

Génération et détection de la polarisation de vallée optique dans les semimétaux de Weyl

par

Simon Bertrand

Thèse présentée au département de physique
en vue de l'obtention du grade de docteur ès sciences (Ph.D.)

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 10 août 2020

Le 10 août 2020

le jury a accepté la thèse de Monsieur Simon Bertrand dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur Ion Garate
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur René Côté
Codirecteur de recherche
Département de physique

Professeur Jeffrey Quilliam
Membre interne
Département de physique

Mark Oliver Goerbig
Professeur
Membre externe
Laboratoire de Physique des Solides
Université Paris-Saclay

Professeur André-Marie Tremblay
Président rapporteur
Département de physique

À mon père, ma mère et Hannah

Sommaire

Cette thèse a pour but la description de la génération et de la détection de la polarisation de vallée optique dans les semimétaux de Weyl. Le lien entre propriétés optiques et topologiques reste une avenue encore peu empruntée dans les matériaux topologiques et les semimétaux de Weyl en particulier. La question centrale de cette thèse est de comprendre la relation entre propriétés topologiques et d'éventuelles interactions entre les électrons puis les manifestations de cette présence conjointe sur des mesures optiques, comme la conductivité ou l'absorption optique.

Premièrement, nous présenterons la physique de base régissant les semimétaux de Weyl ainsi que leur nature topologique intrinsèque. Par la suite, nous mettrons en lumière le lien entre les différentes fonctions de réponse optiques, comme l'absorption, la conductivité optique et la fonction diélectrique afin de pouvoir comparer nos prédictions théoriques à des mesures expérimentales. Puis l'on montrera comment obtenir une polarisation de vallée et comment la mesurer, soit par des mesures de transport, soit par des mesures optiques, dans différents systèmes afin de comparer notre polarisation de vallée à des résultats existants.

Nous montrerons deuxièmement comment calculer la polarisation interbande dans un modèle de semimétal de Weyl brisant la symétrie de renversement du temps ou d'inversion. Cela nous permettra de calculer l'absorption optique du système ainsi que d'écrire une équation de Schrödinger effective pour la paire électron-trou topologique, que l'on identifie à un exciton de Mahan topologique. La topologie de cet exciton est exhibée par une courbure de Berry jointe, reliée au potentiel de Schwinger, qui conduit à un effet observable dans le cas d'un modèle avec des termes non linéaires dans la dispersion. Cette courbure de Berry jointe donne notamment lieu à une chiralité dans l'absorption optique, ce qui permet une réponse différente pour une lumière polarisée circulairement gauche et droite. Une autre conséquence est l'apparition d'une polarisation de vallée partielle pour un modèle qui brise la symétrie d'inversion spatiale pour des noeuds reliés par symétrie d'inversion du temps. Dans le cadre d'un modèle où seule la symétrie de renversement du temps est brisée, une

telle polarisation de vallée n'a pas lieu mais un dichroïsme circulaire est possible.

Dans la troisième partie, on inclura un champ magnétique externe donnant lieu à des niveaux de Landau dans le système. La brisure de la symétrie de renversement du temps par le champ magnétique nous permettra alors d'obtenir une polarisation de vallée de paires de noeuds complète. Cette polarisation de vallée se manifeste par un dédoublement du pic de la transition optique entre le niveau chiral et un niveau de Landau non chiral pour les noeuds reliés par symétrie par renversement du temps dans le modèle en absence de champ magnétique. Toutefois la brisure de la symétrie anti-unitaire à basse énergie, nécessitant l'existence de termes non linéaires dans la dispersion ou bien d'une inclinaison des noeuds de Weyl, est cruciale. Ceci nous montre qu'en présence d'un champ magnétique externe également, la polarisation de vallée a toujours une origine topologique dans les semimétaux de Weyl. De plus, il est possible de contrôler cette dernière en changeant la direction de propagation de la lumière et l'orientation du champ magnétique externe. Si ces derniers ne sont pas orientés selon un axe de symétrie principal, alors la polarisation de vallée est chirale.

Finalement, nous développerons dans la dernière partie une théorie afin de pouvoir détecter par le transport la polarisation de vallée complète mais non chirale, donc en fort champ magnétique. Nous monterons que les noeuds de Weyl dans un semimétal brisant la symétrie d'inversion portent un courant relié à l'effet magnéto-photogalvanique en présence d'une lumière externe. De plus, nous verrons comment le terme d'anomalie chirale viendra modifier les équations de van Roosbroeck, équations de base permettant de décrire le transport dans les semiconducteurs. Pour finir, nous présenterons quelques résultats préliminaires, pour un système limité prenant en compte uniquement les niveaux de Landau chiraux avec des conditions aux bords de type contacts ohmiques. Dans ce cas, aucun courant axial hors-équilibre n'apparaît et le système se comporte comme un semiconducteur unidimensionnel ordinaire.

Remerciements

Une thèse est un travail personnel, cependant, ce n'est pas un ouvrage que l'on accomplit seul, mais avec l'aide de beaucoup de monde autour de soi. Sans toutes ces personnes, un tel travail n'aurait pas été possible.

Je voudrais tout d'abord remercier mes deux directeurs de thèses, Ion Garate et René Côté, qui ont été de véritables mentors tout au long de mon doctorat. Ce fut un privilège et un grand plaisir que d'apprendre à vos côtés. Merci à vous deux pour votre disponibilité, votre savoir, votre soutien et votre grande complémentarité. Merci Ion pour ton dynamisme constant, ta capacité à motiver et ta recherche constante de projets novateurs. Merci René pour ta bonne humeur, ton calme, ton sérieux et ton expertise des problèmes à N corps. En bref, merci à vous deux de m'avoir fait confiance.

Je remercie également les membres de mon jury, André-Marie Tremblay, Jeffrey Quilliam, Mark Oliver Goerbig, René Côté et Ion Garate, pour leurs commentaires et questions à la lecture (et relecture) de mon manuscrit. Toutes vos remarques et encouragements m'ont permis d'arriver à un travail plus abouti ainsi qu'à des discussions passionnantes lors de ma soutenance.

Je remercie aussi tous les gens que j'ai pu côtoyer au département de physique. En premier lieu tous les membres de mon groupe : Pierre Rinkel, Samuel Boutin, Pedro Lopes (tudo bem), Jorge Ramirez-Ruiz, Jean-Michel Parent et Sanghita Sengupta. Un remerciement particulier à Jean-Michel qui m'a bien aidé lors de sa maîtrise pour la polarisation de vallée chirale. Merci aussi à Redha Rouane, Sidhartha Dash, Reza Nourafkan, Arash Akbari, Lucas Déssopi, Arghyadip Ghosh et tous les autres que j'ai pu oublier. Sans toutes les pauses café, cette thèse n'aurait pas été possible !

Ensuite, comme on est riche de ses amis, merci à Hipolito Treffinger, Antoine Becker (pour les soirées GoT interminables du lundi soir), Émilie Lefol et Thibaut Hestin, mais aussi mes colocs et amis avec qui j'ai passé nombre de soirées inoubliables, Clément Collignon

(ptit cotoz inclus), Shaheen Acheche (qui m'a fait venir à Sherbrooke, double remerciement pour toi l'ami, et un seul cerveau bruh), Pierre Rinkel (protman bruh), Anaëlle Legros et Alexis Reymbaut. Merci aussi à Jehan Rubin (groupe de motivation bien sur), Ellen Haas, Rémy Herbaut (Mon gars sur de Paris à Los Angeles en passant par Tadoussac), Alexis Praysac (Sac), Jean-Mathieu Maro (JM pour les intimes), Julia Nieddu et tous mes amis de P7, merci aussi à Hynék Vignon (promis je retourne courir), merci à mes amis du lycée : Arthur Pedro, Gaspard Ducournau (Courno), Thibaut Sahatdjian (Thibal), Gullaume Cuzin (Zinzin), Pierre Duquesnoy et aussi Adrien Yakoub.

Évidemment, je te remercie du fond du coeur, ma douce Hannah, pour faire partie de ma vie depuis maintenant plus de trois ans, merci d'avoir été là et d'être là pour moi (surtout pendant deux mois de rédaction/confinement) et d'accompagner tous les moments de ma vie, ce qui les rend mille fois plus agréables. J'ai beaucoup de chance de partager ma vie avec une personne aussi belle, intelligente et drôle que toi.

Pour finir, je remercie ma famille. Mes tantes en France ainsi que ma grand-mère en Pologne, mais surtout mes parents, Jean-Luc et Dorothée, pour m'avoir appris tant de choses, d'avoir toujours éveillé ma curiosité, ce qui m'a conduit à faire de la physique, et aussi d'avoir été présents pendant ces années de doctorat malgré les milliers de kilomètres qui nous séparent (merci aussi aux colis de fromages assurément vitaux). Merci pour tout, vous êtes des parents formidables.

Table des matières

Sommaire	ii
Remerciements	iv
Introduction	1
1 Les semimétaux de Weyl et la polarisation de vallée optique	4
1.1 Théorie des semimétaux de Weyl	4
1.1.1 De l'équation de Dirac au hamiltonien de Weyl à basse énergie	4
1.1.2 Caractère topologique des semimétaux de Weyl	7
1.2 Matériaux découverts contenant des noeuds de Weyl	10
1.2.1 Matériaux brisant la symétrie de renversement du temps	10
1.2.2 Matériaux brisant la symétrie d'inversion spatiale	11
1.3 Aperçu sur les fonctions de réponse	13
1.3.1 Rappel sur la réponse linéaire : formalisme de Kubo	13
1.3.2 Relation entre les différentes fonctions de réponse utilisées	14
1.4 Polarisation de vallée	17
1.4.1 Découverte de la polarisation de vallée	17
1.4.2 Le cas d'école : polarisation de vallée dans les semiconducteurs bidimensionnels	19
2 Absorption optique dans un sémimetal de Weyl avec interaction coulombienne à longue portée	23
2.1 Hamiltonien avec interaction coulombienne et couplage électron-photon	24
2.1.1 Interaction électron-électron à longue portée	24
2.1.2 Couplage entre les électrons et un champ électrique externe	25
2.2 Formalisme pour l'absorption optique interbande	27
2.2.1 Équation du mouvement pour la polarisation interbande	27
2.2.2 Équation aux valeurs propres pour l'exciton "topologique"	34

2.2.3	Application aux semimétaux de Weyl brisant la symétrie anti-unitaire à basse énergie : termes non-linéaires dans la dispersion	39
2.3	Absorption optique interbande pour un modèle minimal avec symétrie par renversement du temps	47
2.3.1	Spectre optique pour un noeud de Weyl unique avec dispersion linéaire	47
2.3.2	Comparaison des spectres optiques pour les différents noeuds	50
2.3.3	Dépendance du cutoff ultraviolet	52
2.4	Polarisation de vallée optique	54
2.4.1	Origine de la polarisation de vallée en présence d'interaction coulombienne	54
2.4.2	Configurations pour la polarisation de vallée	58
2.5	Résumé du chapitre	60
3	Absorption optique dans un semimétal de Weyl avec interaction coulombienne sous fort champ magnétique	63
3.1	Hamiltonien sous fort champ magnétique	64
3.1.1	Electrons libres et structure de bandes : niveaux de Landau	64
3.1.2	Conductivité optique en fort champ magnétique et avec interaction coulombienne	68
3.2	Conductivité optique interbande pour un semimétal de Weyl avec une inclinaison des cônes parallèle au champ	72
3.2.1	Noeud de Weyl isolé	72
3.2.2	Effet de l'inclinaison des cônes	74
3.2.3	Effet du champ magnétique et du potentiel chimique	75
3.2.4	Effet de la constante diélectrique	77
3.3	Polarisation de vallée complète sous fort champ magnétique	78
3.3.1	Détection optique de la polarisation de vallée complète	79
3.3.2	Configurations de la polarisation de vallée non chirale et chirale	82
3.3.3	Application aux matériaux possédant des noeuds de Weyl à basse énergie	84
3.4	Résumé du chapitre	88
4	Théorie dérive-diffusion des semimétaux de Weyl sous fort champ magnétique	90
4.1	Motivation	90
4.1.1	Détection électrique de la polarisation de vallée non chirale	91
4.1.2	Modélisation des effets topologiques dans les dispositifs à base des matériaux topologiques	92

4.2	Résumé des équations de Van Roosbroeck dans un semiconducteur unidimensionnel "usuel"	94
4.2.1	Équation pour le courant	94
4.2.2	Équation de Poisson	96
4.2.3	Équations de continuité	97
4.3	Dérivation des équations de van Roosbroeck pour un semimétal de Weyl sous fort champ magnétique	98
4.3.1	Champ magnétique fort et troncature de l'espace de Hilbert	98
4.3.2	Équations de Van Roosbroeck pour un semimétal de Weyl	99
4.3.3	Équations différentielles pour les variables indépendantes	108
4.3.4	Discussion sur les conditions aux limites	110
4.4	Exemple de solution des équations de van Roosbroeck	111
4.4.1	Équations de van Roosbroeck pour les niveaux chiraux	111
4.4.2	Solution analytique du système d'équations couplées pour des noeuds non inclinés	113
4.4.3	Solution numérique du système d'équations couplées comme référence	115
	Conclusion	119
	A Calcul analytique des fonctions d'ondes et des énergie propre pour un noeud de Weyl avec des interactions électron-électron de type contact	123
	B Conductivité optique sous fort champ magnétique dans l'approximation GRPA	132
	B.1 Retour sur l'approximation GRPA	133
	B.2 Application pour notre base d'intérêt	136
	C Niveaux de Landau et conductivité optique pour le cas d'une dispersion avec des termes non linéaires	145
	Bibliographie	147

Liste des tableaux

2.1	Tableau représentant les hamiltoniens à basse énergie dans le cas d'une dispersion avec des termes non linéaires pour chacun des noeuds de Weyl dans un semimétal de Weyl préservant la symétrie de renversement du temps . .	41
2.2	Tableau représentant les hamiltoniens à basse énergie dans le cas d'une dispersion avec des termes non linéaires pour chacun des noeuds de Weyl dans un semimétal de Weyl préservant la symétrie d'inversion spatiale	41
2.3	Tableau représentant les hamiltoniens à basse énergie de chaque noeud dans le cas de cônes inclinés pour un semimétal de Weyl avec symétrie par renversement du temps	56
2.4	Tableau représentant les configurations de la direction de propagation de la lumière conduisant à différents types de polarisations de vallée.	61
3.1	Différence des gaps optiques pour les différents noeuds selon la configuration du champ magnétique.	83
3.2	Différentes configurations pour obtenir une polarisations de vallée complète.	84

Table des figures

1.1	Dispersion autour de noeuds de Weyl	7
1.2	Schéma de modèle minimal de semimétal de Weyl brisant la symétrie d'inversion	12
1.3	Représentation des électrons activés par la polarisation de vallée dans le bismuth et le diamant	19
1.4	Cellule unité et bandes pour une monocouche et une bicouche de MoS ₂	20
2.1	Représentation schématique de la connexion de Berry jointe autour d'un noeud de Weyl	38
2.2	Schémas d'orbitales d'excitons dans l'espace réciproque pour la surface d'un isolant topologique 3D et un semimétal de Weyl 3D	46
2.3	Absorption optique pour un seul noeud de Weyl avec une dispersion parfaitement linéaire.	49
2.4	Absorption optique pour une dispersion avec des termes non linéaires à basse énergie pour $\tau = 1$ et 2.	51
2.5	Absorption optique pour une dispersion avec des termes non linéaires à basse énergie pour $\tau = 1$ et 3.	52
2.6	Absorption optique pour différentes valeurs du cutoff Λ	53
2.7	Schéma de l'absorption optique à basse énergie pour un semimétal du Weyl brisant la symétrie d'inversion spatiale.	54
2.8	Schéma de l'absorption optique à basse énergie pour un semimétal du Weyl brisant la symétrie de renversement du temps.	55
2.9	Dispersion électronique selon k_z pour les différents noeuds inclinés selon \mathbf{z}	57
2.10	Absorption optique pour les différents noeuds de Weyl dans le cas de cônes de Weyl inclinés.	58
2.11	Absorption optique résolue en noeud dans le cas où la lumière se propage ni parallèlement, ni perpendiculairement à un axe de symétrie.	60

3.1	Niveaux de Landau pour un modèle jouet de semimétal de Weyl avec le champ magnétique orienté parallèlement et perpendiculaire à l'inclinaison des cônes.	68
3.2	Conductivité optique résolue en noeud sous fort champ magnétique avec une inclinaison parallèle au champ.	73
3.3	Conductivité optique totale à basse énergie pour différentes amplitudes d'inclinaison du cône parallèle à la direction du champ magnétique.	74
3.4	Variation du potentiel chimique en fonction du champ magnétique.	75
3.5	Conductivité optique totale à basse énergie pour différentes valeurs de champ magnétique.	76
3.6	Conductivité optique totale à basse énergie pour différentes valeurs de constante diélectrique.	77
3.7	Polarisation de vallée complète dans un semimétal de Weyl brisant la symétrie d'inversion spatiale pour différentes amplitude d'inclinaison et de champ magnétique.	80
3.8	Conductivité optique résolue en noeud pour une configuration permettant la polarisation de vallée chirale.	85
3.9	Représentation schématique de la polarisation de vallée pour les noeuds W2 de TaAs.	86
3.10	Valeur estimée de la plage de fréquence de la polarisation de vallée en fonction du champ magnétique pour TaAs et TaP.	87
4.1	Potentiel électrostatique, quasi-niveaux de Fermi pour le sous-système des niveaux de Landau chiraux.	118
A.1	Fonctions d'onde pour les paires électrons-trous topologiques.	129
C.1	Dépendance des termes non linéaires dans la dispersion électronique pour la conductivité optique totale en champ magnétique à basse énergie.	146

Introduction

L'étude des propriétés topologiques de la matière est un domaine majeur de la physique de la matière condensée depuis maintenant plusieurs décennies. On peut donner une date approximative de cette naissance vers 1983 lorsque Berry publie son article sur sa phase éponyme [1], bien qu'existaient les travaux pionniers de Karplus et Luttinger [2] ainsi que ceux d'Adams et Blount [3] sur la manière dont les électrons se déplacent dans un potentiel périodique, donnant naissance à la "vitesse anormale". Sans entrer dans des considérations mathématiques, comment peut-on définir la topologie en physique ? Une manière simple d'approcher ce problème est de dire que les propriétés topologiques sont invariantes sous des perturbations faibles du système. L'exemple le plus simple représente le genre d'une surface fermée, c'est à dire le nombre de trous que possède la surface. Pour une sphère, le genre sera zéro, pour un tore, un, etc. Une perturbation faible représente n'importe quelle perturbation qui ne modifie pas ce genre. L'exemple le plus célèbre de la topologie en matière condensée est sans doute l'effet Hall quantique entier. La découverte de cet effet par von Klitzing en 1980 [4], suivie par son explication dans un papier célèbre par Thouless, Kohomoto, Nightingale et den Nijs en 1982 puis raffiné en 1985 en utilisant le formalisme introduit par Berry [5,6], ont définitivement posé les bases de ce nouveau paradigme. On trouvait une conductivité de Hall dépendant d'un entier, donné par le nombre de Chern, conséquence de la courbure de Berry, et de constantes fondamentales de la physique. Cela a conduit à un véritable âge d'or de la physique topologique, de l'effet Hall quantique fractionnaire [7] en passant par l'effet Hall quantique de spin [8] et l'effet Hall quantique anormal [9], c'est à dire sans champ magnétique externe, jusqu'à plus récemment à l'effet Hall quantique de vallée [10].

Qu'en est il alors des matériaux topologiques ? Comme pour les propriétés topologiques décrites en utilisant le "vocabulaire" de Berry, on peut indexer chaque bande par un nombre de Chern, un entier, qui peut être nul, pour le cas d'une bande triviale ou non nul, pour une bande dite non triviale. Pour un isolant topologique qui brise la symétrie de renversement du temps, on dira que le nombre de Chern des bandes occupées doit être non nul. Si

cette symétrie est préservée, alors une autre classification doit être utilisée, basée sur les travaux de Kane et Mele [11]. Toute l'étude des ces matériaux a été développée par des travaux théoriques titanesques basés sur des symétries pour essayer de découvrir toutes les classes d'isolants topologiques. Ce travail, similaire à celui de Mendeleïv, porte le nom de tableau périodique des invariants topologiques qui a débuté par les travaux d'Altland et Zirnbauer [12], suivi par des extensions par Schnyder et al. [13] ainsi que Bradlyn et al. [14].

La découverte tardive des semimétaux de Weyl est due au fait qu'ils ont échappé à cette minutieuse recherche de nouvelles classes de matériaux topologiques. Ces derniers possèdent des noeuds de Weyl à basse énergie, c'est-à-dire proche du niveau de Fermi, qui sont des croisements de bandes linéaires, obéissant donc à une solution particulière de l'équation de Dirac : l'équation de Weyl [15, 16]. Ces noeuds ou cônes de Weyl résultent d'un croisement accidentel de bandes non dégénérées en trois dimensions, phénomène exploré pour la première fois par Herring [17]. Cette dernière implique qu'un noeud de Weyl peut se situer à une position complètement arbitraire de la zone de Brillouin. Cela a rendu les semimétaux de Weyl difficiles à débusquer et il a fallu coupler tout le savoir accumulé dans l'étude des structures de bandes, la DFT (*Density functional theory* en anglais), à la nature topologique de ces noeuds de Weyl. Chaque noeud portant un nombre quantique appelé chiralité, et se comportant comme des sources ou drains de la courbure de Berry dans l'espace réciproque. Ces connaissances combinées ont permis de les mettre en lumière dans le milieu des années 2010 [18].

De nombreuses découvertes expérimentales ont ensuite appuyé cette prédiction théorique, confirmant la nature topologique de ces matériaux, dont le plus éminent représentant est sans doute TaAs [18–23]. L'effet le plus célèbre reste l'anomalie chirale, dont une des conséquences probables réside dans la magnéto-résistance négative [23, 24]. La présence d'arcs de Fermi, conséquence de la correspondance bord-volume, états de bord uniques aux semimétaux de Weyl, a aussi été rapportée [20, 25]. Plus récemment des mesures optiques en fort champ magnétique ont confirmé cette tendance en sondant les niveaux de Landau dans les semimétaux de Weyl, montrant leur dispersion unique en champ magnétique. La nature topologique de ces derniers se manifeste alors via l'existence d'un niveau de Landau chiral à basse énergie [26, 27].

Le travail de cette thèse se place à la croisée des différentes approches pour étudier la nature topologique des semimétaux de Weyl, en se concentrant sur le lien entre topologie, interactions de Coulomb, champ magnétique et réponse optique. L'étude de la relation entre propriétés topologiques et interactions de Coulomb a déjà donné lieu à plusieurs travaux dans les systèmes bidimensionnels, que ce soit pour des surfaces d'isolants topologiques tridimensionnels [28] ou bien des isolants topologiques bidimensionnels inspirés du modèle

du graphène [29], donnant lieu à des excitons chiraux, nommés ainsi parce que leur énergie de liaison dépend du signe du moment angulaire de la paire électron-trou [30,31]. Plusieurs questions essentielles parcourent cette thèse. Comment est ce que les interactions entre électrons et la topologie sont reliées dans les semimétaux de Weyl ? Quelle est l'influence d'un champ magnétique externe, donnant lieu à des niveaux de Landau, dont le niveau chiral, sur cette relation ? Avec tout ce que l'on appris, les propriétés topologiques des semimétaux de Weyl peuvent elles être utilisées pour des dispositifs électroniques ?

Le chapitre 1 se veut être une introduction aux semimétaux de Weyl, en présentant leurs propriétés topologiques, les différents modèles possibles ainsi qu'une liste non exhaustive de matériaux existants. Ensuite, on fera un bref rappel sur le formalisme de réponse linéaire, puis sur les relations entre les différentes fonctions de réponse qui nous intéressent. Enfin, on fera une brève revue de littérature sur la polarisation de vallée, ainsi qu'une explication de ce phénomène dans des systèmes connus. Le chapitre 2 présente notre modèle favori de semimétal de Weyl à basse énergie en incluant des interactions de Coulomb et le couplage avec le champ électrique externe de la lumière. On présentera ici le formalisme pour calculer l'absorption optique appliqué au cas particulier d'un noeud de Weyl avec des termes non linéaires dans sa dispersion. On calculera cette absorption optique pour les deux modèles jouet principaux des semimétaux de Weyl, brisant soit la symétrie d'inversion spatiale, soit de renversement du temps. Le chapitre 3 constitue une application du cas précédent en incluant un champ magnétique externe donnant lieu à des niveaux de Landau. Nous mettrons de côté cette fois ci les termes non linéaires pour laisser place à des noeuds de Weyl inclinés (*tilted Weyl cones*). Ce dernier est plus facile à manipuler théoriquement et donne lieu aux mêmes conséquences physiques. Enfin, le chapitre 4 présente une théorie du transport dans le formalisme de dérive-diffusion pour les semimétaux de Weyl en fort champ magnétique. On rappellera ici les équations fondamentales de ce modèle, ainsi que ses limites dans le cadre des semiconducteurs usuels, pour ensuite écrire ces équations dans notre cas d'intérêt.

Chapitre 1

Les semimétaux de Weyl et la polarisation de vallée optique

Dans ce chapitre, nous présenterons les bases théoriques relatives aux semimétaux de Weyl, en partant de l'équation de Dirac pour arriver au hamiltonien à basse énergie décrivant le comportement des électrons dans ces matériaux. Plusieurs modèles existent pour décrire ces matériaux, qui consistent à briser soit la symétrie de renversement du temps, soit la symétrie d'inversion spatiale. Par la suite, nous effectuerons un bref rappel sur la théorie de la réponse linéaire et les différentes fonctions de réponses d'intérêt dans cette thèse pour l'étude optique des semimétaux de Weyl. Pour finir nous expliciterons en quoi consiste la polarisation de vallée et son importance dans plusieurs systèmes déjà étudiés.

1.1 Théorie des semimétaux de Weyl

1.1.1 De l'équation de Dirac au hamiltonien de Weyl à basse énergie

La réussite de l'extraction d'une monocouche de graphène par exfoliation en 2004 [32] a étendu considérablement un champ de recherche de la matière condensée : l'étude des matériaux de Dirac. Ces matériaux, dont le champion se trouve être le graphène, ont la particularité, contrairement aux métaux et semiconducteurs "usuels", de posséder des électrons dispersant linéairement en moment à basse énergie. La dénomination de matériaux

de Dirac tient donc au fait que l'on peut décrire ces électrons à basse énergie avec la même équation que Paul Dirac a écrit en 1928 [15].

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1.1)$$

où les matrices γ sont des matrices 4×4 appelées matrices de Dirac, $\partial_\mu = (\partial_t, -v\nabla)$ et m la masse des fermions de Dirac en question, qui a la dimension d'une énergie. Cette formulation covariante est propre à la physique des hautes énergies. Nous allons expliciter les matrices de Dirac dans la représentation dite de Weyl et dans l'espace de la quantité de mouvement. On trouve alors une forme qui nous est plus familière

$$(\tau_0 \otimes \sigma_0 (-i\hbar \partial_t) + \tau_z \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot v\mathbf{p} + \tau_x \otimes \sigma_0 m) \psi(\mathbf{p}, t) = 0, \quad (1.2)$$

où v est une vitesse, $\hbar = h/(2\pi)$ la constante de Planck réduite et $\boldsymbol{\tau}$ ainsi que $\boldsymbol{\sigma}$ sont des matrices de Pauli qui agissent dans des espaces de Hilbert différents ; l'indice 0 représente la matrice identité 2×2 . En physique de la matière condensée ces espaces correspondent par exemple au sous espace du spin et des orbitales électroniques, tandis que l'équation de Dirac "originelle" prend en compte le sous espace du spin et du degré de liberté particule/anti-particule.

On peut alors écrire le hamiltonien aisément à partir de l'équation (1.2)

$$H_{\text{Dirac}} = \tau_z \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot v\mathbf{p} + \tau_x \otimes \sigma_0 m, \quad (1.3)$$

et obtenir les énergies propres en prenant le carré de ce dernier

$$E_\pm = \pm \sqrt{\hbar^2 v^2 \mathbf{k}^2 + m^2}, \quad (1.4)$$

avec $\hbar \mathbf{k}$ le nombre quantique associé au moment \mathbf{p} et le signe \pm fait référence à la bande de valence ($-$) et conduction ($+$) qui sont dégénérées deux fois chacune. Cette dispersion a souvent le surnom de *cônes de Dirac* en raison du caractère conique de la dispersion ou bien de *noeuds de Dirac* lorsque $m = 0$ puisque les deux bandes se touchent à $\mathbf{k} = 0$.

Le terme semimétal vient alors du fait que le niveau de Fermi est soit très proche, soit localisé au croisement des bandes de valence et de conduction pour le cas où m est nulle. Cette masse en physique des hautes énergies est appelée bande interdite ou *gap* dans le vocabulaire de la matière condensée, qui dénote l'espacement entre les deux bandes égal à $2|m|$ où aucun état n'est disponible. Cette dispersion est donc une caractéristique des matériaux de Dirac.

L'équation de Weyl à proprement parler est une solution de l'équation de Dirac pour des fermions de masse nulle [16]. Dans ce cas, on écrit le hamiltonien de Weyl

$$H_{\text{Weyl}} = \hbar v \tau_z \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}. \quad (1.5)$$

Nous obtenons un hamiltonien diagonal par blocs 2×2 qui dépend de la valeur propre de τ_z que l'on peut écrire

$$h_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \hbar v \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (1.6)$$

On obtient alors un hamiltonien correspondant à deux degrés de liberté (pour nous, cela correspondra à des bandes) et dont la valeur propre de τ_z égale à ± 1 correspond à la *chiralité* du fermion ou *noeud* de Weyl que l'on notera dorénavant $\chi = \pm 1$. À la différence du semimétal de Dirac, dont les bandes sont dégénérées deux fois, en raison de la présence conjointe de la symétrie de renversement du temps et d'inversion spatiale, les bandes d'un semimétal de Weyl ne sont pas dégénérées. Cet hamiltonien décrit donc des électrons à basse énergie, c'est-à-dire pour des énergies proche du niveau de Fermi, dans un semimétal de Weyl, comme montré sur la figure 1.1.

En physique de la matière condensée, la distinction entre semimétal de Weyl et de Dirac s'explique par la brisure de la symétrie de renversement du temps ou de la symétrie d'inversion spatiale, en plus d'un couplage spin-orbite, ce qui permet la levée de la dégénérescence des bandes et donne lieu à un semimétal de Weyl. Cela conduit alors à la séparation dans la zone de Brillouin des deux noeuds de Weyl indexés par ± 1 , comme nous le verrons plus tard. De plus, il est commun d'affirmer qu'un fermion de Weyl correspond à un "demi fermion" de Dirac, nous verrons que cela a une incidence sur la manière de réaliser des modèles jouets de semimétaux de Weyl.

On peut inclure un couplage spin-orbite dans un semimétal de Dirac tel que le graphène [33], bien que ce dernier soit faible étant donné que la force du couplage spin-orbite est proportionnel à Z^4 , où Z représente le nombre de protons des ions constituant le réseau cristallin. Dans le graphène, un tel couplage a pour conséquence l'ouverture d'un très petit gap, en raison du faible nombre de protons des atomes de carbone, ce qui n'est pas le cas dans un semimétal de Weyl. De plus, aucune (faible) perturbation ne peut ouvrir de gap dans un semimétal de Weyl, ce qui fait dire que les noeuds de Weyl sont robustes aux perturbations externes. Cela est dû à un triple effet de dégénérescence accidentelle, du fait que ce sont des matériaux tridimensionnels, et de propriétés topologiques.

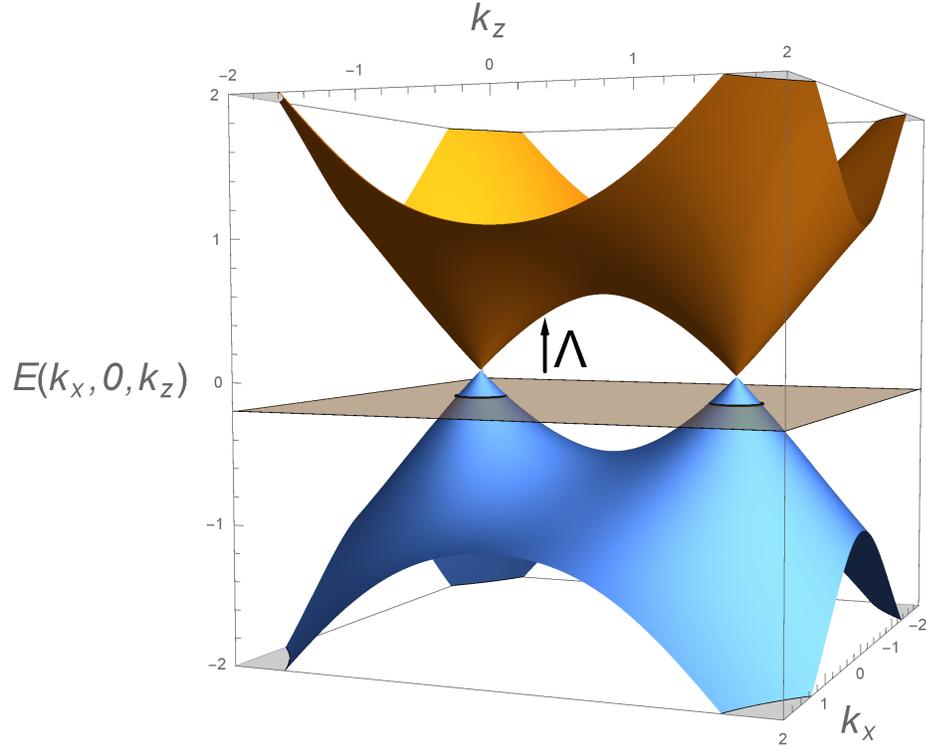


FIGURE 1.1 Dispersion pour un modèle de semimétal de Weyl sur réseau choisi pour illustrer le domaine de validité du modèle linéaire à basse énergie des noeuds de Weyl. La partie bleue représente la bande de valence et celle orange la bande de conduction. Le plan gris qui croise la bande de valence représente le niveau de Fermi et Λ le *cutoff* à basse énergie mesuré à partir du point de neutralité.

1.1.2 Caractère topologique des semimétaux de Weyl

Les semimétaux de Weyl sont classés dans les matériaux topologiques et comme pour l'effet Hall quantique [6], déterminer la nature topologique des solides se fait à l'aide de quantités introduites par Berry [1], notamment par l'intégrale sur une surface fermée de la *courbure* de Berry, appelé nombre de Chern, qui s'exprime pour un cristal par :

$$C_n = \frac{1}{2\pi} \int_S d\mathbf{S}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}), \quad (1.7)$$

$$\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \nabla \times \mathcal{A}_n(\mathbf{k}), \quad (1.8)$$

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle, \quad (1.9)$$

où C_n , $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$ et $\mathcal{A}_n(\mathbf{k})$ sont respectivement le nombre de Chern, la courbure et la connexion de Berry pour la bande n . De plus, $u_n(\mathbf{k})$ représente la partie périodique de la fonction de Bloch pour la bande n . Il est commun d'affirmer que la connexion et la courbures de Berry

sont les analogues du potentiel vecteur et du champ magnétique dans l'espace des vecteurs d'onde, et nous verrons que cette analogie n'est pas anodine pour les semimétaux de Weyl.

À basse énergie, l'hamiltonien de Weyl en matière condensée peut être obtenu par la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [34]. Au voisinage d'un noeud de Weyl dans la zone de Brillouin, l'hamiltonien a un terme dominant qui est linéaire en \mathbf{k} , et s'écrit, dans le cadre d'un modèle à deux bandes, $h_{\pm}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$. On peut alors trouver les vecteurs propres du hamiltonien de Weyl 2×2 défini à l'équation (1.6) (où $\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k}) = \chi \hbar v_F \mathbf{k}$)

$$|\mathbf{k}c\tau\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2} \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}\tau}} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2} \end{pmatrix}, \quad |\mathbf{k}v\tau\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2} \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}\tau}} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2} \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

où c et v représentent respectivement les bandes de conduction et valence et l'indice τ indique que l'on se trouve autour du noeud τ qui peut être de chiralité $\chi = \pm 1$. On a de plus $\cos \theta_{\mathbf{k}\tau} = d_{z,\tau}(\mathbf{k})/|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})|$ et $\tan \varphi_{\mathbf{k}\tau} = d_{y,\tau}(\mathbf{k})/d_{x,\tau}(\mathbf{k})$.

Cela nous permet de déterminer courbure de Berry d'un noeud de Weyl décrit par l'équation (1.6) :

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = \frac{\chi}{2} \frac{\hat{\mathbf{k}}}{\mathbf{k}^2}, \quad (1.11)$$

où la connexion de Berry a été calculée pour la bande de valence et $\hat{\mathbf{k}}$ est le vecteur unitaire de \mathbf{k} . L'équation (1.11) nous dit que le signe de la courbure de Berry pour un noeud de chiralité positive est alignée avec $\hat{\mathbf{k}}$, tandis que pour un noeud de chiralité négative, cette dernière est anti-alignée avec $\hat{\mathbf{k}}$. Nous avons énoncé auparavant que la courbure de Berry pouvait être vue comme un analogue du champ magnétique mais dans l'espace réciproque; on peut alors affirmer qu'un noeud de Weyl agit comme un *monopôle magnétique* dans cet espace compte tenu de l'expression de la courbure de Berry, qui est équivalente au champ créé par un monopole. Les noeuds de Weyl de chiralité positive agissent comme des sources de la courbure de Berry et les noeuds de Weyl de chiralité négative comme des drains.

Une autre manière de comprendre ce résultat est de prendre l'intégrale de surface de la courbure de Berry pour une surface sphérique englobant un noeud de Weyl isolé :

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_S d\mathbf{S}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_S d\mathbf{S}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\chi \hat{\mathbf{k}}}{2\mathbf{k}^2} = \chi, \quad (1.12)$$

ce qui nous dit que le nombre de Chern d'un noeud de Weyl est non nul et donc que la charge topologique du noeud de Weyl est directement associée à sa chiralité. Ces résultats nous aident à comprendre le fait que deux fermions de Weyl résultent en un fermion de

Dirac, et donc que les fermions de Weyl apparaissent toujours par paires de noeuds de chiralité opposées. En effet, un noeud de Weyl unique donnerait un flux net sortant de la zone de Brillouin, ce qui est en contradiction avec la périodicité de cette dernière. Pour contrebalancer ce paradoxe, les noeuds de Weyl dans la zone de Brillouin doivent toujours apparaître par paires de chiralités opposées afin que la chiralité totale soit zéro pour que le flux de la courbure de Berry en entrée et en sortie de la zone de Brillouin se moyenne à zéro. Cette propriété est connue sous le nom du théorème *no-go* de Nielsen-Ninomiya [35,36]. Ce théorème est d'importance car il nous dit que n'importe quel modèle jouet visant à décrire un semimétal de Weyl à basse énergie doit contenir au moins une paire de noeuds de Weyl de chiralité opposées.

Un argument supplémentaire nous permet d'affirmer que ces noeuds sont robustes aux perturbations extérieures, en effet, la nature topologique de ces derniers nous informe que puisqu'ils sont toujours présents par paires de noeuds de chiralité opposées, il faut les faire se rencontrer *au même point* de la zone de Brillouin afin de pouvoir envisager ouvrir un gap (de manière similaire à l'annihilation d'une particule avec son anti-particule).

Nous avons vu avec l'équation 1.6 qu'un noeud de Weyl est décrit par un croisement de deux bandes non dégénérées. Pour cette raison, n'importe quel hamiltonien représentant un système de deux bandes peut être écrit par

$$h(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k})\sigma_0 + d_x(\mathbf{k})\sigma_x + d_y(\mathbf{k})\sigma_y + d_z(\mathbf{k})\sigma_z, \quad (1.13)$$

où on rappelle que σ_0 est la matrice identité 2×2 . Ceci représente le hamiltonien le plus général possible puisque l'on peut écrire n'importe quelle matrice 2×2 à l'aide des matrices de Pauli. On sait que les deux bandes s'écrivent alors

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{d_x(\mathbf{k})^2 + d_y(\mathbf{k})^2 + d_z(\mathbf{k})^2}. \quad (1.14)$$

Afin d'avoir un croisement de bandes, il faut simultanément que $d_x(\mathbf{k}) = d_y(\mathbf{k}) = d_z(\mathbf{k}) = 0$, ce qui nécessite trois variables indépendantes. Il se trouve que cette condition est réalisée en trois dimensions étant donné que nos trois variables indépendantes représentent les trois composantes du vecteur d'onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$, contrairement au cas en deux dimensions où nous ne disposons que de deux variables indépendantes. La conclusion est la suivante : si on peut écrire un hamiltonien à basse énergie comme un système de deux bandes non dégénérées, alors on a une solution mathématique impliquant un croisement de ces bandes. Ce phénomène s'appelle une *dégénérescence accidentelle* [17,37], c'est-à-dire où le croisement de bandes (l'emplacement où il existe une dégénérescence entre la bande de conduction et de valence) n'est pas dû à une symétrie particulière du réseau cristallin, contrairement aux

cônes de Dirac du graphène.

Afin d'obtenir des noeuds de Weyl à basse énergie, il est nécessaire de pouvoir écrire un hamiltonien pour un modèle à deux bandes. Une manière d'obtenir un tel résultat, au moins théoriquement, est de "séparer" un noeud de Dirac en deux noeuds de Weyl distincts dans la zone de Brillouin. Pour qu'un tel processus soit possible, il nous faut briser au moins une des deux symétries suivantes : la symétrie d'inversion spatiale ou la symétrie par renversement du temps.

1.2 Matériaux découverts contenant des noeuds de Weyl

Nous allons utiliser comme point de départ le hamiltonien de Dirac pour une masse m nulle et décrire comment obtenir un semimétal de Weyl par la brisure d'une des symétries suivantes.

1.2.1 Matériaux brisant la symétrie de renversement du temps

Une manière d'obtenir un modèle de semimétal à partir du hamiltonien de Dirac est de briser la symétrie par renversement du temps. Dans ce cas il suffit de rajouter un terme Zeeman dans le hamiltonien à basse énergie

$$h_{\text{TRS}} = \Delta\sigma_z \otimes \tau_0, \quad (1.15)$$

que l'on peut définir dans la direction z du spin sans perte de généralité, τ_0 la matrice identité dans le sous-espace des matrices τ et Δ l'amplitude de la perturbation. Le hamiltonien total s'écrit alors

$$h(\mathbf{k}) = \hbar v \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tau_z + \Delta \sigma_z \tau_0. \quad (1.16)$$

Cet hamiltonien donne lieu à deux noeuds de Weyl situés à $\mathbf{k}_{\text{Weyl}} = (0, 0, \pm\Delta/(\hbar v))$. Pour un vecteur d'onde proche d'un noeud de Weyl $\mathbf{k} \sim \mathbf{k}_{\text{Weyl}} + \delta\mathbf{k}$ ¹, on peut alors écrire le hamiltonien de Weyl à basse énergie linéaire en moment avec un noeud de chiralité $\chi = +1$ pour $\mathbf{k}_{\text{Weyl}} = (0, 0, -\Delta/(\hbar v))$ et $\chi = -1$ pour $\mathbf{k}_{\text{Weyl}} = (0, 0, +\Delta/(\hbar v))$.

Ce modèle minimal donne donc lieu à deux noeuds de Weyl de chiralités opposées, qui est le plus petit nombre des noeuds que l'on peut avoir dans un semimétal. Ceci peut être

1. Il nous faut préciser que $\delta\mathbf{k}$ sera, dans les sections et chapitres suivants noté directement \mathbf{k} que l'on supposera par définition proche du noeud de Weyl.

compris également par la préservation de la symétrie d'inversion spatiale qui laisse le spin invariant mais change le signe du vecteur d'onde (total et non autour d'un noeud de Weyl) $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, donc la symétrie d'inversion change le signe de $\delta\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, et par conséquent change le signe de la chiralité.

Un tel modèle de semimétal est par exemple réalisé par une hétérostructure d'isolant topologique et d'isolant trivial dopé aux impuretés magnétiques [38]. Les noeuds de Weyl peuvent être à n'importe quel endroit de la zone de Brillouin étant donné que ces croisements ne sont pas dus à des symétries, ce qui explique qu'il existe de nombreuses prédictions numériques issues de calculs *ab initio* afin de trouver des matériaux possédant ces mêmes noeuds. On retient par exemple les pyrochlores magnétiques [39] ou des matériaux de la famille YbMnBi_2 [40].

1.2.2 Matériaux brisant la symétrie d'inversion spatiale

L'autre façon de réaliser un semimétal de Weyl est en brisant la symétrie d'inversion spatiale. Une manière analogue à la section précédente est d'introduire une perturbation, cette fois ci dans le sous espace des matrices de Pauli $\boldsymbol{\tau}$ (que l'on peut comprendre comme un sous espace agissant sur les orbitales électroniques)

$$h_{\text{IS}} = \Delta' \sigma_0 \otimes \tau_z, \quad (1.17)$$

avec σ_0 la matrice identité dans le sous-espace du spin et Δ' (pour différencier ce dernier de Δ) l'amplitude de la perturbation. Le hamiltonien de Dirac plus la perturbation s'écrit alors

$$h(\mathbf{k}) = \hbar v \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tau_z + \Delta' \sigma_0 \tau_z. \quad (1.18)$$

Un tel hamiltonien donne lieu à deux noeuds de Weyl au même point de la zone de Brillouin $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ mais séparés en énergie par $2\Delta'$. Cela donne lieu à un semimétal à ligne de noeuds (*nodal line semimetal* en anglais) qui correspond à une phase semimétallique où la bande de conduction et de valence se touchent en une ligne fermée (par exemple un cercle) au voisinage de l'énergie de Fermi [41]. Dans ces conditions, nous n'avons pas de noeuds de Weyl à basse énergie. Il est alors nécessaire d'avoir un couplage spin-orbite qui ne brise pas la symétrie par renversement du temps dans notre modèle. Cela a pour conséquence d'ouvrir un gap à plusieurs endroits de la ligne de noeuds et donner lieu à un semimétal de Weyl où seuls certains croisements de bandes subsistent. Un tel processus a été vérifié par des calculs *ab initio* [18]. Une autre conséquence est que $\boldsymbol{\sigma}$ n'est plus un "vrai" spin en raison du couplage spin-orbite, mais une superposition linéaire des différentes espèces de spin, ce

qui donnera lieu à une discussion à la section 2.2.3.

Il nous faut aussi préciser que le modèle minimal pour un semimétal de Weyl qui brise la symétrie d'inversion inclut quatre noeuds et non plus deux, comme indiqué sur la figure 1.2. En effet, la symétrie par renversement du temps est toujours préservée dans un tel système, et si l'on applique cette dernière à un noeud de Weyl on obtient un autre noeud avec la même chiralité. Cette symétrie change le signe de σ ainsi que de \mathbf{k} , donc le terme $\mathbf{k} \cdot \sigma$ est invariant par symétrie de renversement du temps. Un moyen pour obtenir un autre noeud de chiralité opposée dans un tel modèle est d'inclure des symétries miroir qui vont changer la chiralité des noeuds reliés par symétrie par renversement du temps afin d'avoir un modèle physique, c'est-à-dire avec une chiralité totale nulle². La symétrie miroir change le signe du vecteur d'onde si ce dernier n'est pas dans le plan du miroir ainsi que le signe de σ pour les composantes dans le plan du miroir, et donc change le signe de $\mathbf{k} \cdot \sigma$.

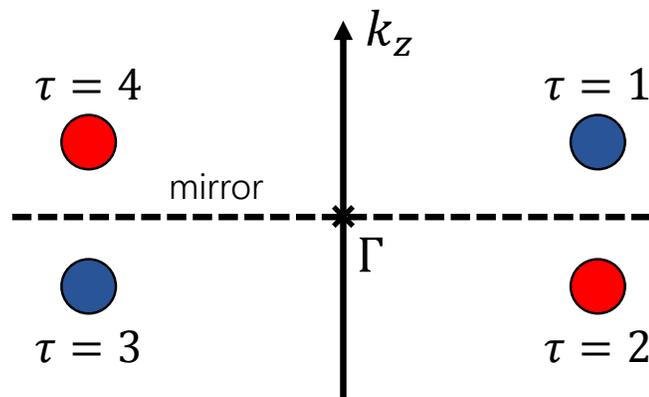


FIGURE 1.2 Schéma d'un modèle minimal à basse énergie d'un semimétal de Weyl brisant la symétrie d'inversion spatiale mais conservant la symétrie par renversement du temps. Le point Γ indique le point invariant par symétrie par renversement du temps, les cercles bleus représentent les noeuds de chiralité $\chi = +1$ et les rouges les noeuds de chiralité $\chi = -1$, le segment en tirets représente un plan de miroir.

Parmi les semimétaux de Weyl brisant la symétrie d'inversion spatiale (que l'on appelle matériaux non centrosymétriques), on trouve la famille de matériaux à base de métaux de transition monophosphurés comme TaAs, TaP, NbAs et NbP qui ont été prédits théoriquement [18, 19, 42] puis vérifiés expérimentalement [20, 43, 44]. C'est à ces derniers que nous appliquerons, à travers notre modèle jouet, notre théorie de l'absorption optique interbande en incluant des interactions de Coulomb à longue portée.

2. Il n'est toutefois pas nécessaire d'inclure ces symétries miroir pour obtenir des noeuds de chiralité opposées mais elles sont souvent présentes dans les matériaux réels.

1.3 Aperçu sur les fonctions de réponse

La théorie de la réponse linéaire, comme son nom l'indique a pour but de répondre à la question suivante : on suppose une perturbation faible B (qui est de manière générale décrite par un opérateur), quel est le changement de la quantité $\langle A \rangle$ au premier ordre en puissance de B ?

1.3.1 Rappel sur la réponse linéaire : formalisme de Kubo

La brique de base pour décrire la réponse linéaire en mécanique quantique consiste à utiliser un hamiltonien H_0 indépendant du temps pour le système d'étude, puis de rajouter une perturbation $H_{\text{pert.}}(t)$ dépendante du temps. Cette dernière est choisie comme nulle avant un certain temps t_0 . On peut alors écrire le hamiltonien total comme

$$H(t) = H_0 + H_{\text{pert.}}(t)\Theta(t - t_0), \quad (1.19)$$

où $\Theta(x)$ est la fonction de Heaviside (ou fonction marche). Pour $t < t_0$, le système est donc à l'équilibre, et notre quantité d'intérêt A est égale à sa valeur à l'équilibre $\langle A \rangle_{\text{eq.}} = A_0$. Cependant, pour $t > t_0$, une fois que la perturbation est présente, le résultat précédent n'est plus valide, parce que la valeur moyenne $\langle A \rangle$ est modifiée par $H_{\text{pert.}}$ et on obtient $\langle A \rangle_{\text{hors eq.}} = \langle A \rangle_{\text{eq.}} + \delta \langle A \rangle_{\text{hors eq.}}$ où $\delta \langle A \rangle_{\text{hors eq.}}$ dépend linéairement en $H_{\text{pert.}}(t)$ dans l'hypothèse de la réponse linéaire.

La formule de Kubo est alors très utile car elle nous permet de relier la valeur moyenne de A dans le cas hors équilibre à la valeur moyenne d'un commutateur à l'équilibre (en général simple à calculer pour un hamiltonien sans terme quartique en opérateurs) [45], qui s'écrit

$$\delta \langle A(t) \rangle_{\text{hors eq.}} \equiv \langle A(t) \rangle_{\text{hors eq.}} - \langle A \rangle_{\text{eq.}} = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{AH_{\text{pert.}}}^R(t, t') e^{-\eta(t-t')} \quad (1.20)$$

où η est un paramètre infinitésimal positif ayant mathématiquement pour but de s'assurer de la convergence de l'intégrale, physiquement il signifie que la perturbation doit être activée de manière adiabatique, et $C_{AH_{\text{pert.}}}^R(t, t')$ est la fonction de corrélation retardée et s'écrit

$$C_{AH_{\text{pert.}}}^R(t, t') = -i\Theta(t - t') \langle [A(t), H_{\text{pert.}}(t')] \rangle_{\text{eq.}} \quad (1.21)$$

Ce résultat remarquable que nous devons à Kubo [46] relie la variation de A en présence de la perturbation, qui est par définition une quantité hors-équilibre, à une valeur moyenne d'un commutateur évaluée sur le hamiltonien H_0 à l'équilibre. Cette relation est valide

uniquement pour la réponse linéaire naturellement.

Dans la base du temps, la quantité qui nous intéresse $\delta\langle A(t)\rangle$ est un produit de convolution ; une base plus commode est la base en fréquence pour la fonction de corrélation. Cette dernière est invariante par translation dans le temps étant donné qu'elle ne dépend que de la différence $t - t'$. Il nous suffit alors de calculer la transformée de Fourier du hamiltonien pour obtenir, après avoir fixé $t_0 = -\infty$,

$$\delta\langle A(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} e^{-i(\omega+i\eta)(t'-t)} C_{AH_{\text{pert.},\omega}}^R(t-t'), \quad (1.22)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} C_{AH_{\text{pert.},\omega}}^R(\omega), \quad (1.23)$$

$$\delta\langle A(\omega)\rangle = C_{AH_{\text{pert.},\omega}}^R(\omega). \quad (1.24)$$

Cette relation nous relie directement, en fréquence, la partie hors équilibre de la quantité A avec la fonction de corrélation retardée correspondante.

Parmi les grandeurs avec lesquelles nous sommes familiers, la quantité A peut correspondre au courant électrique \mathbf{J} , l'aimantation \mathbf{M} ou bien la polarisation \mathbf{P} . La perturbation $H_{\text{pert.}}(t)$ représente alors le couplage entre une perturbation externe, comme un champ électrique \mathbf{E} ou magnétique \mathbf{B} , et des degrés de liberté du système, respectivement le dipôle électrique ou le spin des électrons. La fonction de réponse correspond au coefficient de proportionnalité (qui est en général un tenseur) entre la quantité $\delta\langle A(\omega)\rangle$ et la perturbation externe.

1.3.2 Relation entre les différentes fonctions de réponse utilisées

Dans cette thèse nous nous intéresserons en priorité à deux types de fonctions de réponses qui sont proches l'une de l'autre : la conductivité optique, notée $\sigma_{ij}(\omega)$ et l'absorption optique notée $\alpha_{ij}(\omega)$ où $i, j \in \{x, y, z\}$ sont les composantes du tenseur correspondant. Nous étudierons tout d'abord l'absorption optique, puis la conductivité optique.

En utilisant la théorie de la réponse linéaire nous pouvons trouver des relations entre la polarisation électrique d'un matériau notée \mathbf{P} et le champ électrique total, ainsi qu'entre le champ de déplacement électrique, noté \mathbf{D} , et le champ électrique total :

$$\mathbf{P}(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_0 \chi(\mathbf{q}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega), \quad (1.25)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_0 \epsilon(\mathbf{q}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega), \quad (1.26)$$

où χ est le tenseur de susceptibilité électrique, ϵ le tenseur diélectrique, ϵ_0 la permittivité du vide et \mathbf{q} et ω respectivement le vecteur d'onde et la fréquence associés au champ électrique externe. À l'aide de la relation entre ces deux quantités $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$, on trouve

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = \mathbf{1} + \chi(\mathbf{q}, \omega). \quad (1.27)$$

Cependant, le cas de l'absorption optique est plus subtil car elle est définie par la diminution d'intensité d'une onde lumineuse lorsque cette dernière traverse un matériau :

$$I(\mathbf{r}_2, \omega) = I(\mathbf{r}_1, \omega) \exp(-\alpha(\omega)|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|), \quad (1.28)$$

où $\alpha(\omega) = 4\pi n''(\omega)/\lambda$ est appelé le *coefficient d'absorption* ou bien simplement *l'absorption optique*, qui dépend de la fréquence ω avec $n''(\omega)$ la partie imaginaire de l'indice de réfraction (aussi appelé *coefficient d'extinction*) et λ la longueur d'onde de la lumière dans le vide. Cette relation est donnée en calculant l'atténuation de l'onde électromagnétique dans un solide en partant des équations de Maxwell [47]. Dans ce cas, il est plus facile de trouver une relation entre le coefficient d'absorption et la susceptibilité électrique. En effet on peut relier l'absorption optique à la susceptibilité électrique par la puissance dissipée de la lumière par unité de volume dans le matériau [34], ou en utilisant la relation entre fonction diélectrique et indice de réfraction $\epsilon(\omega) = n(\omega)^2$:

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega \chi''(\omega)}{n'(\omega)c}, \quad (1.29)$$

où χ'' représentent les valeurs propres de la partie imaginaire de la susceptibilité électrique, $n'(\omega)$ la partie réelle de l'indice de réfraction et c la vitesse de la lumière. Par exemple, pour une lumière circulairement polarisée droite ou gauche, on a

$$\alpha_{\text{LCP (RCP)}}(\omega) = \frac{\omega \chi''_{\text{LCP (RCP)}}(\omega)}{n'(\omega)c}, \quad (1.30)$$

où LCP et RCP représentent respectivement une lumière polarisée circulairement gauche et droite. De manière générale, les éléments du tenseur de la susceptibilité électrique dépendent de la structure cristalline étudiée [34, 48]. On a également négligé la dépendance de la polarisation de la lumière pour l'indice de réfraction.

Nous nous intéresserons ici exclusivement à la partie interbande de cette absorption, impliquant des transitions optiques entre la (ou les) bande de valence et la (ou les) bande de

conduction. Dans ce cas on peut trouver une définition utilisant la règle d'or de Fermi [48]

$$\alpha(\omega) = \frac{\hbar\omega \times \text{nombre de transitions par unité de volume par unité de temps}}{\text{flux électromagnétique incident}}. \quad (1.31)$$

Dans cette thèse, l'étude de l'absorption optique est motivée également par un souci de proximité avec l'expérience. La plupart du temps ce qu'une expérience va mesurer est le *coefficient de réflexion*, aussi appelé *réflectance* qui correspond au ratio entre intensité réfléchie et incidente de l'onde lumineuse, noté R . Cette quantité est reliée à la *réflectivité*, noté r [34]

$$R(\omega) \equiv r(\omega)^2 = \left| \frac{n(\omega) - 1}{n(\omega) + 1} \right|^2 \quad (1.32)$$

pour le cas d'une incidence normale où $n = n' + in''$ est l'indice de réfraction complexe, que l'on décompose en une partie réelle et imaginaire. On peut donc extraire la fonction diélectrique $\epsilon(\omega)$, reliée au coefficient de réfraction à partir du coefficient de réflexion.

Toujours en réponse linéaire, on peut trouver une relation entre le courant électrique \mathbf{J} et le champ électrique externe \mathbf{E}

$$\mathbf{J}(\mathbf{q}, \omega) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega), \quad (1.33)$$

qui n'est rien d'autre que la célèbre loi d'Ohm où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur de conductivité. L'avantage de calculer la conductivité optique est qu'elle est reliée à la fonction de réponse du courant, elle même directement reliée au commutateur courant-courant. Toutefois, on peut également relier la conductivité optique à la fonction diélectrique à l'aide des équations de Maxwell. En utilisant les transformées de Fourier de l'équation de Maxwell-Ampère et Maxwell-Faraday [49] ainsi que l'équation 1.33, on obtient :

$$i\mathbf{q} \times \mathbf{B} = \mu_0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{E} - \frac{i\omega}{c^2} \mathbf{E}, \quad (1.34)$$

$$i\mathbf{q} \times \mathbf{E} = -i\omega \mathbf{B}. \quad (1.35)$$

En se concentrant sur la partie transverse, c'est-à-dire pour $\mathbf{q} \cdot \mathbf{E} = 0$, on obtient une relation reliant le tenseur diélectrique à la conductivité

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{q}, \omega) = \mathbf{1} + \frac{i}{\omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{q}, \omega), \quad (1.36)$$

cela nous permet également de trouver des relations entre les parties imaginaires et réelles de ces mêmes tenseurs. On obtient alors une relation entre le coefficient d'absorption et les

valeurs propres de la partie réelle de conductivité optique

$$\alpha(\omega) = \frac{\sigma'(\omega)}{n'(\omega)c}. \quad (1.37)$$

De plus, nous nous intéresserons à des fréquences correspondant à des énergies très basses, entre 10 – 50 meV, qui est le domaine de validité de la dispersion linéaire pour des fermions de Weyl. Ces énergies correspondent à des fréquences de l'ordre de 1 – 10 THz, ce qui nous situe à la limite entre le térahertz et l'infrarouge ; on peut alors raisonnablement considérer que la partie réelle de l'indice de réfraction est indépendante de la fréquence sur cet intervalle [34]. Cela nous donne donc une relation de proportionnalité directe

$$\alpha(\omega) = \frac{\sigma'(\omega)}{n'c} \rightarrow \alpha(\omega) \propto \sigma'(\omega), \quad (1.38)$$

entre l'absorption optique et les valeurs propres de la conductivité optique. Dans le chapitre 2, nous utiliserons le coefficient d'absorption optique (interbande), parce que plus proche d'un formalisme où on extrait la fonction de réponse correspondant à la polarisation. Cependant dans le chapitre 3, on parlera de conductivité optique interbande, plus particulièrement la partie réelle, parce que plus commode à calculer dans le formalisme GRPA (cf. l'annexe B). Ces quantités sont en revanche tout à fait équivalentes sur le plan de l'interprétation physique, ce qui explique certains abus de passer allégrement de l'une à l'autre.

1.4 Polarisation de vallée

Nous présentons ici le concept de base de la polarisation de vallée, que l'on construit par analogie avec la polarisation de spin dans les solides.

1.4.1 Découverte de la polarisation de vallée

Avant même de parler du principe de polarisation de vallée, il nous faut expliquer le concept de *vallée*. Une vallée, dans un semiconducteur, correspond à un minimum local (en énergie) de la bande interdite, c'est-à-dire où la bande de valence et de conduction sont les plus proches en énergie dans la zone de Brillouin. Pour un semiconducteur où le niveau de Fermi réside dans le gap, une vallée est donc l'endroit dans la zone de Brillouin où les transitions interbandes se font à l'énergie la plus basse. Pour la polarisation de vallée, il est nécessaire d'avoir un système avec plusieurs vallées ; on parle alors de semiconducteur à

vallées multiples (*multivalley semiconductor* en anglais), comme le diamant, le silicium ou le germanium [50,51].

Dans le cas où plusieurs vallées sont dégénérées (c'est-à-dire que le gap entre bande de conduction et valence est égal dans plusieurs d'entre elles), une polarisation de vallée est un phénomène physique où une seule de ces vallées (parfois un ensemble de plusieurs vallées) est activée, que ce soit par un champ électrique externe continu ou alternatif. On met alors en lumière tout le problème existant : premièrement, comment peut-on activer uniquement une seule vallée ? Deuxièmement, comment peut-on détecter la polarisation de vallée ?

Commençons alors par faire une rapide analogie avec le spin. Supposons que l'on soit capable de manipuler le degré de liberté de spin dans un solide. Au lieu de transmettre l'information par le courant électrique, on peut le faire avec le courant de spin [52]; ce champ de travail s'appelle la spintronique (mot valise venant de l'anglais *spintronics*). À l'instar de ce domaine, depuis la fin des années 2000, un domaine appelé valléetronique (*valleytronics* en anglais) est né avec des propositions dans des modèles de graphène gapé sur des mesures de transport [53,54]. Imaginons que nous ayons deux vallées dégénérées, pour des raisons de symétries, mais présentes à des endroits différents de la zone de Brillouin, alors on peut écrire un hamiltonien pour les électrons à basse énergie dans ce système qui comprend un degré de liberté pour une vallée A et B , de la même façon que l'on peut avoir une composante du spin \uparrow et \downarrow . En effet lorsque l'on a un matériau ferromagnétique, on dit que le système est polarisé en spin. Le même type de nomenclature apparaît dans le cadre de la polarisation de vallée.

Obtenir une polarisation de vallée, c'est-à-dire parvenir à activer des électrons d'une seule vallée, est donc la première étape avant la "valléetronique". Parmi les succès à ce jour on peut noter la polarisation de vallée dans le bismuth en transport sous un champ magnétique externe [55,56]. En raison de la forme très anisotrope des surfaces de Fermi et de la symétrie C_3 , le courant électrique peut être polarisée en vallée et on peut choisir la vallée en question en changeant l'orientation du champ. Un comportement similaire est possible dans le diamant sous un fort champ électrique externe, dans ce cas, les électrons qui participent au transport sont polarisés dans une paire de vallée selon un des trois axes principaux de la zone de Brillouin [57] (c.f. figure 1.3).

Cependant, outre une activation par une différence de potentiel ou un champ magnétique externe fort, on peut, dans certains systèmes faire une activation optique des vallées. Ces systèmes nécessitent une brisure de la symétrie par inversion afin de pouvoir exciter séparément les électrons dans les différentes vallées à l'aide d'une lumière circulairement polarisée. Cela a été montré dans le cas du graphène gapé en considérant le moment ma-

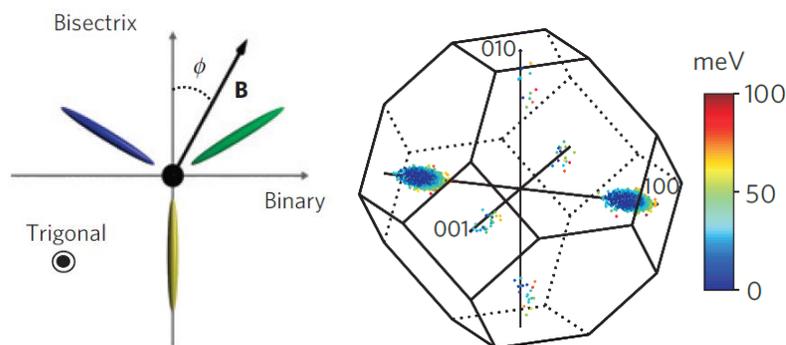


FIGURE 1.3 *Figure de gauche* : représentation de la surface de Fermi du Bismuth, chaque ovale représente une poche d'électrons autour d'une vallée. Lorsque le champ magnétique est orienté perpendiculairement à une poche donnée, alors la majorité du courant vient de la vallée associée; figure tirée de [55]. *Figure de droite* : zone de Brillouin du diamant avec trois paires de vallées inéquivalentes selon trois axes principaux. Si le champ électrique est suffisamment fort, alors une seule paire de vallées est activée, selon l'axe [100]; figure tirée de [57].

gnétique orbital des électrons [58].

Ces premiers travaux ont pavé la route à l'étude de matériaux de Dirac qui brisent par essence la symétrie d'inversion spatiale, contrairement au graphène : les métaux de transitions dichalcogène (*transition metal dichalcogenide* en anglais, souvent abrégé en TMD ou TMDC) [59].

1.4.2 Le cas d'école : polarisation de vallée dans les semiconducteurs bidimensionnels

Les métaux de transitions dichalcogènes [59] ont une stoechiométrie de la forme AB_2 avec A un métal de transition, souvent du molybdène (Mo) ou du tungstène (W), et B un élément de la seizième colonne du tableau périodique, un chalcogène, souvent du soufre (S), du sélénium (Se) ou du tellure (Te). Cette classe de semiconducteurs bidimensionnels a permis d'exploiter à son plein potentiel les effets de la polarisation de vallée. Deux phénomènes physiques conjoints conduisent à cette possibilité. Premièrement, la brisure de symétrie par inversion de ces systèmes, ayant un réseau cristallin similaire au graphène vu du dessus, mais qui consistent en un empilement d'atomes $B - A - B$ vu de la tranche. Un de ces empilements est appelé monocouche (c.f. figure 1.4). De façon similaire au graphène avec le graphite, ces monocouches sont liées entre elles par une interaction de Van der Waals lorsque présentes sous forme de matériau tridimensionnel ou *bulk*. En plus de la brisure de symétrie par inversion spatiale, il existe dans ces matériaux un fort couplage spin-orbite qui a pour conséquence de lever la dégénérescence en spin autour de chaque vallée, et couple

fortement les degrés de spin et de moment, donc de vallée, comme indiqué sur la figure 1.4.

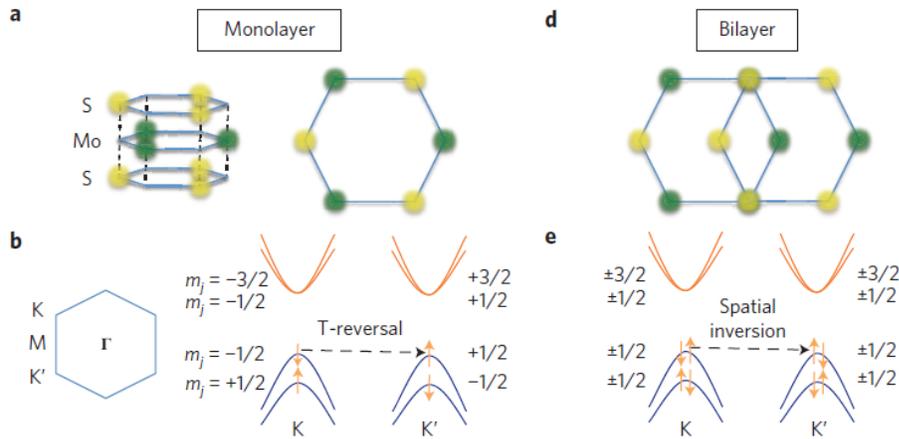


FIGURE 1.4 **a** et **d** Représentation de la cellule unité d'une monocouche et d'une bicouche de MoS₂ respectivement. **b**. Représentation des bandes proches des vallées K et K' pour une monocouche. Le couplage spin-orbite conduit à une levée de dégénérescence en plusieurs bandes de moment angulaire différents. Le fait que les deux vallées soient reliées par symétrie par renversement du temps nous impose qu'une bande de moment angulaire m dans la vallée K conduise à une bande de moment angulaire $-m$ de même énergie dans la vallée K' . **e**. Représentation des bandes proches des vallées K et K' dans le cas de la bicouche. Dans ce cas les vallées K et K' sont reliées par symétrie d'inversion spatiale ce qui impose que les deux vallées possèdent des bandes doublement dégénérées en moment angulaire. Figure extraite de [60].

Cette combinaison entre couplage spin-orbite et brisure de symétrie par inversion spatiale permet de contrôler optiquement la population des électrons dans les deux vallées reliées par symétrie de renversement du temps, K et K' (comme pour le graphène), par une lumière circulairement polarisée [60]. En effet, lorsque l'on a une transition entre des états de moment angulaire total $|m\rangle$ et $|m'\rangle$, on doit avoir conservation de ce dernier. Dans ce cas, si la lumière est polarisée circulairement dans le plan de la monocouche, les photons polarisés circulairement droite ont un moment angulaire égal à $+1$ et inversement les photons polarisés gauche -1 . Pour la vallée K , le gap ayant l'énergie la plus faible correspond à l'écart entre les bandes $m = -1/2$ et $-3/2$ (c.f. figure 1.4), on peut donc exciter optiquement les électrons de cette vallée par une lumière polarisée *gauche*. Cependant le même gap correspond à l'écart entre les bandes $m = +1/2$ et $+3/2$ pour la vallée K' , qui peut alors être excitée optiquement par une lumière polarisée *droite*. Chose encore plus remarquable, étant donnée que la polarisation de vallée se fait par des règles de sélection impliquant le moment angulaire, détecter cette dernière est possible par photoluminescence, c'est-à-dire en "regardant" directement la polarisation des photons issus de la relaxation des électrons de la bande de conduction à la bande de valence [60, 61]. Plus précisément, les électrons

excités dans une certaine vallée pour une polarisation lumineuse fixe vont se désexciter en produisant des photons avec la même polarisation. En observant la polarisation des photons du spectre optique en émission, on peut alors déterminer dans quelle vallée se trouvaient les électrons excités. Ces résultats ont été confirmés également pour une monocouche de WS_2 sur un substrat d'or en spectroscopie par photoémission résolue en angle et en temps (*time resolved ARPES* en anglais) où une polarisation de vallée de plus de 80 % est atteinte [62].

Ces propriétés optiques remarquables de sélection de vallée ont pu être étendues à des phénomènes opto-électroniques en utilisant l'effet Hall de vallée. Les vallées K et K' reliées par symétrie de renversement du temps possèdent une courbure de Berry opposée, ce qui conduit à une composante de vitesse anormale (reliée à la courbure de Berry) opposée pour les deux vallées. Il est possible de changer la différence de potentiel de Hall en changeant la polarisation de la lumière [10]. De plus, des expériences plus récentes ont montré qu'à la fois dans la monocouche et dans la bicouche, il était possible de régler électriquement la polarisation de vallée en utilisant les propriétés de la courbure de Berry, donnant lieu à un courant polarisé en vallée [63,64]. Dans la même veine, des prédictions théoriques quant à la possibilité de développer une électronique à base du degré de liberté de vallée émergent dans les matériaux de Dirac en utilisant les propriétés de l'effet tunnel du pseudo-spin [65].

Toutes ces expériences ont pointé du doigt la relation entre la courbure de Berry, provenant de la brisure de symétrie d'inversion et du fort couplage spin-orbite, et la polarisation de vallée. Cependant des résultats théoriques précurseurs montraient déjà une relation spécifique entre matériaux topologiques bidimensionnels (semiconducteurs 2D ou surface d'un isolant topologique 3D) et règles de sélection optique et ce, en présence d'interaction coulombienne [28–31].

On en vient donc aux questions que soulève cette thèse : les semimétaux de Weyl, matériaux topologiques qui brisent intrinsèquement la symétrie d'inversion, connus pour abriter un fort couplage spin-orbite peuvent ils être utilisés pour la polarisation de vallée ? Comme certains résultats l'indiquent pour les matériaux topologiques bidimensionnels, la relation entre topologie des bandes à une particule et interactions coulombienne à longue portée est-elle pertinente ? Si une polarisation de vallée est possible, comment peut-on la détecter, voire la contrôler ?

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre nous avons présenté une introduction aux semimétaux de Weyl en partant d'abord de l'équation de Dirac pour l'électron, puis en montrant le lien entre physique des hautes énergies et matière condensée. Nous avons vu ensuite qu'un semimétal de Weyl n'est pas simplement un système où les électrons dispersent linéairement en moment mais aussi un système avec une topologie non triviale, caractérisée par la courbure de Berry et le nombre de Chern. Parmi les manifestations physiques des propriétés topologiques, on retrouve la désormais célèbre anomalie chirale [19] ainsi que la présence d'états de bord, les arcs de Fermi, conséquence de la correspondance bord-volume [20].

Les croisements linéaires de bandes dans les semimétaux de Weyl proviennent de dégénérescences accidentelles. Surtout, ces croisements se produisent à des endroits arbitraires de la zone de Brillouin, ce qui explique que la découverte "tardive" de tels matériaux. De plus, un semimétal de Weyl, pour exister, doit briser par la symétrie d'inversion spatiale ou de renversement du temps, et doit respecter le théorème *no-go* de Nielsen et Ninomiya [35,36]. Cela implique la présence de plusieurs noeuds de Weyl dans la zone de Brillouin, et la somme des chiralités de tous les noeuds de Weyl doit être égale à zéro. Par exemple, pour les semimétaux de Weyl de la famille de TaAs, il existe 12 paires de noeuds de Weyl dans la zone de Brillouin.

Cette thèse se concentrant en premier lieu sur les réponses optiques de semimétaux de Weyl, nous avons effectué un bref rappel des formules de base pour le formalisme de Kubo de la réponse linéaire, puis défini les relations entre les différentes grandeurs d'intérêt dans notre cas. On peut citer par exemple le coefficient d'absorption (ou absorption optique), la fonction diélectrique, la susceptibilité électrique ainsi que la conductivité optique. En général, toutes ces quantités sont des tenseurs.

Pour finir, nous avons fait une brève revue de littérature sur la polarisation de vallée et de manière plus générale, la valléetronique, visant à utiliser le nombre quantique de vallée pour des applications électroniques. Nous avons choisi comme point de départ les premiers articles parus à la fin des années 2000, en passant par les résultats remarquables dans les métaux de transitions dichalcogènes, véritable terrain de jeu pour la polarisation de vallée. Enfin, nous avons abordé des sujets plus récents comme la présence conjointe de propriétés topologiques et d'interaction coulombienne à longue portée dans les systèmes bidimensionnels.

Chapitre 2

Absorption optique dans un sémimétal de Weyl avec interaction coulombienne à longue portée

Dans ce chapitre nous présenterons tout d'abord le modèle avec interactions de Coulomb que nous avons utilisé pour décrire l'absorption optique à basse énergie d'un semimétal de Weyl. Ensuite nous verrons comment écrire l'absorption optique dans un formalisme d'équation du mouvement pour ainsi obtenir une équation aux valeurs propres pour la paire électron-trou, l'exciton, et nous argumenterons sur le caractère topologique de ces derniers. Puis nous calculerons les éléments du tenseur de susceptibilité, et nous appliquerons cette méthode à différents types de semimétaux de Weyl, ceux brisant la symétrie d'inversion spatiale mais préservant la symétrie de renversement du temps, et ceux brisant la symétrie de renversement du temps mais préservant la symétrie d'inversion spatiale. Finalement nous montrerons qu'il est possible d'avoir une polarisation de vallée partielle de *paires* de noeuds de Weyl dans ces systèmes si certaines conditions sont réunies.

Les travaux présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'un article [66].

2.1 Hamiltonien avec interaction coulombienne et couplage électron-photon

2.1.1 Interaction électron-électron à longue portée

Nous avons présenté dans la section 1.1 le modèle usuel pour des électrons libres à basse énergie dans un semimétal de Weyl. On rappelle ici que le hamiltonien proche du noeud de Weyl s'écrit

$$h_\tau(\mathbf{k}) = d_{0,\tau}(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}_\tau(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.1)$$

où τ représente l'indice de noeud, σ_0 la matrice identité 2×2 et $\boldsymbol{\sigma}$ les matrices de Pauli.

En seconde quantification, nous pouvons écrire le hamiltonien pour des électrons libres comme

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\lambda\tau} E_{\mathbf{k}\lambda\tau} c_{\mathbf{k}\lambda\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}\lambda\tau}, \quad (2.2)$$

où $\lambda = c, v$ représente le degré de liberté de bande avec $E_{\mathbf{k}c\tau} = d_{0,\tau}(\mathbf{k}) + |\mathbf{d}_\tau(\mathbf{k})|$ et $E_{\mathbf{k}v\tau} = d_{0,\tau}(\mathbf{k}) - |\mathbf{d}_\tau(\mathbf{k})|$. De plus l'opérateur $c_{\mathbf{k}\lambda\tau}^{(\dagger)}$ annihile (crée) un électron dans l'état $|\mathbf{k}\lambda\tau\rangle$ et on a $\{c_\alpha^\dagger, c_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}$ ainsi que $\{c_\alpha^\dagger, c_\beta^\dagger\} = \{c_\alpha, c_\beta\} = 0$ où α et β représentent l'ensemble des nombres quantiques du système.

Nous voulons ajouter un terme d'interaction coulombienne à notre modèle de semimétal de Weyl. Gardons à l'esprit que nous avons un modèle à basse énergie similaire à un gaz d'électrons. On peut alors écrire un terme d'interaction coulombienne à longue portée pour un gaz d'électrons

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

où $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = e^2 / (4\pi\epsilon_0\epsilon_\infty|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ représente le potentiel coulombien pour un gaz d'électrons avec ϵ_∞ la contribution de la constante diélectrique provenant des bandes de haute énergie (c'est-à-dire non comprises dans notre approximation linéaire) et $\Psi(\mathbf{r})$ l'opérateur de champ à basse énergie qui s'écrit comme

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}\lambda\tau} e^{i\mathbf{k}_\tau \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} |\mathbf{k}\lambda\tau\rangle c_{\mathbf{k}\lambda\tau}, \quad (2.4)$$

où \mathcal{V} est le volume du système, \mathbf{k}_τ la position du noeud de Weyl dans l'espace des vecteurs

d'onde et \mathbf{k} le vecteur d'onde mesuré par rapport au noeud de Weyl. On rappelle

$$|\mathbf{k}c\tau\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2} \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}\tau}} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2} \end{pmatrix}, \quad |\mathbf{k}v\tau\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2} \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}\tau}} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

On peut alors utiliser l'expression de l'opérateur champ dans l'équation (2.3) en faisant l'approximation que deux opérateurs champ $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ et $\Psi(\mathbf{r})$ provenant du même point \mathbf{r} dans l'espace doivent provenir du même noeud de Weyl. Ceci est justifié puisque, dans le cas contraire, deux électrons provenant de deux noeuds de Weyl différents impliquerait l'existence d'un vecteur d'onde d'échange correspondant à la distance dans la zone de Brillouin entre ces deux mêmes noeuds, soit $2|\mathbf{k}_\tau|$. Un tel vecteur d'onde sort donc de notre pré-requis qui est de considérer tous les vecteurs d'ondes plus petit qu'un *cutoff* $\tilde{\Lambda}$ associé au *cutoff* Λ en énergie. Ceci consiste à faire l'approximation de ne garder que les termes à petit vecteur d'onde dans l'interaction coulombienne.

Ceci nous conduit, en utilisant la transformée de Fourier du potentiel coulombien ainsi que l'équation (2.4), à

$$\mathcal{U} \simeq \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\tau\tau'} \sum_{\lambda\lambda'\gamma\gamma'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq\mathbf{0}} \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \lambda\tau | \mathbf{k}\gamma\tau \rangle \langle \mathbf{k}' - \mathbf{q} | \lambda'\tau' | \mathbf{k}'\gamma'\tau' \rangle V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\lambda\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\lambda'\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\gamma'\tau'} c_{\mathbf{k}\gamma\tau}, \quad (2.6)$$

avec $V(\mathbf{q}) = e^2 / (\epsilon_0 \epsilon_\infty q^2)$. L'exclusion de $\mathbf{q} = 0$ de la somme provient de l'approximation du modèle du jellium considérée ici [45]; ce terme électronique s'annule avec la contribution des ions du réseau cristallin.

Pour l'instant nous garderons cette forme générale de l'interaction coulombienne. Nous introduirons plusieurs approximations qui seront nécessaires lors de la résolution de l'équation du mouvement, comme l'écrantage ou une simplification des éléments de matrice de l'équation (2.6).

2.1.2 Couplage entre les électrons et un champ électrique externe

Nous allons ensuite ajouter le dernier ingrédient à notre modèle : le couplage entre les électrons et les photons. On introduit ce couplage via l'interaction dipolaire entre les électrons et le champ électrique de la lumière.

$$\mathcal{H}_\mathcal{E} = \int d^3r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) (-e\mathbf{r}) \cdot \mathcal{E}(t) \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.7)$$

où e est la charge élémentaire et $\mathcal{E}(t)$ le champ électrique de la lumière, et on suppose que la longueur d'onde de la lumière est beaucoup plus grande que la longueur de pénétration du champ afin de considérer ce dernier comme uniforme. Il nous faut préciser que nous nous intéressons ici qu'à la partie interbande de l'absorption optique, c'est-à-dire à une fréquence finie de la lumière, en opposition à la partie intrabande qui se situe à fréquence nulle. Nous allons aussi considérer que le vecteur d'onde des photons considérés est très faible, donc négligeable. Dans notre cas, l'absorption optique a lieu dans le domaine de l'infrarouge voire le térahertz $\hbar\omega \sim 10 - 40$ meV. Dans le régime à basse énergie des noeuds de Weyl, on peut écrire l'énergie des électrons comme $E = \hbar v_F k_{el}$. Celle des photons s'écrit $E_{ph} = hc/\lambda = \hbar c k_{ph}$ où c est la vitesse de la lumière. Pour des énergies comparables des électrons et des photons $E_{el} \sim E_{ph}$, on obtient $k_{ph} = (v_F/c)k_{el}$. Dans ce cas, le vecteur d'onde du photon est environ 1000 fois inférieur à celui de l'électron, donc si ce dernier absorbe un photon d'énergie de l'ordre de la dizaine de meV, nous pouvons considérer que son vecteur d'onde sera le même avant et après l'absorption.

Nous pouvons alors écrire la partie du hamiltonien décrivant l'interaction électron-lumière dans la base des vecteurs d'onde

$$\mathcal{H}_\mathcal{E} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda\lambda'}^{\lambda \neq \lambda'} \sum_{\tau\tau'} e^{-i\mathbf{k}_\tau \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \langle \mathbf{k}\lambda\tau | c_{\mathbf{k}\lambda\tau}^\dagger (-e\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathcal{E}(t) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \mathbf{k}'\lambda'\tau' \rangle c_{\mathbf{k}'\lambda'\tau'} \quad (2.8)$$

$$= -e\mathcal{E}(t) \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\lambda\lambda'}^{\lambda \neq \lambda'} \sum_{\tau\tau'} c_{\mathbf{k}\lambda\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}'\lambda'\tau'} \frac{1}{\mathcal{V}} \int d^3r \langle \mathbf{k}\lambda\tau | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{k}'\lambda'\tau' \rangle e^{i(\mathbf{k}_\tau - \mathbf{k}'_\tau + \mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.9)$$

En utilisant

$$\hat{\mathbf{v}} \equiv \hat{\mathbf{r}} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_0, \hat{\mathbf{r}}], \quad (2.10)$$

où \mathcal{H}_0 est le hamiltonien pour des électrons libres, on obtient pour l'élément de matrice

$$\langle \mathbf{k}\lambda\tau | \hat{\mathbf{v}} | \mathbf{k}'\lambda'\tau \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{k}\lambda\tau | [\mathcal{H}_0, \hat{\mathbf{r}}] | \mathbf{k}'\lambda'\tau \rangle \quad (2.11)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} (E_{\mathbf{k}'\lambda'\tau} - E_{\mathbf{k}\lambda\tau}) \langle \mathbf{k}\lambda\tau | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{k}'\lambda'\tau \rangle \quad (2.12)$$

$$\langle \mathbf{k}\lambda\tau | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{k}'\lambda'\tau \rangle = i\hbar \frac{\langle \mathbf{k}\lambda\tau | \hat{\mathbf{v}} | \mathbf{k}'\lambda'\tau \rangle}{E_{\mathbf{k}'\lambda'\tau} - E_{\mathbf{k}\lambda\tau}}. \quad (2.13)$$

L'intégrale sur \mathbf{r} donne alors un delta de Dirac et la seule façon de satisfaire la condition imposée par ce dernier est d'avoir $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ ainsi que $\mathbf{k}_\tau = \mathbf{k}'_\tau$ étant donné que l'on a considéré que les vecteurs $|\mathbf{k}| < \Lambda$ dans notre approximation à basse énergie ainsi que $|\mathbf{k}_\tau| \gg \Lambda$.

Tout ceci nous permet d'obtenir une forme plus élégante du couplage électron-lumière

$$\mathcal{H}_{\mathcal{E}} = -\mathcal{E}(t) \cdot \sum_{\mathbf{k}\tau} \mathbf{d}_{\tau}^{vc}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\tau}^{\dagger} c_{\mathbf{k}v\tau} + \text{h.c.}, \quad (2.14)$$

où h.c. indique l'hermitien conjugué et $\mathbf{d}_{\tau}^{vc}(\mathbf{k})$ ¹, l'élément de matrice du dipôle interbande, est défini comme

$$\mathbf{d}_{\tau}^{vc}(\mathbf{k}) = ie\hbar \frac{\langle \mathbf{k}c\tau | \hat{\mathbf{v}} | \mathbf{k}v\tau \rangle}{E_{\mathbf{k}v\tau} - E_{\mathbf{k}c\tau}}, \quad (2.15)$$

où $\hat{\mathbf{v}} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} h_{\tau}(\mathbf{k})$ est l'opérateur vitesse.

2.2 Formalisme pour l'absorption optique interbande

Nous allons maintenant présenter le calcul afin d'obtenir l'absorption optique interbande dans un semimétal de Weyl. Tout d'abord il nous faut rappeler que notre hamiltonien est diagonal dans la base des noeuds, donc nous allons calculer la conductivité optique pour chaque noeud séparément. On précise aussi que l'on ne tiendra pas compte des états de surface des semimétaux de Weyl pour ce calcul.

2.2.1 Équation du mouvement pour la polarisation interbande

Nous allons suivre ici le formalisme de [67] pour trouver une équation aux valeurs propres pour la paire électron-trou.

Tout d'abord, il nous faut définir la quantité que l'on veut calculer. Nous avons montré dans la section 1.1 le lien entre susceptibilité optique, absorption optique et conductivité optique. Écrivons alors l'expression pour la polarisation macroscopique comme un moment dipolaire par unité de volume

$$\mathbf{P}(t) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\tau} \langle P_{\tau}(\mathbf{k}, t) \rangle \mathbf{d}_{\tau}^{vc*}(\mathbf{k}) + \text{c.c.}, \quad (2.16)$$

où c.c. indique le complexe conjugué et

$$P_{\tau}(\mathbf{k}, t) = c_{\mathbf{k}v\tau}^{\dagger}(t^{+}) c_{\mathbf{k}c\tau}(t), \quad (2.17)$$

1. L'indice vc pour valence-conduction sert à différencier le dipôle interbande du terme $d(\mathbf{k})$ que l'on écrit pour le hamiltonien à basse énergie

où $c_{\mathbf{k}\lambda\tau}(t) = \exp(i\mathcal{H}t)c_{\mathbf{k}\lambda\tau}(0)\exp(-i\mathcal{H}t)$. Ici $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{U} + \mathcal{H}_E(t)$ est le hamiltonien complet du système et la valeur moyenne est prise sur l'état fondamental de \mathcal{H} . De plus t^+ indique un temps égal à t mais très légèrement supérieur pour que l'ordonnement temporel des opérateurs soit bien défini. La quantité $\langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle$ représente la cohérence interbande. Lorsque nous sommes à l'équilibre thermodynamique et en absence de phase de type condensat excitonique, c'est-à-dire un condensat de Bose-Einstein composé d'excitons [68, 69], nous avons par définition que cette quantité sur l'état fondamental de $\mathcal{H}_0 + \mathcal{U}$ est nulle. En revanche, sous excitation lumineuse, des électrons de bande de valence vont être promus en bande de conduction, ce qui conduit à une cohérence interbande non nulle. Trouver l'expression de cette valeur moyenne est donc une manière pour calculer l'absorption optique d'un système. On applique ici le formalisme de la section 1.3, ce qui nous permet d'écrire

$$\langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle_{\text{hors-eq.}} = \langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle_{\text{eq.}} + \delta \langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle_{\text{hors-eq.}}, \quad (2.18)$$

où $\langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle_{\text{eq.}} = 0$ dans notre cas (absence de condensat excitonique) et $\delta \langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle_{\text{hors-eq.}}$ est considéré uniquement à l'ordre linéaire dans le champ électrique externe de la lumière. Pour trouver l'expression de $P_\tau(\mathbf{k}, t)$, il nous faut calculer l'équation du mouvement pour le produit d'opérateurs $c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(t^+)c_{\mathbf{k}c\tau}(t)$ avec le hamiltonien complet. On a alors

$$\frac{d}{dt}(c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(t)c_{\mathbf{k}c\tau}(t)) = \frac{i}{\hbar} \left[\mathcal{H}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(t)c_{\mathbf{k}c\tau}(t) \right]. \quad (2.19)$$

Puisque l'opérateur \mathcal{H} commute avec lui même, on trouve directement

$$\frac{d}{dt}(c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(t)c_{\mathbf{k}c\tau}(t)) = \frac{i}{\hbar} \exp(i\mathcal{H}t) \left[\mathcal{H}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(0)c_{\mathbf{k}c\tau}(0) \right] \exp(-i\mathcal{H}t). \quad (2.20)$$

Ce commutateur à temps nul est assez facile à obtenir pour la partie quadratique du hamiltonien, cependant, la partie quartique (interaction coulombienne) requiert plus de patience. Calculons ce commutateur pour la partie quadratique du hamiltonien. Tous les opérateurs sont considérés à $t = 0$.

$$\begin{aligned} \left[\mathcal{H}_0, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} \right] &= \sum_{\mathbf{k}'\tau'} \left(E_{\mathbf{k}'c\tau'} \left[c_{\mathbf{k}'c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'c\tau'}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} \right] + E_{\mathbf{k}'v\tau'} \left[c_{\mathbf{k}'v\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'v\tau'}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} \right] \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}'\tau'} \left(-E_{\mathbf{k}'c\tau'} c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger \{ c_{\mathbf{k}'c\tau'}^\dagger, c_{\mathbf{k}c\tau} \} c_{\mathbf{k}'c\tau'} + E_{\mathbf{k}'v\tau'} c_{\mathbf{k}'v\tau'}^\dagger \{ c_{\mathbf{k}'v\tau'}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger \} c_{\mathbf{k}c\tau} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}'\tau'} \left(-E_{\mathbf{k}'c\tau'} c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}'c\tau'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\tau\tau'} + E_{\mathbf{k}'v\tau'} c_{\mathbf{k}'v\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\tau\tau'} \right) \\ &= -(E_{\mathbf{k}c\tau} - E_{\mathbf{k}v\tau}) c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Pour la partie de l'interaction électron-photon, nous avons

$$\begin{aligned}
\left[\mathcal{H}_{\mathcal{E}}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} \right] &= -\mathcal{E}(t) \sum_{\mathbf{k}'\tau'} \mathbf{d}_{\tau'}^{vc}(\mathbf{k}') \left[\left(c_{\mathbf{k}'c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'v\tau'} - c_{\mathbf{k}'v\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'c\tau'} \right), c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} \right] \\
&= -\mathcal{E}(t) \sum_{\mathbf{k}'\tau'} \mathbf{d}_{\tau'}^{vc}(\mathbf{k}') \left(c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger \left[c_{\mathbf{k}'c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'v\tau'}, c_{\mathbf{k}c\tau} \right] + \left[c_{\mathbf{k}'c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'v\tau'}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger \right] c_{\mathbf{k}c\tau} \right) \\
&= -\mathcal{E}(t) \sum_{\mathbf{k}'\tau'} \mathbf{d}_{\tau'}^{vc}(\mathbf{k}') \left(-c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger \{ c_{\mathbf{k}'c\tau'}^\dagger, c_{\mathbf{k}c\tau} \} c_{\mathbf{k}'v\tau'} + c_{\mathbf{k}'c\tau'}^\dagger \{ c_{\mathbf{k}'v\tau'}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger \} c_{\mathbf{k}c\tau} \right) \\
&= -\mathcal{E}(t) \cdot \mathbf{d}_{\tau}^{vc}(\mathbf{k}) \left(c_{\mathbf{k}c\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} - c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}v\tau} \right). \tag{2.22}
\end{aligned}$$

Insérons maintenant les équations (2.21) et (2.22) dans l'équation (2.19) de l'équation du mouvement afin de trouver un résultat pour la polarisation interbande, sans le terme d'interaction coulombienne pour commencer :

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} (c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}c\tau}(t)) &= (E_{\mathbf{k}c\tau} - E_{\mathbf{k}v\tau}) c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}c\tau}(t) \\
&\quad + \mathcal{E}(t) \cdot \mathbf{d}_{\tau}^{vc}(\mathbf{k}) \left(c_{\mathbf{k}c\tau}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}c\tau}(t) - c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}v\tau}(t) \right). \tag{2.23}
\end{aligned}$$

Les valeurs moyennes sont prises ici dans l'état fondamental du hamiltonien en l'absence d'interaction coulombienne :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle P_{\tau}(\mathbf{k}, t) \rangle = (E_{\mathbf{k}c\tau} - E_{\mathbf{k}v\tau}) \langle P_{\tau}(\mathbf{k}, t) \rangle + \mathcal{E}(t) \cdot \mathbf{d}_{\tau}^{vc}(\mathbf{k}) (n_{\mathbf{k}c\tau}(t) - n_{\mathbf{k}v\tau}(t)), \tag{2.24}$$

où $n_{\mathbf{k}\alpha\tau}(t) = \langle c_{\mathbf{k}\alpha\tau}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}\alpha\tau}(t) \rangle$. Nous allons faire ici une approximation de quasi-équilibre pour le facteur d'occupation en bande de valence et conduction. Cela conduit à $n_{\mathbf{k}\alpha\tau}(t) = f_{\alpha\tau}(\mathbf{k})$ où f représente la fonction de Fermi-Dirac. Cette approximation est valide dans le formalisme de réponse linéaire considéré ici étant donné que le terme comprenant les occupations des bandes est déjà linéaire en $\mathcal{E}(t)$.

L'étape suivante est de prendre la transformée de Fourier de la polarisation interbande

$$P_{\tau}(\mathbf{k}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} P_{\tau}(\mathbf{k}, \omega). \tag{2.25}$$

On obtient alors une équation de la polarisation interbande en fonction de la fréquence

$$\delta \langle P_{\tau}(\mathbf{k}, \omega) \rangle_{\text{hors-éq.}} = \mathcal{E}(\omega) \cdot \mathbf{d}_{\tau}^{vc}(\mathbf{k}) \frac{f_{c\tau}(\mathbf{k}) - f_{v\tau}(\mathbf{k})}{\hbar\omega + i\eta - (E_{\mathbf{k}c\tau} - E_{\mathbf{k}v\tau})}, \tag{2.26}$$

où nous avons déplacé la fréquence $\omega \rightarrow \omega + i\eta$ pour déplacer le pôle de la fonction $P_{\tau}(\mathbf{k}, \omega)$ dans la partie supérieure du plan complexe [45].

Remplaçons à présent notre définition de la polarisation interbande dans l'équation (2.16) pour la polarisation macroscopique

$$\mathbf{P}(t) \equiv \epsilon_0 \chi(\omega) \mathcal{E}(\omega) = \frac{\epsilon_0}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\tau} \mathbf{d}_{\tau}^{vc*}(\mathbf{k}) (\mathcal{E}(\omega) \cdot \mathbf{d}_{\tau}^{vc}(\mathbf{k})) \frac{f_{c\tau}(\mathbf{k}) - f_{v\tau}(\mathbf{k})}{\hbar\omega + i\eta - (E_{\mathbf{k}c\tau} - E_{\mathbf{k}v\tau})}. \quad (2.27)$$

Ce qui définit la susceptibilité *sans* interaction coulombienne. Ce cas nous donne cependant une intuition physique forte sur le problème, en effet l'absorption optique est reliée à la partie imaginaire du tenseur susceptibilité, ce dernier étant décomposé en une partie réelle et imaginaire. En utilisant la relation

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\omega + i\eta} = \text{V.P.} \left(\frac{1}{\omega} \right) + i\pi\delta(\omega), \quad (2.28)$$

où V.P. représente la valeur principale de Cauchy, l'expression pour une composante de la partie imaginaire du tenseur de susceptibilité s'écrit alors

$$\chi''_{ij}(\omega) = \frac{\pi}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\tau} d_{i,\tau}^{vc*}(\mathbf{k}) d_{j,\tau}^{vc}(\mathbf{k}) (f_{c\tau}(\mathbf{k}) - f_{v\tau}(\mathbf{k})) \delta(\hbar\omega - (E_{\mathbf{k}c\tau} - E_{\mathbf{k}v\tau})). \quad (2.29)$$

Cette expression sans interaction nous donne au moins deux informations essentielles pour comprendre l'absorption optique. Premièrement, l'état de départ en bande de valence doit être occupé et l'état final en bande de conduction doit être vide pour l'absorption (ou vice versa pour l'émission), sinon la différence des facteurs d'occupation est nulle. De plus, pour un état avec un vecteur d'onde \mathbf{k} , il faut une fréquence lumineuse ω appropriée pour satisfaire la conservation de l'énergie imposée par le delta de Dirac.

Revenons à présent à l'incorporation de l'interaction coulombienne dans notre calcul. Cette dernière décrite par l'équation (2.6) implique une somme sur quatre indices de bandes indépendants, on peut alors faire une approximation pour simplifier le problème qui est de considérer $\langle \mathbf{k} + \mathbf{q}\lambda\tau | \mathbf{k}\gamma\tau \rangle \simeq \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}\lambda\tau | \mathbf{k}\lambda\tau \rangle \delta_{\lambda\gamma}$ [67]. Cela se justifie pour deux raisons : premièrement il nous faut nous souvenir que nous avons un cutoff sur tous les moments, donc $|\mathbf{k}| < \tilde{\Lambda}$ ainsi que $|\mathbf{k} + \mathbf{q}| < \tilde{\Lambda}$, où on rappelle que $\tilde{\Lambda}$ est le cutoff en moment correspondant au cutoff Λ en énergie. Pour une dispersion parfaitement linéaire on a $\tilde{\Lambda} \equiv \Lambda / (\hbar v_F)$.

Deuxièmement, nous savons que $V(\mathbf{q})$ est important pour $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$. Dans ce cas $\mathbf{k} + \mathbf{q} \sim \mathbf{k}$, donc le produit scalaire de spineurs de deux bandes différentes est quasiment nul, ce qui nous permet donc de considérer la simplification mentionnée plus haut. Cet argument est aussi utilisé en disant qu'il n'est pas énergétiquement favorable de promouvoir un électron de la bande de valence à la bande de conduction uniquement via l'interaction coulombienne [67]. En effet, on peut estimer l'importance du potentiel coulombien par rapport à l'énergie

typique de notre système, l'énergie de Fermi

$$\frac{E}{V} \sim \frac{\hbar v_F k_F}{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_\infty} k_F} \sim \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_\infty \hbar v_F}{e^2} \sim \frac{\epsilon_\infty v_F}{c} \frac{1}{\alpha_{\text{str. fine}}} \sim 4, \quad (2.30)$$

avec $\alpha_{\text{str. fine}}$ la constante de structure fine, c la vitesse de la lumière et on a choisi $\epsilon_\infty = 30$, valeur typique pour un semimétal de Weyl de la famille de TaAs [21]. L'amplitude du potentiel coulombien a été faite en utilisant le principe d'incertitude $\Delta r \Delta k \sim 1$ avec $V(r) = e^2 / (4\pi\epsilon_0\epsilon_\infty \Delta r)$ et $\Delta k \sim k_F$ qui est le vecteur d'onde moyen caractéristique de l'interaction coulombienne. Compte tenu du rapport entre l'énergie de Fermi et le potentiel coulombien "moyen", il n'est pas possible, via l'interaction coulombienne, de promouvoir un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

Cette simplification nous permet de réécrire le terme d'interaction coulombienne

$$\mathcal{U} \simeq \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\tau\tau'} \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq 0} \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} \lambda \tau | \mathbf{k} \lambda \tau \rangle \langle \mathbf{k}' - \mathbf{q} \lambda' \tau' | \mathbf{k}' \lambda' \tau' \rangle V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\lambda\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\lambda'\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'\lambda'\tau'} c_{\mathbf{k}\lambda\tau}. \quad (2.31)$$

On peut exprimer la somme sur les bandes de manière explicite, ce qui donne naissance à trois termes

$$\begin{aligned} \mathcal{U} \simeq & \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\tau\tau'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq 0} \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} c \tau | \mathbf{k} c \tau \rangle \langle \mathbf{k}' - \mathbf{q} c \tau' | \mathbf{k}' c \tau' \rangle V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}c\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'c\tau'} c_{\mathbf{k}c\tau} \\ & + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\tau\tau'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq 0} \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} v \tau | \mathbf{k} v \tau \rangle \langle \mathbf{k}' - \mathbf{q} v \tau' | \mathbf{k}' v \tau' \rangle V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}v\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'v\tau'} c_{\mathbf{k}v\tau} \\ & + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\tau\tau'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\neq 0} \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} c \tau | \mathbf{k} c \tau \rangle \langle \mathbf{k}' - \mathbf{q} v \tau' | \mathbf{k}' v \tau' \rangle V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}c\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}v\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}'v\tau'} c_{\mathbf{k}c\tau}, \quad (2.32) \end{aligned}$$

par symétrie $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ et par anticommutation des opérateurs c et c^\dagger .

Il nous faut alors calculer le commutateur entre le terme \mathcal{U} et notre terme quadratique $c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau}$. Nous allons prendre comme exemple le premier terme de l'équation (2.32) puis le calcul sera implicite pour les autres termes afin de trouver l'équation du mouvement pour la polarisation interbande. Ce premier terme implique un terme quartique d'opérateurs de création et d'annihilation fermionique en bande de conduction

$$\begin{aligned} & \left[c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}''-\mathbf{q}c\tau''}^\dagger c_{\mathbf{k}''c\tau''} c_{\mathbf{k}'c\tau'}, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} \right] \\ & = c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k}''c\tau''} c_{\mathbf{k}'c\tau'} \delta_{\mathbf{k}''-\mathbf{q},\mathbf{k}} \delta_{\tau''\tau} - c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}''-\mathbf{q}c\tau''}^\dagger c_{\mathbf{k}''c\tau''} c_{\mathbf{k}'c\tau'} \delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\mathbf{k}} \delta_{\tau'\tau}, \quad (2.33) \end{aligned}$$

que l'on trouve après quelques manipulations de commutation et d'anticommutation. Le

commutateur présent dans l'équation du mouvement pour ce terme quartique donne, après quelques changements d'indices de somme,

$$\left[\mathcal{U}_c, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}c\tau} \right] = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\tau'} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q} \neq 0} \langle \mathbf{k}c\tau | \mathbf{k} + \mathbf{q}c\tau \rangle \langle \mathbf{k}' + \mathbf{q}c\tau' | \mathbf{k}'c\tau' \rangle V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}c\tau} c_{\mathbf{k}'c\tau'}. \quad (2.34)$$

Nous devons prendre en compte la dépendance temporelle des opérateurs puis la valeur moyenne de ces derniers. La valeur moyenne est prise dans l'état fondamental de \mathcal{H} . Il nous faut donc supposer que cet état fondamental est un état à une particule pour décomposer la valeur moyenne quartique en valeurs moyennes quadratiques en s'armant du théorème de Wick [45]. De manière similaire, on dit que la forme du hamiltonien doit être quadratique, ce qui pour notre cas revient à faire un traitement de champ moyen de type Hartree-Fock du terme d'interaction [45, 67]. Ces considérations nous permettent alors d'écrire, au premier ordre en champ électrique externe

$$\langle c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger c_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}c\tau'}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}c\tau} c_{\mathbf{k}'c\tau'} \rangle = \delta_{\tau\tau'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f_{c\tau}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \delta \langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle_{\text{hors-}\acute{e}\text{q.}}, \quad (2.35)$$

étant donné que $\langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle_{\text{eq.}}$ est nul ; puis d'insérer ce résultat dans l'équation du mouvement

$$\begin{aligned} & \left\langle \left[\mathcal{U}_c, c_{\mathbf{k}v\tau}^\dagger(t) c_{\mathbf{k}c\tau}(t) \right] \right\rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \langle \mathbf{k}c\tau | \mathbf{k} + \mathbf{q}c\tau \rangle \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}c\tau | \mathbf{k}c\tau \rangle V(\mathbf{q}) f_{c\tau}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \delta \langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \langle \mathbf{k}c\tau | \mathbf{k}'c\tau \rangle \langle \mathbf{k}'c\tau | \mathbf{k}c\tau \rangle V(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) f_{c\tau}(\mathbf{k}') \delta \langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle \quad (2.37)$$

$$\equiv \Sigma_{c\tau}(\mathbf{k}) \delta \langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle. \quad (2.38)$$

On définit alors $\Sigma_{c\tau}(\mathbf{k})$ par l'équation (2.38), et on trouve un terme similaire avec la partie quartique qui ne comprend que des opérateurs concernant la bande de valence. Ce terme est appelé self-énergie. On a également enlevé l'indice "hors-éq." de $\delta \langle P_\tau(\mathbf{k}, t) \rangle$ afin d'avoir une formulation plus compacte. Gardons à l'esprit que cette quantité est hors-équilibre par définition. La dernière pièce de notre puzzle d'équation du mouvement concerne le terme quartique dans l'interaction coulombienne contenant à la fois des opérateurs agissant sur la bande de valence et de conduction. Une procédure similaire à celle effectuée plus haut donne un terme qualifié de liaison ou d'échange, dont nous verrons la signification plus en détail dans la section suivante. Nous pouvons à présent écrire l'équation du mouvement

complète, dans l'espace des fréquences, pour la polarisation interbande

$$\begin{aligned} & [\hbar\omega - (\xi_{c\tau}(\mathbf{k}) - \xi_{v\tau}(\mathbf{k}))] \delta\langle P_\tau(\mathbf{k}, \omega) \rangle \\ &= (f_{c\tau}(\mathbf{k}) - f_{v\tau}(\mathbf{k})) \left(\boldsymbol{\varepsilon}(\omega) \cdot \mathbf{d}_\tau^{vc}(\mathbf{k}) + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta\langle P_\tau(\mathbf{k}', \omega) \rangle \right), \end{aligned} \quad (2.39)$$

où on a utilisé les définitions suivantes :

$$\xi_{\lambda\tau}(\mathbf{k}) \equiv E_{\mathbf{k}\lambda\tau} + \Sigma_{\lambda\tau}(\mathbf{k}) \quad (2.40)$$

$$\Sigma_{\lambda\tau}(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} |\langle \mathbf{k}\lambda\tau | \mathbf{k}'\lambda\tau \rangle|^2 V_{\text{sc}}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) f_{\lambda\tau}(\mathbf{k}') \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &\equiv V_{\text{sc}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle \mathbf{k}c\tau | \mathbf{k}'c\tau \rangle \langle \mathbf{k}'v\tau | \mathbf{k}v\tau \rangle \\ &= V_{\text{sc}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{1}{2} [\sin \theta_{\mathbf{k}\tau} \sin \theta_{\mathbf{k}'\tau} + (1 + \cos \theta_{\mathbf{k}\tau} \cos \theta_{\mathbf{k}'\tau}) \cos(\varphi_{\mathbf{k}\tau} - \varphi_{\mathbf{k}'\tau}) \\ &\quad + i(\cos \theta_{\mathbf{k}\tau} + \cos \theta_{\mathbf{k}'\tau}) \sin(\varphi_{\mathbf{k}\tau} - \varphi_{\mathbf{k}'\tau})]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Dans les équations (2.41) et (2.42), nous avons remplacé le potentiel coulombien standard en trois dimensions pour un gaz d'électrons par le potentiel coulombien écranté $V_{\text{sc}}(\mathbf{q})$. Dans le cas d'un métal ou d'un semimétal dopé, la présence d'une surface de Fermi finie donne lieu à un écrantage de l'interaction électron-électron qui réduit l'intensité de cette dernière. Le niveau de Fermi des semimétaux de Weyl n'est en général pas au point de neutralité, c'est pourquoi on considère ici la possibilité d'un écrantage [42]. De manière générale, l'écrantage a pour effet de modifier la constante diélectrique en une fonction du vecteur d'onde $\epsilon(\mathbf{q})$. On va ici considérer l'écrantage de Thomas-Fermi qui donne

$$\epsilon(\mathbf{q} \rightarrow 0) = \epsilon_0 \epsilon_\infty \left(1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty \mathbf{q}^2} \nu(\epsilon_F) \right), \quad (2.43)$$

où $\nu(\epsilon_F)$ indique la densité d'états au niveau de Fermi. On obtient alors pour le potentiel coulombien écranté dans l'approximation de Thomas-Fermi

$$V_{\text{TF}}(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\epsilon(\mathbf{q} \rightarrow 0) \mathbf{q}^2} = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty (\mathbf{q}^2 + q_{\text{TF}}^2)} \equiv V_{\text{sc}}(\mathbf{q}), \quad (2.44)$$

où $q_{\text{TF}}^2 = e^2 / (\epsilon_0 \epsilon_\infty) \nu(\epsilon_F)$.

L'interaction coulombienne est importante pour \mathbf{q} petit, typiquement $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$. Ouvrons

ici une petite parenthèse, nous savons que

$$q_{\text{TF}}^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \nu(\epsilon_F) = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \frac{\epsilon_F^2}{2\pi^2 \hbar^3 v_F^3}, \quad (2.45)$$

où on a choisi pour l'exemple la densité d'états au niveau de Fermi pour un noeud de Weyl avec une dispersion parfaitement linéaire $\nu(\epsilon_F) = \epsilon_F^2 / (2\pi^2 \hbar^3 v_F^3)$. En utilisant la valeur de la constante de structure fine, on arrive à

$$q_{\text{TF}}^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_\infty\hbar c} \frac{c}{v_F} \frac{2}{\pi} k_F^2 \sim \frac{1000}{137} \frac{2}{\pi\epsilon_\infty} k_F^2, \quad (2.46)$$

on trouve alors que $q_{\text{TF}} \sim 0.15k_F$ pour $\epsilon_\infty = 30$. Ceci implique donc que l'interaction coulombienne est importante si $|\mathbf{q}| \ll k_F$. En effet, on peut montrer que pour l'interaction de Coulomb écrantée avec les valeurs précédentes que $V(\mathbf{q} = 0)/V(\mathbf{q} = k_F) \sim 45$. Cela justifie également à posteriori que le produit scalaire de spineurs entre deux bandes différentes, c'est-à-dire $\langle \mathbf{k} + \mathbf{q}\lambda\tau | \mathbf{k}\gamma\tau \rangle$ est quasiment nul si $\lambda \neq \gamma$.

On a déjà vu plus haut comment obtenir la partie imaginaire du tenseur susceptibilité, élément essentiel s'il en est afin de pouvoir calculer l'absorption optique, sans interaction coulombienne, à partir de la polarisation interbande. Nonobstant, l'ajout des interactions de Coulomb est une (légère) épine dans le pied pour obtenir de manière similaire l'absorption optique.

2.2.2 Équation aux valeurs propres pour l'exciton "topologique"

Nous allons dans cette sous-section utiliser une méthode, parmi d'autres, afin d'obtenir une expression pour la polarisation interbande à partir de l'équation (2.39). Il suffit de décomposer la polarisation interbande sur une base orthonormée. Ceci est une méthode usuelle pour obtenir une valeur propre pour les paires électrons-trous comme dans [67]. On écrit

$$\delta\langle P_\tau(\mathbf{k}, \omega) \rangle = \sum_n a_{n,\tau}(\omega) \psi_{n\tau}(\mathbf{k}), \quad (2.47)$$

où les $a_{n,\tau}(\omega)$ représentent des coefficients de la base orthonormée qui ne dépendent que de la fréquence et $\psi_{n\tau}(\mathbf{k})$ représentent les vecteurs de la base. Dans notre cas, ces derniers sont des fonctions d'ondes de paires électrons-trous ne dépendant que de \mathbf{k} et de l'indice n (indice de vecteur propre). En remplaçant l'équation (2.47) dans l'équation (2.39), on trouve pour la partie indépendante de la fréquence que les fonctions d'ondes de l'équation (2.47)

obéissent à une équation de Wannier [67] dans l'espace des vecteurs d'ondes :

$$[\epsilon_{n\tau} - (\xi_{c\tau}(\mathbf{k}) - \xi_{v\tau}(\mathbf{k}))] \psi_{n\tau}(\mathbf{k}) = (f_{c\tau}(\mathbf{k}) - f_{v\tau}(\mathbf{k})) \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \psi_{n\tau}(\mathbf{k}'). \quad (2.48)$$

Cette équation définit les fonctions d'onde de paires électrons-trous ou excitons, avec $\epsilon_{n\tau}$ leur énergie associée. On peut la comprendre comme une équation de Schrödinger effective pour la paire électron-trou. L'avantage de cette méthode est d'obtenir une solution de l'équation homogène pour la polarisation interbande, que l'on peut insérer dans l'équation (2.47).

Si le terme d'interaction coulombienne est nul dans le hamiltonien, alors l'équation devient

$$[\epsilon_{n\tau} - (E_{c\tau\mathbf{k}} - E_{v\tau\mathbf{k}})] \psi_{n\tau} = 0, \quad (2.49)$$

ce qui nous dit que soit $\psi_{n\tau}$ est nul (donc la polarisation interbande aussi), ce qui n'est pas la chose la plus intéressante ici, soit $\epsilon_{n\tau} = E_{c\tau\mathbf{k}} - E_{v\tau\mathbf{k}}$, ce qui nous dit que l'énergie associée aux fonctions d'ondes est celle associée à la fréquence d'absorption optique.

En présence du terme d'interaction coulombienne, l'énergie des paires électrons trous est abaissée par l'attraction entre l'électron et le trou. Cette attraction peut donner lieu à un état lié, appelé exciton. Pour que ce dernier soit bien défini, il faut en général une bande interdite entre la bande de conduction et de valence, ce qui garantit que le niveau ayant la plus grande énergie de liaison ne soit pas mélangé ou hybridé avec les états de la bande de conduction [67,70]. Dans notre cas, il n'y a pas de gap entre les deux bandes à proprement parler mais un gap optique. Ce dernier représente une plage en fréquence où il n'est pas possible d'exciter des électrons de la bande de valence à la bande de conduction étant donné que sur cette plage, ces deux dernières sont soit vides, soit occupées. Nous verrons que cela a des conséquences pour la définition de l'exciton, notamment dans l'annexe A. On peut se poser la question si l'exciton est différent pour un noeud τ de chiralité positive et pour un noeud τ' de chiralité négative. Si on suppose que le spectre optique autour d'un noeud de Weyl est identique pour deux chiralités opposées en absence d'interaction coulombienne, seuls les éléments de matrice de l'équation (2.42) contribuent. Nous allons également faire l'approximation que $\mathbf{k} \simeq \mathbf{k}'$, toujours pour la raison que $V_{sc}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ est important dans cette

limite, et faire un développement limité au premier ordre autour de \mathbf{k} .

$$\langle \mathbf{k}c\tau | \mathbf{k}'c\tau \rangle = \cos\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}'\tau}}{2}\right) + e^{i(\varphi_{\mathbf{k}\tau} - \varphi_{\mathbf{k}'\tau})} \sin\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}'\tau}}{2}\right) \quad (2.50)$$

$$\simeq \cos\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right) + (1 + i\delta\varphi_\tau) \sin\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right) \quad (2.51)$$

$$\simeq 1 + i\delta\varphi_\tau \sin^2\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right) \quad (2.52)$$

$$\simeq \exp\left(i\delta\varphi_\tau \sin^2\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right)\right), \quad (2.53)$$

où $\delta\varphi_\tau = \varphi_{\mathbf{k}\tau} - \varphi_{\mathbf{k}'\tau}$. De manière similaire on trouve

$$\langle \mathbf{k}'v\tau | \mathbf{k}v\tau \rangle \simeq \exp\left(-i\delta\varphi_\tau \cos^2\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}\tau}}{2}\right)\right), \quad (2.54)$$

ce qui implique

$$\langle \mathbf{k}c\tau | \mathbf{k}'c\tau \rangle \langle \mathbf{k}'v\tau | \mathbf{k}v\tau \rangle \simeq \exp(-i\delta\varphi_\tau \cos\theta_{\mathbf{k}\tau}). \quad (2.55)$$

On peut reconnaître

$$\exp(-i\delta\varphi_\tau \cos\theta_\tau) = \exp(-i \cos\theta_\tau \nabla_{\mathbf{d}} \varphi_\tau \cdot \delta\mathbf{d}_\tau), \quad (2.56)$$

où on rappelle que \mathbf{d}_τ est défini par $h_\tau(\mathbf{k}) \equiv \mathbf{d}_\tau(\mathbf{k}) \cdot \sigma$ et $\nabla_{\mathbf{d}}$ est l'opérateur gradient par rapport au vecteur \mathbf{d}_τ , en coordonnées sphériques. En effet, il se trouve que l'on peut écrire

$$\nabla_{\mathbf{d}} = \hat{\mathbf{d}} \frac{\partial}{\partial d} + \frac{1}{|\mathbf{d}_\tau|} \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{|\mathbf{d}_\tau| \sin\theta} \hat{\boldsymbol{\varphi}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (2.57)$$

$$\delta\mathbf{d}_\tau \equiv \mathbf{d}_\tau(\mathbf{k}') - \mathbf{d}_\tau(\mathbf{k}) = \delta|\mathbf{d}_\tau| \hat{\mathbf{d}} + |\mathbf{d}_\tau| \sin\theta \delta\varphi \hat{\boldsymbol{\varphi}} + |\mathbf{d}_\tau| \delta\theta \hat{\boldsymbol{\theta}} \quad (2.58)$$

$$\nabla_{\mathbf{d}} \varphi_\tau \cdot \delta\mathbf{d}_\tau = \frac{1}{|\mathbf{d}_\tau| \sin\theta} |\mathbf{d}_\tau| \sin\theta \delta\varphi = \delta\varphi, \quad (2.59)$$

où nous avons largement omis les indices \mathbf{k} ainsi que τ sur les coordonnées angulaires pour plus de lisibilité. Il convient ensuite de noter que

$$\cos\theta \nabla_{\mathbf{d}} \varphi_\tau = \frac{1}{|\mathbf{d}_\tau|} \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \hat{\boldsymbol{\varphi}} = \mathbf{A}_{\text{Sch}} = \mathbf{A}_c - \mathbf{A}_v \quad (2.60)$$

$$\mathbf{A}_{\text{Sch}} \equiv -\frac{g}{|\mathbf{d}|} \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \hat{\boldsymbol{\varphi}}, \quad (2.61)$$

où nous avons donné la définition générale de \mathbf{A}_{Sch} qui est le potentiel de Schwinger [71]. Ce dernier représente le potentiel vecteur créé par un monopole magnétique avec une singularité pour $\theta = 0$ et π , et g la charge du monopole magnétique entouré par une surface fermée. Dans

le cas du semimétal de Weyl, la charge du monopole magnétique est donnée directement par la chiralité du noeud de Weyl en question. Il convient également de définir les connexions de Berry pour les bandes, qui sont ici un peu spéciales $\mathbf{A}_{c(v)} \equiv i\langle \mathbf{k}c(v)\tau | \nabla_{\mathbf{d}} | \mathbf{k}c(v)\tau \rangle^2$ étant donné que l'opérateur gradient est pris par rapport au vecteur \mathbf{d} et non \mathbf{k} . Ceci sera plus explicite ensuite pour un semimétal de Weyl avec une dispersion avec des termes non linéaires dans ce cas, le système de coordonnées sphériques n'est plus naturel pour \mathbf{k} , cependant, il le restera toujours pour \mathbf{d} .

Pour finir, cela nous donne donc

$$\langle \mathbf{k}c\tau | \mathbf{k}'c\tau \rangle \langle \mathbf{k}'v\tau | \mathbf{k}v\tau \rangle \simeq \exp(-i\mathbf{A}_{\text{Sch},\tau} \cdot \delta\mathbf{d}_{\tau}), \quad (2.62)$$

ce qui relie directement les éléments de matrices de matrice de l'interaction de Coulomb pour $\mathbf{k} \simeq \mathbf{k}'$ à une quantité topologique qui est le potentiel de Schwinger, et dans notre cas, qui correspond à la connexion de Berry en bande de conduction moins la connexion de Berry en bande de valence, ce qui correspond à une connexion de Berry jointe entre l'électron et le trou. On sait qu'à chaque connexion de Berry, on peut y associer sa courbure. On définit alors une courbure de Berry jointe pour la paire électron-trou

$$\Omega_{\text{Sch}} = \nabla_{\mathbf{d}} \times \mathbf{A}_{\text{Sch}} = -\mathbf{d}_{\tau} / d_{\tau}^3. \quad (2.63)$$

Cette courbure de Berry jointe est intimement liée au facteur $\cos \theta_{\mathbf{k}\tau}$ qui est équivalent à l'intégrale de la connexion de Berry jointe sur une sphère entourant un noeud de Weyl (c.f. figure 2.2).

Dans un isolant topologique bidimensionnel, le facteur $\cos \theta$ est défini par $\cos \theta \equiv \Delta / |\mathbf{d}(\mathbf{k})|$ où Δ représente le gap entre bande de conduction et valence. Autour de $\mathbf{k} = 0$, la courbure de Berry est maximale [29], et on obtient $\cos \theta = \pm 1$ où le signe dépend du signe de la courbure de Berry. Dans les systèmes bidimensionnels, la courbure de Berry est toujours perpendiculaire au plan, et donc un signe positif ou négatif correspond aux deux configurations possibles pour cette courbure. En reprenant l'équation (2.55), cela implique un déplacement du moment angulaire azimutal des excitons par un facteur $\exp(\pm i\delta\varphi)$. On verra dans la sous-section suivante qu'un tel facteur dans les éléments de matrice de l'interaction coulombienne (c.f. 2.55) a pour conséquence de déplacer de ± 1 le moment angulaire correspondant à la plus grande énergie de liaison pour la paire électron-trou et donc donne lieu à des excitons chiraux dans les systèmes 2D [28, 29].

En revanche, pour un noeud de Weyl avec une dispersion *parfaitement* linéaire, l'intégrale

2. On peut l'écrire aussi $\mathbf{A}_{c(v)} \equiv i\langle \mathbf{d} + (-)\tau | \nabla_{\mathbf{d}} | \mathbf{d} + (-)\tau \rangle$.

angulaire du dernier terme du potentiel coulombien (qui contient $\cos \theta$) dans l'équation (2.42) est nulle. Ceci implique une absence d'excitons chiraux. Nous verrons que l'on peut relier cette absence d'excitons chiraux à la présence d'une symétrie effective à basse énergie pour un noeud de Weyl linéaire et symétrique par rapport à $\mathbf{k} = 0$, c'est à dire sans inclinaison du cône. Une manière équivalente d'approcher le problème que l'on choisira par la suite est de dire que l'intégrale de la courbure de Berry sur une sphère d'énergie constante est nulle (étant donné que l'intégrale sur l'hémisphère supérieure et inférieure s'annulent), ce qui est indiqué sur la figure 2.2. Cet argument sera également discuté dans l'annexe A.

Une des questions fondamentales que nous avons posé est comment la courbure de Berry et les interactions coulombiennes ensemble peuvent impacter l'absorption optique dans les semimétaux de Weyl. Une façon de faire pour que $\langle \cos \theta_{\mathbf{k}\tau} \rangle_{\epsilon_F}$ soit différente de zéro est de considérer une surface de Fermi non sphérique ou asymétrique par rapport à $\mathbf{k} = 0$. Nous allons donc voir qu'ajouter des termes quadratiques "perturbatifs" dans la dispersion électronique est une manière de parvenir à ce résultat.

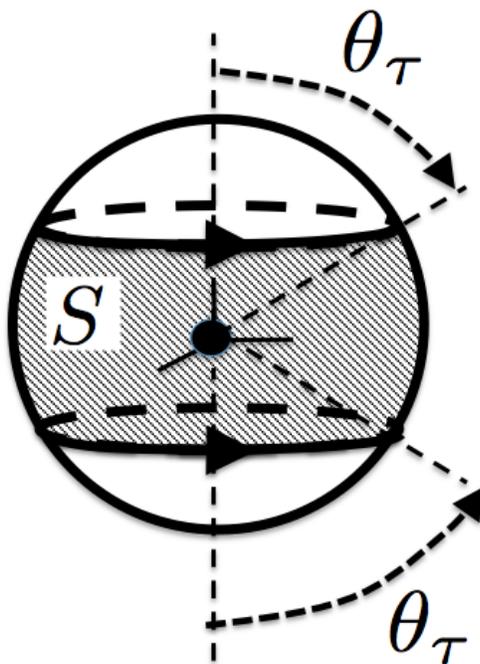


FIGURE 2.1 Représentation schématique d'une sphère dans la base de \mathbf{d} (différente de \mathbf{k}), centrée autour d'un noeud de Weyl τ . Le facteur $\cos \theta_{\mathbf{k}\tau}$ (ou $\cos \theta_\tau$) peut, entre autres, être interprété comme le flux de la courbure de Berry jointe à travers la surface hachurée S , dans ce cas $\cos \theta_\tau = -(1/4\pi) \int_S \boldsymbol{\Omega}_{\text{Sch}} \cdot d\mathbf{S}$. Le flux est positif pour l'hémisphère supérieure et négatif pour l'hémisphère inférieure.

2.2.3 Application aux semimétaux de Weyl brisant la symétrie anti-unitaire à basse énergie : termes non-linéaires dans la dispersion

Jusqu'ici notre formalisme est général pour n'importe quel type de modèle à deux bandes avec un nombre arbitraire de degré de liberté de vallée. Nous allons donc l'appliquer à un semimétal de Weyl avec des termes non linéaires dans la dispersion, et nous verrons que ce modèle brise une symétrie effective à basse énergie : la symétrie de renversement du temps *autour* d'un noeud de Weyl. Nous écrivons une version revisitée de notre modèle jouet préféré à basse énergie [66,72] pour le noeud $\tau = 1$

$$d_x(\mathbf{k}) = \hbar v k_x (1 + \alpha k_z) \quad (2.64)$$

$$d_y(\mathbf{k}) = \hbar v k_y (1 + \alpha k_z) \quad (2.65)$$

$$d_z(\mathbf{k}) = \hbar v_z k_z + \beta (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad (2.66)$$

où v est la vitesse de Fermi dans la direction x et y , v_z celle dans la direction z qui peut être différente. Ici, α et β sont nos paramètres qui permettent une non linéarité de la dispersion. Ces derniers ont une dimension différente, α est homogène à une longueur et β à une énergie fois une longueur au carré ($E \cdot L^2$). Physiquement, ces termes représentent le fait que deux noeuds de Weyl appartiennent à la même bande et indiquent à basse énergie la courbure de bande de la dispersion à mesure que l'on s'éloigne de $\mathbf{k} = 0$. Un noeud de Weyl n'est jamais parfaitement isolé et les termes non linéaires indiquent dans la structure de bande la présence d'un partenaire ailleurs dans l'espace réciproque [72].

Un oeil affûté observera que notre modèle possède une symétrie cylindrique pour \mathbf{k} , cela nous permet d'écrire le vecteur d'onde $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$ et $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$. Le but principal d'une telle symétrie à basse énergie est de simplifier le calcul afin de pouvoir considérer le moment angulaire m comme un bon nombre quantique. Il nous faut également garder à l'esprit que nous prenons un cutoff ultraviolet Λ pour notre modèle. Dans ce cas, il est nécessaire d'imposer des conditions sur l'amplitude de α et β que nous expliciterons ensuite. Parce que les termes non-linéaires dans la dispersion impliquent que cette dernière n'est plus symétrique autour de $k = 0$, le cutoff que nous imposons en énergie, qui doit être grand devant ϵ_F , implique un cutoff asymétrique pour le vecteur d'onde.

Les noeuds de Weyl apparaissent toujours par paire de chiralités opposées comme nous le savons désormais. Nous allons ici utiliser le modèle présenté dans la section (1.1) pour appliquer les différentes opérations de symétries afin de trouver le hamiltonien à basse énergie autour de chaque noeud de Weyl. Nous considérons toujours la présence d'au moins un plan de miroir dans notre modèle et la présence d'un centre d'inversion ou d'un point

dans l'espace réciproque invariant par renversement du temps. La plupart des matériaux non-centrosymétriques contenant de noeud de Weyl à basse énergie possèdent des plans de symétrie miroir [18], on fait alors le choix d'inclure ces derniers dans notre modèle minimal. De manière générale, nous savons comment le spin (ou le moment angulaire de manière générale), se transforme sous ces différentes symétries.

Notons le "vrai" spin $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$ où \mathbf{s} est directement relié aux matrices de Pauli, ce qui implique que \mathbf{s} possède les mêmes règles d'anticommutation que ces dernières. Un miroir perpendiculaire à l'axe z implique que l'on peut écrire l'opérateur miroir (*uniquement* dans le sous espace du spin) $\mathcal{M} = is_z$. Ceci implique que la composante du spin perpendiculaire au plan du miroir reste inchangée (ici s_z), contrairement à celles parallèles (s_x et s_y) qui changent de signe. La symétrie par renversement du temps change également le signe d'un moment angulaire ou d'un spin, on peut alors écrire l'opérateur de renversement du temps dans le sous espace de spin $\mathcal{T} = is_y K$ où K est l'opérateur de conjugaison complexe. On remarque immédiatement que toutes les composantes du spin changent de signe sous une telle opération. D'une manière encore plus triviale, la symétrie d'inversion spatiale agit comme l'identité dans le sous espace des spins.

Cependant, les matrices σ apparaissant dans le hamiltonien à deux bandes à basse énergie $h_\tau(\mathbf{k}) = \mathbf{d}_\tau(\mathbf{k}) \cdot \sigma$ ne caractérisent pas le vrai spin, en raison du couplage spin-orbite qui mélangent les différentes composantes de \mathbf{s} [73]. On écrit alors $\sigma_i = \sum_{ij} a_{ij} s_j$ où $i, j \in \{x, y, z\}$ avec a_{ij} des coefficients réels. On remarque alors que σ se transforme comme \mathbf{s} sous symétrie par renversement du temps étant donné que les coefficients a_{ij} sont réels. En revanche, ce n'est pas le cas pour la symétrie miroir qui change uniquement les composantes du spin parallèle au plan du miroir. Dans ce cas, σ ne se transforme pas comme \mathbf{s} . Toutefois, nous allons considérer à partir de maintenant que σ se transforme comme \mathbf{s} , par commodité quant à notre modèle. Nous verrons par la suite que c'est surtout la symétrie par renversement du temps qui est cruciale dans notre étude, cette approximation n'ayant donc qu'un impact limité sur les résultats.

À présent armés de notre connaissance des opérations de symétrie dans le sous-espace σ , nous pouvons écrire les différents opérateurs de symétrie dans l'espace de Hilbert complet à basse énergie

$$\mathcal{M} = i\sigma_z \otimes (k_z \rightarrow -k_z) \quad (2.67)$$

$$\mathcal{T} = i\sigma_y K \otimes (\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}) \quad (2.68)$$

$$\mathcal{P} = \mathbb{1} \otimes (\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}). \quad (2.69)$$

TABLE 2.1 Hamiltoniens à basse énergie pour les quatre noeuds de Weyl de notre modèle pour un semimétal de Weyl avec symétrie par renversement du temps. Les noeuds indexés par $\tau = 1$ et 2 sont reliés par un miroir perpendiculaire à z . Les noeuds $\tau = 3$ et 4 sont les partenaires par renversement du temps des noeuds 1 et 2, respectivement.

Noeuds	$\tau = 1$	$\tau = 2$	$\tau = 3$	$\tau = 4$
$d_{\tau,x}(\mathbf{k})$	$vk_x(1 + \alpha k_z)$	$-vk_x(1 - \alpha k_z)$	$vk_x(1 - \alpha k_z)$	$-vk_x(1 + \alpha k_z)$
$d_{\tau,y}(\mathbf{k})$	$vk_y(1 + \alpha k_z)$	$-vk_y(1 - \alpha k_z)$	$vk_y(1 - \alpha k_z)$	$-vk_y(1 + \alpha k_z)$
$d_{\tau,z}(\mathbf{k})$	$v_z k_z + \beta(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$	$-v_z k_z + \beta(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$	$v_z k_z - \beta(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$	$-v_z k_z - \beta(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$

TABLE 2.2 Hamiltoniens à basse énergie pour les quatre noeuds de Weyl de notre modèle pour un semimétal de Weyl avec un centre d'inversion spatial. Les noeuds indexés par $\tau = 1$ et 2 sont reliés par un miroir perpendiculaire à z . Les noeuds $\tau = 3$ et 4 sont les partenaires par inversion spatiale des noeuds 1 et 2, respectivement.

Noeuds	$\tau = 1$	$\tau = 2$	$\tau = 3$	$\tau = 4$
$d_{\tau,x}(\mathbf{k})$	$vk_x(1 + \alpha k_z)$	$-vk_x(1 - \alpha k_z)$	$-vk_x(1 - \alpha k_z)$	$vk_x(1 + \alpha k_z)$
$d_{\tau,y}(\mathbf{k})$	$vk_y(1 + \alpha k_z)$	$-vk_y(1 - \alpha k_z)$	$-vk_y(1 - \alpha k_z)$	$vk_y(1 + \alpha k_z)$
$d_{\tau,z}(\mathbf{k})$	$v_z k_z + \beta(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$	$-v_z k_z + \beta(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$	$-v_z k_z + \beta(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$	$v_z k_z + \beta(k_{\parallel}^2 - 2k_z^2)$

Cela nous permet alors d'obtenir les hamiltoniens à basse énergie correspondant aux trois noeuds restant en utilisant ces opérations de symétrie :

$$h_2(\mathcal{M}\mathbf{k}) = \mathcal{M}^{-1}h_1(\mathbf{k})\mathcal{M} \quad (2.70)$$

$$h_3(\mathcal{T}\mathbf{k}) = \mathcal{T}^{-1}h_1(\mathbf{k})\mathcal{T} \quad (2.71)$$

$$h_4(\mathcal{MT}\mathbf{k}) = (\mathcal{MT})^{-1}h_1(\mathbf{k})(\mathcal{MT}). \quad (2.72)$$

On précise que l'opération $\mathcal{M}\mathbf{k}$ n'agit que sur le sous espace \mathbf{k} et que l'opération $\mathcal{M}^{-1}h_1(\mathbf{k})\mathcal{M}$ n'agit que sur le sous espace σ , c'est à dire en utilisant $\mathcal{M} = i\sigma_z$. La même convention s'applique pour les opérations de symétrie \mathcal{T} et \mathcal{P} . Ces transformations de symétries peuvent être résumées par des transformations du vecteur $\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})$ pour chacun des noeuds (en laissant σ inchangé). Ces résultats sont regroupés dans le tableau (2.1).

Maintenant que nous avons le hamiltonien à basse énergie, donc les énergies propres et les fonctions d'onde, autour de chaque noeud de Weyl, avec notre modèle contenant des termes quadratiques, nous pouvons trouver l'expression de la susceptibilité dans le cadre

de ce modèle. Comme énoncé auparavant, notre modèle possède une symétrie cylindrique autour de l'axe k_z , ce qui nous permet de décomposer la polarisation interbande en canaux de moment angulaire

$$\delta\langle P_\tau(\mathbf{k}, \omega) \rangle = \sum_m e^{im\varphi} \delta\langle P_{m\tau}(k_\parallel, k_z, \omega) \rangle, \quad (2.73)$$

avec m le moment angulaire azimutal, φ l'angle azimutal du vecteur \mathbf{k} et on a la relation $\int_0^{2\pi} d\varphi / (2\pi) e^{i(m-m')\varphi} = \delta_{m,m'}$. En utilisant cette propriété dans l'équation (2.39), en multipliant par $\exp(-im'\varphi)$ puis en intégrant sur φ , on obtient

$$\begin{aligned} & [\omega + i\delta - (\xi_{c\tau}(k_\parallel, k_z) - \xi_{v\tau}(k_\parallel, k_z))] \delta\langle P_{m\tau}(k_\parallel, k_z, \omega) \rangle \\ &= \Delta f_\tau(\mathbf{k}) \left[\boldsymbol{\mathcal{E}}(\omega) \cdot \mathbf{d}_{m\tau}^{vc}(k_\parallel, k_z) + \int_{k'_\parallel, k'_z} V_{m\tau}(k_\parallel, k_z; k'_\parallel, k'_z) \delta\langle P_{m\tau}(k'_\parallel, k'_z, \omega) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.74)$$

L'interaction coulombienne pour le canal de moment angulaire m s'écrit :

$$\begin{aligned} V_{m\tau}(k_\parallel, k_z; k'_\parallel, k'_z) &= \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{-im\phi} \\ &\times \frac{\sin\theta \sin\theta' + (1 + \cos\theta \cos\theta') \cos\phi + i(\cos\theta + \cos\theta') \sin\phi}{k_\parallel^2 + k'_\parallel{}^2 - 2k_\parallel k'_\parallel \cos\phi + (k_z - k'_z)^2 + q_{\text{TF}}^2}, \end{aligned} \quad (2.75)$$

où on rappelle que $\theta \equiv \theta_{\mathbf{k}\tau}$ et $\phi \equiv \varphi - \varphi' = \varphi_{\mathbf{k}\tau} - \varphi'_{\mathbf{k}\tau}$. On définit la transformée de Fourier de l'élément de matrice du dipôle interbande

$$\mathbf{d}_{m\tau}^{vc}(k_\parallel, k_z) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} e^{-im\varphi} \mathbf{d}_\tau^{vc}(\mathbf{k}). \quad (2.76)$$

Cette transformation se comprend comme une projection sur le canal m de moment angulaire de l'élément de matrice du dipôle interbande. Il nous reste toutefois à définir deux quantités de l'équation (2.74)

$$\Delta f_\tau(\mathbf{k}) \equiv f_{c\tau}(k_\parallel, k_z) - f_{v\tau}(k_\parallel, k_z) \quad (2.77)$$

$$\int_{k_\parallel, k_z} \equiv \int \frac{dk_z}{2\pi} \int \frac{k_\parallel dk_\parallel}{2\pi} \Theta(\Lambda - |d_\tau(k_\parallel, k_z)|), \quad (2.78)$$

qui simplifient l'écriture, avec $\Theta(x)$ la fonction de Heaviside, qui impose le cutoff sur les vecteurs d'onde. La stratégie ici est similaire à celle de l'équation (2.47), c'est-à-dire de décomposer la polarisation interbande sur une base

$$\delta\langle P_{m\tau}(k_\parallel, k_z, \omega) \rangle = \sum_n a_{nm\tau}(\omega) \psi_{nm\tau}(k_\parallel, k_z), \quad (2.79)$$

avec $a_{nm\tau}$ les coefficients de décomposition sur la base des vecteurs $\psi_{nm\tau}$. Puisque m est un bon nombre quantique en raison de la symétrie cylindrique de notre hamiltonien, les coefficients et les fonctions d'ondes sont indexés par ce dernier. De manière semblable à la dérivation de la sous section 2.2.2, les fonctions d'ondes obéissent à une équation de Wannier :

$$[\epsilon_{nm\tau} - (\xi_{c\tau}(\mathbf{k}) - \xi_{v\tau}(\mathbf{k}))] \psi_{nm\tau}(k_{\parallel}, k_z) = \Delta f_{\tau}(\mathbf{k}) \int_{k'_{\parallel}, k'_z} V_m(k_{\parallel}, k_z; k'_{\parallel}, k'_z) \psi_{nm\tau}(k'_{\parallel}, k'_z). \quad (2.80)$$

Il se trouve que le terme d'interaction coulombienne est purement réel pour des raisons de parité des termes imaginaires qui apparaissent dans l'équation (2.75) sur l'intervalle $[0, 2\pi]$. Cela implique que les énergies propres $\epsilon_{nm\tau}$ ainsi que les vecteurs propres $\psi_{nm\tau}$ sont réels également.

Il nous faut garder en tête que notre objectif est de calculer l'absorption optique pour chaque noeud, qui est relié à la partie imaginaire du tenseur de susceptibilité. La stratégie à suivre n'est pas propre au cas non-linéaire mais est tout à fait générale au cas du modèle à deux bandes, comme montré dans la référence [67]. Nous l'appliquerons ici au cas désiré (le lecteur devinera que l'on obtient le cas linéaire usuel du semimétal de Weyl en posant $\alpha = \beta = 0$), c'est-à-dire en utilisant comme point de départ l'équation (2.79). Il faut tout d'abord insérer cette dernière équation dans l'équation (2.74) pour avoir une expression des coefficients $a_{nm\tau}(\omega)$ en utilisant l'orthonormalité des fonctions d'ondes $\psi_{nm\tau}$, soit

$$\int_{k_{\parallel}, k_z} \psi_{nm\tau}(k_{\parallel}, k_z) \psi_{n'm\tau}^*(k_{\parallel}, k_z) = \delta_{n,n'}. \quad (2.81)$$

Enfin, on prend l'équation pour les coefficients que l'on réinsère dans l'équation (2.79) pour avoir une équation pour la polarisation interbande. Il suffit ensuite d'écrire la transformée de Fourier de l'équation (2.16) pour avoir la polarisation interbande totale. Écrivons ici les étapes principales de ce raisonnement :

$$\sum_n \left[(\omega + i\delta - (\xi_{c\tau}(k_{\parallel}, k_z) - \xi_{v\tau}(k_{\parallel}, k_z))) \psi_{nm\tau}(k_{\parallel}, k_z) - \Delta f_{\tau}(\mathbf{k}) \int_{k'_{\parallel}, k'_z} V_{m\tau}(k_{\parallel}, k_z; k'_{\parallel}, k'_z) \psi_{nm\tau}(k'_{\parallel}, k'_z) \right] \times a_{nm\tau}(\omega) = \Delta f_{\tau}(\mathbf{k}) \mathcal{E}(\omega) \cdot \mathbf{d}_{m\tau}^{vc}(k_{\parallel}, k_z), \quad (2.82)$$

et en utilisant (2.80), ce qui conduit à

$$\sum_n [(\omega + i\delta - \epsilon_{nm\tau}) \psi_{nm\tau}(k_{\parallel}, k_z)] a_{nm\tau}(\omega) = \Delta f_{\tau}(\mathbf{k}) \mathcal{E}(\omega) \cdot \mathbf{d}_{m\tau}^{vc}(k_{\parallel}, k_z). \quad (2.83)$$

Il suffit de multiplier l'équation (2.83) par $\psi_{n'm\tau}^*(k_{\parallel}, k_z)$ et d'intégrer sur k_{\parallel} et k_z pour trouver

les coefficients

$$a_{nm\tau}(\omega) = \frac{1}{\omega + i\delta - \epsilon_{nm\tau}} \int_{k'_{\parallel}, k'_z} \Delta f_{\tau}(\mathbf{k}') \mathcal{E}(\omega) \cdot \mathbf{d}_{m\tau}^{vc}(k'_{\parallel}, k'_z) \psi_{nm\tau}(k'_{\parallel}, k'_z). \quad (2.84)$$

Finalement on obtient la polarisation interbande

$$\delta \langle P_{m\tau}(k_{\parallel}, k_z, \omega) \rangle = \frac{\psi_{nm\tau}(k_{\parallel}, k_z)}{\omega + i\delta - \epsilon_{nm\tau}} \int_{k'_{\parallel}, k'_z} \Delta f_{\tau}(\mathbf{k}') \mathcal{E}(\omega) \cdot \mathbf{d}_{m\tau}^{vc}(k'_{\parallel}, k'_z) \psi_{nm\tau}(k'_{\parallel}, k'_z). \quad (2.85)$$

Ce qui nous permet d'obtenir la polarisation macroscopique résolue en noeud d'après l'équation (2.16)

$$\mathbf{P}_{\tau}(\omega) = \sum_{nm} \int_{k_{\parallel}, k_z} \mathbf{d}_{m\tau}^{vc*}(k_{\parallel}, k_z) \frac{\psi_{nm\tau}(k_{\parallel}, k_z)}{\omega + i\delta - \epsilon_{nm\tau}} \int_{k'_{\parallel}, k'_z} \Delta f_{\tau}(\mathbf{k}') \mathcal{E}(\omega) \cdot \mathbf{d}_{m\tau}^{vc}(k'_{\parallel}, k'_z) \psi_{nm\tau}(k'_{\parallel}, k'_z) + \text{c.c.}, \quad (2.86)$$

sachant que la polarisation macroscopique *totale* s'écrit comme la somme sur tous les noeuds de Weyl que l'on considère. Bien que notre modèle possède quatre noeuds, on voit que l'on peut le généraliser à un nombre arbitraire de noeuds si tant est que l'on possède le hamiltonien à basse énergie ainsi que les symétries reliant les divers noeuds. Nous savons que l'on a $\mathbf{P}_{\tau}(\omega) = \chi_{\tau}(\omega) \cdot \mathcal{E}(\omega)$, on peut alors identifier tous les éléments du tenseur susceptibilité à partir de l'équation précédente, ce dernier ayant la structure

$$\chi_{\tau} = \begin{pmatrix} \chi_{\tau,xx} & \chi_{\tau,xy} & 0 \\ -\chi_{\tau,xy} & \chi_{\tau,xx} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{\tau,zz} \end{pmatrix}, \quad (2.87)$$

qui est diagonale par blocs. On peut diagonaliser ce tenseur sur la base correspondant à une lumière circulairement polarisée droite et gauche. Nous savons que pour obtenir l'absorption optique, nous n'avons besoin que de la partie imaginaire de ce tenseur. Nous allons nous concentrer sur cette dernière uniquement à partir de maintenant. La diagonalisation des éléments du premier bloc du tenseur susceptibilité conduit à

$$\chi''_{\tau,\pm} = \chi_{\tau,xx} \pm i\chi_{\tau,xy}. \quad (2.88)$$

De surcroît, nous savons que la partie imaginaire du tenseur va donner un delta de Dirac $\delta(\omega - \epsilon_{nm\tau})$ pour le premier terme de l'équation (2.86) et $\delta(\omega + \epsilon_{nm\tau})$ pour le complexe conjugué (en raison de la relation $\mathcal{E}^*(\omega) = \mathcal{E}(-\omega)$). Le complexe conjugué correspondant à l'émission d'un photon ($\omega < 0$), on choisit de ne plus s'en préoccuper. Pour connaître

l'absorption optique sous irradiation de lumière circulairement polarisée autour d'un noeud de Weyl, on écrit alors les éléments de la partie imaginaire du tenseur (diagonal), pour le noeud $\tau = 1$:

$$\begin{aligned} \chi''_{\tau=1,\pm} = & -\frac{\pi e^2}{16} \sum_n \delta(\omega - \epsilon_{n,m=\pm 1,1}) \int_{k_{\parallel}, k_z} [v(1 + \alpha k_z)(1 \pm \cos \theta_1) \mp 2\beta k_{\parallel} \sin \theta_1] \frac{\psi_{n,m=\pm 1,1}(k_{\parallel}, k_z)}{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|} \\ & \times \int_{k'_{\parallel}, k'_z} \Delta f(\mathbf{k}') [v(1 + \alpha k'_z)(1 \pm \cos \theta'_1) \mp 2\beta k'_{\parallel} \sin \theta'_1] \frac{\psi_{n,m=\pm 1,1}(k'_{\parallel}, k'_z)}{|\mathbf{d}(\mathbf{k}')|}. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Cette même quantité pour les différents noeuds de notre modèle peut être obtenue en utilisant les différentes valeurs des composantes du vecteur $\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})$ à partir du tableau 2.1 dans le cas d'un semimétal respectant la symétrie de renversement du temps et le tableau 2.2 pour un semimétal respectant la symétrie d'inversion spatiale.

Un point qui mérite d'être souligné est qu'une lumière RCP ou LCP excite uniquement les paires électrons-trous de moment angulaire $m = +1$ et -1 respectivement. Dans notre cas, la différence d'absorption entre ces deux polarisations lumineuses est directement reliée à la différence $V_{m\tau} - V_{-m\tau}$, ce que l'on remarque avec l'équation (2.75), et également schématisé avec la figure 2.2. Nous complétons que l'élément du tenseur $\chi_{\tau,zz}$ n'est pas activé par une lumière circulairement polarisée droite ou gauche, nous ferons donc le choix ci-après de le négliger. Ce dernier implique uniquement le moment angulaire azimutal $m = 0$ et ne conduit pas à un effet conjoint de la courbure de Berry et des interactions de Coulomb.

Avant d'étudier en détail l'absorption optique, il nous faut expliquer en quoi l'absorption optique interbande est différente des autres réponses impliquant des quantités topologiques dans les semimétaux de Weyl. La plupart des effets topologiques dans ces matériaux observables par le biais de réponses optiques sont des réponses non linéaires, se produisant au deuxième ordre en champ électrique externe. La courbure de Berry est connue pour donner lieu à des réponses anormales au second ordre en champ électrique externe [74, 75]. Les noeuds de Weyl étant des monopoles de la courbures de Berry, des quantités comme la génération de seconde harmonique, l'effet photogalvanique circulaire (dont on discutera au chapitre 4) ou le courant de "shift" (shift current) sont spéciales dans les semimétaux de Weyl [75–77]. Dans un formalisme semiclassique, cela se remarque par une vitesse anormale ainsi qu'une aimantation orbitale qui sont fonctions de la courbure de Berry [78].

Tous ces effets sont des manifestations indirectes de la chiralité des noeuds de Weyl. Cependant, plusieurs propositions ont été faites afin d'accéder directement à la chiralité des noeuds de Weyl. On peut citer le cas d'un effet Hall anormal induit par des photons

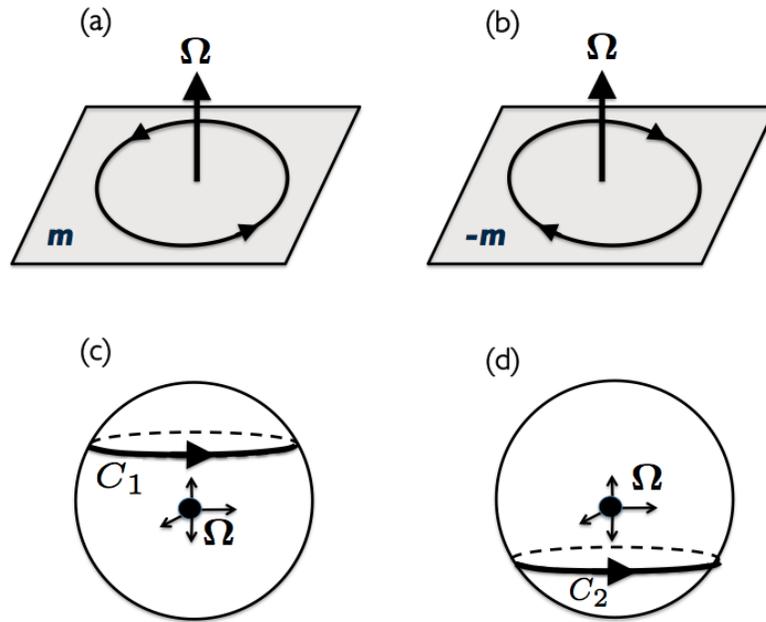


FIGURE 2.2 Figures (a) et (b) : Orbites d'excitons (2D) dans l'espace des vecteurs d'onde pour une surface d'isolant topologique 3D. La figure (a) correspond à un exciton avec un moment angulaire m autour de l'axe perpendiculaire à la surface. La figure (b) représente un exciton avec un moment angulaire $-m$. La courbure de Berry, ici notée Ω , est perpendiculaire au plan de la surface et approximativement constante à travers l'orbite de l'exciton [29]. Le flux de la courbure de Berry à travers l'orbite excitonique a un signe opposé pour les excitons de moment angulaire $\pm m$ (dans un cas, Ω est antialigné avec le moment angulaire et dans l'autre cas, aligné). Cette différence est responsable de la chiralité dans le spectre excitonique [28,31]. Figures (c) et (d) : Orbites d'excitons (3D) dans l'espace des vecteurs d'onde pour un semimétal de Weyl avec une dispersion parfaitement linéaire pour un noeud de chiralité $\chi = +1$. Dans ce cas, la sphère dénote une surface d'énergie constante. Les orbites C_1 et C_2 ont le même moment angulaire orbital, cependant le flux de la courbure de Berry à travers les deux orbites est opposé. Par conséquent, le flux de la courbure de Berry à travers une orbite excitonique de moment angulaire m se moyenne à zéro lorsque l'on somme les deux contributions. C'est la raison pour laquelle on n'observe pas de chiralité excitonique pour un semimétal de Weyl avec une dispersion parfaitement linéaire (c.f. figure (2.3)). Dans un semimétal de Weyl avec des termes non linéaires dans la dispersion, la surface d'énergie constante n'est plus sphérique et donc il existe un flux net de la courbure de Berry pour les orbites excitoniques de moment angulaire m .

circulairement polarisés [79] ainsi que par des mesures optiques de rayons X résonants résolus en polarisation [80]. Notre démarche dans ce chapitre est cependant différente. On cherche à établir un lien entre chiralité des fermions de Weyl et interaction électron-électron. Puis en s'aidant de ce lien, de contrôler l'absorption optique de chaque noeud de Weyl en fonction de la polarisation de la lumière, de façon similaire au cas bidimensionnel [28,29].

2.3 Absorption optique interbande pour un modèle minimal avec symétrie par renversement du temps

Dans cette section nous présenterons des résultats, majoritairement issus d'une résolution numérique de l'équation (2.89). Nous allons suivre ici l'approche de [28] afin de calculer les intégrales en moment de l'équation voulue. Cette approche se base sur une méthode de quadrature de Gauss-Legendre [81] de l'intégrale qui vise à donner plus de "poids" aux valeurs de l'intégrande dans le voisinage de $\mathbf{k} \sim \mathbf{k}'$. Tous les résultats présentés ici, sauf mention contraire, ont les paramètres suivants : on discrétise les intégrales en k_{\parallel} et en k_z avec une quadrature de Gauss-Legendre de $N = 82$ points. Le résultat reste inchangé si l'on augmente le nombre de points. Le delta de Dirac apparaissant dans (2.89) est remplacé dans le calcul numérique par une fonction gaussienne d'écart type $0.6|\epsilon_F|$, ce qui correspond approximativement à une lorentzienne de largeur à mi hauteur $0.8|\epsilon_F|$. Cela conduit un élargissement de la lorentzienne de plusieurs meV pour des valeurs d'énergie de Fermi typique dans les semimétaux de Weyl non-centrosymétriques (10 – 20 meV), ce qui correspond à des ordres de grandeurs existants [82,83]. À température nulle, la largeur de la fonction delta de Dirac se justifie par la diffusion des électrons sur les impuretés du cristal. Nous avons choisi une gaussienne pour une meilleure stabilité numérique de l'équation (2.89) par rapport à la lorentzienne. De plus nous choisissons $v = 2.5 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$, $v_z = 1.3v$, $\epsilon_{\infty} = 30$ (dans le cas comprenant des interactions uniquement, dans le cas sans interactions on a $\epsilon_{\infty} \rightarrow \infty$) et $\Lambda = 10|\epsilon_F|$. Notre modèle de semimétal de Weyl possède une symétrie particule-trou, donc peu importe si ϵ_F est positif ou négatif, c'est pourquoi c'est toujours la valeur absolue de ϵ_F qui apparaîtra.

2.3.1 Spectre optique pour un noeud de Weyl unique avec dispersion linéaire

Nous allons donc tout d'abord étudier l'absorption optique pour un noeud de Weyl isolé. L'absorption optique totale pourra être déterminée en faisant la somme des contributions de chaque noeud.

Pour un noeud de Weyl avec une dispersion parfaitement linéaire, les réponses optiques sous illumination de lumière circulairement polarisée droite (notée RCP) et gauche (notée LCP) sont identiques comme nous pouvons le voir avec la figure (2.3). Mathématiquement, la différence pour une réponse optique entre RCP et LCP est reliée au fait que le dernier terme dans l'équation (2.75) ne se moyenne pas à zéro lorsque l'on calcule l'intégrale. La présence de termes non linéaires nous préviennent d'une telle situation. Physiquement

cependant, cette différence est plus facile à saisir. La symétrie qui relie la lumière polarisée circulairement droite et gauche est la symétrie par renversement du temps, il se trouve en revanche qu'un noeud de Weyl isolé brise cette symétrie étant donné que son partenaire n'est pas présent. On devrait alors avoir une différence entre les spectres optiques de LCP et RCP. Il existe cependant une symétrie effective de renversement du temps à basse énergie autour de chaque noeud de Weyl isolé définie par :

$$h_{\tau}(-\mathbf{k}) = \mathcal{T}_{\text{eff.}}^{-1} h_{\tau}(\mathbf{k}) \mathcal{T}_{\text{eff.}}, \quad (2.90)$$

où $\mathcal{T}_{\text{eff.}} = i\sigma_y K \otimes (\delta\mathbf{k} \rightarrow -\delta\mathbf{k})$ ³ a la même expression que \mathcal{T} , défini dans l'équation 2.68, mais n'a pas la même signification physique. Évidemment, un noeud de Weyl avec une dispersion parfaitement linéaire sans inclinaison respecte cette symétrie car les bandes sont décrites par $E_{\pm} = \pm\hbar v_F |\mathbf{k}|$. Cependant, si l'on ajoute des termes non linéaires via le modèle de la section 2.2.3, alors cette condition de symétrie n'est plus respectée. Sous cette opération de symétrie, $m \rightarrow -m$ et donc la polarisation RCP \rightarrow LCP, par conséquent, ces deux spectres optiques sont identiques.

Cette situation est radicalement différente du cas bidimensionnel, où la différence entre spectre RCP et LCP est obtenue par une courbure de Berry définie dans la direction perpendiculaire au plan qui brise par nature la symétrie par renversement du temps [28,31]. Une manière de parvenir à un résultat similaire est d'inclure comme on l'a vu des termes non linéaires dans la dispersion électronique à basse énergie. Ces derniers ont pour conséquence mathématique une différence du terme $\cos\theta_{\tau} + \cos\theta'_{\tau}$ pour les deux polarisations de la lumière, comme indiqué sur la figure (2.4).

L'asymétrie entre réponses LCP et RCP, en négligeant l'effet de la self-énergie qui a essentiellement pour effet de renormaliser le gap optique, est gouverné par les termes sans dimensions $\alpha\omega/v$ et $\beta\omega/v^2$ en considérant $v \simeq v_z$. Avec cela, on comprend donc que plus la fréquence augmente, plus cette différence augmente (car les termes non linéaires ont une plus grande importance à haute fréquence), comme on le remarque sur les différentes figures. Il existe deux manières alors d'augmenter la différence que l'on note sur la Figure (2.4) proche du seuil d'absorption, c'est-à-dire où l'absorption optique devient finie. Une est d'augmenter simplement α , l'autre est d'augmenter le dopage, donc ϵ_F (sans interaction électron-électron, on a une fréquence de seuil $\omega_{\text{seuil}} = 2|\epsilon_F|$).

Il existe plusieurs effets à prendre en compte dans la réponse optique que nous allons découpler les uns des autres pour plus de clarté. La première chose à remarquer, comme noté

3. Nous avons précisé ici la notation $\delta\mathbf{k}$ pour insister que cette symétrie concerne uniquement un noeud de Weyl isolé.

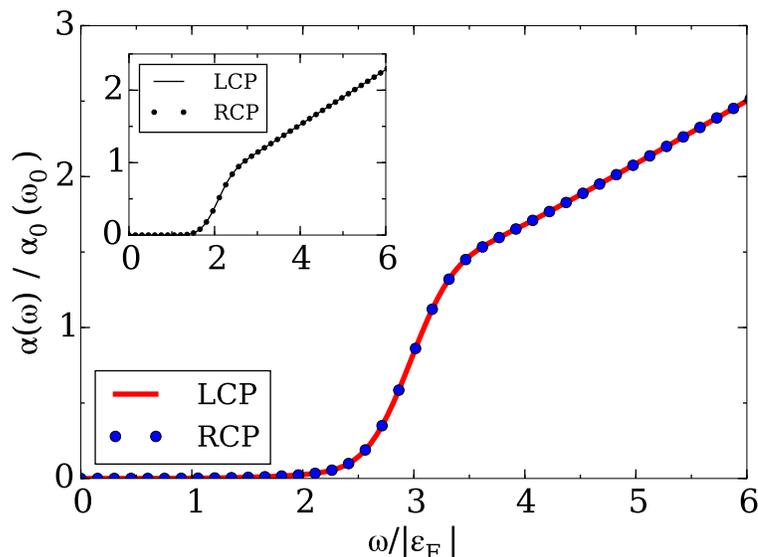


FIGURE 2.3 Absorption optique interbande pour le noeud $\tau = 1$ pour une dispersion parfaitement linéaire avec interactions électron-électron écrantées. Par définition, $\alpha_0(\omega)$ représente l'absorption optique sans interaction coulombienne, indiquée par la fenêtre située dans le coin en haut à gauche. De plus la fréquence ω_0 représente la fréquence pour le cas sans interaction au delà de laquelle l'absorption optique devient linéaire en fonction de la fréquence. La self-énergie a pour conséquence de déplacer vers les plus hautes fréquences le seuil d'absorption optique. Nous remarquons que, pour le cas d'une dispersion parfaitement linéaire, les deux spectres optiques en réponse à une lumière RCP et LCP sont identiques.

dans la figure 2.3 est que le terme de self-énergie renormalise le gap optique et donc induit un déplacement du seuil d'absorption vis à vis du cas sans interaction. La présence de termes non linéaires introduit une anisotropie de cette self-énergie en \mathbf{k} , et donc une renormalisation anisotrope du gap en \mathbf{k} . Cette anisotropie affecte alors différemment les réponses RCP et LCP, bien que la self-énergie soit indépendante du moment angulaire m . La figure 2.3 nous apprend que les interactions électron-électron ne créent pas de différence entre polarisations circulaires gauche et droite. S'il on ne considère que l'existence du terme α , les résultats sont particulièrement parlants. Sans interactions coulombiennes, la présence seule du terme α ne conduit à aucune différence entre les deux types de réponses optiques. Cependant, l'ajout de ces interactions introduit une différence au niveau du seuil d'absorption.

De manière encore plus étonnante, la différence entre LCP et RCP n'est pas liée à une différence entre les énergies propres pour les excitons de valeur propre m et $-m$, contrairement au cas bidimensionnel [28], mais uniquement à une différence de dépendance en k_{\parallel} et k_z des fonctions d'ondes des paires électrons-trous de moment angulaires $\pm m$. Ces fonctions d'ondes électrons-trous possèdent des zéros (aussi appelés noeuds), à des valeurs bien

précises dans le plan (k_{\parallel}, k_z) , qui dépendent de la valeur de m . Ces noeuds ne dépendent pas des propriétés microscopiques de notre modèle à basse énergie ou des interactions électron-électron. Cela nous permet alors de les relier cet effet à des propriétés topologiques. De plus, le moment angulaire m donne lieu à une vorticit  des fonctions d'ondes autour des noeuds de Weyl, en raison du facteur $\exp(im\varphi)$ qui d pend du signe du moment angulaire. Toutes ces consid rations sont d velopp es dans l'annexe A.

Pour terminer, nous discutons de l'effet du terme β . Ce dernier a essentiellement pour but de cr er une s paration de plus en plus grande pour le spectre optique entre la lumi re LCP et RCP au del  du seuil d'absorption, au fur et   mesure que la fr quence augmente. On remarque que cet effet est aussi pr sent dans le cas sans interactions, comme on le voit dans la fen tre de la figure 2.4. L'effet simultan  des interactions ainsi que des deux termes non lin aires a pour cons quence une diff rence d'intensit  d'absorption au seuil d'absorption entre les r ponses LCP et RCP pour un m me noeud.   plus haute fr quence, les courbes LCP et RCP se croisent et on observe un changement de la polarisation dont l'amplitude d'absorption est la plus forte. Par exemple, concentrons nous sur le noeud $\tau = 1$ de la figure 2.4, on voit au seuil d'absorption que la lumi re RCP est plus absorb e que LCP. Cet effet s'inverse   plus haute fr quence o  LCP est d sormais absorb e avec plus d'intensit  que RCP. Ce dernier effet n'est pas pr sent si on consid re seulement le terme α .

2.3.2 Comparaison des spectres optiques pour les diff rents noeuds

Notre compr hension de l'absorption optique est maintenant faite pour un noeud de Weyl isol . Il faut alors se poser la question du comportement de cette derni re pour un syst me r el, c'est- -dire avec plusieurs noeuds de Weyl reli s par diff rentes sym tries.

Consid rons premi rement l'absorption des noeuds $\tau = 1$ et 2 dont le spectre optique pour les polarisations lumineuses RCP et LCP est repr sent  sur la figure 2.4. Ces noeuds sont reli s par un miroir dans notre mod le minimal.

Dans le cas de deux noeuds reli s par une sym trie miroir, on a automatiquement que les deux spectres pour *une* polarisation donn e sont identiques si la lumi re se propage perpendiculairement au plan du miroir. Nous verrons cela plus en d tail dans la section 2.4.2.

Ensuite nous nous int ressons au cas de deux noeuds reli s par une sym trie par renversement du temps, c'est- -dire les noeuds $\tau = 1$ et 3 (le r sultat est identique pour la paire $\tau = 2$ et 4), dont le spectre optique pour les polarisations LCP et RCP est repr sent  sur la figure 2.5.

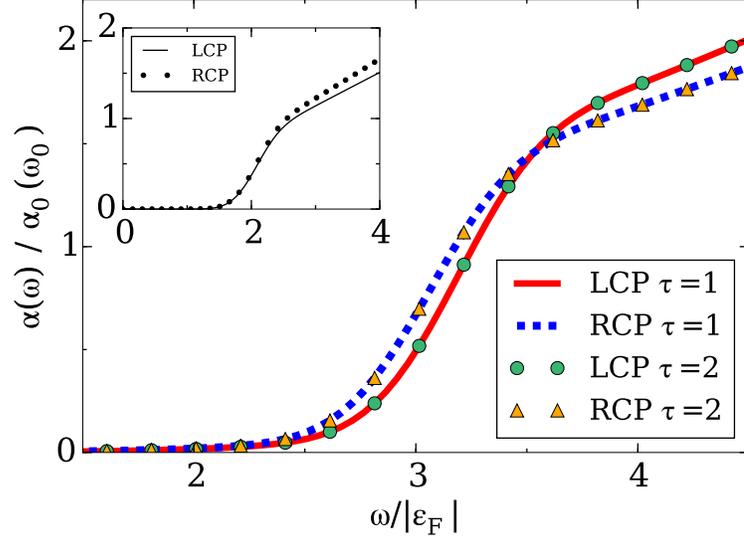


FIGURE 2.4 Absorption optique interbande sous illumination d'une lumière polarisée circulairement droite (RCP) et gauche (LCP) en fonction de la fréquence pour les noeuds $\tau = 1$ et 2 (reliés par une symétrie miroir) avec des termes non linéaires dans la dispersion ($\alpha|\epsilon_F|/v = 0.075$ et $\beta|\epsilon_F|/v^2 = 0.02$). Les noeuds reliés par une symétrie miroir absorbent la lumière polarisée droite (ou gauche) avec la même amplitude. La fenêtre dans le graphique représente l'absorption optique sans interaction coulombienne pour le noeud $\tau = 1$.

Pour ce cas, il n'est pas surprenant de voir que le spectre optique du noeud 1 pour une lumière polarisée circulairement droite est identique au spectre du noeud 3 pour une lumière polarisée circulairement gauche. Cette propriété est reliée au fait que ces deux noeuds sont reliés par la symétrie de renversement du temps. Dans un semimétal de Weyl qui ne brise pas cette symétrie, le spectre total de l'absorption (soit la somme sur tous les noeuds) doit être identique pour une lumière LCP et RCP, ce qui est le cas ici. On voit que pour des fréquences au niveau du seuil d'absorption, pour une lumière RCP, l'absorption du noeud 1 est plus importante (de quelques pourcents ici) par rapport à celle du noeud 3. Ce phénomène est inversé si l'on change la polarisation de la lumière. On a ici un effet appelé *polarisation de vallée* optique [61], qui est relié à une absorption optique différente dans l'espace des \mathbf{k} pour une polarisation lumineuse définie. Nos deux "vallées" sont les paires de noeuds de Weyl $\tau = (1,2)$ et $\tau = (3,4)$. Nous expliciterons largement ce phénomène dans la section 2.4.

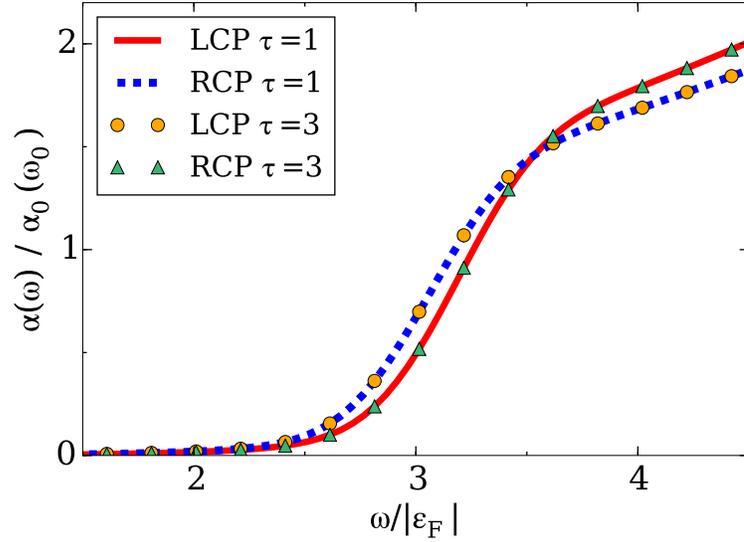


FIGURE 2.5 Absorption optique interbande sous illumination d'une lumière polarisée circulairement droite (RCP) et gauche (LCP) en fonction de la fréquence pour les noeuds $\tau = 1$ et 3 (reliés par la symétrie de renversement du temps) avec des termes non linéaires dans la dispersion ($\alpha|\epsilon_F|/v = 0.075$ et $\beta|\epsilon_F|/v^2 = 0.02$). Le spectre optique du noeud $\tau = 1$ sous illumination de lumière polarisée gauche est identique au spectre optique du noeud $\tau = 3$ sous illumination de lumière polarisée droite. Ceci est une conséquence de la symétrie par renversement du temps dans le système.

2.3.3 Dépendance du cutoff ultraviolet

Il nous faut à présent dissenter sur l'importance du cutoff ultraviolet dans notre modèle. Ce cutoff en énergie est nécessaire pour s'assurer que la dispersion linéaire à basse énergie est valide. Dans notre cas, le rôle du cutoff est aussi de s'assurer que les termes non linéaires sont petits par rapport aux termes linéaires.

On observe sur la figure 2.6 que la séparation des courbes LCP et RCP au niveau du seuil d'absorption est sensible à notre valeur du cutoff (en unités de l'énergie de Fermi), variant de quelques pourcents pour $\Lambda = 6|\epsilon_F|$, à plus de 10% pour $\Lambda = 16|\epsilon_F|$. La première chose que l'on peut remarquer est que la renormalisation du gap optique est fortement dépendante du cutoff.

Au sujet de la self-énergie, on peut dire que plus le cutoff est grand, plus l'intégrale en \mathbf{k}' (voir l'équation (2.41)) va se faire sur un grand nombre de valeurs, et donc la renormalisation de la vitesse de Fermi va être plus grande (cette image est plus pertinente dans le cas linéaire mais reste qualitativement équivalente avec des termes non linéaires). En raison

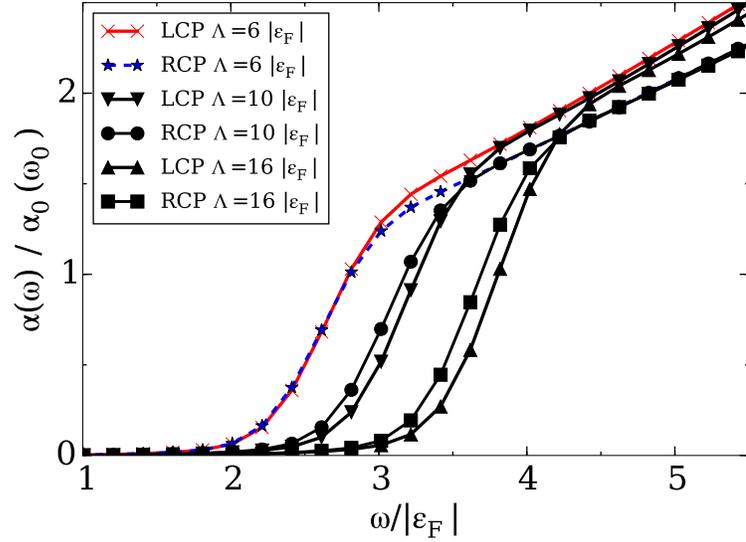


FIGURE 2.6 Dépendance de l'absorption optique interbande pour trois valeurs de Λ , le cutoff ultraviolet de notre modèle, pour $\alpha|\epsilon_F|/v = 0.075$ et $\beta|\epsilon_F|/v^2 = 0.02$. Plus le cutoff est grand, plus la différence entre la réponse optique à une lumière RCP et LCP devient importante. Cependant, pour toute valeur de Λ , une différence entre les deux polarisations de la lumière est observée. Par exemple, pour $\Lambda = 6|\epsilon_F|$, la différence pour l'absorption optique entre les deux polarisations de la lumière au niveau du seuil d'absorption optique est d'environ 5%.

de la renormalisation de la vitesse de Fermi, le gap optique est renormalisé également. Considérons un spectre optique pour une polarisation lumineuse donnée, comme on le voit sur la figure 2.3. Si l'on compare le cas avec et sans interactions électron-électron, un déplacement de la fréquence du seuil d'absorption est observable lorsque des interactions sont présentes. Il nous faut ensuite considérer l'augmentation de la séparation entre les courbes indexées LCP et RCP. On a vu dans la section 2.3.1 que la self-énergie introduit une anisotropie dans la renormalisation du gap en raison des termes non linéaires. Combiné au fait précédent, on comprend que, parce que la renormalisation gap est anisotrope et, de plus en plus grande à mesure que l'on augmente Λ , l'écart entre les deux types de polarisation augmente au niveau du seuil d'absorption.

On conclue ici que notre modèle à basse énergie se doit d'avoir un cutoff en énergie pour rester valide. Cependant il faut garder en tête que le cutoff influe de manière *quantitative* sur les résultats via la self-énergie mais non de manière *qualitative*.

2.4 Polarisation de vallée optique

2.4.1 Origine de la polarisation de vallée en présence d'interaction coulombienne

Nous avons vu précédemment que dans un système avec plusieurs noeuds de Weyl, ce qui est le cas dans la nature, il existe un moyen d'avoir une intensité d'absorption différente pour les différents noeuds. L'existence de termes non linéaires brise la symétrie anti-unitaire à basse énergie (autour d'un même noeud de Weyl), ce qui permet une levée de dégénérescence pour un même noeud de Weyl de la réponse optique à une lumière polarisée circulairement droite et gauche. Dans le cas d'un semimétal de Weyl brisant la symétrie d'inversion spatiale, nous avons vu (c.f. figure 2.5) que les noeuds de Weyl $\tau = 1$ et 3 n'ont pas le même spectre optique pour une polarisation lumineuse donnée. Ces considérations sont résumées dans la figure 2.7 où, pour une lumière RCP, les noeuds 1 et 2 absorbent plus de lumière au niveau du seuil d'absorption que les noeuds 3 et 4. Cet effet est parfaitement inversé si la lumière change de polarisation pour LCP, conséquence de la symétrie par renversement du temps. Cet effet est une *polarisation de vallée* de paire de noeuds.

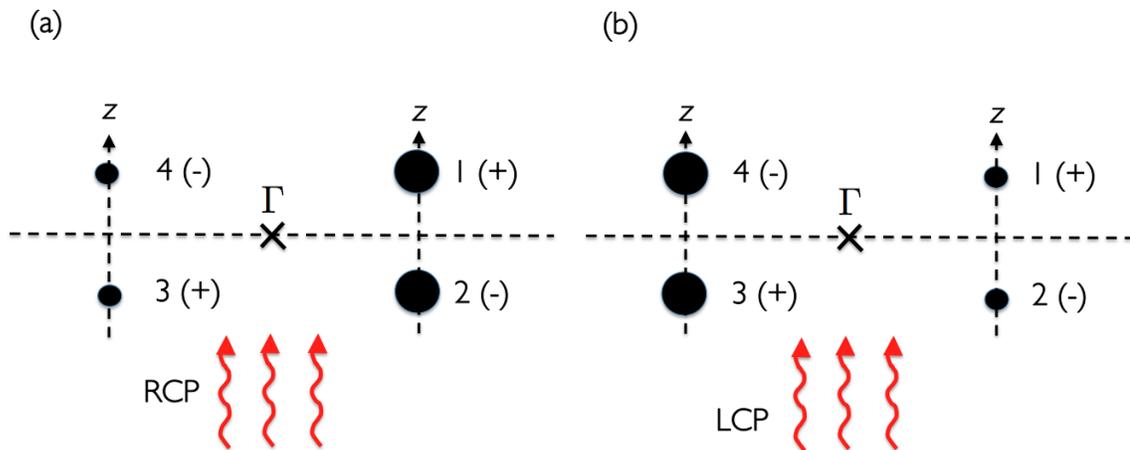


FIGURE 2.7 Représentation schématique de la polarisation de vallée optique induite par la lumière dans un semimétal de Weyl avec symétries de renversement du temps et miroir. On considère ici la situation où la lumière se propage perpendiculairement au miroir. Les noeuds de Weyl sont indiqués par les chiffres de 1 à 4 et leur chiralité par le signe entre parenthèses. La taille des cercles représente l'amplitude de l'absorption optique proche du seuil d'absorption pour chaque noeud. Le point Γ indique ici le point invariant par symétrie par renversement du temps. Les noeuds 1 et 3 sont reliés par symétrie d'inversion temporelle qui préserve la chiralité.

Il nous faut aussi préciser, ce qui peut être vu sur les figures précédentes, que cette polarisation de vallée est *partielle*, c'est-à-dire que les noeuds 1 et 2 ont une intensité d'ab-

sorption seulement de quelques pourcents plus élevée que les noeuds 3 et 4, pour une lumière polarisée droite, au niveau du seuil d'absorption. Si l'on mesure l'absorption optique d'un système, on observera la somme de l'absorption optique de tous les noeuds, donc l'absorption optique *totale*. Des différences aussi faibles entre les spectres telles que les nôtres seront donc "noyées" dans la sommation et semblent alors difficiles à détecter en mesurant l'absorption optique totale.

Le cas d'un semimétal de Weyl qui brise intrinsèquement la symétrie par renversement du temps mais préserve la symétrie par inversion est aussi étudié. Dans ce cas, on s'aide des hamiltoniens à basse énergie présentés dans le tableau 2.2 afin de calculer l'absorption optique pour chacun des noeuds. Pour ce système précis, tous les noeuds absorbent avec la même intensité une lumière polarisée donnée, comme représenté sur les schémas de la figure 2.8. On a ici un cas typique de dichroïsme circulaire [84], c'est-à-dire où la lumière RCP a une intensité d'absorption différente (ici, supérieure) par rapport à la lumière LCP. Un tel type de dichroïsme peut alors vérifier expérimentalement si un système brise la symétrie par renversement du temps.

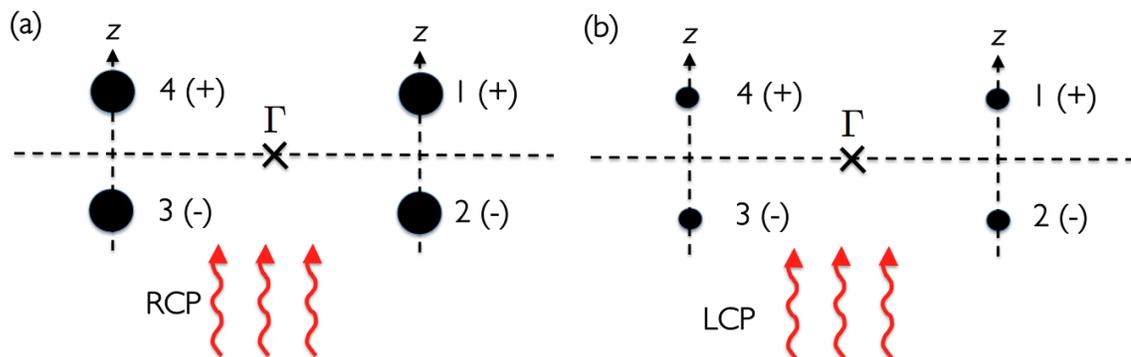


FIGURE 2.8 Représentation schématique de la polarisation de vallée optique induite par la lumière dans un semimétal de Weyl avec symétries d'inversion spatiale et miroir. Les noeuds de Weyl sont indiqués par les chiffres de 1 à 4 et leur chiralité par le signe entre parenthèses. La taille des cercles représente l'amplitude de l'absorption optique proche du seuil d'absorption pour chaque noeud. Le point Γ indique ici le point invariant par symétrie d'inversion spatiale. Les noeuds 1 et 3 sont reliés par symétrie d'inversion spatiale qui change le signe de la chiralité du noeud.

Cependant, seul un semimétal de Weyl qui brise uniquement la symétrie d'inversion spatiale permet une polarisation de vallée non triviale. L'ajout de termes non linéaires dans la dispersion est un outil d'étude formidable étant donné qu'il permet de relier le caractère topologique des paires électrons-trous à la polarisation de vallée proche du seuil d'absorption de manière similaire au cas bidimensionnel [28, 31]. Nous avons malheureusement

TABLE 2.3 Hamiltoniens à basse énergie de notre modèle à quatre noeuds pour des cônes inclinés dans le cas d'un semimétal de Weyl avec symétrie par renversement du temps. Les noeuds indexés par $\tau = 1$ et 2 sont reliés par un miroir perpendiculaire à z . Les noeuds $\tau = 3$ et 4 sont les partenaires par renversement du temps des noeuds 1 et 2 respectivement.

Noeuds	$\tau = 1$	$\tau = 2$	$\tau = 3$	$\tau = 4$
$h_\tau(\mathbf{k})$	(v_F, t_x, t_y, t_z)	$(-v_F, -t_x, -t_y, t_z)$	$(v_F, -t_x, -t_y, -t_z)$	$(-v_F, t_x, t_y, -t_z)$

vu qu'une mesure expérimentale via l'absorption ou la conductivité optique n'est pas à l'ordre du jour compte tenu de la faible amplitude de cette dernière. Pour pouvoir observer, potentiellement, cette polarisation de vallée, il nous faut un écart plus grand entre les absorptions des deux polarisations lumineuses. Une telle caractéristique est possible à l'aide d'une inclinaison du cône de Weyl dans une certaine direction. Comme on l'a vu dans la section 1.1, les noeuds de Weyl apparaissant à des points arbitraires de la zone de Brillouin, aucune symétrie ne contraint la dispersion linéaire autour d'un noeud de Weyl, la dispersion peut alors être "inclinée" dans n'importe quelle direction avec un vecteur d'inclinaison (*tilt* en anglais) que nous noterons \mathbf{t} et qui apparaît dans le hamiltonien à basse énergie comme un terme linéaire en \mathbf{k} . En négligeant alors les termes non linéaires, on peut écrire par exemple un hamiltonien pour le noeud $\tau = 1$ comme

$$h_{\tau=1}(\mathbf{k}) = \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \mathbf{t} \sigma_0 + \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.91)$$

où le vecteur d'inclinaison est sans dimension. On se concentre ici sur des semimétaux de Weyl de type I, c'est-à-dire avec $|\mathbf{t}| < 1$. L'autre régime, où $|\mathbf{t}| > 1$, concerne les semimétaux de Weyl de type II [85, 86]. De plus, on peut appliquer les différentes opérations de symétries de manière similaire à celle du tableau 2.1 afin de trouver les différents hamiltoniens à basse énergie des différents noeuds pour le cas d'un semimétal de Weyl qui préserve la symétrie par renversement du temps, comme montré sur la figure 2.9 pour les énergies propres. Le cas du cône incliné est encore plus simple que le cas que nous avons étudié en détail pour ce chapitre, étant donné que les opérations de symétrie se résument aux résultats du tableau 2.3.

En utilisant les résultats de ce tableau, on peut, avec un formalisme équivalent à celui développé plus haut, obtenir l'absorption optique pour les différents noeuds avec un vecteur d'inclinaison. Nous négligerons pour le moment les interactions électron-électron.

Les résultats présentés dans la figure 2.10 sont pour un modèle de semimétal de Weyl en

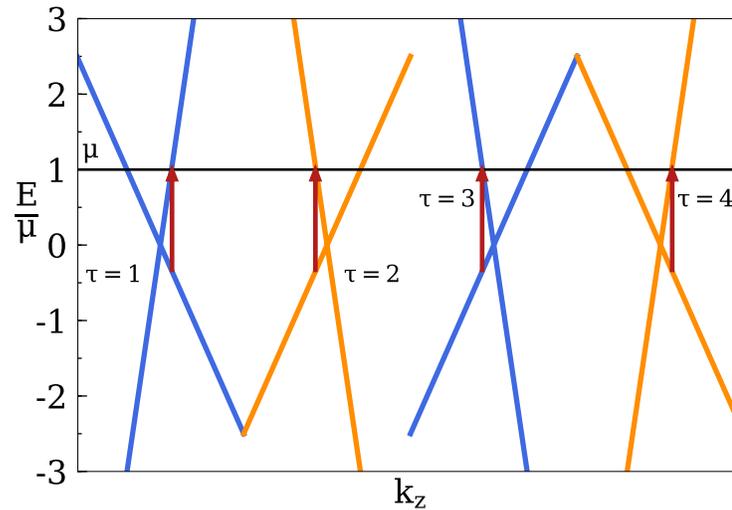


FIGURE 2.9 Dispersion électronique selon k_z pour les différents noeuds de Weyl en utilisant le hamiltonien de l'équation (2.91) et le tableau 2.3. Les noeuds ont été déplacés sur l'axe k_z pour plus de lisibilité. Les dispersions en bleu représentent les noeuds de chiralité $\chi = +1$ et en orange les noeuds de chiralité $\chi = -1$. La ligne horizontale noire représente le niveau de Fermi du système. Les flèches rouges représentent la transition possible de plus faible énergie, soit le gap optique du système. On voit en effet que les gaps optiques sont égaux pour les différents noeuds, ce qui donne lieu à une polarisation de vallée partielle seulement.

absence d'interactions électron-électron, et dans le cas de cônes inclinés. La présence d'une inclinaison des noeuds, contrairement aux termes non linéaires dans la dispersion, permet une polarisation de vallée, toujours *partielle*, mais bien plus importante que dans le cas avec des termes non linéaires. Cela est essentiellement une conséquence de la brisure de la symétrie anti-unitaire à basse énergie, autour d'un même noeud, que nous avons mentionné. Nous pouvons caractériser qualitativement la polarisation de vallée par "l'amplitude" de la brisure de la symétrie anti-unitaire à basse énergie, soit par l'inclinaison des cônes, soit par les termes non linéaires. De plus, la présence d'une inclinaison est plus facile à appréhender dans notre modèle minimal grâce à l'existence de plusieurs calculs *ab initio* servant à caractériser le vecteur d'inclinaison dans la structure de bandes à basse énergie [42,87]. Nous pouvons donc nous référer à des publications qui donnent quantitativement des valeurs pour l'inclinaison des cônes dans différentes directions de la zone de Brillouin, contrairement aux termes non linéaires.

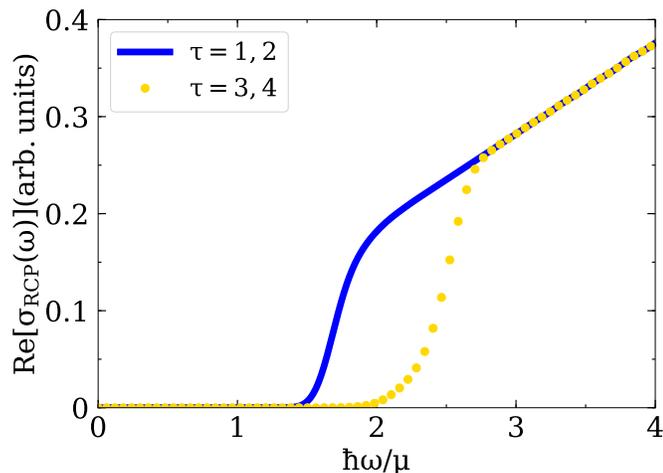


FIGURE 2.10 Absorption optique pour une lumière polarisée circulairement droite en fonction de la fréquence, en unités de l'énergie de Fermi, pour les différents noeuds dans le modèle décrit dans le tableau 2.3. Le vecteur d'inclinaison mentionné plus tôt est égal à $\mathbf{t} = (0.2, 0, 0.4)$, et la lumière incidente est polarisée circulairement dans le plan (x, y) et donc se propage selon \mathbf{z} . Dans ce cas, les noeuds $\tau = 1$ et 2 ont le même spectre optique, représenté par la courbe bleue. Le spectre optique des noeuds $\tau = 3$ et 4, également identique, est représenté par les points jaunes. Nous n'avons pas ici pris en compte les interactions coulombiennes étant donné que nous désirons uniquement caractériser la polarisation de vallée.

2.4.2 Configurations pour la polarisation de vallée

Nous avons caractérisé l'absorption optique, à basse énergie, d'un semimétal de Weyl invariant par symétrie de renversement du temps. Nous avons trouvé qu'une polarisation de vallée partielle existe, dans le cas de noeuds de Weyl avec des termes non linéaires dans la dispersion ou bien de noeuds de Weyl inclinés. Dans le premier cas, la polarisation de vallée au niveau du seuil d'absorption a pu être reliée à la présence conjointe de termes non linéaires et d'interactions coulombiennes. Dans le second cas, la seule présence d'une inclinaison des cônes brise la symétrie anti-unitaire à basse énergie dépendant de l'amplitude de ce dernier, ce qui permet une polarisation de vallée partielle plus importante. Cependant, nous n'avons considéré ici qu'une seule configuration pouvant être réalisée expérimentalement, c'est-à-dire, avec une lumière polarisée circulairement dans le plan (x, y) et se propageant selon \mathbf{z} (donc perpendiculairement au plan du miroir de notre modèle minimal).

Certaines propriétés de symétrie doivent être considérées dans un cas réel. Par exemple si la lumière se propage parallèlement ou perpendiculairement à notre plan du miroir. Ces deux cas sont les cas les plus simples. Si la lumière se propage *perpendiculairement* au plan du miroir, alors nous pouvons dire que la symétrie miroir est préservée dans le cristal car, sous

cette opération de symétrie, le vecteur de polarisation de la lumière reste invariant, étant donné que ce dernier se transforme comme un moment angulaire. En revanche la symétrie par renversement du temps change une lumière RCP en LCP, donc le spectre optique du noeud $\tau = 3$ pour une lumière RCP doit être identique au spectre optique du noeud $\tau = 1$ pour une lumière LCP. On note cela $\alpha_{\text{LCP},\tau=1}(\omega) = \alpha_{\text{RCP},\tau=3}(\omega)$, ce qui correspond à la polarisation de vallée montrée jusqu'à présent, et indiquée par la première ligne du tableau 2.4.

Dans le cas d'une lumière se propageant *parallèlement* au miroir, la symétrie du miroir est brisée étant donné que le miroir va changer une lumière RCP en LCP, de la même façon qu'un moment angulaire parallèle à un miroir change de direction. Cette fois, les noeuds reliés par un miroir n'auront pas le même spectre optique, on écrit alors $\alpha_{\text{LCP},\tau=1}(\omega) = \alpha_{\text{RCP},\tau=2}(\omega)$. En revanche la symétrie miroir fois renversement du temps notée $\mathcal{M} \otimes \mathcal{T}$ est préservée dans ce cas (on inverse deux fois la polarisation, ce qui équivaut à dire que cette opération de symétrie est identique à l'identité), ce qui explique que les noeuds $\tau = 1$ et 4 ont le même spectre optique, comme indiqué à la deuxième ligne du tableau 2.4, étant donné que ces noeuds sont reliés par le symétrie $\mathcal{M} \otimes \mathcal{T}$.

Pour finir, nous devons évoquer le cas général où la lumière se propage ni parallèlement, ni perpendiculairement à un axe de symétrie, ce qui est le cas représenté dans la figure 2.11. Dans ce cas, plus aucune restriction de symétrie ne relie les spectres optiques des différents noeuds et il existe une polarisation de noeuds partielle, où chacun des noeuds a une intensité d'absorption différente. Cependant, il n'existe pas de polarisation de vallée chirale, c'est-à-dire que l'absorption optique totale des noeuds de chiralité positive est égale à l'absorption optique totale des noeuds de chiralité négative, donc il n'existe pas de polarisation de vallée impliquant une chiralité nette. Cela se traduit par la relation $\alpha_{\tau=1}(\omega) + \alpha_{\tau=3}(\omega) = \alpha_{\tau=2}(\omega) + \alpha_{\tau=4}(\omega)$ qui est valide pour toute fréquence.

On a dans cette section pris en compte le cas de noeuds de Weyl inclinés à basse énergie, mais les résultats du tableau 2.4 ne dépendent que des symétries du modèle minimal, et par extension du cristal. On rappelle que le rôle de l'inclinaison des cônes ou des termes non linéaires est de briser la symétrie effective anti-unitaire à basse énergie, afin que la dégénérescence entre lumière circulairement polarisée gauche et droite pour un noeud de Weyl soit levée.

En général, ces termes sont toujours permis à basse énergie pour un noeud de Weyl et dans un semimétal de Weyl préservant la symétrie par renversement du temps contenant des miroirs, on a montré qu'une polarisation de vallée *partielle* peut exister. En raison du fait que les gaps optiques sont identiques pour tous les noeuds, comme indiqué sur la figure

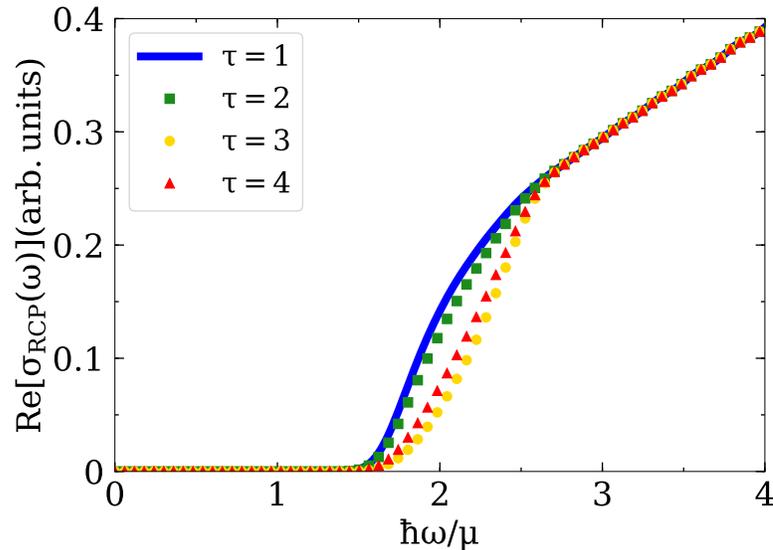


FIGURE 2.11 Absorption optique résolue en noeud pour une lumière polarisée droite sans considérer les interactions électron-électron. Le vecteur d'inclinaison pour le noeud $\tau = 1$ est égal à $\mathbf{t} = (0.2, 0, 0.4)$ et le vecteur d'onde de la lumière \mathbf{q} fait un angle de $\pi/6$ avec l'axe \mathbf{z} (l'axe normal au miroir). Dans cette configuration, parce que \mathbf{q} n'est ni parallèle ni perpendiculaire au plan du miroir, tous les noeuds ont un spectre optique différent.

2.9, cette polarisation de vallée ne peut qu'être partielle et ce, peu importe la configuration expérimentale en question.

Plusieurs questions restent alors en suspens : Peut-on détecter une polarisation de vallée expérimentalement avec des sondes optiques ? La polarisation de vallée peut elle être totale voire *chirale*, c'est-à-dire qu'un seul noeud absorbe de la lumière ? Peut-on relier la topologie des noeuds de Weyl à la polarisation de vallée ? Nous répondrons dans le chapitre suivant à ces questions en ajoutant un ingrédient à notre modèle : un champ magnétique externe.

2.5 Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté une théorie de l'absorption optique pour un semimétal de Weyl en se concentrant sur la dispersion à basse énergie. Nous avons étudié le cas des termes non linéaires dans la dispersion en présence d'interactions de Coulomb mais aussi le cas de cônes de Weyl inclinés.

Notre prédiction principale en utilisant ce formalisme est que l'absorption optique interbande résolue en noeud pour une lumière RCP ou LCP sont différentes. Cet effet

TABLE 2.4 Polarisation de vallée optique dans un semimétal de Weyl avec symétrie de renversement du temps avec des cônes de Weyl inclinés. Le noeud de Weyl $\tau = 1$ a un vecteur d'inclinaison noté \mathbf{t} , qui peut avoir ses trois composantes non nulles, et la lumière polarisée circulairement a un vecteur d'onde noté \mathbf{q} . La notation (n, m) indique que les noeuds $\tau = n$ et m absorbent la lumière avec une intensité égale.

Configuration	Polarisation de vallée
$\mathbf{q} \perp$ miroir	$(1, 2) \neq (3, 4)$ partielle
$\mathbf{q} \parallel$ miroir	$(1, 4) \neq (2, 3)$ partielle
$\mathbf{q} \not\perp, \not\parallel$ miroir	$1 \neq 2 \neq 3 \neq 4$ partielle

provient de la brisure de la symétrie anti-unitaire à basse énergie par l'inclinaison des cônes, ou les termes non linéaires, et donne lieu à la polarisation de vallée *partielle*.

Dans le cadre du modèle avec des termes non linéaires et en présence d'interactions de Coulomb, nous avons relié cet effet à une valeur non nulle de la courbure de Berry moyennée sur la surface de Fermi, ce qui constitue un phénomène qui émerge par la présence conjointe d'une topologie non triviale et de corrélations électroniques (faibles) dans un semimétal de Weyl.

Ces propriétés sont également corroborées par un modèle analytique où l'on considère les interactions de Coulomb comme purement locales (voir Annexe A). Cela nous permet d'affirmer que les paires électrons-trous sont liées de manière exponentiellement faible proche du seuil d'absorption et donc s'hybrident fortement avec les électrons libres. Ces paires, ou excitons de Mahan, sont en revanche associées à la nature topologique du semimétal parce que leur fonction d'onde possède des noeuds (ou des zéros) avec une vorticité non nulle. Les règles de sélection optiques imposent alors que la lumière LCP ou RCP est absorbée par des paires électrons-trous de vorticité opposée, ce qui est en partie responsable de la polarisation de vallée.

De plus, nous avons étudié différentes configurations pour la direction de propagation de la lumière par rapport au plan du miroir de notre modèle afin de prédire quelle type de polarisation de vallée pouvait être obtenue, ce qui peut être étendu pour de véritables matériaux abritant des noeuds de Weyl à basse énergie.

Cependant, un résultat décevant est que cette polarisation de vallée n'est que partielle et de surcroît, très faible dans le cas des termes non linéaires dans la dispersion comparés à des études de transport dans le bismuth [55] ou en optique dans le disulfure de molybdène

[61]. En présence d'une inclinaison des noeuds, la polarisation de vallée peut devenir plus significative mais reste difficile à détecter si l'on considère l'absorption optique totale. Comme nous le verrons au prochain chapitre, une façon d'augmenter significativement la polarisation de vallée est de briser la symétrie de renversement du temps par le biais d'un champ magnétique.

Chapitre 3

Absorption optique dans un semimétal de Weyl avec interaction coulombienne sous fort champ magnétique

Dans ce chapitre, nous étudierons le modèle d'un semimétal de Weyl avec symétrie par renversement du temps qui permet la polarisation de vallée introduite au chapitre précédent. On ajoutera ici un ingrédient supplémentaire : un fort champ magnétique externe. Ce dernier donne lieu à des niveaux de Landau particuliers que nous expliciterons. Puis nous calculerons avec les états et énergies propres modifiées par le champ magnétique la conductivité optique résolue en noeud du système, toujours en considérant des interactions électron-électron à longue portée que nous traiterons avec l'approximation dite GRPA (*Generalized Random Phase Approximation* en anglais). Nous verrons comment les différents paramètres du système (inclinaison du cône, champ magnétique, niveau de Fermi, constante diélectrique) influent la polarisation de vallée, qui dans ce cas est *complète*. Cela correspond à une plage en fréquence où un sous ensemble de noeuds absorbe la totalité de la lumière incidente. On verra que la polarisation de vallée peut être *chirale* dans certains cas, lorsqu'un seul type de chiralité est impliqué dans l'absorption. Enfin nous verrons qu'il est possible de détecter cette dernière via la conductivité optique totale mais aussi via certaines mesures de transport.

Les travaux présents dans ce chapitre ont fait l'objet d'un article [88].

3.1 Hamiltonien sous fort champ magnétique

Notre point de départ est le hamiltonien général à deux bandes que nous avons écrit à la section 1.1. Nous allons nous concentrer ici au hamiltonien pour le noeud $\tau = 1$, uniquement avec un vecteur d'inclinaison, et en négligeant les termes non linéaires, qui sont étudiés séparément dans l'annexe C.

3.1.1 Electrons libres et structure de bandes : niveaux de Landau

Dans cette section, nous nous intéresserons à l'ajout d'un fort champ magnétique externe statique et uniforme à notre modèle via le couplage minimal $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + e\mathbf{A}/\hbar$, où \mathbf{A} est le potentiel vecteur qui obéit à $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, ce qui donne

$$h_\tau \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) = C_\tau \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \sigma_0 + d_\tau \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.1)$$

On choisit par la suite une jauge particulière pour le potentiel vecteur, la jauge de Landau, $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ avec $\mathbf{B} = B\mathbf{z}$. On prend ici le champ magnétique selon z , on verra par la suite qu'on peut le prendre dans une direction quelconque. La substitution présente dans l'équation (3.1) est un cas particulier du couplage minimal, qui s'effectue directement sur les gradients [89]. Pour les besoins du modèle ici, nous allons écrire les états propres et énergies propres dans une configuration particulière, c'est-à-dire $\mathbf{t} \parallel \mathbf{B} \parallel \mathbf{z}$. Cette configuration a l'avantage de permettre un calcul analytique simple des états et énergies propres du hamiltonien de l'équation (3.1). Ce dernier s'écrit

$$h_\tau \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) = \hbar v_F k_z t_z + \hbar v_F (k_z \sigma_z + \Pi_x \sigma_x + \Pi_y \sigma_y), \quad (3.2)$$

avec $\boldsymbol{\Pi} = (\Pi_x, \Pi_y) = (k_x, k_y + eBx/\hbar)$. Contrairement au chapitre 2, il faut ici considérer \mathbf{k} comme un opérateur, étant donné que le commutateur entre Π_x et Π_y est non nul, alors qu'on avait précédemment $[k_x, k_y] = 0$. On peut alors calculer ce commutateur

$$[\Pi_x, \Pi_y] = [-i\nabla_x, -i\nabla_y + \frac{eB}{\hbar}x] = \frac{eB}{\hbar}[-i\nabla_x, x] = -i\frac{eB}{\hbar}. \quad (3.3)$$

En raison de ce commutateur non nul, on perd l'invariance par translation selon x , ce qui change fondamentalement la nature physique du problème. Au lieu des bandes d'énergies du problème sans champ magnétique, on peut ici définir des opérateurs d'échelle à partir

des opérateurs de moment généralisés

$$a = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} (\Pi_x - i\Pi_y), \quad (3.4)$$

$$a^\dagger = \frac{\ell_B}{\sqrt{2}} (\Pi_x + i\Pi_y), \quad (3.5)$$

avec $\ell_B = \sqrt{\hbar/eB}$ la longueur magnétique. Les opérateurs d'échelles vérifient $[a, a^\dagger] = 1$ ainsi que $a^\dagger a \equiv \hat{n}$, où \hat{n} est l'opérateur nombre qui obéit à $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$ avec $n \in \mathbb{N}$.

Suivant ces considérations, on sait que notre hamiltonien est de la forme

$$h_\tau(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} t_z k_z + k_z & \frac{\sqrt{2}}{\ell_B} a \\ \frac{\sqrt{2}}{\ell_B} a^\dagger & t_z k_z - k_z \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

On suppose alors des solutions de la forme

$$\Psi_{n,X,k_z}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L_z}} \begin{pmatrix} u_{n,k_z} h_{|n-1|,X}(\mathbf{r}) \\ v_{n,k_z} h_{|n|,X}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

avec u_{n,k_z} et v_{n,k_z} des fonctions à déterminer qui dépendent du modèle microscopique. Dans le cas d'un noeud de Weyl avec une dispersion parfaitement linéaire, on a

$$u_{n,k_z} = -i \operatorname{sgn}(n) \chi \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{sgn}(n) \frac{k_z}{\sqrt{k_z^2 + 2|n|/\ell_B^2}} \right)}, \quad (3.8)$$

$$v_{n,k_z} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{sgn}(n) \chi \frac{k_z}{\sqrt{k_z^2 + 2|n|/\ell_B^2}} \right)}. \quad (3.9)$$

De plus, $\mathbf{r} = (x, y)$ représente la position dans les plans perpendiculaires à la direction du champ magnétique. On définit [90] :

$$h_{|n|,X}(\mathbf{r}) = \frac{(-i)^{|n|}}{\sqrt{L_y}} \varphi_{|n|}(x - X) \exp\left(-i \frac{Xy}{\ell_B^2}\right), \quad (3.10)$$

où $X \equiv -k_y \ell_B^2$ est le centre d'orbite cyclotron et $\varphi_{|n|}(x - X)$ les fonctions propres de l'oscil-

lateur harmonique quantique en une dimension qui s'écrivent

$$\varphi_n(x - X) = \left(\frac{1}{\pi \ell_B^2} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\frac{x - X}{\ell_B} \right) \exp \left(-\frac{(x - X)^2}{2\ell_B^2} \right), \quad (3.11)$$

où $H_n(x)$ sont les polynômes d'Hermite. Les opérateurs d'échelles obéissent quant à eux à

$$a h_{|n|,X}(\mathbf{r}) = \sqrt{|n|} h_{|n-1|,X}(\mathbf{r}), \quad (3.12)$$

$$a^\dagger h_{|n|,X}(\mathbf{r}) = \sqrt{|n+1|} h_{|n+1|,X}(\mathbf{r}), \quad (3.13)$$

qui sont les relations usuelles de l'oscillateur harmonique quantique.

Plusieurs choses sont à remarquer. Une première est que l'invariance par translation dans la direction z est conservée (de manière générale, on dit que l'invariance par translation est conservée dans la direction parallèle au champ magnétique), comme l'indique le facteur $\exp(ik_z z)$ dans l'équation (3.7). Donc k_z est un bon nombre quantique pour indexer les états et énergies propres. Mentionnons aussi que l'invariance par translation selon la direction y est aussi conservée comme on peut le remarquer via l'équation (3.10). Ensuite, il se trouve que les énergies propres ne dépendent pas de l'indice du centre d'orbite X (lié à k_y) mais uniquement des indices n et k_z , ce qui implique qu'il existe une dégénérescence des niveaux d'énergies en X . Cela est lié à ce que l'on nomme la dégénérescence *macroscopique* des niveaux de Landau [47], étant donné que l'on peut mettre un nombre macroscopique d'électrons dans un même état. Cette dégénérescence s'écrit

$$N_\phi = \frac{L_x L_y}{2\pi \ell_B^2} = \frac{S}{2\pi \ell_B^2}, \quad (3.14)$$

où L_i est la longueur du système dans la direction $i \in \{x, y, z\}$. La surface S en question est toujours perpendiculaire à la direction du champ magnétique externe (dans notre cas on a choisi $\mathbf{B} = Bz$).

On peut alors écrire les énergies propres dans le cas d'une inclinaison du cône parallèle au champ externe avec l'équation aux valeurs propres habituelle $h|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, ce qui nous permet de trouver :

$$E_{n \neq 0, k_z}^{(\tau=1)} = \hbar v_F t_z k_z + \text{sgn}(n) \hbar \sqrt{v_F^2 k_z^2 + \frac{2|n|v_F^2}{\ell_B^2}} \quad (3.15)$$

$$E_{n=0, k_z}^{(\tau=1)} = \hbar v_F t_z k_z - \hbar v_F k_z, \quad (3.16)$$

pour le noeud $\tau = 1$ et où $\text{sgn}(n)$ est la fonction signe. L'équation (3.15) représente les

niveaux de Landau de la bande de conduction ($n > 0$) et valence ($n < 0$). L'équation (3.16) représente un niveau de Landau special, qui est dit *chiral* car sa dispersion est seulement dans une direction et fixée par la chiralité du noeud de Weyl (et la direction du champ). La dispersion de ce niveau est donc reliée à la nature topologique des fermions de Weyl. D'ailleurs, le spineur pour le niveau de Landau chiral est spécial également : il s'écrit

$$\Psi_{0,X,k_z}(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L_z}} \begin{pmatrix} 0 \\ h_{0,X}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

où seule une composante du spineur est non nulle. Notons qu'inverser la direction du champ magnétique inverse les composantes "up" et "down" des spineurs.

Jusqu'à présent, uniquement le cas d'une inclinaison parallèle au champ magnétique a été considéré, surtout à des fins pédagogiques. On a vu cependant qu'une inclinaison du cône de Weyl parallèle au champ était simple à prendre en compte, et ceci en raison de l'invariance par translation dans la direction z . En effet, parce que $\mathbf{t} \parallel \mathbf{B}$ ne comprend qu'un terme proportionnel à k_z alors les fonctions d'ondes ne changent pas du cas non incliné. Cependant, pour le cas où on considère un vecteur d'inclinaison quelconque, ce qui est le cas de noeuds de Weyl dans des systèmes réels, la résolution est bien plus subtile. Il existe cependant une approche analytique permettant de trouver les énergies et états propres [86]. On écrit ici les niveaux de Landau pour une inclinaison arbitraire :

$$E_{n \neq 0, k_{\parallel}}^{(\tau=1)} = \hbar v_F t_{\parallel} k_{\parallel} + \text{sgn}(n) \frac{\hbar}{\gamma} \sqrt{v_F^2 k_{\parallel}^2 + \frac{2|n|v_F^2}{\gamma \ell_B^2}} \quad (3.18)$$

$$E_{n=0, k_{\parallel}}^{(\tau=1)} = \hbar v_F t_{\parallel} k_{\parallel} - \frac{\hbar v_F}{\gamma} k_{\parallel}, \quad (3.19)$$

où $k_{\parallel} = \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{B}}$ est le vecteur d'onde dans la direction parallèle au champ magnétique, qui peut être quelconque, de même $t_{\parallel} = \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{B}}$ et $\gamma = (1 - |\mathbf{t} \times \hat{\mathbf{B}}|)^{-1/2}$. Le facteur γ a pour conséquence de rapprocher les niveaux de Landau entre eux à mesure que la composante du vecteur d'inclinaison perpendiculaire au champ magnétique augmente, étant donné que γ est toujours supérieur ou égal à 1. À titre d'exemple, on a représenté sur la figure 3.1 deux configurations "principales", une pour $\mathbf{t} \perp \mathbf{B}$, l'autre pour $\mathbf{t} \parallel \mathbf{B}$. On rappelle également que les opérations de symétrie nécessaires pour trouver les niveaux de Landau pour les autres noeuds sont résumées au tableau 2.3.

Tout au long de ce chapitre, nous omettrons la présence d'un terme Zeeman du type $\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ dans notre hamiltonien à basse énergie pour deux raisons. Premièrement, dans notre

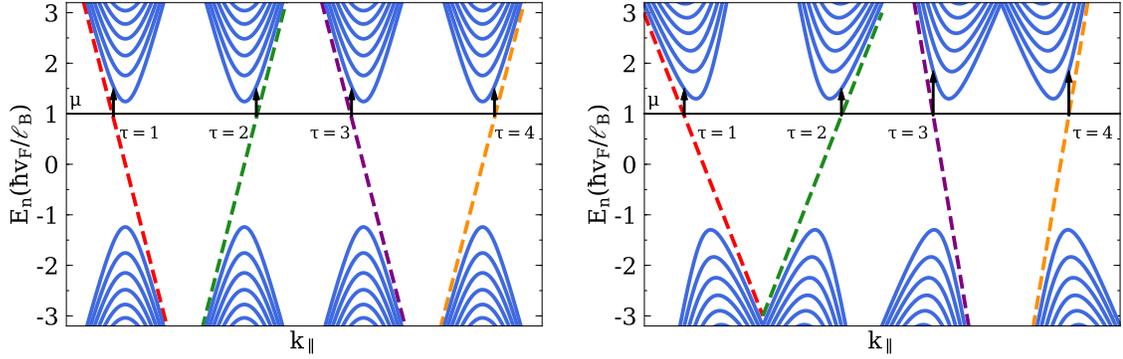


FIGURE 3.1 Énergie en fonction du vecteur d'onde parallèle au champ magnétique. Les différents noeuds ont été déplacés sur l'axe k_{\parallel} pour plus de lisibilité. Les courbes en bleu représentent les niveaux de Landau en bande de conduction et valence et ceux en pointillés les niveaux chiraux. La ligne horizontale noire représente le niveau de Fermi. Deux configurations sont représentées : à gauche, le champ magnétique est orienté perpendiculairement au vecteur d'inclinaison, donc les gaps optiques pour les différents noeuds sont tous égaux (indiqué par les flèches verticales noires). À droite, l'inclinaison est parallèle au champ magnétique. On remarque alors que les noeuds reliés par la symétrie de renversement du temps ont des gaps optiques différents comme indiqué par les flèches verticales noires qui représentent schématiquement la transition optique $n = 0 \rightarrow 1$.

modèle jouet, un tel terme déplace les noeuds de Weyl en \mathbf{k} , et peut être absorbé par une redéfinition du vecteur d'onde. Deuxièmement, il contribue à un déplacement en énergie de tous les noeuds d'un facteur $\mathbf{t} \cdot \mathbf{B}$, qui peut être absorbé par une redéfinition du potentiel chimique.

Il convient également de préciser qu'une solution numérique est envisageable pour le cas d'une inclinaison quelconque pour obtenir les valeurs et vecteurs propres, qui consiste à résoudre le cas sans inclinaison, puis à diagonaliser la partie avec l'inclinaison du noeud sur la base du cas sans inclinaison.

3.1.2 Conductivité optique en fort champ magnétique et avec interaction coulombienne

Après ajout du champ magnétique externe, le dernier élément à inclure est l'interaction coulombienne. De manière similaire au cas sans champ magnétique, on inclut cette dernière via l'interaction densité-densité pour les électrons

$$\mathcal{H}_{\text{el-el}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \rho(\mathbf{q}) \rho(-\mathbf{q}), \quad (3.20)$$

où \mathcal{V} représente le volume du système, $V(\mathbf{q}) = e^2/(\epsilon_0\epsilon_\infty\mathbf{q}^2)$ et $\rho(\mathbf{q})$ la transformée de Fourier de l'opérateur densité.

On veut ensuite écrire la conductivité optique, en présence d'interactions coulombiennes, sous un fort champ magnétique externe donnant lieu à une quantification de Landau. La stratégie est la suivante : nous allons considérer une équation du mouvement pour la fonction de corrélation à deux particules, ce qui est le cas des fonctions de réponses pour la réponse linéaire (conductivité, susceptibilité, ...) de manière générale. Cependant il nous faut faire des approximations en présence d'interactions électron-électron étant donné que le problème est insoluble dans le cas le plus général. On procède alors à une approximation qui consiste à ne garder que deux contributions, dites de Hartree et de Fock, pour la self-énergie du propagateur électronique (ou fonction de Green à une particule) puis d'obtenir une équation (matricielle) pour la fonction de Green à deux particules. Cette approximation est appelée GRPA [91,92]. Cette dernière est une extension de la plus célèbre approximation RPA (*Random Phase Approximation* en anglais) qui ne consiste à garder que la contribution de Hartree, qui donne lieu au phénomène d'écrantage dans les métaux [93]. Contrairement à la RPA, la GRPA nous permet de capturer les corrections excitoniques, et donc d'avoir une meilleure description de la conductivité optique interbande. L'étape suivante est de considérer notre système d'intérêt de niveaux de Landau et d'utiliser cette base pour décrire tous nos propagateurs, puis d'écrire les fonctions de réponse d'intérêt dans cette même base. Ce procédé fastidieux est décrit dans l'annexe B. Cette approximation est très populaire dans le cas des gaz d'électrons bidimensionnels en fort champ magnétique externe [94], c'est pourquoi nous l'appliquons ici. Dorénavant, le paramètre qui décrit la force de l'interaction coulombienne pour nos fermions de Weyl est ϵ_∞ . Plus ce dernier augmente, plus le terme d'interaction coulombienne sera petit par rapport à l'échelle d'énergie cinétique typique de notre problème ($\hbar v_F/\ell_B$). Nous traiterons de son effet dans la section 3.2.4.

On rappelle, d'après les équations (1.27) et (1.36), que la partie réelle de la conductivité est reliée à la partie imaginaire de la fonction de corrélation courant-courant retardée par

$$\text{Re} [\sigma_{\alpha\beta}(\omega)] = - \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \frac{\text{Im} [\chi_{J_\alpha J_\beta}^R(\mathbf{q}, \omega)]}{\omega}, \quad (3.21)$$

où $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$ et \mathbf{q} et ω correspondent respectivement au vecteur d'onde et à la fréquence du photon incident. On prend la limite $\mathbf{q} \rightarrow 0$ afin d'obtenir la conductivité optique, cependant nous allons traiter par la suite différentes directions du vecteur d'onde \mathbf{q} . Cela est relié au fait que le potentiel vecteur (de la lumière) est orienté perpendiculairement à la direction de propagation, donc changer \mathbf{q} peut être vu comme une modification de la polarisation de l'onde lumineuse dans notre modèle, de manière semblable à ce que

l'on a écrit pour le tableau 2.4. De plus, comme pour le cas sans champ magnétique, on va ici étudier la conductivité optique de chaque noeud séparément, ce qui est une bonne approximation si l'on néglige la diffusion d'électrons d'un noeud de Weyl à un autre par interaction coulombienne ou par des impuretés. On écrit alors $\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_{\tau} \sigma_{\alpha\beta}(\omega, \tau)$.

À partir de maintenant, nous allons nous concentrer sur deux types de réponses spécifiques pour la lumière : des réponses optiques pour une lumière polarisée circulairement droite (RCP) et gauche (LCP). Si l'on considère le cas $\mathbf{q} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ alors, on a pour chaque noeud

$$\sigma_{\text{LCP}}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) - i\sigma_{xy}(\omega), \quad (3.22)$$

$$\sigma_{\text{RCP}}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) + i\sigma_{xy}(\omega). \quad (3.23)$$

En absence d'interactions, la conductivité optique en champ magnétique présente aussi des règles de sélection bien connues pour un semimétal de Weyl [95]. Ces règles imposent des transitions optiques possibles entre les différents niveaux de Landau. Dans la configuration donnée précédemment, on les trouve en calculant les éléments de matrice de l'opérateur courant en seconde quantification à $\mathbf{q} = 0$. Ce dernier s'écrit, pour une composante $\alpha \in \{x, y, z\}$:

$$\Lambda_{n_1 k_z, n_2 k_z}^{\alpha}(\mathbf{q}_{\perp} = 0) = \langle \psi_{n_1, k_z} | j_{\alpha} | \psi_{n_2, k_z} \rangle, \quad (3.24)$$

où

$$|\psi_{n, k_z}\rangle = \begin{pmatrix} u_{n, k_z} |n-1\rangle \\ v_{n, k_z} |n\rangle \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

et

$$j_{\alpha} = -\frac{\delta h}{\delta A_{\alpha}} \propto \sigma_{\alpha} + t_{\alpha} \sigma_0. \quad (3.26)$$

Ici, j_{α} est l'opérateur courant en première quantification qui est défini par la dérivée partielle du hamiltonien par rapport au potentiel vecteur du champ électromagnétique de la lumière. Après couplage minimal, on a que l'opérateur courant est directement proportionnel aux matrices de Pauli (sans inclinaison des cônes), étant donné que notre hamiltonien est linéaire en \mathbf{k} . Ensuite $|\psi_{n, k_z}\rangle$ est le spineur provenant de l'équation (3.7). En considérant le vecteur d'onde du photon égal à zéro, cela implique que les fonctions $h_{n, x}(\mathbf{r})$ peuvent être remplacées par $|n\rangle$, états propres de l'oscillateur harmonique quantique en une dimension. Par exemple, s'il n'y a aucune inclinaison selon x , on a pour j_x le règles de sélection : $|n_2| = |n_1| + 1$ et $|n_2| = |n_1| - 1$, où n_2 est le niveau final et n_1 le niveau initial. On peut expliciter cela en

mentionnant quelques transitions :

$$\begin{aligned}
 &0 \rightarrow 1 \quad -1 \rightarrow 0 \\
 &-1 \rightarrow 2 \quad 1 \rightarrow 2 \\
 &-2 \rightarrow 3 \quad 2 \rightarrow 3 \quad \dots
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

Pour le cas des réponses LCP et RCP, on peut calculer ces règles de sélection de la même manière, et on trouve :

$$\begin{array}{cc}
 \text{LCP} & \text{RCP} \\
 -1 \rightarrow 0 & 0 \rightarrow 1 \\
 -2 \rightarrow 1 & -1 \rightarrow 2 \\
 -3 \rightarrow 2 & -2 \rightarrow 3 \quad \dots
 \end{array} \tag{3.28}$$

Il nous faut alors noter que ces règles de sélection sont identiques pour les cas avec ou sans interactions coulombiennes. Bien que les interactions entre les électrons puissent coupler différents niveaux de Landau entre eux, nous considérons uniquement le cas où la fonction de réponse associée à une transition optique n'est couplée qu'à elle-même. Cette discussion a lieu dans l'annexe B.

Enfin, nous insistons sur certaines symétries qui sont indépendantes des interactions électron-électron dans notre système. Nous avons vu à la section 2.4 les différentes symétries reliant l'absorption optique dans les différents noeuds. Les mêmes arguments sont valides dans le cas de la conductivité optique, par exemple, les réponses LCP et RCP sont reliées par la symétrie de renversement du temps : pour des noeuds isolés, on a

$$\sigma_{\text{LCP},\mathbf{B}}(\omega, \tau) = \sigma_{\text{RCP},-\mathbf{B}}(\omega, \bar{\tau}), \tag{3.29}$$

où $\bar{\tau}$ représente le partenaire par renversement du temps du noeud τ . Dans un système avec symétrie de renversement du temps, on trouve $\sigma_{\text{LCP},\mathbf{B}}(\omega) = \sigma_{\text{RCP},-\mathbf{B}}(\omega)$ pour la conductivité optique totale.

3.2 Conductivité optique interbande pour un semimétal de Weyl avec une inclinaison des cônes parallèle au champ

On présente dans cette section les résultats de la conductivité optique selon les différentes variables du problème, comme l'inclinaison des noeuds, le champ magnétique et la constante diélectrique. On se concentre ici sur la conductivité optique interbande à température nulle. Nous allons étudier pour le moment le cas $\mathbf{B} \parallel \mathbf{t} \parallel \mathbf{q}$, où \mathbf{q} est le vecteur d'onde de la lumière qui est perpendiculaire au miroir.

Sauf mention contraire, tous les résultats numériques présents dans cette section ont pour paramètres $\mathbf{t} = (0, 0, 0.5)$, $B = 20 \text{ T}$ et $\mathbf{B} \parallel \mathbf{t} \parallel \mathbf{q}$, $\epsilon_\infty = 25$, $v_F = 3 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$ et $\mu = \hbar v_F / \ell_B \simeq 34 \text{ meV}$. Ces dernières valeurs se veulent (relativement) réalistes quant aux matériaux existants [21, 27, 42, 87]. Le delta de Dirac présent dans l'expression pour la conductivité optique a été numériquement substitué par une lorentzienne de largeur à mi-hauteur $\eta = 2 \text{ meV}$ [28]. Les détails techniques de ce calcul sont présentés à la fin de l'annexe B.

3.2.1 Noeud de Weyl isolé

Tout d'abord, on étudie la conductivité optique interbande à basse énergie résolue en noeud, c'est-à-dire pour chaque noeud de Weyl séparément. Ce calcul est fait pour les différents noeuds et les relations de symétrie du tableau 2.3 donnent les différents hamiltoniens à basse énergie. Ce résultat est représenté à la figure 3.2.

On se concentre sur une fenêtre à basse énergie où seuls les niveaux de Landau à basse énergie contribuent ($n \in [-3, 3]$). Chaque pic dans la partie réelle de la conductivité optique correspond à une transition entre deux niveaux de Landau. Cette courbe est caractéristique d'un système de niveaux de Landau et on retrouve des similarités avec le cas bidimensionnel [96]. En absence de champ magnétique, la conductivité optique est linéaire en fréquence à basse fréquence. On retrouve cette tendance en champ magnétique également. Cet effet est visible pour des champs magnétiques faibles ou modérés ou bien si l'on dispose d'une plus grande plage en fréquence [95].

Le résultat principal de la figure 3.2 repose sur le fait que les noeuds $\tau = 1$ et 2 absorbent la lumière polarisée droite à plus basse fréquence que les noeuds $\tau = 3$ et 4 au niveau du seuil d'absorption uniquement. Dans ce cas précis, le niveau de Fermi ne croise que le niveau de Landau chiral et non les niveaux de Landau massifs, et donc les gaps optiques pour les

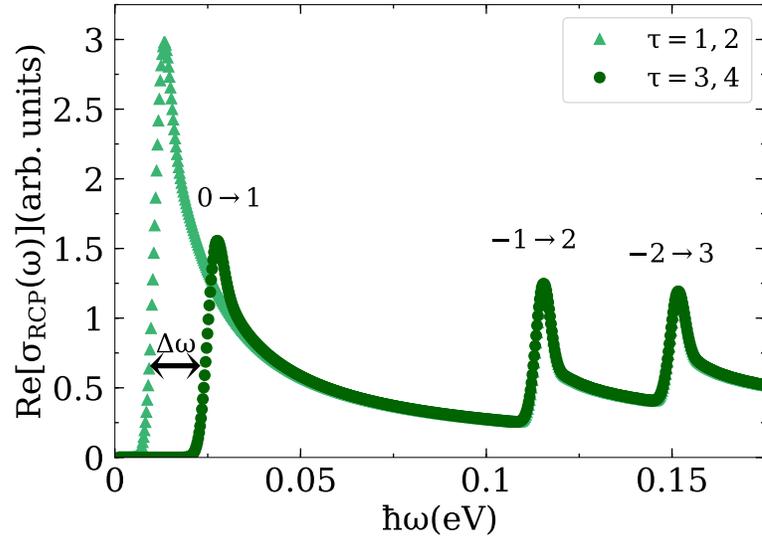


FIGURE 3.2 Conductivité optique à basse énergie résolue en noeud avec interactions de Coulomb sous fort champ magnétique externe sous illumination de lumière RCP. La courbe composée de triangles représente les noeuds $\tau = 1, 2$ et la courbe de cercles leurs partenaires de renversement du temps, les noeuds $\tau = 3, 4$. Chaque pic représente une transition possible entre deux niveaux de Landau, qui sont indiqués sur la figure. Comme mentionné à la figure 3.1, les noeuds reliés par renversement ont dans cette configuration des gaps optiques différents, ce qui est dénoté ici par l'écart $\Delta\omega$ entre les seuils d'absorption de ces mêmes noeuds, pour la transition $0 \rightarrow 1$.

transitions impliquant uniquement des niveaux de Landau non chiraux sont identiques pour tous les noeuds. Ceci explique que les pics reliés aux transitions n'impliquant pas le niveau chiral sont situés aux mêmes fréquences. L'écart en fréquence de l'activation optique des noeuds reliés par symétrie par renversement du temps est noté $\Delta\omega$, et est directement reliée à la polarisation de vallée que nous avons mentionnée dans le cas sans champ magnétique. L'on peut voir cependant que dans ce cas, cette dernière est bien plus importante que dans le cas sans champ magnétique. On dira alors qu'elle est complète, puisque sur une certaine plage de fréquence, seul un ensemble réduit de noeuds absorbe la lumière. Ce phénomène peut être compris dans le cas sans interaction par une différence de gaps optiques pour les noeuds reliés par symétrie de reversement du temps, comme montré sur la figure 3.1.

Nous n'avons mentionné que la conductivité optique RCP, mais nous pouvons commenter brièvement ce qui se passe pour des photons LCP. Le champ magnétique brise *globalement* la symétrie de renversement du temps du système. Pour le cas sans champ magnétique, cette symétrie était conservée, et on avait alors $\sigma_{\text{LCP}}(\omega, \tau) = \sigma_{\text{RCP}}(\omega, \bar{\tau})$. Ce résultat n'est plus valide à présent, comme on l'a montré avec l'équation (3.29). La symétrie de renversement

du temps étant brisée, les lumières LCP et RCP ne sont pas absorbées de la même façon par le système (ce qu'on appelle le dichroïsme circulaire). Étant donné que la lumière LCP a des règles de sélection différentes pour les transitions entre les niveaux de Landau, ce sera cette fois les noeuds $\tau = 3, 4$ qui absorberont la lumière avant les noeuds $\tau = 1, 2$. Aussi, $\Delta\omega$ prendra une valeur différente dans ce cas et le seuil d'absorption sera déplacé vers les plus hautes fréquences.

3.2.2 Effet de l'inclinaison des cônes

Dans notre modèle, l'inclinaison du noeud est le paramètre qui brise la symétrie de renversement du temps *effective* à basse énergie, comme on l'a vu sans champ magnétique dans la section 2.4. La différence du gap optique entre les noeuds 1 et 3 (reliés par symétrie de renversement du temps) provient de l'inclinaison parallèle à la direction du champ magnétique.

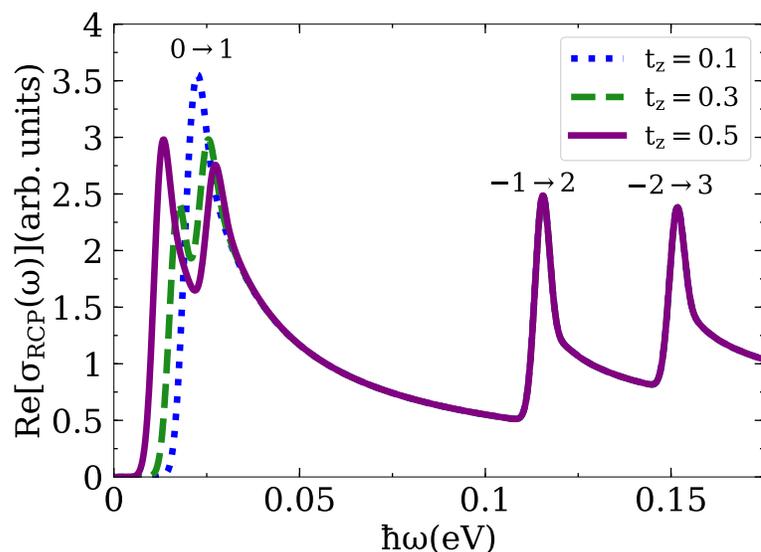


FIGURE 3.3 Conductivité optique totale, c'est-à-dire la somme de la contribution de chaque noeud, en fonction de la fréquence pour une lumière RCP. Les différentes courbes représentent trois valeurs de vecteur d'inclinaison : en bleu $t_z = 0.1$, en vert $t_z = 0.3$ et en violet $t_z = 0.5$. Les transitions permises sont indiquées au-dessus de chaque pic.

On observe que, plus l'inclinaison du cône est grande, plus la séparation entre le pic de la transition $0 \rightarrow 1$ pour les noeuds $\tau = 1, 2$ et $\tau = 3, 4$ est importante. Si l'inclinaison est trop faible, alors la somme des contributions des différents noeuds ne conduit qu'à un seul pic, étant donné que la symétrie anti-unitaire à basse énergie n'est que *faiblement* brisée.

Dans ce cas, une largeur à mi-hauteur de lorentzienne correspondant à $\eta = 2 \text{ meV}$ rend invisible tout dédoublement entre les pics de la transition $0 \rightarrow 1$.

Sans inclinaison des noeuds et pour un potentiel chimique non nul, les réponses LCP et RCP seront différentes pour chaque noeud. Cependant, la combinaison de la symétrie de renversement du temps dans le modèle, en plus de la symétrie anti-unitaire à basse énergie implique que la réponse RCP sera la même pour tous les noeuds. D'où la nécessité d'une inclinaison des cônes pour avoir le double pic, en plus du champ magnétique. L'apparition du double pic pour la transition $0 \rightarrow 1$ dans la conductivité optique totale est la manifestation observable de $\Delta\omega$, dont on donnera une définition mathématique par la suite.

3.2.3 Effet du champ magnétique et du potentiel chimique

Une autre variable du problème est le champ magnétique. Alors que l'inclinaison des cônes est intrinsèque au semimétal de Weyl, le champ magnétique lui peut être modifié expérimentalement. Tout d'abord, nous devons calculer la dépendance du potentiel chimique en fonction du champ magnétique. Cette dépendance est connue pour un semimétal de Weyl [97].

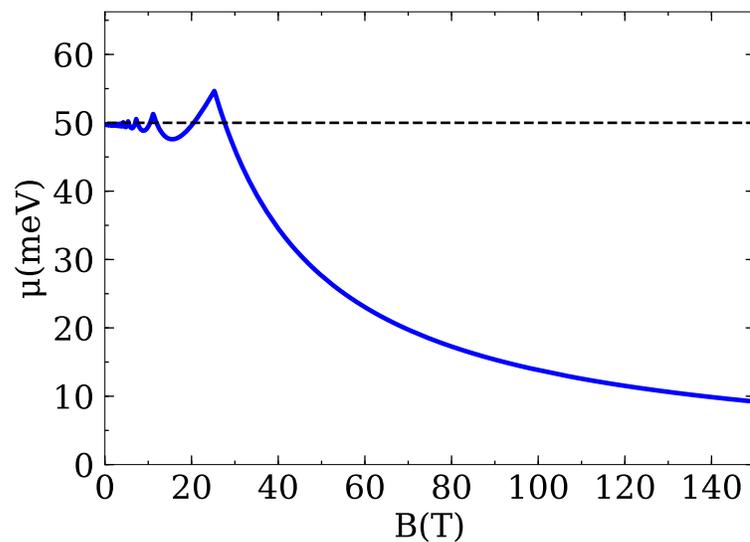


FIGURE 3.4 Dépendance du potentiel chimique en champ magnétique. On fixe le potentiel chimique $\mu = 50 \text{ meV}$ à un champ magnétique de $B = 0.5 \text{ T}$. On demande ensuite que le nombre de particules reste constant dans le système.

À faible champ, le potentiel chimique oscille autour de sa valeur sans champ magnétique. Ceci est dû à deux phénomènes en compétition. Premièrement, plus le champ augmente,

plus l'on peut mettre d'électrons dans un niveau de Landau. Deuxièmement, plus le champ augmente, plus les niveaux de Landau se séparent en énergie, car $\hbar v_F / \ell_B$ augmente, et donc sont déplacés au dessus du potentiel chimique. Dès que le premier niveau en bande de conduction (ou valence si le potentiel chimique sans champ magnétique est situé en bande de valence) passe au dessus du potentiel chimique, alors il ne reste que le niveau de Landau chiral qui ne disperse pas en fonction du champ magnétique. Dans ce cas, plus le champ magnétique augmente, plus la dégénérescence macroscopique du niveau de Landau chiral augmente, plus on peut mettre d'électrons dans ce niveau. À fort champ, le potentiel chimique décroît de manière asymptotique en $1/B$ afin de garder le nombre d'électrons fixe.

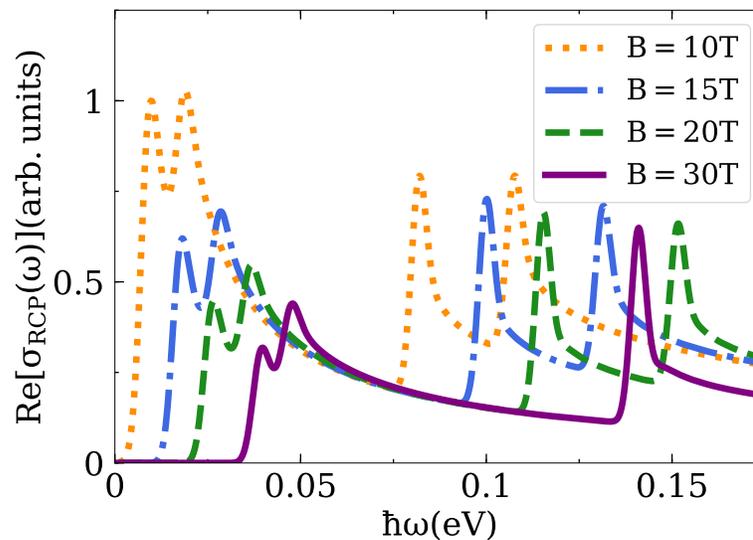


FIGURE 3.5 Conductivité optique totale en fonction de la fréquence pour une lumière RCP. Les différentes courbes représentent la conductivité optique pour différentes valeurs de champ magnétique. Seules les transitions impliquant les niveaux $n \in [-3, 3]$ sont montrées ici. On a choisi $\mu = \hbar v_F / \ell_B$ pour $B = 10$ T.

Armés de notre connaissance de la fonction $\mu(B)$, il nous est désormais plus facile de comprendre la figure 3.5. On a choisi de fixer le potentiel chimique juste en-dessous du premier niveau de Landau en bande de conduction à $B = 10$ T. Ce choix permet de maximiser la séparation entre les pics des différents noeuds pour la transition $0 \rightarrow 1$. En effet, étant donné que l'inclinaison du cône comprend un terme linéaire en k_{\parallel} , si le potentiel chimique croise exactement $k_{\parallel} = 0$, alors les gaps optiques pour tous les noeuds seront égaux. On sait que plus le champ magnétique augmente, plus le potentiel chimique tend vers $\mu \rightarrow 0$. Ceci explique pourquoi, à mesure que B augmente, le dédoublement et l'amplitude des pics reliés à la transition $0 \rightarrow 1$ est de plus en plus réduite, ce qui se voit si l'on compare la courbe à $B = 10$ T et 30 T. Pour toutes les autres transitions, on a vu que plus le champ

magnétique augmente, plus la séparation entre les niveaux de Landau augmente également (typiquement $\hbar v_F / \ell_B \propto \sqrt{B}$). Cela explique l'éloignement respectif des pics pour toutes les autres transitions n'impliquant pas le niveau de Landau chiral.

3.2.4 Effet de la constante diélectrique

La constante diélectrique est le marqueur des interactions électron-électron dans notre système. Pour des semimétaux de Weyl comme TaAs, cette dernière est fortement anisotrope : on a $\epsilon_\infty \sim 900$ dans la direction [100] et $\epsilon_\infty \sim 35$ dans la direction [001] [21]. On peut alors avoir, en fonction de la direction de propagation de l'onde lumineuse et du champ magnétique, soit un comportement d'électrons libres ($\epsilon_\infty \simeq 900$) ou alors faiblement en interaction ($\epsilon_\infty \simeq 35$).

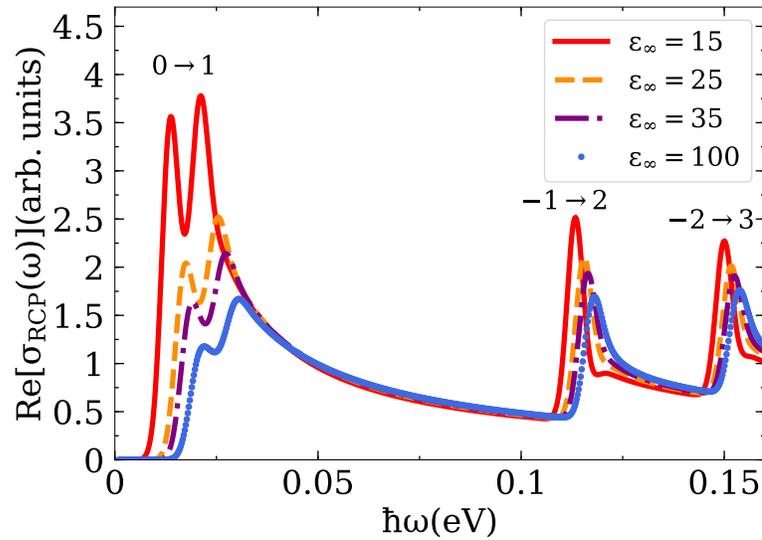


FIGURE 3.6 Conductivité optique totale en fonction de la fréquence pour une lumière RCP. Les différentes courbes représentent différentes valeurs de la constante diélectrique. Plus cette dernière est faible, plus les interactions de Coulomb à longue portée sont importantes dans notre système. À mesure que ϵ_∞ diminue, le dédoublement des pics de la transition $0 \rightarrow 1$ devient plus marquée. On a choisi ici $t_z = 0.3$, $B = 20 \text{ T}$, $v_F = 3 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$ et $\mu = \hbar v_F / \ell_B$.

La figure 3.6 montre la dépendance de la conductivité optique en fonction de différentes valeurs de la constante diélectrique. Pour $\epsilon_\infty = 100$, on a un comportement très proche de celui que l'on trouve pour des électrons libres. À mesure que ϵ_∞ diminue, de nouvelles caractéristiques apparaissent. Premièrement, l'amplitude des pics pour les différentes transitions augmente. Cet effet est encore plus marqué pour les pics impliquant le niveau de

Landau chiral. Plus les interactions coulombiennes sont fortes, plus le dédoublement du pic correspondant à la transition $0 \rightarrow 1$ apparaît de manière évidente. Deuxièmement, l'effet des corrélations électroniques se remarque aussi sur les autres pics. Pour $\epsilon_\infty = 15$ (qui est une valeur très faible), les pics impliquant les transitions autres que le niveau chiral sont déplacés à basse fréquence. Un second pic, plus faible en amplitude, est présent proche de la valeur attendue sans interactions. On peut voir sur la figure 3.6, pour $\epsilon_\infty = 15$, ce deuxième pic (proche du pic principal mais avec une amplitude bien inférieure), à $\hbar\omega \sim 0.12$ eV. Cet effet est un pur effet des interactions électroniques qui induit un pic type magnéto-exciton [94,98], c'est-à-dire une paire électron-trou liée par l'interaction coulombienne sous champ magnétique fort.

Les interactions de Coulomb ne sont pas nécessaires pour avoir cette séparation de pics de la transition $0 \rightarrow 1$, étant donné que l'on a vu que cela peut être relié à la différence des gaps optiques à potentiel chimique non nul en présence d'une inclinaison des cônes. Les interactions électron-électron ont alors pour principal effet d'augmenter l'amplitude de ces transitions, mais ne change pas la valeur en fréquence de la séparation entre les deux transitions $0 \rightarrow 1$. Un effet observable remarquable est que le paramètre empirique $\Delta\omega$ que l'on a défini à la figure 3.2 est (relativement) indépendant de la valeur de ϵ_∞ .

Par la suite, on considérera uniquement le cas sans interactions pour donner une expression analytique de $\Delta\omega$ et traiter les différentes configurations du problème. La présence ou non d'interactions de Coulomb ne modifie pas qualitativement notre discussion.

3.3 Polarisation de vallée complète sous fort champ magnétique

L'effet des différents paramètres du problème est désormais connu et l'on va ici se concentrer sur l'origine et la description qualitative de la séparation entre les transitions $0 \rightarrow 1$ des différents noeuds. Cette séparation est reliée à la polarisation de vallée comme on le verra. Dans le cas en fort champ magnétique, la polarisation de vallée est *complète*. De manière similaire au cas sans champ magnétique, on étudiera les différentes configurations possibles pour le champ magnétique et la direction de propagation de la lumière. Enfin, on discutera de l'application possible à des semimétaux de Weyl de la famille de TaAs.

3.3.1 Détection optique de la polarisation de vallée complète

Le cas sans champ magnétique n'offre malheureusement pas de signature évidente dans l'absorption optique totale pour la polarisation de vallée, qui n'était que partielle. Dans le cas avec champ magnétique, nous avons une polarisation de vallée complète de paires de noeuds proche du seuil d'absorption, ce qui est visible sur la figure 3.2. On remarque que sur une plage de fréquence de $\simeq 15$ meV, seuls les noeuds $\tau = 1$ et 2 absorbent la lumière. Cet intervalle $\Delta\omega$ sur lequel uniquement un ensemble limité de noeuds absorbe la totalité des photons incidents représente la polarisation de vallée complète de paires de noeuds.

Il nous faut également insister sur la nature topologique de cette polarisation de vallée. En effet, seules les transitions impliquant le niveau de Landau chiral jouent un rôle dans cette dernière. Cela provient du fait que le niveau zéro disperse de manière unidirectionnelle et ce, proportionnellement à la chiralité du noeud de Weyl. En raison de cette dispersion, le potentiel chimique ne croise le niveau chiral que pour une seule valeur notée k_{\parallel}^* . Cette intersection étant unique, cela implique une différence de gap optique pour les différents noeuds. Cet effet conduit à une levée de dégénérescence de la transition $0 \rightarrow 1$ et à un dédoublement du pic de cette transition provenant de différents noeuds (de manière plus générale, cela pourrait être une transition $0 \rightarrow |n|$ ou $-|n| \rightarrow 0$). Cette signature optique est la manifestation principale de la polarisation de vallée complète dans le cadre de ce chapitre. De plus, on relie la plage de fréquence (au niveau du seuil) $\Delta\omega$, réminiscent de cette polarisation de vallée, à l'écart entre les pics. Malheureusement, en regardant un spectre d'absorption optique total d'un semimétal de Weyl à basse énergie, on ne peut pas affirmer quel noeud absorbe à plus basse fréquence; c'est quelque chose que nous devons montrer *a priori*.

Pour ce faire, on peut définir la polarisation de vallée comme

$$VP_i(\omega) = \frac{\text{Re} [\sigma_i(\omega, \tau = 1)] - \text{Re} [\sigma_i(\omega, \tau = 3)]}{\text{Re} [\sigma_i(\omega, \tau = 1)] + \text{Re} [\sigma_i(\omega, \tau = 3)]}, \quad (3.30)$$

où $i = \{\text{LCP}, \text{RCP}\}$. Avec cette formule, on voit que si les réponses optiques pour les noeuds reliés par renversement du temps sont identiques, on a que $VP(\omega) = 0$. Cependant, si uniquement le noeud 1 absorbe et non le noeud 3, alors $VP(\omega) = 1$. Si on change la polarisation de RCP à LCP, alors $VP(\omega) = -1$, dans une autre plage de fréquence, pour un champ magnétique fixe. En revanche, en gardant la polarisation de l'onde lumineuse fixe, mais en changeant $\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$, alors cette fois $VP = 1$, pour une autre plage de fréquence. On a représenté cette fonction pour divers cas sur la figure 3.7. Pour la plage de fréquence où la polarisation de vallée est égale à 1 (en valeur absolue), on dit que la polarisation de vallée

est complète. Cet intervalle correspond à notre définition de $\Delta\omega$.

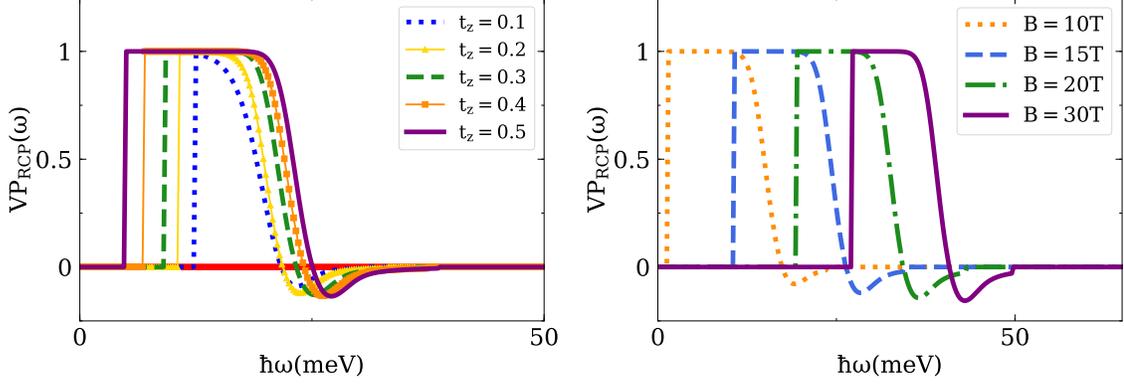


FIGURE 3.7 Polarisation de vallée complète en fonction de la fréquence dans un semimétal de Weyl avec interactions de Coulomb. La configuration et les paramètres sont identiques à ceux de la figure 3.2. La figure de gauche représente différentes courbes de la polarisation de vallée pour diverses valeurs de vecteur d'inclinaison. La figure de droite représente l'évolution de la polarisation de vallée pour plusieurs valeurs du champ magnétique ; à mesure que le potentiel chimique tend vers zéro, la plage de fréquence de la polarisation de vallée se restreint.

La lumière polarisée linéairement pouvant être vue comme une superposition cohérente de lumière RCP et LCP, il existe également une polarisation de vallée non nulle dans ce cas. Cela peut se comprendre par une activation des règles de sélection provenant à la fois de LCP et RCP.

Une expression de $\Delta\omega$ est alors nécessaire pour expliquer, au moins qualitativement, le comportement des divers paramètres étudiés auparavant et donner une intuition qualitative des phénomènes. On rappelle ici que l'on procède à un calcul sans prendre en compte les interactions de Coulomb mais uniquement les différences de gaps optiques. On définit alors

$$\begin{aligned} \hbar\Delta\omega &= \hbar|\Delta\omega_{\tau=1} - \Delta\omega_{\tau=3}|, \\ &= |(E_{n=1,k_{\parallel,1}^*,\tau=1} - E_{n=0,k_{\parallel,1}^*,\tau=1}) - (E_{n=1,k_{\parallel,3}^*,\tau=3} - E_{n=0,k_{\parallel,3}^*,\tau=3})|. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Si l'on considère que le potentiel chimique ne croise que les niveaux de Landau chiraux, alors on peut relier ce dernier à $k_{\parallel,1}^*$ et $k_{\parallel,3}^*$, vecteurs d'onde que croise le potentiel chimique respectivement pour les niveaux de Landau chiraux des noeuds $\tau = 1$ et $\tau = 3$. On peut

donc définir, dans le cas d'une inclinaison quelconque

$$k_{\parallel,1}^* = -\frac{\mu\gamma}{\hbar v_F(1 - \gamma t_{\parallel})}, \quad (3.32)$$

$$k_{\parallel,3}^* = -\frac{\mu\gamma}{\hbar v_F(1 + \gamma t_{\parallel})}. \quad (3.33)$$

Cela nous permet de trouver une expression analytique pour $\Delta\omega$:

$$\hbar\Delta\omega = \left| -\frac{2\mu\gamma t_{\parallel}}{1 - \gamma^2 t_{\parallel}^2} + \sqrt{\frac{2\hbar^2 v_F^2}{\gamma^3 \ell_B^2} + \frac{\mu^2}{(1 - \gamma t_{\parallel})^2}} - \sqrt{\frac{2\hbar^2 v_F^2}{\gamma^3 \ell_B^2} + \frac{\mu^2}{(1 + \gamma t_{\parallel})^2}} \right|. \quad (3.34)$$

Cette expression montre que si μ , B ou t_{\parallel} tendent vers zéro, alors $\Delta\omega = 0$, comme on l'avait pressenti en étudiant les divers dépendances indépendamment les unes des autres.

Deux limites sont d'intérêt ici, premièrement la limite où $\ell_B^{-1} \gg \mu/(\hbar v_F)$. Dans cette limite, le premier terme de l'équation (3.34) domine et $\hbar\Delta\omega \simeq 2|\mu\gamma t_{\parallel}/(1 - \gamma^2 t_{\parallel}^2)|$. Cette limite est dite *quantique*, ou limite à fort champ, car le potentiel chimique ne croise que le niveau chiral. Dans ce cas, $\Delta\omega$ dépend indirectement du champ magnétique à travers le potentiel chimique et on sait que si $B \rightarrow \infty$, $\mu \rightarrow 0$ donc $\Delta\omega = 0$.

L'autre limite d'intérêt est la limite à faible champ, c'est-à-dire pour $\ell_B^{-1} \ll \mu/(\hbar v_F)$. Dans ce cas, notre expression se réduit à $\Delta\omega = 2eBv_F^2 t_{\parallel}/(\gamma^2 \mu)$. Pour cette limite, on peut négliger la dépendance de μ en B et considérer que le potentiel chimique est approximativement constant. Ainsi, $\Delta\omega$ a une dépendance linéaire en B et en t_{\parallel} . On atteint alors le maximum de $\Delta\omega(B)$ pour $\ell_B^{-1} \sim \mu/(\hbar v_F)$ soit $\mu \sim \hbar v_F/\ell_B$, donc lorsque le potentiel chimique se trouve proche du premier niveau de Landau en bande de conduction. On justifie alors *a posteriori* notre choix de potentiel chimique pour nos diverses figures de la conductivité optique, étant donné que c'est la valeur du potentiel chimique qui maximise la plage de fréquence de la polarisation de vallée.

La dépendance très particulière de $\Delta\omega$ en fonction du champ magnétique externe, en raison de la nature topologique des niveaux de Landau chiraux, est alors la sonde principale de la polarisation de vallée complète. L'étude récente des propriétés optiques des semimétaux de Weyl en champ magnétique a récemment attiré beaucoup d'attention, en raison de la nature spéciale du niveau de Landau chiral en champ magnétique [26, 27].

Pour finir, nous notons que la polarisation de vallée prédite ici est fondamentalement différente de celle pour les métaux de transitions dichalcogènes, où les lumières RCP et LCP sont absorbées par des vallées différentes, dû à des règles de sélection. Ces dernières permettent la détection de la polarisation via la photoluminescence (en regardant la polari-

sation des photons émis) [61]. En outre, les gaps optiques des différentes vallées dans ces matériaux sont tous égaux.

3.3.2 Configurations de la polarisation de vallée non chirale et chirale

Jusqu'à présent nous nous sommes concentrés sur un cas spécifique : lorsque le champ magnétique est orienté parallèlement à la direction de propagation de la lumière et à l'inclinaison des noeuds, tous selon l'axe z , soit perpendiculairement au plan du miroir que nous avons défini dans notre modèle.

Cependant les cônes peuvent être inclinés dans une direction quelconque, dépendant du matériau [42,87]. Nous allons donc légèrement changer d'approche ici en se plaçant plus près des conditions réelles des matériaux étudiés et considérer le plan du miroir comme fixe et perpendiculaire à l'axe z ainsi que considérer le vecteur d'inclinaison comme quelconque. Nous connaissons déjà les différentes opérations de symétrie pour les diverses composantes via le tableau 2.3.

Pour commencer, concentrons nous uniquement sur le comportement de la dispersion des niveaux de Landau selon diverses configurations de champ magnétique, et également sur le gap optique entre les niveaux de Landau $n = 0$ et 1 à potentiel chimique non nul, la polarisation de vallée provenant de la spécificité de cette transition. On a présenté sur la figure 3.1 le cas où \mathbf{B} est orienté perpendiculairement au miroir. Dans ce cas, les gaps optiques sont identiques pour les noeuds $\tau = 1, 2$ ainsi que pour $\tau = 3, 4$, mais différents pour les deux paires de noeuds. On peut associer cela à la brisure de symétrie par inversion du temps étant donné que les gaps optiques pour les noeuds reliés par cette même symétrie ne sont plus équivalents. Si le champ magnétique est orienté parallèlement au miroir, alors la symétrie miroir est brisée. Cela se comprend par le fait que le champ magnétique est un pseudo-vecteur est donc change de signe par symétrie miroir s'il est parallèle à ce dernier. Puisqu'un vrai champ magnétique externe ne change évidemment pas de signe par symétrie miroir dans un cristal, dans ce cas, on dit que cette symétrie est brisée dans cette configuration. Il s'ensuit que les gaps optiques pour les noeuds reliés par un miroir ne sont plus égaux, mais il se trouve qu'une symétrie est préservée, la symétrie $\mathcal{M} \times \mathcal{T}$ (miroir fois renversement du temps). En effet, sous l'effet combiné des symétries \mathcal{M} et \mathcal{T} , le champ magnétique change deux fois de signe et donc les gaps optiques pour les noeuds reliés par cette symétrie sont identiques. Dans notre modèle, il s'agit des paires $\tau = 1, 4$ ainsi que $\tau = 2, 3$. Pour finir, si le champ magnétique est dans une direction arbitraire (c'est-à-dire ni parallèle ni perpendiculaire au miroir, alors aucune symétrie n'empêche les gaps optiques d'être différents. Ces considérations sont résumées dans le tableau 3.1.

TABLE 3.1 Gaps optiques pour les transitions interbande entre les niveaux de Landau impliquant le niveau chiral. Le semimétal de Weyl préserve la symétrie par inversion du temps et possède un plan miroir. Notre modèle comporte quatre cônes de Weyl inclinés. La notation (n, m) signifie que les noeuds n et m ont les mêmes gaps optiques. On suppose le vecteur d'inclinaison quelconque tout en gardant $|\mathbf{t}| < 1$.

Configuration	Symétrie préservée	Gaps optiques
$\mathbf{B} \perp$ miroir	miroir	$(1, 2) \neq (3, 4)$
$\mathbf{B} \parallel$ miroir	(miroir) \times (renversement du temps)	$(1, 4) \neq (2, 3)$
$\mathbf{B} \not\parallel, \not\perp$ miroir	aucune	$1 \neq 2 \neq 3 \neq 4$

Outre les gaps optiques, nous pouvons étudier avec la même approche ce qui se passe pour la polarisation de vallée pour les différentes configurations à notre disposition. Cette fois-ci, il nous faut prendre en compte le vecteur d'onde de la lumière pour avoir une théorie complète des diverses configurations. Nous avons déjà étudié longuement le cas $\mathbf{B} \parallel \mathbf{q} \perp$ miroir. Pour cette configuration, il existe une polarisation de vallée complète entre les paires $\tau = 1, 2$ et $\tau = 3, 4$ avec une conductivité optique identique pour les noeuds reliés par symétrie miroir. Notons que si l'on change simultanément le signe de \mathbf{B} et de \mathbf{q} , alors la polarisation de vallée change de signe, c'est-à-dire qu'elle est déplacée de $(1, 2)$ à $(3, 4)$.

Ensuite, dans le cas où $\mathbf{B} \parallel \mathbf{q} \parallel$ miroir, les gaps optiques des noeuds reliés par la symétrie \mathcal{MT} sont identiques. Dans ce cas, la polarisation de vallée change de $(1, 2)$ à $(1, 4)$. Notons que tant que la lumière se propage colinéairement au champ magnétique, alors les noeuds ayant les mêmes gaps optiques ont le même spectre optique.

Reste trois cas possibles. Premièrement pour un vecteur d'onde de la lumière quelconque mais pour $\mathbf{B} \perp$ miroir, une polarisation de vallée complète existe toujours entre les noeuds reliés par renversement du temps. Cependant, les noeuds reliés par symétrie miroir n'ont plus les mêmes règles de sélection optiques car $\mathbf{q} \not\parallel \mathbf{B}$. Il existe alors une polarisation de vallée partielle entre ces noeuds. Ces derniers commencent à absorber la lumière à la même fréquence mais pas avec la même intensité.

Deuxièmement, toujours en gardant $\mathbf{q} \not\parallel \mathbf{B}$ mais avec $\mathbf{B} \parallel$ miroir, une polarisation de vallée complète entre les noeuds $\tau = 1, 4$ et $\tau = 2, 3$ existe. En revanche, pour la même raison que précédemment, les noeuds reliés par la symétrie \mathcal{MT} n'ont pas le même spectre optique, il existe alors une polarisation de vallée partielle entre ces noeuds.

Troisièmement, le cas où le champ magnétique n'est ni parallèle, ni perpendiculaire au

TABLE 3.2 Polarisation de vallée optique interbande sous champ magnétique externe \mathbf{B} pour un semimétal de Weyl avec symétrie de renversement du temps et un plan miroir. Le vecteur d'onde de la lumière polarisée circulairement est \mathbf{q} . Le vecteur d'inclinaison est toujours considéré comme quelconque. La notation (n, m) signifie que les noeuds n et m absorbent la lumière avec la même intensité. La notation $[n, m]$ signifie en revanche que les noeuds n et m n'absorbent pas la lumière avec la même intensité mais possèdent des gaps optiques identiques conduisant à une polarisation de vallée partielle. L'indication "complète" signifie que la polarisation de vallée est complète pour une plage de fréquence finie.

Configuration	Polarisation de vallée
$\mathbf{B} \perp$ miroir, $\mathbf{q} \parallel \mathbf{B}$	$(1, 2) \neq (3, 4)$ complète
$\mathbf{B} \perp$ miroir, $\mathbf{q} \not\parallel \mathbf{B}$	$[1, 2] \neq [3, 4]$ complète
$\mathbf{B} \parallel$ miroir, $\mathbf{q} \parallel \mathbf{B}$	$(1, 4) \neq (2, 3)$ complète
$\mathbf{B} \parallel$ miroir, $\mathbf{q} \not\parallel \mathbf{B}$	$[1, 4] \neq [2, 3]$ complète
$\mathbf{B} \not\parallel, \not\perp$ miroir, $\forall \mathbf{q}$	$1 \neq 2 \neq 3 \neq 4$ complète

plan du miroir. Tous les noeuds ont alors des gaps optiques différents (voir les équations (3.19) et (3.18)). Il s'ensuit que l'absorption optique pour les quatre noeuds est en principe différente car toutes les symétries du cristal sont brisées. On a représenté sur la figure 3.8 ce cas, en considérant $\mathbf{q} \parallel \mathbf{B}$ pour plus de simplicité numérique. Cette configuration particulière donne lieu à l'excitation optique d'un unique noeud de Weyl sur une certaine plage de fréquence, on dit que l'on a une polarisation de vallée *chirale*. Toutes ces configurations ont été rassemblées dans le tableau 3.2.

Il existe un dernier cas très particulier que nous devons mentionner, où le champ magnétique est perpendiculaire au vecteur d'inclinaison pour tous les noeuds. Dans notre modèle, cela est possible si les noeuds sont inclinés parallèlement ou perpendiculairement au plan du miroir. Dans ce cas, comme indiqué sur la figure 3.1, les gaps optiques pour tous les noeuds sont identiques et donc la polarisation de vallée disparaît. Cet effet est possible dans de vrais matériaux comme nous le verrons dans la section suivante.

3.3.3 Application aux matériaux possédant des noeuds de Weyl à basse énergie

Jusqu'à présent, nous n'avons utilisé qu'un modèle jouet de semimétal de Weyl à quatre noeuds pour prédire une polarisation de vallée complète d'origine topologique, car reliée à la nature chirale du niveau de Landau zéro en fort champ magnétique. Nous avons prédit que la

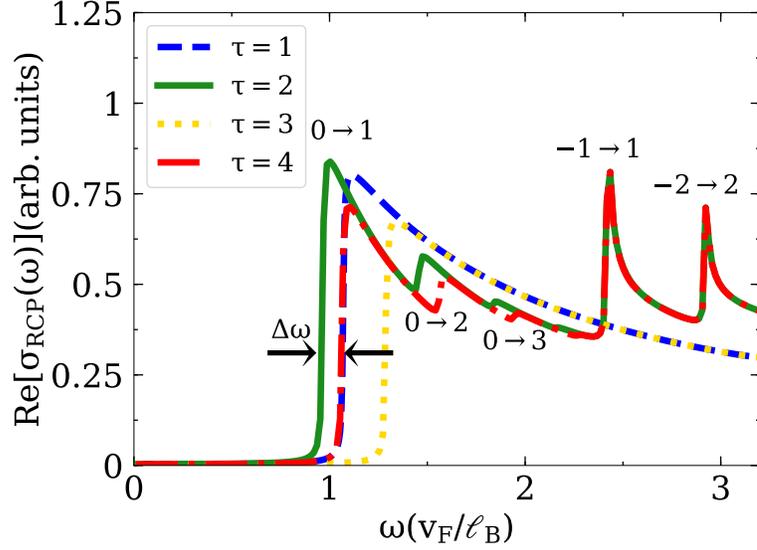


FIGURE 3.8 Absorption optique interbande résolue en noeud pour un semimétal de Weyl à quatre noeuds. Le champ magnétique est choisi colinéaire au vecteur d’inclinaison pour le noeud $\tau = 1$ soit $\mathbf{t} = (0.25, 0, 0.43)$ et la lumière se propage parallèlement au champ magnétique. On a choisi ici $\mu = 0.2\hbar v_F/\ell_B$ et $\epsilon_\infty = \infty$ (système sans interactions de Coulomb). Dans cette configuration, il y a une plage de fréquence $\Delta\omega = 0.13v_F/\ell_B$ où seul le noeud $\tau = 2$ absorbe la lumière. Cela correspond à $\hbar\Delta\omega \simeq 3.5$ meV pour $B = 20$ T et $\hbar\Delta\omega \simeq 5$ meV pour $B = 40$ T. Compte tenu la configuration étudiée, de nouvelles transitions sont activées comme $0 \rightarrow |n|$ et $-|n| \rightarrow |n|$.

mesure principale de cet effet est la séparation du pic venant des transitions interbandes entre les niveaux de Landau $0 \rightarrow |n|$ (ou $-|n| \rightarrow 0$) dans le spectre de l’absorption optique. Ce modèle jouet nous a permis de comprendre comment différentes configurations donnent lieu à des polarisations de vallée impliquant différentes paires de noeuds, voire qu’un seul noeud. Il nous faut désormais extrapoler ces résultats à des matériaux réels possédant des fermions de Weyl à basse énergie en se concentrant sur les semimétaux non-centrosymétriques TaAs, TaP, NbAs ainsi que NbP [18, 42, 87]. TaAs et TaP sont les plus prometteurs dans le cadre de cette étude car l’approximation linéaire à basse énergie est valide sur une plus grande plage de fréquence.

Cette famille de semimétaux de Weyl possède deux ensembles de noeuds de Weyl, denotés W1, au nombre de 8, et W2, au nombre de 16. Les noeuds W1 sont situés dans le plan $k_z = 0$ et sont reliés par symétrie par renversement du temps ainsi que par un axe C_{4v} , ce qui les empêche d’être inclinés dans la direction z . Au contraire, les noeuds W2 situés dans des plans à k_z fini, mais symétriques par rapport à $k_z = 0$ (8 pour $k_z > 0$ et 8 pour $k_z < 0$), peuvent être inclinés selon l’axe z .

Cette différence fondamentale entre les noeuds W1 et W2 conduit à des différences pour les spectres optiques lorsque $\mathbf{B} \parallel \mathbf{q} \parallel \hat{\mathbf{z}}$. Dans cette configuration, toutes les symétries miroirs \mathcal{M} (qui sont parallèles au champ magnétique) ainsi que la symétrie de renversement du temps \mathcal{T} sont brisées. En revanche le produit \mathcal{MT} ainsi que l'axe de rotation C_{4v} sont préservés. Cela implique que tous les noeuds W1 ont le même spectre optique. Cela n'est cependant pas vrai pour les noeuds W2 étant donné que les symétries préservées ne connectent que 8 des 16 noeuds.

Il existe donc, en principe, un effet de polarisation de vallée d'octuplet de noeuds pour les noeuds W2 dans ces matériaux, qui se manifesterait par le même phénomène de dédoublement de la transition optique $0 \rightarrow 1$. Cette dernière est représentée schématiquement à la figure 3.9. Il faut noter que, malgré le fait qu'il n'existe pas de polarisation de vallée chirale, un résultat intéressant est l'existence d'un moment dipolaire non nul dû à l'excitation optique dans cette configuration, où des électrons de chiralité $+1$ sont excités dans la partie supérieure de la zone de Brillouin ($k_z > 0$) et des électrons de chiralité -1 dans la partie inférieure.

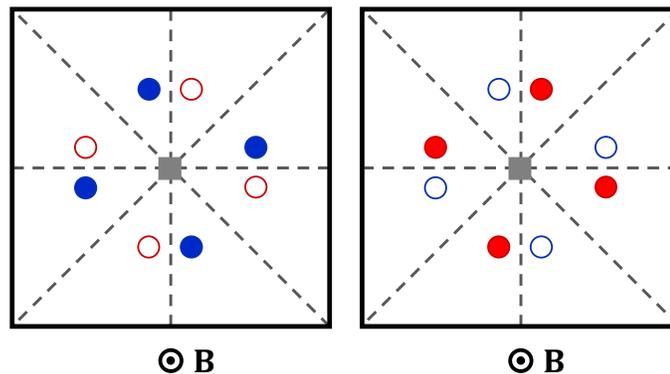


FIGURE 3.9 Schéma de l'absorption optique pour les noeuds W2 dans le matériau TaAs. Le champ magnétique ainsi que la propagation de la lumière sont selon l'axe \mathbf{z} . Le carré gris représente l'axe de rotation C_{4v} et les traits en pointillés les plans des différents miroirs. La figure de gauche représente les noeuds localisés à $k_z > 0$ tandis que celle de droite ceux à $k_z < 0$. Les cercles pleins représentent les noeuds qui absorbent la lumière dans un certain intervalle de fréquence tandis que ceux vides n'absorbent pas, dans ce même intervalle. Les cercles bleus et rouges représentent les deux chiralités opposées.

On a également tracé sur la figure 3.10 la dépendance particulière en champ magnétique de cette polarisation de vallée à l'aide de paramètres issus de calculs de premiers principes dans la formule analytique pour $\Delta\omega$ (c.f. équation (3.34)). Une telle dépendance non triviale pourrait en principe écarter toute autre origine d'une séparation de la transition $0 \rightarrow |n|$ ou $-|n| \rightarrow 0$.

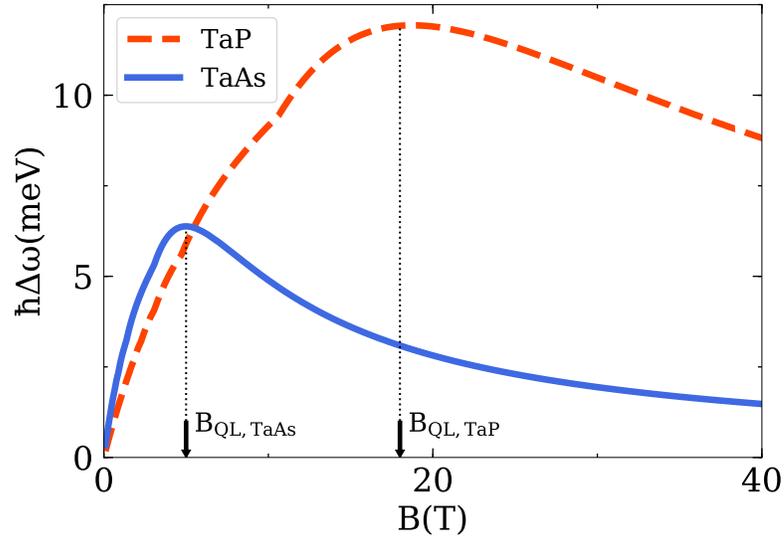


FIGURE 3.10 Dédoublment en fréquence de la transition $0 \rightarrow 1$ pour TaAs et $-1 \rightarrow 0$ pour TaP pour les noeuds de Weyl W2 en fonction du champ magnétique avec la configuration $\mathbf{B} \parallel \mathbf{q} \parallel \hat{\mathbf{z}}$. Les paramètres choisis sont issus de calculs *ab initio* de la référence [87] : pour TaAs on a $\mu = 13$ meV (sans champ magnétique), $t_{\parallel} = 0.47$, $v_F = 3.0 \times 10^5$ m.s $^{-1}$ et $\gamma = 1.09$; pour TaP, $\mu = -21$ meV (sans champ magnétique), $t_{\parallel} = 0.5$, $v_F = 2.77 \times 10^5$ m.s $^{-1}$ et $\gamma = 1.16$. Les flèches représentent approximativement l'entrée dans la limite quantique donnée par B_{QL} , c'est-à-dire quand seul le niveau de Landau chiral croise le potentiel chimique. On a approximativement $B_{QL} = 5$ T pour TaAs et 18 T pour TaP.

On rappelle aussi brièvement qu'il existe intrinsèquement une polarisation de vallée entre les noeuds W1 et W2 dans les matériaux de la famille de TaAs. Cette dernière est triviale parce qu'aucune symétrie ne relie ces noeuds, et ont donc des gaps optiques différents. De plus, cette polarisation de vallée n'est pas contrôlable : les noeuds activés ne peuvent être changés en modifiant la configuration du champ magnétique et la direction de propagation de la lumière.

Des expériences récentes ont été réalisées sur des semimétaux de Weyl en fort champ magnétique [26,27]. Parmi elles, des caractéristiques pouvant laisser penser qu'un tel dédoublement est présent existent, notamment dans la référence [26] qui mentionne un dédoublement impliquant le niveau de Landau chiral pour les noeuds W2 du matériaux NbP. Les auteurs attribuent ce dédoublement à une différence de gaps optiques pour les transitions $0 \rightarrow 1$ et $-1 \rightarrow 0$ d'un même noeud de Weyl sous illumination de lumière linéairement polarisée. Afin de faire correspondre théoriquement cette séparation à leurs données, les auteurs utilisent un facteur *ad hoc* via un terme Zeeman censé modéliser la brisure de la symétrie particule-trou dans leur système. En revanche, dans notre modèle, ces transitions

sont excitées séparément par une lumière LCP et RCP. Il nous faut aussi rappeler que l'inclinaison des noeuds brise aussi la symétrie particule-trou, dans ce cadre, l'effet seul d'une inclinaison des cônes pourrait alors être envisageable. De plus les auteurs montrent qu'aucun dédoublement n'a lieu pour les noeuds W1, ce que notre modèle explique également, sans ajout de terme Zeeman.

Une autre possibilité mentionnée dans la section précédente, et que nous avons vu réalisable via la figure 3.8, est l'émergence d'une polarisation de vallée chirale complète. Cela est possible si le champ magnétique est orienté dans une direction quelconque, c'est-à-dire ni parallèlement, ni perpendiculairement à un axe de symétrie comme un plan de miroir ou un axe de rotation. Cet effet a été évoqué comme pouvant donner lieu à un photocourant sous fort champ magnétique appelé effet photogalvanique magnétique [99–101].

3.4 Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons développé une théorie de l'absorption optique interbande sous fort champ magnétique en incluant des interactions électrons-électrons dans l'approximation GRPA (voir annexe B) pour un semimétal de Weyl avec des noeuds inclinés.

Le résultat principal repose sur le fait, qu'en champ magnétique externe fort, une polarisation de vallée *complète* est possible en brisant la symétrie anti-unitaire à basse énergie, soit par l'inclinaison des noeuds, soit par des termes non linéaires (voir annexe C). L'existence d'un champ magnétique externe réduit la symétrie du cristal et conduit donc à une polarisation de vallée entre des noeuds qui étaient équivalents par symétrie en absence de champ externe. De plus, nous sommes parvenus à relier cette polarisation de vallée à la présence du niveau de Landau *chiral*, ce qui associe intimement cette dernière à la nature topologique des fermions de Weyl. Cela nous a permis de relier la plage de fréquence où la polarisation de vallée est non nulle à l'écart $\Delta\omega$ des gaps optiques entre les niveaux $n = 0$ et 1 pour les noeuds reliés par symétrie de renversement du temps.

Le comportement singulier de $\Delta\omega$ en fonction du champ magnétique nous a permis de comprendre que le potentiel chimique doit se trouver à l'entrée de la limite quantique, c'est-à-dire lorsqu'il croise le niveau de Landau chiral mais proche du premier niveau de Landau non chiral afin de maximiser la polarisation de vallée. Enfin une inclinaison des cônes selon la direction parallèle au champ est également nécessaire.

Nous avons montré que la manifestation expérimentale la plus claire et simple repose sur le dédoublement du pic associé à la transition optique $0 \rightarrow 1$ pour une lumière RCP

(ou $-1 \rightarrow 0$ pour LCP) en champ magnétique fort. Les interactions électron-électron ont tendance à accentuer l'amplitude des pics, particulièrement ceux associées à la transition $0 \rightarrow 1$. Cette séparation entre les pics correspond approximativement (au moins qualitativement) à $\Delta\omega$ et peut atteindre environ 15 meV dans les cas les plus optimistes.

Nous avons montré qu'une telle signature optique était possible et attendue dans les semimétaux de Weyl brisant la symétrie d'inversion spatiale et semble cohérente avec des mesures expérimentales [26,27]. Nous avons prédit, en se basant sur des calculs *ab initio* que cette séparation pouvait être de l'ordre de $\Delta\omega = 5 - 10$ meV pour TaAs et TaP pour des champ magnétiques raisonnables ($B < 20$ T). Une telle séparation entre des pics est détectable compte tenu de la résolution expérimentale actuelle [26,27,102,103].

Nous avons mentionné dans la section précédente que des mesures de transport, comme l'effet photogalvanique magnétique, constituent des sondes possibles pour la polarisation de vallée chirale que nous avons proposé. On peut se poser la question, qu'en est il pour une polarisation de vallée complète non chirale ? Peut-on détecter cette dernière via des mesures de transport ? Nous tenterons de répondre à ces questions dans le prochain chapitre.

Chapitre 4

Théorie dérive-diffusion des semimétaux de Weyl sous fort champ magnétique

Dans ce chapitre, nous allons étendre nos résultats précédents sur la génération et la détection de la polarisation de vallée complète induite optiquement, à la possibilité de détecter cette dernière par des mesures de transport. Nous utiliserons la théorie dérive-diffusion qui décrit le comportement de nombreux dispositifs semiconducteurs, où les équations de van Roosbroeck [104] font office de cas d'école, puis on appliquera ce formalisme à un semimétal de Weyl sous fort champ magnétique externe pour un sous ensemble de niveaux de Landau. Ensuite nous présenterons des résultats analytiques, puis numériques, pour le niveau de Landau chiral uniquement. Enfin, nous discuterons les équations générales pour le sous-ensemble de niveaux de Landau d'intérêt.

Le contenu de ce chapitre fait l'objet d'un travail en cours.

4.1 Motivation

Nous partons ici du résultat de la section précédente, c'est-à-dire que l'on sait déjà qu'une polarisation de vallée complète (chirale ou non chirale) est possible. Nous savons également qu'une polarisation de vallée chirale est détectable en plaçant un semimétal de Weyl dans un circuit fermé sous illumination de lumière circulairement polarisée, et en mesurant le photocourant dû à l'effet magnéto-photogalvanique [99]. La question centrale est alors : peut-on détecter la polarisation de vallée non chirale par le biais d'une mesure de transport ?

4.1.1 Détection électrique de la polarisation de vallée non chirale

Une caractéristique au moins peut être expérimentalement déduite de la polarisation de vallée non chirale : un dédoublement du pic relié à la transition entre le niveau de Landau chirale et le premier niveau non chirale, pour une lumière circulairement polarisée droite. Dans la situation où cette polarisation de vallée est chirale, c'est-à-dire lorsqu'un seul noeud de Weyl est activé par une onde lumineuse, un courant lié à l'effet magnéto-photogalvanique (*magneto photogalvanic effect* noté MPGE) peut être généré dans un certain intervalle en fréquence [99]. Ce dernier est une généralisation en champ magnétique de l'effet photogalvanique circulaire ou CPGE [105]. Le CPGE consiste à une génération de courant continu sous l'effet d'une lumière circulairement polarisée (on parle alors de photocourant). Lorsque la polarisation de cette lumière change, la direction du courant change également. Ceci est valide uniquement pour les matériaux gyrotropes, ce qui est le cas de nombreux semimétaux de Weyl [77]. Dans les matériaux où la symétrie par renversement du temps est présente, une lumière circulairement polarisée est le seul moyen d'injecter un photocourant. Si l'on calcule le photocourant pour le CPGE d'un noeud de Weyl isolé, on trouve que ce courant est directement relié à la chiralité du noeud, ce qui en fait un effet prometteur pour exploiter les propriétés topologiques de ces matériaux [77,99].

Dans le cas où nous avons une polarisation de vallée complète mais non chirale, deux noeuds de chiralités opposées, reliés dans notre modèle par un miroir, et le champ magnétique perpendiculaire à ce dernier, vont absorber la lumière avec la même intensité. Lorsque nous sommes en champ magnétique fort, le courant est obligatoirement orienté parallèlement au champ magnétique, puisque la composante transverse du courant est supprimée à cause de la quantification des orbites cyclotron [99,100]. On a alors $\mathbf{j} \parallel \mathbf{B}$. Un tel scénario nous empêche d'avoir une apparition d'un courant puisque ce dernier est un vecteur vrai (au contraire d'un vecteur axial) et donc change de signe par une symétrie miroir. Deux noeuds de chiralités opposées reliés par une symétrie miroir qui ont le même spectre optique auront alors une amplitude égale de courant magnéto-photogalvanique, mais opposée en signe. Ceci se résume par

$$j_{\alpha}^{\text{MPGE}} \propto \chi B_{\alpha} |\mathbf{E}|^2, \quad (4.1)$$

où $\chi = \pm 1$ est la chiralité du noeud, B_{α} la composante α du champ magnétique externe et \mathbf{E} le champ électrique de la lumière [99]. Le courant magnéto-photogalvanique total étant donné par la somme des noeuds absorbant la lumière, si deux noeuds de chiralités opposées absorbent les photons avec la même intensité, alors ce courant sera nul.

Nous allons alors mettre de côté le courant *vecteur* pour l'instant et nous intéresser plutôt

au courant *axial*¹. Ce dernier est défini par par la différence des courants de noeuds de chiralité opposées

$$\text{courant vecteur} : \mathbf{j} = \mathbf{j}_{\chi=+1} + \mathbf{j}_{\chi=-1}, \quad (4.2)$$

$$\text{courant axial} : \mathbf{j}^5 = \mathbf{j}_{\chi=+1} - \mathbf{j}_{\chi=-1}, \quad (4.3)$$

que l'on note \mathbf{j}^5 , nomenclature héritée de la physique des hautes énergies. Il existe alors en fort champ magnétique, dans la limite quantique, un courant axial à l'équilibre. À l'équilibre, il existe un courant non nul pour chaque noeud, étant donné que le niveau de Landau chiral sera toujours occupé. Ce courant axial conduit alors à un courant de vallée avec une chiralité nette. Cependant, ce courant étant à l'équilibre, il ne donne pas lieu à un effet mesurable en transport. Une telle problématique existe aussi pour les courants de spin à l'équilibre, et n'est pas propre à notre cas précis [106]. Sous excitation lumineuse en revanche, il existe un courant axial hors équilibre induit par la lumière. Notre objectif est alors de déterminer si ce dernier peut avoir une signature mesurable en transport, qui serait caractéristique de la polarisation de vallée non chirale.

Il nous faut alors développer une théorie du transport pour notre système afin de répondre à ce problème. Nous allons choisir une approche qui a déjà prouvé sa réussite dans l'étude des dispositifs semiconducteurs [104, 107–109], mais aussi des dispositifs à base de spin [110–113] jusqu'à plus récemment pour un semimétal de Weyl [114]; la théorie dérive-diffusion (*drift-diffusion* en anglais). Cette théorie consiste essentiellement à modéliser le courant des porteurs par un terme de diffusion, associé à un gradient du potentiel chimique, et par un terme de dérive, associé à un gradient du potentiel électrique.

Notre modèle comportera alors plusieurs ingrédients : un semimétal de Weyl sous fort champ magnétique, un champ électrique externe dû à la lumière et, si nécessaire, une différence de potentiel aux bornes de notre système.

4.1.2 Modélisation des effets topologiques dans les dispositifs à base des matériaux topologiques

L'objectif plus ambitieux de notre étude consiste à modéliser de possibles dispositifs topologiques et à chercher des nouveaux effets reliés aux propriétés topologiques. De telles démarches commencent à émerger pour l'étude des semimétaux de Dirac [65] ou de Weyl [114, 115]. Dans la référence [114], les auteurs se sont concentrés sur un système homogène et sans lumière externe. Les références [65] et [115] étudient quant à elles les

1. Lorsque l'on parle de courant, on supposera qu'il s'agit toujours du courant vecteur.

propriétés de l'effet tunnel dans des hétérostructures à base de matériaux de Dirac, et se situent alors dans la limite tunnel du transport dans ces dispositifs. En utilisant les propriétés de l'effet tunnel dans les semimétaux de Weyl avec des cônes de Weyl inclinés, il est possible de contrôler la polarisation de vallée chirale de manière électrique, cependant, cette dernière demeure partielle ($\sim 15\%$) [115]. De même, dans un semimétal de Dirac bidimensionnel, il est possible de contrôler l'effet tunnel en raison des propriétés du pseudo-spin. Cela permet entre autres de construire des portes logiques avec le degré de liberté de vallée [65].

On peut légitimement se demander comment les propriétés topologiques des semimétaux de Weyl peuvent influencer sur les résultats usuels des dispositifs semiconducteurs. Nous verrons dans la section 4.3 comment les équations de base diffèrent de celles écrites à la section 4.2 pour des semiconducteurs ordinaires. Avant de rentrer dans les considérations techniques, un semimétal de Weyl sans champ magnétique externe comporte de nombreuses vallées de chiralités opposées par paires. Un tel système est donc un semiconducteur à vallées multiples, mais à gap nul, qui est une généralisation du cas d'un semiconducteur à vallée "unique" [116]. De plus, un semimétal de Weyl brise intrinsèquement, soit la symétrie par inversion spatiale, soit de renversement du temps (ou les deux), ce qui donne lieu, par exemple, à un effet photogalvanique en présence de lumière externe pour les matériaux non-centrosymétriques [117]. L'ajout d'un champ magnétique externe peut faire apparaître de nouvelles propriétés topologiques comme l'anomalie chirale et la présence de niveaux de Landau chiraux. La présence de cette dernière implique une non conservation de la charge *axiale* et donc une modification des équations de continuité pour chaque noeud de Weyl [78, 114].

En raison de ces propriétés uniques reliées aux semimétaux de Weyl, nous voulons être capables, avec le modèle de la section 4.3 de prédire les modifications par rapport au semiconducteur "usuel". Une telle dénomination résume le fait que ce dernier doit obéir aux équations de Van Roosbroeck, aussi appelées équations semiconductrices basiques, ou principales (*Basic/Main semiconductor equations*) [104, 108, 118]. Tout comme ce système d'équations, notre modèle doit être capable d'étudier des systèmes homogènes ou inhomogènes, comme la jonction $p - n$ (diode), des systèmes en présence ou en absence de lumière externe, et en considérant un système avec un nombre arbitraire de noeuds reliés par des symétries données. On peut penser par exemple à la manière dont les résultats de l'expérience de Haynes-Shockley peuvent être modifiés avec l'anomalie chirale ; cette dernière consiste à envoyer une impulsion lumineuse et permet de mesurer des caractéristiques essentielles d'un dispositif comme la mobilité des porteurs ou leur durée de vie [119, 120].

4.2 Résumé des équations de Van Roosbroeck dans un semiconducteur unidimensionnel "usuel"

Dans cette section nous ferons une dérivation heuristique des équations semiconductrices principales dans le cas d'un système unidimensionnel. Une dérivation plus formelle sera faite dans notre cas d'intérêt à la section 4.3. L'objectif ici est de donner un sens physique à ces équations, introduire la nomenclature, expliquer quelques limites où ces dernières décrivent correctement les phénomènes physiques, et de mentionner quelques applications.

4.2.1 Équation pour le courant

En général, écrire une équation pour le transport de charge dans un semiconducteur peut être très complexe. Nous allons ici nous placer dans le formalisme de dérive-diffusion qui résume le courant à deux termes très généraux.

Premièrement, traitons le cas du terme de dérive. Les principes de bases de la mécanique nous permettent d'écrire une équation pour la force ressentie par les porteurs de charge dans un cristal :

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} = m\mathbf{a}, \quad (4.4)$$

où q est la charge électrique des porteurs ($-q$ pour les électrons et $+q$ pour les trous), \mathbf{E} le champ électrique, pouvant être externe ou interne, m la masse des porteurs et \mathbf{a} l'accélération. Dans le cas unidimensionnel on peut écrire

$$a_x = \frac{qE_x}{m}, \quad (4.5)$$

qui est l'accélération ressentie par les porteurs. Cependant, dans un solide, dans la limite où un porteur va interagir très vite avec des nombreux constituants du cristal, comme une impureté, un phonon, ou un autre porteur, le temps de vol de l'électron entre deux collisions est très faible. On peut alors écrire une approximation de l'accélération comme $a_x = \langle v_x \rangle / \tau$ où $\langle v_x \rangle$ est une vitesse moyenne et τ le temps de vol de l'électron entre deux collisions. On définit alors

$$\langle v_x \rangle = \frac{q\tau E_x}{m} \equiv \pm \mu_q E_x, \quad (4.6)$$

où μ_q est appelé la *mobilité* des porteurs, qui est définie positive, et le signe dépend de la charge de ces derniers (+ pour les trous et - pour les électrons). On peut alors écrire le courant des électrons par

$$j_{\text{dérive},x} = -qn\langle v_x \rangle = q\mu_e n E_x, \quad (4.7)$$

où n représente la densité d'électrons. On retrouve la conductivité de Drude, $\sigma = q^2 n \tau / m$. Le même terme peut être calculé pour les trous et le courant de dérive a le même signe pour les deux types de porteurs. En regardant la première partie de l'équation (4.7), on voit que $-q$ deviendra $+q$ pour des trous, mais la vitesse va également changer de signe pour les deux types de porteurs.

Ce terme de courant représente donc la dérive des électrons en présence d'un champ électrique. En l'absence de ce dernier, la valeur moyenne de la vitesse est nulle. La limite principale de cette approximation réside dans l'amplitude du champ électrique : si ce dernier est trop élevé, alors la vitesse de dérive n'est plus linéaire en champ mais sature à une certaine valeur [109]. Cette approche néglige également tous les événements se déroulant à un temps caractéristique plus court que le temps de vol entre deux collisions ou des tailles caractéristiques plus petites que le libre parcours moyen. À titre d'exemple, pour le silicium pur à 300 K, l'équation (4.6) est valide jusqu'à des champs électriques de l'ordre de 10^3 V.cm^{-1} et la mobilité est indépendante du champ électrique.

Le second terme que nous devons ajouter représente la diffusion des porteurs. Ce terme est très important pour les systèmes non uniformes. Jusqu'à présent, nous n'avons pas écrit de manière explicite le comportement de la densité ou du courant dans l'espace. On considérera le champ électrique comme uniforme, ou variant faiblement dans l'espace. Dès que l'on a un gradient de concentration ou de densité, il existe un phénomène de diffusion décrit par la loi de Fick [121], résultant du mouvement thermique aléatoire des porteurs. Si l'on suppose que le mouvement d'un électron est indépendant des autres, on peut écrire le flux de porteurs à travers une surface

$$f = -D \frac{\partial n}{\partial x}, \quad (4.8)$$

où D est le coefficient de diffusion, en unité de surface divisé par un temps, et n représente la densité. Le flux de porteurs implique une diffusion d'une zone plus dense vers une zone moins dense en porteurs. Contrairement au courant de dérive, le courant de diffusion a un signe opposé pour les trous et les électrons. Pour les électrons, on écrit :

$$j_{\text{diff},x}(x, t) = qD \frac{\partial n(x, t)}{\partial x}. \quad (4.9)$$

On peut alors combiner les deux termes, qui donnent lieu au courant des électrons dans la théorie de dérive-diffusion :

$$j_{e,x}(x, t) = qD \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + q\mu_e n(x, t) E_x. \quad (4.10)$$

Pour le cas des trous, le terme de diffusion va changer de signe et le courant total dans un système où coexistent trous et électrons sera simplement la somme des deux courants. On rappelle qu'en absence de symétrie d'inversion dans le cristal, un terme de courant photogalvanique est aussi présent si le système est sujet à une excitation lumineuse.

4.2.2 Équation de Poisson

Nous savons comment le courant varie en fonction de la charge et du champ électrique. Maintenant, on écrit une équation qui relie la charge au champ électrique externe afin d'obtenir l'équation de Poisson. On commence simplement par écrire l'équation de Maxwell-Gauss

$$\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{D}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} (\epsilon_0 \epsilon(x) \mathbf{E}(x, t)) = \rho_{\text{libre}}(x, t), \quad (4.11)$$

où ρ_{libre} représente la charge libre du cristal. On peut écrire le champ électrique comme

$$\mathbf{E}(x, t) = -\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \mathbf{A}(x, t)}{\partial t}, \quad (4.12)$$

où ψ est le potentiel électrostatique (ou potentiel scalaire) et \mathbf{A} le potentiel vecteur. On peut alors choisir la jauge de Coulomb qui vérifie $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Dans le cas où la constante diélectrique est homogène, ce que l'on suppose ici, on obtient

$$-\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\rho_{\text{libre}}(x, t)}{\epsilon_0 \epsilon}. \quad (4.13)$$

L'équation (4.13) est appelée équation de Poisson. La présence de charge libre nette donne lieu à un gradient de courant électrique.

Dans le cas des semiconducteurs où les charges sont soit des électrons, des trous ou des impuretés (comme des donneurs ou accepteurs), on peut faire la substitution

$$\rho_{\text{libre}}(x, t) = q(p(x, t) - n(x, t) + C(x)), \quad (4.14)$$

où p représente la densité de trous, n la densité d'électrons et C représente la concentration de charges additionnelles (fixes) que constituent les donneurs et les accepteurs dans le système [108].

4.2.3 Équations de continuité

Pour compléter notre système d'équations, il nous est nécessaire d'écrire des équations de continuité, une pour les électrons et une pour les trous. On peut dériver l'équation de continuité pour la charge totale à partir des équations de Maxwell, ce qui nous permet de trouver, toujours en une dimension,

$$\frac{\partial j(x, t)}{\partial x} + q \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = 0. \quad (4.15)$$

Cette équation est valide pour toutes les charges, cependant on sait que l'on peut décomposer le courant total en courant de trous et d'électrons, et de même pour la charge :

$$\frac{\partial}{\partial x} (j_e(x, t) + j_t(x, t)) + q \frac{\partial}{\partial t} (p(x, t) - n(x, t)) = 0, \quad (4.16)$$

où j_e correspond au courant d'électrons, j_t au courant de trous, p à la densité de trous et n à la densité d'électrons. Cela nous dit que l'on peut écrire une équation de continuité pour chacune des espèces de porteurs si la condition suivante est respectée :

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial j_e(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = G(x, t) - R(x, t), \quad (4.17)$$

$$\frac{1}{q} \frac{\partial j_t(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = G(x, t) - R(x, t), \quad (4.18)$$

où $G(x, t)$ et $R(x, t)$ sont des fonctions positives modélisant de manière phénoménologique respectivement la génération et la recombinaison des porteurs. En général il existe différents processus de recombinaison et de génération qui sont des fonctions non triviales de n et p [108, 109]. Notre but ici n'est pas de préciser ces différents phénomènes, ni même de les quantifier, mais de donner des bases physiques sur le système d'équations d'intérêt. Dans notre cas du semimétal de Weyl sous fort champ magnétique, nous introduirons en détail les fonctions $G(x, t)$ et $R(x, t)$ nécessaires au problème.

Les équations (4.10), (4.13), (4.14), (4.17) et (4.18) constituent les équations de Van Rosbroeck. Ces dernières régissent la physique d'un grand nombre de dispositifs semiconducteurs, comme les diodes, les cellules solaires, etc.

4.3 Dérivation des équations de van Roosbroeck pour un sémimétal de Weyl sous fort champ magnétique

Dans cette section, nous allons revenir sur notre cas d'intérêt du semimétal de Weyl en fort champ magnétique et développer les équations nécessaires pour décrire le transport sur la base des connaissances acquises à la section précédente.

4.3.1 Champ magnétique fort et troncature de l'espace de Hilbert

Nous allons considérer premièrement la présence d'un fort champ magnétique à notre système. Cela implique que toutes les équations pour le courant, les équations de continuité et l'équation de Poisson seront en une dimension. Ce choix de champ magnétique fort n'est pas anodin. Nous avons vu au chapitre 3 que la polarisation de vallée est complète pour les noeuds reliés par symétrie de renversement du temps, dans la configuration où le champ magnétique \mathbf{B} ainsi que la direction de propagation de la lumière \mathbf{q} sont perpendiculaires au plan du miroir (les noeuds reliés par un miroir absorbant la lumière avec une intensité égale).

La présence d'un champ magnétique externe est donc idéale pour sonder la polarisation de vallée car il permet aussi, en changeant sa direction, de contrôler cette dernière. De plus, de effets topologiques uniques apparaissent dans les semimétaux de Weyl en fort champ magnétique, comme l'anomalie chirale [78, 114], ou la présence de niveaux de Landau chiraux, directement reliés à la chiralité des noeuds de Weyl en absence de champ [26, 27].

De surcroît, les effets qui nous intéressent sont plus importants dans la limite quantique. On considère alors que le potentiel chimique intersecte les niveaux de Landau chiraux uniquement, et que l'écart en énergie entre le minimum en énergie du premier niveau de Landau non chiral et le potentiel chimique est faible comparé à $\hbar v_F / \ell_B$. On se concentre aussi dans cette situation à une lumière RCP sans perte de généralité étant donné que les mêmes résultats se produisent pour une lumière LCP. Puisque cette situation est la plus favorable pour la polarisation de vallée (elle atteint 100% sur une certaine plage de fréquence), nous ne garderons que deux niveaux de Landau pour notre étude en transport : le niveau de Landau chiral (indexé $n = 0$) ainsi que le premier niveau de Landau en bande de conduction (indexé $n = 1$). Ceci a également l'avantage de simplifier le problème en tronquant l'espace de Hilbert. Afin d'avoir une excitation thermique faible du niveau de Landau 0 au niveau 1, nous nous placerons dans la limite de basse température ($k_B T \ll \hbar v_F / \ell_B$). Cette limite est réalisable dans les semimétaux de Weyl réels.

4.3.2 Équations de Van Roosbroeck pour un semimétal de Weyl

De manière similaire au semiconducteur ordinaire en une dimension, nous allons développer une théorie du courant pour les deux niveaux de Landau d'intérêt en considérant le niveau chiral comme un gaz de fermions dégénéré et le niveau non chiral comme un gaz non-dégénéré, ce que l'on justifiera par la suite. On prendra également en compte l'effet de l'inclinaison des noeuds dans nos calculs afin de pouvoir généraliser les équations pour le courant à un nombre arbitraire de noeuds en utilisant les relations de symétries appropriées pour les paramètres microscopiques. En général, on laissera l'indice de noeud τ implicite pour toutes les quantités concernées, comme le courant, la vitesse ou la densité. On ressuscitera cet indice pour les variables en fin de calcul, si le cas s'y applique, on mettra seulement l'indice de chiralité χ du noeud.

Équations pour le courant du niveau chiral et du premier niveau non chiral

Nous effectuons ici une approche microscopique plus rigoureuse que dans la section 4.2. On commence par définir le courant provenant d'un noeud de Weyl. Le courant ainsi que la vitesse des électrons sont par définition dans la même direction que le champ magnétique :

$$j_n(z, t) = -q \frac{1}{2\pi \ell_B^2} \int_{k \in \text{Weyl}} \frac{dk}{2\pi} v_{k,n} f_n(k, z, t), \quad (4.19)$$

où on a gardé la même convention que dans le chapitre précédent, c'est-à-dire, $q > 0$, $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$, $f_n(k, z)$ la fonction de distribution des électrons pour le niveau n et $v_{k,n} = \hbar^{-1} \partial E_{k,n} / \partial k$ par définition selon z . L'intégrale est définie seulement autour d'un noeud de Weyl. Le théorème de Liouville impose que la dérivée totale de la fonction de distribution est nulle, cette dernière représentant une densité de probabilité [122] :

$$\frac{d}{dt} f_n(k, z, t) = \frac{\partial f_n}{\partial t} + \left(\frac{\partial z}{\partial t} \right)_n \frac{\partial f_n}{\partial z} + \left(\frac{\partial k}{\partial t} \right)_n \frac{\partial f_n}{\partial k} \equiv 0, \quad (4.20)$$

où l'indice n représente le niveau de Landau. Ici, $\partial z / \partial t$ correspond à la vitesse de groupe des électrons dans le niveau n et $\partial(\hbar k) / \partial t$ correspond à la somme des forces, internes et externes, s'exerçant sur les porteurs. On écrit alors

$$\left(\frac{\partial z}{\partial t} \right)_n = v_{k,n} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{k,n}}{\partial k}, \quad (4.21)$$

$$\left(\frac{\partial k}{\partial t} \right)_n = \frac{F_z}{\hbar}. \quad (4.22)$$

Un ansatz consiste à écrire la fonction de distribution comme une partie en *quasi-équilibre*, c'est-à-dire où la fonction de distribution obéit à un équilibre local et une partie hors équilibre, que l'on considère comme une perturbation de la fonction de distribution de quasi-équilibre :

$$f_n(k, z, t) = f_{n, \text{qe}}(k, z) + \delta f_n(k, z, t). \quad (4.23)$$

En modélisant l'effet des forces internes par un terme de collision et en considérant la limite quasi-statique où la dérivée partielle par rapport au temps est nulle, cela implique que l'équation 4.20 est modifiée et conduit à

$$v_{k,n} \frac{\partial}{\partial z} f_n(k, z) + \frac{F_n^{\text{ext.}}}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} f_n(k, z) = -\frac{f_n(k, z) - f_{n, \text{qe}}(k, z)}{\tau_n}, \quad (4.24)$$

avec τ_n un temps de relaxation caractéristique qui en principe peut dépendre du niveau de Landau, ainsi que de k . L'équation obtenue représente alors l'équation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation. On néglige par la suite les dérivées en espace et moment de δf_n car cette partie hors-équilibre est déjà une perturbation. On peut alors écrire les dérivées d'intérêt avec la fonction de distribution de quasi-équilibre

$$f_{n, \text{qe}}(k, z) = \frac{1}{1 + \exp[\beta (E_{k,n}(z) - E_{F,n}(z))]}, \quad (4.25)$$

où $\beta = (k_B T)^{-1}$, $E_{k,n}(z) = E_{k,n} - q\psi(z)$ et $E_{F,n}(z)$ le quasi-niveau de Fermi pour le niveau n [108]. La dénomination de quasi-niveau de Fermi est propre à la physique des semiconducteurs. En matière condensée, on préfère la dénomination de potentiel électrochimique, qui est identique. Avec la définition $\mu_{\text{EC},n}(z) = \mu_{\text{int},n}(z) - q\psi(z)$, on obtient une définition équivalente de la fonction de distribution de quasi-équilibre :

$$f_{n, \text{qe}}(k, z) = \frac{1}{1 + \exp \beta (E_{k,n} - \mu_{\text{int},n}(z))}, \quad (4.26)$$

où $\mu_{\text{int},n}(z)$ est le potentiel chimique (interne) local qui en principe peut dépendre du niveau et du noeud dans l'approximation de quasi-équilibre.

On peut alors résoudre l'équation de Boltzmann pour δf en commençant par

$$\frac{\partial}{\partial k} f_n(k, z) = \frac{\partial E_{k,n}}{\partial k} \frac{\partial f_{n, \text{qe}}}{\partial E_{k,n}} = \hbar v_{k,n} \frac{\partial f_{n, \text{qe}}}{\partial E_{k,n}}, \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} f_n(k, z) = \frac{\partial (E_{k,n}(z) - E_{F,n}(z))}{\partial z} \frac{\partial f_{n, \text{qe}}}{\partial E_{k,n}} = \left(-q \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} - \frac{\partial E_{F,n}(z)}{\partial z} \right) \frac{\partial f_{n, \text{qe}}}{\partial E_{k,n}}. \quad (4.28)$$

Sachant que la seule force s'exerçant sur les électrons est le champ électrique, on a $F_z =$

$-qE_z = q\partial\psi/\partial z$, et en combinant les équations (4.24), (4.27) et (4.28), on obtient

$$\delta f_n(k, z) = v_{k,n} \tau_n \frac{\partial f_{n,qe}}{\partial E_{k,n}} \frac{\partial E_{F,n}(z)}{\partial z}. \quad (4.29)$$

À partir de l'équation (4.26), on trouve une relation analogue en substituant dans l'équation précédente $E_{F,n}(z)$ par le potentiel électrochimique $\mu_{EC,n}(z)$. On abusera des deux nomenclatures à l'avenir.

On peut alors remplacer notre solution pour la fonction de distribution dans l'équation pour le courant, en commençant par le niveau de Landau chiral :

$$j_0(z) = -q \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \int \frac{dk}{2\pi} v_{k,0} f_{0,qe}(k, z) - q \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \int \frac{dk}{2\pi} v_{k,0} \delta f_0(k, z), \quad (4.30)$$

où la vitesse pour le noeud $\tau = 1$,

$$v_{k,0} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{k,0}}{\partial k} = v_F \left(t_{\parallel} - \frac{1}{\gamma} \right) \equiv v_0, \quad (4.31)$$

est indépendante de k . On a considéré à la fois une inclinaison des cônes parallèle et perpendiculaire au champ magnétique et on rappelle que $\gamma = (1 - |\mathbf{t} \times \hat{\mathbf{B}}|)^{-1/2}$. On obtient alors

$$j_0(z) = -\frac{qv_0}{2\pi\ell_B^2} \int \frac{dk}{2\pi} f_{0,qe}(k, z) - \frac{q\tau_0 v_0^2}{2\pi\ell_B^2} \frac{\partial E_{F,0}(z)}{\partial z} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\partial f_{0,qe}}{\partial E_{k,0}}. \quad (4.32)$$

À basse température, le courant devient

$$j_0(z) = -qv_0 \rho_{0,qe}(z) + \frac{q|v_0|\tau_0}{4\pi^2\ell_B^2\hbar} \frac{\partial E_{F,0}(z)}{\partial z}, \quad (4.33)$$

où

$$\rho_n(z) = \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \int \frac{dk}{2\pi} f_n(k, z). \quad (4.34)$$

On trouve dans l'équation 4.33 un terme habituel, proportionnel au gradient du potentiel électrochimique dont le coefficient de proportionnalité est relié à la conductivité à fréquence nulle, et un terme moins usuel, le premier terme, correspondant au fait que l'on dispose de niveaux de Landau chiraux. Il se trouve que dans notre modèle à basse énergie, ce terme est infini. La stratégie est alors de soustraire au terme de quasi-équilibre le "courant à l'équilibre" du niveau de Landau chiral, ce dernier ne pouvant avoir aucune signature en

transport [106, 114]. On trouve alors

$$j_0(z) = -qv_0 (\rho_{0,qe}(z) - \rho_{0,eq}(z)) + \frac{q|v_0|\tau_0}{4\pi^2\ell_B^2\hbar} \frac{\partial E_{F,0}(z)}{\partial z}, \quad (4.35)$$

qui est cette fois un courant fini. On peut calculer l'écart de la densité en quasi-équilibre par rapport à la densité en équilibre dans la limite de basse température

$$\rho_{0,qe}(z) - \rho_{0,eq}(z) \simeq \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} (\Theta(E_{F,0}(z) - q\psi(z) - E_{k,0}) - \Theta(\epsilon_F - E_{k,0})), \quad (4.36)$$

où $\Theta(x)$ représente la fonction marche et ϵ_F représente le niveau de Fermi du système à l'équilibre. On fait ensuite la substitution $E_{F,0}(z) = \epsilon_F - q\varphi_0(z)$, où $\varphi_0(z)$ est appelé le *quasi-potentiel de Fermi* (parce que homogène à un potentiel électrique), c'est-à-dire que l'on sépare le quasi-niveau de Fermi en une partie à l'équilibre (ϵ_F) et une partie comme intrinsèquement hors équilibre ($q\varphi_0(z)$). On peut montrer que cette quantité est indépendante de la chiralité du noeud si les noeuds sont reliés par un miroir avec un champ magnétique externe perpendiculaire à celui ci. On trouve alors

$$\rho_{0,qe}(z) - \rho_{0,eq}(z) = \frac{1}{4\pi^2\ell_B^2} \frac{q\psi(z) - q\varphi_0(z)}{\hbar|v_0|}. \quad (4.37)$$

Par conséquent, on écrit le courant pour le niveau de Landau chiral comme

$$j_0(z) = -\frac{q^2}{4\pi^2\ell_B^2\hbar} \frac{v_0}{|v_0|} (\psi(z) - \varphi_0(z)) - \frac{q^2|v_0|\tau_0}{4\pi^2\ell_B^2\hbar} \frac{\partial\varphi_0(z)}{\partial z}. \quad (4.38)$$

On remarque que le premier terme dépend de la chiralité du noeud, puisque $\chi \equiv \text{sgn}(v_0) = v_0/|v_0|$. Donc pour deux noeuds de chiralités opposées, ce premier terme aura un signe différent, contrairement au deuxième terme qui lui est indépendant de la chiralité. En particulier, si $|v_0|$ est le même pour deux noeuds, ce qui est le cas pour deux noeuds de chiralité opposée reliés par un miroir, alors ce terme est égal pour les deux noeuds.

La situation est légèrement différente pour le courant du premier niveau de Landau non chiral, quoique la dérivation est identique jusqu'à l'équation (4.29). On écrit

$$j_1(z) = -q \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \int \frac{dk}{2\pi} v_{k,1} f_{1,qe}(k, z) - q \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \int \frac{dk}{2\pi} v_{k,1} \delta f_1(k, z). \quad (4.39)$$

À basse température (si $k_B T$ est petit par rapport à la différence entre le bas de la bande $n = 1$ et ϵ_F), les électrons peuplant le niveau $n = 1$ peuvent être considérés comme un gaz

d'électrons non-dégénéré. On peut alors écrire

$$\frac{\partial f_{1,qe}(k, z)}{\partial E_{k,1}} = -\beta f_{1,qe}(k, z) (1 - f_{1,qe}(k, z)) \simeq -\beta f_{1,qe}(k, z), \quad (4.40)$$

$$f_{1,qe}(k, z) = \exp[-\beta (E_{k,1}(z) - E_{F,1}(z))], \quad (4.41)$$

où on a utilisé $f_{1,qe}(k, z) \ll 1$. Cela correspond à la distribution de Maxwell-Boltzmann. Pour un niveau décrit par une telle distribution, on peut considérer que seulement le bas de la bande non chirale est peuplé, ce qui nous permet de faire un développement limité de l'énergie et de la vitesse proche du bas de la bande :

$$E_{k,1} \simeq \hbar v_F t_{\parallel} k + \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{\gamma^{3/2} \ell_B} + \sqrt{\frac{2}{\gamma}} \frac{\hbar v_F \ell_B}{4} k^2, \quad (4.42)$$

$$v_{k,1} = v_F t_{\parallel} + \frac{v_F \ell_B k}{\sqrt{2\gamma}}, \quad (4.43)$$

ce qui est équivalent à une bande parabolique lorsque les noeuds ne sont pas inclinés. On peut alors réécrire l'équation (4.39) avec ces nouvelles approximations :

$$j_1(z) = -q \frac{1}{2\pi \ell_B^2} \int \frac{dk}{2\pi} v_{k,1} f_{1,qe}(k, z) + \frac{q \tau_1 \beta}{2\pi \ell_B^2} \frac{\partial E_{F,1}(z)}{\partial z} \int \frac{dk}{2\pi} v_{k,1}^2 f_{1,qe}(k, z). \quad (4.44)$$

Écrivons les intégrales d'intérêt pour ce calcul, en choisissant d'intégrer de $-\infty$ à $+\infty$, le facteur d'occupation décroissant exponentiellement à mesure que l'on va à plus haute énergie :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} f_{1,qe}(k, z) = \frac{1}{2\pi} \frac{2^{3/4} \sqrt{\pi}}{\sqrt{\hbar v_F \ell_B \beta / \gamma}} e^{\frac{\hbar v_F \beta}{\sqrt{2} \ell_B \gamma^{3/2}} (t_{\parallel}^2 \gamma^2 - 2)} e^{\beta(q\psi(z) - E_{F,1}(z))} \equiv 2\pi \ell_B^2 \rho_{1,qe}(z), \quad (4.45)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} v_{k,1} f_{1,qe}(k, z) = 0, \quad (4.46)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} v_{k,1}^2 f_{1,qe}(k, z) = \frac{v_F \ell_B}{\sqrt{2\gamma} \hbar \beta} 2\pi \ell_B^2 \rho_{1,qe}(z), \quad (4.47)$$

ce qui nous donne pour le courant

$$j_1(z) = q \tau_1 \frac{v_F \ell_B}{\sqrt{2\gamma} \hbar} \frac{\partial E_{F,1}(z)}{\partial z} \rho_{1,qe}(z). \quad (4.48)$$

On identifie la mobilité pour les électrons dans le niveau $n = 1$, $\mu_1 = q \tau_1 / m^*$ (à ne pas

confondre avec le potentiel chimique), où m^* représente la masse effective :

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_{k,1}}{\partial k^2} \right)^{-1} = \frac{\sqrt{2\gamma}\hbar}{v_F \ell_B}. \quad (4.49)$$

En faisant la substitution mathématique entre le quasi-niveau de Fermi et le quasi-potentiel de Fermi, on obtient

$$j_1(z) = -q\mu_1\rho_{1,\text{qe}}(z) \frac{\partial\varphi_1(z)}{\partial z}. \quad (4.50)$$

Cette équation a la même forme que pour un semiconducteur ordinaire mais avec une mobilité qui dépend du champ magnétique externe.

Équation de Poisson

Nous allons désormais écrire l'équation de Poisson pour notre système. On a déjà écrit les étapes principales du raisonnement dans la section 4.2.2 pour un semiconducteur usuel. Ce calcul n'est pas différent ici. On peut donc écrire

$$-\frac{\partial^2\psi(z)}{\partial z^2} = \frac{-q}{\epsilon_0\epsilon_\infty} \sum_{\tau,n} \left[\rho_n^\tau(z) - \rho_{\text{eq},n}^\tau(z) \right], \quad (4.51)$$

où τ représente un noeud de Weyl et

$$\rho_n(z) = \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \int \frac{dk}{2\pi} (f_{n,\text{qe}}(k,z) + \delta f_n(k,z)). \quad (4.52)$$

L'équation (4.52) s'applique pour chaque noeud séparément, l'indice τ étant implicite. La particularité des niveaux de Landau chiraux est que leur vitesse est indépendante de k , ce qui permet de relier directement le courant à la densité, que nous avons déjà calculée. De plus nous allons considérer que le niveau de Landau $n = 1$ est quasiment vide à l'équilibre thermodynamique et en utilisant l'équation (4.46), on peut trouver

$$\rho_0(z) - \rho_{\text{eq},0}(z) = \frac{1}{4\pi^2\ell_B^2} \frac{q\psi(z) - q\varphi_0(z)}{\hbar|v_0|} + \frac{q}{4\pi^2\ell_B^2} \frac{\tau_0}{\hbar} \frac{v_0}{|v_0|} \frac{\partial\varphi_0(z)}{\partial z}, \quad (4.53)$$

$$\rho_1(z) - \rho_{\text{eq},1}(z) = \rho_1(z) = \frac{1}{4\pi^2\ell_B^2} \frac{2^{3/4}\sqrt{\pi}}{\sqrt{\hbar v_F \ell_B \beta / \gamma}} e^{\frac{\hbar v_F \beta}{\sqrt{2\ell_B \gamma^{3/2}} (t_\parallel^2 \gamma^2 - 2)}} e^{\beta(q\psi(z) - E_{F,1}(z))}. \quad (4.54)$$

On peut alors remplacer les valeurs pour la densité dans l'équation de Poisson, ce qui conduit à

$$\frac{\partial^2\psi(z)}{\partial z^2} = \frac{q}{\epsilon_0\epsilon_\infty} \frac{1}{4\pi^2\ell_B^2} \sum_{\tau} \left[\frac{q\psi(z) - q\varphi_0^\tau(z)}{\hbar|v_0^\tau|} + q \frac{\tau_0}{\hbar} \frac{v_0^\tau}{|v_0^\tau|} \frac{\partial\varphi_0^\tau(z)}{\partial z} + 4\pi^2\ell_B^2 \rho_1^\tau(z) \right], \quad (4.55)$$

où on a explicité l'indice τ pour les variables concernées en raison de la somme et on a laissé la densité pour le niveau non chiral implicite pour une formulation plus compacte.

Génération de porteurs et effet magnéto-photogalvanique

Il nous faut à présent écrire le taux de génération (ou pompage) par la lumière externe des porteurs du niveau de Landau chiral vers le premier niveau de Landau non chiral. On rappelle que l'on se concentre sur le plage en fréquence avec une lumière RCP où seule cette transition est active. A l'aide de la règle d'or de Fermi, le taux de transition est donné par [99] :

$$\left(\frac{\partial \rho_1(z)}{\partial t}\right)_{\text{gen.}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{2\pi\ell_B^2} \sum_k |\langle \psi_{1,k} | \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} | \psi_{0,k} \rangle|^2 (f_{0,\text{qe}}(k, z) - f_{1,\text{qe}}(k, z)) \delta(E_{k,1} - E_{k,0} - \hbar\omega). \quad (4.56)$$

On précise que $|\psi_{n,k}\rangle$ représente le spineur en fort champ magnétique pour le niveau de Landau n , \mathbf{v} l'opérateur vitesse, \mathbf{A} le potentiel vecteur relié au champ électrique de l'onde lumineuse et ω la fréquence de cette dernière. En présence d'une inclinaison arbitraire des noeuds, on rappelle que ces spineurs peuvent être obtenus analytiquement [86]. Nous allons ici à titre d'exemple considérer le cas de noeuds non inclinés pour plus de simplicité mais il nous faut rappeler que l'équation (4.56) est générale. Pour une lumière circulairement polarisée droite, on peut écrire

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} = \frac{v_F \ell |\mathcal{E}_{\text{ext.}}|}{\omega} \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2}, \quad (4.57)$$

où $\mathcal{E}_{\text{ext.}}$ est le champ électrique de la lumière, σ_x et σ_y les matrices de Pauli. Sans inclinaison des cônes, on rappelle que les éléments du spineur de l'équation (3.25) s'écrivent

$$u_{n,k} = -i \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \text{sgn}(n) \chi \frac{k}{\sqrt{k^2 + 2|n|/\ell_B^2}} \right)}, \quad (4.58)$$

$$v_{n,k} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \text{sgn}(n) \chi \frac{k}{\sqrt{k^2 + 2|n|/\ell_B^2}} \right)}, \quad (4.59)$$

ce qui nous permet d'écrire

$$|\langle \psi_{1,k} | \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} | \psi_{0,k} \rangle|^2 = \frac{v_F^2 \ell^2 |\mathcal{E}_{\text{ext.}}|^2}{2\omega^2} \left(1 + \chi \frac{k}{\sqrt{k^2 + 2/\ell_B^2}} \right). \quad (4.60)$$

On trouve alors que la génération de porteurs dans le niveau non chirale est proportionnelle à l'intensité de la lumière incidente.

Nous allons par la suite considérer que la fréquence ω de la lumière externe est fixe. La question suivante se pose : pour une fréquence ω donnée, quel est le taux de génération de porteurs pour la bande non chirale ? Il nous faut alors déterminer la condition sur le delta de Dirac pour le vecteur d'onde dans l'équation (4.56). La condition du delta de Dirac s'écrit

$$\sqrt{v_F^2(k^*)^2 + \frac{2v_F^2}{\ell_B^2}} + \chi v_F k^* - \hbar\omega = 0, \quad (4.61)$$

ce qui conduit, après quelques manipulations, à une solution unique pour le vecteur d'onde en fonction de la fréquence :

$$k^* = \frac{1}{2\chi v_F \omega} \left(\omega^2 - \frac{2v_F^2}{\ell_B^2} \right). \quad (4.62)$$

Ceci nous informe que pour une fréquence donnée, l'absorption se fait pour une seule valeur de k^* par noeud. On procède ensuite au changement de variable pour le delta de Dirac :

$$\delta(E_{k,1} - E_{k,0} - \hbar\omega) = \delta(k - k^*) \left| \frac{\partial(E_{k,1} - E_{k,0})}{\partial k} \right|^{-1} = \frac{\delta(k - k^*)}{|\hbar v_F|} \left| 1 + \frac{\chi k}{\sqrt{k^2 + 2/\ell_B^2}} \right|^{-1}, \quad (4.63)$$

où la fonction à l'intérieur de la valeur absolue est toujours positive et correspond exactement à l'élément de matrice de la transition pour une lumière circulairement polarisée droite (on aurait eu le même résultat avec une lumière circulairement polarisée gauche pour la transition $-1 \rightarrow 0$). Toutes ces considérations simplifient le terme de génération de porteurs dans le niveau $n = 1$, qui conduit à

$$\left(\frac{\partial \rho_1(z)}{\partial t} \right)_{\text{gen.}} = \frac{v_F e^2 |\mathcal{E}_{\text{ext.}}|^2}{2\hbar^2 \ell_B^2 \omega^2} (f_{0,\text{qe}}(k^*, z) - f_{1,\text{qe}}(k^*, z)), \quad (4.64)$$

où on laisse les expressions des fonctions de distribution pour une formulation plus compacte. On trouve automatiquement la perte d'électrons pour le niveau chirale par pompage optique

$$\left(\frac{\partial \rho_0(z)}{\partial t} \right)_{\text{perte}} = - \left(\frac{\partial \rho_1(z)}{\partial t} \right)_{\text{gen.}}. \quad (4.65)$$

Il nous faut maintenant déterminer le courant issu de l'effet magneto-photogalvanique,

qui s'écrit [99] :

$$j_{n,\text{MPGE}}(z) = -\frac{q}{\hbar\ell_B^2} \sum_k \tau_n v_{k,n} |\langle \psi_{1,k} | \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} | \psi_{0,k} \rangle|^2 (f_{0,\text{qe}}(k, z) - f_{1,\text{qe}}(k, z)) \delta(E_{k,1} - E_{k,0} - \hbar\omega). \quad (4.66)$$

Pour le niveau de Landau chiral, la vitesse est indépendante de k . Il est donc trivial d'obtenir le courant magneto-photogalvanique pour ce niveau. Pour le niveau de Landau non chiral, il suffit de faire le même processus que précédemment et remplacer la valeur de k dans la vitesse par k^* . Cela conduit à

$$j_{0,\text{MPGE}}(z) = \chi q v_F \tau_0 \left(\frac{\partial \rho_1(z)}{\partial t} \right)_{\text{gen.}}, \quad (4.67)$$

$$j_{1,\text{MPGE}}(z) = -\chi q v_F \tau_1 \frac{1 - 2v_F^2 / (\omega\ell_B)^2}{1 + 2v_F^2 / (\omega\ell_B)^2} \left(\frac{\partial \rho_1(z)}{\partial t} \right)_{\text{gen.}}. \quad (4.68)$$

Équations de continuité

Pour finir, nous allons écrire les équations de continuité pour les niveaux chiral et non chiral. Nous allons spécifier ici le noeud en question pour chaque niveau. Il faut garder en tête que lorsqu'on écrit l'équation de continuité pour le courant total, la partie droite de l'équation est automatiquement zéro en raison de la conservation de la charge totale. Bien que cette dernière est conservée, la charge dans chaque noeud et chaque niveau n'est pas conservée. On peut donc envisager deux temps caractéristiques pour la relaxation de ces charges. Le premier consiste en la relaxation des porteurs excités par la lumière du niveau chiral au niveau non chiral, que l'on notera τ_r . Le deuxième correspond à la relaxation intervallée pour les niveaux chiraux ainsi que pour les niveaux de Landau non chiraux, que l'on notera τ_v . En général, ces derniers peuvent être différents pour les deux niveaux de Landau, cependant on les considérera comme égaux ici. De plus, en fort champ magnétique, il existe pour le niveau $n = 0$ un terme d'anomalie chirale dans l'équation de continuité qui représente la non conservation de la charge chirale, c'est-à-dire $\rho_0^+ - \rho_0^-$ [78, 114].

On va considérer ici seulement deux noeuds de chiralités opposées reliés par un miroir avec le champ magnétique orienté perpendiculairement à ce dernier. Ainsi les équations de continuité pour le niveau $n = 0$ et $n = 1$ deviennent

$$\frac{\partial j_{0,\text{tot}}^\chi(z)}{\partial z} - q \frac{\partial \rho_0^\chi(z)}{\partial t} = -q \left(\frac{\partial \rho_0^\chi(z)}{\partial t} \right)_{\text{rel.}} - q \left(\frac{\partial \rho_0^\chi(z)}{\partial t} \right)_{\text{perte}} + \chi \frac{q^3}{4\pi^2 \hbar^2} \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} B_z, \quad (4.69)$$

$$\frac{\partial j_{1,\text{tot}}^\chi(z)}{\partial z} - q \frac{\partial \rho_1^\chi(z)}{\partial t} = -q \left(\frac{\partial \rho_1^\chi(z)}{\partial t} \right)_{\text{rel.}} - q \left(\frac{\partial \rho_1^\chi(z)}{\partial t} \right)_{\text{gen.}}, \quad (4.70)$$

où $j_{n,\text{tot}}(z) = j_n(z) + j_{n,\text{MPGE}}(z)$, $\chi = \pm 1$ représente la chiralité du noeud .

Nous allons suivre une approche phénoménologique pour écrire les termes de relaxation dans les équations de continuité :

$$\left(\frac{\partial \rho_0^\chi(z)}{\partial t} \right)_{\text{rel.}} = -\chi \frac{\rho_0^+(z) - \rho_0^-(z)}{2\tau_v} + \frac{\rho_1^+(z) + \rho_1^-(z)}{2\tau_r}, \quad (4.71)$$

$$\left(\frac{\partial \rho_1^\chi(z)}{\partial t} \right)_{\text{rel.}} = -\chi \frac{\rho_1^+(z) - \rho_1^-(z)}{2\tau_v} - \frac{\rho_1^+(z) + \rho_1^-(z)}{2\tau_r}. \quad (4.72)$$

Ce qui correspond à une approximation du temps de relaxation dans les équations de continuité. Le premier terme de l'équation (4.71) correspond à la relaxation intervallée pour le niveau $n = 0$. S'il y a un excès de charge dans le noeud $\chi = +1$ par rapport au noeud $\chi = -1$, alors cet excès a tendance à relaxer à un temps caractéristique τ_v . Le deuxième terme de l'équation (4.71) correspond à la relaxation de la charge totale du niveau $n = 1$ vers le niveau $n = 0$. Sous excitation lumineuse, des électrons du niveau $n = 0$ vont être promus au niveau $n = 1$. Ce terme a alors pour but de modéliser la relaxation après excitation des électrons. L'équation (4.72) représente les mêmes phénomènes physiques mais pour le niveau $n = 1$. Le deuxième terme de l'équation (4.72) a un signe opposé au terme de l'équation (4.71) étant donné que le niveau $n = 1$ perd des électrons par relaxation et le niveau $n = 0$ en gagne. Dans la limite quasi-statique, c'est-à-dire où la densité devient indépendante du temps, on arrive à

$$\frac{\partial j_{0,\text{tot}}^\chi(z)}{\partial z} = \chi q \frac{\rho_0^+(z) - \rho_0^-(z)}{2\tau_v} - q \frac{\rho_1^+(z) + \rho_1^-(z)}{2\tau_r} + q \left(\frac{\partial \rho_1^\chi(z)}{\partial t} \right)_{\text{gen.}} + \chi \frac{q^3}{4\pi^2 \hbar^2} \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} B_z, \quad (4.73)$$

$$\frac{\partial j_{1,\text{tot}}^\chi(z)}{\partial z} = \chi q \frac{\rho_1^+(z) - \rho_1^-(z)}{2\tau_v} + q \frac{\rho_1^+(z) + \rho_1^-(z)}{2\tau_r} - q \left(\frac{\partial \rho_1^\chi(z)}{\partial t} \right)_{\text{gen.}}. \quad (4.74)$$

Maintenant que nous disposons de toutes les équations nécessaires, il nous faut écrire des équations différentielles pour des variables indépendantes. Dans notre cas, nous choisirons le potentiel électrostatique $\psi(z)$ ainsi que les quasi-potentiel de Fermi $\varphi_0^\pm(z)$ et $\varphi_1^\pm(z)$ comme variables indépendantes.

4.3.3 Équations différentielles pour les variables indépendantes

Il est nécessaire, afin de résoudre complètement le système, d'exprimer les équations différentielles en fonction de variables indépendantes. Nous disposons de cinq variables

indépendantes : $\psi(z)$, $\varphi_0^+(z)$, $\varphi_0^-(z)$, $\varphi_1^+(z)$ et $\varphi_1^-(z)$, et également de cinq équations pour résoudre entièrement le système. On rappelle premièrement l'équation de Poisson

$$\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \frac{1}{4\pi^2 \ell_B^2} \sum_\chi \left[\frac{q\psi(z) - q\varphi_0^\chi(z)}{\hbar |v_0^\chi|} + \chi q \frac{\tau_v}{\hbar} \frac{\partial \varphi_0^\chi(z)}{\partial z} + 4\pi^2 \ell_B^2 \rho_1^\chi [\psi(z), \varphi_1^\chi(z)] \right], \quad (4.75)$$

L'étape suivante est de remplacer le courant total dans l'équation de continuité, ce qui nous permet d'écrire un système d'équations en fonctions des variables indépendantes. Après quelques étapes de calcul, toujours en considérant deux noeuds de chiralités opposées, on obtient l'équation pour le quasi-niveau de Fermi pour le niveau chiral

$$\begin{aligned} & - \frac{q^2 |v_0^\chi| \tau_v}{4\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \frac{\partial^2 \varphi_0^\chi(z)}{\partial z^2} - \chi \frac{q^2}{4\pi \ell_B^2 \hbar} \frac{\partial \varphi_0^\chi(z)}{\partial z} + \chi q v_F \tau_r \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \rho_1^\chi}{\partial t} [\psi(z), \varphi_0^\chi(z), \varphi_1^\chi(z)] \right)_{\text{gen.}} \\ & = \chi q \frac{\rho_0^+ [\psi(z), \varphi_0^+(z)] - \rho_0^- [\psi(z), \varphi_0^-(z)]}{2\tau_v} - q \frac{\rho_1^+ [\psi(z), \varphi_1^+(z)] + \rho_1^- [\psi(z), \varphi_1^-(z)]}{2\tau_r} \\ & + q \left(\frac{\partial \rho_1^\chi}{\partial t} [\psi(z), \varphi_0^\chi(z), \varphi_1^\chi(z)] \right)_{\text{gen.}}, \end{aligned} \quad (4.76)$$

et pour le niveau non chiral

$$\begin{aligned} & - q \mu_1 \rho_1^\chi [\psi(z), \varphi_1^\chi(z)] \frac{\partial^2 \varphi_1^\chi(z)}{\partial z^2} - q \mu_1 \frac{\partial \varphi_1^\chi(z)}{\partial z} \frac{\partial \rho_1^\chi [\psi(z), \varphi_1^\chi(z)]}{\partial z} \\ & - \chi q v_F \tau_r \frac{1 - 2v_F^2 / (\omega \ell_B)^2}{1 + 2v_F^2 / (\omega \ell_B)^2} \left(\frac{\partial \rho_1^\chi}{\partial t} [\psi(z), \varphi_0^\chi(z), \varphi_1^\chi(z)] \right)_{\text{gen.}} \\ & = \chi q \frac{\rho_1^+ [\psi(z), \varphi_1^+(z)] - \rho_1^- [\psi(z), \varphi_1^-(z)]}{2\tau_v} + q \frac{\rho_1^+ [\psi(z), \varphi_1^+(z)] + \rho_1^- [\psi(z), \varphi_1^-(z)]}{2\tau_r} \\ & - q \left(\frac{\partial \rho_1^\chi}{\partial t} [\psi(z), \varphi_0^\chi(z), \varphi_1^\chi(z)] \right)_{\text{gen.}}. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Les crochets représentent une fonctionnelle pour préciser les quantités qui dépendent des variables indépendantes que l'on a pas explicité ici pour avoir des expressions plus compactes. Nous discuterons dans la section 4.4.3 d'un algorithme et d'une méthode numérique afin de résoudre cette équation en présence d'une lumière externe et possiblement un champ électrique statique donné par une différence de potentiel aux bornes du système. Pour pouvoir résoudre ce système des équations de manière unique, il nous faut d'abord préciser les conditions aux limites du système. Dans le cas présent, il nous en faut deux par équation.

4.3.4 Discussion sur les conditions aux limites

Les conditions aux limites de notre système dépendent évidemment de la nature physique des bornes de ce dernier. Si notre échantillon de semimétal de Weyl est dans une jonction entre deux isolants, deux métaux (contacts ohmiques ou tunnels) ou bien deux autres semimétaux de Weyl avec des propriétés microscopiques différentes, la formulation des conditions aux frontières sera différente.

On va ici présenter en guise d'exemple des conditions aux limites avec un contact ohmique et un isolant, en général toutes les combinaisons sont possibles si tant est que l'on peut justifier l'utilisation de différentes conditions aux bords. Premièrement, pour une interface avec un isolant située à $z = 0$ [108] :

$$j_{0,\text{tot}}(z = 0) = j_{0,\text{tot}}^+(z = 0) + j_{0,\text{tot}}^-(z = 0) = \pm q R_{\text{surf}}, \quad (4.78)$$

$$j_{1,\text{tot}}(z = 0) = j_{1,\text{tot}}^+(z = 0) + j_{1,\text{tot}}^-(z = 0) = \mp q R_{\text{surf}}, \quad (4.79)$$

$$\left. \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{Q_{\text{int}}}{\epsilon_0 \epsilon_\infty}, \quad (4.80)$$

où R_{surf} représente la recombinaison des charges à l'interface. Le signe devant le terme de recombinaison pour les deux niveaux de Landau doit obéir à la condition $j_{0,\text{tot}}(z = 0) + j_{1,\text{tot}}(z = 0) = 0$ et Q_{int} modélise la présence de charge à l'interface que l'on a supposé perpendiculaire à \hat{z} . Il est cependant commun de négliger cette recombinaison de charges à la surface ainsi que la présence de charge à l'interface [108, 109], ce qui conduit à des conditions aux limites simplifiées

$$j_{0,\text{tot}}(z = 0) = j_{0,\text{tot}}^+(z = 0) + j_{0,\text{tot}}^-(z = 0) = 0, \quad (4.81)$$

$$j_{1,\text{tot}}(z = 0) = j_{1,\text{tot}}^+(z = 0) + j_{1,\text{tot}}^-(z = 0) = 0, \quad (4.82)$$

$$\left. \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0. \quad (4.83)$$

Cela implique que le potentiel électrostatique doit être continu à l'interface et que le courant des différents niveaux de Landau ne peut pas pénétrer dans le matériau isolant. Nous allons par la suite nous concentrer sur une seconde possibilité de conditions aux limites, qui est l'interface avec un métal modélisé par un contact ohmique. Dans ce cas, la valeur du potentiel électrostatique à l'interface ainsi que la valeur des quasi-potentiels de Fermi sont donnés par leur valeur dans le contact ohmique, soit

$$\varphi_0^\chi(z = 0) = \varphi_1^\chi(z = 0) = \psi(z = 0) = U_{\text{ohm}}. \quad (4.84)$$

À l'interface, pour ces conditions aux limites, les quasi-niveaux de Fermi sont égaux pour les deux noeuds de chiralité opposées, étant donné que le degré de liberté de vallée (chirale) n'existe pas dans un métal.

D'autres conditions sont aussi possibles, comme des conditions aux limites type "injection". Dans ce cas, on injecte un courant de charge total, qui peut être propre à un niveau de Landau, voire injecter un courant axial pur. Une manière de faire cela est d'avoir deux échantillons de semimétaux de Weyl dont l'un est illuminé et dont l'absorption conduit à une polarisation de vallée complète. On sait que cela donne lieu à un courant axial qui se propage colinéairement au champ magnétique, et peut alors pénétrer dans l'autre semimétal de Weyl non illuminé.

La richesse des conditions aux limites en plus de la nature des équations de van Roosbroeck pour les variables indépendantes rend délicate et subtile une compréhension totale de la physique du système, tant au point de vue analytique que numérique. On va donc pour commencer résoudre ce système d'équations pour un cas simplifié, présenté dans la section suivante.

4.4 Exemple de solution des équations de van Roosbroeck

La physique décrite par le système d'équations que nous venons de développer est riche et complexe, cependant il faut s'assurer que le modèle que l'on a présenté décrit bien certaines limites simples avant d'ajouter tous les ingrédients voulus. Nous allons donc commencer par résoudre ces équations dans un cas limite plus simple, en l'absence de lumière externe. Dans ce cas particulier, si l'on se place dans la limite quantique, où le niveau de Fermi (à l'équilibre) croise uniquement les niveaux de Landau chiraux, alors on peut éliminer le premier niveau non chirale de notre étude et résoudre le système d'équations de Van Roosbroeck uniquement pour le niveau chirale.

4.4.1 Équations de van Roosbroeck pour les niveaux chiraux

Nous allons nous concentrer sur les diverses équations régissant le transport des électrons dans le niveau de Landau chirale en prenant le cas de noeuds non inclinés pour deux

noeuds de chiralités opposées reliés par un miroir avec un champ magnétique orienté perpendiculairement au plan de ce dernier. On écrit alors respectivement les équations pour le courant, de continuité et de Poisson comme

$$j_0^\chi(z) = \frac{q^2}{4\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \left(\chi (\psi(z) - \varphi_0^\chi(z)) - |v_0^\chi| \tau_v \frac{\partial \varphi_0^\chi}{\partial z} \right), \quad (4.85)$$

$$\frac{\partial j_0^\chi}{\partial z} = \chi q \frac{\rho_0^+(z) - \rho_0^-(z)}{2\tau_v} + \chi \frac{q^2}{4\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \frac{\partial \psi(z)}{\partial z}, \quad (4.86)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} = \frac{q^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty 4\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \left[\frac{2\psi(z) - \varphi_0^+(z) - \varphi_0^-(z)}{|v_0^\chi|} - \tau_v \left(\frac{\partial \varphi_0^+(z)}{\partial z} - \frac{\partial \varphi_0^-(z)}{\partial z} \right) \right], \quad (4.87)$$

où l'indice $+$ ($-$) représente le noeud de chiralité positive (négative) et τ_v le temps de diffusion caractéristique du système, celui entre les deux noeuds de Weyl. L'équation (4.85) a également été dérivée dans un formalisme plus proche de la physique des hautes énergies pour un courant dans un fluide relativiste en incluant le terme d'anomalie provenant du diagramme "triangle" [114, 123]. On peut ensuite écrire une expression pour le courant total et pour le courant axial :

$$j_0^s(z) = j_0^+(z) + j_0^-(z) = \frac{q^2}{4\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \left(-\varphi_0^+(z) + \varphi_0^-(z) - |v_0^\chi| \tau_v \left(\frac{\partial \varphi_0^+}{\partial z} + \frac{\partial \varphi_0^-}{\partial z} \right) \right), \quad (4.88)$$

$$j_0^5(z) = j_0^+(z) - j_0^-(z) = \frac{q^2}{4\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \left(2\psi(z) - \varphi_0^+(z) - \varphi_0^-(z) - |v_0^\chi| \tau_v \left(\frac{\partial \varphi_0^+(z)}{\partial z} - \frac{\partial \varphi_0^-(z)}{\partial z} \right) \right). \quad (4.89)$$

On rappelle qu'on a choisi comme variables indépendantes le potentiel électrostatique et les quasi-potentiels de Fermi, ici pour les deux niveaux de Landau zéro de chiralité opposée. Le but est alors le même que dans la section 4.3.3, obtenir un système d'équations à partir des équations (4.85), (4.86) et (4.87) impliquant uniquement ces variables indépendantes. Cette dernière s'exprime déjà en fonction des variables voulues. Il suffit donc d'insérer l'équation pour le courant dans l'équation de continuité en utilisant l'expression pour la densité électronique pour le niveau chiral de l'équation (4.53) afin de trouver

$$\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} - \frac{q^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty 4\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \left[\frac{2\psi(z) - \varphi_0^+(z) - \varphi_0^-(z)}{|v_0^\chi|} - \tau_v \left(\frac{\partial \varphi_0^+(z)}{\partial z} - \frac{\partial \varphi_0^-(z)}{\partial z} \right) \right] = 0, \quad (4.90)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_0^+}{\partial z^2} + \frac{1}{|v_0^\chi| \tau_v} \frac{\partial \varphi_0^+}{\partial z} - \frac{1}{2|v_0^\chi| \tau_v} \left(\frac{\varphi_0^+ - \varphi_0^-}{|v_0^\chi| \tau_v} + \frac{\partial \varphi_0^+}{\partial z} + \frac{\partial \varphi_0^-}{\partial z} \right) = 0, \quad (4.91)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi_0^-}{\partial z^2} - \frac{1}{|v_0^\chi| \tau_v} \frac{\partial \varphi_0^-}{\partial z} + \frac{1}{2|v_0^\chi| \tau_v} \left(\frac{\varphi_0^+ - \varphi_0^-}{|v_0^\chi| \tau_v} + \frac{\partial \varphi_0^+}{\partial z} + \frac{\partial \varphi_0^-}{\partial z} \right) = 0. \quad (4.92)$$

On obtient alors trois équations différentielles du second ordre pour trois variables indépendantes, ce qui nous permet de résoudre entièrement le système à l'aide de conditions aux limites pour chaque variable. Dans le cas de deux noeuds reliés par un miroir avec le champ magnétique perpendiculaire à ce dernier, il est possible de résoudre analytiquement ce système d'équations.

4.4.2 Solution analytique du système d'équations couplées pour des noeuds non inclinés

Nous allons reprendre les équations résumées dans la section précédente afin de donner une solution analytique, puis nous précisons les conditions aux limites afin de résoudre complètement ces équations. Tout d'abord, commençons par l'équation de continuité pour le courant de charge, qui est un vecteur vrai. En utilisant l'équation (4.86) pour les deux noeuds et en sommant ces dernières, on obtient immédiatement

$$\frac{\partial j_0^c}{\partial z} = 0 \rightarrow j_0^c(z) = \text{constante.} \quad (4.93)$$

Pour l'instant cette constante est indéterminée, mais cette conclusion due à l'équation de continuité est par ailleurs bien connue : en régime stationnaire et en une dimension le courant total est uniforme dans le système.

Nous allons ensuite considérer le cas sans inclinaison, ce dernier agissant uniquement comme une renormalisation de la vitesse de Fermi. On procède alors à la substitution $|v_0^x| \rightarrow v_F$. On peut ensuite écrire l'équation de continuité pour le courant axial, toujours en utilisant l'équation (4.86), ce qui donne

$$\frac{\partial j_0^5}{\partial z} = \frac{1}{v_F \tau_v} j_0^c(z) + \frac{q^2}{2\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad (4.94)$$

en reconnaissant que $j_0^c(z) = qv_F (\rho_0^+(z) - \rho_0^-(z))$. De plus si l'on prend la dérivée de l'équation (4.94), on trouve

$$\frac{\partial^2 j_0^5}{\partial z^2} = \frac{q^2}{2\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{q^2}{2\pi^2 \ell_B^2 \hbar v_F \epsilon_\infty \epsilon_0} j_0^5(z) \equiv \frac{j_0^5(z)}{\lambda^2}, \quad (4.95)$$

en notant que la partie droite du signe égal de l'équation (4.87) correspond au courant axial de l'équation (4.89) à des constantes près. De manière intéressante, la longueur caractéristique associée aux variations spatiales du courant axial est reliée à une constante de structure fine effective, avec la vitesse de Fermi en lieu et place de la vitesse de la lumière, ainsi qu'à la longueur magnétique ($\lambda \propto \sqrt{\epsilon_\infty/B}$). La solution est alors immédiate pour l'équation (4.95)

et on obtient :

$$j_0^5(z) = Ae^{z/\lambda} + Be^{-z/\lambda}, \quad (4.96)$$

avec A et B des constantes restant à être déterminées par les conditions aux limites. On peut alors remplacer cette solution dans l'équation de Poisson pour trouver la solution pour le potentiel électrostatique

$$\psi(z) = D + Cz + \frac{\lambda^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty v_F} \left(Ae^{z/\lambda} + Be^{-z/\lambda} \right), \quad (4.97)$$

où C et D sont également des constantes à déterminer. On peut ensuite déterminer les équations pour les quasi-potentiels de Fermi, en écrivant pour commencer $j_0^c(z) + j_0^5(z) = 2j_0^+(z)$, en prenant la dérivée de cette équation et avec les équations (4.96) et (4.97) :

$$\varphi_0^+(z) = E + Cz + Fv_F\tau_v e^{-z/(v_F\tau_v)}. \quad (4.98)$$

Pour le quasi-potential de Fermi de l'autre niveau de Landau chiral, cette fois avec $j_0^c(z) - j_0^5(z) = 2j_0^-(z)$, on arrive à

$$\varphi_0^-(z) = \tilde{E} + Cz + \tilde{F}v_F\tau_v e^{z/(v_F\tau_v)}, \quad (4.99)$$

avec E, \tilde{E}, F et \tilde{F} des constantes restant à être fixées par les conditions aux bords. L'étape suivante est de remplacer les équations (4.98) et (4.99) dans les expressions pour le courant vecteur et le courant axial, ce qui conduit à deux conditions supplémentaires pour certaines constantes :

$$j_0^c(z) = \frac{q^2}{4\pi^2 \ell_B^2 \hbar} (-2v_F\tau_v C - E + \tilde{E}), \quad (4.100)$$

$$0 = 2D - E - \tilde{E}. \quad (4.101)$$

De plus, l'équation (4.94) donne la condition $E = \tilde{E}$, ce qui implique automatiquement $E = D$. On obtient alors le système d'équations simplifié suivant :

$$j_0^c(z) = -\frac{q^2 v_F \tau_v}{2\pi^2 \ell_B^2 \hbar} C, \quad (4.102)$$

$$j_0^5(z) = Ae^{z/\lambda} + Be^{-z/\lambda}, \quad (4.103)$$

$$\psi(z) = D + Cz + \frac{\lambda^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty v_F} \left(Ae^{z/\lambda} + Be^{-z/\lambda} \right), \quad (4.104)$$

$$\varphi_0^L(z) = D + Cz + Fv_F\tau_v e^{-z/(v_F\tau_v)}, \quad (4.105)$$

$$\varphi_0^R(z) = D + Cz + \tilde{F}v_F\tau_v e^{z/(v_F\tau_v)}. \quad (4.106)$$

Toutes ces équations, sans inclinaison des cônes, sont jusqu'à présent indépendantes de quelconques conditions aux limites. On peut alors utiliser ces dernières pour modéliser les niveaux de Landau chiraux de n'importe quel semimétal de Weyl en fort champ magnétique. Afin de nous assurer de la cohérence de notre modèle, nous allons imposer des conditions aux bords consistant en des contacts ohmiques. Dans un tel modèle, nous allons fixer $\psi(0) = \varphi^+(0) = \varphi^-(0) = U_1$ et $\psi(L) = \varphi^+(L) = \varphi^-(L) = U_2$ pour notre système de longueur L avec U_1 et U_2 des voltages imposés aux bornes du système [108, 118].

En choisissant ces conditions aux limites, on trouve pour $z = 0$ que $F = \tilde{F}$ ainsi que $A + B = F\epsilon_0\epsilon_\infty v_F^2 \tau_v / \lambda^2$ et pour $z = L$, $\tilde{F} = F = 0$ et par conséquent $A = B = 0$, de plus on trouve aussi que $C = (U_2 - U_1)/L$. Cela nous permet donc d'écrire les solutions pour toutes les variables et quantités d'intérêt :

$$j_0^c(z) = -\frac{q^2 v_F \tau_v}{2\pi^2 \ell_B^2 \hbar} \frac{U_2 - U_1}{L} = \frac{q^2 v_F \tau_v}{2\pi^2 \ell_B^2 \hbar} E_z, \quad (4.107)$$

$$j_0^s(z) = 0, \quad (4.108)$$

$$\psi(z) = \varphi_0^+(z) = \varphi_0^-(z) = \frac{U_2 - U_1}{L} z + U_1, \quad (4.109)$$

où on a posé $D = U_1$ afin de respecter les conditions aux limites en $z = 0$ et en $z = L$ pour le potentiel électrostatique et les quasi-potentiels de Fermi. Le choix de D n'intervient pas dans les observables physiques. Tout d'abord, on retrouve pour l'équation du courant le résultat bien connu de la conductivité en fort champ magnétique d'un semimétal de Weyl, donnant lieu à la fameuse magnéto-résistance négative [78]. Ensuite, dans ces conditions aux bords on trouve un courant axial hors équilibre nul. On a également relié la génération de charge induite nette hors équilibre au courant axial (c.f. équations (4.87) et (4.89)). Un courant axial nul implique alors la condition de quasi-neutralité, avec $\rho_0^+(z) = -\rho_0^-(z)$, où l'excès d'électrons dans un noeud est compensé par un déficit dans l'autre noeud [109]. Parce que la charge totale est conservée dans l'équation de continuité et que dans notre modèle, seuls les niveaux de Landau chiraux y contribuent, la condition de quasi-neutralité est vérifiée *a priori*. L'équation du potentiel électrostatique indique que, dans un milieu homogène et en présence de contacts ohmiques, le champ électrique est constant dans l'échantillon, ce qui est également attendu.

4.4.3 Solution numérique du système d'équations couplées comme référence

Nous allons maintenant présenter une méthode numérique utilisée pour les hétérostructures semiconductrices comme les diodes. Cette méthode est tirée du chapitre 50 de la

référence [118]. On rappelle qu'on veut ultimement inclure un champ électrique externe dû à la lumière dans notre modèle, ainsi que le premier niveau de Landau non chiral. On va ici présenter la méthode générale pour résoudre numériquement les équations de Van Roosbroeck, puis extrapoler cette méthode à des problématiques futures.

Tout d'abord, si l'on considère uniquement le niveau chiral, on a comme équations de départ (4.90), (4.91) ainsi que (4.92). Si le champ magnétique est orienté perpendiculairement au miroir, on sait que l'on peut trouver une solution analytique.

Premièrement il faut en règle générale calculer le potentiel intégré (*built-in potential* en anglais) pour un système hétérogène. Ce potentiel intégré représente la fonction $\psi(z)$ à l'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire lorsque $\varphi_0^+(z) = \varphi_0^-(z) = 0$. L'étape initiale est alors de poser la condition de neutralité locale à l'équilibre, c'est-à-dire de poser $\partial^2\psi/\partial z^2 = 0$ pour l'équation (4.87). Dans notre cas, cela résulte simplement à $\psi_{\text{eq.}}(z) = 0$. Nous ne discuterons pas le cas de l'hétérostructure ici qui a été développé en détail pour les semiconducteurs ordinaires dans la littérature [118].

Deuxièmement il faut discrétiser notre système et définir les conditions aux limites. Plusieurs schémas de discrétisation existent dans le cadre des jonctions semiconductrices [108, 118]. Nous allons ici implémenter une discrétisation uniforme pour un système de $N_{\text{sites}} = 801$ points et utiliser une méthode de différence finie pour les dérivées premières et secondes.

Considérons un instant des conditions aux limites données et fixes, la méthode que l'on choisit alors pour résoudre le système est une méthode de Newton, consistant simplement à trouver le zéro des équations (4.90), (4.91) et (4.92) simultanément par itérations successives [124]. Cependant, au lieu d'avoir une simple équation polynomiale ou différentielle à résoudre, on a trois équations qui sont des fonctionnelles de la position. Chaque variable indépendante ($\psi(z)$, $\varphi_0^+(z)$ et $\varphi_0^-(z)$) s'écrit alors comme un vecteur en z de N_{sites} . Chacune de ces équations devient alors un vecteur avec un nombre d'éléments correspondant au nombre de sites. Pour une fonction simple d'une variable, l'algorithme entre deux itérations de la méthode de Newton s'écrit

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad (4.110)$$

où $f'(x)$ est la dérivée première de $f(x)$ et k une itération donnée. Dans notre cas, nous cherchons le zéro de plusieurs équations simultanément, on doit alors calculer le jacobien du système pour trouver les nouvelles valeurs de nos variables indépendantes à chaque itération. La matrice jacobienne nécessaire est de la taille $(N_{\text{var.}} \times N_{\text{sites}}) \times (N_{\text{var.}} \times N_{\text{sites}})$,

où N_{var} représente le nombre de variables indépendantes, au nombre de 3 dans notre calcul. Pour résumer, entre l'itération k et $k + 1$ de la méthode de Newton, on procède à l'opération suivante :

$$\begin{pmatrix} \psi_{k+1} \\ \varphi_{0,k+1}^+ \\ \varphi_{0,k+1}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_k \\ \varphi_{0,k}^+ \\ \varphi_{0,k}^- \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial \psi} & \frac{\partial F_1}{\partial \varphi_0^+} & \frac{\partial F_1}{\partial \varphi_0^-} \\ \frac{\partial F_2}{\partial \psi} & \frac{\partial F_2}{\partial \varphi_0^+} & \frac{\partial F_2}{\partial \varphi_0^-} \\ \frac{\partial F_3}{\partial \psi} & \frac{\partial F_3}{\partial \varphi_0^+} & \frac{\partial F_3}{\partial \varphi_0^-} \end{pmatrix}_k^{-1} \begin{pmatrix} F_1(\psi_k, \varphi_{0,k}^+, \varphi_{0,k}^-) \\ F_2(\psi_k, \varphi_{0,k}^+, \varphi_{0,k}^-) \\ F_3(\psi_k, \varphi_{0,k}^+, \varphi_{0,k}^-) \end{pmatrix}. \quad (4.111)$$

Les itérations continuent jusqu'à convergence. Dans l'équation (4.111), ψ_k et $\varphi_{0,k}^\pm$ sont des vecteurs à N_{Sites} composantes et F_1 , F_2 et F_3 correspondent respectivement aux équations (4.90), (4.91) et (4.92), c'est-à-dire $F_1(\psi_k, \varphi_{0,k}^+, \varphi_{0,k}^-) = 0$ correspond à l'équation (4.90), etc. On précise également qu'on calcule la matrice jacobienne pour les équations discrétisées. Une fois que l'itération par la méthode de Newton est donnée, il faut développer un algorithme pour calculer toutes les propriétés hors-équilibre du système.

Tout d'abord, on initialise le système en supposant l'équilibre thermodynamique, avec les vecteurs initiaux $\varphi_{0,k=0}^\pm = (0)_{i=1}^{N_{\text{Sites}}}$ ainsi que $\psi_{k=0} = (\psi_{\text{eq}})_{i=1}^{N_{\text{Sites}}}$, où la notation $(A)_{i=1}^{N_{\text{Sites}}}$ représente le vecteur où les N_{sites} composantes sont égales à A . Les conditions aux limites, pour le cas des contacts ohmiques, sont initialisées à $U_1 = U_2 = 0$. Ensuite, on doit augmenter légèrement U_2 et U_1 pour générer une différence de potentiel $\delta U = U_2 - U_1$ à chaque itération. On résout ensuite notre système d'équations avec la méthode de Newton en partant des vecteurs $(\psi_{k=0}, \varphi_{0,k=0}^+, \varphi_{0,k=0}^-)$ de l'itération $k = 0$, pour obtenir par la suite nos vecteurs "mis à jour" $(\psi_{k=1}, \varphi_{0,k=1}^+, \varphi_{0,k=1}^-)$ après la première itération. Enfin, on recommence cette dernière étape jusqu'à la valeur de différence de potentiel voulue.

La figure 4.1 représente les solutions obtenues pour divers itérations du potentiel électrostatique, des quasi-potentiels de Fermi ainsi que le courant obtenu pour la dernière itération. Pour cette figure, on a augmenté la différence de potentiel par pas de $\delta U = 0.2$ mV jusqu'à $U_2 - U_1 = -1$ mV, où on a continué à faire quelques itérations pour vérifier la bonne convergence du système. On a comparé les résultats obtenus numériquement à la solution analytique de la section 4.4.2 et on remarque que la correspondance est excellente, ce qui nous permet de vérifier que notre algorithme numérique est une bonne référence pour de futurs résultats. On vérifie aussi que le courant axial est nul en tout point, comme prédit analytiquement pour des conditions aux limites type contacts ohmiques. De plus, si les deux noeuds sont reliés par un miroir et le champ magnétique orienté perpendiculairement au miroir, la présence d'une inclinaison des cônes n'a aucune conséquence sur les résultats.

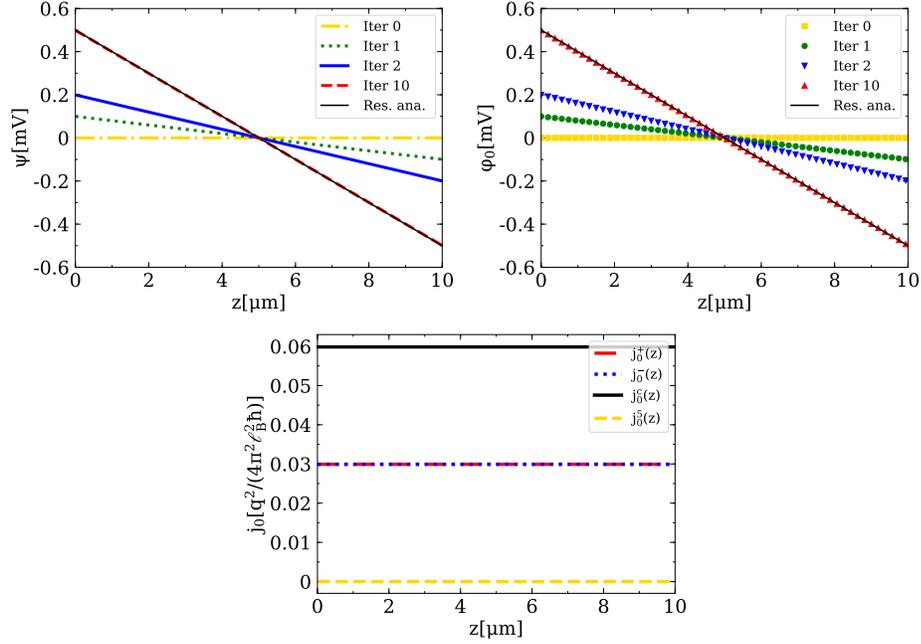


FIGURE 4.1 *Panneau de gauche* : Potentiel électrostatique en fonction de la position dans le système. *Panneau de droite* : Quasi-niveau de Fermi pour le noeud de chiralité positive (les courbes sont identiques pour le noeud de chiralité négative) en fonction de la position dans le semimétal. *Panneau du bas* : Courant pour chaque noeud, vecteur et axial en fonction de la position dans le semimétal sous fort champ magnétique pour la dernière itération du calcul. Les courbes rouge et bleu pointillées représentent respectivement le courant du noeud de chiralité positive et négative. La courbe noire représente le courant vecteur et la courbe jaune en tirets le courant axial. On a choisi comme paramètres $t_x = t_y = 0.1$, $t_z = 0.5$, $\tau_v = 1$ ps, $\epsilon_\infty = 30$, $v_F = 3 \times 10^5 \text{m.s}^{-1}$ et $B = 1$ T. On a choisi une longueur du système $L = 10 \mu\text{m}$ avec un nombre de sites $N_{\text{sites}} = 801$.

Nous nous sommes concentrés dans cette section sur le transport des niveaux de Landau chiraux pour deux noeuds de Weyl reliés par un miroir. Cependant, notre algorithme est généralisable au cas comportant un niveau de Landau chiral et le premier niveau non chiral. Il suffit de reprendre les équations de van Roosbroeck pour le potentiel et appliquer la même méthode de Newton. Cette fois, on inclut le champ électrique externe de la même façon que la différence de potentiel pour des contacts ohmiques. On augmente progressivement l'intensité de la lumière à chaque itération, ce qui revient à inclure la lumière externe de manière adiabatique. Cette dernière tâche reste à être implémentée.

Résumé du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons motivé l'étude de dispositifs à base de semimétaux de Weyl en fort champ magnétique pour tenter de détecter des signatures propres aux propriétés topologiques de ces derniers. Nous avons choisi d'utiliser le formalisme de dérive-diffusion, célèbre dans la physique des semiconducteurs.

Ce formalisme nous a permis de dériver un ensemble d'équations, aussi appelé système d'équations de van Roosbroeck [104, 108] pour un semimétal de Weyl en fort champ magnétique pour les niveaux de Landau chiraux ainsi que pour les premiers niveaux de Landau non chiraux. Plusieurs résultats préliminaires ont déjà été obtenus en parvenant à résoudre analytiquement ce système d'équations mais uniquement pour les niveaux chiraux. On a montré ici des solutions particulières pour le cas de contacts ohmiques mais de nombreuses conditions aux limites peuvent être explorées, comme le fait d'injecter un courant axial à une extrémité et mesurer sa diffusion dans le système.

Nous sommes parvenus à écrire un algorithme qui nous permet de résoudre le système numériquement, au moins pour le cas de niveaux de Landau chiraux. Cela nous a également permis de vérifier nos résultats analytiques et ultimement de pouvoir le généraliser au cas avec les niveaux non chiraux ainsi qu'à la présence d'un champ électrique externe due à la lumière.

De plus nous nous sommes concentrés uniquement sur les noeuds reliés par symétrie miroir, en négligeant ceux reliés par symétrie par renversement du temps, ce qui peut être incorporé dans un travail futur basé sur le formalisme présenté dans ce chapitre. Le modèle présenté ici se veut simple afin de pouvoir incorporer le nombre de noeuds ainsi que le nombre de niveaux de Landau voulus, et cela, en présence ou non de lumière externe.

Conclusion

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés au lien entre la nature topologique des semimétaux de Weyl, les interactions entre les électrons, la présence d'un champ magnétique externe et la manifestation de ce lien dans des mesures optiques puis de transport. Pour ce faire, nous avons utilisé un modèle à basse énergie de semimétal de Weyl qui capture les propriétés essentielles que l'on a voulu mettre en évidence, comme la chiralité des noeuds de Weyl et le croisement de bandes non dégénérées. Nous nous sommes concentrés sur deux types de réponses optiques égales à un facteur près, que sont la conductivité optique interbande ainsi que l'absorption optique interbande. La première pour le cas en fort champ magnétique, parce que plus usitée dans le cadre du formalisme de l'approximation GRPA, et la seconde en l'absence de champ magnétique externe, plus proche d'un formalisme de la physique des semiconducteurs. Cette thèse a également eu à coeur de comparer ses prédictions théoriques avec des mesures expérimentales, c'est pourquoi on a étudié l'effet des différentes relations de symétries dans un cristal, comme la symétrie miroir, le renversement du temps ou l'inversion spatiale, afin de décrire la réponse optique de notre modèle minimal et pouvoir l'extrapoler à des matériaux réels.

Dans le chapitre 2, nous nous sommes efforcés d'écrire une théorie de l'absorption optique pour un système à deux bandes avec une dispersion linéaire en prenant en compte l'effet des interactions entre les électrons au voisinage de chaque noeud de Weyl. Cela nous a permis d'écrire une équation pour un exciton dit topologique. Dans le cas d'un semimétal de Weyl avec des termes non linéaires dans la dispersion, on est parvenu à relier les éléments de matrice de l'interaction coulombienne à une phase de Berry jointe entre l'électron et le trou. Pour une dispersion parfaitement linéaire, l'effet de cette courbure de Berry est moyenné à zéro. Pour une dispersion parfaitement linéaire, la réponse optique pour une lumière polarisée circulairement gauche et droite est dégénérée. Cependant, si l'on inclut des termes non linéaires, cela se traduit par la brisure de la symétrie anti-unitaire (ou symétrie de renversement du temps effective) à basse énergie, qui a pour conséquence de donner une contribution non nulle à cette courbure de Berry jointe qui donne une chiralité aux excitons.

Cet effet se manifeste dans le calcul de l'absorption optique. En brisant la symétrie de renversement du temps effective à basse énergie, on parvient à lever la dégénérescence pour une lumière circulairement polarisée entre les noeuds reliés par, cette fois, la vraie symétrie de renversement du temps dans le cristal. Cette levée de dégénérescence est caractéristique de la polarisation de vallée partielle que l'on a décrit. Proche du seuil d'absorption, il existe une plage en fréquence où un nombre limité de noeuds de Weyl absorbent plus que d'autres la lumière. Le lien entre la courbure de Berry jointe, la vorticité des fonctions d'ondes des paires électron-trou, ainsi que la brisure de cette symétrie anti-unitaire à basse énergie, pouvant venir de termes non linéaires ou d'une inclinaison du noeud de Weyl, ont été essentiels afin d'obtenir cette polarisation de vallée.

La polarisation de vallée partielle n'étant qu'une étape, on a cherché dans le chapitre 3 un moyen pour obtenir une polarisation de vallée complète. En se concentrant sur la polarisation de vallée partielle entre noeuds reliés par la symétrie de renversement du temps, la brisure de cette dernière s'est avérée être un point de départ pour notre travail. On a alors inclus un champ magnétique externe à notre étude, donnant lieu à un ensemble de niveaux de Landau, dont un particulièrement spécial, le niveau de Landau chiral qui disperse seulement dans une direction. Les interactions entre électrons ont été implémentées en utilisant l'approximation GRPA pour un gaz de fermions en fort champ magnétique, ce qui nous a permis d'écrire la conductivité optique en présence de ces interactions. Cette fois ci, pour plus de facilités théoriques, nous nous sommes concentré sur des cônes de Weyl inclinés, ce qui rend également les comparaisons avec l'expérience plus aisées. Nous nous sommes ensuite intéressés à l'effet des divers paramètres de notre modèle, comme l'inclinaison du cône, le potentiel chimique ainsi que la constante diélectrique. La polarisation de vallée est cette fois complète entre noeuds reliés par symétrie de renversement du temps sur une certaine plage de fréquence. Cette dernière est maximale lorsque le potentiel chimique croise uniquement le niveau chiral mais proche du premier niveau non chiral, c'est-à-dire à l'entrée de la limite quantique. De surcroît, plus l'amplitude du vecteur d'inclinaison est importante, plus la brisure de la symétrie anti-unitaire est "forte" et donc amplifie également la plage en fréquence de la polarisation de vallée. L'observation expérimentale de cette polarisation de vallée complète se manifeste par le dédoublement de la transition optique entre le niveau chiral et les niveaux non chiraux. L'amplitude de ces pics est renforcée par les interactions de Coulomb. Ces considérations montrent la nature topologique de cette polarisation de vallée complète. En outre, il est possible de contrôler cette dernière selon la direction d'application du champ magnétique et la direction de propagation de la lumière. En particulier, il est possible, si ces deux derniers ne sont pas orientés selon un axe de symétrie principal, de réaliser optiquement une polarisation de vallée chirale.

Enfin, le chapitre 4 construit une théorie du transport pour un semimétal de Weyl en fort champ magnétique afin de déterminer s'il est possible de détecter, autrement que par une réponse optique, la polarisation de vallée complète. Nous avons alors écrit un ensemble d'équations, qui a fait la gloire des dispositifs semiconducteurs, appelées équations de van Roosbroeck, pour notre système d'intérêt. Tout en gardant à l'esprit la polarisation de vallée complète, on a choisi de tronquer l'espace de Hilbert et de ne garder que le niveau de Landau chiral et le premier niveau non chiral dans notre étude afin de simplifier le problème. Nous sommes alors parvenus à écrire une équation pour le courant, une équation de continuité pour chacun de ces deux niveaux et chacun des noeuds, ainsi que l'équation de Poisson pour le système. On a ensuite écrit une solution en absence du champ électrique externe de la lumière et en omettant volontairement le niveau de Landau non chiral pour se concentrer sur les niveaux chiraux. Nous avons trouvé une solution analytique à notre système d'équations les niveaux chiraux. En appliquant des conditions aux limites associées à des contacts ohmiques, nous avons trouvé avec une nouvelle approche des résultats déjà connus dans la littérature, comme la célèbre magnéto-résistance négative. Nous avons aussi résolu numériquement ce même système d'équations afin de pouvoir observer une correspondance entre les deux résultats. Cette correspondance étant excellente, nous pouvons avec confiance utiliser l'approche numérique développée pour un problème plus élaboré.

Pour compléter les travaux présentés dans cette thèse, il serait intéressant de déterminer une manière de mesurer expérimentalement la polarisation de vallée partielle, dont l'amplitude s'avère malheureusement faible dans nos calculs. De plus d'autres façons de mesurer la polarisation de vallée complète peuvent être imaginées, comme l'effet Kerr ou Faraday, qui sont sensibles à la brisure de symétrie par renversement du temps. Une étude de la réponse optique en incorporant l'influence des arcs de Fermi, qui sont eux aussi une manifestation de la nature topologique des semimétaux de Weyl pourrait s'avérer intéressante. De même, on s'est concentré sur les semimétaux de Weyl de type I; la nature de la polarisation de vallée pour les semimétaux de Weyl de type II, reste à ce jour inexplorée. Nous nous sommes uniquement intéressés dans ce travail à l'étude des propriétés statiques de la polarisation de vallée; comprendre la dynamique de cette dernière serait également bienvenu. Pour finir, le dernier chapitre ouvre vers de nombreuses avenues de recherche. Comment contrôler la polarisation de vallée par le transport? Est-il possible de la détecter et l'utiliser? Quid du courant axial pur créé par une polarisation de vallée complète? Enfin, est-il possible de voir un jour une utilisation des propriétés topologiques des semimétaux de Weyl dans des dispositifs électroniques? Une thèse ouvre autant de portes, voire plus, qu'elle n'en ferme.

Annexe A

Calcul analytique des fonctions d'ondes et des énergie propre pour un noeud de Weyl avec des interactions électron-électron de type contact

L'objectif de cette annexe est d'appuyer les résultats numériques de la section 2.3 en portant un nouveau regard sur ces derniers à l'aide d'une approche analytique de l'équation (2.80). On fait l'approximation d'un potentiel de Coulomb local où on remplace le potentiel coulombien écranté par un delta de Dirac. L'approche choisie ici est similaire à celle étudiée pour les états liés à deux électrons [125].

Cette approximation est valide pour des échelles de longueur qui dépassent la longueur caractéristique d'écrantage, et donc pour des vecteurs d'onde qui sont petits par rapport au vecteur d'onde de Thomas-Fermi q_{TF} , ou de manière plus pratique, si q_{TF} est grand comparé au cutoff en moment, ce qui est en effet possible dans la limite d'interactions fortes (c'est-à-dire ϵ_∞ de l'ordre de 1), dans la limite de dopage fort (c'est-à-dire où l'énergie de Fermi est élevée, mais ce qui peut poser des problèmes sur la justification du modèle à basse énergie) ou bien si l'on se trouve au voisinage d'une singularité de Van Hove (à l'exception du point de neutralité). Cependant le vecteur d'onde de Thomas-Fermi doit rester petit par rapport au vecteur d'onde de séparation entre les noeuds de Weyl. Dans cette limite, nous

pouvons remplacer l'équation (2.75) par

$$\begin{aligned}
V_{m\tau}(k_{\parallel}, k_z; k'_{\parallel}, k'_z) & \quad (A.1) \\
& \simeq \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_{\infty}q_{\text{TF}}^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{-im\phi} [\sin\theta_{\tau} \sin\theta'_{\tau} + (1 + \cos\theta_{\tau} \cos\theta'_{\tau}) \cos\phi + i(\cos\theta_{\tau} + \cos\theta'_{\tau}) \sin\phi] \\
& = \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_{\infty}q_{\text{TF}}^2} \left[\sin\theta_{\tau} \sin\theta'_{\tau} \delta_{m,0} + \frac{1}{2}(1 - \cos\theta_{\tau})(1 - \cos\theta'_{\tau}) \delta_{m,-1} + \frac{1}{2}(1 + \cos\theta_{\tau})(1 + \cos\theta'_{\tau}) \delta_{m,1} \right].
\end{aligned}$$

Dans ce régime, on observe que seuls les canaux de moment angulaire $m = 0, \pm 1$ contribuent à l'attraction effective électron-trou ; de plus seuls les canaux $m = \pm 1$ sont activés par la lumière circulairement polarisée ($m = +1$ pour RCP et $m = -1$ pour LCP). L'avantage est que l'équation (A.1) devient indépendante de l'intensité des interactions entre électrons étant donné que $q_{\text{TF}}^2 = e^2 / (\epsilon_0\epsilon_{\infty})v(\epsilon_F)$ pour l'approximation de Thomas-Fermi. En plus de cela, il est alors possible de séparer le terme d'interaction coulombienne entre les variables sans prime ($\sin\theta_{\tau}$ et $\cos\theta_{\tau}$) et celles avec ($\sin\theta'_{\tau}$ et $\cos\theta'_{\tau}$), ce qui permet une solution analytique de l'équation de Wannier. Le problème à résoudre est en fait une variation du problème de Cooper dans la théorie BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) de la supraconductivité [126].

Premièrement, considérons le canal de moment angulaire $m = 0$. En divisant l'équation (2.80) par le facteur $(2|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - \epsilon_{n,m=0,\tau})$, que l'on suppose alors non nul, ce qui est le cas en présence d'interactions, puis en multipliant par le facteur $\sin\theta_{\tau}$, et enfin en intégrant sur la variable \mathbf{k} , nous arrivons à

$$\frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_{\infty}q_{\text{TF}}^2} \int_{k_{\parallel}, k_z} \sin^2\theta_{\tau} \frac{\Theta(|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - |\epsilon_F|)}{2|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - \epsilon_{n,m=0,\tau}} = 1, \quad (A.2)$$

où l'on a choisi la limite de température nulle. On précise également que pour plus de simplicité, on a négligé la correction de la self-énergie sur les bandes, donc $\xi_{\alpha\tau}(\mathbf{k})$ est remplacé par $E_{\alpha\tau}(\mathbf{k})$. On rappelle également que toutes les intégrales sur les vecteurs d'onde obéissent à la condition $|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| < \Lambda$ (c.f. l'équation (2.78)).

On obtient alors, grâce à l'équation (A.2), les énergies d'excitation des paires électrons-trous correspondant à $m = 0$ pour le noeud τ . De la même façon, on trouve que les énergies d'excitation pour le canal de moment angulaire $m = \pm 1$ obéissent à

$$\frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_{\infty}q_{\text{TF}}^2} \int_{k_{\parallel}, k_z} \frac{(1 \pm \cos\theta_{\tau})^2}{2} \frac{\Theta(|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - |\epsilon_F|)}{2|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - \epsilon_{n,m=\pm 1,\tau}} = 1. \quad (A.3)$$

Afin d'obtenir des solutions analytiques approximatives pour les équations (A.2) et (A.3), il

nous faut reconnaître la relation

$$\int_{k_{\parallel}, k_z} F(k_{\parallel}, k_z) = \int^{\Lambda} dE \int_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \delta(E - |\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})|), \quad (\text{A.4})$$

où $\int_{\mathbf{k}} \equiv \int d^3k / (2\pi)^3 \Theta(\Lambda - |\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})|)$. En utilisant cette relation pour les équations (A.2) et (A.3), ces dernières deviennent

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_{\infty}q_{\text{TF}}^2} \int_{|\epsilon_F|}^{\Lambda} dE \frac{\rho_{\tau}(E)}{2E - \epsilon_{n,m=0,\tau}} \langle \sin^2 \theta_{\tau} \rangle_E &= 1, \\ \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_{\infty}q_{\text{TF}}^2} \int_{|\epsilon_F|}^{\Lambda} dE \frac{\rho_{\tau}(E)}{2E - \epsilon_{n,m=\pm 1,\tau}} \left\langle \frac{(1 \pm \cos \theta_{\tau})^2}{2} \right\rangle_E &= 1, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

où $\nu_{\tau}(E) = \int_{\mathbf{k}} \delta(E - |\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})|)$ est la densité d'états résolue en noeud à l'énergie E et

$$\langle f_{\tau}(\mathbf{k}) \rangle_E \equiv \frac{\int_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \delta(E - |\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})|)}{\nu_{\tau}(E)} \quad (\text{A.6})$$

est une valeur moyenne sur une surface d'énergie constante (E) autour du noeud τ d'une fonction dans l'espace des vecteurs d'onde $f_{\tau}(\mathbf{k})$.

Il existe de nombreuses solutions de l'équation (A.5), indexées par l'indice n . On va s'intéresser ici uniquement aux solutions d'énergie propre $\epsilon_{nm\tau} \leq 2|\epsilon_F|$, c'est-à-dire proches (et légèrement inférieures) du seuil d'absorption optique. Dans ce cas, les intégrandes de l'équation (A.5) sont piqués au voisinage de $E \simeq |\epsilon_F|$ en raison du delta de Dirac, et on obtient donc

$$\begin{aligned} \epsilon_{m=0,\tau} &\simeq 2|\epsilon_F| - 2\Lambda \exp[-1/\lambda_{m=0,\tau}(|\epsilon_F|)] \\ \epsilon_{m=\pm 1,\tau} &\simeq 2|\epsilon_F| - 2\Lambda \exp[-1/\lambda_{m=\pm 1,\tau}(|\epsilon_F|)], \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

où on définit

$$\begin{aligned} \lambda_{m=0,\tau}(|\epsilon_F|) &= \frac{e^2}{4\epsilon_0\epsilon_{\infty}q_{\text{TF}}^2} \nu_{\tau}(|\epsilon_F|) \langle \sin^2 \theta_{\tau} \rangle_{|\epsilon_F|} \\ \lambda_{m=\pm 1,\tau}(|\epsilon_F|) &= \frac{e^2}{8\epsilon_0\epsilon_{\infty}q_{\text{TF}}^2} \nu_{\tau}(|\epsilon_F|) \langle (1 \pm \cos \theta_{\tau})^2 \rangle_{|\epsilon_F|}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Lors de la dérivation de l'équation (A.7), nous avons négligé les termes d'ordre $O(|\epsilon_F|/\Lambda)$. Les quantités $\epsilon_{m,\tau} - 2|\epsilon_F|$ (c.f. l'équation (A.7)) représentent les énergies de liaison pour des excitons de Mahan [127] avec un moment angulaire azimutal m . De plus, il faut noter que l'énergie de liaison de ces excitons est supprimée de manière exponentielle, ce que nous discuterons par la suite.

Discutons maintenant de l'équation (A.7) pour certains cas particuliers. Lorsque $\alpha = \beta = 0$ (c'est-à-dire des noeuds de Weyl avec une dispersion parfaitement linéaire), on trouve $\langle \cos \theta_\tau \rangle_E = 0$ (c.f. figure 2.2) et

$$\langle \sin^2 \theta_\tau \rangle_E = \left\langle \frac{(1 \pm \cos \theta_\tau)^2}{2} \right\rangle_E, \quad (\text{A.9})$$

ce qui implique automatiquement $\epsilon_{m=0,\tau} = \epsilon_{m=\pm 1,\tau}$ et donc que les énergies de liaison pour un semimétal de Weyl parfaitement linéaire sont indépendantes du moment angulaire.

Maintenant, autorisons des termes non linéaires dans la dispersion, il s'ensuit que $\langle \cos \theta_\tau \rangle_E \neq 0$. Pour que le calcul soit plus aisé, on procède au changement de variable suivant

$$\int_{\mathbf{k}} = \int_{\mathbf{d}_\tau} \left| \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial \mathbf{B}_\tau} \right|, \quad (\text{A.10})$$

où $\int_{\mathbf{d}_\tau} \equiv \int d^3 d_\tau / (2\pi)^3 \Theta(\Lambda - d_\tau)$ et $|\partial \mathbf{k} / \partial \mathbf{d}_\tau|$ est le déterminant du Jacobien. En coordonnées sphériques, on a $\mathbf{d}_\tau = d_\tau (\sin \theta_\tau \cos \varphi, \sin \theta_\tau \sin \varphi, \cos \theta_\tau)$, avec $d_\tau \in [0, +\infty[$, $\theta_\tau \in [0, \pi]$ et $\varphi \in [0, 2\pi]$. Le cutoff ultraviolet pose une contrainte uniquement sur d_τ (étant donné que c'est la seule variable reliée à l'énergie) et non pas sur θ_τ et φ , ce qui est l'avantage de ce changement de variable.

Dans le cas où $\beta = 0$, le Jacobien est simple à calculer analytiquement, on se place donc dans cette limite dès à présent. On a pour le noeud $\tau = 1$

$$\left| \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial \mathbf{d}_1} \right| = \left| \frac{v_z}{v^2 (v_z + \alpha d_{1,z})^2} \right|. \quad (\text{A.11})$$

On rappelle que le cutoff ultraviolet impose que les termes non linéaires sont considérés comme une perturbation de la dispersion électronique. Cela impose donc que $\alpha |k_z| < 1$, ce qui implique que $v_z + \alpha d_{1,z} > 0$. En utilisant les équations (A.10) et (A.11), on obtient

$$q_{\text{TF}}^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \nu_\tau(\epsilon_F) = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty} \frac{\epsilon_F^2}{2\pi^2 \hbar v} \frac{v_z/v}{\hbar^2 v_z^2 - \epsilon_F^2 \alpha^2}, \quad (\text{A.12})$$

pour $\beta = 0$. Le cutoff ultraviolet nous garantit que $|\alpha| < |v_z/\epsilon_F|$. En remplaçant l'équation (A.12) dans l'équation (A.8) puis en calculant les intégrales dans cette dernière, on

parvient à trouver

$$\begin{aligned}\lambda_{m=\pm 1, \tau=1}(x) &= \frac{1 \mp x}{16\pi x^2} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{x} - x \right) \ln \frac{1-x}{1+x} \right], \\ \lambda_{m=0, \tau=1}(x) &= \frac{1-x}{8\pi x} \left(-1 + \frac{1}{2x} \ln \frac{1+x}{1-x} \right),\end{aligned}\tag{A.13}$$

toujours pour $\beta = 0$ et où on a défini

$$x \equiv \frac{\alpha |\epsilon_F|}{v_z}\tag{A.14}$$

comme paramètre adimensionné qui détermine le degré de non-linéarité de la dispersion en l'absence d'interaction. On a immédiatement que $x = 0$ pour $\alpha = 0$.

À présent, nous allons nous concentrer sur quelques cas limites de l'équation (A.13). Dans la limite où $x \ll 1$, qui est un régime faiblement non linéaire, on obtient

$$\begin{aligned}\lambda_{m=0, \tau=1}(x) &\simeq 1/(24\pi) + O(x^2) \\ \lambda_{m=\pm 1, \tau=1}(x) &\simeq (1 \mp x)/(24\pi) + O(x^2),\end{aligned}\tag{A.15}$$

on a alors pour les énergies propres

$$\begin{aligned}\epsilon_{m=-1} &< \epsilon_{m=0} < \epsilon_{m=1} \quad (\text{si } \alpha > 0), \\ \epsilon_{m=1} &< \epsilon_{m=0} < \epsilon_{m=-1} \quad (\text{si } \alpha < 0),\end{aligned}\tag{A.16}$$

donc $\alpha \neq 0$ crée une chiralité de l'énergie de liaison des excitons autour d'un même noeud, i.e. $\epsilon_m \neq \epsilon_{-m}$.

À l'inverse, pour $x \simeq 1$, qui est un régime fortement non linéaire en considérant $\alpha > 0$, on trouve

$$\begin{aligned}\lambda_{m=0, \tau=1}(x) &\simeq \lambda_{m=1, \tau=1}(x) \simeq 0 \\ \lambda_{m=-1, \tau=1}(x) &\simeq 1/(8\pi),\end{aligned}\tag{A.17}$$

où on a omis les termes d'ordre $O(1-x)$ et $O((1-x)\ln(1-x))$. De façon similaire, si $x \simeq -1$, c'est-à-dire un régime fortement non linéaire mais pour $\alpha < 0$, on a

$$\begin{aligned}\lambda_{m=0, \tau=1}(x) &\simeq \lambda_{m=-1, \tau=1}(x) \simeq 0 \\ \lambda_{m=1, \tau=1}(x) &\simeq 1/(8\pi).\end{aligned}\tag{A.18}$$

En résumé, dans la limite où $|\alpha|$ devient grand, donc $|x| \rightarrow 1$, l'effet de la chiralité des excitons devient de plus en plus prononcé, de plus, comme pour le cas à faible non linéarité, l'énergie de liaison la plus grande pour $\alpha > 0$ ($\alpha < 0$) a lieu dans le canal de moment angulaire $m = -1$ ($m = 1$). En outre, les résultats pour le régime fortement non linéaire restent cohérents avec notre hypothèse de départ de considérer $\epsilon_m \simeq 2|\epsilon_F|$.

À partir de l'équation (A.8), il est clair que la différence entre $\epsilon_{m=1,\tau}$ et $\epsilon_{m=-1,\tau}$ provient du fait que $\langle \cos \theta_\tau \rangle_{|\epsilon_F|} \neq 0$. Comme il mentionné à la figure 2.1, le facteur $\cos \theta_\tau$ peut être lié au flux de la courbure de Berry jointe. Il est donc intéressant de noter que

$$\langle \cos \theta_\tau \rangle_{\epsilon_F} \neq 0 \leftrightarrow \langle \mathbf{\Omega}_{\text{Sch}} \cdot \hat{\mathbf{z}} \rangle_{\epsilon_F} \neq 0, \quad (\text{A.19})$$

où $\mathbf{\Omega}_{\text{Sch}}$ est la courbure de Berry définie à l'équation (2.63). En d'autres termes, la projection de la courbure de Berry le long de l'axe qui connecte les deux noeuds de Weyl de chiralités opposées doit avoir une moyenne non nulle lorsqu'elle est évaluée sur la surface de Fermi afin de donner lieu à une asymétrie entre les états d'exciton m et $-m$.

Pour le modèle avec une dispersion parfaitement linéaire ($\alpha = \beta = 0$), on a $\langle \cos \theta_\tau \rangle_{|\epsilon_F|} = 0$ et donc l'effet de la courbure de Berry dans la différence en énergie des états de paires électrons-trous m et $-m$ se moyenne à zéro, manifestation de la symétrie anti-unitaire de renversement du temps effective à base énergie pour un noeud de Weyl (c.f. l'équation (2.90)). En présence de termes non linéaires dans la dispersion, alors $\langle \cos \theta_\tau \rangle_{|\epsilon_F|} \neq 0$ et la courbure de Berry jointe donne lieu à la chiralité des excitons et donc dans le spectre de l'absorption optique.

Par conséquent, notre modèle analytique simple prédit une différence entre les états de moment angulaire $\pm m$. Cependant, que ce soit pour le régime où $|x| \ll 1$ ou bien $|x| \simeq 1$, cette différence entre les énergies $\epsilon_{m=1}$ et $\epsilon_{m=-1}$ est extrêmement faible : de l'ordre de $\exp(-24\pi) \simeq 10^{-33}$ et $\exp(-8\pi) \simeq 10^{-11}$ (en unité de ϵ_F) respectivement pour les énergies de liaison. Cela implique que n'importe quel modèle réaliste avec une durée de vie finie de ces excitations, impliquant un élargissement du pic dans l'absorption optique rendrait une telle différence complètement inespérée à détecter. Cette conclusion est toutefois cohérente avec les résultats numériques obtenus pour l'absorption optique dans la section 2.3. Nous avons noté dans cette dernière une différence très faible entre les énergies propres $\epsilon_{nm\tau}$ et $\epsilon_{n,-m,\tau}$, et que l'origine de l'asymétrie dans l'absorption optique venait plutôt des *fonctions d'onde* de l'équation de Wannier (si l'on néglige la renormalisation des bandes via la self-énergie). Afin d'expliquer ce résultat, nous allons désormais nous concentrer sur les fonctions propres de l'équation (2.80). Toujours dans la limite où le potentiel coulombien est remplacé par une

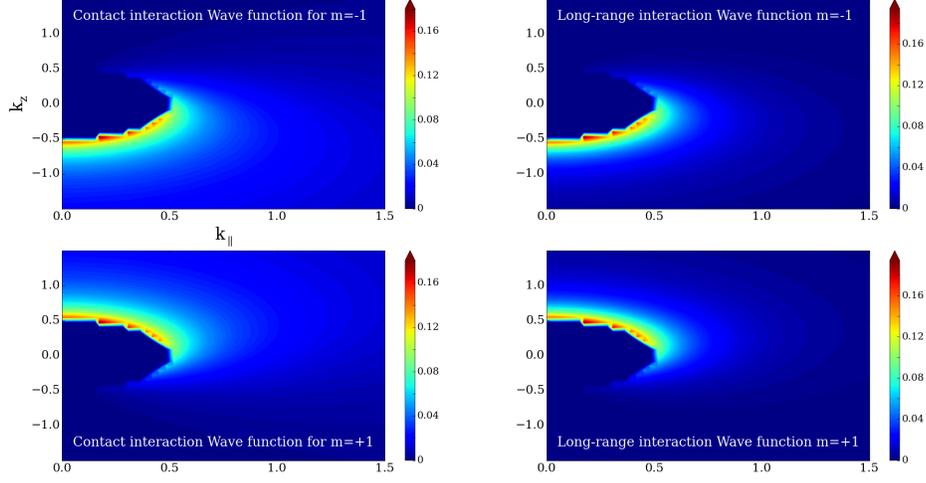


FIGURE A.1 Fonctions d’onde pour les paires électrons-trous. *Panneaux de gauche* : Figures obtenues avec l’équation (A.20) pour $m = -1$ (panneau du haut) et $m = +1$ (panneau du bas) pour les fonctions d’onde avec l’interaction de Coulomb de type contact. Pour $m = -1$, la fonction d’onde s’annule lorsque $k_{\parallel} = 0$ et $k_z > 0$, i.e. quand $\cos \theta = 1$. À l’inverse, pour $m = +1$, la fonction d’onde s’annule lorsque $k_{\parallel} = 0$ et $k_z < 0$, i.e. quand $\cos \theta = -1$. *Panneaux de droite* : Fonctions d’onde calculées numériquement pour $m = -1$ (panneau du haut) et $m = +1$ (panneau du bas) dans le modèle avec une interaction de Coulomb à longue portée. Bien qu’il existe des différences dans les détails des fonctions d’onde pour les deux modèles, les mêmes zéros apparaissent pour $\cos \theta = \pm 1$ dans le cas où $m = \mp 1$. On a choisi un modèle linéaire pour faire ces calculs (i.e. $\alpha = \beta = 0$), avec $v_z = v$, et un cutoff en énergie $\Lambda = 10|\epsilon_F|$. La fonction d’onde représentée correspond à une énergie propre de $2.9607|\epsilon_F|$ (ce qui correspond au seuil d’absorption pour cette valeur de Λ étant donné que le terme de self-énergie est inclus ici). L’ajout des termes non linéaires conduit à une différence d’amplitude des fonctions d’onde pour $m = +1$ et $m = -1$, mais ne change pas les zéros de ces fonctions d’onde à $\cos \theta = -1$ et $\cos \theta = +1$ respectivement.

fonction delta de Dirac dans l’espace, on obtient

$$\begin{aligned} \psi_{n,m=0,\tau}(k_{\parallel}, k_z) &= c_{n,m=0,\tau} \frac{\Theta(|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - |\epsilon_F|)}{2|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - \epsilon_{n,m=0,\tau}} \sin \theta_{\tau}, \\ \psi_{n,m=\pm 1,\tau}(k_{\parallel}, k_z) &= c_{n,m=\pm 1,\tau} \frac{\Theta(|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - |\epsilon_F|)}{2|\mathbf{d}_{\tau}(\mathbf{k})| - \epsilon_{n,m=\pm 1,\tau}} (1 \pm \cos \theta_{\tau}), \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

où $c_{nm\tau}$ sont des constantes indépendantes de \mathbf{k} qui peuvent être déterminées en utilisant la condition de normalisation des fonctions d’onde. On peut vérifier que l’équation (A.20) est en effet valide en la ré-insérant dans l’équation (2.80) avec le potentiel coulombien donné par l’équation (A.1).

À partir de l'équation (A.20), on peut noter deux caractéristiques qui sont valides que l'on choisisse un modèle avec une dispersion linéaire ou non linéaire. Premièrement, les fonctions d'ondes électrons-trous ont des zéros situés à $\theta = 0$ pour $m = -1$, et à $\theta = \pi$ pour $m = 1$, et à ces deux valeurs pour $m = 0$. Deuxièmement, le moment angulaire m donne lieu à une vorticit  des fonctions d'onde $\exp(im\varphi)\psi_{nm\tau}(k_{\parallel}, k_z)$ le long de boucles infinitesimales centr es au niveau des noeuds. Dans un certain sens, l' quation (A.20) est l'analogue des paires de Cooper topologiques nodales dans un semim tal de Weyl supraconducteur [128]. Une diff rence importante est que, dans notre cas, il n'est pas n cessaire d'avoir un condensat excitonique afin d'obtenir $\psi_{nm\tau} \neq 0$.

La figure A.1 illustre justement les fonctions d'onde pour $m = \pm 1$ en fonction des vecteurs d'onde k_{\parallel} et k_z , et on observe justement ces z ros (ou noeuds) pour $\cos \theta = \pm 1$. Point important   noter, on a ajout  sur la m me figure les fonctions d'onde du probl me avec l'interaction coulombienne  crant e r solu   la section (2.3). Ces fonctions d'onde contiennent les m mes z ros   $\cos \theta = \pm 1$ que leurs analogues avec une interaction de type contact. Ce qui nous pousse   affirmer que les z ros de ces fonctions d'onde sont robustes au point de vue de la topologie du syst me, c'est- -dire ind pendantes des d tails de l'interaction coulombienne.

En utilisant l' quation (A.20), on peut alors comprendre analytiquement pourquoi l'absorption optique   un noeud donn  est diff rente pour une lumi re circulairement polaris e droite et gauche. En prenant tout d'abord l' quation (2.89), puis les  quations (A.4) et (A.20) dans la limite de temp rature nulle, et pour plus de simplicit  dans le calcul analytique, avec $\beta = 0$, on trouve pour le noeud $\tau = 1$

$$\begin{aligned} \chi''_{1,\pm}(\omega) = & -\frac{\pi e^2}{16} \sum_n c_{n,m=\pm 1,\tau=1}^2 \delta(\hbar\omega - \epsilon_{n,m=\pm 1,\tau=1}) \\ & \times \left[\int_{|\epsilon_F|}^{\Lambda} dE \frac{v_1(E)}{2E - \epsilon_{n,m=\pm 1,\tau=1}} \frac{\hbar v}{E} \langle (1 + \alpha k_z)(1 \pm \cos \theta_1)^2 \rangle_E \right]^2. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

On rappelle que l'on se concentre aux valeurs de n qui ob issent   $\epsilon_{nm\tau} \simeq 2|\epsilon_F|$. On a montr  pr c demment que les  nergies d'excitation des paires  lectrons-trous  taient sensiblement  gales pour $m = 1$ et $m = -1$. De plus, pour le mod le avec une dispersion parfaitement lin aire, on trouve $\langle (1 + \cos \theta)^2(1 + \alpha k_z) \rangle_E = \langle (1 - \cos \theta)^2(1 + \alpha k_z) \rangle_E$, et donc on a forc ment $\chi''_{\tau,+} = \chi''_{\tau,-}$. Lorsque $\alpha \neq 0$, il existe cependant une diff rence entre les fonctions de r ponse $\chi''_{\tau,+}$ et $\chi''_{\tau,-}$ qui vient d'une valeur moyenne non nulle sur une surface d' nergie constante des fonctions $\cos \theta$ et $\cos \theta(1 + \alpha k_z)$. Cette diff rence, contr l e par le param tre sans dimension x n'implique pas, en revanche, de diff rence exponentiellement faible contrairement aux  nergies propres, et donne une intuition de la raison pour laquelle

on observe une chiralité de l'absorption optique entre les réponses LCP et RCP dans la section (2.3). Une approximation du calcul analytique en combinant les équations (A.20) ainsi que (A.21) conduit à la relation $\chi''_{1,+}/\chi''_{1,-} \simeq 1 + x^3/10$ pour $x \ll 1$, i.e. que l'amplitude de l'absorption optique pour une lumière RCP est plus grande que pour une lumière LCP.

Pour conclure cette annexe, nous faisons une preuve de concept pour un système avec plusieurs noeuds en étendant nos résultats pour les noeuds autres que $\tau = 1$. Commençons avec le noeud $\tau = 2$, qui est le partenaire par symétrie miroir du noeud $\tau = 1$. Afin d'extrapoler le résultat du noeud $\tau = 1$ au noeud $\tau = 2$, on utilise les relations de symétries mentionnées au tableau 2.1, qui sont $v_z \rightarrow -v_z$, $v \rightarrow -v$, et $\alpha \rightarrow -\alpha$. Cela implique automatiquement $\epsilon_{nm,\tau=1} = \epsilon_{nm,\tau=2}$, et on peut montrer de manière similaire que la moyenne $\langle (1 + \alpha k_z)(1 \pm \cos \theta) \rangle_E$ est la même pour les noeuds reliés par une symétrie miroir (on a $k_z = d_z/(\hbar v_z)$ pour le noeud $\tau = 1$, tandis que l'on a $k_z = -d_z/(\hbar v_z)$ pour le noeud $\tau = 2$). Cela nous donne une explication, avec ce modèle analytique simple, de la raison pour laquelle le spectre optique est identique pour les noeuds reliés par symétrie miroir, peu importe la présence de termes non linéaires et d'interaction coulombienne.

Dans un semimétal avec symétrie par renversement du temps, on obtient le hamiltonien du noeud $\tau = 3$ à partir du noeud $\tau = 1$ via le changement $\alpha \rightarrow -\alpha$. Par conséquent, le paramètre sans dimension x change de signe d'un noeud à l'autre. On a montré dans cette annexe que la contribution des termes non linéaires (surtout α) à l'absorption optique est une fonction impaire de x . On trouve alors $\chi''_{\pm,1} = \chi''_{\mp,3}$, ce qui est exactement le résultat obtenu dans la section 2.3.

Annexe B

Conductivité optique sous fort champ magnétique dans l'approximation GRPA

Dans cette annexe, nous présenterons le calcul de la conductivité optique en présence d'interactions coulombiennes sous fort champ magnétique dans l'approximation GRPA [91,92], qui consiste à tronquer la self-énergie de certaines contributions et ne considérer que les contributions de Hartree et de Fock pour les fonctions de réponses à deux particules. Dans notre cas, on s'intéresse à la fonction de corrélation courant-courant retardée.

Notre point de départ pour ce calcul est la relation entre conductivité optique $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ et la fonction de corrélation courant-courant retardée $\chi_{J_\alpha J_\beta}^R(\mathbf{q}, \omega)$ définie à l'équation (3.21) que l'on rappelle ici :

$$\text{Re} [\sigma_{\alpha\beta}(\omega)] = - \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \frac{\text{Im} [\chi_{J_\alpha J_\beta}^R(\mathbf{q}, \omega)]}{\omega}, \quad (\text{B.1})$$

où $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$, \mathbf{q} et ω sont respectivement le vecteur d'onde et la fréquence des photons incidents. On peut écrire explicitement la fonction de corrélation courant-courant retardée en temps

$$\chi_{J_\alpha J_\beta}^R(\mathbf{q}, t) = - \frac{i}{\mathcal{V}\hbar} \langle [J_\alpha(\mathbf{q}, t), J_\beta(-\mathbf{q}, 0)] \rangle \Theta(t), \quad (\text{B.2})$$

où \mathcal{V} est le volume du système et J_α la composante α de l'opérateur courant \mathbf{J} .

B.1 Retour sur l'approximation GRPA

Écrivons tout d'abord le hamiltonien de notre système en incluant le terme d'interaction de Coulomb

$$\begin{aligned} \mathcal{H} - \mu N = & \sum_a \int d\mathbf{u} \Psi_a^\dagger(\mathbf{u}) [h_a(\mathbf{u}, i\partial_{\mathbf{u}}) - \mu] \Psi_a(\mathbf{u}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{a,b} \int d\mathbf{u} d\mathbf{u}' \Psi_a^\dagger(\mathbf{u}) \Psi_b^\dagger(\mathbf{u}') V(\mathbf{u} - \mathbf{u}') \Psi_b(\mathbf{u}') \Psi_a(\mathbf{u}), \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

où

$$\Psi_a(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \Psi_{a\uparrow}(\mathbf{u}) \\ \Psi_{a\downarrow}(\mathbf{u}) \end{pmatrix} = \sum_p w_{a,p}(\mathbf{u}) c_{a,p} \quad (\text{B.4})$$

est un opérateur qui détruit un électron à la position $\mathbf{u} \equiv (\mathbf{r}, z)$ et pour le noeud de Weyl d'indice a . De plus, \mathbf{r} est la position de l'électron dans le plan perpendiculaire au champ magnétique. Nous choisissons $\mathbf{B} \parallel \mathbf{z}$ dans cette annexe. Les indices \uparrow et \downarrow représentent les composantes *up* et *down* du spineur, p tient lieu d'ensemble de nombres quantiques qui caractérisent l'état propre et $w_{a,p}(\mathbf{u})$ est un spineur propre à deux composantes de l'hamiltonien h_a 2×2 sans interactions de Coulomb. L'opérateur $c_{a,p}$ ($c_{a,p}^\dagger$) annihile (créé) un électron dans un état p au noeud a et $V(\mathbf{u} - \mathbf{u}')$ dans l'équation (B.3) représente le potentiel coulombien à longue portée. Il faut préciser que dans le terme coulombien de l'équation (B.3), le produit scalaire entre deux spineurs pour une même position \mathbf{u} seulement est implicite.

On peut écrire la fonction de réponse courant-courant en temps imaginaire :

$$\chi_{J_\alpha J_\beta}(\mathbf{q}, \tau) = -\frac{1}{\mathcal{V}\hbar} \langle T_\tau J_\alpha(\mathbf{q}, \tau) J_\beta(-\mathbf{q}, 0) \rangle, \quad (\text{B.5})$$

où τ est le temps imaginaire et T_τ est l'opérateur d'ordonnancement temporel en temps imaginaire. La transformée de Fourier de cette fonction s'écrit

$$\chi_{J_\alpha J_\beta}(\mathbf{q}, i\Omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau e^{i\Omega_n \tau} \chi_{J_\alpha J_\beta}(\mathbf{q}, \tau), \quad (\text{B.6})$$

où $\Omega_n = 2n\pi/\beta\hbar$ est une fréquence de Matsubara bosonique et $\beta = 1/k_B T$, avec k_B la constante de Boltzmann. La réponse retardée donnant lieu à la conductivité dans l'équation (B.1) est obtenue par prolongement analytique ($i\Omega_n \rightarrow \omega + i\delta$) de la fonction $\chi_{J_\alpha J_\beta}(\mathbf{q}, i\Omega_n)$. Ultiment, nous choisirons la limite de température nulle.

On peut trouver l'opérateur courant en première quantification, qui s'écrit après couplage minimal dans le hamiltonien sans terme d'interaction

$$j_{a,\alpha} = -\frac{\delta h_a}{\delta A_\alpha}, \quad (\text{B.7})$$

où A_α est la composante α du potentiel vecteur. Cet opérateur courant est représenté par une matrice 2×2 dans l'espace du pseudospin.

En seconde quantification, la transformée de Fourier de l'opérateur courant s'écrit

$$\begin{aligned} J_{a,\alpha}(\mathbf{q}) &= \int d\mathbf{u} \Psi_a^\dagger(\mathbf{u}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}} j_{a,\alpha} \Psi_a(\mathbf{u}), \\ &= \sum_{p_1, p_2} \Lambda_{p_1, p_2}^{(a,\alpha)}(\mathbf{q}) c_{a, p_1}^\dagger c_{a, p_2}, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

où on considère comme implicite la dépendance temporelle des opérateurs de création et d'annihilation. De plus, les éléments de matrice de l'équation (B.8) s'écrivent

$$\Lambda_{p_1, p_2}^{(a,\alpha)}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{u} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}} \left[w_{a, p_1}^\dagger(\mathbf{u}) \cdot j_{a,\alpha} \cdot w_{a, p_2}(\mathbf{u}) \right], \quad (\text{B.9})$$

où nous avons explicitement indiqué le produit scalaire des opérateurs. En insérant l'équation (B.8) dans l'équation (B.5) et en utilisant $J_\alpha = \sum_a J_{a,\alpha}$, on arrive à

$$\chi_{J_\alpha J_\beta}(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{\mathcal{V}\hbar} \sum_{a,b} \sum_{p_1, p_2, p_3, p_4} \Lambda_{p_1, p_2}^{(a,\alpha)}(\mathbf{q}) \Lambda_{p_3, p_4}^{(b,\beta)}(-\mathbf{q}) \chi_{p_1, p_2, p_3, p_4}^{(a,a,b,b)}(\tau), \quad (\text{B.10})$$

où la fonction $\chi_{p_1, p_2, p_3, p_4}^{(a,a,b,b)}(\tau)$ est définie par

$$\chi_{p_1, p_2, p_3, p_4}^{(a,b,c,d)}(\tau_1 - \tau_2) = - \left\langle T_\tau c_{a, p_1}^\dagger(\tau_1) c_{b, p_2}(\tau_1) c_{c, p_3}^\dagger(\tau_2) c_{d, p_4}(\tau_2) \right\rangle. \quad (\text{B.11})$$

L'étape d'après consiste à dériver une expression explicite pour la fonction $\chi_{p_1 \dots p_4}^{(a \dots d)}$. On rappelle les définitions de la fonction de Green à une et à deux particules respectivement :

$$G_{a,b}(1,2) = - \left\langle T_\tau \Psi_a(1) \Psi_b^\dagger(2) \right\rangle, \quad (\text{B.12})$$

et

$$L_{a,b,c,d}(1,2,3,4) = - \left\langle T_\tau \Psi_a^\dagger(1) \Psi_b(2) \Psi_c^\dagger(3) \Psi_d(4) \right\rangle + G_{b,a}(2,1) G_{d,c}(4,3). \quad (\text{B.13})$$

Dans ces expressions, le nombre $n = (\mathbf{u}_n, \tau_n)$ combine les variables de position et de temps

imaginaire. Dans l'approximation GRPA, la fonction de Green à une particule $G_{a,b}(1,2)$ est évaluée dans l'approximation Hartree-Fock, i.e.

$$G_{a,b}(1,2) = G_{a,b}^0(1,2) + \sum_{c,d} G_{a,c}^0(1,\bar{3}) \Sigma_{c,d}^{HF}(\bar{3},\bar{4}) G_{d,b}(\bar{4},2), \quad (\text{B.14})$$

où $G_{a,b}^0(1,2)$ est la fonction de Green sans interaction, et

$$\Sigma_{a,b}^{HF}(1,2) = \frac{1}{\hbar} \delta_{a,b} \delta(1-2) V(1-\bar{3}) \sum_c G_{c,c}(\bar{3},\bar{3}^+) - \frac{1}{\hbar} V(1-2) G_{a,b}(1,2) \quad (\text{B.15})$$

la self-énergie Hartree-Fock, et $V(1-2) = V(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2)$. Dans les équations (B.14) ainsi que (B.15), les nombres avec une barre au dessus impliquent une intégration sur cette même variable. De plus, les indices + et - indiquent des temps différents pour une quantité infinitésimale afin de préserver l'ordonnancement temporel.

La fonction de Green à deux particules pour la GRPA est ensuite définie comme une dérivée fonctionnelle de la self-énergie Hartree-Fock [91]. Cela conduit à

$$\begin{aligned} L_{a,b,c,d}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2; \tau_1 - \tau_2) &= G_{b,c}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2; \tau_1 - \tau_2) G_{d,a}(\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1; \tau_2 - \tau_1) \quad (\text{B.16}) \\ &+ \frac{1}{\hbar} \sum_{e,f} \int d\mathbf{u}_3 \int d\mathbf{u}_4 \int d\tau_3 G_{b,e}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_3; \tau_1 - \tau_3) G_{e,a}(\mathbf{u}_3, \mathbf{u}_1; \tau_3 - \tau_1) V(\mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_4) \\ &\times L_{f,f,c,d}(\mathbf{u}_4, \mathbf{u}_4, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2; \tau_3 - \tau_2) \\ &- \frac{1}{\hbar} \sum_{e,f} \int d\mathbf{u}_3 \int d\mathbf{u}_4 \int d\tau_3 G_{b,e}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_3; \tau_1 - \tau_3) G_{f,a}(\mathbf{u}_4, \mathbf{u}_1; \tau_3 - \tau_1) V(\mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_4) \\ &\times L_{f,e,c,d}(\mathbf{u}_4, \mathbf{u}_3, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2; \tau_3 - \tau_2). \end{aligned}$$

Il nous faut préciser qu'on a écrit ici une équation pour la fonction L avec seulement deux coordonnées de positions et de temps imaginaire, cette quantité étant suffisante pour la conductivité optique. De plus, nous nous intéressons à la réponse linéaire dans la perturbation externe, donc L ne dépend que de la différence entre les temps imaginaires τ_1 et τ_2 . Le premier terme à droite du signe égal de l'équation (B.16) est la réponse Hartree-Fock et les deuxième et troisième termes correspondent respectivement aux corrections pour la polarisation et aux corrections excitoniques. Il convient de noter le dernier terme contient une fonction de Green à trois points dans l'espace, contrairement aux autres termes.

B.2 Application pour notre base d'intérêt

On obtient une équation pour $\chi_{p_1, p_2, p_3, p_4}^{(a, b, c, d)}(i\Omega_n)$, la fonction voulue pour l'équation (B.10), en développant les fonctions de Green à une et deux particules sur la base des états propres. On obtient alors

$$L_{a, b, c, d}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2; \tau_1 - \tau_2) = \sum_{p_1 \dots p_4} \left[w_{a, p_1}^\dagger(\mathbf{u}_1) \cdot w_{b, p_2}(\mathbf{u}_1) \right] \left[w_{c, p_3}^\dagger(\mathbf{u}_2) \cdot w_{d, p_4}(\mathbf{u}_2) \right] \times \chi_{p_1 \dots p_4}^{(a, b, c, d)}(\tau_1 - \tau_2), \quad (\text{B.17})$$

et

$$G_{a, b}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2; \tau) = \sum_{p_1, p_2} w_{a, p_1}(\mathbf{u}_1) w_{b, p_2}^\dagger(\mathbf{u}_2) G_{p_1, p_2}^{(a, b)}(\tau), \quad (\text{B.18})$$

avec la définition

$$G_{p_1, p_2}^{(a, b)}(\tau) = - \left\langle T_\tau c_{a, p_1}(\tau) c_{b, p_2}^\dagger(0) \right\rangle. \quad (\text{B.19})$$

Nous voulons, à la fin du calcul, obtenir la fonction de corrélation courant-courant définie pour l'équation (B.10), alors nous devons faire le produit scalaire des spineurs comme indiqué dans l'équation (B.17). De plus, les spineurs associés à la fonction de Green à une particule de l'équation (B.16) doivent être calculés selon la règle énoncée pour l'interaction coulombienne, c'est-à-dire que le produit scalaire doit être écrit pour la même coordonnée \mathbf{u}_n . À titre d'exemple, le produit scalaire des spineurs du dernier terme de l'équation (B.16) doit être interprété comme

$$\left[w_a^\dagger(\mathbf{u}_1) \cdot w_b(\mathbf{u}_1) \right] \left[w_c^\dagger(\mathbf{u}_2) \cdot w_d(\mathbf{u}_2) \right] \left[w_e^\dagger(\mathbf{u}_3) \cdot w_e(\mathbf{u}_3) \right] \left[w_f^\dagger(\mathbf{u}_4) \cdot w_f(\mathbf{u}_4) \right], \quad (\text{B.20})$$

où on a omis les indices p volontairement pour une écriture plus compacte. De façon similaire, pour le deuxième terme de l'équation (B.16) nous avons des produits scalaires de la forme $\left[w_a^\dagger(\mathbf{u}_1) \cdot w_b(\mathbf{u}_1) \right] \left[w_c^\dagger(\mathbf{u}_2) \cdot w_d(\mathbf{u}_2) \right]$ pour les spineurs associés au produit de deux fonctions de Green à une particule. Ensuite, nous pouvons simplifier l'équation (B.16) en enlevant tous les termes de spineurs propres. On obtient alors

$$\begin{aligned} \chi_{p_1, p_2, p_3, p_4}^{(a, b, c, d)}(i\Omega_n) &= \chi_{p_1, p_2, p_3, p_4}^{(0)(a, b, c, d)}(i\Omega_n) \\ &+ \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{e, f} \sum_{p_5, p_6, p_7, p_8} \sum_{\mathbf{q}} \chi_{p_1, p_2, p_5, p_6}^{(0)(a, b, e, e)}(i\Omega_n) Y_{p_5, p_6}^{(e)}(\mathbf{q}) V(\mathbf{q}) Y_{p_7, p_8}^{(f)}(-\mathbf{q}) \chi_{p_7, p_8, p_3, p_4}^{(f, f, c, d)}(i\Omega_n) \\ &- \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{e, f} \sum_{p_5, p_6, p_7, p_8} \sum_{\mathbf{q}} \chi_{p_1, p_2, p_5, p_6}^{(0)(a, b, e, f)}(i\Omega_n) Y_{p_5, p_8}^{(e)}(\mathbf{q}) V(\mathbf{q}) Y_{p_7, p_6}^{(f)}(-\mathbf{q}) \chi_{p_7, p_8, p_3, p_4}^{(f, e, c, d)}(i\Omega_n), \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

où $V(\mathbf{q}) = V(\mathbf{q}_\perp, q_z) = e^2 / (\epsilon_0 \epsilon_\infty (q_\perp^2 + q_z^2))$ et on définit

$$\chi_{p_1, p_2, p_3, p_4}^{(0)(a,b,c,d)}(i\Omega_n) = \frac{1}{\beta \hbar} \sum_{\omega_n} G_{p_2, p_3}^{(b,c)}(i\omega_n + i\Omega_n) G_{p_4, p_1}^{(d,a)}(i\omega_n). \quad (\text{B.22})$$

La transformée de Fourier de l'élément de matrice de l'opérateur densité apparaissant dans l'équation (B.21) s'écrit :

$$Y_{p_1, p_2}^{(a)}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{u} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}} \left[w_{a, p_1}^\dagger(\mathbf{u}) \cdot w_{a, p_2}(\mathbf{u}) \right]. \quad (\text{B.23})$$

On rappelle que l'on considère un champ magnétique $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = B\hat{z}$. On écrit en jauge de Landau le potentiel vecteur $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, par conséquent les spineurs propres s'écrivent

$$w_{a,p}(\mathbf{u}) = \frac{1}{\sqrt{L_z}} w_{a,n,k,X}(\mathbf{r}) e^{-ikz}, \quad (\text{B.24})$$

où k est le vecteur d'onde parallèle au champ magnétique, L_z la longueur du système dans la direction z , n l'indice du niveau de Landau ($n = 0$ pour le niveau chiral, $n > 0$ pour les niveaux en bande de conduction et $n < 0$ en bande de valence) et X l'indice de centre d'orbite des électrons.

On rappelle que les énergies propres possèdent une dégénérescence macroscopique en X égale à $N_\varphi = S/2\pi\ell_B^2$, où $S = L_x L_y$ est l'aire du système dans le plan perpendiculaire au champ et $\ell_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$ la longueur magnétique.

En développant l'opérateur champ sur la base obtenue, on obtient

$$\begin{aligned} \Psi_a(\mathbf{u}) &= \frac{1}{\sqrt{L_z}} \sum_{n,X,k} w_{a,n,k,X}(\mathbf{r}) e^{-ikz} c_{a,n,k,X} \\ &= \frac{1}{\sqrt{L_z}} \sum_{n,X,k} \begin{pmatrix} u_{n,k,a} h_{|n|-1,X}(\mathbf{r}) \\ v_{n,k,a} h_{|n|,X}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} e^{-ikz} c_{a,n,k,X}, \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

où $h_{|n|,X} = ((-i)^{|n|} / \sqrt{L_y}) \varphi_{|n|}(x - X) \exp(-iXy/\ell_B^2)$ avec $\varphi_{|n|}(x)$ sont les fonctions propres de l'oscillateur harmonique quantique en une dimension définies à l'équation (3.11). Les coefficients $u_{n,k,a}$ et $v_{n,k,a}$ sont des fonctions non triviales de k en présence d'une inclinaison quelconque des cônes [86].

Pour un semimétal avec des noeuds de Weyl inclinés, l'équation (B.25) n'est valide que pour un champ magnétique parallèle au vecteur d'inclinaison. De manière similaire, pour un semimétal de Weyl avec des termes non linéaires dans la dispersion (c.f. annexe C), cette

même équation n'est valide que pour un champ magnétique orienté parallèlement à l'axe de symétrie cylindrique. Par conséquent, pour le reste de cette annexe, nous considérerons que ces conditions sont vérifiées et nous utiliserons l'équation (B.25) pour l'opérateur champ.

Nous faisons cette simplification étant donné que, dans le cas général avec une orientation arbitraire du champ magnétique, la forme des spineurs propres en l'absence d'interaction coulombienne est plus compliquée et l'analyse des effets des interactions à longue portée devient plus complexe (c.f. matériel supplémentaire de [86] pour les fonctions d'onde en question). Dans ce cas, il convient de rappeler que les résultats obtenus dans le chapitre 3 impliquant une inclinaison quelconque et quelque soit l'orientation du champ magnétique, sont en absence d'interactions de Coulomb.

En remplaçant l'équation (B.24) dans l'équation (B.23), on obtient

$$\begin{aligned} Y_{n_1, k_1, X_1, n_2, k_2, X_2}^{(a)}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{L_z} \int d\mathbf{u} e^{ik_1 z} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}} e^{-ik_2 z} \left[w_{a, n_1, k_1, X_1}^\dagger(\mathbf{r}) \cdot w_{a, n_2, k_2, X_2}(\mathbf{r}) \right] \\ &= \delta_{k_1, k_2 + q_z} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}} \left[w_{a, n_1, k_1, X_1}^\dagger(\mathbf{r}) \cdot w_{a, n_2, k_2, X_2}(\mathbf{r}) \right] \\ &\equiv \delta_{k_1, k_2 + q_z} \tilde{Y}_{n_1 k_2 + q_z, n_2 k_2}^{(a)}(-\mathbf{q}_\perp) e^{-\frac{i}{2} q_x (X_1 + X_2)} \delta_{X_1, X_2 + q_y \ell_B^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

où

$$\tilde{Y}_{n_1 k_2 + q_z, n_2 k_2}^{(a)}(-\mathbf{q}_\perp) = u_{n_1, k_2 + q_z, a}^* u_{n_2, k_2, a} F_{|n_1| - 1, |n_2| - 1}(-\mathbf{q}_\perp) + v_{n_1, k_2 + q_z, a}^* v_{n_2, k_2, a} F_{|n_1|, |n_2|}(-\mathbf{q}_\perp), \quad (\text{B.27})$$

avec

$$F_{n_1, n_2}(\mathbf{q}_\perp) = \sqrt{\frac{\min(n_1, n_2)!}{\max(n_1, n_2)!}} \left(\frac{\pm q_y \ell_B + i q_x \ell_B}{\sqrt{2}} \right)^{|n_1 - n_2|} L_{\min(n_1, n_2)}^{|n_1 - n_2|} (q_\perp^2 \ell_B^2 / 2) e^{-q_\perp^2 \ell_B^2 / 4}. \quad (\text{B.28})$$

L'équation (B.28) peut être obtenue par intégration des polynômes d'Hermite [129]. Le signe $+(-)$ correspond respectivement au cas $n_1 > n_2$ ($n_1 < n_2$) et les fonctions $L_n^a(x)$ sont les polynômes de Laguerre généralisés. De plus, on a des relations remarquables dans la limite $\mathbf{q}_\perp \rightarrow 0$ pour les équations (B.28) et (B.27), qui deviennent $F_{n_1, n_2}(\mathbf{q}_\perp = 0) = \delta_{n_1, n_2}$ et $\tilde{Y}_{n_1 k, n_2 k}^{(a)}(\mathbf{0}) = \delta_{n_1, n_2}$. Ces dernières seront fortement utiles par la suite dans le calcul de la conductivité optique.

De manière identique, on peut écrire les éléments de matrice de l'opérateur courant

$$\begin{aligned}\Lambda_{n_1, k_1, X_1; n_2, k_2, X_2}^{(a, \alpha)}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{L_z} \int d\mathbf{u} e^{ik_1 z} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}} e^{-ik_2 z} \left[w_{a, n_1, k_1, X_1}^\dagger(\mathbf{u}) \cdot j_{a, \alpha} \cdot w_{a, n_2, k_2, X_2}(\mathbf{u}) \right] \quad (\text{B.29}) \\ &= \delta_{k_1, k_2 + q_z} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}} \left[w_{a, n_1, k_1, X_1}^\dagger(\mathbf{r}) \cdot j_{a, \alpha} \cdot w_{a, n_2, k_2, X_2}(\mathbf{r}) \right] \\ &\equiv \delta_{k_1, k_2 + q_z} \tilde{\Lambda}_{n_1 k_2 + q_z, n_2 k_2}^{(a, \alpha)}(-\mathbf{q}_\perp) e^{-\frac{i}{2} q_x (X_1 + X_2)} \delta_{X_1, X_2 + q_y \ell_B^2},\end{aligned}$$

où $\tilde{\Lambda}_{n_1 k_1, n_2 k_2}^{(a, \alpha)}$ est calculé de manière semblable à l'équation (B.27). Étant donné que les expressions pour $\tilde{Y}_{n_1 k_1, n_2 k_2}^{(a)}(\mathbf{q}_\perp)$ et $\tilde{\Lambda}_{n_1 k_1, n_2 k_2}^{(a, \alpha)}(\mathbf{q}_\perp)$ ne dépendent pas du centre d'orbite X , l'équation (B.8) s'écrit alors

$$\begin{aligned}J_{a, \alpha}(\mathbf{q}) &= \sum_{n_1, n_2, k} \tilde{\Lambda}_{n_1 k + q_z, n_2 k}^{a, \alpha}(-\mathbf{q}_\perp) \sum_{X_1, X_2} e^{-\frac{i}{2} q_x (X_1 + X_2)} \delta_{X_1, X_2 + q_y \ell_B^2} c_{a, n_1, k + q_z, X_1}^\dagger c_{a, n_2, k, X_2} \quad (\text{B.30}) \\ &= N_\varphi \sum_{n_1, n_2, k} \tilde{\Lambda}_{n_1 k + q_z, n_2 k}^{a, \alpha}(-\mathbf{q}_\perp) \rho_{n_1 k + q_z, n_2 k}^{(a, a)}(\mathbf{q}_\perp),\end{aligned}$$

où on a introduit un nouvel opérateur

$$\rho_{n_1 k + q_z, n_2 k}^{(a, b)}(\mathbf{q}_\perp) = \frac{1}{N_\varphi} \sum_{X_1, X_2} e^{-\frac{i}{2} q_x (X_1 + X_2)} \delta_{X_1, X_2 + q_y \ell_B^2} c_{a, n_1, k + q_z, X_1}^\dagger c_{b, n_2, k, X_2}. \quad (\text{B.31})$$

Ce dernier est relié à la transformée de Fourier de l'opérateur densité

$$\begin{aligned}n_e(\mathbf{q}) &= \sum_a \int d\mathbf{u} e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}} e^{-iq_z z} \Psi_a^\dagger(\mathbf{u}) \Psi_a(\mathbf{u}) \\ &= N_\varphi \sum_a \sum_{n_1, n_2, k} \tilde{Y}_{n_1 k + q_z, n_2 k}^{a, \alpha}(-\mathbf{q}_\perp) \rho_{n_1 k + q_z, n_2 k}^{(a, a)}(\mathbf{q}_\perp).\end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

En remplaçant l'équation (B.30) dans l'équation (B.8), la fonction de corrélation courant-courant en fréquence de Matsubara devient alors

$$\begin{aligned}\chi_{J_\alpha J_\beta}(\mathbf{q}, i\Omega_n) &= \frac{N_\varphi}{\mathcal{V} \hbar} \sum_{a, b} \sum_{n_1 \dots n_4} \sum_{k_1, k_3} \tilde{\Lambda}_{n_1 k_1 + q_z, n_2 k_1}^{(a, \alpha)}(-\mathbf{q}_\perp) P_{n_1 k_1 + q_z, n_2 k_1, n_3 k_3 - q_z, n_4 k_3}^{(a, a, b, b)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}_\perp; i\Omega_n) \\ &\quad \times \tilde{\Lambda}_{n_3 k_3 - q_z, n_4 k_3}^{(b, \beta)}(\mathbf{q}_\perp),\end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

où

$$P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(a, a, b, b)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; \tau) = -N_\varphi \left\langle T_\tau \rho_{n_1 k_1, n_2 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{q}_\perp, \tau) \rho_{n_3 k_3, n_4 k_4}^{(b, b)}(-\mathbf{q}'_\perp, 0) \right\rangle. \quad (\text{B.34})$$

Finalement, en combinant les équations (B.34), (B.31), (B.26) et (B.21), on arrive au résultat

$$\begin{aligned}
P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(a,a,b,b)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) &= P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(0)(a,a,b,b)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) \\
&+ \frac{N_\varphi}{\hbar \mathcal{V}} \sum_{c,d} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{k'_1, k'_3} \sum_{n'_1 \dots n'_4} P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n'_3 k'_3, n'_4 k'_3 + p_z}^{(0)(a,a,c,c)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{p}_\perp; i\Omega_n) H_{n'_3 k'_3, n'_4 k'_3 + p_z, n'_1 k'_1, n'_2 k'_1 - p_z}^{(c,d)}(\mathbf{p}) \\
&\times P_{n'_1 k'_1, n'_2 k'_1 - p_z, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(d,d,b,b)}(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) \\
&- \frac{1}{\hbar \mathcal{V}} \sum_{c,d} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{k'_1, k'_3} \sum_{n'_1 \dots n'_4} P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n'_3 k'_3, n'_4 k'_1}^{(0)(a,a,c,d)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{p}_\perp; i\Omega_n) X_{n'_3 k'_3, n'_2 k'_3 - p_z, n'_1 k'_1 - p_z, n'_4 k'_1}^{(c,d)}(\mathbf{p}) \\
&\times P_{n'_1 k'_1 - p_z, n'_2 k'_3 - p_z, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(d,c,b,b)}(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n), \tag{B.35}
\end{aligned}$$

où on définit les interactions de Hartree (H) et de Fock (X)

$$\begin{aligned}
H_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(c,d)}(\mathbf{p}) &= \tilde{Y}_{n_1 k_1, n_2 k_2}^{(c)}(\mathbf{p}_\perp) V(\mathbf{p}) \tilde{Y}_{n_3 k_3, n_4 k_4}^{(d)}(-\mathbf{p}_\perp), \\
X_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(c,d)}(\mathbf{p}) &= \sum_{\mathbf{t}_\perp} e^{-i(\mathbf{t}_\perp \times \mathbf{p}_\perp) \cdot \hat{\mathbf{z}} \ell_B^2} \tilde{Y}_{n_1 k_1, n_2 k_2}^{(c)}(\mathbf{t}_\perp) V(\mathbf{t}_\perp, p_z) \tilde{Y}_{n_3 k_3, n_4 k_4}^{(d)}(-\mathbf{t}_\perp). \tag{B.36}
\end{aligned}$$

Dans la dernière équation, signalons que le vecteur \mathbf{t}_\perp est un vecteur d'onde en deux dimensions dans le plan (x, y) et à ne pas confondre avec le vecteur d'inclinaison. On précise que pour le calcul du terme de Fock, on a utilisé la relation

$$c_{a,n,k,X}^\dagger c_{b,n',k',X'} = \sum_{\mathbf{p}_\perp} \rho_{nk,n'k'}^{(a,b)}(\mathbf{p}_\perp) e^{i p_x (X+X')} \delta_{X,X'+p_y \ell_B^2}. \tag{B.37}$$

La fonction de Green Hartree-Fock à deux particules $P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(0)(a,a,b,b)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n)$ qui apparaît dans l'équation (B.35) peut être calculée de deux façons, soit en calculant directement l'équation (B.22), soit en parvenant à résoudre l'équation du mouvement pour le hamiltonien Hartree-Fock (c'est-à-dire évalué en champ moyen dans l'approximation éponyme). Nous choisirons cette dernière approche.

On obtient alors le hamiltonien H_{HF} à partir de l'équation (B.3)

$$\begin{aligned}
H_{HF} - \mu N &= N_\varphi \sum_{a,n,k} \left[E_{n,k}^{(a)} - \mu \right] \rho_{nk,nk}^{(a,a)}(\mathbf{q}_\perp = 0) \\
&+ \frac{N_\varphi^2}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{a,b} \sum_{k_1, k_2} \sum_{n_1 \dots n_4} H_{n_1 k_1, n_4 k_1 + q_z, n_2 k_2, n_3 k_2 - q_z}^{(a,b)}(\mathbf{q}) \left\langle \rho_{n_1 k_1, n_4 k_1 + q_z}^{(a,a)}(-\mathbf{q}_\perp) \right\rangle \rho_{n_2 k_2, n_3 k_2 - q_z}^{(b,b)}(\mathbf{q}_\perp) \\
&- \frac{N_\varphi}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{a,b} \sum_{k_1, k_2} \sum_{n_1 \dots n_4} X_{n_1 k_1, n_4 k_1 + q_z, n_2 k_2, n_3 k_2 - q_z}^{(a,b)}(\mathbf{q}) \left\langle \rho_{n_1 k_1, n_3 k_2 - q_z}^{(a,b)}(-\mathbf{q}_\perp) \right\rangle \rho_{n_2, k_2, n_4 k_1 + q_z}^{(b,a)}(\mathbf{q}_\perp), \tag{B.38}
\end{aligned}$$

où $E_{n,k}^{(a)}$ sont les énergies propres du hamiltonien en l'absence d'interaction de Coulomb et μ

le potentiel chimique.

On peut alors trouver l'équation pour $P^{(0)}$ en utilisant l'équation du mouvement. On obtient après quelques étapes de calcul

$$\begin{aligned}
& \left[i\Omega_n - \left(E_{n_2k_2}^{(b)} - E_{n_1k_1}^{(a)} \right) / \right] P_{n_1k_1, n_2k_2, n_3k_3, n_4k_4}^{(0)(a,b,c,d)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) = \\
& \left\langle \rho_{n_1k_1, n_4k_4}^{(a,d)}(\mathbf{q}_\perp - \mathbf{q}'_\perp) \right\rangle e^{i(\mathbf{q}_\perp \times \mathbf{q}'_\perp) \cdot \hat{\mathbf{z}} \ell_B^2 / 2} \delta_{b,c} \delta_{n_2, n_3} \delta_{k_2, k_3} \\
& - \left\langle \rho_{n_3k_3, n_2k_2}^{(c,b)}(\mathbf{q}_\perp - \mathbf{q}'_\perp) \right\rangle e^{-i(\mathbf{q}_\perp \times \mathbf{q}'_\perp) \cdot \hat{\mathbf{z}} \ell_B^2 / 2} \delta_{a,d} \delta_{n_1, n_4} \delta_{k_1, k_4} \\
& - \frac{N\varphi}{\hbar\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{a'} \sum_{k'_1} \sum_{n'_1 n'_2 n'_3} e^{-i(\mathbf{p}_\perp \times \mathbf{q}_\perp) \cdot \hat{\mathbf{z}} \ell_B^2 / 2} H_{n'_1 k'_1, n'_2 k'_1 + p_z, n'_2 k_1 + p_z, n_1 k_1}^{(a',a)}(\mathbf{p} - \mathbf{q}_\perp) \left\langle \rho_{n'_1 k'_1, n'_3 k'_1 + p_z}^{(a',a')}(\mathbf{q}_\perp - \mathbf{p}_\perp) \right\rangle \\
& \times P_{n'_2 k_1 + p_z, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(0)(a,b,c,d)}(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) \\
& + \frac{N\varphi}{\hbar\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{b'} \sum_{k'_1} \sum_{n'_1 n'_2 n'_3} e^{i(\mathbf{p}_\perp \times \mathbf{q}_\perp) \cdot \hat{\mathbf{z}} \ell_B^2 / 2} H_{n'_1 k'_1, n'_2 k'_1 + p_z, n_2 k_2, n'_3 k_2 - p_z}^{(b',b)}(\mathbf{p} - \mathbf{q}_\perp) \left\langle \rho_{n'_1 k'_1, n'_2 k'_1 + p_z}^{(b',b')}(\mathbf{q}_\perp - \mathbf{p}_\perp) \right\rangle \\
& \times P_{n_1 k_1, n'_3 k_2 - p_z, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(0)(a,b,c,d)}(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) \\
& + \frac{1}{\hbar\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{a'} \sum_{k'_2} \sum_{n'_1 n'_2 n'_3} e^{-i(\mathbf{p}_\perp \times \mathbf{q}_\perp) \cdot \hat{\mathbf{z}} \ell_B^2 / 2} X_{n'_1 k'_1 - p_z, n_1 k_1, n'_2 k'_2, n'_3 k'_2 - p_z}^{(a,a')}(\mathbf{p} - \mathbf{q}_\perp) \left\langle \rho_{n'_1 k'_1 - p_z, n'_3 k'_2 - p_z}^{(a,a')}(\mathbf{q}_\perp - \mathbf{p}_\perp) \right\rangle \\
& \times P_{n'_2 k'_2, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(0)(a',b,c,d)}(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) \\
& - \frac{1}{\hbar\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{b'} \sum_{k'_1} \sum_{n'_1 n'_2 n'_3} e^{i(\mathbf{p}_\perp \times \mathbf{q}_\perp) \cdot \hat{\mathbf{z}} \ell_B^2 / 2} X_{n'_1 k'_1 - p_z, n'_2 k'_1, n_2 k_2, n'_3 k_2 - p_z}^{(b',b)}(\mathbf{p} - \mathbf{q}_\perp) \left\langle \rho_{n'_1 k'_1 - p_z, n'_3 k_2 - p_z}^{(b',b')}(\mathbf{p}_\perp - \mathbf{q}_\perp) \right\rangle \\
& \times P_{n_1 k_1, n'_2 k'_1, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(0)(a,b',c,d)}(\mathbf{p}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n).
\end{aligned} \tag{B.39}$$

On précise que les équations (B.35) et (B.39) sont tout à fait générales. Ces dernières peuvent être utilisées pour étudier des états non uniformes du gaz d'électrons ou des états comprenant des mélanges de niveaux de Landau (ce qui peut se produire avec une inclinaison des noeuds non parallèle au champ) ou en incluant une cohérence internoeud (i.e. un état avec un paramètre d'ordre $\langle \rho^{(a,b)} \rangle \neq 0$ avec $a \neq b$). Dans cette thèse, nous nous intéressons uniquement à des états uniformes du gaz d'électrons sans cohérence d'une quelconque sorte. Cela nous permet donc de simplifier la réponse Hartree-Fock avec

$$\left\langle \rho_{n_1 k_1, n_2 k_2}^{(a,b)}(\mathbf{p}_\perp - \mathbf{q}_\perp) \right\rangle = \left\langle \rho_{n_1 k_1, n_1 k_1}^{(a,a)}(\mathbf{0}) \right\rangle \delta_{k_1, k_2} \delta_{n_1, n_2} \delta_{a,b} \delta_{\mathbf{q}_\perp, \mathbf{p}_\perp}. \tag{B.40}$$

En utilisant la condition donnée par l'équation (B.40), les termes de Hartree de l'équation (B.39) sont évalués pour un vecteur d'onde nul. Ces termes sont donc annulés avec la contribution du fond ionique positif (*positive background* en anglais).

Pour les deux derniers termes de l'équation (B.39), la simplification donne lieu à

$$X_{n'_1 k_1 - p_z, n_1 k_1, n'_2 k_1, n'_1 k_1 - p_z}^{(a,a)}(\mathbf{0}, p_z) \propto \delta_{|n'_2|, |n_1|}, \quad (\text{B.41})$$

$$X_{n'_1 k_2 - p_z, n'_2 k_2, n_2 k_2, n'_1 k_2 - p_z}^{(b,b)}(\mathbf{0}, p_z) \propto \delta_{|n'_2|, |n_2|}. \quad (\text{B.42})$$

Ces conditions peuvent être démontrées à partir de l'équation (B.36). Pour ces équations, les termes $n'_2 = -n_1$ et $n'_2 = -n_2$ sont négligeables par rapport aux termes $n'_2 = n_1$ et $n'_2 = n_2$ dans les delta de Kronecker. Une raison pour expliquer cela provient de la singularité logarithmique à $p_z = 0$ uniquement quand $n'_2 = n_1$ et $n'_2 = n_2$ respectivement pour chacune des équations précédentes de X . Nous garderons alors uniquement ces contributions pour la suite, ce qui simplifie le calcul. Cela nous conduit à

$$\begin{aligned} & \left[i\Omega_n - \left(\tilde{E}_{n_2 k_2}^{(b)} - \tilde{E}_{n_1 k_1}^{(a)} \right) / \hbar \right] P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(0)(a,b,c,d)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) = \\ & \left[\left\langle \rho_{n_1 k_1, n_1 k_1}^{(a,a)}(0) \right\rangle - \left\langle \rho_{n_2 k_2, n_2 k_2}^{(b,b)}(0) \right\rangle \right] \delta_{a,d} \delta_{b,c} \delta_{n_1, n_4} \delta_{n_2, n_3} \delta_{k_2, k_3} \delta_{k_1, k_4} \delta_{\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp}, \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

où $\tilde{E}_{nk}^{(a)} = E_{nk}^{(a)} + \Sigma_{nk}^{(a)}$ représentent les bandes renormalisées et on définit la self-énergie

$$\Sigma_{nk}^{(a)} = -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{p_z} \sum_{n'} X_{n'k-p_z, nk, nk, n'k-p_z}^{(a,a)}(\mathbf{0}, p_z) \left\langle \rho_{n'k-p_z, n'k-p_z}^{(a,a)}(0) \right\rangle. \quad (\text{B.44})$$

Un oeil avisé remarquera dans l'équation (B.43) les facteurs $\delta_{n_1, n_4} \delta_{n_2, n_3}$. Ces derniers reflètent le fait que la fonction de Green Hartree-Fock a été approximée comme étant diagonale dans l'indice du niveau de Landau. Cette approximation est une conséquence des termes négligés dans les équations (B.41) et (B.42).

On peut alors remplacer la fonction de Green Hartree-Fock à deux particules dans l'équation (B.35), ce qui conduit à

$$\begin{aligned} & P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(a,a,b,b)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) = P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_2 k_2, n_1 k_1}^{(0)(a,a,a,a)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}_\perp; i\Omega_n) \delta_{a,b} \delta_{n_1, n_4} \delta_{n_2, n_3} \delta_{k_2, k_3} \delta_{k_1, k_4} \delta_{\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp} \\ & + \frac{N_\varphi}{\hbar \mathcal{V}} \sum_c \sum_{k'_1} \sum_{n'_1 n'_2} P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_2 k_2, n_1 k_1}^{(0)(a,a,a,a)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}_\perp; i\Omega_n) H_{n_2 k_2, n_1 k_1, n'_1 k'_1, n'_2 k'_1 - k_1 + k_2}^{(a,c)}(\mathbf{q}_\perp, k_1 - k_2) \\ & \times P_{n'_1 k'_1, n'_2 k'_1 - k_1 + k_2, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(c,c,b,b)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n) \\ & - \frac{1}{\hbar \mathcal{V}} \sum_{p_z} \sum_{n'_1 n'_2} P_{n_1 k_1, n_2 k_2, n_2 k_2, n_1 k_1}^{(0)(a,a,a,a)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}_\perp; i\Omega_n) X_{n_2 k_2, n'_2 k_2 - p_z, n'_1 k_1 - p_z, n_1 k_1}^{(a,a)}(\mathbf{q}_\perp, p_z) \\ & \times P_{n'_1 k_1 - p_z, n'_2 k_2 - p_z, n_3 k_3, n_4 k_4}^{(a,a,b,b)}(\mathbf{q}_\perp, \mathbf{q}'_\perp; i\Omega_n). \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

Pour calculer la conductivité optique, nous pouvons désormais fixer $\mathbf{q}_\perp = \mathbf{q}'_\perp = 0$. Cela

simplifie grandement l'équation précédente et on trouve alors

$$\begin{aligned}
P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, b, b)}(i\Omega_n) &= P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_2 k_2, n_1 k_2}^{(0)(a, a, a, a)}(i\Omega_n) \delta_{a, b} \delta_{n_1, n_4} \delta_{n_2, n_3} \delta_{k_2, k_3} \delta_{k_1, k_4} \\
&+ \frac{N_\varphi}{\hbar \mathcal{V}} \sum_c \sum_{k'_1} \sum_{n'_1 n'_2} P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_2 k_2, n_1 k_2}^{(0)(a, a, a, a)}(i\Omega_n) H_{n_2 k_2, n_1 k_2, n'_1 k'_1, n'_2 k'_1}^{(a, c)}(\mathbf{0}, k_1 - k_2) P_{n'_1 k'_1, n'_2 k'_1, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(c, c, b, b)}(i\Omega_n) \\
&- \frac{1}{\hbar \mathcal{V}} \sum_{p_z} \sum_{n'_1 n'_2} P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_2 k_2, n_1 k_2}^{(0)(a, a, a, a)}(i\Omega_n) X_{n_2 k_2, n'_2 k_2 - p_z, n'_1 k_2 - p_z, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}, p_z) P_{n'_1 k_2 - p_z, n'_2 k_2 - p_z, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, b, b)}(i\Omega_n).
\end{aligned} \tag{B.46}$$

Notre objectif est de calculer la conductivité optique interbande, ce qui implique des transitions entre niveaux de Landau avec $n_1 \neq n_2$. Une telle considération implique que le terme de Hartree est nul pour la fonction de Green à deux particules en raison de l'orthogonalité des spineurs pour $n_1 \neq n_2$ (c.f. équation (B.36)). Il ne nous reste alors que les corrections excitoniques

$$\begin{aligned}
P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, b, b)}(i\Omega_n) &= P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_2 k_2, n_1 k_2}^{(0)(a, a, a, a)}(i\Omega_n) \delta_{a, b} \delta_{n_1, n_4} \delta_{n_2, n_3} \delta_{k_2, k_4} \\
&- \frac{1}{\hbar \mathcal{V}} \sum_{p_z} \sum_{n'_1 n'_2} P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_2 k_2, n_1 k_2}^{(0)(a, a, a, a)}(i\Omega_n) X_{n_2 k_2, n'_2 k_2 - p_z, n'_1 k_2 - p_z, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}, p_z) P_{n'_1 k_2 - p_z, n'_2 k_2 - p_z, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, b, b)}(i\Omega_n).
\end{aligned} \tag{B.47}$$

Ensuite, on multiplie l'équation (B.47) par le facteur $\left[i\Omega_n - \left(\tilde{E}_{n_2 k_2}^{(a)} - \tilde{E}_{n_1 k_2}^{(a)} \right) / \hbar \right]$ et en utilisant l'équation (B.43), on trouve

$$\begin{aligned}
&\left[\omega + i\delta - \left(\tilde{E}_{n_2 k_2}^{(a)} - \tilde{E}_{n_1 k_2}^{(a)} \right) / \hbar \right] P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, b, b)}(\omega) \\
&= \left[\left\langle \rho_{n_1 k_2, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}) \right\rangle - \left\langle \rho_{n_2 k_2, n_2 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}) \right\rangle \right] \delta_{a, b} \delta_{n_1, n_4} \delta_{n_2, n_3} \delta_{k_2, k_4} \\
&- \frac{1}{\hbar \mathcal{V}} \sum_{p_z} \sum_{n'_1 n'_2} \left[\left\langle \rho_{n_1 k_2, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}) \right\rangle - \left\langle \rho_{n_2 k_2, n_2 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}) \right\rangle \right] X_{n_2 k_2, n'_2 k_2 - p_z, n'_1 k_2 - p_z, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}, p_z) \\
&\times P_{n'_1 k_2 - p_z, n'_2 k_2 - p_z, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, b, b)}(\omega),
\end{aligned} \tag{B.48}$$

en ayant également effectué le prolongement analytique. À partir de l'équation (B.48), on a, à chaque ordre en théorie des perturbations, $P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, b, b)} = P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, a, a)} \delta_{a, b}$. De plus il est possible de montrer à partir de l'équation (B.36) que, pour $n_1 \neq n_2$, on a $X_{n_2 k_2, n'_2 k_2 - p_z, n'_1 k_2 - p_z, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}, p_z) \propto \delta_{|n'_2|, |n_2|} \delta_{|n'_1|, |n_1|}$ parce que $\tilde{Y}_{n_1 k, n_2 k}^{(a)}(\mathbf{0}) = \delta_{n_1, n_2}$ (où on rappelle que l'on ne garde que les termes $n'_2 = n_2$ et $n'_1 = n_1$ étant donné qu'ils sont dominant à faible p_z en raison de leur divergence logarithmique). Cela conduit alors à $P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_3 k_4, n_4 k_4}^{(a, a, a, a)} =$

$P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_2 k_4, n_1 k_4}^{(a, a, a, a)}$ $\delta_{n_2, n_3} \delta_{n_1, n_4}$. Cela simplifie l'équation (B.48), ce qui nous conduit à

$$\begin{aligned}
& \left[\omega + i\delta - \left(\tilde{E}_{n_2 k_2}^{(a)} - \tilde{E}_{n_1 k_2}^{(a)} \right) / \hbar \right] P_{n_1 k_2, n_2 k_2, n_2 k_4, n_1 k_4}^{(a, a, a, a)}(\omega) \\
& = \left[\left\langle \rho_{n_1 k_2, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}) \right\rangle - \left\langle \rho_{n_2 k_2, n_2 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}) \right\rangle \right] \delta_{k_2, k_4} \\
& - \frac{1}{\hbar \mathcal{V}} \sum_{p_z} \left[\left\langle \rho_{n_1 k_2, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}) \right\rangle - \left\langle \rho_{n_2 k_2, n_2 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}) \right\rangle \right] X_{n_2 k_2, n_2 k_2 - p_z, n_1 k_2 - p_z, n_1 k_2}^{(a, a)}(\mathbf{0}, p_z) \\
& \times P_{n_1 k_2 - p_z, n_2 k_2 - p_z, k_4 n_2, k_4 n_1}^{(a, a, a, a)}(\omega).
\end{aligned} \tag{B.49}$$

On trouve alors que pour chaque valeur de ω , n_1 , n_2 et k_4 , l'équation (B.49) peut être réexprimée dans un problème d'inversion matricielle. La dimension de cette matrice est donnée par le nombre de points en vecteur d'onde k_2 . L'approche numérique consiste à discrétiser le vecteur d'onde parallèle au champ magnétique (on choisit $N_k = 200$ points, ce résultat implique déjà une convergence des résultats qui restent inchangés en augmentant N_k), et on choisit un cutoff ultraviolet pour notre modèle. On mesure (numériquement) toutes les énergies et les vecteurs d'onde en unités de $\hbar v_F / \ell_B$ et ℓ_B^{-1} respectivement. Le cutoff en k dépend donc de la valeur du champ magnétique étant donné qu'il implique la quantité sans dimension $k \ell_B$. Par exemple, pour $B = 20$ T et 40 T, cela implique respectivement $k \ell_B \in [-5, 5]$ et $k \ell_B \in [-3.5, 3.5]$. De plus, afin de pouvoir résoudre pratiquement le problème, on impose une limite à la taille de l'espace de Hilbert pour les niveaux de Landau en incluant le niveau chiral et les trois premiers niveaux en bande de valence et conduction, ce qui est justifié en fort champ magnétique puisque l'on est intéressé au régime à basse énergie.

Avec l'équation (B.33), on peut alors écrire la réponse retardée pour le courant pour chaque noeud a

$$\chi_{J_\alpha J_\beta}^R(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \omega) = \frac{N_\varphi}{\mathcal{V} \hbar} \sum_{n_1, n_2}^* \sum_{k_1, k_2} \tilde{\Lambda}_{k_1 n_1, k_1 n_2}^{(a, \alpha)}(\mathbf{0}) P_{n_1 k_1, n_2 k_1, n_2 k_2, n_1 k_2}^{(a, a, a, a)}(\omega) \tilde{\Lambda}_{n_2 k_2, n_1, k_2}^{(a, \beta)}(\mathbf{0}), \tag{B.50}$$

où la présence de l'étoile sur le symbole de la somme indique un espace de Hilbert tronqué pour les niveaux de Landau. Finalement, en insérant la solution que l'on trouve numériquement de l'équation (B.49) dans l'équation (B.50), on obtient la fonction de corrélation courant-courant retardée ce qui nous permet ultimement d'obtenir une expression pour la conductivité optique interbande sous fort champ magnétique.

Annexe C

Niveaux de Landau et conductivité optique pour le cas d'une dispersion avec des termes non linéaires

Dans le chapitre 3 de cette thèse, nous nous sommes concentrés sur un modèle minimal d'un semimétal avec des noeuds de Weyl inclinés uniquement. Cependant, nous avons insisté que l'élément central pour obtenir la polarisation de vallée est la brisure de la symétrie anti-unitaire à basse énergie définie par l'opération de l'équation (2.90).

Dans cette annexe, nous confirmerons ce point en montrant qu'une polarisation de vallée complète et le dédoublement du pic provenant d'une transition impliquant le niveau chiral dans la conductivité optique sont présentes dans un modèle qui préserve la symétrie électron-trou avec des termes non linéaires dans la dispersion.

Pour ce faire, on retrouve le modèle introduit dans la section (2.2.3) [66,72]

$$\begin{aligned}d_{1,0}(\mathbf{k}) &= 0, \\d_{1,x}(\mathbf{k}) &= \hbar v_F k_x (1 + \alpha k_z), \\d_{1,y}(\mathbf{k}) &= \hbar v_F k_y (1 + \alpha k_z), \\d_{1,z}(\mathbf{k}) &= \hbar v_z k_z + \beta(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2),\end{aligned}\tag{C.1}$$

qui décrit le hamiltonien du noeud de Weyl $\tau = 1$. On rappelle que les différents hamiltoniens peuvent être obtenues grâce au tableau 2.1.

Ensuite, nous considérons l'effet du champ magnétique orienté dans la direction z , qui

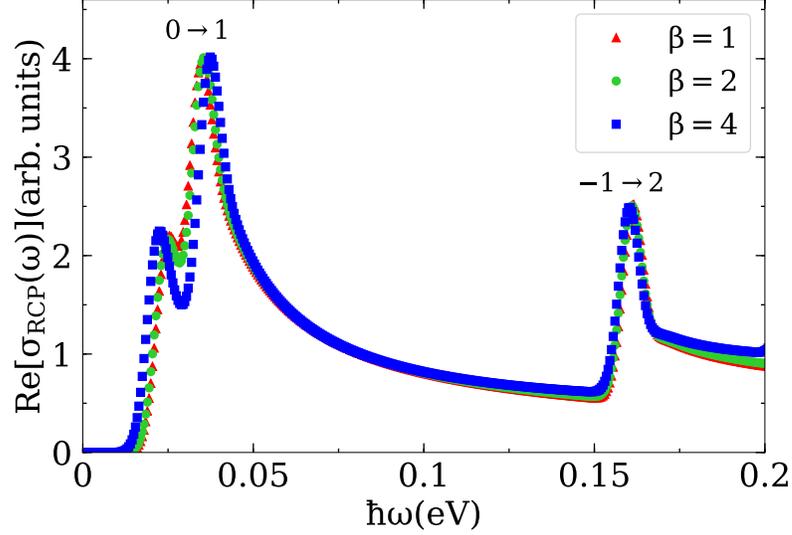


FIGURE C.1 Conductivité optique totale pour un modèle de semimétal de Weyl avec quatre noeuds avec la configuration $\mathbf{B} \parallel \mathbf{q} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ pour une lumière circulairement polarisée droite. Cette figure est très similaire à la figure 3.3 à l'exception du fait que l'inclinaison des cônes est remplacée par les termes non linéaires dans la dispersion. Le même résultat qualitatif, un dédoublement du pic relié à la transition $0 \rightarrow 1$ est présent. Les paramètres utilisés pour le calcul sont $\alpha = 0.08\ell_B$, $B = 40$ T, $\epsilon_\infty = 20$, $\mu = \hbar v_F / \ell_B$, $v_z = v_F$ et $\eta = 3$ meV. Les triangles rouges, cercles vert et carrés bleus représentent respectivement des valeurs de $\beta = 1, 2$ et 4 eVÅ². Ces valeurs sont du même ordre de grandeur que les coefficients reliés aux termes quadratiques en vecteur d'onde dans la dispersion pour des semimétaux de Dirac [130,131].

est la direction qui préserve la symétrie de rotation cylindrique du modèle. Cela nous permet d'obtenir une solution analytique plus simple pour la structure de bandes ainsi que les états propres. De manière similaire au cas de noeuds inclinés, on peut trouver numériquement la structure électronique ainsi que les états propres si le champ magnétique n'est plus selon la direction z . En utilisant la jauge de Landau $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, les coefficients des spineurs propres du hamiltonien sans interaction de Coulomb pour le noeud τ s'écrivent

$$\begin{aligned}
 u_{nk_z\tau} &= -i \operatorname{sgn}(n) \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{sgn}(n) \frac{\hbar v_z k_z + \beta (2|n|/\ell_B^2 - 2k_z^2)}{E_{nk_z}^{(\tau)} + \beta/\ell_B^2} \right)}, \\
 v_{nk_z\tau} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{sgn}(n) \frac{\hbar v_z k_z + \beta (2|n|/\ell_B^2 - 2k_z^2)}{E_{nk_z}^{(\tau)} + \beta/\ell_B^2} \right)},
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

où n est l'indice du niveau de Landau et que, dans le cas spécial $n = 0$, on rappelle que

$u_{n\tau k_z} = 0$ et $v_{n\tau k_z} = 1$. De même, on trouve les énergies propres pour $\tau = 1$:

$$E_{0k_z}^{(1)} = -\hbar v_z k_z - \beta(\ell_B^{-2} - 2k_z^2), \quad (\text{C.3})$$

$$E_{nk_z}^{(1)} = -\frac{\beta}{\ell_B^2} + \text{sgn}(n) \sqrt{2|n| \frac{(\hbar v_F)^2}{\ell_B^2} (1 + \alpha k_z)^2 + \left[\hbar v_z k_z + \beta \left(\frac{2|n|}{\ell_B^2} - 2k_z^2 \right) \right]^2}. \quad (\text{C.4})$$

On utilise alors le formalisme de l'annexe B pour trouver la conductivité optique à partir de ce modèle. On obtient alors la figure C.1 qui représente le résultat pour la conductivité optique, où, de façon similaire au cas des noeuds inclinés, un dédoublement du pic relié à la transition $0 \rightarrow 1$ est présente. Ce dédoublement, induit par les termes non linéaires dans la dispersion (i.e. α et β), est une preuve de la polarisation de vallée complète. Les mêmes résultats qualitatifs sont donc observés pour des cônes inclinés et pour des termes non linéaires dans la dispersion.

Bibliographie

- [1] M. V. Berry. Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **392**(1802), 45–57 (1984). <http://www.jstor.org/stable/2397741>. 1, 7
- [2] Robert Karplus et J. M. Luttinger. Hall effect in ferromagnetics. *Phys. Rev.* **95**, 1154–1160 (1954). [doi:10.1103/PhysRev.95.1154](https://doi.org/10.1103/PhysRev.95.1154). 1
- [3] EN Adams et EI Blount. Energy bands in the presence of an external force field—ii : Anomalous velocities. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **10**(4), 286–303 (1959). 1
- [4] Klaus Von Klitzing. The quantized Hall effect. *Reviews of Modern Physics* **58**(3), 519 (1986). 1
- [5] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale et M. den Nijs. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405–408 (1982). [doi:10.1103/PhysRevLett.49.405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.405). 1
- [6] Qian Niu, Ds J Thouless et Yong-Shi Wu. Quantized Hall conductance as a topological invariant. *Physical Review B* **31**(6), 3372 (1985). 1, 7
- [7] R. B. Laughlin. Anomalous quantum Hall effect : An incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1395–1398 (1983). [doi:10.1103/PhysRevLett.50.1395](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.1395). 1
- [8] B. Andrei Bernevig et Shou-Cheng Zhang. Quantum spin Hall effect. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 106802 (2006). [doi:10.1103/PhysRevLett.96.106802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.106802). 1
- [9] Cui-Zu Chang, Jinsong Zhang, Xiao Feng, Jie Shen, Zuocheng Zhang, Minghua Guo, Kang Li, Yunbo Ou, Pang Wei, Li-Li Wang et others. Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator. *Science* **340**(6129), 167–170 (2013). 1
- [10] K. F. Mak, K. L. McGill, J. Park et P. L. McEuen. The valley Hall effect in MoS₂ transistors. *Science* **344**(6191), 1489–1492 (2014). [doi:10.1126/science.1250140](https://doi.org/10.1126/science.1250140). 1, 21
- [11] C. L. Kane et E. J. Mele. Z₂ topological order and the quantum spin Hall effect. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005). [doi:10.1103/PhysRevLett.95.146802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.146802). 2
- [12] Alexander Altland et Martin R. Zirnbauer. Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures. *Phys. Rev. B* **55**, 1142–1161 (1997). [doi:10.1103/PhysRevB.55.1142](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.1142). 2

- [13] Andreas P. Schnyder, Shinsei Ryu, Akira Furusaki et Andreas W. W. Ludwig. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008). doi :[10.1103/PhysRevB.78.195125](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.195125). 2
- [14] B. Bradlyn, L. Elcoro, J. Cano, M. G. Vergniory, Z. Wang, C. Felser, M. I. Aroyo et B. A. Bernevig. Topological quantum chemistry. **547**, 298–305 (2017). doi :[10.1038/nature23268](https://doi.org/10.1038/nature23268). 2
- [15] Paul Adrien Maurice Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **117**(778), 610–624 (1928). 2, 5
- [16] Hermann Weyl. Gravitation and the electron. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **15**(4), 323–334 (1929). doi :[10.1073/pnas.15.4.323](https://doi.org/10.1073/pnas.15.4.323). 2, 6
- [17] Conyers Herring. Accidental degeneracy in the energy bands of crystals. *Phys. Rev.* **52**, 365–373 (1937). doi :[10.1103/PhysRev.52.365](https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.365). 2, 9
- [18] Hongming Weng, Chen Fang, Zhong Fang, B. Andrei Bernevig et Xi Dai. Weyl semimetal phase in noncentrosymmetric transition-metal monophosphides. *Phys. Rev. X* **5**, 011029 (2015). doi :[10.1103/PhysRevX.5.011029](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.011029). 2, 11, 12, 40, 85
- [19] Xiaochun Huang, Lingxiao Zhao, Yujia Long, Peipei Wang, Dong Chen, Zhanhai Yang, Hui Liang, Mianqi Xue, Hongming Weng, Zhong Fang, Xi Dai et Genfu Chen. Observation of the chiral-anomaly-induced negative magnetoresistance in 3D Weyl semimetal TaAs. *Phys. Rev. X* **5**, 031023 (2015). doi :[10.1103/PhysRevX.5.031023](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.031023). 2, 12, 22
- [20] B. Q. Lv, H. M. Weng, B. B. Fu, X. P. Wang, H. Miao, J. Ma, P. Richard, X. C. Huang, L. X. Zhao, G. F. Chen, Z. Fang, X. Dai, T. Qian et H. Ding. Experimental discovery of Weyl semimetal TaAs. *Phys. Rev. X* **5**, 031013 (2015). doi :[10.1103/PhysRevX.5.031013](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.031013). 2, 12, 22
- [21] J. Buckeridge, D. Jevdokimovs, C. R. A. Catlow et A. A. Sokol. Bulk electronic, elastic, structural, and dielectric properties of the Weyl semimetal TaAs. *Phys. Rev. B* **93**, 125205 (2016). doi :[10.1103/PhysRevB.93.125205](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.125205). 2, 31, 72, 77
- [22] B. Xu, Y. M. Dai, L. X. Zhao, K. Wang, R. Yang, W. Zhang, J. Y. Liu, H. Xiao, G. F. Chen, A. J. Taylor, D. A. Yarotski, R. P. Prasankumar et X. G. Qiu. Optical spectroscopy of the Weyl semimetal TaAs. *Phys. Rev. B* **93**, 121110 (2016). doi :[10.1103/PhysRevB.93.121110](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.121110). 2
- [23] Cheng-Long Zhang, Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Zhujun Yuan, Ziquan Lin, Bingbing Tong, Guang Bian, Nasser Alidoust, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Tay-Rong Chang, Guoqing Chang, Chuang-Han Hsu, Horng-Tay Jeng, Madhab Neupane, Daniel S. Sanchez, Hao Zheng, Junfeng Wang, Hsin Lin, Chi Zhang, Hai-Zhou Lu, Shun-Qing Shen, Titus Neupert, M. Zahid Hasan et Shuang Jia. Signatures of the Adler–Bell–Jackiw chiral anomaly in a Weyl fermion semimetal. *Nature Communications* **7**, 10735 (2016). doi :[10.1038/ncomms10735](https://doi.org/10.1038/ncomms10735). 2
- [24] JianHua Du, HangDong Wang, Qin Chen, QianHui Mao, Rajwali Khan, BinJie Xu, YuXing Zhou, YanNan Zhang, JinHu Yang, Bin Chen, ChunMu Feng et MingHu Fang. Large unsaturated positive and negative magnetoresistance in Weyl semimetal TaP.

- Science China Physics, Mechanics & Astronomy* **59**(5), 657406 (2016). doi :10.1007/s11433-016-5798-4. 2
- [25] M. Zahid Hasan, Su-Yang Xu, Ilya Belopolski et Shin-Ming Huang. Discovery of Weyl fermion semimetals and topological Fermi arc states. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **8**(1), 289–309 (2017). doi :10.1146/annurev-conmatphys-031016-025225. 2
- [26] Yuxuan Jiang, Zhiling Dun, Seongphil Moon, Haidong Zhou, Mikito Koshino, Dmitry Smirnov et Zhigang Jiang. Landau quantization in coupled Weyl points : A case study of semimetal NbP. *Nano Letters* **18**(12), 7726–7731 (2018). doi :10.1021/acs.nanolett.8b03418. PMID : 30403143. 2, 81, 87, 89, 98
- [27] Xiang Yuan, Zhongbo Yan, Chaoyu Song, Mengyao Zhang, Zhilin Li, Cheng Zhang, Yanwen Liu, Weiyi Wang, Minhao Zhao, Zehao Lin, Tian Xie, Jonathan Ludwig, Yuxuan Jiang, Xiaoxing Zhang, Cui Shang, Zefang Ye, Jiayang Wang, Feng Chen, Zhengcai Xia, Dmitry Smirnov, Xiaolong Chen, Zhong Wang, Hugen Yan et Faxian Xiu. Chiral Landau levels in Weyl semimetal NbAs with multiple topological carriers. *Nature Communications* **9**(1) (2018). doi :10.1038/s41467-018-04080-4. 2, 72, 81, 87, 89, 98
- [28] Ion Garate et M. Franz. Excitons and optical absorption on the surface of a strong topological insulator with a magnetic energy gap. *Phys. Rev. B* **84**, 045403 (2011). doi :10.1103/PhysRevB.84.045403. 2, 21, 37, 46, 47, 48, 49, 55, 72
- [29] Jianhui Zhou, Wen-Yu Shan, Wang Yao et Di Xiao. Berry phase modification to the energy spectrum of excitons. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 166803 (2015). doi :10.1103/PhysRevLett.115.166803. 3, 21, 37, 46
- [30] Ting Cao, Meng Wu et Steven G. Louie. Unifying optical selection rules for excitons in two dimensions : Band topology and winding numbers. *Phys. Rev. Lett.* **120**, 087402 (2018). doi :10.1103/PhysRevLett.120.087402. 3, 21
- [31] Xiaou Zhang, Wen-Yu Shan et Di Xiao. Optical selection rule of excitons in gapped chiral fermion systems. *Phys. Rev. Lett.* **120**, 077401 (2018). doi :10.1103/PhysRevLett.120.077401. 3, 21, 46, 48, 55
- [32] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva et A. A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* **306**(5696), 666–669 (2004). doi :10.1126/science.1102896. 4
- [33] C. L. Kane et E. J. Mele. Quantum spin Hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005). doi :10.1103/PhysRevLett.95.226801. 6
- [34] Peter Y Yu et Manuel Cardona. *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*. Springer, (1996). 8, 15, 16, 17
- [35] Holger Bech Nielsen et Masao Ninomiya. Absence of neutrinos on a lattice : (I). Proof by homotopy theory. *Nuclear Physics B* **185**(1), 20–40 (1981). 9, 22
- [36] Holger Bech Nielsen et Masao Ninomiya. Absence of neutrinos on a lattice : (II). Intuitive topological proof. *Nuclear Physics B* **193**(1), 173–194 (1981). 9, 22
- [37] J. von Neuman et E. Wigner. Über merkwürdige diskrete Eigenwerte. Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen. *Physikalische Zeitschrift* **30**, 467–470 (1929). 9

- [38] A. A. Burkov et Leon Balents. Weyl Semimetal in a Topological Insulator Multilayer. *Physical Review Letters* **107**(12) (2011). doi :[10.1103/PhysRevLett.107.127205](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.127205). arXiv : 1105.5138. 11
- [39] Xiangang Wan, Ari M. Turner, Ashvin Vishwanath et Sergey Y. Savrasov. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011). doi :[10.1103/PhysRevB.83.205101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.205101). 11
- [40] Sergey Borisenko, Daniil Evtushinsky, Quinn Gibson, Alexander Yaresko, Klaus Koepernik, Timur Kim, Mazhar Ali, Jeroen van den Brink, Moritz Hoesch, Alexander Fedorov, Erik Haubold, Yevhen Kushnirenko, Ivan Soldatov, Rudolf Schäfer et Robert J. Cava. Time-reversal symmetry breaking type-II Weyl state in YbMnBi₂. *Nature Communications* **10**(1), 1–10 (2019). doi :[10.1038/s41467-019-11393-5](https://doi.org/10.1038/s41467-019-11393-5). Number : 1 Publisher : Nature Publishing Group. 11
- [41] Shuichi Murakami, Motoaki Hirayama, Ryo Okugawa et Takashi Miyake. Emergence of topological semimetals in gap closing in semiconductors without inversion symmetry. *Science Advances* **3**(5) (2017). doi :[10.1126/sciadv.1602680](https://doi.org/10.1126/sciadv.1602680). 11
- [42] Chi-Cheng Lee, Su-Yang Xu, Shin-Ming Huang, Daniel S. Sanchez, Ilya Belopolski, Guoqing Chang, Guang Bian, Nasser Alidoust, Hao Zheng, Madhab Neupane, Baokai Wang, Arun Bansil, M. Zahid Hasan et Hsin Lin. Fermi surface interconnectivity and topology in Weyl fermion semimetals TaAs, TaP, NbAs, and NbP. *Phys. Rev. B* **92**, 235104 (2015). doi :[10.1103/PhysRevB.92.235104](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.235104). 12, 33, 57, 72, 82, 85
- [43] Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Nasser Alidoust, Madhab Neupane, Guang Bian, Chenglong Zhang, Raman Sankar, Guoqing Chang, Zhujun Yuan, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Hao Zheng, Jie Ma, Daniel S. Sanchez, BaoKai Wang, Arun Bansil, Fangcheng Chou, Pavel P. Shibayev, Hsin Lin, Shuang Jia et M. Zahid Hasan. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science* **349**(6248), 613–617 (2015). doi :[10.1126/science.aaa9297](https://doi.org/10.1126/science.aaa9297). 12
- [44] Su-Yang Xu, Nasser Alidoust, Ilya Belopolski, Zhujun Yuan, Guang Bian, Tay-Rong Chang, Hao Zheng, Vladimir N. Strocov, Daniel S. Sanchez, Guoqing Chang, Chenglong Zhang, Daixiang Mou, Yun Wu, Lunan Huang, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, BaoKai Wang, Arun Bansil, Horng-Tay Jeng, Titus Neupert, Adam Kaminski, Hsin Lin, Shuang Jia et M. Zahid Hasan. Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide. *Nature Physics* **11**(9), 748–754 (2015). doi :[10.1038/nphys3437](https://doi.org/10.1038/nphys3437). Number : 9 Publisher : Nature Publishing Group. 12
- [45] Henrik Bruus et Karsten Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. Oxford university press, (2004). 13, 25, 29, 32
- [46] Ryogo Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan* **12**(6), 570–586 (1957). 13
- [47] John M Ziman. *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge University press, (1972). 15, 66
- [48] MS Dresselhaus. Solid state physics part II : Optical properties of solids. *Lecture Notes (Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA)* **17** (2001). 15, 16

- [49] Lev Davidovich Landau, JS Bell, MJ Kearsley, LP Pitaevskii, EM Lifshitz et JB Sykes. *Electrodynamics of continuous media*, volume 8. elsevier, (2013). [16](#)
- [50] Christoph E Nebel. Electrons dance in diamond. *Nature materials* **12**(8), 690–691 (2013). [18](#)
- [51] Dimitrie Culcer, Lukasz Cywinski, Qiuqi Li, Xuedong Hu et S. Das Sarma. Quantum dot spin qubits in silicon : Multivalley physics. *Phys. Rev. B* **82**, 155312 (2010). [doi :10.1103/PhysRevB.82.155312](#). [18](#)
- [52] Igor Žutić, Jaroslav Fabian et S. Das Sarma. Spintronics : Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics* **76**(2), 323–410 (2004). [doi :10.1103/RevModPhys.76.323](#). [18](#)
- [53] Di Xiao, Wang Yao et Qian Niu. Valley-contrasting physics in graphene : Magnetic moment and topological transport. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 236809 (2007). [doi :10.1103/PhysRevLett.99.236809](#). [18](#)
- [54] A. Rycerz, J. Tworzydło et C. W. J. Beenakker. Valley filter and valley valve in graphene. *Nature Physics* **3**(3), 172–175 (2007). [doi :10.1038/nphys547](#). Number : 3 Publisher : Nature Publishing Group. [18](#)
- [55] Zengwei Zhu, Aurélie Collaudin, Benoît Fauqué, Woun Kang et Kamran Behnia. Field-induced polarization of Dirac valleys in Bismuth. *Nature Physics* **8**(1), 89–94 (2012). [doi :10.1038/nphys2111](#). [18](#), [19](#), [61](#)
- [56] Ayumu Iwasa, Akihiro Kondo, Shiro Kawachi, Kazuto Akiba, Yoshiki Nakanishi, Masahito Yoshizawa, Masashi Tokunaga et Koichi Kindo. Thermodynamic evidence of magnetic-field-induced complete valley polarization in Bismuth. *Scientific Reports* **9**(1), 1672 (2019). [doi :10.1038/s41598-018-38206-x](#). [18](#)
- [57] Jan Isberg, Markus Gabrysch, Johan Hammersberg, Saman Majdi, Kiran Kumar Kovi et Daniel J. Twitchen. Generation, transport and detection of valley-polarized electrons in diamond. *Nature Materials* **12**(8), 760–764 (2013). [doi :10.1038/nmat3694](#). [18](#), [19](#)
- [58] Wang Yao, Di Xiao et Qian Niu. Valley-dependent optoelectronics from inversion symmetry breaking. *Phys. Rev. B* **77**, 235406 (2008). [doi :10.1103/PhysRevB.77.235406](#). [19](#)
- [59] Manish Chhowalla, Hyeon Suk Shin, Goki Eda, Lain-Jong Li, Kian Ping Loh et Hua Zhang. The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenide nanosheets. *Nature chemistry* **5**(4), 263 (2013). [19](#)
- [60] Kin Fai Mak, Keliang He, Jie Shan et Tony F. Heinz. Control of valley polarization in monolayer MoS₂ by optical helicity. *Nature Nanotechnology* **7**(8), 494–498 (2012). [doi :10.1038/nnano.2012.96](#). [20](#)
- [61] Hualing Zeng, Junfeng Dai, Wang Yao, Di Xiao et Xiaodong Cui. Valley polarization in MoS₂ monolayers by optical pumping. *Nature Nanotechnology* **7**(8), 490–493 (2012). [doi :10.1038/nnano.2012.95](#). [20](#), [51](#), [62](#), [82](#)
- [62] H. Beyer, G. Rohde, A. Grubišić Čabo, A. Stange, T. Jacobsen, L. Bignardi, D. Lizzit, P. Lacovig, C. E. Sanders, S. Lizzit, K. Rossnagel, P. Hofmann et M. Bauer. 80% valley polarization of free carriers in singly oriented single-layer WS₂ on Au(111). *Phys. Rev. Lett.* **123**, 236802 (2019). [doi :10.1103/PhysRevLett.123.236802](#). [21](#)

- [63] Jieun Lee, Kin Fai Mak et Jie Shan. Electrical control of the valley Hall effect in bilayer MoS₂ transistors. *Nature Nanotechnology* **11**(5), 421–425 (2016). doi :[10.1038/nnano.2015.337](https://doi.org/10.1038/nnano.2015.337). Number : 5 Publisher : Nature Publishing Group. 21
- [64] Terry Y. T. Hung, Kerem Y. Camsari, Shengjiao Zhang, Pramey Upadhyaya et Zhihong Chen. Direct observation of valley-coupled topological current in MoS₂. *Science Advances* **5**(4), eaau6478 (2019). doi :[10.1126/sciadv.aau6478](https://doi.org/10.1126/sciadv.aau6478). 21
- [65] Yee Sin Ang, Shengyuan A. Yang, C. Zhang, Zhongshui Ma et L. K. Ang. Valleytronics in merging Dirac cones : All-electric-controlled valley filter, valve, and universal reversible logic gate. *Phys. Rev. B* **96**, 245410 (2017). doi :[10.1103/PhysRevB.96.245410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.245410). 21, 92, 93
- [66] Simon Bertrand, Ion Garate et René Côté. Light-induced valley polarization in interacting and nonlinear Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **96**, 075126 (2017). doi :[10.1103/PhysRevB.96.075126](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.075126). 23, 39, 145
- [67] Hartmut Haug et Stephan W Koch. *Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors, fifth edition*. World Scientific Publishing Co., (2009). doi :[10.1142/7184](https://doi.org/10.1142/7184). 27, 30, 32, 34, 35, 43
- [68] Zefang Wang, Daniel A. Rhodes, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, James C. Hone, Jie Shan et Kin Fai Mak. Evidence of high-temperature exciton condensation in two-dimensional atomic double layers. *Nature* **574**(7776), 76–80 (2019). doi :[10.1038/s41586-019-1591-7](https://doi.org/10.1038/s41586-019-1591-7). Number : 7776 Publisher : Nature Publishing Group. 28
- [69] Huazhou Wei, Sung-Po Chao et Vivek Aji. Excitonic phases from Weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 196403 (2012). doi :[10.1103/PhysRevLett.109.196403](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.196403). 28
- [70] Michael Rohlfing et Steven G. Louie. Electron-hole excitations and optical spectra from first principles. *Phys. Rev. B* **62**, 4927–4944 (2000). doi :[10.1103/PhysRevB.62.4927](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.4927). 35
- [71] Yakov M. Shnir. *Magnetic Monopoles*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2005). doi :[10.1007/3-540-29082-6](https://doi.org/10.1007/3-540-29082-6). 36
- [72] Hiroaki Ishizuka, Tomoya Hayata, Masahito Ueda et Naoto Nagaosa. Emergent electromagnetic induction and adiabatic charge pumping in noncentrosymmetric Weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 216601 (2016). doi :[10.1103/PhysRevLett.117.216601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.216601). 39, 145
- [73] N. P. Armitage, E. J. Mele et Ashvin Vishwanath. Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids. *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018). doi :[10.1103/RevModPhys.90.015001](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.90.015001). 40
- [74] Takahiro Morimoto, Shudan Zhong, Joseph Orenstein et Joel E. Moore. Semiclassical theory of nonlinear magneto-optical responses with applications to topological Dirac/Weyl semimetals. *Physical Review B* **94**(24), 245121 (2016). doi :[10.1103/PhysRevB.94.245121](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.245121). 45
- [75] Takahiro Morimoto, Shudan Zhong, Joseph Orenstein et Joel E. Moore. Semiclassical theory of nonlinear magneto-optical responses with applications to topological Dirac/Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **94**, 245121 (2016). doi :[10.1103/PhysRevB.94.245121](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.245121). 45

- [76] Daniel E. Parker, Takahiro Morimoto, Joseph Orenstein et Joel E. Moore. Diagrammatic approach to nonlinear optical response with application to Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **99**, 045121 (2019). doi :10.1103/PhysRevB.99.045121. 45
- [77] Fernando de Juan, Adolfo G Grushin, Takahiro Morimoto et Joel E Moore. Quantized circular photogalvanic effect in Weyl semimetals. *Nature communications* **8**(1), 1–7 (2017). 45, 91
- [78] D. T. Son et B. Z. Spivak. Chiral anomaly and classical negative magnetoresistance of Weyl metals. *Phys. Rev. B* **88**, 104412 (2013). doi :10.1103/PhysRevB.88.104412. 45, 93, 98, 107, 115
- [79] Ching-Kit Chan, Patrick A. Lee, Kenneth S. Burch, Jung Hoon Han et Ying Ran. When chiral photons meet chiral fermions : Photoinduced anomalous Hall effects in Weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.* **116**, 026805 (2016). doi :10.1103/PhysRevLett.116.026805. 46
- [80] Stefanos Kourtis. Bulk spectroscopic measurement of the topological charge of Weyl nodes with resonant x rays. *Phys. Rev. B* **94**, 125132 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.94.125132. 46
- [81] Arieh Iserles. *A first course in the numerical analysis of differential equations*. Number 44. Cambridge University press, (2009). 47
- [82] Phillip E. C. Ashby et J. P. Carbotte. Chiral anomaly and optical absorption in Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **89**, 245121 (2014). doi :10.1103/PhysRevB.89.245121. 47
- [83] C. J. Tabert, J. P. Carbotte et E. J. Nicol. Optical and transport properties in three-dimensional Dirac and Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **93**, 085426 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.93.085426. 47
- [84] Rui Yu, Hongming Weng, Zhong Fang, Hong Ding et Xi Dai. Determining the chirality of Weyl fermions from circular dichroism spectra in time-dependent angle-resolved photoemission. *Phys. Rev. B* **93**, 205133 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.93.205133. 55
- [85] S. P. Mukherjee et J. P. Carbotte. Absorption of circular polarized light in tilted type-i and type-ii Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **96**, 085114 (2017). doi :10.1103/PhysRevB.96.085114. 56
- [86] Serguei Tchoumakov, Marcello Civelli et Mark O. Goerbig. Magnetic-field-induced relativistic properties in Type-I and Type-II Weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 086402 (2016). doi :10.1103/PhysRevLett.117.086402. 56, 67, 105, 137, 138
- [87] Davide Grassano, Olivia Pulci, Adriano Mosca Conte et Friedhelm Bechstedt. Validity of Weyl fermion picture for transition metals monpnictides TaAs, TaP, NbAs, and NbP from ab initio studies. *Scientific Reports* **8**(1), 3534 (2018). doi :10.1038/s41598-018-21465-z. 57, 72, 82, 85, 87
- [88] Simon Bertrand, Jean-Michel Parent, René Côté et Ion Garate. Complete optical valley polarization in Weyl semimetals in strong magnetic fields. *Phys. Rev. B* **100**, 075107 (2019). doi :10.1103/PhysRevB.100.075107. 63
- [89] Gordon Baym. *Lectures on quantum mechanics*. CRC Press, (2018). 64
- [90] L. D. Landau et E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Pergamon Press, London, (1981). 65

- [91] Gordon Baym et Leo P. Kadanoff. Conservation laws and correlation functions. *Phys. Rev.* **124**, 287–299 (1961). doi :10.1103/PhysRev.124.287. 69, 132, 135
- [92] Gordon Baym. Self-consistent approximations in many-body systems. *Phys. Rev.* **127**, 1391–1401 (1962). doi :10.1103/PhysRev.127.1391. 69, 132
- [93] Gerald D Mahan. *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, (2013). 69
- [94] C. Kallin et B. I. Halperin. Excitations from a filled Landau level in the two-dimensional electron gas. *Physical Review B* **30**(10), 5655–5668 (1984). doi :10.1103/PhysRevB.30.5655. 69, 78
- [95] Phillip E. C. Ashby et J. P. Carbotte. Magneto-optical conductivity of Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **87**, 245131 (2013). doi :10.1103/PhysRevB.87.245131. 70, 72
- [96] V P Gusynin, S G Sharapov et J P Carbotte. Magneto-optical conductivity in graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter* **19**(2), 026222 (2006). doi :10.1088/0953-8984/19/2/026222. 72
- [97] K. A. Modic, T. Meng, F. Ronning, E. D. Bauer, P. J. W. Moll et B. J. Ramshaw. Uncovering Weyl Fermions in the Quantum Limit of NbP. *ArXiv e-prints* (2018). arXiv :1802.08221. 75
- [98] MO Goerbig. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Reviews of Modern Physics* **83**(4), 1193 (2011). 78
- [99] L. E. Golub et E. L. Ivchenko. Circular and magnetoinduced photocurrents in Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **98**, 075305 (2018). doi :10.1103/PhysRevB.98.075305. 88, 90, 91, 105, 107
- [100] L. E. Golub, E. L. Ivchenko et B. Z. Spivak. Photocurrent in gyrotropic Weyl semimetals. *JETP Letters* **105**(12), 782–785 (2017). doi :10.1134/S0021364017120062. 88, 91
- [101] Dmitri E. Kharzeev, Yuta Kikuchi, René Meyer et Yuya Tanizaki. Giant photocurrent in asymmetric Weyl semimetals from the helical magnetic effect. *Phys. Rev. B* **98**, 014305 (2018). doi :10.1103/PhysRevB.98.014305. 88
- [102] Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Nasser Alidoust, Madhab Neupane, Guang Bian, Chenglong Zhang, Raman Sankar, Guoqing Chang, Zhujun Yuan, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Hao Zheng, Jie Ma, Daniel S. Sanchez, BaoKai Wang, Arun Bansil, Fangcheng Chou, Pavel P. Shibayev, Hsin Lin, Shuang Jia et M. Zahid Hasan. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science* **349**(6248), 613–617 (2015). doi :10.1126/science.aaa9297. 89
- [103] D. Neubauer, A. Yaresko, W. Li, A. Löhle, R. Hübner, M. B. Schilling, C. Shekhar, C. Felser, M. Dressel et A. V. Pronin. Optical conductivity of the Weyl semimetal NbP. *ArXiv e-prints* (2018). arXiv :1803.09708. 89
- [104] W. Van Roosbroeck. Theory of the flow of electrons and holes in Germanium and other semiconductors. *The Bell System Technical Journal* **29**(4), 560–607 (1950). doi :10.1002/j.1538-7305.1950.tb03653.x. 90, 92, 93, 119
- [105] Eougenious L Ivchenko. *Optical spectroscopy of semiconductor nanostructures*. Alpha Science Int'l Ltd., (2005). 91

- [106] Emmanuel I. Rashba. Spin currents in thermodynamic equilibrium: The challenge of discerning transport currents. *Phys. Rev. B* **68**, 241315 (2003). doi :10.1103/PhysRevB.68.241315. 92, 102
- [107] J. S. Blakemore. *Semiconductor Statistics*. Dover Phoenix Editions, (1962). 92
- [108] S. Selberherr. *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Springer-Verlag Wien New York, (1984). 92, 93, 96, 97, 100, 110, 115, 116, 119
- [109] Clifton Fonstad. *Microelectronic devices and circuits-2006 electronic edition*, (2006). 92, 95, 97, 110, 115
- [110] Shufeng Zhang. Spin Hall effect in the presence of spin diffusion. *Physical review letters* **85**(2), 393 (2000). 92
- [111] Igor Žutić, Jaroslav Fabian et S. Das Sarma. Spin-polarized transport in inhomogeneous magnetic semiconductors : Theory of magnetic/nonmagnetic $p - n$ junctions. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 066603 (2002). doi :10.1103/PhysRevLett.88.066603. 92
- [112] Jaroslav Fabian, Igor Žutić et S. Das Sarma. Theory of spin-polarized bipolar transport in magnetic $p - n$ junctions. *Phys. Rev. B* **66**, 165301 (2002). doi :10.1103/PhysRevB.66.165301. 92
- [113] Saburo Takahashi et Sadamichi Maekawa. Spin current, spin accumulation and spin Hall effect. *Science and Technology of Advanced Materials* **9**(1), 014105 (2008). 92
- [114] S. A. Parameswaran, T. Grover, D. A. Abanin, D. A. Pesin et A. Vishwanath. Probing the chiral anomaly with nonlocal transport in three-dimensional topological semimetals. *Phys. Rev. X* **4**, 031035 (2014). doi :10.1103/PhysRevX.4.031035. 92, 93, 98, 102, 107, 112
- [115] Can Yesilyurt, Zhuo Bin Siu, Seng Ghee Tan, Gengchiao Liang, Shengyuan A Yang et Mansoor BA Jalil. Electrically tunable valley polarization in Weyl semimetals with tilted energy dispersion. *Scientific reports* **9**(1), 1–16 (2019). 92, 93
- [116] K. Blotekjaer. Transport equations for electrons in two-valley semiconductors. *IEEE Transactions on Electron Devices* **17**(1), 38–47 (1970). 93
- [117] Nickolai V. Kukhtarev, Tatiana Kukhtareva et Preben Buchhave. Chapter 1 - standard photorefractive model as a foundation of real-time holography. Dans *Photorefractive Optics*, Francis Yu et Shizhuo Yin, 1 – 24. Academic Press, San Diego (2000). 93
- [118] J. Piprek. *Handbook of Optoelectronic Device Modeling and Simulation: Lasers, Modulators, Photodetectors, Solar Cells, and Numerical Methods*. CRC Press, (2017). 93, 115, 116
- [119] J. R. Haynes et W. Shockley. Investigation of hole injection in transistor action. *Phys. Rev.* **75**, 691–691 (1949). doi :10.1103/PhysRev.75.691. 93
- [120] W. Shockley, G. L. Pearson et J. R. Haynes. Hole injection in Germanium — quantitative studies and filamentary transistors. *The Bell System Technical Journal* **28**(3), 344–366 (1949). 93
- [121] Adolf Fick. Ueber diffusion. *Annalen der Physik* **170**(1), 59–86 (1855). 95
- [122] L.D. Landau et E.M. Lifshitz. *Statistical Physics*. Number vol. 5. Elsevier Science, (1980). <https://books.google.ca/books?id=dEVtKQEACAAJ>. 99
- [123] Dam T. Son et Piotr Surówka. Hydrodynamics with triangle anomalies. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 191601 (2009). doi :10.1103/PhysRevLett.103.191601. 112

- [124] Carl T Kelley. *Solving nonlinear equations with Newton's method*, volume 1. Siam, (2003). 116
- [125] L. L. Marnham et A. V. Shytov. Bielectrons in the Dirac sea in graphene : the role of many-body effects, (2015). 123
- [126] J Robert Schrieffer. *Theory of superconductivity*. CRC Press, (2018). 124
- [127] G. D. Mahan. Excitons in degenerate semiconductors. *Phys. Rev.* **153**, 882–889 (1967). doi :10.1103/PhysRev.153.882. 125
- [128] Yi Li et F. D. M. Haldane. Topological nodal Cooper pairing in doped Weyl metals. *Phys. Rev. Lett.* **120**, 067003 (2018). doi :10.1103/PhysRevLett.120.067003. 130
- [129] Daniel Zwillinger, Victor Moll, I.S. Gradshteyn et I.M. Ryzhik. 7 - *Definite Integrals of Special Functions*. Academic Press, Boston, eighth edition édition, (2014). doi :https://doi.org/10.1016/B978-0-12-384933-5.00007-2. 138
- [130] Zhijun Wang, Yan Sun, Xing-Qiu Chen, Cesare Franchini, Gang Xu, Hongming Weng, Xi Dai et Zhong Fang. Dirac semimetal and topological phase transitions in A_3Bi ($A=Na, K, Rb$). *Phys. Rev. B* **85**, 195320 (2012). doi :10.1103/PhysRevB.85.195320. 146
- [131] Zhijun Wang, Hongming Weng, Quansheng Wu, Xi Dai et Zhong Fang. Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in Cd_3As_2 . *Phys. Rev. B* **88**, 125427 (2013). doi :10.1103/PhysRevB.88.125427. 146