée est reliée à une quantité topologique qui ne dépend pas de la forme précise de la surface. De manière analogue, le

nombre de Chern ne dépend pas de la répartition exacte de la courbure de Berry dans la ZB, mais uniquement de son flux total [94].

Pour un isolant possédant plusieurs bandes occupées isolées les unes des autres, le nombre de Chern total est obtenu en sommant les contributions des bandes situées sous le niveau de Fermi [3, 95],

$$\mathcal{C} = \sum_{n \in \text{occ.}} \mathcal{C}_n. \tag{2.32}$$

C'est ce nombre entier global qui permet de caractériser la phase topologique de l'isolant.

2.4.2 . Le nombre de Chern : un entier topologique

L'une des propriétés essentielles du nombre de Chern est qu'il ne peut prendre que des valeurs entières [81, 96],

$$\mathcal{C}_n \in \mathbb{Z}. \tag{2.33}$$

Cette propriété n'est pas évidente à partir de l'équation (2.31). En effet, cette expression ressemble simplement à l'intégrale d'une fonction continue sur la ZB. A priori, rien ne semble imposer que le résultat soit un entier. L'origine de cette quantification provient de la liberté de jauge des états de Bloch [81, 94].

Comme nous l'avons vu précédemment, un état physique ne correspond pas à un vecteur unique dans l'espace de Hilbert. Deux états propres qui diffèrent uniquement par une phase décrivent le même état physique. On peut donc effectuer la transformation

$$|u_{n\mathbf{k}}\rangle \longrightarrow e^{i\chi_n(\mathbf{k})} |u_{n\mathbf{k}}\rangle , \tag{2.34}$$

sans modifier la physique du système.

Sous cette transformation, la connexion de Berry devient

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\mathbf{k}) \longrightarrow \boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\mathbf{k}) - \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} \chi_n(\mathbf{k}), \tag{2.35}$$

tandis que la courbure de Berry reste inchangée. Cette différence joue un rôle central dans la quantification du nombre de Chern [79, 81].

Pour comprendre l'origine de cette quantification, supposons que l'on puisse définir un état propre $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ lisse [11] et périodique sur l'ensemble de la ZB. En appliquant directement le théorème de Stokes, l'intégrale de la courbure de Berry sur une surface fermée serait nulle. Il serait alors impossible d'obtenir un nombre de Chern non nul [81, 94].

Lorsque $\mathcal{C}_n \neq 0$, il n'est donc pas possible de choisir une seule jauge qui soit lisse et périodique sur toute la ZB. Il faut plutôt recouvrir la ZB par plusieurs domaines. Pour simplifier, considérons deux régions U_1 et U_2 sur lesquelles on peut choisir deux états propres lisses, $\left|u^{(1)}_{n\mathbf{k}}\right\rangle$ et $\left|u^{(2)}_{n\mathbf{k}}\right\rangle$.

Dans la région où les deux domaines se recouvrent, ces deux états décrivent la même physique. Ils doivent donc être reliés par une transformation de jauge,

$$\left|u^{(2)}_{n\mathbf{k}}\right\rangle = e^{i\chi(\mathbf{k})} \left|u^{(1)}_{n\mathbf{k}}\right\rangle . \tag{2.36}$$

11. Ici, « lisse » signifie que le choix de phase de $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ varie de façon continue et suffisamment différentiable avec $\mathbf{k}$, sans saut de phase ni singularité.

Les connexions de Berry associées aux deux choix de jauge vérifient alors

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}_n^{(2)}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\mathcal{A}}_n^{(1)}(\mathbf{k}) - \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\chi(\mathbf{k}). \tag{2.37}$$

En appliquant le théorème de Stokes séparément sur les deux domaines, le flux total de courbure de Berry peut être réécrit comme une intégrale le long de leur frontière commune [81, 96]. On obtient

$$\mathcal{C}_n = \frac{1}{2\pi} \oint d\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\chi(\mathbf{k}). \tag{2.38}$$

Cette expression possède une interprétation simple. Lorsque l'on parcourt la frontière entre les deux domaines, la phase relative $\chi(\mathbf{k})$ peut s'enrouler plusieurs fois. Cependant, l'état physique doit rester monovalué. La variation totale de la phase doit donc être un multiple entier de 2π,

$$\oint d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}\chi(\mathbf{k}) = 2\pi m, \qquad m \in \mathbb{Z}. \tag{2.39}$$

En combinant les équations (2.38) et (2.39), on obtient finalement

$$\mathcal{C}_n = m \in \mathbb{Z}. \tag{2.40}$$

Le nombre de Chern mesure donc un nombre d'enroulements [94]. Sa nature entière ne provient pas d'un détail microscopique du Hamiltonien, mais de la manière dont les différentes jauges doivent être raccordées les unes aux autres sur l'ensemble de la ZB.

Dans le langage de la géométrie différentielle, le nombre de Chern correspond à la première classe de Chern du fibré [12] formé par les états de Bloch [94]. Nous n'aurons pas besoin d'utiliser ce formalisme dans la suite de ce manuscrit. Il est toutefois utile de retenir l'idée principale : lorsque $\mathcal{C}_n \neq 0$, il est impossible de définir un état propre qui soit à la fois lisse, périodique et non singulier sur toute la ZB.

Le nombre de Chern fournit ainsi une information globale sur la structure des états de Bloch. Deux bandes possédant des nombres de Chern différents ne peuvent pas être reliées continûment l'une à l'autre tant qu'elles restent isolées des autres bandes par un gap d'énergie [39, 96].

2.4.3 . Robustesse aux perturbations

La nature entière du nombre de Chern explique pourquoi les phases topologiques sont robustes. Considérons un Hamiltonien de Bloch $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ décrivant un isolant, puis ajoutons une perturbation continue $\delta\mathcal{H}(\mathbf{k})$. Cette perturbation peut modifier la structure de bandes, déformer les états propres et redistribuer la courbure de Berry dans la ZB [39].

Cependant, tant que le gap entre les bandes occupées et les bandes vides reste ouvert, le nombre de Chern ne peut pas changer. On a donc

$$\mathcal{C}\left[\mathcal{H}(\mathbf{k}) + \delta\mathcal{H}(\mathbf{k})\right] = C\left[\mathcal{H}(\mathbf{k})\right]. \tag{2.41}$$

Cette propriété peut se comprendre simplement. Une perturbation faible modifie continûment les états propres et la courbure de Berry. Le nombre de Chern varie donc également

12. Un fibré est un espace où l'on attache à chaque point d'un espace de base (ici chaque vecteur $\mathbf{k}$ de la ZB) un autre espace, appelé fibre. Dans le cas présent, la fibre correspond à l'état de Bloch associé à ce point.

de manière continue. Or, comme il s'agit d'un entier, il ne peut pas évoluer progressivement. Il reste nécessairement constant tant que le gap ne se ferme pas [96].

Il est important de distinguer ici la courbure de Berry du nombre de Chern. La courbure de Berry est une quantité géométrique locale. Elle dépend des détails microscopiques du Hamiltonien et peut être fortement modifiée par une perturbation. À l'inverse, son intégrale sur toute la ZB est une quantité topologique. Tant que le système reste isolant, cette intégrale reste inchangée [39, 78].

Cette stabilité possède des conséquences physiques importantes. Dans un matériau réel, la structure de bandes peut être affectée par du désordre faible, des contraintes mécaniques, des interactions effectives ou encore par des perturbations extérieures. Ces effets modifient généralement la distribution locale de la courbure de Berry dans la ZB. Cependant, ils ne changent pas le nombre de Chern tant qu'ils ne ferment pas le gap.

Les réponses physiques directement reliées au nombre de Chern peuvent donc rester quantifiées malgré la présence d'imperfections microscopiques [97]. Cette propriété se manifeste directement dans la conductivité de Hall d'un isolant de Chern, comme nous le discutons dans la sous-section suivante.

Il faut finalement préciser que toutes les phases topologiques ne reposent pas sur le même mécanisme de protection. Les phases caractérisées par un nombre de Chern non nul ne nécessitent pas de symétrie particulière pour rester topologiques : il suffit que le gap séparant les bandes occupées des bandes vides reste ouvert. À l'inverse, certaines phases topologiques reposent sur une symétrie spécifique [4, 54]. C'est par exemple le cas des isolants topologiques invariants par renversement du temps, dont les formulations fondatrices ont conduit à une classification en termes d'un invariant $\mathbb{Z}_2$ [48,49,53]. Dans ces systèmes, une perturbation qui brise la symétrie protectrice peut modifier la classification topologique [52].

Dans les phases tridimensionnelles, cette classification peut aussi être formulée à l'aide d'une théorie de champ effective reliant la topologie du volume à une réponse électromagnétique topologique [98].

Dans la suite de ce manuscrit, nous nous concentrerons principalement sur les phases de Chern.

2.4.4 . Conséquences physiques : conductivité de Hall et formule de Středa

Le nombre de Chern possède également une conséquence directe sur les propriétés de transport. Pour un isolant bidimensionnel dont le potentiel chimique se situe dans le gap à température nulle, la formule de Kubo permet de relier la conductivité de Hall au nombre de Chern total des bandes occupées [3, 81, 95],

$$\sigma_{xy} = -\mathcal{C}\frac{e^2}{h}, \tag{2.42}$$

avec $-e < 0$ la charge électronique élémentaire.

Cette relation montre qu'une propriété définie à partir des états de Bloch sur l'ensemble de la ZB contrôle directement une observable mesurable. Elle constitue l'une des manifestations physiques les plus importantes de la topologie des bandes [83].

Une formulation complémentaire est donnée par la formule de Středa [99,100], qui relie la conductivité de Hall à la variation de la densité électronique avec le champ magnétique,

à potentiel chimique fixé,

$$\sigma_{xy} = -e \left(\frac{\partial n}{\partial B} \right)_{\mu}. \tag{2.43}$$

Dans une phase isolante, lorsque le potentiel chimique reste dans le gap, cette relation conduit à

$$\left(\frac{\partial n}{\partial B} \right)_{\mu} = \mathcal{C} \frac{e}{h}. \tag{2.44}$$

Ainsi, le nombre de Chern ne détermine pas seulement la réponse transverse au champ électrique, mais aussi la manière dont la densité de charge d'un isolant topologique varie sous l'effet d'un champ magnétique. Cette interprétation sera particulièrement utile dans la suite de ce manuscrit, où l'asymétrie spectrale induite par le champ magnétique modifiera la condition de neutralité électrostatique dans des jonctions d'isolants de Chern.

La correspondance *bulk-edge* (que nous introduirons dans la suite de ce chapitre) fournit une lecture complémentaire de ce résultat. Le nombre de Chern détermine à la fois la conductivité de Hall du volume, la réponse de densité au champ magnétique et le nombre net de canaux chiraux apparaissant aux interfaces [46, 47].

Afin de rendre les notions introduites ici plus concrètes, nous allons maintenant étudier un modèle minimal permettant de calculer explicitement la courbure de Berry et la contribution au nombre de Chern : le fermion de Dirac massif en dimension deux.

2.5 . Un modèle minimal : fermions de Dirac massifs

2.5.1 . Hamiltonien de Dirac 2D

Pour illustrer les notions introduites dans les sections précédentes, considérons maintenant un modèle continu minimal à deux bandes. L'un des exemples les plus simples, mais aussi l'un des plus importants en physique de la matière condensée, est celui d'un fermion de Dirac massif en deux dimensions [101, 102]. Ce modèle sera également utile dans la suite de ce manuscrit, notamment pour étudier les propriétés semi-classiques des systèmes gappés et les jonctions entre isolants de Chern.

Son Hamiltonien de Bloch dans la limite de basse énergie (*i.e.* à faible $\mathbf{k}$) s'écrit [101]

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \hbar v_x k_x \sigma_x + \hbar v_y k_y \sigma_y + m\sigma_z, \tag{2.45}$$

où $\mathbf{k} = (k_x, k_y) \in \mathbb{R}^2$ est le vecteur d'onde, (v_x, v_y) sont des vitesses caractéristiques appelées *vitesses de Dirac* et m un terme de masse. Les matrices de Pauli σ_i agissent dans un sous-espace de $\mathscr{H}$ à deux dimensions. Selon le système considéré, ce sous-espace peut correspondre à un degré de liberté de sous-réseau, d'orbitale ou de pseudo-spin.

Le rôle du terme de masse est particulièrement important (*cf.* figure 2.5). Lorsque $m = 0$, le spectre présente un point de contact entre les deux bandes au centre de la ZB. On parle alors de *cône de Dirac sans masse*. À l'inverse, lorsque $m \neq 0$, le terme proportionnel à σ_z ouvre un gap dans le spectre [31, 101].

Les vitesses de Dirac (v_x, v_y) dans (2.45) ont aussi leur importance. En effet, elle permette de définir la *chiralité* du cône de Dirac. Cette quantité, notée χ, sera utile par la suite pour définir le signe du nombre de Chern ainsi que l'asymétrie spectrale (*cf.* chapitre 6). La chiralité est défini comme

$$\chi = \mathrm{sgn}(v_x v_y). \tag{2.46}$$

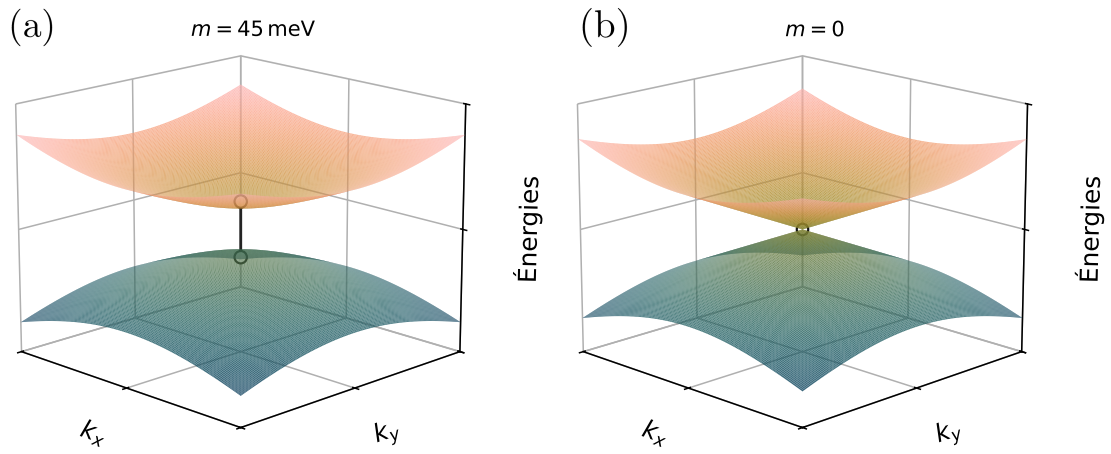

FIGURE 2.5 – Dispersion des bandes de conduction et de valence d'un fermion de Dirac bidimensionnel. (a) Pour une masse finie, $m = 45$ meV, les deux bandes sont séparées par un gap énergétique $2|m|$ au point $\mathbf{k} = 0$. (b) Lorsque $m = 0$, le gap se referme et les deux bandes se rejoignent en un point de Dirac. Dans les deux cas, on a choisi $v_x = v_y > 0$.

Afin de faire apparaître plus clairement la structure géométrique du Hamiltonien, on peut l'écrire sous la forme générale [31, 78]

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{2.47}$$

où l'on a introduit le vecteur

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = (\hbar v_x k_x, \hbar v_y k_y, m) \in \mathbb{R}^3. \tag{2.48}$$

Les énergies propres sont alors données par

$$\varepsilon_\pm(\mathbf{k}) = \pm|\mathbf{d}(\mathbf{k})| = \pm\sqrt{\hbar^2 v_x^2 k_x^2 + \hbar^2 v_y^2 k_y^2 + m^2}. \tag{2.49}$$

La bande d'énergie positive correspond à la bande de conduction, tandis que la bande d'énergie négative correspond à la bande de valence. Le gap entre ces deux bandes vaut $E_\mathrm{g} = 2|m|$.

Lorsque le potentiel chimique se situe à l'intérieur de ce gap, le système est donc isolant. À l'inverse, lorsque $m = 0$, le gap se ferme au point $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ et les deux bandes forment un cône de Dirac.

Interprétation géométrique. La forme $\mathcal{H} = \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ possède une interprétation géométrique simple. À chaque impulsion $\mathbf{k}$ du plan $\mathbb{R}^2$ est associé un vecteur $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ dans $\mathbb{R}^3$, puis une fois normalisé, le nouveau vecteur

$$\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{d}(\mathbf{k})}{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|} \tag{2.50}$$

vit dans un espace appelé *sphère de Bloch* (autrement dit $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k}) \in \mathbb{S}^2$). Les états propres des deux bandes sont respectivement orientés parallèlement et antiparallèlement au vecteur unitaire $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ [31, 101].

Ainsi, lorsque $\mathbf{k}$ parcourt le plan des impulsions, le vecteur $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ décrit une surface sur la sphère de Bloch (*cf.* figure 2.6). Au point $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, les deux composantes proportionnelles à k_x et k_y s'annulent. Le vecteur $\hat{\mathbf{d}}$ pointe donc vers le pôle nord lorsque $m > 0$ et vers le pôle sud lorsque $m < 0$. Lorsque k augmente, les composantes contenues dans le plan deviennent progressivement dominantes et le vecteur se rapproche de l'équateur.

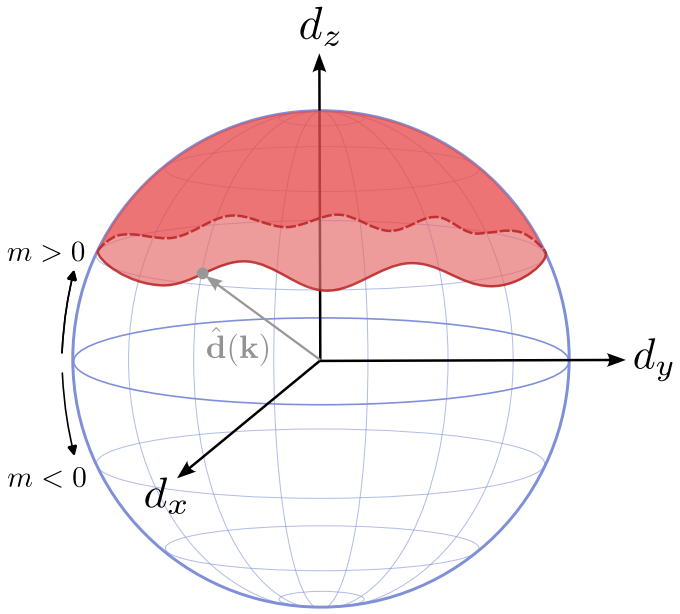

FIGURE 2.6 – Représentation de la sphère de Bloch pour un fermion de Dirac massif. À chaque impulsion $\mathbf{k}$ est associée une orientation du vecteur unitaire $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$. Au centre du cône de Dirac, le signe de la masse m détermine si le vecteur pointe vers l'hémisphère nord ou vers l'hémisphère sud.

Cette représentation permet de relier directement la structure des états propres à la topologie du modèle. En effet, les propriétés géométriques des bandes dépendent de la manière dont le vecteur $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ évolue lorsque l'impulsion parcourt l'espace des paramètres [78, 102].

2.5.2 . Calcul explicite de la courbure et du nombre de Chern

Pour un Hamiltonien à deux bandes de la forme (2.47), la courbure de Berry peut s'exprimer directement en fonction du vecteur unitaire $\hat{\mathbf{d}}$ [2, 78]. Pour les deux bandes d'énergie $\varepsilon_\pm$, on obtient

$$\mathbf{\Omega}_\pm(\mathbf{k}) = \Omega_\pm(\mathbf{k})\hat{\mathbf{z}} = \mp\frac{1}{2}\hat{\mathbf{d}} \cdot \left(\partial_{k_x}\hat{\mathbf{d}} \times \partial_{k_y}\hat{\mathbf{d}}\right)\hat{\mathbf{z}}. \tag{2.51}$$

Lorsque l'on se déplace dans le plan des impulsions, le vecteur $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ décrit une surface sur la sphère de Bloch. La quantité $\hat{\mathbf{d}} \cdot (\partial_{k_x}\hat{\mathbf{d}} \times \partial_{k_y}\hat{\mathbf{d}})$ mesure alors la densité d'angle solide orienté balayé sur cette sphère. La courbure de Berry des deux bandes est égale à cette densité d'angle solide, à un facteur $\mp 1/2$ près [2, 78].

Dans le cas particulier du Hamiltonien de Dirac (2.45), la courbure de Berry prend la forme [101, 103]

$$\Omega_{\pm}(\mathbf{k}) = \mp \frac{m\hbar^2 v_x v_y}{2\left[\hbar^2 v_x^2 k_x^2 + \hbar^2 v_y^2 k_y^2 + + m^2\right]^{3/2}}. \tag{2.52}$$

Cette expression montre que la courbure de Berry est principalement concentrée autour du point $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, *i.e.* autour du point où le gap se fermerait si la masse s'annulait (*cf.* figure 2.7). Son signe dépend du signe de m et de la bande considérée. Lorsque $|m|$ diminue, la courbure devient plus fortement piquée autour du cône de Dirac. À l'inverse, lorsque le gap augmente, la courbure s'étale davantage dans l'espace des impulsions et son amplitude au centre diminue [103].

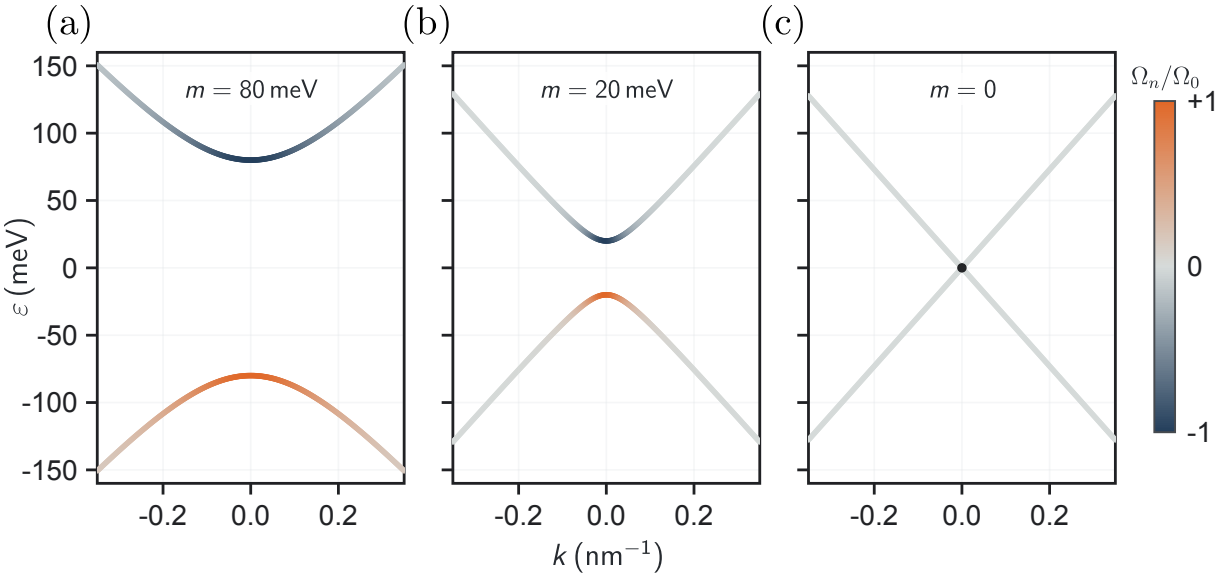

FIGURE 2.7 – Répartition de la courbure de Berry au sein d'un cône de Dirac pour différentes valeurs de masse (a) $m = 80\,\text{meV}$, (b) $m = 20\,\text{meV}$ et (c) $m = 0$. Plus le paramètre de masse m s'approche de zéro, plus la courbure de Berry se concentre au minimum (maximum) de la bande de conduction (valence) jusqu'en une divergence au point de Dirac pour $m = 0$.

On peut ensuite intégrer la courbure de Berry sur l'ensemble du plan des impulsions. On obtient [101, 102]

$$\mathcal{C}_{\pm}^{\text{Dirac}} = \frac{1}{2\pi}\int d^2k\,\Omega_{\pm}(\mathbf{k}) = \mp\frac{\chi}{2}\,\text{sgn}(m). \tag{2.53}$$

Ce résultat peut sembler surprenant. En effet, nous avons vu précédemment que le nombre de Chern associé à une bande isolée est nécessairement entier. Pourtant, un seul cône de Dirac massif semble ici porter une contribution demi-entière.

Cette apparente contradiction provient du fait que le Hamiltonien (2.45) est un modèle continu. Il décrit correctement la physique à basse énergie autour d'un point particulier de la ZB, mais il ne constitue pas à lui seul une théorie de bande complète définie sur un réseau cristallin. Son espace des impulsions est le plan infini $\mathbb{R}^2$, et non une ZB compacte et périodique [102].

Le demi-entier obtenu dans l'équation (2.53) ne doit donc pas être interprété comme le nombre de Chern physique d'une bande isolée. Il correspond plutôt à la contribution locale

d'un cône de Dirac massif à l'invariant topologique total. Dans un modèle sur réseau, les différents cônes de Dirac présents dans la ZB fournissent chacun une contribution demi-entière car, au voisinage de chacun d'eux, le vecteur normalisé $\hat{\mathbf{d}}$ ne recouvre qu'une demi-sphère de Bloch. Leur somme est en revanche toujours entière (*cf.* sous-section 2.4.2) [55, 102].

Cette observation sera importante dans la suite. Lorsque la masse change de signe, la contribution locale du cône de Dirac varie d'une unité. Pour la bande de valence, si $\chi = +1$ et si la masse passe de $m > 0$ à $m < 0$, on obtient

$$\Delta\mathcal{C}_{-}^{\text{Dirac}} = 1. \tag{2.54}$$

Lorsque son gap se ferme puis se rouvre avec une masse de signe opposé, la contribution locale à l'invariant topologique change d'une unité [101, 102].

2.5.3 . Transition de phase topologique

Le modèle de Dirac permet maintenant de comprendre simplement le mécanisme général d'une transition de phase topologique. Pour $m \neq 0$, le spectre (2.49) est gappé. Le système est donc isolant lorsque la bande de valence est entièrement remplie et que le potentiel chimique se situe dans le gap.

Lorsque la masse varie continûment sans changer de signe, le gap reste ouvert. Les états propres peuvent alors se déformer progressivement sans modifier la contribution topologique du cône de Dirac. En revanche, lorsque la masse passe par zéro, le gap se ferme au point $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. À cet instant, la séparation entre la bande de valence et la bande de conduction disparaît localement (*cf.* figure 2.8). Cette fermeture du gap permet à l'invariant topologique de changer de valeur [39, 101].

Le changement de signe de m correspond donc à une inversion de bandes [101]. Cette inversion peut également être visualisée sur la sphère de Bloch. Au voisinage du point $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, le vecteur $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ pointe vers le pôle nord lorsque $m > 0$ et vers le pôle sud lorsque $m < 0$. Le passage par $m = 0$ inverse donc l'orientation du vecteur au centre du cône de Dirac.

Cette inversion modifie la manière dont les états propres s'organisent dans l'espace des impulsions. Elle change ainsi la contribution locale du cône au nombre de Chern. Le point critique $m = 0$ joue un rôle essentiel : une phase topologique ne peut pas être reliée continûment à une phase triviale sans passer par une fermeture du gap, ou sans sortir de la classe de Hamiltoniens considérée [39, 96].

Dans un cristal, il est nécessaire de prendre en compte l'ensemble de la ZB. Le modèle continu de Dirac ne suffit donc pas à déterminer le nombre de Chern total du système. Cependant, il permet de décrire précisément la physique au voisinage d'une transition topologique. Dans un modèle sur réseau, une telle transition apparaît lorsque le gap se ferme puis se rouvre à un ou plusieurs points de haute symétrie de la ZB [101, 102].

Pour certaines valeurs des paramètres, le système possède un nombre de Chern nul et appartient à une phase triviale. Pour d'autres, une ou plusieurs inversions de bandes modifient le nombre de Chern total et produisent une phase topologique. Dans la section suivante, nous allons construire explicitement un modèle sur réseau permettant de décrire ces différentes phases : le modèle half-BHZ.

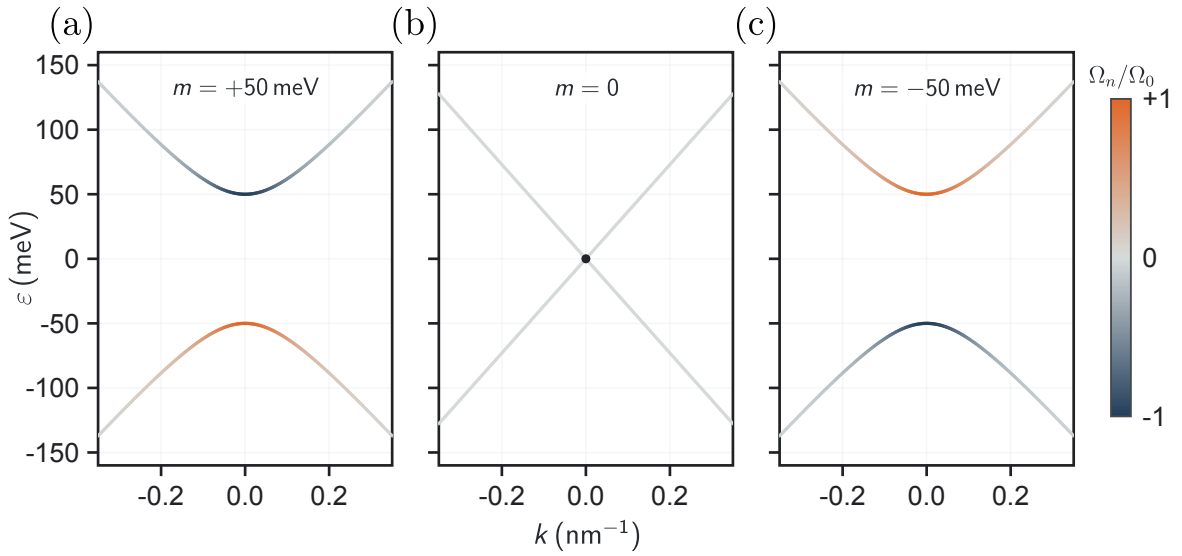

FIGURE 2.8 – Transition de phase topologique d'un fermion de Dirac massif décrit par le Hamiltonien (2.45). Les trois panneaux montrent le spectre pour (a) $m > 0$, (b) $m = 0$ et (c) $m < 0$, avec $\hbar v = 365\,\text{meV.nm}$ dans les trois cas. La couleur encode la courbure de Berry normalisée Ω_n/Ω_0, où $\Omega_0 = (\hbar v)^2/(2|m|^2)$ est la valeur absolue de la courbure au centre du cône dans les phases gappées. Pour $|m| = 50\,\text{meV}$, on obtient $\Omega_0 \simeq 26.6\,\text{nm}^2$. Le changement de signe de m inverse le signe de la courbure de Berry dans chacune des bandes, tandis que le gap se ferme au point critique $m = 0$.

2.6 . Isolants de Chern sur réseau et correspondance *bulk-edge*

Dans la section précédente, nous avons introduit un fermion de Dirac massif en dimension deux. Ce modèle nous a permis de comprendre simplement comment une transition topologique pouvait apparaître lorsque la masse change de signe. En effet, lorsque m passe par zéro, le gap se ferme puis se rouvre avec une inversion de bandes. Dans le même temps, la contribution locale du cône de Dirac au nombre de Chern varie d'une unité [101, 102].

Cependant, ce modèle continu ne constitue pas à lui seul une description complète d'un cristal. Son espace des impulsions est le plan continu $\mathbb{R}^2$, tandis que l'espace des impulsions d'un cristal est une ZB compacte et périodique. De plus, comme nous l'avons vu précédemment, un cône de Dirac massif isolé porte une contribution demi-entière au nombre de Chern. Or, le nombre de Chern associé à une bande électronique définie sur l'ensemble de la ZB doit nécessairement être entier [55, 81].

Dans cette section, nous adoptons le point de vue inverse. Plutôt que de construire le modèle sur réseau comme une régularisation du modèle continu, nous introduisons directement un Hamiltonien de Bloch périodique défini sur l'ensemble de la ZB. Le fermion de Dirac massif apparaîtra alors comme la limite de basse énergie de ce modèle au voisinage d'un point de gap minimal [55, 102]. Cette approche permet de relier plus naturellement la description continue locale à la structure globale du cristal, dont dépend le nombre de Chern entier. Nous étudierons ensuite le spectre du modèle dans une géométrie de ruban afin de faire apparaître les états de bord chiraux associés à la phase topologique.

2.6.1 . Modèle sur réseau et limite de basse énergie

Considérons un réseau carré bidimensionnel de constante de réseau a. Un modèle minimal d'isolant de Chern peut être construit à partir d'un bloc du modèle de Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ), introduit pour prédire l'effet Hall quantique de spin dans les puits quantiques HgTe/CdTe [50]. Cette phase a ensuite été mise en évidence expérimentalement dans des puits quantiques de HgTe [51]. La dynamique des électrons dans ce modèle est schématisée sur la figure 2.9. Dans la suite, nous parlerons simplement de modèle half-BHZ. Son Hamiltonien de Bloch s'écrit [31, 50]

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \frac{A}{a}\left[\sin(ak_x)\sigma_x + \sin(ak_y)\sigma_y\right] + M_{\mathbf{k}}\sigma_z, \tag{2.55}$$

avec

$$M_{\mathbf{k}} = M + \frac{2B_m}{a^2}\left[\cos(ak_x) + \cos(ak_y) - 2\right]. \tag{2.56}$$

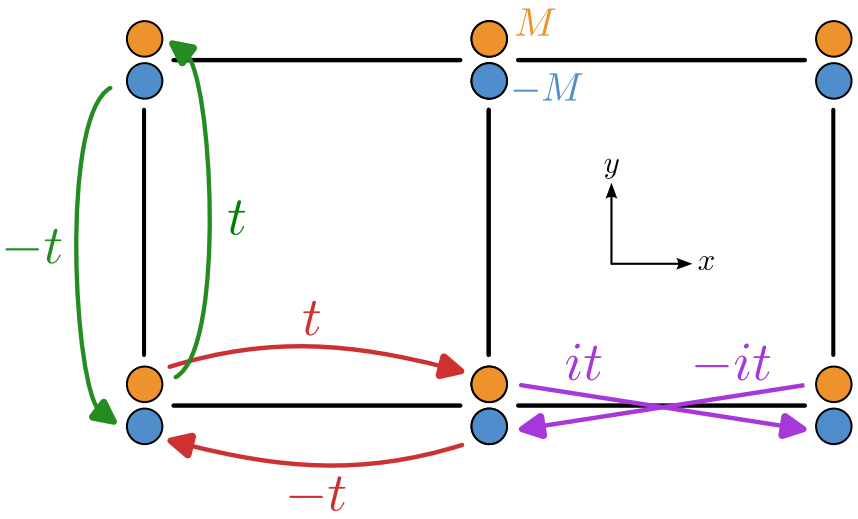

FIGURE 2.9 – Représentation schématique du modèle half-BHZ sur réseau carré. Chaque maille contient deux degrés de liberté orbitaux, représentés par les cercles orange et bleu, associés à des énergies sur site opposées $+M$ et $-M$. Les flèches indiquent les amplitudes de saut entre sites voisins, dont les signes et les phases dépendent de la direction et de l'orbitale considérée. Les sauts réels et imaginaires génèrent respectivement les termes en cosinus et en sinus du Hamiltonien de Bloch, et permettent d'obtenir un modèle minimal d'isolant de Chern.

Un point essentiel est que le modèle half-BHZ décrit une seule partie du modèle BHZ complet. Il ne possède donc pas la symétrie de renversement du temps du modèle BHZ complet, qui relierait deux blocs de chiralités opposées [31, 54]. Cette absence de symétrie temporelle est indispensable pour obtenir un nombre de Chern non nul. En effet, en présence de cette symétrie, la courbure de Berry vérifie $\Omega(-\mathbf{k}) = -\Omega(\mathbf{k})$, de sorte que son intégrale sur toute la ZB s'annule. Un isolant de Chern nécessite donc une brisure de la symétrie de renversement du temps, par exemple induite par un ordre magnétique ou, comme ici, effective dans la description d'un seul bloc du modèle BHZ.

Le paramètre M correspond à la masse[13] effective au point $\Gamma = (0, 0)$, tandis que B_m contrôle la dépendance de cette masse avec l'impulsion. Il encode ainsi la courbure du terme de masse lorsque l'on s'éloigne du centre de la ZB.

13. On parle de *masse* mais M possède les dimensions d'une *énergie*.

Le lien avec le fermion de Dirac massif apparaît en développant le Hamiltonien (2.55) au voisinage du point Γ, *i.e.* dans la limite $a|\mathbf{q}| \ll 1$ [50, 101]. On utilise alors

$$\frac{1}{a}\sin(aq_i) = q_i + \mathcal{O}(a^2 q_i^3), \tag{2.57a}$$

$$\frac{2}{a^2}\left[\cos(aq_x) + \cos(aq_y) - 2\right] = -\left(q_x^2 + q_y^2\right) + \mathcal{O}(a^2 q^4), \tag{2.57b}$$

où $\mathbf{q}$ est le vecteur d'onde mesuré à partir du point de haute symétrie Γ. On obtient donc, à basse énergie,

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) \simeq A\left(q_x\sigma_x + q_y\sigma_y\right) + \left(M - B_m q^2\right)\sigma_z. \tag{2.58}$$

À l'ordre dominant en $|\mathbf{q}|$, ce Hamiltonien se réduit au fermion de Dirac massif introduit précédemment,

$$\mathcal{H}_{\mathrm{D}}(\mathbf{k}) = A\left(q_x\sigma_x + q_y\sigma_y\right) + M\sigma_z. \tag{2.59}$$

Le modèle continu doit donc être compris comme un modèle effectif local, valable près du point Γ et à basse énergie. À l'inverse, le modèle sur réseau contient l'information globale sur toute la ZB. Cette information globale est essentielle pour obtenir un nombre de Chern entier [31, 102].

2.6.2 . Cônes de Dirac effectifs et phases topologiques

Le spectre du Hamiltonien (2.55) est donné par

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\frac{A^2}{a^2}\left[\sin^2(ak_x) + \sin^2(ak_y)\right] + M_{\mathbf{k}}^2}. \tag{2.60}$$

Le gap se ferme lorsque les trois composantes du Hamiltonien s'annulent simultanément. Les composantes proportionnelles à σ_x et σ_y s'annulent lorsque

$$\sin(ak_x) = 0, \qquad \sin(ak_y) = 0. \tag{2.61}$$

Cette condition est satisfaite aux quatre points de haute symétrie de la ZB,

$$\Gamma = (0,0), \qquad X = \left(\frac{\pi}{a}, 0\right), \qquad Y = \left(0, \frac{\pi}{a}\right), \qquad \mathcal{M} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right). \tag{2.62}$$

Au voisinage de chacun de ces points, le Hamiltonien se comporte comme un fermion de Dirac massif [31, 101]. Les masses associées sont obtenues en évaluant $M_{\mathbf{k}}$ aux quatre points précédents,

$$M_\Gamma = M, \qquad M_X = M_Y = M - \frac{4B_m}{a^2}, \qquad M_{\mathcal{M}} = M - \frac{8B_m}{a^2}. \tag{2.63}$$

Les cônes de Dirac ne possèdent pas tous la même chiralité (*cf.* figure 2.10) [31]. Pour le modèle considéré ici, les cônes situés aux points Γ et $\mathcal{M}$ possèdent une chiralité positive, tandis que ceux situés aux points X et Y possèdent une chiralité négative,

$$\chi_\Gamma = \chi_{\mathcal{M}} = +1, \qquad \chi_X = \chi_Y = -1. \tag{2.64}$$

Chaque cône de Dirac contribue au nombre de Chern à travers une quantité demi-entière [101, 102],

$$\mathcal{C}_i = \frac{\chi_i}{2}\,\mathrm{sgn}(M_i). \tag{2.65}$$

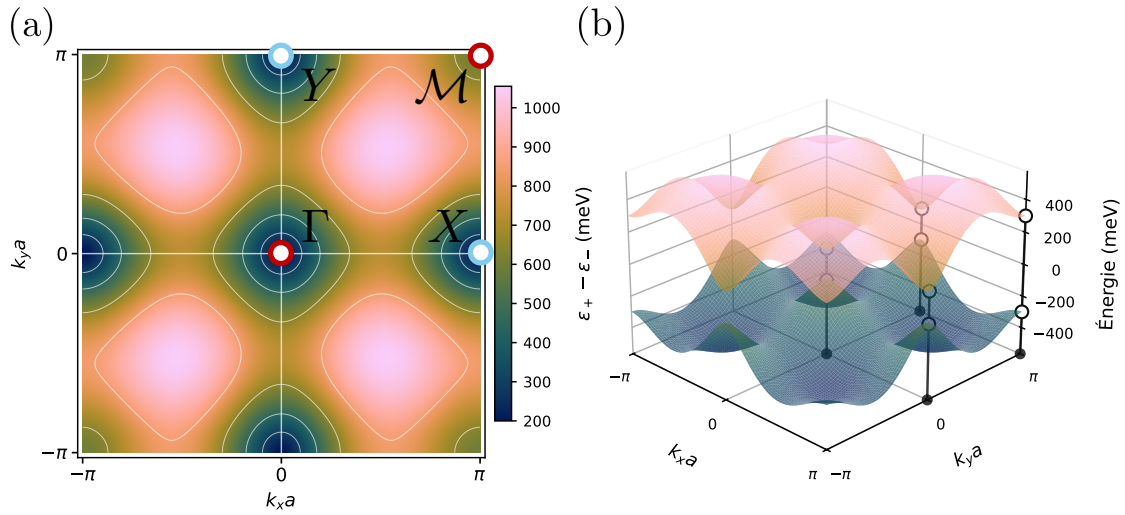

FIGURE 2.10 – (a) Première ZB du réseau carré associé au modèle half-BHZ (2.55). Les valeurs des paramètres numériques sont $a = 1\,\text{nm}$, $A = 365\,\text{meV}$, $B_m = -50\,\text{meV}$, $M = -100\,\text{meV}$. Le nombre de Chern associé à ces paramètres est $\mathcal{C} = 1$. Les quatre points de haute symétrie Γ, X, Y et $\mathcal{M}$ correspondent à des fermions de Dirac massifs. Les cônes situés aux points Γ et $\mathcal{M}$ possèdent une chiralité positive (points rouges), tandis que ceux situés aux points X et Y possèdent une chiralité négative (points bleus). (b) Vision 3D du spectre du modèle half-BHZ. La bande rose (bleue) correspond à la bande de conduction (valence).

Le nombre de Chern total de la bande de valence est obtenu en sommant les contributions des quatre cônes [31, 55],

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2}\left[\text{sgn}(M) - 2\,\text{sgn}\left(M - \frac{4B_m}{a^2}\right) + \text{sgn}\left(M - \frac{8B_m}{a^2}\right)\right]. \tag{2.66}$$

Cette expression montre pourquoi la structure globale du modèle sur réseau est nécessaire. Chaque cône fournit une contribution demi-entière, mais la somme des quatre contributions est bien un entier. Il ne suffit donc pas d'étudier uniquement le cône situé au point Γ pour déterminer la phase topologique complète du système. Il faut prendre en compte l'ensemble des cônes présents dans la ZB [14].

Diagramme de phase. Le nombre de Chern peut changer uniquement lorsque l'une des masses s'annule (création d'un point de Dirac) [39, 101]. Les transitions entre les phases topologiques ont donc lieu pour

$$M = 0, \qquad M = \frac{4B_m}{a^2}, \qquad M = \frac{8B_m}{a^2}. \tag{2.67}$$

Dans la suite, nous considérons le cas $B_m < 0$. Les trois valeurs critiques sont alors ordonnées selon

$$\frac{8B_m}{a^2} < \frac{4B_m}{a^2} < 0. \tag{2.68}$$

14. Dans un modèle régularisé sur réseau, les cônes de Dirac ne peuvent pas apparaître de manière isolée : la périodicité de la zone de Brillouin impose que la somme de leurs chiralités soit nulle. Ils apparaissent donc par paires de chiralités opposées, conformément au théorème de *fermion doubling* de Nielsen-Ninomiya [104].

Lorsque M diminue depuis une valeur positive, le système traverse successivement deux phases topologiques avant de redevenir trivial [31]. Le diagramme de phase s'écrit

$$\mathcal{C} = \begin{cases} 0, & M < 0, \\ -1, & 0 < M < 4B_m/a^2, \\ +1, & 4B_m/a^2 < M < 8B_m/a^2, \\ 0, & M > 8B_m/a^2. \end{cases} \tag{2.69}$$

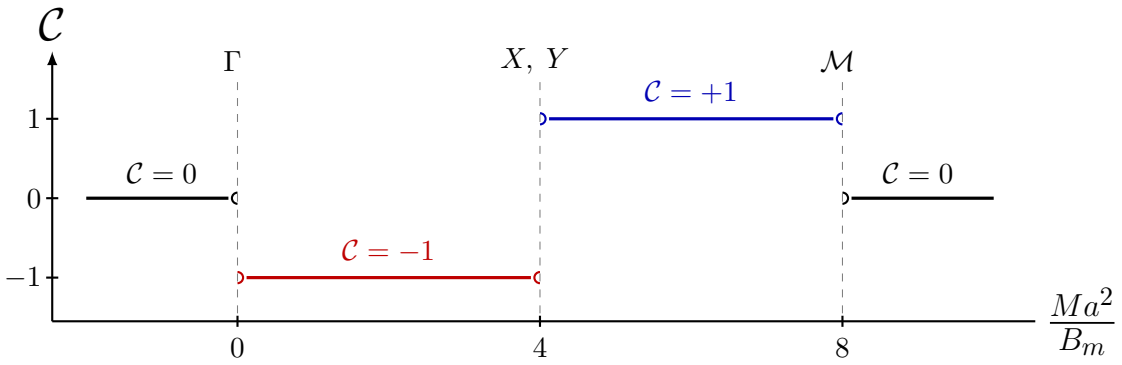

FIGURE 2.11 – Diagramme de phase topologique du modèle Half-BHZ pour $B_m < 0$. Les transitions successives sont associées à des fermetures du gap au point $\mathcal{M}$, aux points X et Y, puis finalement au point Γ de la ZB. En particulier, la transition entre les phases $\mathcal{C} = +1$ et $\mathcal{C} = -1$ implique une inversion de bandes simultanée en deux points distincts de la ZB, à savoir X et Y, tandis que les autres transitions correspondent chacune à une fermeture du gap en un unique point de haute symétrie. Les lignes verticales en pointillés indiquent les valeurs critiques de Ma^2/B_m auxquelles le gap de volume se ferme et le nombre de Chern change ; exactement à ces valeurs critiques, le nombre de Chern n'est pas bien défini.

En présence d'un champ magnétique, chaque cône de Dirac contribue à l'asymétrie spectrale à travers son niveau de Landau anomal. La somme des contributions fait alors apparaître le nombre de Chern entier du modèle sur réseau [38, 101].

2.6.3 . Géométrie de ruban et états de bord chiraux

Construction du ruban. Jusqu'à présent, nous avons considéré un système périodique selon les deux directions du plan. Dans cette géométrie, les deux composantes du vecteur d'onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ sont de bons nombres quantiques. Cette description est adaptée pour calculer le nombre de Chern, mais elle ne permet pas de visualiser directement les états de bord.

Pour faire apparaître ces états, considérons maintenant une géométrie de ruban (*cf.* figure 2.12) [31]. Le système reste périodique selon la direction y, mais devient fini selon la direction x. Le vecteur d'onde k_y reste donc un bon nombre quantique, tandis que la direction x doit être décrite dans l'espace réel. Nous considérons une chaîne de N_x sites, $x \in [1, N_x]a$.

Pour chaque valeur de k_y, le Hamiltonien devient un problème effectif unidimensionnel possédant deux orbitales par site. Il peut s'écrire sous la forme [31]

$$\mathcal{H} = \sum_{n,k_y} c^\dagger_{n,k_y} h_0(k_y) c_{n,k_y} + \sum_{n,k_y} \left(c^\dagger_{n+1,k_y} h_x c_{n,k_y} + \text{h.c.} \right), \tag{2.70}$$

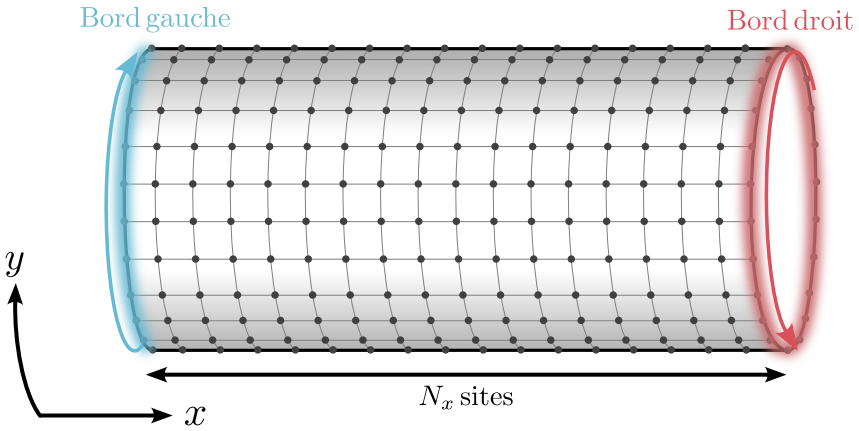

FIGURE 2.12 – Géométrie de ruban du modèle half-BHZ. Le système est fini selon la direction x, avec N_x sites, et périodique selon la direction y, de sorte que k_y reste un bon nombre quantique. Les régions colorées indiquent les états de bord chiraux localisés aux deux extrémités du ruban.

où n indexe les sites selon la direction x. Les matrices associées aux termes sur site et aux sauts entre sites voisins sont données par

$$h_0(k_y) = \frac{A}{a}\sin(ak_y)\sigma_y + \left[M + \frac{2B_m}{a^2}\left(\cos(ak_y) - 2\right)\right]\sigma_z, \tag{2.71}$$

et

$$h_x = \frac{B_m}{a^2}\sigma_z + \frac{iA}{2a}\sigma_x. \tag{2.72}$$

Spectre dans les phases triviale et topologique. Lorsque les paramètres correspondent à une phase triviale, le spectre du ruban possède un gap analogue à celui obtenu dans le système périodique. Les états appartenant aux bandes de conduction et de valence sont essentiellement localisés dans le volume du matériau. Aucun état ne traverse le gap lorsque k_y varie dans la ZB.

La situation est différente lorsque le nombre de Chern est non nul. Dans ce cas, des branches dispersives apparaissent à l'intérieur du gap (*cf.* figure 2.13). Ces branches correspondent à des états localisés aux bords du ruban [46, 55]. Pour une phase caractérisée par $|\mathcal{C}| = 1$, une branche est localisée sur le bord gauche et une autre sur le bord droit.

La vitesse de groupe d'un état est donnée par

$$v_y = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_y}. \tag{2.73}$$

La pente des branches traversant le gap permet donc de déterminer leur direction de propagation. Sur un bord donné, les états localisés dans le gap se propagent dans une direction privilégiée. Ils sont dits chiraux [46]. Sur le bord opposé, les états se propagent dans la direction inverse.

Il est important de distinguer ces états de bord d'un canal de conduction unidimensionnel ordinaire. Dans un fil conventionnel, des états se propageant dans des directions opposées peuvent généralement coexister au même endroit et être couplés par le désordre. Dans un isolant de Chern possédant un seul canal par bord, aucun état contre-propageant n'est disponible localement à la même énergie. Les processus de rétrodiffusion élastique sont donc fortement limités [47].

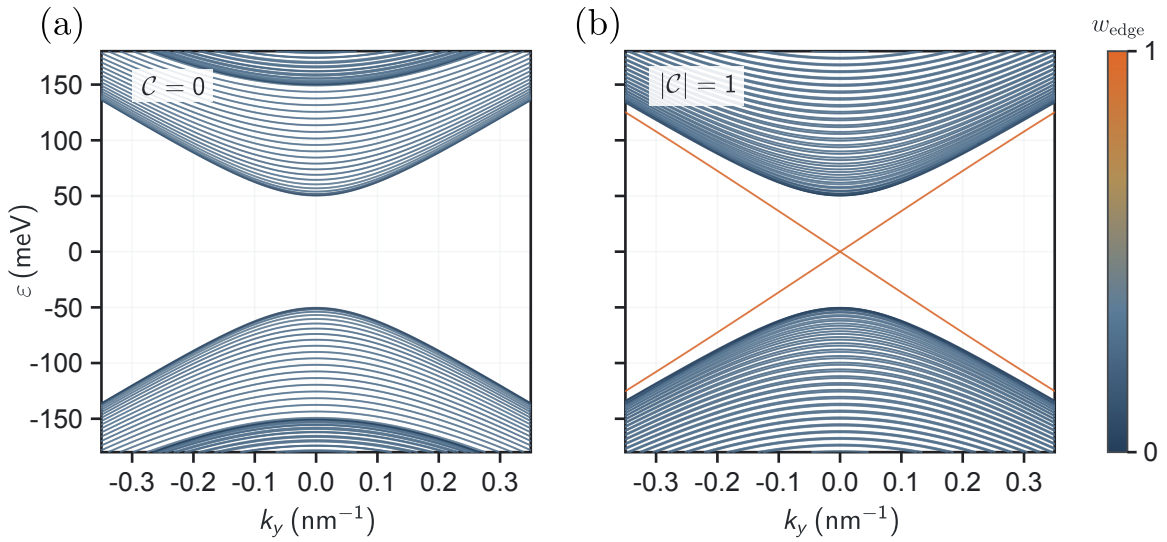

FIGURE 2.13 – Spectre en énergie du modèle half-BHZ dans une géométrie de ruban ouverte selon x et périodique selon y décrit par (2.70). Le panneau (a) correspond à une phase triviale de nombre de Chern $\mathcal{C} = 0$, tandis que le panneau (b) correspond à une phase topologique caractérisée par $|\mathcal{C}| = 1$. La couleur encode le poids de localisation aux bords $w_{\text{edge}} = \sum_{x \in \text{edges},\, \alpha} |\psi_{x\alpha}|^2$, où α désigne les composantes orbitales. Dans la phase topologique, des branches localisées aux bords traversent le gap séparant les bandes de valence et de conduction.

La longueur de localisation des états de bord dépend du gap et des paramètres microscopiques du modèle. Lorsque le système s'approche d'une transition topologique, le gap diminue et les états pénètrent davantage dans le volume. Si le ruban devient trop étroit, les états situés sur les deux bords peuvent s'hybrider et ouvrir un petit gap résiduel. Dans la limite d'un ruban suffisamment large, cet effet devient exponentiellement faible [31].

2.6.4 . Correspondance *bulk-edge*

Les résultats précédents montrent qu'une phase topologique possède des états de bord chiraux lorsque le système est placé dans une géométrie finie. Cette propriété n'est pas un détail dépendant de la forme précise du bord. Elle est directement imposée par la topologie du volume. Cette relation est appelée correspondance *bulk-edge* [46, 47].

Considérons une interface séparant deux régions caractérisées par des nombres de Chern $\mathcal{C}_{\text{L}}$ et $\mathcal{C}_{\text{R}}$. Le nombre net de modes chiraux localisés à l'interface est donné par [46,47]

$$\nu_{\text{edge}} = N_{\rightarrow} - N_{\leftarrow} = \mathcal{C}_{\text{L}} - \mathcal{C}_{\text{R}}, \tag{2.74}$$

où $N_{\rightarrow}$ et $N_{\leftarrow}$ désignent respectivement les nombres de modes se propageant dans les deux directions le long de l'interface.

Dans une géométrie de ruban entourée par le vide, on peut attribuer au vide un nombre de Chern nul. La relation précédente devient simplement

$$\nu_{\text{edge}} = \mathcal{C}. \tag{2.75}$$

Une phase caractérisée par $\mathcal{C} = 1$ possède donc un mode chiral net à chaque interface avec le vide. Une phase caractérisée par $\mathcal{C} = -1$ possède un mode se propageant dans la direction opposée. Pour $|\mathcal{C}| > 1$, plusieurs branches chirales peuvent traverser le gap [46].

La correspondance *bulk-edge* peut être comprise intuitivement en considérant une interface entre deux phases topologiquement distinctes. Le nombre de Chern ne peut pas varier continûment tant que le gap de volume reste ouvert. Lorsque l'on passe d'une région à une autre caractérisée par un nombre de Chern différent, le gap doit donc se fermer localement quelque part à l'interface. Les états qui apparaissent dans cette région forment les branches chirales traversant le gap [47].

Dans le cas du fermion de Dirac continu, cette idée peut être illustrée de manière simple en considérant une masse dépendant de la position,

$$M \longrightarrow M(x), \tag{2.76}$$

telle que

$$M(x \to -\infty)M(x \to +\infty) < 0. \tag{2.77}$$

Le changement de signe de la masse correspond alors à une inversion de bandes locale et produit un état localisé au voisinage de l'interface, dispersif dans la direction parallèle à celle-ci [101, 102].

Dans un modèle sur réseau, le raisonnement doit être généralisé. La transition topologique n'est pas nécessairement contrôlée par le signe de la seule masse au point Γ. Elle peut résulter de l'annulation et du changement de signe de l'une des masses effectives associées aux différents points de haute symétrie de la ZB. Dans le modèle half-BHZ, par exemple, les transitions peuvent avoir lieu lorsque M_Γ, $M_X = M_Y$ ou $M_\mathcal{M}$ s'annule. Le nombre de modes chiraux à l'interface est donc déterminé par la différence entre les nombres de Chern complets des deux régions, et non uniquement par le changement de signe d'une masse de Dirac particulière [31, 46].

2.7 . Conclusion du chapitre

Les notions introduites dans ce chapitre joueront un rôle central dans la suite de ce manuscrit. Dans un premier temps, nous verrons que la courbure de Berry modifie la dynamique semi-classique des porteurs de charge et peut affecter les propriétés de transport au-delà de la seule relation de dispersion. Dans un système fini, cette contribution géométrique peut notamment se combiner à la diffusion aux surfaces et engendrer une réponse longitudinale non linéaire.

Nous rencontrerons ensuite une conséquence complémentaire de la topologie dans le chapitre 6. En présence d'un champ magnétique perpendiculaire, l'asymétrie spectrale des niveaux de Landau modifiera la condition de neutralité électrostatique. Une jonction entre deux phases possédant des nombres de Chern différents pourra alors développer un potentiel interne intrinsèque, même en l'absence de dopage extrinsèque.

Chapitre 3

Théorie semi-classique moderne

Résumé

Ce chapitre introduit le formalisme semi-classique moderne des électrons de Bloch. Après avoir rappelé la description semi-classique standard fondée sur la dynamique d'un paquet d'ondes dans une bande d'énergie, nous montrons pourquoi cette description doit être enrichie lorsque les états de Bloch possèdent une géométrie non triviale. La construction variationnelle du paquet d'ondes fait apparaître naturellement les connexions et courbures de Berry dans l'espace des phases. Elle conduit ensuite aux équations du mouvement corrigées par la vitesse anomale, le moment magnétique orbital et la modification de la densité d'états. Nous discutons ensuite les conséquences directes pour le transport électronique, en particulier l'effet Hall anomal intrinsèque et son lien avec le nombre de Chern. Enfin, nous présentons la quantification semi-classique des orbites cyclotrons en champ magnétique, où la phase de Berry et le moment orbital modifient la règle d'Onsager et préparent l'étude des niveaux de Landau et de l'asymétrie spectrale utilisée dans les chapitres suivants.

Sommaire

3.1 Aux origines du semi-classique moderne 46
3.2 Construction du paquet d'ondes et principe variationnel . . . 49
3.3 Équations du mouvement avec corrections de Berry 53
3.4 Moment magnétique orbital et énergie corrigée 54
3.5 Une densité d'états modifiée par la géométrie 57
3.6 Transport électronique et effet Hall anomal 60
3.7 Champ magnétique et niveaux de Landau 63
3.8 Conclusion du chapitre 66

3.1 . Aux origines du semi-classique moderne

3.1.1 . Semi-classique standard : position et impulsion

Dans le chapitre précédent, nous avons vu que la structure électronique d'un matériau ne se résume pas à la dispersion de ses bandes. Les états de Bloch portent aussi une information géométrique, encodée dans la connexion de Berry, la courbure de Berry et, lorsque la bande est isolée sur toute la zone de Brillouin, dans un invariant topologique tel que le nombre de Chern. La phase géométrique trouve son origine dans le travail fondateur de Berry [1], tandis que son application à la dynamique des paquets d'ondes constitue le cœur du formalisme semi-classique moderne [2,5]. L'objectif de ce chapitre est de montrer comment la géométrie des bandes influe la dynamique réelle des électrons. Autrement dit, il ne s'agit plus uniquement de classifier les bandes, mais de comprendre comment les propriétés géométriques des états de Bloch modifient les équations du mouvement, la densité d'états et les réponses de transport.

La description semi-classique standard d'un électron dans un cristal repose sur une idée simple. Si un paquet d'ondes est suffisamment localisé en vecteur d'onde et en énergie pour être associé à une bande et à un vecteur d'onde donnés, mais suffisamment étendu en espace réel pour ne pas voir les détails microscopiques du réseau, il peut être décrit par deux variables : une position moyenne $\mathbf{r}$ et un vecteur d'onde moyen $\mathbf{k}$ [2, 5]. Dans une bande d'énergie (indicée n) $\varepsilon_n(\mathbf{k})$, la vitesse du paquet d'ondes est alors identifiée à la vitesse de groupe,

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\varepsilon_n(\mathbf{k}), \tag{3.1}$$

et l'action d'une force extérieure $\mathbf{F}$ modifie le quasi-moment cristallin selon

$$\hbar\dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F}. \tag{3.2}$$

Dans le cas d'un électron de charge $-e$, avec $e > 0$, soumis à des champs électromagnétiques classiques, cette force prend la forme de Lorentz [2]

$$\hbar\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}. \tag{3.3}$$

Ces équations constituent le point de départ de la théorie de Boltzmann dans les solides [105]. Elles permettent de décrire de nombreux phénomènes de transport, comme la conductivité longitudinale, l'effet Hall ordinaire [41] ou la dynamique des orbites cyclotrons, dès lors que les perturbations externes varient lentement à l'échelle de la maille cristalline [106].

Cette description standard contient cependant une approximation implicite. Elle suppose que toute l'information sur la bande est contenue dans la fonction $\varepsilon_n(\mathbf{k})$. Une telle hypothèse est suffisante pour un électron libre ou pour une bande parabolique simple, mais elle devient incomplète dès que la structure géométrique des fonctions de Bloch intervient. Or, dans un cristal, deux états de Bloch ayant la même énergie locale peuvent différer par leur phase, leur texture orbitale, leur texture de spin, *etc.* Ces degrés de liberté internes ne sont pas visibles dans la dispersion, mais ils peuvent modifier la dynamique du paquet d'ondes.

Une façon physique de comprendre cette limite consiste à remarquer qu'un paquet d'ondes de Bloch n'est pas une particule ponctuelle élémentaire. Il possède une taille

finie, une structure interne et une phase géométrique. Lorsqu'il se déplace lentement dans l'espace des paramètres, par exemple dans l'espace des vecteurs d'onde sous l'effet d'un champ électrique, l'état périodique $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ peut accumuler une phase de Berry [1,45]. Cette phase modifie donc la relation entre vitesse, force et espace des phases. La dynamique semi-classique moderne peut être vue comme la formulation minimale qui conserve la simplicité de la description par un paquet d'ondes, tout en incluant l'impact de la géométrie de la bande sur la dynamique [2,5].

3.1.2 . Pourquoi il faut aller au-delà : rôle de la géométrie de bande

L'un des résultats les plus emblématiques de la physique semi-classique moderne est l'apparition d'une *vitesse anomale* proportionnelle au produit vectoriel entre le champ électrique et la courbure de Berry [2,5]. Dans une bande isolée, en l'absence de champ magnétique et pour un champ électrique uniforme, les équations du mouvement prennent la forme

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\varepsilon_n(\mathbf{k}) + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\times\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}), \tag{3.4a}$$

$$\hbar\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E}. \tag{3.4b}$$

Le premier terme de $\dot{\mathbf{r}}$ est la vitesse de groupe habituelle. Le second terme est absent de la théorie semi-classique standard. Il est perpendiculaire au champ électrique et ne dépend pas directement du temps de relaxation. Il s'agit donc d'une contribution intrinsèque à la dynamique, fixée par la géométrie de la bande et non par les détails microscopiques de la diffusion [42,43].

Cette vitesse anomale fournit une interprétation dynamique très simple du lien entre courbure de Berry et effet Hall anomal [2,43]. Si une bande possède une courbure de Berry moyenne non nulle sur les états occupés, un champ électrique longitudinal induit un courant transverse même en l'absence de champ magnétique externe. Dans un isolant de Chern, lorsque toute une bande est remplie, l'intégrale de la courbure de Berry sur la zone de Brillouin est quantifiée et la conductivité Hall devient proportionnelle au nombre de Chern [3,95]. Ainsi, la physique semi-classique moderne établit un lien direct entre les objets géométriques introduits dans le chapitre précédent et des grandeurs mesurables de transport comme la conductivité par exemple.

La nécessité d'aller au-delà du semi-classique standard apparaît aussi en champ magnétique. D'une part, un paquet d'ondes de Bloch possède un moment magnétique orbital associé à sa rotation [2,107,108]. L'énergie de bande pertinente n'est donc plus simplement $\varepsilon_n(\mathbf{k})$, mais une énergie corrigée $\tilde{\varepsilon}_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mathbf{m}_n(\mathbf{k})\cdot\mathbf{B}$. D'autre part, la courbure de Berry modifie la densité d'états dans l'espace des phases par un facteur $1+(e/\hbar)\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\Omega}_n$ [109,110]. Ces deux effets sont essentiels dès que l'on cherche à calculer correctement une densité de charge, une aimantation orbitale ou une réponse électrostatique dans un matériau topologique.

Dans ce chapitre, nous suivons donc la logique suivante. Nous construisons d'abord un paquet d'ondes de Bloch localisé dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'ondes. Nous montrons ensuite que son Lagrangien effectif contient naturellement des connexions de Berry associées aux variables du problème. Les équations d'Euler-Lagrange donnent alors les équations du mouvement semi-classiques générales, avec des courbures dans l'espace des vecteurs d'onde, dans l'espace réel et dans l'espace mixte. Nous spécialisons

ensuite ces résultats aux champs électromagnétiques, puis nous discutons la modification de la densité d'états, le moment magnétique orbital, l'effet Hall anomal et la quantification semi-classique en champ magnétique.

3.1.3 . Domaine de validité du formalisme

La première hypothèse est l'existence d'une bande isolée et d'une dynamique adiabatique à l'échelle de cette bande. Dans le cadre semi-classique, le paquet d'ondes est construit à partir des états de Bloch d'une seule bande n [2, 5]. Cette projection n'est valable que si les couplages interbandes, induits par les champs extérieurs ou les gradients spatiaux, restent faibles devant le gap qui sépare la bande considérée des autres. Lorsque cette séparation d'énergie disparaît, par exemple près d'une fermeture de gap, ou lorsque le champ électrique devient suffisamment fort pour induire des transitions non adiabatiques de type Landau-Zener [111,112], la dynamique ne se réduit plus à celle d'un paquet d'ondes adiabatiquement confiné dans une bande unique.

Des généralisations semi-classiques existent néanmoins au-delà de cette approximation d'une bande. Elles peuvent traiter explicitement une dynamique de paquets d'ondes dans des sous-espaces de bandes couplées [113] ou une géométrie non abélienne [114]. Les champs peuvent aussi induire perturbativement un décalage positionnel et des corrections interbandes au-delà du premier ordre [115, 116]. Ces développements sortent cependant du cadre de ce chapitre, où nous nous placerons dans le régime adiabatique à une seule bande.

La deuxième hypothèse est une séparation d'échelles spatiales. Le paquet d'ondes doit être beaucoup plus large que la maille cristalline, afin que le vecteur d'onde moyen soit bien défini, mais beaucoup plus petit que l'échelle de variation des perturbations externes [2,5]. On peut résumer cette condition sous la forme $a \ll \ell_W \ll \ell_\beta$ (*cf.* figure 3.1), où a est le pas du réseau, ℓ_W la largeur du paquet d'ondes et ℓ_β la longueur caractéristique des champs ou paramètres externes. Cette hiérarchie permet d'utiliser une base de Bloch locale et de tronquer le développement du Hamiltonien aux premiers gradients.

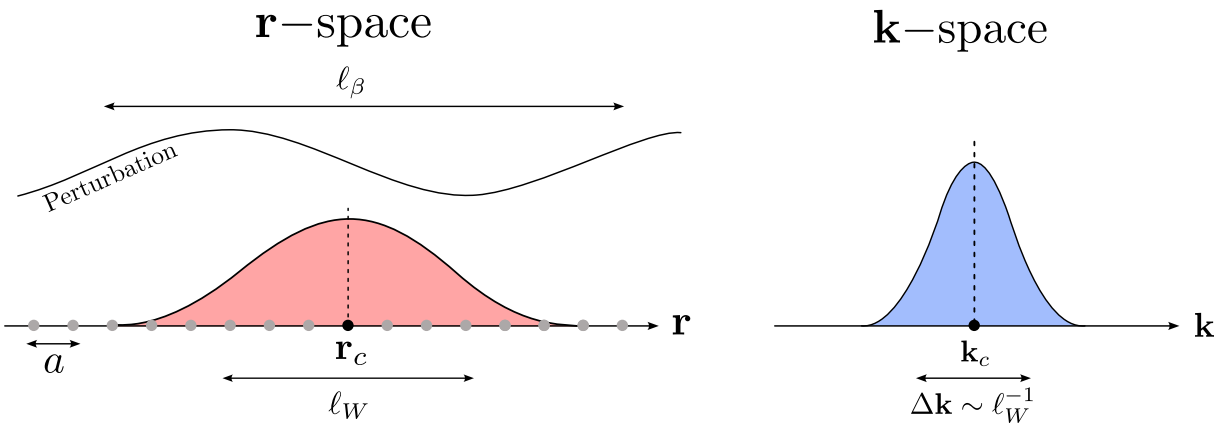

FIGURE 3.1 – Paquet d'ondes semi-classique dans un cristal lentement perturbé. La séparation d'échelles $a \ll \ell_W \ll \ell_\beta$ permet de décrire le paquet par une position moyenne $\mathbf{r}_c$ et un vecteur d'onde moyen $\mathbf{k}_c$, tout en projetant la dynamique sur une bande locale.

La troisième hypothèse concerne le champ magnétique. La description semi-classique en termes de trajectoires dans l'espace des vecteurs d'ondes est particulièrement adaptée

lorsque la longueur magnétique $\ell_B = \sqrt{\hbar/(e|B|)}$ reste grande devant l'échelle microscopique du réseau. Dans cette limite, le champ magnétique sonde la structure de bande de manière suffisamment douce pour que les orbites cyclotron puissent être quantifiées par la condition d'Onsager [1] [38, 106]. Lorsque le champ devient très fort, ou lorsque seuls les premiers niveaux de Landau sont pertinents, il est en général nécessaire de traiter le problème directement à partir du Hamiltonien quantifié.

Enfin, le formalisme présenté ici décrit la dynamique de volume d'un paquet d'ondes. Il ne remplace pas une résolution explicite des états de bord ou des états d'interface lorsque ceux-ci jouent un rôle central. Dans un isolant de Chern fini, par exemple, les modes chiraux de bord sont indispensables pour comprendre le transport entre contacts. En revanche, la description semi-classique de volume permet de calculer la réponse locale des bandes, la contribution intrinsèque au courant Hall, les corrections de densité d'états et les effets orbitaux. C'est précisément cette complémentarité entre description de volume et modes de bord qui rend le formalisme utile dans la suite de cette thèse.

3.2 . Construction du paquet d'ondes et principe variationnel

3.2.1 . Hypothèses d'adiabaticité et Hamiltonien local

Considérons un cristal soumis à des perturbations externes lentes, décrites collectivement par des paramètres $\{\beta_i(\mathbf{r}, t)\}$. Ces perturbations peuvent représenter un potentiel électrostatique lisse, une déformation du réseau, une texture magnétique, un champ de contrainte, un potentiel de jauge effectif ou encore une variation spatiale lente des paramètres d'un Hamiltonien effectif [2, 5]. Le Hamiltonien microscopique peut alors être écrit formellement comme

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \{\beta_i(\mathbf{r}, t)\}\right). \tag{3.5}$$

L'hypothèse centrale est que les paramètres β_i varient sur une longueur caractéristique ℓ_β grande devant la taille de la maille cristalline a. Dans ce régime, un paquet d'ondes centré autour d'une position $\mathbf{r}_c$ ne voit localement qu'un cristal presque périodique, dont les paramètres sont "gelés" à leur valeur locale $\beta_i(\mathbf{r}_c, t)$.

On définit ainsi un Hamiltonien local $\mathcal{H}_c$ obtenu en évaluant les perturbations au centre du paquet d'ondes,

$$\mathcal{H}_c = \mathcal{H}\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \{\beta_i(\mathbf{r}_c, t)\}\right). \tag{3.6}$$

Dans les expressions précédentes, $\mathbf{p}$ désigne l'opérateur impulsion agissant sur les coordonnées microscopiques. Une fois la périodicité du Hamiltonien local exploitée, ses états propres sont naturellement étiquetés par le vecteur d'onde cristallin $\mathbf{k}$, ou quasi-impulsion, associé aux translations du réseau. Cet Hamiltonien possède la périodicité du cristal local et admet donc des états de Bloch. Pour une bande n, ils satisfont

$$\mathcal{H}_c \left|\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}_c, t)\right\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}_c, t) \left|\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}_c, t)\right\rangle. \tag{3.7}$$

L'état de Bloch s'écrit $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle$, où $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ est périodique sur la maille élémentaire. Dans toute la suite, nous supposons que la bande étudiée est séparée des autres

1. La condition d'Onsager est une règle de quantification semi-classique reliant les niveaux de Landau à l'aire des orbites cyclotron dans l'espace des vecteurs d'onde.

bandes par un gap suffisamment grand pour que les transitions interbandes soient négligeables. Cette approximation adiabatique permet de projeter la dynamique sur une seule bande, tout en conservant les corrections géométriques [2] dues à la dépendance de $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ en $\mathbf{k}$, $\mathbf{r}_c$ et t [2,5].

Le Hamiltonien complet peut être développé autour de $\mathbf{r}_c$. À l'ordre linéaire dans les gradients des perturbations, on écrit [5]

$$\mathcal{H} \simeq \mathcal{H}_c + \Delta\mathcal{H}, \tag{3.8}$$

avec

$$\Delta\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left[(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}_c}\mathcal{H}_c + \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}_c}\mathcal{H}_c\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)\right]. \tag{3.9}$$

La symétrisation est nécessaire lorsque les opérateurs ne commutent pas. Les termes d'ordre supérieur font intervenir des moments multipolaires plus élevés du paquet d'ondes et des gradients de perturbations plus forts. Ils sont négligés dans le régime semi-classique considéré ici.

3.2.2 . Définition et localisation du paquet d'ondes

Un paquet d'ondes projeté sur la bande n est construit comme une superposition d'états de Bloch locaux [2,5,107],

$$|W\rangle = \int d\mathbf{k}\, A(\mathbf{k},t)\,|\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}_c,t)\rangle\,. \tag{3.10}$$

L'amplitude complexe $A(\mathbf{k},t)$ est normalisée selon

$$\int d\mathbf{k}\,|A(\mathbf{k},t)|^2 = 1, \tag{3.11}$$

et elle est supposée fortement localisée autour d'un vecteur d'onde moyen $\mathbf{k}_c$,

$$\mathbf{k}_c = \int d\mathbf{k}\,|A(\mathbf{k},t)|^2\mathbf{k}. \tag{3.12}$$

Cette localisation en espace des vecteurs d'ondes implique que le paquet d'ondes est étendu sur plusieurs mailles en espace réel. Elle est indispensable pour donner un sens à une position moyenne lisse, mais elle doit rester compatible avec une localisation à une échelle petite devant la longueur de variation des perturbations externes [2,5] (*cf.* figure 3.1).

On décompose l'amplitude sous la forme $A(\mathbf{k},t) = |A(\mathbf{k},t)|e^{-i\gamma(\mathbf{k},t)}$. La position moyenne du paquet d'ondes est définie par

$$\mathbf{r}_c = \langle W|\mathbf{r}|W\rangle\,. \tag{3.13}$$

En utilisant la représentation de Bloch et en négligeant les corrections liées à la largeur finie de $|a|^2$, on obtient [2,5]

$$\mathbf{r}_c \simeq \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}_c}\gamma(\mathbf{k}_c,t) + \boldsymbol{\mathcal{A}}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{k}_c,\mathbf{r}_c,t), \tag{3.14}$$

2. Ces corrections géométriques sont d'origine interbande, ils donnent lieu à la courbure de Berry et au moment magnétique orbital.

où

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{k},\mathbf{r},t) = i\,\langle u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)|\,\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\,|u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)\rangle \tag{3.15}$$

est la connexion de Berry dans l'espace des vecteurs d'onde. Cette équation est déjà très instructive. La position du paquet d'ondes n'est pas uniquement déterminée par le gradient de la phase γ, elle contient aussi une contribution géométrique associée à la structure interne de l'état de Bloch.

Sous une transformation de jauge locale $|u_{n\mathbf{k}}\rangle \to e^{i\chi(\mathbf{k},\mathbf{r},t)}\,|u_{n\mathbf{k}}\rangle$, la connexion de Berry se transforme comme $\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}} \to \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}} - \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\chi$. Cette variation est compensée par une transformation correspondante de la phase γ, de sorte que $\mathbf{r}_c$ reste invariant de jauge [2,5]. Cette remarque illustre un point important : les connexions de Berry dépendent du choix de phase des états de Bloch, mais les équations du mouvement finales ne dépendent que des courbures de Berry, qui sont invariantes de jauge.

3.2.3 . Lagrangien effectif

La dynamique des variables collectives $\mathbf{r}_c$ et $\mathbf{k}_c$ peut être obtenue à partir d'un principe variationnel dépendant du temps [5, 107]. On définit le Lagrangien effectif du paquet d'ondes par

$$\mathcal{L} = \langle W|i\hbar\frac{d}{dt} - \mathcal{H}|W\rangle\,. \tag{3.16}$$

À l'ordre dominant dans la largeur du paquet et dans les gradients des perturbations, ce Lagrangien peut s'écrire [2,5]

$$\mathcal{L} = \hbar\mathbf{k}_c\cdot\dot{\mathbf{r}}_c + \hbar\dot{\mathbf{k}}_c\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}} + \hbar\dot{\mathbf{r}}_c\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathbf{r}} + \hbar\mathcal{A}_t - \varepsilon(\mathbf{k}_c,\mathbf{r}_c,t), \tag{3.17}$$

où les connexions généralisées sont définies par

$$\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathbf{k}_c} = i\,\langle u_c|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}_c}|u_c\rangle\,, \qquad \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathbf{r}_c} = i\,\langle u_c|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}_c}|u_c\rangle\,, \qquad \mathcal{A}_t = i\,\langle u_c|\partial_t|u_c\rangle\,. \tag{3.18}$$

Ici, $|u_c\rangle$ désigne la partie périodique de l'état de Bloch local évaluée au centre du paquet d'ondes, *i.e.* en $(\mathbf{k}_c,\mathbf{r}_c,t)$. Le premier terme, $\hbar\mathbf{k}_c\cdot\dot{\mathbf{r}}_c$, est le terme canonique usuel. Les trois termes suivants sont géométriques : ils traduisent le fait que l'état du paquet d'ondes varie lorsque $\mathbf{k}_c$, $\mathbf{r}_c$ ou t changent.

L'énergie ε qui apparaît dans le Lagrangien n'est pas nécessairement l'énergie de bande locale ordinaire. Elle est donnée par

$$\varepsilon = \langle W|\mathcal{H}|W\rangle \equiv \varepsilon_n(\mathbf{k}_c,\mathbf{r}_c,t) + \Delta\varepsilon(\mathbf{k}_c,\mathbf{r}_c,t), \tag{3.19}$$

où $\Delta\varepsilon$ regroupe les corrections dues aux gradients des perturbations et, en présence d'un champ magnétique, au moment magnétique orbital. De manière générale, pour une perturbation lente, la correction linéaire associée à $\Delta\mathcal{H}$ peut être écrite sous la forme [5]

$$\Delta\varepsilon = -\mathrm{Im}\left[\langle\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}u_c|\cdot(\varepsilon_n - \mathcal{H}_c)\,|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}u_c\rangle\right]. \tag{3.20}$$

Cette expression montre que l'énergie du paquet d'ondes peut dépendre de façon géométrique des variations spatiales de la base locale. Elle sera particulièrement utile lorsque les paramètres du Hamiltonien, comme une masse de Dirac, varient lentement dans l'espace réel.

Le Lagrangien (3.17) a une structure très proche de celle d'une particule chargée dans un champ électromagnétique, mais dans un espace des phases élargi. Les connexions de Berry jouent le rôle de potentiels de jauge effectifs associés aux coordonnées adiabatiques [2, 45]. Les courbures correspondantes agiront donc comme des champs effectifs qui modifient la dynamique. Cette analogie est utile, mais il faut garder en tête que ces champs ne vivent pas nécessairement dans l'espace réel : la courbure la plus importante pour la topologie des bandes est souvent une courbure dans l'espace des vecteurs d'onde.

3.2.4 . Courbures généralisées et équations du mouvement

Les équations du mouvement sont obtenues en appliquant les équations d'Euler-Lagrange aux variables $\mathbf{r}_c$ et $\mathbf{k}_c$. Pour alléger les notations, nous omettons désormais l'indice c et notons simplement $\mathbf{r}$ et $\mathbf{k}$ le centre du paquet d'ondes. On introduit les courbures de Berry généralisées [2, 5]

$$(\Omega_{\alpha\beta})_{ij} = \partial_{\alpha_i}(\mathcal{A}_\beta)_j - \partial_{\beta_j}(\mathcal{A}_\alpha)_i, \tag{3.21}$$

où α et β peuvent désigner $\mathbf{r}$, $\mathbf{k}$ ou t. La courbure $\Omega_{\mathbf{kk}}$ est donc la courbure de Berry usuelle introduite dans le chapitre 2. Les courbures $\Omega_{\mathbf{rr}}$ et $\Omega_{\mathbf{kr}}$ apparaissent lorsque la base locale dépend aussi de la position, par exemple dans un système déformé, texturé ou inhomogène.

Les équations du mouvement générales s'écrivent [2, 5]

$$\hbar\dot{r}_i = \partial_{k_i}\varepsilon - \hbar(\Omega_{kr})_{ij}\dot{r}_j - \hbar(\Omega_{kk})_{ij}\dot{k}_j - \hbar(\Omega_{kt})_i, \tag{3.22a}$$

$$\hbar\dot{k}_i = -\partial_{r_i}\varepsilon + \hbar(\Omega_{rr})_{ij}\dot{r}_j + \hbar(\Omega_{rk})_{ij}\dot{k}_j + \hbar(\Omega_{rt})_i. \tag{3.22b}$$

Ces équations constituent l'une des formes les plus complètes de la dynamique semi-classique moderne [2, 5]. Elles contiennent la dynamique standard comme cas limite, tout en conservant les corrections géométriques qui apparaissent au premier ordre en gradients. Si les états de Bloch ne dépendent pas explicitement de la position ni du temps, seules les composantes Ω_{kk} subsistent et l'on retrouve la vitesse anomale dans l'espace des vecteurs d'onde. Si, au contraire, les états dépendent de paramètres spatiaux lents, des courbures mixtes apparaissent et modifient à la fois la vitesse et la force effectives.

Il est utile de souligner que les connexions de Berry ne sont pas directement observables, car elles dépendent du choix de jauge des états $|u\rangle$. En revanche, les courbures de Berry qui apparaissent dans (3.22) sont invariantes de jauge. La dynamique du centre du paquet d'ondes est donc bien définie physiquement. Cette structure est analogue au passage du potentiel vecteur électromagnétique $\mathbf{A}$ au champ magnétique $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}$, mais elle se généralise ici à un espace de paramètres plus large.

Remarque historique. La courbure Ω_{kk} est l'objet introduit dans le chapitre précédent pour définir le nombre de Chern d'une bande isolée. Son apparition dans les équations du mouvement donne une interprétation dynamique à cette quantité géométrique. Les travaux de Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs ont montré que son intégrale sur la zone de Brillouin contrôle la conductance Hall quantifiée [3, 81]. Les travaux de Berry [1] et de Simon [45] ont clarifié son origine géométrique. Le formalisme semi-classique moderne montre quant à lui que cette même courbure agit localement sur la trajectoire d'un paquet d'ondes [2, 5].

3.3 . Équations du mouvement avec corrections de Berry

3.3.1 . Perturbation électromagnétique uniforme

Considérons maintenant le cas important d'un cristal uniforme soumis à des champs électromagnétiques qui varient lentement à l'échelle du paquet d'ondes. Les états de Bloch ne dépendent pas explicitement de $\mathbf{r}$, de sorte que les courbures Ω_{rr} et Ω_{kr} sont nulles. La courbure pertinente est alors la courbure de Berry en espace des vecteurs d'onde, notée [2]

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{k}). \tag{3.23}$$

L'énergie du paquet d'ondes en champ magnétique est corrigée par le moment magnétique orbital [2, 107, 108],

$$\tilde{\varepsilon}_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mathbf{m}_n^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{B} - e\phi(\mathbf{r}), \tag{3.24}$$

où ϕ est le potentiel électrostatique et $\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi - \partial_t \mathbf{A}_{\mathrm{em}}$.

Dans ce cas, les équations du mouvement semi-classiques prennent la forme [2, 5]

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\tilde{\varepsilon}_n(\mathbf{k}) - \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}), \tag{3.25a}$$

$$\hbar\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}. \tag{3.25b}$$

La première équation contient la correction géométrique $-\dot{\mathbf{k}}\times\boldsymbol{\Omega}_n$, qui devient la vitesse anomale lorsqu'un champ électrique accélère le paquet d'ondes dans l'espace des vecteurs d'onde. La seconde équation est la force de Lorentz écrite pour le quasi-moment cristallin. Ces deux équations sont couplées, car $\dot{\mathbf{r}}$ apparaît dans la force magnétique et $\dot{\mathbf{k}}$ apparaît dans la vitesse anomale.

En définissant la vitesse de groupe corrigée

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\tilde{\varepsilon}_n(\mathbf{k}), \tag{3.26}$$

on peut résoudre explicitement (3.25). On obtient [2, 109]

$$D_n\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_n + \frac{e}{\hbar}\mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_n + \frac{e}{\hbar}(\mathbf{v}_n \cdot \boldsymbol{\Omega}_n)\mathbf{B}, \tag{3.27a}$$

$$\hbar D_n\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v}_n \times \mathbf{B} - \frac{e^2}{\hbar}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{B})\boldsymbol{\Omega}_n, \tag{3.27b}$$

avec

$$D_n(\mathbf{k}) = 1 + \frac{e}{\hbar}\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}). \tag{3.28}$$

Le facteur D_n joue un double rôle. Il apparaît comme un facteur scalaire dans les équations du mouvement, mais il modifie aussi la mesure de l'espace des phases, comme nous le verrons plus loin [109, 110]. Lorsque $\mathbf{B} = 0$, ce facteur vaut 1 et la seule correction géométrique explicite dans la vitesse est la vitesse anomale $(e/\hbar)\mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_n$.

La vitesse anomale est de nature transverse [2, 43]. Pour un système bidimensionnel dans le plan (x, y), avec une courbure $\boldsymbol{\Omega}_n = \Omega_{n,z}\hat{\mathbf{z}}$ et un champ électrique $\mathbf{E} = E_x\hat{\mathbf{x}}$, elle vaut

$$\mathbf{v}_{\mathrm{anom}} = \frac{e}{\hbar}E_x\hat{\mathbf{x}} \times \Omega_{n,z}\hat{\mathbf{z}} = -\frac{e}{\hbar}E_x\Omega_{n,z}\hat{\mathbf{y}}. \tag{3.29}$$

Un champ longitudinal peut donc engendrer une vitesse transverse si les états occupés portent une courbure de Berry moyenne non nulle. Cette observation est au cœur de l'interprétation semi-classique de l'effet Hall anomal intrinsèque.

3.3.2 . Perturbation électromagnétique non uniforme

Dans de nombreux problèmes physiques, les paramètres du Hamiltonien ne sont pas strictement uniformes. C'est le cas par exemple d'une hétérojonction, d'une texture magnétique, d'une déformation mécanique, d'une interface entre deux phases ou d'une masse de Dirac dépendant de la position. Lorsque ces variations restent lentes à l'échelle de la maille, on peut toujours utiliser une base locale de Bloch, mais les états $|u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)\rangle$ dépendent maintenant explicitement de $\mathbf{r}$. Cette dépendance fait apparaître des connexions $\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathbf{r}}$ et des courbures mixtes Ω_{kr} [2, 5].

Les équations du mouvement générales (3.22) peuvent alors être réécrites en séparant les contributions électromagnétiques usuelles et les contributions géométriques associées à la base locale. En notation indicielle, on obtient alors [5]

$$\dot{r}_i = \frac{1}{\hbar}\partial_{k_i}\varepsilon - (\Omega_{kk})_{ij}\dot{k}_j - (\Omega_{kr})_{ij}\dot{r}_j - (\Omega_{kt})_i, \tag{3.30a}$$

$$\hbar\dot{k}_i = -eE_i - e(\dot{\mathbf{r}}\times\mathbf{B})_i - \partial_{r_i}\varepsilon + \hbar(\Omega_{rr})_{ij}\dot{r}_j + \hbar(\Omega_{rk})_{ij}\dot{k}_j + \hbar(\Omega_{rt})_i. \tag{3.30b}$$

Le terme $-\partial_{r_i}\varepsilon$ correspond à la force due aux variations spatiales de l'énergie locale. Les courbures Ω_{kr} et Ω_{rk} modifient la relation entre vitesse et quasi-moment lorsque la structure interne de la bande change dans l'espace. Les courbures temporelles Ω_{kt} et Ω_{rt} décrivent quant à elles des effets de pompage adiabatique lorsque les paramètres du Hamiltonien varient lentement dans le temps [2, 117].

Dans un modèle de Dirac inhomogène, par exemple avec une masse $M(\mathbf{r})$ variable, les courbures mixtes sont directement reliées aux gradients de cette masse. Physiquement, cela signifie que le paquet d'ondes ressent non seulement une force classique due à la variation de l'énergie de gap, mais aussi une correction géométrique due à la rotation de la texture de Bloch lorsque l'on traverse l'interface. Ces termes sont généralement petits lorsque l'interface est large devant la longueur d'onde électronique, mais ils fournissent le cadre naturel pour traiter les corrections de gradient de manière contrôlée.

Dans la suite de cette thèse, nous utiliserons surtout le cas uniforme, ou bien des situations où les gradients spatiaux interviennent dans la détermination locale de la densité de charge et du potentiel électrostatique. Il est néanmoins important de présenter le formalisme non uniforme, car il montre que la physique semi-classique moderne ne se limite pas à la courbure de Berry en espace des vecteurs d'onde. Elle correspond plus généralement à une géométrie de l'espace des phases, où les coordonnées réelles, les vecteurs d'onde et les paramètres externes jouent des rôles comparables.

3.4 . Moment magnétique orbital et énergie corrigée

3.4.1 . Origine physique du moment orbital

Un paquet d'ondes de Bloch possède une structure interne. Même si son centre suit une trajectoire semi-classique, la distribution de charge associée au paquet peut effectuer une rotation autour de ce centre (*cf.* figure 3.2). Cette auto-rotation engendre un moment magnétique orbital, de la même manière qu'une boucle de courant classique produit un moment magnétique [2, 107]. Dans un solide, ce moment orbital n'est pas seulement une propriété géométrique de l'orbite réelle : il dépend aussi de la structure des états de Bloch et des couplages interbandes.

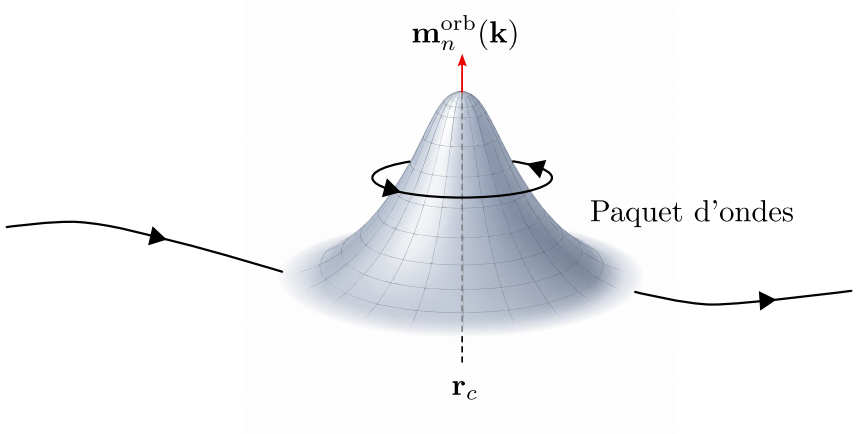

FIGURE 3.2 – Rotation d'un paquet d'ondes de Bloch. Le paquet d'ondes, localisé autour de son centre $\mathbf{r}_c$, possède à la fois un mouvement de centre de masse et une rotation interne autour de ce centre. Cette rotation donne naissance à un moment magnétique orbital $\mathbf{m}_n^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k})$, propriété intrinsèque de la bande dans la description semi-classique. Schéma inspiré de la représentation du moment magnétique orbital dans [118].

Pour une bande non dégénérée, le moment magnétique orbital s'écrit [2, 107, 108]

$$\left[\mathbf{m}_n^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k})\right]_\gamma = -\frac{e}{2\hbar}\,\mathrm{Im}\sum_{\alpha,\beta}\epsilon_{\gamma\alpha\beta}\left\langle\partial_{k_\alpha}u_{n\mathbf{k}}\right|\left[\mathcal{H}(\mathbf{k})-\varepsilon_n(\mathbf{k})\right]\left|\partial_{k_\beta}u_{n\mathbf{k}}\right\rangle, \tag{3.31}$$

où $e > 0$ désigne la valeur absolue de la charge de l'électron et $\epsilon_{\gamma\alpha\beta}$ est le tenseur de Levi-Civita. Cette expression fait intervenir les dérivées de la partie périodique $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ par rapport au vecteur d'onde, comme la courbure de Berry. Elle est donc directement sensible à la géométrie de la bande.

Pour rendre explicite son caractère interbande, il est utile de réécrire cette expression en utilisant la théorie des perturbations appliquée aux états de Bloch [2]. Pour $m \neq n$, on a

$$\langle u_{m\mathbf{k}}|\partial_{k_\alpha}u_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{\langle u_{m\mathbf{k}}|\,\partial_{k_\alpha}\mathcal{H}(\mathbf{k})\,|u_{n\mathbf{k}}\rangle}{\varepsilon_n(\mathbf{k})-\varepsilon_m(\mathbf{k})}. \tag{3.32}$$

On obtient alors la forme interbande du moment magnétique orbital,

$$\left[\mathbf{m}_n^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k})\right]_\gamma = \frac{e}{2\hbar}\,\mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\sum_{\alpha,\beta}\epsilon_{\gamma\alpha\beta}\frac{\langle u_{n\mathbf{k}}|\,\partial_{k_\alpha}\mathcal{H}(\mathbf{k})\,|u_{m\mathbf{k}}\rangle\,\langle u_{m\mathbf{k}}|\,\partial_{k_\beta}\mathcal{H}(\mathbf{k})\,|u_{n\mathbf{k}}\rangle}{\varepsilon_n(\mathbf{k})-\varepsilon_m(\mathbf{k})}. \tag{3.33}$$

En deux dimensions, seule la composante perpendiculaire au plan est non nulle. Elle s'écrit

$$m_{n,z}^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k}) = \frac{e}{\hbar}\,\mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\frac{\langle u_{n\mathbf{k}}|\,\partial_{k_x}\mathcal{H}(\mathbf{k})\,|u_{m\mathbf{k}}\rangle\,\langle u_{m\mathbf{k}}|\,\partial_{k_y}\mathcal{H}(\mathbf{k})\,|u_{n\mathbf{k}}\rangle}{\varepsilon_n(\mathbf{k})-\varepsilon_m(\mathbf{k})}. \tag{3.34}$$

Cette expression montre que le moment magnétique orbital est gouverné par les éléments de matrice interbandes de $\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\mathcal{H}$, *i.e.* par l'opérateur vitesse à un facteur $\hbar$ près [2]. Les bandes proches en énergie tendent à contribuer plus fortement, car leur écart énergétique apparaît au dénominateur. Le moment orbital encode donc à la fois la géométrie des états propres et la structure énergétique du spectre.

3.4.2 . Lien avec la courbure de Berry

Le même caractère interbande apparaît dans la courbure de Berry [2]. En effet, en terme de composantes elle s'écrit

$$[\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})]_\gamma = i \sum_{\alpha,\beta} \epsilon_{\gamma\alpha\beta} \left\langle \partial_{k_\alpha} u_{n\mathbf{k}} \middle| \partial_{k_\beta} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle . \tag{3.35}$$

En utilisant l'identité de l'équation (3.32), on obtient

$$[\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})]_\gamma = i \sum_{m\neq n} \sum_{\alpha,\beta} \epsilon_{\gamma\alpha\beta} \frac{\langle u_{n\mathbf{k}}| \partial_{k_\alpha} \mathcal{H}(\mathbf{k}) |u_{m\mathbf{k}}\rangle \langle u_{m\mathbf{k}}| \partial_{k_\beta} \mathcal{H}(\mathbf{k}) |u_{n\mathbf{k}}\rangle}{\left[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{k})\right]^2}. \tag{3.36}$$

En deux dimensions, cette expression devient

$$\Omega_{n,z}(\mathbf{k}) = -2 \operatorname{Im} \sum_{m\neq n} \frac{\langle u_{n\mathbf{k}}| \partial_{k_x} \mathcal{H}(\mathbf{k}) |u_{m\mathbf{k}}\rangle \langle u_{m\mathbf{k}}| \partial_{k_y} \mathcal{H}(\mathbf{k}) |u_{n\mathbf{k}}\rangle}{\left[\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_m(\mathbf{k})\right]^2}. \tag{3.37}$$

La courbure de Berry et le moment magnétique orbital reposent donc sur les mêmes éléments de matrice interbandes de $\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}}\mathcal{H}$. La différence essentielle est leur pondération énergétique : la courbure de Berry contient l'inverse du carré de l'écart énergétique, tandis que le moment orbital contient l'inverse de cet écart. Le moment orbital dépend ainsi à la fois de la géométrie des états propres et de la structure énergétique du spectre.

En présence d'un champ magnétique faible, l'énergie semi-classique de la bande est corrigée par le couplage entre le moment magnétique orbital et le champ [2, 108],

$$\tilde{\varepsilon}_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mathbf{m}_n^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{B}. \tag{3.38}$$

Cette correction est parfois aussi importante que la correction de densité d'états. Dans les matériaux où la courbure de Berry est fortement concentrée près de points où le gap est minimal, le moment orbital peut devenir grand et modifier de manière significative la position effective des bords de bande en champ magnétique [103, 119] (*cf.* figure 3.3).

Cas particulier des modèles à deux bandes. Dans les modèles à deux bandes de type Dirac, le lien entre moment magnétique orbital et courbure de Berry devient particulièrement simple. Considérons un Hamiltonien de la forme

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{3.39}$$

dont les énergies sont

$$\varepsilon_\pm(\mathbf{k}) = \pm|\mathbf{d}(\mathbf{k})|. \tag{3.40}$$

Comme il n'existe qu'une seule autre bande, la somme interbande dans l'équation (3.33) ne contient qu'un seul terme. En la comparant à l'expression interbande de la courbure de Berry, on obtient [2, 103]

$$\mathbf{m}_\pm^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k}) = -\frac{e}{\hbar} \varepsilon_\pm(\mathbf{k}) \boldsymbol{\Omega}_\pm(\mathbf{k}), \tag{3.41}$$

Cette relation montre que, dans un modèle à deux bandes, le moment orbital est directement contrôlé par la courbure de Berry et par l'énergie de la bande.

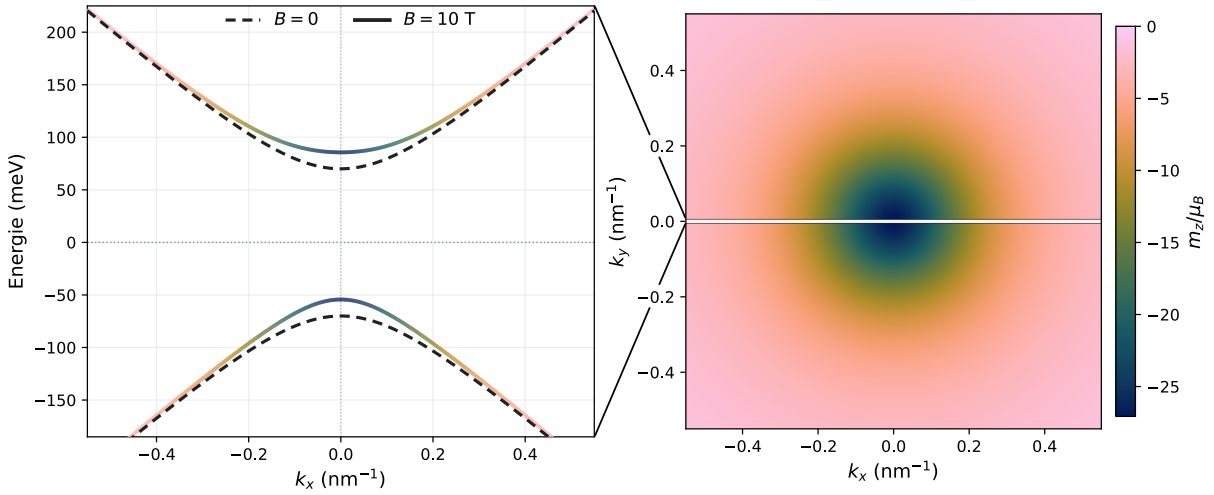

FIGURE 3.3 – Moment magnétique orbital d'un paquet d'ondes de Bloch. La structure interne du paquet peut produire une auto-rotation, qui se couple au champ magnétique et corrige l'énergie semi-classique de la bande selon $\tilde{\varepsilon}_\pm(\mathbf{k}, B) = \varepsilon_\pm(\mathbf{k}) - m_z^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k})B$. Ici $\mu_B = e\hbar/(2m_e)$ est le magnéton de Bohr, avec $e > 0$, soit $\mu_B \simeq 5.79 \times 10^{-2}\,\mathrm{meV/T}$.

Cette relation explique pourquoi les effets orbitaux sont particulièrement forts dans les systèmes de Dirac massifs [103]. Lorsque le gap est petit, la courbure de Berry est fortement concentrée près du point de Dirac, et le moment orbital l'est également. Le champ magnétique ne se contente alors pas de quantifier les orbites électroniques en niveaux de Landau : il corrige aussi l'énergie locale des bandes par le couplage $-\mathbf{m}_n \cdot \mathbf{B}$.

Dans les chapitres suivants, cette correction jouera un rôle conceptuel important. Dans un isolant de Chern, le champ magnétique modifie à la fois la mesure de l'espace des phases, à travers la courbure de Berry [109], et l'énergie semi-classique des bandes, à travers le moment magnétique orbital [2, 103]. Ces effets sont à l'origine de corrections de densité de charge qui n'existent pas dans une théorie fondée uniquement sur la dispersion énergétique. Plus généralement, le moment orbital intervient aussi dans la susceptibilité magnétique géométrique [119], dans l'effet magnétique gyrotrope des métaux non centrosymétriques [120] et dans la séparation entre courants de transport et courants d'aimantation [121].

3.5 . Une densité d'états modifiée par la géométrie

3.5.1 . Description symplectique de l'espace des phases

Dans la théorie semi-classique standard, chaque état occupe un volume élémentaire $(2\pi)^2$ [3] dans l'espace des phases $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$, en unités où l'on intègre sur $d^2\mathbf{k}$ [2]. Ainsi, la somme sur les états d'une bande est remplacée par

$$\sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \int \frac{d^2\mathbf{r}\, d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \tag{3.42}$$

Lorsque la dynamique est modifiée par des courbures de Berry, les variables $\mathbf{r}$ et $\mathbf{k}$ ne

3. Nous nous concentrons sur des systèmes bidimensionnels. Pour des systèmes de dimensions d, la forme plus général du facteur est $(2\pi)^d$.

forment plus une paire canonique au sens usuel. La mesure de l'espace des phases doit alors être modifiée de façon cohérente avec la structure *symplectique* du problème [109, 110].

On peut regrouper les coordonnées de l'espace des phases dans un vecteur de coordonnées généralisées $\boldsymbol{\xi} = (\mathbf{r}, \mathbf{k})$. Les équations du mouvement (3.30) peuvent alors s'écrire sous la forme compacte

$$\Gamma_{ij}\dot{\xi}_j = \partial_{\xi_i}\varepsilon, \tag{3.43}$$

où Γ est la matrice symplectique effective. Dans le cas canonique standard, Γ se réduit à la matrice antisymétrique usuelle qui encode les *crochets de Poisson* entre positions et vecteur d'onde. En présence de courbures de Berry et de champs magnétiques, Γ est différente.

La forme volume [4] naturelle sur l'espace des phases est proportionnelle à la racine du déterminant de cette matrice symplectique. Autrement dit, la mesure dans le cas général devient [109, 110]

$$dV = \sqrt{\det \Gamma}\, \frac{d^2\mathbf{r}\, d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \tag{3.44}$$

Cette expression peut être comprise comme la généralisation géométrique du volume élémentaire de l'espace des phases. Elle ne viole pas le *théorème de Liouville*, au contraire, elle l'exprime dans les bonnes coordonnées [110]. Le volume conservé par le flot hamiltonien n'est pas nécessairement le volume canonique naïf $d^2\mathbf{r}d^2\mathbf{k}$, mais le volume symplectique associé à la dynamique.

3.5.2 . Cas uniforme

Pour une bande uniforme en présence d'un champ magnétique, la matrice symplectique conduit au facteur simple [2, 109] que l'on retrouve dans les équations du mouvement semi-classiques

$$\sqrt{\det \Gamma} = 1 + \frac{e}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) \equiv D_n(\mathbf{k}). \tag{3.45}$$

Une somme "semi-classique" sur les états devient donc [109]

$$\sum_n \sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \sum_n \int \frac{d^2\mathbf{r}\, d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[1 + \frac{e}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})\right]. \tag{3.46}$$

En deux dimensions, pour un champ $\mathbf{B} = B_z\hat{\mathbf{z}}$, la densité d'états locale dans l'espace des vecteurs d'ondes vaut

$$\nu_n(\mathbf{k}, B_z) = \frac{1}{(2\pi)^2}\left[1 + \frac{e}{\hbar}B_z\Omega_{n,z}(\mathbf{k})\right]. \tag{3.47}$$

Cette correction est linéaire en champ magnétique et proportionnelle à la courbure de Berry [109]. Elle n'est pas quantifiée par un invariant global et peut s'annuler après intégration dans certaines bandes triviales, mais elle est particulièrement importante dans les systèmes de Dirac massifs, les isolants de Chern et les matériaux où les effets orbitaux sont forts [2, 103].

Cette modification de la densité d'états possède une interprétation intuitive. En présence d'une courbure de Berry, la dynamique dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'onde n'est plus indépendante. Un champ magnétique réel couple les coordonnées

4. Une forme volume généralise l'élément de volume et permet de définir l'intégration sur un espace.

spatiales, tandis que la courbure de Berry couple les coordonnées "réciproques". Leur produit scalaire modifie le volume élémentaire disponible dans l'espace des phases. Ainsi, la courbure de Berry agit comme un champ magnétique dans l'espace des vecteurs d'onde, et le facteur $\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}$ mesure le couplage entre ce champ effectif et le champ magnétique réel (*cf.* figure 3.4).

La densité électronique d'une bande s'écrit alors [2, 109]

$$n(\mathbf{r}) = \sum_n \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} D_n(\mathbf{k}) f\left(\tilde{\varepsilon}_n(\mathbf{k},\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r})\right), \tag{3.48}$$

où f est la fonction de Fermi-Dirac. Cette formule montre explicitement que la courbure de Berry peut modifier la densité de charge à potentiel chimique fixé, même lorsque la dispersion $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ est inchangée. Ce point sera central dans l'étude des réponses électrostatiques de systèmes topologiques.

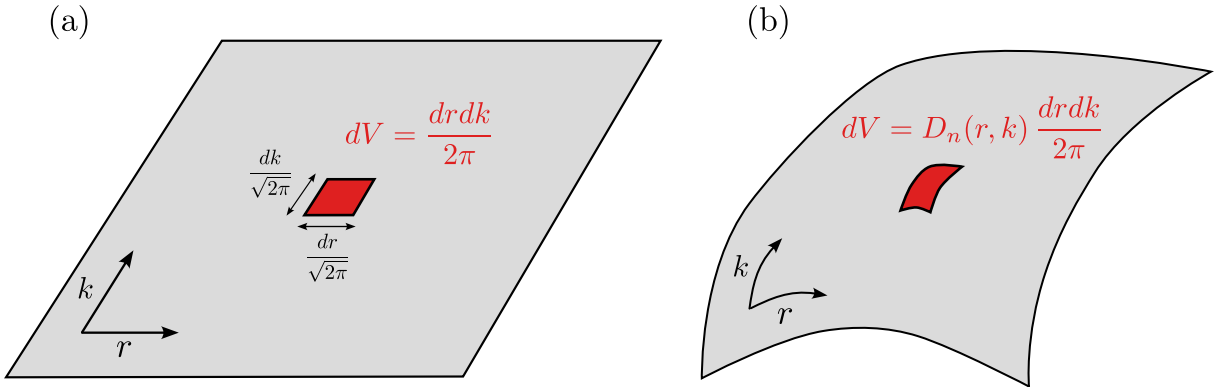

FIGURE 3.4 – Déformation de l'espace des phases induite par le champ magnétique et la courbure de Berry. Par simplicité d'illustration, on ne considère qu'une seul dimension. (a) Les coordonnées canoniques définissent une cellule élémentaire de volume $drdk/(2\pi)$. (b) Le passage aux coordonnées physiques, en présence d'un champ magnétique réel $\mathbf{B}$ et d'une courbure de Berry $\mathbf{\Omega}$, déforme cette cellule. Le volume effectif de l'espace des phases est alors multiplié par le facteur $D_n(r,k)$.

3.5.3 . Cas non uniforme et courbures mixtes

Dans un système non uniforme, la mesure de l'espace des phases reçoit aussi des contributions provenant des courbures mixtes et réelles [5, 110]. Pour un système bidimensionnel, la matrice symplectique peut être organisée par blocs selon les coordonnées $(\mathbf{r},\mathbf{k})$,

$$\Gamma = \begin{pmatrix} -\frac{e}{\hbar}B_{ij} + (\Omega_{rr})_{ij} & (\Omega_{rk})_{ij} - \delta_{ij} \\ (\Omega_{kr})_{ij} + \delta_{ij} & (\Omega_{kk})_{ij} \end{pmatrix}. \tag{3.49}$$

La densité d'états est donnée par $\sqrt{\det\Gamma}/(2\pi)^2$. À l'ordre linéaire en champ magnétique et en gradients spatiaux, on obtient typiquement [5, 110]

$$\nu(\mathbf{r},\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^2}\left[1 + \frac{e}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}_{kk} + \mathrm{Tr}(\Omega_{kr})\right]. \tag{3.50}$$

Le premier terme correctif est celui du cas uniforme. Le second provient de la géométrie mixte entre espace réel et espace des vecteurs d'onde. Il traduit le fait que le nombre d'états

disponibles dans une région de l'espace des phases peut être modifié par une variation spatiale lente de la base de Bloch.

Si l'on conserve également certains termes d'ordre supérieur en gradients, la structure complète contient des produits de courbures, par exemple des termes proportionnels à $\Omega_{kk}\Omega_{rr}$ ou à des combinaisons quadratiques de courbures mixtes. Dans une expansion de gradient contrôlée, ces termes sont généralement négligés lorsque les perturbations varient sur une longueur grande devant l'échelle microscopique du paquet d'ondes. Dans le cas d'une interface douce décrite par une masse de Dirac $M(x)$, la contribution linéaire en gradient est celle qu'il faut examiner en priorité.

Il est important de ne pas confondre deux effets distincts. La modification uniforme $1 + (e/\hbar)\mathbf{B} \cdot \mathbf{\Omega}$ existe même dans un cristal parfaitement homogène, dès qu'un champ magnétique externe est appliqué. Les corrections mixtes, elles, sont liées à la variation spatiale de la base locale. Dans de nombreux calculs de transport ou de densité de charge en volume, les corrections mixtes peuvent être négligées au premier niveau d'approximation. En revanche, elles fournissent un cadre conceptuel utile pour discuter les interfaces, les textures et les jonctions topologiques.

3.6 . Transport électronique et effet Hall anomal

L'effet Hall ordinaire a été mis en évidence par Hall à la fin du XIXe siècle [41]. Peu après, l'étude du nickel et du cobalt a révélé une réponse transverse ne se réduisant pas au seul champ magnétique appliqué [122]. La compréhension moderne de cet effet Hall anomal distingue une contribution intrinsèque, historiquement associée au mécanisme de Karplus–Luttinger [42], et des contributions extrinsèques liées à la diffusion, notamment le *skew scattering* introduit par Smit [123]. La revue de Nagaosa *et al.* fournit une synthèse moderne de cette classification [43].

3.6.1 . Équation de Boltzmann semi-classique

La dynamique d'un paquet d'ondes permet de construire une théorie cinétique pour la distribution électronique $f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ dans chaque bande [2, 105]. En présence de collisions, cette distribution satisfait l'équation de Boltzmann

$$\partial_t f_n + \dot{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}} f_n + \dot{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} f_n = \mathcal{I}_{\mathrm{coll}}[f_n], \tag{3.51}$$

où les vitesses $\dot{\mathbf{r}}$ et $\dot{\mathbf{k}}$ sont données par les équations du mouvement corrigées par la géométrie des états de Bloch [2]. Dans l'approximation du temps de relaxation, on remplace souvent le terme de collision par $\mathcal{I}_{\mathrm{coll}} = -(f_n - f_n^{(0)})/\tau$, où $f_n^{(0)}$ est la distribution d'équilibre locale et τ un temps de relaxation [105]. Lorsque les cohérences interbandes, les effets quantiques des collisions ou les réponses rapides deviennent essentiels, une formulation cinétique quantique plus générale est nécessaire [124].

Le courant électrique associé aux électrons de Bloch s'écrit [118, 121]

$$\mathbf{j} = -e \sum_n \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} D_n(\mathbf{k}) \dot{\mathbf{r}}_n f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{M}, \tag{3.52}$$

où $\mathbf{M}$ est l'aimantation orbitale. Le terme $\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{M}$ correspond à un courant d'aimantation local qui ne contribue pas toujours au courant de transport mesuré entre contacts, mais qui

est nécessaire pour écrire une densité de courant locale cohérente à l'équilibre [118, 121]. Dans un système uniforme, le courant de transport est essentiellement obtenu en intégrant la vitesse semi-classique pondérée par la distribution.

Dans la réponse linéaire à un champ électrique faible, il est utile de séparer deux contributions. La première provient de la correction hors équilibre δf_n, contrôlée par les collisions et le temps de relaxation. Elle donne notamment la conductivité longitudinale de Drude et l'effet Hall ordinaire. La seconde provient de la vitesse anomale évaluée avec la distribution d'équilibre $f_n^{(0)}$. Cette contribution ne nécessite pas de déformation de la distribution et existe donc même dans la limite propre. Elle est dite intrinsèque, car elle est déterminée par la géométrie des états occupés [42, 43, 125].

3.6.2 . Courant anomal et conductivité de Hall

À champ magnétique nul et au premier ordre en champ électrique, la vitesse anomale est [2, 5]

$$\dot{\mathbf{r}}_{\text{anom}} = \frac{e}{\hbar}\mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}). \tag{3.53}$$

En l'insérant dans l'expression du courant, on obtient le courant anomal intrinsèque [42, 43] pour un système homogène [5]

$$\mathbf{j}_{\text{anom}} = -\frac{e^2}{\hbar}\sum_n \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} f_n^{(0)}(\mathbf{k})\, \mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}). \tag{3.54}$$

Pour un système bidimensionnel avec $\boldsymbol{\Omega}_n = \Omega_{n,z}\hat{\mathbf{z}}$, cette expression donne une conductivité Hall intrinsèque [43, 80]

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar}\sum_n \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} f_n^{(0)}(\mathbf{k})\Omega_{n,z}(\mathbf{k}). \tag{3.55}$$

La conductivité Hall intrinsèque est une intégrale de la courbure de Berry pondérée par les états occupés (*cf.* figure 3.5).

Dans un métal, seuls les états occupés jusqu'au niveau de Fermi contribuent. La conductivité Hall intrinsèque n'est alors pas quantifiée en général, mais elle peut être reformulée comme une propriété de la surface de Fermi [80] et reste fortement influencée par les régions où la courbure de Berry est grande. Ces régions se situent souvent près de points de Dirac ou de nœuds de Weyl [43]. Dans un isolant, en revanche, si le potentiel chimique est dans le gap et qu'une bande entière est remplie, l'intégrale porte sur toute la zone de Brillouin.

La contribution intrinsèque ne constitue qu'une partie de l'effet Hall anomal dans un métal réel. Le *skew scattering* correspond à une asymétrie de la probabilité de diffusion [123], tandis que le *side jump* peut être décrit par un décalage de coordonnée associé à chaque collision [126]. La séparation cohérente de ces mécanismes et de leurs lois d'échelle est discutée dans les théories semi-classiques modernes de l'effet Hall anomal [43, 125].

5. À noter que dans le cas d'un système inhomogène, $e\mathbf{E} = -e\boldsymbol{\nabla}\phi$ est remplacé par le gradient du potentiel électrochimique $\boldsymbol{\nabla}(\mu - e\phi)$.

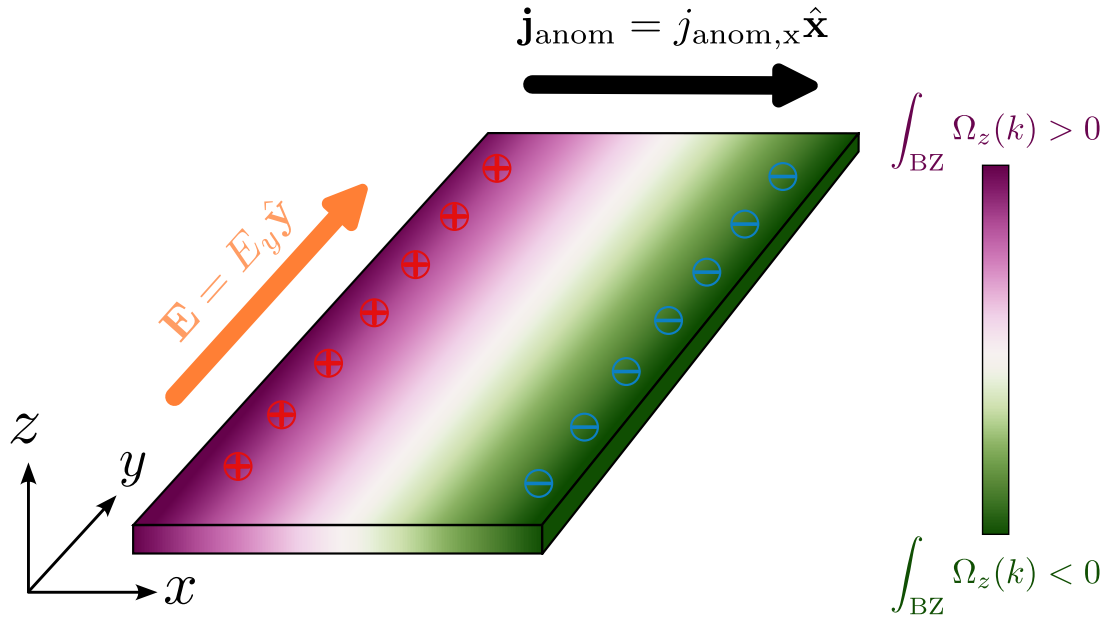

FIGURE 3.5 – Interprétation semi-classique de l'effet Hall anomal intrinsèque. La vitesse anomale induite par la courbure de Berry donne un courant transverse proportionnel à l'intégrale de la courbure sur les états occupés. Lorsque toute une bande isolée est remplie, cette intégrale est quantifiée par le nombre de Chern.

Ouverture vers les réponses non linéaires. Au-delà de la réponse linéaire, la géométrie de bande peut produire un effet Hall non linéaire dans des systèmes invariants par renversement du temps lorsque le dipôle de courbure de Berry est non nul [75, 127]. Cette réponse a été observée expérimentalement dans des matériaux bidimensionnels [128, 129] et fait l'objet de revues récentes [130]. D'autres contributions intrinsèques peuvent impliquer la métrique quantique [131] ou, plus généralement, la géométrie quantique hors équilibre [132, 133]. Il faut alors distinguer avec soin les composantes Hall et longitudinales d'une réponse non linéaire [116, 134].

Les réponses optiques fournissent un autre terrain d'application de cette géométrie. Des formulations semi-classiques ont été développées pour les réponses magnéto-optiques non linéaires des semi-métaux de Dirac et de Weyl [135], tandis que des photocourants sensibles à la phase de Berry [136] et un effet photogalvanique circulaire quantifié dans certains semi-métaux de Weyl [137] illustrent la diversité des phénomènes possibles. Une approche diagrammatique permet de compléter et de contrôler ces descriptions dans le régime optique [138]. Ces développements restent ici une mise en perspective : leur traitement détaillé dépasse le cadre de ce chapitre.

Réponses de type Magnus. Dans un dispositif spatialement inhomogène, un potentiel interne peut combiner la vitesse anomale et la propagation balistique pour produire un effet Hall Magnus [139]. Des extensions topologiques ont été étudiées en deux et trois dimensions [140], ainsi que leurs analogues Nernst et Hall thermique [141]. Ces effets se distinguent de l'effet Hall anomal homogène discuté ci-dessus et prépareront la généralisation des équations macroscopiques de transport au chapitre suivant.

3.6.3 . Lien avec le nombre de Chern

Pour une bande isolée n complètement occupée en deux dimensions, le nombre de Chern est défini par [3, 81]

$$\mathcal{C}_n = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathrm{BZ}} d^2\mathbf{k}\, \Omega_{n,z}(\mathbf{k}). \tag{3.56}$$

En insérant cette définition dans (3.55), on obtient [3, 95]

$$\sigma_{xy} = -\mathcal{C}\frac{e^2}{h}, \tag{3.57}$$

où $\mathcal{C} = \sum_{n\in\mathrm{occ}} \mathcal{C}_n$ est le nombre de Chern total des bandes occupées. Cette relation entre invariant et conductivité quantifiée est le résultat central du travail de Thouless *et al.* [3] et de ses formulations topologiques ultérieures [95]. Elle montre que la conductivité Hall d'un isolant de Chern est robuste, car elle est fixée par un invariant entier qui ne peut changer que si le gap se ferme [6].

L'équation (3.57) établit un lien direct avec la correspondance *bulk-edge* discutée précédemment (*cf.* section 2.6.4). Du point de vue de volume, la réponse Hall provient de l'intégrale de la courbure de Berry dans la zone de Brillouin. Du point de vue d'un échantillon fini, elle peut être comprise comme le transport porté par les modes de bord chiraux. Les deux descriptions sont complémentaires. Le formalisme semi-classique met l'accent sur la réponse de volume et sur la géométrie locale des états de Bloch, tandis que l'image des états de bord rend explicite le transport unidirectionnel aux frontières.

La physique semi-classique moderne est donc particulièrement adaptée pour faire le lien entre la topologie de bande et les réponses électroniques mesurables. Elle permet de comprendre pourquoi un champ électrique peut produire un courant transverse sans champ magnétique externe, pourquoi ce courant devient quantifié dans un isolant de Chern, et pourquoi les corrections géométriques doivent être prises en compte dans une description de transport ou d'électrostatique des matériaux topologiques.

3.7 . Champ magnétique et niveaux de Landau

3.7.1 . Orbites cyclotrons et règle d'Onsager

En champ magnétique uniforme, la dynamique semi-classique d'un électron dans une bande conduit à des orbites cyclotrons [2, 107, 143]. En l'absence de champ électrique, l'énergie est conservée et le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ évolue le long d'une courbe d'énergie constante dans l'espace des vecteurs d'onde. Pour un système bidimensionnel, cette courbe est définie par

$$C(E) = \{\mathbf{k} \,|\, \varepsilon_n(\mathbf{k}) = E\}\,. \tag{3.58}$$

L'aire encerclée par cette orbite dans l'espace des vecteurs d'onde est notée

$$A(E) = \iint_{S(E)} d^2\mathbf{k}, \tag{3.59}$$

6. Les interactions électroniques ne détruisent pas nécessairement cette quantification : dans un isolant corrélé gappé, si le fondamental est unique et que les corrélations sont à courte portée alors la conductivité de Hall est égale au nombre de Chern à plusieurs corps [95]. Elle peut néanmoins devenir non quantifiée dans certains régimes où les corrélations sont à portée infinie, comme l'ont montré Desort *et al.* pour des modèles topologiques avec interaction de type Hatsugai-Kohmoto [142]

où $S(E)$ est la surface délimitée par $C(E)$.

La quantification semi-classique de Bohr–Sommerfeld impose que l'action accumulée sur une orbite fermée soit un multiple entier de $2\pi\hbar$, corrigé par une phase de Maslov. Dans un cristal, sa traduction en aire d'orbite est due à Onsager [106]. Dans un cristal, cette condition se traduit par la règle d'Onsager

$$A(E_j) = \frac{2\pi eB}{\hbar}\left(j + \frac{1}{2}\right), \qquad j = 0, 1, 2, \ldots, \tag{3.60}$$

pour une bande parabolique simple sans phase géométrique. Cette relation exprime le fait que les niveaux de Landau correspondent à une quantification des aires d'orbites cyclotrons dans l'espace des vecteurs d'onde.

Au sein d'une bande d'énergie, le paquet d'ondes accumule également une phase de Berry le long de l'orbite fermée $C(E)$ [88, 144],

$$\Gamma_B(E) = \oint_{C(E)} \boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k}. \tag{3.61}$$

Par le théorème de Stokes, cette phase peut être exprimée comme le flux de la courbure de Berry à travers la surface $S(E)$,

$$\Gamma_B(E) = \iint_{S(E)} \Omega_{n,z}(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k}. \tag{3.62}$$

La règle d'Onsager corrigée par la phase de Berry devient alors [88, 144]

$$A(E_j) = \frac{2\pi eB}{\hbar}\left(j + \frac{1}{2} - \frac{\Gamma_B(E_j)}{2\pi}\right). \tag{3.63}$$

Le terme $1/2$ est la contribution de Maslov associée aux points de retournement de l'orbite semi-classique, tandis que le terme $-\Gamma_B/2\pi$ est purement géométrique.

Cette correction est particulièrement importante dans les systèmes de Dirac [88]. Pour un cône de Dirac sans masse, la phase de Berry vaut π, ce qui annule le décalage $1/2$ et produit une séquence de niveaux caractéristique. Pour un fermion de Dirac massif, la phase de Berry dépend de l'énergie de l'orbite et s'interpole entre la limite parabolique et la limite de Dirac sans masse. Ainsi, la géométrie de la bande modifie directement la quantification des orbites cyclotrons.

3.7.2 . Correction du moment orbital à la quantification

La phase de Berry n'est pas la seule correction géométrique à la quantification semi-classique. En champ magnétique, l'énergie pertinente de l'orbite est l'énergie corrigée par le moment magnétique orbital [38, 108],

$$\tilde{\varepsilon}_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) - \mathbf{m}_n^{\mathrm{orb}}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{B}. \tag{3.64}$$

La condition d'Onsager doit donc être appliquée aux contours de $\tilde{\varepsilon}_n$, et non seulement à ceux de ε_n, lorsque l'on travaille au premier ordre en champ magnétique [38, 108]. Cette correction est essentielle pour reproduire correctement les niveaux de Landau de modèles de Dirac massifs dans la limite des grands indices.

Pour un Hamiltonien de Dirac bidimensionnel

$$\mathcal{H}_D(\mathbf{k}) = \hbar v(k_x\sigma_x + k_y\sigma_y) + \Delta\sigma_z, \tag{3.65}$$

les énergies à champ magnétique nul sont

$$\varepsilon_\pm(k) = \pm\sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 v^2 k^2}. \tag{3.66}$$

La phase de Berry associée à une orbite de rayon k dans la bande de conduction peut s'écrire [88]

$$\Gamma_B(E) = \pi\left(1 - \frac{\Delta}{E}\right), \tag{3.67}$$

où $E > 0$ est l'énergie de l'orbite. Cette expression montre que la phase de Berry vaut π dans la limite sans masse $\Delta = 0$, tandis qu'elle devient petite près du bord de bande lorsque $E \simeq \Delta > 0$.

La quantification semi-classique des orbites cyclotron, lorsqu'elle inclut à la fois la phase de Berry et la correction due au moment magnétique orbital du paquet d'ondes, reproduit les niveaux de Landau relativistes pour $j \geq 1$ [38, 108],

$$E_{j,\pm} = \pm\sqrt{\Delta^2 + 2j\frac{\hbar^2 v^2}{\ell_B^2}}, \qquad \ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{e|B|}}. \tag{3.68}$$

Le niveau $j = 0$ est particulier. Il n'est pas simplement obtenu comme une orbite semi-classique ordinaire, mais reflète la structure chirale du Hamiltonien de Dirac [38]. Sa position dépend du signe de la masse, du signe du champ magnétique et de la convention de chiralité du cône. C'est ce niveau anomal qui porte l'asymétrie spectrale caractéristique des fermions de Dirac massifs en champ magnétique.

3.7.3 . Dégénérescence des niveaux et densité de charge

Chaque niveau de Landau possède une dégénérescence par unité d'aire [2, 38]

$$g_B = \frac{e|B|}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2\pi\ell_B^2}. \tag{3.69}$$

Ainsi, la densité électronique d'une bande quantifiée en niveaux de Landau pour un système en deux dimensions peut être écrite sous la forme

$$n(B,\mu,T) = \frac{e|B|}{2\pi\hbar}\sum_j f(E_j - \mu), \tag{3.70}$$

où $f(E) = 1/(e^{\beta E} + 1)$ est la fonction de Fermi-Dirac. Dans la limite de champ faible, la somme sur les niveaux de Landau peut être reliée à l'intégrale semi-classique [7] avec le facteur $D_n = 1 + (e/\hbar)\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}_n$ [38, 109].

Cette correspondance entre niveaux de Landau et densité d'états corrigée est particulièrement utile pour les matériaux topologiques. À champ faible, la courbure de Berry modifie continûment la densité d'états disponible. À champ plus fort, les niveaux de Landau deviennent résolus et l'asymétrie du niveau anomal peut dominer la densité de charge.

7. Ce lien n'est pas évident et constitue encore un sujet de discussion actuel.

Ces deux descriptions ne sont pas contradictoires, elles correspondent à deux régimes du même problème physique.

Dans un isolant de Chern, le lien entre géométrie de bande, champ magnétique et densité de charge devient encore plus profond. L'intégrale de la courbure de Berry sur les bandes occupées fixe le nombre de Chern, tandis que les niveaux de Landau anomaux reflètent l'asymétrie spectrale associée aux cônes de Dirac massifs qui composent le modèle effectif. Dans un modèle régularisé sur réseau, la somme des contributions locales doit être compatible avec l'invariant topologique global. C'est cette compatibilité qui permettra, dans le chapitre 6, de relier une différence de nombre de Chern à une différence de densité effective et à un potentiel électrostatique interne.

3.8 . Conclusion du chapitre

Le formalisme développé dans ce chapitre peut être résumé autour de trois idées. Premièrement, un électron de Bloch dans une bande isolée peut être décrit par un paquet d'ondes semi-classique, mais ce paquet d'ondes est impacté par la géométrie de l'état périodique $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ [2,5]. Deuxièmement, cette géométrie modifie les équations du mouvement à travers des courbures de Berry, qui agissent comme des champs effectifs dans l'espace des vecteurs d'onde ou plus généralement dans l'espace des phases. Troisièmement, cette géométrie modifie le comptage des états, l'énergie en champ magnétique et les réponses de transport.

Dans le cas uniforme, les deux résultats les plus importants sont la vitesse anomale

$$\mathbf{v}_{\text{anom}} = \frac{e}{\hbar}\mathbf{E} \times \mathbf{\Omega}_n \tag{3.71}$$

et le facteur de densité d'états

$$D_n = 1 + \frac{e}{\hbar}\mathbf{B} \cdot \mathbf{\Omega}_n. \tag{3.72}$$

La première relation donne une interprétation dynamique de l'effet Hall anomal intrinsèque [2, 43]. La seconde montre que la courbure de Berry peut modifier la densité de charge en champ magnétique [109]. Ensemble, elles indiquent que la topologie des bandes ne se manifeste pas seulement par des états de bord ou des invariants globaux, mais aussi par des corrections locales aux équations du mouvement et aux grandeurs thermodynamiques.

Le moment magnétique orbital complète cette description. Il corrige l'énergie de bande en champ magnétique et est lui aussi contrôlé par la géométrie des états de Bloch [2, 108]. Dans les modèles de Dirac massifs, la courbure de Berry et le moment orbital sont fortement concentrés près du gap [103]. Par conséquent, les réponses semi-classiques sont particulièrement sensibles à l'inversion de bandes, *i.e.* au mécanisme même qui permet de changer le nombre de Chern.

Le transport Hall intrinsèque illustre le lien direct entre géométrie locale et topologie globale. Pour une bande partiellement occupée, la réponse dépend de l'intégrale de la courbure de Berry sur les états remplis. Pour une bande complètement occupée dans un isolant, cette intégrale devient le nombre de Chern et la conductivité Hall est quantifiée [3, 95].

Enfin, la quantification semi-classique en champ magnétique montre que la phase de Berry et le moment magnétique orbital modifient la règle d'Onsager et la structure des niveaux de Landau [38,88,106]. Dans les systèmes de Dirac, le niveau anomal et l'asymétrie spectrale associée constituent les ingrédients physiques des effets électrostatiques étudiés dans le chapitre 6. Le champ magnétique ne se contente pas de créer des niveaux discrets : il révèle aussi la structure géométrique et les propriétés topologiques de la bande.

Ce chapitre servira de base conceptuelle pour la suite. Dans les systèmes topologiques de basse dimension, les corrections semi-classiques ne sont pas de petites subtilités formelles. Elles déterminent des courants transverses, des densités de charge, des moments orbitaux et des réponses électrostatiques qui ne peuvent pas être déduits de la dispersion seule. C'est précisément cette idée qui sera exploitée dans les chapitres suivants pour analyser le transport dans des interconnecteurs topologiques et l'électrostatique de jonctions entre isolants de Chern.

Chapitre 4

Équations de dérive-diffusion topologiques

Résumé

Ce chapitre généralise les équations de van Roosbroeck aux matériaux bidimensionnels non uniformes possédant une géométrie de bande non triviale. Après avoir rappelé les équations classiques et le rôle des champs quasi-électriques, nous étudions les modifications de la dynamique, de la densité d'états et des courants induites par les courbures de Berry. À champ magnétique nul et au premier ordre, les contributions explicites des courbures mixtes s'annulent dans le courant de transport grâce à une identité de Bianchi. Il subsiste un courant Hall anomal gouverné par la force électrochimique complète, qui s'annule à l'équilibre. Aux ordres supérieurs, une distribution hors équilibre peut produire une réponse transverse de type Hall Magnus diffusif. En présence d'un champ magnétique faible, la courbure de Berry et le moment orbital modifient l'équation d'état et, lorsque la densité ou la neutralité est imposée, déplacent le potentiel chimique et le champ interne. Les équations de continuité et de Poisson conservent leur forme, tandis que les champs quasi-électriques et les coefficients de transport sont renormalisés par la géométrie de bande.

Sommaire

4.1 Introduction et problématique physique 70
4.2 Équations de van Roosbroeck conventionnelles 71
4.3 Système non uniforme à champ magnétique nul 74
4.4 Ordres supérieurs et effet Hall Magnus diffusif 79
4.5 Système non uniforme à champ magnétique non nul 82
4.6 Système final de van Roosbroeck généralisé 87
4.7 Conclusion du chapitre 88

4.1 . Introduction et problématique physique

Les chapitres précédents ont montré que la dynamique d'un électron dans un cristal n'est pas entièrement déterminée par la dispersion énergétique. La géométrie des états de Bloch, encodée notamment dans les différentes courbures de Berry, intervient dans les équations du mouvement du paquet d'ondes, dans la mesure de l'espace des phases et dans les courants de transport [2, 5, 109]. Ces résultats sont formulés à l'échelle microscopique d'une bande électronique. Pour décrire un dispositif, il faut cependant les traduire en équations portant sur des grandeurs macroscopiques : densités d'électrons et de trous, courants, taux de génération-recombinaison et potentiel électrostatique.

Dans les semi-conducteurs ordinaires, cette description est fournie par les équations de van Roosbroeck [6]. Elles réunissent les équations de continuité, les lois de dérive-diffusion et l'équation de Poisson dans un système auto-cohérent [33, 34]. Leur intérêt tient à leur caractère intermédiaire. Elles conservent suffisamment d'information microscopique pour distinguer les électrons des trous, les mobilités, les bords de bande et les mécanismes de recombinaison, tout en restant applicables à l'échelle d'un dispositif.

Les variations spatiales de structure de bande jouent un rôle central dans cette théorie. Dans une hétérojonction, une variation du bord de bande exerce sur les porteurs une force qui ne se réduit pas au champ électrostatique. Elle est regroupée avec celui-ci dans un champ dit *quasi-électrique* [33, 35]. Kroemer a placé cette idée au centre de son discours Nobel consacré aux hétérostructures : l'ingénierie des décalages de bandes permet de guider différemment les électrons et les trous, et constitue ainsi un degré de liberté propre aux dispositifs semi-conducteurs [145].

La question étudiée dans ce chapitre est la suivante : comment la géométrie et la topologie de bande modifient-elles cette structure de van Roosbroeck lorsque le matériau est lui-même non uniforme ? Cette question prolonge l'extension de ces équations aux semi-métaux de Weyl [7], mais elle sera abordée ici pour un système bidimensionnel, avec en ligne de mire les isolants de Chern et leurs jonctions.

Deux régimes doivent être distingués. À champ magnétique nul, les courbures mixtes entre espace réel et espace des vecteurs d'onde interviennent dans la dynamique d'une bande localement non uniforme. Nous montrerons toutefois qu'au premier ordre en champ électrique et en gradients, elles se recombinent dans le courant de transport. Le résultat est un courant Hall anomal dans lequel le champ électrique est remplacé par la force électrochimique complète. À l'équilibre, cette structure restitue la condition électrochimique ordinaire qui fixe le champ interne d'une jonction. Les conséquences géométriques supplémentaires apparaissent aux ordres supérieurs, par exemple dans l'effet Hall Magnus diffusif. La même condition d'équilibre servira ensuite de point de départ au régime magnétique.

À champ magnétique non nul, une seconde modification apparaît. La courbure de Berry change le nombre d'états disponibles, tandis que le moment magnétique orbital déplace leur énergie [2, 103, 109]. Si la densité ou la neutralité est imposée, le potentiel chimique doit s'ajuster. Son gradient entre alors dans la loi de courant et modifie la condition d'équilibre. Ce mécanisme fournira un lien direct avec le potentiel interne des jonctions d'isolants de Chern étudié au chapitre 6.

4.2 . Équations de van Roosbroeck conventionnelles

4.2.1 . Équations de continuité, dérive-diffusion et Poisson

Nous considérons un semi-conducteur décrit par une densité électronique $n(\mathbf{r},t)$ dans la bande de conduction et une densité de trous $p(\mathbf{r},t)$ dans la bande de valence [6, 32]. La charge élémentaire est notée $e>0$, de sorte que la charge de l'électron vaut $-e$. Les quantités $\mathbf{J}^n$ et $\mathbf{J}^p$ désignent des courants électriques conventionnels et non des flux de particules.

Les équations de continuité s'écrivent [6, 33]

$$\frac{\partial n}{\partial t}-\frac{1}{e}\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}^n=G_n-R_n, \tag{4.1a}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}+\frac{1}{e}\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{J}^p=G_p-R_p. \tag{4.1b}$$

Les termes $G_{n,p}$ et $R_{n,p}$ décrivent respectivement la génération et la recombinaison des porteurs. Dans un dispositif réel, ils peuvent inclure des mécanismes radiatifs, Auger ou assistés par des défauts [32, 36]. La courbure de Berry pourrait également influencer ces taux, notamment en modifiant les états électroniques et les éléments de matrice associés aux transitions. Une description détaillée de ces corrections dépasse toutefois le cadre de cette thèse. Dans la suite, les termes de génération et de recombinaison seront donc conservés sous leur forme usuelle.

Dans un matériau homogène et isotrope, les lois classiques de dérive-diffusion sont [33, 35, 146]

$$J_i^n=en\mu_nE_i+e\mathcal{D}_n\partial_i n, \tag{4.2a}$$

$$J_i^p=ep\mu_pE_i-e\mathcal{D}_p\partial_i p. \tag{4.2b}$$

Le premier terme de chaque courant est un courant de dérive (μ_n et μ_p étant les mobilités des électrons et des trous respectivement), tandis que le second est un courant de diffusion, comme l'illustre la figure 4.1. Nous notons $\mathcal{D}_{n,p}$ les coefficients de diffusion des électrons et des trous afin de ne pas les confondre avec le facteur de mesure de l'espace des phases introduit plus loin.

Dans le régime non dégénéré, la mobilité et le coefficient de diffusion sont reliés par la relation d'Einstein [35, 146]

$$\mathcal{D}_{n,p}=\frac{1}{\beta e}\mu_{n,p}, \tag{4.3}$$

où $\beta=(k_{\mathrm{B}}T)^{-1}$. Cette relation traduit l'origine commune des contributions de dérive et de diffusion dans le régime d'équilibre local.

Le système d'équations de van Roosbroeck est fermé par l'équation de Poisson [32, 33],

$$-\boldsymbol{\nabla}\cdot[\epsilon(\mathbf{r})\boldsymbol{\nabla}\phi(\mathbf{r})]=\rho(\mathbf{r}),\qquad \mathbf{E}=-\boldsymbol{\nabla}\phi, \tag{4.4}$$

avec

$$\rho(\mathbf{r})=-e\left[n(\mathbf{r})-p(\mathbf{r})-N_D^+(\mathbf{r})+N_A^-(\mathbf{r})\right], \tag{4.5}$$

où $N_A^-(\mathbf{r})$ et $N_D^+(\mathbf{r})$ désignent respectivement les densités de dopants accepteurs ionisés, chargés négativement après avoir capté un électron, et de dopants donneurs ionisés, chargés positivement après avoir cédé un électron.

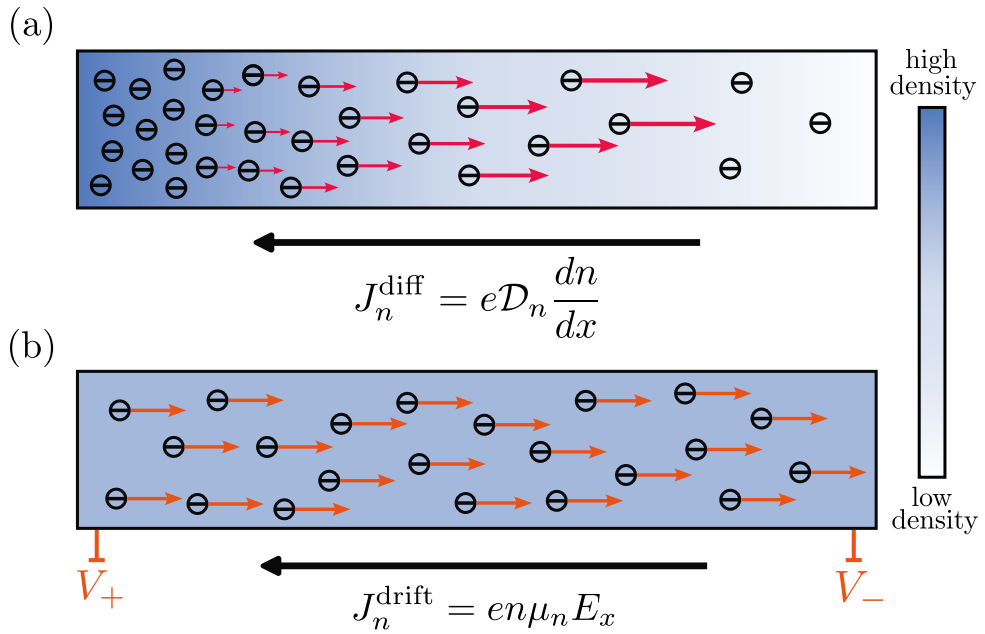

FIGURE 4.1 – Schéma des contributions de diffusion et de dérive au transport électronique. (a) Courant de diffusion induit par un gradient spatial de densité électronique. Les électrons diffusent de la région de forte densité vers la région de faible densité. (b) Courant de dérive induit par un champ électrique longitudinal créé par une différence de potentiel entre les contacts.

Les densités déterminent donc le potentiel par l'équation de Poisson, tandis que le potentiel détermine le champ qui entre dans les courants. Cette boucle constitue le caractère auto-cohérent des équations de van Roosbroeck. Sa résolution numérique est historiquement associée au schéma de Gummel [147], et sa structure mathématique a été étudiée de manière systématique [34, 148, 149].

4.2.2 . Champs quasi-électriques dans un semi-conducteur non uniforme

Les équations (4.2) supposent implicitement une structure de bande uniforme. Cette hypothèse n'est plus valable dans une hétérostructure, où les bords de bande et les densités effectives d'états dépendent de la position. Notons $E_c^0(\mathbf{r})$ et $E_v^0(\mathbf{r})$ les bords de bande en l'absence de l'énergie électrostatique. Les énergies complètes sont

$$E_c = E_c^0 - e\phi, \qquad E_v = E_v^0 - e\phi, \tag{4.6}$$

avec $e > 0$ et $\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi$.

La non-uniformité du matériau peut être décrite à l'aide de deux grandeurs locales. La première est la densité intrinsèque

$$n_{\text{i}} = \sqrt{N_c N_v}\exp\left(-\frac{\beta E_g}{2}\right), \qquad E_g = E_c^0 - E_v^0, \tag{4.7}$$

où N_c et N_v sont les densités effectives d'états dans les bandes de conduction et de valence, respectivement. Elles dépendent notamment de la température et de la structure de bande locale du matériau. La seconde est le potentiel chimique d'un semi-conducteur intrinsèque, défini par

$$E_{\text{int}}^0 = \frac{E_c^0 + E_v^0}{2} + \frac{1}{2\beta}\ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right). \tag{4.8}$$

Ces deux quantités vérifient

$$n_{\mathrm{i}} = N_c \exp\left[-\beta(E_c^0 - E_{\mathrm{int}}^0)\right] = N_v \exp\left[-\beta(E_{\mathrm{int}}^0 - E_v^0)\right]. \tag{4.9}$$

Introduisons également le niveau intrinsèque complet

$$E_{\mathrm{int}} = E_{\mathrm{int}}^0 - e\phi. \tag{4.10}$$

Afin d'éviter toute confusion avec les mobilités μ_n et μ_p, nous notons F_n et F_p les quasi-niveaux de Fermi. Dans la limite de Maxwell-Boltzmann ($E_c^0 - E_{\mathrm{int}}^0 \gg k_{\mathrm{B}}T$ et $E_{\mathrm{int}}^0 - E_v^0 \gg k_{\mathrm{B}}T$), les densités de porteurs s'écrivent alors

$$n = n_{\mathrm{i}} \exp\left[-\beta(E_{\mathrm{int}} - F_n)\right], \tag{4.11a}$$
$$p = n_{\mathrm{i}} \exp\left[-\beta(F_p - E_{\mathrm{int}})\right]. \tag{4.11b}$$

Les variations de E_{int}^0 décrivent le déplacement spatial commun de la structure de bande, tandis que celles de n_{i} rendent compte des variations du gap et des densités effectives d'états. Ces contributions sont regroupées dans les champs quasi-électriques [33,35],

$$\mathcal{E}_{n,i}^{(0)} = E_i + \frac{1}{e}\partial_i E_{\mathrm{int}}^0 - \frac{1}{\beta e}\partial_i \ln\left(\frac{n_{\mathrm{i}}}{n_{\mathrm{ref}}}\right), \tag{4.12a}$$
$$\mathcal{E}_{p,i}^{(0)} = E_i + \frac{1}{e}\partial_i E_{\mathrm{int}}^0 + \frac{1}{\beta e}\partial_i \ln\left(\frac{n_{\mathrm{i}}}{n_{\mathrm{ref}}}\right), \tag{4.12b}$$

où n_{ref} est une densité de référence uniforme. Les courants de dérive-diffusion deviennent

$$J_i^n = en\mu_n \mathcal{E}_{n,i}^{(0)} + e\mathcal{D}_n \partial_i n, \tag{4.13a}$$
$$J_i^p = ep\mu_p \mathcal{E}_{p,i}^{(0)} - e\mathcal{D}_p \partial_i p. \tag{4.13b}$$

Les gradients des potentiels électrochimiques sont déjà contenus dans les termes diffusifs. En effet, en utilisant les équations (4.11) et les relations d'Einstein (4.3) on obtient directement

$$J_i^n = n\mu_n \partial_i F_n, \tag{4.14a}$$
$$J_i^p = p\mu_p \partial_i F_p. \tag{4.14b}$$

Les gradients de F_n et F_p ne doivent donc pas être ajoutés une seconde fois aux champs (4.12). À l'équilibre, $F_n = F_p = F$ est uniforme et les deux courants s'annulent, même lorsque E_{int}^0, n_{i} et les densités de porteurs varient dans l'espace.

Dans le cas particulier d'un modèle possédant une symétrie électron-trou,

$$E_c^0 = -E_v^0, \qquad N_c = N_v, \tag{4.15}$$

le zéro d'énergie peut être choisi de sorte que $E_{\mathrm{int}}^0 = 0$. Les champs se réduisent alors à

$$\mathcal{E}_{n,i}^{(0)} = E_i - \frac{1}{\beta e}\partial_i \ln\left(\frac{n_{\mathrm{i}}}{n_{\mathrm{ref}}}\right), \tag{4.16a}$$
$$\mathcal{E}_{p,i}^{(0)} = E_i + \frac{1}{\beta e}\partial_i \ln\left(\frac{n_{\mathrm{i}}}{n_{\mathrm{ref}}}\right). \tag{4.16b}$$

Les champs quasi-électriques décrivent ainsi l'action d'une structure de bande non uniforme sur les électrons et les trous. Ils peuvent être non nuls en l'absence de champ électrostatique et ne constituent pas des champs électromagnétiques au sens de Maxwell. Ils exercent néanmoins sur les porteurs une force effective analogue à celle produite par un champ électrique. La question centrale de ce chapitre est alors de déterminer si la géométrie de bande introduit d'autres forces effectives dans les équations de van Roosbroeck, ou si elle modifie seulement les coefficients de transport et les contributions transverses aux courants.

4.2.3 . Hypothèses et convention d'énergie

Nous nous limiterons à des systèmes bidimensionnels dans le plan (x, y), dont les paramètres varient lentement devant la maille cristalline et l'extension spatiale du paquet d'ondes [2,5]. La projection sur une bande isolée doit rester adiabatique. Elle cesse d'être contrôlée près d'une fermeture locale de gap ou lorsque les gradients induisent un mélange interbande important [115,150].

La dynamique sera supposée stationnaire et diffusive. Les collisions seront traitées dans l'approximation du temps de relaxation,

$$I_{\mathrm{coll}}[f] = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau}, \tag{4.17}$$

où $f^{(0)} = f_{\mathrm{FD}}(\tilde{\varepsilon} - \zeta)$ est une distribution d'équilibre local. Dans les dérivations effectuées à l'échelle d'une bande, ζ désigne le potentiel chimique local mesuré relativement à $\tilde{\varepsilon}$, tandis que $F = \zeta - e\phi$ est le potentiel électrochimique correspondant. Pour chaque type de porteur, cette convention donne $F_a = \zeta_a - e\phi$. Les symboles μ_n et μ_p restent ainsi réservés aux mobilités. L'énergie $\tilde{\varepsilon}$ contient la structure de bande locale et, lorsque $B_z \neq 0$, la correction du moment magnétique orbital. L'énergie électrostatique $-e\phi$ n'y est pas incluse : elle intervient séparément par $\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi$. Cette convention évite de compter deux fois le champ électrique.

Enfin, nous décrirons le transport de volume. Les états de bord et d'interface, essentiels dans un isolant de Chern fini, ne sont pas explicitement résolus. Leur contribution doit être ajoutée lorsque le transport n'est plus dominé par les porteurs de volume [46,47].

4.3 . Système non uniforme à champ magnétique nul

4.3.1 . Équations du mouvement et courbures mixtes

Le chapitre 3 a introduit les équations du mouvement d'un paquet d'ondes dans un cristal lentement perturbé. Dans un système statique non uniforme, elles peuvent s'écrire [2,5]

$$\dot{r}_i = \frac{1}{\hbar}\partial_{k_i}\varepsilon - (\Omega_{kk})_{ij}\dot{k}_j - (\Omega_{kr})_{ij}\dot{r}_j, \tag{4.18a}$$

$$\dot{k}_i = -\frac{1}{\hbar}\partial_{r_i}\varepsilon + (\Omega_{rk})_{ij}\dot{k}_j + (\Omega_{rr})_{ij}\dot{r}_j. \tag{4.18b}$$

Les tenseurs Ω_{kk} et Ω_{rr} sont des courbures dans les espaces des vecteurs d'onde et des positions. Les tenseurs Ω_{kr} et Ω_{rk} sont des courbures mixtes. Ils apparaissent parce que

la partie périodique de l'état de Bloch dépend à la fois de $\mathbf{k}$ et des paramètres locaux du Hamiltonien. On rappelle leur expression

$$(\Omega_{\alpha\beta})_{ij} = \partial_{\alpha_i}(\mathcal{A}_\beta)_j - \partial_{\beta_j}(\mathcal{A}_\alpha)_i, \tag{4.19}$$

où α et β peuvent désigner $\mathbf{r}$ ou $\mathbf{k}$.

Nous décomposons $\varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{r},\mathbf{k}) - e\phi(\mathbf{r})$, puis nous conservons les termes linéaires en $\mathbf{E}$ et en gradients spatiaux. En deux dimensions, avec $\mathbf{\Omega}_{kk} = \Omega_z\hat{\mathbf{z}}$, la résolution des équations (4.18) donne

$$D\dot{r}_i = v_i + v_i \operatorname{Tr}\Omega_{kr} + \frac{e}{\hbar}\epsilon_{ijz}E_j\Omega_z + \frac{1}{\hbar}\epsilon_{ijz}(\partial_j\varepsilon_0)\Omega_z - (\Omega_{kr})_{ij}v_j, \tag{4.20a}$$

$$\hbar D\dot{k}_i = -eE_i - \partial_i\varepsilon_0, \tag{4.20b}$$

avec $v_i = (1/\hbar)\partial_{k_i}\varepsilon_0$ et

$$D = 1 + \operatorname{Tr}\Omega_{kr}. \tag{4.21}$$

Une non-uniformité lente peut également corriger l'énergie propre du paquet d'ondes. Au premier ordre en gradients, cette correction est [5]

$$\Delta\varepsilon_\nabla = -\operatorname{Im}\langle\partial_{r_i}u|(\varepsilon_0 - H_0)|\partial_{k_i}u\rangle\,. \tag{4.22}$$

Nous évaluerons cette correction dans un modèle de Dirac dans lequel le paramètre de masse varie dans l'espace.

Le même facteur D apparaît dans la mesure de l'espace des phases. Ce résultat est la version non uniforme de la correction de densité d'états discutée au chapitre 3 [2]. À cet ordre,

$$n(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} D(\mathbf{r},\mathbf{k})f(\mathbf{r},\mathbf{k}), \qquad \int_{\mathbf{k}} \equiv \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}. \tag{4.23}$$

La structure symplectique de la dynamique assure la conservation de la mesure corrigée. Dans les situations régulières considérées ici,

$$\partial_{r_i}(D\dot{r}_i) + \partial_{k_i}(D\dot{k}_i) = 0. \tag{4.24}$$

En intégrant l'équation de Boltzmann sur l'espace des vecteurs d'onde, on retrouve donc les équations de continuité usuelles. La courbure de Berry ne crée pas de porteurs en deux dimensions, elle modifie les densités et les courants qui entrent dans les équations (4.1). Cette conclusion est différente de la dynamique d'une vallée de Weyl en trois dimensions, où un terme proportionnel à $\mathbf{E}\cdot\mathbf{B}$ peut transférer des particules entre nœuds de chiralités différentes [7, 151, 152].

4.3.2 . Courant local, courant d'aimantation et courant de transport

La distinction entre courant local et courant de transport est essentielle dans un système non uniforme. Le courant électrique local d'une bande électronique contient le déplacement du centre du paquet d'ondes et le courant associé à son moment orbital $\mathbf{m}^{\mathrm{orb}}(\mathbf{r})$ [2, 118] défini dans le chapitre 3,

$$J_i^{\mathrm{loc}} = -e\int_{\mathbf{k}} D\dot{r}_i f + \epsilon_{ijk}\partial_{r_j}\int_{\mathbf{k}} Dm_k^{\mathrm{orb}} f. \tag{4.25}$$

Même à l'équilibre, J_i^{loc} peut être non nul. Il décrit alors un courant d'aimantation qui circule localement sans transporter de charge entre deux contacts. Le courant mesuré dans une expérience de transport est obtenu en soustrayant cette contribution,

$$J_i^{\mathrm{tr}} = J_i^{\mathrm{loc}} - \epsilon_{ijk}\partial_{r_j} M_k, \tag{4.26}$$

où $\mathbf{M}$ est la densité d'aimantation thermodynamique [118, 121]. Cette soustraction n'est pas un détail formel : elle est précisément ce qui empêche d'interpréter un courant d'équilibre comme un courant transporté.

La fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ est déterminée par l'équation de Boltzmann semi-classique,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}} f + \dot{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{k}} f = \mathcal{I}_{\mathrm{coll}}[f], \tag{4.27}$$

où $\mathcal{I}_{\mathrm{coll}}[f]$ désigne l'intégrale de collision. Nous cherchons une solution perturbative au premier ordre dans les forces motrices qui éloignent le système de l'équilibre. En introduisant un paramètre formel λ mesurant l'amplitude de ces perturbations, nous écrivons

$$f = f^{(0)} + \lambda f^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2), \tag{4.28}$$

puis nous posons $\lambda = 1$ à la fin du calcul. En développant l'équation (4.26) au premier ordre en champ et en gradients, on obtient

$$\begin{aligned} J_i^{\mathrm{tr},(1)} = & -e\int_{\mathbf{k}} v_i f^{(1)} - \frac{e^2}{\hbar}\epsilon_{ijk}\left(E_j + \frac{1}{e}\partial_j\zeta\right)\int_{\mathbf{k}} (\Omega_{kk})_k f^{(0)} \\ & - \frac{e}{\beta\hbar}\int_{\mathbf{k}} \ln\left[1 + e^{-\beta(\varepsilon_0-\zeta)}\right]\left[\epsilon_{ijk}\partial_{r_j}(\Omega_{kk})_k + \partial_{k_i}\operatorname{Tr}\Omega_{kr} - \partial_{k_j}(\Omega_{kr})_{ij}\right]. \end{aligned} \tag{4.29}$$

Les trois termes de la dernière ligne ne sont pas indépendants. Les courbures généralisées sont les composantes d'une même forme de Berry dans l'espace mixte $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ [5]. Elles satisfont par conséquent l'identité de Bianchi [153]

$$\epsilon_{ijk}\partial_{r_j}(\Omega_{kk})_k + \partial_{k_i}\operatorname{Tr}\Omega_{kr} - \partial_{k_j}(\Omega_{kr})_{ij} = 0. \tag{4.30}$$

Cette identité s'obtient directement en remplaçant chaque courbure par les dérivées des connexions généralisées, puis en utilisant la commutation des dérivées partielles. La démonstration algébrique détaillée de cette identité est donnée dans l'annexe A.

Le courant de transport se réduit finalement à

$$J_i^{\mathrm{tr},(1)} = -e\int_{\mathbf{k}} v_i f^{(1)} - \frac{e^2}{\hbar}\epsilon_{ijk}\left(E_j + \frac{1}{e}\partial_j\zeta\right)\int_{\mathbf{k}} (\Omega_{kk})_k f^{(0)}. \tag{4.31}$$

Il s'agit du résultat central à champ magnétique nul. Toutes les dépendances explicites en Ω_{kr} et en $\boldsymbol{\nabla}\Omega_{kk}$ se sont annulées dans le courant de transport au premier ordre. La géométrie reste présente à travers la courbure Ω_{kk}, mais sa structure est celle de l'effet Hall anomal intrinsèque [42, 43]. La seule différence avec le cas uniforme est que le champ électrique est remplacé par

$$\mathcal{X}_i \equiv eE_i + \partial_i\zeta = \partial_i(\zeta - e\phi) = \partial_i F, \tag{4.32}$$

i.e. par le gradient du potentiel électrochimique. Cette combinaison apparaît également dans les formulations du transport anomal où les courants d'aimantation sont correctement soustraits [2, 118, 121].

4.3.3 . Équilibre et potentiel interne d'une jonction

L'équation de Boltzmann linéarisée donne

$$f^{(1)} = \tau v_i \mathcal{X}_i \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon_0}. \tag{4.33}$$

À l'équilibre thermodynamique, la partie hors équilibre de la distribution doit s'annuler. On obtient donc la condition

$$\mathcal{X}_i = 0, \qquad E_i^{\text{int}} = -\frac{1}{e}\partial_i \zeta, \qquad \boldsymbol{\nabla}(\zeta - e\phi) = \boldsymbol{\nabla} F = \mathbf{0}. \tag{4.34}$$

Cette condition annule simultanément les deux contributions de l'équation (4.31). Il n'existe donc pas de courant de transport à l'équilibre. Les éventuels courants locaux sont des courants d'aimantation et ont déjà été soustraits.

Dans une jonction p-n, la diffusion initiale des porteurs crée une redistribution de charge. Le champ interne qui en résulte ajuste ϕ jusqu'à rendre le potentiel électrochimique uniforme [32]. Pour une jonction unidimensionnelle selon x,

$$E_x^{\text{int}} = -\partial_x \phi_{\text{int}} = -\frac{1}{e}\partial_x \zeta, \tag{4.35}$$

et la différence de potentiel entre deux régions homogènes L et R vaut

$$e\left[\phi_R - \phi_L\right] = \zeta_R - \zeta_L. \tag{4.36}$$

À $B = 0$, cette relation n'ajoute pas de mécanisme topologique nouveau : elle exprime l'équilibre électrochimique ordinaire. Elle fixe cependant le langage nécessaire au chapitre 6, où la topologie modifiera la valeur locale du potentiel chimique de neutralité en présence d'un champ magnétique.

4.3.4 . Gap variable, champ quasi-électrique et courbure locale

Considérons maintenant un modèle de Dirac massif dont la masse varie lentement dans l'espace,

$$H_\chi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \chi \hbar v_D k_x \sigma_x + \hbar v_D k_y \sigma_y + m(\mathbf{r})\sigma_z. \tag{4.37}$$

Les bords de bande sont $E_c^0 = |m|$ et $E_v^0 = -|m|$. Près du bord de bande, les masses effectives vérifient $m_c^* = m_v^* = |m|/v_D^2$, de sorte que N_c et N_v sont proportionnelles à $|m|$ en deux dimensions. Les équations (4.12) donnent alors, de part et d'autre de la région où le gap se ferme,

$$\mathcal{E}_{n,i}^{(0)} = E_i + \frac{1}{e}\partial_i |m| - \frac{1}{\beta e}\partial_i \ln |m|, \tag{4.38a}$$

$$\mathcal{E}_{p,i}^{(0)} = E_i - \frac{1}{e}\partial_i |m| + \frac{1}{\beta e}\partial_i \ln |m|. \tag{4.38b}$$

La première correction vient du déplacement du bord de bande, tandis que la seconde provient de la variation de la densité effective d'états. Ces termes sont classiques : ils subsistent lorsque la courbure de Berry est artificiellement annulée.

Au-delà de ces contributions, le gradient de masse engendre également une correction géométrique locale à l'énergie. Dans le modèle de Dirac (4.37), où seule la masse dépend

de la position, cette correction n'est pas identiquement nulle. Pour une bande $s = \pm 1$, on trouve

$$\Delta\varepsilon_{s,\nabla} = \chi \frac{\hbar^2 v_D^2}{2\varepsilon^2} \left(\mathbf{k} \times \boldsymbol{\nabla} m\right)_z , \tag{4.39}$$

où

$$\varepsilon = \sqrt{m^2 + \hbar^2 v_D^2 k^2}. \tag{4.40}$$

Dans la géométrie unidimensionnelle considérée ici, où $m = m(x)$, cette correction est impaire en k_y. Pour une distribution d'équilibre paire en vecteur d'onde transverse, sa contribution intégrée vérifie donc

$$\int_{\mathbf{k}} \Delta\varepsilon_{s,\nabla} F_s(\varepsilon) = 0. \tag{4.41}$$

Bien qu'elle soit localement non nulle, cette correction ne contribue donc ni à la densité d'équilibre ni aux moments longitudinaux du modèle minimal. Le détail du calcul est donné dans l'annexe B.

La variation de la masse modifie par ailleurs la géométrie locale des bandes. Pour la bande de conduction du modèle (4.37),

$$\Omega^{\chi}_{c,z}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = -\chi \frac{\hbar^2 v_D^2 m(\mathbf{r})}{2\left[m(\mathbf{r})^2 + \hbar^2 v_D^2 k^2\right]^{3/2}}, \qquad \Omega^{\chi}_{v,z} = -\Omega^{\chi}_{c,z}. \tag{4.42}$$

À $k = 0$, la courbure est proportionnelle à $\mathrm{sgn}(m)/m^2$. Elle change donc de signe lors d'une inversion de bande et diverge dans l'approximation à une bande lorsque $m \to 0$ comme l'illustre la figure 4.2.

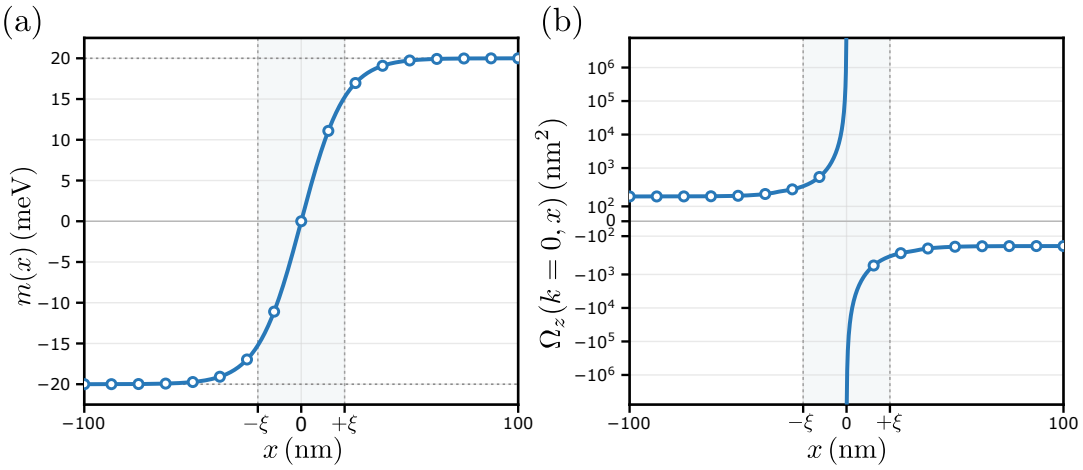

FIGURE 4.2 – Profil spatial de la masse et de la courbure de Berry dans une interface de Dirac. (a) Profil de masse $m(x) = m_0 \tanh(x/\xi)$, avec $m_0 = 20\,\mathrm{meV}$ et $\xi = 20\,\mathrm{nm}$. (b) Courbure de Berry locale de la bande de conduction (4.42), évaluée à $k = 0$ pour une vallée de chiralité $\chi = +1$. Le changement de signe de la masse s'accompagne d'un changement de signe de la courbure de Berry. La singularité apparente en $x = 0$ indique la fermeture du gap local et la perte de validité de la description en termes d'une bande isolée.

Le résultat (4.31) permet maintenant de séparer clairement deux niveaux de physique. La variation du gap entre dans le courant longitudinal à travers les champs quasi-électriques. La variation de la courbure intervient dans la dynamique microscopique, mais

ses gradients explicites s'annulent du courant de transport au premier ordre. Pour faire apparaître une réponse géométrique supplémentaire, il faut donc considérer soit un champ magnétique, soit un ordre supérieur dans le développement hors équilibre.

4.4 . Ordres supérieurs et effet Hall Magnus diffusif

4.4.1 . Organisation du développement hors équilibre

L'équation (4.33) montre que la distribution hors équilibre est contrôlée par la force électrochimique $\mathcal{X}_i$. La vitesse anomale est elle-même linéaire en champ électrique. En combinant cette vitesse avec $f^{(1)}$, on obtient une contribution d'ordre deux,

$$J_i^{\Omega,(2)} = -\frac{e^2\tau}{\hbar}\epsilon_{ikz}E_k\int_{\mathbf{k}}\Omega_z v_j \mathcal{X}_j \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon_0}. \tag{4.43}$$

Cette expression contient simultanément un terme en E_kE_j et un terme en $E_k\partial_j\zeta$. Dans le régime non dégénéré et pour des paramètres de bande uniformes dans la région considérée, $\partial_j\zeta$ peut être réécrit en fonction de $\partial_j n$, de sorte que le second terme possède la structure $E\boldsymbol{\nabla}n$. Dans une hétérostructure générale, les gradients de $E^0_{\rm int}$ et de $n_{\rm i}$ doivent également être conservés. Il est cependant essentiel de garder toutes les contributions tant qu'on discute l'équilibre : elles proviennent de la même force $\mathcal{X}_j$ et ne peuvent pas être séparées de manière cohérente lorsque $\mathcal{X}_j = 0$.

Les réponses quadratiques en champ et celles qui couplent champ et gradient sont autorisées seulement si les symétries de la dispersion rendent non nulles les moyennes de type $\langle\Omega_z v_i\rangle$ [154, 155]. Ici, les crochets désignent la moyenne thermique, normalisée par la densité de cette vallée. Un modèle de Dirac incliné fournit un exemple simple.

4.4.2 . Modèle de Dirac massif incliné

Dans une vallée $\chi = \pm 1$, considérons la dispersion

$$\varepsilon_\chi(\mathbf{k}) = \sqrt{m^2 + \hbar^2 v_D^2 k^2} + \hbar\boldsymbol{\alpha}^\chi\cdot\mathbf{k}, \tag{4.44}$$

où $\boldsymbol{\alpha}^\chi$ décrit l'inclinaison et $m \equiv |m| > 0$ désigne ici le demi-gap. Près du bord de bande,

$$\varepsilon_\chi(\mathbf{k}) \simeq m + \frac{\hbar^2k^2}{2m^*} + \hbar\boldsymbol{\alpha}^\chi\cdot\mathbf{k}, \qquad m^* = \frac{m}{v_D^2}. \tag{4.45}$$

La courbure de Berry n'est pas modifiée par l'inclinaison, puisque celle-ci multiplie l'identité dans le Hamiltonien (*cf.* figure 4.3). Dans la même limite,

$$\Omega_z^\chi(\mathbf{k}) \simeq \Omega^\chi\left(1 - \frac{3\hbar^2v_D^2k^2}{2m^2}\right), \qquad \Omega^\chi = -\chi\frac{\hbar^2v_D^2}{2m^2} \tag{4.46}$$

pour $m > 0$ dans la convention du Hamiltonien (4.37).

Sans inclinaison, l'intégrale de $\Omega_z v_i$ sur $\mathbf{k}$ s'annule par parité. À l'ordre dominant en $k_{\rm B}T/m$, l'inclinaison donne au contraire

$$\langle\Omega_z^\chi v_i^\chi\rangle \simeq 3\Omega^\chi\alpha_i^\chi\frac{k_{\rm B}T}{m}. \tag{4.47}$$

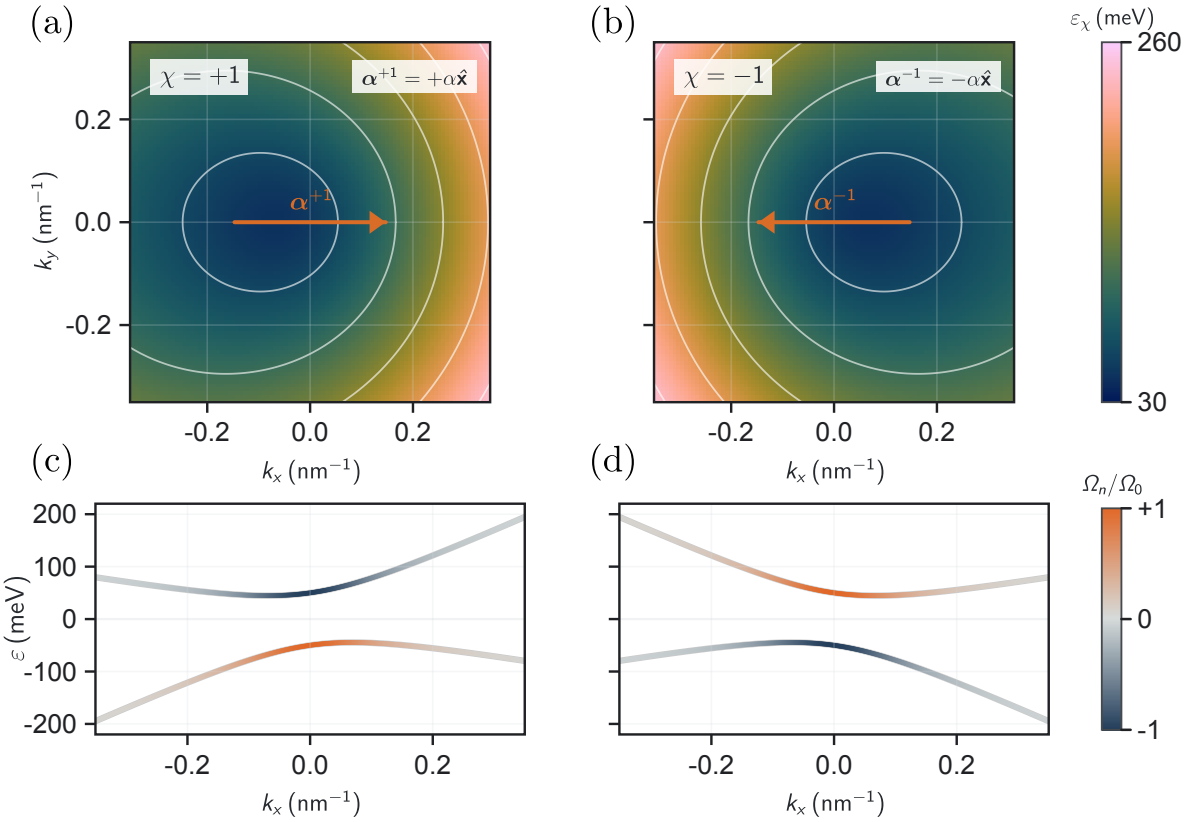

FIGURE 4.3 – Dispersion d'un cône de Dirac massif incliné dans deux vallées opposées. (a) Carte de $\varepsilon_\chi(k_x, k_y)$ pour la vallée $\chi = +1$, avec $\boldsymbol{\alpha}^{+1} = +\alpha\hat{\mathbf{x}}$. (b) Même carte pour $\chi = -1$, avec $\boldsymbol{\alpha}^{-1} = -\alpha\hat{\mathbf{x}}$. Les lignes blanches indiquent des iso-énergies décalées par l'inclinaison. (c,d) Coupes à $k_y = 0$ des dispersions correspondantes, montrant l'inclinaison opposée des deux cônes. La couleur des bandes représente la courbure de Berry normalisée.

Dans un système à deux vallées reliées par renversement du temps,

$$\Omega^+ = -\Omega^-, \qquad \boldsymbol{\alpha}^+ = -\boldsymbol{\alpha}^-, \tag{4.48}$$

de sorte que le produit $\Omega^\chi \boldsymbol{\alpha}^\chi$ est pair. Les deux vallées peuvent donc contribuer avec le même signe au courant de charge. La partie proportionnelle à $E_k \partial_j n$, isolée pour comparaison avec la forme usuelle de l'effet Hall Magnus diffusif, s'écrit

$$J_i^{\Omega,(2)}\Big|_{E\nabla n} = 6\frac{e^2\tau}{\hbar}\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\Omega E_k\left(\epsilon_{ikz}\alpha_j + \epsilon_{jkz}\alpha_i\right)\partial_j n. \tag{4.49}$$

Dans cette expression, $\Omega \equiv \Omega^+$, $\boldsymbol{\alpha} \equiv \boldsymbol{\alpha}^+$ et n désigne la densité totale des deux vallées.

Cette contribution n'est pas une simple renormalisation scalaire du coefficient de diffusion. Elle est tensorielle, transverse et dépend du champ électrique. Elle constitue une correction géométrique de dérive-diffusion plutôt qu'une réponse topologique quantifiée.

4.4.3 . Courant transverse et effet Hall Magnus

Considérons un champ et un gradient de densité dirigés selon x. La composante transverse issue de l'équation (4.49) est

$$J_y^{\Omega,(2)}\big|_{E\nabla n} = -6\frac{e^2\tau}{\hbar}\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\Omega\alpha_x E_x\partial_x n. \tag{4.50}$$

On peut lui associer localement une conductivité

$$\sigma_{yx}^{\Omega} = -6\frac{e^2\tau}{\hbar}\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\Omega\alpha_x\partial_x n. \tag{4.51}$$

Cette structure est reliée à l'effet Hall Magnus [139, 140] dont le principe est schématisé sur la figure 4.4. Dans sa version balistique, un champ interne associé à une région inhomogène produit une déviation transverse des porteurs. Ici, la présence du temps de relaxation τ caractérise une version diffusive, dans laquelle l'inhomogénéité intervient à travers la distribution locale [7]. Des réponses thermiques apparentées, de type Magnus Nernst ou Hall thermique, ont également été étudiées [141].

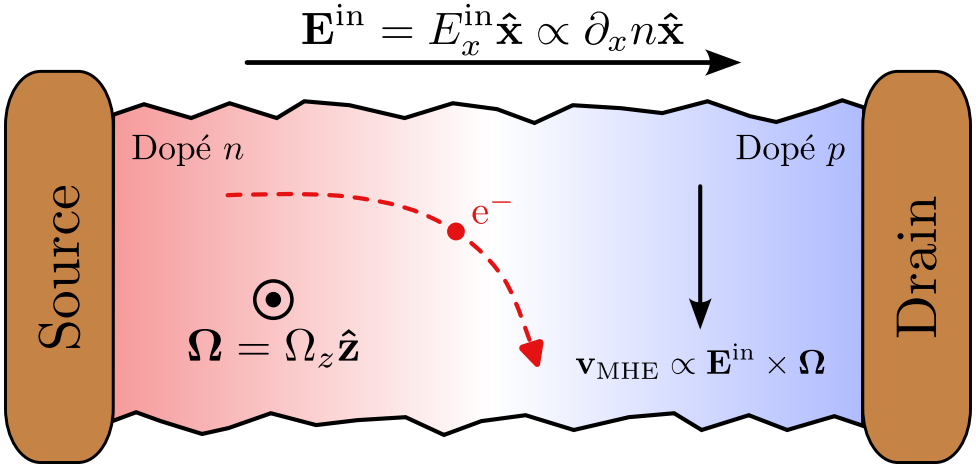

FIGURE 4.4 – Effet Hall Magnus diffusif dans une jonction. Hors équilibre, la combinaison d'un champ électrique longitudinal, d'un gradient de densité et d'une courbure de Berry produit une contribution transverse au courant. En circuit ouvert selon y, celle-ci est compensée par un champ transverse.

En circuit ouvert selon y, le champ transverse s'ajuste jusqu'à imposer

$$J_y^{\mathrm{tot}} = J_y^{\mathrm{ord}} + J_y^{\Omega} = 0. \tag{4.52}$$

4.4.4 . Pourquoi le courant s'annule bien à l'équilibre

Prise isolément, l'équation (4.50) semble rester non nulle dans une jonction à l'équilibre, puisque $E_x^{\mathrm{int}} \neq 0$ et $\partial_x n \neq 0$. Cette conclusion serait incorrecte. L'équation (4.50) ne représente qu'une partie du développement de l'équation (4.43). Le terme en $E_x\partial_x n$ est accompagné d'un terme en E_x^2, et les deux se regroupent en

$$J_i^{\Omega,(2)} \propto E_k\Omega\left(\epsilon_{ikz}\alpha_j + \epsilon_{jkz}\alpha_i\right)\mathcal{X}_j. \tag{4.53}$$

À l'équilibre, $\mathcal{X}_j = 0$ d'après l'équation (4.34). Pour des paramètres de bande uniformes, la contribution quadratique et la contribution $E\boldsymbol{\nabla} n$ se compensent donc exactement. Dans une hétérostructure générale, les termes associés aux gradients de la structure de bande participent à la même recombinaison en $\mathcal{X}_j$. Un courant de Hall Magnus de transport apparaît seulement lorsqu'une force électrochimique hors équilibre est appliquée, par exemple par une tension longitudinale, un gradient de quasi-niveau de Fermi ou une injection de porteurs.

Cette vérification précise aussi le lien avec le chapitre 5. Les effets étudiés dans les interconnecteurs topologiques sont des réponses non linéaires hors équilibre, où un champ appliqué et une diffusion non spéculaire aux surfaces produisent une correction de courant d'origine géométrique [10]. Dans les deux cas, la courbure de Berry n'engendre pas spontanément un courant à l'équilibre, elle modifie la réponse lorsque la distribution est déplacée hors équilibre.

4.5 . Système non uniforme à champ magnétique non nul

4.5.1 . Équations du mouvement et mesure de l'espace des phases

Nous considérons maintenant un champ $\mathbf{B} = B_z\hat{\mathbf{z}}$, uniforme et perpendiculaire au plan. L'énergie du paquet d'ondes est corrigée par son moment magnétique orbital [2, 5, 103],

$$\tilde{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{r},\mathbf{k}) - m_z^{\mathrm{orb}}(\mathbf{r},\mathbf{k})B_z. \tag{4.54}$$

Au premier ordre en champ et en gradients, les équations du mouvement deviennent

$$D\dot{r}_i = v_i + v_i \operatorname{Tr}\Omega_{kr} + \frac{e}{\hbar}\epsilon_{ijz}E_j\Omega_z + \frac{1}{\hbar}\epsilon_{ijz}(\partial_j\tilde{\varepsilon})\Omega_z - (\Omega_{kr})_{ij}v_j, \tag{4.55a}$$

$$\hbar D\dot{k}_i = -eE_i - \partial_i\tilde{\varepsilon} - e\epsilon_{ijz}v_jB_z, \tag{4.55b}$$

avec

$$D = 1 + \operatorname{Tr}\Omega_{kr} + \frac{e}{\hbar}B_z\Omega_z. \tag{4.56}$$

La densité s'écrit donc

$$n(B_z,\zeta) = \int_{\mathbf{k}} \left(1 + \operatorname{Tr}\Omega_{kr} + \frac{e}{\hbar}B_z\Omega_z\right) f_{\mathrm{FD}}(\tilde{\varepsilon} - \zeta). \tag{4.57}$$

Le terme $eB_z\Omega_z/\hbar$ modifie le nombre d'états disponibles [109]. Le terme $-m_z^{\mathrm{orb}}B_z$ modifie leur énergie. Ces deux corrections sont du même ordre et doivent être conservées ensemble. La description reste semi-classique tant que les niveaux de Landau ne sont pas résolus. Lorsque leur séparation devient supérieure à l'élargissement et à l'échelle thermique, l'intégrale continue doit être remplacée par une somme sur les niveaux de Landau, comme au chapitre 3.

4.5.2 . Potentiel chimique à densité ou neutralité imposée

Il faut distinguer deux situations thermodynamiques. Si le système échange des particules avec un réservoir qui fixe le potentiel électrochimique F, ou de manière équivalente ζ à potentiel électrostatique fixé, la densité donnée par l'équation (4.57) varie avec le champ. Cette variation est physique et se trouve notamment au cœur de la formule de

Středa [99, 100, 109]. Si, au contraire, le nombre de particules ou une condition locale de neutralité est imposé, le potentiel chimique doit se déplacer afin de compenser la modification de densité d'états.

Considérons d'abord une bande non dégénérée et imposons $n(B_z, \zeta) = n_0$. Nous écrivons

$$\zeta(B_z) = \zeta_0 + \zeta_1 B_z + \mathcal{O}(B_z^2) \equiv \zeta_0 + \delta\zeta_B + \mathcal{O}(B_z^2), \tag{4.58}$$

où ζ_0 est le potentiel électrochimique à champ magnétique nul et $\delta\zeta_B = \zeta_1 B_z$ désigne sa correction linéaire en champ. Une telle correction n'est permise que si la symétrie par renversement du temps est déjà brisée à $B_z = 0$. En effet, lorsque cette symétrie est préservée et que l'ensemble des bandes reliées par renversement du temps est pris en compte, la densité vérifie $n(B_z, \zeta) = n(-B_z, \zeta)$. À densité fixée, il en résulte $\zeta(B_z) = \zeta(-B_z)$, de sorte que $\zeta_1 = 0$ et que la première correction est quadratique en B_z. Dans un isolant de Chern, la symétrie par renversement du temps est brisée, si bien qu'une correction linéaire $\delta\zeta_B$ peut être non nulle.

Si la dispersion est paire en vecteur d'onde, $\operatorname{Tr}\Omega_{kr}$ est impair dans le modèle considéré et ne contribue pas à l'intégrale. Dans la limite de Maxwell-Boltzmann,

$$\frac{n(B_z, \zeta) - n_0}{n_0} = \beta\delta\zeta_B + \beta B_z \langle m_z^{\mathrm{orb}}\rangle_0 + \frac{eB_z}{\hbar}\langle\Omega_z\rangle_0, \tag{4.59}$$

où

$$\langle A\rangle_0 \equiv \frac{1}{n_0}\int_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) e^{-\beta[\varepsilon_0(\mathbf{k})-\zeta_0]}. \tag{4.60}$$

La condition $n = n_0$ donne

$$\delta\zeta_B = -B_z\left[\langle m_z^{\mathrm{orb}}\rangle_0 + \frac{e}{\beta\hbar}\langle\Omega_z\rangle_0\right]. \tag{4.61}$$

Cette expression possède une lecture simple. Le premier terme compense le déplacement magnétique des niveaux, le second compense la modification de leur nombre. Dans un problème à deux bandes, il ne faut généralement pas imposer séparément la conservation de n et de p. La contrainte physique est plutôt la conservation de la charge totale ou la neutralité locale. Le déplacement de potentiel chimique doit alors être obtenu à partir de l'équation d'état complète. C'est cette construction qui sera utilisée pour les isolants de Chern au chapitre 6 [11].

Lorsque les paramètres de bande varient dans l'espace, l'équation (4.61) produit un nouveau gradient,

$$\partial_i\zeta = \partial_i\zeta_0 - B_z\partial_i\left[\langle m_z^{\mathrm{orb}}\rangle_0 + \frac{e}{\beta\hbar}\langle\Omega_z\rangle_0\right]. \tag{4.62}$$

Ce terme est la première manifestation d'une correction géométrique au champ interne nécessaire pour imposer $\mathcal{X}_i = 0$ à l'équilibre électrostatique.

4.5.3 . Fonction de distribution en champ faible

Pour déterminer la partie hors équilibre de la distribution, nous résolvons l'équation de Boltzmann stationnaire dans l'approximation du temps de relaxation. La force électrochimique qui déplace la distribution est

$$\mathcal{X}_i = eE_i + \partial_i\zeta = \partial_i F. \tag{4.63}$$

Le terme de Lorentz dans l'équation de Boltzmann ne fournit aucun travail aux porteurs : il fait tourner leur vitesse dans le plan perpendiculaire au champ. La correction du moment orbital est déjà incluse dans $\tilde{\varepsilon}$. Pour une dispersion isotrope,

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \qquad v_i = \frac{\hbar k_i}{m^*}, \tag{4.64}$$

la solution peut donc être recherchée sous la forme

$$f^{(1)} = v_i \Lambda_i \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \tilde{\varepsilon}}, \tag{4.65}$$

où le vecteur $\mathbf{\Lambda}$ décrit le déplacement de la distribution dans l'espace des impulsions.

En reportant cet ansatz dans l'équation de Boltzmann, le terme de collision et la rotation cyclotron peuvent être regroupés dans une matrice,

$$\Gamma_{ij} \Lambda_j = \mathcal{X}_i, \tag{4.66}$$

avec

$$\Gamma_{ij} = \frac{D}{\tau} \delta_{ij} + \omega_c \epsilon_{ijz}, \qquad \omega_c = \frac{eB_z}{m^*}. \tag{4.67}$$

Le facteur D, défini par l'équation (4.56), est ici le facteur géométrique de l'espace des phases et ne doit pas être confondu avec le coefficient de diffusion $\mathcal{D}$.

La solution stationnaire s'écrit alors

$$f^{(1)} = v_i (\Gamma^{-1})_{ij} \mathcal{X}_j \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \tilde{\varepsilon}}. \tag{4.68}$$

Dans le plan perpendiculaire à $\mathbf{B}$, l'inverse exact de la matrice (4.67) est

$$(\Gamma^{-1})_{ij} = \frac{\tau}{D} \frac{\delta_{ij} - \dfrac{\omega_c \tau}{D} \epsilon_{ijz}}{1 + \left(\dfrac{\omega_c \tau}{D}\right)^2}. \tag{4.69}$$

La contribution de $\operatorname{Tr} \Omega_{kr}$ est indépendante du champ magnétique et intervient donc déjà à $B_z = 0$. Comme nous cherchons uniquement la variation induite par le champ, nous ne la faisons plus apparaître explicitement. Au premier ordre en B_z, et en négligeant les termes croisés entre le champ et les gradients spatiaux, nous utilisons ainsi

$$D \simeq 1 + \frac{eB_z}{\hbar} \Omega_z. \tag{4.70}$$

Au premier ordre en B_z, tout en conservant les produits entre le champ magnétique et la force électrochimique, l'équation (4.69) devient

$$(\Gamma^{-1})_{ij} \simeq \tau \left[\left(1 - \frac{eB_z}{\hbar} \Omega_z \right) \delta_{ij} - \omega_c \tau \epsilon_{ijz} \right]. \tag{4.71}$$

Décomposons maintenant le potentiel chimique selon

$$\zeta = \zeta_0 + \delta\zeta_B, \qquad \mathcal{X}_i^{(0)} = eE_i + \partial_i \zeta_0, \tag{4.72}$$

où $\delta\zeta_B = \mathcal{O}(B_z)$ est donné par l'équation (4.61). Pour faire apparaître uniquement la structure tensorielle de la réponse, nous n'explicitons pas ici la dépendance en B_z de la fonction de distribution d'équilibre $f^{(0)}$. Cette dépendance provient notamment des corrections magnétiques à l'énergie de bande et au potentiel électrochimique. En négligeant les termes d'ordre B_z^2, la correction à la distribution devient

$$f^{(1)} \simeq \tau v_i \left[\left(1 - \frac{eB_z}{\hbar} \Omega_z \right) \mathcal{X}_i^{(0)} - \omega_c \tau \epsilon_{ijz} \mathcal{X}_j^{(0)} + \partial_i \delta\zeta_B \right] \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \tilde{\varepsilon}}. \tag{4.73}$$

Les produits $\omega_c\tau\, \partial_j \delta\zeta_B$ et $B_z \Omega_z\, \partial_i \delta\zeta_B$ ont été omis puisqu'ils sont d'ordre B_z^2.

L'équation (4.73) distingue ainsi trois contributions. La première est la réponse longitudinale à $e\mathbf{E} + \boldsymbol{\nabla}\zeta_0$, corrigée par la modification géométrique de la densité d'états. La deuxième correspond à l'effet Hall ordinaire produite par la rotation cyclotron. La dernière provient du déplacement $\delta\zeta_B$ nécessaire pour maintenir la densité ou la neutralité imposée, elle dépend du moment magnétique orbital et de la courbure de Berry à travers l'équation (4.61).

Ce dernier terme constitue la nouvelle contribution. Le gradient $\boldsymbol{\nabla}\delta\zeta_B$ doit être combiné au champ électrique interne dans la force électrochimique totale, ainsi qu'aux contributions de vitesse anomale lors du calcul du courant de transport.

4.5.4 . Courant de transport et contrôle de l'équilibre

Après soustraction du courant d'aimantation, la structure du courant de transport reste

$$J_i^{\mathrm{tr}} = -e \int_{\mathbf{k}} v_i f^{(1)} - \frac{e}{\hbar} \epsilon_{ijz} \mathcal{X}_j \int_{\mathbf{k}} \Omega_z f^{(0)}. \tag{4.74}$$

Pour une bande parabolique et des valeurs de Ω_z et m_z^{orb} approximativement constantes dans la région thermique, cette expression devient

$$J_i^{\mathrm{tr}} = \mu_{\mathrm{mob}} n \left(1 - \frac{eB_z}{\hbar} \Omega_z \right) \mathcal{X}_i - \mu_{\mathrm{mob}} n \omega_c \tau \epsilon_{ijz} \mathcal{X}_j - \frac{en\Omega_z}{\hbar} \epsilon_{ijz} \mathcal{X}_j. \tag{4.75}$$

Ici, μ_{mob} désigne la mobilité de la bande considérée. Le premier terme contient la dérive-diffusion longitudinale et sa correction géométrique. Le deuxième est le courant de Hall ordinaire. Le troisième est le courant Hall anomal. Enfin, le gradient de $\delta\zeta_B$ de l'équation (4.62) est inclus dans chaque occurrence de $\mathcal{X}_i$.

Cette écriture résout l'apparente difficulté du courant à l'équilibre. Si le champ interne vérifie

$$eE_i^{\mathrm{int}} + \partial_i \zeta = 0, \tag{4.76}$$

alors tous les termes de l'équation (4.75) s'annulent. Le terme en $\boldsymbol{\nabla}\delta\zeta_B$ ne doit donc jamais être interprété seul comme un courant d'équilibre. Il déplace plutôt le champ interne,

$$E_i^{\mathrm{int}} = -\frac{1}{e}\partial_i \zeta_0 + \frac{B_z}{e} \partial_i \left[\langle m_z^{\mathrm{orb}} \rangle_0 + \frac{e}{\beta\hbar} \langle \Omega_z \rangle_0 \right]. \tag{4.77}$$

Pour une jonction selon x, l'intégration de cette relation donne une correction au potentiel interne contrôlée par les différences de moment orbital et de courbure entre les deux côtés. Dans un modèle à deux bandes symétrique, les moments orbitaux des bandes de conduction et de valence peuvent contribuer avec le même signe tandis que

leurs courbures sont opposées [103]. La combinaison exacte dépend de la contrainte de neutralité et de l'ensemble des vallées. Le chapitre 6 montrera qu'après sommation sur le modèle de réseau, la contribution pertinente est reliée au nombre de Chern $\mathcal{C}$ et à l'asymétrie spectrale des niveaux de Landau.

4.5.5 . Bandes de conduction et de valence

Pour revenir à une description de dispositif, il faut distinguer les électrons de conduction et les trous de valence. Nous introduisons les courbures,

$$\Omega_{n,z} \equiv \Omega_{c,z}, \qquad \Omega_{p,z} \equiv -\Omega_{v,z}, \tag{4.78}$$

où le signe moins dans $\Omega_{p,z}$ traduit le caractère de lacune d'un trou. De même, $m^{\mathrm{orb}}_{n,z}$ et $m^{\mathrm{orb}}_{p,z}$ désignent les moments orbitaux effectifs des porteurs. Nous adoptons la convention $m^{\mathrm{orb}}_{n,z} = m^{\mathrm{orb}}_{c,z}$ et $m^{\mathrm{orb}}_{p,z} = -m^{\mathrm{orb}}_{v,z}$. Afin de tenir compte du signe opposé de la correction de mesure pour les trous, nous introduisons

$$s_n = +1, \qquad s_p = -1, \tag{4.79}$$

ainsi que les moyennes propres à chaque type de porteur,

$$\langle Q \rangle_{a,0} \equiv \frac{1}{n_{a,0}} \int_{\mathbf{k}} Q f_{a,0}, \qquad n_{n,0} \equiv n_0, \qquad n_{p,0} \equiv p_0. \tag{4.80}$$

Dans l'approximation de champ faible, nous définissons

$$A_a(\mathbf{r}) \equiv \left\langle m^{\mathrm{orb}}_{a,z} \right\rangle_{a,0} + s_a \frac{e}{\beta\hbar} \left\langle \Omega_{a,z} \right\rangle_{a,0}, \qquad a \in \{n, p\}. \tag{4.81}$$

La correction magnétique apportée au champ électrochimique effectif de chaque porteur est alors

$$\overline{E}_{a,i} = E_i - s_a \frac{B_z}{e} \partial_i A_a. \tag{4.82}$$

Pour un modèle de Dirac à symétrie particule-trou, les relations entre Ω_c, Ω_v et les moments orbitaux peuvent rendre cette correction identique pour les électrons et les trous. Il est néanmoins préférable de conserver l'indice a dans une formulation générale.

Les champs quasi-électriques modifiés s'écrivent

$$\widetilde{\mathcal{E}}_{n,i} = \overline{E}_{n,i} + \frac{1}{e}\partial_i E^0_{\mathrm{int}} - \frac{1}{\beta e}\partial_i \ln\left(\frac{n_{\mathrm{i}}}{n_{\mathrm{ref}}}\right), \tag{4.83a}$$

$$\widetilde{\mathcal{E}}_{p,i} = \overline{E}_{p,i} + \frac{1}{e}\partial_i E^0_{\mathrm{int}} + \frac{1}{\beta e}\partial_i \ln\left(\frac{n_{\mathrm{i}}}{n_{\mathrm{ref}}}\right). \tag{4.83b}$$

Dans le cas d'un modèle possédant une symétrie électron-trou, le zéro d'énergie peut être choisi de sorte que $E^0_{\mathrm{int}} = 0$.

La correction de mesure modifie également les mobilités longitudinales. Au premier ordre,

$$\widetilde{\mu}_a = \mu_a \left[1 - s_a \frac{eB_z}{\hbar} \left\langle \Omega_{a,z} \right\rangle_{a,0}\right], \qquad \widetilde{\mathcal{D}}_a = \frac{1}{\beta e}\widetilde{\mu}_a. \tag{4.84}$$

Il faut interpréter cette formule comme une approximation de bande parabolique, de temps de relaxation constant et de champ faible. Dans un modèle général, les mobilités et les coefficients de diffusion deviennent des intégrales d'énergie et peuvent être tensoriels.

Les courants de conduction et de valence prennent finalement une forme directement comparable à celle de Selberherr,

$$J_i^n = en\widetilde{\mu}_n\widetilde{\mathcal{E}}_{n,i} + e\widetilde{\mathcal{D}}_n\partial_i n + J_i^{\perp,n}, \tag{4.85a}$$

$$J_i^p = ep\widetilde{\mu}_p\widetilde{\mathcal{E}}_{p,i} - e\widetilde{\mathcal{D}}_p\partial_i p + J_i^{\perp,p}. \tag{4.85b}$$

Les termes $J_i^{\perp,a}$ regroupent le Hall ordinaire, le Hall anomal et, hors équilibre, les corrections non linéaires de type Hall Magnus. La structure longitudinale de Selberherr est donc conservée, mais trois objets sont modifiés : le champ quasi-électrique reçoit une correction magnétique géométrique, la mobilité est renormalisée par $B_z\Omega_z$, et le coefficient de diffusion suit la même renormalisation dans le régime où la relation d'Einstein reste valable.

4.5.6 . Courants de charge et de vallée

Dans un système invariant par renversement du temps, les courbures de deux vallées opposées vérifient généralement $\Omega_z^+ = -\Omega_z^-$ [103, 156]. Certaines corrections linéaires en $B_z\Omega_z$ s'annulent alors dans le courant de charge total. Elles peuvent cependant survivre dans un courant de vallée,

$$J_i^{\mathrm{val}} = J_i^+ - J_i^-. \tag{4.86}$$

Cette compensation ne se produit pas dans un isolant de Chern à une vallée effective ou, plus généralement, lorsque la somme des contributions géométriques de toutes les vallées est non nulle. Il faut donc effectuer la sommation sur les vallées avant d'identifier une correction comme un courant de charge observable. La même prudence s'applique au déplacement de potentiel chimique : dans le chapitre 6, la quantité qui subsiste après sommation est reliée au nombre de Chern total du modèle sur réseau et non à la courbure de Berry d'une vallée isolée.

4.6 . Système final de van Roosbroeck généralisé

La dérivation précédente permet de répondre à la question posée au début du chapitre. La géométrie de bande ne remplace ni les équations de continuité ni l'équation de Poisson. Elle modifie les relations constitutives qui relient les densités et les courants au potentiel électrostatique et aux paramètres locaux de bande.

Dans le régime de champ faible et de transport diffusif considéré ici, le système peut être résumé sous la forme

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{e}\partial_i J_i^n = G_n - R_n, \tag{4.87a}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{e}\partial_i J_i^p = G_p - R_p, \tag{4.87b}$$

$$J_i^n = en\widetilde{\mu}_n\widetilde{\mathcal{E}}_{n,i} + e\widetilde{\mathcal{D}}_n\partial_i n + J_i^{\perp,n}, \tag{4.87c}$$

$$J_i^p = ep\widetilde{\mu}_p\widetilde{\mathcal{E}}_{p,i} - e\widetilde{\mathcal{D}}_p\partial_i p + J_i^{\perp,p}, \tag{4.87d}$$

$$-\boldsymbol{\nabla}\cdot[\epsilon(\mathbf{r})\boldsymbol{\nabla}\phi] = e\left[p - n + N_D^+ - N_A^-\right], \qquad \mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi. \tag{4.87e}$$

L'équation de Poisson (4.87e) ne contient que les contributions usuelles des électrons, des trous et des dopants ionisés. Dans un isolant de Chern soumis à un champ magnétique,

l'asymétrie spectrale peut engendrer une contribution topologique supplémentaire ρ_{asym} à la densité de charge. Le membre de droite de l'équation de Poisson prend alors plus généralement la forme

$$-\boldsymbol{\nabla}\cdot[\epsilon(\mathbf{r})\boldsymbol{\nabla}\phi] = e\left[p - n + N_D^+ - N_A^-\right] + \rho_{\mathrm{asym}}. \tag{4.88}$$

Ce terme, qui ne se réduit pas aux densités de porteurs mobiles n et p, n'est pas inclus dans la formulation développée ici. Son origine et ses conséquences électrostatiques seront étudiées au chapitre 6 dans le contexte des jonctions d'isolants de Chern.

Les densités qui entrent dans l'équation de Poisson doivent être calculées avec la mesure corrigée. Nous notons $n_n \equiv n$, $n_p \equiv p$, f_n la distribution électronique de conduction et $f_p \equiv 1 - f_v$ la distribution de trous. En étendant aux courbures mixtes la même convention de lacune que pour $\Omega_{p,z}$, on obtient

$$n_a = \int_{\mathbf{k}} \left(1 + s_a \,\mathrm{Tr}\,\Omega^a_{kr} + s_a \frac{e}{\hbar} B_z \Omega_{a,z}\right) f_a, \tag{4.89}$$

et avec l'énergie incluant le moment orbital. Les champs $\widetilde{\mathcal{E}}_{n,p}$ sont donnés par l'équation (4.83), tandis que $\widetilde{\mu}_{n,p}$ et $\widetilde{\mathcal{D}}_{n,p}$ sont des coefficients effectifs à déterminer à partir du modèle microscopique.

À $B_z = 0$ et au premier ordre en gradients, les courbures mixtes disparaissent explicitement du courant de transport grâce à l'identité (4.30). Il reste le Hall anomal gouverné par la force électrochimique. Aux ordres supérieurs, la combinaison de la courbure, de l'inclinaison et d'une distribution hors équilibre produit des termes de type Hall Magnus. À $B_z \neq 0$, le facteur de mesure et le moment orbital modifient le potentiel chimique, les champs quasi-électriques et les coefficients de transport.

Dans la limite

$$\boldsymbol{\Omega} \to \mathbf{0}, \qquad \mathbf{B} \to \mathbf{0}, \qquad \boldsymbol{\nabla} E^0_{c,v} \to \mathbf{0}, \qquad \boldsymbol{\nabla} N_{c,v} \to \mathbf{0}, \tag{4.90}$$

les champs quasi-électriques se réduisent au champ électrostatique, les mobilités redeviennent ordinaires et les termes transverses disparaissent. On retrouve alors exactement les équations de van Roosbroeck classiques.

Cette formulation possède deux limites importantes. D'une part, elle repose sur une projection adiabatique à une bande et ne décrit pas la région immédiate d'une fermeture de gap. D'autre part, elle ne remplace pas une théorie des états de bord ou d'interface lorsque ceux-ci dominent le transport. Elle fournit une théorie locale des porteurs de volume, adaptée aux variations lentes et au régime diffusif.

4.7 . Conclusion du chapitre

Ce chapitre a étudié la généralisation des équations de van Roosbroeck à un système bidimensionnel non uniforme possédant une géométrie de bande non triviale. Le point de départ était la formulation de Selberherr, dans laquelle les variations des bords de bande et des densités effectives d'états sont regroupées dans des champs quasi-électriques [33,35]. Ces champs sont indispensables pour décrire les hétérostructures, car ils rendent compte de forces qui ne se réduisent pas au champ électrostatique et qui agissent différemment sur les électrons et les trous.

À champ magnétique nul, les équations du mouvement d'un système non uniforme font apparaître des courbures mixtes Ω_{kr}. Celles-ci modifient séparément la vitesse, la mesure de l'espace des phases et le courant local. Après soustraction du courant d'aimantation, leurs gradients explicites s'annulent cependant au premier ordre grâce à une identité de Bianchi. Le courant de transport se réduit alors à la somme du courant longitudinal ordinaire et d'un courant Hall anomal gouverné par $e\mathbf{E} + \boldsymbol{\nabla}\zeta = \boldsymbol{\nabla}F$. La géométrie ne produit donc aucun courant de transport à l'équilibre, puisque le potentiel électrochimique y est uniforme.

Deux directions se dégagent à partir de ce résultat. La première consiste à étudier la condition d'équilibre elle-même. Le champ interne d'une jonction est fixé par le gradient du potentiel chimique, ce qui établit le lien avec l'électrostatique des jonctions. La seconde consiste à poursuivre le développement hors équilibre. À l'ordre E^2 ou $E\boldsymbol{\nabla}n$, une dispersion inclinée permet à la courbure de Berry de produire un courant transverse de type Hall Magnus [139, 140]. Nous avons montré que le terme $E\boldsymbol{\nabla}n$ ne doit pas être isolé lorsqu'on teste l'équilibre : il est compensé par le terme E^2 issu de la même force électrochimique. Cette réponse non linéaire fait écho aux corrections géométriques étudiées dans les interconnecteurs topologiques au chapitre 5 [10].

En présence d'un champ magnétique faible, la courbure de Berry modifie le nombre d'états disponibles et le moment orbital déplace leur énergie [103, 109]. À potentiel chimique fixé, la densité peut varier avec le champ. À densité ou neutralité imposée, le potentiel chimique s'ajuste. Son gradient produit une correction au champ interne, tandis que le facteur $B_z\Omega_z$ renormalise la mobilité et, dans le régime non dégénéré, le coefficient de diffusion. Les équations finales conservent ainsi la forme de Selberherr, mais avec des champs quasi-électriques et des coefficients enrichis par la géométrie de bande.

Le résultat principal peut être résumé simplement : l'architecture conservation–courants–Poisson de van Roosbroeck reste inchangée, mais l'équation d'état et les lois constitutives doivent être recalculées à partir de la dynamique semi-classique topologique. Le chapitre suivant appliquera la branche hors équilibre de cette idée aux interconnecteurs, tandis que le chapitre 6 exploitera sa branche d'équilibre : la modification topologique du potentiel chimique de neutralité y deviendra la source d'un potentiel interne intrinsèque entre deux isolants de Chern.

Chapitre 5

Interconnecteurs topologiques : une alternative aux métaux conventionnels

Résumé

La miniaturisation de dispositifs microélectroniques tels que les circuits intégrés fait fasse à un problème majeur : l'augmentation de la résistivité des interconnecteurs conventionnels, généralement faits de cuivre. La raison sous-jacente à cette limite a été mise en lumière, dans un premier temps, par Fuchs, puis par Sondheimer. Ils ont montré que les films de métaux très fins sont plus résistifs que leur analogue épais car les porteurs de charge rencontrent plus fréquemment les surfaces rugueuses du film. Dans ce chapitre, une généralisation de la théorie de Fuchs-Sondheimer (FS) aux matériaux de Dirac (2D) et de Weyl (3D) est présentée. Ces deux types de matériau sont des candidats prometteurs pour la prochaine génération d'interconnecteurs. Le résultat principal de cette étude montre l'existence d'un courant électrique longitudinal non-linéaire dont l'origine vient de la courbure de Berry et de la diffusion non-spéculaire sur les surfaces.

Sommaire

5.1 Introduction et problématique physique 92
5.2 Diffusion de surface dans un métal ordinaire 93
5.3 Généraliser Fuchs-Sondheimer aux matériaux topologiques . 99
5.4 Apparition d'un courant géométrique de bord 102
5.5 Métal de Dirac bidimensionnel 105
5.6 Extension tridimensionnelle : semi-métaux de Weyl 110
5.7 Signatures physiques, limites et perspectives 112
5.8 Conclusion du chapitre 117

5.1 . Introduction et problématique physique

La miniaturisation continue des circuits intégrés impose des contraintes croissantes sur les matériaux utilisés pour réaliser les interconnexions métalliques [26,27,157]. Lorsque les dimensions transverses d'un fil deviennent comparables au libre parcours moyen des électrons, les collisions avec les surfaces jouent un rôle de plus en plus important. La résistivité augmente alors à mesure que la taille du conducteur diminue, comme l'ont notamment montré les études consacrées aux lignes de cuivre de dimensions mésoscopiques [158,159]. Dans une interconnexion réelle, cette évolution résulte en outre de contributions conjointes dues à la géométrie, aux phonons, aux impuretés et aux joints de grains [160,161]. Cette mise à l'échelle défavorable limite progressivement les performances des interconnecteurs conventionnels à base de cuivre et motive la recherche de métaux alternatifs [26,28].

La théorie de Fuchs-Sondheimer (FS) offre une description simple de l'origine microscopique de cet effet de taille [8,9]. Dans un métal ordinaire, les collisions diffusives avec les surfaces modifient la fonction de distribution électronique à proximité des bords. Les électrons quittant une surface rugueuse perdent la mémoire de leur état incident, de sorte que la distribution hors équilibre devient inhomogène dans l'espace selon la direction transverse. Lorsque l'épaisseur du fil est grande devant le libre parcours moyen, cet effet reste confiné près des surfaces et la conductivité tend vers sa valeur de volume. En revanche, lorsque les dimensions du système diminuent, les régions affectées par les deux surfaces occupent une fraction croissante du conducteur et la conductivité longitudinale est réduite [24,162].

Les matériaux dont la structure de bande possède une géométrie non triviale offrent une perspective différente. Comme discuté dans le chapitre consacré à la physique semi-classique, la courbure de Berry modifie les équations du mouvement électroniques à travers l'apparition d'une vitesse anomale. Cette contribution géométrique est généralement associée à des réponses transverses, telles que l'effet Hall anormal. Dans un système fini, elle peut toutefois se combiner à la brisure de translation induite par les surfaces et modifier également la réponse longitudinale [2,10].

Les semi-métaux topologiques ont par ailleurs été proposés comme candidats pour des interconnexions de très petite section, notamment parce que leurs états de surface peuvent contribuer fortement à la conduction [30,163]. Cette perspective doit toutefois rester nuancée : dans CoSi, le sens de la mise à l'échelle dépend du rapport entre conduction de surface, conduction de volume, densité de défauts et épaisseur [164], tandis que la diffusion aux joints de grains demeure un mécanisme résistif dans les semi-métaux topologiques [165]. À une échelle plus architecturale, des réseaux de canaux chiraux ont également été envisagés pour rapprocher la physique des phases de Chern des contraintes de dispositifs [58].

L'objectif de ce chapitre est d'étudier cette possibilité en généralisant la théorie de Fuchs-Sondheimer à des matériaux possédant une courbure de Berry non nulle [10]. Le point de départ reste le mécanisme ordinaire : les conditions aux limites diffusives créent une dépendance spatiale de la fonction de distribution hors équilibre. Cependant, cette inhomogénéité transverse ne conduit plus uniquement à une réduction de la conductivité linéaire. En présence d'une vitesse anomale, elle peut également engendrer un courant longitudinal non linéaire localisé à proximité des surfaces. Ce courant est porté par les états de volume, bien que son origine soit directement liée à la présence des bords [10].

Dans un premier temps, nous rappelons la théorie de Fuchs-Sondheimer dans le cadre d'un métal ordinaire et mettons en évidence la manière dont les surfaces modifient la distribution électronique et la conductivité longitudinale. Nous généralisons ensuite cette approche à un système possédant une courbure de Berry et identifions les conditions nécessaires à l'apparition d'un courant géométrique de bord. Le mécanisme est illustré à partir d'un modèle bidimensionnel de fermions de Dirac massifs, puis étendu au cas tridimensionnel des semi-métaux de Weyl. Enfin, nous discutons les signatures physiques attendues, les limites du modèle minimal et plusieurs prolongements possibles.

5.2 . Diffusion de surface dans un métal ordinaire

5.2.1 . La théorie de Fuchs-Sondheimer

Les travaux précurseurs de Fuchs [8], puis de Sondheimer [9], montrent que, sous certaines conditions aux limites, la conductivité d'un film métallique mince diminue lorsque son épaisseur diminue. Ce résultat repose sur le choix des conditions aux limites. En effet, dans sa formulation la plus simple [1], lorsqu'un porteur de charge atteint la surface du fil, il subit une collision entièrement diffusive, de sorte qu'il ne conserve aucune « mémoire » de son état antérieur. Cela revient à imposer que la partie hors équilibre de la fonction de distribution soit réinitialisée aux surfaces du fil. Afin de vérifier cette hypothèse dans un calcul concret, on peut s'appuyer sur la théorie du transport électrique de Boltzmann détaillée dans le chapitre 3. Dans le cas d'un matériau sans propriétés topologiques, les équations du mouvement sous champ électrique sont

$$\dot{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}}, \tag{5.1a}$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -e\mathbf{E}. \tag{5.1b}$$

Dans l'approximation du temps de relaxation, l'équation de Boltzmann stationnaire pour la fonction de distribution électronique $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ s'écrit [12, 63]

$$\dot{\mathbf{r}} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}} f + \dot{\mathbf{p}} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{p}} f = -\frac{f - f_0}{\tau}, \tag{5.2}$$

où $f_0(\mathbf{p})$ est la fonction de distribution à l'équilibre, *i.e.* la distribution de Fermi-Dirac [12].

Modèle. Dans ce qui suit, nous utiliserons un modèle bidimensionnel, dans lequel l'espace des vitesses est décrit par les deux composantes (v_x, v_z).

Considérons un modèle simple dans lequel le fil est infini et uniforme selon la direction $\hat{\mathbf{x}}$, et possède une largeur égale à a selon la direction $\hat{\mathbf{z}}$. Considérons d'abord un champ électrique appliqué selon $\hat{\mathbf{x}}$, de sorte que $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}}$. La relation de dispersion parabolique des électrons libres est [12]

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \tag{5.3}$$

où m est la masse effective des électrons. Ces considérations nous permettent de résoudre un problème effectif unidimensionnel, de sorte que $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv f(z, \mathbf{p})$, et l'équation (5.2) devient

$$v_z \frac{\partial f}{\partial z} - eE_x \frac{\partial f}{\partial p_x} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \tag{5.4}$$

1. Nous verrons juste après que cette condition n'est pas nécessaire lorsque l'on introduit des collisions spéculaires [9].

où, dans cette section, nous notons $\mathbf{v} \equiv \dot{\mathbf{r}}$. Cette équation différentielle partielle peut être résolue exactement par la méthode des caractéristiques. Dans la suite, il est toutefois suffisant d'effectuer un développement perturbatif de la fonction de distribution en puissances du champ électrique, *i.e.* $f(z, \mathbf{v}) \equiv f_0(\mathbf{v}) + f_1(z, \mathbf{v}) + o(E_x)$ [63].

Au premier ordre en champ électrique, l'équation (5.4) devient

$$\frac{\partial f_1}{\partial z} + \frac{f_1}{\tau v_z} = \frac{eE_x}{m v_z} \frac{\partial f_0}{\partial v_x}, \tag{5.5}$$

dont la solution générale peut s'écrire

$$f_1(z, \mathbf{v}) = \frac{eE_x \tau}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left(1 + F(\mathbf{v}) e^{-z/\tau v_z}\right), \tag{5.6}$$

où $F(\mathbf{v})$ est une fonction à déterminer à l'aide des conditions aux limites. Comme rappelé précédemment, Fuchs et Sondheimer supposent que les porteurs de charge sont entièrement diffusés lorsqu'ils entrent en collision avec les surfaces situées en $z = 0$ et $z = a$ [8,9]. Cela signifie que la fonction de distribution doit être isotrope lorsqu'elle est évaluée aux surfaces (*cf.* figure 5.1). Pour imposer cette condition, les conditions aux limites doivent être séparées en deux cas distincts, et donc f_1 également. En effet, dans le cas de collisions purement diffusives, il faut distinguer les porteurs qui s'éloignent de la surface $z = 0$ de ceux qui s'éloignent de la surface $z = a$, *i.e.*

$$\begin{cases} f_1(0, \mathbf{v}) = 0 \quad \text{pour} \quad v_z > 0, & \text{(5.7a)} \\ f_1(a, \mathbf{v}) = 0 \quad \text{pour} \quad v_z < 0. & \text{(5.7b)} \end{cases}$$

En appliquant ces conditions à la solution générale (5.6), on obtient finalement

$$\begin{cases} f_1^+(z, \mathbf{v}) = \dfrac{eE_x \tau}{m} \dfrac{\partial f_0}{\partial v_x} \left(1 - e^{-z/\tau v_z}\right) \quad \text{pour} \quad v_z > 0, & \text{(5.8a)} \\ f_1^-(z, \mathbf{v}) = \dfrac{eE_x \tau}{m} \dfrac{\partial f_0}{\partial v_x} \left(1 - e^{(a-z)/\tau v_z}\right) \quad \text{pour} \quad v_z < 0. & \text{(5.8b)} \end{cases}$$

5.2.2 . Conductivité longitudinale et effet de taille

Courant local. À partir des solutions (5.8), on peut calculer la conductivité électrique longitudinale. Pour cela, il est nécessaire de déterminer d'abord la densité de courant électrique selon l'axe x au premier ordre en champ électrique en utilisant la définition semi-classique du courant [12,63]

$$j_x^{(1)}(z) = -\frac{e}{h^2} \int d^2p \, v_x \, f_1(z, \mathbf{p}) = -\frac{e}{h^2} \int d^2v \, |\mathrm{Jac}(v_x, v_z)| \, v_x \, f_1(z, \mathbf{v}) \tag{5.9}$$

où $|\mathrm{Jac}(v_x, v_z)| = m^2$ est le déterminant de la matrice jacobienne associée à la transformation entre $\mathbf{p}$ et $\mathbf{v}$. Dans le cas d'électrons libres, la relation est simplement $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. Dans cette dérivation, nous omettons pour simplicité la dégénérescence de spin. La réintroduire multiplierait juste (5.9) par un facteur 2. Après séparation des vitesses positives et négatives selon $\hat{\mathbf{z}}$, la densité de courant s'écrit

$$j_x^{(1)}(z) = -\frac{em^2}{h^2} \int_{\mathbb{R}} dv_x \, v_x \left\{ \int_{-\infty}^{0} dv_z \, f_1^- + \int_{0}^{+\infty} dv_z \, f_1^+ \right\}. \tag{5.10}$$

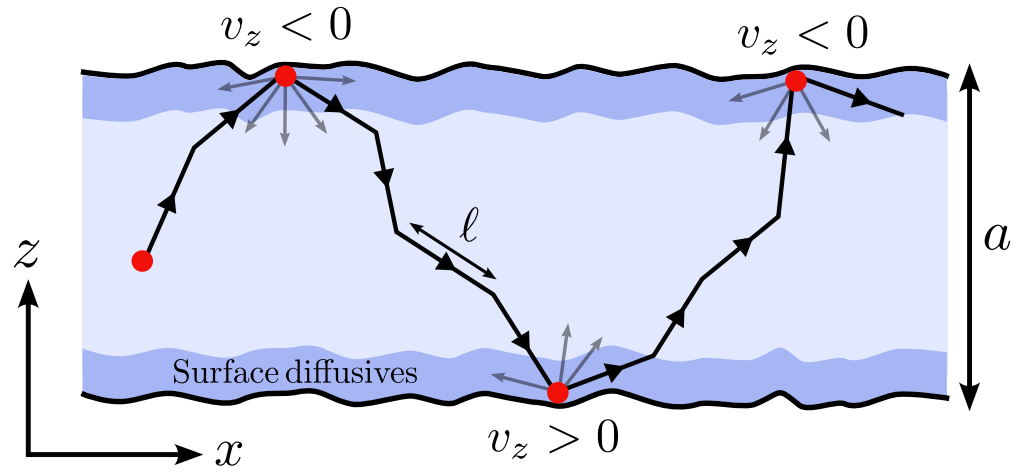

FIGURE 5.1 – Schéma des conditions aux bords dans la théorie de Fuchs-Sondheimer pour un fil métallique d'épaisseur a. Le transport longitudinal se fait selon la direction x, tandis que les surfaces du fil sont perpendiculaires à l'axe z. Les électrons sont diffusés par les surfaces rugueuses du fil : après collision avec un bord, leur direction de propagation n'est pas nécessairement reliée spéculairement à la direction incidente. Les flèches grises illustrent la distribution possible des directions après réflexion non spéculaire. Le libre parcours moyen des électrons de l'intérieur (délimité par des collisions avec des impuretés ou avec des phonons, mais pas avec les surfaces du fil) est noté ℓ. Les labels $v_z > 0$ et $v_z < 0$ distinguent les électrons se propageant respectivement vers la surface supérieure ou inférieure.

Pour simplifier le calcul, considérons un régime de basse température. Dans ce régime, la distribution de Fermi-Dirac peut être approximée par une fonction de Heaviside centrée au niveau de Fermi, *i.e.* $f_0 \sim \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_\mathbf{p})$ [12]. À température non nulle, les calculs seraient analogues à ceux présentés ci-après bien que plus difficiles à traiter analytiquement.

En utilisant la règle de dérivation des fonctions composées, on peut écrire que, dans le régime de basse température,

$$\frac{\partial f_0}{\partial v_x} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\mathbf{p}} \frac{\partial \varepsilon_\mathbf{p}}{\partial v_x} \approx -m v_x \delta(\varepsilon_\mathbf{p} - \varepsilon_F). \tag{5.11}$$

On paramétrise alors le système en coordonnées polaires, selon

$$v_x = v\cos\theta, \qquad v_z = v\sin\theta, \qquad dv_x dv_z = v dv d\theta. \tag{5.12}$$

L'argument du delta de Dirac doit être modifié pour correspondre aux changements de variable. Avec les propriétés du delta de Dirac, on écrit

$$\delta(\varepsilon_\mathbf{p} - \varepsilon_F) = \left|\frac{\partial \varepsilon_\mathbf{p}}{\partial v}\right|^{-1}_{v=v_F} \delta(v - v_F) = \frac{1}{m v_F}\delta(v - v_F), \tag{5.13}$$

où l'on a défini la vitesse de Fermi $v_F = \sqrt{2\varepsilon_F/m}$ telle que $\varepsilon_\mathbf{p} = \varepsilon_F$.

En combinant les résultats précédents, la densité de courant longitudinale s'écrit finalement comme

$$j_x^{(1)}(z) = \frac{2e^2\tau m E_x v_F^2}{h^2} \int_0^\pi d\theta\, \cos^2\theta \left[1 - e^{-a/2\ell\sin\theta}\mathrm{ch}\left(\frac{z - a/2}{\ell\sin\theta}\right)\right], \tag{5.14}$$

où l'on a défini un libre parcours moyen $\ell = \tau v_F$, correspondant à la distance moyenne parcourue entre deux collisions avec des impuretés de volume (*cf.* figure 5.1). L'équation (5.14) est la densité de courant longitudinale à travers le film, résultat analogue à celui de Fuchs et Sondheimer [8, 9].

Pour visualiser l'effet des surfaces sur le transport, la figure 5.2 représente le profil spatial de la densité de courant longitudinale $j_x^{(1)}(z)$ à travers le film. On constate que le courant est réduit à proximité des interfaces, où les collisions avec les surfaces perturbent le plus fortement la distribution électronique hors équilibre. La figure compare deux situations correspondant à des valeurs différentes du paramètre p. À ce stade, il suffit de retenir que p contrôle la nature de la réflexion des porteurs aux surfaces [9] ; sa signification précise sera introduite et discutée plus en détail dans la suite.

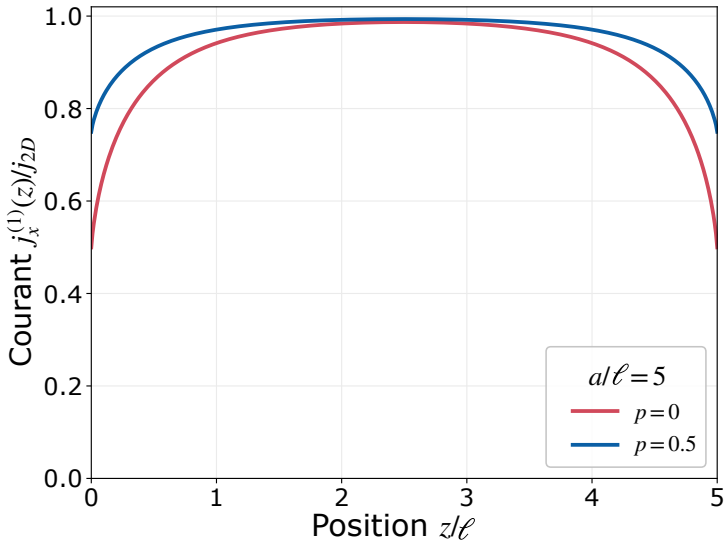

FIGURE 5.2 – Profil spatial de la densité de courant longitudinale $j_x^{(1)}(z)$ dans un film d'épaisseur a, normalisée par le courant bidimensionnel j_{2D}, pour $a/\ell = 5$. Les courbes comparent le cas de réflexions diffuses aux surfaces ($p = 0$) et de réflexions partiellement spéculaires ($p = 0.5$). La normalisation est définie par $j_{2D} = (\pi e^2 \tau m E_x v_F^2)/h^2$. L'augmentation de p réduit la perte de courant près des interfaces, ce qui rapproche le profil de la limite uniforme $j_x^{(1)}(z)/j_{2D} = 1$.

Conductivité moyenne. D'un point de vue expérimental, cette quantité est difficilement accessible directement, car il est délicat de sonder une densité de courant locale. Par conséquent, il est naturel de vouloir calculer le courant moyen à travers le fil (*i.e.* selon $\hat{\mathbf{z}}$). Dans ce cas, le courant moyen s'écrit

$$\overline{j_x^{(1)}} = \frac{1}{a}\int_0^a dz\, j_x^{(1)} = \frac{2e^2\tau m E_x v_F^2}{h^2}\left[\frac{\pi}{2} - \frac{1}{\kappa}\int_0^\pi d\theta\, \cos^2\theta \sin\theta \left(1 - e^{-\kappa/\sin\theta}\right)\right], \tag{5.15}$$

avec $\kappa = a/\ell$ un paramètre de taille du système adimensionné. Dans le régime $a \gg \ell$, *i.e.* pour un système très épais, on a $\kappa \gg 1$ et la contribution de l'intégrale devient négligeable. On retrouve alors la valeur de conductivité du *modèle de Drude* pour un feuillet 2D [12],

$$\sigma_0 = \frac{e^2\tau m v_F^2 \pi}{h^2}. \tag{5.16}$$

Connaissant cette valeur, on peut isoler la contribution de FS à la conductivité électrique longitudinale [8, 9]

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{4}{\pi}\frac{1}{\kappa}\int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2\theta \sin\theta \left(1 - e^{-\kappa/\sin\theta}\right). \tag{5.17}$$

Réflexions spéculaires. Dans son étude de synthèse, Sondheimer introduit un résultat plus général qui prend en compte une proportion de réflexions spéculaires aux surfaces au moyen d'un paramètre p [9]. Les conditions de bord sont alors généralisées comme

$$\begin{cases} f_1^+(0, v_z) = p f_1^-(0, -v_z), & v_z > 0, \quad (5.18a) \\ f_1^-(a, -v_z) = p f_1^+(a, v_z), & v_z < 0. \quad (5.18b) \end{cases}$$

Les étapes du calcul sont les mêmes que précédemment, mais avec ces conditions de bord plus générales. La conductivité électrique s'écrit dans ce cas [9]

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 1 - \frac{4}{\pi}\frac{1-p}{\kappa}\int_0^{\pi/2} d\theta \cos^2\theta \sin\theta \frac{1 - e^{-\kappa/\sin\theta}}{1 - p e^{-\kappa/\sin\theta}}. \tag{5.19}$$

Lorsque l'on ne considère que des réflexions diffusives ($p = 0$), l'expression (5.19) se réduit bien à (5.17). Le panneau (a) de la figure 5.3 illustre le comportement de la conductivité pour deux types de réflexions. La courbe rouge indique des réflexions diffusives ($p = 0$) tandis que la courbe bleue correspond à des réflexions partiellement spéculaires ($p = 0.5$). Dans les deux cas, lorsque l'épaisseur a devient de l'ordre du libre parcours moyen ℓ, la conductivité décroît fortement car l'effet des surfaces devient dominant par rapport à la contribution de volume [8, 9].

Résistivité longitudinale. La résistivité normalisée du système est alors définie par

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^{-1}. \tag{5.20}$$

Le panneau (b) de la figure 5.3 représente le comportement de la résistivité du système en fonction de son épaisseur pour deux cas : la courbe rouge correspond à des réflexions uniquement diffusives ($p = 0$), tandis que la courbe bleue correspond à des réflexions partiellement spéculaires ($p = 0.5$). On retrouve ainsi le constat de Fuchs et Sondheimer : la résistivité augmente lorsque l'épaisseur du film diminue [8, 9]. À température finie, la dérivation doit être modifiée en conservant l'élargissement thermique de $-\partial f_0/\partial\varepsilon$ et, en général, une dépendance en énergie du temps de relaxation. Le mécanisme physique reste toutefois le même : lorsque l'épaisseur devient comparable au libre parcours moyen, la diffusion aux surfaces réduit la conductivité longitudinale.

Portée du modèle pour les interconnecteurs réels. La théorie de Fuchs-Sondheimer isole la diffusion aux surfaces. Dans un film polycristallin, les joints de grains constituent un mécanisme résistif distinct, classiquement décrit par le modèle de Mayadas–Shatzkes [23]. Les mesures sur le cuivre montrent que les contributions des surfaces et des joints de grains dépendent conjointement de la microstructure, de la taille moyenne des grains et de la géométrie du conducteur [160, 161, 167]. Leur combinaison par une simple

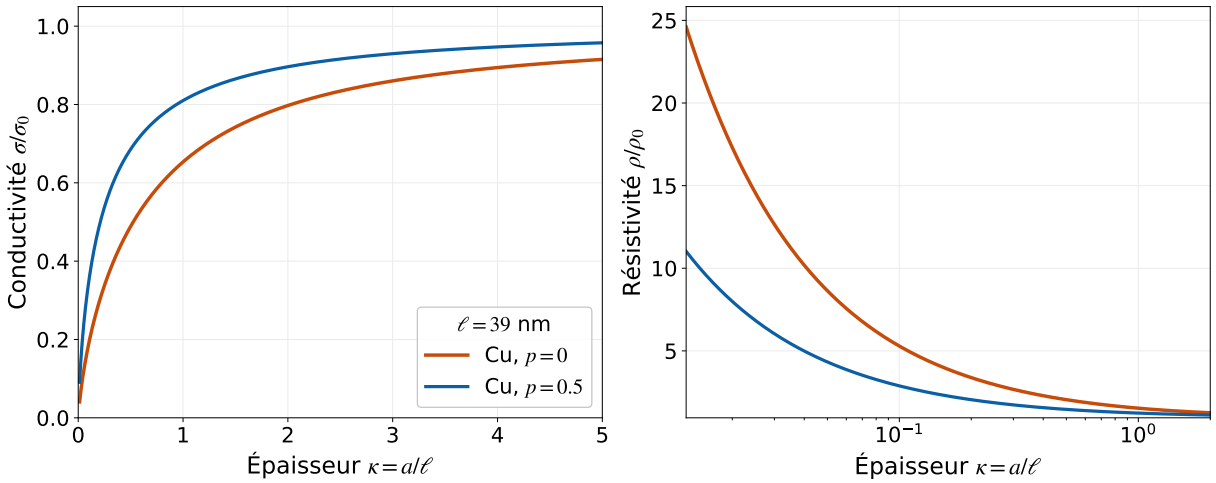

FIGURE 5.3 – Conductivité et résistivité normalisées d'un fil mince de cuivre dans le cadre de la théorie de Fuchs-Sondheimer, en fonction de l'épaisseur réduite $\kappa = a/\ell$. Le libre parcours moyen est fixé à $\ell = 39\,\text{nm}$, valeur typique du cuivre à température ambiante [166]. Le panneau (a) montre la conductivité normalisée σ/σ_0, tandis que le panneau (b) montre la résistivité normalisée $\rho/\rho_0 = (\sigma/\sigma_0)^{-1}$. Les deux courbes correspondent à des réflexions complètement diffusives aux surfaces ($p = 0$) et à des réflexions partiellement spéculaires ($p = 0.5$). Lorsque l'épaisseur devient comparable ou inférieure au libre parcours moyen, la diffusion aux surfaces réduit la conductivité longitudinale et augmente fortement la résistivité.

règle d'additivité doit donc être interprétée comme une approximation, plutôt que comme une séparation microscopique exacte [157].

Les expériences réalisées sur des fils de cuivre de largeur inférieure ou voisine de 100 nm mettent clairement en évidence l'augmentation de la résistivité avec la réduction des dimensions [158, 159]. Des études complémentaires sur des couches et lignes de cuivre confirment le rôle de la diffusion aux surfaces, tout en montrant que l'extraction d'un paramètre de spécularité unique dépend du modèle et de la structure réelle des interfaces [24, 168, 169]. Il convient en outre de distinguer la géométrie d'un film, confiné dans une direction, de celle d'un nanofil confiné dans deux directions, pour lequel la forme de la section et les différentes faces interviennent explicitement [25].

Le choix d'un matériau d'interconnexion ne peut ainsi reposer sur sa seule résistivité volumique. Le libre parcours moyen, la structure de grains, la sensibilité aux surfaces et les contraintes d'intégration sont également déterminants [26, 27, 166]. Les couches épitaxiées ou monocristallines de ruthénium permettent, par exemple, d'étudier l'effet de surface en limitant ou en supprimant la contribution des joints de grains [170, 171] ; elles illustrent l'intérêt, mais aussi la nécessité, d'une sélection multicritère des métaux alternatifs [28].

Enfin, le modèle minimal suppose une dispersion isotrope et un paramètre p indépendant de l'énergie et de la direction. Les analyses modernes de couches et nanofils métalliques montrent que la mise à l'échelle dépend de la structure électronique et de la géométrie des surfaces [25, 162]. Une généralisation de type Fuchs-Sondheimer à une dispersion fortement anisotrope a également été développée pour le transport phononique [172] ; ce résultat ne se transpose pas directement aux électrons, mais il illustre pourquoi une description scalaire de la diffusion aux frontières peut devenir insuffisante dans un matériau anisotrope.

5.2.3 . Bilan physique : une distribution inhomogène près des bords

La théorie de FS montre que les surfaces ne modifient pas seulement la valeur globale de la conductivité [8, 9]. Elles modifient d'abord la fonction de distribution elle-même. Dans le volume, loin des surfaces, les exponentielles présentes dans (5.8) disparaissent et l'on retrouve la solution de Drude usuelle. À proximité des bords, en revanche, la distribution est appauvrie par les réflexions diffusives, car les électrons qui quittent une surface ont perdu la « mémoire » de leur état incident.

La correction à la conductivité provient donc directement de cette zone de bord, dont l'extension typique est fixée par le libre parcours moyen $\ell = \tau v_F$ [8, 9]. Lorsque $a \gg \ell$, les surfaces n'affectent qu'une petite fraction du système et la conductivité tend vers sa valeur de Drude. Lorsque a devient comparable à ℓ, les zones perturbées par les deux surfaces occupent une partie importante du fil, ce qui réduit significativement la conductivité.

Ce point est essentiel pour la suite. Dans un métal ordinaire, l'inhomogénéité transverse de f_1 conduit simplement à une réduction de la conductivité linéaire. Dans un matériau où la courbure de Berry est non nulle, cette même inhomogénéité peut devenir une source de courant géométrique, car la vitesse anomale couple le champ électrique longitudinal à la variation transverse $\partial_z f_1$ [10].

5.3 . Généraliser Fuchs-Sondheimer aux matériaux topologiques

5.3.1 . Géométrie du système et hypothèses de travail

Nous généralisons maintenant le mécanisme de FS à des matériaux dont la structure de bande possède une courbure de Berry non nulle. La géométrie considérée reste proche de celle de la section précédente. Le système est fini selon la direction transverse z, avec $z \in [-a/2, a/2]$, et infini dans les directions parallèles aux surfaces. En dimension deux, seule la direction longitudinale x est présente ; en dimension trois, les directions parallèles aux surfaces sont x et y. Le champ électrique appliqué est uniforme et orienté selon la direction de transport $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}}$. Ainsi, la brisure de translation est uniquement associée aux deux surfaces situées en $z = \pm a/2$, tandis que la quantité mesurée est le courant longitudinal selon x.

Nous considérons des matériaux conducteurs dont les porteurs de charge à basse énergie sont organisés en vallées, indexées par χ. Dans chaque vallée, la dispersion électronique est notée $\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}}$, où $\mathbf{p}$ désigne l'impulsion mesurée par rapport au centre de la vallée. Les vallées seront traitées comme des canaux de transport indépendants. Cette hypothèse revient à supposer que la relaxation intravallée est beaucoup plus rapide que la relaxation intervallée, de sorte que les processus de diffusion entre vallées peuvent être négligés à l'échelle du transport considéré.

Nous supposons également qu'une seule bande par vallée coupe le niveau de Fermi. Cette approximation permet de décrire le transport à l'aide d'une dynamique semi-classique intrabande comme introduite dans le chapitre 3 [63]. En particulier, nous négligeons les effets de quantification transverse, ce qui impose que l'épaisseur du fil soit grande devant la longueur d'onde de Fermi $a \gg \lambda_F$ [63].

Les éventuels états de surface topologiques ne sont pas inclus explicitement dans le modèle. Le courant étudié dans ce chapitre est donc porté par les états de volume. Il pourra toutefois être spatialement localisé près des surfaces en raison des conditions aux

limites diffusives.

Dans le volume, les électrons subissent une diffusion élastique par les impuretés, caractérisée par un temps de relaxation τ. Les mécanismes extrinsèques tels que le *skew-scattering* et le *side jump* [43, 125] seront négligés. Aux surfaces, nous conservons l'hypothèse de FS : une collision diffusive avec un bord détruit la mémoire de l'état incident et réinitialise la partie hors-équilibre de la distribution électronique [8–10]. Le rôle des surfaces sera donc toujours de rendre la fonction de distribution dépendante de la coordonnée transverse z.

Enfin, contrairement au métal ordinaire, la dynamique semi-classique contient désormais une contribution géométrique liée à la courbure de Berry. C'est cette contribution qui, combinée à l'inhomogénéité en z créée par les surfaces, donnera naissance au courant longitudinal non linéaire étudié dans la suite.

5.3.2 . Équation de Boltzmann en présence de courbure de Berry

Comme introduit dans le chapitre consacré à la théorie semi-classique moderne, les propriétés de transport peuvent être étudiées à partir de l'équation de Boltzmann suivante [63]

$$\dot{\mathbf{r}}^{\chi}_{\mathbf{p}} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}} f^{\chi}_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) + \dot{\mathbf{p}}^{\chi} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{p}} f^{\chi}_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathcal{I}^{\chi}_{\mathbf{p}}, \tag{5.21}$$

où $f^{\chi}_{\mathbf{p}}$ est la fonction de distribution électronique dans la vallée χ. Le membre de droite correspond à l'intégrale de collision et contient les contributions dues aux collisions dans le système. Comme indiqué plus haut, nous ne retenons ici que les collisions élastiques entre électrons et impuretés de volume. Par conséquent, le terme de collision dans l'*approximation de Born* prend la forme

$$\mathcal{I}^{\chi}_{\mathbf{p}} = -\frac{1}{\rho(\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}})\tau} \sum_{\mathbf{p}'} \delta(\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}} - \varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}'})(f^{\chi}_{\mathbf{p}} - f^{\chi}_{\mathbf{p}'}). \tag{5.22}$$

Ici, $\rho(\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}})$ est la densité d'états à l'énergie $\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}}$ et τ le temps de relaxation. De plus, dans (5.21), les quantités $\dot{\mathbf{r}}^{\chi}_{\mathbf{p}}$ et $\dot{\mathbf{p}}^{\chi}$ sont données par les équations du mouvement modifiées par la courbure de Berry [2, 5]

$$\dot{\mathbf{r}}^{\chi}_{\mathbf{p}} = \mathbf{v}^{\chi}_{\mathbf{p}} - \frac{1}{\hbar}\dot{\mathbf{p}} \times \boldsymbol{\Omega}^{\chi}_{\mathbf{p}}, \tag{5.23a}$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -e\mathbf{E}. \tag{5.23b}$$

Dans les expressions ci-dessus, $\mathbf{v}^{\chi}_{\mathbf{p}} = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{p}}\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}}$ est la vitesse de groupe des électrons et $\boldsymbol{\Omega}^{\chi}_{\mathbf{p}}$ est la courbure de Berry dans la vallée χ.

La différence essentielle avec le métal ordinaire ne réside donc ni dans la géométrie du problème ni dans la nature des conditions de bord, qui restent celles de FS. Elle réside dans la dynamique semi-classique des porteurs. En présence de courbure de Berry, un champ électrique longitudinal peut induire une vitesse anomale transverse. Cette vitesse anomale couple le transport longitudinal à la variation spatiale de la distribution près des surfaces. Il s'agit donc de résoudre (5.21) avec les conditions de bord de FS [10].

5.3.3 . Conditions de bord et développement perturbatif

Développement de la fonction de distribution. Pour résoudre l'équation de Boltzmann, nous développons la fonction de distribution en puissances du champ électrique,

$$f^{\chi}_{\mathbf{p}} \simeq f^{\chi}_{0,\mathbf{p}} + f^{\chi}_{1,\mathbf{p}} + f^{\chi}_{2,\mathbf{p}}, \qquad f^{\chi}_{n,\mathbf{p}} \propto E^{n}_{x}. \tag{5.24}$$

Comme nous le verrons, la contribution géométrique recherchée apparaît à l'ordre deux en champ électrique. Les ordres supérieurs ne seront pas traités dans la suite de ce chapitre. La raison principale est expérimentale : plus l'ordre perturbatif est élevé, plus l'effet attendu est faible, et donc plus sa pertinence pratique diminue.

Conditions de bord. Dans la suite, nous imposons la version entièrement diffusive des conditions de FS [8–10]. Autrement dit, après une collision avec une surface, la partie hors-équilibre de la distribution est réinitialisée. Pour tout ordre $n \geq 1$, les conditions aux limites s'écrivent

$$\begin{cases} f^{\chi}_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r}_{\parallel}, -a/2) = 0, \qquad v^{\chi}_{\mathbf{p},z} > 0, & \text{(5.25a)} \\ f^{\chi}_{n,\mathbf{p}}(\mathbf{r}_{\parallel}, a/2) = 0, \qquad v^{\chi}_{\mathbf{p},z} < 0. & \text{(5.25b)} \end{cases}$$

Ici, le signe entrant ou sortant est déterminé par la vitesse de groupe $v^{\chi}_{\mathbf{p},z}$, et non par la vitesse complète $\dot{z}^{\chi}_{\mathbf{p}}$. Cette distinction est cohérente avec le développement perturbatif en puissances du champ électrique.

Développement du courant. Dans cette géométrie, la brisure de translation selon z implique que le courant local dépend lui aussi de la coordonnée transverse. Nous définissons le courant longitudinal local par

$$j_x(z) = -e \sum_{\chi} \int \frac{d^d p}{h^d}\, \dot{x}^{\chi}_{\mathbf{p}}\, f^{\chi}_{\mathbf{p}}(z), \tag{5.26}$$

où d désigne la dimension du modèle considéré. Dans un système bidimensionnel, $d = 2$ et $\mathbf{p} = (p_x, p_z)$, tandis que dans un système tridimensionnel, $d = 3$ et $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$. Dans cette expression, nous ne tenons pas compte explicitement des contributions de courant de magnétisation associées au moment magnétique orbital du paquet d'onde [10,121]. Ces termes seront discutés séparément parmi les limites et extensions du modèle.

Comme dans la théorie de FS ordinaire, la quantité macroscopique pertinente est obtenue en moyennant le courant local sur l'épaisseur du système,

$$\overline{j_x} = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} dz\, j_x(z). \tag{5.27}$$

Le courant local admet alors lui aussi un développement en puissances du champ [10],

$$j_x(z) \simeq j_{1,x}(z) + j_{2,x}(z), \tag{5.28}$$

où $j_{1,x} \propto E_x$ est la réponse linéaire et $j_{2,x} \propto E_x^2$ la réponse non linéaire d'ordre 2. Après moyenne sur l'épaisseur, on obtient

$$\overline{j_x} \simeq \sigma_1 E_x + \sigma_2 E_x^2. \tag{5.29}$$

Le coefficient σ_1 correspond à la conductivité linéaire du système fini, déjà modifiée par la diffusion aux surfaces. Le coefficient σ_2, absent dans le modèle ordinaire considéré précédemment, sera au centre de la suite : il décrit ici un courant longitudinal non linéaire induit par la combinaison de la courbure de Berry et de l'inhomogénéité transverse de la distribution électronique [10].

5.4 . Apparition d'un courant géométrique de bord

5.4.1 . À l'ordre linéaire : retour au résultat de Fuchs-Sondheimer

Commençons par résoudre l'équation de Boltzmann au premier ordre en champ électrique. À l'ordre zéro, la fonction de distribution est simplement la fonction de Fermi-Dirac d'équilibre,

$$f^{\chi}_{\mathbf{p}}(z) = f^{\chi}_{0,\mathbf{p}}, \tag{5.30}$$

et elle est indépendante de la position transverse,

$$\frac{\partial f^{\chi}_{0,\mathbf{p}}}{\partial z} = 0. \tag{5.31}$$

À l'équilibre, le système (densité de charge et la structure de bandes) est en effet supposé homogène.

Au premier ordre en E_x, l'équation de Boltzmann devient

$$v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\frac{\partial f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}}{\partial z} - eE_x\frac{\partial f^{\chi}_{0,\mathbf{p}}}{\partial p_x} = \mathcal{I}^{\chi}_{1,\mathbf{p}}. \tag{5.32}$$

Sous l'hypothèse que la dispersion $\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}}$ est paire sous $p_x \to -p_x$ [2], comme dans la dérivation du modèle minimal, le terme source $\partial_{p_x} f^{\chi}_{0,\mathbf{p}}$ est impair en p_x. La solution pertinente pour le courant longitudinal est donc elle aussi impaire en p_x. Dans cette partie impaire, le terme de collision se réduit à une relaxation avec le temps τ, et l'on retrouve une équation de la même forme que dans la théorie ordinaire de FS.

En imposant les conditions de bord diffusives introduites précédemment, on obtient [10]

$$\begin{cases} f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}(z) = h^{\chi}_{1,\mathbf{p}}\left[1 - \exp\left(-\dfrac{z + a/2}{v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\tau}\right)\right], & v^{\chi}_{\mathbf{p},z} > 0, \quad \text{(5.33a)} \\ f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}(z) = h^{\chi}_{1,\mathbf{p}}\left[1 - \exp\left(-\dfrac{z - a/2}{v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\tau}\right)\right], & v^{\chi}_{\mathbf{p},z} < 0, \quad \text{(5.33b)} \end{cases}$$

avec

$$h^{\chi}_{1,\mathbf{p}} = eE_x\tau\frac{\partial f^{\chi}_{0,\mathbf{p}}}{\partial p_x}. \tag{5.34}$$

Ces expressions sont l'analogue direct du résultat de FS [8, 9]. Loin des surfaces, les exponentielles disparaissent et la distribution tend vers la solution de Drude dans un système infini,

$$f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}(z) \longrightarrow h^{\chi}_{1,\mathbf{p}}. \tag{5.35}$$

Près des surfaces, en revanche, la distribution est déplétée par les conditions aux limites diffusives. La longueur caractéristique sur laquelle cette inhomogénéité se développe est de l'ordre de $|v^{\chi}_{\mathbf{p},z}|\tau$, et devient de l'ordre du libre parcours moyen après intégration angulaire.

Le point important est que la courbure de Berry ne produit pas encore de nouvelle contribution au courant longitudinal à cet ordre. La raison est simple : la vitesse anomale est elle-même proportionnelle et transverse au champ électrique. Elle ne peut donc modifier l'équation de transport qu'à partir de l'ordre deux lorsqu'elle agit sur la correction linéaire $f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}$ [10].

2. Cette hypothèse permet de traiter analytiquement le terme de collision dans l'équation de Boltzmann dans sa forme la plus exacte, *i.e.* sans l'approximation du temps de relaxation qui violait des lois de conservation (*cf.* Supp. Mat. de [10]).

5.4.2 . À l'ordre deux : le terme source géométrique

La nouveauté apparaît à l'ordre deux en champ électrique. En développant l'équation de Boltzmann à cet ordre, on obtient

$$v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\frac{\partial f^{\chi}_{2,\mathbf{p}}}{\partial z}+\frac{eE_x\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}}{\hbar}\frac{\partial f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}}{\partial z}-eE_x\frac{\partial f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}}{\partial p_x}=\mathcal{I}^{\chi}_{2,\mathbf{p}}. \tag{5.36}$$

Cette équation contient deux termes sources distincts. Le terme $-eE_x\partial_{p_x}f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}$ est le terme non linéaire ordinaire, déjà présent même en absence de courbure de Berry. Le terme

$$\frac{eE_x\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}}{\hbar}\frac{\partial f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}}{\partial z} \tag{5.37}$$

est en revanche d'origine géométrique. Il provient de la vitesse anomale transverse induite par la courbure de Berry [2],

$$\dot{z}^{\chi}_{\text{anom}}=-\frac{eE_x}{\hbar}\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}. \tag{5.38}$$

Autrement dit, le champ électrique longitudinal génère, en présence de courbure de Berry, un déplacement transverse anomal. Ce déplacement transverse sonde l'inhomogénéité de la distribution créée par les surfaces à l'ordre linéaire.

Cette structure permet de comprendre immédiatement pourquoi le courant étudié ici est un effet de bord. Si le système était parfaitement homogène selon z, on aurait

$$\frac{\partial f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}}{\partial z}=0, \tag{5.39}$$

et le terme géométrique (5.37) disparaîtrait. Ce n'est donc pas seulement la courbure de Berry qui est nécessaire, mais sa combinaison avec la brisure de translation due aux surfaces [10].

Il est utile de décomposer $f^{\chi}_{2,\mathbf{p}}$ selon sa parité sous $p_x\to -p_x$, *i.e.* $f^{\chi}_{2,\mathbf{p}}=f^{\chi,e}_{2,\mathbf{p}}+f^{\chi,o}_{2,\mathbf{p}}$, où les exposants e (pour *even*) et o (pour *odd*) désignent respectivement les parties paire et impaire en p_x. Sous l'hypothèse que $\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}}$ est paire en p_x, la correction linéaire $f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}$ est impaire en p_x. Ainsi, $\partial_{p_x}f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}$ est paire en p_x, tandis que $\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}\partial_z f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}$ est impaire en p_x lorsque $\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}$ est paire en p_x [3]. Les deux sources de l'équation (5.36) alimentent donc deux secteurs de parité différents.

Cette observation est importante pour le courant longitudinal. En effet, la partie dominante du courant selon x est de la forme

$$j_{2,x}(z)=-e\sum_{\chi}\int\frac{d^dp}{h^d}v^{\chi}_{\mathbf{p},x}f^{\chi}_{2,\mathbf{p}}(z). \tag{5.40}$$

Comme $v^{\chi}_{\mathbf{p},x}$ est impair en p_x, seule la partie impaire de $f^{\chi}_{2,\mathbf{p}}$ contribue à cette intégrale. La contribution géométrique est donc précisément celle qui est sélectionnée par le courant longitudinal.

La partie impaire de l'équation de Boltzmann à l'ordre deux s'écrit alors

$$v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\frac{\partial f^{\chi,o}_{2,\mathbf{p}}}{\partial z}+\frac{eE_x\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}}{\hbar}\frac{\partial f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}}{\partial z}=-\frac{f^{\chi,o}_{2,\mathbf{p}}}{\tau}. \tag{5.41}$$

3. Cette circonstance sera réalisée dans les modèles simples traités dans la suite de ce chapitre.

Cette équation peut être résolue analytiquement avec les mêmes conditions de bord diffusives que précédemment. On obtient

$$\begin{cases} f^{\chi,o}_{2,\mathbf{p}}(z) = h^{\chi}_{2,\mathbf{p}}\left(z+\dfrac{a}{2}\right)\exp\left[-\dfrac{z+a/2}{v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\tau}\right], & v^{\chi}_{\mathbf{p},z}>0, \quad (5.42a) \\ f^{\chi,o}_{2,\mathbf{p}}(z) = h^{\chi}_{2,\mathbf{p}}\left(z-\dfrac{a}{2}\right)\exp\left[-\dfrac{z-a/2}{v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\tau}\right], & v^{\chi}_{\mathbf{p},z}<0, \quad (5.42b) \end{cases}$$

où

$$h^{\chi}_{2,\mathbf{p}} = \frac{e^2E_x^2\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}}{\hbar\left(v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\right)^2}\frac{\partial f^{\chi}_{0,\mathbf{p}}}{\partial p_x}. \quad (5.43)$$

Cette solution est proportionnelle à la courbure de Berry et au carré du champ électrique. Elle disparaît donc dans un métal ordinaire, où la géométrie de bande est triviale.

5.4.3 . Localisation du courant près des surfaces

La forme de la solution (5.42) permet d'identifier directement l'origine spatiale du courant non linéaire . Pour les électrons qui quittent la surface inférieure, $v^{\chi}_{\mathbf{p},z}>0$, la correction est proportionnelle à

$$\left(z+\frac{a}{2}\right)\exp\left[-\frac{z+a/2}{v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\tau}\right]. \quad (5.44)$$

Elle est donc maximale à une distance de l'ordre de $v^{\chi}_{\mathbf{p},z}\tau$ de la surface située en $z=-a/2$, puis décroît exponentiellement vers l'intérieur du système. De manière analogue, pour $v^{\chi}_{\mathbf{p},z}<0$, la correction est localisée près de la surface supérieure située en $z=a/2$.

Ainsi, contrairement à la correction linéaire $f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}$, qui tend vers la solution homogène de Drude loin des surfaces, la correction $f^{\chi,o}_{2,\mathbf{p}}$ est essentiellement un objet de bord. Elle devient négligeable dans le volume lorsque la distance à la surface est grande devant le libre parcours moyen. Après intégration sur les directions de propagation, la longueur typique de localisation du courant non linéaire est donc de l'ordre du libre parcours moyen ℓ [10].

Il est important d'insister sur la nature de cette localisation. Le courant obtenu ici n'est pas introduit comme un courant porté par des états de surface topologiques. Il est calculé à partir des états de volume, mais sa distribution spatiale est rendue non uniforme par les conditions de bord diffusives. En ce sens, il s'agit d'un courant de bord géométrique porté par les électrons de volume.

Le mécanisme physique peut alors se résumer ainsi. À l'ordre linéaire, les surfaces créent une inhomogénéité transverse de la distribution,

$$\frac{\partial f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}}{\partial z}\neq 0, \quad (5.45)$$

localisée près des bords. En présence de courbure de Berry, le champ longitudinal induit une vitesse anomale transverse. Cette vitesse anomale couple alors le champ électrique à l'inhomogénéité de bord et génère une correction d'ordre deux,

$$f^{\chi,o}_{2,\mathbf{p}} \propto E_x^2\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}. \quad (5.46)$$

Le courant longitudinal non linéaire qui en résulte est donc le produit de deux ingrédients : la géométrie de bande, à travers la courbure de Berry, et la diffusion non spéculaire aux surfaces, à travers la dépendance en z de $f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}$.

À ce stade, nous avons établi l'existence d'une contribution locale au courant longitudinal non linéaire. Son amplitude, son signe et sa contribution moyenne après intégration sur l'épaisseur dépendent toutefois du modèle de bande et des symétries du système. C'est pourquoi nous considérons maintenant un exemple concret : un métal de Dirac bidimensionnel à courbure de Berry non nulle.

5.5 . Métal de Dirac bidimensionnel

5.5.1 . Modèle effectif, courbure de Berry et structure de vallées

Considérons maintenant un exemple concret qui illustre le mécanisme présenté dans la section précédente. Nous nous plaçons dans un système bidimensionnel, contenu dans le plan (x, z), fini selon z et infini selon x. Le champ électrique est toujours appliqué dans la direction longitudinale, $\mathbf{E} = E_x\hat{\mathbf{x}}$.

Nous considérons un métal de Dirac massif possédant deux vallées reliées par symétrie de renversement du temps, que nous indexons par $\chi = \pm 1$. La dispersion électronique de la bande de conduction dans la vallée χ est prise sous la forme

$$\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}} = \sqrt{c^2p^2 + m^2} + \alpha^{\chi}_z p_z, \tag{5.47}$$

où $\mathbf{p} = (p_x, p_z)$ est mesuré depuis le centre de la vallée, c est la vitesse de Fermi, m est le gap, et α^{χ}_z décrit une inclinaison de la dispersion dans la direction transverse p_z. Les deux vallées étant reliées par renversement du temps, l'inclinaison change de signe entre elles, $\alpha^{\chi}_z = \chi\alpha_z$.

La courbure de Berry associée à la vallée χ est orientée selon la direction perpendiculaire au plan du système [103],

$$\mathbf{\Omega}^{\chi}_{\mathbf{p}} = \chi \frac{m\hbar^2c^2}{2\left(c^2p^2 + m^2\right)^{3/2}}\hat{\mathbf{y}}. \tag{5.48}$$

Elle est donc opposée dans les deux vallées. Cette propriété est une conséquence directe de la symétrie de renversement du temps : la courbure de Berry change de signe sous cette symétrie. À l'énergie de Fermi, nous noterons

$$\Omega_y \equiv \frac{m\hbar^2c^2}{2\varepsilon_F^3}, \tag{5.49}$$

de sorte que, en absence d'inclinaison, la courbure de Berry dans la vallée χ vaut simplement $\Omega^{\chi}_y = \chi\Omega_y$ au niveau de Fermi.

À dessein d'alléger la notation pour la suite, le libre parcours moyen effectif associé aux électrons de la bande de conduction est défini comme

$$\ell \equiv c\tau\sqrt{1 - \frac{m^2}{\varepsilon_F^2}}. \tag{5.50}$$

Dans la suite, nous travaillons à basse température, de sorte que les intégrales de transport sont dominées par les états proches de l'énergie de Fermi.

5.5.2 . Distribution spatiale du courant non linéaire

Le résultat général de la section précédente montre que la partie géométrique de la correction d'ordre deux à la distribution est proportionnelle à la courbure de Berry et localisée près des surfaces. En l'insérant dans l'expression du courant longitudinal, on obtient un courant non linéaire local

$$j^{\chi}_{2,x}(z) = -e \int \frac{d^2p}{h^2} v^{\chi}_{\mathbf{p},x} f^{\chi,o}_{2,\mathbf{p}}(z), \tag{5.51}$$

où seule la partie impaire en p_x de $f^{\chi}_{2,\mathbf{p}}$ contribue.

À basse température, la contribution locale obtenue pour une vallée peut s'écrire, dans le cas non incliné $\alpha_z = 0$ [10],

$$j^{\chi}_{2,x}(z) = \chi \mathcal{J}_0 \int_0^{\pi} d\theta \, \tan^2\theta \left[\left(z + \frac{a}{2} \right) e^{-(z+a/2)/(\ell \sin\theta)} - \left(\frac{a}{2} - z \right) e^{-(a/2-z)/(\ell \sin\theta)} \right], \tag{5.52}$$

avec

$$\mathcal{J}_0 = \frac{e^3 E_x^2}{8\pi^2 \hbar} \frac{m}{\varepsilon_F^2}. \tag{5.53}$$

Cette expression illustre directement la nature de bord du courant. Le premier terme de (5.52) est localisé près de la surface inférieure $z = -a/2$, tandis que le second est localisé près de la surface supérieure $z = a/2$. Dans les deux cas, la longueur typique de décroissance est de l'ordre de ℓ après intégration sur les angles (*cf.* figure 5.4).

Il faut insister sur le fait que ce courant n'est pas porté par des états de surface topologiques. Il provient des états de volume, mais les conditions de bord diffusives rendent la distribution hors équilibre inhomogène près des surfaces. La courbure de Berry convertit ensuite cette inhomogénéité en une contribution longitudinale non linéaire. Une autre façon de voir cela est la différence entre les échelles de longueurs. Le courant (5.52) est localisé sur une distance $\sim \ell$ des bords. Alors que, les courants portés par des états de surface protégés topologiquement sont localisés à une distance du bord de l'ordre de quelques atomes.

5.5.3 . Symétries et compensation entre vallées

La structure en vallées impose des contraintes importantes sur la densité de courant. En absence d'inclinaison transverse, la densité de courant associée à une vallée est anti-symétrique par rapport au centre du système,

$$j^{\chi}_{2,x}(z) = -j^{\chi}_{2,x}(-z). \tag{5.54}$$

Autrement dit, les deux bords portent des contributions opposées dans une même vallée. Cette propriété est visible directement dans (5.52), où les deux termes de bord s'échangent sous $z \to -z$ avec un changement de signe.

Les deux vallées étant reliées par renversement du temps, leurs courbures de Berry sont opposées. En outre, la symétrie miroir par rapport au centre du fil relie les profils de courant des deux vallées selon

$$j^{+}_{2,x}(z) = j^{-}_{2,x}(-z). \tag{5.55}$$

En combinant les relations (5.54) et (5.55), on obtient

$$j^{+}_{2,x}(z) = -j^{-}_{2,x}(z). \tag{5.56}$$

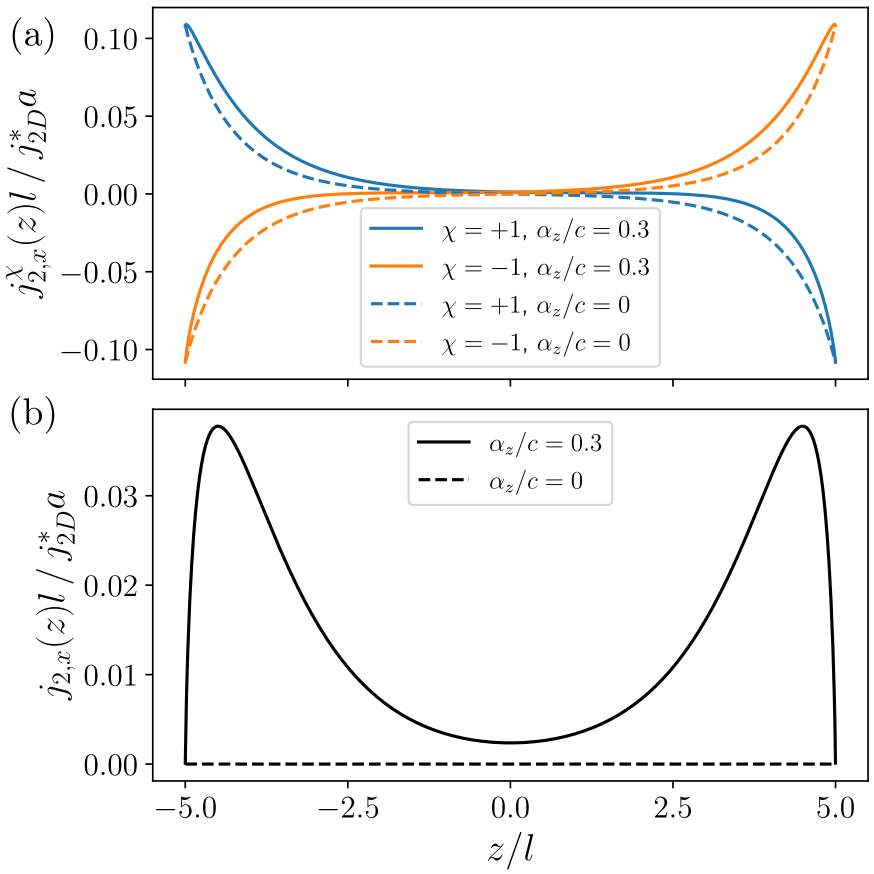

FIGURE 5.4 – Densité de courant longitudinal non linéaire induite par la courbure de Berry dans un métal de Dirac bidimensionnel à deux vallées reliées par symétrie de renversement du temps. Les paramètres utilisés sont $a = 10\ell$ et $m = 0.5\varepsilon_F$. Le courant est normalisé par $j^*_{2D}a/\ell$, où $j^*_{2D} = j_{2D}c/\alpha_z$ est une amplitude de courant indépendante de l'inclinaison, j_{2D} désignant l'échelle de courant introduite dans le texte. Le panneau (a) montre les contributions résolues en vallée $j^{\chi}_{2,x}(z)$: elles sont localisées près des surfaces sur une longueur de l'ordre du libre parcours moyen ℓ. En absence d'inclinaison transverse de la dispersion, $\alpha_z = 0$, les profils associés aux deux vallées sont opposés et se compensent. Une inclinaison $\alpha_z \neq 0$ déforme les profils de courant et empêche cette compensation exacte. Le panneau (b) montre la densité de courant totale $j_{2,x}(z) = \sum_{\chi} j^{\chi}_{2,x}(z)$, qui s'annule pour $\alpha_z = 0$ mais devient non nulle lorsque la dispersion est inclinée dans la direction transverse.

Par conséquent, la densité de courant non linéaire totale,

$$j_{2,x}(z) = \sum_{\chi=\pm1} j^{\chi}_{2,x}(z) = 0, \tag{5.57}$$

s'annule point par point lorsque la dispersion n'est pas inclinée.

Cette annulation ne signifie pas que le mécanisme géométrique est absent. Elle signifie plutôt que, dans un système trop symétrique, les contributions de bord et de vallée se compensent exactement. Pour obtenir une densité de courant totale mesurable, il faut briser cette compensation sans détruire la symétrie de renversement du temps globale du système. En effet, si la symétrie par renversement du temps est brisée, alors des courant longitudinaux $\propto E_x^2$ peuvent exister et ceci même en l'absence de courbure de Berry [116].

5.5.4 . Rôle de l'inclinaison transverse de la dispersion

L'inclinaison transverse de la dispersion joue précisément ce rôle. Lorsque $\alpha_z \neq 0$, la dispersion dans une vallée n'est plus symétrique sous la transformation

$$(x, z; p_x, p_z) \longrightarrow (-x, -z; -p_x, -p_z). \tag{5.58}$$

Comme le montre la figure 5.4, une inclinaison transverse $\alpha_z \neq 0$ rompt l'antisymétrie du profil de courant de chaque vallée par rapport au centre du fil, empêchant ainsi la compensation exacte des contributions localisées aux deux surfaces après sommation sur les vallées [10].

Physiquement, l'inclinaison transverse modifie différemment les états se propageant vers la surface supérieure et vers la surface inférieure. Comme le courant géométrique est lui-même un effet de surface, cette asymétrie de propagation se traduit par un déséquilibre entre les deux bords. Le résultat est une densité de courant non linéaire totale non nulle,

$$j_{2,x}(z) = j^{+}_{2,x}(z) + j^{-}_{2,x}(z) \neq 0. \tag{5.59}$$

Il est important de noter que l'inclinaison seule ne suffit pas à produire le courant étudié ici. La densité de courant obtenue reste proportionnelle à la courbure de Berry. Dans le modèle de Dirac, la réponse moyenne sera donc proportionnelle au produit $\Omega_y \alpha_z$ [10].

Ainsi, la courbure de Berry fournit l'origine géométrique de l'effet, tandis que l'inclinaison transverse empêche sa compensation entre les deux bords et les deux vallées.

5.5.5 . Courant moyen et régimes limites

La quantité directement reliée à une mesure de transport est le courant moyen sur l'épaisseur du système,

$$\overline{j_{2,x}} = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} dz\, j_{2,x}(z). \tag{5.60}$$

En développant le résultat au premier ordre en inclinaison adimensionnée α_z / v_F, on obtient [10]

$$\overline{j_{2,x}} = \sigma_2 E_x^2 \simeq j_{2D} \left[1 - I(\kappa)\right], \qquad \kappa = \frac{a}{\ell}, \tag{5.61}$$

où

$$I(\kappa) = \frac{3}{8} \int_0^{\pi} d\theta\, \cos^2\theta\, \sin\theta\, (\kappa + 2\sin\theta)^2\, e^{-\kappa/\sin\theta}. \tag{5.62}$$

L'amplitude caractéristique du courant est

$$j_{2D} = E_x^2 \frac{16}{3} \frac{e^3}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\varepsilon_F \Omega_y \ell^2}{c^2 a} \sqrt{1 - \frac{m^2}{\varepsilon_F^2}} \frac{\alpha_z}{c}. \tag{5.63}$$

Cette expression rend explicites les ingrédients du phénomène. Le courant est quadratique en champ électrique, proportionnel à la courbure de Berry évaluée au niveau de Fermi, proportionnel à l'inclinaison transverse, et dépend de l'épaisseur du système à travers le rapport a/ℓ.

Les régimes limites permettent de clarifier l'origine physique de cette dépendance. Pour un système épais, $a \gg \ell$, on a

$$\overline{j_{2,x}} \simeq j_{2D}. \tag{5.64}$$

Comme $j_{2D} \propto 1/a$, le courant moyen tend vers zéro dans la limite $a \to \infty$. Cela reflète le fait que le courant local est confiné dans une région de taille ℓ près des surfaces : lorsque l'épaisseur totale augmente, la contribution de bord est diluée dans la moyenne sur l'épaisseur.

Dans la limite opposée, $a \ll \ell$, on obtient [10]

$$\overline{j_{2,x}} \simeq \frac{9a^2}{4\ell^2} \log\left(\frac{\ell}{a}\right) j_{2D}. \tag{5.65}$$

À noter que notre théorie ne s'applique que pour une épaisseur supérieure à la longueur d'onde de Fermi du métal, *i.e.* $a > \lambda_F$.

Le courant moyen s'annule également lorsque $a \to 0$. Dans ce régime, la diffusion aux surfaces devient omniprésente et les contributions associées aux deux bords se recouvrent fortement, ce qui supprime le courant net.

Le courant non linéaire moyen s'annule donc dans les deux limites $a \gg \ell$ et $a \ll \ell$. Il possède par conséquent un maximum pour une épaisseur intermédiaire,

$$a \sim \ell. \tag{5.66}$$

Cette dépendance en épaisseur constitue une signature directe de son origine de type FS : le courant apparaît lorsque les surfaces influencent significativement la distribution électronique, sans pour autant que les deux bords soient complètement confondus. La figure 5.5 résume cette dépendance en épaisseur.

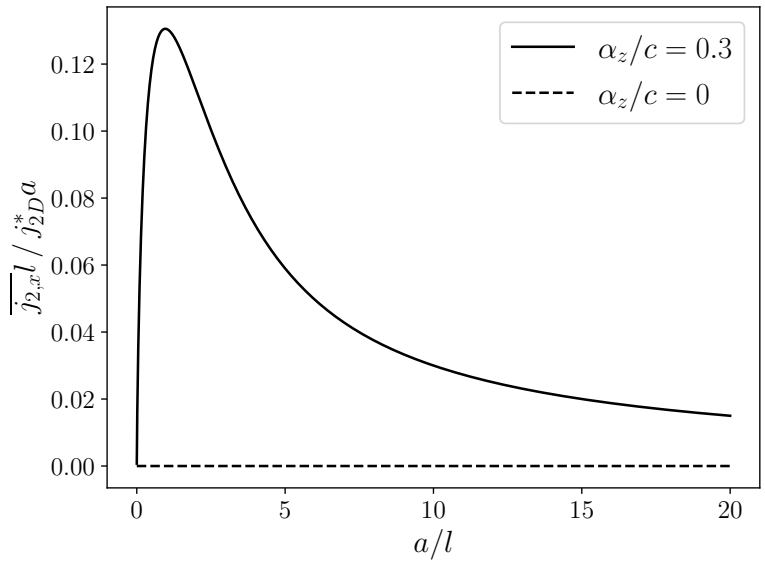

FIGURE 5.5 – Courant longitudinal non linéaire moyen dans un métal de Dirac bidimensionnel en fonction de l'épaisseur réduite a/ℓ. Le courant est normalisé sous la forme $j_{2,x}\ell/(j^*_{2D}a)$, où $j^*_{2D} = j_{2D}c/\alpha_z$ est une échelle de courant indépendante de l'inclinaison transverse. Cette normalisation est choisie de sorte que $j^*_{2D}a$ soit indépendant de l'épaisseur du système. En absence d'inclinaison transverse, $\alpha_z = 0$, le courant moyen s'annule. Pour $\alpha_z/c = 0.3$, le courant moyen est non nul et présente un maximum lorsque l'épaisseur du système est de l'ordre du libre parcours moyen, $a \sim \ell$. Il s'annule dans les deux limites $a/\ell \to 0$ et $a/\ell \to \infty$, ce qui confirme son origine de bord de type Fuchs-Sondheimer.

5.6 . Extension tridimensionnelle : semi-métaux de Weyl

Après avoir étudié le cas d'un métal de Dirac bidimensionnel, nous montrons maintenant que le mécanisme précédent peut être généralisé à des systèmes tridimensionnels. Les semi-métaux de Weyl constituent un exemple naturel, puisque leur courbure de Berry possède une structure monopolaire dans l'espace des impulsions [59]. Le mécanisme physique reste le même dans son principe : les surfaces créent une inhomogénéité de la distribution électronique, et la courbure de Berry convertit cette inhomogénéité en un courant longitudinal non linéaire. Cependant, la structure angulaire de la courbure de Berry rend les conditions de symétrie plus restrictives que dans le cas bidimensionnel.

5.6.1 . Modèle de Weyl et courbure de Berry monopolaire

Ayant traité un exemple de système bidimensionnel, nous allons maintenant explorer un exemple de système tridimensionnel. Considérons un semi-métal de Weyl sous forme de fil mince, infini dans les directions x et y, et fini selon z, avec $z \in [-a/2, a/2]$. Le champ électrique est appliqué selon la direction longitudinale, $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}}$.

Nous considérons deux vallées de chiralités opposées, indexées par $\chi = \pm 1$. À proximité du nœud de Weyl de vallée χ, la dispersion de la bande de conduction est prise sous la forme

$$\varepsilon^{\chi}_{\mathbf{p}} = cp + \alpha^{\chi}_y p_y + \alpha^{\chi}_z p_z, \tag{5.67}$$

où $p = |\mathbf{p}|$, c est la vitesse de Fermi, et α^{χ}_y, α^{χ}_z sont les vitesses d'inclinaison du cône dans les directions transverses au transport.

La courbure de Berry d'un nœud de Weyl est donnée par [10]

$$\mathbf{\Omega}^{\chi}_{\mathbf{p}} = \chi \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathbf{p}}{p^3}. \tag{5.68}$$

Elle possède donc la structure d'un monopôle dans l'espace des impulsions, de charge topologique χ. Cette différence est importante par rapport au modèle de Dirac bidimensionnel : dans le cas Dirac, la composante pertinente Ω^{χ}_y pouvait être essentiellement traitée comme constante sur la surface de Fermi, tandis que dans un semi-métal de Weyl elle dépend de la direction de $\mathbf{p}$.

Le courant géométrique de bord dépend encore de la composante de la courbure de Berry perpendiculaire à la fois au champ électrique et à la normale aux surfaces. Ici, puisque $\mathbf{E} \parallel \hat{\mathbf{x}}$ et que les surfaces sont normales à $\hat{\mathbf{z}}$, la composante pertinente est $\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}$. Cependant, pour un cône de Weyl non incliné,

$$\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y} \propto \chi \frac{p_y}{p^3}, \tag{5.69}$$

qui est impaire sous $p_y \to -p_y$. L'intégration sur la surface de Fermi (5.51) annule donc la contribution si la dispersion reste symétrique en p_y. C'est pourquoi une inclinaison selon y est nécessaire pour obtenir un courant local non nul dans ce modèle [10].

5.6.2 . Conditions de symétrie pour un courant moyen non nul

La discussion précédente montre qu'il ne suffit pas d'avoir une courbure de Berry non nulle. Dans le cas d'un semi-métal de Weyl, deux inclinaisons transverses jouent des rôles distincts.

D'abord, une inclinaison selon y est nécessaire pour éviter l'annulation angulaire liée à la parité de $\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}$. Sans cette inclinaison, les contributions provenant des états de moments p_y et $-p_y$ se compensent, et le courant non linéaire local disparaît. Autrement dit,

$$\alpha^{\chi}_{y} = 0 \quad \Longrightarrow \quad j^{\chi}_{2,x}(z) = 0. \tag{5.70}$$

Ensuite, une inclinaison selon z est nécessaire pour que le courant de bord survive à la moyenne sur l'épaisseur. En effet, si $\alpha^{\chi}_{z} = 0$, le profil de courant associé à une vallée reste antisymétrique par rapport au centre du fil,

$$j^{\chi}_{2,x}(z) = -j^{\chi}_{2,x}(-z), \tag{5.71}$$

comme dans le cas du métal de Dirac bidimensionnel non incliné. Le courant local peut alors être non nul près des surfaces, mais sa moyenne sur z s'annule

$$\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} dz\, j^{\chi}_{2,x}(z) = 0. \tag{5.72}$$

Ainsi, un courant moyen non nul requiert que le cône de Weyl soit incliné dans les deux directions transverses au transport,

$$\alpha^{\chi}_{y} \neq 0, \qquad \alpha^{\chi}_{z} \neq 0. \tag{5.73}$$

La contribution moyenne dépend alors du produit $\chi\, \alpha^{\chi}_{y}\alpha^{\chi}_{z}$. Cette structure rend le rôle des symétries cristallines particulièrement important. Si les deux vallées de chiralités opposées sont reliées par une symétrie (par exemple la symétrie d'inversion $\mathcal{P}$ ou une symétrie miroir $\mathcal{M}_x$ par rapport au plan yz) telle que le produit $\alpha^{\chi}_{y}\alpha^{\chi}_{z}$ soit indépendant de χ, les contributions pondérées par la chiralité se compensent dans la somme sur les vallées. Dans ce cas,

$$\sum_{\chi} \chi\, \alpha^{\chi}_{y}\alpha^{\chi}_{z} = 0, \tag{5.74}$$

et le courant moyen total s'annule.

À l'inverse, si la symétrie reliant les vallées (par exemple une symétrie miroir $\mathcal{M}_z$: $(k_x, k_y, k_z) \to (k_x, k_y, -k_z)$) impose

$$\alpha^{+}_{z} = -\alpha^{-}_{z}, \qquad \alpha^{+}_{y} = \alpha^{-}_{y}, \tag{5.75}$$

alors les deux vallées contribuent avec le même signe au courant moyen. Dans ce cas,

$$\sum_{\chi} \chi\, \alpha^{\chi}_{y}\alpha^{\chi}_{z} \neq 0, \tag{5.76}$$

et le courant longitudinal non linéaire survit après sommation sur les vallées.

5.6.3 . Dépendance en épaisseur et comparaison avec le cas Dirac

Après intégration sur les moments et moyenne sur l'épaisseur du fil, le courant non linéaire moyen possède la même structure générale que dans le cas du métal de Dirac bidimensionnel [10]. Dans les limites asymptotiques, on obtient

$$\overline{j_{2,x}} \simeq \begin{cases} j_{3D}, & a \gg \ell, \\ \dfrac{3a^2}{2\ell^2} \ln\left(\dfrac{\ell}{a}\right) j_{3D}, & a \ll \ell, \end{cases} \tag{5.77}$$

où l'échelle de courant est

$$j_{3D} = E_x^2 \frac{e^3 \ell^2}{12 a h^2 c} \sum_\chi \chi \frac{\alpha_y^\chi \alpha_z^\chi}{c^2}. \tag{5.78}$$

Comme précédemment, cette expression est quadratique en champ électrique et proportionnelle à une combinaison de paramètres géométriques et de paramètres d'asymétrie de la structure de bande.

Le facteur $1/a$ contenu dans j_{3D} traduit le caractère de bord du courant. Lorsque $a \gg \ell$, le courant local reste confiné près des surfaces sur une longueur de l'ordre de ℓ, mais il est dilué dans la moyenne sur toute l'épaisseur. Ainsi,

$$\overline{j_{2,x}} \to 0 \qquad \text{lorsque} \qquad a \to \infty. \tag{5.79}$$

Dans la limite opposée, $a \ll \ell$, la diffusion aux surfaces devient omniprésente et les contributions des deux bords se recouvrent fortement. Le courant moyen s'annule également,

$$\overline{j_{2,x}} \to 0 \qquad \text{lorsque} \qquad a \to 0. \tag{5.80}$$

Comme dans le cas bidimensionnel, le courant possède donc un maximum pour une épaisseur intermédiaire. Dans le modèle de Weyl considéré ici, ce maximum est obtenu pour une épaisseur de l'ordre de la moitié du libre parcours moyen, $a \sim 0.5\,\ell$.

Cette dépendance non monotone en épaisseur est une signature directe de l'origine FS du phénomène. La figure 5.6 illustre les observations ci-dessus.

La comparaison avec le métal de Dirac bidimensionnel permet de résumer les ingrédients essentiels. Dans les deux cas, la diffusion aux surfaces crée une inhomogénéité transverse de la distribution, la courbure de Berry produit une vitesse anomale, et une asymétrie de dispersion empêche la compensation entre les deux bords. La différence principale est que, dans le modèle de Weyl, la courbure de Berry est directionnelle et impaire en p_y. Il faut donc une inclinaison supplémentaire selon y pour obtenir un courant local non nul, puis une inclinaison selon z pour obtenir un courant moyen non nul.

5.7 . Signatures physiques, limites et perspectives

Les sections précédentes ont montré que la combinaison de la diffusion diffusive aux surfaces et de la courbure de Berry peut produire un courant longitudinal non linéaire localisé près des bords. Avant de conclure ce chapitre, il est utile de préciser la nature physique de ce courant, les signatures qui permettraient de l'identifier expérimentalement, ainsi que les limites du modèle utilisé.

5.7.1 . Courant de bord géométrique ou courant d'états de surface ?

Le courant obtenu dans ce chapitre est localisé près des surfaces du système. Il serait donc tentant de l'interpréter comme un courant d'états de surface. Cependant, cette interprétation serait incorrecte dans le cadre du modèle considéré ici. Les états de surface topologiques n'ont pas été inclus explicitement dans la théorie. Dès le départ, nous avons supposé qu'une seule bande de volume par vallée coupe le niveau de Fermi, et que le transport peut être décrit par une dynamique semi-classique intrabande. Le courant étudié est donc porté par les états de volume [10].

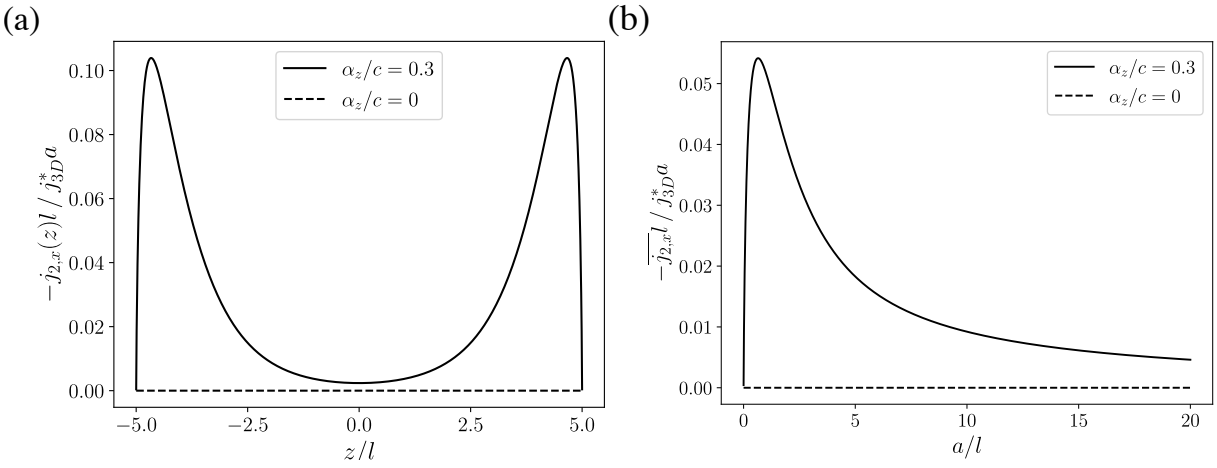

FIGURE 5.6 – Courant longitudinal non linéaire dans un semi-métal de Weyl tridimensionnel. Le panneau (a) montre la densité de courant résolue spatialement $j_{2,x}(z)$ pour une épaisseur $\tilde{a} = a/\ell = 10$ et une inclinaison transverse fixée $\tilde{\alpha}_y = \alpha_y/c = 0.3$. Le courant est normalisé sous la forme $-j_{2,x}(z)\ell/(j^*_{3D}a)$, où $j^*_{3D} = j_{3D}/(\tilde{\alpha}_z\tilde{\alpha}_y)$ est une échelle de courant indépendante des inclinaisons, avec $\tilde{\alpha}_i = \alpha_i/c$. Le signe global suit la convention de la figure. Le profil est localisé près des surfaces et reste pair en z dans la configuration où les deux vallées sont reliées par un miroir perpendiculaire à z. Le panneau (b) montre le courant moyen en fonction de l'épaisseur réduite a/ℓ, avec la même normalisation. Lorsque $\tilde{\alpha}_z = 0$, le courant moyen s'annule. Pour $\tilde{\alpha}_z = 0.3$, il devient non nul, s'annule dans les deux limites $a/\ell \to 0$ et $a/\ell \to \infty$, et possède un maximum autour de $a/\ell \simeq 0.5$. Cette dépendance non monotone confirme l'origine de bord de type Fuchs-Sondheimer du courant géométrique.

La localisation près des surfaces a une origine différente. Elle provient du fait que les conditions de bord de FS rendent la fonction de distribution hors équilibre dépendante de la coordonnée transverse z. À l'ordre linéaire, cette dépendance spatiale donne la correction ordinaire de FS à la conductivité. À l'ordre deux, en présence de courbure de Berry, la vitesse anomale transverse couple le champ électrique longitudinal à l'inhomogénéité de bord,

$$\dot{z}^{\chi}_{\text{anom}}\partial_z f^{\chi}_{1,\mathbf{p}} \propto E_x\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}\partial_z f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}. \tag{5.81}$$

Le courant qui en résulte est donc un courant de bord au sens spatial, mais un courant de volume au sens microscopique : il est porté par les porteurs de volume dont la distribution est modifiée par les surfaces.

Cette distinction est importante pour l'interprétation physique. Dans un matériau topologique réel, les états de surface peuvent eux aussi contribuer au transport [30,163,164]. Le courant prédit ici devrait alors coexister avec d'autres contributions de surface, bien que ces contributions de surface soient beaucoup plus localisées aux bords. Sa signature spécifique n'est pas seulement sa localisation près des bords, mais le fait qu'il soit quadratique en champ électrique, proportionnel à la courbure de Berry et fortement dépendant du rapport entre l'épaisseur du système et le libre parcours moyen.

5.7.2 . Dépendance en épaisseur, densité et champ électrique

Le premier critère expérimental permettant d'identifier ce courant est sa dépendance en champ électrique. Dans les systèmes homogènes considérés ici, la contribution géométrique

apparaît à l'ordre deux,

$$\overline{j_x} = \sigma_1 E_x + \sigma_2 E_x^2. \tag{5.82}$$

Le coefficient σ_2 porte donc l'information sur le courant longitudinal non linéaire. Cette dépendance quadratique le distingue de la correction linéaire ordinaire de FS.

La deuxième signature essentielle est la dépendance en épaisseur. Le courant local est confiné près des surfaces sur une longueur de l'ordre du libre parcours moyen ℓ.

Le courant moyen possède donc un maximum pour une épaisseur intermédiaire, typiquement lorsque a est de l'ordre de ℓ. Cette dépendance non monotone est une signature directe de son origine de type FS [10].

La dépendance en densité électronique constitue une autre signature possible. En effet, la courbure de Berry, la vitesse de Fermi et le libre parcours moyen dépendent en général du niveau de Fermi. Dans le modèle de Dirac bidimensionnel, par exemple,

$$\Omega_y(\varepsilon_F) = \frac{m\hbar^2 c^2}{2\varepsilon_F^3}, \tag{5.83}$$

de sorte que la contribution géométrique varie fortement lorsque le niveau de Fermi est déplacé dans la bande de conduction. Une mesure de la réponse non linéaire en fonction de la densité de porteurs pourrait donc permettre de distinguer ce mécanisme d'autres sources de courant non linéaire.

Enfin, une sonde locale du courant serait particulièrement utile. Puisque la contribution géométrique est spatialement localisée près des surfaces, une mesure capable de résoudre le profil de courant à l'échelle du libre parcours moyen permettrait de la distinguer d'un courant non linéaire de volume, distribué sur toute l'épaisseur du système.

5.7.3 . Accumulation de charge et polarisation de vallée

Le mécanisme étudié dans ce chapitre peut également s'accompagner de redistributions locales de charge ou de vallée près des bords. Pour discuter ce point, il est utile de définir une densité résolue en vallée,

$$\rho^\chi(z) = \int \frac{d^d p}{h^d} f^\chi_{\mathbf{p}}(z), \tag{5.84}$$

ainsi qu'une polarisation de vallée,

$$\rho_v(z) = \sum_{\chi=\pm1} \chi\, \rho^\chi(z). \tag{5.85}$$

À l'équilibre, cette quantité s'annule dans un système invariant par renversement du temps, car les deux vallées sont également peuplées. À l'ordre linéaire, la correction $f^\chi_{1,\mathbf{p}}$ est impaire en p_x et son intégrale sur les moments s'annule. Une polarisation de vallée ne peut donc apparaître qu'à partir de l'ordre deux.

Il existe cependant une différence importante entre la polarisation de vallée et le courant longitudinal non linéaire. Le courant $j_{2,x}$ sélectionne la partie impaire de $f^\chi_{2,\mathbf{p}}$ sous $p_x \to -p_x$, car la vitesse v_x est elle-même impaire. En revanche, la densité de vallée dépend de la partie paire de $f^\chi_{2,\mathbf{p}}$,

$$\rho_v(z) \sim \sum_{\chi=\pm1} \chi \int \frac{d^d p}{h^d} f^{\chi,e}_{2,\mathbf{p}}(z). \tag{5.86}$$

Or cette partie paire de la distribution est plus délicate à obtenir analytiquement, car elle fait intervenir la partie du terme de collision qui assure la conservation du nombre de particules.

Dans une approximation simplifiée, on trouve une accumulation de vallée près des bords lorsque la dispersion est inclinée. Cette accumulation est localisée sur une longueur de l'ordre de ℓ et change de signe entre les deux surfaces. Néanmoins, comme son calcul repose sur une approximation moins contrôlée que celle utilisée pour le courant, elle doit être interprétée avec prudence. Le résultat robuste du chapitre reste le courant longitudinal non linéaire, qui dépend de la partie impaire de f_2 et peut être obtenu sans recourir à une approximation de temps de relaxation susceptible de violer la conservation du nombre de particules.

Cette distinction suggère malgré tout une perspective intéressante : le mécanisme de bord géométrique pourrait s'accompagner de signatures de vallée ou de charge près des surfaces. Leur description complète demanderait toutefois un traitement plus précis du terme de collision et, possiblement, une résolution auto-cohérente du champ électrique induit par les accumulations de charge.

5.7.4 . Comparaison avec la littérature existante

Le courant longitudinal non linéaire étudié ici [10] doit être distingué d'autres courants géométriques connus. Les effets Hall non linéaires, par exemple, reposent eux aussi sur la courbure de Berry, mais ils produisent un courant transverse au champ électrique [75,130]. Le mécanisme présenté dans ce chapitre est différent : le courant est parallèle au champ appliqué, $\mathbf{j}_2 \parallel \mathbf{E}$, et il existe grâce à la brisure de translation induite par les surfaces.

Il existe également des courants géométriques dans des systèmes spatialement inhomogènes [121, 150, 173]. Dans ces approches, des termes de courant peuvent apparaître en présence simultanée de courbure de Berry et de gradients spatiaux de la distribution. Le mécanisme étudié ici peut être vu comme une réalisation particulière de cette idée, où le gradient spatial n'est pas imposé par un potentiel externe, mais généré dynamiquement par les conditions de bord diffusives. La différence essentielle est que l'inhomogénéité pertinente est celle de la correction hors équilibre f_1, localisée près des surfaces.

Il faut aussi distinguer notre contribution des courants non linéaires de volume produits par des mécanismes extrinsèques, comme le *skew scattering* ou le *side jump* [43, 125]. Ces processus peuvent générer des réponses non linéaires longitudinales dans certains matériaux [154], mais ils ne sont pas nécessaires au mécanisme discuté ici. Dans notre description, la contribution apparaît déjà dans l'approximation de Born pour la diffusion par impuretés, dès lors que les conditions de bord sont non spéculaires, que la courbure de Berry possède la bonne orientation et que la dispersion est suffisamment asymétrique pour éviter les compensations de symétrie.

Une conductivité longitudinale non linéaire a également été observée dans le tellure chiral, avec une parité particulière sous inversion spatiale [174]. Cette observation fournit un ordre de grandeur expérimental utile pour les réponses longitudinales d'ordre deux, mais son origine de symétrie et son caractère volumique doivent être distingués du mécanisme de bord de type Fuchs-Sondheimer étudié ici.

D'un point de vue expérimental, la distinction entre ces différents mécanismes n'est pas toujours immédiate. Un courant de volume produit une contribution à la conductance qui croît avec l'épaisseur du système, tandis qu'un courant de bord donne une contribution

beaucoup moins sensible à l'épaisseur lorsque $a \gg \ell$. En pratique, les surfaces peuvent toutefois modifier aussi les mécanismes de volume, ce qui rend la séparation moins triviale. La dépendance en densité électronique et l'utilisation de sondes locales constituent donc des critères complémentaires importants.

5.7.5 . Perspectives : fils inhomogènes et coexistence avec des états de surface

Le modèle étudié dans ce chapitre suppose un système homogène à l'équilibre. Cette hypothèse permet d'isoler clairement le rôle des surfaces et de montrer que le courant longitudinal géométrique apparaît à l'ordre deux en champ électrique. Dans un fil réel, cependant, la composition, la densité de porteurs ou le potentiel chimique peuvent varier dans la section transverse. Une telle inhomogénéité d'équilibre pourrait modifier profondément la structure de la réponse.

En effet, si la distribution d'équilibre dépend déjà de la position,

$$\frac{\partial f_0}{\partial z} \neq 0, \tag{5.87}$$

alors la vitesse anomale induite par la courbure de Berry peut agir directement sur cette inhomogénéité dès l'ordre linéaire en champ électrique. On peut donc envisager qu'un fil dont la densité électronique varie transversalement présente une contribution géométrique à la conductivité linéaire. Cette possibilité est particulièrement intéressante pour les interconnecteurs, car elle suggère que des gradients de composition ou de densité pourraient être utilisés pour amplifier une réponse de transport d'origine géométrique.

Une autre perspective importante concerne la coexistence entre états de volume et états de surface topologiques. Dans notre modèle, les états de surface sont absents par construction. Dans un matériau topologique réel, ils peuvent cependant contribuer fortement au transport, surtout lorsque le niveau de Fermi croise à la fois des bandes de volume et des états de surface [163, 164]. Le courant géométrique de bord discuté ici devrait alors être combiné avec les courants portés par ces états de surface, ainsi qu'avec la diffusion aux joints de grains qui subsiste dans les semi-métaux topologiques [165].

Les propositions d'interconnecteurs topologiques couvrent ainsi des mécanismes distincts : conduction par arcs de Fermi dans des semi-métaux [163, 164], conductivité élevée observée dans des nanobelts de NbAs [30], ou réseaux de canaux chiraux dans des phases de Chern [58]. Aucune de ces pistes n'implique une absence générale de dissipation : la qualité cristalline, les contacts, l'hybridation entre surfaces et la coexistence avec les états de volume restent déterminants.

Cette situation soulève plusieurs questions ouvertes. Comment les conditions de bord de FS doivent-elles être modifiées lorsque les surfaces portent elles-mêmes des modes conducteurs ? Les états de surface peuvent-ils relaxer ou amplifier l'accumulation de charge et de vallée produite par les états de volume ? Quel est le rôle de la diffusion intervallée lorsque les surfaces mélangent les vallées ou brisent certaines symétries ? Ces questions dépassent le cadre du modèle minimal étudié ici, mais elles indiquent une voie naturelle pour prolonger la théorie.

Ainsi, la généralisation géométrique de la théorie de FS ne doit pas seulement être vue comme une correction de taille supplémentaire. Elle montre que les surfaces, souvent considérées comme une source de dissipation, peuvent devenir un élément actif du transport dans les matériaux à géométrie de bande non triviale. En combinant diffusion de bord,

courbure de Berry et asymétrie de dispersion, il devient possible de générer une réponse longitudinale non linéaire dont la signature est directement contrôlée par la géométrie du système.

5.8 . Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons montré comment la théorie de FS, initialement développée pour décrire l'augmentation de la résistivité dans les métaux ordinaires de taille finie [8, 9], peut être généralisée à des matériaux dont la structure de bande possède une géométrie non triviale [10]. Dans le cas ordinaire, les surfaces diffusives modifient la fonction de distribution électronique près des bords et réduisent la conductivité longitudinale lorsque l'épaisseur du système devient comparable au libre parcours moyen. Cette première étape a permis d'identifier l'ingrédient essentiel du mécanisme : la diffusion de surface crée une inhomogénéité transverse de la distribution hors équilibre.

Dans un matériau où la courbure de Berry est non nulle, cette inhomogénéité acquiert une signification nouvelle. En effet, la vitesse anomale induite par le champ électrique longitudinal possède une composante transverse, capable de sonder le gradient spatial de la correction linéaire à la distribution. Le terme source géométrique qui apparaît à l'ordre deux en champ électrique est ainsi proportionnel à

$$E_x \Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y} \frac{\partial f^{\chi}_{1,\mathbf{p}}}{\partial z}. \tag{5.88}$$

Cette structure montre que le courant longitudinal non linéaire étudié dans ce chapitre naît de la combinaison de deux ingrédients : la courbure de Berry, qui encode la géométrie de bande, et les conditions de bord diffusives, qui créent une dépendance en z de la fonction de distribution. En l'absence de l'un de ces deux éléments, le mécanisme disparaît. Il s'agit donc d'un effet de transport intrinsèquement lié à la taille finie du système [10].

L'étude d'un métal de Dirac bidimensionnel a permis d'illustrer ce mécanisme dans un modèle minimal. La courbure de Berry, opposée dans les deux vallées reliées par renversement du temps, produit un courant non linéaire localisé près des surfaces. Toutefois, lorsque la dispersion est trop symétrique, les contributions des deux bords et des deux vallées se compensent. Une inclinaison transverse de la dispersion est alors nécessaire pour empêcher cette compensation et obtenir un courant moyen non nul. Le courant résultant est proportionnel au produit entre la courbure de Berry et l'inclinaison transverse, ce qui met en évidence le rôle conjoint de la géométrie de bande et des symétries du modèle.

Nous avons ensuite montré que le mécanisme se généralise aux semi-métaux de Weyl tridimensionnels, avec des conditions de symétrie plus contraignantes. Dans ce cas, la courbure de Berry possède une structure monopolaire dans l'espace des impulsions, et la composante pertinente $\Omega^{\chi}_{\mathbf{p},y}$ est impaire en p_y. Une inclinaison dans la direction y est donc nécessaire pour éviter l'annulation angulaire du courant local, tandis qu'une inclinaison dans la direction z est nécessaire pour empêcher la compensation entre les deux surfaces après moyenne sur l'épaisseur. Le courant moyen dépend alors de la combinaison

$$\sum_{\chi} \chi \, \alpha^{\chi}_{y} \alpha^{\chi}_{z}, \tag{5.89}$$

ce qui souligne l'importance des symétries reliant les différentes vallées.

Dans les cas bidimensionnel et tridimensionnel, la dépendance en épaisseur constitue une signature centrale du phénomène. Le courant moyen s'annule lorsque le système est trop épais, car la contribution de bord est diluée dans la moyenne sur l'épaisseur. Il s'annule également lorsque le système devient trop mince, car les contributions associées aux deux surfaces se recouvrent fortement. Le courant non linéaire possède donc un maximum pour une épaisseur de l'ordre du libre parcours moyen,

$$a \sim \ell. \tag{5.90}$$

À titre d'ordre de grandeur, pour $m \simeq 100\,\mathrm{meV}$, $c \simeq 10^5\,\mathrm{m.s^{-1}}$ et une inclinaison $\alpha_z/c \simeq 0.3$, on obtient $\overline{\sigma}_2/\overline{\sigma}_1 \sim 10^{-3}\,\mu\mathrm{m.V^{-1}}$ [10]. Ainsi, pour un champ $E_x \sim 1\,\mathrm{V}/\mu\mathrm{m}$, la contribution non linéaire peut atteindre environ 10^{-3} du courant linéaire.

Cette dépendance non monotone distingue le courant géométrique de bord d'un courant non linéaire de volume. Elle montre que les surfaces ne jouent pas seulement le rôle d'une source de dissipation, comme dans la théorie de FS ordinaire, mais peuvent devenir un élément actif du transport lorsque la dynamique semi-classique contient une vitesse anomale liée à la courbure de Berry.

Enfin, nous avons discuté plusieurs limites et perspectives. Le courant étudié ici est porté par les états de volume, même s'il est localisé près des surfaces ; il doit donc être distingué d'un courant d'états de surface topologiques. Dans un matériau réel, ces deux contributions peuvent toutefois coexister [163, 164]. De plus, des inhomogénéités d'équilibre, des gradients de densité, la diffusion intervallée ou encore les processus extrinsèques tels que le *skew scattering* et le *side jump* pourraient enrichir la réponse de transport. Ces extensions ouvrent la voie à une description plus complète des effets de surface dans les matériaux topologiques.

Ainsi, la généralisation géométrique de la théorie de FS révèle un mécanisme simple mais profond : dans un système fini, la géométrie de bande peut être convertie en une réponse longitudinale non linéaire grâce aux surfaces. Ce résultat suggère que les effets de taille, longtemps considérés principalement comme une limitation pour le transport électronique, peuvent aussi devenir un levier pour révéler et exploiter les propriétés géométriques des matériaux quantiques.

Dans le chapitre suivant, nous adopterons une perspective complémentaire. Nous montrerons que la topologie des bandes peut également intervenir dans les propriétés électrostatiques d'équilibre d'un matériau.

Chapitre 6

Jonctions d'isolant de Chern : nouvelles propriétés électrostatiques

Résumé

Le contrôle électrostatique est central dans les jonctions semi-conductrices, mais son interaction avec la topologie des bandes reste largement inexplorée. Nous étudions des jonctions latérales entre des phases isolantes bidimensionnelles de nombres de Chern différents, soumises à un champ magnétique perpendiculaire. L'asymétrie spectrale d'un isolant de Chern agit alors comme une densité effective de dopants, fixée par la topologie et ajustable par le champ magnétique. Deux régions de nombres de Chern différents acquièrent ainsi des potentiels chimiques distincts à neutralité de charge, générant un potentiel interne intrinsèque à travers la jonction. Nous dérivons analytiquement ce potentiel et résolvons de manière auto-cohérente l'équation de Poisson bidimensionnelle afin d'obtenir les profils de charge et de potentiel associés. Nos résultats montrent qu'une différence de nombre de Chern modifie l'équilibre électrostatique des jonctions bidimensionnelles et permet de sonder l'asymétrie spectrale topologique à travers des observables telles que la capacité de la jonction.

Sommaire

6.1 Introduction et problématique physique 120
6.2 Jonction latérale et modèle électronique 121
6.3 Asymétrie spectrale et neutralité de volume 124
6.4 Potentiel interne intrinsèque 127
6.5 Électrostatique d'une jonction latérale bidimensionnelle . . . 131
6.6 Formulation auto-cohérente et méthode numérique 132
6.7 Profils électrostatiques et rôle de l'interface 135
6.8 Signature capacitive 141
6.9 Discussion, signatures expérimentales et limites 143
6.10 Conclusion du chapitre 145

6.1 . Introduction et problématique physique

Les jonctions entre semi-conducteurs constituent l'une des briques élémentaires de l'électronique. Dans une jonction p-n, les électrons et les trous diffusent de part et d'autre de l'interface jusqu'à ce que le champ électrique créé par les dopants ionisés s'oppose à cette diffusion. L'équilibre est alors caractérisé par un potentiel interne, qui contrôle notamment le redressement, l'injection des porteurs et la capacité de la jonction [32].

Cette image doit être adaptée lorsque le matériau est bidimensionnel. La charge reste confinée dans la monocouche, mais les lignes de champ électrique se déploient dans l'espace qui l'entoure. Le problème électrostatique demeure donc tridimensionnel, même si la densité de charge ne dépend que d'une coordonnée au sein du matériau. Cette géométrie rend l'écrantage non local et produit, dans une jonction latérale, des queues de charge algébriques plutôt qu'une zone de déplétion strictement bornée [65, 66, 175].

Les chapitres précédents ont montré que la géométrie des états de Bloch modifie la dynamique semi-classique, la densité d'états et les lois de transport. Nous abordons ici une question complémentaire : un invariant topologique peut-il également modifier l'équilibre électrostatique d'un matériau ? Nous nous concentrons sur les isolants de Chern, introduits au chapitre 2. Leur nombre de Chern détermine la conductivité de Hall quantifiée et le nombre net de modes chiraux présents à sur les bords [3, 46, 55]. Des jonctions entre phases de Chern distinctes sont désormais envisagées comme éléments de circuits topologiques, dans lesquels les canaux d'interface peuvent être guidés ou redistribués [57, 58].

À champ magnétique nul, le signe du nombre de Chern ne peut pas, à lui seul, fixer un potentiel électrostatique de volume. En effet, le nombre de Chern est impair sous renversement du temps, tandis que le potentiel électrostatique est pair. En présence d'un champ magnétique perpendiculaire B, le produit $\mathcal{C}B$ est en revanche pair. Il peut donc entrer dans l'équation d'état du matériau. Le champ magnétique ne crée pas ici la phase topologique : celle-ci existe déjà à $B = 0$. Son rôle est de rendre visible la topologie dans le comptage des états électroniques.

Le mécanisme repose sur les niveaux de Landau anomaux des fermions de Dirac massifs. Leur absence de partenaire dans le secteur d'énergie opposé produit une asymétrie spectrale. Après sommation sur les vallées du modèle sur réseau, cette asymétrie est proportionnelle au nombre de Chern entier. Elle modifie la condition de neutralité locale et déplace le potentiel chimique à l'intérieur du gap. Si le nombre de Chern change à travers une interface, les deux régions n'ont donc plus le même potentiel chimique de neutralité. Leur mise en contact impose une redistribution de charge et fait apparaître un potentiel interne intrinsèque.

La suite du chapitre est organisée de la manière suivante. Nous rappelons d'abord le modèle half-BHZ et sa quantification en niveaux de Landau. Nous établissons ensuite le lien entre asymétrie spectrale, nombre de Chern et densité de charge. Cette relation permet de calculer le potentiel interne dans les régimes de champ faible et fort. Nous formulons ensuite le problème de Poisson bidimensionnel et sa résolution auto-cohérente. Les résultats numériques permettent de distinguer les contributions de volume et d'interface, puis d'étudier l'effet de la température. Enfin, nous construisons une capacité différentielle de transfert, qui fournit une observable intégrée de la redistribution de charge.

6.2 . Jonction latérale et modèle électronique

6.2.1 . Géométrie et conventions

Nous considérons une monocouche contenue dans le plan (x, y). Une interface située en $x = 0$ sépare deux régions homogènes (*cf.* figure 6.1). Le système est invariant par translation selon y, tandis que ses paramètres électroniques varient selon x. Un champ magnétique uniforme est appliqué perpendiculairement au matériau, $\mathbf{B} = B\,\hat{\mathbf{z}}$. $e > 0$ désigne la charge élémentaire, de sorte que la charge de l'électron vaut $-e$. Nous introduisons également la longueur magnétique positive

$$\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{e|B|}}. \tag{6.1}$$

La région de gauche possède un nombre de Chern $\mathcal{C}_L$, tandis que celle de droite possède un nombre de Chern $\mathcal{C}_R$. L'essentiel des résultats numériques concerne une jonction entre deux phases opposées,

$$\mathcal{C}_L = +1, \qquad \mathcal{C}_R = -1. \tag{6.2}$$

Les dérivations seront néanmoins écrites pour des valeurs générales de $\mathcal{C}_L$ et $\mathcal{C}_R$. Une jonction topologique-triviale s'obtient en prenant l'un des deux nombres de Chern égal à zéro.

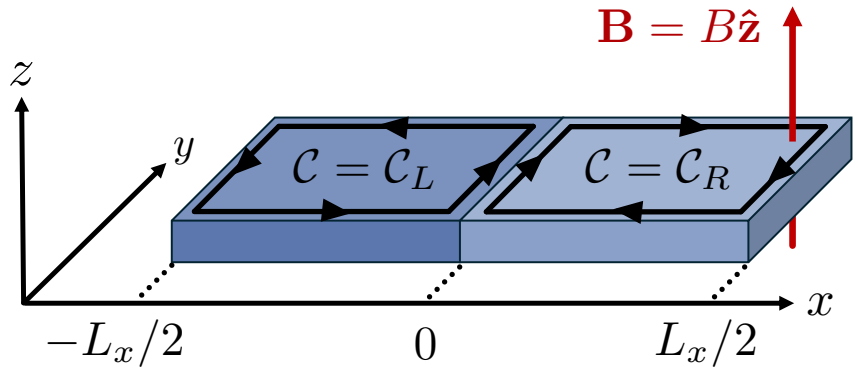

FIGURE 6.1 – Géométrie de la jonction latérale. La monocouche est contenue dans le plan (x, y) et l'interface est située en $x = 0$. Les régions de gauche et de droite possèdent respectivement les nombres de Chern $\mathcal{C}_L$ et $\mathcal{C}_R$. Le champ magnétique $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ est perpendiculaire au matériau. Les flèches représentent schématiquement les modes chiraux associés aux frontières entre régions de nombres de Chern différents.

Deux longueurs doivent être distinguées. La première est la largeur microscopique λ_M sur laquelle les paramètres de bande varient. La seconde est l'étendue électrostatique de la redistribution de charge, qui peut être beaucoup plus grande. Les propriétés asymptotiques de la jonction sont déterminées par les deux régions de volume. La forme locale de la charge près de $x = 0$ dépend en revanche du profil microscopique de l'interface et des états qui y sont liés.

6.2.2 . Rappel du modèle half-BHZ

Le modèle half-BHZ et sa correspondance *bulk-edge* ont été étudiés en détail au chapitre 2. Nous rappelons seulement les éléments nécessaires au calcul électrostatique. Sur un réseau carré de constante a, l'Hamiltonien de Bloch s'écrit [50, 51]

$$H(\mathbf{k}) = \frac{A}{a}\left[\sin(ak_x)\sigma_x + \sin(ak_y)\sigma_y\right] + M_{\mathbf{k}}\sigma_z, \tag{6.3}$$

avec

$$M_{\mathbf{k}} = M + \frac{2B_m}{a^2}\left[\cos(ak_x) + \cos(ak_y) - 2\right]. \tag{6.4}$$

Les matrices σ_i agissent dans l'espace orbital. Le paramètre A a les dimensions d'une énergie multipliée par une longueur, tandis que B_m a les dimensions d'une énergie multipliée par une longueur au carré. Nous omettons le terme proportionnel à l'identité, qui brise la symétrie électron-trou sans modifier le mécanisme étudié ici.

Au voisinage des quatre points de haute symétrie $i \in \{\Gamma, X, Y, \mathcal{M}\}$, le modèle se réduit à un fermion de Dirac massif,

$$H_i(\mathbf{q}) \simeq \hbar v_{x,i} q_x \sigma_x + \hbar v_{y,i} q_y \sigma_y + M_i \sigma_z. \tag{6.5}$$

Les masses sont

$$M_\Gamma = M, \qquad M_X = M_Y = M - \frac{4B_m}{a^2}, \qquad M_{\mathcal{M}} = M - \frac{8B_m}{a^2}, \tag{6.6}$$

et les chiralités $\chi_i = \mathrm{sgn}(v_{x,i}v_{y,i})$ vérifient

$$\chi_\Gamma = \chi_{\mathcal{M}} = +1, \qquad \chi_X = \chi_Y = -1. \tag{6.7}$$

Avec la convention adoptée au chapitre 2, la contribution de la vallée i au nombre de Chern vaut

$$\mathcal{C}^{(i)} = \frac{1}{2}\chi_i \,\mathrm{sgn}(M_i), \tag{6.8}$$

et le nombre de Chern total est

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2}\left[\mathrm{sgn}(M) - 2\,\mathrm{sgn}\left(M - \frac{4B_m}{a^2}\right) + \mathrm{sgn}\left(M - \frac{8B_m}{a^2}\right)\right]. \tag{6.9}$$

Dans la jonction, la masse uniforme est remplacée par un profil $M(x)$. Une interpolation simple est

$$M(x) = \frac{M_L + M_R}{2} + \frac{M_R - M_L}{2}\tanh\left(\frac{x}{\lambda_M}\right). \tag{6.10}$$

Un changement de phase topologique (*cf.* figure 2.11) impose des états chiraux à l'interface. Lorsque le profil est suffisamment lisse, des états massifs supplémentaires de type Volkov-Pankratov peuvent également apparaître [176–178]. Ces états modifieront la charge à courte distance, sans changer les conditions de neutralité loin de l'interface.

6.2.3 . Spectre sous champ magnétique

Le champ magnétique est introduit dans le modèle sur réseau par une substitution de Peierls. Dans la jauge de Landau $\mathbf{A} = Bx\hat{\mathbf{y}}$, la translation selon y est conservée et k_y reste un bon nombre quantique. Dans une géométrie de ruban ouverte selon x, le spectre présente des niveaux de Landau presque plats dans le volume et des branches chirales dispersives aux bords.

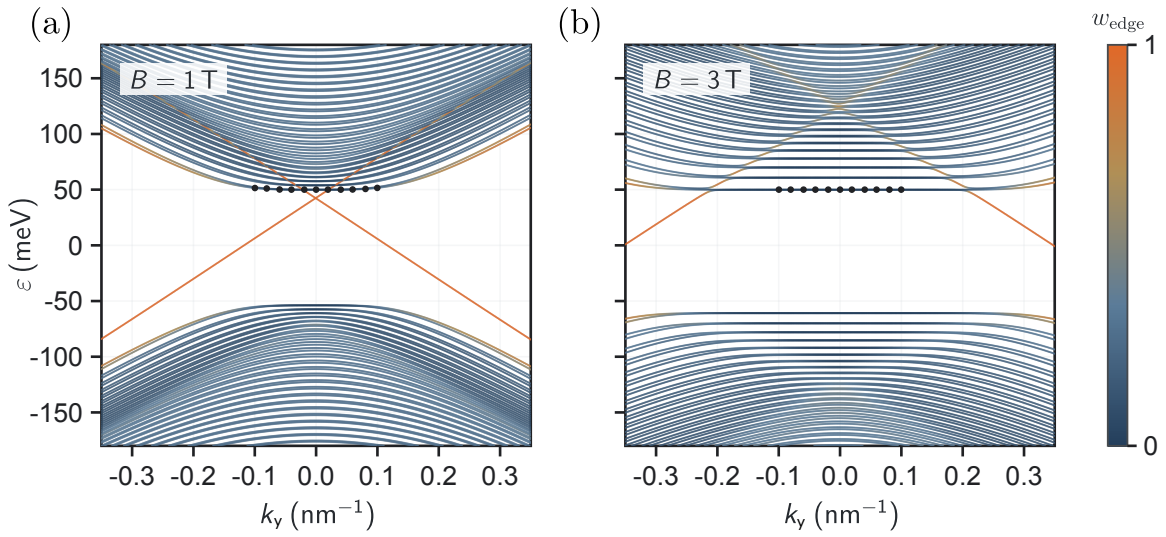

FIGURE 6.2 – Spectre du modèle half-BHZ dans une géométrie de ruban ouverte selon x et périodique selon y, pour $A = 365\,\mathrm{meV.nm}$, $B_m = 25\,\mathrm{meV.nm}^2$ et $M = 50\,\mathrm{meV}$. Les panneaux (a) et (b) correspondent à deux valeurs croissantes du champ magnétique. La couleur encode le poids des fonctions d'onde près des bords $w_{\mathrm{edge}} = \sum_{x\in\mathrm{edges},\,\alpha} |\psi_{x\alpha}|^2$. Les branches dispersives dans le gap sont les états de bord chiraux, tandis que les bandes presque plates sont les niveaux de Landau de volume. Les points noirs repèrent le niveau anomal $j = 0$ autour de la vallée de plus petit gap.

Si l'on néglige d'abord les corrections quadratiques en $\mathbf{q}$, les niveaux ordinaires de la vallée i sont [72, 179]

$$\varepsilon^{(i)}_{j\geq 1,\pm} = \pm\sqrt{M_i^2 + \frac{2jA^2}{\ell_B^2}}. \tag{6.11}$$

Ils apparaissent par paires de signes opposés. Le niveau $j = 0$ est différent : son énergie dépend de la masse, de la chiralité et de l'orientation du champ. Avec les conventions de l'équation (6.5),

$$\varepsilon^{(i)}_0 = \chi_i M_i \,\mathrm{sgn}(B). \tag{6.12}$$

Le paramètre B_m ajoute des corrections aux niveaux de Landau. Elles sont conservées dans les calculs numériques, car elles deviennent visibles lorsque le champ augmente, mais elles ne modifient pas le mécanisme d'asymétrie spectrale. L'éventail de Landau (*cf.* figure 6.3) montre notamment la dispersion du niveau anomal avec le champ.

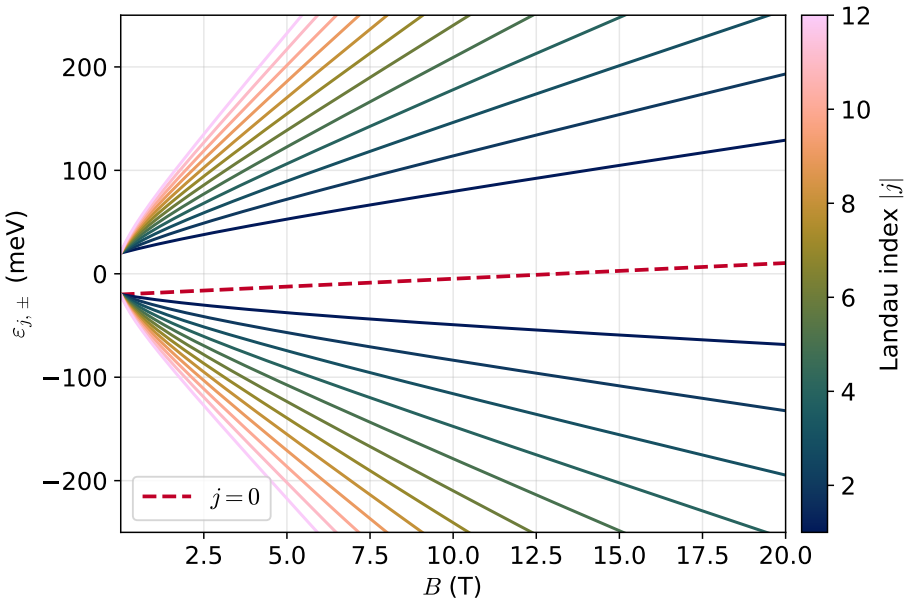

FIGURE 6.3 – Éventail de Landau au voisinage de la vallée Γ, obtenu en conservant la correction quadratique associée à B_m. La ligne rouge en tirets représente le niveau anomal $j = 0$. Les autres branches correspondent aux niveaux ordinaires des secteurs de conduction et de valence, leur couleur indique l'indice de Landau.

6.3 . Asymétrie spectrale et neutralité de volume

6.3.1 . Décomposition de la densité de charge

La densité qui entre dans l'équation de Poisson doit être définie relativement au fond ionique. Nous notons $-e\sigma(\mathbf{r})$ la densité surfacique de charge physique. La quantité σ a donc les dimensions d'une densité de particules et est positive pour un excès d'électrons.

Pour une base d'états propres $\{\alpha\}$, nous séparons les secteurs de conduction et de valence. Les densités d'électrons et de trous sont

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha \in c} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 f_\alpha, \tag{6.13a}$$

$$p(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha \in v} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 (1 - f_\alpha), \tag{6.13b}$$

où

$$f_\alpha = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_\alpha - \mu)] + 1}, \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}. \tag{6.14}$$

Nous introduisons ensuite l'asymétrie spectrale locale

$$\eta(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha \in c} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 - \sum_{\alpha \in v} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2, \tag{6.15}$$

ainsi que la densité de dopage extrinsèque

$$c(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 - \sigma_{\text{ion}}(\mathbf{r}). \tag{6.16}$$

La densité relative se réécrit alors exactement sous la forme [11]

$$\sigma(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) - p(\mathbf{r}) - \frac{\eta(\mathbf{r})}{2} + c(\mathbf{r}). \tag{6.17}$$

Une preuve plus détaillée est donnée dans l'annexe C. À champ nul et pour un spectre symétrique, $\eta = 0$. On retrouve l'expression usuelle $\sigma = n - p + c$ d'un semi-conducteur. Dans cette convention, $c = N_A^+ - N_D^-$, où N_A^+ et N_D^- désignent les densités d'accepteurs et de donneurs ionisés.

6.3.2 . Lien avec le nombre de Chern

Chaque niveau de Landau possède une dégénérescence surfacique (*cf.* annexe D)

$$g_B = \frac{1}{2\pi\ell_B^2} = \frac{e|B|}{h}. \tag{6.18}$$

Les niveaux ordinaires ne contribuent pas à l'asymétrie spectrale, car ils sont appariés entre les deux secteurs. La vallée i apporte en revanche, par son niveau anomal,

$$\eta_i = \frac{2e}{h}\mathcal{C}^{(i)}B. \tag{6.19}$$

Après sommation sur les vallées,

$$\eta_{\text{vol}} = \sum_i \eta_i = \frac{2e}{h}\mathcal{C}B. \tag{6.20}$$

Le nombre de Chern apparaît donc dans le comptage des états sous champ magnétique. Cette relation est une manifestation de l'asymétrie spectrale des fermions de Dirac massifs [73, 180–182].

Le lien avec la formule de Středa est direct [99, 100]. À température nulle et pour un potentiel chimique dans le gap, $n = p = 0$. La variation de la densité électronique avec le champ donne alors

$$\left.\frac{\partial(-e\sigma)}{\partial B}\right|_{\mu} = -\frac{e^2}{h}\mathcal{C}. \tag{6.21}$$

La relation (6.20) est ainsi la forme spectrale de la même réponse topologique.

Il est commode d'introduire la densité topologique

$$c_{\text{topo}} \equiv \frac{\eta_{\text{vol}}}{2} = \frac{e}{h}\mathcal{C}B. \tag{6.22}$$

Pour $|\mathcal{C}| = 1$ et $|B| = 1\,\text{T}$, son amplitude vaut

$$|c_{\text{topo}}| \simeq 2.42 \times 10^{10}\,\text{cm}^{-2}. \tag{6.23}$$

Cette valeur est comparable aux faibles densités de dopage accessibles dans des matériaux bidimensionnels. Contrairement à un dopage chimique, son signe peut être inversé en changeant l'orientation du champ ou le nombre de Chern.

Le résultat peut aussi être rapproché de la correction de densité d'états présentée au chapitre 3. Dans le régime semi-classique, la mesure de l'espace des phases contient le facteur [2, 109]

$$D_n = 1 + \frac{e}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\Omega}_n. \tag{6.24}$$

Son intégration sur une bande remplie produit une correction proportionnelle à $\mathcal{C}B$. La dérivation par niveaux de Landau et la description semi-classique expriment donc le même transfert spectral, dans deux régimes complémentaires.

6.3.3 . Neutralité et dopage effectif

Dans une région homogène, l'équation (6.17) devient

$$\sigma = n - p + c_{\text{eff}}, \qquad c_{\text{eff}} \equiv c - \frac{e}{h}\mathcal{C}B. \tag{6.25}$$

La condition de neutralité locale, $\sigma = 0$, impose donc

$$n - p = \frac{e}{h}\mathcal{C}B - c. \tag{6.26}$$

Dans un matériau propre, $c = 0$,

$$n - p = \frac{e}{h}\mathcal{C}B. \tag{6.27}$$

Une phase triviale retrouve $n = p$. Une phase de Chern exige au contraire un déséquilibre entre électrons et trous afin de compenser l'asymétrie spectrale. Ce déséquilibre est obtenu par un déplacement du potentiel chimique à l'intérieur du gap.

Le dopage effectif de l'équation (6.25) ne signifie pas que des impuretés sont créées par le champ. Il s'agit d'une analogie au niveau de l'équation de charge. La contribution c est liée au fond ionique et reste fixée par la fabrication. La contribution $-e\mathcal{C}B/h$ provient du comptage des états électroniques et disparaît lorsque le champ s'annule.

6.3.4 . Interprétation thermodynamique de la neutralité

Il est utile de reformuler la condition de neutralité sans faire immédiatement appel au détail des niveaux de Landau. Cette lecture permet de comprendre pourquoi un terme source linéaire en champ peut produire un déplacement important du potentiel chimique. Considérons un spectre présentant un gap d'énergie Δ, avec un potentiel chimique situé dans le gap. Dans le régime de Maxwell-Boltzmann, les densités d'électrons et de trous peuvent s'écrire

$$n \simeq N_c(B)\exp\left[-\beta\left(\frac{\Delta}{2} - \mu\right)\right], \qquad p \simeq N_v(B)\exp\left[-\beta\left(\frac{\Delta}{2} + \mu\right)\right], \tag{6.28}$$

où $N_c(B)$ et $N_v(B)$ désignent les densités d'états effectives associées aux bords des bandes de conduction et de valence. À champ nul, la symétrie électron-trou du modèle impose $N_c(0) = N_v(0)$. À champ non nul, cette égalité n'est toutefois plus garantie. La mesure semi-classique de l'espace des phases acquiert en effet le facteur

$$D_n(\mathbf{k}) = 1 + \frac{e}{\hbar}B\Omega_{n,z}(\mathbf{k}), \tag{6.29}$$

qui produit des corrections opposées dans les bandes de conduction et de valence lorsque leurs courbures de Berry sont de signes opposés [109].

En introduisant la densité intrinsèque effective

$$n_{\text{i}}(B) = \sqrt{N_c(B)N_v(B)}\, e^{-\beta\Delta/2}, \tag{6.30}$$

la différence entre les densités de porteurs devient

$$n - p = 2n_{\text{i}}(B)\sinh\left[\beta\mu + \frac{1}{2}\ln\left(\frac{N_c(B)}{N_v(B)}\right)\right]. \tag{6.31}$$

En utilisant l'équation (6.26), le potentiel chimique de neutralité prend alors la forme

$$\mu_{\mathrm{N}} \simeq k_B T \,\mathrm{asinh}\left[\frac{e\mathcal{C}B/h - c}{2n_i(B)}\right] - \frac{k_B T}{2}\ln\left[\frac{N_c(B)}{N_v(B)}\right]. \tag{6.32}$$

Le second terme traduit l'asymétrie entre les densités d'états effectives des bandes de conduction et de valence. Il disparaît à champ nul lorsque $N_c = N_v$, mais peut produire un déplacement de μ_{N} linéaire en B, y compris dans une phase topologiquement triviale pour laquelle $\mathcal{C} = 0$. L'expression précédente se réduit à la forme symétrique lorsque les corrections de champ aux deux bandes sont négligées.

Cette écriture clarifie l'analogie avec un semi-conducteur dopé. Dans les deux cas, la condition de neutralité impose aux porteurs mobiles de compenser un terme source effectif. Dans un semi-conducteur extrinsèque, celui-ci provient des charges associées au dopage et est fixé par c. Dans un isolant de Chern non dopé, le champ magnétique produit une contribution topologique à la densité proportionnelle à $e\mathcal{C}B/h$. À celle-ci s'ajoute le déplacement thermodynamique résultant de l'asymétrie $N_c(B) \neq N_v(B)$. La réponse possède donc une structure similaire à celle d'un semi-conducteur conventionnel, bien que l'origine physique et la dépendance au champ de ces contributions soient différentes.

6.4 . Potentiel interne intrinsèque

6.4.1 . Potentiel chimique de neutralité à champ faible

Nous supposons que le plus petit gap est situé dans une vallée ℓ, de dégénérescence g_ℓ, et nous notons

$$\Delta = 2|M_\ell| \tag{6.33}$$

le gap correspondant. Les autres vallées restent nécessaires pour déterminer le nombre de Chern total, mais on considère des situations où leur contribution aux porteurs mobiles est négligeable devant celle de la vallée ℓ.

Dans le régime de Maxwell-Boltzmann, $\beta\Delta \gg 1$, et pour un champ suffisamment faible,

$$\frac{A}{\ell_B} \ll \{k_B T, \Delta\}, \tag{6.34}$$

les sommes sur les niveaux de Landau peuvent être développées par la formule d'Euler-Maclaurin. En négligeant ici les corrections quadratiques en $\mathbf{q}$ dans (6.5), on obtient [11,72]

$$n \simeq \frac{g_\ell e^{-\beta(\Delta/2-\mu)}}{4\pi A^2\beta^2}\left[\beta\Delta + \frac{A^2\beta^2}{\ell_B^2}\chi_\ell \,\mathrm{sgn}(M_\ell B)\right], \tag{6.35a}$$

$$p \simeq \frac{g_\ell e^{-\beta(\Delta/2+\mu)}}{4\pi A^2\beta^2}\left[\beta\Delta - \frac{A^2\beta^2}{\ell_B^2}\chi_\ell \,\mathrm{sgn}(M_\ell B)\right]. \tag{6.35b}$$

Le premier facteur décrit l'activation thermique. Les termes linéaires en champ proviennent du niveau anomal de la vallée de plus petit gap. Ils ne doivent pas être ajoutés une seconde fois sous la forme d'une correction semi-classique de moment orbital ou de densité d'états : la somme de Landau les contient déjà.

Pour un matériau propre, l'insertion de l'équation (6.35) dans la condition de neutralité donne, au premier ordre en B et pour $|\beta\mu| \ll 1$,

$$\mu_{\mathrm{N}} \simeq \frac{A^2 eB}{g_\ell \hbar \Delta} \left[g_\ell \mathcal{C}^{(\ell)} + e^{\beta\Delta/2} \mathcal{C} \right] . \tag{6.36}$$

Le premier terme dépend du nombre de Chern partiel de la vallée thermiquement active. Le second dépend du nombre de Chern total. Dans une phase topologique et à basse température, ce dernier domine en raison du facteur $e^{\beta\Delta/2}$. Une faible asymétrie spectrale exige en effet un déplacement important de μ lorsque les porteurs thermiquement activés deviennent rares. La comparaison entre cette prédiction analytique et les résultats numériques obtenus à partir du modèle de liaisons fortes est présentée dans la figure 6.4.

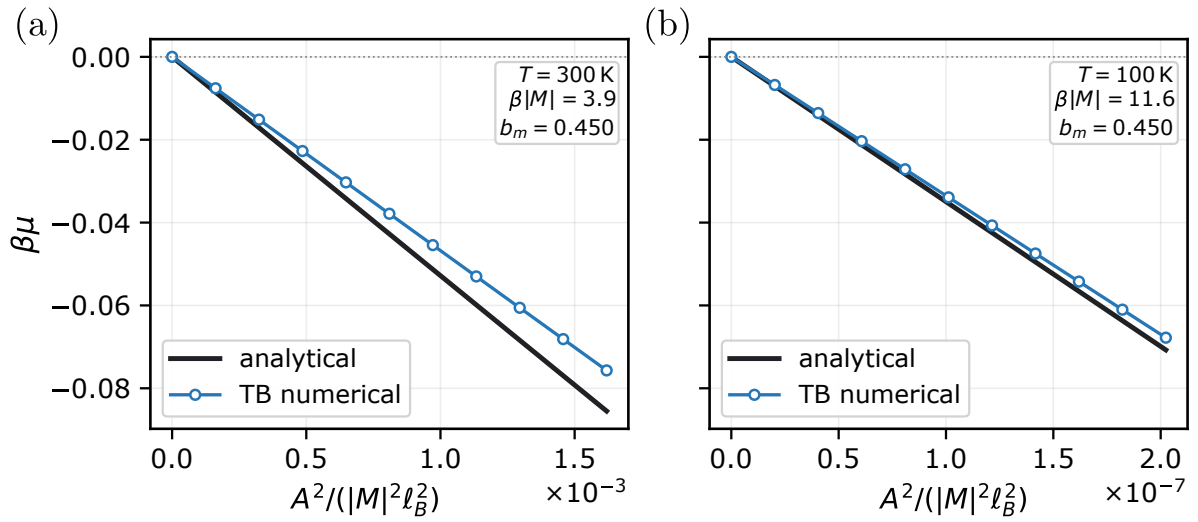

FIGURE 6.4 – Potentiel chimique de neutralité d'une phase de Chern dans le régime de champ faible. Les lignes représentent l'expression analytique (6.36), tandis que les symboles sont obtenus à partir du modèle liaisons fortes. L'accord s'améliore lorsque la température diminue, car les contributions thermiques des vallées de plus grand gap deviennent négligeables. Le domaine de champ est choisi de manière à conserver $|\beta\mu| \ll 1$.

Les calculs numériques utilisent le spectre complet du modèle half-BHZ. Ils conservent donc la courbure induite par B_m, les contributions des autres vallées et la statistique de Fermi-Dirac. L'équation (6.36) sert de limite analytique, et non d'équation d'état dans tout le domaine de paramètres.

6.4.2 . Mise en contact et potentiel interne

Considérons d'abord les deux régions séparément. Leurs potentiels chimiques de neutralité sont notés $\mu_{\mathrm{N},L}$ et $\mu_{\mathrm{N},R}$. Après la mise en contact, le potentiel électrochimique doit être uniforme. Le potentiel électrostatique compense alors la différence entre ces deux valeurs.

Pour éviter toute ambiguïté de signe, nous définissons le potentiel interne comme une amplitude,

$$V_{\mathrm{bi}} \equiv |\phi_R - \phi_L| = \frac{|\mu_{\mathrm{N},R} - \mu_{\mathrm{N},L}|}{e}. \tag{6.37}$$

Le signe de $\phi_R - \phi_L$ dépend de l'orientation de la jonction, du champ et des nombres de Chern.

Pour une jonction symétrique, les deux côtés ont les mêmes valeurs de A, Δ et g_ℓ, mais des masses inversées et donc pas le même nombre de Chern. L'équation (6.36) donne

$$V_{\text{bi}} \simeq \frac{A^2|B|}{g_\ell \hbar \Delta} \left(1 + e^{\beta\Delta/2}\right) |\mathcal{C}_R - \mathcal{C}_L|. \tag{6.38}$$

Dans la limite $\beta\Delta \gg 1$,

$$V_{\text{bi}} \simeq \frac{A^2|B|}{g_\ell \hbar \Delta} e^{\beta\Delta/2} |\mathcal{C}_R - \mathcal{C}_L|. \tag{6.39}$$

Le potentiel interne est donc linéaire en champ à faible B, sensible à la topologie et fortement amplifié lorsque la température diminue.

Pour une jonction asymétrique, les paramètres peuvent différer de part et d'autre. La potentiel $U_{\text{bi}} = \phi_R - \phi_L$ devient [11]

$$U_{\text{bi}} \simeq \frac{A_R^2 B}{g_R \hbar \Delta_R} \left[g_R \mathcal{C}_R^{(\ell)} + e^{\beta\Delta_R/2} \mathcal{C}_R\right] - \frac{A_L^2 B}{g_L \hbar \Delta_L} \left[g_L \mathcal{C}_L^{(\ell)} + e^{\beta\Delta_L/2} \mathcal{C}_L\right]. \tag{6.40}$$

Une contribution magnétique peut alors subsister même si $\mathcal{C}_L = \mathcal{C}_R$. Elle provient de la différence entre les réponses orbitales des deux matériaux. Lorsque les deux régions sont triviales, cette contribution ne bénéficie toutefois pas de l'amplification exponentielle associée au nombre de Chern total.

6.4.3 . Contribution topologique et paramètres de bande

L'équation (6.40) montre que le potentiel interne ne dépend pas uniquement de la différence $\mathcal{C}_R - \mathcal{C}_L$. Deux niveaux d'information géométrique interviennent. Le nombre de Chern total contrôle l'asymétrie spectrale obtenue après intégration sur toute la zone de Brillouin. Le nombre de Chern partiel $\mathcal{C}^{(\ell)}$ décrit quant à lui la vallée qui domine les porteurs thermiquement activés. Ces deux contributions ne coïncident pas en général.

Cette distinction est particulièrement importante lorsque le plus petit gap n'est pas situé à une vallée unique. Dans le modèle half-BHZ, les points X et Y sont dégénérés tant que la symétrie du réseau carré est conservée. Leur contribution thermique porte alors un facteur de dégénérescence $g_\ell = 2$. Une perturbation qui lève cette dégénérescence peut modifier la compressibilité à faible énergie sans changer immédiatement le nombre de Chern total. Le potentiel interne reste sensible à ces détails, car il résulte de la compensation entre une source topologique globale et une population de porteurs contrôlée par les bords de bandes.

Dans la jonction symétrique, ces contributions ordinaires se compensent entre les deux côtés. Le terme dominant est alors proportionnel à $|\mathcal{C}_R - \mathcal{C}_L|$, ce qui isole clairement l'effet topologique. Dans une jonction composée de deux matériaux différents, cette séparation est moins directe. Une différence de gap, de vitesse de Dirac ou de courbure de bande peut produire un potentiel intrinsèque même lorsque $\mathcal{C}_L = \mathcal{C}_R$. Il devient alors utile de comparer la jonction étudiée à une jonction de référence dans laquelle les nombres de Chern sont identiques, mais les paramètres de bande sont conservés.

La parité en champ fournit un second critère. Dans le régime où les paramètres de bande peuvent être considérés indépendants de B, le potentiel vérifie

$$U_{\mathrm{bi}}(-B) = -U_{\mathrm{bi}}(B). \tag{6.41}$$

Pour une jonction symétrique, l'échange des deux régions inverse également le signe du potentiel. Son amplitude reste inchangée. Ces propriétés ne suffisent pas, à elles seules, à prouver l'origine topologique du signal, puisque certaines contributions orbitales ordinaires sont aussi impaires en champ. La dépendance simultanée en B, en température et en différence de nombre de Chern permet en revanche de les distinguer.

6.4.4 . Champ fort et saturation

L'expression (6.36) cesse d'être valable lorsque les niveaux de Landau sont résolus,

$$\frac{A}{\ell_B} \gg \{k_B T, \Delta\}. \tag{6.42}$$

La neutralité est alors contrôlée par les niveaux les plus proches du gap. Si ε_c et ε_v désignent respectivement le plus bas niveau du secteur de conduction et le plus haut niveau du secteur de valence dans la vallée active, on obtient

$$\mu_{\mathrm{N}} \simeq \begin{cases} \varepsilon_c, & \mathcal{C}B > 0, \\ \varepsilon_v, & \mathcal{C}B < 0, \\ (\varepsilon_c + \varepsilon_v)/2, & \mathcal{C} = 0. \end{cases} \tag{6.43}$$

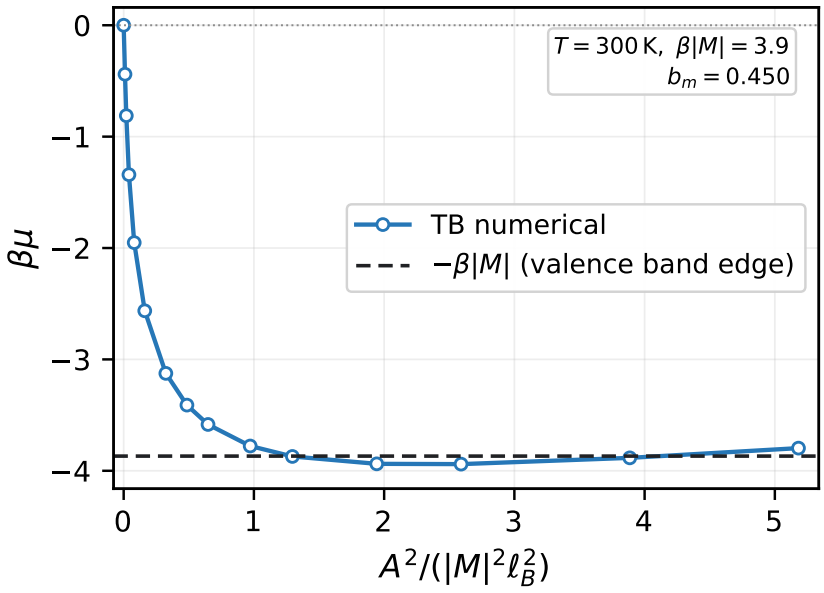

FIGURE 6.5 – Potentiel chimique de neutralité obtenu à partir du modèle de liaisons fortes lorsque le champ magnétique augmente. Dans la phase de Chern $\mathcal{C} = -1$ représentée, le potentiel chimique quitte le régime perturbatif, se rapproche du bord de bande associé au niveau de Landau anomal, puis tend vers une valeur fixée par le gap. Une phase topologiquement triviale ne présente pas le même déplacement vers un bord de bande. Les paramètres utilisés sont $M = -100\,\mathrm{meV}$, $B_m = -300\,\mathrm{meV.nm^2}$, $A = 365\,\mathrm{meV.nm}$, $a = 1\,\mathrm{nm}$ et $T = 300\,\mathrm{K}$.

La figure 6.5 montre que lorsque le nombre de Chern global et le nombre de Chern partiel de la vallée active ont le même signe, le niveau anomal se situe au bord de la bande pertinente et μ_{N} tend vers une valeur fixée par le gap. Dans le cas contraire, le niveau ordinaire le plus proche varie comme $\sqrt{|B|}$, et le potentiel chimique conserve cette dépendance. La saturation n'est donc pas universelle : elle dépend de la manière dont l'asymétrie globale est portée par les vallées de basse énergie.

6.5 . Électrostatique d'une jonction latérale bidimensionnelle

6.5.1 . Équation de Poisson pour une monocouche

La monocouche est placée dans le plan $z = 0$. L'invariance selon y permet d'écrire le potentiel sous la forme $\phi(x, z)$. La charge volumique associée à la densité surfacique $-e\sigma(x)$ est

$$\rho_{3\mathrm{D}}(x, z) = -e\sigma(x)\delta(z). \tag{6.44}$$

Dans un environnement diélectrique homogène de permittivité ε, l'équation de Poisson devient

$$\left(\partial_x^2 + \partial_z^2\right)\phi(x, z) = \frac{e}{\varepsilon}\sigma(x)\delta(z). \tag{6.45}$$

En principe, la permittivité diélectrique peut elle-même dépendre du champ magnétique. Nous négligeons ici cette dépendance et assimilons $\varepsilon(B)$ à sa valeur à champ nul, en supposant que les corrections induites par le champ restent faibles devant $\varepsilon(0)$. Il convient également de souligner que la réponse diélectrique effective ne provient pas uniquement des bandes proches de l'énergie de Fermi décrites par le modèle à deux bandes. Elle reçoit aussi des contributions de bandes plus éloignées, qui ne sont pas explicitement prises en compte dans notre description. Nous supposons que ces corrections renormalisent principalement la valeur effective de ε, sans modifier qualitativement les résultats présentés dans la suite.

La coordonnée transverse z ne peut pas être éliminée : elle décrit la propagation des lignes de champ hors de la monocouche [65, 175].

6.5.2 . Solution asymptotique et queue algébrique

Une limite analytique simple consiste à remplacer les deux régions par des demi-plans métalliques coplanaires et à imposer

$$\phi(x \to \pm\infty, 0) = \pm\frac{V_{\mathrm{bi}}}{2}. \tag{6.46}$$

Pour $z > 0$, la solution de Laplace est [65]

$$\phi(x, z) = \frac{V_{\mathrm{bi}}}{\pi}\,\mathrm{atan}\left(\frac{x}{z}\right). \tag{6.47}$$

Le saut du champ normal à travers la monocouche donne

$$-e\sigma(x) = -2\varepsilon\,\partial_z\phi(x, z)|_{z=0^+} = \frac{2\varepsilon V_{\mathrm{bi}}}{\pi x}. \tag{6.48}$$

La charge décroît donc comme $1/x$. Contrairement à une jonction volumique, elle ne s'annule pas au-delà d'une largeur de déplétion finie. Cette queue est la conséquence directe de la géométrie coplanaire.

L'équation (6.48) diverge lorsque $x \to 0$, car le modèle métallique suppose une compressibilité infinie. Dans un semi-conducteur, la densité est limitée par le dopage effectif. Pour une jonction symétrique propre, nous posons

$$c_0 = |c_{\text{eff}}| = \frac{e}{h}|\mathcal{C}B|. \tag{6.49}$$

La position de raccordement x_c entre le plateau de densité et la queue s'obtient en identifiant ec_0 au membre de droite de l'équation (6.48),

$$x_c = \frac{2\varepsilon V_{\text{bi}}}{\pi e c_0}. \tag{6.50}$$

Cette longueur joue le rôle d'une largeur effective de déplétion. Elle marque un changement de régime, et non une frontière au-delà de laquelle la charge disparaît.

Dans une jonction asymétrique, les amplitudes $|c_{\text{eff},L}|$ et $|c_{\text{eff},R}|$ doivent être traitées séparément. On définit alors une longueur de raccordement de chaque côté. Les expressions fermées utilisées plus loin concernent la jonction symétrique, tandis que les calculs auto-cohérents ne requièrent pas cette approximation.

6.6 . Formulation auto-cohérente et méthode numérique

6.6.1 . Potentiel électrochimique et équation d'état locale

Pour un électron de charge $-e$, l'énergie potentielle électrostatique vaut $-e\phi$. Si $\mu(x)$ désigne le potentiel chimique mesuré relativement aux bandes locales sans le décalage électrostatique, le potentiel électrochimique est

$$\mu_{\text{ec}} = \mu(x) - e\phi(x, 0). \tag{6.51}$$

À l'équilibre, μ_{ec} est uniforme. En choisissant cette constante comme origine des énergies,

$$\mu(x) = e\phi(x, 0). \tag{6.52}$$

Dans l'approximation locale de volume, l'équation d'état s'écrit

$$\sigma(x) = n[\mu(x); M(x), B, T] - p[\mu(x); M(x), B, T] + c(x) - \frac{e}{h}\mathcal{C}(x)B. \tag{6.53}$$

Les densités n et p sont calculées à partir des niveaux de Landau du modèle local. Cette approximation restitue exactement les neutralités asymptotiques et décrit les profils qui varient lentement à l'échelle du réseau. Elle ne contient pas encore les états localisés à l'interface.

6.6.2 . Domaine, conditions aux limites et convergence

L'équation (6.45) est résolue sur le domaine

$$(x, z) \in \left[-\frac{L_x}{2}, \frac{L_x}{2}\right] \times \left[-\frac{L_z}{2}, \frac{L_z}{2}\right]. \tag{6.54}$$

La distribution $\delta(z)$ est remplacée par un profil étroit $\delta_w(z)$, normalisé et résolu par le maillage.

Des contacts ohmiques sont placés aux frontières latérales. Ils imposent les potentiels neutres des deux régions,

$$\phi\left(-\frac{L_x}{2}, z\right) = \frac{\mu_{\mathrm{N},L}}{e}, \qquad \phi\left(+\frac{L_x}{2}, z\right) = \frac{\mu_{\mathrm{N},R}}{e}. \tag{6.55}$$

Les frontières transverses sont artificielles. Nous y imposons des conditions de Neumann, *i.e.*

$$\partial_z \phi|_{z=\pm L_z/2} = 0. \tag{6.56}$$

Le domaine L_z doit être assez grand pour que les profils dans la monocouche soient insensibles à ces frontières. Ce contrôle est particulièrement important dans les simulations électrostatiques de matériaux atomiquement minces [175].

La résolution suit une boucle de type Gummel [147,148,183]. À l'itération m, le potentiel ϕ_m fournit $\mu_m(x) = e\phi_m(x,0)$. L'équation d'état donne ensuite $\sigma_m(x)$, qui devient la source du problème de Poisson. Si $\widetilde{\phi}_{m+1}$ est la solution brute, nous appliquons un mélange linéaire,

$$\phi_{m+1} = (1-\alpha)\phi_m + \alpha\widetilde{\phi}_{m+1}, \qquad 0 < \alpha < 1. \tag{6.57}$$

La convergence est vérifiée simultanément sur le potentiel et sur la densité,

$$\max_{x,z} |\phi_{m+1} - \phi_m| < \epsilon_\phi, \qquad \max_{x} |\sigma_{m+1} - \sigma_m| < \epsilon_\sigma. \tag{6.58}$$

Le mélange est réduit lorsque les itérations oscillent et augmenté progressivement lorsque la convergence devient monotone. La solution obtenue ne doit par ailleurs pas dépendre du profil initial choisi pour ϕ. Pour une distribution de charge fixée, cette propriété découle du théorème d'unicité de l'électrostatique dès lors que les conditions aux limites sont imposées. Dans le problème auto-cohérent considéré ici, la charge dépend toutefois du potentiel à travers l'équation d'état. L'unicité reste assurée lorsque $\sigma[\phi(x,0)]$ est une fonction monotone du potentiel, comme c'est le cas dans notre modèle puisque l'augmentation de $\mu = e\phi$ accroît la densité électronique et réduit la densité de trous. En pratique, cette propriété est également vérifiée numériquement en répétant le calcul à partir de plusieurs profils initiaux et en contrôlant qu'ils convergent vers la même solution.

6.6.3 . Raccordement entre niveaux de Landau et modèle liaisons fortes

La description locale en niveaux de Landau suffit pour le potentiel interne et la queue de charge. Elle ne décrit cependant ni les modes chiraux de la jonction ni les éventuels états massifs d'une interface lisse. Une diagonalisation liaisons fortes complète à chaque itération serait coûteuse sur l'ensemble du domaine. Nous utilisons donc une description hybride, microscopique près de $x = 0$ et locale dans les régions éloignées.

La fenêtre liaisons fortes est définie par

$$w_{\mathrm{TB}}(x) = \frac{1}{2}\left[\tanh\left(\frac{x + W_{\mathrm{TB}}/2}{\lambda}\right) - \tanh\left(\frac{x - W_{\mathrm{TB}}/2}{\lambda}\right)\right]. \tag{6.59}$$

Dans les calculs présentés ici, $W_{\mathrm{TB}} = 160\,\mathrm{nm}$ et $\lambda = 5\,\mathrm{nm}$. Les queues telles que $w_{\mathrm{TB}} < 10^{-4}$ sont tronquées afin de limiter le coût numérique.

La densité injectée dans l'équation de Poisson est

$$\sigma_{\mathrm{hyb}}(x) = \sigma_{\mathrm{LL}}(x) + w_{\mathrm{TB}}(x)\left[\sigma_{\mathrm{TB}}(x) - \sigma_{\mathrm{LL}}(x)\right]. \tag{6.60}$$

Cette écriture remplace progressivement la densité de volume par la densité microscopique, sans modifier la solution loin de l'interface [11].

6.6.4 . Contrôles numériques

La géométrie bidimensionnelle et le caractère non linéaire de l'équation d'état imposent plusieurs contrôles. Le premier concerne le domaine électrostatique. La hauteur L_z doit être augmentée jusqu'à ce que le potentiel $\phi(x, 0)$ et la densité $\sigma(x)$ ne dépendent plus des frontières transverses. Ce test est indispensable : une frontière trop proche peut réfléchir artificiellement les lignes de champ et modifier la largeur apparente de la jonction [175]. Nous vérifions également que le profil central reste inchangé lorsque L_x augmente, à condition de comparer des points situés à distance fixe des contacts.

Le deuxième contrôle porte sur la représentation de la monocouche. La largeur w du profil $\delta_w(z)$ doit rester petite devant x_c et devant toutes les longueurs électrostatiques résolues. Elle doit cependant contenir plusieurs points du maillage transverse. Les calculs sont répétés en diminuant simultanément w, Δx et Δz. La solution physique doit converger lorsque la charge intégrée du profil transverse reste normalisée.

La convergence de la boucle auto-cohérente ne peut pas être évaluée uniquement à partir de la variation du potentiel. Dans un gap, une faible modification de ϕ peut produire une variation relative importante des porteurs thermiquement activés. Nous contrôlons donc séparément la variation de la densité, la neutralité dans les régions proches des contacts et le résidu discret de l'équation de Poisson [184]. Ce dernier mesure le défaut de satisfaction de l'équation de Poisson discrétisée par le potentiel et la densité obtenus numériquement. Ce dernier mesure localement l'écart entre le potentiel et la densité obtenus numériquement et l'équation de Poisson discrétisée. Il est défini sur le maillage par

$$R_{\mathrm{P}}(x_i, z_j) = \left[\left(\partial_x^2 + \partial_z^2\right)\phi\right]_{i,j} - \frac{e}{\varepsilon}\sigma(x_i)\delta_w(z_j), \tag{6.61}$$

et sa norme, par exemple $\max_{i,j} |R_{\mathrm{P}}(x_i, z_j)|$, doit tendre vers zéro lorsque la solution numérique converge.

La conservation de la charge transférée fournit un test supplémentaire. Nous définissons les charges nettes situées respectivement à gauche et à droite de l'interface par

$$Q_L = -e\int_{-L_x/2}^{0} \sigma(x)\,dx, \qquad Q_R = -e\int_{0}^{L_x/2} \sigma(x)\,dx, \tag{6.62}$$

où Q_L et Q_R représentent des charges par unité de longueur selon la direction invariante y. L'écart relatif à la neutralité globale est alors défini par

$$\delta_Q \equiv \frac{|Q_L + Q_R|}{|Q_L| + |Q_R|}. \tag{6.63}$$

Pour une jonction symétrique isolée des réservoirs, la neutralité globale impose théoriquement

$$Q_L + Q_R = 0, \tag{6.64}$$

et donc $\delta_Q = 0$. Numériquement, on exige plutôt $\delta_Q \ll 1$, en raison des erreurs de discrétisation et des tolérances de convergence. Une valeur non négligeable de δ_Q signale généralement un domaine trop court, une convergence incomplète ou une charge parasite introduite près des contacts.

Le calcul électronique demande lui aussi des tests spécifiques. Dans la description en niveaux de Landau, le nombre de niveaux conservés doit être augmenté jusqu'à convergence des densités n et p. Ce nombre croît avec la température, car davantage de niveaux

contribuent à l'activation thermique. Dans la fenêtre liaisons fortes, la discrétisation de k_y et la largeur W_{TB} sont variées indépendamment. La correction microscopique doit rester localisée près de $x = 0$ et la densité hybride doit rejoindre continûment la solution de volume avant d'atteindre les bords de la fenêtre.

Enfin, plusieurs limites analytiques servent de références. À faible champ, le potentiel chimique est comparé à l'équation (6.36). Loin de l'interface, la densité doit suivre la loi en $1/x$. Dans le régime symétrique, la position de raccordement doit respecter l'échelle $x_c \propto V_{\mathrm{bi}}/c_0$. L'accord simultané avec ces trois comportements permet de distinguer une solution convergée d'un résultat dépendant du maillage ou des conditions aux limites.

6.7 . Profils électrostatiques et rôle de l'interface

6.7.1 . Profils auto-cohérents et potentiel interne

Nous considérons d'abord la jonction symétrique de l'équation (6.2). Dans un matériau propre, le dopage effectif change de signe à l'interface, pourvu que le nombre de Chern $\mathcal{C}$ change lui aussi de signe, et son amplitude vaut $c_0 = e|B|/h = |c_{\mathrm{eff}}|$. La figure 6.6 montre un résultat auto-cohérent typique dans le régime de faible champ magnétique.

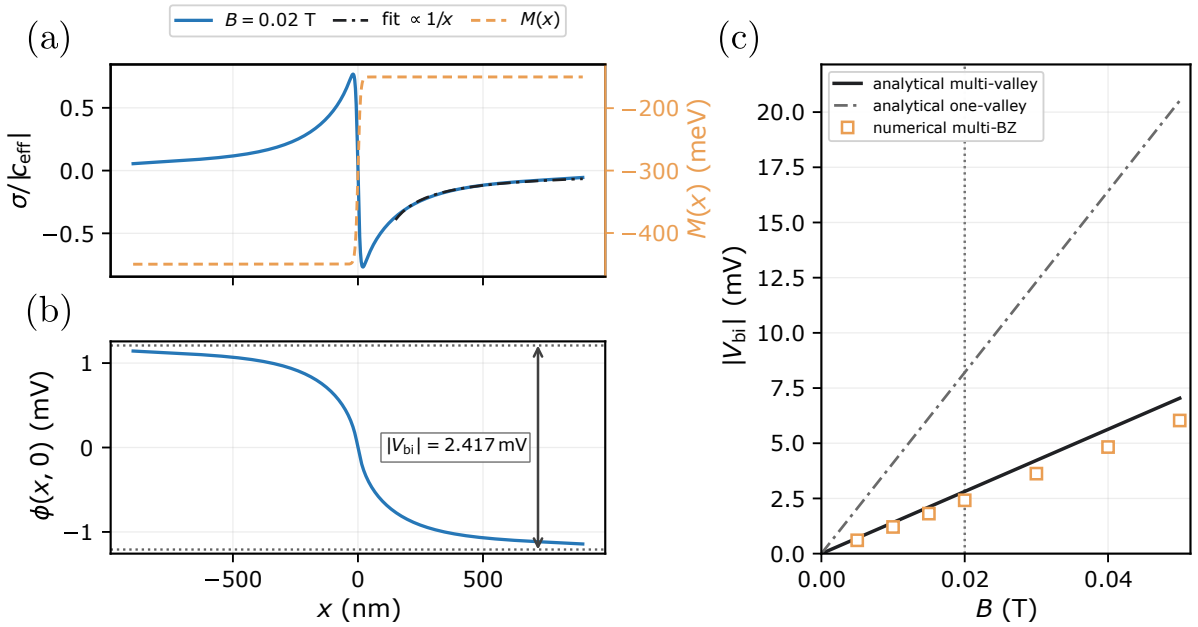

FIGURE 6.6 – Profil électrostatique auto-cohérent d'une jonction Chern-Chern $\mathcal{C}_L = +1\,|\,\mathcal{C}_R = -1$ dans le modèle half-BHZ. Les paramètres sont $A = 365\,\mathrm{meV\,nm}$, $a = 1\,\mathrm{nm}$, $T = 300\,\mathrm{K}$, $B = 0.02\,\mathrm{T}$ et $\lambda_M = 10\,\mathrm{nm}$. (a) Densité normalisée $\sigma/|c_{\mathrm{eff}}|$, avec $c_{\mathrm{eff}} = eB/h$, et profil de masse $M(x)$. (b) Potentiel électrostatique $\phi(x, 0)$, dont les valeurs asymptotiques définissent V_{bi}. (c) Dépendance de $|V_{\mathrm{bi}}|$ avec B, comparant le calcul numérique multi-vallée aux formules analytiques de Maxwell–Boltzmann mono- et multi-vallées données par l'équation (6.40). Ici, $B_m = -50\,\mathrm{meV\,nm^2}$, $M_L = -300\,\mathrm{meV}$, $M_R = -100\,\mathrm{meV}$ et $\Delta = 200\,\mathrm{meV}$.

La saturation de la densité de charge apparaît plus nettement lorsque la température est abaissée et le champ magnétique augmenté. La figure 6.7 présente le profil obtenu pour $T = 50\,\mathrm{K}$ et $B = 1\,\mathrm{T}$.

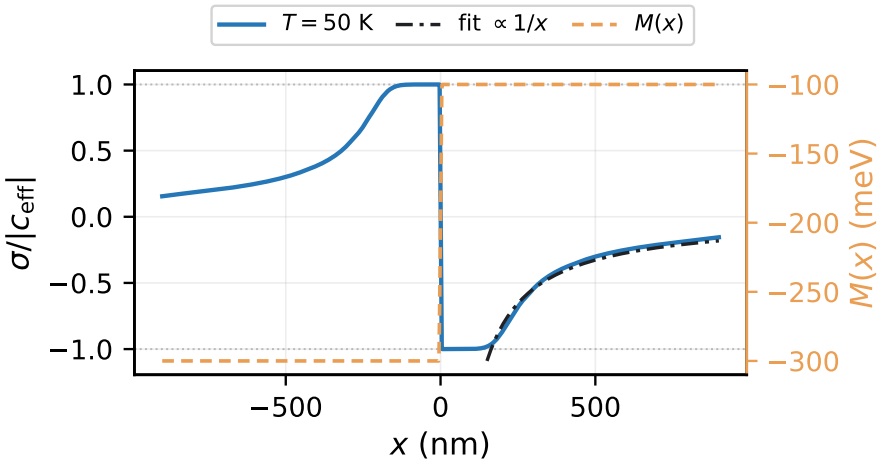

FIGURE 6.7 – Profil de densité de charge d'une jonction Chern-Chern $\mathcal{C}_L = +1\,|\,\mathcal{C}_R = -1$. Au voisinage de l'interface, la densité normalisée forme deux plateaux de signes opposés, avec $\sigma/|c_{\text{eff}}| \simeq +1$ à gauche et $\sigma/|c_{\text{eff}}| \simeq -1$ à droite. La valeur absolue de la densité atteint ainsi la charge effective $c_0 = |c_{\text{eff}}| = e|B|/h$. Le trait pointillé noir indique le comportement asymptotique en $1/x$, tandis que la ligne orange représente le profil de masse $M(x)$. Les paramètres sont $A = 365\,\text{meV.nm}$, $B_m = -50\,\text{meV.nm}^2$, $M_L = -300\,\text{meV}$, $M_R = -100\,\text{meV}$, $T = 50\,\text{K}$, $B = 1\,\text{T}$ et $\lambda_M = 10\,\text{nm}$.

Loin de l'interface, la densité relative tend vers zéro et le potentiel rejoint les valeurs imposées par la neutralité de volume. Près de la jonction, la charge atteint une fraction importante de c_0 dans le régime de faible champ de la figure 6.6. À plus fort champ et à plus basse température, elle sature au contraire à $\sigma \simeq \pm c_0$, comme le montrent les deux plateaux de la figure 6.7. En dehors de cette région, la densité décroît lentement, suivant approximativement un comportement en $1/x$. Le potentiel relie quant à lui de manière continue les deux valeurs asymptotiques.

La charge ne forme donc pas un dipôle étroit centré sur $x = 0$. Elle s'étend sur une longueur bien supérieure à λ_M, avec des queues qui persistent sur plusieurs centaines de nanomètres. Cette séparation d'échelles justifie la distinction entre la physique microscopique de l'interface et l'électrostatique non locale de la jonction.

6.7.2 . Largeur effective de déplétion

La position x_c est extraite en ajustant la région lointaine par $|\sigma(x)| \propto 1/|x|$, puis en déterminant son intersection avec le plateau de densité. La figure 6.8 montre son évolution avec le champ.

La quasi-constance de x_c à faible champ découle directement de l'équation (6.50). À plus fort champ, le potentiel chimique se rapproche d'un bord de bande. Le potentiel interne croît alors moins vite que la densité topologique, ce qui resserre la région de charge maximale [11].

La valeur précise de x_c dépend de la permittivité, de la température, des contacts et de la taille du domaine. Elle n'est donc pas universelle. Sa dépendance croisée en champ et en température constitue néanmoins une conséquence robuste du mécanisme de neutralité.

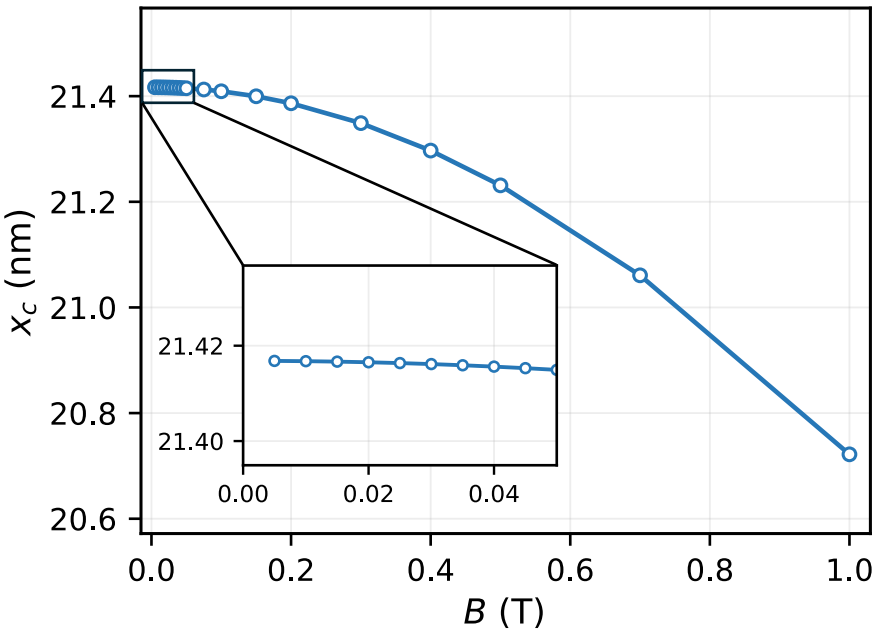

FIGURE 6.8 – Largeur effective de déplétion x_c en fonction du champ magnétique B pour une jonction Chern-Chern $\mathcal{C}_L = +1\,|\,\mathcal{C}_R = -1$. À faible champ, x_c varie peu, car V_{bi} et c_0 sont tous deux linéaires en $|B|$. Lorsque le potentiel interne devient sous-linéaire alors que c_0 continue de croître, la largeur diminue progressivement. Les paramètres utilisés sont $M_L = -100\,\mathrm{meV}$, $M_R = -300\,\mathrm{meV}$, $B_m = -50\,\mathrm{meV.nm^2}$, $A = 365\,\mathrm{meV.nm}$, $a = 1\,\mathrm{nm}$ et $T = 300\,\mathrm{K}$.

6.7.3 . Lecture des différents régimes

Les profils auto-cohérents peuvent être organisés en trois régimes. À champ très faible ou à température élevée, la densité topologique est petite devant la densité de porteurs thermiques. Le potentiel chimique reste proche du milieu du gap et le potentiel interne est faible. La densité ne rejoint pas nécessairement la valeur c_0 près de l'interface. Dans ce cas, la séparation entre un plateau et une queue est peu marquée. La longueur x_c extraite par ajustement doit alors être interprétée avec prudence.

Dans le régime intermédiaire, le plateau devient visible tandis que la quantification de Landau reste faiblement résolue. C'est le domaine dans lequel l'image analytique est la plus utile. Le potentiel interne et la source topologique sont tous deux linéaires en champ. La largeur x_c varie donc lentement, alors que l'amplitude de la charge augmente. La queue en $1/x$ est bien développée si les contacts sont suffisamment éloignés.

À champ fort ou à basse température, la densité de porteurs au milieu du gap devient insuffisante pour compenser l'asymétrie spectrale. Le potentiel chimique atteint la région d'un niveau de Landau proche du bord de bande. La compressibilité augmente alors rapidement et limite la croissance du potentiel interne. La densité topologique continue cependant d'être proportionnelle à $|B|$. Le rapport V_{bi}/c_0 diminue, ce qui explique la réduction de x_c observée sur la figure 6.8.

Ces trois régimes ne sont pas séparés par des transitions. Ils décrivent des changements progressifs de l'équation d'état. Leurs frontières dépendent du gap, de la température et de la vitesse de Dirac. Elles fournissent néanmoins une grille de lecture simple pour comparer des matériaux ou des géométries de jonction différents.

6.7.4 . Comparaison avec une jonction conventionnelle dopée

L'interprétation de c_{topo} comme un dopage effectif peut être testée en comparant la jonction de Chern à un semi-conducteur parabolique contenant un profil de dopants ionisés. Pour rendre la comparaison significative, il faut ajuster non seulement l'amplitude du terme source, mais aussi le gap et la masse effective. Ces paramètres déterminent la compressibilité et donc le potentiel chimique nécessaire à la neutralité.

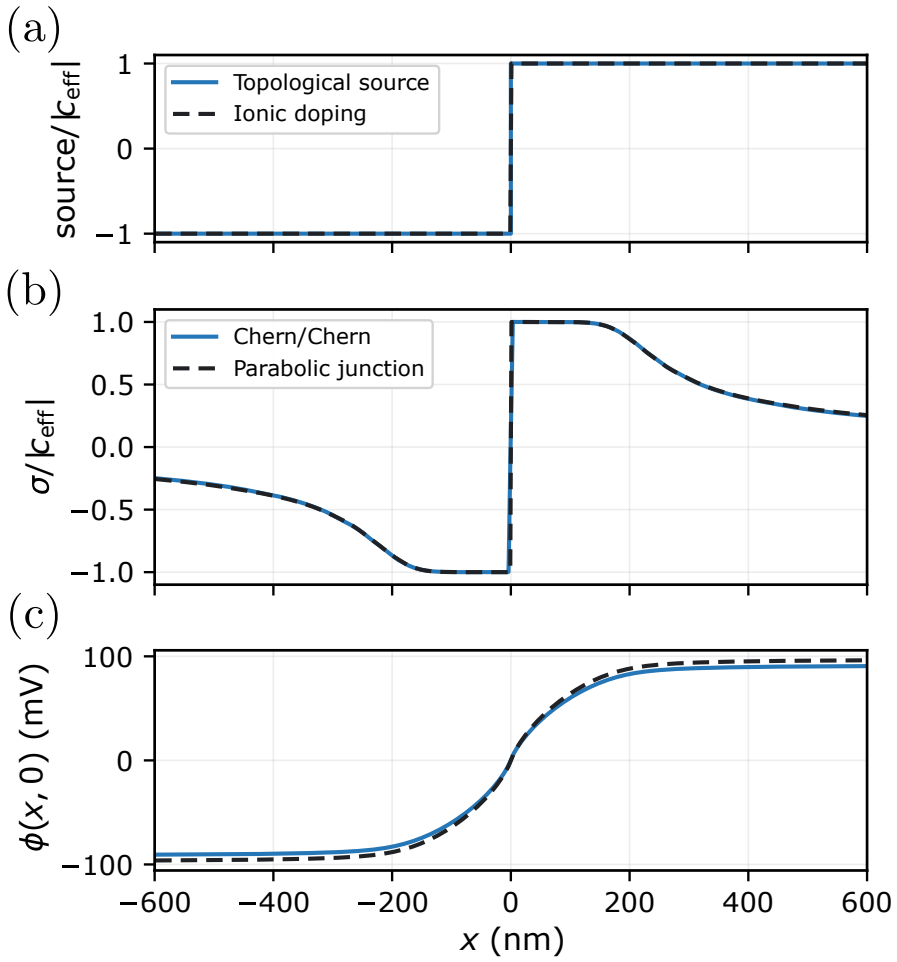

FIGURE 6.9 – Comparaison entre une jonction topologique propre et une jonction conventionnellement dopée, pour des termes sources de même amplitude. (a) Profils du terme source. (b) Densités surfaciques auto-cohérentes. (c) Potentiels électrostatiques. La courbe bleue correspond à la jonction topologique, calculée avec $M_L = -100\,\text{meV}$, $M_R = -300\,\text{meV}$, $B_m = -50\,\text{meV.nm}^2$, $A = 365\,\text{meV.nm}$, $a = 1\,\text{nm}$ et $B = 1\,\text{T}$. La courbe noire représente une jonction conventionnelle possédant un gap parabolique $E_g = 200\,\text{meV}$, une masse effective ajustée $m^*/m_e = 0.0571962$ et un dopage ionique abrupt, $c_L = -|c_{\text{eff}}|$ et $c_R = +|c_{\text{eff}}|$, sans région de transition ($\lambda_{\text{dop}} = 0$). Les deux calculs sont réalisés avec $T = 50\,\text{K}$. Lorsque le gap et la masse effective du modèle parabolique sont ajustés à ceux de la jonction topologique, les profils obtenus deviennent très proches.

La figure 6.9 confirme que les deux profils sont presque identiques après cet ajustement. Cette similarité concerne l'équation électrostatique. L'origine du terme source reste différente : les dopants sont fixés par la fabrication, tandis que la source topologique est

réversible par le champ magnétique et s'annule à $B = 0$.

6.7.5 . Contribution des états d'interface

Les valeurs asymptotiques du potentiel et la queue en $1/x$ sont des propriétés de volume. Les états chiraux peuvent néanmoins modifier la densité près de $x = 0$. La figure 6.10 compare la description locale en niveaux de Landau au raccordement hybride de l'équation (6.60).

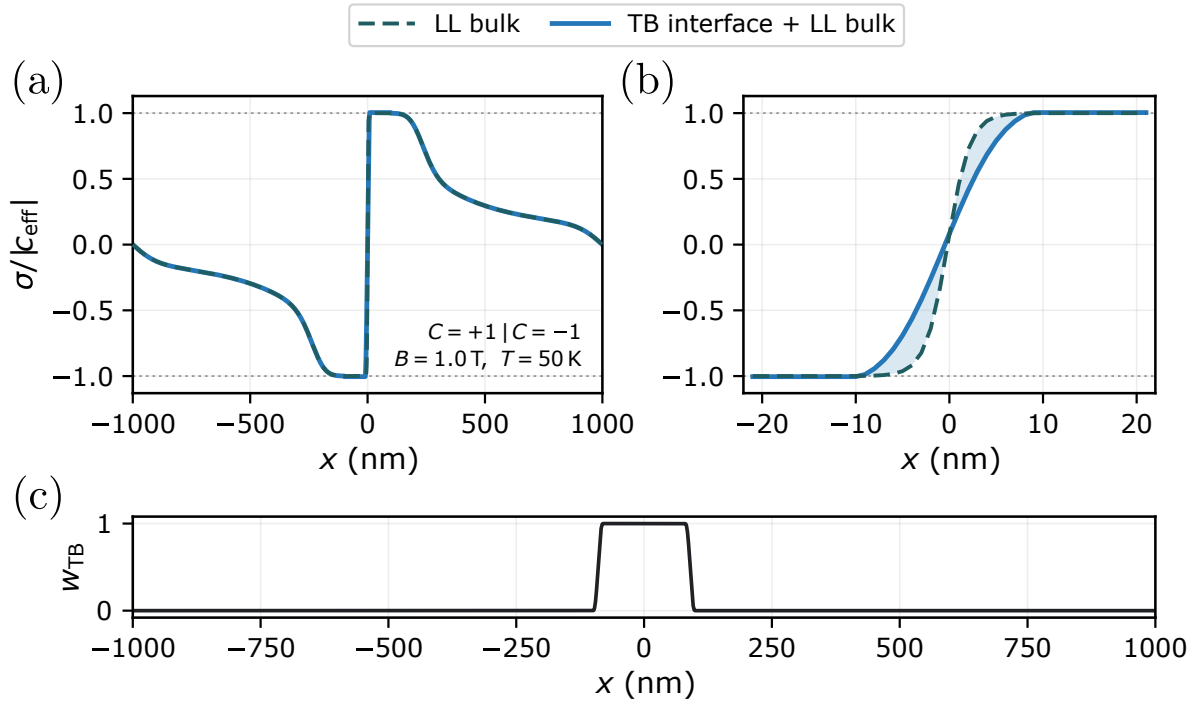

FIGURE 6.10 – Influence du traitement microscopique de l'interface sur la densité auto-cohérente pour une jonction Chern-Chern $\mathcal{C}_L = -1\,|\,\mathcal{C}_R = +1$. La ligne en tirets est obtenue à partir de l'équation d'état de volume, tandis que la ligne continue inclut la correction issue du modèle de liaisons fortes. (a) Profil sur l'ensemble de la jonction. (b) Agrandissement autour de $x = 0$. (c) Fenêtre $w_{\mathrm{TB}}(x)$ utilisée pour effectuer le raccordement entre les deux descriptions. La correction demeure localisée au voisinage de l'interface. Les paramètres utilisés sont $M_L = -100\,\mathrm{meV}$, $M_R = -300\,\mathrm{meV}$, $A = 365\,\mathrm{meV.nm}$, $B_m = -50\,\mathrm{meV.nm}^2$, $a = 1\,\mathrm{nm}$, $B = 1\,\mathrm{T}$ et $T = 50\,\mathrm{K}$. Aucun dopage de fond n'est introduit et l'amplitude de la densité effective vaut $|c_{\mathrm{eff}}| = eB/h \simeq 2.418 \times 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-2}$.

Les deux descriptions coïncident loin de la jonction. Dans la fenêtre centrale, le calcul liaisons fortes lisse et redistribue la charge sur une distance comparable à la longueur de pénétration des états d'interface. Le résultat permet de séparer clairement deux effets : l'asymétrie spectrale de volume fixe le potentiel interne et la queue lointaine, tandis que les modes d'interface contrôlent une correction locale.

Dans un ruban fini, des états existent également aux bords extérieurs. Lorsque le ruban est trop étroit, des bords opposés peuvent s'hybrider [185]. Dans un dispositif contacté, ces états se couplent aux réservoirs métalliques. Ils ne doivent donc pas être interprétés comme des canaux isolés capables de modifier la neutralité asymptotique de la jonction centrale.

6.7.6 . Dépendance en température

La densité topologique $e\mathcal{C}B/h$ ne dépend pas directement de la température. La température contrôle en revanche la quantité de porteurs mobiles disponibles pour la compenser. À haute température, une faible variation de μ suffit à produire le déséquilibre $n-p$ requis. Lorsque le système est refroidi, les densités thermiques diminuent et le potentiel chimique doit se rapprocher d'un bord de bande.

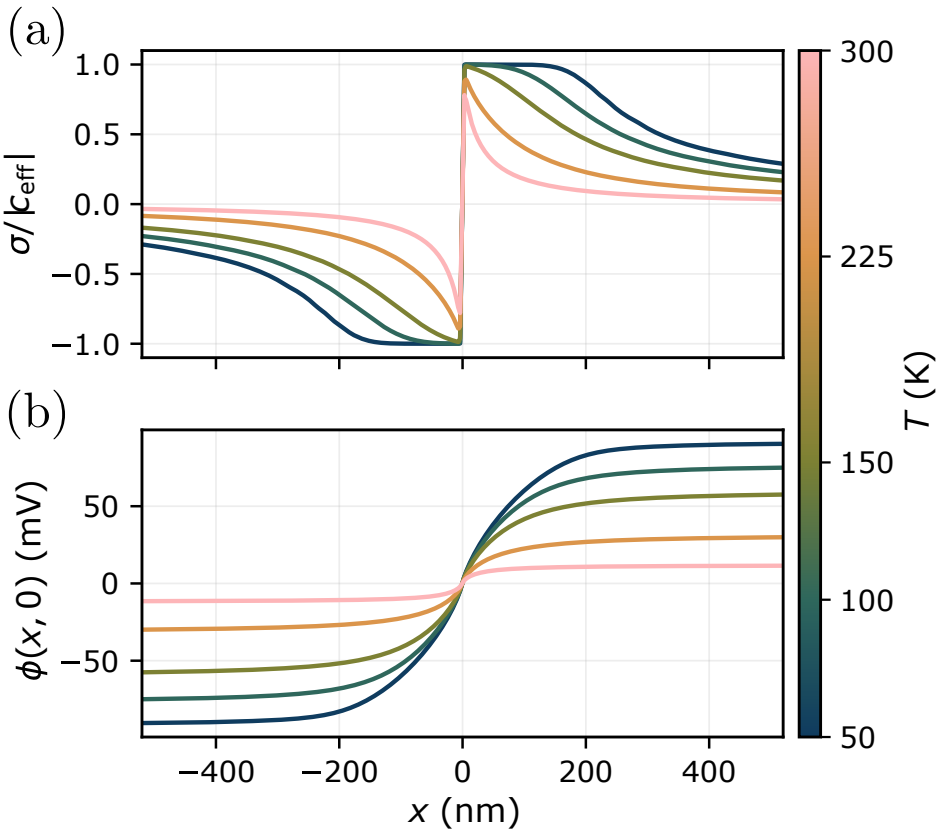

FIGURE 6.11 – Dépendance en température de la densité surfacique et du potentiel électrostatique pour une jonction Chern-Chern $\mathcal{C}_L = -1\,|\,\mathcal{C}_R = +1$. À haute température, les porteurs thermiquement activés écrantent efficacement la source topologique. Lorsque la température diminue, le potentiel interne augmente et la redistribution de charge s'étend davantage dans la monocouche. Les températures représentées sont $T = 50$, 100, 150, 225 et 300 K. Les autres paramètres sont $M_L = -100$ meV, $M_R = -300$ meV, $A = 365$ meV.nm, $B_m = -50$ meV.nm^2, $a = 1$ nm et $B = 1$ T.

La figure 6.11 illustre cette évolution. Le potentiel interne augmente au refroidissement et le profil s'élargit. Cette croissance s'interrompt lorsque le potentiel chimique approche le niveau de Landau qui borde le gap. Le système entre alors dans le régime de champ fort décrit par l'équation (6.43).

6.8 . Signature capacitive

6.8.1 . Charge transférée et capacité différentielle

Puisque la jonction est invariante selon y, la charge accumulée s'exprime par unité de longueur le long de l'interface. Nous définissons les charges physiques des deux côtés par

$$Q_L(V) = -e\int_{-L}^{0}\sigma(x;V)\,\mathrm{d}x, \qquad Q_R(V) = -e\int_{0}^{L}\sigma(x;V)\,\mathrm{d}x. \tag{6.65}$$

La capacité différentielle de transfert est

$$C_{\mathrm{tr}}^{\mathrm{diff}} = \frac{1}{2}\left[\left.\frac{\partial Q_R}{\partial V}\right|_{V=0} - \left.\frac{\partial Q_L}{\partial V}\right|_{V=0}\right]. \tag{6.66}$$

Le facteur $1/2$ évite de compter deux fois la même charge transférée. La quantité $C_{\mathrm{tr}}^{\mathrm{diff}}$ est une capacité par unité de longueur.

Pour une jonction symétrique, l'approximation plateau-queue donne, sur un côté,

$$|-e\sigma(x)| \simeq \begin{cases} ec_0, & 0 < x < x_c, \\ \dfrac{2\varepsilon U}{\pi x}, & x_c < x < L, \end{cases} \tag{6.67}$$

où U est la chute de potentiel totale. La charge d'équilibre contient un terme de plateau et un terme logarithmique,

$$|Q_R| \simeq \frac{2\varepsilon U}{\pi}\left[1 + \ln\!\left(\frac{L}{x_c}\right)\right]. \tag{6.68}$$

Lorsque l'on dérive cette expression par rapport au potentiel, le terme constant est compensé par la dépendance $x_c \propto U$. En introduisant

$$\widetilde{C}_{\mathrm{tr}}^{\mathrm{diff}} = \frac{C_{\mathrm{tr}}^{\mathrm{diff}}}{4\pi\varepsilon}, \tag{6.69}$$

on obtient

$$\widetilde{C}_{\mathrm{dep}}^{\mathrm{diff}} \simeq \frac{1}{2\pi^2}\ln\!\left(\frac{L}{x_c}\right). \tag{6.70}$$

La dépendance logarithmique avec la taille du dispositif est l'empreinte intégrée de la queue en $1/x$.

6.8.2 . Protocole quasi-statique

Pour calculer la réponse de basse fréquence, nous imposons des potentiels électrochimiques opposés dans les réservoirs,

$$\mu_{\mathrm{ec},L} = +\frac{eV}{2}, \qquad \mu_{\mathrm{ec},R} = -\frac{eV}{2}. \tag{6.71}$$

Une interpolation lisse relie ces valeurs dans la région centrale,

$$\mu_{\mathrm{ec}}(x;V) = -\frac{eV}{2}\tanh\!\left(\frac{x}{w_\mu}\right). \tag{6.72}$$

La relation locale correcte est alors

$$\mu(x;V) = \mu_{\mathrm{ec}}(x;V) + e\phi(x,0;V). \tag{6.73}$$

À chaque tension, les potentiels imposés aux frontières sont ajustés afin que les régions proches des réservoirs restent neutres. La dérivée est évaluée par différence finie centrée,

$$\left.\frac{\partial Q_i}{\partial V}\right|_{V=0} \simeq \frac{Q_i(+\delta V) - Q_i(-\delta V)}{2\delta V}, \qquad i \in \{L, R\}. \tag{6.74}$$

Cette construction est une approximation quasi-statique inspirée des niveaux quasi-Fermi des dispositifs semi-conducteurs. Elle ne remplace pas une théorie de transport hors équilibre.

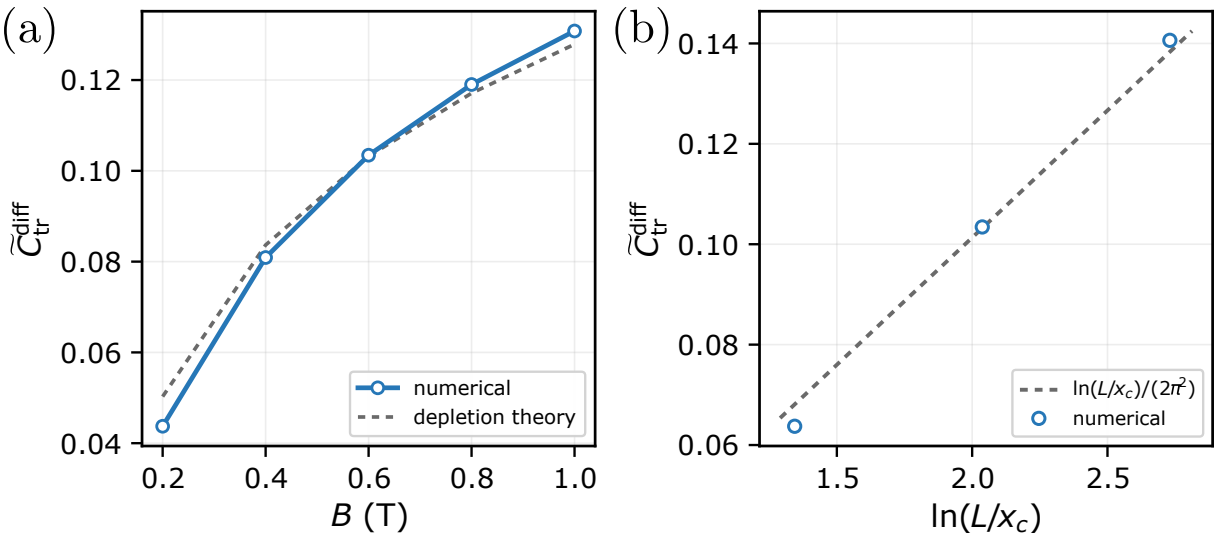

FIGURE 6.12 – Capacité différentielle de transfert pour une jonction $\mathcal{C}_L = -1\,|\,\mathcal{C}_R = +1$. (a) Dépendance en champ magnétique à température fixée. Les symboles représentent les calculs auto-cohérents et la ligne en tirets l'approximation donnée par l'équation (6.70). (b) Dépendance avec $\ln(L/x_c)$ pour plusieurs tailles de dispositif. La croissance linéaire confirme l'origine logarithmique de la capacité, sans paramètre ajustable. Les paramètres utilisés sont $M_L = -100\,\mathrm{meV}$, $M_R = -300\,\mathrm{meV}$, $A = 365\,\mathrm{meV.nm}$, $B_m = -50\,\mathrm{meV.nm}^2$, $a = 1\,\mathrm{nm}$ et $T = 50\,\mathrm{K}$.

La figure 6.12 montre un bon accord avec l'estimation analytique lorsque le plateau et la queue sont clairement séparés. Aux champs les plus faibles, cette séparation devient moins nette et les écarts augmentent. Le panneau (b) confirme directement la dépendance en $\ln(L/x_c)$.

6.8.3 . Réponse autour d'une tension continue

Nous considérons enfin une petite modulation autour d'une tension continue V_{dc}. En choisissant l'orientation pour laquelle $V_{\mathrm{dc}} > 0$ augmente la chute de potentiel, nous écrivons

$$U(V_{\mathrm{dc}}) = V_{\mathrm{bi}} + V_{\mathrm{dc}}. \tag{6.75}$$

Pour la jonction symétrique,

$$x_c(V_{\mathrm{dc}}) = \frac{2\varepsilon|V_{\mathrm{bi}} + V_{\mathrm{dc}}|}{\pi e c_0}, \tag{6.76}$$

et

$$\widetilde{C}^{\mathrm{diff}}_{\mathrm{dep}}(V_{\mathrm{dc}}) = \frac{1}{2\pi^2}\ln\left[\frac{\pi e c_0 L}{2\varepsilon|V_{\mathrm{bi}}+V_{\mathrm{dc}}|}\right]. \tag{6.77}$$

Cette expression suppose $|c_{\mathrm{eff},L}| = |c_{\mathrm{eff},R}| = c_0$. Pour une jonction topologique-triviale ou une jonction asymétrique, les deux côtés doivent être traités séparément dans le calcul auto-cohérent.

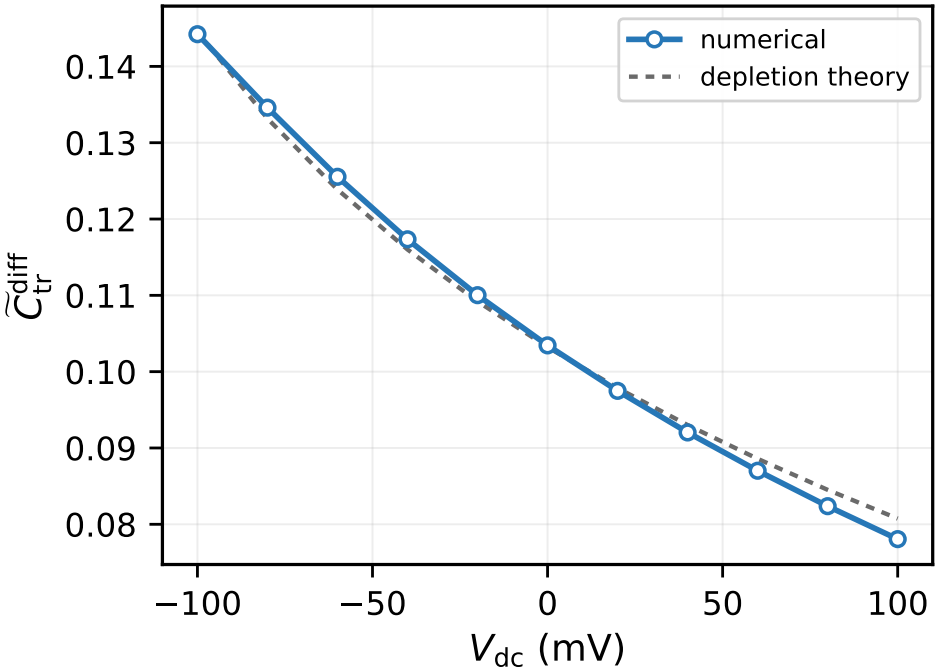

FIGURE 6.13 – Capacité différentielle en fonction de la tension continue. Les symboles sont issus de la résolution auto-cohérente, tandis que la ligne en tirets représente l'équation (6.77). Dans la convention choisie, une tension positive correspond à une polarisation inverse : elle augmente la chute de potentiel, élargit x_c et réduit la capacité. Les paramètres utilisés sont $M_L = -100\,\mathrm{meV}$, $M_R = -300\,\mathrm{meV}$, $A = 365\,\mathrm{meV.nm}$, $B_m = -50\,\mathrm{meV.nm^2}$, $a = 1\,\mathrm{nm}$, $B = 0.6\,\mathrm{T}$ et $T = 50\,\mathrm{K}$.

La figure 6.13 montre que la capacité augmente en polarisation directe et diminue en polarisation inverse. Cette évolution ne provient pas d'une variation de c_{topo}, qui reste fixé par $\mathcal{C}B$, mais du déplacement de la position de raccordement x_c.

6.9 . Discussion, signatures expérimentales et limites

6.9.1 . Séparer topologie de volume et physique d'interface

Les résultats du chapitre conduisent à une séparation simple. La topologie de volume fixe le terme source

$$c_{\mathrm{topo}} = \frac{e}{h}\mathcal{C}B. \tag{6.78}$$

Ce terme détermine les potentiels chimiques de neutralité et, par conséquent, le potentiel interne. La géométrie électrostatique fixe ensuite la manière dont la charge se distribue

dans l'espace. Enfin, les états chiraux et les autres états liés à l'interface apportent une correction locale. Ils ne sont pas nécessaires à l'existence du potentiel interne et ne modifient pas la queue asymptotique.

Cette distinction est importante. Une mesure locale au voisinage de $x = 0$ peut être sensible aux détails du profil de masse, à la longueur de pénétration des modes chiraux et à la présence d'états Volkov-Pankratov. Une mesure intégrée sur une grande région sonde davantage la neutralité de volume et la queue électrostatique.

6.9.2 . Observables possibles

Le potentiel interne peut être recherché par des sondes locales du potentiel de surface, telles que la microscopie à force de Kelvin [74]. Une mesure de compressibilité ou de capacité locale pourrait également suivre le déplacement du potentiel chimique lorsque le champ est inversé. La signature la plus directe n'est pas seulement une dépendance en $|B|$, mais la sensibilité au produit $\mathcal{C}B$.

La capacité différentielle offre une observable complémentaire. Elle intègre la redistribution de charge et conserve la dépendance logarithmique liée à la géométrie bidimensionnelle. Sa variation avec le champ, la température, la taille du dispositif et la tension continue permet de distinguer plusieurs régimes sans exiger une résolution spatiale nanométrique.

6.9.3 . Ordres de grandeur et stratégie de mesure

L'échelle de densité associée au mécanisme est directement fixée par le quantum de flux. Pour $|\mathcal{C}| = 1$, elle vaut environ $2.42 \times 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-2}$ par tesla. Cette densité est plus faible que celle de nombreux dispositifs fortement dopés, mais elle n'est pas négligeable dans un isolant propre dont le potentiel chimique se trouve dans le gap. Elle augmente avec le champ et ne dépend pas d'une concentration d'impuretés difficile à reproduire.

L'échelle de potentiel est moins universelle. Elle dépend de la compressibilité, donc du gap et de la température. Dans les paramètres étudiés ici, le potentiel interne se situe dans le domaine des millivolts à très faible champ. Il peut atteindre plusieurs dizaines de millivolts, voire davantage, lorsque la température diminue et que le potentiel chimique se rapproche d'un bord de bande. Cette forte dépendance thermique est utile pour identifier le mécanisme, mais elle impose de vérifier que le système reste à l'équilibre et que les contacts n'introduisent pas un dopage dominant.

Une stratégie expérimentale possible consiste à mesurer successivement quatre configurations : $(\mathcal{C}_L, \mathcal{C}_R, B)$, $(\mathcal{C}_R, \mathcal{C}_L, B)$, $(\mathcal{C}_L, \mathcal{C}_R, -B)$ et une jonction de référence telle que $\mathcal{C}_L = \mathcal{C}_R$. L'échange des domaines et l'inversion du champ permettent de suivre le signe du potentiel intrinsèque. La jonction de référence isole les contributions liées aux différences de gap ou de courbure de bande. Une série en température teste enfin l'activation thermique prédite par l'équation (6.32).

Pour la capacité, la dépendance en taille constitue une information supplémentaire. Une mesure sur plusieurs distances entre l'interface et les contacts doit produire une évolution approximativement logarithmique tant que la queue électrostatique n'est pas coupée par une grille. La comparaison entre dispositifs de même matériau mais de longueurs différentes est donc plus robuste qu'une valeur absolue unique, qui dépend de la permittivité et de la géométrie exacte des électrodes.

6.9.4 . Limites du modèle

Le modèle utilisé ici isole le mécanisme topologique, mais plusieurs effets devront être inclus pour décrire un dispositif réel.

Premièrement, l'environnement diélectrique a été supposé homogène. Une encapsulation asymétrique, une grille métallique ou un substrat proche modifient les lignes de champ et peuvent tronquer la queue en $1/x$. La capacité dépend alors de la géométrie complète du dispositif.

Deuxièmement, les contacts ont été représentés par des conditions aux limites idéales. Des contacts réels produisent un transfert de charge, un écrantage métallique et une résistance d'interface. Ils doivent être placés suffisamment loin de la jonction centrale pour ne pas masquer la redistribution intrinsèque.

Troisièmement, la symétrie électron-trou du modèle minimal simplifie la neutralité. Un terme proportionnel à l'identité, un couplage Zeeman ou plusieurs bandes proches du gap déplacent le potentiel chimique de référence. Ils ajoutent des contributions non topologiques au potentiel interne, sans supprimer le terme contrôlé par $\mathcal{C}B$.

Quatrièmement, le désordre et les interactions n'ont pas été traités explicitement. Le nombre de Chern reste robuste tant que le gap de mobilité demeure ouvert, mais la compressibilité et les profils locaux peuvent être modifiés. Une étude ultérieure devra déterminer dans quelle mesure la signature capacitive survit à ces corrections.

Enfin, le protocole quasi-statique ne décrit pas le transport dissipatif sous tension finie. Une extension naturelle consisterait à coupler l'équation de Poisson aux équations de continuité et de dérive-diffusion développées au chapitre 4. Le terme de densité topologique établi ici fournirait alors l'équation d'état locale, tandis que les courants conserveraient les corrections de courbure de Berry.

6.10 . Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons montré qu'un nombre de Chern peut intervenir directement dans l'équilibre électrostatique d'une jonction [11]. Sous champ magnétique, les niveaux de Landau anomaux produisent une asymétrie spectrale,

$$\eta_{\mathrm{vol}} = \frac{2e}{h}\mathcal{C}B. \tag{6.79}$$

Cette asymétrie apparaît dans l'équation de charge comme une densité topologique $c_{\mathrm{topo}} = e\mathcal{C}B/h$. Dans une phase propre, la neutralité n'impose donc plus $n = p$, mais

$$n - p = \frac{e}{h}\mathcal{C}B. \tag{6.80}$$

Deux régions de nombres de Chern différents possèdent ainsi des potentiels chimiques de neutralité distincts. Leur mise en contact produit un potentiel interne intrinsèque, linéaire en champ dans le régime perturbatif et fortement dépendant de la température. Lorsque les niveaux de Landau sont résolus, le potentiel chimique se rapproche d'un bord de bande ou suit une loi en $\sqrt{|B|}$, selon la vallée qui porte l'asymétrie de basse énergie.

La résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson montre ensuite que la charge s'étend bien au-delà de l'interface microscopique. Dans une géométrie coplanaire, sa décroissance asymptotique suit une loi en $1/x$. Les états chiraux modifient la charge à courte

distance, mais le potentiel interne et la queue lointaine restent déterminés par les propriétés de volume.

Enfin, la capacité différentielle conserve une dépendance logarithmique avec la taille du dispositif et varie de manière caractéristique avec le champ et la tension appliquée. La topologie ne modifie donc pas seulement les lois de transport ou les états de bord : elle peut aussi entrer dans l'équation d'état d'un matériau et laisser une signature dans ses propriétés électrostatiques.

Conclusion générale

Cette thèse a étudié la manifestation de la géométrie et de la topologie des bandes électroniques dans des systèmes de taille finie comportant des surfaces ou des interfaces. L'objectif était de comprendre comment les propriétés des états de Bloch modifient des observables locales telles que les courants, les densités de charge, les conditions de neutralité et le potentiel électrostatique. Le transport dans des conducteurs minces et l'électrostatique de jonctions d'isolants de Chern en ont fourni deux réalisations complémentaires.

Sur le plan méthodologique, les équations de van Roosbroeck ont été étendues aux matériaux présentant une géométrie de bande non triviale. Les densités et les lois de courant acquièrent alors des corrections liées à la courbure de Berry, au moment magnétique orbital et à la mesure modifiée de l'espace des phases. Un terme d'asymétrie spectrale peut également compléter la densité de charge qui intervient dans l'équation de Poisson. Cette formulation relie ainsi la dynamique semi-classique des états de Bloch aux observables de transport et d'électrostatique d'un dispositif [7].

Transport géométrique dans les interconnecteurs topologiques. La première partie a généralisé la théorie de Fuchs-Sondheimer à des conducteurs dont les bandes possèdent une courbure de Berry. L'inhomogénéité de la fonction de distribution créée par les surfaces diffusives peut, en présence d'une vitesse anomale, produire un courant longitudinal quadratique en champ électrique [10]. Ce courant est localisé sur une distance de l'ordre du libre parcours moyen à proximité des surfaces, mais reste porté par les états de volume.

Cette réponse requiert une composante appropriée de la courbure de Berry et une asymétrie de dispersion empêchant les compensations entre états. Établi dans un métal de Dirac bidimensionnel puis généralisé aux semi-métaux de Weyl, le mécanisme présente une dépendance non monotone en épaisseur. Le courant moyen est maximal lorsque l'épaisseur devient comparable au libre parcours moyen et disparaît dans les limites des très faibles et des très grandes épaisseurs. Les surfaces peuvent donc rendre observable une réponse géométrique absente dans un système homogène et infini.

Électrostatique des jonctions d'isolants de Chern. La seconde partie a porté sur une jonction latérale entre isolants de Chern soumise à un champ magnétique perpendiculaire. L'asymétrie spectrale des niveaux de Landau anomaux produit une contribution de volume à la densité électronique reliée au nombre de Chern. La condition de neutralité ne se réduit alors plus à $n = p$, puisque les porteurs mobiles doivent aussi compenser une densité effective proportionnelle à $e\mathcal{C}B/h$. Lorsque les deux régions possèdent des nombres de Chern différents, leurs potentiels chimiques de neutralité diffèrent et leur mise en contact engendre un potentiel interne sans dopage extrinsèque [11].

À faible champ, la contribution topologique à ce potentiel varie linéairement avec le champ magnétique et avec la différence des nombres de Chern. Une contribution non topologique liée à l'asymétrie des densités d'états peut cependant s'y ajouter. Le potentiel interne dépend donc du gap, de la température et des paramètres microscopiques : il n'est ni universel ni quantifié. À champ plus fort ou à basse température, le potentiel chimique de neutralité se rapproche du niveau de Landau anomal et le potentiel interne tend vers

une saturation contrôlée par le gap.

La résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson a également montré le rôle essentiel de la géométrie latérale. Bien que la charge soit confinée dans la monocouche, les lignes de champ se développent dans l'environnement tridimensionnel. La redistribution de charge présente ainsi une décroissance algébrique à longue distance plutôt qu'un confinement au voisinage de l'interface. Les états d'interface modifient localement la densité, sans changer les neutralités asymptotiques ni l'origine du potentiel interne.

Ces deux projets montrent que la géométrie de bande et la topologie peuvent agir au-delà des réponses Hall quantifiées. Elles peuvent produire un courant longitudinal non linéaire, modifier le comptage des états et déplacer une condition de neutralité. Les surfaces et les interfaces ne détruisent donc pas l'information géométrique du matériau : elles déterminent la forme sous laquelle celle-ci devient mesurable.

Limites et perspectives. Les résultats obtenus restent liés aux approximations des modèles utilisés, notamment à la dynamique semi-classique, à l'approximation du temps de relaxation, au modèle effectif half-BHZ et à la description idéalisée des contacts et de l'environnement diélectrique. Le désordre, les interactions entre électrons et le transport hors équilibre ne sont pas traités de manière microscopique.

Pour les interconnecteurs topologiques, une extension naturelle consisterait à traiter simultanément les états de volume et de surface et à décrire plus précisément les mécanismes de collision. Pour les jonctions d'isolants de Chern, l'introduction de grilles, de contacts réalistes et d'environnements diélectriques hétérogènes permettrait de se rapprocher des dispositifs expérimentaux. Le couplage de l'électrostatique auto-cohérente au transport hors équilibre ainsi que l'étude du désordre et des interactions constituent également des prolongements importants.

Enfin, des mesures locales de potentiel ou de compressibilité, l'antisymétrisation des signaux en champ magnétique et les mesures de capacité différentielle pourraient contribuer à isoler les signatures topologiques prédites. Ces perspectives prolongent l'idée centrale de cette thèse : dans les systèmes électroniques de basse dimension, les frontières et les interfaces peuvent servir de médiateurs entre la géométrie de bande et les observables d'un dispositif.

Annexes

A . Démonstration de l'identité de Bianchi pour les courbures mixtes

Cette annexe démontre l'annulation du terme entre crochets qui apparaît dans l'équation (4.29). Cette annulation est une conséquence géométrique de l'identité de Bianchi satisfaite par la courbure de Berry dans l'espace étendu des paramètres $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$. Nous considérons une bande isolée et non dégénérée, dont la partie périodique $|u(\mathbf{r}, \mathbf{k})\rangle$ dépend de manière régulière de la position et du vecteur d'onde. Les indices répétés sont sommés.

A.1 . Connexions et courbures dans l'espace étendu

Les connexions de Berry dans les espaces réel et réciproque sont définies par [2, 5]

$$(\mathcal{A}_r)_i = i \langle u | \partial_{r_i} u \rangle , \qquad (\mathcal{A}_k)_i = i \langle u | \partial_{k_i} u \rangle . \tag{81}$$

Les composantes pertinentes des courbures généralisées sont alors

$$(\Omega_{kk})_{ij} = \partial_{k_i} (\mathcal{A}_k)_j - \partial_{k_j} (\mathcal{A}_k)_i, \tag{82a}$$
$$(\Omega_{kr})_{ij} = \partial_{k_i} (\mathcal{A}_r)_j - \partial_{r_j} (\mathcal{A}_k)_i. \tag{82b}$$

L'antisymétrie de la forme de courbure dans l'espace étendu implique

$$(\Omega_{rk})_{ji} = -(\Omega_{kr})_{ij}. \tag{83}$$

La trace de la courbure mixte est

$$\operatorname{Tr} \Omega_{kr} = (\Omega_{kr})_{jj} = \partial_{k_j} (\mathcal{A}_r)_j - \partial_{r_j} (\mathcal{A}_k)_j. \tag{84}$$

Dans la notation vectorielle utilisée pour la courbure en espace des vecteurs d'onde,

$$(\Omega_{kk})_k = \frac{1}{2} \epsilon_{k\ell m} (\Omega_{kk})_{\ell m}. \tag{85}$$

On en déduit

$$\begin{aligned} \epsilon_{ijk} (\Omega_{kk})_k &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \epsilon_{k\ell m} (\Omega_{kk})_{\ell m} \\ &= \frac{1}{2} \left(\delta_{i\ell} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{j\ell} \right) (\Omega_{kk})_{\ell m} \\ &= (\Omega_{kk})_{ij}, \end{aligned} \tag{86}$$

où nous avons utilisé l'antisymétrie de $(\Omega_{kk})_{\ell m}$. Par conséquent,

$$\epsilon_{ijk} \partial_{r_j} (\Omega_{kk})_k = \partial_{r_j} (\Omega_{kk})_{ij}. \tag{87}$$

A.2 . Forme générale de l'identité de Bianchi

En regroupant les coordonnées dans un vecteur généralisé

$$\boldsymbol{\xi} = (r_1, \ldots, r_d, k_1, \ldots, k_d), \tag{88}$$

la connexion de Berry est une 1-forme $\mathcal{A} = \mathcal{A}_a \, d\xi^a$ et sa courbure est la 2-forme

$$\Omega = d\mathcal{A}, \qquad \Omega_{ab} = \partial_a \mathcal{A}_b - \partial_b \mathcal{A}_a. \tag{89}$$

Comme $d^2 = 0$, cette courbure est fermée,

$$d\Omega = d^2 \mathcal{A} = 0. \tag{90}$$

En composantes, cette relation donne l'identité de Bianchi abélienne

$$\partial_a \Omega_{bc} + \partial_b \Omega_{ca} + \partial_c \Omega_{ab} = 0. \tag{91}$$

Choisissons successivement les trois coordonnées

$$(\xi^a, \xi^b, \xi^c) = (r_j, k_i, k_j) \tag{92}$$

et sommons sur l'indice j. L'équation (91) devient

$$\partial_{r_j} (\Omega_{kk})_{ij} + \partial_{k_i} (\Omega_{kr})_{jj} + \partial_{k_j} (\Omega_{rk})_{ji} = 0. \tag{93}$$

En utilisant l'équation (83), puis les équations (84) et (87), on obtient immédiatement

$$\epsilon_{ijk} \partial_{r_j} (\Omega_{kk})_k + \partial_{k_i} \operatorname{Tr} \Omega_{kr} - \partial_{k_j} (\Omega_{kr})_{ij} = 0. \tag{94}$$

Il s'agit précisément de l'identité utilisée dans l'équation (4.30).

A.3 . Vérification algébrique explicite

Pour rendre l'annulation complètement explicite, définissons

$$\mathcal{B}_i \equiv \partial_{r_j} (\Omega_{kk})_{ij} + \partial_{k_i} (\Omega_{kr})_{jj} - \partial_{k_j} (\Omega_{kr})_{ij}. \tag{95}$$

En remplaçant les courbures par les dérivées des connexions données dans les équations (82), il vient

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_i = {} & \partial_{r_j} \partial_{k_i} (\mathcal{A}_k)_j - \partial_{r_j} \partial_{k_j} (\mathcal{A}_k)_i + \partial_{k_i} \partial_{k_j} (\mathcal{A}_r)_j - \partial_{k_i} \partial_{r_j} (\mathcal{A}_k)_j \\ & - \partial_{k_j} \partial_{k_i} (\mathcal{A}_r)_j + \partial_{k_j} \partial_{r_j} (\mathcal{A}_k)_i. \end{aligned} \tag{96}$$

Ces six termes peuvent être regroupés par paires

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_i = {} & \left[\partial_{r_j} \partial_{k_i} (\mathcal{A}_k)_j - \partial_{k_i} \partial_{r_j} (\mathcal{A}_k)_j \right] \\ & + \left[\partial_{k_i} \partial_{k_j} (\mathcal{A}_r)_j - \partial_{k_j} \partial_{k_i} (\mathcal{A}_r)_j \right] \\ & + \left[\partial_{k_j} \partial_{r_j} (\mathcal{A}_k)_i - \partial_{r_j} \partial_{k_j} (\mathcal{A}_k)_i \right]. \end{aligned} \tag{97}$$

Dans une région où les états de Bloch sont réguliers, les dérivées partielles commutent, *i.e.*

$$[\partial_{r_j}, \partial_{k_i}] = 0, \qquad [\partial_{k_i}, \partial_{k_j}] = 0. \tag{98}$$

Chacun des trois crochets de l'équation (97) est donc nul séparément, d'où

$$\boxed{\mathcal{B}_i = 0.} \tag{99}$$

L'annulation est locale : elle est vérifiée en chaque point $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ où la projection sur la bande considérée est régulière. Il ne s'agit donc pas seulement d'une annulation après intégration sur l'espace des vecteurs d'onde. La dernière ligne de l'équation (4.29) vérifie directement

$$-\frac{e}{\beta\hbar}\int_{\mathbf{k}} \ln\left[1 + e^{-\beta(\varepsilon_0-\mu)}\right] \mathcal{B}_i = 0. \tag{100}$$

Le courant de transport au premier ordre se réduit par conséquent aux contributions longitudinale et Hall anomale données dans l'équation (4.31).

Remarque sur la jauge et les dégénérescences. Dans une bande topologique, une connexion de Berry régulière ne peut pas toujours être définie globalement sur toute la zone de Brillouin. La démonstration précédente reste néanmoins valable dans chaque domaine de jauge, tandis que la courbure, qui est invariante de jauge, se raccorde entre ces domaines. L'identité de Bianchi est donc globale dès lors que la bande demeure isolée. Au voisinage d'une dégénérescence, la projection sur une bande unique cesse en revanche d'être régulière. Pour un sous-espace dégénéré, la connexion devient non abélienne et l'identité précédente doit être remplacée par sa forme covariante, $D\Omega = 0$.

B . Correction de gradient à l'énergie du modèle de Dirac

Cette annexe évalue la correction à l'énergie propre du paquet d'ondes induite par une non-uniformité lente. Pour une bande isolée, cette correction s'écrit au premier ordre en gradients [5]

$$\Delta\varepsilon_{s,\nabla} = -\operatorname{Im}\sum_i \langle \partial_{r_i} u_s | (\varepsilon_s - H_0) | \partial_{k_i} u_s \rangle \,, \tag{101}$$

où $s = \pm 1$ désigne respectivement les bandes de conduction et de valence. Nous considérons le Hamiltonien de Dirac local

$$H_{0,\chi}(\mathbf{r},\mathbf{k}) = \mathbf{d}_\chi(\mathbf{r},\mathbf{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \qquad \mathbf{d}_\chi = (\chi\hbar v_D k_x, \hbar v_D k_y, m(\mathbf{r}))\,, \tag{102}$$

avec $\chi = \pm 1$ et

$$\varepsilon_s = s\varepsilon, \qquad \varepsilon = |\mathbf{d}_\chi| = \sqrt{m^2 + \hbar^2 v_D^2 k^2}. \tag{103}$$

B.1 . Projection sur la seconde bande

Insérons la relation de fermeture

$$\mathbb{1} = |u_s\rangle\langle u_s| + |u_{-s}\rangle\langle u_{-s}| \tag{104}$$

dans l'équation (101). La contribution de $|u_s\rangle$ est nulle puisque $(\varepsilon_s - H_0)|u_s\rangle = 0$. Il reste donc

$$\Delta\varepsilon_{s,\nabla} = -\operatorname{Im}\sum_i (\varepsilon_s - \varepsilon_{-s}) \langle \partial_{r_i} u_s | u_{-s}\rangle\langle u_{-s} | \partial_{k_i} u_s\rangle. \tag{105}$$

Pour une bande non dégénérée, la dérivation de l'équation propre donne

$$\langle u_{-s} | \partial_\lambda u_s \rangle = \frac{\langle u_{-s} | \partial_\lambda H_0 | u_s\rangle}{\varepsilon_s - \varepsilon_{-s}}, \tag{106}$$

où λ peut être r_i ou k_i. On obtient alors

$$\Delta\varepsilon_{s,\nabla} = -\operatorname{Im}\sum_i \frac{\langle u_s | \partial_{r_i} H_0 | u_{-s}\rangle\langle u_{-s} | \partial_{k_i} H_0 | u_s\rangle}{\varepsilon_s - \varepsilon_{-s}}. \tag{107}$$

Pour un Hamiltonien à deux niveaux, l'identité

$$\operatorname{Im}\big[\langle u_s|\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}|u_{-s}\rangle\langle u_{-s}|\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}|u_s\rangle\big] = s\,\widehat{\mathbf{d}}\cdot(\mathbf{a}\times\mathbf{b}) \tag{108}$$

permet d'évaluer directement l'équation (107). Comme $\varepsilon_s - \varepsilon_{-s} = 2s\varepsilon$, le facteur s s'élimine et il vient

$$\Delta\varepsilon_{s,\nabla} = -\frac{1}{2\varepsilon^2}\sum_i \mathbf{d}_\chi\cdot(\partial_{r_i}\mathbf{d}_\chi \times \partial_{k_i}\mathbf{d}_\chi)\,. \tag{109}$$

Cette expression est identique pour les deux bandes dans le modèle à symétrie particule–trou considéré ici.

B.2 . Résultat pour une masse non uniforme

Les dérivées du vecteur $\mathbf{d}_\chi$ sont

$$\partial_{r_i}\mathbf{d}_\chi = (0,0,\partial_{r_i}m), \qquad \partial_{k_x}\mathbf{d}_\chi = (\chi\hbar v_D,0,0), \qquad \partial_{k_y}\mathbf{d}_\chi = (0,\hbar v_D,0). \tag{110}$$

L'équation (109) devient donc

$$\boxed{\Delta\varepsilon_{s,\nabla} = \chi\frac{\hbar^2 v_D^2}{2\varepsilon^2}\left(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\nabla}m\right)_z}. \tag{111}$$

La correction locale n'est ainsi pas identiquement nulle. Pour une interface unidimensionnelle, $m = m(x)$, elle prend la forme

$$\Delta\varepsilon_{s,\nabla}(x,\mathbf{k}) = -\chi\frac{\hbar^2 v_D^2}{2\varepsilon^2}k_y\,\partial_x m. \tag{112}$$

On peut aussi contrôler séparément les deux termes de l'équation de départ. Avec la convention

$$\operatorname{Tr}\Omega^s_{rk} = i\sum_i\left(\langle\partial_{r_i}u_s|\partial_{k_i}u_s\rangle - \langle\partial_{k_i}u_s|\partial_{r_i}u_s\rangle\right), \tag{113}$$

les deux parties vérifient

$$-\varepsilon_s\operatorname{Im}\sum_i\langle\partial_{r_i}u_s|\partial_{k_i}u_s\rangle = \frac{\varepsilon_s}{2}\operatorname{Tr}\Omega^s_{rk}, \tag{114a}$$

$$\operatorname{Im}\sum_i\langle\partial_{r_i}u_s|H_0|\partial_{k_i}u_s\rangle = \frac{\varepsilon_s}{2}\operatorname{Tr}\Omega^s_{rk}. \tag{114b}$$

Elles s'additionnent donc au lieu de se compenser, et

$$\Delta\varepsilon_{s,\nabla} = \varepsilon_s\operatorname{Tr}\Omega^s_{rk}. \tag{115}$$

B.3 . Annulation après intégration

Dans la géométrie unidimensionnelle, l'équation (112) est impaire sous $k_y \mapsto -k_y$, tandis que ε est paire. Pour toute fonction d'équilibre $F_s(\varepsilon)$, on a par conséquent

$$\boxed{\int_{\mathbf{k}}\Delta\varepsilon_{s,\nabla}(x,\mathbf{k})F_s[\varepsilon(x,\mathbf{k})] = 0}. \tag{116}$$

La correction ne contribue donc ni à la densité d'équilibre ni aux moments longitudinaux dont le noyau est pair en k_y. C'est cette annulation par symétrie qui permet de la négliger dans la dérive-diffusion unidimensionnelle du modèle minimal. Elle ne doit toutefois pas être interprétée comme une annulation locale de l'énergie. Une inclinaison transverse de la dispersion, une distribution hors équilibre impaire en k_y ou l'absence de symétrie entre vallées peut rendre cette correction observable.

C . Dérivation de la décomposition de la densité de charge

Nous démontrons ici la décomposition de la densité électronique relative au fond ionique. Nous considérons une base orthonormée d'états propres $\{\psi_\alpha\}$, séparée en un secteur de conduction c et un secteur de valence v.

La densité électronique relative au fond ionique est définie par

$$\sigma(\mathbf{r}) = \sum_\alpha |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 f_\alpha - \sigma_{\text{ion}}(\mathbf{r}), \tag{117}$$

où f_α est l'occupation de l'état α. Avec $e > 0$, la densité de charge physique vaut $\rho = -e\sigma$: la quantité σ est donc positive pour un excès d'électrons.

Séparons la somme en ses contributions de conduction et de valence,

$$\sum_\alpha = \sum_{\alpha\in c} + \sum_{\alpha\in v}. \tag{118}$$

La contribution des états occupés de conduction définit directement la densité électronique,

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\in c} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 f_\alpha. \tag{119}$$

Dans le secteur de valence, les excitations mobiles sont les états inoccupés. La densité de trous est donc

$$p(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\in v} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 (1 - f_\alpha)\,. \tag{120}$$

En utilisant l'identité

$$f_\alpha = 1 - (1 - f_\alpha)\,, \tag{121}$$

la contribution des états de valence occupés se réécrit

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha\in v} |\psi_\alpha|^2 f_\alpha &= \sum_{\alpha\in v} |\psi_\alpha|^2 - \sum_{\alpha\in v} |\psi_\alpha|^2 (1 - f_\alpha) \\ &= \sum_{\alpha\in v} |\psi_\alpha|^2 - p.\end{aligned} \tag{122}$$

L'équation (117) devient alors

$$\sigma = n - p + \sum_{\alpha\in v} |\psi_\alpha|^2 - \sigma_{\text{ion}}. \tag{123}$$

Introduisons l'asymétrie spectrale locale

$$\eta(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\in c} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 - \sum_{\alpha\in v} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2\,. \tag{124}$$

La somme complète des états vérifie parallèlement

$$\sum_\alpha |\psi_\alpha|^2 = \sum_{\alpha\in c} |\psi_\alpha|^2 + \sum_{\alpha\in v} |\psi_\alpha|^2\,. \tag{125}$$

En soustrayant l'équation définissant η de cette dernière relation, on obtient

$$\sum_{\alpha \in v} |\psi_\alpha|^2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} |\psi_\alpha|^2 - \frac{\eta}{2}. \tag{126}$$

L'insertion de cette identité dans l'équation (123) donne

$$\sigma = n - p - \frac{\eta}{2} + \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha} |\psi_\alpha|^2 - \sigma_{\text{ion}} \right]. \tag{127}$$

En définissant la densité de référence associée au fond ionique,

$$c(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2} \sum_{\alpha} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 - \sigma_{\text{ion}}(\mathbf{r}), \tag{128}$$

nous obtenons finalement

$$\boxed{\sigma(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) - p(\mathbf{r}) - \frac{\eta(\mathbf{r})}{2} + c(\mathbf{r})}. \tag{129}$$

Cette dérivation montre que le terme d'asymétrie spectrale n'est pas ajouté phénoménologiquement. Il apparaît exactement lorsque la densité totale est réécrite en termes d'électrons, de trous et de fond ionique.

D . Dégénérescence de Landau et centres-guides

Cette annexe rappelle l'origine de la dégénérescence surfacique utilisée dans l'équation (6.18). Nous considérons la géométrie du chapitre 6 : la monocouche est contenue dans le plan (x, y), le champ magnétique est $\mathbf{B} = B\,\hat{\mathbf{z}}$ et la jauge de Landau est

$$\mathbf{A} = Bx\,\hat{\mathbf{y}}. \tag{130}$$

Le système est périodique selon y, de longueur L_y, et ouvert selon x, de largeur L_x. La translation selon y est donc conservée et les états d'un niveau de Landau peuvent être repérés par leur indice j et par le nombre quantique k_y.

Pour un électron de charge $-e$, avec $e > 0$, l'impulsion cinétique est $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}$. Sa composante selon y vaut

$$\pi_y = \hbar k_y + eBx = eB(x - X), \tag{131}$$

où le centre-guide est

$$X = -\frac{\hbar k_y}{eB} = -\operatorname{sgn}(B)\, k_y \ell_B^2, \qquad \ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{e|B|}}. \tag{132}$$

Le signe de X dépend ainsi de l'orientation du champ et du choix de jauge, tandis que la dégénérescence ne dépend que de $|B|$.

Les conditions périodiques imposent

$$k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, \qquad n_y \in \mathbb{Z}, \tag{133}$$

de sorte que deux centres-guides successifs sont séparés par

$$|\Delta X| = \ell_B^2 \frac{2\pi}{L_y}. \tag{134}$$

La densité linéique de centres-guides selon x est donc

$$\frac{dN_X}{dX} = \frac{1}{|\Delta X|} = \frac{L_y}{2\pi\ell_B^2}. \tag{135}$$

Dans le volume, X appartient à l'échantillon. En négligeant les corrections de bord, le nombre d'états d'un niveau de Landau est

$$N_X \simeq \frac{L_x L_y}{2\pi\ell_B^2} = \frac{|B| L_x L_y}{h/e}. \tag{136}$$

Cette expression correspond au nombre de quanta de flux magnétique traversant la surface. En divisant par l'aire $L_x L_y$, on retrouve la dégénérescence surfacique par niveau de Landau,

$$\boxed{g_B = \frac{1}{2\pi\ell_B^2} = \frac{e|B|}{h}}. \tag{137}$$

La même relation peut être obtenue localement. Loin des bords, une fonction d'onde peut être écrite sous la forme

$$\psi_{jk_y}(x,y) = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}}\,\varphi_j(x-X), \tag{138}$$

où φ_j est normalisée selon x. La somme sur les valeurs permises de k_y devient, dans la limite d'un grand système,

$$\begin{aligned}\sum_{k_y} |\psi_{jk_y}(x,y)|^2 &= \frac{1}{L_y}\sum_{k_y} |\varphi_j(x-X)|^2 \\ &\longrightarrow \frac{1}{2\pi\ell_B^2}\int dX\,|\varphi_j(x-X)|^2 \\ &= \frac{1}{2\pi\ell_B^2}.\end{aligned} \tag{139}$$

Pour une fonction d'onde spinorielle, $|\psi_{jk_y}|^2$ désigne la somme sur ses composantes internes. Le facteur g_B est la dégénérescence orbitale d'un niveau et d'une espèce interne donnée ; une éventuelle dégénérescence supplémentaire de spin ou de vallée doit être comptée séparément. Près des bords, l'identité locale est modifiée par la dispersion des états de bord, mais le comptage total des états reste fixé par le flux magnétique.

E . Dérivation de la capacité différentielle

Nous considérons le côté droit de la jonction et notons $U > 0$ la chute de potentiel instantanée. Dans l'approximation plateau-plus-queue, la densité de charge est décrite par

$$|\rho_{\mathrm{R}}(x;U)| \simeq \begin{cases} ec_0, & 0 \le x \le x_c(U), \\ \dfrac{2\varepsilon U}{\pi x}, & x_c(U) \le x \le L. \end{cases} \tag{140}$$

La continuité entre les deux régimes impose

$$ec_0 = \frac{2\varepsilon U}{\pi x_c(U)}, \tag{141}$$

d'où

$$x_c(U) = \frac{2\varepsilon U}{\pi e c_0}. \tag{142}$$

La charge accumulée s'obtient en intégrant l'équation (140),

$$\begin{aligned} |Q_{\mathrm{R}}(U)| &\simeq ec_0 x_c(U) + \frac{2\varepsilon U}{\pi}\int_{x_c(U)}^{L}\frac{dx}{x} \\ &= \frac{2\varepsilon U}{\pi}\left[1 + \ln\left(\frac{L}{x_c(U)}\right)\right]. \end{aligned} \tag{143}$$

Considérons maintenant une faible modulation de U, à champ magnétique et polarité fixés. La quantité c_0 reste constante, tandis que l'équation (142) donne

$$\frac{dx_c}{dU} = \frac{x_c}{U}. \tag{144}$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dU}\left\{U\left[1 + \ln\left(\frac{L}{x_c(U)}\right)\right]\right\} &= 1 + \ln\left(\frac{L}{x_c}\right) - \frac{U}{x_c}\frac{dx_c}{dU} \\ &= \ln\left(\frac{L}{x_c}\right). \end{aligned} \tag{145}$$

Le terme constant associé à la charge du plateau est ainsi exactement compensé par le déplacement de la position de raccordement x_c. On obtient

$$\frac{d|Q_{\mathrm{R}}|}{dU} = \frac{2\varepsilon}{\pi}\ln\left(\frac{L}{x_c}\right). \tag{146}$$

Avec la normalisation utilisée dans l'équation (**??**),

$$\widetilde{C}_{\mathrm{dep}}^{\mathrm{diff}} = \frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{d|Q_{\mathrm{R}}|}{dU}, \tag{147}$$

la capacité différentielle s'écrit finalement

$$\widetilde{C}_{\mathrm{dep}}^{\mathrm{diff}} = \frac{1}{2\pi^2}\ln\left(\frac{L}{x_c}\right). \tag{148}$$

La disparition du terme constant $1/(2\pi^2)$ distingue ainsi la capacité différentielle de la capacité statique effective.

Bibliographie

[1] M. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**(1802), 45–57 (1984). [*cf.* p. xix, 5, 14, 18, 23, 24, 25, 46, 47, 52]

[2] D. Xiao, M.-C. Chang et Q. Niu. Berry phase effects on electronic properties. *Reviews of Modern Physics* **82**(3), 1959–2007 (2010). [*cf.* p. xix, 5, 6, 10, 11, 12, 14, 18, 25, 33, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 63, 65, 66, 70, 74, 75, 76, 82, 92, 100, 103, 125, 149]

[3] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale et M. den Nijs. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405–408 (1982). [*cf.* p. xix, 5, 11, 18, 27, 28, 30, 47, 52, 63, 66, 120]

[4] M. Z. Hasan et C. L. Kane. Colloquium : Topological insulators. *Reviews of Modern Physics* **82**(4), 3045–3067 (2010). [*cf.* p. xix, 4, 5, 7, 8, 30]

[5] G. Sundaram et Q. Niu. Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals : Gradient corrections and Berry-phase effects. *Phys. Rev. B* **59**(23), 14915–14925 (1999). [*cf.* p. xix, 6, 14, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 59, 61, 66, 70, 74, 75, 76, 82, 100, 149, 152]

[6] W. Van Roosbroeck. Theory of the Flow of Electrons and Holes in Germanium and Other Semiconductors. *Bell System Technical Journal* **29**(4), 560–607 (1950). [*cf.* p. xix, 4, 13, 70, 71]

[7] P.-A. Graham, S. Bertrand, M. Bédard, **R. Durand** et I. Garate. Van Roosbroeck's equations with topological terms : The case of Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **108**(2), 024301 (2023). [*cf.* p. xix, 14, 15, 70, 75, 81, 147]

[8] K. Fuchs. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **34**(1), 100–108 (1938). [*cf.* p. xix, 2, 3, 4, 15, 92, 93, 94, 96, 97, 99, 100, 101, 102, 117]

[9] E. Sondheimer. The mean free path of electrons in metals. *Adv. Phys.* **1**(1), 1–42 (1952). [*cf.* p. xix, 2, 3, 4, 15, 92, 93, 94, 96, 97, 99, 100, 101, 102, 117]

[10] **R. Durand**, L.-T. Gendron, T. N. Dionne et I. Garate. Nonlinear longitudinal current of band-geometric origin in wires of finite thickness. *Phys. Rev. Lett.* **133**, 226302 (2024). [*cf.* p. xx, 4, 10, 12, 14, 15, 82, 89, 92, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 106, 108, 109, 110, 111, 112, 114, 115, 117, 118, 147]

[11] **R. Durand**, P. Simon et I. Garate. Electrostatics of Chern insulator junctions. *Submitted to SciPost Phsyics* (2026). [*cf.* p. xx, 5, 10, 11, 12, 15, 83, 125, 127, 129, 133, 136, 145, 147]

[12] N. Ashcroft et N. Mermin. *Solid State Physics*. HRW International Editions. Holt, Rinehart and Winston, (1976). [*cf.* p. 2, 5, 18, 19, 20, 21, 22, 93, 94, 95, 96]

[13] J. P. McKelvey. *Solid State and Semiconductor Physics*. Krieger Pub. Co, Malabar, Fla, (1982). [*cf.* p. 2, 13]

[14] G. E. Moore. Cramming more components onto integrated circuits. *Proceedings of the IEEE* **86**, 82 (1965). [*cf.* p. 2]

[15] R. Dennard, F. Gaensslen, H.-N. Yu, V. Rideout, E. Bassous et A. LeBlanc. Design of ion-implanted MOSFET's with very small physical dimensions. *IEEE Journal of Solid-State Circuits* **9**(5), 256–268 (1974). [*cf.* p. 2]

[16] M. M. Waldrop. The chips are down for Moore's law. *Nature* **530**, 144–147 (2016). [*cf.* p. 2]

[17] T. N. Theis et H.-S. P. Wong. The end of Moore's law : A new beginning for information technology. *Computing in Science & Engineering* **19**, 41–50 (2017). [*cf.* p. 2]

[18] H. H. Radamson, Y. Miao, Z. Zhou, Z. Wu, Z. Kong, J. Gao, H. Yang, Y. Ren, Y. Zhang, J. Shi, J. Xiang, H. Cui, B. Lu, J. Li, J. Liu, H. Lin, H. Xu, M. Li, J. Cao, C. He, X. Duan, X. Zhao, J. Su, Y. Du et al. CMOS scaling for the 5 nm node and beyond : Device, process and technology. *Nanomaterials* **14**(10) (2024). [*cf.* p. 2]

[19] S. E. Thompson, R. S. Chau, T. Ghani, K. Mistry, S. Tyagi et M. T. Bohr. In search of "forever, " continued transistor scaling one new material at a time. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing* **18**, 26–36 (2005). [*cf.* p. 2]

[20] M. T. Bohr. Interconnect scaling—The real limiter to high performance ULSI. Dans *IEEE International Electron Devices Meeting*, 241–244, (1995). [*cf.* p. 2]

[21] R. Ho, K. W. Mai et M. A. Horowitz. The future of wires. *Proceedings of the IEEE* **89**, 490–504 (2001). [*cf.* p. 2]

[22] C. Fonstad. *Microelectronic Devices and Circuits*. McGraw-Hill Series in Electrical and Computer Engineering. McGraw-Hill, (1994). [*cf.* p. 2, 4]

[23] A. F. Mayadas et M. Shatzkes. Electrical-resistivity model for polycrystalline films. *Phys. Rev. B* **1**, 1382 (1970). [*cf.* p. 2, 4, 97]

[24] T. Sun, B. Yao, A. P. Warren, V. Kumar, S. Roberts, K. Barmak et K. R. Coffey. Classical size effect in oxide-encapsulated cu thin films : Impact of grain boundaries versus surfaces on resistivity. *Journal of Vacuum Science Technology A* **26**(4), 605–609 (2008). [*cf.* p. 2, 92, 98]

[25] X. Chen et R. H. Victora. Surface scattering in metallic nanowires. *Appl. Phys. Lett.* **93**(16), 162105 (2008). [*cf.* p. 2, 98]

[26] D. Gall. The search for the most conductive metal for narrow interconnect lines. *J. Appl. Phys.* **127**(5), 050901 (2020). [*cf.* p. 2, 3, 92, 98]

[27] D. Gall, J. Cha, Z. Chen, H.-J. Han, C. Hinkle, J. A. Robinson, R. Sundararaman et R. Torsi. Materials for interconnects. *MRS Bulletin* **46**, 959 (2021). [*cf.* p. 2, 3, 92, 98]

[28] J.-P. Soulié, K. Sankaran, B. Van Troeye, A. Leśniewska, O. Varela Pedreira, H. Oprins, G. Delie, C. Fleischmann, L. Boakes, C. Rolin, L.- Ragnarsson, K. Croes, S. Park, J. Swerts, G. Pourtois, Z. Tőkei et C. Adelmann. Selecting alternative metals for advanced interconnects. *J. Appl. Phys.* **136**(17), 171101 (2024). [*cf.* p. 3, 92, 98]

[29] M. J. Gilbert. Topological electronics. *Communications Physics* **4**(1), 70 (2021). [*cf.* p. 3, 8, 9, 10, 11]

[30] C. Zhang, Z. Ni, J. Zhang, X. Yuan, Y. Liu, Y. Zou, Z. Liao, Y. Du, A. Narayan, H. Zhang, T. Gu, X. Zhu, L. Pi, S. Sanvito, X. Han, J. Zou, Y. Shi, X. Wan, S. Y. Savrasov et F. Xiu. Ultrahigh conductivity in Weyl semimetal NbAs nanobelts. *Nature Materials* **18**(5), 482–488 (2019). [*cf.* p. 3, 8, 92, 113, 116]

[31] B. A. Bernevig et T. L. Hughes. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, Princeton, (2013). [*cf.* p. 4, 5, 6, 7, 11, 31, 32, 37, 38, 39, 40, 42, 43]

[32] S. M. Sze et K. K. Ng. *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley, 3e édition, (2007). [*cf.* p. 4, 12, 13, 71, 77, 120]

[33] S. Selberherr. *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Springer Vienna, Vienna, (1984). [*cf.* p. 4, 13, 70, 71, 73, 88]

[34] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer et C. Schmeiser. *Semiconductor Equations*. Springer Vienna, (1990). [*cf.* p. 4, 13, 70, 72]

[35] W. Hänsch. *The Drift Diffusion Equation and Its Applications in MOSFET Modeling*. Computational Microelectronics. Springer Vienna, Vienna, (1991). [*cf.* p. 4, 13, 70, 71, 73, 88]

[36] W. Shockley et W. T. Read. Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Phys. Rev.* **87**, 835 (1952). [*cf.* p. 4, 71]

[37] R. N. Hall. Electron-hole recombination in germanium. *Phys. Rev.* **87**, 387 (1952). [*cf.* p. 4]

[38] J.-N. Fuchs, F. Piéchon et G. Montambaux. Landau levels, response functions and magnetic oscillations from a generalized Onsager relation. *SciPost Physics* **4**(5), 024 (2018). [*cf.* p. 5, 11, 25, 40, 49, 64, 65, 67]

[39] R. Moessner et J. E. Moore. *Topological Phases of Matter*. Cambridge University Press, 1re édition, (2021). [*cf.* p. 5, 6, 7, 18, 27, 29, 30, 35, 39]

[40] B. J. Wieder, B. Bradlyn, J. Cano, Z. Wang, M. G. Vergniory, L. Elcoro, A. A. Soluyanov, C. Felser, T. Neupert, N. Regnault et B. A. Bernevig. Topological materials discovery from crystal symmetry. *Nature Reviews Materials* **7**(3), 196–216 (2022). [*cf.* p. 5, 9, 11, 18]

[41] E. H. Hall. On a New Action of the Magnet on Electric Currents. *American Journal of Mathematics* **2**(3), 287 (1879). [*cf.* p. 5, 46, 60]

[42] R. Karplus et J. M. Luttinger. Hall Effect in Ferromagnetics. *Phys. Rev.* **95**(5), 1154–1160 (1954). [*cf.* p. 5, 6, 12, 14, 47, 60, 61, 76]

[43] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald et N. P. Ong. Anomalous Hall effect. *Reviews of Modern Physics* **82**(2), 1539–1592 (2010). [*cf.* p. 5, 6, 12, 14, 47, 53, 60, 61, 66, 76, 100, 115]

[44] K. v. Klitzing, G. Dorda et M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494–497 (1980). [*cf.* p. 5, 6]

[45] B. Simon. Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and Berry's phase. *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2167 (1983). [*cf.* p. 5, 24, 25, 47, 52]

[46] Y. Hatsugai. Chern number and edge states in the integer quantum Hall effect. *Phys. Rev. Lett.* **71**(22), 3697–3700 (1993). [*cf.* p. 5, 6, 10, 11, 18, 31, 41, 42, 43, 74, 120]

[47] Y. Hatsugai. Edge states in the integer quantum Hall effect and the Riemann surface of the Bloch function. *Phys. Rev. B* **48**, 11851 (1993). [*cf.* p. 5, 6, 10, 11, 31, 41, 42, 43, 74]

[48] C. L. Kane et E. J. Mele. Quantum spin Hall effect in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005). [*cf.* p. 7, 30]

[49] C. L. Kane et E. J. Mele. $\mathbb{Z}_2$ topological order and the quantum spin Hall effect. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005). [*cf.* p. 7, 30]

[50] B. A. Bernevig, T. L. Hughes et S.-C. Zhang. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science* **314**, 1757 (2006). [*cf.* p. 7, 8, 11, 37, 38, 122]

[51] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi et S.-C. Zhang. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science* **318**(5851), 766–770 (2007). [*cf.* p. 7, 8, 11, 37, 122]

[52] L. Fu et C. L. Kane. Time reversal polarization and a $\mathbb{Z}_2$ adiabatic spin pump. *Phys. Rev. B* **74**, 195312 (2006). [*cf.* p. 7, 30]

[53] L. Fu, C. L. Kane et E. J. Mele. Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803 (2007). [*cf.* p. 7, 30]

[54] X.-L. Qi et S.-C. Zhang. Topological insulators and superconductors. *Reviews of Modern Physics* **83**, 1057 (2011). [*cf.* p. 7, 11, 30, 37]

[55] F. D. M. Haldane. Model for a quantum Hall effect without Landau levels. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988). [*cf.* p. 8, 11, 18, 35, 36, 39, 41, 120]

[56] J. Cai, D. Ovchinnikov, Z. Fei, M. He, T. Song, Z. Lin, C. Wang, D. Cobden, J.-H. Chu, Y.-T. Cui, C.-Z. Chang, D. Xiao, J. Yan et X. Xu. Electric control of a canted-antiferromagnetic Chern insulator. *Nat. Commun.* **13**(1), 1668 (2022). [*cf.* p. 8, 9, 10, 11]

[57] D. Ovchinnikov, J. Cai, Z. Lin, Z. Fei, Z. Liu, Y.-T. Cui, D. H. Cobden, J.-H. Chu, C.-Z. Chang, D. Xiao, J. Yan et X. Xu. Topological current divider in a Chern insulator junction. *Nat. Commun.* **13**(1), 5967 (2022). [*cf.* p. 8, 10, 15, 120]

[58] M. J. Gilbert. Chern networks : Reconciling fundamental physics and device engineering. *Nat. Commun.* **16**(1), 3904 (2025). [*cf.* p. 8, 9, 15, 92, 116, 120]

[59] N. P. Armitage, E. J. Mele et A. Vishwanath. Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids. *Reviews of Modern Physics* **90**(1), 015001 (2018). [*cf.* p. 8, 18, 110]

[60] C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma et Q.-K. Xue. Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator. *Science* **340**(6129), 167–170 (2013). [*cf.* p. 8]

[61] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva et A. A. Firsov. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science* **306**(5696), 666–669 (2004). [*cf.* p. 8, 10]

[62] R. Bianco et R. Resta. Mapping topological order in coordinate space. *Phys. Rev. B* **84**, 241106 (2011). [*cf.* p. 9]

[63] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Number 3 in Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge Univ. Press, Cambridge, (2009). [*cf.* p. 9, 10, 93, 94, 99, 100]

[64] A. Roth, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi et S.-C. Zhang. Nonlocal transport in the quantum spin Hall state. *Science* **325**(5938), 294–297 (2009). [*cf.* p. 10]

[65] H. Yu, A. Kutana et B. I. Yakobson. Carrier Delocalization in Two-Dimensional Coplanar *p*-*n* Junctions of Graphene and Metal Dichalcogenides. *Nano Letters* **16**(8), 5032–5036 (2016). [*cf.* p. 11, 12, 15, 120, 131]

[66] F. A. Chaves, P. C. Feijoo et D. Jiménez. 2D *p*-*n* junctions driven out-of-equilibrium. *Nanoscale Advances* **2**(8), 3252–3262 (2020). [*cf.* p. 11, 12, 15, 120]

[67] S. Memaran, N. R. Pradhan, Z. Lu, D. Rhodes, J. Ludwig, Q. Zhou, O. Ogunsolu, P. M. Ajayan, D. Smirnov, A. I. Fernández-Domínguez, F. J. García-Vidal et L. Balicas. Pronounced Photovoltaic Response from Multilayered Transition-Metal Dichalcogenides *p*-*n* Junctions. *Nano Letters* **15**(11), 7532–7538 (2015). [*cf.* p. 11]

[68] E. Elahi, M. Ahmad, A. Dahshan, M. Rabeel, S. Saleem, V. H. Nguyen, H. H. Hegazy et S. Aftab. Contemporary innovations in two-dimensional transition metal dichalcogenide-based *p*-*n* junctions for optoelectronics. *Nanoscale* **16**(1), 14–43 (2024). [*cf.* p. 11]

[69] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain et Z.-X. Shen. Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi_2Te_3. *Science* **325**(5937), 178–181 (2009). [*cf.* p. 12]

[70] S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, S.-M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D. S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P. P. Shibayev, H. Lin, S. Jia et M. Z. Hasan. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science* **349**(6248), 613–617 (2015). [*cf.* p. 12, 13]

[71] O. Chiatti, C. Riha, D. Lawrenz, M. Busch, S. Dusari, J. Sánchez-Barriga, A. Mogilatenko, L. V. Yashina, S. Valencia, A. A. Ünal, O. Rader et S. F. Fischer. 2D layered transport properties from topological insulator Bi_2Se_3 single crystals and micro flakes. *Sci. Rep.* **6**(1), 27483 (2016). [*cf.* p. 13]

[72] S. G. Sharapov. Thermodynamic properties of the 2+1-dimensional Dirac fermions with broken time-reversal symmetry. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **48**(36), 365002 (2015). [*cf.* p. 12, 123, 127]

[73] C. Tutschku, F. S. Nogueira, C. Northe, J. Van Den Brink et E. M. Hankiewicz. Temperature and chemical potential dependence of the parity anomaly in quantum anomalous Hall insulators. *Phys. Rev. B* **102**(20), 205407 (2020). [*cf.* p. 12, 125]

[74] M. Nonnenmacher, M. P. O'Boyle et H. K. Wickramasinghe. Kelvin probe force microscopy. *Appl. Phys. Lett.* **58**(25), 2921–2923 (1991). [*cf.* p. 12, 144]

[75] I. Sodemann et L. Fu. Quantum Nonlinear Hall Effect Induced by Berry Curvature Dipole in Time-Reversal Invariant Materials. *Phys. Rev. Lett.* **115**(21), 216806 (2015). [*cf.* p. 14, 62, 115]

[76] N. Nagaosa et T. Morimoto. Concept of quantum geometry in optoelectronic processes in solids : Application to solar cells. *Advanced Materials* **29**(25), 1603345 (2017). [*cf.* p. 14, 27]

[77] A. T. Boothroyd. Topological electronic bands in crystalline solids. *Contemporary Physics* **63**(4), 305–327 (2022). [*cf.* p. 18, 23]

[78] J. Cayssol et J. N. Fuchs. Topological and geometrical aspects of band theory. *Journal of Physics: Materials* **4**(3), 034007 (2021). [*cf.* p. 18, 23, 25, 26, 27, 30, 32, 33]

[79] D. Vanderbilt. *Berry Phases in Electronic Structure Theory*. Cambridge University Press, (2018). [*cf.* p. 18, 23, 25, 26, 27, 28]

[80] F. D. M. Haldane. Berry Curvature on the Fermi Surface : Anomalous Hall Effect as a Topological Fermi-Liquid Property. *Phys. Rev. Lett.* **93**(20), 206602 (2004). [*cf.* p. 18, 61]

[81] M. Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the Hall conductance. *Annals of Physics* **160**, 343–354 (1985). [*cf.* p. 18, 27, 28, 29, 30, 36, 52, 63]

[82] F. Bloch. über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeitschrift für Physik* **52**(7), 555–600 (1929). [*cf.* p. 22]

[83] S. M. Girvin et K. Yang. *Modern Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 1re édition, (2019). [*cf.* p. 22, 27, 30]

[84] R. Resta. The insulating state of matter : A geometrical theory. *The European Physical Journal B* **79**(2), 121–137 (2011). [*cf.* p. 23, 27]

[85] J. P. Provost et G. Vallee. Riemannian structure on manifolds of quantum states. *Communications in Mathematical Physics* **76**(3), 289–301 (1980). [*cf.* p. 23, 26]

[86] R. Cheng. Quantum Geometric Tensor (Fubini-Study Metric) in Simple Quantum System : A pedagogical Introduction, (2010). [*cf.* p. 23, 26]

[87] J. C. Solem et L. C. Biedenharn. Understanding geometrical phases in quantum mechanics : An elementary example. *Foundations of Physics* **23**(2), 185–195 (1993). [*cf.* p. 25]

[88] J. N. Fuchs, F. Piéchon, M. O. Goerbig et G. Montambaux. Topological Berry phase and semiclassical quantization of cyclotron orbits for two dimensional electrons in coupled band models. *The European Physical Journal B* **77**(3), 351–362 (2010). [*cf.* p. 25, 64, 65, 67]

[89] J. Zak. Berry's phase for energy bands in solids. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2747 (1989). [*cf.* p. 26]

[90] R. D. King-Smith et D. Vanderbilt. Theory of polarization of crystalline solids. *Phys. Rev. B* **47**, 1651–1654 (1993). [*cf.* p. 26]

[91] N. Marzari et D. Vanderbilt. Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands. *Phys. Rev. B* **56**, 12847–12865 (1997). [*cf.* p. 27]

[92] T. Fukui, Y. Hatsugai et H. Suzuki. Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone : Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances. *Journal of the Physical Society of Japan* **74**(6), 1674–1677 (2005). [*cf.* p. 27]

[93] T. Desort. Computing numerically Berry curvatures. Notes personnelles. [*cf.* p. 27]

[94] E. Witten. Three lectures on topological phases of matter. *La Rivista del Nuovo Cimento* **39**(7), 313–370 (2016). [*cf.* p. 28, 29]

[95] Q. Niu, D. J. Thouless et Y.-S. Wu. Quantized Hall conductance as a topological invariant. *Phys. Rev. B* **31**, 3372–3377 (1985). [*cf.* p. 28, 30, 47, 63, 66]

[96] J. E. Avron, R. Seiler et B. Simon. Homotopy and quantization in condensed matter physics. *Phys. Rev. Lett.* **51**, 51–53 (1983). [*cf.* p. 28, 29, 30, 35]

[97] J. Bellissard, A. van Elst et H. Schulz-Baldes. The non-commutative geometry of the quantum Hall effect. *J. Math. Phys.* **35**, 5373–5451 (1994). [*cf.* p. 30]

[98] X.-L. Qi, T. L. Hughes et S.-C. Zhang. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008). [*cf.* p. 30]

[99] P. Středa. Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **15**(22), L717 (1982). [*cf.* p. 30, 83, 125]

[100] P. Středa et L. Smrčka. Thermodynamic derivation of the Hall current and the thermopower in quantising magnetic field. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **16**(24), L895 (1983). [*cf.* p. 30, 83, 125]

[101] S.-Q. Shen. *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter*. Number 187 in Springer Series in Solid-State Sciences. Springer Singapore : Imprint : Springer, Singapore, 2nd ed. 2017e édition, (2017). [*cf.* p. 31, 32, 34, 35, 36, 38, 39, 40, 43]

[102] D. Carpentier. *Topology of Bands in Solids: From Insulators to Dirac Matter*, 95–129. Springer International Publishing, Cham (2017). [*cf.* p. 31, 33, 34, 35, 36, 38, 43]

[103] D. Xiao, W. Yao et Q. Niu. Valley-Contrasting Physics in Graphene : Magnetic Moment and Topological Transport. *Phys. Rev. Lett.* **99**(23), 236809 (2007). [*cf.* p. 34, 56, 57, 58, 66, 70, 82, 86, 87, 89, 105]

[104] H. B. Nielsen et M. Ninomiya. A no-go theorem for regularizing chiral fermions. *Physics Letters B* **105**, 219–223 (1981). [*cf.* p. 39]

[105] P. L. Krapivsky, S. Redner et E. Ben-Naim. *A Kinetic View of Statistical Physics*. Cambridge University Press, 1re édition, (2010). [*cf.* p. 46, 60]

[106] L. Onsager. Interpretation of the de Haas-van Alphen effect. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **43**, 1006 (1952). [*cf.* p. 46, 49, 64, 67]

[107] M.-C. Chang et Q. Niu. Berry phase, hyperorbits, and the Hofstadter spectrum : Semiclassical dynamics in magnetic Bloch bands. *Phys. Rev. B* **53**(11), 7010–7023 (1996). [*cf.* p. 47, 50, 51, 53, 54, 55, 63]

[108] L. M. Roth. Semiclassical theory of magnetic energy levels and magnetic susceptibility of Bloch electrons. *Phys. Rev.* **145**, 434 (1966). [*cf.* p. 47, 53, 55, 56, 64, 65, 66]

[109] D. Xiao, J. Shi et Q. Niu. Berry Phase Correction to Electron Density of States in Solids. *Phys. Rev. Lett.* **95**(13), 137204 (2005). [*cf.* p. 47, 53, 57, 58, 59, 65, 66, 70, 82, 83, 89, 125, 126]

[110] C. Duval, Z. Horváth, P. A. Horváthy, L. Martina et P. C. Stichel. Berry phase correction to electron density in solids and "exotic" dynamics. *Modern Physics Letters B* **20**(07), 373–378 (2006). [*cf.* p. 47, 53, 58, 59]

[111] C. Zener. Non-adiabatic crossing of energy levels. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **137**(833), 696–702 (1932). [*cf.* p. 48]

[112] C. Zener. A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **145**(855), 523–529 (1934). [*cf.* p. 48]

[113] D. Culcer, Y. Yao et Q. Niu. Coherent wave-packet evolution in coupled bands. *Phys. Rev. B* **72**, 085110 (2005). [*cf.* p. 48]

[114] R. Shindou et K.-I. Imura. Noncommutative geometry and non-Abelian Berry phase in the wave-packet dynamics of Bloch electrons. *Nuclear Physics B* **720**, 399–435 (2005). [*cf.* p. 48]

[115] Y. Gao, S. A. Yang et Q. Niu. Field Induced Positional Shift of Bloch Electrons and Its Dynamical Implications. *Phys. Rev. Lett.* **112**(16), 166601 (2014). [*cf.* p. 48, 74]

[116] Y. Gao. Semiclassical dynamics and nonlinear charge current. *Frontiers of Physics* **14**(3), 33404 (2019). [*cf.* p. 48, 62, 107]

[117] D. J. Thouless. Quantization of particle transport. *Phys. Rev. B* **27**, 6083–6087 (1983). [*cf.* p. 54]

[118] D. Xiao, Y. Yao, Z. Fang et Q. Niu. Berry-Phase Effect in Anomalous Thermoelectric Transport. *Phys. Rev. Lett.* **97**(2), 026603 (2006). [*cf.* p. 55, 60, 61, 75, 76]

[119] Y. Gao, S. A. Yang et Q. Niu. Geometrical effects in orbital magnetic susceptibility. *Phys. Rev. B* **91**, 214405 (2015). [*cf.* p. 56, 57]

[120] S. Zhong, J. E. Moore et I. Souza. Gyrotropic magnetic effect and the magnetic moment on the Fermi surface. *Phys. Rev. Lett.* **116**, 077201 (2016). [*cf.* p. 57]

[121] C. Xiao et Q. Niu. Unified bulk semiclassical theory for intrinsic thermal transport and magnetization currents. *Phys. Rev. B* **101**(23), 235430 (2020). [*cf.* p. 57, 60, 61, 76, 101, 115]

[122] E. Hall. XVIII. *On the "Rotational Coefficient" in nickel and cobalt*. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **12**(74), 157–172 (1881). [*cf.* p. 60]

[123] J. Smit. The spontaneous Hall effect in ferromagnetics II. *Physica* **24**(1-5), 39–51 (1958). [*cf.* p. 60, 61]

[124] Y. Hidaka, S. Pu, Q. Wang et D.-L. Yang. Foundations and applications of quantum kinetic theory. *Progress in Particle and Nuclear Physics* **127**, 103989 (2022). [*cf.* p. 60]

[125] N. A. Sinitsyn. Semiclassical theories of the anomalous Hall effect. *Journal of Physics: Condensed Matter* **20**(2), 023201 (2008). [*cf.* p. 61, 100, 115]

[126] N. A. Sinitsyn, Q. Niu et A. H. MacDonald. Coordinate shift in the semiclassical Boltzmann equation and the anomalous Hall effect. *Phys. Rev. B* **73**(7), 075318 (2006). [*cf.* p. 61]

[127] C. Ortix. Nonlinear Hall Effect with Time-Reversal Symmetry : Theory and Material Realizations. *Advanced Quantum Technologies* **4**(9), 2100056 (2021). [*cf.* p. 62]

[128] Q. Ma, S.-Y. Xu, H. Shen, D. MacNeill, V. Fatemi, T.-R. Chang, A. M. Mier Valdivia, S. Wu, Z. Du, C.-H. Hsu, S. Fang, Q. D. Gibson, K. Watanabe, T. Taniguchi, R. J. Cava, E. Kaxiras, H.-Z. Lu, H. Lin, L. Fu, N. Gedik et P. Jarillo-Herrero. Observation of the nonlinear Hall effect under time-reversal-symmetric conditions. *Nature* **565**(7739), 337–342 (2019). [*cf.* p. 62]

[129] K. Kang, T. Li, E. Sohn, J. Shan et K. F. Mak. Nonlinear anomalous Hall effect in few-layer WTe2. *Nature Materials* **18**(4), 324–328 (2019). [*cf.* p. 62]

[130] Z. Z. Du, H.-Z. Lu et X. C. Xie. Nonlinear Hall effects. *Nature Reviews Physics* **3**(11), 744–752 (2021). [*cf.* p. 62, 115]

[131] K. Das, S. Lahiri, R. B. Atencia, D. Culcer et A. Agarwal. Intrinsic nonlinear conductivities induced by the quantum metric. *Phys. Rev. B* **108**, L201405 (2023). [*cf.* p. 62]

[132] A. G. Grushin et K. S. Burch. Topology and geometry under the nonlinear electromagnetic spotlight. *Nature Materials* **20**(12), 1601–1614 (2021). [*cf.* p. 62]

[133] T. Morimoto, S. Kitamura et N. Nagaosa. Geometric Aspects of Nonlinear and Nonequilibrium Phenomena. *Journal of the Physical Society of Japan* **92**(7), 072001 (2023). [*cf.* p. 62]

[134] S. Tsirkin et I. Souza. On the separation of Hall and Ohmic nonlinear responses. *SciPost Physics Core* **5**, 039 (2022). [*cf.* p. 62]

[135] T. Morimoto, S. Zhong, J. Orenstein et J. E. Moore. Semiclassical theory of nonlinear magneto-optical responses with applications to topological Dirac/Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **94**(24), 245121 (2016). [*cf.* p. 62]

[136] J. E. Moore et J. Orenstein. Confinement-induced Berry phase and helicity-dependent photocurrents. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 026805 (2010). [*cf.* p. 62]

[137] F. de Juan, A. G. Grushin, T. Morimoto et J. E. Moore. Quantized circular photogalvanic effect in Weyl semimetals. *Nat. Commun.* **8**, 15995 (2017). [*cf.* p. 62]

[138] D. E. Parker, T. Morimoto, J. Orenstein et J. E. Moore. Diagrammatic approach to nonlinear optical response with application to Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **99**, 045121 (2019). [*cf.* p. 62]

[139] M. Papaj et L. Fu. Magnus Hall Effect. *Phys. Rev. Lett.* **123**(21), 216802 (2019). [*cf.* p. 62, 81, 89]

[140] S. K. Das, T. Nag et S. Nandy. Topological Magnus responses in two- and three-dimensional systems. *Phys. Rev. B* **104**(11), 115420 (2021). [*cf.* p. 62, 81, 89]

[141] D. Mandal, K. Das et A. Agarwal. Magnus Nernst and thermal Hall effect. *Phys. Rev. B* **102**(20), 205414 (2020). [*cf.* p. 62, 81]

[142] T. Desort, M. O. Goerbig et C. Morice. Quantized and nonquantized Hall response in topological Hatsugai-Kohmoto systems. *Phys. Rev. B* **112**, 195135 (2025). [*cf.* p. 63]

[143] M.-C. Chang et Q. Niu. Berry Phase, Hyperorbits, and the Hofstadter Spectrum. *Phys. Rev. Lett.* **75**(7), 1348–1351 (1995). [*cf.* p. 63]

[144] G. P. Mikitik et Yu. V. Sharlai. Manifestation of Berry's phase in metal physics. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2147 (1999). [*cf.* p. 64]

[145] H. Kroemer. Nobel lecture : Quasielectric fields and band offsets : teaching electrons new tricks. *Rev. Mod. Phys.* **73**, 783–793 (2001). [*cf.* p. 70]

[146] M. Lundstrom. *Fundamentals of Carrier Transport*. Cambridge University Press, 2e édition, (2000). [*cf.* p. 71]

[147] H. K. Gummel. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations. *IEEE Transactions on Electron Devices* **11**, 455–465 (1964). [*cf.* p. 72, 133]

[148] J. W. Jerome. *Analysis of Charge Transport: A Mathematical Study of Semiconductor Devices*. Springer Berlin Heidelberg, (1996). [*cf.* p. 72, 133]

[149] A. Jüngel. *Transport Equations for Semiconductors*, tome 773 de *Lecture Notes in Physics*. Springer Berlin Heidelberg, (2009). [*cf.* p. 72]

[150] M. F. Lapa et T. L. Hughes. Semiclassical wave packet dynamics in nonuniform electric fields. *Phys. Rev. B* **99**, 121111(R) (2019). [*cf.* p. 74, 115]

[151] D. T. Son et B. Z. Spivak. Chiral anomaly and classical negative magnetoresistance of weyl metals. *Phys. Rev. B* **88**, 104412 (2013). [*cf.* p. 75]

[152] H. Nielsen et M. Ninomiya. The adler-bell-jackiw anomaly and weyl fermions in a crystal. *Physics Letters B* **130**(6), 389–396 (1983). [*cf.* p. 75]

[153] M. Nakahara. *Geometry, Topology and Physics*. CRC Press, 2e édition, (2003). [*cf.* p. 76]

[154] H. Isobe, S.-Y. Xu et L. Fu. High-frequency rectification via chiral Bloch electrons. *Sci. Adv.* **6**(13) (2020). [*cf.* p. 79, 115]

[155] Y. Wang, Z. Zhang, Z.-G. Zhu et G. Su. Intrinsic nonlinear ohmic current. *Phys. Rev. B* **109**, 085419 (2024). [*cf.* p. 79]

[156] J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao et X. Xu. Valleytronics in 2D materials. *Nature Reviews Materials* **1**(11), 16055 (2016). [*cf.* p. 87]

[157] D. Josell, S. H. Brongersma et Z. Tőkei. Size-dependent resistivity in nanoscale interconnects. *Annual Review of Materials Research* **39**, 231–254 (2009). [*cf.* p. 92, 98]

[158] W. Steinhögl, G. Schindler, G. Steinlesberger et M. Engelhardt. Size-dependent resistivity of metallic wires in the mesoscopic range. *Phys. Rev. B* **66**, 075414 (2002). [*cf.* p. 92, 98]

[159] W. Steinhögl, G. Schindler, G. Steinlesberger, M. Traving et M. Engelhardt. Comprehensive study of the resistivity of copper wires with lateral dimensions of 100 nm and smaller. *J. Appl. Phys.* **97**, 023706 (2005). [*cf.* p. 92, 98]

[160] J. J. Plombon, E. Andideh, V. M. Dubin et J. Maiz. Influence of phonon, geometry, impurity, and grain size on Copper line resistivity. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 113124 (2006). [*cf.* p. 92, 97]

[161] J. S. Chawla, F. Gstrein, K. P. O'Brien, J. S. Clarke et D. Gall. Electron scattering at surfaces and grain boundaries in Cu thin films and wires. *Phys. Rev. B* **84**, 235423 (2011). [*cf.* p. 92, 97]

[162] T. Zhou et D. Gall. Resistivity scaling due to electron surface scattering in thin metal layers. *Phys. Rev. B* **97**, 165406 (2018). [*cf.* p. 92, 98]

[163] M. Breitkreiz et P. W. Brouwer. Large Contribution of Fermi Arcs to the Conductivity of Topological Metals. *Phys. Rev. Lett.* **123**(6), 066804 (2019). [*cf.* p. 92, 113, 116, 118]

[164] S.-W. Lien, I. Garate, U. Bajpai, C.-Y. Huang, C.-H. Hsu, Y.-H. Tu, N. A. Lanzillo, A. Bansil, T.-R. Chang, G. Liang, H. Lin et C.-T. Chen. Unconventional resistivity scaling in topological semimetal CoSi. *npj Quantum Materials* **8**(1), 3 (2023). [*cf.* p. 92, 113, 116, 118]

[165] N. A. Lanzillo, U. Bajpai, I. Garate et C.-T. Chen. Size-dependent grain-boundary scattering in topological semimetals. *Phys. Rev. Appl.* **18**, 034053 (2022). [*cf.* p. 92, 116]

[166] D. Gall. Electron mean free path in elemental metals. *J. Appl. Phys.* **119**, 085101 (2016). [*cf.* p. 98]

[167] T. Sun, B. Yao, A. P. Warren, K. Barmak, M. F. Toney, R. E. Peale et K. R. Coffey. Surface and grain-boundary scattering in nanometric Cu films. *Phys. Rev. B* **81**, 155454 (2010). [*cf.* p. 97]

[168] S. M. Rossnagel et T. S. Kuan. Alteration of Cu conductivity in the size effect regime. *Journal of Vacuum Science & Technology B* **22**, 240 (2004). [*cf.* p. 98]

[169] J. R. Sambles. The resistivity of thin metal films – Some critical remarks. *Thin Solid Films* **106**, 321–331 (1983). [*cf.* p. 98]

[170] E. Milosevic, S. Kerdsongpanya, A. Zangiabadi, K. Barmak, K. R. Coffey et D. Gall. Resistivity size effect in epitaxial Ru(0001) layers. *J. Appl. Phys.* **124**, 165105 (2018). [*cf.* p. 98]

[171] S. S. Ezzat, P. D. Mani, A. Khaniya, W. Kaden, D. Gall, K. Barmak et K. R. Coffey. Resistivity and surface scattering of (0001) single crystal ruthenium thin films. *Journal of Vacuum Science & Technology A* **37**, 031516 (2019). [*cf.* p. 98]

[172] A. J. Minnich. Thermal phonon boundary scattering in anisotropic thin films. *Appl. Phys. Lett.* **107**(18), 183106 (2015). [*cf.* p. 98]

[173] P. Bruno, V. K. Dugaev et M. Taillefumier. Topological hall effect and berry phase in magnetic nanostructures. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 096806 (2004). [*cf.* p. 115]

[174] M. Suárez-Rodríguez, B. Martín-García, W. Skowroński, F. Calavalle, S. S. Tsirkin, I. Souza, F. De Juan, A. Chuvilin, A. Fert, M. Gobbi, F. Casanova et L. E. Hueso. Odd nonlinear conductivity under spatial inversion in chiral tellurium. *Phys. Rev. Lett.* **132**, 046303 (2024). [*cf.* p. 115]

[175] A. Nipane, Y. Zhang et J. T. Teherani. Role of out-of-plane dielectric thickness in the electrostatic simulation of atomically thin lateral junctions. *J. Appl. Phys.* **123**(21), 214302 (2018). [*cf.* p. 120, 131, 133, 134]

[176] R. Jackiw et C. Rebbi. Solitons with fermion number 1/2. *Phys. Rev. D: Particles and Fields* **13**, 3398 (1976). [*cf.* p. 122]

[177] O. A. Pankratov, S. V. Pakhomov et B. A. Volkov. Supersymmetry in heterojunctions : Band-inverting contact on the basis of $Pb_{1-x}Sn_xTe$ and $Hg_{1-x}Cd_xTe$. *Solid State Communications* **61**, 93–96 (1987). [*cf.* p. 122]

[178] S. Tchoumakov, V. Jouffrey, A. Inhofer, E. Bocquillon, B. Plaçais, D. Carpentier et M. O. Goerbig. Volkov-Pankratov states in topological heterojunctions. *Phys. Rev. B* **96**, 201302(R) (2017). [*cf.* p. 122]

[179] M. O. Goerbig. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Reviews of Modern Physics* **83**, 1193 (2011). [*cf.* p. 123]

[180] A. J. Niemi et G. W. Semenoff. Fermion number fractionization in quantum field theory. *Physics Reports* **135**, 99–193 (1986). [*cf.* p. 125]

[181] A. N. Redlich. Gauge noninvariance and parity nonconservation of three-dimensional fermions. *Phys. Rev. Lett.* **52**, 18 (1984). [*cf.* p. 125]

[182] G. W. Semenoff. Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449–2452 (1984). [*cf.* p. 125]

[183] P. Armagnat, A. Lacerda-Santos, B. Rossignol, C. Groth et X. Waintal. The self-consistent quantum-electrostatic problem in strongly non-linear regime. *SciPost Physics* **7**(3), 031 (2019). [*cf.* p. 133]

[184] R. Verfürth. *A Posteriori Error Estimation Techniques for Finite Element Methods*. Oxford University Press, (2013). [*cf.* p. 134]

[185] B. Zhou, H.-Z. Lu, R.-L. Chu, S.-Q. Shen et Q. Niu. Finite size effects on helical edge states in a quantum spin-Hall system. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 246807 (2008). [*cf.* p. 139]