

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Ibn Khaldoun – TIARET



Faculté des Sciences de la Matière
Département de Physique

Mémoire

Présenté par :
Bouzar Malika

Pour obtenir le diplôme de Master

Filière : Physique
Spécialité: Nano physique

Thème :

**Physique et Applications de l'effet Hall
quantique**

Soutenu le :

Devant le jury composé de MM. :

| | | |
|-------------------------------|-------------------|------------------|
| Hassan Madani | M. C. A | Président |
| Zerrouki Miloud | M. C. A | Examineur |
| Larabi Abdelkrim | M. C. A | Examineur |
| Hadj-Zoubir Nasreddine | Professeur | Encadrant |

ANNEE UNIVERSITAIRE 2018/2019

Table des matières

| | |
|---|----|
| INTRODUCTION | 1 |
| BIBLIOGRAPHIE..... | 5 |
| CHAPITRE I : LE TRANSPORT QUANTIQUE ELECTRONIQUE | 6 |
| I.1. Transport classique et transport quantique | 7 |
| I.2. Configuration du système étudié | 9 |
| I.3. Le formalisme de Landauer-Büttiker | 10 |
| I.4. Matrice de diffusion | 17 |
| BIBLIOGRAPHIE..... | 21 |
| CHAPITRE II : L'EFFET HALL CLASSIQUE..... | 23 |
| II.1. Introduction..... | 24 |
| II.2. Théorie simple de l'effet Hall classique..... | 24 |
| BIBLIOGRAPHIE..... | 28 |
| CHAPITRE III : LES EFFETS HALL QUANTIQUES | 30 |
| III.1. Introduction..... | 31 |
| III.2. Bases physiques | 32 |
| III.2.1. Le mouvement cyclotron classique d'une particule chargée | 32 |
| III.2.1.1. Mouvement circulaire uniforme | 32 |
| III.2.1.2. Le courant de Hall..... | 34 |
| III.3. La quantification de Landau | 35 |
| III.3.1. Origine du phénomène..... | 35 |
| III.3.2. Les niveaux de Landau | 35 |
| III.3.2.1. Champ magnétique appliqué nul | 35 |
| III.3.2.2. Application d'un champ magnétique | 37 |
| III.4. L'Effet Hall Quantique Entier (EHQE) | 41 |
| III.4.1. Présentation de l'EHQE. Mise en évidence | 41 |
| III.4.2. Mouvement quantique de l'électron | 44 |
| III.4.2.1. Hamiltonien quantique et niveaux de Landau..... | 44 |
| III.4.2.2. Jauge de Landau..... | 47 |
| III.4.2.3. Dégénérescence d'un niveau de Landau | 48 |
| III.4.2. Facteur de remplissage..... | 49 |
| III.4.3. Les effets du désordre | 51 |
| III.4.4. Les états de bord | 55 |
| III.4.5. Expressions de la résistance et états de bord | 58 |

| | |
|--|-----|
| III.4.5.1. Conducteur 2D à deux terminaux | 58 |
| III.4.5.2. Conducteur 2D à six terminaux | 61 |
| III.4.6. Origine des plateaux | 63 |
| III.5. L'Effet Hall Quantique Fractionnaire (EHQF)..... | 65 |
| III.5.1. Présentation de l'EHQF | 65 |
| III.5.2. Théorie des fermions composites..... | 66 |
| BIBLIOGRAPHIE..... | 70 |
| CHAPITRE IV : L'EFFET HALL QUANTIQUE DANS LE GRAPHÈNE..... | 73 |
| IV.1. Introduction | 74 |
| IV.2. Propriétés électroniques du graphène | 75 |
| IV.2.1. Le matériau graphène | 75 |
| IV.2.1.1. Présentation et structure cristalline..... | 75 |
| IV.2.1.2. Comment fabrique-t-on le graphène ? | 80 |
| IV.2.2. Structure de bandes du graphène | 82 |
| IV.2.2.1. Rappels sur la théorie des bandes d'énergie | 82 |
| IV.2.2.2. Méthode des liaisons fortes | 83 |
| IV.2.2.3. Relation de dispersion | 84 |
| IV.2.3. Des électrons « relativistes » ou quand les électrons perdent leur masse | 87 |
| IV.2.3.1. Hamiltonien de Dirac..... | 87 |
| IV.3. Les propriétés de transport | 90 |
| IV.3.1. La conduction électrique | 90 |
| IV.3.2. La conduction thermique | 91 |
| IV.4. Applications..... | 93 |
| IV.5. Physique de l'effet Hall quantique dans le graphène | 93 |
| IV.5.1. Introduction | 93 |
| IV.5.2. Niveaux de Landau relativistes..... | 94 |
| IV.6. Spectroscopie des niveaux de Landau | 95 |
| IV.7. Effet Hall quantique relativiste..... | 97 |
| IV.8. Le graphène bicouche | 100 |
| IV.8. 1. Structure de bandes..... | 100 |
| IV.8. 2. Niveaux de Landau (NL)..... | 102 |
| BIBLIOGRAPHIE..... | 105 |
| CHAPITRE V : ESSAIS DE SIMULATION | 109 |
| V.1. Introduction..... | 110 |
| V.2. La plateforme Kwant | 110 |
| V.2.1. Modèles et concepts de base du transport quantique | 111 |

| | |
|--|-----|
| V.2.2. Présentation de quelques exemples utilisant Kwant | 115 |
| V.3. Essais de simulations | 121 |
| V.3. 1. Conductance d'un fil quantique (quantum wire) bidimensionnel | 121 |
| V.3.2. Effet Hall quantique entier. Cas d'un gaz électronique bidimensionnel | 127 |
| V.3.3. Effet Hall quantique entier. Cas du graphène | 134 |
| BIBLIOGRAPHIE..... | 141 |
| CONCLUSION..... | 143 |
| ANNEXE : LE MODELE DE DRUDE | 146 |

INTRODUCTION

L'effet Hall quantique constitue certainement une des découvertes les plus remarquables de la fin du **XX^{ème}** siècle en Physique. Sa caractéristique la plus spectaculaire est la mesure du rapport de constantes universelles h/e^2 avec une précision de 10^{-9} , ce qui a des conséquences immédiates en métrologie, en particulier dans la définition de l'étalon de résistance [1].

En fait, on doit plutôt parler de deux effets Hall quantiques et de l'effet Hall classique.

Les effets Hall quantiques (le premier dit entier, et le second dit fractionnaire) apparaissent dans un gaz d'électrons bidimensionnel, à basse température et soumis à un champ magnétique relativement élevé.

Pour rappel, l'effet Hall classique est le fait qu'un métal (ou un semi-conducteur) soumis à un champ magnétique perpendiculaire modéré acquiert, à la température ambiante, une résistance transverse (dite résistance de Hall) proportionnelle au champ magnétique. Cet effet permet principalement la détermination de la nature des porteurs de charge et le calcul de leur concentration.

Contrairement à l'effet Hall classique, les effets Hall quantiques ne se produisent donc que lorsque le gaz d'électrons est confiné à deux dimensions. Alors, à basse température et à fort champ magnétique, la résistance de Hall présente des plateaux (ou paliers) sur lesquels elle est quantifiée tandis que la résistance longitudinale présente des sortes d'oscillations (c'est-à-dire qu'elle s'annule, augmente rapidement, et ainsi de suite). Sur ces plateaux, le rapport entre la conductance transverse et le quantum de conductance peut être un entier, auquel cas on parle d'effet Hall quantique entier (EHQE) ou une fraction, il s'agit alors de l'effet Hall quantique fractionnaire (EHQF). Ces deux phénomènes sont d'origine purement quantique. L'EHQE constitue le premier exemple de phases topologiques que l'on peut comprendre grâce à la physique à un corps tandis que l'EHQF est le seul exemple réalisé expérimentalement de phases topologiques en interaction forte [2].

L'effet Hall quantique a été utilisé en métrologie pour la définition d'une nouvelle unité de mesure de la résistance électrique, à la place de l'ohm. En effet, l'effet Hall quantique permet d'obtenir une résistance électrique (transverse) qui ne dépend que des constantes fondamentales de la physique h (constante de Planck) et e (charge de l'électron) ; il peut donc être employé comme étalon de représentation des résistances électriques. C'est ce qui fut accompli plus tard, car l'utilisation de l'effet Hall quantique était recommandée par le Comité International des Poids et Mesures (CIPM) pour la métrologie des résistances électriques [3].

En 2005, l'effet Hall quantique a pu être observé [4] dans une couche d'atomes de carbone d'un seul atome d'épaisseur : le graphène. Par la suite, l'effet Hall quantique a été mesuré dans une bicouche de graphène. L'effet Hall quantique dans une monocouche et dans une bicouche représentent un double intérêt pour la métrologie. En premier lieu, les métrologues peuvent envisager la réalisation de tests d'universalité de l'effet Hall quantique, c'est à dire la comparaison directe de deux effets Hall quantiques dans deux matériaux différents. Un électron dans une monocouche de graphène obéit à une équation de Dirac à l'inverse d'un électron dans un semi conducteur conventionnel (MOSFET silicium ou hétéro-structure GaAs) qui obéit à une équation de Schrödinger. La réalisation d'une comparaison directe entre l'effet Hall quantique de fermions de Dirac et l'effet Hall quantique de fermions de Schrödinger constituerait un important test d'universalité. Ces tests d'universalité sont nécessaires non seulement pour améliorer la compréhension de l'effet Hall quantique mais aussi dans le processus actuel de révision du Système International d'unités. Le second intérêt pour la métrologie est la réalisation d'un étalon quantique de résistance opérant à plus haute température et/ou plus faible champ magnétique par rapport à l'étalon actuel. En effet, l'effet Hall quantique dans une monocouche de graphène est plus robuste que dans un semi conducteur conventionnel; il a par exemple pu être observé à température ambiante [5].

L'étude que nous allons présenter ci-après se compose, en plus de l'introduction, de quatre chapitres.

Le premier chapitre traite du transport quantique électronique dans une nanostructure et permet de montrer que sa conductance est quantifiée contrairement au cas classique basé sur la théorie (ou modèle) de conduction électrique de Drude. Nous définirons à cette occasion la matrice de diffusion qui intervient dans les simulations développées dans le chapitre V.

Le deuxième chapitre fait un rappel relativement succinct de l'effet Hall classique qui apparaît dans une structure conductrice 3D. Le but étant de montrer quel était l'effet de l'application d'un champ magnétique perpendiculaire au courant qui circule (grâce à un champ électrique longitudinal) dans l'échantillon. On définira dans cette étude la résistance de Hall et sa dépendance vis-à-vis du champ magnétique, ainsi que le coefficient de Hall.

Le troisième chapitre traite la théorie des deux effets Hall : l'effet Hall entier (EHQE) puis l'effet Hall fractionnaire (EHQF). Dans ce chapitre, on exposera l'influence du champ magnétique sur la trajectoire des porteurs en définissant le mouvement cyclotron, classique, puis celui relatif à des structures quantiques comme des gaz d'électrons bidimensionnels. Ceci nous amènera à intro-

duire le concept de quantification de l'énergie à travers l'apparition des « niveaux de Landau », puis la quantification de la résistance de Hall et le rôle du désordre dans l'explication de l'EHQE. Dans une deuxième partie, on verra que la physique de l'EHQF diffère de celle de l'EHQE par le fait que dans l'EHQF, on doit tenir compte des interactions entre électrons (contrairement à l'EHQE). On entamera alors une discussion autour d'une théorie complexe élaborée pour la compréhension de cette physique et qui est la théorie des fermions composites.

Le quatrième chapitre sera consacré à l'étude de l'effet Hall quantique dans un matériau devenu depuis un certain nombre d'années, le matériau 2D de référence et qui est le graphène. Pour ce faire, nous serons amenés à discuter des propriétés structurales et électroniques de ce matériau et son comportement en présence d'un champ magnétique modéré et à des températures plus élevées.

Le cinquième et dernier chapitre sera consacré à des essais de simulation. Nous commencerons par traiter le cas d'un fil quantique pour montrer que sa conductance est bien quantifiée, puis nous présenterons quelques exemples utilisant Kwant. Enfin, nous nous intéresserons à la simulation de l'EHQE dans un gaz électronique 2D et dans le graphène 2D.

Ce mémoire sera clôturé par une conclusion générale dans laquelle nous résumerons la théorie étudiée et les résultats auxquels nous sommes parvenus, ainsi que les difficultés rencontrés dans l'étude du transport dans des structures quantiques.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] F. Lafont, R. Ribeiro-Palau, D. Kazazis, A. Michon, O. Couturaud, C. Consejo, T. Chassagne, M. Zielinski, M. Portail, B. Jouault, F. Schopfer et W. Poirier, **Nat. Commun.** **6**, 6806(2015)
- [2] D. Yoshioka, « **The Quantum Hall Effect** », Ed. Springer (2001)
- [3] T. J. Quinn, **Metrologia** **26**, 69(1989)
- [4] K. S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morozov, V. I. Falko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, et A. K. Geim, **Nat. Phys.** **2**, 177(2006)
- [5] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim, and A. K. Geim, **Science** **315**, 1379(2007)

CHAPITRE I : LE TRANSPORT QUANTIQUE ELECTRONIQUE

I.1. Transport classique et transport quantique

Comme nous le savons, la conduction électrique locale d'un matériau donné est décrite par la conductivité σ ou son inverse ρ , la résistivité. Un matériau dans lequel les porteurs de charge (électrons ou trous) peuvent se déplacer librement en subissant peu de collisions, est caractérisé par une conductivité σ assez forte. Pour étudier le transport électronique, on se placera dans l'hypothèse de la réponse linéaire en courant à une excitation électrique (différence de potentiel appliquée V), et dans le cas d'un courant continu (transport à fréquence quasi-nulle).

Les propriétés de conduction dans un matériau macroscopique sont décrites par le modèle (ou théorie) de Drude (détaillé en annexe). Dans ce modèle, les électrons (ou les trous) sont considérés comme des particules ponctuelles et soumises à une force électrique extérieure $-e\vec{E}$ (où \vec{E} est le champ électrique créé par la différence de potentiel appliquée V). Dans le solide, les électrons sont dotés d'une masse dite effective m^* différente de la masse de l'électron m_0 dans le vide.

Dans ce modèle, les électrons vont subir -dans le conducteur- des collisions (ou chocs); entre deux chocs leur trajectoire est supposée uniforme et rectiligne. Par ailleurs, ces chocs sont instantanés et assurent une redistribution aléatoire et isotrope de la vitesse des électrons.

L'expression de la conductivité de Drude est de la forme :

$$\sigma = ne\mu_e = \frac{ne^2\tau}{m^*} \quad (\text{I-1})$$

Où n est la concentration des électrons, μ_e leur mobilité et τ le temps de collision (ou temps de relaxation); c'est la durée moyenne entre deux chocs successifs.

A titre d'exemple, $\mu_e \approx 10^7 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ à basse température dans des hétérostructures 2DEG GaAS/AlGaAs.

Sous l'action d'un champ électrique extérieur, les électrons sont mis en mouvement ce qui provoque l'installation d'un gradient de concentration $\vec{\nabla}n$. En réponse à ce gradient, il apparaît un courant de diffusion \vec{j}_D qui s'ajoute au courant de conduction $\vec{j}_C = \sigma\vec{E}$:

$$\vec{j}_D = eD\vec{\nabla}n \quad (\text{I-2})$$

Où D est le coefficient de diffusion.

On sait que les électrons sont des fermions qui obéissent à la statistique de Fermi-Dirac dont la fonction de distribution est :

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu)/k_B T] + 1} \quad (\text{I-3})$$

Où E est l'énergie des électrons, μ leur potentiel chimique; k_B est la constante de Boltzmann et T la température.

Le principe de Pauli fait que seuls les électrons ayant une énergie égale à l'énergie du niveau de Fermi E_F (à $T = 0K$) et dans l'intervalle $\pm k_B T$ autour de E_F à $T \neq 0K$, vont participer à la conduction.

Lorsque le système est à l'équilibre thermodynamique, le potentiel chimique est donné par $\mu = E_F + eV$ et il est constant (V étant la tension appliquée) : $\vec{\nabla}\mu = 0$. On peut alors aboutir à l'expression suivante du champ électrique :

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{e} \frac{1}{(\partial n / \partial E_F)} \vec{\nabla} n \quad (\text{I-4})$$

Où $\frac{\partial n}{\partial E_F} = g(E_F)$ est la densité d'états (ou nombre d'états électroniques par unité d'énergie) évaluée à l'énergie de Fermi.

A l'équilibre thermodynamique, le courant électrique total (conduction + diffusion) est également nul : $\vec{j}_t = \vec{j}_C + \vec{j}_D = \vec{0}$:

$$\vec{j}_t = \vec{0} \Rightarrow \sigma \vec{\mathcal{E}} + eD \vec{\nabla} n = \vec{0} \quad (\text{I-5})$$

En combinant (I-4) et (I-5), on aboutit au résultat suivant :

$$\sigma = e^2 D g(E_F) \quad (\text{I-6})$$

La conductivité relie la densité locale de courant au champ électrique à travers la loi d'Ohm locale $\vec{j}_C = \sigma \vec{\mathcal{E}}$. C'est donc une grandeur locale qui permet de faire une description microscopique. Des mesures de transport électronique ne permettent pas d'accéder directement à σ mais permettent de mesurer la conductance G , à travers la loi d'Ohm intégrée : $I = GV$. Si L et S sont respectivement la longueur et la section du conducteur bidimensionnel, on a :

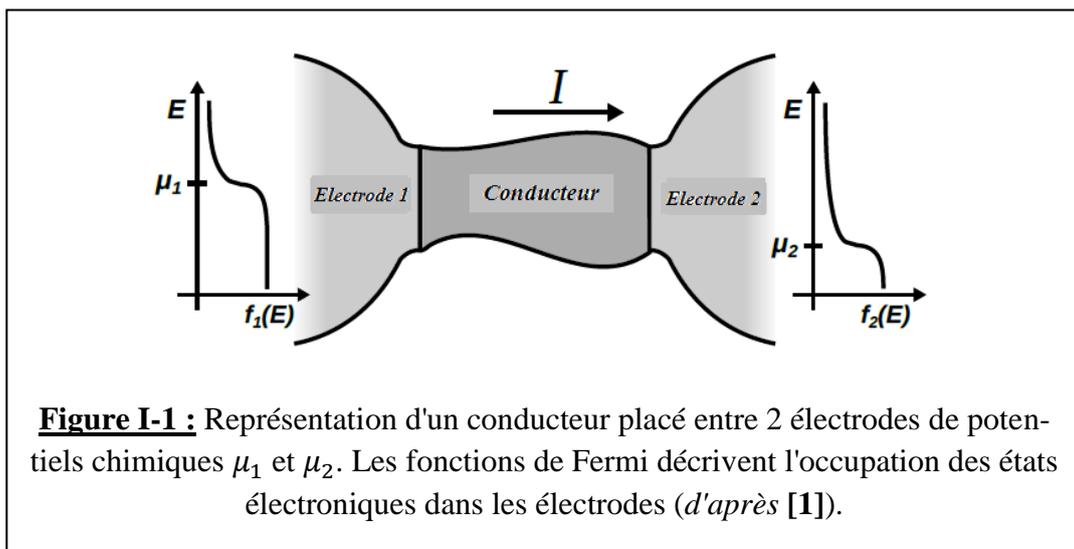
$$G = \frac{S}{L} \sigma = \frac{S n e^2 \tau}{L m^*} \quad (\text{I-7})$$

La loi (I-7) qui décrit le comportement ohmique d'un conducteur, soulève une question : jusqu'à quel point peut-on diminuer les dimensions du conducteur (L et/ou S) pour que cette loi reste valide ? Nous essayerons de répondre à cette question dans la suite de l'étude.

I.2. Configuration du système étudié

En physique de la matière condensée, on a souvent à traiter des phénomènes de diffusion de particules dans un milieu (souvent cristallin). Cette diffusion peut être due à la présence d'impuretés, aux phonons (à température relativement élevée) et aux collisions électron-électron. Dans le modèle utilisé, on considère la diffusion de particules dans un système (milieu) de dimensions finies couplé à des "électrodes" ou "réservoirs de porteurs de charge" (électrons par exemple) infinis par l'intermédiaire de fils de connexion ou connexions ou fils d'amenée (**leads**, en anglais). La solution du problème fournit directement la conductance (inverse de la résistance) et diverses autres propriétés de transport, mais elle peut également être utilisée comme élément de base pour le calcul de phénomènes physiques plus complexes.

Le système physique considéré (système 2D) est représenté sur la figure I.1. Une des dimensions est la direction de propagation, suivant laquelle sont connectées deux électrodes notées (1) et (2). Le milieu objet de l'étude (le conducteur de dimensions nanométriques) est placé entre ces deux électrodes caractérisées par leurs potentiels chimiques respectifs μ_1 et μ_2 . Les électrons de l'électrode i obéissent à la statistique de Fermi-Dirac; leur fonction de distribution est donc : $f_i(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu_i)/k_B T]+1}$. Les électrodes sont reliées au conducteur par un fil de connexion à une extrémité, et à un réservoir d'électrons par un autre fil de connexion. Ces réservoirs d'électrons sont supposés être de grande capacité et les électrons qui en sortent, entrent dans le conducteur sans subir de réflexion.



Le conducteur constitue un milieu de dimensions finies et les électrodes sont des milieux semi-infinis. On peut avoir des systèmes comportant plus de deux électrodes.

I.3. Le formalisme de Landauer-Büttiker

Le formalisme de Landauer-Büttiker [2, 3], consiste à décrire le courant électrique traversant le conducteur mésoscopique en termes de probabilité de transmission d'un électron à travers le conducteur. Ce formalisme peut être généralisé à des conducteurs tridimensionnels.

A l'échelle mésoscopique¹, les dimensions des fils conducteurs sont telles que ces derniers se comportent comme des guides d'ondes électroniques.

Qu'est ce qu'un guide d'onde ?

De manière générale, un **guide d'onde** classique est un système qui sert à guider les ondes électromagnétiques ou les ondes acoustiques. Le guide d'onde est notamment utilisé en physique, en optique et en télécommunications. Pour guider les ondes, le système est généralement constitué de deux matériaux différents. Il peut aussi être constitué d'un seul matériau avec un gradient d'indice.

Le matériau dépend du spectre électromagnétique des ondes que l'on veut guider : **i)** dans la partie "visible" (optique), on peut utiliser une fibre optique ; **ii)** dans les micro-ondes, c'est une coque métallique creuse. Selon la taille du guide, celui ci peut être monomode, c'est à dire qu'il ne supporte qu'un mode ou alors multi-mode, c'est à dire qu'il va supporter plusieurs modes. Un mode correspond à une configuration spatiale du champ électromagnétique. Selon la répartition du champ, chaque mode voit un indice différent des matériaux constituant le guide d'onde dépendant de chaque mode. L'indice vu par chaque mode définit l'indice effectif.

Le transport à travers le système de la figure I.1 peut être décrit par une fonction d'onde. Les fils de connexion reliant les réservoirs (d'électrons) au conducteur sont assimilés à des guides d'onde quantiques pour les électrons.

Quelques définitions importantes.

1. Probabilité de transmission ou facteur de transmission

La conductance d'un conducteur donné est d'autant plus grande que les électrons qui y pénètrent sont nombreux à en sortir. Cette facilité de passage des électrons à travers le conducteur est liée à son facteur de transmission qui est la probabilité T qu'a un électron incident au niveau de l'électrode d'entrée (notée dans notre cas (1)), de ressortir par l'électrode (2). La quantité ($R = 1 - T$) est

¹ La physique **mésoscopique** est un domaine de la physique de la matière condensée qui étudie les systèmes ayant des dimensions intermédiaires entre celles de la physique quantique et de la physique classique. L'échelle des distances en cause s'étend des dimensions de l'atome jusqu'au micromètre (Wikipédia).

la probabilité de réflexion ou facteur de réflexion. Le conducteur peut être considéré comme une barrière de potentiel.

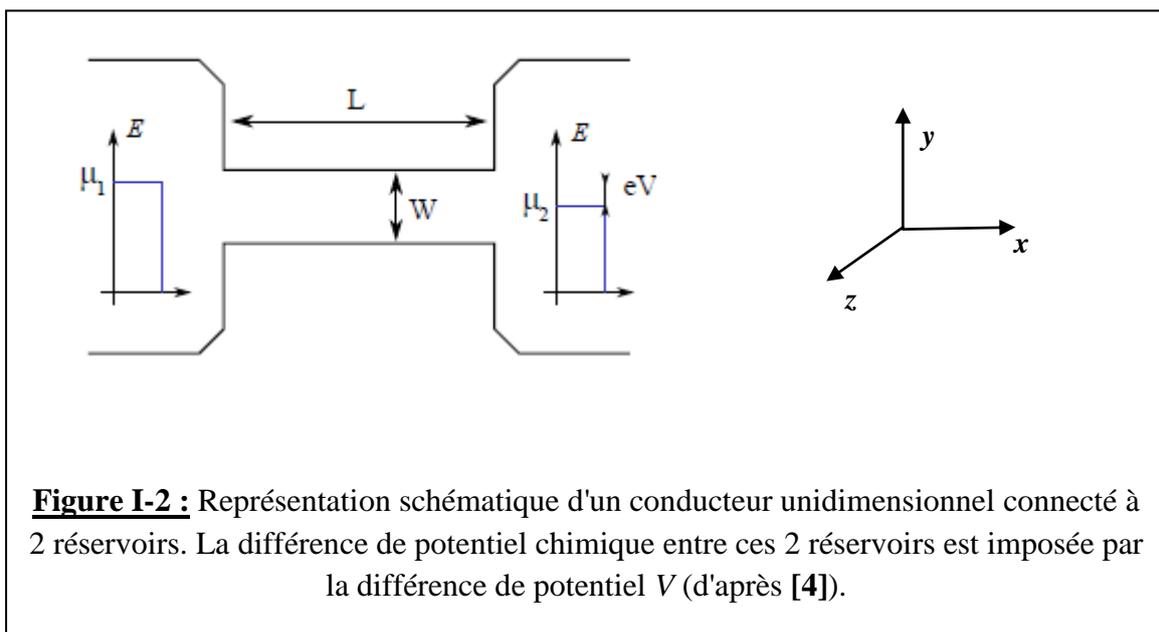
2. Conducteur balistique

Un conducteur balistique est un conducteur dans lequel les électrons qui y entrent ne sont pas diffusés par les centres diffuseurs (impuretés principalement). Ce conducteur est donc caractérisé par une probabilité de transmission de $T = 1$ et par un libre parcours moyen l grand devant la longueur du conducteur : $l \gg L$.

3. Propriétés des contacts

On va supposer que tous les électrons circulant entre le conducteur et les contacts (leads) ne sont pas réfléchis aux interfaces, c'est-à-dire que $R \approx 0$. Si en plus, aucune diffusion n'a lieu à l'intérieur du conducteur, tous les électrons de vecteurs d'onde positifs ($+k_x$) proviennent du contact gauche (1), tandis que le contact droit (2) est à la source des électrons de vecteurs d'onde négatifs ($-k_x$). Les potentiels chimiques μ_1 et μ_2 agissent donc comme des quasi-niveaux de Fermi pour les électrons de vecteurs d'onde respectifs ($+k_x$) et ($-k_x$).

Considérons le cas d'un conducteur **balistique** relié à deux réservoirs d'électrons (figure I.2); on appelle un tel conducteur, conducteur à deux terminaux, de longueur L et de largeur W constante. Ces réservoirs ont pour rôle d'injecter des électrons et d'absorber les électrons qu'ils reçoivent. Pour permettre le passage des électrons dans le conducteur, on applique une différence de potentiel chimique (c'est-à-dire qu'on décale l'un des deux réservoirs d'une énergie $eV = \mu_1 - \mu_2$ par rapport à l'autre).



Nous allons montrer que la conductance G de notre conducteur est quantifiée. On supposera que la longueur L est assez grande devant W (pour assurer l'invariance de la symétrie de translation suivant la direction de propagation x). Pour déterminer G , on doit d'abord trouver l'expression du courant à travers le conducteur en réponse à l'application d'une tension entre les deux électrodes.

Les fonctions d'ondes électroniques correspondant aux états \vec{k} ont pour expression dans ce conducteur :

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = \chi_n(\mathbf{y}, z) \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(i\mathbf{k}_x x) \quad (\text{I-8})$$

La dimension L est aussi supposée être très grande devant la longueur d'onde électronique.

$\chi_n(y, z)$ représentent des états quantifiés appelés modes transverses du fil quantique. Ce sont des états normaux (perpendiculaires) à la direction de propagation x . La relation de dispersion $E(\vec{k})$ le long du conducteur est de forme parabolique :

$$E(\mathbf{k}_x) = E_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \quad (\text{I-9})$$

E_n est la contribution à l'énergie qui provient de la quantification suivant la direction transverse. Le terme $(\hbar^2 k_x^2 / 2m^*)$ représente l'énergie cinétique de l'électron le long de la direction de propagation x .

Les états $\chi_n(y, z)$ sont solutions de l'équation de Schrödinger "transverse" :

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\mathbf{y}, z) \right\} \chi_n(\mathbf{y}, z) = E_n \chi_n(\mathbf{y}, z) \quad (\text{I-10})$$

$U(y, z)$ est le potentiel "transverse" de confinement (figure I-3).

Le nombre quantique (entier) n définit les modes du fil quantique (comme dans un guide d'onde).

La relation de dispersion $E(k_x)$ est représentée schématiquement sur la figure I-4. Seuls les électrons d'énergie comprise entre μ_1 et μ_2 participent au transport.

Quelle est l'expression du courant électrique qui parcourt le fil quantique lorsqu'on applique une tension électrique V entre les deux électrodes de la figure I-2 ?

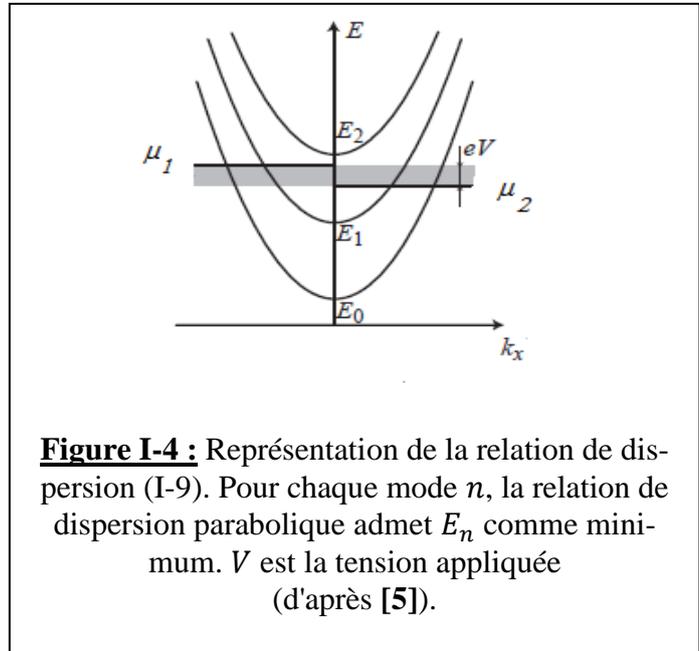
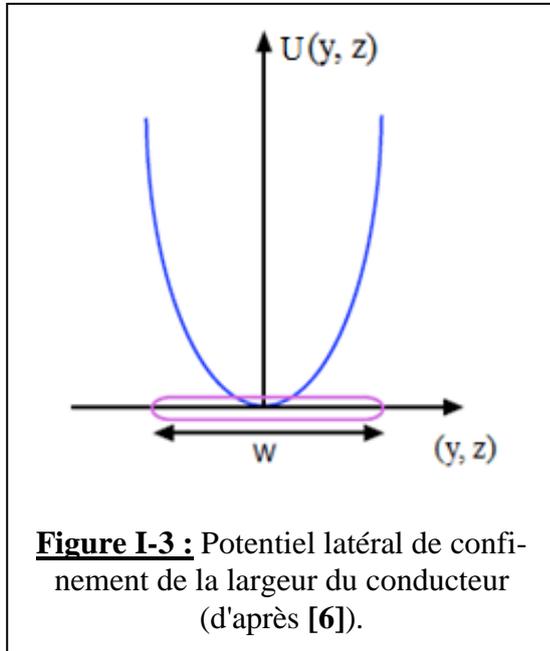
On montre [4] que ce courant a pour expression, en tenant compte de la dégénérescence de spin :

$$I_{tot} = 2 \frac{e^2}{h} \int_{E_n}^{\infty} [f_1(E) - f_2(E)] dE \quad (\text{I-11})$$

Où $f_i(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu_i)/k_B T] + 1}$ est la fonction de distribution de Fermi-Dirac et $i = 1, 2$.

On va considérer l'hypothèse où la tension appliquée V est faible, c'est-à-dire $\mu_1 - \mu_2 = eV \ll k_B T$. Dans ce cas, on montre que le courant total devient :

$$I_{tot} = 2 \frac{e^2}{h} V \sum_n f_1(E_n) \quad (\text{I-12})$$



La conductance G est définie par le rapport du courant I_{tot} à la tension appliquée V :

$$G = \frac{I_{tot}}{V} = 2 \frac{e^2}{h} \sum_n f_1(E_n) = 2 \frac{e^2}{h} N \quad (\text{I-13})$$

On constate donc que la conductance G est **quantifiée**; elle ne peut prendre que des valeurs discrètes et présente des **plateaux**; son expression est différente de la conductance classique donnée par la relation I-7. La somme $\sum_n f_1(E_n)$ est égale à N (entier), le nombre de modes occupés (c'est-à-dire le nombre de modes pour lesquels $E_n < E_F^2$).

Les potentiels chimiques sont liés à l'énergie de Fermi E_F à l'équilibre suivant les relations :

$$\begin{cases} \mu_1 = E_F + eV/2 \\ \mu_2 = E_F - eV/2 \end{cases} \quad (\text{I-14})$$

Dans le cas où le conducteur balistique est un fil quantique³, $N = 1$, et $G = 2 \frac{e^2}{h}$

² Un mode n tel que $E_n < E_F$ est occupé $\rightarrow f_1(E_n) = 1$

³ Un fil quantique est un conducteur où les porteurs de charge sont confinés suivant 2 directions de l'espace (confinement 2D).

La quantité $G_0 = e^2/h$ est appelée quantum de conductance. Le calcul donne : $G_0 = 3,8740459 \times 10^{-5} \Omega^{-1}$. On verra au chapitre III que l'inverse $1/G_0$ définit une nouvelle constante (étalon de résistance) appelée constante de Klitzing.

Cas général d'un conducteur non balistique.

C'est le cas où $T < 1$. On reprend le cas illustré par la figure I-2 mais l'on suppose que le dispositif n'est pas balistique en tout point.

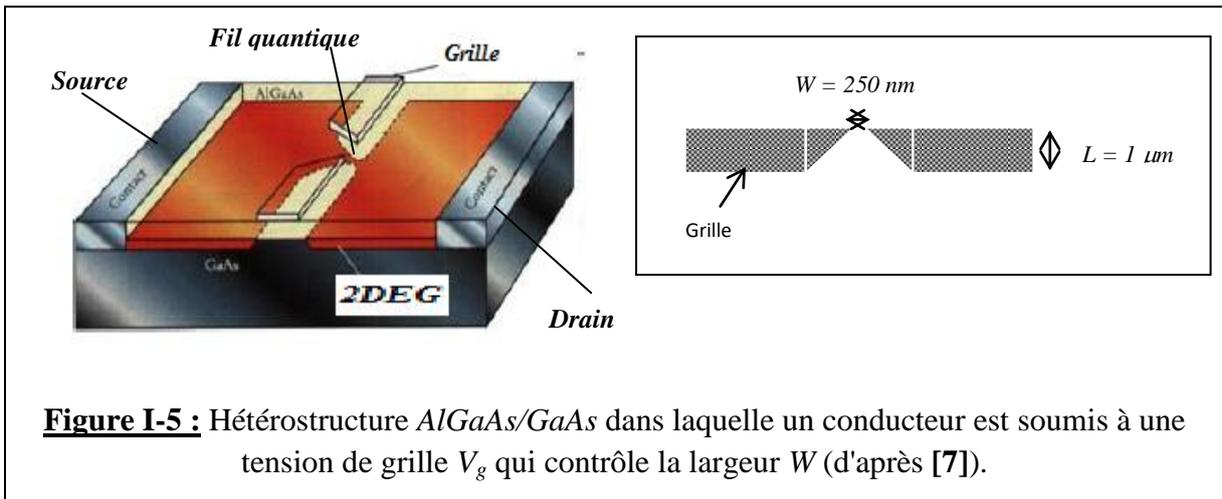
En se rappelant que la conductance est définie par (I-13) : $G = \frac{I_{tot}}{V} = \frac{I_{tot}}{(\mu_1 - \mu_2)/e}$, on peut alors écrire la formule de Landauer sur la conductance :

$$G = 2 \frac{e^2}{h} N.T \tag{I-15}$$

B.J. van Wees et al. [7] ont montré que le produit $N.T$ dans l'expression (I-14) de G , dépend de la largeur W du conducteur (figure I-1).

La figure I-5 donne une représentation schématique du dispositif expérimental utilisé. Il est constitué de deux électrodes appelées Source et Drain entre lesquelles est appliquée une tension V_{SD} que nous avons notée V plus haut. Une troisième électrode, appelée Grille est rapprochée du conducteur (fil quantique) mais ne rentre pas en contact avec ce dernier.

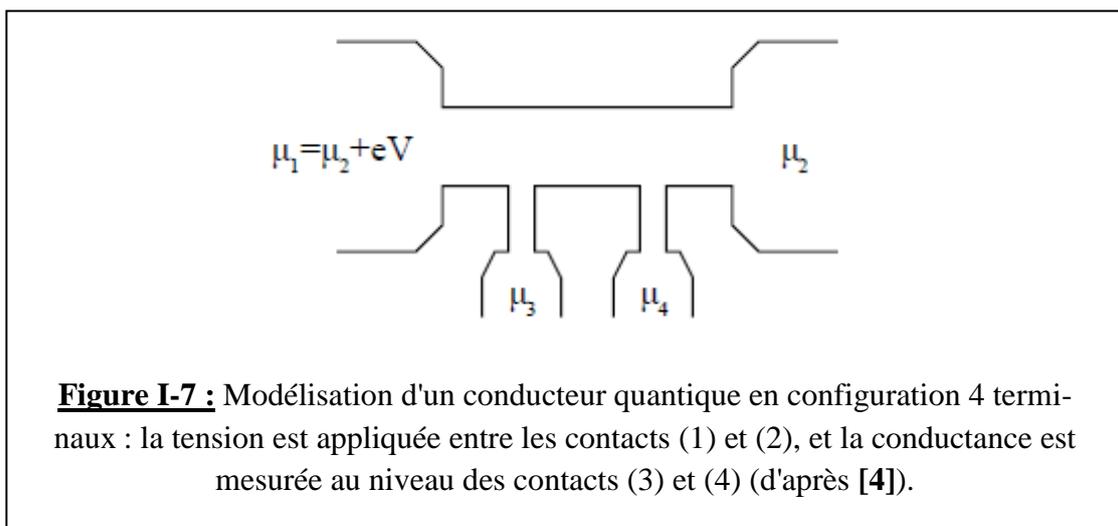
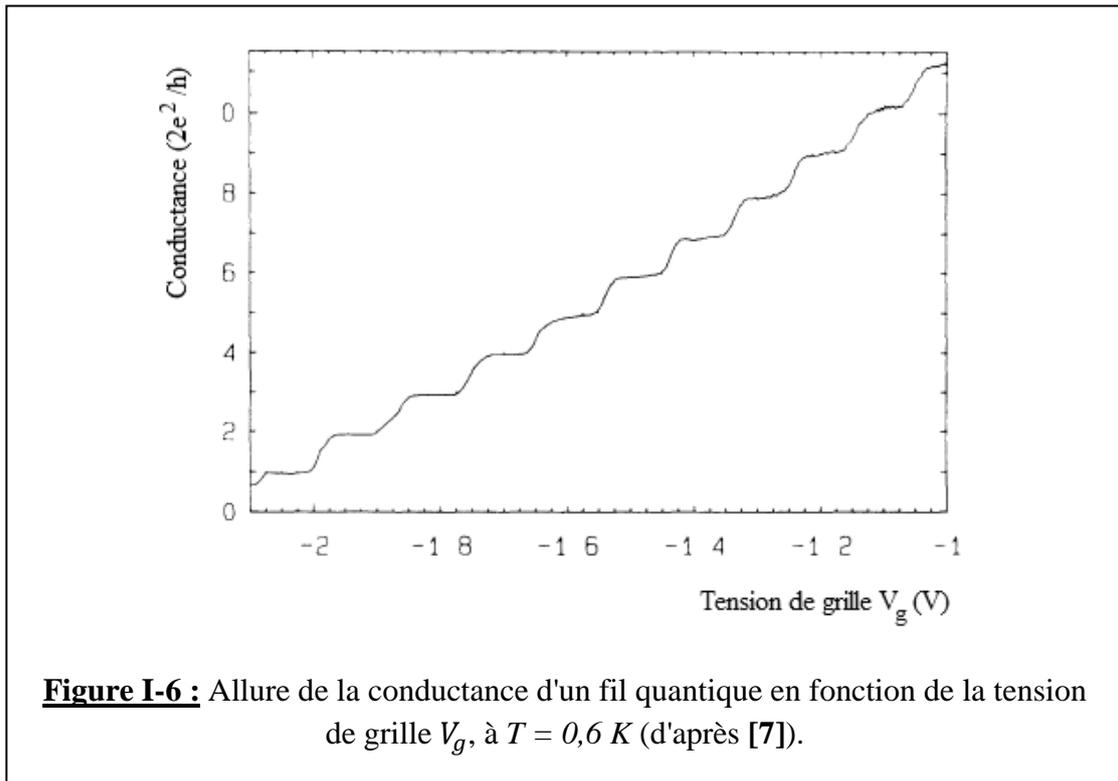
La tension de grille appliquée au conducteur fait varier sa largeur W (initialement égale à 250 nm); la relation entre V_g et W est linéaire.



La figure I-6 montre la variation de la conductance G (en unités $2e^2/h$) en fonction de la tension de grille V_g .

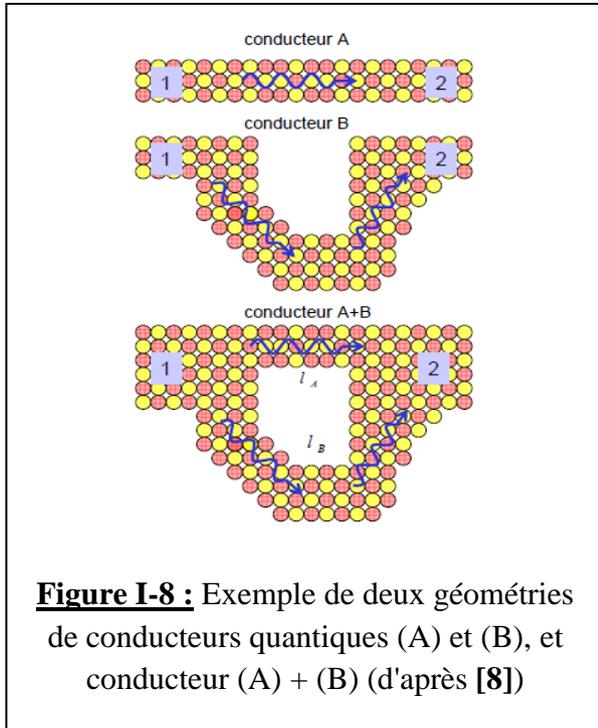
Nous venons d'établir l'expression de la conductance pour, un guide d'onde monomode, en prenant la différence de potentiel chimique entre les réservoirs. Il s'agit de la conductance du système (conducteur + réservoirs) dans une configuration "2 terminaux".

Dans une configuration "4 terminaux" (figure I-7), on ne mesure pas la chute de potentiel entre les réservoirs (1) et (2) (dits fils de courant) mais au niveau de deux fils supplémentaires (3) et (4) (dits fils de tension).



Violation de la loi d'Ohm : non additivité des conductances

La conduction quantique permet aussi d'observer des comportements non conforme à la plus fondamentale des lois de l'électrocinétique : la loi d'Ohm. Ici nous allons voir qu'on n'a plus l'additivité des conductances. Prenons deux conducteurs A et B schématisés sur la figure I-8.



Dans le cas quantique, on n'a pas addition des conductances, c'est-à-dire que :

$$G_{A+B} \neq G_A + G_B \quad (\text{I-16})$$

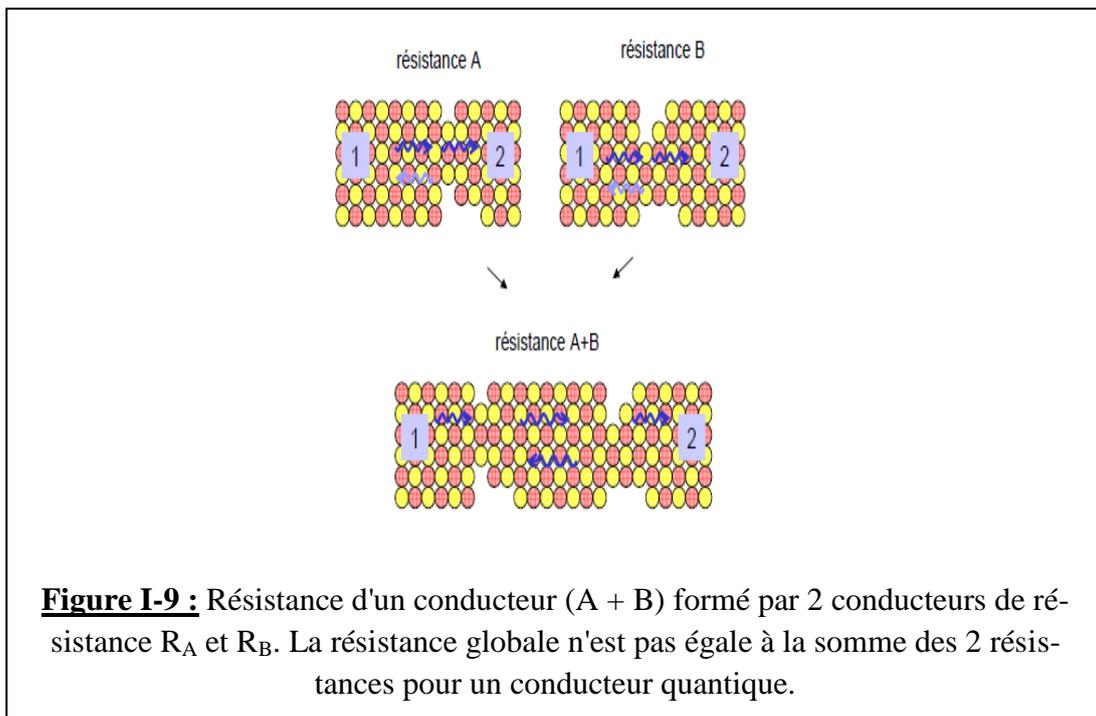
En effet, on montre que :

$$T_{A+B} = T_A + T_B + 2\sqrt{T_A T_B} \cos k_F (l_A - l_B)$$

Où T_A est le facteur de transmission relatif au conducteur A, et T_B celui relatif au conducteur B.

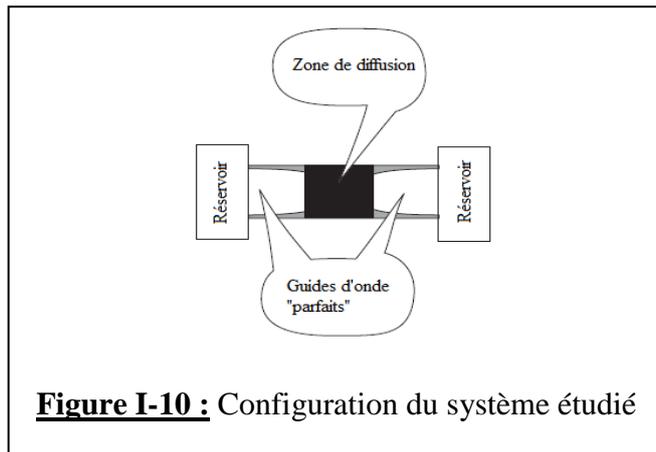
$k_F = \sqrt{2m^*E_F}/\hbar$ est le vecteur d'onde de Fermi, et l_A et l_B sont les libres parcours moyens dans A et B.

On assiste également à une non-additivité des résistances : $R_{A+B} \neq R_A + R_B$ (figure I-9).



I.4. Matrice de diffusion

Les propriétés de transport des nanostructures peuvent être exprimées à travers un ensemble restreint de paramètres. Pour des tensions appliquées suffisamment faibles et à basse température, les électrons traversent la structure sans perte d'énergie, c'est-à-dire qu'ils subissent une diffusion élastique, caractérisée par une matrice de diffusion qui contient toutes les informations sur les différentes fonctions d'onde existantes.



Nous reprenons la configuration du système décrite dans la section I-2. Ce système consiste en deux réservoirs (1) et (2) reliés au conducteur (ou nanostructure) par l'intermédiaire de connexions assimilés à des guides d'onde (figure I-10).

Dans cette configuration, la diffusion des porteurs de charge a lieu dans une région de dimensions limitées loin des réservoirs. La forme des fonctions d'onde est très compliquée dans cette région, mais ces fonctions d'onde sont une combinaison d'ondes planes dans les guides d'onde.

Nous allons, pour définir le concept de matrice de diffusion, traiter un cas assez simple. Considérons pour cela la barrière de potentiel symétrique⁴ de la figure I-11, définie par :

$$U(z) = \begin{cases} \alpha & \text{pour } z = 0 \\ 0 & \text{pour } z \neq 0 \end{cases} \quad (\text{I-17})$$

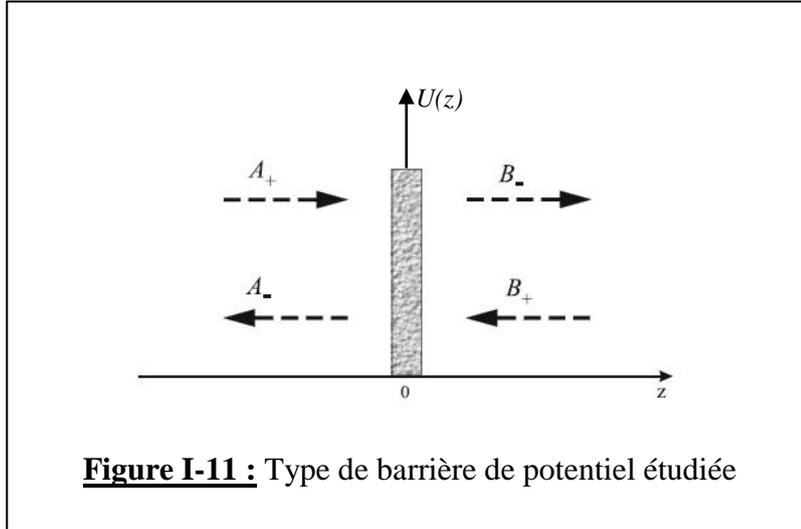
On tiendra compte des fonctions d'onde se déplaçant dans les deux directions (de la gauche vers la droite et vice versa).

Les solutions de l'équation de Schrödinger correspondante sont les suivantes :

$$\psi(z) = \begin{cases} A_+ e^{+ikz} + A_- e^{-ikz} & \text{pour } z < 0 \\ B_- e^{+ikz} + B_+ e^{-ikz} & \text{pour } z > 0 \end{cases} \quad (\text{I-18})$$

⁴ L'ensemble réservoirs + connexions (guides d'onde) + conducteur constitue une jonction quantique. $U(z)$ définit la géométrie de cette jonction; c'est le potentiel responsable des phénomènes de diffusion (il peut être du aux impuretés).

Où A_+e^{+ikz} et B_+e^{-ikz} représentent les ondes incidentes sur la barrière, et A_-e^{-ikz} représente l'onde réfléchie et B_-e^{+ikz} l'onde transmise. Le vecteur d'onde a pour expression : $k = \sqrt{2mE_z}/\hbar$, m étant la masse du porteur de charge.



Les conditions que doivent remplir la fonction d'onde et sa dérivée en $z = 0$ s'écrivent :

$$\begin{cases} \psi(0_-) = \psi(0_+) \\ \psi'(0_+) - \psi'(0_-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \end{cases} \quad \text{(I-19)}$$

Sous forme matricielle, ces conditions deviennent :

$$\begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} B_- \\ B_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{i}{K} & \frac{i}{K} \\ -\frac{i}{K} & 1 - \frac{i}{K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_- \\ B_+ \end{pmatrix} \quad \text{(I-20)}$$

Avec $K = \frac{\hbar^2 k}{m\alpha}$

$M = \begin{pmatrix} 1 + \frac{i}{K} & \frac{i}{K} \\ -\frac{i}{K} & 1 - \frac{i}{K} \end{pmatrix}$ est appelée matrice de transfert.

La matrice M relie les amplitudes des ondes des deux côtés de la barrière.

La matrice de diffusion S est définie par :

$$\begin{pmatrix} A_- \\ B_- \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_+ \\ B_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{iK-1} & \frac{iK}{iK-1} \\ \frac{iK}{iK-1} & \frac{1}{iK-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_+ \\ B_+ \end{pmatrix} \quad \text{(I-21)}$$

La matrice $S = \begin{pmatrix} \frac{1}{iK-1} & \frac{iK}{iK-1} \\ \frac{iK}{iK-1} & \frac{1}{iK-1} \end{pmatrix}$ relie les amplitudes des ondes sortantes et incidentes.

Les facteurs de transmission T et de réflexion R sont définis par les expressions suivantes, en posant $B_+ = 0$:

$$T(E_z) = \frac{|B_-|^2}{|A_+|^2} = \frac{K^2}{1+K^2} \quad (\text{I-22})$$

$$R(E_z) = \frac{|A_-|^2}{|A_+|^2} = \frac{1}{1+K^2} \quad (\text{I-23})$$

On vérifie bien que $T + R = 1$.

Les descriptions d'un système donné en termes de matrice de diffusion ou de transfert sont tout à fait équivalentes. La détermination de la matrice de diffusion permet de calculer la conductance à l'aide de la formule de Landauer (à travers le calcul de T). Mais dans le cas de mécanismes de diffusion assez complexes, l'utilisation de la matrice de transfert est recommandée [9].

Cas général

Dans le cas général (jonction ou barrière asymétrique, présence d'un champ magnétique, etc.), la matrice de diffusion est représentée par $S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}$.

Le facteur de transmission et le facteur de réflexion de la gauche vers la droite ($G \rightarrow D$) sont donnés par :

$$\begin{cases} T_{G \rightarrow D}(E) = |t|^2 \\ R_{G \rightarrow D}(E) = |r|^2 \end{cases} \quad (\text{I-24})$$

Et de la droite vers la gauche ($D \rightarrow G$), on a :

$$\begin{cases} T_{D \rightarrow G}(E) = |t'|^2 \\ R_{D \rightarrow G}(E) = |r'|^2 \end{cases} \quad (\text{I-25})$$

La matrice de transfert M peut également s'exprimer en fonction des coefficients r , r' , t et t' :

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{t} & -\frac{r'}{t} \\ \frac{r}{t} & \frac{tt' - rr'}{t} \end{pmatrix} \quad (\text{I-26})$$

Expression de S en fonction des éléments de M :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \frac{M_{21}}{M_{11}} & \frac{M_{11}M_{22}-M_{12}M_{21}}{M_{11}} \\ \frac{1}{M_{11}} & -\frac{M_{12}}{M_{11}} \end{pmatrix} \quad (\text{I-27})$$

Bien entendu, ces matrices peuvent avoir d'autres propriétés particulières qui conduisent à des relations entre les différents coefficients de transmission et de réflexion. De même, que des calculs relativement longs permettent, grâce à l'utilisation de la matrice \mathbf{S} , de retrouver l'expression de la conductance G (formule de Landauer) en fonction de T .

On retrouvera l'usage de la matrice de diffusion ultérieurement dans la simulation de l'effet Hall quantique entier (chapitre V).

BIBLIOGRAPHIE

- [1] O. Erlandsson, "**Numerical simulations of quantum transport in semiconductor nano-wires**", Bachelor's thesis, Université de Lund (2016)
- [2] R. Landauer, **IBM J. Res. Dev.** **1**, 223(1957)
- [3] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer et S. Pinhas, **Phys. Rev. B** **31**, 6207(1985)
- [4] J. Guignard, Thèse de Doctorat "**Etude de l'effet Hall quantique dans le graphène exfolié en vue d'une application en métrologie quantique**", Université Paris-Sud 11 (2011)
- [5] T. Ihn, "**Semiconductor Nanostructures -Quantum States and Electronic Transport**", Ed. Oxford University Press (2010)
- [6] S. Datta, "**Electronic Transport in Mesoscopic Systems**", Ed. Cambridge University Press (1995)
- [7] B.J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel et C. T. Foxon, **Phys. Rev. Lett.** **60**, 848(1988)
- [8] D.C. Glattli, "**Les conducteurs quantiques ou le monde étrange de la nanoélectronique**", SPEC, CEA Saclay et LPA ENS Paris (2006)
- [9] D. A. Ryndyk, "**Theory of quantum transport at nanoscale-An introduction**", Springer Series in Solid-State Sciences (Vol. 184), Ed. Springer (2016)

CHAPITRE II : L'EFFET HALL CLASSIQUE

II.1. Introduction

Dans sa thèse de Doctorat, Edwin Herbert Hall essayait de répondre à une question soulevée par Maxwell, qui consiste à savoir si la résistance est affectée ou non par un champ magnétique. Il a montré expérimentalement que, sous un champ magnétique appliqué perpendiculairement au courant, apparaît une tension électrique (tension de Hall) proportionnelle au champ magnétique appliqué et au courant longitudinal, c'est l'effet Hall dit classique. Cette découverte remarquable, bien avant la découverte de l'électron par J.J. Thomson (1897), a permis de déterminer la densité des porteurs de charge. Edwin Hall a aussi constaté que le signe des porteurs dépend du matériau. Ce signe anormal ne fût compris que cinquante ans plus tard quand apparaît la théorie des bandes avec son concept (nouveau) de porteurs de charge positive (trou ou hole en anglais). En 1980, soit une centaine d'années plus tard, fut révélée une des découvertes en physique les plus remarquables de la fin du XX^{ème} siècle, à savoir l'effet Hall quantique entier, suivi peu de temps après par la découverte de l'effet Hall quantique fractionnaire.

II.2. Théorie simple de l'effet Hall classique

Avant de parler de l'effet Hall quantique (EHQ), on doit nécessairement présenter l'effet Hall classique (EHC).

Cet effet fut découvert en 1879 [1], alors que E. H. Hall étudiait la dépendance de la résistance électrique d'un champ magnétique appliqué.

Considérons un matériau métallique par exemple, de largeur L et d'épaisseur d . Les axes x , y et z portent respectivement les vecteurs unitaires \vec{e}_x , \vec{e}_y et \vec{e}_z

La figure I.1 donne la géométrie de l'effet Hall. L'expérience se déroule à température ambiante.

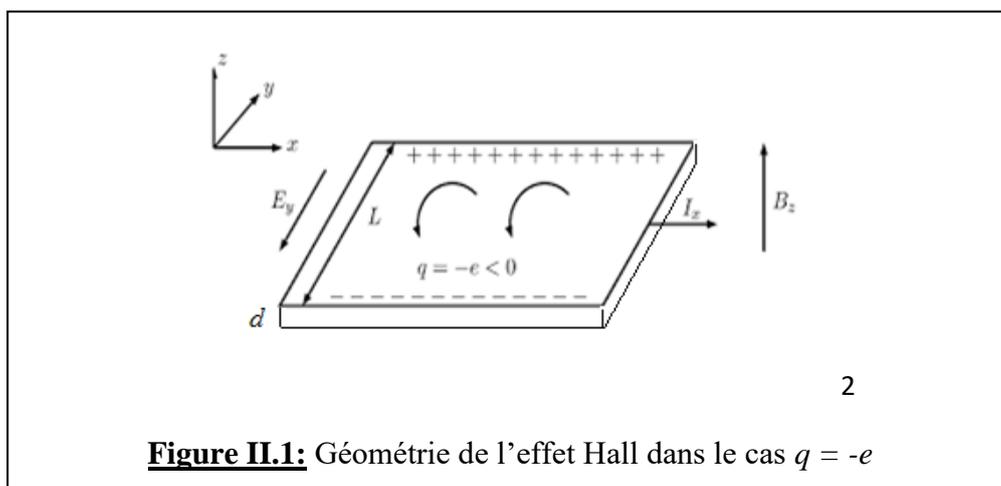


Figure II.1: Géométrie de l'effet Hall dans le cas $q = -e$

Le matériau est parcouru suivant l'axe x , par un courant électrique d'intensité $I_x = j_x L d$ du à un champ électrique appliqué $\vec{E}_x = E_x \vec{e}_x$. Si l'on ajoute un champ magnétique perpendiculaire au plan (x, y) tel que $\vec{B} = B \vec{e}_z$, (et d'intensité modérée) les porteurs de charges subissent via la force de Lorentz, une déviation qui courbe leur trajectoire vers le bord extérieur, et s'y accumulent comme illustré sur la figure II.1. Il va donc apparaître une différence de potentiel induisant un champ électrique E_y suivant Oy . Le mouvement d'une particule chargée (comme un électron) peut être compris dans le cadre du modèle de Drude [2], et est régi par l'équation :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) - m \frac{\vec{v}}{\tau} \quad (\text{II-1})$$

La force $(-m \frac{\vec{v}}{\tau})$ est une force phénoménologique du modèle de Drude, assimilable à une force "visqueuse" qui traduit de façon empirique les différents processus de dissipation : collisions des électrons avec les impuretés du matériau, avec les phonons, etc. et où τ est le temps moyen entre deux collisions, appelé également temps de relaxation.

Lorsque le régime stationnaire est atteint ($\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{0}$), on peut donc écrire l'équation du mouvement comme suit :

$$q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) - m \frac{\vec{v}}{\tau} = \vec{0} \quad (\text{II-2})$$

En considérant que : $\vec{E}(E_x, E_y, 0)$, $\vec{B}(0, 0, B_z)$ et que $\vec{v}(v_x, v_y, 0)$, la projection de l'équation (II-2) sur les axes Ox et Oy donne, respectivement :

$$q(E_x + B v_y) = \frac{m v_x}{\tau} \quad (\text{II-3})$$

$$q(E_y - B v_x) = \frac{m v_y}{\tau} \quad (\text{II-4})$$

Sachant qu'à l'équilibre des forces suivant Oy , il n'y a plus de déplacement de charges, donc pas de courant, la vitesse suivant cette composante est nulle ($v_y = 0$) et on a :

$$v_x = \frac{q\tau}{m} E_x \quad (\text{II-5})$$

La densité de courant associée au mouvement longitudinal des charges a pour expression :

$$j_x = n_p q v_x = \frac{n_p q^2 \tau}{m} E_x \quad (\text{II-6})$$

Avec n_p la densité de porteurs de charges.

Le rapport $\rho(H) = \frac{E_x}{j_x}$ est **magnétorésistance**. Hall montra que cette quantité est indépendante du champ magnétique, comme le prouve la relation (II-5).

On appelle résistance longitudinale, la résistance notée R_L mesurée entre la face (1) de pénétration du courant I_x et sa sortie par la face (2) (figure I-1) ; elle est donnée d'après la loi d'Ohm par le rapport de la différence de potentiel entre les 2 faces et le courant qui traverse le matériau :

$$R_L = \frac{V_2 - V_1}{I_x} \quad (\text{II-7})$$

Le champ électrique suivant l'axe y est appelé **champ de Hall** ; son expression est d'après la relation (I-3) :

$$E_y = Bv_x = \frac{q\tau}{m} BE_x \quad (\text{II-8})$$

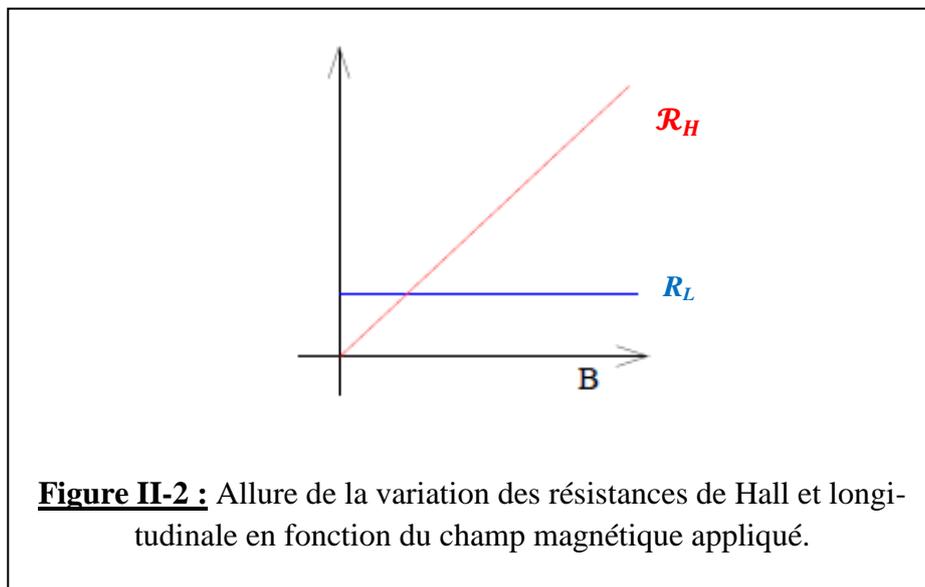
La différence de potentiel induite, appelée **tension de Hall** est donc :

$$V_H = L|E_y| = L \frac{|q|\tau}{m} BE_x = \mathcal{R}_H I_x \quad (\text{II-9})$$

Cette expression de V_H a été obtenue en tenant compte de l'équation (II-6) et du fait que $I_x = j_x Ld$, où L est la largeur du matériau et d son épaisseur. La résistance \mathcal{R}_H est appelée **résistance de Hall** :

$$\mathcal{R}_H = \frac{V_H}{I_x} = \frac{B}{n_p |q| d} \quad (\text{II-10})$$

On constate que la résistance de Hall (\mathcal{R}_H) est directement proportionnelle à l'intensité B du champ magnétique. En effet, la pente de la droite $\mathcal{R}_H = f(B)$ permet d'obtenir la densité des porteurs de charge n_p . Par contre, la résistance longitudinale R_L est constante et ne dépend pas de B (figure II.2).



Remarque :

1. En réalité, cette variation linéaire de $\mathcal{R}_H = f(B)$ n'est vraie que pour des champs magnétiques raisonnables et à la température ambiante. La relation devient tout autre lorsqu'on commence à travailler avec des champs magnétiques très importants et à des températures proches du zéro absolu, et nous devons donc utiliser une approche quantique du problème [3].
2. La relation (II-9) définissant la résistance de Hall n'est pas une application de la loi d'Ohm contrairement à la relation (II-6) donnant R_L .

Le coefficient (ou constante) de Hall est donné par :

$$R_H = \frac{1}{nq} \quad \text{(II-11)}$$

Ce résultat est tout à fait remarquable, puisqu'il suggère que la constante de Hall ne dépend d'aucun paramètre du métal, excepté la densité des porteurs de charge. Dans le système international (SI), le coefficient de hall s'exprime en m^3/C ou $\text{m}^3/\text{A.s}$. On constate donc que $R_H > 0$ si $q > 0$, et $R_H < 0$ si $q < 0$. Il permet, en principe, la détermination du signe des porteur de charge dans un matériau donné. Par exemple, si $R_H > 0$ dans un semi-conducteur, cela devrait signifier que les porteurs de charge majoritaires dans celui-ci sont les trous et non les électrons, et l'inverse est vrai.

BIBLIOGRAPHIE

[1]. E. H. Hall, **American Journal of Mathematics** **2**, 287(1879)

[2]. N.W Ashcroft et N. D. Mermin, “**Physique des Solides**”, Ed. EDP Sciences (France), (2002)

[3]. K.v. Klitzing, G. Dorda et M. Pepper, **Phys. Rev. Lett.** **45**, 494(1980)

CHAPITRE III : LES EFFETS HALL QUANTIQUES

III.1. Introduction

Un siècle après la mise en évidence par E.H. Hall d'un effet qui porte depuis son nom, fut découvert un effet Hall purement quantique dans des structures semi-conductrices (MOSFET⁵ de silicium) à deux dimensions, soumises à un fort champ magnétique et à des températures très basses.

En fait, il s'agit plutôt de deux effets Hall quantiques. Le premier de ces effets, appelé **effet Hall quantique entier** (EHQE) fut découvert, en 1980, par K.v. Klitzing et ses collègues [1]. Après cette découverte, un deuxième effet Hall quantique a vu le jour en 1983 [2]; il s'agit de l'**effet Hall quantique fractionnaire** (EHQF). Depuis, les systèmes bidimensionnels d'électrons soumis à un champ magnétique perpendiculaire restent un domaine de recherche intense tant au niveau expérimental que théorique [3].

Dans des hétéro-structures comme les puits quantique de type GaAs/AlGaAs (qui sont un prototype de gaz 2D), les chercheurs ont réussi à obtenir des mobilités très importantes et ont pu observer des effets Hall quantiques avec une résolution meilleure que celle obtenue au début des années 80.

L'observation des effets Hall quantiques (dans un gaz d'électrons) fait partie des découvertes qui ont bouleversé la compréhension du « **fluide électronique** » en physique de la matière condensée, et qui fut expliqué avec succès par la théorie de Landau du liquide de Fermi⁶ [4]

Comme l'effet Hall quantique permet d'obtenir une résistance électrique qui (comme nous le verrons) ne dépend que de deux constantes fondamentales de la physique qui sont la constante de Planck (h) et la charge de l'électron (e), on a jugé qu'il pouvait être utilisé comme étalon de représentation des résistances électriques. Au début des années 90, l'utilisation de l'effet Hall quantique était recommandée par le Comité International des Poids et Mesures (CIPM) pour la métrologie des résistances électriques. Mais l'utilisation de cet effet en métrologie nécessite une complète maîtrise expérimentale incluant, en premier lieu, la reproductibilité de la mesure de la résistance avec une précision au milliardième près en valeur relative (10^{-9}). Dans les hétéro-structures GaAs/AlGaAs (qui constituent à ce jour cet étalon), cet objectif est atteint mais demeure très contraignant : l'étalon doit être refroidi à 1,5 K, plongé dans un champ magnétique de 10 T, et mesuré avec des courants n'excédant pas des dizaines de mA, mesures qui ne sont pas toujours aisées au niveau de tous les Instituts Nationaux de Métrologie et empêche son transfert vers les utilisateurs industriels.

⁵ MOSFET : Metal/Oxide/Semiconductor Field Effect Transistor = Transistor à Effet de Champ à structure Métal/Oxyde/Semi-conducteur.

⁶ Un liquide de Fermi est un état quantique de la matière observé à basse température dans les solides cristallins.

Un nouvel étalon va certainement remplacer bientôt les hétéro-structures à base d'arséniure de gallium ; il s'agit du graphène qui est un matériau 2D constitué uniquement d'atomes de carbone. Ces travaux entrepris au niveau de plusieurs laboratoires [5-7] ont montré une quantification de la résistance de Hall parfaite à 10^{-9} près, à des champs magnétiques assez faibles (3,5 T), des températures aussi élevées que 10 K et des courants de mesure relativement forts (0,5 mA), ce qui constitue certainement des records !

Dans ce chapitre, nous allons présenter et expliquer la physique des deux types d'effet Hall quantiques qui sont l'effet Hall quantique entier (EHQE) et l'effet Hall quantique fractionnaire (EHQF). Pour cela, nous aurons besoin de rappeler « la physique quantique de base » que constituent ce qu'on appelle les niveaux de Landau, et les gaz d'électrons bidimensionnels généralement appelés 2DEG (pour 2D Electron Gas).

III.2. Bases physiques

III.2.1. Le mouvement cyclotron classique d'une particule chargée

III.2.1.1. Mouvement circulaire uniforme

Quand une particule de masse m et de charge q , est plongée dans un champ magnétique d'induction \vec{B} , son mouvement s'analyse, d'un point de vue de la mécanique newtonienne, en résolvant l'équation fondamentale de la dynamique :

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = q \vec{v} \wedge \vec{B} \quad (\text{III-1})$$

$\vec{r}(x, y, z)$ est le vecteur-position de la particule, $\vec{v}(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ est sa vitesse et $\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2}(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z})$ son accélération $\vec{F}_L = q \vec{v} \wedge \vec{B}$ est la force de Lorentz.

Considérons le champ \vec{B} aligné avec l'axe z , c'est-à-dire $\vec{B} = B \vec{e}_z$. La projection de l'équation (III-1) suivant les trois axes x , y et z donne :

$$\begin{cases} \ddot{x} = \omega_c \dot{y} \\ \ddot{y} = -\omega_c \dot{x} \\ \ddot{z} = 0 \end{cases} \quad (\text{III-2})$$

$\omega_c = qB/m$ est la fréquence (ou plutôt la pulsation) cyclotron.

D'après la troisième équation (III-2), le mouvement selon l'axe z est un mouvement de translation uniforme puisque $\ddot{z} = 0$ ou encore $\dot{z} = \text{constante}$. On restreindra donc notre étude au mouvement projeté dans le plan (xy). La résolution des deux premières équations (III-2) donne :

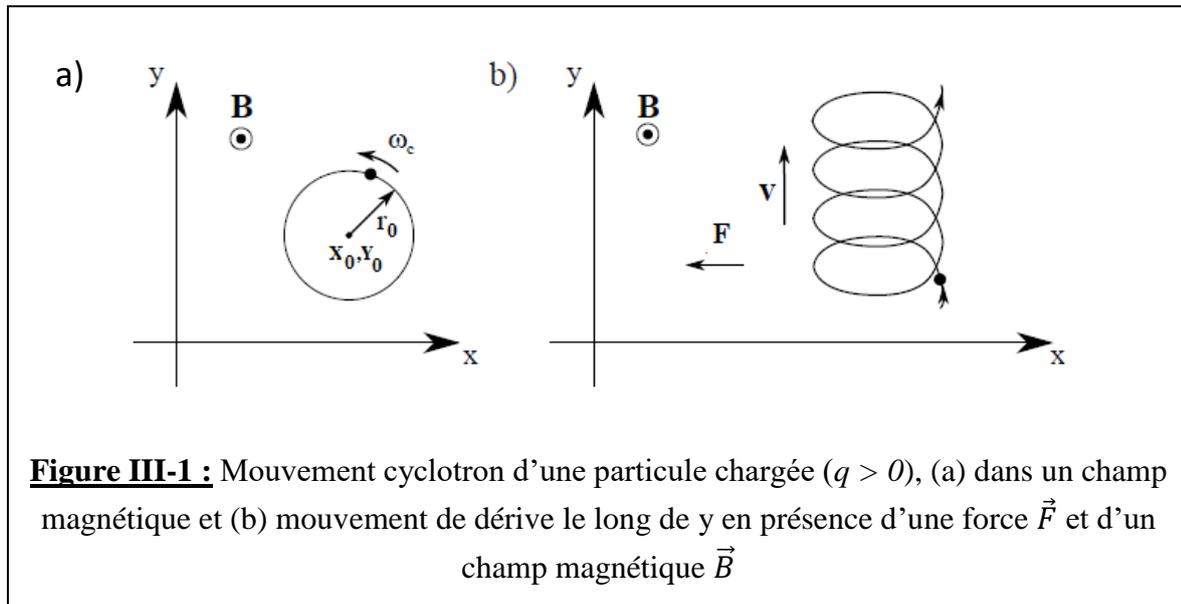
$$\begin{cases} x(t) = X_0 - \frac{v_0}{\omega_c} \cos(\omega_c t) \\ y(t) = Y_0 + \frac{v_0}{\omega_c} \sin(\omega_c t) \end{cases} \quad \text{(III-3)}$$

v_0 est le module de la vitesse $\vec{v}(t)$. Le mouvement décrit par la particule est alors dans ce cas un mouvement circulaire uniforme de pulsation ω_c parcouru dans le sens horaire si $\omega_c > 0$. Le centre du cercle décrit (de rayon r_0) a pour coordonnées (X_0, Y_0) . Cette trajectoire est représentée sur la figure II-1a.

Sachant que \vec{B} et \vec{v} sont perpendiculaires, on peut écrire que : $|q|v_0B = mv_0^2/r_0$.

On en déduit alors l'expression du rayon r_0 (en supposant que $|\omega_c| = \omega_c$) :

$$r_0 = v_0/\omega_c \quad \text{(II-4)}$$



Remarque :

Pour une vitesse initiale donnée de la particule, les paramètres de la trajectoire que sont r_0 et ω_c seront les mêmes quelle que soit la position initiale dans le plan (x, y). On peut donc considérer que le fait d'appliquer un champ magnétique sur la particule revient à la localiser dans l'espace des phases (espace de la position (x, y) et de la quantité de mouvement (p_x, p_y)) associé au mouvement dans le

plan (xOy), sa position et sa vitesse étant confinées dans une région centrée au centre en (X_0, Y_0) et de dimension ou d'extension :

$$|\Delta \mathbf{r} \times \Delta \mathbf{p}|^2 \sim |\mathbf{r}_0 \times (m\mathbf{v}_0)|^2 \quad (\text{III-5})$$

Avec $r_0 = v_0/\omega_c$.

Cette dernière relation doit également satisfaire à l'inégalité de Heisenberg : $\Delta \mathbf{r}_i \times \Delta \mathbf{p}_i \geq \hbar/2$ (avec $i = x, y$).

III.2.1.2. Le courant de Hall

On va supposer maintenant qu'une force uniforme \vec{F} , indépendante de la position et de la vitesse de la particule, vient s'ajouter à la force de Lorentz \vec{F}_L . Cette force peut par exemple être créée par un champ électrique uniforme \vec{E} . On considère que F est appliquée suivant l'axe x : $\vec{F} = F\vec{e}_x$. Cette force ne change pas le mouvement suivant z mais dans le plan (xy) , la projection de l'équation vectorielle du mouvement donne :

$$\begin{cases} m\ddot{x} = qB\dot{y} + F \\ m\ddot{y} = -qB\dot{x} \end{cases} \quad (\text{III-6})$$

En l'absence de tout champ magnétique, l'effet de la force \vec{F} est évidemment d'accélérer la particule le long de l'axe x . En présence de \vec{B} , la nature du mouvement change radicalement. Les solutions générales des équations du mouvement sont données par :

$$\begin{cases} x(t) = X_0 - \frac{v_0}{\omega_c} \cos(\omega_c t) \\ y(t) = Y_0 + \frac{v_0}{\omega_c} \sin(\omega_c t) - \frac{F}{qB} t \end{cases} \quad (\text{III-7})$$

La figure III-1b représente le mouvement décrit dans ce cas par la particule et qui correspond à la composition :

- Du mouvement circulaire uniforme étudié dans le paragraphe précédent (avec $F = 0$)
- Du mouvement de translation uniforme (mouvement de dérive) à vitesse $(-F/qB)$, dans la direction y perpendiculaire à la force \vec{F} .

Si la force \vec{F} est due à un champ électrique \vec{E} ($\vec{F} = q\vec{E}$), ce mouvement de dérive est appelé courant de Hall.

III.3. La quantification de Landau

III.3.1. Origine du phénomène

En appliquant la mécanique quantique à l'étude des métaux, le physicien russe L. D. Landau et son disciple E.M. Lifschitz s'intéressèrent au traitement quantique d'un gaz d'électrons (libres) bidimensionnel (noté conventionnellement 2DEG) dans un champ magnétique [8].

On sait actuellement fabriquer des structures semi-conductrices dans lesquelles les électrons de conduction sont confinés dans ce qu'on appelle des puits quantiques à deux dimensions (2D) d'épaisseurs comprises entre 50 et 100 Å. Ce gaz d'électrons 2D ainsi créé exhibe des effets physiques très intéressants, en particulier en présence d'un champ magnétique de forte intensité.

Landau et Lifschitz montrèrent que, de même qu'un oscillateur harmonique, les niveaux d'énergie de l'électron 2D sont équidistants avec un écart entre eux égal à $\hbar\omega_c$. Ces niveaux ont alors été appelés « **niveaux de Landau** ». Le caractère 2D se manifeste par une dégénérescence élevée de chaque niveau.

III.3.2. Les niveaux de Landau

III.3.2.1. Champ magnétique appliqué nul

Un gaz d'électrons bidimensionnel (noté conventionnellement 2DEG) ne peut se déplacer dans la direction z perpendiculaire à l'hétéro-interface ou à la série de couches constituant les puits quantiques (c'est le confinement quantique); par contre, il peut se déplacer quasi-librement dans le plan (xy) perpendiculaire à la direction z. L'énergie d'un tel électron a pour expression [9] :

$$E_j(k_{\parallel}) = \frac{\hbar^2}{2m_x^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^*} k_y^2 + \varepsilon_j \quad \text{(III-8)}$$

Où m_x^* et m_y^* sont les masses effectives de l'électron suivant x et y ; ε_j est un spectre de valeurs propres de l'énergie qui résulte de la quantification suivant z. Pour un puits quantique rectangulaire **profond** d'épaisseur d_z (dimension suivant z telle que $d_z \ll dx, dy$ dimensions suivant x et y, respectivement) par exemple, les énergies de confinement ε_j de l'électron dans le puits d_z a pour expression :

$$\varepsilon_j = \frac{\hbar^2 \pi^2 j^2}{2m_z^* d_z^2} \quad \text{(III-9)}$$

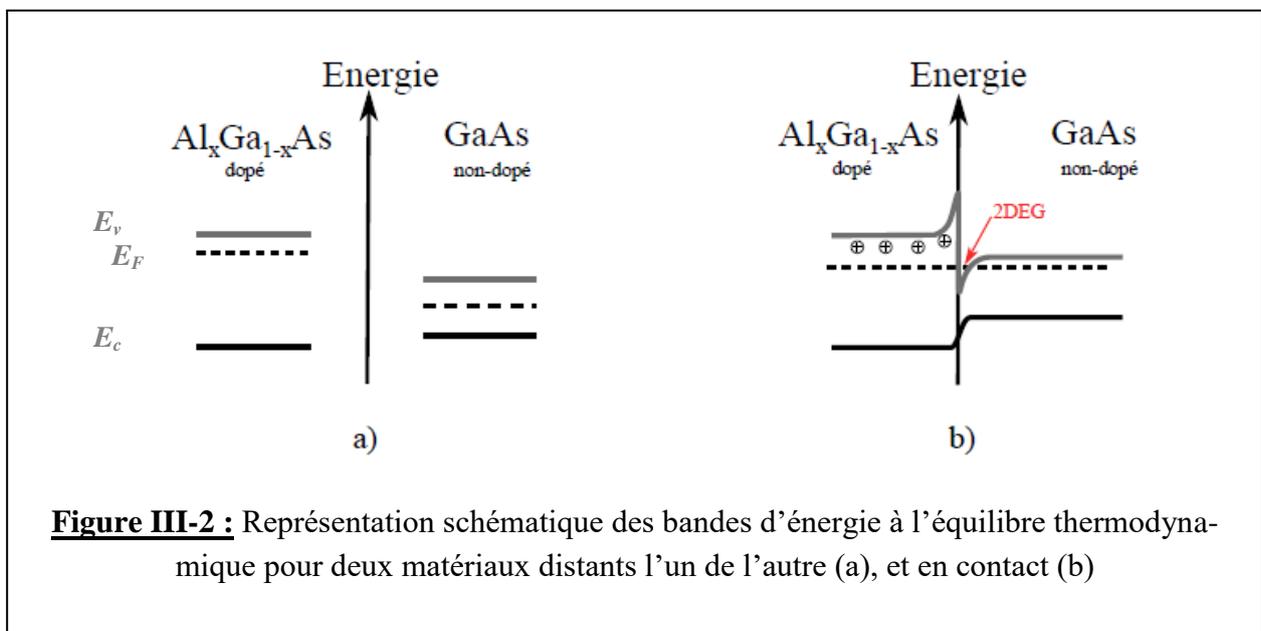
Où $j = 0, 2, 3, \dots$

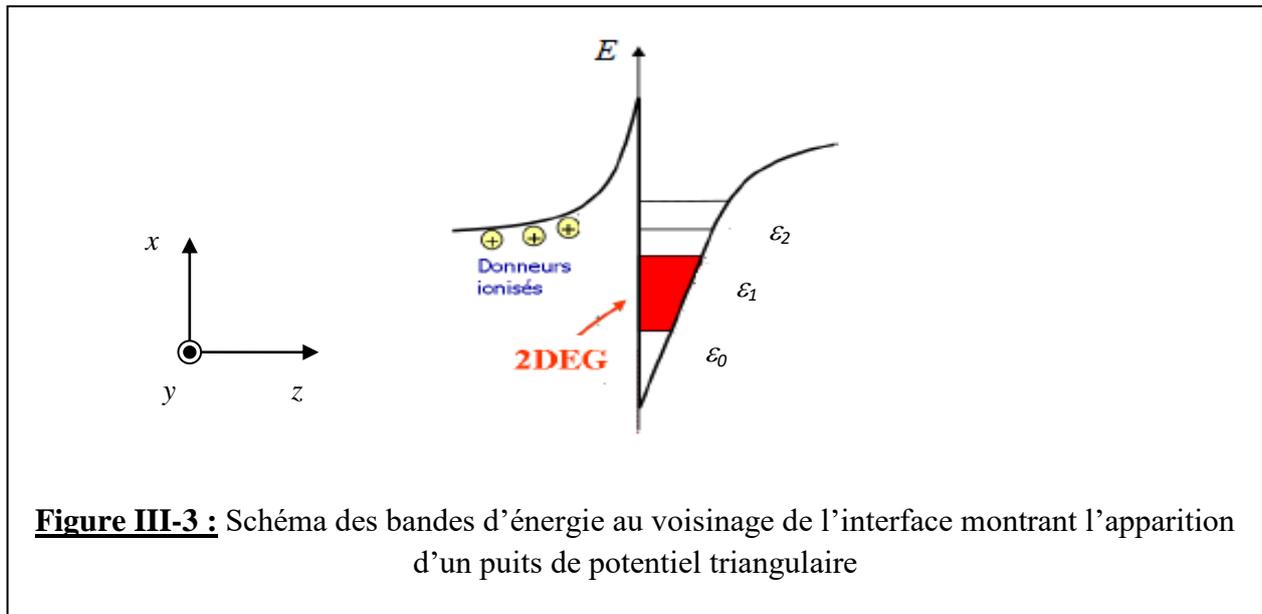
Dans l'exemple considéré (puits de potentiel rectangulaire), l'expression (III-9) ressemble à celle obtenue pour l'énergie d'une particule dans un puits de potentiel carré de largeur d_z .

Nous allons maintenant considérer un autre exemple plus réaliste qui concerne une hétéro-structure semi-conductrice, à savoir $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (dopé Si)/GaAs (très peu dopé ou intrinsèque). Exemple d'une telle structure : $\text{Al}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As}$ /GaAs, de largeurs de la bande interdite égales à, respectivement, 1,77 eV et 1,42 eV.

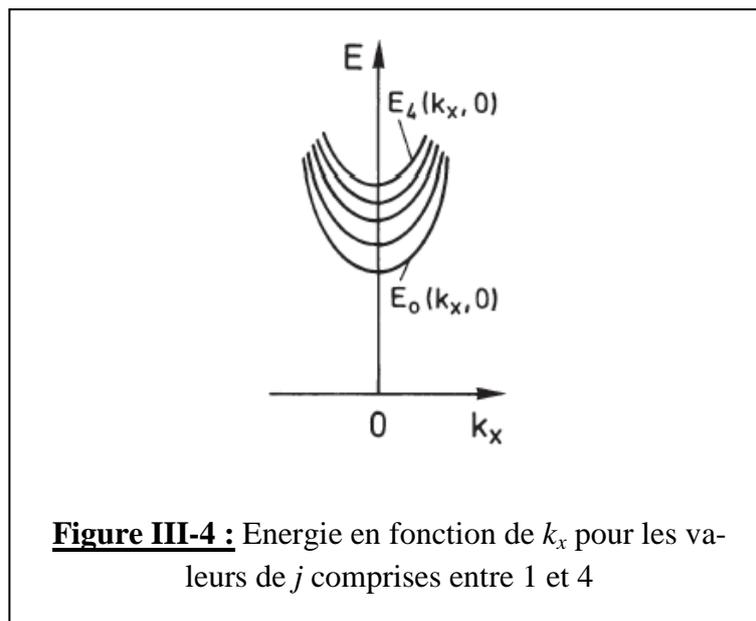
Lorsque deux matériaux semi-conducteurs de gaps différents sont mis en contact, les potentiels chimiques (niveaux de Fermi) des deux matériaux s'équilibrent. Considérons le cas d'une couche de GaAs non dopée et une couche de AlGaAs dopée avec des atomes de silicium jouant le rôle d'impuretés de donneurs d'électrons. Pour que les potentiels chimiques puissent s'équilibrer, des électrons fournis par les dopants de AlGaAs sont transférés vers GaAs (figure III-2). Ce transfert de charge a pour conséquence de courber les bandes d'énergie de telle sorte qu'il apparaît au niveau de l'interface un potentiel de confinement de profil triangulaire (figure III-3). La largeur de ce puits est de l'ordre de 10 nm, ce qui permet de confiner 'quantiquement' les électrons.

A cause de ce confinement, le vecteur d'onde transverse (k_{\perp}) à l'interface est quantifié ; il apparaît alors ce qu'on appelle des **sous-bandes** d'énergie E_j (cf. équation III-8). L'écart en énergie de ces sous-bandes est lié à la largeur du puits (à travers ϵ_j). A titre d'exemple [10], cet écart d'énergie peut être de l'ordre de 0,1 eV, valeur grande devant l'énergie thermique à la température de travail ($T \approx 1,3$ K) et égale à $k_B T \approx 10^{-4}$ eV. En réalité, on constate dans cet exemple que seule la première sous-bande E_0 est occupée : les électrons ont alors une dynamique purement bidimensionnelle.





La figure III-4 montre les sous-bandes paraboliques, représentées en fonction de k_x , dans le plan de propagation libre du 2DEG perpendiculaire à z .



III.3.2.2. Application d'un champ magnétique

Appliquons maintenant un champ magnétique d'induction \vec{B} perpendiculairement au plan (x, y) de propagation du gaz d'électrons (avec $|\vec{B}| = B$). Cela a pour conséquence de réduire sensiblement la dimensionnalité du 2DEG. C'est-à-dire que les électrons sont forcés à adopter des mouvements cyclotrons perpendiculaires au champ magnétique (comme vu au paragraphe III.1), avec une pulsation ou fréquence orbitale donnée par $\omega_c = |q|B/m_{\parallel}^* = eB/m_{\parallel}^*$, où m_{\parallel}^* est la masse effective des

électrons dans le plan (x, y) ou masse effective parallèle. Dans le cas particulier où cette masse est la même suivant les directions x et y (isotropie de direction) alors : $m_{\parallel}^* = m_x^* = m_y^*$.

Le mouvement circulaire cyclotronique peut être considéré comme la composition de deux mouvements harmoniques simples perpendiculaires déphasés de $\pi/2$, et de fréquence propre ω_c . De ce fait, les énergies propres de ce mouvement circulaire sont celles de l'oscillateur harmonique de pulsation égale à la fréquence propre ω_c . L'application de \vec{B} provoque alors une quantification des sous-bandes (III-8), ce qui conduit à des niveaux d'énergie de la forme (en tenant compte du spin de l'électron) :

$$E_{j,n,s} = \varepsilon_j + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + sg\mu_B B \quad (\text{III-10})$$

Dans le terme ($sg\mu_B B$), qui représente le terme dû à l'effet Zeeman, s représente le nombre quantique de spin ($s = \pm 1/2$), $\mu_B = e/2m_{\parallel}^*$ est le magnéton de Bohr et g est le facteur de Landé des électrons. Souvent, on ne tient pas compte de cet effet dans le traitement de l'effet Hall quantique (comme dans notre cas).

La quantification causée par le champ magnétique conduit à la transformation des sous-bandes paraboliques en niveaux discrets d'énergie appelés niveaux de Landau E_n :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c \quad (\text{III-11})$$

Où $n \in \mathbb{N}$. Cette énergie E_n représente en fait l'énergie cinétique quantifiée d'un électron dans le plan (x, y) ; c'est la quantification du rayon cyclotron de l'orbite circulaire (relation III-4) qui a pour conséquence la quantification de cette énergie. Deux niveaux de Landau successifs sont séparés de la quantité $\hbar\omega_c$. Le niveau E_0 correspondant à $n = 0$ est le niveau de Landau le plus bas, noté LLL (Lowest Landau Level).

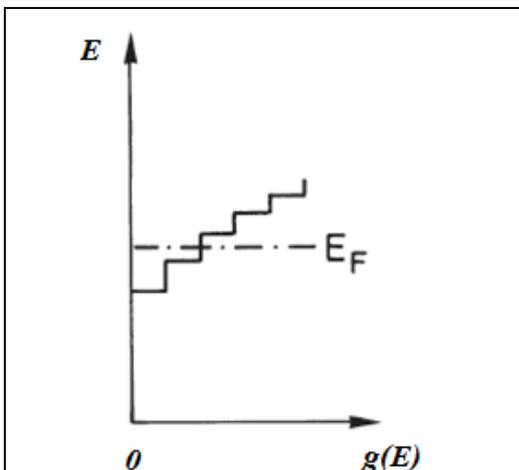
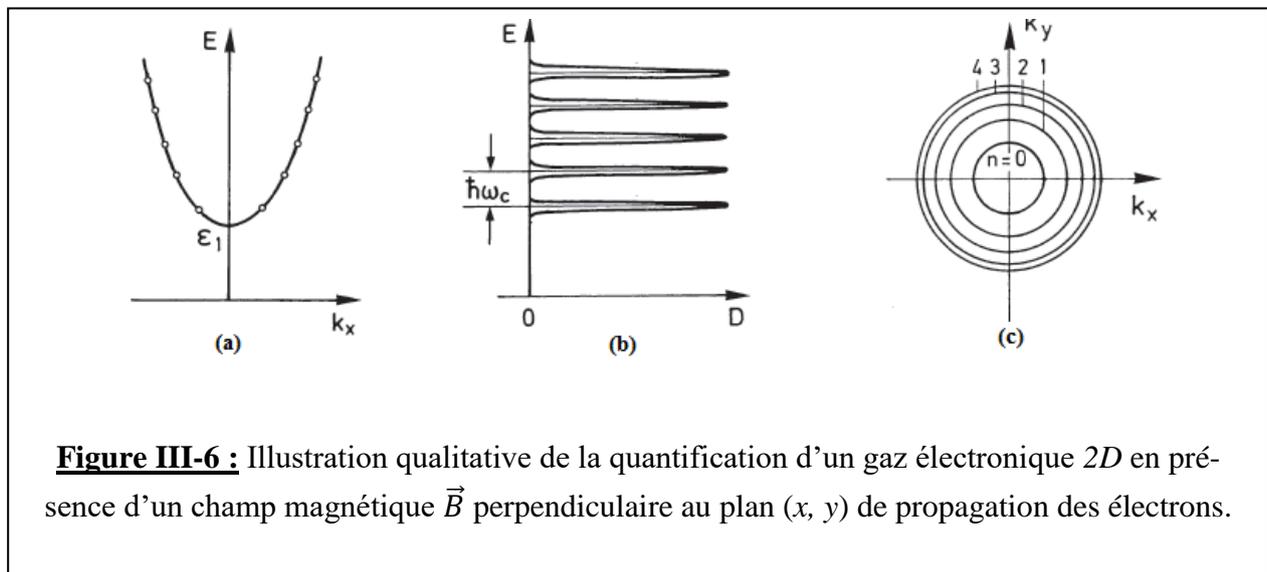


Figure III-5 : Densité d'états du gaz 2DEG reflétant sa quantification en sous-bandes

Pour une sous-bande particulière, la densité d'états en l'absence de champ magnétique appliqué ($\vec{B} = \vec{0}$) est une fonction en escalier à cause du caractère 2D du gaz électronique (figure III-5). Chaque palier correspond à une sous-bande d'énergie.

Cette fonction continue ($g(E)$) montrée sur la figure III-5 se subdivise –en présence d'un champ magnétique– en une série de fonctions semblables à des fonctions delta (δ), séparées de la quantité d'énergie ($\hbar\omega_c$), donnant les niveaux de Landau.

La figure III-6 montre une illustration de la quantification d'un gaz électronique 2D en présence d'un champ magnétique \vec{B} perpendiculaire au plan (x, y) de propagation des électrons. **(a)** Représentation de l'énergie (parabolique) de la première sous-bande (ϵ_1), pour un électron libre du 2DEG en fonction de k_x . On y voit une autre quantification qui apparaît sous forme d'états de Landau (points) lors de l'application d'un champ magnétique externe ; **(b)** Représentation de la densité d'états D dans la première sous-bande ; on rappelle que $\omega_c = eB/m_{\parallel}^*$ est la fréquence (pulsation) cyclotron de l'orbite électronique perpendiculaire au champ magnétique ; **(c)** Représentation de l'énergie (cinétique) des niveaux de Landau $(n + 1/2)\hbar\omega_c$ dans le plan (k_x, k_y) de l'espace réciproque pour n variant de $n = 0$ à $n = 4$.



Remarque :

En l'absence de phénomènes de diffusion des électrons, la densité d'états D (figure III-6b) est représentée par une fonction « peigne » ou par des fonctions réellement de type δ . Dans le cas contraire, cette densité d'états présente une largeur qui dépendra de l'intensité de la diffusion électronique par des défauts et impuretés (on parle souvent de désordre introduit par ces défauts et impuretés). En d'autres termes, c'est ce désordre qui donne naissance à l'élargissement des niveaux de Landau. On verra plus loin qu'il est nécessaire d'avoir un tel élargissement pour observer l'effet Hall quantique.

On peut montrer que les niveaux de Landau sont dégénérés ; cette dégénérescence dépend de B et le degré de dégénérescence est donné par :

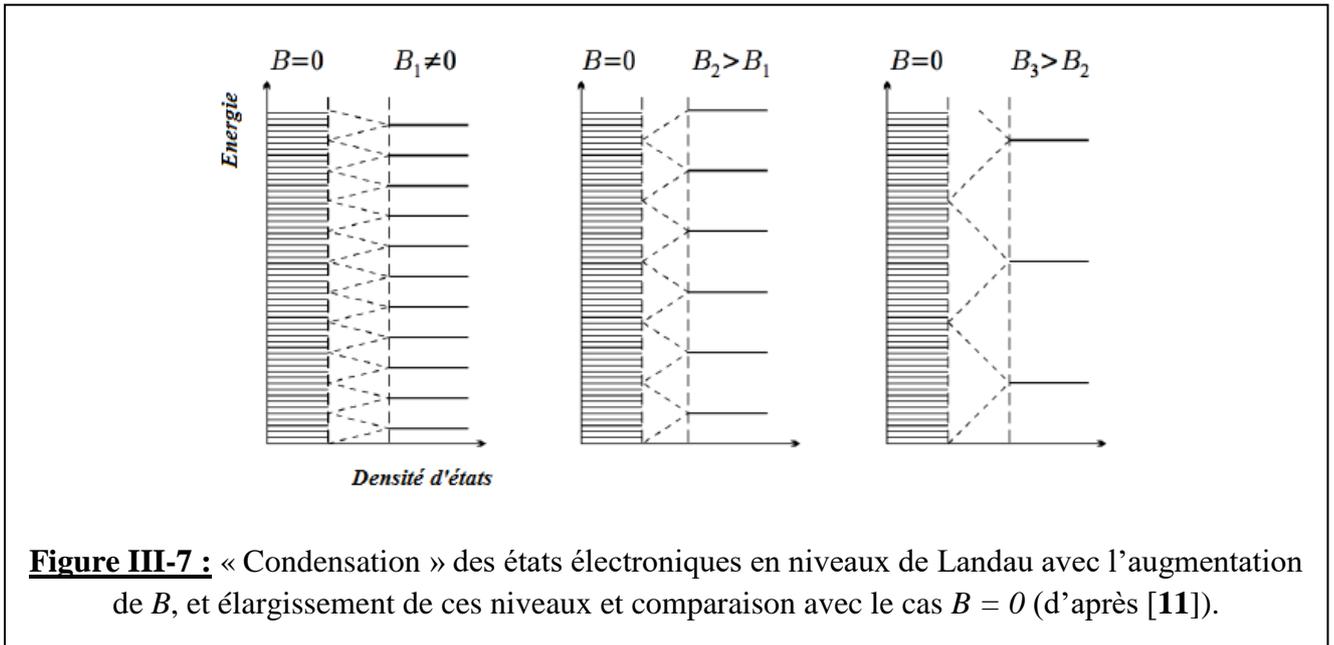
$$N_L = eB/h = 2,42 \times 10^{10} B \text{ (cm}^{-2}\text{T}^{-1}\text{)} \quad \text{(III-12)}$$

N_L représente le nombre d'états par unité de surface de l'échantillon que peut contenir chaque niveau de Landau, à basse température. Par exemple, N_L sera égal au nombre d'électrons par cm^2 que contient un niveau de Landau d'énergie inférieure à l'énergie du niveau de Fermi (E_F) à basse température. Si le gaz d'électrons occupe une surface d'aire $A = L_x L_y$ (où L_x et L_y sont les dimensions de l'échantillon), le nombre total d'états est alors :

$$N_L^t = N_L A \quad \text{(III-13)}$$

Une variation de B change la distance énergétique de séparation des niveaux de Landau ($\hbar\omega_c$) ainsi que le degré de dégénérescence N_L , selon la relation (III-12). Lorsque B augmente, les niveaux de Landau se déplacent vers les énergies plus élevées et lorsqu'un niveau totalement occupé dépasse le niveau de Fermi E_F , il va se vider dans le niveau de Landau suivant de plus faible énergie.

La figure III-7 montre que lorsque le champ magnétique augmente, de plus en plus d'états électroniques «condensent» dans chaque niveau de Landau. La distance inter-niveaux augmente aussi avec B .



A basse température, à chaque fois que B augmente, l'énergie du système d'électrons augmente ; le retour à l'équilibre (par une minimisation de l'énergie) se fait à chaque fois que les niveaux de Landau qui deviennent supérieurs à E_F se vident. L'énergie du système va donc augmenter et diminuer (osciller) en fonction de B ; il en est de même pour la conductivité électrique (**effet Shubnikov-de Haas**) et la susceptibilité magnétique (**effet Haas-van Alphen**) [11]. L'effet Shubnikov-de Haas est

souvent utilisé pour calculer les masses effectives des électrons et des trous. En ce qui concerne notre sujet, nous verrons que les oscillations de la conductivité (ou de la résistivité) produites sont reliées aux effets Hall quantiques. Par ailleurs, l'effet de Haas-van Alphen est d'une grande importance dans l'étude de la topologie des surfaces de Fermi dans les métaux.

III.4. L'Effet Hall Quantique Entier (EHQE)

III.4.1. Présentation de l'EHQE. Mise en évidence

En 1980, soit un siècle après la découverte de l'effet Hall dit classique, une expérience de K.v. Klitzing et ses collègues [1] a montré que la résistance de Hall \mathcal{R}_H à très basse température⁷ ne varie pas linéairement avec le champ magnétique B (comme dans le cas classique : voir chap. II, équation II.9), mais que cette résistance est quantifiée : à certaines valeurs du champ \mathcal{R}_H reste constante quand on varie légèrement B. Ceci donne lieu à des paliers dans la résistance de Hall autour de la courbe classique. Von Klitzing réalise aussitôt que cette quantification de la résistance de Hall est indépendante des détails géométriques et de la composition de l'échantillon étudié, et ne dépend que de deux constantes fondamentales qui sont la constante de Planck (h) et la charge élémentaire (e) suivant :

$$\mathcal{R}_H = \frac{h}{i e^2} \quad \text{(III-14)}$$

On parle d'effet Hall quantique entier (EHQE) dans le cas où i est un entier ; si ce nombre est fractionnaire on parle d'effet Hall quantique fractionnaire (EHQF).

La découverte de ces deux effets fut récompensée par l'attribution de deux prix Nobel : en 1985, cette distinction fut remise à K.v. Klitzing pour la découverte de l'EQHE [1], et Tsui, Störmer et Laughlin partagèrent ce prix en 1998 pour leurs travaux respectivement expérimentaux et théoriques sur l'EQHF [2].

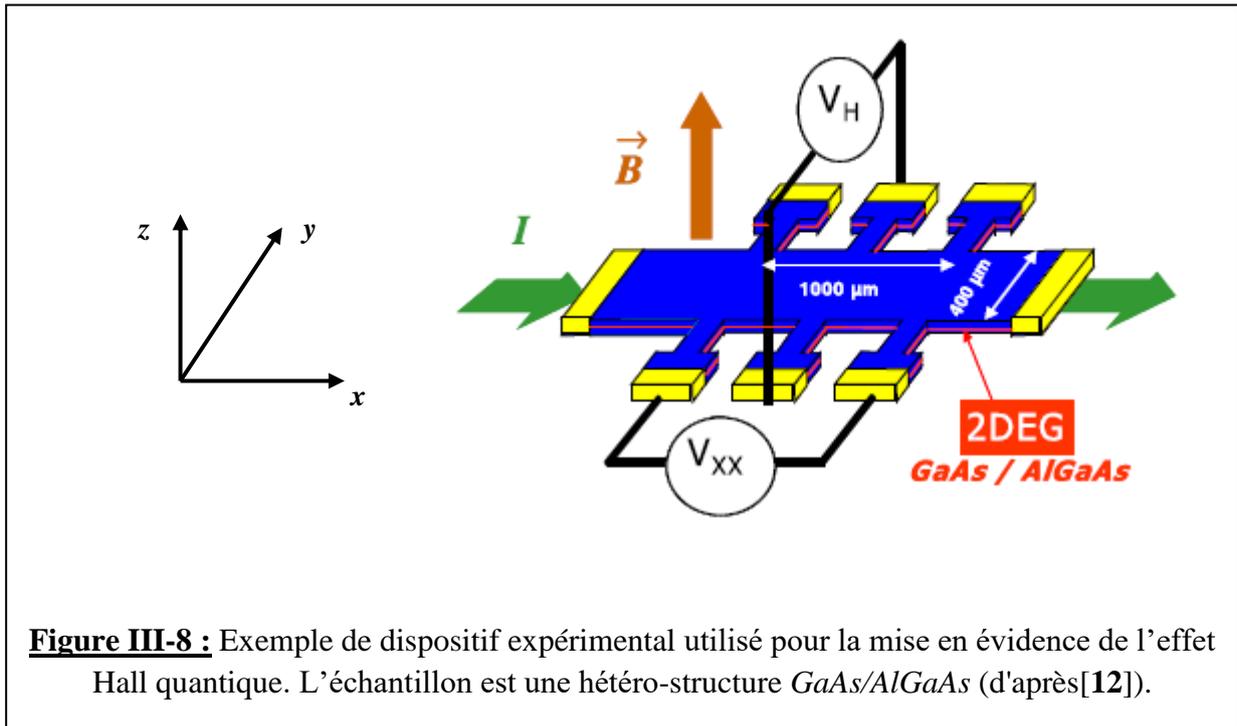
La figure III-8 montre une hétéro-structure de type GaAs/AlGaAs utilisée pour mettre en évidence l'effet quantique.

Sur cette figure, $R_{xy} = \mathcal{R}_H = V_H/I$ est la résistance de Hall et $R_{xx} = R_L = V_{xx}/I$ est la résistance longitudinale.

⁷ Pour $k_B T \ll \hbar \omega_c$

Remarque :

La résistivité de Hall se confond avec la résistance de Hall, c'est-à-dire que $\rho_{xy} = \mathcal{R}_H = \frac{h}{e^2} i$. C'est une particularité des systèmes bidimensionnels. Cependant la résistivité longitudinale s'écrit $\rho_{xx} = (V_{xx}/I)(L_y/L_x)$, avec $L_x = 1000 \mu m$ et $L_y = 400 \mu m$ d'après la figure III.8. La résistivité de Hall est uniquement fonction de constantes physiques fondamentales (h et e) et ne dépend pas de la géométrie comme l'est ρ_{xx} .



La représentation des résistivités de Hall ρ_{xy} et longitudinale ρ_{xx} en fonction de l'intensité du champ magnétique est montrée sur la figure III-9. On y constate que ρ_{xy} est constante sur des plateaux correspondant aux valeurs $i = 1, 2, 3, \dots$; elle passe rapidement d'un plateau à l'autre à mesure que B augmente. Par contre, ρ_{xx} est nulle sur ces plateaux et augmente rapidement lorsque ρ_{xy} passe d'un plateau au suivant.

La valeur mesurée de i montre que c'est un entier avec une précision extraordinaire. La mesure de la résistivité en unités $(\frac{h}{e^2})$ donne exactement pour l'état $i = 1$, $\rho_{xy} = \frac{h}{e^2}$!

On définit la constante de Klitzing par :

$$R_K = \frac{h}{e^2} \tag{III-15}$$

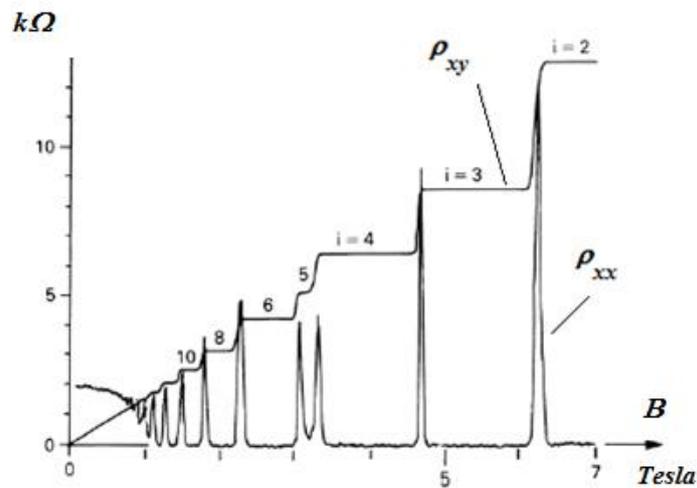


Figure III-9 : Evolution de la résistivité de Hall et de la résistivité longitudinale en fonction de B dans le cas de l'effet Hall quantique entier (d'après[13])

Cette constante constitue une nouvelle unité de mesure de la résistance électrique, à la place de l'ohm du fait de sa plus grande précision.

Depuis 1990, une valeur très précise de R_K , notée $R_{K-90} = 25812,807 \Omega$, est utilisée pour la calibration des résistances électriques partout dans le monde.

Quelques autres définitions :

- h/e^2 : est appelé quantum de résistance
- $\phi_0 = h/e$: est appelé quantum de flux ; chaque état électronique est associé à un quantum de flux
- $N_L = B/\phi_0$: est la dégénérescence d'un niveau de Landau (relation II-12), exprimée en fonction de ϕ_0 (B/ϕ_0 est également appelée densité de flux)
- $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$: est la longueur magnétique
- $\sigma = 2\pi l_B^2$: est la surface minimale « occupée » par un état quantique.
- Le produit du champ B par la surface minimale σ est égale au flux ϕ_0 (appelé quantum de flux)
- $R_c = l_B \sqrt{2n + 1}$: est le rayon cyclotron qui est une grandeur quantifiée (n est entier)

III.4.2. Mouvement quantique de l'électron

Dans cette partie, nous allons présenter une étude quantique détaillée qui nous permettra de mieux comprendre-en particulier- l'origine des niveaux de Landau. Le point de départ va être l'écriture du hamiltonien du système 2D soumis à un champ magnétique.

III.4.2.1. Hamiltonien quantique et niveaux de Landau

Pour tenir compte du champ magnétique, on doit remplacer l'opérateur impulsion \mathbf{p} par l'opérateur impulsion dynamique $\mathbf{\Pi}$ qui contient l'opérateur potentiel vecteur \mathbf{A} :

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A} \quad (\text{III-16})$$

Et dans le plan (x, y) dans lequel évolue la particule quantique, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \Pi_x &= p_x + eA_x = m^* \dot{x} \\ \Pi_y &= p_y + eA_y = m^* \dot{y} \end{aligned} \quad (\text{III-17})$$

Avec m^* la masse effective électronique.

Rappel

- On définit le potentiel vecteur magnétique \vec{A} par : $\text{rot}(\vec{A}) = \vec{B}$.

Cette définition permet de vérifier que $\text{div}\vec{B} = 0$, car $\text{div}[\text{rot}(\vec{A})] = 0$.

- L'opérateur impulsion est défini par : $p_x = -i\hbar \partial/\partial x$ et $p_y = -i\hbar \partial/\partial y$.

Si l'on tient compte de l'effet Zeeman qui lève la dégénérescence de spin, l'hamiltonien d'un électron soumis à un champ magnétique est donné par :

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m^*} \pm \frac{g\mu_B B}{2} \quad (\text{III-18})$$

Où g est le facteur de Landé, et μ_B le magnéton de Bohr.

Quel rôle pour le spin de l'électron ?

La différence d'énergie entre les niveaux de Landau est $\Delta E_L = \hbar\omega_c = e\hbar B/m^*$ (voir paragraphe III.3.2.2). Pour les **électrons libres**, cette quantité coïncide avec la différence d'énergie entre spins due à l'effet Zeeman $\Delta E_Z = g\mu_B B$, où $\mu_B = e\hbar/2m_0$ est le magnéton de Bohr, (m_0 étant la masse de l'électron libre) et $g = 2$. Dans un matériau cristallin, on doit remplacer la masse m_0 par la masse effective m^* , et le facteur g n'est plus rigoureusement égal à 2 mais peut prendre d'autres valeurs. Dans le matériau GaAs par exemple, l'énergie Zeeman ($g\mu_B B$) est environ 70 fois plus faible que l'énergie cyclotronique ($\hbar\omega_c$).

Pour cette raison, dans la suite, nous ne tiendrons pas compte de l'effet Zeeman parce que les énergies mises en jeu sont faibles. Dans ce cas précis, tout se passe comme si l'on ne tenait pas compte du spin électronique, et donc :

$$H = \frac{\Pi^2}{2m^*} = \frac{1}{2m^*} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \quad (\text{III-19})$$

Le champ magnétique sera considéré constant et perpendiculaire au plan (x, y); c'est-à-dire :

$$\overrightarrow{\text{rot}}(\vec{A}) = \vec{V} \wedge \vec{A} = B \cdot \vec{k}.$$

Cela a pour conséquence que le potentiel vecteur \vec{A} (et l'opérateur A) est une fonction linéaire des coordonnées spatiales.

Les relations de commutation canoniques qui existent entre les opérateurs position et impulsion sont :

$$[x, p_x] = [y, p_y] = i\hbar \text{ et } [x, y] = [p_x, p_y] = [x, p_y] = [y, p_x] = 0$$

Rappel

En mécanique quantique, le commutateur de deux opérateurs B et C est défini par :

$$[B, C] = BC - CB$$

Si la différence $BC - CB = 0$, c'est-à-dire $BC = CB$, on dit que les deux opérateurs commutent.

On peut montrer que $[\Pi_x, \Pi_y] = -ie\hbar B$.

Introduisons maintenant deux nouveaux opérateurs que sont l'opérateur de création \mathbf{a}^\dagger et l'opérateur d'annihilation \mathbf{a} définis par :

$$\begin{cases} \mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\Pi_x + i\Pi_y) \\ \mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\Pi_x - i\Pi_y) \end{cases} \quad (\text{III-20})$$

La relation de commutation de l'opérateur Π permet d'écrire : $[a, a^\dagger] = 1$.

Tenant compte de ce qui précède, l'hamiltonien (II-19) peut être réécrit comme suit :

$$H = \frac{\Pi^2}{2m^*} = \frac{1}{2m^*} \Pi \cdot \Pi = \hbar\omega_c \left(\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{III-21})$$

Où ω_c est la fréquence cyclotron vue au paragraphe III.3.2.2.

L'espace de Hilbert⁸ correspondant peut être construit en définissant d'abord l'état fondamental $|0\rangle$ (qui correspond à l'état fondamental de l'oscillateur harmonique classique) par : $a|0\rangle = 0$, et à poursuivre cette construction en faisant agir les opérateurs a^\dagger et a de la façon suivante :

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \text{ et } a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (\text{III-22})$$

Tenant compte des relations (II-21) et (II-22), on peut écrire :

$$H|n\rangle = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega_c \left[a^\dagger(a|n\rangle) + \frac{|n\rangle}{2} \right] = \hbar\omega_c \left[a^\dagger(\sqrt{n}|n-1\rangle) + \frac{|n\rangle}{2} \right]$$

$$H|n\rangle = \hbar\omega_c \left[\sqrt{n}a^\dagger|n-1\rangle + \frac{|n\rangle}{2} \right] = \hbar\omega_c \left[\sqrt{n}\sqrt{n}|n\rangle + \frac{|n\rangle}{2} \right] = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E_n |n\rangle$$

L'état $|n\rangle$ admet donc comme valeur propre l'énergie :

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{III-23})$$

Nous venons de démontrer le résultat déjà annoncé dans le paragraphe III.3.2.2, relation III-11.

Cette énergie est l'énergie du niveau de Landau n . Le nombre n est la valeur propre de l'opérateur $a^\dagger a$: c'est un nombre entier, positif ou nul qui correspond à l'indice du niveau de Landau.

Notons de nouveau que les niveaux de Landau sont équidistants en énergie et séparés de la même quantité $\hbar\omega_c$; c'est une conséquence de l'application d'un champ magnétique (constant).

Remarque

Nous avons traité le cas d'une particule quantique évoluant dans un plan (mouvement à deux degrés de liberté), puis nous avons abouti à un système se comportant comme un oscillateur harmonique, qui lui a un seul degré de liberté. Comment concilier ces deux résultats, apparemment non concordants ?

En fait, l'équation (III-23) donnant les niveaux d'énergie E_n est correcte d'un point de vue théorique, mais contrairement à l'oscillateur harmonique, chaque niveau d'énergie n'est pas associé à un état unique. Il y a en effet dégénérescence des états d'énergie; on reviendra sur cette propriété des niveaux de Landau plus loin.

⁸ L'espace de Hilbert est l'espace des fonctions d'onde qui représentent un système quantique donné. Voir par exemple à ce sujet l'ouvrage de référence : *Mécanique quantique, Tome 1 par A. Messiah, Ed. Dunod (1995)*.

III.4.2.2. Jauge de Landau

Pour déterminer les fonctions d'onde correspondant aux valeurs propres E_n , nous devons définir une jauge du potentiel vecteur \vec{A} qui vérifie, comme nous l'avons vu $\vec{\nabla} \wedge \vec{A} = B \cdot \vec{k}$.

Ce choix de jauge de \vec{A} n'est pas unique; nous allons discuter deux choix possibles et différents de \vec{A} .

Le premier choix consiste à écrire :

$$\vec{A} = xB\vec{j} \quad (\text{III-24})$$

Ce choix est appelé jauge de Landau. On remarque que si \vec{A} est dans ce cas invariant par symétrie de translation suivant y , il ne l'est pas suivant x et non plus par symétrie de rotation (le contraire du champ magnétique qui est invariant par symétrie de translation et de rotation dans le plan (x, y)).

L'hamiltonien (III-19) devient :

$$H = \frac{1}{2m^*} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2m^*} [p_x^2 + (p_y + eBx)^2] \quad (\text{III-25})$$

A cause du fait que nous avons une invariance de translation de jauge suivant la direction y , nous devons chercher des fonctions d'onde propres qui sont des ondes planes suivant cette direction, et de la forme :

$$\psi_k(x, y) = e^{iky} f_k(x) \quad (\text{III-26})$$

Avec $p_y = \hbar k$.

Nous devons maintenant appliquer l'hamiltonien sur ces fonctions d'onde :

$$H\psi_k(x, y) = \frac{1}{2m^*} [p_x^2 + (\hbar k + eBx)^2] \psi_k(x, y) \equiv H_k \psi_k(x, y) \quad (\text{III-27})$$

L'opérateur p_y agissant sur la fonction d'onde $\psi_k(x, y)$ a pour valeur propre $\hbar k$.

L'expression (III-27) nous est familière; en effet, H_k est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique dans la direction x mais dont le centre est déplacé par rapport à l'origine de la quantité $x_0 = -kl_B^2$. Sa fréquence est toujours égale à la fréquence cyclotron $\omega_B = eB/m^*$:

$$H_k = \frac{1}{2m^*} [p_x^2 + (\hbar k + eBx)^2] = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{m^* \omega_B^2}{2} (x + kl_B^2)^2 \quad (\text{III-28})$$

La quantité $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ est une longueur caractéristique appelée longueur magnétique; elle caractérise les phénomènes quantiques dans un champ magnétique.

Exemple: pour $B = 1T$, $l_B \approx 2,5 \times 10^{-8}m$.

Nous allons maintenant donner une expression plus explicite des fonctions d'onde. Ces fonctions d'onde dépendent en fait de deux nombres quantiques, $n \in \mathbb{N}$ et $k \in \mathbb{R}$; elles sont de la forme :

$$\psi_{n,k}(x, y) \sim e^{iky} H_n(x + kl_B^2) e^{-(x+kl_B^2)^2/2l_B^2} \quad (\text{III-29})$$

Où H_n sont les fonctions d'onde polynomiales d'Hermite de l'oscillateur harmonique⁹. Le signe \sim signifie que nous n'avons pas essayé de normaliser ces fonctions d'onde.

Le deuxième choix de jauge est, ce qu'on appelle la jauge symétrique définie par :

$$\vec{A} = -\frac{yB}{2}\vec{i} + \frac{xB}{2}\vec{j} \quad (\text{III-30})$$

Cette jauge brise la symétrie de translation symétrique dans les deux directions x et y , mais elle conserve la symétrie de rotation autour de l'origine. Cela signifie que le moment angulaire constitue un bon nombre quantique.

Une jauge symétrique telle que (III-30) est surtout utilisée pour étudier les niveaux de Landau qui apparaissent dans le cas de l'effet quantique fractionnaire (voir paragraphe III.5).

III.4.2.3. Dégénérescence d'un niveau de Landau

La fonction d'onde (III-29) dépend de deux nombres quantiques, n et k , mais les niveaux d'énergie ne dépendent que de n .

Pour étudier ce phénomène de dégénérescence, considérons une région finie du plan (x, y) qui est en fait un rectangle de côtés L_x et L_y . Nous voulons connaître le nombre d'états contenus dans ce rectangle.

Le fait que L_y soit finie est équivalent à considérer le système comme confiné dans la direction y ; cet effet a pour conséquence de quantifier le vecteur d'onde en unités de $2\pi/L_y$.

La situation est différente suivant la direction x : la raison en est que le choix de la jauge (III-24) n'a pas d'invariance translationnelle suivant x . Puisque les fonctions d'onde (III-29) sont localisées autour de $x_0 = -kl_B^2$ pour une dimension de l'échantillon suivant x , telle que $0 \leq x \leq L_x$, alors on s'attend à ce que les valeurs de k soient telles que $-L_x/l_B^2 \leq k \leq 0$. Finalement, le nombre d'états compris dans le rectangle est :

$$N_L^t = \frac{L_y}{2\pi} \int_{-L_x/l_B^2}^0 dk = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = \frac{eBS}{2\pi\hbar} \quad (\text{III-31})$$

Où $S = L_x L_y$ est l'aire du rectangle.

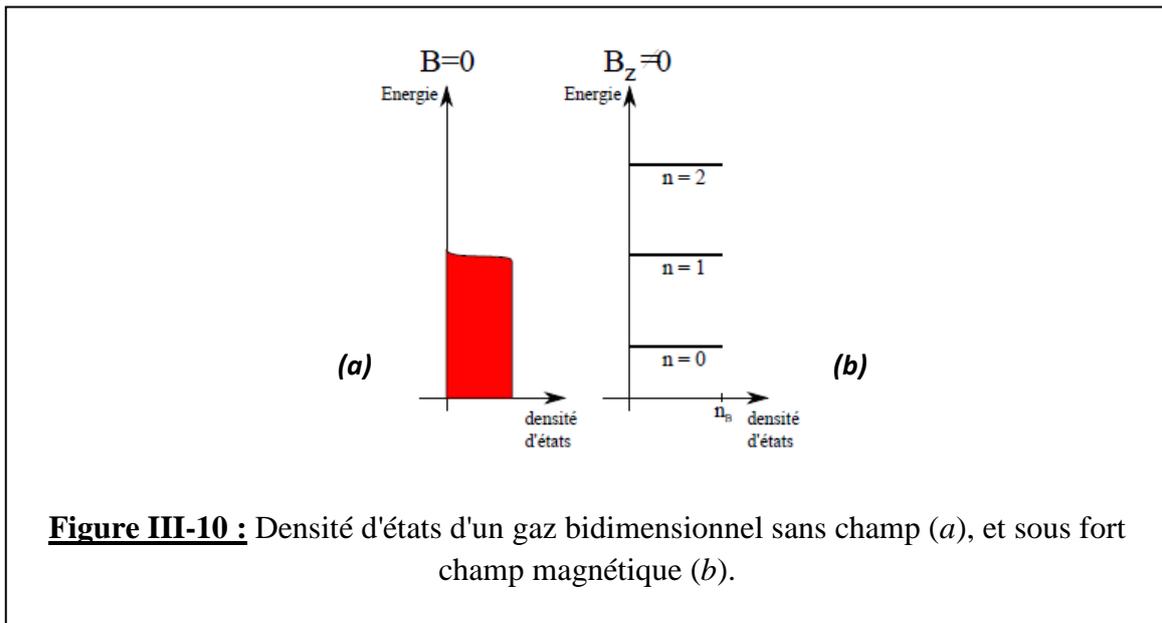
⁹ Voir à ce sujet, par exemple le site Wikipédia.

La densité d'états de chaque niveau de Landau est égale à la densité de quantum de flux (N_L) :

$$N_L = \frac{1}{2\pi l_B^2} = \frac{eB}{2\pi\hbar} = \frac{eB}{h} \quad (\text{III-32})$$

Nous avons déjà défini ces quantités dans le paragraphe III.3.2.2.

La densité d'états pour un conducteur 2D sans désordre est représentée sur la figure III.10. Lorsque le nombre d'électrons n_{el} est un multiple de N_L ($n_{el} = pN_L$), le niveau de Fermi coïncide avec le niveau de Landau d'indice p . Dans une telle situation, pour ajouter un électron supplémentaire, il faut fournir l'énergie $\hbar\omega_c$ pour commencer à remplir le niveau de Landau suivant. Avec $B = 10 \text{ T}$ et $m^* = 0,067m_0$ (hétérostructure GaAs/AlGaAs), on a $\hbar\omega_B = 17,5 \text{ meV}$, valeur beaucoup plus grande que l'énergie thermique à $T = 1,5 \text{ K}$ ($k_B T = 0,13 \text{ meV}$). Dans ce cas, on dit que le fluide électronique est incompressible (c'est-à-dire qu'il est impossible de modifier la densité d'électrons dans le conducteur), ou encore que le conducteur est non dissipatif (parce qu'il ne peut échanger d'énergie inférieure à $\hbar\omega_c$).



III.4.2. Facteur de remplissage

En raison du fait qu'ils obéissent à la statistique de Fermi-Dirac, les électrons remplissent successivement les niveaux de Landau, et il est naturel de définir un facteur de remplissage :

$$\nu = \frac{n_{el}}{N_L} = \frac{n_{el}\phi_0}{B} \quad (\text{III-33})$$

Où n_{el} est la densité (ou concentration) électronique. D'après cette définition, le facteur de remplissage représente le nombre d'électrons par unité de flux traversant l'échantillon. L'existence de plateaux peut être comprise dans le contexte de la quantification de Landau.

Nous allons comprendre sur l'exemple suivant, la relation entre le facteur de remplissage ν et la dégénérescence N_L .

Comme son nom l'indique, le facteur de remplissage donne le nombre de niveaux de Landau qui sont occupés. Pour des valeurs élevées du champ magnétique, N_L devient supérieure à la concentration des n_{el} des électrons, et tous les électrons se trouvent dans le niveau de Landau le plus bas ; dans ce cas $\nu < 1$ (figure III-11c). Une diminution du champ magnétique B induit automatiquement un rétrécissement de l'espacement inter-niveaux ($\hbar\omega_c$) et une diminution de N_L , puisque ces deux grandeurs sont proportionnelles à B .

Pour une valeur $B = B_1$ (figure III-11b), le niveau de Landau le plus bas est exactement rempli, c'est-à-dire que $\nu = 1$, car le nombre de places disponibles est égal de façon exacte au nombre d'électrons : $N_L(B_1) = B_1/\phi_0 = n_{el}$.

Une réduction du champ magnétique à une valeur inférieure à B_1 va obliger quelques électrons à passer sur le niveau de Landau supérieur (figure III-11a). Et ce, à cause du principe de Pauli, puisque le nombre de places disponibles est inférieur au nombre d'électrons : $N_L(B_1) < n_{el} \Rightarrow \nu > 1$.

Eventuellement, on peut appliquer un champ d'intensité B_2 pour lequel les deux niveaux de Landau les plus bas vont se remplir exactement, c'est-à-dire que chacun des deux niveaux de dégénérescence $N_L(B_2) = B_2/\phi_0$ va comporter $n_{el}/2$ électrons : $N_L(B_2) = n_{el}/2 \Rightarrow \nu = 2$.

De manière générale, pour tout entier i , il y a un champ magnétique d'intensité :

$$B_i = hn_{el}/ie \quad \text{(III-34)}$$

Pour lequel les i plus bas niveaux de Landau sont exactement remplis, et tous les niveaux supérieurs sont vides.

Dans l'expression (III-14) de la résistance de Hall, i est la partie entière du facteur de remplissage ν : $i = [\nu]$.

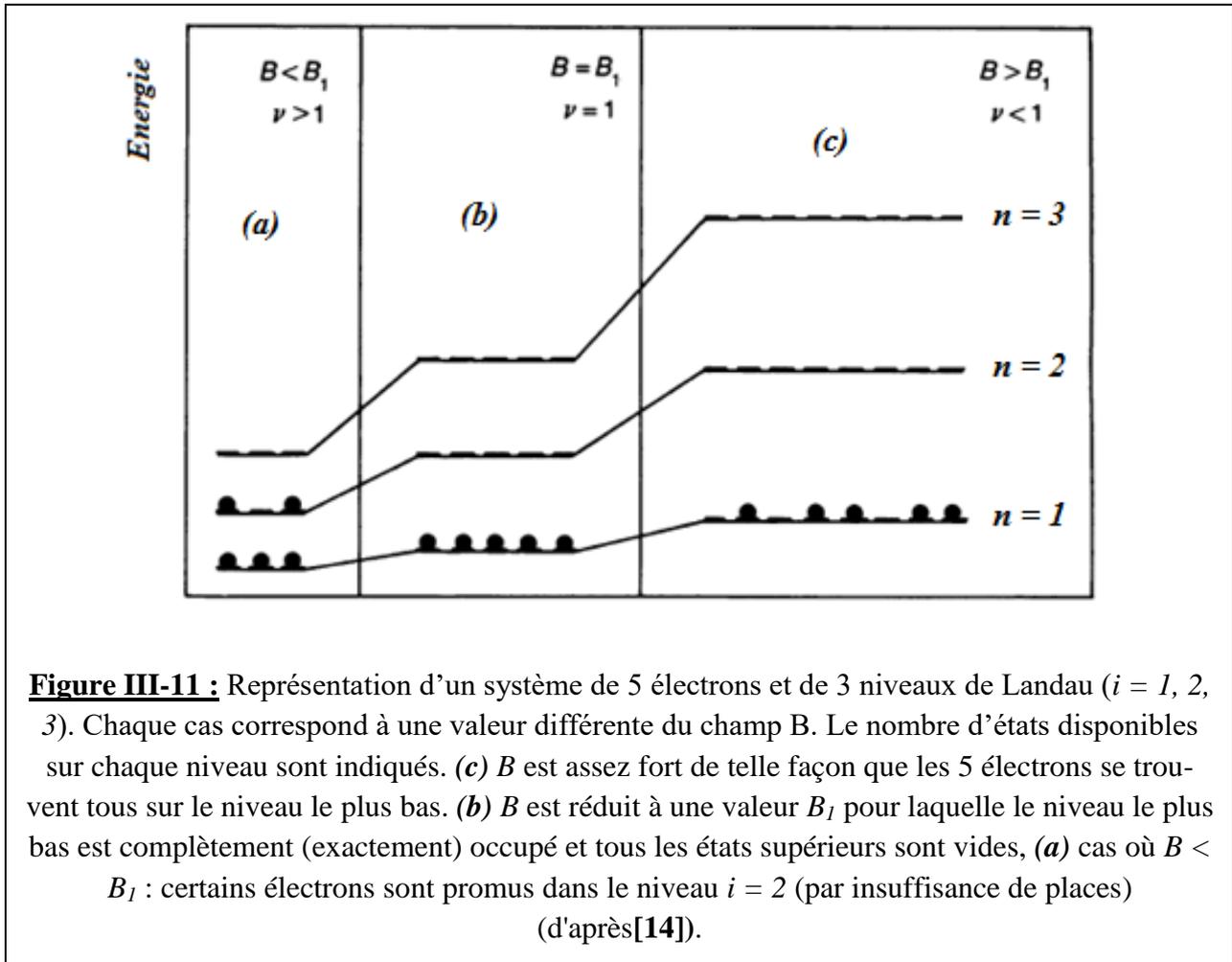
Dans l'EHQE, le nombre i est en fait égal au nombre de niveaux **exactement remplis** !

Pour faire varier le remplissage des niveaux de Landau, il faut soit faire varier B , soit faire varier la densité électronique n_{el} .

Pour un conducteur parfait (c'est-à-dire sans désordre), lorsque ν est **entier**, on peut montrer en tenant compte des expressions III-33 et III-34) que :

$$\begin{cases} R_{xx} = R_L = 0 \\ R_{xy} = \mathcal{R}_H = \frac{h}{\nu e^2} \end{cases} \quad \text{(III-35)}$$

En d'autres termes, la quantification de la résistance de Hall (\mathcal{R}_H) n'existe que pour les valeurs entières de ν ; il n'y a pas de plateau de résistance pour un conducteur sans désordre.



III.4.3. Les effets du désordre

Les plateaux observés dans l'EHQE (figure III-9) doivent leur existence au désordre. L'effet (largeur des plateaux) tend à disparaître pour des échantillons de plus en plus purs. Le désordre joue donc un rôle essentiel.

Nature du désordre : il est dû au potentiel électrostatique induit par les impuretés de substitution à l'origine du dopage du semi-conducteur.

En introduisant la notion de quantification de Landau, nous avons supposé que le gaz d'électrons était constitué d'électrons libres (ou quasi-libres). Mais en réalité, on doit également prendre en considération la localisation des électrons à cause des impuretés présentes dans le réseau cristallin. De telles impuretés introduisent un désordre dans le réseau en créant des puits de potentiel qui piègent les électrons et les empêchent donc de participer à la conduction électronique (figure III-12). Entre

ces états localisés, existent des états étendus ou délocalisés situés au centre des niveaux de Landau (autour des niveaux en tirets sur la figure III-12). Ces derniers états assurent le transport électronique et interviennent dans l'expression de la résistance longitudinale R_L . En réalité, l'explication du comportement de la résistance longitudinale (ou de la résistivité ρ_{xx}) que montre la figure III-9 est quelque peu complexe.

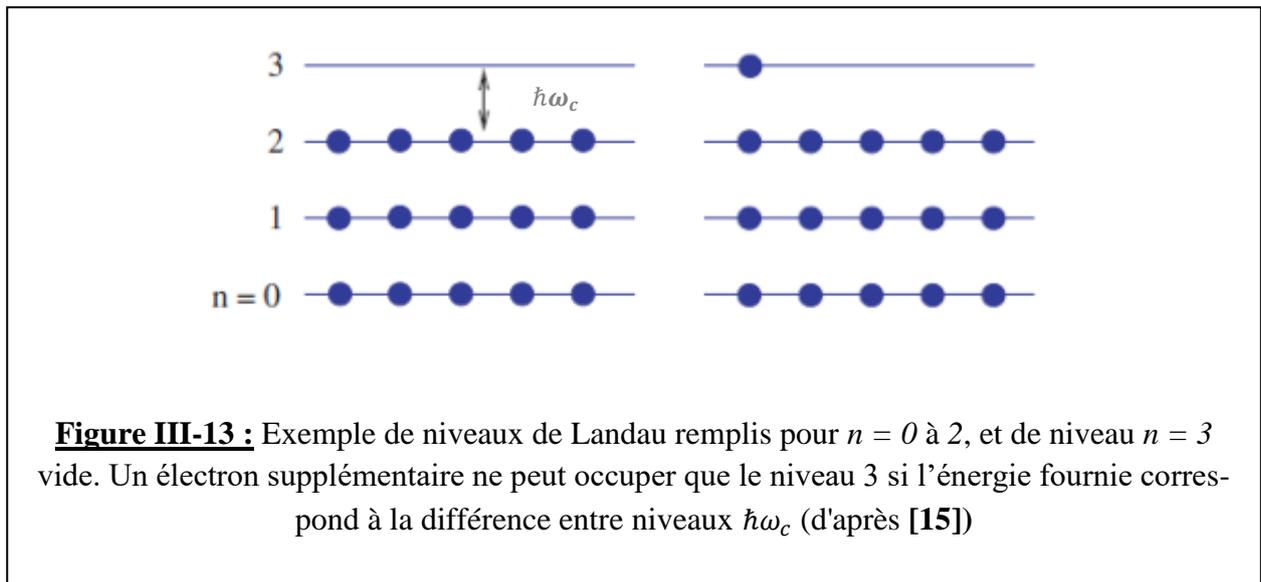
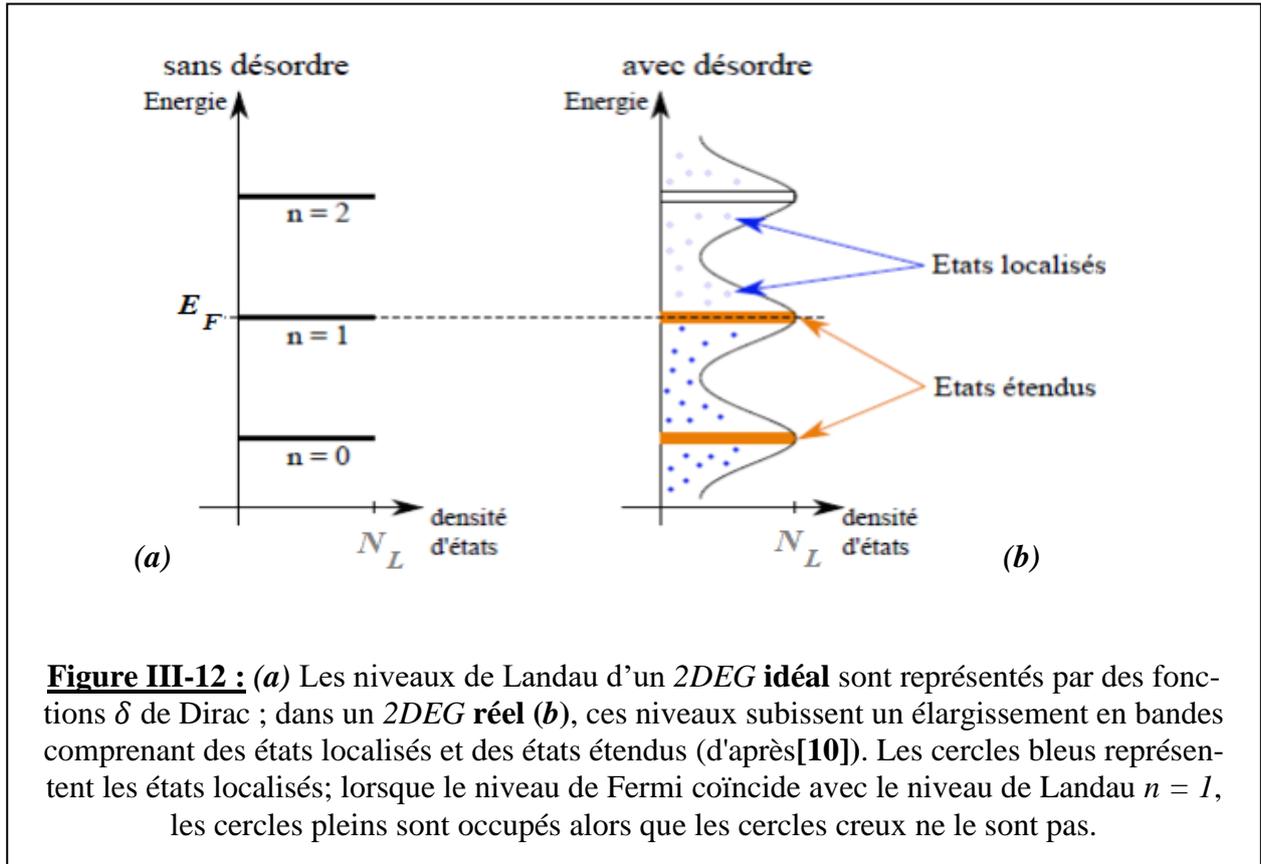
Un état étendu est réparti dans tout le système. En revanche, un état localisé est limité à une région de l'espace.

En pratique, cela signifie que les échantillons présentant l'effet Hall quantique doivent en réalité être très propres. Nous avons cependant besoin de désordre, **mais pas trop de désordre!** Le spectre d'énergie en présence de ce faible désordre devrait modifier les niveaux quantifiés de Landau de l'image familière de la figure III-12a au spectre plus large de la figure III-12b.

Les propriétés d'un niveau de Landau, d'un point de vue électronique, doivent être assez différentes selon que toutes les « cases » sont occupées (niveau de remplissage entier : $\nu = i$) ou non (niveau de remplissage non-entier : $\nu \neq i$). A $\nu = i$, c'est-à-dire quand i niveaux de Landau sont **complètement remplis**, on observe l'EHQE : un électron qu'on ajoute dans ce système (en lui fournissant une énergie minimale égale à $\hbar\omega_c$), est forcé d'occuper un niveau supérieur à cause du principe de Pauli, qui interdit à deux électrons d'occuper le même état quantique (figure III-13). En présence d'impuretés (et si les énergies thermique et électrique sont très faibles devant $\hbar\omega_c$), cet électron dans un niveau supérieur se place de préférence dans un puits du potentiel d'impuretés et reste donc piégé. Pour cette raison, il ne peut contribuer au transport électronique mesuré par la résistance \mathcal{R}_H , **laquelle reste donc accrochée à sa valeur initiale.**

On observe, par ailleurs sur la figure III-9, que lorsque B diminue :

- La largeur des plateaux diminue au fur et à mesure jusqu'à disparaître quand $B \rightarrow 0$: la résistance de Hall retrouve un comportement classique de variation linéaire (voir chap. II)
- \mathcal{R}_H peut diminuer lorsque l'énergie thermique ($k_B T$) devient de plus en plus importante ; des électrons peuvent alors être thermiquement excités dans des niveaux supérieurs et l'effet quantique disparaît. La différence entre niveaux de Landau ($\hbar\omega_c$) devient de plus en plus petite et une bande d'énergie se reconstitue à la place de niveaux d'énergie discrets.
- Le remplissage des niveaux étant fixé par le champ B, ce piégeage d'électrons donne lieu aux paliers (plateaux) dans la résistance de Hall en fonction du champ [16].



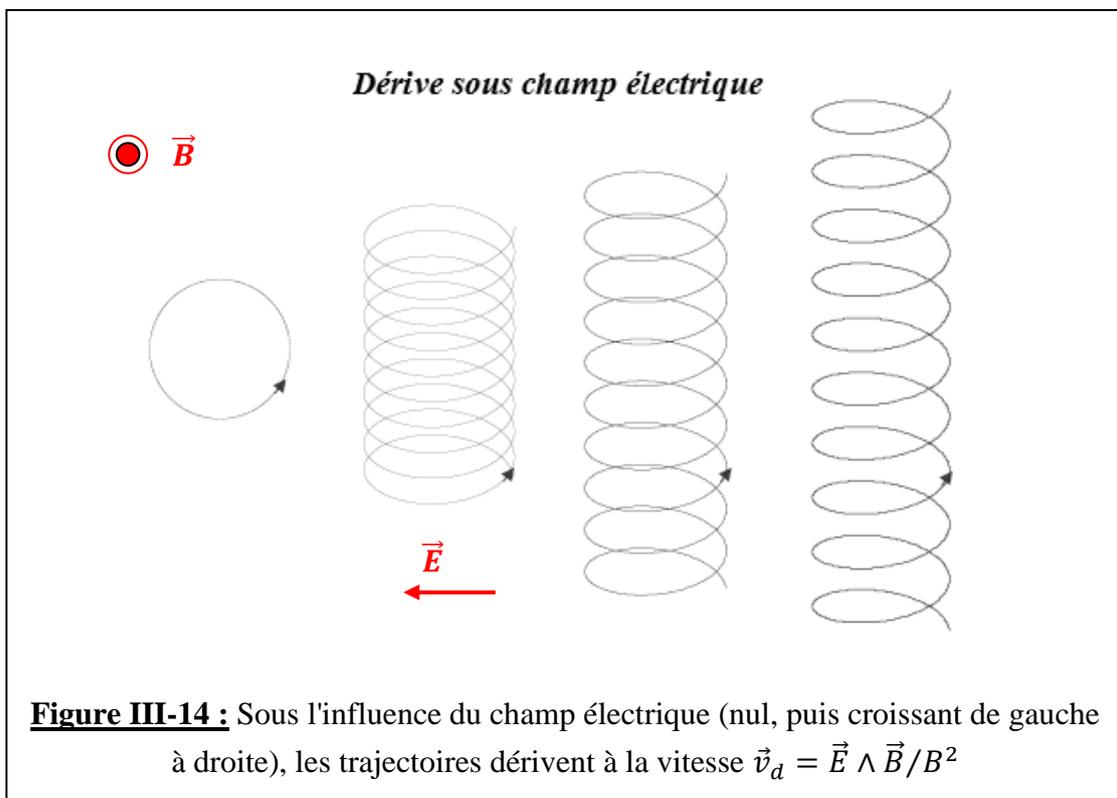
Pour discuter des effets du désordre, commençons par observer le déplacement d'un électron en, présence d'un potentiel aléatoire $V(\vec{r})$ de désordre qui modélise l'influence des impuretés dans le conducteur.

On va supposer que ce potentiel représentant l'influence des défauts (impuretés) vérifie deux conditions : **1.** il est faible par rapport à l'écart entre les niveaux de Landau (1), et **2.** Les variations spa-

tiales de ce potentiel sont lentes devant le rayon cyclotron, afin que la quantification en niveaux de Landau ne soit pas affectée (2). Ces conditions s'écrivent donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \quad V \ll \hbar\omega_c \\ (2) \quad |\vec{\nabla}V| \ll \frac{\hbar\omega_c}{l_B} \end{array} \right. \quad \text{(III-36)}$$

Alors localement une trajectoire cyclotron est soumise à un champ électrique $\vec{E} = \frac{1}{e}\vec{\nabla}V$ et acquiert une vitesse de dérive $\vec{v}_d = \vec{E} \wedge \vec{B}/B^2$.¹⁰ Nous avons montré l'influence de la vitesse de dérive sur les trajectoires cyclotron sur la figure III-14.



Sur la figure III-15, nous avons représenté les courbes de niveaux du potentiel V qui sont des équipotentielles. Le signe (+) représente un maximum local du potentiel et le signe (−) un minimum local.

Ainsi les orbites cyclotron peuvent rester piégées le long des équipotentielles comme on le voit sur la figure III-14. Les électrons se déplacent alors suivant les équipotentielles selon un mouvement qui se superpose au mouvement cyclotron.

¹⁰ Remarque : ne pas confondre le potentiel électrostatique $V_{\text{él}}$ tel que $\vec{E} = -\vec{\nabla}V_{\text{él}}$ et l'énergie potentielle V . On a $V = qV_{\text{él}} = -eV_{\text{él}}$ de telle façon que $\vec{E} = \frac{1}{e}\vec{\nabla}V$.

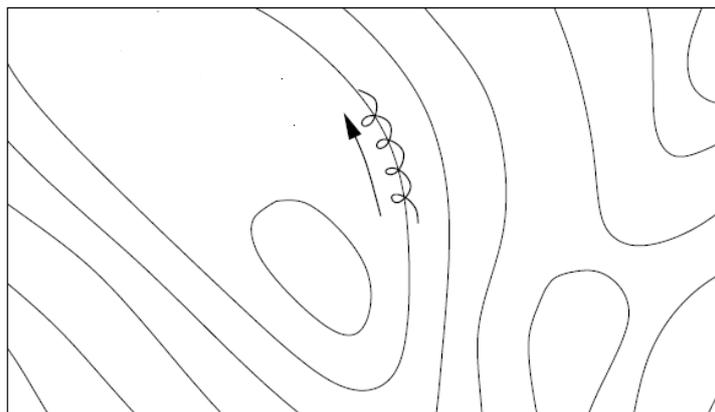


Figure III-15 : Mouvement des électrons dans un champ magnétique en présence d'un potentiel d'impuretés

Ils se déplacent dans le sens inverse des aiguilles d'une montre autour des maxima (+), et dans le sens horaire autour des minima (-).

Ces trajectoires sont donc localisées par le potentiel de désordre et ne peuvent contribuer au transport électronique. Pourtant, la résistance longitudinale est nulle ! : il n'y a pas de chute de potentiel le long de la direction x . Ce qui nous amène à nous poser la question suivante : comment le courant est-il transporté dans la direction x ?

C'est là qu'interviennent les états de bord !

III.4.4. Les états de bord

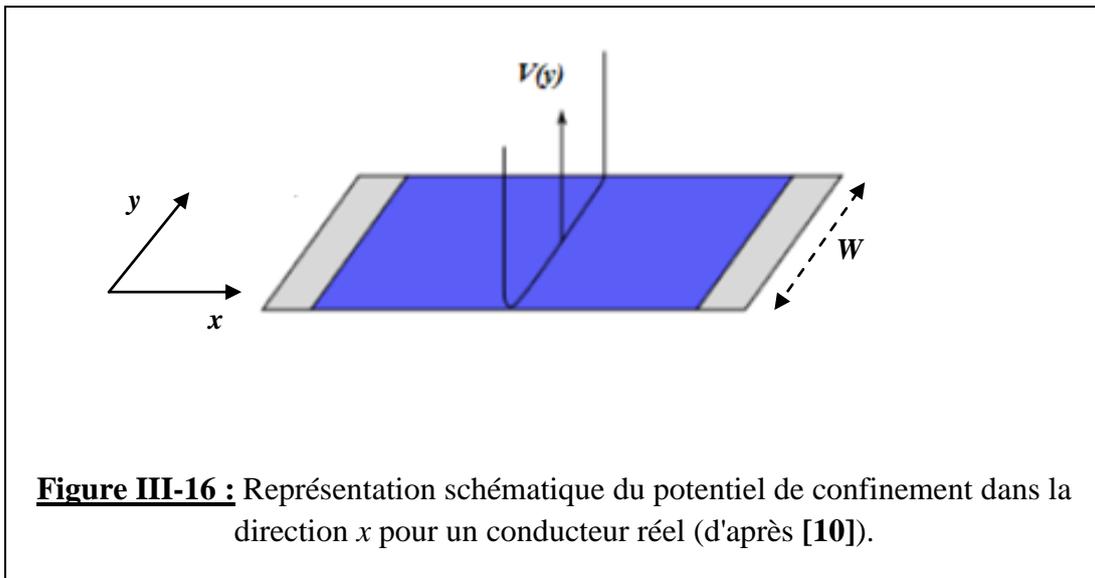
Nous avons vu que la formation de plateaux de résistance peut être expliquée par le désordre introduit par les impuretés présentes dans le matériau, et qui crée des états localisés et des états étendus. Mais cette théorie a été élaborée pour un échantillon (ou conducteur) sans tenir compte de ses dimensions finies.

Ce qui caractérise un bord, c'est l'existence d'un potentiel $V(y)$ qui confine les électrons dans l'échantillon (c'est-à-dire qui empêche les électrons de "sortir" de l'échantillon). Ce potentiel,

représenté sur la figure III-16 a pour expression :
$$V(y) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < y < W \\ \infty & \text{pour } y \leq 0 \text{ ou } y \geq W \end{cases}$$

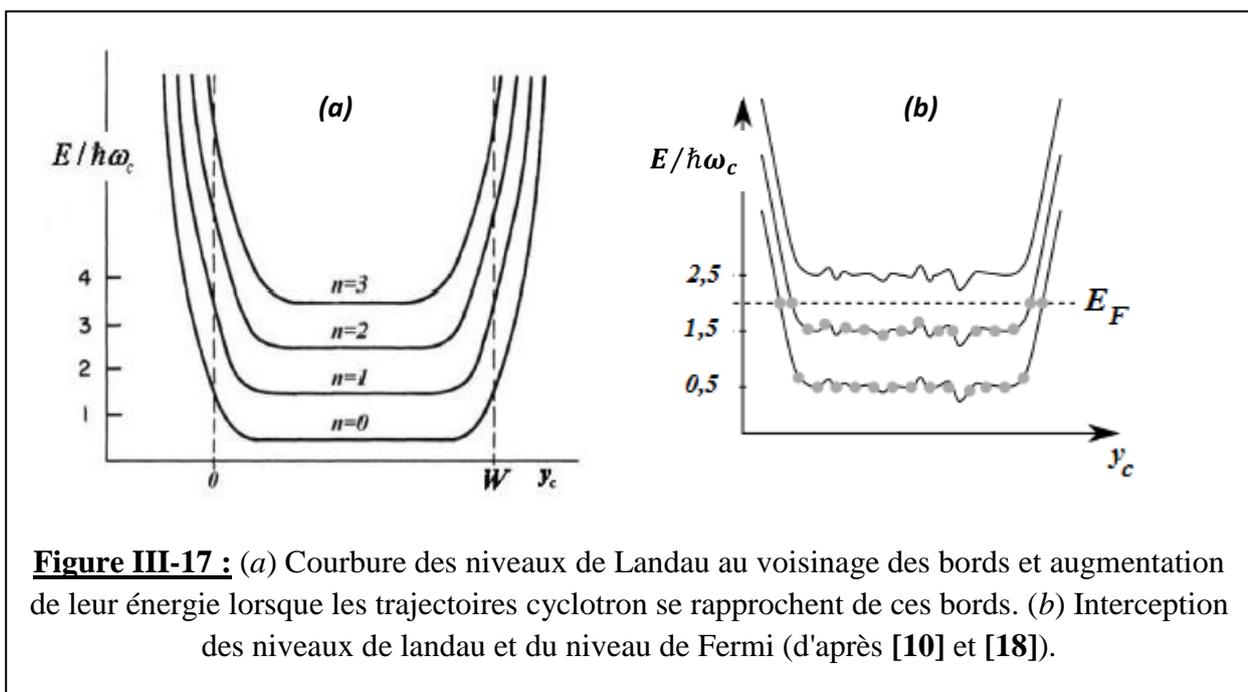
L'hamiltonien en présence d'un champ magnétique et d'un potentiel extérieur devient :

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*} + V(y) \quad (\text{III-37})$$



Loin des bords du conducteur, c'est-à-dire dans le "bulk", le potentiel $V(y)$ de confinement est nul. Près des bords, il faut tenir compte de ce potentiel de confinement; ce potentiel a pour effet de courber chaque niveau de Landau au voisinage des bords (figure III-17a).

Considérons le cas illustré sur la figure III-17b pour lequel le niveau de Fermi se situe entre deux niveaux de Landau **dans le "bulk"**. En raison de la courbure sur les bords, les niveaux de Landau interceptent le niveau de Fermi. On a donc un nombre d'états finis au niveau de Fermi sur les bords du conducteur : ce sont **les états de bord** [10, 19].



Près des bords, l'énergie augmente et devient $E_{nk} = E_n[y_c(k)] = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + V(y_c)$, où $y_c = kl_B^2$ est la distance entre un bord et le centre de l'orbite cyclotron (on rappelle que $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ est la

longueur magnétique). On retrouve $E_{nk} = E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)$ au centre de l'échantillon, lorsqu'on fait $V = 0$. k est le vecteur d'onde suivant la direction x .

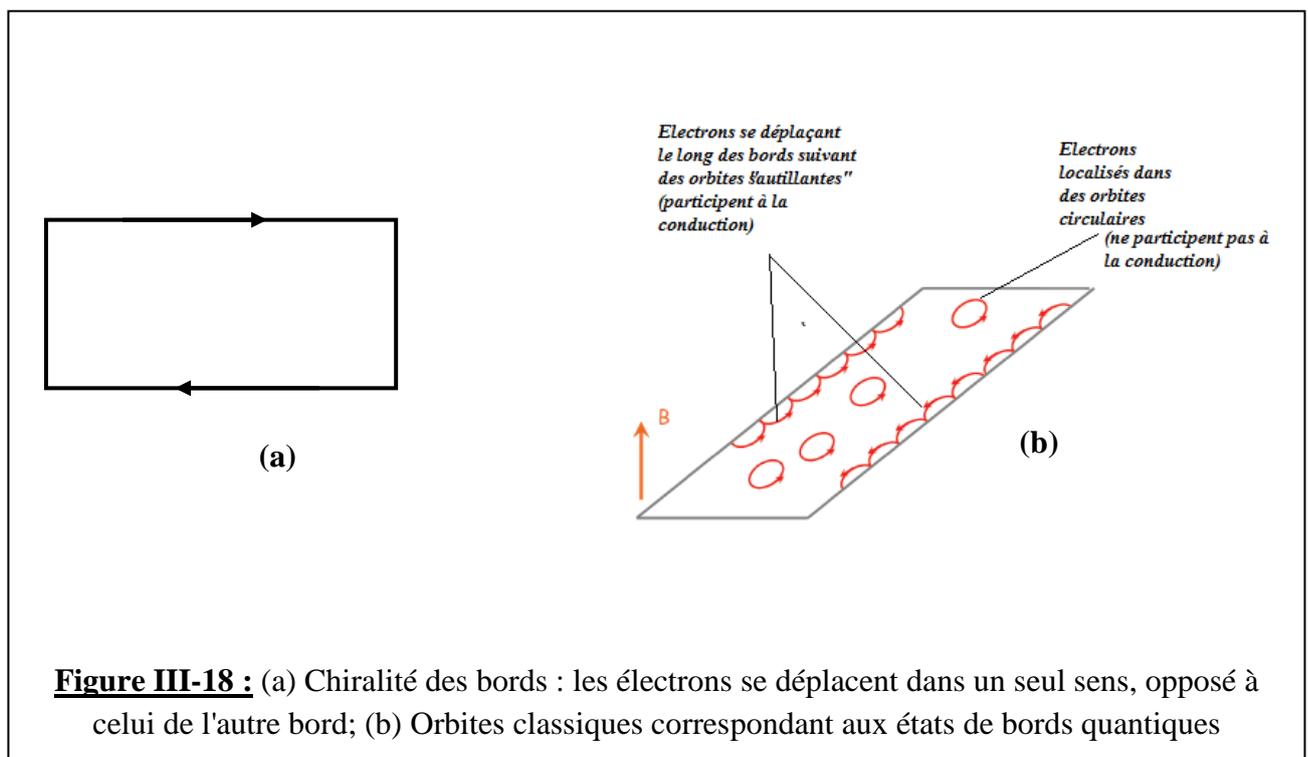
On peut montrer que les électrons vont avoir une vitesse longitudinale (c'est une vitesse de groupe), de sens opposé sur chacun des bords. Cette vitesse a pour expression :

$$v_{g,nk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dV}{dk} \quad \text{(III-38)}$$

Où $\frac{dV}{dk}$ est nul partout sauf au voisinage des bords de l'échantillon.

Le nombre d'états à l'énergie de Fermi est déterminé par l'équation $E_F = E_{nk}$. Lorsque l'énergie de Fermi E_F se trouve entre deux niveaux de Landau (comme sur la figure III-17), le nombre N de valeurs de k qui satisfont l'équation $E_F = E_{nk}$ correspond au nombre d'états à l'énergie de Fermi.

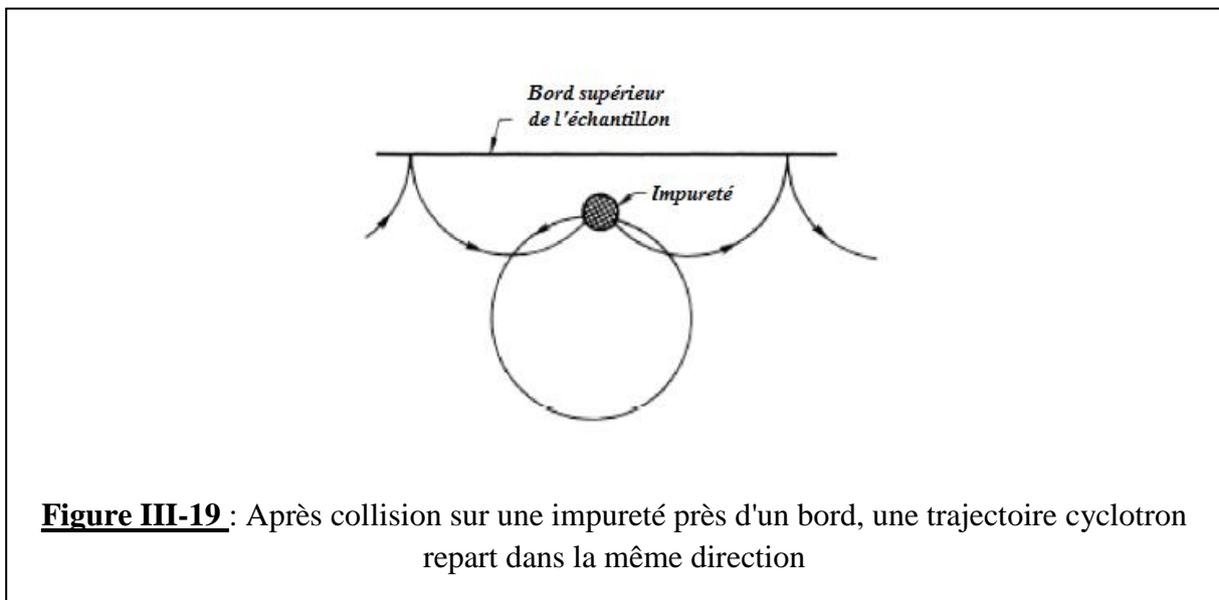
Ainsi l'effet Hall quantique, c'est-à-dire l'apparition de plateaux pour les valeurs de la résistance transverse \mathcal{R}_H ou R_{xy} peut aussi être expliqué par la conduction au niveau des états de bord, et les bords de l'échantillon sont dits chiraux (c'est-à-dire que les électrons tournent dans le sens imposé par le champ \vec{B} sur les bords, figure III-18a). Le mouvement des électrons sur les bords peut se décomposer en un mouvement circulaire de pulsation ω_c et un mouvement linéaire le long des bords (figure III-18b).



III.4.5. Expressions de la résistance et états de bord

Si les états de volume sont piégés par le potentiel de désordre, les états de bord sont délocalisés et ne sont pas sensibles au désordre. Cela se comprend facilement à l'aide de la figure III-19 qui montre qu'une trajectoire près des bords repart toujours dans la même direction même après collision sur une impureté. La transmission associée à un canal de bord est donc parfaitement égale à 1. De plus, nous avons vu que les états de bord sont des états chiraux, c'est-à-dire que les états d'un bord portent un courant dans une direction donnée et ceux de l'autre bord portent un courant dans l'autre direction (figure III-18).

Seuls ces états de bords peuvent contribuer au courant, les trajectoires de volume étant piégées par le désordre. Ainsi le système est isolant en volume et parfaitement conducteur sur les bords, à travers N canaux de bord : chaque canal est associé à un niveau de Landau rempli dans le volume.



Nous allons, sans faire trop de calculs, donner l'expression du courant porté par ces états de bord, puis de la résistance du conducteur.

III.4.5.1. Conducteur 2D à deux terminaux

C'est un conducteur représenté sur la figure III-20. Il comprend deux réservoirs.

a) Conducteur parfait

Il est représenté sur la figure III-20a.

- **Cas où $B = 0$**

Le courant a pour expression, dans ce cas :

$$I = \frac{e}{h} \Delta\mu \sum_i T_i \quad (\text{III-39})$$

Où $\Delta\mu$ est la différence de potentiel entre les deux réservoirs ($\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1 = eV$). Comme le conducteur est supposé parfait $\rightarrow T_i = 1$, pour tout i . D'où :

$$I = \frac{e}{h} \Delta\mu N = \frac{e^2}{h} V N \quad (\text{III-40})$$

Où N est le nombre de modes.

- **Cas où $B \neq 0$ et orthogonal**

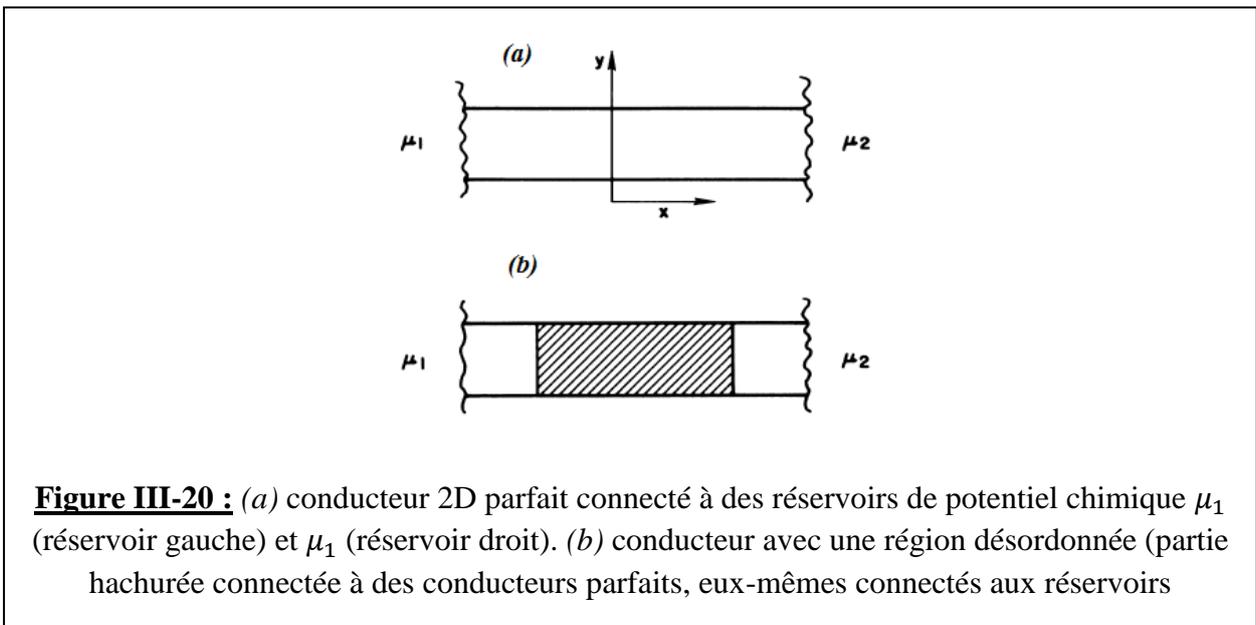
La conduction passe, dans ce cas, par les états de bord. On peut exprimer l'intensité passant à travers l'échantillon de la même manière que dans le cas précédent ($B = 0$) à N modes i , à ceci près que le courant est cette fois-ci localisé aux bords et que le nombre de modes N est en fait le nombre d'états de bord; on a donc pour la résistance :

$$R = \frac{V}{I} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{N} \quad (\text{III-41})$$

Cette résistance n'est pas la résistance de Hall, mais la résistance dite à "2 terminaux" ou à "2 fils".

Notons aussi que N dépend du champ magnétique : plus B augmente, moins il y a de niveaux de Landau en-dessous de l'énergie de Fermi E_F , et donc plus N est petit.

La situation que nous venons de présenter est bien sûr une **situation idéale**, où les impuretés sans inexistantes, donc sans phénomènes de diffusion des porteurs de charge.



b) Conducteur avec diffusion élastique

Soit maintenant une région désordonnée (figure III-20b), connectée de part et d'autre à des conducteurs parfaits à leur tour connectés à des réservoirs. Il faut cette fois prendre en considération les coefficients de transmission T_{ij} et de réflexion R_{ij} entre les modes i et j . Le courant total transmis est donné par :

$$I = \frac{e}{h} \Delta\mu \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij} = \frac{e^2}{h} V \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij} \quad (\text{III-42})$$

Sachant que $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1 = eV$. On en déduit alors la résistance puis la conductance du conducteur :

$$R = \frac{V}{I} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{T} \quad (\text{III-43})$$

Avec $T = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij}$, la transmission totale à travers la région désordonnée.

En présence de B , la présence d'impuretés et donc de diffusion a pour effet de "mélanger" les différents canaux sans changer la direction du courant (il y a diffusion vers l'avant). Si ce n'est pas le cas, on dit qu'il y a **rétrodiffusion** : un électron à un bord se déplaçant du contact droit vers la droite peut changer de direction de propagation et se propager vers la gauche mais le long du bord opposé pour revenir au contact droit; il doit donc franchir transversalement l'échantillon. Ce phénomène de rétrodiffusion, n'est possible que si les bords sont très proches spatialement l'un de l'autre (on dit qu'il y a couplage des bords opposés). L'absence de rétrodiffusion donne lieu à l'apparition de l'effet Hall quantique et donc de plateaux. A l'inverse, la présence de rétrodiffusion surtout en présence d'un champ magnétique élevé, conduit à la disparition des plateaux et donc de l'effet Hall quantique.

Dans le cas de la diffusion élastique, tous les coefficients de réflexion sont nuls, et la matrice de diffusion (qui représente le phénomène de diffusion dans la région désordonnée) a la propriété que la transmission de tous les états de bord dans l'état de bord i est égale à 1 :

$$T_i = \sum_{j=1}^N T_{ij} = 1 \quad (\text{III-44})$$

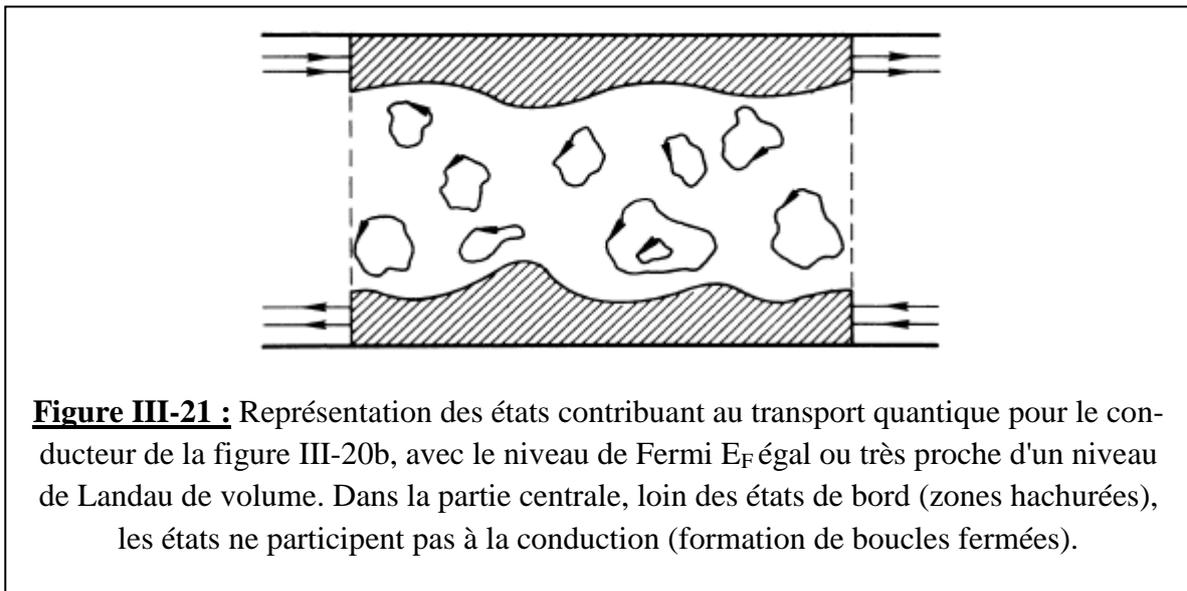
On retrouve donc la même expression de la résistance : $R = \frac{h}{e^2} \frac{1}{N}$ (c.f. expression III-41), puisque $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij} = N$.

c) Conducteur avec diffusion inélastique

Nous allons brièvement discuter de la diffusion inélastique dans le cas où l'énergie de Fermi est proche de l'énergie du centre d'un niveau de Landau. Sur la figure III-21, nous avons représenté le volume et les bords de l'échantillon.

Nous avons vu plus haut qu'en l'absence de diffusion inélastique, seuls les états de bord participent à la conduction de courant.

En présence de diffusion inélastique, il peut se produire des transitions entre états de volume (transition d'une boucle à une autre boucle voisine). Ces états de volume sont caractérisés par des énergies légèrement différentes. Ainsi, pour qu'elles puissent se produire, ces transitions doivent être activées et concernent les énergies proches du centre du niveau de Landau. On a alors affaire à une conductance activée. Pour de telles énergies, les états de bord contribuent également à la conductance.



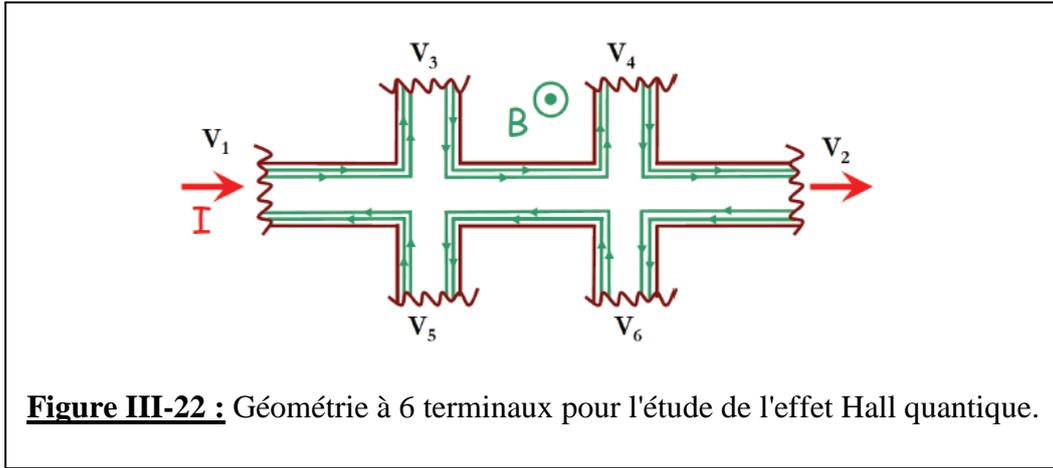
Quel effet produit la diffusion inélastique ?

Elle a pour effet, quand elle existe, de provoquer une déformation des plateaux de la conductance de Hall.

III.4.5.2. Conducteur 2D à six terminaux

On utilisera la géométrie de la figure III-22 à six terminaux. Les terminaux (1) et (2) sont les terminaux d'injection du courant, et les autres terminaux servent à mesurer les tensions électriques. Les mesures de tension donnent accès à la résistance longitudinale $R_L = (V_3 - V_4)/I$ et la résistance de Hall $\mathcal{R}_H = (V_3 - V_5)/I$. La résistance dite "2-terminaux" (ou "2-fils") est donnée par $R_{2t} = (V_1 - V_2)/I$.

Comme la transmission des états de bord est parfaite (transmission $\mathbf{T} = \mathbf{1} \leftrightarrow$ transport balistique), on a $V_1 = V_3 = V_4$ et $V_2 = V_5 = V_6$. La résistance longitudinale est donc nulle : $R_L = (V_3 - V_4)/I = (V_5 - V_6)/I = 0$.



Qu'en est-il du courant dans la direction x ?

Le courant sur le bord supérieur est dû aux électrons émis par le réservoir (1) qui est porté au potentiel V_1 . Pour un canal de bord (qui correspond, comme nous l'avons mentionné plus haut, à un niveau de Landau en volume), de transmission parfaite ($T = 1$), on note ce courant I_{\rightarrow} . Le courant parcouru dans l'autre direction le long de l'autre bord est émis par le réservoir (2) porté au potentiel V_2 ; il est noté I_{\leftarrow} . Le courant total est : $I = I_{\rightarrow} + I_{\leftarrow}$: il est nul si les deux réservoirs sont au même potentiel ($V_1 = V_2$). A basse température, le courant total porté par **un** canal de bord est donné par la formule de Landauer :

$$I = \frac{e^2}{h} (V_1 - V_2) \quad (\text{III-45})$$

Et puisque $V_3 = V_1$ et $V_5 = V_2$, la résistance de Hall est quantifiée. Pour une direction de spin, on a :

$$\mathcal{R}_H = (V_3 - V_5)/I = \frac{h}{e^2} \quad (\text{III-46})$$

Pour N canaux de bord, le courant est simplement la somme des contributions identiques de ces différents canaux et la résistance de Hall devient :

$$\mathcal{R}_H = (V_3 - V_5)/I = \frac{h}{Ne^2} \quad (\text{III-47})$$

On doit également noter que la résistance "2-terminaux" est également quantifiée :

$$R_{2t} = (V_1 - V_2)/I = \frac{h}{Ne^2} \quad (\text{III-48})$$

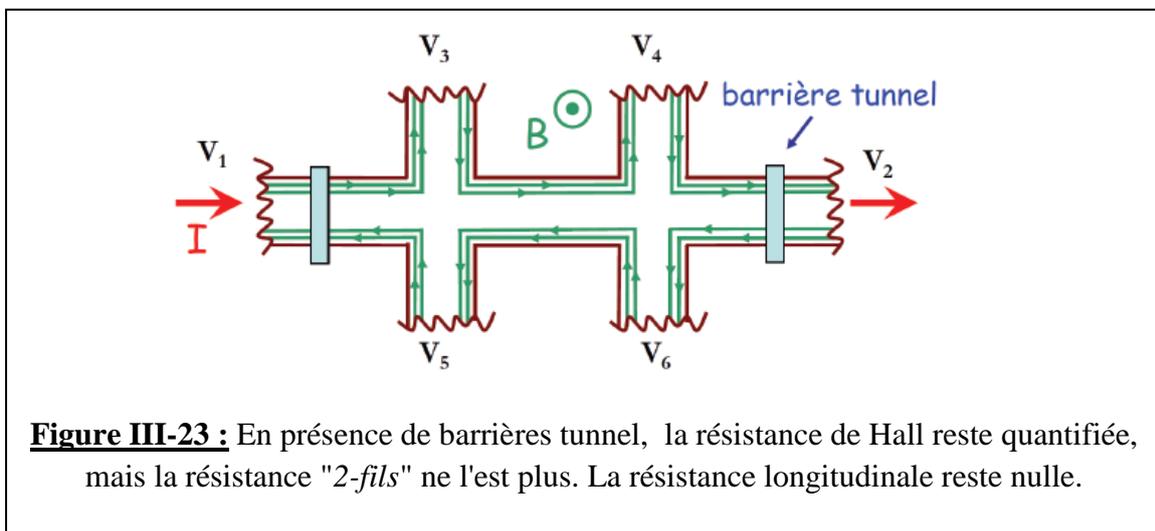
Si la transmission aux contacts devient imparfaite (existence de barrières tunnel aux contacts), R_{2t} n'est plus quantifiée, mais la résistance de Hall \mathcal{R}_H reste quantifiée.

On montre par exemple, que dans la géométrie de la figure III-23 (où $N = 2$), la résistance "2 terminaux" et la résistance de Hall sont données par :

$$\begin{cases} R_{2t} = \left(\frac{N^2 - R^2}{NT^2} \right) \frac{h}{e^2} \\ R_H = \frac{h}{Ne^2} \end{cases} \quad (\text{III-49})$$

Où T et R sont les coefficients de transmission et de réflexion des deux barrières tunnel, avec $T + R = N$.

Le fait que R_H reste quantifiée (même si la transmission n'est pas parfaite), fait que la quantification de la conductance de Hall est une propriété beaucoup plus "robuste" que la quantification de la conductance longitudinale.



III.4.6. Origine des plateaux

Nous devons maintenant essayer de comprendre pourquoi on observe des plateaux. C'est-à-dire, nous devons comprendre pourquoi, lorsque le champ B ou lorsque le nombre de porteurs de charge n_{el} sont modifiés, la résistance de Hall reste constante.

La figure III-24 va nous aider à comprendre le comportement de R_H et de R_L , et donc expliquer l'existence des plateaux.

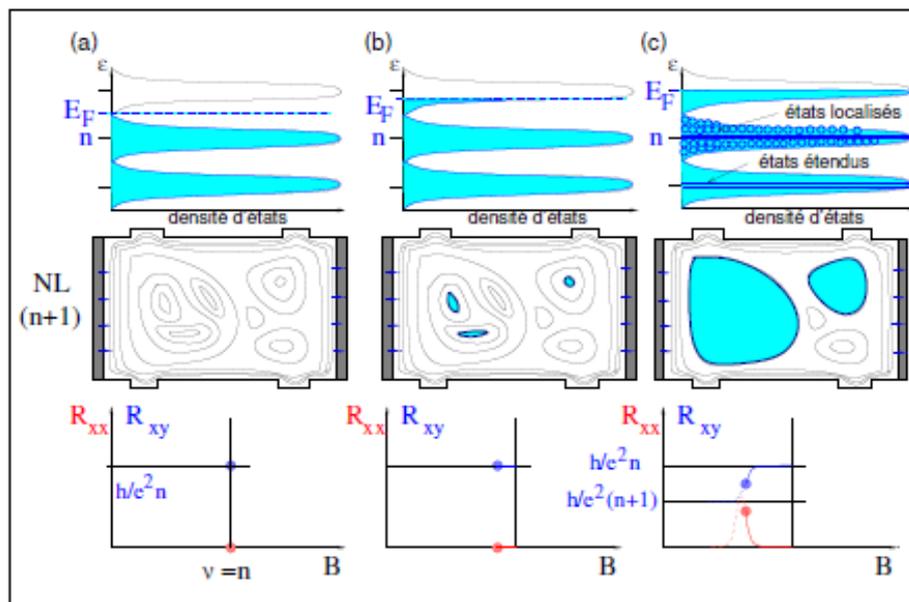


Figure III-24 : Explication de l'observation des plateaux dans l'effet Hall quantique (d'après [19])

Commentaires de la figure III-24 :

- **La première ligne** montre les niveaux de Landau (NL) élargis par les impuretés et leur remplissage, indiqué par le niveau de Fermi E_F .
- **la deuxième ligne** représente l'échantillon vu d'en haut, avec les équipotentielles et le remplissage électronique du NL ($n + 1$),.
- **La troisième (et dernière) ligne** montre schématiquement les courbes de résistance (longitudinale en couleur rouge et de Hall en couleur bleue).

La figure se lit par colonnes qui représentent le système lorsqu'on fait varier le facteur de remplissage ν :

- **La première colonne (a)** représente le système à remplissage entier ($\nu = n$), où le niveau de Fermi E_F se trouve exactement entre les NL (n) et ($n + 1$), le dernier état étant non occupé. La résistance de Hall est donc $\mathcal{R}_H = h/ne^2$, et la résistance longitudinale s'annule
- **La deuxième colonne (b)** montre le système avec un faible remplissage du NL ($n + 1$), où les électrons occupent les puits du potentiel (de désordre) dans l'échantillon et ne contribuent pas au transport électronique. Comme cette situation se produit lorsqu'on baisse légèrement le champ ma-

gnétique par rapport à sa valeur correspondant à $\nu = n$, les résistances (qui mesurent précisément le transport électronique) restent accrochées à leurs valeurs initiales.

- **La troisième et dernière colonne (c)**, montre le NL ($n + 1$) à demi-rempli : les équipotentielles connectent les bords opposés, ce qui a pour effet une rétro-diffusion des électrons, c'est-à-dire qu'un électron injecté par un contact revient à ce dernier : le système change d'un régime balistique à un régime diffusif. Dans ce cas, la résistance longitudinale devient différente de zéro et la résistance de Hall saute sur un plateau voisin.

Dans la densité d'états, les états étendus sont alors au milieu des NL alors que les états localisés, qui sont représentés par des cercles bleus, se trouvent sur les flancs.

Lorsque le remplissage du dernier NL est supérieur à $1/2$, le même raisonnement s'applique, en termes de trous (à la place des électrons).

III.5. L'Effet Hall Quantique Fractionnaire (EHQF)

III.5.1. Présentation de l'EHQF

Cet effet fut découvert, en 1982, dans des systèmes 2D ayant une mobilité électronique assez élevée, [16], c'est-à-dire des couches 2D avec une densité de défauts assez faible. C'est le cas des systèmes à base de GaAs par rapport aux MOSFETs à base de Si, dans lesquels a été mis en évidence l'effet Hall quantique entier (EHQE). Dans les systèmes semi-conducteurs exhibant l'EHQF, les plateaux (ou paliers) de la résistance de Hall correspondant aux valeurs entières du facteur de remplissage ν ($i = 1, 2, 3, \dots$) **sont de moins en moins visibles** et il apparaît plutôt des plateaux où ν prend des **valeurs fractionnaires** comme le montre la figure III-25, lorsque la température devient très basse et le champ magnétique très fort.

Tous les nombres fractionnaires i ne sont pas possibles. Les plateaux les plus importants se situent à $i = 1/3, 1/5$ (non représenté sur la figure II-25) et $2/5$, mais il y en a beaucoup plus. La plupart de ces plateaux i sont caractérisés par des dénominateurs impairs.

A mesure que la densité de défauts (ou le désordre) dans le système 2D diminue, le nombre de plateaux fractionnaires augmente. Dans le cas idéal d'un matériau parfaitement pur, le nombre de plateaux devient infini et la représentation de \mathcal{R}_H en fonction de B devient une droite, comme dans le cas classique.

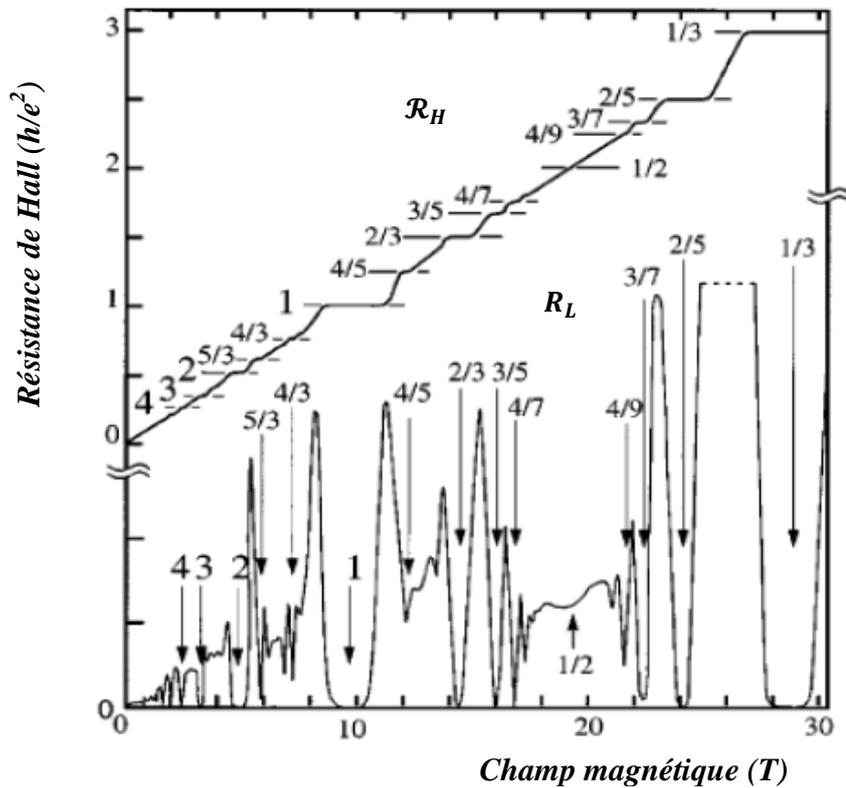


Figure III-25: Variation de la résistivité longitudinale (R_L) et de la résistance de Hall (\mathcal{R}_H) en fonction du champ magnétique et révélation de l'EHQF (d'après [13])

III.5.2. Théorie des fermions composites

L'effet Hall quantique entier peut être compris à l'aide d'électrons libres. En revanche, pour expliquer l'effet Hall quantique fractionnaire, nous devons prendre en considération les interactions entre électrons. Cela rend le problème beaucoup plus difficile mais beaucoup plus riche. Les bases de la théorie ont été définies pour la première fois par R. B. Laughlin [17], mais le sujet a été étudié dans une multitude de directions différentes. Pour leurs travaux sur le sujet, le prix Nobel 1998 a été attribué à D. C. Tsui, H. L. Störmer, et A. C. Gossard.

Si dans l'étude de l'EHQE, nous n'avons pas tenu compte des interactions électron-électron (forces de répulsion coulombienne), cela est dû au fait que l'interaction **entre niveaux de Landau** complètement remplis ($\nu = i$) et qui est de l'ordre de l'énergie de séparation $\hbar\omega_c$, est beaucoup plus grande que l'énergie typique des interactions de Coulomb entre électrons. L'interaction dans un même niveau de Landau est interdite par le principe de Pauli.

Mais lorsque $\nu \neq i$ (niveaux de Landau partiellement remplis), les interactions de Coulomb deviennent essentielles même si elles restent faibles. La raison en est que, dans ce cas, il peut y avoir des excitations dans le même niveau (excitations intra-niveaux) et non plus entre niveaux (excitations

inter-niveaux). Comme les états couplés (d'un même niveau) par de telles excitations ont la même énergie cinétique $\hbar\omega_c(n + 1/2)$, laquelle ne joue plus aucun rôle pour la dynamique des électrons restreints à un niveau, l'énergie de Coulomb reste la seule échelle d'énergie significative.

La figure III-20 représente schématiquement ce processus d'excitations inter- et intra-niveaux, dans le cas où l'on tient compte de l'effet Zeeman (séparation ΔZ des niveaux de Landau en deux branches de spin).

Un tel système décrit ci-avant est appelé un système électronique à corrélations fortes. C'est dans ce régime de corrélations fortes qu'on observe l'EHQE, qui est la manifestation d'un **liquide quantique** (électronique) dont la formation est due précisément à la répulsion coulombienne entre électrons.

Dans le plus bas niveau de Landau ($n = 0$), on mesure des paliers dans la résistance de Hall \mathcal{R}_H autour des facteurs de remplissage $\nu = p/(2ps + 1)$, où s et p sont des nombres entiers.

Cet effet peut être compris comme un EHQE d'une nouvelle particule, nommée **fermion composite** (FC) [20], qui consiste en un électron et une sorte de tourbillon du liquide quantique, ou « **vortex** » qui porte s paires de quanta de flux¹¹. Le nombre p est le nombre de niveaux de Landau de FC exactement remplis. L'existence du vortex, qui est une excitation du liquide électronique, est naturelle : chaque électron repousse les autres, et s'entoure d'un « **trou de corrélation** ». **Dans le champ magnétique**, le bord de ce trou est animé d'un mouvement circulaire. On montre qu'il se crée un défaut de charge électrique (par rapport à la densité de charge moyenne) égal à $\left(+\frac{2ps}{2ps+1}\right)e$, et il est favorable pour un électron de se lier à ce défaut. Cet état lié (défaut + électron) est un FC qui porte une charge :

$$e^* = -\frac{e}{2ps+1} = \left(+\frac{2ps}{2ps+1}e\right) + (-e) \quad \text{(III-50)}$$

inférieure donc à celle de l'électron. L'énergie de l'état lié est quantifiée en niveaux de Landau à cause de la présence d'un champ magnétique (comme décrit dans le cas de l'EHQE).

Calcul de la longueur magnétique du FC :

$$l_B^* = \sqrt{\frac{\hbar}{e^*B}} = \sqrt{\frac{\hbar}{B} \left(\frac{2ps+1}{e}\right)} = \sqrt{2ps+1} \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} = l_B \sqrt{2ps+1} \quad \text{(III-51)}$$

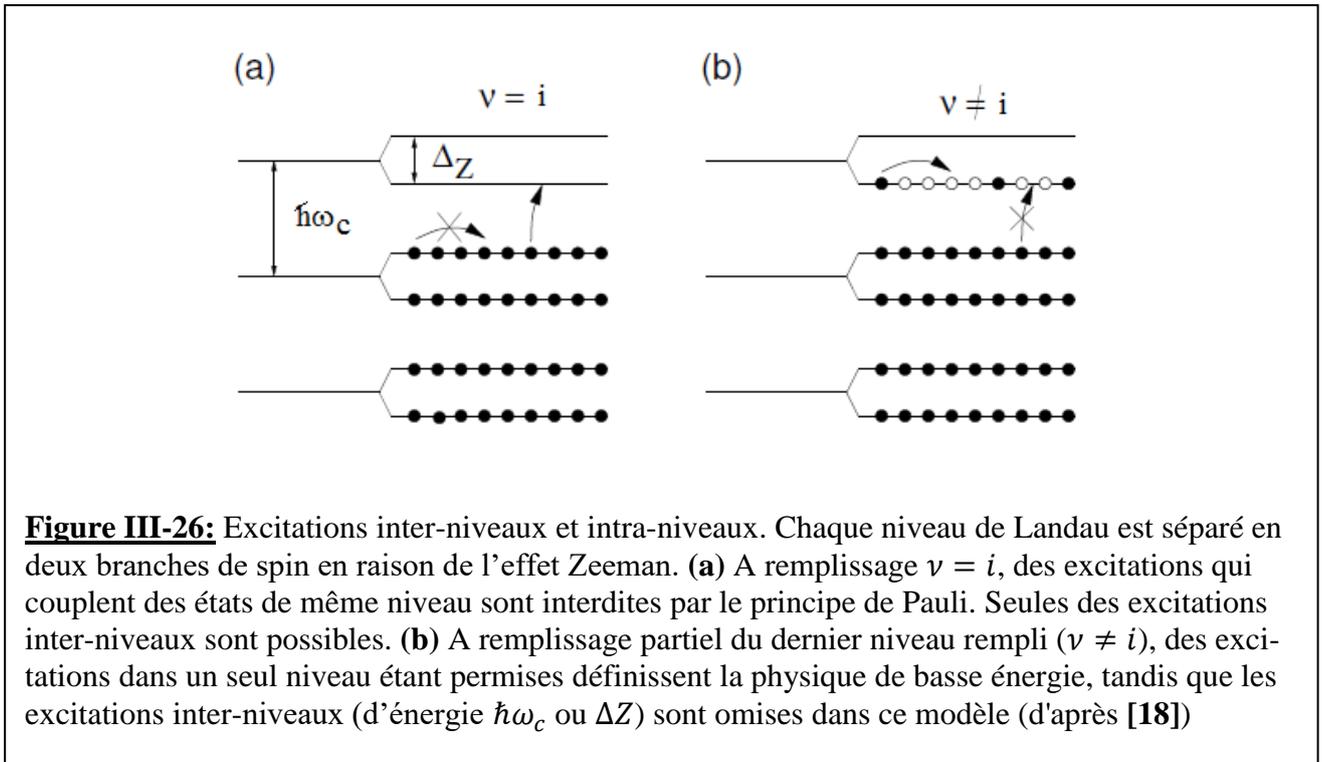
Où l_B est la longueur magnétique de l'électron ; on voit donc que : $l_B^* > l_B$.

Calcul de la surface minimale occupée par chaque état quantique d'un FC :

¹¹ On rappelle qu'un quantum de flux est égal à $\phi_0 = h/e$ et est associé à chaque état électronique

$$\sigma^* = 2\pi l_B^2 = 2\pi l_B^2(2ps + 1) = (2ps + 1)\sigma \quad (\text{III-52})$$

Où σ est la surface minimale occupée par un état quantique électronique ; on voit donc que : $\sigma^* > \sigma$.



L'EHQF est donc observé à des valeurs de B qui correspondent à p niveaux de Landau de fermions composites (FCs) complètement remplis ($p = n_{el}\sigma^*$) et par conséquent à des facteurs de remplissage électroniques :

$$\nu = \frac{p}{2ps+1} \quad (\text{III-53})$$

On voit donc que contrairement à l'EQHE, le facteur de remplissage de l'EQHF est fractionnaire, comme son nom l'indique.

La formation de FCs est schématisée sur la figure III-19 pour $\nu = 1/3$, c'est-à-dire : $s = p = 1$.

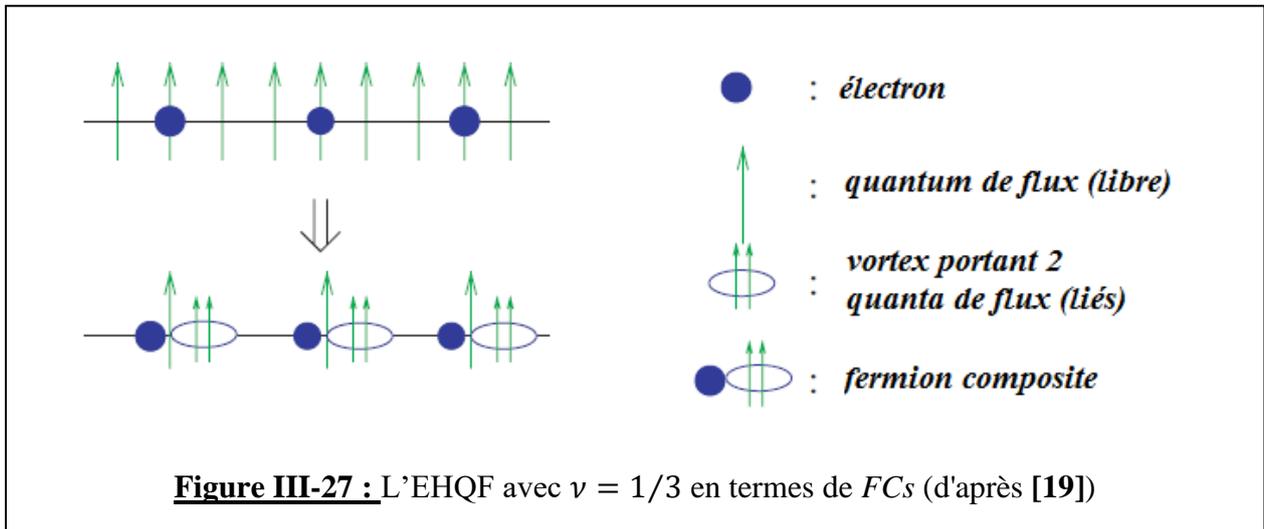
Dans cet exemple, on voit que par électron, il y a trois quanta de flux dans le système : 2 sont portés par un tourbillon du liquide électronique (vortex) ($s = \text{une paire} = 1$). Ce dernier (le vortex) est lié à un électron pour former le FC. <il reste autant de quanta de flux libres que FCs (soient 3), ce qui donne lieu à un facteur de remplissage de Fcs : $p = 1$.

Quelles sont les valeurs du facteur de remplissage pour lesquelles on observe l'EQHF dans le niveau de Landau électronique $n = 1$?

Elles correspondent à :

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2s+1} \quad (\text{II-54})$$

$\bar{\nu}$ est un facteur de remplissage partiel de $n = 1$. Les électrons dans le plus bas niveau $n = 0$, qui est complètement rempli, restent inertes.



Remarque :

Malgré son succès, la théorie des fermions composites, proposée en 1989 par J.K. Jain, a suscité autant de nouvelles interrogations qu'elle n'a apporté de réponses. La structure interne du FC demeure aussi mystérieuse que la nature du lien entre l'électron et le vortex. Ces questions constituent un des sujets les plus brûlants de la recherche actuelle en physique de la matière condensée.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] K. von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, **Phys. Rev. Lett.** **45**, 494(1980)
- [2] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, **Phys. Rev. Lett.** **48**, 1559(1982).
- [3] S. Das Sarma et A. Pinczuk, eds., "**Perspectives in Quantum Hall Effects**", Wiley, New York (1997)
- [4] L. D. Landau et E. M. Lifschitz, « **Physique théorique** », tome 9 – « **Physique statistique** » (partie 2), Ed. MIR (1990)
- [5] F. Lafont, R. Ribeiro-Palau, D. Kazazis, A. Michon, O. Couturaud, C. Consejo, T. Chassagne, M. Zielinski, M. Portail, B. Jouault, F. Schopfer et W. Poirier, **Nat. Commun.** **6**, 6806 (2015)
- [6] R. Ribeiro-Palau, F. Lafont, J. Brun-Picard, D. Kazazis, A. Michon, F. Cheynis, O. Couturaud, C. Consejo, B. Jouault, W. Poirier, et F. Schopfer, **Nat. Nanotechnol.** **10**, 965(2015)
- [7] J. Bru-Picard, Thèse de Doctorat « **Une nouvelle génération d'étalons quantiques fondée sur l'effet Hall quantique** », Université Paris-Saclay (2018)
- [8] L.D. Landau et E.M. Lifschitz, "**Physique Théorique Vol. 3 : Mécanique quantique**", Ed. MIR (1975)
- [9] H. Ibach et H. Lüth, "**Solid-Sate Physics : An introduction to Principles of Materials Science**", Editions Springer-Verlag (1995)
- [10] J. Guignard, Thèse de Doctorat "**Etude de l'effet Hall quantique dans le graphène exfolié en vue d'une application en métrologie quantique**", Université Paris-Sud 11 (2011)
- [11] J. Solyom et A. Piroth. "**Fundamentals of the Physics of Solids, Vol. II–Electronic Properties**", Ed. Springer (2008)
- [12] W. Poirier, F. Schopfer, J. Guignard, O. Thévenot et P. Gournay, **C. R. Physique** **12**, 347(2011)
- [13] H.L. Stormer, **Rev. Mod. Phys.** **71**, 875(1999)
- [14] J. P. Eisenstein et H. L. Stormer, **Science** **248**, 1510(1990)
- [15] M-O Goerbig, P. Lederer, C. M. Smith, **Images de la Physique - CNRS**, 105(2005)
- [16] D. C. Tsui, H. L. Störmer, and A. C. Gossard, **Phys. Rev. Lett.** **48** (1982)1559
- [17] R. B. Laughlin, **Phys. Rev. Lett.** **50**, 1395(1983)

- [18] G. Montambaux, Notes de Cours "**Physique mésoscopique et conduction quantique**", Département de Physique - Ecole Polytechnique, Paris (2018)
- [19] M.O. Goerbig et P. Lederer, Notes de Cours "**Electrons bidimensionnels sous champ magnétique fort : la physique des effets Hall quantiques**", Université de Paris Sud (2006)
- [20] J.K. Jain, «**Composite Fermions**», Ed. Cambridge University Press (2007)

CHAPITRE IV : L'EFFET HALL QUANTIQUE DANS LE GRAPHÈNE

IV.1. Introduction

Dans cette étude, nous allons discuter des éléments essentiels qui permettent de comprendre l'effet Hall quantique dans le graphène, et le comparer au même effet dans les systèmes électroniques bidimensionnels plus conventionnels comme ceux utilisés pour expliquer l'EHQE et l'EHQF. Ces deux types de systèmes diffèrent principalement par leur caractère relativiste : alors que les porteurs de basse énergie dans le graphène sont «**ultra relativistes**» dans la mesure où ils sont décrits en termes d'équation de Dirac, ceux dans les autres systèmes obéissent à l'équation de Schrödinger non relativiste. Malgré cette différence fondamentale, la quantification de la résistance de Hall est universelle, c'est-à-dire qu'elle est donnée par la constante universelle (h/e^2) et un nombre entier, autant pour les porteurs dans le graphène que pour ceux dans les gaz d'électrons avec une bande parabolique.

Rappelons que l'EHQE est une propriété universelle des 2DEG soumis à un champ magnétique de forte intensité. A des températures suffisamment basses, l'effet est caractérisé par une résistance longitudinale R_L qui s'annule pour toute valeur de la résistance de Hall \mathcal{R}_H (ou résistance transverse) constante sur un plateau donnée par la relation III-14 (chapitre III).

Alors que l'EHQE peut être compris dans le cadre de la quantification de Landau qui se produit dans un système d'électrons 2D où les interactions coulombiennes ne sont pas prises en compte, l'EHQF est certainement causé par les interactions mutuelles coulombiennes entre électrons.

L'investigation expérimentale et théorique de l'effet Hall quantique a connu un regain d'intérêt avec la découverte en 2005 d'un EHQE particulier dans le graphène (ou graphite 2D) [1, 2].

Comparées aux systèmes électroniques 2D étudiés jusqu'à présent, les propriétés électroniques à basse énergie du graphène sont décrites par une équation de Dirac relativiste pour des particules 2D sans masse, plutôt que par l'équation de Schrödinger non relativiste habituelle pour les électrons du réseau avec une masse effective non nulle.

Dans la présente étude, nous allons nous limiter à la discussion des électrons non interagissant entre eux, c'est-à-dire à la présentation des principaux résultats de l'EHQE dans le graphène, sachant que la discussion des interactions électroniques et de l'EHQF découvert dans le graphène en 2009 [3, 4] est un peu plus longue et plus complexe !

IV.2. Propriétés électroniques du graphène

IV.2.1. Le matériau graphène

IV.2.1.1. Présentation et structure cristalline

Matériau bidimensionnel, le graphène a surpris le monde scientifique par ses propriétés physiques et mécaniques et ses potentialités dans les domaines de l'électronique et de l'optoélectronique.

Le graphène a été décrit de manière théorique pour la première fois en 1947 par P. R. Wallace lors du calcul de la structure de bandes du graphite [5].

C'est en 2004, que Novoselov et al. [6] réussirent à isoler une couche de graphite d'une épaisseur d'un seul atome de carbone (couche que nous nommons graphène). Le graphène a été mis à l'honneur par le prix Nobel de physique 2010, décerné à ses découvreurs André Geim et Konstantin Novoselov (de l'Université de Manchester, Royaume-Uni) pour leurs expériences sur ce matériau cristallin bidimensionnel (expériences qualifiées de révolutionnaires par le comité Nobel) [7]).

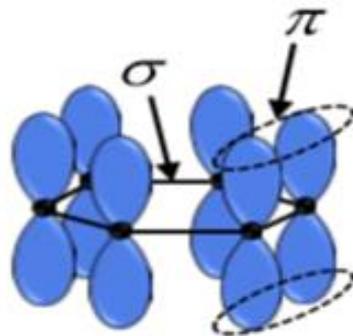


Figure IV-1 : Diagramme schématique des liaisons σ dans le plan de graphène et des orbitales π perpendiculaire à ce plan

En effet, le graphite naturel est constitué de feuillets de graphène empilés les uns sur les autres. Ces feuillets sont elles-mêmes composées d'atomes de carbone en hybridation sp^2 : l'hybridation, dans le plan de la feuille, des orbitales atomiques $2s$,

$2p_x$ et $2p_y$ engendrent les orbitales moléculaires σ à l'origine de la rigidité mécanique du cristal. Au nombre de trois, ces orbitales σ constituent les liaisons covalentes qui sont coplanaires et forment des angles de 120° entre elles. Les orbitales atomiques $2p_z$, perpendiculaires au plan de la feuille, se recouvrent d'un atome à l'autre et forment les orbitales moléculaires π (orbitale liante) et π^* (orbitale anti-liante) (figure IV-1).

Ces deux orbitales sont à l'origine des bandes de valence et de conduction qui sont concurrentes : le feuillet de graphène est un matériau conducteur. Par comparaison, le diamant est lui

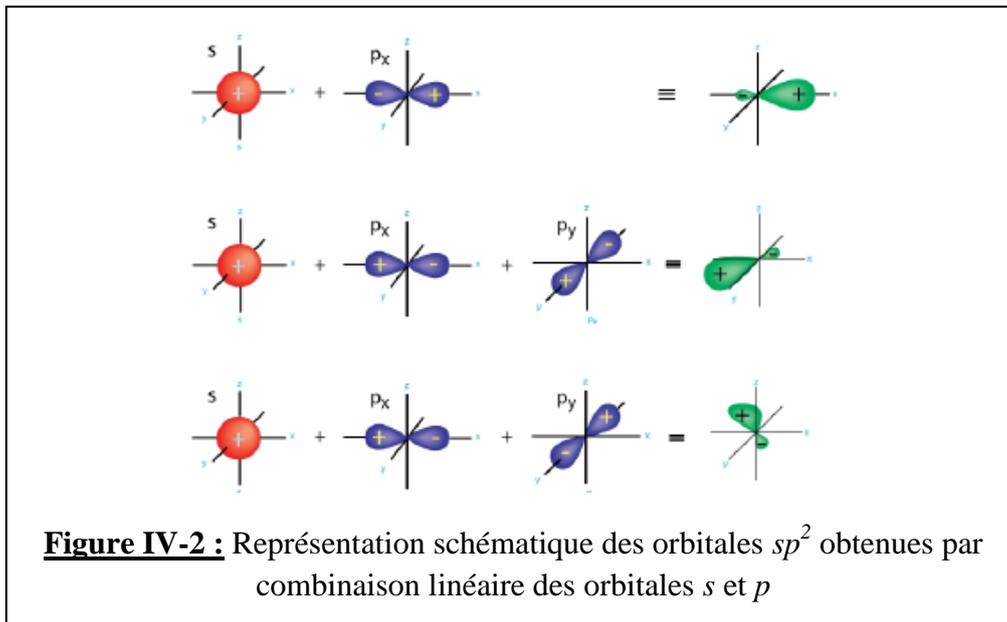
aussi constitué d'atomes de carbone mais qui sont en hybridation sp^3 : les quatre liaisons covalentes forment un tétraèdre. Cette structure est particulièrement robuste d'un point de vue mécanique. Ainsi, à l'inverse du graphite qui est très friable en raison de sa structure en feuillets, le diamant est quant à lui le matériau le plus dur. Enfin, le diamant est un isolant électrique avec une bande interdite égale 5,4 eV.

En quoi consiste l'hybridation des orbitales s et p ?

L'atome de carbone possède six électrons, sa configuration électronique dans l'état fondamental est donc : $1s^2 2s^2 2p^2$. La géométrie hexagonale du graphène est décrite par des orbitales hybrides nommées sp_a^2 , sp_b^2 et sp_c^2 qui sont des combinaisons linéaires des états $2s$, $2p_x$, $2p_y$:

$$\begin{cases} |sp_a^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|2p_x\rangle \\ |sp_b^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left\{\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle\right\} \\ |sp_c^2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}|2s\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left\{\frac{\sqrt{3}}{2}|2p_x\rangle + \frac{1}{2}|2p_y\rangle\right\} \end{cases} \quad (\text{IV-1})$$

L'hybridation puis la formation d'orbitales de type sp^2 est montrée sur la figure IV-2.



Ces orbitales hybrides sont orientés dans le même plan et forment des angles de 120° . La distribution spatiale de probabilité de présence des trois électrons hybridés donne les liaisons covalentes (σ) que forme chaque atome avec ses plus proches voisins dans un plan de graphène.

Le quatrième électron ne s'hybride pas et reste dans une orbitale p_z . Le recouvrement de deux orbitales p_z voisines est bien plus faible que le recouvrement des orbitales sp^2 , ainsi cet électron va participer à l'existence d'une bande de haute énergie responsable de la conduction électronique.

Les atomes de carbone d'un feuillet de graphène sont disposés selon une géométrie en "**nid d'abeille**", obtenue par juxtaposition d'hexagones réguliers. La figure IV-3 présente un schéma de cet arrangement. La figure IV-4 présente une image du graphène obtenue par microscopie à effet tunnel.

On peut classer les atomes de carbone en deux catégories selon la position des trois atomes de carbone qui l'entourent :

- ✚ pour un atome de carbone de type « **A** », les trois atomes de carbone qui sont ses plus proches voisins sont dans les directions « haut-gauche », « haut-droite » et « bas » ;
- ✚ alors que pour un atome de type « **B** », les plus proches voisins sont dans les directions « bas-gauche », « bas-droite » et « haut » (Figure IV-3).

Ces deux types d'atomes de carbone ne sont pas équivalents : on parle de sous-réseaux. En raison de cette non-équivalence, le réseau en nid d'abeille n'est pas un réseau de Bravais.

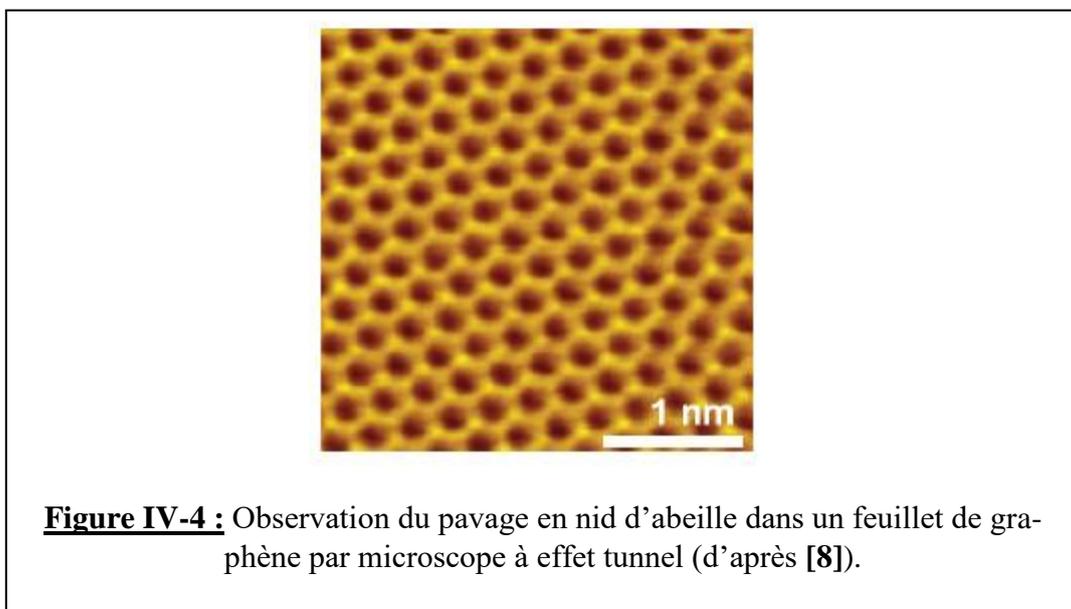
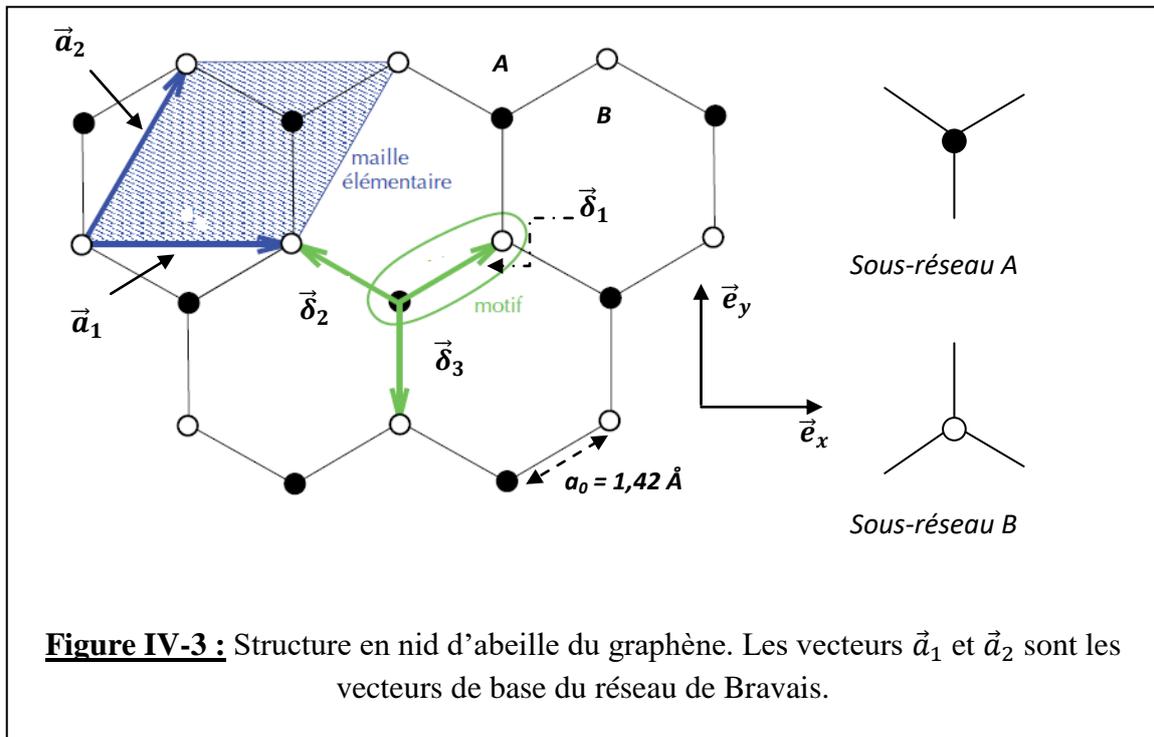
La structure cristallographique du graphène est constituée d'une cellule unitaire hexagonale avec **deux** atomes de carbone.

Cependant, chaque sous-réseau est un réseau de Bravais hexagonal. On peut donc décrire la structure en nid d'abeille par un réseau de Bravais hexagonal à deux atomes par maille (A et B) situés à une distance $a_0 = 0,142 \text{ nm}$ l'un de l'autre. La figure IV-3 montre cette structure physique du graphène composée des deux sous-réseaux (réseau d'atomes A et réseau d'atomes B) ou encore un réseau avec une base de deux atomes nommés A et B. Chaque atome a trois voisins immédiats venant de l'autre sous-réseau qui lui sont reliés par les vecteurs $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ et $\vec{\delta}_3$ tels que :

$$\begin{cases} \vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}\vec{e}_x + \frac{a}{2\sqrt{3}}\vec{e}_y \\ \vec{\delta}_2 = -\frac{a}{2}\vec{e}_x + \frac{a}{2\sqrt{3}}\vec{e}_y \\ \vec{\delta}_3 = -\frac{a}{\sqrt{3}}\vec{e}_y \end{cases} \quad (\text{IV-2})$$

Dans ces expressions, $a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a_0\sqrt{3}$ (avec $a_0 = 1,42 \text{ \AA}$, on $a = 2,46 \text{ \AA}$). Les vecteurs de base \vec{a}_1 et \vec{a}_2 du réseau direct ont pour expressions :

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}\vec{e}_x - \frac{a\sqrt{3}}{2}\vec{e}_y \\ \vec{a}_2 = a\vec{e}_x \end{cases} \quad (\text{IV-3})$$



Dans l'espace réciproque (ou espace de Fourier), la maille élémentaire est, comme on le sait, appelée « Première Zone de Brillouin » ou **PZB**.

Ce réseau réciproque bidimensionnel, ainsi que sa PZB sont représentés sur la figure IV-5. Ce réseau est généré par les vecteurs \vec{a}_1^* et \vec{a}_2^* qui forment un angle de 120° entre eux et tels que :

$$\begin{cases} |\vec{a}_1^*| = 2\pi/|\vec{a}_1| \\ |\vec{a}_2^*| = 2\pi/|\vec{a}_2| \end{cases} \quad (\text{IV-4})$$

Dans le cas d'un réseau de Bravais triangulaire, la PZB est un hexagone dont les sommets peuvent être regroupés en deux triplets de points inéquivalents (ou non équivalents) notés \mathbf{K} et \mathbf{K}' (figure IV-5).

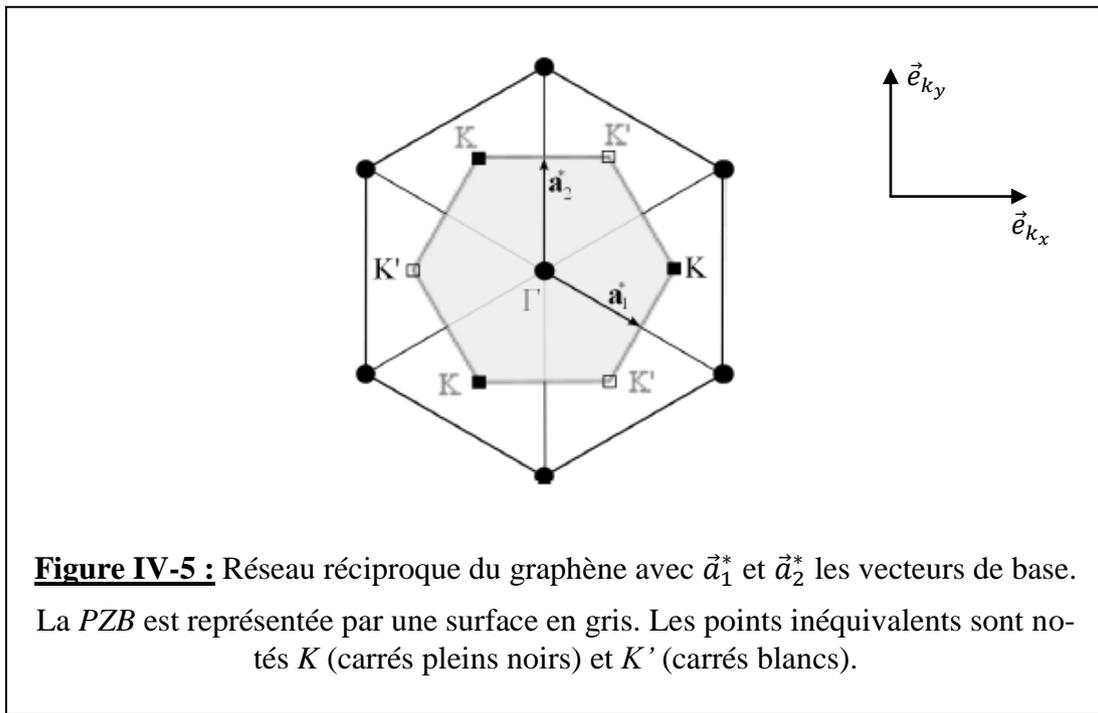


Figure IV-5 : Réseau réciproque du graphène avec \vec{a}_1^* et \vec{a}_2^* les vecteurs de base. La PZB est représentée par une surface en gris. Les points inéquivalents sont notés \mathbf{K} (carrés pleins noirs) et \mathbf{K}' (carrés blancs).

\vec{e}_{k_x} et \vec{e}_{k_y} sont des vecteurs unitaires dans l'espace réciproque. Par exemple, les points inéquivalents \mathbf{K} et \mathbf{K}' situés le long de l'axe qui porte \vec{e}_{k_x} sont situés, par rapport au centre Γ de la PZB aux coordonnées :

$$\begin{cases} K_x = +\frac{4\pi}{3a_0\sqrt{3}} \\ K'_x = -\frac{4\pi}{3a_0\sqrt{3}} \end{cases} \quad (\text{IV-5})$$

Ces points sont appelés points de Dirac.

Dans l'espace direct, les atomes A et B ne peuvent être joints par les vecteurs de translation du réseau \vec{a}_1 et \vec{a}_2 . Il en va de même pour les points \mathbf{K} et \mathbf{K}' de la première zone de Brillouin : il est impossible de passer de \mathbf{K} à \mathbf{K}' en utilisant les vecteurs \vec{a}_1^* et \vec{a}_2^* . Ainsi les vecteurs d'onde associés à ces points (\mathbf{K} et \mathbf{K}') correspondent à des situations physiques différentes.

IV.2.1.2. Comment fabrique-t-on le graphène ?

A l'heure actuelle, il existe deux grandes voies de fabrication du graphène : l'exfoliation mécanique [9, 10] ou l'exfoliation chimique [11 – 13], et l'épitaxie [14, 15].

L'exfoliation (ou technique du scotch)

L'exfoliation mécanique de graphite naturel tire profit de la structure en feuillets du graphite naturel. En effet, lorsque l'on frotte un morceau de graphite, par exemple la mine d'un crayon, sur une surface, de nombreux micro-grains ainsi que des systèmes plus fins sont arrachés du morceau de graphite et se déposent sur la surface en contact. Le principe de l'exfoliation consiste à maîtriser le dépôt lorsque l'on met en contact des grains de graphite avec un substrat. La méthode consiste à cliver des grains macroscopiques de graphite naturel en grains plus petits grâce à un ruban adhésif. Lorsque la répartition de ces grains est quasi uniforme sur le ruban, on l'applique contre un substrat préalablement nettoyé. Afin de favoriser le contact entre les micro-grains et la surface du substrat, on peut placer les échantillons sous presse afin de chasser les bulles d'air. Enfin, lorsque l'on enlève le ruban adhésif du substrat, on peut observer sur la surface des distributions aléatoires de feuilles uniques, de bicouches, de systèmes ayant plusieurs feuilles d'épaisseur mais aussi de micro-grains. Le clivage des grains de graphite peut aussi être réalisé par voie chimique. En effet, par des procédés d'intercalation, il est possible d'insérer des molécules entre les plans de graphène.

Il est alors possible de provoquer le délaminage des feuilles grâce à une expansion chimique. On a alors exfoliation du graphite en solution.

L'épitaxie

La seconde grande méthode de synthèse du graphène est l'épitaxie sur carbure de silicium (SiC), aussi appelée graphitisation. La croissance de couches graphitiques très fines est un phénomène connu depuis une trentaine d'années. A l'inverse d'une épitaxie par dépôt qui consiste à faire croître une structure cristalline en venant déposer les matériaux couche atomique après couche atomique, l'épitaxie du graphène repose sur l'utilisation d'un substrat qui contient des atomes de carbone (comme SiC) et qui a une structure cristallographique proche de celle du graphène. Le substrat en question qui remplit cette condition est le carbure de Silicium (SiC). Lorsqu'un tel matériau est soumis à une température élevée (typiquement plus de 1000°C) dans une atmosphère contrôlée, les atomes de silicium des premières couches atomiques sont vaporisés (s'évaporent) et, après reconstruction de la surface, on a formation de plans de graphène : on parle de graphitisation. Il faut souligner que jusqu'en 2009, les couches

produites par cette méthode étaient très épaisses (plus d'une dizaine de plans) et les feuilles n'étaient pas couplées entre elles comme dans du graphite naturel. En utilisant des substrats SiC avec une terminaison carbone (c'est-à-dire que les atomes de la surface sont des atomes de carbone), on observe une rotation des couches de graphène ; elles sont donc découplées du substrat. Grâce à une meilleure maîtrise de l'atmosphère et des températures pendant les différentes phases, il a été possible d'obtenir des monocouches de graphène et d'observer l'effet Hall quantique.

Différences entre graphène exfolié et graphène épitaxié

Ces deux manières d'obtenir du graphène conduisent en fait à deux matériaux similaires mais néanmoins différents. Une différence importante est que dans le cas du graphène exfolié, la feuille de graphène repose sur un substrat isolant (du dioxyde de silicium). Sous cet isolant se trouve un conducteur (du silicium dopé) qui sert de grille électrostatique : en appliquant une tension électrique à cette grille, on peut changer le nombre d'électrons de conduction dans la feuille de graphène. Ceci se produit par un effet de champ électrique similaire à ce qui se passe dans un condensateur : une des plaques du condensateur serait la feuille de graphène, l'autre le silicium dopé, les deux plaques étant séparées par un diélectrique (le dioxyde de silicium).

Il existe d'autres différences importantes entre les deux types de graphène. Par exemple, la structure cristalline n'est pas exactement identique. Sans rentrer dans les détails, on notera simplement que le graphène épitaxié apparaît comme un système plus compliqué que le graphène exfolié.

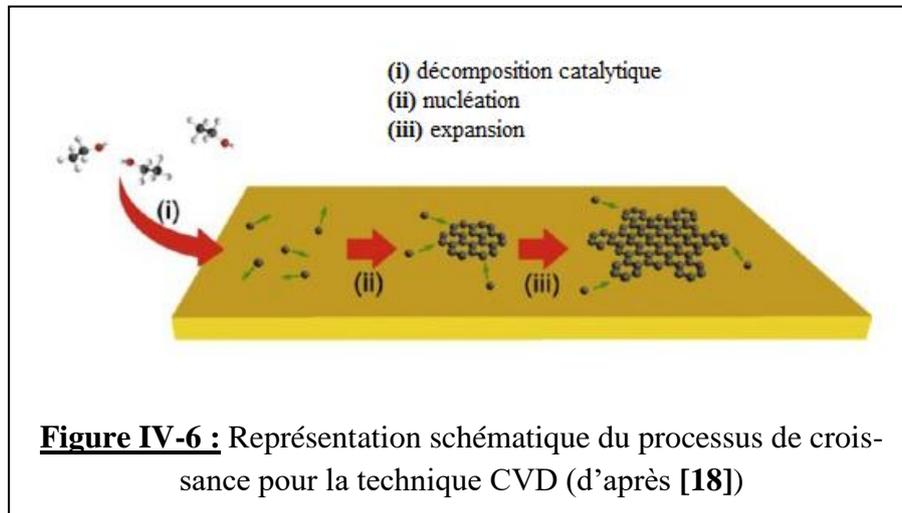
Le dépôt en phase chimique CVD

Une troisième voie de fabrication du graphène existe, il s'agit de la technique CVD (Chemical Vapor Deposition), où différents matériaux peuvent être utilisés comme substrats pour déposer le graphène. Le substrat le plus utilisé est, cependant, un substrat de cuivre de faible épaisseur [16-18].

La première étape consiste en un nettoyage du substrat par une série de solvants en commençant par une solution d'acide acétique suivi d'un bain d'acétone, puis de 2-propanol.

Puis on transfère le substrat dans un réacteur CVD où règne une température de l'ordre de 1000°C. Le méthane et l'hydrogène gazeux sont ensuite introduits dans l'enceinte; l'hydrogène

joue le rôle de catalyseur de la réaction qui a lieu entre les molécules de méthane et la surface du substrat métallique. Cette réaction se traduit par le dépôt d'atomes de carbone sur le substrat et la formation d'une couche de graphène. Dans ces réactions chimiques de surface, les molécules d'hydrocarbure se dissocient à la surface du substrat et les atomes de carbone commencent à former des couches de graphène par nucléation (figure IV-6).



IV.2.2. Structure de bandes du graphène

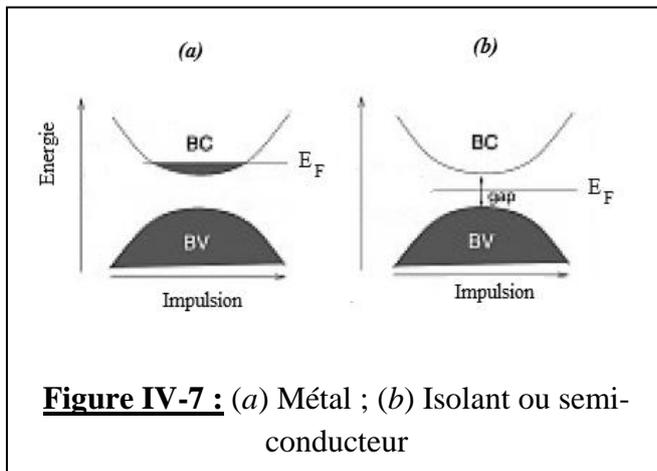
IV.2.2.1. Rappels sur la théorie des bandes d'énergie

Dans le vide, un électron se déplace en ligne droite et en respectant la relation de dispersion – c'est-à-dire la relation qui existe entre son énergie E et sa quantité de mouvement (ou impulsion) \vec{p} , bien connue : $E = \vec{p}^2/2m = (\hbar\vec{k})^2/2m$, qui traduit la conservation de l'énergie cinétique (\vec{k} est le vecteur de l'onde associée à l'électron dit libre).

Dans un cristal, la présence d'un réseau atomique modifie fortement la dynamique de l'électron. Bloch a montré (dans sa thèse de doctorat, en 1928) que la mécanique quantique permettait à un électron de se déplacer en ligne droite même dans un réseau cristallin, mais uniquement pour certaines bandes d'énergie permises et avec une relation de dispersion modifiée. Ces bandes d'énergie permises sont séparées par des bandes d'énergie interdites appelées gaps.

A l'intérieur d'une bande d'énergie permise, la relation de dispersion de l'électron est modifiée par rapport à la relation dans le vide. Le théorème de Bloch stipule que les états stationnaires de l'électron sont des ondes planes de vecteur d'onde (de Bloch) \vec{k} multipliées par une fonction qui a la périodicité du réseau de Bravais. Pour la majorité des cristaux, en bord de bande permise, la relation de dispersion reste quadratique $E \propto k^2$ et la masse des électrons m

est remplacée par une masse effective m^* qui dépend des propriétés du réseau cristallin (et n'est plus nécessairement positive) telle que $E = (\hbar\vec{k})^2/2m^*$. On décrit alors le mouvement de l'électron par une équation de Schrödinger effective avec l'hamiltonien $H = \vec{p}^2/2m^*$ où $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ est l'opérateur impulsion $\hat{p} = -i\hbar\nabla$.



Dans un cristal, il y a en réalité de nombreux électrons qui se déplacent simultanément (en même temps). Comme ils sont indiscernables et que ce sont des fermions, ils sont obligés de respecter le principe de Pauli, c'est-à-dire d'occuper des états quantiques différents. Pour minimiser l'énergie du cristal, les électrons remplissent les états de plus basse

énergie en se soumettant à l'interdiction de Pauli. Les derniers états occupés par des électrons (ceux de plus haute énergie) correspondent à ce qu'on appelle le niveau de Fermi et l'énergie de ces états est appelée énergie de Fermi. Cette énergie de Fermi (E_F) n'est rien d'autre que le potentiel chimique du fluide d'électrons, c'est-à-dire l'énergie que coûterait l'ajout d'un électron supplémentaire au système. Elle sépare les états de basse énergie occupés par des électrons, des états vides de haute énergie. Si E_F tombe dans une bande permise, on dit que le système est un conducteur ou un métal et cette bande est appelée bande de conduction (BC) (voir figure IV-7a). Les propriétés du métal sont contrôlées par le nombre d'états accessibles aux électrons au voisinage de E_F , appelé la densité d'états du métal. Au contraire, si le niveau de Fermi tombe dans un gap entre deux bandes permises (la plus basse en énergie prend le nom de bande de valence (BV) et la plus haute celui de bande de conduction (BC)), on dit que le cristal est soit un isolant –si le gap est très grand– soit un semi-conducteur, si le gap est relativement beaucoup plus petit (voir figure IV-7b). Les propriétés d'un isolant/semi-conducteur dépendent donc de la taille du gap. De manière générale, les électrons concernés par le transport dans un métal ou dans un semi-conducteur sont au voisinage du niveau de Fermi E_F et c'est donc là qu'il est important de connaître la structure de bande.

IV.2.2.2. Méthode des liaisons fortes

La structure de bandes du graphène a été étudiée à l'aide de la méthode des liaisons fortes.

Cette méthode s'applique dans le cas où le recouvrement entre orbitales voisines est faible, et utilise des combinaisons linéaires de ces orbitales pour construire les états propres de l'hamiltonien du cristal.

La première des étapes est la construction d'une base d'états appelés états de Bloch auxquels on associe un vecteur d'onde \vec{k} , et qui vérifient la condition de Bloch :

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (\text{IV-6})$$

Où : $\vec{T} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ (avec m, n entiers) est un vecteur de translation du réseau direct (ou réseau réel). Lorsqu'on utilise les conditions de Born-Von Karman¹², le vecteur \vec{k} parcourt la PZB associée au cristal.

Les états de Bloch peuvent être obtenus par combinaison linéaire des états $|\Phi_{A,\vec{T}}\rangle$ et $|\Phi_{B,\vec{T}}\rangle$ qui correspondent à une orbitale $2p_z$ centrée respectivement sur un atome A et un atome B.

Comme il y a deux atomes A et B dans une maille primitive du cristal de graphène, on construit deux états de Bloch :

$$\begin{cases} |\Psi_{A,\vec{k}}\rangle = \sum_{\vec{T}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |\Phi_{A,\vec{T}}\rangle \\ |\Psi_{B,\vec{k}}\rangle = \sum_{\vec{T}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |\Phi_{B,\vec{T}}\rangle \end{cases} \quad (\text{IV-7})$$

La recherche des états propres du système se fera en utilisant des combinaisons linéaires du type :

$$|\Psi_{\vec{k}}\rangle = \alpha_{\vec{k}}|\Psi_{A,\vec{k}}\rangle + \beta_{\vec{k}}|\Psi_{B,\vec{k}}\rangle \quad (\text{IV-8})$$

Cette écriture fait apparaître un espace à deux composantes associées aux deux sous-réseaux A et B. On associe donc à l'état $|\Psi_{\vec{k}}\rangle$ un **pseudospin** par analogie avec le spin de l'électron. Toutefois ces deux nombres quantiques ne doivent pas être confondus. Par ailleurs le spin de l'électron n'intervient pas dans les notations précédentes car celui-ci ne joue aucun rôle dans le calcul de la structure de bande.

IV.2.2.3. Relation de dispersion

Pour un vecteur \vec{k} donné, on peut déterminer l'hamiltonien dans la base $\{|\Psi_{A,\vec{k}}\rangle, |\Psi_{B,\vec{k}}\rangle\}$. Les valeurs propres obtenues sont au nombre de deux, et ont expressions :

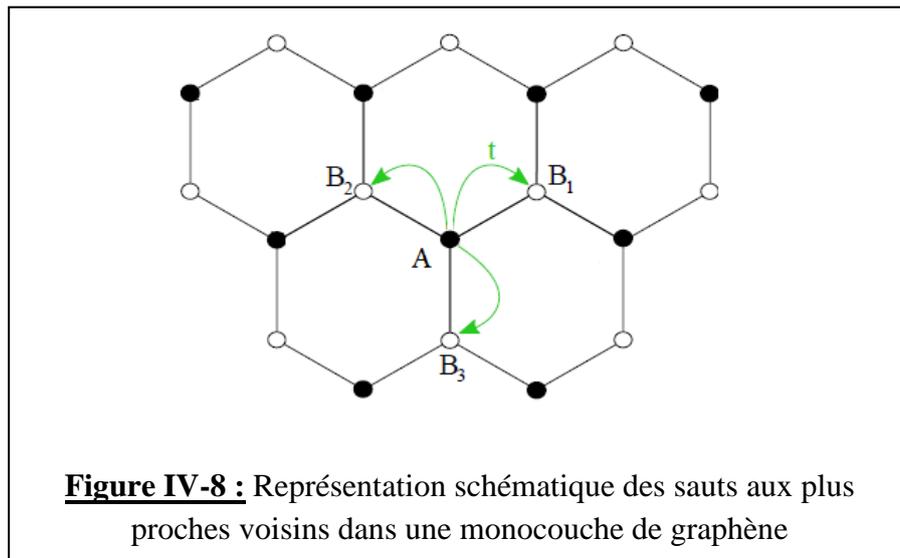
¹² On pourra consulter à ce sujet, par exemple : N.W. Ashcroft et N.D. Mermin « Physique des Solides », Ed. EDP Sciences Paris (2002).

$$\begin{cases} E_+(\vec{k}) = +t\sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{a_0\sqrt{3}}{2}k_y\right)\cos\left(\frac{3a_0}{2}k_x\right) + 4\cos^2\left(\frac{a_0\sqrt{3}}{2}k_y\right)} \\ E_-(\vec{k}) = -t\sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{a_0\sqrt{3}}{2}k_y\right)\cos\left(\frac{3a_0}{2}k_x\right) + 4\cos^2\left(\frac{a_0\sqrt{3}}{2}k_y\right)} \end{cases} \quad (\text{IV-9})$$

La constante t s'appelle l'intégrale de saut entre plus proches voisins et vaut 2,8 eV [19]. Cette énergie représente en fait l'énergie cinétique typique d'électrons sautant d'un atome à ses trois plus proches voisins (figure IV-8).

On obtient alors deux bandes d'énergie symétriques¹³ représentées sur la figure IV-9 : la bande supérieure est la bande de conduction (BC) et la bande inférieure la bande de valence (BV).

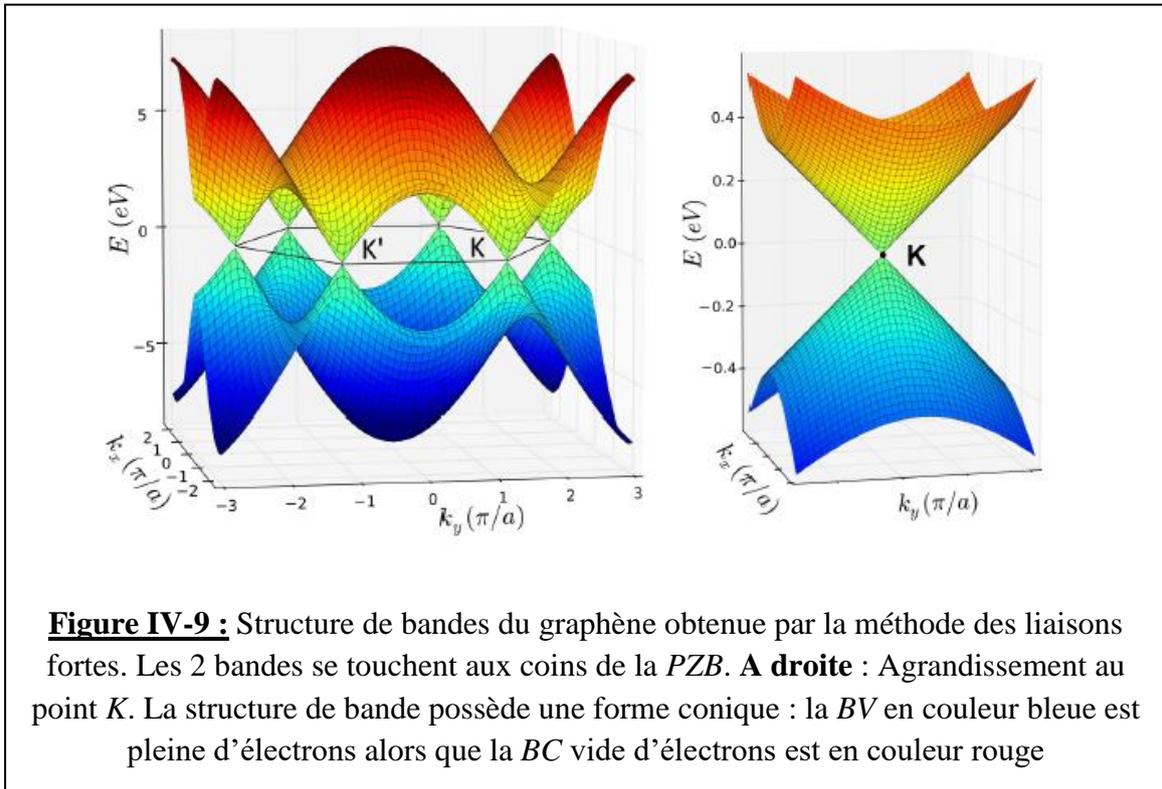
La relation de dispersion s'annule aux six coins de la PZB. Les deux bandes sont donc dégénérées en ces points particuliers.



Le nombre d'états disponibles dans ces deux bandes est égal au nombre de mailles élémentaires dans le cristal multiplié par deux, puisque l'électron possède un spin $\pm 1/2$.

Comme il y a deux électrons de conduction par maille dans le graphène, **la BV est totalement remplie et la BC est totalement vide**. La surface de Fermi (correspondant à $E = E_F$) se réduit alors à six points, dont deux seulement sont des points inéquivalents du réseau réciproque : K et K'.

¹³ Dans le cas où l'on prend en compte le couplage entre second voisins, alors les deux bandes ne sont plus symétriques [19].



Conclusion : Le graphène (**non dopé**) est donc un semi-conducteur à gap **strictement nul**¹⁴.

Linéarisation de la relation de dispersion.

Si l'on s'intéresse uniquement aux états électroniques proches du niveau de Fermi, la relation de dispersion peut être approché par un développement limité des équations IV-8.

On montre alors que, autour du point K par exemple, que cette relation devient :

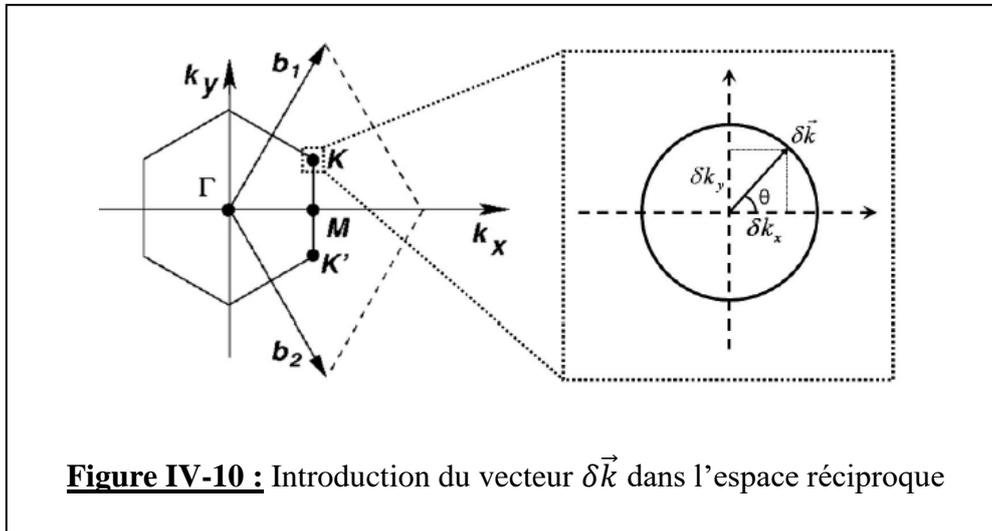
$$E(\vec{k}) = \pm \hbar v_F |\delta \vec{k}| \quad \text{(IV-10)}$$

Où v_F est la vitesse de Fermi qui a pour valeur : $v_F = \frac{3a_0 t}{2\hbar} \approx 10^6 \text{ m/s}$.

Le vecteur $\delta \vec{k}$ intervient dans la notation $\vec{k} = \vec{\Gamma K} + \delta \vec{k}$ (figure IV-10) ; il représente un petit déplacement autour du point K dans l'espace réciproque. On peut alors écrire $E(\vec{k}) = E(\vec{\Gamma K} + \delta \vec{k}) = E(\vec{\Gamma K}) + \delta E(\delta \vec{k}) = \delta E(\delta \vec{k})$ puisque la relation de dispersion s'annule au point K (c'est-à-dire $E(\vec{\Gamma K}) = 0$).

¹⁴ Ou encore un métal ($E_F = 0$) de densité d'états au niveau de Fermi nulle ! Pour le graphène dopé, c'est un métal de densité d'états au niveau de Fermi non nulle mais faible. Le dopage (c'est-à-dire le remplissage en électrons dans la feuille de graphène) est contrôlé par une tension de grille V_g dans un montage : conducteur(graphène)/isolant(SiO₂)/conducteur(n-Si) [1].

Ce résultat est valable aux six coins de la première zone de Brillouin. La relation de dispersion apparaît alors isotrope et linéaire. En effet, la structure de bande présente une forme de cône aux points où elle s'annule (voir figure IV-9). La pente de la relation de dispersion est indépendante de l'énergie et donne la vitesse de Fermi v_F des électrons dans le graphène.



Comme mentionné plus haut, seuls deux des coins de la zone de Brillouin sont des points inéquivalents de l'espace réciproque. Ainsi les excitations de basse énergie sont décrites uniquement par deux cônes situés en K et K'. La structure de bande du graphène possède donc uniquement deux vallées. Ces deux cônes sont appelés cônes de Dirac et le point où ils se touchent le point de Dirac. Cette appellation découle du fait que l'on peut établir une analogie entre l'hamiltonien du graphène et l'équation de Dirac qui gouverne l'évolution de particules relativistes sans masse.

IV.2.3. Des électrons « relativistes » ou quand les électrons perdent leur masse

IV.2.3.1. Hamiltonien de Dirac

La relation de dispersion IV-8 rappelle la relation de dispersion des photons $E = \hbar\omega = \hbar ck$ où la vitesse de la lumière (c) est remplacée par la vitesse de Fermi des électrons v_F . L'analogie avec des particules sans masse (comme les photons) peut être poussée encore plus loin, car on peut également linéariser l'hamiltonien des liaisons fortes au point K et montrer que celui-ci s'écrit sous la forme d'un hamiltonien de Dirac. Au point K, cet hamiltonien s'écrit :

$$H_K = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k} \quad (\text{IV-11})$$

Où $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ est un opérateur vectoriel composé des matrices de Pauli.

Rappel

Les matrices de Pauli sont les matrices (2×2) suivantes :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Remarque

Dans l'expression (IV-9) l'origine des vecteurs d'ondes est placée au point K. On a donc $\vec{k} = \delta\vec{k}$. Ce changement d'origine n'a pas de conséquence physique sur l'évolution des particules.

L'hamiltonien au point K' s'obtient par $H_{K'} = -H_K$. Dans ce cas, l'origine des vecteurs d'ondes est alors placée au point K'.

Il faut bien noter que l'opérateur $\vec{\sigma}$ n'agit pas sur le spin réel de l'électron mais sur le pseudospin décrivant la fonction d'onde $|\Psi_{\vec{k}}\rangle$ (expression IV-6) sur les sous-réseaux A et B.

En 1928, Paul Dirac dérive une équation qui décrit le comportement de particules relativistes de spin 1/2. Ces particules peuvent avoir une masse finie. Dans le cas particulier de particules de masse nulle, l'équation de Dirac se réduit à l'hamiltonien (IV-9). C'est pourquoi on parle parfois de fermions de Dirac sans masse pour qualifier les excitations électroniques dans le graphène.

En réalité, la relation de dispersion $E(\vec{k})$ sous forme relativiste s'écrit :

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^{*2} + m^{*2} c^{*4}} = \pm c^* p \quad (\text{IV-12})$$

Mais avec une masse effective (m^*) nulle et une vitesse c^* telle que :

$$c^* = at\sqrt{3}/2\hbar \quad (\text{IV-13})$$

Où p est l'impulsion de l'électron, a est le pas du réseau ($a = 2,46 \text{ \AA}$) et $t \approx 1,28 \text{ eV}$ est l'énergie de saut (ou intégrale de saut).

Cette vitesse c^* n'est pas la vitesse de la lumière ($c \approx 3 \times 10^8 m/s$) mais une « vitesse de la lumière effective » ou vitesse de Fermi. Les électrons ne sont donc pas réellement relativistes au sens où leur vitesse n'est pas égale à la vitesse de la lumière, mais est égale à $c^* \approx 10^6 m/s$, soit 300 fois plus petite que celle de c .

Remarque

La présence d'un signe \pm dans les relations de dispersion (III-9, III-10 et III-12) a une **signification très importante**. Comme les bandes de valence et de conduction se touchent à énergie nulle, les électrons au voisinage appartiennent simultanément aux deux bandes ! Pour décrire leur mouvement il faut donc considérer les deux bandes simultanément. C'est ce qui conduit à la description en termes de fonction d'onde de Bloch à deux composantes $|\Psi_{\vec{k}}\rangle = (|\Psi_{A,\vec{k}}\rangle, |\Psi_{B,\vec{k}}\rangle)$.

En résumé

Pour résumer, la structure de bande du graphène est très particulière et c'est ce qui fait la magie de ce matériau :

1. Les bandes de valence (BV) et de conduction (BC) se touchent à énergie nulle en deux points (vallées) K et K' où affleure le niveau de Fermi E_F : **le graphène est un semi-conducteur à gap nul et à deux vallées**.
2. Au voisinage de E_F , la relation de dispersion est linéaire (et non parabolique) : c'est ce qui permet de dire que les électrons sont «relativistes» avec une **masse effective nulle** et une vitesse de la lumière effective $c^* \approx c/300$.
3. Au voisinage de E_F , il y a une symétrie entre BC et BV, c'est une symétrie électron-trou. Toutes ces particularités font que la description effective des électrons de conduction au voisinage du niveau de Fermi ne se base pas sur une équation de Schrödinger (comme c'est généralement le cas dans les métaux ou les semi-conducteurs), mais sur une équation de Dirac. Plus précisément, il s'agit d'une équation de Dirac pour des particules sans masse et se déplaçant dans un espace bidimensionnel. L'hamiltonien de Dirac s'écrit $H = c^* \vec{\sigma} \cdot \vec{p} + m^* c^{*2} \sigma_z$, où $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ et σ_z sont les matrices de Pauli qui agissent dans l'espace de sous-réseau (A, B) et la masse effective m^* est nulle. La structure matricielle (2×2) de cet hamiltonien traduit l'existence de deux sous-réseaux A et B, ou encore celle d'une symétrie entre BC et BV. Ainsi, un électron au voisinage du niveau de Fermi appartient simultanément (en même temps) aux deux bandes.

L'hamiltonien de Dirac agit donc sur des fonctions d'ondes à deux composantes ($|\Psi_{\vec{k}}\rangle = |\Psi_{A,\vec{k}}\rangle, |\Psi_{B,\vec{k}}\rangle$).

4. La description du transport électronique dans le graphène peut donc être effectuée à l'aide de deux hamiltoniens de Dirac correspondant aux deux vallées. Ces hamiltoniens sont tous deux proportionnels à $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$.

IV.3. Les propriétés de transport

IV.3.1. La conduction électrique

Le comportement assez inhabituel des électrons du graphène avait été prédit dès les années 50 [5] mais ce n'est qu'en 2005 que les premières mesures de transport électrique ont été réalisées par l'équipe d'André Geim [1] et simultanément à Columbia University dans le groupe de Philip Kim [20]. Une des premières expériences consistait à mesurer la conductivité d'une feuille de graphène exfolié en fonction de la tension de grille appliquée. Comme nous l'avons vu (§ IV.2.1.2.), la tension de grille permet de contrôler le remplissage en électrons du graphène, c'est-à-dire de faire varier le nombre de porteurs de charge mobiles. La théorie classique du transport électrique (Drude-Boltzmann), stipule que la conductivité doit être proportionnelle au nombre de porteurs de charge mobiles. Ceci semble être logique : pas de porteurs, pas de conduction ; plus de porteurs, meilleure conduction. En appliquant une tension de grille finie – et quel que soit son signe – on ajoute des porteurs de charge mobiles à la feuille de graphène – que ce soient des électrons dans la bande de conduction ou des trous dans la bande de valence – et la conductivité devrait donc augmenter avec la valeur absolue de la tension de grille. C'est bien ce qui est observé. Par contre à tension de grille nulle, le niveau de Fermi (voir §IV.2.2.1.) est juste aux points de contact entre bandes de valence et de conduction, précisément là où la densité d'états s'annule et où il n'y a donc pas de porteurs de charge mobiles : la conductivité devrait donc être nulle. La surprise est qu'expérimentalement la conductivité ne descend jamais sous une **valeur minimale** de l'ordre du quantum de conductance ($\frac{e^2}{h} = 0,038 / k\Omega$). Malgré de très nombreux travaux théoriques, il n'existe toujours pas d'explication convaincante du minimum de conductivité du graphène à l'heure actuelle.

Par ailleurs, des mesures de conductivité électrique du graphène obtenu par exfoliation mécanique sur SiO₂, ont révélé des limites de mobilité des porteurs de charge de l'ordre de $2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ à la température ambiante [21], pour une densité de porteurs de charge $n \approx 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ auquel correspond un libre parcours moyen $l > 2 \mu\text{m}$. Si ce résultat est atteint, cette mo-

bilité deviendra alors supérieure à celle du composé semi-conducteur InSb (de l'ordre de $7,7 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ [22]) et de celle de nanotubes de carbone (de l'ordre de $1 \times 10^5 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ [23]). Jusqu'à présent, la mobilité mesurée à l'ambiante est de l'ordre de $15.000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$.

L'étude [21] a également montré que les vibrations thermiques (phonons) n'ont que des effets exceptionnellement faibles sur la conduction des électrons présents dans le graphène. En général, dans un matériau, l'énergie thermique fait vibrer les atomes, augmente donc la résistivité électrique intrinsèque, et limite par conséquent la conductivité maximale dans celui-ci. Cette résistivité ne peut être réduite que par fort refroidissement du matériau. Ainsi, ces mesures montrent que la résistivité du graphène à température ambiante est de l'ordre de $10 \text{ n}\Omega \cdot \text{m}$, alors que l'argent (Ag), le meilleur matériau jusqu'alors, présente une résistivité de $15,8 \text{ n}\Omega \cdot \text{m}$. Ceci représente donc une amélioration d'environ 35%.

IV.3.2. La conduction thermique

Les propriétés surprenantes du graphène n'intéressent pas uniquement le domaine électronique mais également le domaine thermique.

Le graphite était déjà connu pour sa conductivité thermique élevée, mais celle-ci augmente encore lorsque l'on réduit le nombre de couches. La conductivité thermique atteint ainsi une valeur maximale d'environ $4000 \text{ Wm}^{-1} \text{K}^{-1}$ sur une monocouche. Le cas du graphène suspendu (ou autosupporté) fait exception. En effet, l'absence d'interaction avec les autres couches fait nettement augmenter la conductivité thermique jusqu'à $5000 \text{ Wm}^{-1} \text{K}^{-1}$. Le graphène suspendu est ainsi le matériau avec la conductivité thermique la plus haute jamais mesurée [23].

La conductance thermique du graphène suspendu mais également celle du graphène déposé sur substrat est largement supérieure à celle de tous les matériaux utilisés dans la microélectronique classique.

Dans le Tableau IV-1, on a reporté la conductivité thermique K expérimentale des allotropes du carbone.

| Type d'échantillon | $K (\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1})$ | Référence |
|--|-----------------------------------|-----------|
| Graphène monocouche (suspendu) | ~ 5000 | [24, 25] |
| Graphène monocouche (déposé sur substrat) | ~ 3000 – 4000 | [25] |

| | | |
|----------------------|---------------|--------------|
| Graphène bicouche | ~ 2800 | [25] |
| MW-CNT ¹⁵ | ~ 3000 | [26] |
| SW-CNT ¹⁶ | ~ 1750 – 7000 | [27, 28, 29] |
| CNT | ~ 1500 – 2900 | [30] |
| Diamant | ~ 1000 – 2200 | [31] |

Tableau IV-1 : Comparaison des conductivités thermiques de certains allotropes du carbone

Le graphène complémentaire du silicium ?

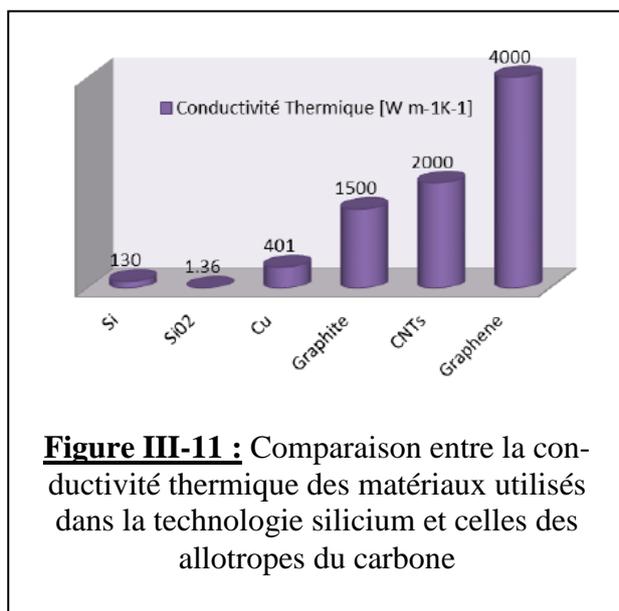


Figure III-11 : Comparaison entre la conductivité thermique des matériaux utilisés dans la technologie silicium et celles des allotropes du carbone

Une des limites actuelles de la technologie basée sur le silicium est l'échauffement (élévation de température) des dispositifs micro-électroniques. L'augmentation exponentielle du nombre de dispositifs par unité de surface (selon la loi de Moore [32]) a pour conséquence une augmentation de la puissance dissipée et une augmentation du nombre de couches d'interconnexions. Il devient alors difficile d'évacuer la chaleur générée dans les régions actives des dispositifs de plus en plus

encapsulés en systèmes complexes et multicouches. Les conséquences sont les phénomènes de "break down" réversibles ou irréversibles qui conduisent à la dégradation ou au claquage du dispositif. L'origine des problèmes thermiques de tous les dispositifs en technologie silicium est la faible conductivité thermique des matériaux utilisés. Un objectif de la nanoélectronique est de trouver des solutions qui permettent de gérer les flux thermiques dans les circuits intégrés. Cet objectif est peu compatible avec les matériaux actuels (Si, SiO₂ et Cu pour les interconnexions) présentant des conductivités thermiques faibles comparées à celle des allotropes du carbone, comme indiqué sur le graphe de la figure IV-11. La différence est très évidente, la conductivité thermique du graphène, en particulier, étant plus de trente fois supé-

¹⁵ MW-CNT : nanotubes multi-parois

¹⁶ SW-CNT : nanotubes mono-parois

rieure à celle du silicium. Une solution possible est donc d'utiliser le graphène comme vecteur de diffusion de la chaleur [33].

IV.4. Applications

Le graphène 2D présente d'énormes potentialités dans différents domaines [34]. Le graphène est un des matériaux les plus résistants mais aussi les plus étirables [35]. Il détient le record de la conductivité thermique entre $(4,84 \pm 0.44) \times 10^3$ et $(5,30 \pm 0.48) \times 10^3 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [36] et il est pratiquement transparent [37]. Ces propriétés font déjà du graphène un matériau unique, mais ce sont les propriétés électroniques [38] qui attirent le plus la communauté scientifique.

Avec une mobilité mesurée de $15.000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [39] qui pourrait atteindre $200.000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [21] à température ambiante le graphène devient extrêmement prometteur. Il intéresse ainsi la nanoélectronique [40,41], la spintronique [42], la photonique et l'optoélectronique [43]. Ses propriétés mécaniques et sa transparence permettent la conception de couches conductrices, transparentes et flexibles [44], utilisables dans un nombre infini d'applications. Mais la recherche ne se focalise pas uniquement sur la forme 2D du graphène. Grâce à la nanostructuration d'un plan 2D, il est désormais possible de synthétiser le graphène sous sa forme 1D : les nanorubans de graphène (GNR), ou 0D : les nanoflocons de graphène (GNF).

IV.5. Physique de l'effet Hall quantique dans le graphène

IV.5.1. Introduction

L'investigation expérimentale et théorique de l'effet Hall quantique a connu un renouveau inattendu avec la découverte en 2005 d'un EHQE¹⁷ particulier dans le graphène [1, 2]. Comparées aux systèmes électroniques 2D étudiés jusqu'à présent, nous avons vu que les propriétés électroniques à basse énergie dans le graphène sont décrites par une équation relativiste de Dirac pour les particules 2D sans masse plutôt que par l'équation de Schrödinger non relativiste habituelle pour les électrons du réseau avec une masse effective non nulle. Une conséquence directe de cette différence est une séquence non conventionnelle de plateaux de Hall centrés autour des valeurs du facteur de remplissage $\nu = \pm 2(2n + 1)$ pour le rapport $\nu = \frac{n_{el}}{N_L}$ (relation III.16, Chap. III) entre la densité électronique n_{el} et la dégénérescence (ou densité de flux à travers la surface 2D) $N_L = eB/h$. Il est donc normal de se demander si les deux effets, l'EHQE dans les gaz d'électrons 2D conventionnels (non relativistes) et celui dans le gra-

¹⁷ EHQE : Effet Hall Quantique Entier

phène, révèlent les mêmes propriétés universelles, notamment en ce qui concerne la quantification de la résistance de Hall \mathcal{R}_H , ou s'il existe des différences significatives.

Nous rappelons que lorsqu'on limite la discussion aux électrons non en interaction, on a affaire à l'EHQE alors que si on prend en compte les interactions électroniques, on a affaire à l'EHQF¹⁸ qui a été découvert en 2009 dans le graphène [45, 46].

IV.5.2. Niveaux de Landau relativistes

Un moyen pratique de sonder les propriétés de transport étranges du graphène, est d'appliquer un champ magnétique \vec{B} perpendiculaire au plan de la feuille de graphène. Comme un électron au voisinage du niveau de Fermi E_F vérifie une relation de dispersion inhabituelle $E = \pm c^* p$ (relation IV-10), le mouvement cyclotron de l'électron dans le champ magnétique n'est pas standard (voir §III.2.1., Chap. III). En effet, les orbites cyclotron sont parcourues à la pulsation ω_c^* et ont un rayon r_c^* donnés par :

$$\begin{cases} \omega_c^* = eBc^*/E \\ r_c^* = |E|/eBc^* \end{cases} \quad (\text{IV-14})$$

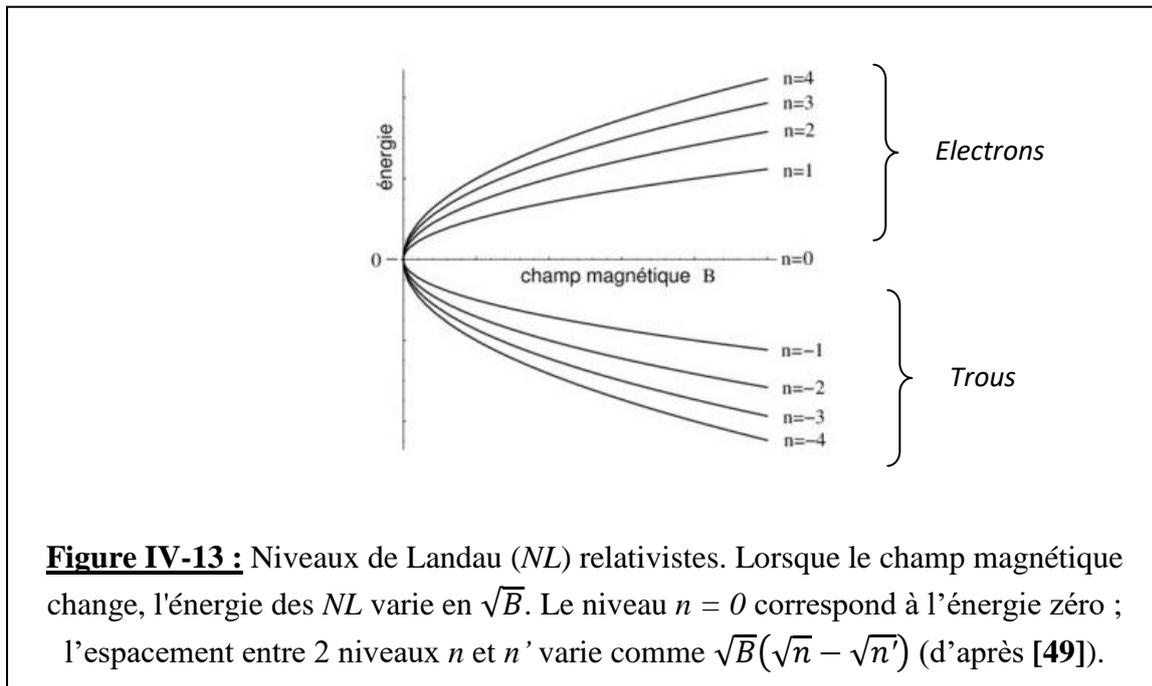
Si on impose maintenant la quantification du flux magnétique égal à $\mathbf{B} \times \pi r_c^{*2} = n\hbar/e$, on trouve que l'énergie est quantifiée selon [47] :

$$E_n = \pm c^* \sqrt{2\hbar e B |n|} \quad (\text{IV-15})$$

Où n est un entier relatif dont le signe est \pm . On voit que les niveaux de Landau E_n ont une dépendance en champ magnétique et en indice n inhabituelle. **En particulier, ils ne sont plus équidistants** (comme dans un 2DEG). La dépendance des niveaux de Landau en fonction du champ magnétique est représentée par la figure IV-13. En effet, à un champ magnétique constant, les différents niveaux de Landau du graphène ne sont donc pas équidistants en énergie, comme cela est le cas pour les gaz 2D obtenus dans les semi conducteurs à structure de bande parabolique. Les niveaux de Landau correspondant à des nombres quantiques élevés ($n \gg 1$). sont plus proches les uns des autres que les niveaux correspondant à de faibles valeurs de n . A $B = 30$ Tesla l'énergie séparant les deux niveaux consécutifs $n = 0$ et $n = 1$ est très grande (~ 0.2 eV) devant l'énergie d'activation thermique ($k_B T = 0.026$ eV) à température ambiante. La quantification en niveaux de Landau dans le graphène est donc observable à

¹⁸ EHQF : Effet Hall Quantique Fractionnaire

température ambiante. Le graphène est le seul matériau connu dans lequel l'effet Hall quantique a été observé jusqu'à 300K.



Quand on compare cette dépendance à celle des niveaux de Landau usuels ($E_n \propto (n + 1/2)B$, voir expression III-11), on remarque l'absence du facteur 1/2 à côté de l'indice n . Ceci a une conséquence très importante : il existe dans le graphène un niveau de Landau à énergie nulle $E_{n=0} = 0$ (d'après l'expression IV-15). En termes classiques, il s'agit d'une orbite cyclotron de rayon nul !

IV.6. Spectroscopie des niveaux de Landau

Le comportement inhabituel des niveaux de Landau du graphène a été mis en évidence en 2006 dans une expérience de spectrométrie infrarouge menée par Sadowski et al. [48].

Dans cette expérience, un échantillon de graphène épitaxial à base de carbure de silicium (SiC) a été utilisé, avec plusieurs couches actives faiblement couplées. Les résultats ont été confirmés sur une monocouche de graphène obtenue par exfoliation [50].

L'expérience a consisté à mesurer des spectres de transmission de lumière infrarouge, c'est-à-dire à mesurer « l'efficacité » de la transmission de la lumière à travers l'échantillon de graphène, en fonction de l'énergie des photons. De tels spectres ont été mesurés sur des échantillons maintenus à basse température et placés à l'intérieur d'un aimant, de manière à appliquer un champ magnétique B d'intensité réglable, perpendiculaire à la surface de l'échantillon.

Lorsque l'échantillon est exposé à une irradiation monochromatique de fréquence ω , une partie de la lumière est absorbée si sa fréquence coïncide avec la différence d'énergie des paires de NL relativistes, c'est-à-dire si $\hbar\omega = E_n - E_{n'} = \Delta E_{n,n'}$, ce qui se traduit par un abaissement local de la transmission relative en fonction de la fréquence.

On peut également dire qu'à cause de la structure que les niveaux d'énergie électroniques acquièrent lorsque le graphène est soumis à un champ magnétique (voir figures IV-13 et IV-14), on s'attend à ce que des photons d'une énergie de l'ordre de la séparation entre les niveaux de Landau ($\Delta E_{n,n'} \propto c^* \sqrt{\hbar e B}$) puissent être efficacement absorbés. On parle de transitions optiques entre niveaux de Landau, ou encore d'excitations optiques des électrons du niveau de Landau L_n au niveau $L_{n'}$.

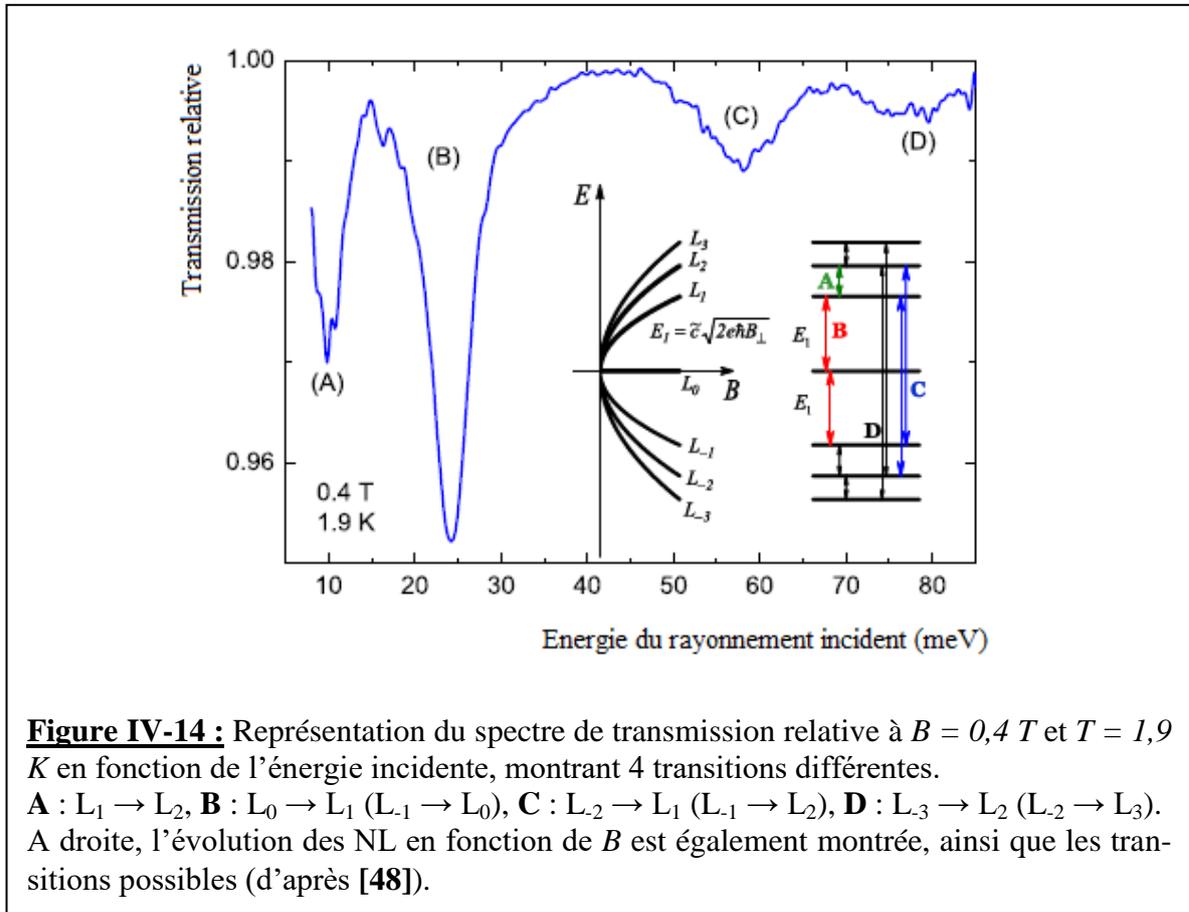
Toutes les transitions de L_n vers $L_{n'}$ ne sont pas possibles. Pour être permise, une transition doit vérifier certaines règles :

1. La transition n'est possible que s'il y a des électrons sur le « niveau de départ » L_n et que simultanément (à cause du principe de Pauli), des états électroniques vides existent au « niveau d'arrivée » $L_{n'}$.
2. Seules les transitions qui vérifient la condition $|n'| = |n| \pm 1$ (appelée règle de sélection), sont autorisées. Ce deuxième critère, moins évident que le premier, provient de la conservation de l'impulsion totale lorsqu'un photon est absorbé.

La figure IV-14 montre un tel spectre à température $T = 1,9\text{K}$ pour un champ magnétique de $0,4\text{ T}$. On y remarque des résonances correspondant à des transitions entre NL relativistes (transitions A, B, C et D).

Quelques transitions optiques permises entre niveaux de Landau du graphène sont représentées par des flèches dans l'encart (à droite) de la figure IV-14. Si les états à énergie positive et à énergie négative sont parfaitement symétriques, c'est-à-dire s'il y a une symétrie électron-trou parfaite, les transitions $L_0 \rightarrow L_1$ et $L_{-1} \rightarrow L_0$ ont la même énergie. En effet, on a vu que l'énergie des niveaux de Landau est $E_n = \pm c^* \sqrt{2\hbar e B |n|}$ (expression IV-15). La transition optique $L_0 \rightarrow L_1$ se fait donc à une énergie $\Delta E_{0,1} = E_1 - E_0 = c^* \sqrt{2\hbar e} \times \sqrt{B}$ qui est la même énergie que l'énergie $\Delta E_{-1,0} = E_0 - E_{-1}$ de la transition $L_{-1} \rightarrow L_0$. Cette propriété est vérifiée par d'autres paires de transitions optiques, telles que $L_{-1} \rightarrow L_2$ et $L_{-2} \rightarrow L_1$ dont l'énergie $\Delta E_{-1,2} = \Delta E_{-2,1} = c^* \sqrt{2\hbar e} (\sqrt{2} + \sqrt{1}) \times \sqrt{B}$, ou encore $L_{-2} \rightarrow L_3$ et $L_{-3} \rightarrow L_2$ dont l'énergie est $\Delta E_{-2,3} = \Delta E_{-3,2} = c^* \sqrt{2\hbar e} (\sqrt{3} + \sqrt{2}) \times \sqrt{B}$, etc. Ainsi, les énergies des transitions op-

tiques $\Delta E_{n,n'}$ devraient varier avec la racine carrée du champ magnétique des NL car $E_n \propto \sqrt{B}$ (expression IV-15).

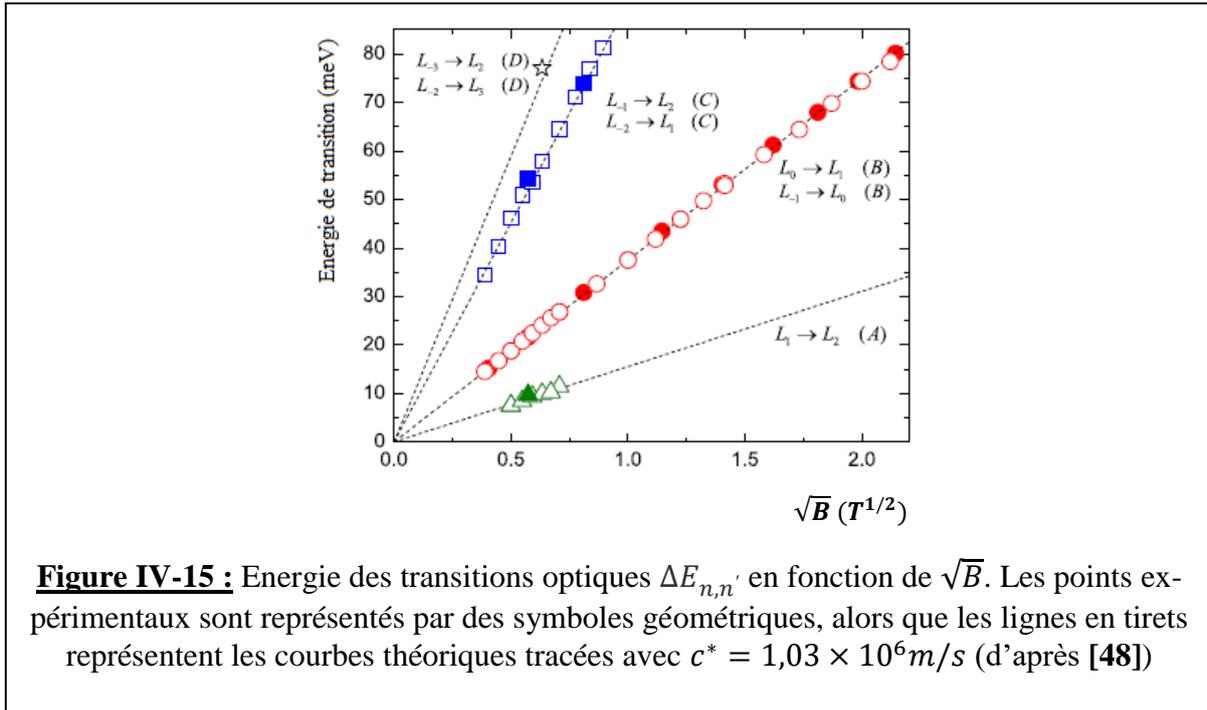


Les points dans la figure IV-15 représentent les énergies des transitions optiques observées dans les expériences. Ces énergies sont tracées en fonction de la racine carrée du champ magnétique. Elles montrent toutes une dépendance linéaire, ce qui constitue une preuve irréfutable du caractère « relativiste » des électrons dans le graphène (parce que la dépendance des niveaux de Landau en racine carrée du champ magnétique est une conséquence directe de la relation de dispersion « relativiste » $E = \pm c^*p$ à champ nul, d'après la relation III-10).

IV.7. Effet Hall quantique relativiste

Bien que dans le graphène existent les deux types d'effets Hall quantiques, nous ne présentons que l'EHQE.

Avant les expériences de spectroscopie de Sadowski et al. [48], la nature relativiste des NL dans le graphène a été mise en évidence de manière indirecte avec l'observation d'un EHQE inhabituel, en 2005, par deux groupes différents [1, 2].



La figure IV-16 montre les mesures de Zhang et al. [2].

On y observe la signature habituelle d'un EHQE, avec des paliers dans la résistance de Hall accompagnés d'une résistance longitudinale nulle R_L , lorsqu'on fait varier le champ magnétique [figure III-16(a)]. Une tension de grille est appliquée à l'échantillon afin d'obtenir une densité de porteurs finie. On a vu dans le chapitre III qu'on peut comprendre l'EHQE dans le cadre de la localisation des électrons dans des NL partiellement remplis.

Comme on peut faire varier dans le graphène la densité des porteurs sur une large gamme à l'aide d'une tension de grille, on peut également changer le facteur de remplissage dans la gamme $-3 < \nu < 3$ à un champ magnétique constant (figure IV-16(c)).

Expression de la conductivité transversale

Dans le graphène, la conductivité transversale a également pour expression $\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}$ où ν est le facteur de remplissage qui lorsqu'il est entier donne l'EHQE et des plateaux de conductance. En raison des niveaux de Landau non conventionnels du graphène (figure IV-13), l'effet Hall quantique est qualifié d'anormal. Les valeurs entières de ν s'écrivent :

$$\nu = i = \pm 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{IV-16})$$

Le facteur 4 est égal au produit de la dégénérescence de spin ($g_s = 2$) et de la dégénérescence de vallée ($g_v = 2$, pour les vallées K et K'). Le facteur n dans l'expression (IV-16) est l'indice

du niveau de Landau; c'est un entier positif ou nul. Le facteur $1/2$ apparaît car la moitié des états dégénérés du niveau d'énergie zéro sont occupés par des trous et l'autre moitié par des électrons. Les plateaux sont équidistants et séparés de la quantité $4 \frac{e^2}{h}$.

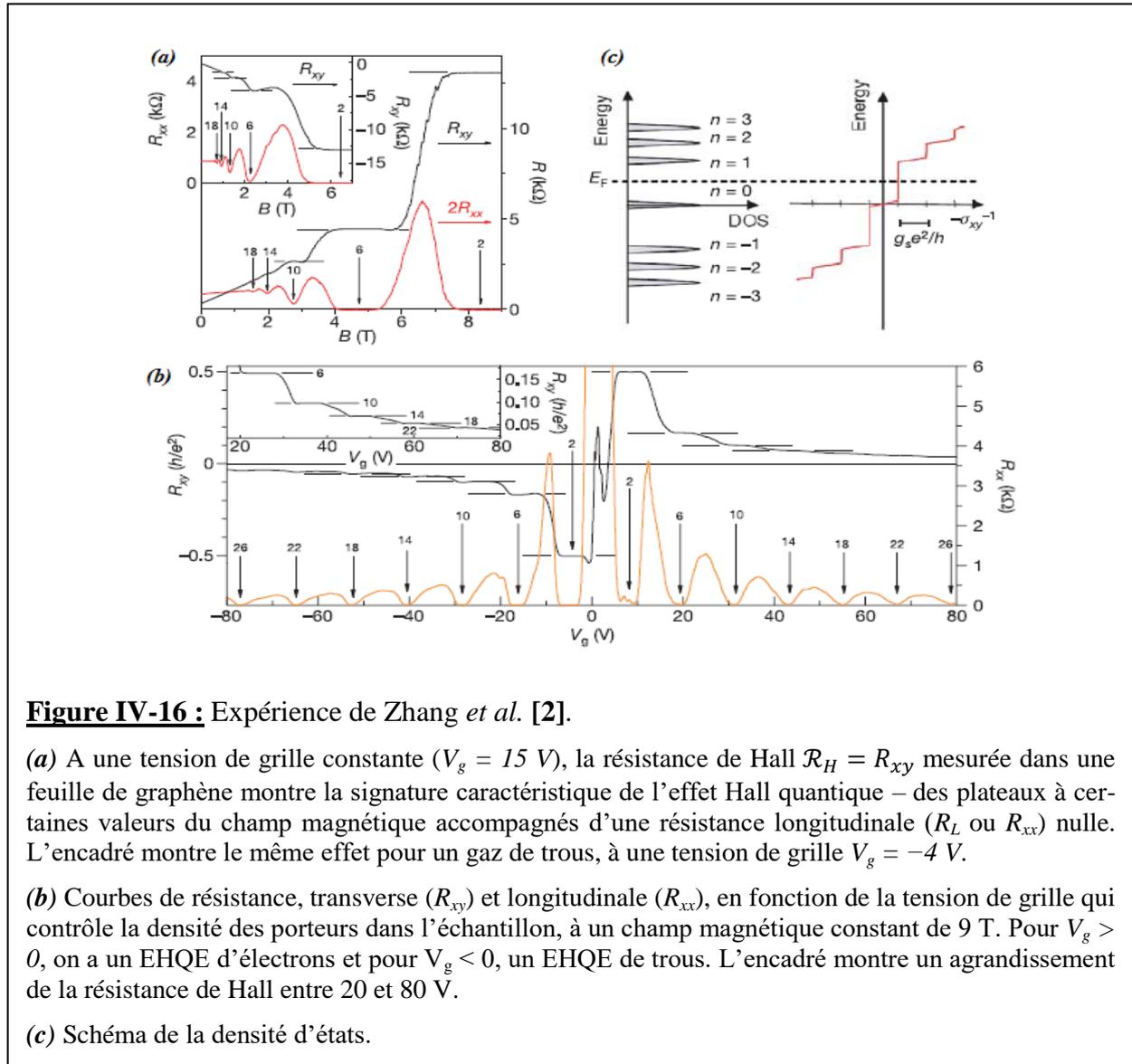


Figure IV-16 : Expérience de Zhang *et al.* [2].

Désordre dans le graphène

Il est généralement d'ordre structural et a pour causes principales :

- les ondulations de la surface du graphène (le graphène idéalement plan à l'échelle atomique n'existe pas; cette surface présente des ondulations);
- les défauts d'ordre topologique comme les dislocations;
- la présence d'adatoms, de lacunes et d'impuretés;

- les défauts d'hybridation sp^3 ;

- les interactions électron-électron.

Comme dans le gaz 2D conventionnel, le désordre dans le graphène est nécessaire pour l'apparition des plateaux de conductance.

IV.8. Le graphène bicouche

IV.8. 1. Structure de bandes

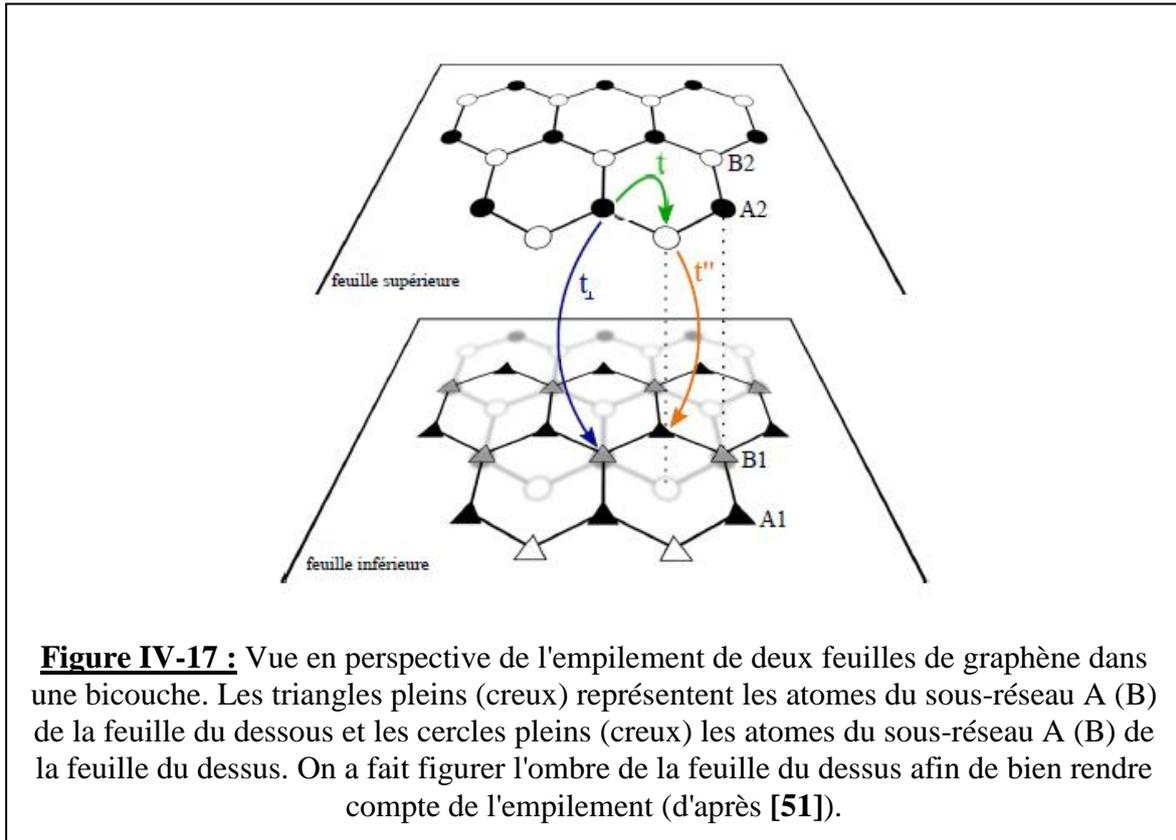
Sans rentrer dans certains détails qui dépassent le cadre de cette étude, nous voulons mentionner l'existence de graphène en multicouches et particulièrement les bicouches de graphène (bilayer graphene) qui peuvent être utilisées en microélectronique et dans des dispositifs supraconducteurs, entre autres.

Une bicouche de graphène est un système de deux feuillets empilés l'un sur l'autre. Dans cet empilement, un atome du sous-réseau A de la feuille supérieure se situe directement au dessus d'un atome du sous-réseau B de la feuille inférieure (Figure IV-16). Ces deux atomes forment un dimère : on parle de couplage fort A2-B1 et d'empilement de type Bernal. La maille élémentaire contient maintenant quatre atomes, deux dans chaque feuille, notés A1, B1, A2 et B2. En outre, la première zone de Brillouin est identique à celle de la monocouche : il s'agit d'un hexagone dont les sommets peuvent être regroupés en deux triplets de points inéquivalents, K et K', situés aux mêmes positions que dans le cas de la monocouche. On a donc une dégénérescence de vallée analogue au cas de la monocouche.

Pour déterminer la structure de bande électronique, on peut se limiter au couplage entre premiers voisins, t , dans chaque feuille, au couplage fort t_{\perp} , au-niveau des dimères (A2-B1) et au couplage direct faible t'' , entre A1 et B2 (Figure IV-17).

Dans le cas de la bicouche de graphène, la résolution de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien (à quatre composantes) donne quatre bandes d'énergie :

- Deux bandes $E_{\pm}^{(2)}$ de haute énergie qui correspondent aux dimères A2-B1
- Deux bandes de basse énergie $E_{\pm}^{(1)}$ qui permettent de rendre compte des propriétés de transport, car on peut montrer que la bande de haute énergie n'est occupée que pour de fortes densités de porteurs de charge (autour de $2,5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$).



Les quatre bandes sont représentées sur la figure IV-18. En particulier les deux bandes de basse énergie peuvent être approximées par :

$$E_{\pm}^{(1)}(p) \approx \pm \frac{t_{\perp}}{2} \left[\sqrt{1 + 4 \frac{v_F^2 p^2}{t_{\perp}^2}} - 1 \right] \quad (\text{IV-16})$$

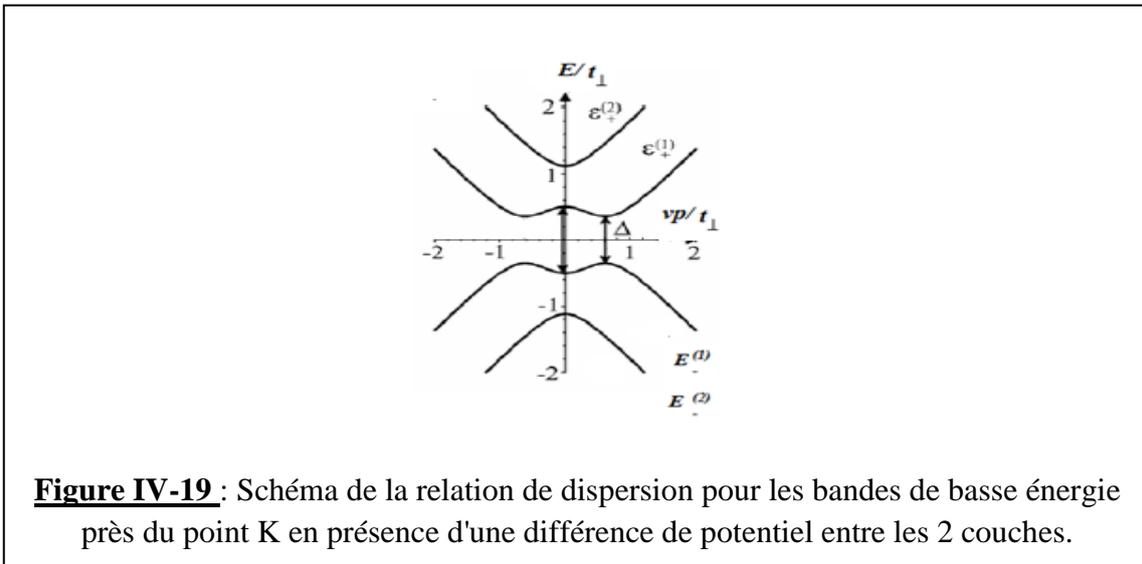
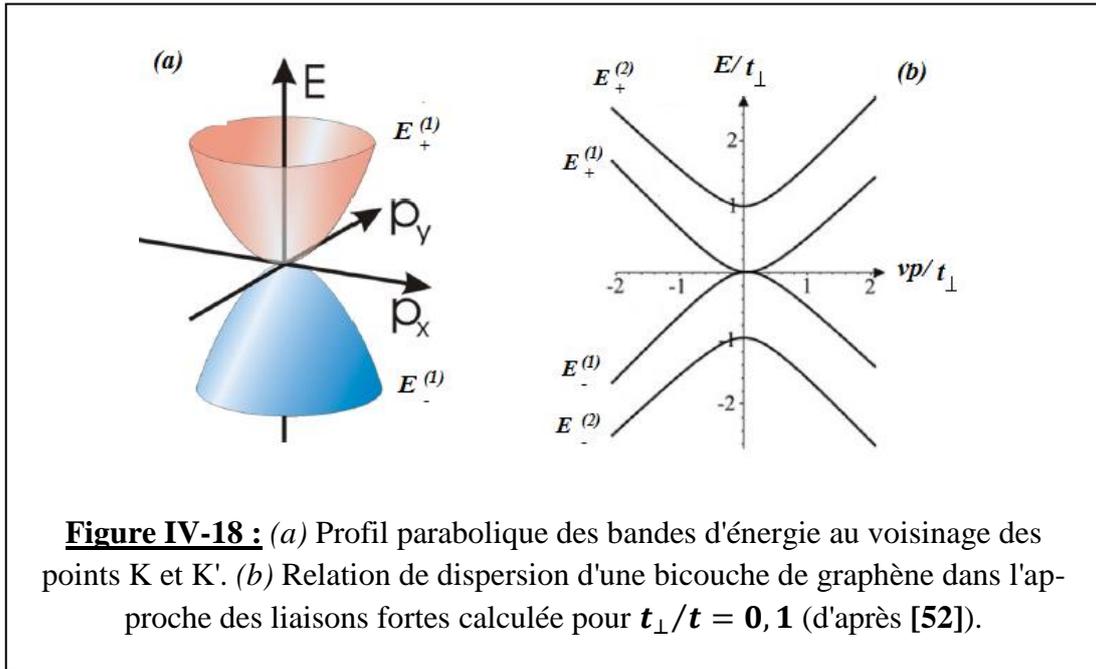
Où p est la quasi-impulsion du porteur de charge et $v_F = \frac{3t_{\perp}a}{2\hbar}$. La masse effective est reliée aux coefficients de sauts selon :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2} \frac{t_{\perp}}{(\sqrt{3}at/2)^2} \quad (\text{IV-17})$$

Où $a = \sqrt{3}a_0 = 0,246 \text{ nm}$ (pas du réseau), $t = 3,16 \text{ eV}$, $t_{\perp} = 0,39 \text{ eV}$ et $t'' = 3,16 \text{ eV}$.

On voit sur cette figure que le graphène bicouche est un semi-conducteur de gap nul possédant, pour $k \ll k_0$, une bande de dispersion parabolique, qui devient linéaire (comme dans le cas du graphène monocouche) quand $k \gg k_0$, avec $k_0 = t_{\perp}/2v_F\hbar$.

L'application d'un champ électrique sur un échantillon bicouche, provoque le décalage du potentiel électrochimique entre les deux couches de graphène. La différence de potentiel électrochimique est égale à 2Δ , où Δ a la dimension d'une énergie (figure IV-19).



L'hamiltonien du système est modifié pour inclure des termes diagonaux Δ ($-\Delta$) représentant l'énergie des sites de la couche inférieure (supérieure).

En considérant que $\hbar v_F k \ll \Delta \ll t_{\perp}$, on montre que la relation de dispersion s'écrit :

$$E_k \approx \Delta - 2(\hbar v_F k)^2/t_{\perp} + (\hbar v_F k)^4/(2t_{\perp}^2 \Delta) \quad (\text{IV-17})$$

IV.8. 2. Niveaux de Landau (NL)

Dans le graphène bicouche, les porteurs de charge à basse énergie possèdent une masse effective m^* , c'est-à-dire que les bandes de dispersion sont paraboliques. Dans ce système, la quan-

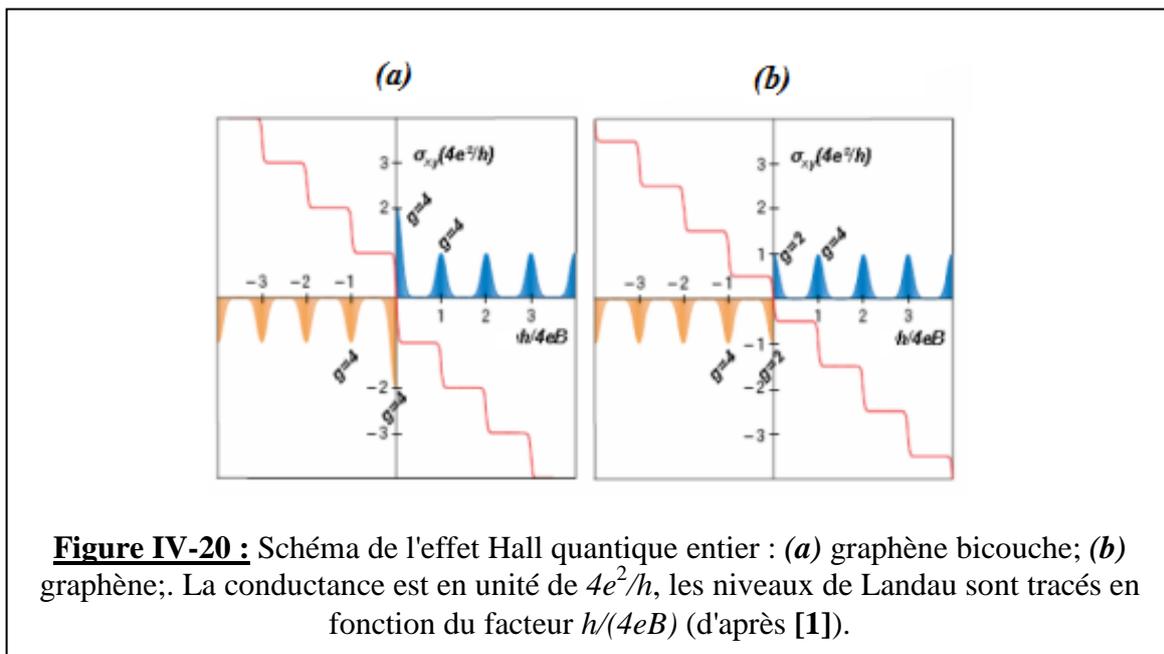
tification en NL est différente à la fois de celle du graphène monocouche et de celle, conventionnelle, des 2DEG. L'énergie des NL s'écrit :

$$E_n = \pm \left[\hbar \omega_c \sqrt{n(n-1)} \right] \quad (\text{IV-18})$$

Où $\omega_c = eB/m^*$ est la pulsation cyclotron. Contrairement au graphène, l'énergie des NL varie linéairement avec le champ magnétique. On remarque également que les deux états de plus basse énergie sont tous deux d'énergie nulle : $E_0 = 0$ et $E_1 = 0$. L'existence de ce NL deux fois dégénéré à énergie nulle, entraîne l'apparition d'un effet Hall quantique non conventionnel pour le graphène bicouche.

Ce qui signifie que, si on tient compte de la dégénérescence de 4 due au spin ($g_s = 2$) et aux points K et K' ($g_v = 2$) (voir plus haut), ainsi que la dégénérescence induite par la présence de deux NL, $n = 0$ et $n = 1$, **alors le niveau d'énergie nulle du graphène bicouche possède une dégénérescence totale égale à 8 partagée entre électrons et trous.**

La bande de dispersion prend alors la forme non conventionnelle d'un "dos de chameau" (figure IV-19). Le graphène bicouche devient alors un semi-conducteur à gap indirect, dont la valeur du gap (situé en $k_{min} = \sqrt{2}\Delta/(\hbar v_F)$) est contrôlable par la seule application d'un champ électrique (ou différence de potentielle) perpendiculaire au plans des deux couches. Cette particularité ouvre pour ce système bicouche de réelles et importantes perspectives d'applications technologiques.



La figure IV-20 montre de manière schématique la densité d'états du graphène et du graphène bicouche à un champ magnétique constant, ainsi que la conductance de Hall σ_{xy} qui en découle. Comme décrit précédemment, chaque niveau de Landau rempli va contribuer à la conductance à hauteur de $4e^2/h$. A champ constant, les valeurs de la conductance de Hall ne vont alors dépendre que du nombre d'états qui vont successivement se remplir lorsque le niveau de Fermi sera modifié.

Pour une même valeur du champ magnétique, la densité d'états du niveau $n = 0$ du graphène bicouche est donc deux fois plus importante que celle du graphène (voir figure IV-20). La séquence de facteurs de remplissage qui (qui découlent de la présence d'un tel niveau) est : $\nu = \dots, -12, -8, -4, 4, 8, 12, \dots$

Les plateaux de conductance vont alors former une suite ininterrompue de marches équidistantes, séparées de $4e^2/h$:

$$\sigma_{xy} = 4n \frac{e^2}{h} \quad (\text{IV-19})$$

BIBLIOGRAPHIE

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morosov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S. Dubonos, A. Firsov, **Nature** **438**, 197(2005)
- [2] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, et P. Kim, **Nature** **438**, 201(2005)
- [3] X. Du, I. Skachko, F. Duerr, A. Luican, E.Y. Andrei, **Nature** **462**, 192(2009)
- [4] K.I. Bolotin, F. Ghahari, M.D. Shulman, H.L. Stormer, P. Kim, **Nature** **462**, 196(2009)
- [5] P.R. Wallace, **Phys. Rev.** **71**, 622(1947)
- [6] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morosov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, I. Grigorieva et A. Firsov, **Science** **306**, 666(2004)
- [7] J-N. Fuchs, M.O. Goerbig et B. Plaçois, **Reflets de la Physique n°25**, 4(2011)
- [8] G. Li, A. Luican, et E.Y. Andrei, **Phys. Rev. Lett.** **102**, 176804(2009)
- [9] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, et A. K. Geim, **Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.** **102**, 10451(2005)
- [10] P. Blake, P. D. Brimicombe, R. R. Nair, T. J. Booth, D. Jiang, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, S. V. Morozov, H. F. Gleeson, E. W. Hill, A. K. Geim, et K. S. Novoselov, **Nano. Lett.** **8**, 1704(2008)
- [11] S. Stankovich, D. A. Dikin, R. D. Piner, K. A. Kohlhaas, A. Kleinhammes, Y. Jia, Y. Wu, SonBinh T. Nguyen, et R. S. Ruo, **Carbon** **45**, 1558(2007)
- [12] G. Eda, G. Fanchini, et M. Chhowalla, **Nat. Nanotechnol.** **3**, 270(2008)
- [13] D. Li, M. B. Muller, S. Gilje, R. B. Kaner, et G. G.Wallace, **Nat. Nanotechnol.** **3**, 101(2008)
- [14] C. Berger, Z. Song, T. Li, X. Li, A. Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. Dai, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, et W. A. de Heer, **J. Phys. Chem. B** **108**, 19912(2004)
- [15] C. Berger, Z. Song, X. Li, X. Wu, N. Brown, C. Naud, D. Mayou, T. Li, J. Hass, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, et W. A. de Heer, **Science** **312**, 1191(2006)
- [16] P. W. Sutter, J.-I. Flege, et E. A. Sutter, **Nat. Mater.** **7**, 406(2008)
- [17] A. Reina, X. Jia, J. Ho, D. Nezich, H. Son, V. Bulovic, M. S. Dresselhaus, et J. Kong, **Nano. Lett.** **9**, 30(2009)

- [18] X. Chena, L. Zhangb, et S. Chena, **Synth. Met.** **210**, 95(2015)
- [19] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, et A.K. Geim, **Rev. Mod. Phys.** **81**, 109(2009)
- [20] Y. Zhang,J.P. Small, W.V. Pontius, et P. Kim, **Appl. Phys. Lett.** **86**, 073104 (2005)
- [21] J-H. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami et M. S. Fuhrer, **Nat. Nanotechnol.** **3**, 206(2008)
- [22] H.J. Hrostowski, F.J. Morin, T.H. Geballe, et G.H. Wheatley, **Phys. Rev.** **100**, 1672(1955)
- [23] T. Dürkop, S. Getty, E. Cobas, et M.S. Fuhrer, **Nano. Lett.** **4**, 35(2004)
- [24] A. Balandin, **Nat. Mater.** **10**, 569(2011)
- [25] S. Ghosh, W. Bao, D. L. Nika, S. Subrina, E. P. Pokatilov, C. N. Lau et A. Balandin, **Nat. Mater.** **9**, 555(2010)
- [26] P. Kim, L. Shi, A. Majumdar et P. L. McEuen. **Phys. Rev. Lett.** **87**, 215502(2001)
- [27] J. Hone, M. Whitney, C. Piskoti et A. Zettl, **Phys. Rev. B** **59**, R2514(1999)
- [28] E. Pop, D. Mann, Q. Wang, K. Goodson et H. Dai, **Nano. Lett.** **6**, 96(2005)
- [29] C. Yu, L. Shi, Z. Yao, D. Li et A. Majumdar, **Nano Lett.** **5**, 1842(2005)
- [30] M. Fujii, X. Zhang, H. Xie, H. Ago, K. Takahashi, T. Ikuta, H. Abe et T. Shimizu, **Phys. Rev. Lett.** **95**, 65502(2005)
- [31] G.A. Slack, **J. Appl. Phys.** **35**, 3460(1964)
- [32] G. E. Moore, **International Electron Devices Meeting, IEEE**, 11(1975)
- [33] R. Prasher, **Science** **328**,185(2010)
- [34] A.K. Geim, **Science** **324**, 1530(2009)
- [35] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar et J. Hone, **Science** **321**, 385(2008)
- [36] A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F.Miao et C. N. Lau. **Nano Lett.** **8**, 902(2008)
- [37] R. Nair, P. Blake, A. Grigorenko, K. Novoselov, T. Booth, T. Stauber, N.Peres et A. Geim, **Science** **320**, 1308(2008)

- [38] A.H.C. Neto, F. Guinea, N. Peres, K. Novoselov et A. Geim, **Rev. Mod. Phys.** **81**, 109(2009)
- [39] A.K. Geim, et K. Novoselov, **Nat. Mater.** **6**, 183(2007)
- [40] F. Schwierz, **Nat. Nanotechnol.** **5**, 487(2010)
- [41] O.V. Yazyev, et S. G. Louie. **Nat. Mater.** **9**, 806(2010)
- [42] N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman et B. J. Van Wees, **Nature** **448**, 571(2007)
- [43] Bonaccorso, F., Z. Sun, T. Hasan et A. Ferrari, **Nat. Photonics** **4**, 611(2010)
- [44] K.S. Kim, Y. Zhao, H. Jang, S. Y. Lee, J. M. Kim, J. H. Ahn, P. Kim, J.Y. Choi et B. H. Hong, **Nature** **457**, 706(2009)
- [45] X. Du, I. Skachko, F. Duerr, A. Luican, et E.Y. Andrei, **Nature** **462**, 192(2009)
- [46] K.I. Bolotin, F. Ghahari, M.D. Shulman, et H.L. Stormer, P. Kim, **Nature** **462**, 196(2009)
- [47] Z. Jiang, Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, et P. Kim, **Solid State Commun.** **143**, 14(2007)
- [48] M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, et W. A. de Heer, **Phys. Rev. Lett.** **97**, 266405(2006)
- [49] M. O. Goerbig et P. Lederer, Notes de Cours « **Electrons bidimensionnels sous champ magnétique fort : la physique des effets Hall quantiques** », Université Paris Sud (2006)
- [50] Z. Jiang, E. A. Henriksen, L. C. Tung, Y.-J. Wang, M. E. Schwartz, M. Y. Han, P. Kim et H. L. Stormer, **Phys. Rev. Lett.** **98**, 197403(2007)
- [51] J. Guignard, Thèse de Doctorat "**Etude de l'effet Hall quantique dans le graphène exfolié en vue d'une application en métrologie quantique**", Université Paris-Sud 11 (2011)
- [52] E. McCann, D. S.L. Abergel, et V.I. Fal'ko, **Solid State Commun.** **143**, 110(2007)

CHAPITRE V : ESSAIS DE SIMULATION

V.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats des essais de simulation de l'effet Hall quantique entier dans un gaz bidimensionnel (2DEG) et dans le graphène.

Ces simulations ont été effectuées en utilisant un logiciel libre facile à utiliser, rapide à programmer, et extrêmement précis en termes de résultats. Ce logiciel appelé **Kwant**, a été développé pendant trois années par un groupe de chercheurs français et hollandais [1]. Il a été pensé par des physiciens, pour faciliter la vie des physiciens...

Kwant possède une librairie qui est utilisée dans le transport quantique; elle est basée sur Python, un langage de programmation scientifique de très haut niveau¹⁹. Kwant est une plateforme basée sur l'utilisation de la méthode dite des "liaisons fortes" pour traiter et résoudre une grande classe d'équations de la physique théorique quantique. Du point de vue utilisateur, l'utilisation de Kwant est très proche du formalisme mathématique naturel de la théorie : on décrit un système dans Kwant (représenté par son Hamiltonien) presque comme on écrit l'équation correspondante sur un tableau noir. En quelques dizaines de lignes de code, il est possible d'étudier des domaines très variés : magnétorésistance géante, effets Hall quantiques, points et fils quantiques, graphène, électronique moléculaire, matériaux magnétiques, supraconducteurs, etc.

Dans ce qui suit, nous allons présenter -plus ou moins succinctement- la plateforme Kwant, puis quelques exemples d'application et enfin les résultats des essais de simulation que nous avons réalisés.

V.2. La plateforme Kwant

L'histoire de la simulation numérique des problèmes de diffusion remonte aux débuts de la physique mésoscopique²⁰ [2–4] lorsque les premiers algorithmes ont été développés. Le plus populaire d'entre eux est l'algorithme des fonctions de Green récursives (RGF : Recursive Green Functions). Différents groupes ont créé leurs propres algorithmes, qui sont rapidement devenus un outil précieux pour vérifier, étendre ou même remplacer l'approche analytique,

¹⁹ En 2014, Python est devenu le langage d'initiation à l'informatique le plus utilisé dans les meilleures universités américaines, devant Java et MatLab.

²⁰ La physique **mésoscopique** est un domaine de la physique de la matière condensée qui étudie les systèmes ayant des dimensions intermédiaires entre celles de la physique quantique et de la physique classique. L'échelle des distances en cause s'étend des dimensions de l'atome jusqu'au micromètre (Wikipédia).

même s'ils étaient limités à des géométries quasi-unidimensionnelles et à un type particulier d'hamiltonien.

Néanmoins, jusqu'à présent, il n'existait aucun progiciel²¹ permettant la résolution efficace et rapide du problème de la diffusion pour différents systèmes, en utilisant la méthode des liaisons fortes.

Nous présentons ici Kwant, un progiciel disponible en libre accès sur le site <http://kwant-project.org/>, qui est conçu pour :

- résoudre les problèmes de diffusion de manière sûre et très efficace;
- présenter un haut degré d'interopérabilité²² avec d'autres progiciels et algorithmes;
- fournir un moyen relativement simple de définir l'hamiltonien discrétisé du système étudié, dans le cadre de la méthode des liaisons fortes.

Il y a deux méthodes pour résoudre un problème numériquement. La première consiste à traduire le problème dans un langage informatique et le second consiste à résoudre effectivement ce problème. Dans Kwant, ces deux étapes sont réalisées de manière très simple.

La définition d'un système physique revient à écrire un programme Python simple qui fonctionne avec des concepts physiques usuels tels que les réseaux cristallins, les symétries et les potentiels.

L'appel à la méthode des liaisons fortes pour étudier un système donné signifie la définition d'un hamiltonien spécifique sous forme matricielle. Ce hamiltonien est traduit en un graphe constitué de sites (nœuds du réseau) et d'éventuels sauts (hoppings) entre ces sites représentés par des connexions. Les sites sont désignés comme étant les sommets (vertices) de la structure et les sauts (hoppings) comme ses bords ou arêtes (edges).

V.2.1. Modèles et concepts de base du transport quantique

Nous allons discuter, dans cette section, la forme générale du modèle des liaisons fortes utilisé par Kwant, et donc des concepts fondamentaux que sont la matrice de diffusion et la conductance, par exemple.

²¹ Ensemble de logiciels munis d'une documentation, conçus pour répondre à des besoins spécifiques et permettre une utilisation autonome (Wikipédia).

²² L'interopérabilité ou *interfonctionnement* en informatique est la capacité que possède un système informatique à fonctionner avec d'autres produits ou systèmes informatiques, existants ou futurs, sans restriction d'accès ou de mise en œuvre (Wikipédia).

Les systèmes utilisant la méthode des liaisons fortes

Bien que Kwant soit également adapté aux systèmes finis, il est plutôt adapté à des systèmes infinis consistant en une région de diffusion finie à laquelle sont connectées des électrodes périodiques semi-infinies.

Dans le formalisme de Landauer-Büttiker (§I.3), ces conducteurs agissent en tant que guides d'ondes acheminant des ondes planes à l'intérieur et hors de la région de diffusion; ces électrodes (connexions) balistiques correspondent aux contacts du conducteur quantique. L'hamiltonien d'un tel système prend la forme suivante :

$$H = \sum_{i,j} H_{ij} a_i^\dagger a_j \quad (\text{V-1})$$

Où a_i^\dagger et a_j sont les opérateurs de création et d'annihilation usuels; i et j représentent les degrés de liberté du système et H_{ij} les éléments matriciels d'une matrice hermitienne²³. La première quantification²⁴ de H permet de l'écrire sous la forme :

$$H = \sum_{i,j} H_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (\text{V-2})$$

Les degrés de liberté peuvent être écrits sous la forme $|i\rangle = |r\alpha\rangle$, où \vec{r} correspond aux coordonnées d'un site du réseau cristallin et α correspond aux degrés de liberté internes (qui incluent, par exemple, une combinaison du spin et d'une orbitale atomique ou couplage spin-orbite). Dans ce cas, l'hamiltonien prend une autre forme : $H = \sum_{r,r'} H_{rr'}$, où :

$$H_{rr'} = \sum_{\alpha,\alpha'} H_{r\alpha r'\alpha'} |r\alpha\rangle \langle r'\alpha'| \quad (\text{V-3})$$

L'élément $H_{rr'}$ assure le couplage entre les sites repérés par \mathbf{r} et \mathbf{r}' .

Un hamiltonien de cette forme décrit un système physique où les sites correspondent à des atomes ou des molécules.

Kwant représente de tels hamiltoniens sous forme de graphiques comme celui montré sur la figure V-1. Chaque nœud du graphique correspond à un site r auquel correspond l'élément H_{rr} . Chaque liaison entre les sites r et r' est représentée par l'élément non nul $H_{rr'} = H_{rr'}^\dagger$. La périodicité des connexions (leads) permet une représentation finie de ces objets infinis. Sur la figure V-1, seules les deux premiers motifs des trois connexions sont représentées avec deux couleurs différentes.

²³ Voir la définition d'une matrice hermitienne sur le site Wikipédia, par exemple.

²⁴ La "première quantification" de la mécanique non relativiste de la particule ponctuelle consiste à remplacer la position x de la particule et son impulsion p par des opérateurs \hat{x} et \hat{p} agissant sur un espace de Hilbert.

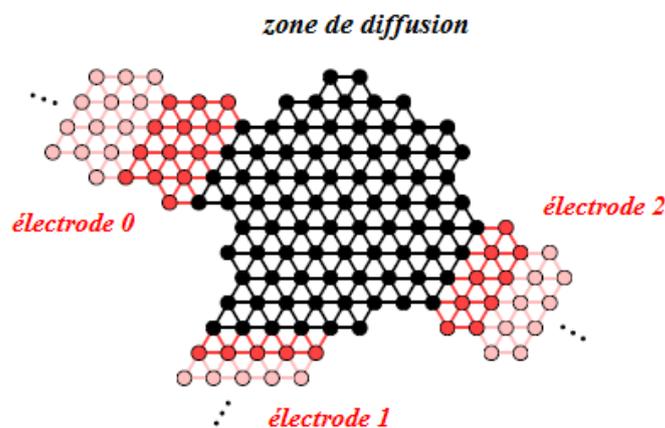
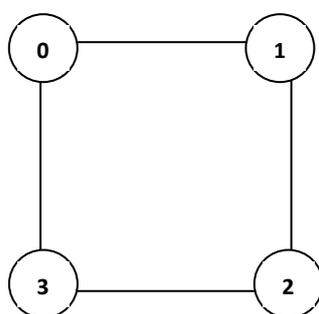


Figure V-1 : Structure d'un système modélisé par la méthode de liaisons fortes avec Kwant. Les sites de la zone de diffusion sont représentés par des points noirs, les sites appartenant à l'une des trois connexions (électrodes) semi-infinies, par des points rouges.

Sur l'exemple suivant, nous allons voir plus en détail la description d'un système simple régi par la méthode des liaisons fortes et la représentation de son hamiltonien par un graphique.

La figure V-2 représente la forme graphique de l'hamiltonien (4×4) :

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & H_{02} & H_{03} \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ 0 & H_{21} & H_{22} & H_{23} \\ H_{30} & 0 & H_{32} & H_{33} \end{pmatrix}$$



$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & 0 & H_{03} \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} & 0 \\ 0 & H_{21} & H_{22} & H_{23} \\ H_{30} & 0 & H_{32} & H_{33} \end{pmatrix}$$

Figure V-2 : Dans le système simple pris comme exemple, le graphique est utilisé pour représenter la matrice associée à l'hamiltonien H .

Considérons la première ligne de H . L'élément H_{00} représente le site 0; l'élément H_{01} représente la liaison (ou saut ou hopping) entre les sites 0 et 1; le 3ème élément $H_{02} = 0$ parce qu'il n'y a pas de liaison entre les sites 0 et 3; le 4ème élément H_{03} représente la liaison entre les sites 0 et 3. Les autres éléments non nuls et nuls de H peuvent être expliqués de la même façon.

Le script suivant comment obtenir les éléments matriciels d'un hamiltonien simple traduit par la représentation graphique de la figure V-2, en utilisant le module "kwant.System". Ce module assure le lien entre la construction de systèmes dans le cadre de la méthode des liaisons fortes et la réalisation de calculs avec ces systèmes. La fonction "FiniteSystem" signifie que le système étudié (le conducteur) est de dimensions finies et il peut être connecté à une ou plusieurs électrodes.

```
class SquareMolecule(kwant.system.FiniteSystem):
    def __init__(self):
        g = kwant.graph.Graph()
        g.add_edges([(0, 1), (1, 0),
                    (1, 2), (2, 1),
                    (2, 3), (3, 2),
                    (0, 3), (3, 0)])
        self.graph = g.compressed()
        self.leads = self.lead_interfaces = []
    def hamiltonian(self, i, j, E= 0.1, t=1):
        return E if i == j else t
```

L'instruction "g.add_edges" relie les noeuds les uns aux autres dans les deux sens; exemple: (0, 1) relie le nœud 0 au nœud 1, et (1, 0) le nœud 1 au nœud 0, etc. Cette instruction utilise le module "kwant.graph.Graph" pour réaliser le tracé graphique.

L'hamiltonien du système est obtenu en sortie du programme grâce au script suivant :

```
dm = SquareMolecule()
print dm.hamiltonian_submatrix().real
[[0.1 1. 0. 1. ]
 [1. 0.1 1. 0. ]
 [0. 1. 0.1 1. ]
 [1. 0. 1. 0.1]]
```

C'est-à-dire :

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & 0 & H_{03} \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} & 0 \\ 0 & H_{21} & H_{22} & H_{23} \\ H_{30} & 0 & H_{32} & H_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,1 & 1,0 & 0 & 1,0 \\ 1,0 & 0,1 & 1,0 & 0 \\ 0 & 1,0 & 0,1 & 1,0 \\ 1,0 & 0 & 1,0 & 0,1 \end{pmatrix}$$

V.2.2. Présentation de quelques exemples utilisant Kwant

Exemple 1: Création de deux sites dans un système initialement vide.

Script Python utilisé

```
Import kwant
a = 1
lat = kwant.lattice.square(a)
syst = kwant.Builder()

syst[lat(1, 0)] = 4
syst[lat(1, 1)] = 4

kwant.plot(syst);
```

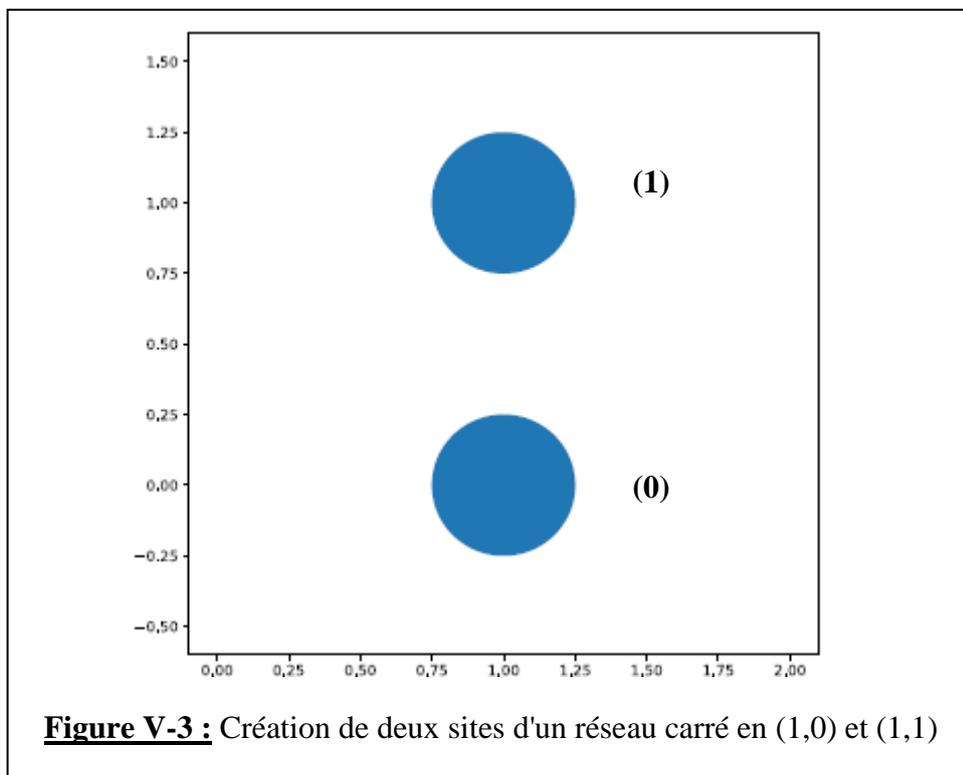


Figure V-3 : Création de deux sites d'un réseau carré en (1,0) et (1,1)

La première instruction fait appel à Kwant. Le deuxième définit la constante de réseau (a) égale à l'unité. La troisième définit le type de réseau (carré = square) de paramètre **a**. La quatrième instruction sert à définir le sys-

tème avec une zone de diffusion et les connexions (leads) qui y sont attachés. On utilise pour cela la fonction "Builder" qui définit et "génère" le modèle de manière adéquate. Son implémentation²⁵ nous permet d'ajouter ou de supprimer efficacement des sites et des hoppings présents dans le système, modifiant ainsi la géométrie du système de manière incrémentale²⁶.

²⁵ Implémenter *Builder* signifie l'installer en réalisant les adaptations nécessaires à son fonctionnement.

²⁶ L'adjectif incrémental est généralement utilisé par les informaticiens pour décrire un ajout par palier, petit à petit, afin d'être certain que chaque valeur ajoutée apporte une amélioration sans créer de dysfonctionnement.

Les cinquième et sixième instructions définissent les coordonnées des deux sites créés, soient (1, 0) et (1, 1). On dit que ces deux sites appartiennent à la même famille (family), lat, et ont pour étiquettes ou tags (1, 0) et (1, 1). Dans la septième instruction, la valeur 4 a été attribuée aux deux sites, ce qui signifie que le système ci-dessus correspond à la matrice hamiltonienne : $H = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$. Enfin dans la dernière instruction on obtient le tracé du graphe, que montre la figure V-3.

Exemple 2 : Création d'un hopping.

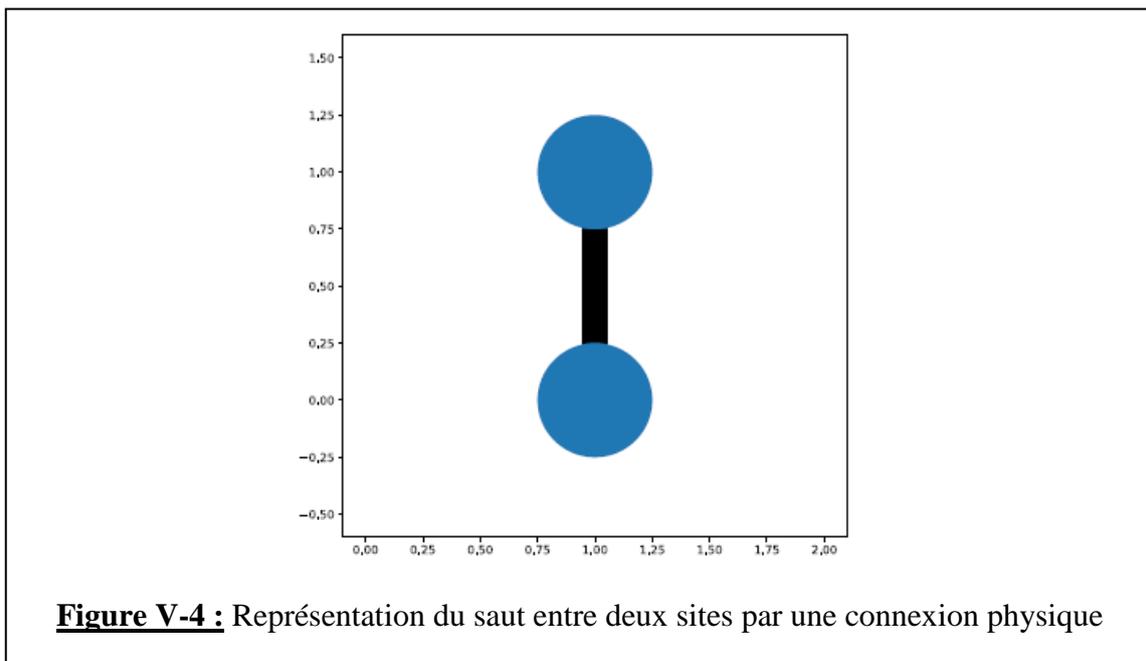
On peut rajouter un saut (hopping) entre les deux sites et le représenter à l'aide des instructions suivantes :

```

syst[(lat(1, 0), lat(1, 1))] = 1j
kwant.plot(syst);

```

Le résultat est représenté sur la figure V-4.



La matrice hamiltonienne est dans ce dernier cas : $H = \begin{pmatrix} 4 & i \\ -i & 4 \end{pmatrix}$. L'élément $H_{00} = 4$ correspond au site noté 0; $H_{01} = i$ correspond à la liaison ou au saut entre ce site et le site 1, ce qui est obtenu par une rotation d'un angle $+\pi/2$ puisque $i = \exp(i \pi/2)$. Enfin, $H_{10} = -i$ correspond à un angle $-\pi/2$ (saut entre les sites 1 et 0).

Notons que l'ajout (site_a, site_b) à un système et l'attribution d'une valeur v ajoute implicitement le saut (site_b, site_a) avec le conjugué hermitien de v en tant que valeur.

Concept de famille de sites et de tags.

Une famille de sites regroupe des sites liés, et une étiquette ou tag sert d'identifiant unique pour un site au sein d'une famille donnée. Donc, dans le cas fréquent où la famille de sites est un réseau régulier, le tag d'un site est simplement représenté par les coordonnées de ce site (qui sont des nombres entiers).

Dans l'exemple précédent, nous avons vu une famille qui s'appelle de manière suggestive **lat**, qui possède des sites dont les tags étaient des paires de nombres entiers. Dans cet exemple spécifique, il s'avère que la famille de sites est également un réseau de Bravais classique et que les tags représentent en fait des coordonnées pour un site sur ce réseau.

Concept de réseau (lattice).

Kwant permet de définir et d'utiliser des réseaux de Bravais pour traiter un ensemble de sites régulièrement disposés. Il peut, par exemple, distinguer des sites proches voisins des autres sites dans une région donnée de l'espace direct. Les réseaux monoatomiques sont constitués de sites identiques (la base est donc constituée de sites identiques) contrairement aux réseaux polyatomiques caractérisés par une base où les sites ne sont pas les mêmes.

En général, n'importe quel réseau cristallin peut être facilement être créé en définissant les vecteurs de base de son réseau de Bravais et les coordonnées des sites à l'intérieur de la maille primitive. Par exemple, le réseau du graphène peut être créé en utilisant le script suivant :

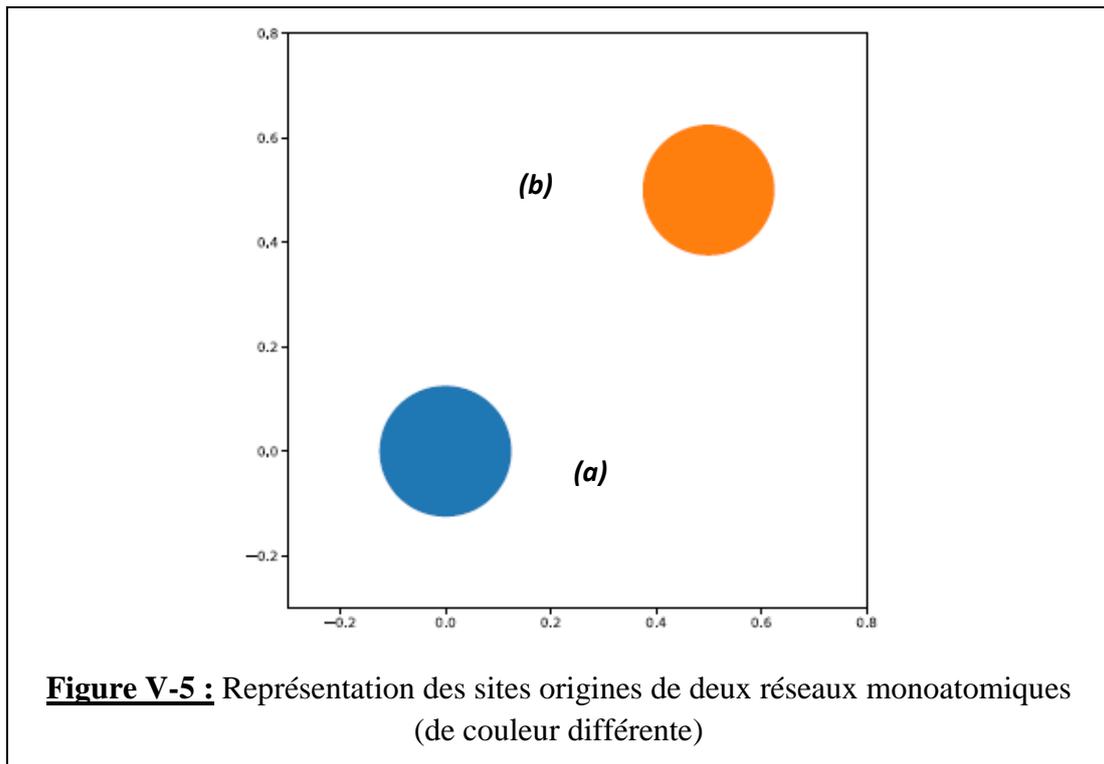
```
Graphene = kwant.lattice.general(  
  [(1,0), (0.5, 0.5*sqrt(3))]  
  [(0,0), (0, 1/sqrt(3))])
```

Exemple 3 : Création de deux réseaux monoatomiques.

Ces deux réseaux (lat_a et lat_b) ont comme vecteurs de base (ou vecteurs primitifs) les vecteurs (1, 0) et (0, 1) et comme origines (0,0) et (0,5; 0,5).

```
primitive_vectors = [(1, 0), (0, 1)]  
lat_a = kwant.lattice.Monatomic(primitive_vectors, offset=(0, 0))  
lat_b = kwant.lattice.Monatomic(primitive_vectors, offset=(0.5,  
0.5))  
  
syst = kwant.Builder()  
  
syst[lat_a(0, 0)] = 4  
syst[lat_b(0, 0)] = 4  
  
kwant.plot(syst);
```

Le résultat est représenté sur la figure V-5.



Exemple 4 : Création d'un réseau polyatomique avec 3 sous-réseaux

Dans ce cas, on doit utiliser le réseau dit kagome, constitué de trois sous-réseaux.

```
lat = kwant.lattice.kagome()
syst = kwant.Builder()

a, b, c = lat.sublattices # Le réseau kagome possède 3 sous-réseaux
```

Dans le script ci-après, nous allons définir une nouvelle fonction permettant la représentation graphique du réseau et assignant une couleur à chaque famille de sites.

```
# Tracé des sites de différentes familles avec différentes couleurs
def family_color(site):
    if site.family == a:
        return 'red'
    if site.family == b:
        return 'green'
    else:
        return 'blue'

def plot_system(syst):
    kwant.plot(syst, site_lw=0.1, site_color=family_color)

## Ajout des sites et des hoppings
for i in range(4):
```

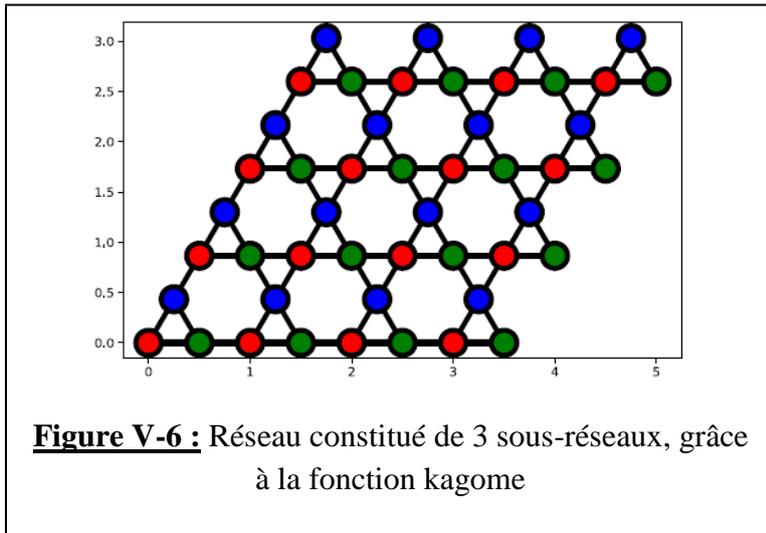
```

for j in range (4):
    syst[a(i, j)] = 4
    syst[b(i, j)] = 4
    syst[c(i, j)] = 4

syst[lat.neighbors()] = -1

## Tracé final du réseau
plot_system(syst)

```



Le résultat est montré sur la figure V-6.

Exemple 5 : Comment créer de nombreux sauts similaires en une seule fois ?

Cela peut être réalisé en faisant appel à la fonction "kwant.builder.HoppingKind".

"HoppingKind", permet de définir tous les sauts d'un «type» particulier, entre deux familles de sites. Par exemple, HoppingKind ((1, 0), lat_a, lat_b) représente tous les sauts de la forme (lat_a (x + (1, 0)), lat_b (x)), où x est un tag (ici, une paire de nombres entiers).

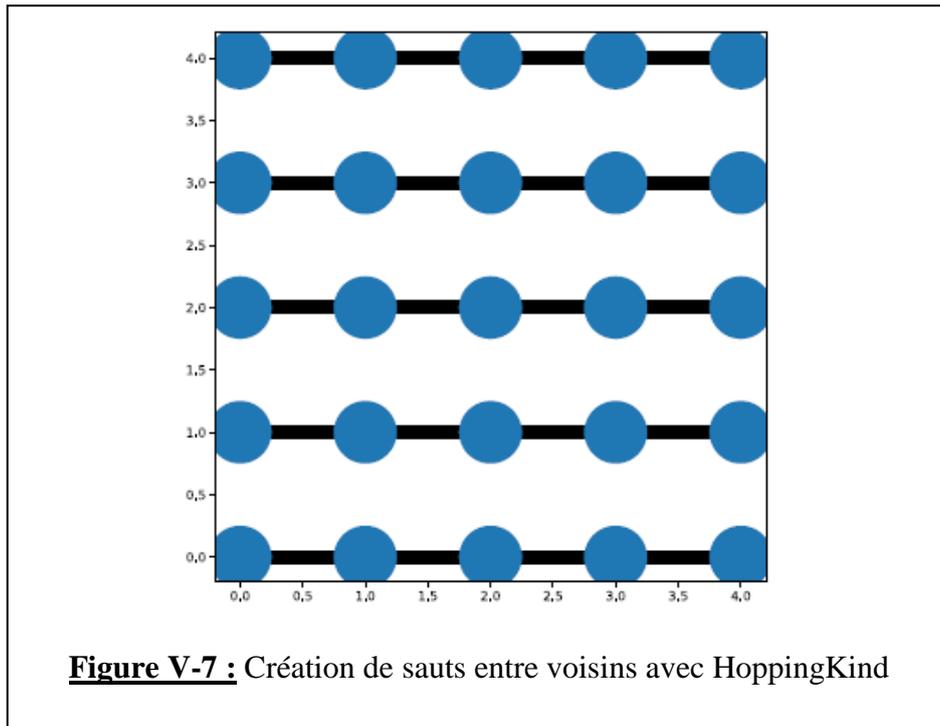
Le script suivant décrit ce processus.

```

# Création de sauts entre voisins avec HoppingKind
a = 1
syst = kwant.Builder()
lat = kwant.lattice.square(a)
syst[ (lat(i, j) for i in range(5) for j in range(5)) ] = 4

syst[kwant.builder.HoppingKind((1, 0), lat)] = -1
kwant.plot(syst);

```



Exemple 6 : Comment relier deux réseaux de nature différente ?

Nous allons montrer sur l'exemple suivant comment relier un réseau hexagonal (lattice.honeycomb") à un réseau carré en utilisant la fonction.

En premier lieu, on doit construire le réseau hexagonal (comme celui du graphène) :

```
L = 5
W = 5

lat = kwant.lattice.honeycomb()
subA, subB = lat.sublattices

syst = kwant.Builder()
syst[(subA(i, j) for i in range(L) for j in range(W))] = 4
syst[(subB(i, j) for i in range(L) for j in range(W))] = 4
syst[lat.neighbors()] = -1

kwant.plot(syst);
```

Ensuite, nous créons la liaison entre réseaux et le réseau carré à l'aide des fonctions "attach_lead" et "TranslationalSymmetry" (opération de translation) :

```
lat_lead = kwant.lattice.square()
sym_lead1 = kwant.TranslationalSymmetry((0, 1))

lead1 = kwant.Builder(sym_lead1)
lead1[(lat_lead(i, 0) for i in range(2, 7))] = 4
```

```

lead1[lat_lead.neighbors()] = -1

yst[(lat_lead(i, 5) for i in range(2, 7))] = 4
syst[lat_lead.neighbors()] = -1

syst[((lat_lead(i+2, 5), subB(i, 4)) for i in range(5))] = -1

syst.attach_lead(lead1)

kwant.plot(syst);

```

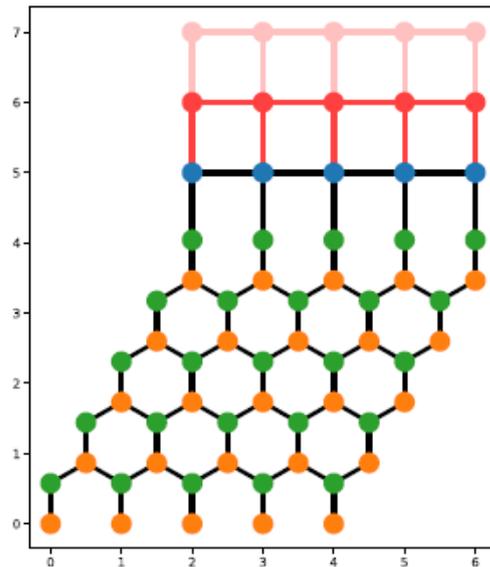


Figure V-8 : Création d'une liaison entre un réseau hexagonal et un réseau carré

Le résultat est montré ci-contre.

Nous venons de présenter, sur quelques exemples, quelques possibilités qu'offre Kwant pour représenter certains système quantiques. Nous ne pouvons pas , bien entendu, présenter de manière exhaustive toutes les fonctions de Kwant. Cependant, nous allons dans la section suivante présenter les résultats des simulations que nous avons effectuées sur trois systèmes quantique différents : un fil quantique, un système 2DEG et le graphène, pour déterminer dans chaque cas la variation de la conductance G .

V.3. Essais de simulations

V.3. 1. Conductance d'un fil quantique (quantum wire) bidimensionnel

Le système est décrit par l'équation de Schrödinger dont l'hamiltonien est :

$$H = -\frac{\hbar}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(\mathbf{y}) \quad (\text{V-1})$$

Mais où $V(y)$ est un potentiel de confinement important suivant la direction y (condition pour avoir une conduction quasi-unidimensionnelle). Ce potentiel peut avoir la forme de la figure I.3. Le conducteur étudié a pour largeur W et pour longueur L beaucoup plus grande que W .

Ce hamiltonien qui est continu, doit être discrétisé²⁷, dans le cadre du modèle des liaisons fortes (voir §V.3.1). Cette discrétisation se fait sur les sites d'un réseau carré de constante de réseau a . Chaque site de coordonnées entières de réseau (i, j) a les coordonnées de l'espace réel $(x, y) = (ai, aj)$.

Introduisons les états de position discrets :

$$|i, j\rangle \equiv |ai, aj\rangle = |x, y\rangle \quad (\text{V-2})$$

En calculant $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ et $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$, on montre que H s'écrit dans le cadre du modèle des liaisons fortes :

$$H = \frac{1}{a^2} \sum_{i,j} [(V(ai, aj) + 4t)|i, j\rangle\langle i, j| - t(|i + 1, j\rangle\langle i, j| + |i, j\rangle\langle i + 1, j| + |i, j + 1\rangle\langle i, j| + |i, j\rangle\langle i, j + 1|)] \quad (\text{V-3})$$

Avec $t = \frac{\hbar^2}{2m^*a^2}$, $[t] = ML^2T^{-2}$ (dimension d'une énergie).

Pour des raisons de commodité, on pose : $a = 1$ et $t = 1$. Le script du programme utilisé pour calculer la conductance du fil quantique est détaillé ci-après.

Pour pouvoir utiliser Kwant, nous devons y faire appel :

```
import kwant
```

La première étape consiste maintenant à définir le système avec la zone de diffusion et les connexions (leads). Pour cela, nous utilisons la fonction "Builder" qui permet de définir et générer le système étudié :

```
# Définition du système
syst = kwant.Builder()
```

Nous aurions pu accéder à "Builder" avec l'instruction "kwant.Builder", mais nous aurions aussi pu le faire avec l'instruction "kwant.builder.Builder".

²⁷ La discrétisation est une opération mathématique qui transforme une grandeur donnée continue en des valeurs individuelles discrètes

Maintenant nous devons également spécifier le type de sites que nous souhaitons ajouter au système. Ici, nous travaillons avec un réseau carré. Pour plus de simplicité, nous définissons la constante de réseau à l'unité ($a = 1$), comme spécifié plus haut :

```
a = 1
lat = kwant.lattice.square(a)
```

Comme nous travaillons avec un réseau carré, nous repérons les points par deux coordonnées entières (i, j). **Builder** nous permet ensuite d'ajouter des éléments matriciels correspondant aux points du réseau: **syst [lat (i, j)] = ...** définit l'énergie sur site pour le point (i, j) et **syst [lat (i1, j1) , lat (i2, j2)] = ...** définit l'élément de matrice de sauts allant du point ($i2, j2$) au point ($i1, j1$).

Notons que nous devons spécifier les sites pour "Builder" sous la forme lat (i, j). L'objet réseau lat fait la traduction des coordonnées entières vers le format de site approprié dans "Builder".

Construisons maintenant une zone de diffusion large de W points ou nœuds de réseau et longue de L points ou nœuds de réseau :

```
t = 1.0
W, L = 10, 30

# Définition de la zone de diffusion

for i in range(L):
    for j in range(W):
        # Hamiltonien de site
        syst[lat(i, j)] = 4 * t

        # Sauts dans la direction y
        if j > 0:
            syst[lat(i, j), lat(i, j - 1)] = -t

        # Sauts dans la direction x
        if i > 0:
            syst[lat(i, j), lat(i - 1, j)] = -t
```

Remarquons que le code ci-dessus correspond directement aux termes de l'hamiltonien discrétisé :

1. Le code "Hamiltonien de site" correspond à : $\sum_{i,j} (V(ai, aj) + 4t) |i, j\rangle \langle i, j|$.
2. Le code "Sauts dans la direction y" correspond à : $\sum_{i,j} -t (|i + 1, j\rangle \langle i, j| + |i, j\rangle \langle i + 1, j|)$.

Remarque : le potentiel de confinement est (par définition) tel **qu'au-delà** d'une certaine région de l'espace, il n'y a plus de sauts entre les nœuds du réseau (voir figure I-3).

3. Le code "Sauts dans la direction x" correspond à : $\sum_{i,j} -t(|i,j+1\rangle\langle i,j| + |i,j\rangle\langle i,j+1|)$.

Ensuite, nous devons définir les connexions ou leads (aux électrodes ou réservoirs). Elles sont également construites à l'aide de "Builder" mais, dans ce cas, le système doit avoir une symétrie de translation, ce qui est vrai dans la direction x :

```
# Définition et rattachement des connexions (leads)
# Commençons par la connexion côté gauche

sym_left_lead = kwant.TranslationalSymmetry((-a, 0))
left_lead = kwant.Builder(sym_left_lead)
```

Dans ce dernier cas, le générateur "Builder" utilise la fonction "TranslationalSymmetry". Le vecteur $(-a, 0)$ de l'espace réel définit une symétrie de translation dans la direction opposée à la zone de diffusion, c'est-à-dire qu'il pointe vers la connexion gauche rattachée au réservoir gauche s'étendant (en théorie) à l'infini. Autrement dit, la mention lead 0 correspond à la connexion gauche.

Pour la connexion gauche elle-même, il suffit d'ajouter les points d'une cellule unitaire ainsi que les sauts à l'intérieur de la cellule dans la cellule unitaire suivante.

Pour un déplacement dans la direction y du réseau carré, la cellule unitaire est simplement une ligne verticale de points. Le code "syst.attach_lead(left_lead)" rattache la connexion gauche au reste du système.

C'est ce que décrit le script suivant :

```
for j in range(W):
    left_lead[lat(0, j)] = 4 * t
    if j > 0:
        left_lead[lat(0, j), lat(0, j - 1)] = -t
    left_lead[lat(1, j), lat(0, j)] = -t

syst.attach_lead(left_lead)
```

Maintenant, nous allons faire de même avec le côté droit. La seule différence par rapport à la connexion gauche est que le vecteur de symétrie de translation doit pointer vers la droite, le reste du code est le même :

```
# Connexion droite
```

```

sym right_lead = kwant.TranslationalSymmetry((a, 0))
right_lead = kwant.Builder(sym_right_lead)

for j in range(W):
    right_lead[lat(0, j)] = 4 * t
    if j > 0:
        right_lead[lat(0, j), lat(0, j - 1)] = -t
        right_lead[lat(1, j), lat(0, j)] = -t

syst.attach_lead(right_lead)

```

Maintenant, nous avons terminé la construction de notre système et représentons le graphiquement en utilisant le code :

```
kwant.plot(syst);
```

On obtient le résultat de la figure V-7 :

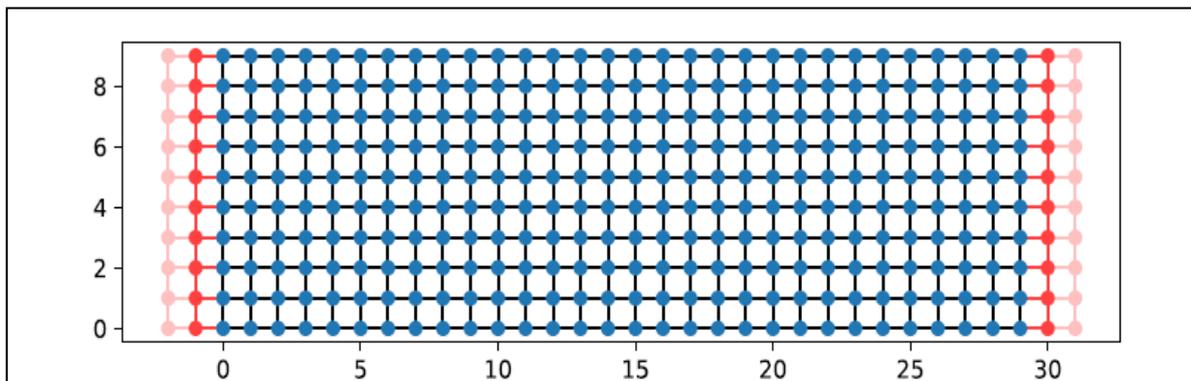


Figure V-7 : Représentation du réseau obtenu à l'aide du script Kwant décrit ci-avant.

Les points bleus représentent les nœuds du réseau du fil quantique, repérés par les coordonnées (i, j) . Pour tout élément de saut non nul entre les nœuds, une ligne relie ces nœuds. Nous n'avons représenté les connexions gauche et droite par quelques cellules unitaires (2), l'une en rouge vif et l'autre rouge pale.

Une fois la construction complètement terminée, l'étape suivante consiste à transformer le système en une forme appropriée (c'est-à-dire le finaliser) pour effectuer les calculs numériques nécessaires :

```

# Etape de finalisation

syst = syst.finalized()

```

Après avoir créé avec succès le système, nous pouvons maintenant commencer immédiatement à calculer sa conductance en fonction de l'énergie :

```

# Procédure de calcul de la conductance
energies = []
data = []
for ie in range(100):
    energy = ie * 0.01

# Calcul de la matrice de diffusion pour une énergie donnée
smatrix = kwant.smatrix(syst, energy)

# Calcul de la probabilité ou facteur de transmission T de
# lead 0 (gauche) à lead 1 (droite)
energies.append(energy)
data.append(smatrix.transmission(1,0))

```

Nous utilisons "kwant.smatrix", nom abrégé de "kwant.solvers.default.smatrix" du module de résolution par défaut "kwant.solvers.default"²⁸.

"kwant.smatrix" calcule la matrice de diffusion S "smatrix" en résolvant un système d'équations linéaires. "smatrix" elle-même permet de calculer directement la probabilité de transmission totale du lead 0 au lead 1 sous la forme "smatrix.transmission (1, 0)".

Finalement, nous utilisons "matplotlib"²⁹ pour obtenir un tracé des données calculées :

```

# Utiliser matplotlib pour le tracé
# Visualisation des plateaux de conductance
pyplot.figure()
pyplot.plot(energies, data)
pyplot.xlabel("energy [t]")
pyplot.ylabel("conductance [e^2/h]")
pyplot.show()

```

Nous obtenons alors le graphique de la figure V-8 qui représente la conductance quantifiée G , en unités e^2/h , qui augmente avec l'énergie, exprimée en unités de $t = 1$. Rappelons que

$$t = \frac{\hbar^2}{2m^*a^2}.$$

La valeur de la conductance est déterminée par le nombre de sous-bandes occupées ou modes occupés qui augmente avec l'énergie du porteur de charge, conformément à la relation I-9 :

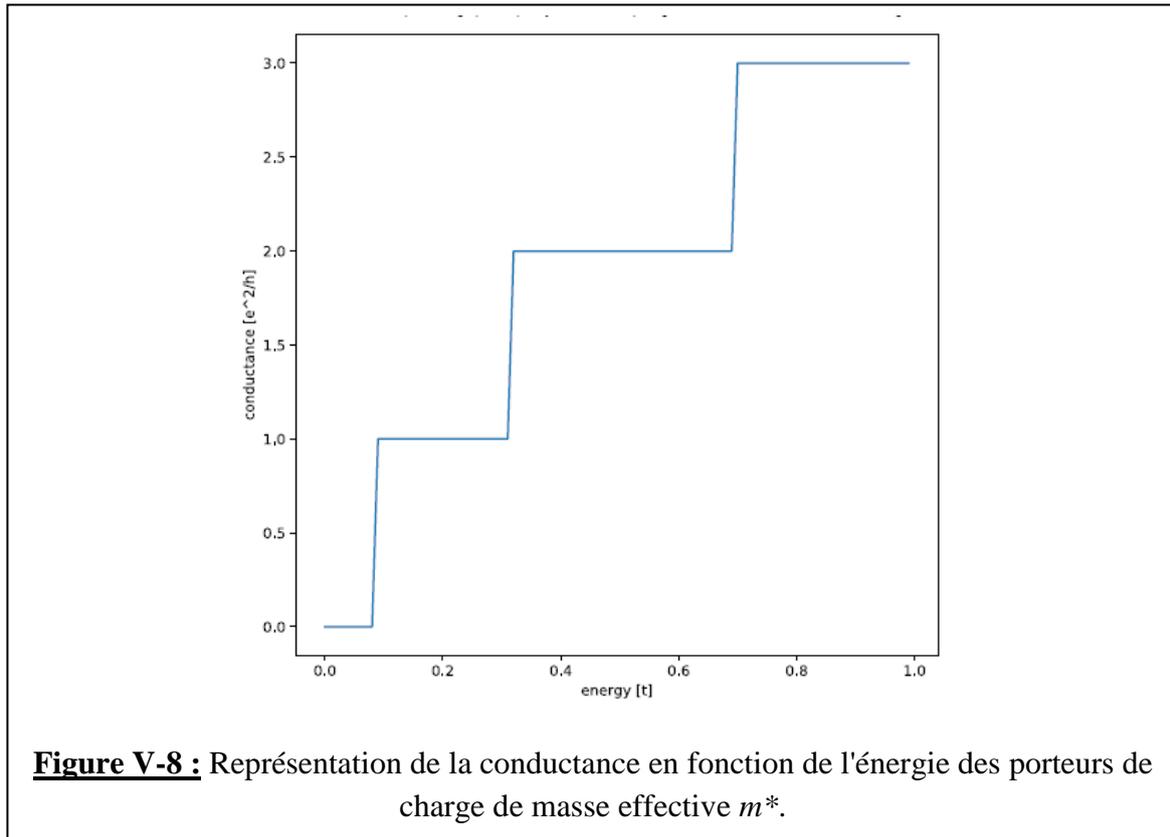
$E(k_x) = E_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}$. L'augmentation de G signifie que la densité de porteurs de charge augmente, sachant que le nombre de porteurs qui participent au transport quantique dépend de la

²⁸ Pour plus de détails, on pourra consulter le site suivant : <https://kwant-project.org/doc/dev/index.html>

²⁹ Matplotlib est une bibliothèque du langage de programmation Python destinée à tracer et visualiser des données sous formes de graphiques. Elle peut être combinée avec les bibliothèques python de calcul scientifique "NumPy" et "SciPy".

différence entre les potentiels chimiques μ_1 et μ_2 , soit de eV (où V est la tension appliquée, voir § I-3).

Lorsque l'énergie transverse E_n passe à une valeur E_{n+1} , la conductance augmente et on atteint un nouveau plateau ($n + 1$); elle reste constante jusqu'à ce que l'énergie transverse passe à une valeur supérieure E_{n+2} . La largeur du plateau est fonction de la largeur entre les sous-bandes E_n (voir figure I-4). L'énergie du porteur augmente avec la tension appliquée V .



V.3.2. Effet Hall quantique entier. Cas d'un gaz électronique bidimensionnel

Rappelons pourquoi le désordre est nécessaire pour expliquer l'effet Hall quantique entier.

Nous avons vu que le tracé de la résistance de Hall R_{xy} (ou \mathcal{R}_H) en fonction du champ magnétique B montre l'existence de plateaux. On obtient un résultat similaire en traçant l'inverse de la résistance R_{xy} (c'est-à-dire la conductance σ_{xy} ou G_{xy}) en fonction de la densité électronique n_{el} parce que cette dernière est liée à B suivant la relation (III-34) : $B_i = hn_{el}/ie$ (où i est un entier). Autrement dit, les plateaux correspondent précisément à l'augmentation de la densité électronique, mais la conductance reste la même.

L'une des conséquences du désordre est que les systèmes désordonnés peuvent avoir de nombreux états localisés ne contribuant pas à la conductivité. Ainsi, les plateaux correspondent précisément au remplissage des états localisés qui ne peuvent pas contribuer à la conductivité qui va donc rester constante.

S'il n'y a pas de désordre, nous n'aurions pas d'états localisés, et alors augmenter la densité électronique n_{el} remplira nécessairement les états qui contribuent à la conductivité, donnant la dépendance linéaire classique entre la conductance (ou la conductivité) et n_{el} .

L'effet Hall quantique (entier) dans un échantillon aux dimensions finies, et en présence de désordre, peut être compris en faisant appel aux effets de bord (§III.4.4) qui eux expliquent le comportement de la conductance observée (figure III-18b).

Concepts de base

Champ magnétique et liaisons fortes.

La force de Lorentz classique se manifeste en mécanique quantique à travers le potentiel vecteur \vec{A} lié à \vec{B} par : $\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$. Considérons un champ magnétique constant dans la direction z (perpendiculaire au 2DEG) tel que $\vec{B} = (0,0,B)$. Nous pouvons choisir la jauge de Landau telle que $\vec{A} = (-By, 0,0)$.

Le potentiel vecteur intervient dans le modèle des liaisons fortes à travers ce qu'on appelle la substitution de Peierls [5] qui consiste simplement à remplacer l'impulsion $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ par $\vec{p} + e\vec{A}$ (expression III-16), en présence d'un champ magnétique. Dans ce cadre, si $t_{ij}(0)$ ³⁰ est l'intégrale de saut en l'absence de champ magnétique du site i au site j , la même intégrale de saut en présence de champ magnétique est donnée par [1] :

$$t_{ij}(\phi) = t_{ij}(0) \times \exp\left(-i\frac{e}{\hbar} \int_{x_i}^{x_j} \vec{A}(x) \overline{dS}\right) \quad (\text{V-4})$$

Pour notre modèle de réseau carré 2D, on peut montrer que cette dernière équation devient :

$$t_{ij}(\phi) = t_{ij}(0) \times \exp\left(-i\phi \frac{(x_i - x_j)(y_i + y_j)}{2}\right) \quad (\text{V-5})$$

Avec $\phi = Be a^2 / \hbar$ le flux magnétique à travers une cellule unitaire (d'aire a^2) dans le réseau carré exprimé en unités de quantum de flux $\phi_0 = h/e$ (voir §III.4.1). (x_i, y_i) et (x_j, y_j) sont les coordonnées des sites i et j .

³⁰ L'intégrale de saut traduit le couplage entre deux sites voisins i et j ; elle a pour expression $t_{ij} = \langle j|H|i\rangle$.

Le choix de la jauge \vec{A} doit être fait de telle sorte qu'il ne brise pas la symétrie de translation selon la direction de propagation; c'est le cas de la jauge de Landau choisie pour une direction de propagation suivant x . En d'autres termes, le potentiel vecteur a la même direction que la direction des connexions (leads).

L'intégrale t_{ij} peut être définie comme une fonction dans Kwant de la façon suivante :

```
def hopping(sitei, sitej, phi, salt)
    xi, yi = sitei.pos
    xj, yj = sitej.pos
    return -exp(-0.5*phi*(xi - xj)*(yi - yj))
```

Cette fonction est caractérisée par quatre arguments : les deux premiers sont relatifs aux sites connectés par le saut. Les deux autres sont relatifs à des paramètres spécifiques : phi correspond à ϕ et salt n'est pour l'instant pas utilisé; il le sera plus loin avec une autre fonction notée onsite.

Le désordre

Il est introduit dans l'hamiltonien du système sous l'appellation potentiel de désordre $V_{dés}$. Ce potentiel peut prendre plusieurs formes; un modèle très couramment utilisé dans le cadre des liaisons fortes est celui qui consiste à ajouter un potentiel aléatoire de type gaussien à chaque site. Kwant offre, à travers le module kwant.digest, un générateur de valeurs pseudo-aléatoires. Définir un tel potentiel gaussien basé sur ce générateur est traduit de la façon suivante :

```
def onsite(site, phi, salt):
    return 0.05 *gauss(repr(site), salt) + 4
```

S'agissant d'une fonction agissant sur les sites, le premier argument est le site sur lequel agit le potentiel. Le deuxième argument est phi le paramètre déjà défini dans la fonction hopping mais qui n'est pas utilisé ici. L'argument salt joue le rôle d'initiateur de nombres aléatoires (graine aléatoire). L'instruction return traite le potentiel de désordre.

Le potentiel de désordre peut aussi avoir la forme suivante :

$$V_{dés} = \sum_i U_i |x_i\rangle\langle x_i| \quad (\text{V-6})$$

Où les U_i sont choisis de façon aléatoire à partir de la distribution uniforme $\left[-\frac{U_0}{2}, \frac{U_0}{2}\right]$.

Il est à noter que l'amplitude du désordre U_0 en soi ne signifie pas grand-chose. Ce désordre peut être quantifié par une autre grandeur physique qui est le libre parcours moyen dont l'expression donnée par :

$$l_e = 48a \left[\sqrt{E/t} / (U_0/t)^2 \right] \quad (\text{V-7})$$

Où E est l'énergie moyenne de la particule (porteur de charge) et $t = \hbar^2 / (2m^* a^2)$ est l'énergie de saut (c'est l'énergie moyenne nécessaire que doit posséder le porteur pour passer d'un d'un site à un autre site voisin). Dans ce cas, le script analogue à celui utilisé plus haut est transcrit ci-après :

```
def onsite(site, params):
    return params.U0 * (uniform(repr(site), repr(params.salt)) - 0.5) + 4 * t
```

Bien entendu, nous n'allons pas exposer dans le détail toutes les instructions Python des scripts utilisant Kwant pour étudier l'EHQE dans un gaz 2D ou plus loin dans le graphène. Cependant, nous devons préciser que la matrice de diffusion est obtenue par résolution d'un système d'équations linéaires. Le module "kwant.smatrix" effectue ce calcul en fonction de l'énergie de Fermi et de certains paramètres optionnels du système, définis par l'utilisateur.

La matrice de diffusion obtenue permet de déterminer la transmission puis la conductance du système physique étudié.

Le programme suivant écrit en Python et utilisant le progiciel Kwant a été utilisé pour calculer la conductance d'un gaz électronique 2D.

```

# Appel des fonctions et modules mathématiques
import math
from cmath import exp
import numpy
from matplotlib import pyplot

import kwant
from kwant.digest import gauss
def hopping(sitei, sitej, phi, salt) :
    xi, yi = sitei.pos
    xj, yj = sitej.pos
    return -exp(-0.5j * phi * (xi - xj) * (yi + yj))

# Définir la région de diffusion et le désordre
def onsite(site, phi, salt) :
    return 0.05 * gauss(repr(site), salt) + 4
def make_system(L=50):
    def central_region(pos):
        x, y = pos
        return -L < x < L and \
            abs(y) < L - 37.5 * math.exp(-x**2 / 12**2)
    lat = kwant.lattice.square()
    sys = kwant.Builder()
    sys[lat.shape(central_region, (0, 0))] = onsite
    sys[lat.neighbors()] = hopping

# Définir et attacher les fils d'amenée (leads)
# Construire le fil de gauche
    sym = kwant.TranslationalSymmetry((-1, 0))
    lead = kwant.Builder(sym)
    lead[(lat(0, y) for y in range(-L + 1, L))] = 4
    lead[lat.neighbors()] = hopping

# Attacher le fil de gauche puis celui de droite
    sys.attach_lead(lead)
    sys.attach_lead(lead.reversed())

    return sys.finalized()
sys = make_system()

# Détermination des plateaux de la conductance
# Calcul de la probabilité ou facteur de transmission T de contact
(lead) 0 à contact (lead) 1
energy = 0.15
reciprocal_phis = numpy.linspace(4, 50, 200)
conductances = []
for phi in 1/reciprocal_phis:
    smatrix = kwant.smatrix(sys, energy, args=[phi, ""])
    conductances.append(smatrix.transmission(1, 0))
pyplot.plot(reciprocal_phis, conductances)
pyplot.show()

# Calculer et tracer la densité locale de tous les états de bord
provenant d'un fil (contact) donné en calculant les fonctions d'onde

```

```

dans la région de diffusion grâce à tous les modes provenant d'un
contact (lead) et se propageant dans la région de diffusion
def density(sys, energy, args, lead_nr):
    wf = kwant.wave_function(sys, energy, args)
    return(abs(wf(lead_nr))**2).sum(axis=0)
d = density(sys, energy, [1/40.0, ""], 0)
kwant.plotter.map(sys,d)

```

Les résultats obtenus sont montrés sur les figures V-9 et V-10.

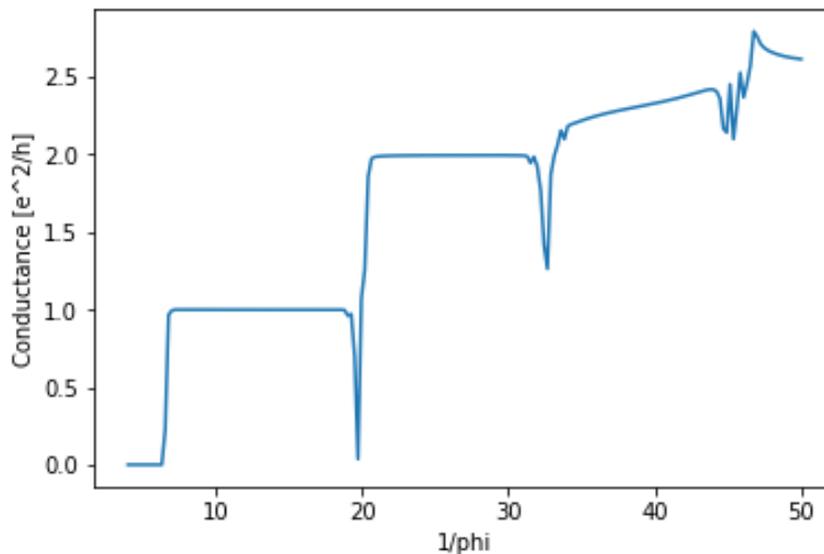
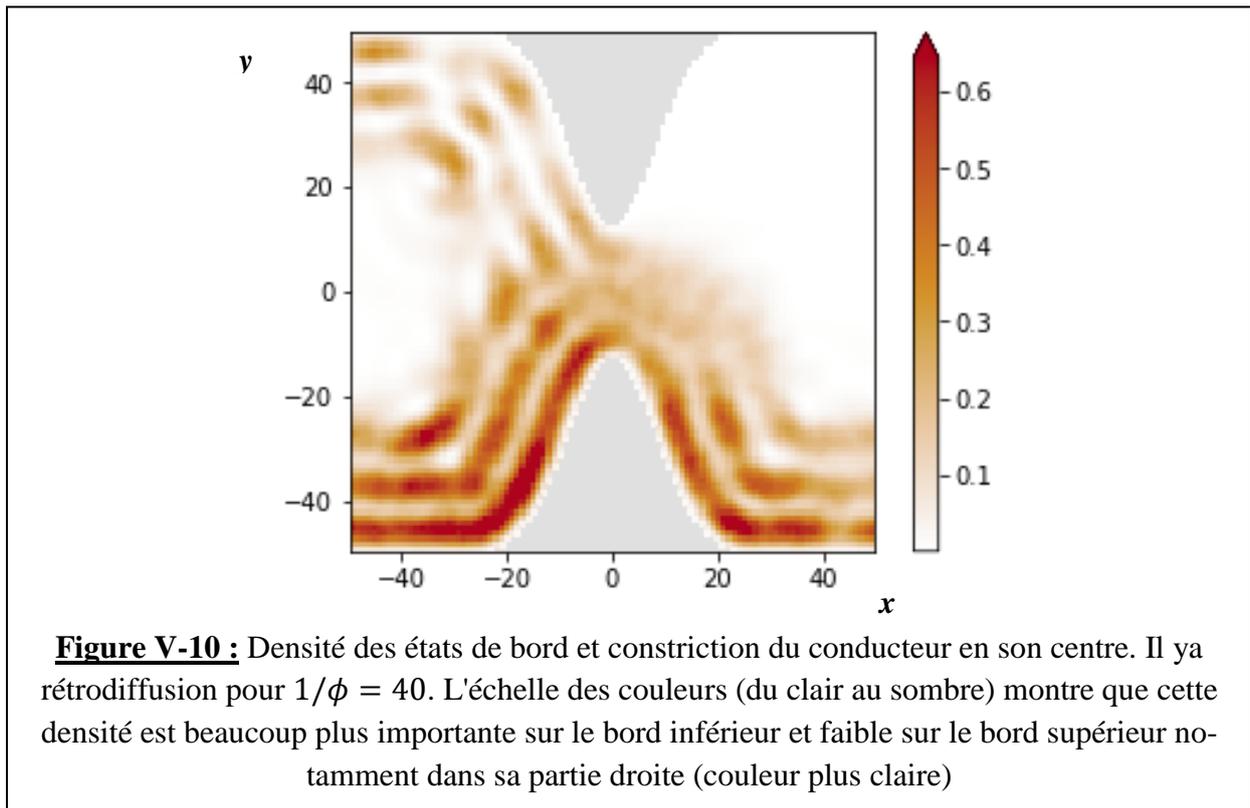


Figure V-9 : Représentation des plateaux de conductance pour un conducteur 2DEG en présence de désordre de type gaussien. $\phi = Be/\hbar$ est le flux magnétique à travers une cellule unitaire (de paramètre de réseau $a = 1$).

Cette figure a été obtenue pour une énergie des électrons incidents E calculée par rapport à l'énergie $t = \hbar^2/(2m^*a^2) = 1$: $E' = \frac{E}{t} = 0,15$ (voir programme informatique ci-avant); cette énergie E est proche de l'énergie de Fermi E_F . Les deux premiers plateaux montrent la quantification de la conductance qui caractérise l'effet Hall quantique. Le troisième plateau autour de $1/\phi = 40$ ne se développe pas en raison d'une constriction (ou resserrement, ou étranglement) du système qui conduit à une rétrodiffusion partielle des porteurs de charge du bord supérieur. En effet, cette constriction a pour effet de rapprocher les bords opposés et de provoquer une rétrodiffusion des électrons : il se produit comme une sorte de "court-circuit" entre ces bords et la quantification des plateaux disparaît, ainsi que l'effet Hall quantique. La conductance augmente alors au lieu de rester constante.

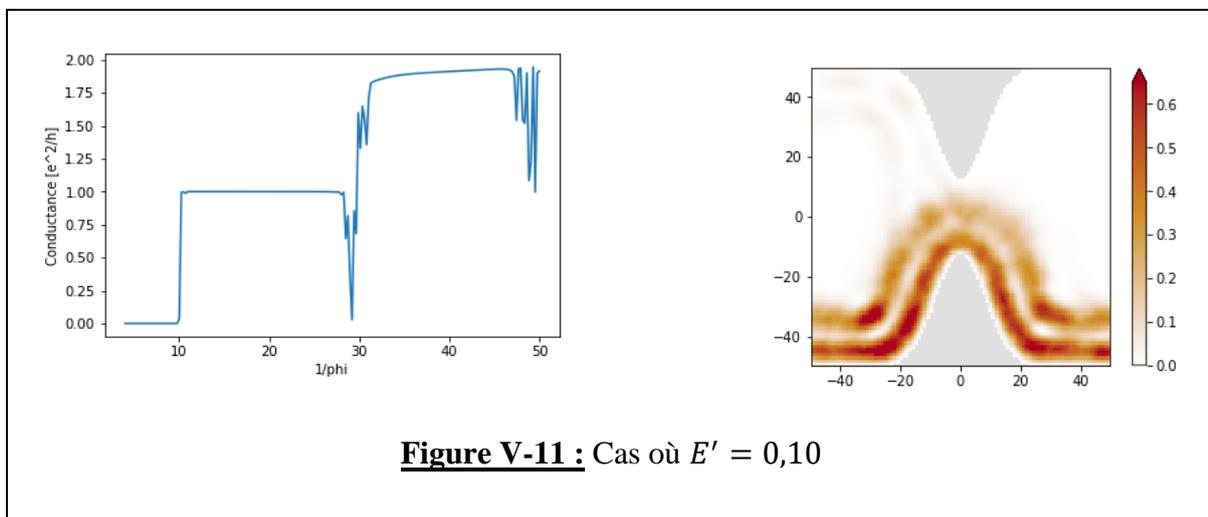
Cet effet de rétrodiffusion des électrons peut être également visualisée en représentant sur un diagramme la densité locale des effets de bord, ce qui revient à représenter la densité de probabilité de présence des électrons (figure V-10). On peut dénombrer un nombre de canaux de conduction du bord inférieur égal à 3.

Par ailleurs, les discontinuités observées lors du passage d'un plateau au suivant sont causées par le bruit gaussien, du au choix du type de désordre (gaussien).

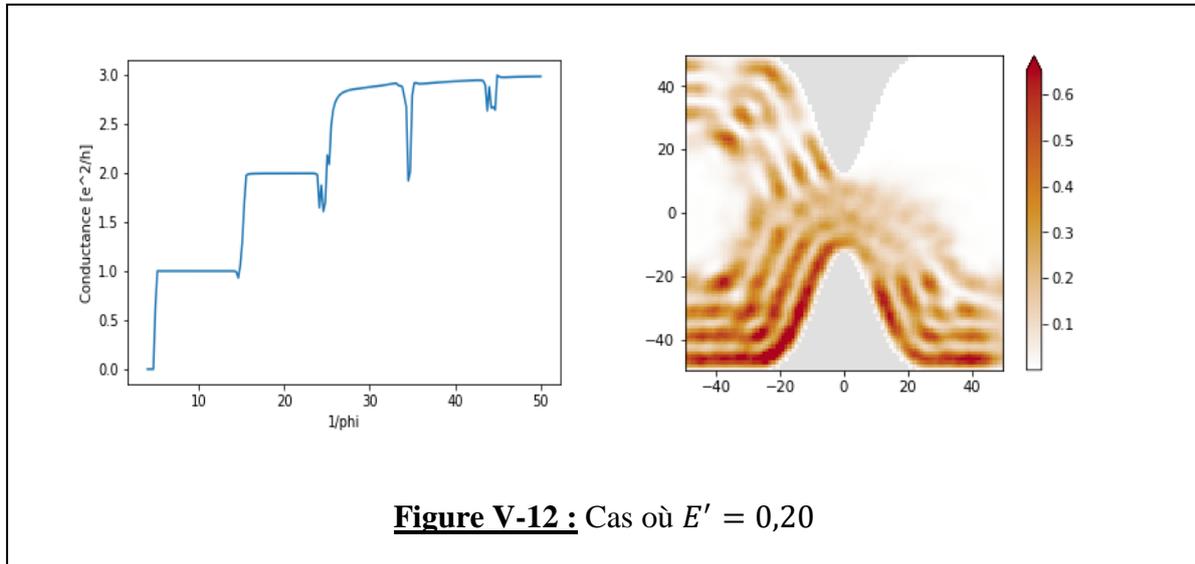


Effet d'une variation de la valeur de l'énergie.

Nous allons voir comment varie la courbe de la figure V-9 et le diagramme de la figure V-10, pour deux valeurs différentes de l'énergie : $E' = 0,10$ et $E' = 0,20$.



On constate que lorsque l'énergie des porteurs de charge passe de 0,15 à 0,10, le nombre de plateaux diminue également ainsi que le nombre canaux de conduction des états de bord, qui passe de 3 à 2. La rétrodiffusion est plus importante dans ce cas et elle opère à compter du deuxième plateau qui n'est plus réellement quantifié. Rappelons par ailleurs, que le nombre de canaux est égal au nombre de NL remplis dans le volume.



V.3.3. Effet Hall quantique entier. Cas du graphène

Le programme a été écrit en Python en faisant toujours appel au package de Kwant, dans le cas du graphène bicouche.

Pour tracer la conductance du graphène (monocouche), nous avons utilisé le même programme mais en éliminant les sauts t_{\perp} et t'' (voir figure IV-17) et en ne gardant que les sauts t entre voisins d'une même feuille (ou couche).

Script du programme utilisé.

```
# Appel des fonctions et modules mathématiques
from __future__ import division # pour que 1/2 == 0.5, et non 0
import math
from math import pi, sqrt, tanh
from cmath import exp
import numpy
import kwant
from kwant.digest import gauss
import scipy.sparse.linalg as sla
from matplotlib import pyplot
```

```
# Définition des réseaux de la bicouche de graphène
a_L=1
c_L=1.36178862*a_L
sin_30, cos_30 = (1 / 2, sqrt(3) / 2)
graphene = kwant.lattice.general([(a_L, 0, 0), (a_L*0.5,
a_L*sqrt(3)*0.5, 0), (0, 0, 2*c_L)], [(0, 0, -c_L/2), (0,
a_L/sqrt(3), -c_L/2), (0, 0, c_L/2), (a_L*0.5, a_L * 0.5/sqrt(3),
c_L/2) ])
a1, b1, a2, b2 = graphene.sublattices
```

```
# Paramètres de sauts
gamma0=1#3.16 # paramètre de saut  $t$  entre sites d'une même couche
(ou feuille supérieure ou inférieure)
gamma1=0.126#0.4 # paramètre de saut  $t_{\perp}$  inter-couches (A2-B1)
gamma3=0#0.4 # paramètre de saut  $t_{\perp}$  inter-couches (A1-B2)
gamma4=0#0.15 # paramètre de saut  $t''$ 
```

```
# Expressions des énergies de saut dans un champ magnétique perpen-
diculaire au plan de la bicouche avec une jauge  $A = (B.y, 0, 0)$ .
def hop0(sitei, sitej, phi, salt):
    xi, yi, zi = sitei.pos
    xj, yj, zj = sitej.pos
    return -gamma0*exp(-0.5j * phi * (xi - xj) * (yi + yj))
def hop1(sitei, sitej, phi, salt):
    xi, yi, zi = sitei.pos
    xj, yj, zj = sitej.pos
    return -gamma1*exp(-0.5j * phi * (xi - xj) * (yi + yj))
def hop3(sitei, sitej, phi, salt):
    xi, yi, zi = sitei.pos
    xj, yj, zj = sitej.pos
    return -gamma3*exp(-0.5j * phi * (xi - xj) * (yi + yj))
def hop4(sitei, sitej, phi, salt):
    xi, yi, zi = sitei.pos
    xj, yj, zj = sitej.pos
    return gamma4*exp(-0.5j * phi * (xi - xj) * (yi + yj))

# Application d'un désordre de type gaussien
def onsite(site, phi, salt):
    return 0.05 * gauss(repr(site), salt)

# Définition de la géométrie rectangulaire de la région de diffusion
def make_system(Lx=10, Ly=10, Lz=0.75*c_L):
    def rect(pos):
        x, y, z = pos
        return abs(x) < Lx and abs(z) < Lz and abs(y) < Ly
    sys = kwant.Builder()
    sys[graphene.shape(rect, (0, 0, 0))] = 0
    hoppings1 = (((0, 0, 0), a1, b1), ((0, 1, 0), a1, b1), ((-1, 1, 0),
a1, b1)) #gamma0
    hoppings2 = (((0, 0, 0), a2, b2), ((0, 1, 0), a2, b2), ((1, 0, 0),
a2, b2)) #gamma0
    hoppings3 = ((0, 0, 0), a1, a2) #gamma1
    hoppings4 = (((0, 0, 0), b1, b2), ((1, 0, 0), b1, b2), ((1, -1, 0),
```

```

    b1, b2)) #gamma3
hoppings5 = ((0, 0, 0), a1, b2), ((0, 1, 0), a1, b2), ((1, 0, 0),
a1, b2), ((0, 0, 0), a2, b1), ((0, 1, 0), a2, b1), ((-1, 1, 0), a2, b1)) #
#gamma4

sys[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings1]]
= hop0
sys[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings2]]
= hop0
sys[kwant.builder.HoppingKind(*hoppings3)] = hop1#gamma1
sys[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings4]]
= hop3
sys[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings5]]
= hop4

# Attribution des couleurs et motifs aux sous-réseaux dans les 2
couches et tracé
def family_colors(site):
    if site.family == a1:
        return 0
    elif site.family == a2:
        return 1
    elif site.family == b1:
        return 0
    elif site.family == b2:
        return 1
kwant.plot(sys, site_color=family_colors, site_lw=0.1, color-
bar=False)

```

```

# Définir et attacher les fils (leads)
# Construire le fil de gauche
sym0 = kwant.TranslationalSymmetry(graphene.vec((-1, 0, 0)))
def lead0_shape(pos):
    x, y, z = pos
    return ( abs(y) < Ly) and ( abs(z) < Lz)
lead0 = kwant.Builder(sym0)
lead0[graphene.shape(lead0_shape, (0, 0, 0))] = 0 #onsite
lead0[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hop-
pings1]] =hop0
lead0[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hop-
pings2]] =hop0
lead0[kwant.builder.HoppingKind(*hoppings3)] = hop1 #gamma1
lead0[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hop-
pings4]] =hop3
lead0[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hop-
pings5]] =hop4

# Construire le fil de droite
sym1 = kwant.TranslationalSymmetry(graphene.vec((1, 0, 0)))
def lead1_shape(pos):
    x, y, z = pos
    return ( abs(y) < Ly) and ( abs(z) < Lz)
lead1 = kwant.Builder(sym1)
lead1[graphene.shape(lead1_shape, (0, 0, 0))] = 0 #onsite

```

```

lead1[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings1]] =hop0
lead1[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings2]] =hop0
lead1[kwant.builder.HoppingKind(*hoppings3)] = hop1#gamma1
lead1[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings4]] =hop3
lead1[[kwant.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings5]] =hop4

# Attacher le fil de gauche puis celui de droite
sys.attach_lead(lead0)
sys.attach_lead(lead1)

# Module de tracé des fils
kwant.plot(sys, site_color=family_colors, site_lw=0.01,
           lead_site_lw=0, colorbar=False)
return sys.finalized()
sys = make_system()

# Tracé de la relation de dispersion
kwant.plotter.bands(sys.leads[0], args=[1/40.0, ""])

# Valeur de l'énergie de Fermi définie par rapport à la valeur de t
(= gamma0 =1)
energy = 0.35
#Détermination des plateaux de la conductance
#Calcul de la probabilité ou facteur de transmission T de contact
(lead ) 0 à contact (lead) 1
reciprocal_phi = numpy.linspace(1, 100, 100)
conductances = []
for phi in 1 / reciprocal_phi:
    smatrix = kwant.smatrix(sys, energy, args=[phi, ""])
    conductances.append(smatrix.transmission(1, 0))
pyplot.plot(reciprocal_phi, conductances)
pyplot.show()

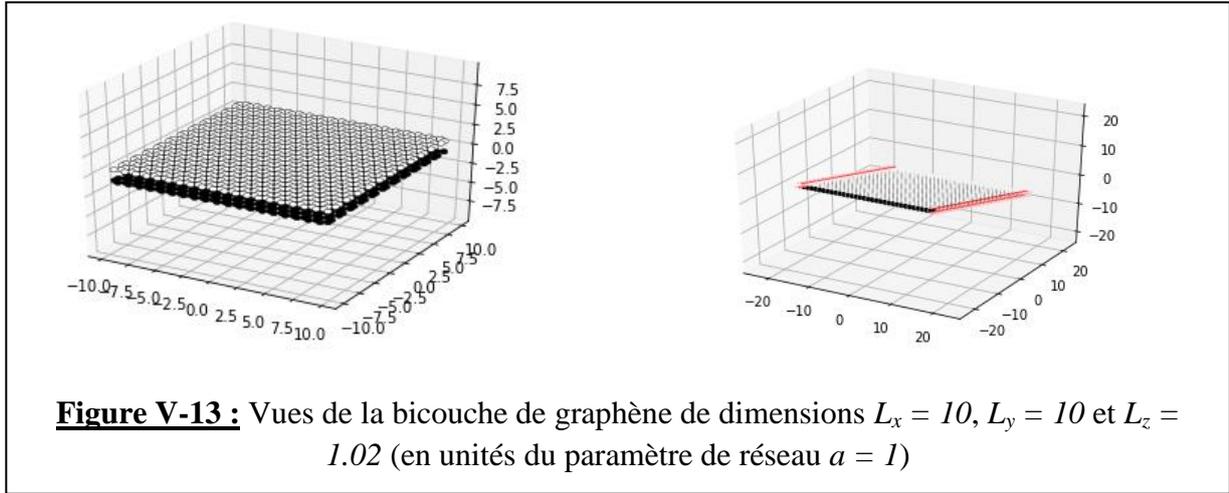
```

Les résultats de simulation obtenus pour le graphène sont montrés sur les figures ci-après.

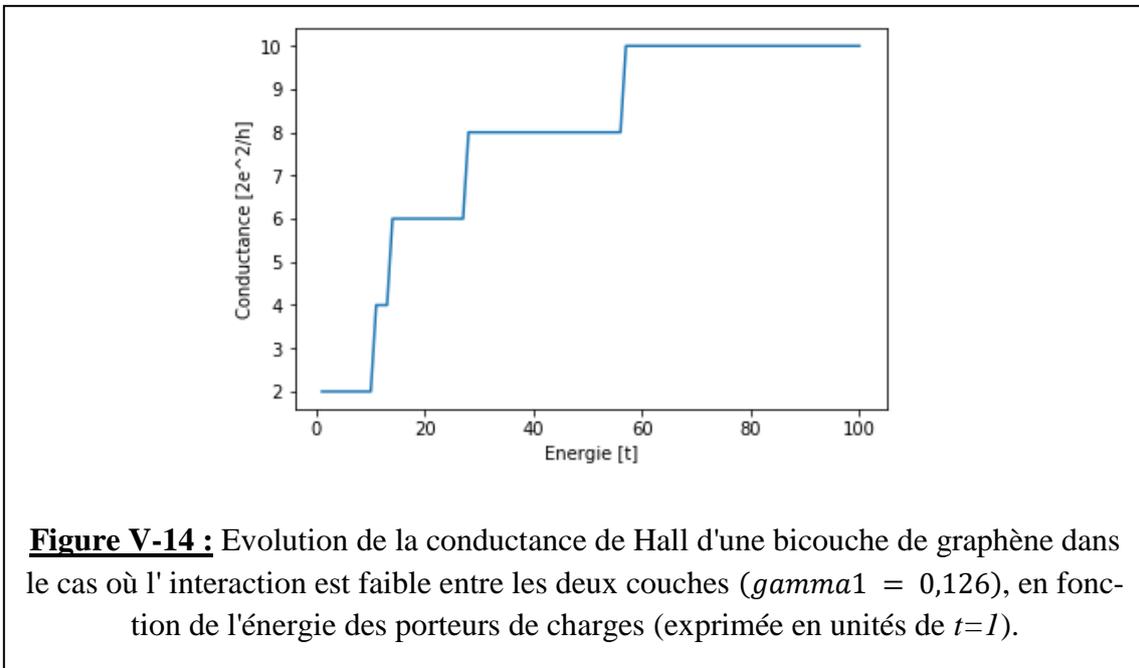
a) Graphène bicouche

La figure V-13 montre la bicouche étudiée dans l'espace (a), ainsi qu'une vue de cette couche montrant les fils d'amenée (leads) en rouge.

Dans les figures suivantes, nous avons étudié l'influence des valeurs des coefficients ou paramètres de saut t , t_{\perp} et t'' . Dans le script décrit ci-avant, ces paramètres sont notés $\text{gamma0} = t$, $\text{gamma1} = \text{gamma3} = t_{\perp}$ et $\text{gamma4} = t''$. Nous représentons dans chaque cas la conductance de Hall de la bicouche ainsi que la structure de bandes associée.



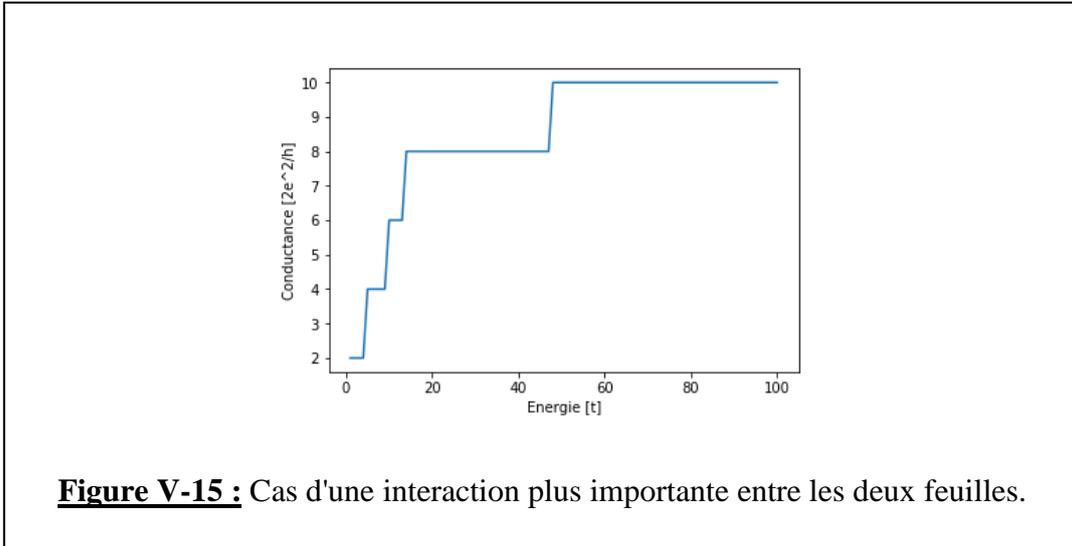
a) $\gamma_0=1$, $\gamma_1 = 0,126$, $\gamma_3=0$ et $\gamma_4=0$



On remarque sur cette figure que la conductance obéit bien à la relation IV-19 : $G_{xy} = \sigma_{xy} = 4n \frac{e^2}{h}$. Ainsi, pour $n = 1$, on obtient $G_{xy} = 4 \frac{e^2}{h} = 2 \left(2 \frac{e^2}{h} \right)$; pour $n = 2$, on obtient $G_{xy} = 8 \frac{e^2}{h} = 4 \left(2 \frac{e^2}{h} \right)$, etc. Le niveau correspondant à $n = 0$ n'existe pas, comme nous l'avions mentionné.

b) $\gamma_0 = 1$, $\gamma_1 = 0,4$, $\gamma_3=0,4$ et $\gamma_4 = 0,15$

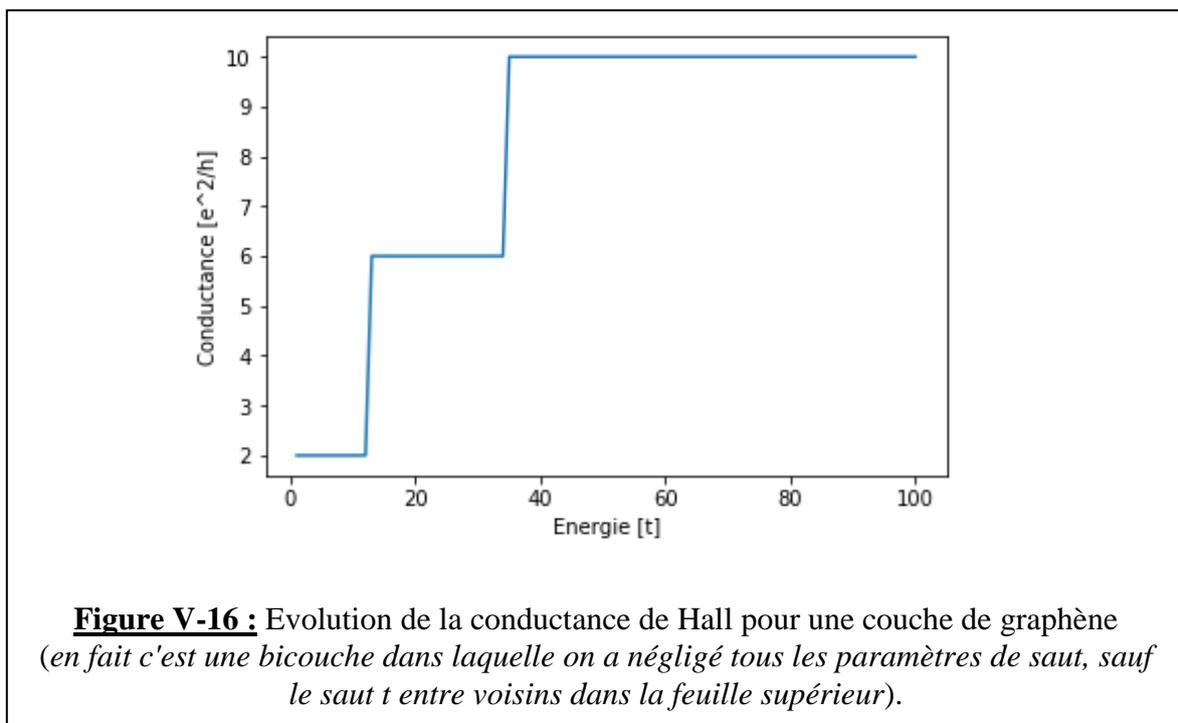
C'est le cas d'une forte interaction entre les deux feuilles constituant la bicouche.



On constate sur cette figure (comme sur la figure précédente) que la largeur des plateaux devient plus importante à mesure que l'énergie augmente, c'est-à-dire à mesure que B augmente. Une faible largeur d'un plateau signifie que les états localisés ne sont pas nombreux dans la gamme d'énergie considérée. Dans une gamme d'énergie plus élevée, ces plateaux s'élargissent montrant que tous les états additionnels sont localisés sur les défauts (impuretés, en particulier); ils ne contribuent pas au courant jusqu'à ce que le facteur de remplissage change. Le dernier plateau (plateau supérieur) est très large donnant ainsi une conductance constante, à cause probablement du piégeage important des porteurs de charge dans les états localisés.

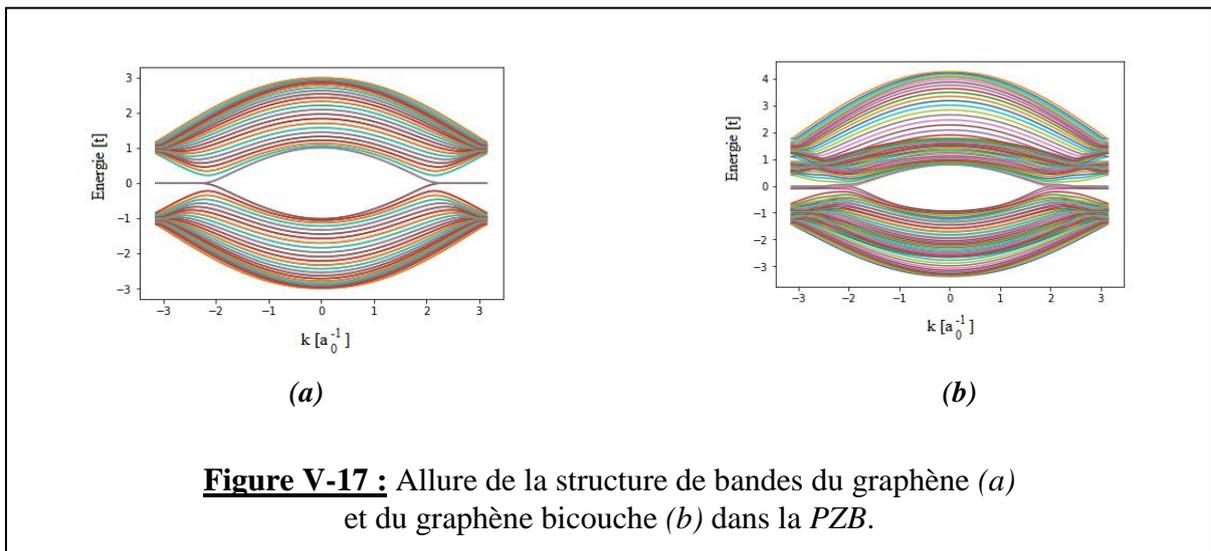
c) $\gamma_0 = 1$, $\gamma_1 = 0$, $\gamma_3 = 0$ et $\gamma_4 = 0$

C'est le cas où on ne tient pas du tout compte de la feuille inférieure de graphène : la bicouche est considérée comme une monocouche de graphène. Le résultat est montré sur la figure ci-après.



L'évolution de la conductance de Hall de la figure V-16 peut donc être considérée comme celle d'une couche de graphène. On y constate que cette conductance a la forme $G_{xy} = \sigma_{xy} = 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{h}$ comme vu au paragraphe IV-7 (où on ne considère les valeurs positives des valeurs entières du facteur de remplissage ν). Le premier plateau correspond au NL $n = 0$ et a pour valeur de la conductance $2 \frac{e^2}{h}$; le deuxième correspond au NL $n = 1$ et a pour valeur de la conductance $6 \frac{e^2}{h}$, et enfin le troisième ($n = 2$) a pour valeur de la conductance $10 \frac{e^2}{h}$. La séparation entre plateaux est égale à $4 \frac{e^2}{h}$, comme dans le cas de la bicouche.

Enfin, nous exposons à la fin de cette étude et à titre illustratif, l'allure des structures de bandes du graphène (figure V-17a) et du graphène bicouche (figure V-17b), obtenues à l'aide des instructions correspondantes du programme Python présenté plus haut.



Dans les deux cas, la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC) se touchent aux limites de la PZB ($-\pi$) et ($+\pi$), aux points K et K'.

Dans le cas (a), les bandes semblent symétriques : la BV est pleine alors que la BC est vide.

Dans le cas (b), il y a dissymétrie : la densité d'états dans la BC est plus importante et les deux bandes ont un aspect plus compliqué. L'explication de ces phénomènes dépasse le niveau de ce mémoire.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] C.W. Groth, M. Wimmer, A.R. Akhmerov et X. Waintal, **New J. Phys.** **16**, 063065(2014)
- [2] P.A. Lee et D.S. Fisher, **Phys. Rev. Lett** **47**, 882(1981)
- [3] D.J. Thouless et S. Kirkpatrick, **J. Phys. C** **14**, 235(1981)
- [4] A. MacKinnon **Zeit. f. Phys. B** **59**, 385(1985)
- [5] D.R. Hofstadter, **Phys. Rev. B** **14**, 2239(1976)

CONCLUSION

Dans l'étude que nous venons de présenter, nous nous sommes intéressés à un effet quantique qui a d'abord trouvé une application en métrologie dans la définition d'un nouvel étalon de résistance électrique. Il s'agit de l'effet ou plutôt des effets Hall quantiques.

L'effet Hall classique, connu depuis longtemps, intervient dans plusieurs applications technologiques. Il a été mis en évidence dans des matériaux métalliques puis semi-conducteurs 3D. Ce même effet, appliqué à des structures bidimensionnelles, où les électrons forment un gaz 2D (appelé 2DEG), fait apparaître des phénomènes physiques nouveaux dont une quantification de l'énergie en niveaux de Landau et de la résistance transverse ou résistance de Hall. Cela se produit en réalité à un champ magnétique appliqué élevé et à basse température. Selon que l'on tienne ou pas compte des interactions électron-électron, on a affaire à l'effet Hall quantique entier ou fractionnaire.

Deux types de nanostructures ont fait l'objet de cette étude : une première structure 2DEG conventionnelle obtenue à l'interface AlGaAs/GaAs, et le graphène, matériau 2D miracle !

En utilisant un progiciel spécialisé dans l'étude du transport quantique dénommé Kwant, et conçu en 2014, nous avons pu reproduire l'effet Hall quantique entier dans les deux nanostructures. Ce progiciel qui dispose d'une bibliothèque très riche fonctionne sous le langage de programmation Python.

Les résultats montrent que la conductance de Hall est bien quantifiée dans les deux cas :

- dans la première nanostructure (2DEG), la conductance de Hall présente effectivement des plateaux mais à partir d'une certaine valeur de B, la quantification disparaît à cause d'un phénomène de rétrodiffusion au niveau des états de bord. Nous avons montré l'importance de ces états de bords dans la conduction observée et l'importance du désordre, responsable aussi de l'apparition de plateaux de quantification. Les canaux de conduction à travers ces états, ainsi que les plateaux ont également été simulés et tracés en faisant varier l'énergie de Fermi du système.

- dans la deuxième nanostructure, nous avons d'abord représenté la conductance de Hall d'un bicouche de graphène et montré qu'elle consistait en des plateaux équidistants séparés de la quantité $4 e^2/h$, où le facteur 4 est le produit de la dégénérescence de spin et de la dégénérescence de vallée. La conductance de Hall obéit bien à la relation $\sigma_{xy} = 4n \frac{e^2}{h}$; le niveau de Landau $n = 0$ correspond à une conductance nulle. Dans une deuxième phase, nous avons appliqué la même procédure au graphène monocouche. Dans ce dernier cas, les plateaux qui

apparaissent sont aussi équidistants de la même quantité $4 e^2/h$. La conductance de Hall obéit bien à la relation $\sigma_{xy} = 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{h}$, le niveau de Landau $n = 0$ correspondant à une conductance non nulle, contrairement au graphène bicouche. Enfin, et à titre illustratif, nous avons représenté les structure de bandes électronique pour les deux types de graphène et avons les différences existantes.

Dans cette étude, nous avons montré qu'il était possible de modéliser la quantification dans des systèmes bidimensionnels (2DEG et graphène), à travers l'étude de l'effet Hall quantique entier. Cette étude doit être poursuivie par des tentatives de modélisation de l'effet Hall quantique fractionnaire, dont la physique est beaucoup plus complexe, en utilisant Kwant.

ANNEXE : LE MODELE DE DRUDE

Dans un cristal réel, les impuretés et les défauts de différente nature constituent des obstacles pour les porteurs de charges que sont les électrons. Ces obstacles induisent un changement du potentiel périodique et la création d'un champ électrique local. Quand un électron passe au voisinage de cet obstacle, il interagit avec ce champ électrique local et la direction de son mouvement est changée; le porteur est diffusé par l'obstacle en question. On dit aussi que le porteur entre en "collision" avec l'obstacle.

La théorie de Drude des métaux est importante pour diverses raisons :

- elle introduit une manière de penser très utile dans la physique des solides (libre parcours moyen, temps de relaxation, collisions);
- motivation historique : ce fut la première théorie (1900) qui a permis d'expliquer avec succès plusieurs propriétés des métaux;
- ses défauts mettent bien en évidence les limites d'une théorie classique (application de la théorie cinétique des gaz aux électrons).

Dans cette théorie, Drude pose les hypothèses suivantes :

- Les porteurs de charge sont les électrons de valence qui constituent un gaz auquel on peut appliquer la théorie cinétique des gaz (Figure A.1).

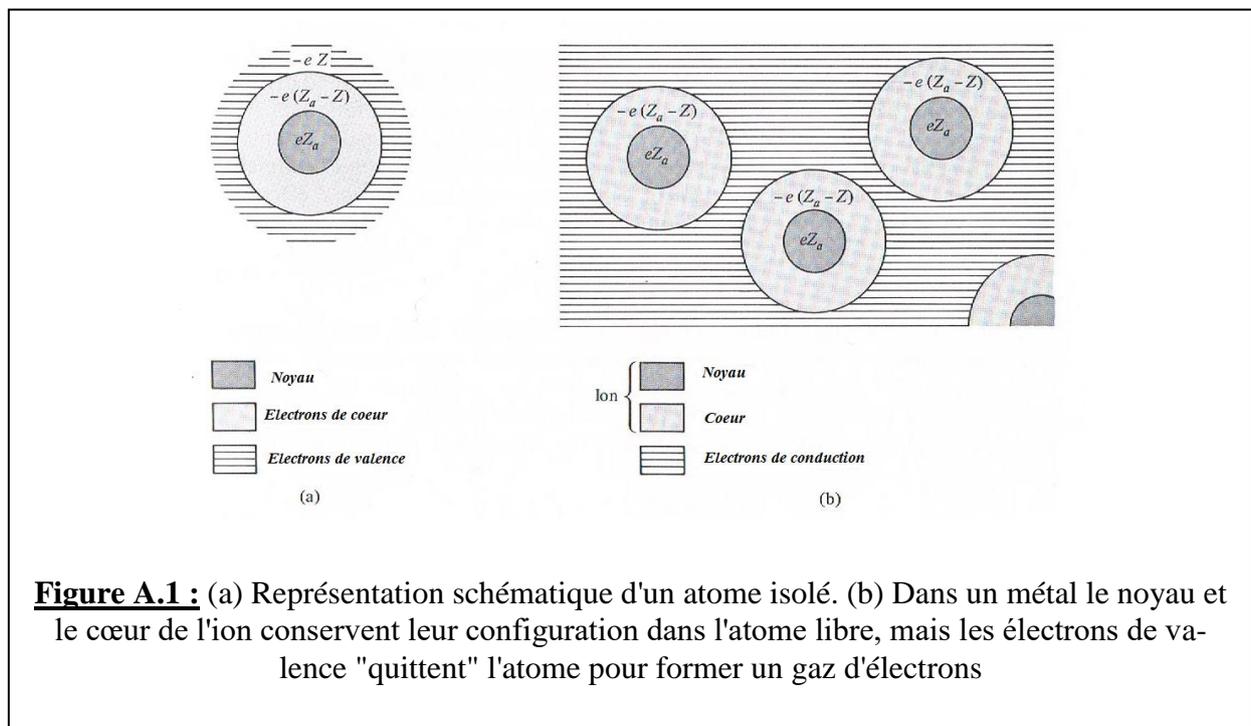


Figure A.1 : (a) Représentation schématique d'un atome isolé. (b) Dans un métal le noyau et le cœur de l'ion conservent leur configuration dans l'atome libre, mais les électrons de valence "quittent" l'atome pour former un gaz d'électrons

- Les porteurs de charge positive (les ions), beaucoup plus lourds, peuvent être considérés comme immobiles.

- Entre les collisions, l'interaction d'un électron avec les autres électrons et les ions est négligée. Ainsi en l'absence de champ extérieur, les électrons ont un mouvement rectiligne uniforme et isotrope. En présence d'un champ extérieur, le mouvement des électrons entre les collisions est déterminé par les équations de Newton.

Il faut remarquer que le fait de négliger les interactions électron-électron entre les collisions (**approximation des électrons indépendants**) est bonne dans de nombreux cas. Par contre, le fait de négliger l'interaction électron-ion (**approximation des électrons libres**) devra être abandonnée si l'on veut expliquer les comportements différents d'un métal et d'un semi-conducteur, par exemple. On pallie à cela en remplaçant la masse de l'électron libre (m ou m_0) par une masse dite effective m^* qui contient l'effet global du potentiel cristallin (créé par les interactions électron-électron et électron-noyau) sur l'électron.

- Les collisions sont des **événements instantanés**, qui modifient brusquement la vitesse des électrons. Cela revient à dire que l'on néglige les forces à longue portée et on ne tient compte que des forces à courte portée.
- La probabilité qu'un électron subisse une collision durant l'intervalle de temps compris entre t_0 et $t_0 + dt$ est égale à dt/τ . Elle est indépendante de t_0 , de la position et de la vitesse de l'électron. Le temps moyen entre deux collisions successives d'un électron est noté τ ; il est appelé **temps de collision**, **temps de vol moyen** ou **temps de relaxation**. τ dépend de la pureté du matériau et de son homogénéité.
- On admet que, après chaque collision, la vitesse d'un électron est d'orientation quelconque (distribution isotrope des vitesses juste après la collision) et que cette vitesse est reliée à la température locale. Lors d'une collision, il y a échange d'énergie entre le porteur et le réseau cristallin; dans certains cas le porteur gagne de l'énergie et dans d'autres cas il en perd. Globalement et sachant qu'il n'y a pas d'apport d'énergie de l'extérieur, l'échange d'énergie est nul. De plus, comme les collisions sont isotropes, toutes les directions de la vectrice vitesse après une collision sont équiprobables (c'est-à-dire qu'elles ont toutes la même probabilité d'existence).

Conclusion : la vitesse moyenne du porteur est nulle lorsque le champ électrique est nul.

En 1900, Drude établit l'expression suivante pour la conductivité σ d'un métal :

$$\sigma = ne\mu = \frac{ne^2\tau}{m_0} \quad (\text{A.1})$$

où : n est la densité électronique (nombre d'électrons par unité de volume), τ le temps de relaxation (ou durée moyenne entre deux collisions), e la valeur absolue de la charge de l'électron, μ sa mobilité (vitesse dans un champ électrique égal à l'unité) et m_0 sa masse (que l'on doit remplacer par la masse effective m^* qui comprend l'effet global du potentiel électrique sur l'électron mobile: $1/m^* = (1/\hbar^2)[d^2E/dk^2]$).

Si \vec{E} est le champ électrique appliqué, la densité de courant (A/m^2) est donnée par la relation :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (A.2)$$

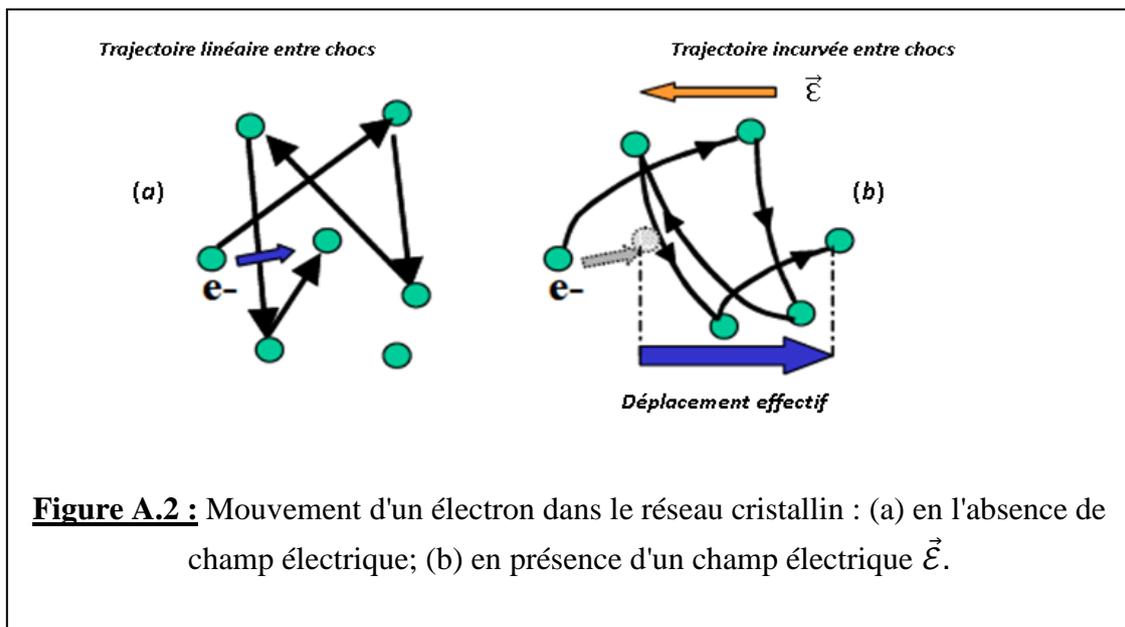
C'est la forme locale de la loi d'Ohm.

Cette densité de courant est liée à la vitesse moyenne de l'électron \vec{v}_m , par la relation :

$$\vec{j} = -ne\vec{v}_m \quad (A.3)$$

En tenant compte des expressions (A.1), (A.2) et (A.3), on a :

$$\vec{v}_m = -\frac{e\tau}{m_0} \vec{E} \quad (A.4)$$



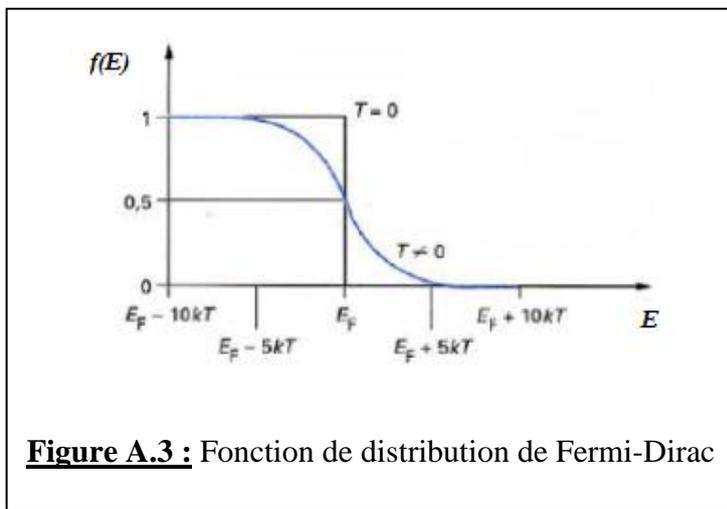
La figure A.2 représente l'influence de l'application d'un champ électrique sur le mouvement d'un électron. Ce mouvement est de type brownien en l'absence de champ et est rectiligne entre deux collisions (ou chocs) successifs (a). Le champ a pour effet d'incurver les trajectoires (entre les diverses collisions) et de provoquer un déplacement effectif du porteur de charge.

LE MODELE DE DRUDE/SOMMERFELD

Le raisonnement de Drude est basé sur un modèle classique où les électrons sont considérés comme des particules libres accélérées par un champ électrique entre deux collisions les-

quelles sont séparées par un temps moyen τ . La théorie de Drude n'est pas apte à expliquer la conduction dans les semi-conducteurs où deux types de porteurs charges de signes opposés interviennent, les électrons et les trous. De même, qu'elle est incapable d'expliquer le signe positif du coefficient de Hall de certains métaux comme l'aluminium ou l'indium.

Nous devons alors faire appel à un modèle semi-classique (modèle de Drude-Sommerfeld) pour expliquer la conductivité dans les métaux. Ce modèle est classique dans le sens où les électrons sont considérés comme des particules ponctuelles (soumises à un phénomène de diffusion) et quantique dans le sens où il fait appel à la statistique de Fermi-Dirac. En mécanique quantique, la statistique de Fermi-Dirac s'applique à des particules appelés fermions (de spin demi-entier) comme les électrons.



Pour un matériau uniforme, à une température T , la fonction de distribution de Fermi-Dirac (figure A.3) est donnée par :

$$f(\mathbf{E}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \quad (\text{A.5})$$

E_F est appelée énergie de Fermi : à $T = 0 \text{ K}$ les électrons occupent tous les états d'énergie inférieure à E_F et les états d'énergie situés au-

dessus de E_F sont tous vides.

E est l'énergie de l'électron; elle dépend du vecteur d'onde \vec{k} qui représente un état quantique : $E = E(\vec{k})$.

Pour un électron libre : $E(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$.

De ce fait, on peut écrire : $f(E) = f(\vec{k})$.

En l'absence de champ électrique ($\vec{\mathcal{E}} = \vec{0}$) et dans les conditions de température homogène : $f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) = f_0$. C'est la fonction de distribution à l'équilibre f_0 qui représente la probabilité pour qu'un état quantique d'énergie E (ou de vecteur d'onde \vec{k}) soit occupé par un électron (Figure A.3).

Cette fonction ne dépend pas de la position \vec{r} de l'électron, contrairement à la fonction de distribution hors équilibre $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$.

ملخص:

فيزياء و تطبيقات تأثير هول الكمي

تم تكريس هذه الأطروحة للدراسة المفصلة نسبيًا للتأثير الكمي الذي يمكن من تحديد معيار جديد للمقاومة الكهربائية يعتمد فقط على ثوابتين أساسيتين للفيزياء ، (ثابت بلانك) و (e) (حمولة الإلكترون) هذا هو تأثير هول الكمي ، الذي تم تسليط الضوء عليه في عام 1980 ، والذي يمكن أن يكون من نوعين صحيحين أو كسريين. يتجلى هذا التأثير في الهياكل النانوية لأشباه الموصلات ثنائية الأبعاد، والتي يتم الحفاظ عليها في درجة حرارة منخفضة (بعض K) وتعرض لحقل مغناطيسي مكثف عموديًا عليها. كما أنه واضح في مادة ثورية وفي درجة حرارة الغرفة. هو الجرافين الذي اكتشف فيه هذا التأثير الكمي في عام 2004. في هاتين البنات النانوية ، يتم التعبير عن تأثير القاعة الكمية عن طريق التقدير الكمي للمقاومة العرضية (التوصيل) ، أو المقاومة (التوصيل) للقاعة ، والتي يعني ظهور محامل أو صواني حيث ثابت. لقد أوضحنا فيزياء ظهور هذه الهضاب وارتباطها بوجود احتمال حدوث اضطراب يؤدي إلى إنشاء حالات موضعية وحالات ممتدة لنقاط الشحن ، وكذلك الدور الذي تلعبه الدول حافة ما يسمى.

في خطوة ثانية ، قمنا بمحاكاة - باستخدام حزمة برامج مع مكتبة غنية جدًا ، تسمى Kwant ، ومتخصصة في النقل الكمي - صواني التوصيل الخاصة بتأثير هول الكم الكلي في حالة النقل الكمي. غاز الكترولون تقليدي ثنائي الأبعاد (2D 2DEG غاز الكترولون) ، ثم في حالة طبقة ثنائية الجرافين (كومة من صفتين من الجرافين) وجرافين أحادي الطبقة. لاحظ أن حزمة البرامج هذه ، في حرية الوصول ، تعمل تحت Python وتستخدم طريقة الارتباطات القوية.

النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام تقنية النمذجة هذه مشجعة للغاية وسمحت لنا بتأكيد النتائج النظرية والتجريبية المنشورة في الأدبيات المتخصصة. كان من المثير للاهتمام تجربة محاكاة تأثير هول الكم الكسري ، لكن تعقيد فيزياء هذا التأثير لا يسمح بإجراء مثل هذه الدراسة في إطار هذا المعلم **الكلمات الرئيسية:** تأثير هول الكمي الكلاسيكي. عدد صحيح قاعة تأثير الكم. تأثير كسور قاعة الكم. مستويات لانداو. الدول الحافة. الجرافين Kwant.

Summary:

Physics and Applications of Quantum Hall Effect.

This thesis is devoted to a relatively detailed study of a quantum effect which defines a new standard of electrical resistance depending solely on two fundamental constants of physics, h (Planck's constant) and e (elementary charge): it is the quantum Hall effect, discovered in 1980, and which consists in fact in integer quantum Hall effect and fractional quantum Hall effect. These effects were revealed in two-dimensional semiconductor nanostructures, maintained at low temperature (some Kelvins) and subjected to an intense magnetic field perpendicular thereto. It exists also in a revolutionary material and at room temperature; this material is graphene in which this quantum effect was discovered in 2004. In these two nanostructures, the quantum Hall effects are expressed by a quantification of the transverse resistance (conductance), or resistance (conductance) of Hall R_H , and which implies the appearance of bearings or trays where R_H is constant. We have explained the physics of the appearance of these plateaus and its correlation with the existence of a disorder potential which causes the creation of localized states and extended states for the charge carriers, as well as the role played by the so-called edge states.

In a second step, we simulated - using a software package with a very rich library, called Kwant, and specialized in quantum transport - the conductance plateaus of the integer quantum Hall effect in the case of quantum transport in a conventional two-dimensional electron gas (2DEG), then in the case of bilayer graphene (stack of two sheets of graphene) and monolayer graphene. Note that this software package, in free access, runs under Python and uses the tight-binding method.

The results obtained using this simulation technique are very encouraging and allowed us to confirm the theoretical and experimental results published in the specialized literature. It would have been interesting to try the simulation of the fractional quantum Hall effect, but the complexity of the physics of this effect does not allow such a study within the framework of this master.

Keywords: Classical quantum Hall effect. Integer quantum Hall effect. Fractional quantum Hall effect. Landau levels. Edge states. Graphene. Kwant.

Résumé:

Physique et applications de l'effet Hall quantique

Ce mémoire est consacré à l'étude relativement détaillée d'un effet quantique qui a permis de définir un nouvel étalon de la résistance électrique dépendant uniquement de deux constantes fondamentales de la physique, h (la constante de Planck) et e (la charge de l'électron) : il s'agit de l'effet Hall quantique, mis en évidence en 1980, et qui peut être de deux sortes entier ou fractionnaire. Cet effet se manifeste dans des nanostructures semi-conductrices bidimensionnelles, maintenues à basse température (quelques K) et soumises à un champ magnétique intense qui leur est perpendiculaire. Il se manifeste aussi dans un matériau révolutionnaire et à la température ambiante; il s'agit du graphène dans lequel cet effet quantique a été découvert en 2004. Dans ces deux nanostructures, l'effet Hall quantique se traduit par une quantification de la résistance (conductance) transverse, ou résistance (conductance) de Hall R_H , et qui implique l'apparition de paliers ou plateaux où R_H est constante. Nous avons expliqué la physique de l'apparition de ces plateaux et sa corrélation avec l'existence d'un potentiel de désordre qui provoque la création d'états localisés et d'états étendus pour les porteurs de charge, ainsi que le rôle joué par les états dits de bord.

Dans une deuxième étape, nous avons simulé - à l'aide d'un progiciel doté d'une bibliothèque très riche, dénommé Kwant, et spécialisé dans le transport quantique - les plateaux de conductance de l'effet Hall quantique entier dans le cas d'un gaz d'électrons bidimensionnel conventionnel (2DEG : 2D electron gas), puis dans le cas du graphène bicouche (empilement de deux feuilles de graphène) et du graphène monocouche. A noter que ce progiciel, en accès libre, fonctionne sous Python et utilise la méthode des liaisons fortes..

Les résultats obtenus à l'aide de cette technique de modélisation sont très encourageants et nous ont permis de confirmer les résultats théoriques et expérimentaux publiés dans la littérature spécialisée. Il aurait été intéressant de tenter la simulation de l'effet Hall quantique fractionnaire, mais la complexité de la physique de cet effet ne permet pas une telle étude dans le cadre de ce master.

Mots-clés: Effet Hall quantique classique. Effet Hall quantique entier. Effet Hall quantique fractionnaire. Niveaux de Landau. Etats de bord., Graphène. Kwant.