

# Andrianomentsoa Harifeno Razanajatovo

DOCTORANT EN PHYSIQUE THÉORIQUE

## Characterization of materials topological nature through their response to an impurity

**Superviseurs : DUTREIX Clément, CAYSSOL Jérôme**

Je travaille sur des systèmes cristallins à deux dimensions, c'est à dire qu'ils présentent des symétries par translations et rotations discrètes. Les électrons circulent dans une matrice d'atomes dont la configuration témoigne de la périodicité du cristal. Pour décrire l'électron, l'Hamiltonien peut être diagonaliser par bloc sur les vecteurs d'ondes  $\vec{k}$ , valeurs propres des opérateurs de symétries par translation discrète. De l'Hamiltonien paramétré en  $\vec{k}$ , l'Hamiltonien de Bloch, naissent les bandes en énergie, correspondant aux valeurs propres de l'Hamiltonien en chaque  $\vec{k}$ . Ceci est à la base de ce que l'on appelle la théorie des bandes qui vient décrire les conducteurs, semi-conducteurs, isolants. Mais si auparavant, nous pensions que toute l'information étaient contenue dans le spectre en énergie, il s'est avéré que, dans certains matériaux, leurs propriétés ne pouvaient s'expliquer qu'à partir de la topologie et de la géométrie de l'espace des fonctions d'onde de Bloch décrivant les états des électrons dans le système.

L'objectif de ma thèse est donc de trouver un moyen systématique d'obtenir de l'information sur la topologie et la géométrie des bandes. Cela a déjà été fait auparavant, mas les observables utilisés étaient limitées à basse énergie et perdaient notamment l'information sur l'influence des symétries cristallines dans la topologie et la géométrie des bandes. Pour contourner ce problème, nous utilisons la densité d'états locales, nombre d'électrons par unité de surface et d'énergie. Cette observable se mesure dans des systèmes électroniques avec une pointe de microscope à effet tunnel par exemple, à travers la conductance différentielle (Variation de la conductance avec la tension entre la pointe et le matériau).

Mathématiquement, la densité d'états locales dépend de la fonction de Green en un point  $\vec{r}$  dans l'espace et une énergie  $\epsilon$  donnée. La fonction de Green en  $\vec{r}$  encode toutes les trajectoires d'un électron partant de  $\vec{r}$  et revenant en ce même point. En présence d'une impureté localisée, la fonction de Green comportera toutes les interactions de l'électron avec celle-ci, développement perturbatif s'exprimant alors comme une somme géométrique dont le résultat est exacte. Le fait que l'énergie  $\epsilon$  soit fixée est dû à une hypothèse de diffusion élastique de l'électron sur l'impureté. C'est en étudiant l'amplitude et la phase de la fluctuation de la densité d'états locales en présence de cette impureté que nous avons chercher à reconstruire la géométrie et la topologie des bandes.