



HAL
open science

Isolants topologiques et magnétisme

Frédéric Bègue

► **To cite this version:**

Frédéric Bègue. Isolants topologiques et magnétisme. Physique Quantique [quant-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2016. Français. NNT : 2016TOU30392 . tel-01926444

HAL Id: tel-01926444

<https://theses.hal.science/tel-01926444>

Submitted on 19 Nov 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)*

Présentée et soutenue le *09/06/2016* par :

BÈGUE FRÉDÉRIC

Isolants Topologiques et Magnétisme

JURY

MONSIEUR TIMO FLEIG
MONSIEUR DAVID CARPENTIER
MONSIEUR JÉRÔME CAYSSOL
MONSIEUR MARK OLIVER GOERBIG
MONSIEUR PIERRE PUJOL
MONSIEUR REVAZ RAMAZASHVILI

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Directeur de thèse
Directeur de thèse

École doctorale et spécialité :

SDM : Physique de la matière - CO090

Unité de Recherche :

Laboratoire de Physique Théorique de Toulouse

Directeurs de Thèse :

Pierre Pujol et Revaz Ramazashvili

Rapporteurs :

David Carpentier et Jérôme Cayssol

À ma femme.
À ma famille.

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier mes directeurs de Thèse, Pierre Pujol et Revaz Ramazashvili. Merci d'avoir accepté d'encadrer cette thèse. Vous avez su être là quand j'avais besoin d'aide, tout en me laissant la place de manœuvrer à ma guise. Le plaisir que j'ai pu éprouver pendant ces années de thèse est en grande partie lié à cette liberté et cette autonomie que vous m'avez laissées.

Merci ensuite à David Carpentier et Jérôme Cayssol qui m'ont fait l'honneur d'être rapporteurs de cette thèse, ainsi qu'à Mark Goerbig et Timo Fleig, qui ont accepté d'être examinateurs. Merci d'avoir pris le temps de vous intéresser à mon travail et d'avoir fait parti de mon jury de thèse. Merci aussi à Sylvain et Sylvie pour leur relecture attentive de ce manuscrit.

Les années passées au sein du Laboratoire de Physique Théorique ont été un vrai plaisir. Merci à tous les membres du LPT, mais aussi de l'IRSAMC dans son ensemble, qui ont permis de faire de ces années de belles années. Merci en particulier à Fabien, Nicolas, Gabriel, Matthieu, Didier et encore une fois Pierre, Revaz et Sylvain, qui ont rendu ces années agréables non seulement sur le plan scientifique, mais aussi en dehors, en particulier durant les longues conversations du déjeuner. Merci aussi à Malika et Sandrine qui nous facilitent grandement la vie au quotidien.

Merci aussi à tous les doctorants et post-docs du LPT et de l'IRSAMC, avec une mention spéciale pour Juan-Pablo, Xavier, Medha, Benjamin, Sumiran, Yasir, Helder et David. Merci bien évidemment aussi à mes différents co-bureaux avec qui j'ai eu grand plaisir à partager un bureau (et même pour l'un d'eux, une résidence...) : Marc, dont la seule présence est motivante, quand on voit à quel point on peut prendre plaisir à faire une thèse, même une fois à la retraite ; Thibaut, à cause de qui il a souvent été difficile de se concentrer (ou était-ce de ma faute ?) et que j'espère suivre dans une grande carrière de DataScientist ; et enfin Maxime, qui devrait selon moi passer moins de temps à surcharger le cluster, et plus à s'entraîner à Civilization.

Sur une note plus personnelle, merci à ma belle-famille, qui m'a accueilli à Toulouse et m'a permis de me sentir chez moi ici.

Merci enfin à ma famille, et en particulier ma mère, mon père, Audrey et Stéphane, qui ont fait de moi la personne que je suis aujourd'hui. J'ai ici l'occasion de vous remercier pour tout ce que vous avez pu faire pour moi, alors merci beaucoup.

Et pour finir, merci à ma femme, Sylvie, qui m'a supporté toutes ces années, et me supportera, je l'espère, encore longtemps. Même si quelques mots en bas de page ne pourront exprimer tout l'amour et toute la gratitude que j'éprouve pour toi : Merci pour tout.

Table des matières

Introduction	1
I Introduction aux Isolants Topologiques	3
1 Les isolants topologiques en matière condensée	4
1.1 Théorie des bandes	4
1.2 Théorème de Bloch et structure de bandes	5
1.3 Modèle de liaisons fortes	6
1.4 Isolants de bandes	8
1.5 Topologie en matière condensée	9
2 L'effet Hall quantique entier	10
2.1 L'effet Hall classique	10
2.2 Phénoménologie de l'effet Hall quantique entier	11
2.3 Une première interprétation de l'effet Hall quantique	12
2.4 L'approche de Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs	14
2.5 L'invariant de TKNN	17
3 Isolants de Chern	18
3.1 Connexion non Abélienne	18
3.2 L'effet Hall sans niveau de Landau : le modèle de Haldane	19
3.3 Correspondance <i>Bulk-Edge</i>	22
3.4 Lien avec la polarisation	24
II Isolants Topologiques Z_2	27
1 La symétrie par renversement du temps	28
1.1 Le renversement du temps en mécanique classique	28
1.2 Le renversement du temps en mécanique quantique	29
1.3 Notations pour les opérateurs anti-linéaires	29
1.4 Théorème de Kramers	30
1.5 Conséquence pour les Hamiltoniens périodiques	31
1.6 Choix de jauge	32
2 Invariant topologique Z_2	33
2.1 Polarisation de renversement du temps	33
2.2 Expression en fonction de la matrice w	35
2.3 Cas particulier de la symétrie par inversion	38
2.4 États de bord des isolants topologiques Z_2	39
2.5 Isolants topologiques Z_2 à trois dimensions	40
3 Un exemple d'isolant topologique Z_2 : le puit quantique HgTe/CdTe	41

3.1	L'Hamiltonien de BHZ	41
3.2	Diagramme de Phase	43
3.3	Construction des états de bord	44
4	Méthodes expérimentales de détection des isolants topologiques . .	45
4.1	Systèmes à 2 dimensions : mesures de transport	46
4.2	Systèmes à 3 dimensions : ARPES, STS et oscillations quantiques	48
 III Méthodes Numériques		 51
1	Obtention d'une jauge cylindrique ou lisse	52
1.1	Position du problème	52
1.2	Méthode de transport parallèle	53
1.3	Construction d'une jauge cylindrique	54
1.4	Méthode de la phase de jonction	57
1.5	Exemple d'application	58
1.6	Construction d'une jauge lisse	59
2	Construction des centres de charge des fonctions de Wannier	60
2.1	Méthode des centres de charge des fonctions de Wannier . .	61
2.2	Propriétés des centres de charge des fonctions de Wannier .	62
2.3	Exemple d'application	63
3	Construction des états de bord	64
3.1	Principe de construction	64
3.2	Méthode de construction explicite des états de bord	64
3.3	Exemple d'application	65
4	Nombre de Chern	67
4.1	Méthode de calcul direct du nombre de Chern	67
4.2	Exemple d'application	68
 IV Isolants Topologiques Antiferromagnétiques		 71
1	Introduction d'une aimantation alternée en dimension 2	72
1.1	Aimantation alternée et réseau	72
1.2	Hamiltonien de Bloch	73
1.3	Deux nouvelles symétries : Θ_{AF} et \mathcal{P}_{AF}	74
1.4	Choix de jauge	76
2	Invariant topologique antiferromagnétique	78
2.1	Travaux précurseurs à trois dimensions	78
2.2	Travaux précurseurs à deux dimensions	78
2.3	Expression analytique de l'invariant topologique à deux dimensions	80
3	Adaptation des méthodes numériques	83
3.1	Transport parallèle et phase de jonction	83
3.2	Centres de charge des fonctions de Wannier	84
3.3	Construction des états de bord	85
3.4	Calcul direct du nombre de Chern	86

Table des matières

V Applications	87
1 Le modèle de BHZ en présence d'ordre AF	88
1.1 Présentation du modèle	88
1.2 Travaux précurseurs et diagramme de Phase	89
1.3 Résultats	91
2 Brisure de la symétrie d'inversion	96
2.1 Présentation du modèle	96
2.2 Résultats	96
3 Brisure de la symétrie C_4	99
3.1 Présentation du modèle	100
3.2 Résultats	101
Conclusion et perspectives	107
Bibliographie	109

Introduction

La physique de la matière condensée étudie les propriétés macroscopiques de la matière. Elle s'appuie en particulier sur les résultats des grandes théories physiques que sont la mécanique quantique, l'électromagnétisme et la physique statistique, ainsi que sur une description microscopique de ses constituants. Un de ses objectifs est la classification des différentes phases de la matière, qui est un outil puissant pour comprendre les comportements similaires de matériaux différents.

L'étude des symétries est particulièrement utile pour classer les phases de la matière, en particulier les symétries qui sont brisées dans telle ou telle phase de la matière. Les fluides par exemple ne brisent aucune symétrie, tandis que les solides cristallins brisent les symétries de translation et de rotation continues, et ne sont invariants que sous l'action d'un groupe de symétries spatiales discret. Les aimants brisent la symétrie de rotation de spin (et de renversement du temps). Les supraconducteurs et les superfluides brisent eux une symétrie $U(1)$ liée au nombre de particules (électrons ou atomes).

La théorie de Ginzburg-Landau permet d'étudier les transitions entre différentes phases présentant des brisures de symétries différentes, en associant un paramètre d'ordre local à chaque symétrie. Le paramètre d'ordre est une grandeur choisie de sorte à être nulle dans la phase désordonnée (symétrique), et non nulle dans la phase ordonnée (qui brise la symétrie). On peut alors classer les phases de la matière en considérant la valeur (nulle ou non nulle) des différents paramètres d'ordre considérés.

En 1980, von Klitzing, Dorda et Pepper [KDP80] découvrent l'effet Hall quantique entier : un système constitué d'électrons piégés dans un plan et soumis à un champ magnétique transverse présente, à basse température, une conductivité de Hall quantifiée. Cette nouvelle phase de la matière sort du paradigme de Ginzburg-Landau. Cette phase ne brise en effet aucune symétrie spontanément (bien qu'elle brise la symétrie de renversement du temps à cause de la présence du champ magnétique), et ne peut pas être caractérisée par un paramètre d'ordre local. Elle peut cependant être caractérisée par un invariant topologique : l'invariant de TKNN [TKNdN82]. Un invariant topologique est une quantité qui ne peut pas être calculée localement, contrairement au paramètre d'ordre local, et qui caractérise l'organisation globale de la fonction d'onde. On peut de plus relier la valeur de cet invariant, à travers la correspondance "bulk-edge", au nombre d'états de bord du système, expliquant ainsi la quantification de la conductivité de Hall.

Le premier chapitre de ce manuscrit est consacré à la présentation de la notion de topologie en matière condensée. Nous y discutons un peu plus en détails l'effet Hall quantique entier et sa caractérisation, ainsi qu'une phase de la matière un

peu plus générale, qui inclut l'effet Hall quantique entier : les isolants de Chern.

Près de 25 ans après la découverte de l'effet Hall quantique, une nouvelle phase topologique de la matière est proposée d'abord théoriquement [KM05a, KM05b, FKM07, MB07], puis rapidement réalisée expérimentalement [KWB⁺07, HQW⁺08, XQH⁺09] : les isolants topologiques. Contrairement à l'effet Hall quantique et aux isolants de Chern, les isolants topologiques dits Z_2 sont symétriques par renversement du temps. De plus cette phase de la matière peut exister en deux et trois dimensions (l'effet Hall quantique est possible uniquement en deux dimensions). Il y a cependant aussi des similarités avec l'effet Hall quantique, comme la présence d'états de bord protégés topologiquement.

Dans le chapitre II de ce manuscrit, nous présentons les isolants topologiques symétriques par renversement du temps, aussi appelés isolants topologiques Z_2 , d'un point de vue théorique, et discutons un exemple d'isolant topologique donné par le modèle de Bernevig, Hughes et Zhang [BHZ06]. Nous discutons ensuite les principales méthodes expérimentales de détection des isolants topologiques à deux et trois dimensions utilisées à ce jour, et proposons une méthode, utilisant les oscillations quantiques magnétiques, pour distinguer un type particulier d'isolant topologique tridimensionnel, dit isolant topologique fort.

Dans le chapitre III, nous présentons différentes méthodes numériques pour calculer la valeur de l'invariant topologique Z_2 , s'appuyant chacune sur des propriétés différentes des isolants topologiques.

La symétrie de renversement du temps joue un rôle primordial dans la définition des isolants topologiques. Mong *et al.* [MEM10] se sont alors posé la question de ce qu'il peut se passer lorsque cette symétrie est brisée par la présence d'un ordre antiferromagnétique, dans des systèmes tridimensionnels. En effet, l'ordre antiferromagnétique brise la symétrie de renversement du temps mais la remplace par le renversement du temps complété d'une translation d'un pas de réseau. Plusieurs travaux ont suivi sur l'étude des isolants topologiques antiferromagnétiques à trois dimensions (voir par exemple [Liu13, ZL15, LZV14, FF15, FGB13]). Cela a aussi ouvert la voie à l'étude de systèmes possédant de nouvelles symétries. On appelle donc de manière générale isolants topologiques cristallins tridimensionnels, les isolants topologiques protégés par le produit du renversement du temps et d'une symétrie du réseau [LZV14, FF15, ZL15, Fu11, KF13, LDF13].

Dans le quatrième chapitre de ce manuscrit, nous nous intéressons aux isolants topologiques antiferromagnétiques, mais à deux dimensions. Nous définissons un invariant topologique pour ces systèmes et nous montrons comment les méthodes développées pour les systèmes paramagnétiques peuvent s'adapter au cas antiferromagnétique.

Enfin, dans le chapitre V, nous appliquons ces méthodes à différents modèles et nous montrons comment elles peuvent donner accès à la nature triviale ou topologique des systèmes considérés, en particulier dans des cas où il n'existait pas, avant ces travaux, de méthodes de calcul de l'invariant topologique.

Chapitre I

Introduction aux Isolants Topologiques

Sommaire

1	Les isolants topologiques en matière condensée	4
1.1	Théorie des bandes	4
1.2	Théorème de Bloch et structure de bandes	5
1.3	Modèle de liaisons fortes	6
1.4	Isolants de bandes	8
1.5	Topologie en matière condensée	9
2	L'effet Hall quantique entier	10
2.1	L'effet Hall classique	10
2.2	Phénoménologie de l'effet Hall quantique entier	11
2.3	Une première interprétation de l'effet Hall quantique	12
2.4	L'approche de Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs	14
2.5	L'invariant de TKNN	17
3	Isolants de Chern	18
3.1	Connexion non Abélienne	18
3.2	L'effet Hall sans niveau de Landau : le modèle de Haldane	19
3.3	Correspondance <i>Bulk-Edge</i>	22
3.4	Lien avec la polarisation	24

Dans ce chapitre, nous présentons la *théorie des bandes topologiques*, qui est le cadre général dans lequel s'inscrit cette thèse. Nous discutons tout d'abord les notions d'isolant et de topologie en matière condensée (1), avant de nous intéresser à la découverte de l'effet Hall quantique (2), premier exemple de phase topologique de la matière. Enfin, nous expliquons comment les notions abordées pour comprendre l'effet Hall quantique peuvent se généraliser afin de décrire une plus grande classe de phases de la matière : les isolants de Chern (3).

1 Les isolants topologiques en matière condensée

La physique de la matière condensée est une branche de la physique qui s'intéresse à des systèmes d'atomes dont le nombre peut varier de quelques centaines au nombre d'Avogadro ($\mathcal{N}_A = 6.02 * 10^{23}$) et étudie leurs propriétés macroscopiques. Il est en principe facile d'écrire un Hamiltonien décrivant le comportement des noyaux et des électrons de ces systèmes, mais les solutions exactes de l'équation de Schrödinger associée sont très rares. Il n'est cependant pas nécessaire de connaître avec précision la trajectoire de chacune des $6.02 * 10^{23}$ particules pour caractériser le système étudié. On utilise donc en général un certain nombre de modèles et d'approximations afin de rendre le problème plus abordable, tout en continuant à capturer l'essence des phénomènes physiques en jeu. Dans cette thèse, nous utilisons principalement les approximations de la théorie des bandes et des modèles de liaisons fortes que nous décrivons dans cette section [AM76]. Une fois le cadre posé, on s'intéresse à la notion d'isolant et de topologie en matière condensée.

1.1 Théorie des bandes

La théorie des bandes consiste en un ensemble d'approximations qui a permis la compréhension de nombreuses propriétés des matériaux cristallins, telles que la notion d'isolant et de conducteur, ou l'absorption optique.

L'une des premières hypothèses de la théorie des bandes est la validité de l'approximation de Born-Oppenheimer [BO27]. Elle consiste à séparer la fonction d'onde du système en une partie correspondant aux noyaux des atomes et une partie correspondant aux électrons. On suppose ensuite que, à cause du rapport important entre la masse des noyaux et la masse des électrons, on peut résoudre l'équation de Schrödinger pour les électrons en considérant les noyaux comme immobiles. Une alternative à l'approximation de Born-Oppenheimer est la méthode des pseudo-potentiels, où on considère comme fixes, non plus uniquement les noyaux, mais un ensemble composé des noyaux et des électrons proches, dits « de cœur », fortement liés au noyau. L'ensemble forme alors un potentiel effectif pour les électrons restants, dits « de valence ».

De plus, la théorie des bandes ne décrit que les états à un seul électron. En effet, on néglige les interactions électron-électron en considérant que l'Hamiltonien

1. Les isolants topologiques en matière condensée

total peut se décomposer en Hamiltoniens à un seul électron h_j sous la forme :

$$\begin{aligned} H &= \sum_{j=1}^{N_e} h_j, \\ h_j &= \frac{p_j^2}{2m_e} + V_{ions-e}(\mathbf{r}_j), \end{aligned} \quad (\text{I.1})$$

où le premier terme correspond à l'énergie cinétique de l'électron, et le deuxième à l'énergie potentielle dérivée de l'approximation de Born-Oppenheimer ou de la méthode des pseudo-potentiels. On peut ensuite construire la fonction d'onde à N_e électrons (pour une température nulle) par construction d'un déterminant de Slater [Sla29] sur les solutions de h_j . Cette approximation devient caduque dans le cas des systèmes en forte interaction, comme les isolants de Mott, où la théorie des bandes échoue à décrire correctement la fonction d'onde électronique. Nous supposons cependant que, pour les systèmes étudiés, les interactions sont suffisamment faibles pour pouvoir être négligées.

Enfin, dans le cadre de la théorie des bandes, les systèmes considérés sont supposés infinis et homogènes. Cette approximation est valide pour l'étude des propriétés de volume (*bulk*) des cristaux macroscopiques, où on suppose que les centres des atomes s'organisent en un réseau infini et homogène. En pratique, cela revient à considérer des potentiels $V_{ions-e}(\mathbf{r}_j)$ périodiques et ayant une extension spatiale infinie. La théorie des bandes peut être étendue à des systèmes infinis dans un nombre restreint de dimensions. C'est le cas par exemple pour les systèmes d'électrons à deux dimensions, qui seront l'objet principal d'étude de cette thèse.

1.2 Théorème de Bloch et structure de bandes

L'intérêt du théorème de Bloch est de tirer parti de la périodicité du potentiel ressenti par les électrons, dans le cadre de la théorie des bandes. Il stipule que les fonctions d'onde à un électron, qui sont les états propres de h_j , doivent elles aussi être périodiques, à une phase près, et peuvent donc s'écrire sous la forme :

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (\text{I.2})$$

où $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ possède au moins la périodicité du potentiel. Nous ne prouverons pas ici le théorème de Bloch.

Par construction, les $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ peuvent être obtenus comme solutions du problème aux valeurs propres

$$H_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\nabla}{i} + \mathbf{k} \right)^2 + V_{ions-e}(\mathbf{r}) \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{n,\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (\text{I.3})$$

qui respectent la périodicité du réseau. On comprend ici que n permet simplement d'indexer les différentes solutions de cette équation. On peut noter que $\epsilon_{n,\mathbf{k}}$ correspondra à l'énergie de l'état propre $\Psi_{n,\mathbf{k}}$ de h_j .

Dans cette équation (I.3), on peut aussi remarquer que \mathbf{k} joue simplement le rôle d'un paramètre continu pour $H_{\mathbf{k}}$. On peut donc choisir les indices n de manière

à obtenir des fonctions $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ et $\epsilon_{n,\mathbf{k}}$ continues en \mathbf{k} . Cela est lié à la structure de jauge de nos bandes (*cf.* [LPL⁺80, Lax74]).

Enfin, la physique doit être indépendante de la cellule unité de l'espace réciproque choisie. Le comportement des observables en un point \mathbf{k} ou $\mathbf{k} + \mathbf{K}$ (avec \mathbf{K} un vecteur du réseau réciproque) doit donc être le même. On obtient ainsi une description hautement redondante. Cela permet de se restreindre en général à des valeurs de \mathbf{k} comprises uniquement dans la première zone de Brillouin (BZ), et d'avoir une définition des $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ et $\epsilon_{n,\mathbf{k}}$ continue à l'intérieur de la BZ. Lorsque cela est possible, on écrit généralement ces fonctions sous une forme qui respecte ¹ :

$$\begin{aligned}\Psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) &= \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ \epsilon_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}} &= \epsilon_{n,\mathbf{k}},\end{aligned}\tag{I.4}$$

avec \mathbf{K} un vecteur quelconque du réseau réciproque. L'information contenue dans ces fonctions s'appelle la structure de bandes du système. On voit apparaître des bandes d'énergie admissibles, indexées par n , qui peuvent être séparées par des bandes d'énergie interdites (gap).

Il peut arriver d'étudier des systèmes non pas infinis, mais avec des conditions aux bords périodiques, en imposant :

$$\Psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \Psi(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3,\tag{I.5}$$

où les \mathbf{a}_i sont les vecteurs de base du réseau et les N_i des entiers. Dans ce cas, les propositions précédentes restent valables à ceci près que \mathbf{k} ne prend plus que des valeurs discrètes : $\mathbf{k} = \sum_i \frac{n_i}{N_i} \mathbf{b}_i$, avec \mathbf{b}_i les vecteurs de base du réseau réciproque et n_i des entiers.

1.3 Modèle de liaisons fortes

Dans les modèles de liaisons fortes, on considère de plus que les électrons sont fortement liés au noyaux, et n'interagissent que faiblement avec les états et le potentiel des atomes environnants.

On peut toujours écrire l'Hamiltonien sous la forme :

$$H = \sum_{\mathbf{R}} H_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \Delta U(\mathbf{r}),\tag{I.6}$$

où H_{at} correspond à l'Hamiltonien atomique et où la somme parcourt l'ensemble des positions \mathbf{R} des atomes et ΔU prend en compte l'ensemble des corrections au potentiel atomique nécessaires pour obtenir l'Hamiltonien réel du cristal. L'approximation du modèle des liaisons fortes consiste à supposer que ΔU est suffisamment grand pour devoir être pris en compte, mais aussi suffisamment faible pour pouvoir être traité en perturbation. Par conséquent, la fonction d'onde de

1. Nous verrons un peu plus loin que l'impossibilité d'écrire les fonctions d'onde sous cette forme (tout en conservant leur dérivabilité selon \mathbf{k}) est l'une des caractéristiques des phases topologiques.

1. Les isolants topologiques en matière condensée

l'électron sera proche de la fonction d'onde de l'orbitale atomique à laquelle il appartient. En seconde quantification, on peut donc utiliser les orbitales atomiques comme base d'états et écrire l'Hamiltonien sous la forme :

$$H = \sum_{i,j,\alpha,\alpha'} t_{i,j}^{\alpha,\alpha'} (c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\alpha'} + h.c.), \quad (\text{I.7})$$

où les $c_{i,\alpha}^\dagger$ et $c_{j,\alpha'}$ sont les opérateurs de création et d'annihilation des orbitales α et α' des atomes situés aux sites i et j du réseau formé par leurs centres. La valeur des coefficients $t_{i,j}^{\alpha,\alpha'}$ peut être obtenue en calculant le recouvrement des orbitales, avec ou sans l'action de ΔU . Pour plus de détails on peut se référer au chapitre 10 de la référence [AM76].

Enfin, on suppose en général que lorsque la distance $|i - j|$ devient grande, le recouvrement des orbitales atomiques devient suffisamment faible pour pouvoir être considéré comme nul. Ainsi, on s'intéresse souvent à des Hamiltoniens avec des éléments de matrice non nuls uniquement pour i et j plus proches voisins (notés $\langle i, j \rangle$), ou seconds voisins (notés $\langle\langle i, j \rangle\rangle$).

De manière générale, les solutions à un électron d'un tel Hamiltonien peuvent s'écrire sous la forme :

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{\alpha,j} a_{\alpha,j} c_{\alpha,j}^\dagger |0\rangle, \quad (\text{I.8})$$

où $|0\rangle$ représente l'état vide (typiquement, la fonction d'onde représentant l'ensemble des ions considérés comme fixes), et les $a_{\alpha,i}$ sont des coefficients complexes, à déterminer. On peut ajouter à cela une condition de normalisation :

$$\sum_{\alpha,j} |a_{\alpha,j}|^2 = 1. \quad (\text{I.9})$$

Le théorème de Bloch permet de se ramener à des solutions de la forme :

$$|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle, \quad (\text{I.10})$$

où $\hat{\mathbf{r}}$ est l'opérateur linéaire position (il agit dans la base des $c_{\alpha,j}^\dagger |0\rangle$ comme $\hat{\mathbf{r}} c_{\alpha,j}^\dagger |0\rangle = r_j c_{\alpha,j}^\dagger |0\rangle$, avec r_j la position du site j) et où

$$|u_{n,\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\alpha,j} a_{\alpha} c_{\alpha,j}^\dagger |0\rangle. \quad (\text{I.11})$$

Cependant, cette solution n'est pas normalisable pour un système infini.

Comme dans le paragraphe 1.2, le passage d'un système infini à des conditions aux bords périodiques se traduit par une discrétisation des valeurs possibles de \mathbf{k} . Dans ce cas, une version normalisée des états existe en fixant $\sum_{\alpha} |a_{\alpha}|^2 = 1$ et en modifiant l'équation (I.10) en :

$$|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle, \quad (\text{I.12})$$

avec $N = N_1 N_2 N_3$, où les N_i sont définis à l'équation (I.5).

Par construction, les $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ sont les états propres de l'Hamiltonien de Bloch défini comme la transformée unitaire de H :²

$$H_{\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}. \quad (\text{I.13})$$

Une fois de plus, les \mathbf{k} ne jouent que le rôle d'un paramètre. Les $H_{\mathbf{k}}$ sont donc des matrices (de taille le nombre d'orbitales considérées par cellule unité) indexées par \mathbf{k} . On retrouve donc la même structure de bandes que dans le paragraphe 1.2. On peut noter que plusieurs choix sont possibles dans la définition de la transformée de Fourier, en particulier pour les réseaux possédant plusieurs sites par cellule unité.

Dans la suite de ce manuscrit, les systèmes étudiés seront définis par leur Hamiltonien, qui seront donnés sous la forme de l'équation (I.7) ou de l'équation (I.13).

1.4 Isolants de bandes

La conductivité électrique des matériaux est une grandeur physique qui couvre l'une des plus grandes échelles de mesure à température ambiante. Elle couvre en effet 33 ordres de grandeur (de $10^{-25} S/m$ pour le teflon à $10^8 S/m$ pour le graphène). C'est par exemple le rapport entre le diamètre de l'univers observable et le diamètre typique d'une bactérie. Cela peut d'ailleurs être un enjeu expérimental (dans des expériences sur les transitions métal-isolant par exemple) quand il faut être capable de mesurer dynamiquement une quantité qui varie sur autant d'ordres de grandeur. Les matériaux cristallins peuvent être classés en trois grandes catégories, selon leur conductivité σ :

- les isolants ($\sigma < 10^{-6} S/m$),
- les semi-conducteurs ($10^{-6} S/m < \sigma < 10^5 S/m$),
- les conducteurs ($\sigma > 10^5 S/m$).

L'un des premiers grands succès de la matière condensée a été d'expliquer les raisons microscopiques de ces comportements, et d'apporter un support théorique à une phénoménologie connue depuis longtemps. En effet, les propriétés électriques d'un matériau sont fonction des populations électroniques des différentes bandes permises. À température nulle et dans l'approximation où les interactions sont négligées, les bandes sont remplies en plaçant un électron par état propre de l'Hamiltonien et en commençant par ceux de plus basse énergie. Une fois les N_e électrons disponibles placés, on définit la bande de valence comme la dernière bande d'énergie entièrement remplie, et la bande de conduction comme la bande juste au-dessus. Ces deux bandes peuvent être séparées par un gap, c'est à dire une bande d'énergie interdite car sans état électronique possible. Dans une vision simplifiée, on distingue alors plusieurs cas :

- si la bande de conduction contient des électrons, alors le matériau est conducteur. En effet, il existe des états non remplis (trous) accessible par les électrons et permettant la transmission du courant,

2. Pour être tout à fait précis, on a $H_{\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}|_{\mathbf{k}=0}$, où $|_{\mathbf{k}=0}$ représente la restriction au sous-espace $\mathbf{k} = 0$.

1. Les isolants topologiques en matière condensée

- si la bande de conduction est vide et le gap est nul, alors le matériau est conducteur. Les électrons de la bande de valence peuvent accéder aux trous de la bande de conduction et conduire le courant,
- si la bande de conduction est vide et le gap est non nul, alors le matériau est isolant. Les électrons de la bande de valence ne peuvent pas se déplacer.

A température non nulle, la répartition des électrons suit la statistique de Fermi-Dirac. Si le gap n'est pas suffisamment grand ($< 2eV$ à $300K$), l'agitation thermique peut faire passer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction, permettant ainsi l'établissement d'un courant et transformant un isolant (à $T = 0K$) en un semi-conducteur (à $T = 300K$).

Dans cette thèse on se concentrera sur la physique à très basse température (qu'on assimilera à $T = 0$), et on appellera donc isolant de bandes tout matériau dont la bande de conduction est vide, et présentant un gap fini entre bande de valence et bande de conduction.

1.5 Topologie en matière condensée

Les phénomènes physiques dont la description implique la notion de topologie sont nombreux, même si initialement le mot topologie n'a pas été employé. C'est le cas par exemple des dislocations dans les cristaux ou des vortex dans les supraconducteur ou les superfluides. Cette notion de topologie s'attache principalement à la description de défauts stables, qui sont des objet topologiques de taille finie.

La notion de topologie qui nous intéresse ici est cependant différente. Elle s'intéresse en effet à la structure globale de la fonction d'onde, qui ne peut être modifiée par des perturbations locales. Pendant longtemps, en effet, les physiciens se sont surtout intéressés à la partie énergétique de la structure de bandes, les fonctions d'ondes n'étant pas des observables. Comme nous venons de le voir, cela a permis de comprendre un certain nombre de choses, comme le caractère isolant ou conducteur des matériaux. Pourtant, de nombreuses informations sont encodées dans la topologie des fonctions d'ondes.

Étant donné un ensemble de symétries (renversement du temps, particule-trou, inversion, translation, rotation, miroir, *etc.*), on peut en effet définir une relation d'équivalence sur les Hamiltonien gappés (isolants de bandes) comme suit :

Deux Hamiltoniens gappés sont topologiquement équivalents s'ils peuvent être déformés continument l'un en l'autre sans passer par une transition métallique (et donc sans fermer le gap) tout en respectant les symétries prescrites [TKNdN82].

L'un des isolants les plus simples qu'on puisse imaginer est un isolant atomique : tous les électrons sont liés à leur noyau de manière à former des atomes, et le gap (non nul) consiste en l'énergie nécessaire pour arracher un électron à l'atome. L'Hamiltonien représentant ce système est dans la même classe d'équivalence que le vide, qui, selon la théorie quantique relativiste de Dirac, présente lui aussi une bande de valence (positrons), une bande de conduction (électrons) et un gap (énergie nécessaire à la production d'une paire). Cette classe d'équivalence est appelée topologiquement triviale.

Tous les matériaux n'appartiennent cependant pas à cette classe. L'effet Hall quantique entier, qui est discuté ici brièvement, en est un exemple. Les isolants topologiques Z_2 , qui seront discutés plus longuement en sont un autre exemple. Chacune de ces classes d'équivalence non triviale est appelée une phase topologique. L'étude des phases topologiques des Hamiltoniens gappés est appelée la théorie des bandes topologiques et s'applique non seulement aux isolants, mais aussi aux supraconducteurs [HK10, QZ11].

Dans ce manuscrit nous montrons que ce qui différencie ces phases topologiques de la phase topologiquement triviale est l'organisation de la structure de bandes, et en particulier des bandes occupées.

Nous montrons aussi qu'il est possible de définir des invariants topologiques, c'est à dire des grandeurs qui prennent la même valeur pour l'ensemble des représentants d'une classe topologique, permettant ainsi de les classifier.

Il est important de noter que la notion de phase topologique abordée ici ne concerne que les modèles d'Hamiltonien à un électron. Elle ne doit pas être confondue avec la notion d'ordre topologique dans les systèmes en interaction [Wen95], qui s'intéresse à d'autres caractères topologiques, tels que la dégénérescence de l'état fondamental [WN90] ou les propriétés de fusion des excitations [MR91, RR99, Kit06] qui n'ont de sens que pour les systèmes en interaction. L'effet Hall quantique fractionnaire est un exemple d'ordre topologique qui ne peut pas se comprendre sans prendre en compte les interactions.

Une propriété importante des phases topologiques est l'apparition d'états de bord métalliques robustes. Si deux matériaux appartenant à des phases topologiques différentes sont mis en contact (d'une façon qui respecte les symétries des systèmes³), on peut observer des états de bord apparaître sur la surface de contact. Ces états sont robustes dans le sens où ils ne peuvent disparaître sans briser les symétries du système ou sans fermer le gap dans le *bulk*. Ces états sont discutés plus en détails un peu plus loin (3.3).

2 L'effet Hall quantique entier

En 1980, von Klitzing, Dorda et Pepper découvrent expérimentalement un nouvel état de la matière : l'effet Hall quantique entier [KDP80]. C'est la première phase topologique découverte. Après un bref rappel sur l'effet Hall classique, nous discuterons de la version quantique. Nous montrerons que cette phase peut être caractérisée par un invariant topologique : l'invariant de TKNN.

2.1 L'effet Hall classique

Si on considère un gaz d'électron en deux dimensions (dans le plan xy) et qu'on lui applique un champ électrique $E = E_x \mathbf{e}_x$ on peut observer une densité de courant j_x dans la direction x . Si on ajoute un champ magnétique transverse $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$ (voir Fig.(I.1)), la force de Lorentz appliquée aux électrons se déplaçant

3. Ce commentaire prend toute son importance dans le Chapitre IV, où nous étudions des isolants topologiques antiferromagnétiques.

2. L'effet Hall quantique entier

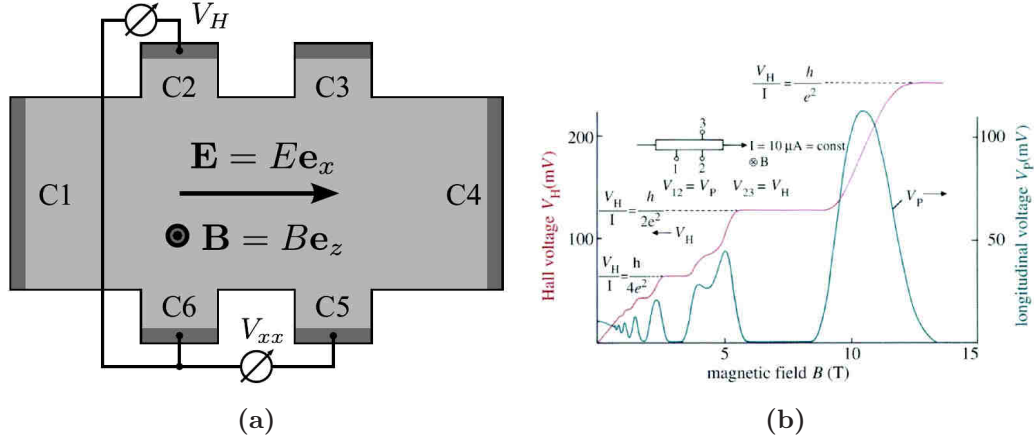


Figure I.1 – (a) Schéma d'un montage typique de mesure de l'effet Hall. Un gaz d'électrons est confiné en deux dimensions dans le plan xy . On le soumet à un champ électrique $E = E_x \mathbf{e}_x$ et un champ magnétique $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$. Les valeurs de E_x et E_y peuvent être obtenues par les mesures de V_{xx} et V_H . Figure extraite de [Sit12]. (b) Mesure de la tension longitudinale (bleu) et de la tension de Hall (rouge) en fonction du champ magnétique. Lorsque B est faible, la tension de Hall est linéaire en B , justifiant l'approche de Drude dans ce régime. Pour de plus grandes valeurs de B les effets quantiques prennent de l'importance. On observe des plateaux dans la tension de Hall, coïncidant avec une valeur de la tension longitudinale nulle. Dans ces plateaux, la tension de Hall est quantifiée (en unité de l'intensité). Figure extraite de [Kla05].

selon x les dévie selon y . Il en résulte une accumulation de charges aux bords et l'apparition d'un champ électrique E_y . À l'équilibre, l'action de ce champ permet de compenser la force de Lorentz, et le courant n'est à nouveau que selon x . On peut alors mesurer deux grandeurs d'importance : la résistivité longitudinale (ou magnétorésistance) $\rho_{xx} = \frac{E_x}{j_x}$ et la résistivité transverse (ou résistivité de Hall) $\rho_{xy} = \frac{E_y}{j_x}$.

Dans le contexte de la théorie des métaux de Drude, on peut montrer que ρ_{xy} est directement proportionnel à B et peut s'écrire :

$$\rho_{xy} = \frac{B}{en_e}, \quad (\text{I.14})$$

où e est la charge de l'électron et n_e la densité électronique.

2.2 Phénoménologie de l'effet Hall quantique entier

En 1980, von Klitzing [KDP80] réalise des mesures de conductivité de Hall sur des semi-conducteurs à base de silicone (préparés par Pepper et Dorda), à très basse température ($T \sim 1.5K$) et en présence d'un champ magnétique intense ($B \sim 15T$). Il observe des plateaux dans la conductivité de Hall en fonction du champ magnétique qui coïncident avec une valeur de la tension longitudinale nulle (*cf.* Fig.(I.1)). Dans ces plateaux, la valeur de la conductivité de Hall prend des valeurs multiples entier du quantum de conductance e^2/h . Cette quantification se révèle

de plus être indépendante des détails microscopiques tels que le semi-conducteur utilisé, la qualité du matériau ou l'intensité exacte du champ magnétique. C'est la première réalisation expérimentale d'une phase topologique, caractérisée par des propriétés non-locales, plutôt que par un paramètre d'ordre local comme dans les théorie de Ginzburg-Landau. Cela vaudra le Prix Nobel de Physique de 1985 à von Klitzing. Les expériences actuelles permettent de mesurer la quantification de la tension de Hall avec une précision de 10^{-9} .

2.3 Une première interprétation de l'effet Hall quantique

Dans la théorie de Landau, un gaz d'électrons à deux dimensions (dans le plan xy) soumis à un champ magnétique orthogonal et uniforme ($\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$) possède une structure en bandes plates (sans dispersion). Les bandes sont fortement dégénérées, et contiennent chacune un nombre d'états environ égal à

$$N_\Phi = \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (\text{I.15})$$

où Φ est la quantité de flux de champ magnétique qui traverse l'échantillon, et où $\Phi_0 = h/e$ est le quantum de flux. On peut indexer les états d'une même bande par k et les bandes par un entier n , et on obtient une énergie des états

$$\epsilon_{n,k} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{I.16})$$

Dans un plan infini, le système est donc un isolant de bande, excepté dans les cas très particuliers où le potentiel chimique coïncide exactement avec l'énergie d'un niveau de Landau.

En revanche, si on considère un système de taille finie, on voit apparaître des états localisés aux extrémités de l'échantillon et pouvant conduire le courant. D'un point de vue classique, on peut imaginer que les électrons sont bloqués sur des orbites circulaires à cause du champ magnétique. Au contraire, pour un échantillon de taille finie, les électrons rebondissent sur le bord, et peuvent ainsi se déplacer (*cf.* Fig.(I.2)). On obtient donc des états de bord pouvant conduire le courant.

D'un point de vue quantique, on peut comprendre l'apparition des états de bord en plaçant le gaz d'électron dans un potentiel confinant qui représente le caractère fini de l'échantillon. On peut alors observer que l'énergie des niveaux de Landau se "courbe" au niveau des extrémités. Ainsi, dans le *bulk*, les niveaux de Landau restent plats et le système est isolant. En revanche, sur le bord et pour n'importe quel potentiel chimique, l'énergie croise un nombre d'états égal au nombre de niveaux de Landau remplis (*cf.* Fig.(I.2)). On obtient donc un matériau isolant dans le *bulk*, mais possédant des canaux de conduction sur ses bords. Ces canaux sont orientés : sur un bord donné, les électrons ne peuvent se déplacer que dans un sens. Sur le bord opposé, ils ne peuvent se déplacer que dans le sens opposé.

Comment lier la présence d'états de bord à la quantification de la tension de Hall ? Pour fixer les idées, disons que notre échantillon est centré sur l'origine d'un repère et que l'on souhaite faire passer un courant de gauche à droite (dans le sens

2. L'effet Hall quantique entier

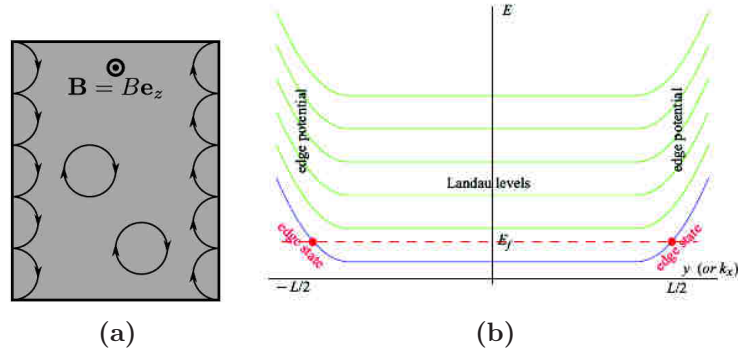


Figure I.2 – (a) Représentation classique du mouvement circulaire des électrons en présence d'un champ magnétique. Sur les bords, les électrons rebondissent et peuvent donc se propager. (b) Représentation des niveaux de Landau pour un gaz d'électron bidimensionnel en présence d'un potentiel confinant. Le potentiel "courbe" l'énergie des niveaux de Landau aux extrémités. Pour tout potentiel chimique, l'énergie de Fermi croise donc à chaque extrémité un nombre d'états égal au nombre de niveaux de Landau remplis. Figure extraite de [Teo11].

des $x > 0$). On supposera de plus que sur le bord supérieur ($y > 0$) les électrons peuvent se déplacer de gauche à droite, et de droite à gauche sur le bord inférieur ($y < 0$). Pour qu'il puisse y avoir établissement d'un courant dans l'échantillon, il faut que le transport de charge soit plus important sur le bord supérieur. L'intensité I_x , est alors donnée par la somme des contributions de ces charges excédentaires. En supposant que n_F niveaux de Landau sont remplis, à $T = 0$, on peut donc écrire :

$$I_x = e \sum_{\nu=1}^{n_F} \int \frac{dk}{2\pi} v_{\nu,k}, \quad (\text{I.17})$$

où v_k est la vitesse de groupe de l'état d'impulsion k , et où le support de l'intégrale ne prend en compte que les charges excédentaires sur le bord supérieure. La vitesse de groupe s'obtient en dérivant l'énergie : $\hbar v_k = \partial\epsilon/\partial k$. On obtient donc :

$$I_x = \frac{e}{h} \sum_{\nu=1}^{n_F} \int_{\mu_I}^{\mu_S} d\epsilon. \quad (\text{I.18})$$

Pour avoir un courant I_x qui traverse l'échantillon, il faut donc une différence $\Delta\mu$ de potentiel chimique entre les bords inférieur (μ_I) et supérieur (μ_S) telle que :

$$I_x = \frac{n_F e}{h} \Delta\mu. \quad (\text{I.19})$$

Or, cette différence de potentiel est directement reliée à la tension de Hall : $\Delta\mu = eV_H$. En substituant cela dans l'équation (I.19) on obtient une conductivité $\sigma_{xy} = I_x/V_H$ quantifiée :

$$\sigma_{xy} = n_F \frac{e^2}{h}, \quad \text{avec} \quad n_F \in \mathbb{Z}. \quad (\text{I.20})$$

Cette approche permet d'expliquer l'effet Hall quantique. Cependant, elle n'a de sens qu'en présence d'un champ magnétique (pour plus de détail, on pourra se

référer aux deux revues [Gir99] et [Goe09]). Or, dans la plupart des cas étudiés dans la suite de ce manuscrit, le champ magnétique sera nul. Nous allons donc maintenant nous intéresser à une autre approche, plus généralisable.

2.4 L'approche de Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs

Dans ce paragraphe, nous présenterons l'argument de Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs (TKNN) pour expliquer l'effet Hall quantique [TKNdN82].

On considère ici des électrons sans interactions dans le plan xy , soumis à un champ magnétique selon z . Le réseau cristallin est un réseau rectangulaire, et son action est représentée par le potentiel

$$U(x, y) = U(x + a, y) = U(x, y + b), \quad (\text{I.21})$$

avec a et b les pas du réseau selon x et y . Dans le cadre du couplage minimal, l'Hamiltonien du système à un électron peut donc s'écrire :

$$H = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + U(\mathbf{r}), \quad (\text{I.22})$$

avec $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = A_x(\mathbf{r})\mathbf{e}_x + A_y(\mathbf{r})\mathbf{e}_y$ le vecteur potentiel. Dans la jauge de Landau, $A(\mathbf{r}) = Bx\mathbf{e}_y$. On suppose de plus que le flux de champ magnétique à travers une cellule unité du réseau est une fraction rationnelle du quantum de flux, *i.e.* $\Phi_C = \frac{p}{q}\Phi_0$ ($p, q \in \mathbb{N}$). Cela implique que p quantum de flux passent dans une cellule unité magnétique de taille $qa \times b$. Une version modifiée du théorème de Bloch s'applique. L'équation (I.2) est toujours valable, mais la condition de périodicité des $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ devient [Zak64a, Zak64b]⁴ :

$$u_{n,\mathbf{k}}(x, y) = u_{n,\mathbf{k}}(x, y + b) = u_{n,\mathbf{k}}(x + qa, y)e^{-2\pi ipy/b}. \quad (\text{I.23})$$

On choisit de plus les $u_{n,\mathbf{k}}$ normalisés sur la cellule unité magnétique (CUM) :

$$\int_0^{qa} dx \int_0^b dy |u_{n,\mathbf{k}}(x, y)|^2 = 1. \quad (\text{I.24})$$

La notion de cellule unité magnétique permet de définir naturellement la zone de Brillouin magnétique (BZM), donnée par l'ensemble des $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ tels que $k_x \in [-\pi/qa, \pi/qa]$ et $k_y \in [-\pi/b, \pi/b]$.

Comme précédemment (1.2) les $u_{n,\mathbf{k}}$ sont donc les vecteurs propres normalisés de

$$H_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}) + \hbar\mathbf{k})^2 + U(\mathbf{r}), \quad (\text{I.25})$$

respectant les conditions aux bords de l'équation (I.23).

4. Cela vient du fait que, à cause du champ magnétique, les translations T_x et T_y ne commutent pas. Il faut donc utiliser le groupe abélien des translations magnétiques, défini par Zak [Zak64a] et prendre en compte les modifications nécessaires pour les fonctions d'ondes [Zak64b].

2. L'effet Hall quantique entier

Si un champ électrique peu intense est appliqué au système, le courant perpendiculaire résultant peut être calculé dans la théorie de la réponse linéaire en utilisant la formule de Nakano-Kubo. On obtient une expression de la conductivité de Hall de la forme :

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2\hbar}{\mathcal{A}} \sum_{\epsilon_\alpha < \epsilon_F < \epsilon_\beta} \frac{v_{\alpha\beta}^x v_{\beta\alpha}^y - v_{\alpha\beta}^y v_{\beta\alpha}^x}{(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)^2}, \quad (\text{I.26})$$

où ϵ_F correspond à l'énergie de Fermi (qu'on supposera au milieu d'un gap), α et β représentent des couples (\mathbf{k}, n) tels que u_α est un état d'énergie ϵ_α , $v_{\alpha\beta}^x$ et $v_{\alpha\beta}^y$ sont les éléments de matrices des composantes de l'opérateur vitesse $\mathbf{v} = (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})/m$ et \mathcal{A} l'aire du système.

Comme on s'intéresse uniquement aux éléments de matrice hors diagonaux de l'opérateur vitesse, on a :

$$v_{\alpha\beta}^x = \langle u_\alpha | \frac{-i\hbar\partial_x + eA_x}{m} | u_\beta \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle u_\alpha | \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} | u_\beta \rangle. \quad (\text{I.27})$$

D'où :

$$v_{\alpha\beta}^x = \frac{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}{\hbar} \langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_x} | u_\beta \rangle = -\frac{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}{\hbar} \langle u_\alpha | \frac{\partial u_\beta}{\partial k_x} \rangle. \quad (\text{I.28})$$

(De même en remplaçant x par y .)

En injectant cette expression dans l'équation (I.26), les différences d'énergie disparaissent et on obtient :

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2}{\mathcal{A}\hbar} \sum_{\epsilon_\alpha < \epsilon_F < \epsilon_\beta} \left(\langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_y} | u_\beta \rangle \langle u_\beta | \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_x} \rangle - \langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_x} | u_\beta \rangle \langle u_\beta | \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_y} \rangle \right). \quad (\text{I.29})$$

Une relation de fermeture et la normalisation des $u_{n,\mathbf{k}}$ permettent alors d'obtenir :

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{i\mathcal{A}\hbar} \sum_{\epsilon_\alpha < \epsilon_F} \left(\langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_x} | \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_y} \rangle - \langle \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_y} | \frac{\partial u_\alpha}{\partial k_x} \rangle \right). \quad (\text{I.30})$$

En utilisant le fait que l'énergie de Fermi est située au milieu d'un gap, on peut faire le changement :

$$\sum_{\epsilon_\alpha < \epsilon_F} \rightarrow \sum_{n \text{ occ.}} \iint_{BZM} \frac{dk_x}{2\pi/(qa)} \frac{dk_y}{2\pi/b}, \quad (\text{I.31})$$

où $n \text{ occ.}$ correspond aux bandes occupées.

De plus, le produit scalaire peut se réécrire comme une intégrale sur la cellule unité magnétique :

$$\langle u_\alpha | u_\beta \rangle = \iint_{\mathcal{A}} d^2\mathbf{r} u_\alpha^*(\mathbf{r}) u_\beta(\mathbf{r}) = \frac{\mathcal{A}}{qab} \iint_{CUM} d^2\mathbf{r} u_\alpha^*(\mathbf{r}) u_\beta(\mathbf{r}). \quad (\text{I.32})$$

Finalement, on obtient :

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{n \text{ occ.}} \iint \frac{d^2\mathbf{k}}{2\pi i} \iint d^2\mathbf{r} \left(\frac{\partial u_{\mathbf{k},n}^*(\mathbf{r})}{\partial k_x} \frac{\partial u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})}{\partial k_y} - \frac{\partial u_{\mathbf{k},n}^*(\mathbf{r})}{\partial k_y} \frac{\partial u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})}{\partial k_x} \right), \quad (\text{I.33})$$

où l'intégrale en \mathbf{k} porte sur la BZM et l'intégrale en \mathbf{r} porte sur la CUM. Le théorème de Stokes permet enfin de réécrire cette équation sous la forme :

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \sum_{n \text{ occ.}} \oint \frac{d\mathbf{k}}{2\pi i} \iint d^2\mathbf{r} u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})^* \nabla_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}). \quad (\text{I.34})$$

Avant de calculer cette grandeur pour une forme spéciale du potentiel $U(\mathbf{r})$, Thouless *et al.* proposent un argument pour la quantification de cette intégrale qui peut se comprendre comme suit.

Comme montré précédemment dans le paragraphe 1.2, il est possible d'avoir une définition continue en \mathbf{k} des $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Si on considère de plus des bandes d'états sans recouvrement (*i.e.* avec un gap entre chaque bande occupée), alors on peut montrer que les $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ne peuvent différer que d'une phase indépendante de \mathbf{r} quand on modifie \mathbf{k} d'un vecteur du réseau réciproque. En d'autres termes, pour chaque bande n il existe deux fonctions $\gamma_x^n(\mathbf{k})$ et $\gamma_y^n(\mathbf{k})$ telles que :

$$\begin{aligned} \Psi_{n,(k_x+\frac{2\pi}{qa},k_y)}(\mathbf{r}) &= e^{i\gamma_x^n(\mathbf{k})} \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ \Psi_{n,(k_x,k_y+\frac{2\pi}{b})}(\mathbf{r}) &= e^{i\gamma_y^n(\mathbf{k})} \Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{I.35})$$

L'équation (I.2) permet alors de montrer que les intégrales en \mathbf{k} de l'équation (I.34) sur les bords opposés de la BZM se compensent partiellement et on obtient, en utilisant la normalisation des $u_{n,\mathbf{k}}$:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi h} \sum_{n \text{ occ.}} \left(\gamma_y^n\left(\frac{-\pi}{qa}, \frac{-\pi}{b}\right) - \gamma_y^n\left(\frac{\pi}{qa}, \frac{-\pi}{b}\right) - \gamma_x^n\left(\frac{-\pi}{qa}, \frac{-\pi}{b}\right) + \gamma_x^n\left(\frac{\pi}{qa}, \frac{-\pi}{b}\right) \right). \quad (\text{I.36})$$

On se retrouve donc avec des différences de fonctions γ^n évaluées en des points équivalents de la MBZ (des points différant d'un vecteur du réseau réciproque). Ces différences ne peuvent être que des multiples de 2π , car, grâce à la périodicité du réseau, on peut toujours choisir :

$$e^{i\gamma_x^n(\mathbf{k}+\mathbf{K})} = e^{i\gamma_x^n(\mathbf{k})}, \quad (\text{I.37})$$

pour tout \mathbf{K} vecteur du réseau réciproque (et de même pour γ_y)

Finalement on obtient que la conductivité de Hall est quantifiée :

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \nu, \quad \nu \in \mathbb{Z}. \quad (\text{I.38})$$

On appelle ν l'invariant de TKNN.

Cela conclut notre présentation des résultats de TKNN dans leur article de 1982. En résumé, on commence par écrire la formule de Nakano-Kubo qui donne une expression de la conductivité de Hall dans le cadre de la réponse linéaire (approximation qui suppose que le champ électrique peut être traité en perturbation). Cette expression est ensuite réécrite en utilisant les fonctions de Bloch magnétiques $u_{n,\mathbf{k}}$. On obtient alors une expression de la conductivité de Hall en e^2/h fois une intégrale. Enfin, en supposant que la structure de bandes est séparée, on montre que cette intégrale ne peut prendre que des valeurs entières. Dans leur article, Thouless *et al.* calculent ensuite explicitement la valeur de la conductivité de Hall pour des modèles particuliers. Ces calculs n'ont pas été reproduits ici.

2. L'effet Hall quantique entier

2.5 L'invariant de TKNN

Dans ce paragraphe, nous discutons plus en détail les propriétés de l'invariant de TKNN.

Tout d'abord, la dénomination « invariant » vient du fait que ν est (partiellement) un invariant de jauge. En effet, considérons la transformation de jauge :

$$u_{n,\mathbf{k}} \leftarrow e^{if(\mathbf{k})} u_{n,\mathbf{k}}, \quad (\text{I.39})$$

où f est une fonction réelle, indépendante de \mathbf{r} et suffisamment lisse en \mathbf{k} . On peut montrer que cette transformation produit une modification de ν donnée par :

$$\iint_{BZM} d^2\mathbf{k} \nabla_{\mathbf{k}} \times \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = 0. \quad (\text{I.40})$$

Ainsi, ν est invariant par changement de la phase des fonctions d'ondes.

D'après l'équation (I.36), on peut aussi remarquer que l'invariant de TKNN peut s'écrire uniquement en fonction des phases γ^n et quantifie la façon dont ces phases « s'enroulent » entre certains points équivalents de la zone de Brillouin. Ainsi, ν est une mesure de l'organisation globale des fonctions d'ondes.

On peut aussi comprendre cela grâce à l'équation (I.34). Deux points de l'espace réciproque différant d'un vecteur du réseau réciproque étant équivalents, la zone de Brillouin est essentiellement un tore plutôt qu'un rectangle. Ainsi, si les $u_{n,\mathbf{k}}$ sont dérivables et monovalués sur le tore, l'équation (I.34) doit donner $\sigma_{xy} = 0$. La dérivabilité étant assurée par choix, on comprend qu'une valeur non nulle de ν interdit d'avoir des fonctions $u_{n,\mathbf{k}}$ monovaluées, empêchant ainsi d'écrire les fonctions d'ondes sous la forme (I.4).⁵

On imagine aisément que de petites modifications locales des fonctions d'ondes ne peuvent pas modifier leur organisation structurale et donc la valeur de ν . De plus, ν étant entier, on ne peut le modifier continument, et seul un événement tel que la fermeture du gap permet d'en changer la valeur. C'est donc un invariant topologique au sens défini dans le paragraphe 1.5.

En 1983, Avron, Seiler et Simon ont démontré que pour les systèmes à bandes séparées, les invariants de TKNN calculés pour chaque bande sont les seuls invariants possibles (tous les autres invariants peuvent s'écrire comme une fonction des invariants de TKNN), et que la donnée de tous les invariants de TKNN permet de déterminer entièrement la classe topologique de tels systèmes. Avron et Seiler [AS84] ont aussi été les premiers à faire le lien entre l'invariant de TKNN et la première classe de Chern d'un fibré vectoriel.

On peut en effet voir une bande n donnée comme un fibré de base la zone de Brillouin assimilée à un tore, et dont la pré-image d'un point \mathbf{k} est donnée par le sous-espace engendré par $u_{n,\mathbf{k}}$. On peut de plus définir une connexion sur ce fibré :

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i \iint d^2\mathbf{r} u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})^* \nabla_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = i \langle u_{\mathbf{k},n} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k},n} \rangle. \quad (\text{I.41})$$

5. Cette propriété, associée à une valeur non nulle de ν , est souvent appelée obstruction (obstruction à définir continument les $u_{n,\mathbf{k}}$ sur la BZ considérée comme un tore).

Cette connexion s'appelle la connexion de Berry (ou potentiel vecteur de Berry). De cette connexion, on peut dériver une courbure :

$$F_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}), \quad (\text{I.42})$$

la courbure de Berry. La première classe de Chern est alors donnée par $c_1 = \frac{1}{2\pi} F_n$.⁶ L'intégrale de la première classe de Chern sur le tore s'appelle le premier nombre de Chern (C_1) et permet de caractériser le fibré. C_1 est quantifié : il prend ses valeurs dans \mathbb{Z} . Il vaut 0 pour un fibré trivial. L'invariant de TKKN, qui peut s'écrire

$$\nu = \sum_{n \text{ occ.}} \frac{-1}{2\pi} \iint_{MBZ} F_n(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k}, \quad (\text{I.43})$$

s'interprète donc comme l'opposé du premier nombre de Chern sommé sur l'ensemble des bandes remplies.

Cela conclut notre description de l'effet Hall quantique. Dans la suite de ce chapitre, nous montrons comment le nombre de Chern, qui est au cœur de la compréhension de la quantification de la tension de Hall, peut être étendu à d'autres systèmes afin d'en étudier la topologie.

3 Isolants de Chern

Dans cette section, nous nous intéressons à la description d'une famille de phase plus large que l'effet Hall quantique : les isolants de Chern. Nous généralisons tout d'abord la définition du nombre de Chern pour des fibrés plus complexes, où les bandes ne sont pas séparées. Nous montrons ensuite que la formulation en terme de nombre de Chern permet d'étudier la topologie de systèmes plus généraux que l'effet Hall quantique comme le modèle de Haldane [Hal88]. C'est un modèle sans champ magnétique, et donc sans niveau de Landau. Enfin, nous nous intéressons aux propriétés des systèmes à nombre de Chern non nul.

3.1 Connexion non Abélienne

Une condition importante pour la quantification de l'invariant de TKKN est que les bandes soient séparées, c'est-à-dire que pour chaque \mathbf{k} , on peut indexer les $u_{n,\mathbf{k}}$ par énergie croissante en ayant $\epsilon_{n,\mathbf{k}} < \epsilon_{n+1,\mathbf{k}}$. Cela simplifie les choses en permettant de traiter chaque bande séparément. Cependant, il peut arriver que les bandes remplies soient dégénérées. Dans ce cas, on peut considérer, non pas le fibré défini par chacune des bandes séparément, mais le fibré dont la pré-image d'un point \mathbf{k} est l'espace engendré par l'ensemble des états $u_{n,\mathbf{k}}$ occupés. La connexion définie à l'équation (I.41), peut être remplacée par sa forme non Abélienne plus générale [WZ84, Mea92] :

$$A_{mn,\mu}(\mathbf{k}) = i \langle u_{m,\mathbf{k}} | \partial_{k_\mu} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (\text{I.44})$$

⁶ En mathématiques, la connexion est plus souvent définie sans le facteur i , qui apparaît alors dans la première classe de Chern.

3. Isolants de Chern

La courbure non Abélienne s'écrit alors

$$F_{mn,\mu\nu}(\mathbf{k}) = \partial_{k_\mu} A_{mn,\nu}(\mathbf{k}) - \partial_{k_\nu} A_{mn,\mu}(\mathbf{k}) - i[A_\mu(\mathbf{k}), A_\nu(\mathbf{k})]_{mn}, \quad (\text{I.45})$$

et la première classe de Chern de ce fibré est donnée par

$$c_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \text{Tr}[F_{xy}(\mathbf{k})], \quad (\text{I.46})$$

où la trace porte sur les indices de bandes.

Cette formulation a de plus l'intérêt d'être invariante de jauge [Nak03]. En effet, tout comme le déterminant de Slater, c_1 est invariant sous l'action d'une transformation unitaire $\mathcal{U} \in U(\mathcal{N})$ sur les bandes occupées ;

$$|u_{m,\mathbf{k}}\rangle \leftarrow \sum_{n \text{ occ}} U_{mn}(\mathbf{k}) |u_{n,\mathbf{k}}\rangle. \quad (\text{I.47})$$

Comme précédemment, le premier nombre de Chern est alors donné par l'intégrale de la première classe de Chern sur le tore.

On peut noter que, pour un espace de Hilbert de dimension finie, le fibré construit sur l'ensemble des états (remplis et non remplis) est toujours trivial [FC13]. Le premier nombre de Chern sommé sur l'ensemble des bandes du système est donc nul. Cela permet d'en déduire que l'étude des bandes remplies est équivalente à l'étude des bandes vides, puisqu'elles conduiront toutes deux à la même valeur du nombre de Chern en valeur absolue. Cela assure de plus de toujours pouvoir écrire l'Hamiltonien de Bloch défini à l'équation (I.13) de manière à respecter

$$H_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = H_{\mathbf{k}}. \quad (\text{I.48})$$

où \mathbf{G} est un vecteur quelconque du réseau réciproque. En effet, le nombre de Chern pour l'ensemble des bandes étant nul, il n'y a pas d'obstruction à une définition continue et périodique de H .

Enfin, le premier nombre de Chern est indépendant du choix de la courbure considérée [FC13]. On pourrait en effet envisager de définir d'autres connexions (d'autres définitions de la dérivée covariante) et donc d'autres courbures pour calculer la première classe de Chern. Ainsi, s'intéresser à la courbure de Berry est simplement une convention qui semble plus naturelle physiquement, mais d'autres choix seraient possibles pour étudier la topologie d'une structure de bandes donnée.

Dans la suite de ce manuscrit, nous étudions des systèmes à bandes séparées. L'étude de chaque bande indépendamment les unes des autres sera donc possible, et nous ne nous intéresserons pas à la connexion non Abélienne. On peut cependant noter que la majeure partie des résultats est généralisable au cas non Abélien.

3.2 L'effet Hall sans niveau de Landau : le modèle de Haldane

Comme exemple d'isolant de Chern, on considère ici un Hamiltonien de liaisons fortes de fermions sans spin sur le réseau hexagonal. Le réseau hexagonal peut être

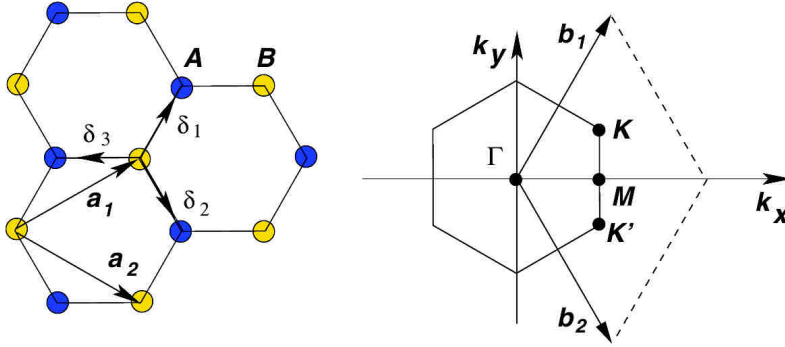


Figure I.3 – Représentation du réseau hexagonal (à gauche) et de sa zone de Brillouin (à droite). Le réseau hexagonal possède deux sites par cellule unitaire (A et B), et s’organise sur un réseau triangulaire de vecteurs de base \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 . Les δ_i sont les vecteurs reliant les plus proches voisins. \mathbf{b}_1 et \mathbf{b}_2 sont les deux vecteurs de base du réseau réciproque. (figure extraite de [CNGP⁺09])

vu comme un réseau triangulaire avec deux sites par cellule unitaire (*cf.* Fig.(I.3)). Les vecteurs de base \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 peuvent s’écrire

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}). \quad (\text{I.49})$$

Les vecteurs de base du réseau réciproque s’écrivent alors

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(3, -\sqrt{3}). \quad (\text{I.50})$$

On peut aussi définir les vecteurs premiers voisins d’un site B :

$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \delta_3 = a(-1, 0). \quad (\text{I.51})$$

Si on considère des sauts de premiers et deuxièmes voisins isotropes, l’Hamiltonien peut s’écrire dans l’espace réel :

$$H = t_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) + t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) \quad (\text{I.52})$$

où h.c. signifie hermitien conjugué, et t_1 et t_2 sont réels. Les bandes d’énergie de ce système ont la forme [Wal47] :

$$E_{\pm} = \pm t_1 \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} + t_2 f(\mathbf{k}),$$

$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right). \quad (\text{I.53})$$

On obtient un système composé de deux bandes mais possédant un gap nul aux points de haute symétrie \mathbf{K} et \mathbf{K}' donnés par : (*cf.* Fig.(I.4a))

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right). \quad (\text{I.54})$$

3. Isolants de Chern

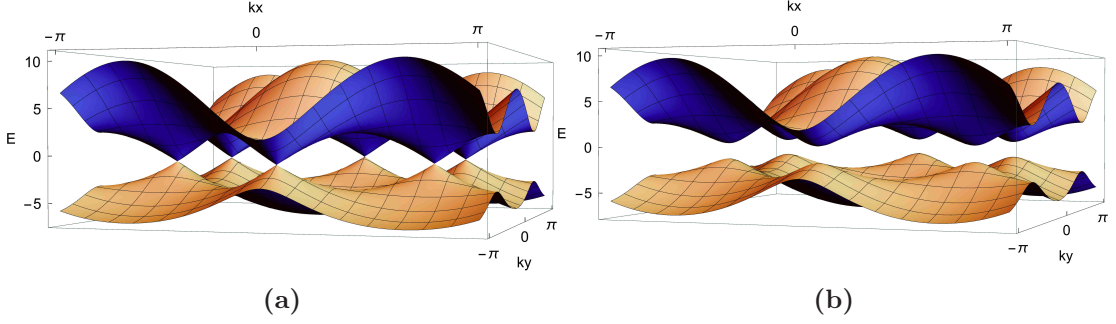


Figure I.4 – Relation de dispersion obtenue pour $a = 1$, $t_1 = -3$ et $t_2 = -0.3$. (a) $\varphi = 0$: On observe deux bandes d'énergie avec un gap nul aux points de haute symétrie \mathbf{K} et \mathbf{K}' . (b) $\varphi = \pi/5$: Le gap s'ouvre. Le matériau est isolant à demi-remplissage

L'idée de Haldane est de modifier cet Hamiltonien en rajoutant localement des flux de champ magnétique afin de briser la symétrie de renversement du temps. L'effet Aharonov-Bohm dû à ces termes est pris en compte grâce à une substitution de Peierls. On multiplie les termes de saut par une phase, de telle sorte que la phase totale accumulée sur un chemin fermé corresponde au flux de champ magnétique à travers la surface orientée définie par ce chemin.

L'Hamiltonien considéré s'écrit donc :

$$H = t_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) + t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (e^{i\varphi} c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}), \quad (\text{I.55})$$

où de nouveau t_1 et t_2 sont réels. Garder le terme de saut de premier voisin réel permet de ne pas accumuler de phase lorsqu'un électron fait le tour complet de la cellule unité. Il n'y a donc pas de champ magnétique net. En revanche la phase du terme de saut de second voisin correspond à une inhomogénéité du flux à l'intérieur de la cellule unité. (*cf.* Fig.(I.5))

L'Hamiltonien de Bloch peut s'écrire dans ce cas

$$H_{\mathbf{k}} = d_0(\mathbf{k})Id + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{I.56})$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le vecteur des matrices de Pauli agissant sur les sites A et B et :

$$\begin{aligned} d_0 &= 2t_2 \cos(\varphi) \left(2 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + \cos(\sqrt{3}k_y a) \right), \\ d_1 &= t_1 \left(2 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + \cos(k_x a) \right), \\ d_2 &= t_1 \left(2 \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) - \sin(k_x a) \right), \\ d_3 &= 2t_2 \sin(\varphi) \left(2 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) - \sin(\sqrt{3}k_y a) \right). \end{aligned} \quad (\text{I.57})$$

On peut diagonaliser cet Hamiltonien simplement (c'est une matrice 2×2) et obtenir la structure de bandes complète de ce système. On ne donnera cependant

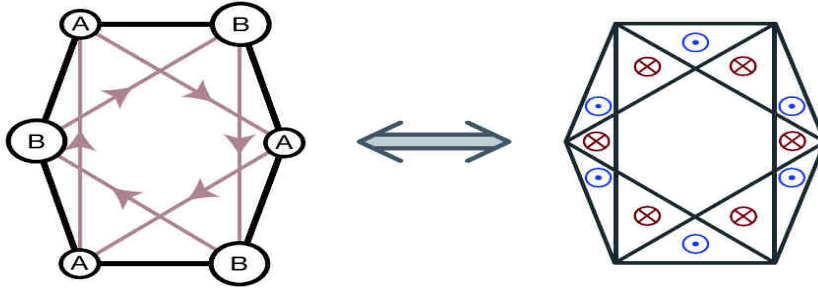


Figure I.5 – Lien entre les termes de saut obtenus par substitution de Peierls et l'inhomogénéité de flux. Sur le premier dessin, les traits noirs correspondent aux termes de saut d'amplitude t_1 , tandis que les flèches rouges correspondent aux sauts d'amplitude $e^{i\varphi}t_2$. Ces termes de saut peuvent être obtenus en présence de flux tels que ceux représentés sur le deuxième schéma. Les cercles bleus représentent un flux positif et les cercles rouges un flux négatif, de telle sorte que le flux total est nul. Figure adaptée de [JMD⁺14].

pas dans ce manuscrit la forme complète des solutions qui est lourde et sans intérêt direct ici.

On observe que cette brisure du renversement du temps ouvre un gap entre les deux bandes du système (*cf.* Fig.(I.4b)). On obtient donc bien un isolant à demi-remplissage. On peut de plus calculer la valeur du nombre de Chern de la bande inférieure grâce à l'équation (I.43). On obtient $C_1 = 1$ si $0 < \varphi < \pi$ et $C_1 = -1$ si $-\pi < \varphi < 0$. On a donc bien affaire à une phase topologique dès que $\varphi \neq 0 \bmod \pi$.

Dans le modèle original, Haldane considère de plus un terme qui brise la symétrie de parité (équivalent à un potentiel chimique différent pour chaque sous-réseau A et B). Il montre que lorsque le gap s'ouvre à cause de la brisure de parité, les deux bandes obtenues ont un nombre de Chern nul. Lorsqu'on brise à la fois la symétrie de renversement du temps et la parité, on obtient une phase triviale ou topologique suivant l'intensité relative de ces deux termes.

3.3 Correspondance *Bulk-Edge*

Une conséquence fondamentale de la classification topologique des isolants de bandes est l'existence d'états de bord métalliques à l'interface entre deux phases topologiques différentes⁷. On a vu par exemple que la conductivité de Hall pouvait se comprendre par la présence d'états de surface métalliques chiraux à l'interface entre le vide ($C_1 = 0$) et un état de Hall de nombre de Chern $C_1 \neq 0$. La notion de chiralité (sur un bord, les électrons ne peuvent se déplacer que dans une seule direction) est importante, car elle assure la robustesse de ces états de bord envers le désordre par exemple. En effet, une impureté sur le bord de l'échantillon devrait normalement rétro-diffuser les électrons. Cependant, à cause de la chiralité, il n'y a pas d'espace des phases accessible pour les électrons rétro-diffusés, rendant le processus énergétiquement défavorable. Les électrons traversent donc l'impureté

7. À condition que l'interface possède au moins les symétries qui protègent les phases topologiques considérées.

3. Isolants de Chern

sans interagir avec elle.

Intuitivement, on peut comprendre l'apparition des états de bord ainsi : les symétries considérées étant respectées, la valeur d'un invariant topologique ne peut pas changer sans fermeture du gap. Une interface doit pourtant interpoler entre deux systèmes gappés mais de structures de bandes différentes. Cela ne peut donc se faire qu'en ayant une fermeture du gap localement, sur la surface de contact.

Pour un exemple plus concret, on peut considérer des fermions de Dirac en dimension 2+1. Un système de fermions de masses positives appartient à une classe topologique différente d'un système de fermions de masses négatives. On crée alors une interface en considérant un Hamiltonien de fermion de Dirac à 2+1 dimensions dont la masse dépend de la position y . Cet Hamiltonien peut s'écrire :

$$H = -i\hbar v_F(\sigma^x \partial_x + \sigma^y \partial_y) + m(y)\sigma^z. \quad (\text{I.58})$$

On choisit $m(y) < 0$ pour $y < 0$, $m(y) > 0$ pour $y > 0$ et $\lim_{y \rightarrow \pm\infty} m(y) = \pm m$. L'invariance selon x permet de considérer k_x comme un bon nombre quantique. On peut donc chercher des solutions de la forme $\Psi_{k_x}(x, y) = e^{ik_x x} \Phi(y)$. On peut montrer que si $m(y)$ est suffisamment lisse et que sa dérivée ne s'annule pas, alors on trouve une solution de la forme [JR76, HK10, FC13]⁸ :

$$\Psi_{k_x}(x, y) = e^{iq_x x} \exp\left(-\int_0^y dy' m(y')/v_F\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \underset{y \rightarrow \pm\infty}{\simeq} e^{iq_x x} e^{-\frac{m|y|}{v_F}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.59})$$

et d'énergie $E(q_x) = \hbar v_F q_x$. Pour toute énergie dans le gap, on obtient donc un état exponentiellement localisé à l'interface $y = 0$ et de vitesse de groupe $dE/dq_x = \hbar v_F > 0$ (cf. Fig.(I.6a)). On peut aussi remarquer que la présence de l'état de bord ne dépend pas de la forme précise de $m(y)$, mais uniquement de la présence de l'interface.

Dans le cadre du modèle de Haldane, on observe que lorsque $\varphi = 0$ on obtient des cônes de Dirac dans la relation de dispersion aux points de Dirac \mathbf{K} et \mathbf{K}' . En modifiant φ , on ouvre un gap en ces points. Cela revient à donner une masse aux électrons de Dirac, de signes différents selon le point de Dirac considéré. Le cas trivial, où le gap est ouvert uniquement grâce à une brisure de la parité, correspond quant à lui à des masses de même signes. Dans les deux cas, le nombre de Chern est donné par $c_1 = \text{sign}(m(\mathbf{K})) - \text{sign}(m(-\mathbf{K}))$. Une interface entre ces deux modèles doit donc interpoler entre deux fermions de masses différentes, et on retrouve bien un état de bord, comme montré précédemment (Pour une discussion plus détaillée, on pourra se référer à [Cay13]).

On peut résoudre le modèle de Haldane qui brise le renversement du temps sur un plan semi-infini. La figure (I.6b) montre les niveaux d'énergie que l'on obtient en fonction de k_x . On observe les bandes de conduction et de valence du *bulk* à demi-remplissage, ainsi qu'une ligne d'état de bord qui connecte la bande de valence à \mathbf{K}' à la bande de conduction à \mathbf{K} . En modifiant l'Hamiltonien près de l'interface, on peut modifier la relation de dispersion des états de bord, de manière

⁸. Il est intéressant de noter que le même mécanisme de Jackiw et Rebbi [JR76] permet d'expliquer des phénomènes aussi variés que les excitations soliton dans le polyacétylène [SSH80] ou les modes d'énergie nulle dans les supraconducteurs d-wave [Hu94].

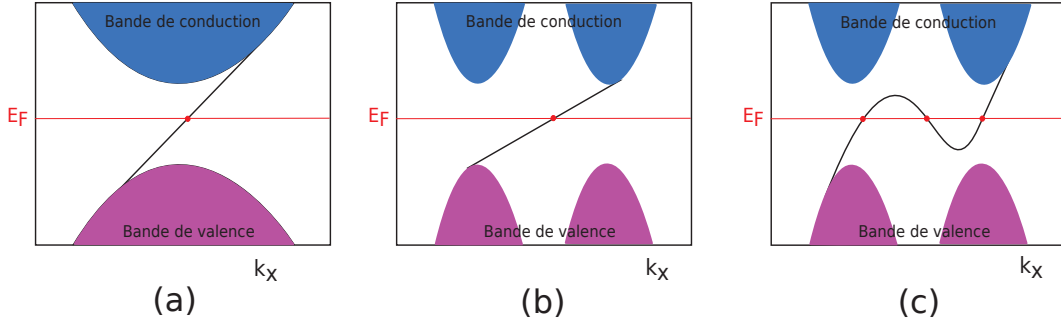


Figure I.6 – Schéma de la relation de dispersion en fonction de k_x pour différentes interfaces. (a) Interface entre électrons de Dirac de masse différentes. (b) Interface entre la phase topologique de Haldane et le vide. (c) Interface entre la phase topologique de Haldane et le vide, avec un Hamiltonien sur le bord modifié de manière à obtenir trois états de bord. La différence entre le nombre d'états de chiralité droite et gauche reste inchangée.

à avoir trois états de bord pour une énergie de Fermi donnée. (*cf.* Fig.(I.6c)) Mais la différence entre le nombre d'état de chiralité droite (N_D) et le nombre d'état de chiralité gauche (N_G) reste inchangé. La valeur de $N_D - N_G$ est déterminé par la structure topologique du *bulk* des deux matériaux mis en contact. C'est ce qu'on appelle la correspondance volume-surface (*bulk-edge*) :

$$N_D - N_G = \Delta C_1, \quad (\text{I.60})$$

où ΔC_1 est la différence de nombre de Chern des deux matériaux.

3.4 Lien avec la polarisation

Étant donné un ensemble de fonctions de Wannier construites à partir des fonctions d'onde comme⁹

$$|\mathbf{R}, n\rangle = \frac{\sqrt{N}}{(2\pi)^2} \iint_{BZ} d^2\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\Psi_{k_x, k_y, n}\rangle, \quad (\text{I.61})$$

on peut définir la polarisation P comme la somme sur les bandes occupées du centre de charge¹⁰ de la fonction de Wannier située à l'origine du réseau :

$$P = \sum_{n \text{ occ.}} \bar{\mathbf{r}}_n = \sum_{n \text{ occ.}} \langle \vec{0}, n | \hat{\mathbf{r}} | \vec{0}, n \rangle. \quad (\text{I.62})$$

La polarisation n'est pas invariante de jauge, elle est définie à un vecteur du réseau près. Une fois la jauge fixée, on peut cependant suivre l'évolution de la polarisation lorsque l'on modifie continument l'Hamiltonien. Cette variation est invariante de jauge [KSV93]. On peut montrer que la polarisation s'écrit en fonction de la connexion de Berry comme [CV09] :

$$P = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{n \text{ occ.}} \iint_{BZ} d^2\mathbf{k} \mathbf{A}_n(\mathbf{k}). \quad (\text{I.63})$$

9. On considère ici l'exemple d'un Hamiltonien sur réseau carré, de pas de réseau $a = 1$, avec des conditions aux bords périodiques et N sites.

10. équivalent au centre de masse en posant $q_e = m_e = 1$.

3. Isolants de Chern

Dans la suite, on voudra souvent considérer des systèmes possédant un bord (par exemple en $x = 0$), mais avec des conditions aux bords périodiques dans l'autre direction. Dans ce cas, une seule des deux impulsions reste un bon nombre quantique (dans cet exemple, k_y). Il peut donc être utile de définir des fonctions de Wannier hybrides :

$$|x, k_y, n\rangle = \frac{\sqrt{N_x}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x e^{-ik_x x} |u_{k_x, k_y, n}\rangle, \quad (\text{I.64})$$

où N_x correspond au nombre de site selon la direction x . Ici k_y joue simplement le rôle d'un paramètre. Comme nous l'avons vu précédemment, il n'est pas toujours possible d'écrire les fonctions d'ondes sous une forme qui respecte la périodicité de l'équation (I.4). En revanche, on peut fixer cette périodicité selon une des deux directions. On définit donc les fonctions de Wannier hybrides à partir de fonctions d'ondes qui respectent :

$$\begin{aligned} |\Psi_{k_x+2\pi, k_y, n}\rangle &= |\Psi_{k_x, k_y, n}\rangle, \\ |\Psi_{k_x, k_y+2\pi, n}\rangle &= e^{i\gamma_y^n(\mathbf{k})} |\Psi_{k_x, k_y, n}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{I.65})$$

Pour une valeur donnée de k_y , on peut définir de nouveau la polarisation électrique selon \vec{x} ,¹¹ comme la somme sur toutes les bandes remplies de la position du centre de charge des fonctions de Wannier associées à la cellule unité à l'origine :

$$P_{k_y} = \sum_{n \text{ occ.}} \bar{x}_{n, k_y} = \sum_{n \text{ occ.}} \langle 0, k_y, n | \hat{\mathbf{x}} | 0, k_y, n \rangle. \quad (\text{I.66})$$

Comme précédemment, P_{k_y} n'est pas invariant de jauge, mais ses variations entre $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$ sont bien définies. En effet, dans ce cas, l'équation (I.63) se réécrit

$$P_{k_y} = \frac{1}{2\pi} \sum_{n \text{ occ.}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x A_{n, k_y}(k_x), \quad (\text{I.67})$$

avec :

$$A_{n, k_y}(k_x) = i \langle u_{k_x, k_y, n} | \nabla_{k_x} | u_{k_x, k_y, n} \rangle. \quad (\text{I.68})$$

La variation de polarisation s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \Delta P = P_{\pi} - P_{-\pi} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n \text{ occ.}} \left(\int_{-\pi}^{\pi} dk_x A_{n, \pi}(k_x) - \int_{-\pi}^{\pi} dk_x A_{n, -\pi}(k_x) \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n \text{ occ.}} \oint_{BZ} d\mathbf{k} A_n(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (\text{I.69})$$

qui n'est autre, grâce au théorème de Green-Stokes, que le premier nombre de Chern calculé sur les bandes remplies.

La quantification du nombre de Chern et donc de ΔP peut se comprendre ainsi : les points $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$ étant équivalents, la physique décrite doit être la même. La polarisation doit donc être égale en ces deux points, à l'invariance de

11. L'appellation polarisation pour des fonctions de Wannier hybrides est un abus de langage qu'on fera souvent. On peut cependant aussi s'y référer comme au centre de charge des fonctions de Wannier (WCC) noté, pour une bande n , \bar{x}_{n, k_y}

jauge près. Or cette invariance de jauge correspond ici à un nombre entier de fois le pas du réseau a qu'on a choisi égal à 1. Nécessairement, on obtient $\Delta P \in \mathbb{Z}$.

Ainsi, une manière d'obtenir le nombre de Chern serait de calculer la polarisation (à partir des centres de charge des fonctions de Wannier) en fonction de k_y et de suivre son évolution lorsque k_y parcourt la zone de Brillouin. Ce sera l'idée principale derrière une des méthodes numériques présentées dans le Chapitre III.

Chapitre II

Isolants Topologiques Z_2

Sommaire

1	La symétrie par renversement du temps	28
1.1	Le renversement du temps en mécanique classique . . .	28
1.2	Le renversement du temps en mécanique quantique . . .	29
1.3	Notations pour les opérateurs anti-linéaires	29
1.4	Théorème de Kramers	30
1.5	Conséquence pour les Hamiltoniens périodiques	31
1.6	Choix de jauge	32
2	Invariant topologique Z_2	33
2.1	Polarisation de renversement du temps	33
2.2	Expression en fonction de la matrice w	35
2.3	Cas particulier de la symétrie par inversion	38
2.4	États de bord des isolants topologiques Z_2	39
2.5	Isolants topologiques Z_2 à trois dimensions	40
3	Un exemple d'isolant topologique Z_2 : le puit quantique HgTe/CdTe	41
3.1	L'Hamiltonien de BHZ	41
3.2	Diagramme de Phase	43
3.3	Construction des états de bord	44
4	Méthodes expérimentales de détection des isolants topologiques	45
4.1	Systèmes à 2 dimensions : mesures de transport	46
4.2	Systèmes à 3 dimensions : ARPES, STS et oscillations quantiques	48

Dans le premier chapitre, nous avons vu qu'il était possible de classer topologiquement les isolants de bandes par le calcul d'un invariant topologique : le premier nombre de Chern. Une condition nécessaire à l'obtention d'un nombre de Chern non nul est la brisure de la symétrie de renversement du temps (TR). En effet, dans l'effet Hall quantique la symétrie TR est brisée par la présence d'un champ magnétique extérieur, tandis que dans le modèle de Haldane ce rôle est joué par un flux alterné. Dans ce chapitre, nous nous intéressons maintenant aux isolants symétriques par renversement du temps. Leur nombre de Chern sera donc nul, mais nous verrons qu'il est possible de séparer ces systèmes en deux classes topologiques distinctes, différenciées par un invariant topologique Z_2 . Dans la première section nous discutons les propriétés de l'opérateur renversement du temps. Nous nous attachons ensuite à donner une expression de cet invariant Z_2 dans un cas général, puis en présence d'une symétrie supplémentaire, l'inversion. Enfin, nous discutons un exemple d'isolant topologique Z_2 : le puits quantique HgTe/CdTe (tellurure de mercure/tellurure de cadmium) représenté par l'Hamiltonien de Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) [BHZ06], avant de présenter les principales méthodes expérimentales d'identification des isolants topologiques.

1 La symétrie par renversement du temps

Dans cette section, nous nous intéressons à la symétrie de renversement du temps et à ses conséquences.

1.1 Le renversement du temps en mécanique classique

L'opération de renversement du temps, comme son nom l'indique, consiste à effectuer la transformation $t \rightarrow -t$. Classiquement, cette opération n'a donc pas de conséquence pour les positions, mais changera les vitesses en leur opposée. Ainsi, l'équation du mouvement d'une particule de position \vec{r} soumise à une force \vec{F}

$$m\ddot{\vec{r}}(t) = \vec{F}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}; t), \quad (\text{II.1})$$

se transforme sous action du renversement du temps en

$$m\ddot{\vec{r}}(-t) = \vec{F}(\vec{r}, -\dot{\vec{r}}; -t). \quad (\text{II.2})$$

L'opération renversement du temps sera une symétrie si

$$\vec{F}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}; t) = \vec{F}(\vec{r}, -\dot{\vec{r}}; -t). \quad (\text{II.3})$$

C'est par exemple le cas de la force gravitationnelle. Si on considère par ailleurs la force de Lorentz

$$\vec{F} = q(\vec{E}(\vec{r}) + \dot{\vec{r}} \times \vec{B}(\vec{r})), \quad (\text{II.4})$$

la symétrie par renversement du temps impose

$$\vec{E}(\vec{r}; t) = \vec{E}(\vec{r}; -t) \quad \text{et} \quad \vec{B}(\vec{r}; t) = -\vec{B}(\vec{r}; -t). \quad (\text{II.5})$$

Un champ magnétique extérieur uniforme et indépendant du temps brise donc la symétrie par renversement du temps, comme c'est le cas dans l'effet Hall quantique.

1. La symétrie par renversement du temps

1.2 Le renversement du temps en mécanique quantique

En mécanique quantique on peut décrire l'action du renversement du temps par un opérateur Θ . L'action du renversement du temps sur les positions et les vitesses impose :

$$[\Theta, \mathbf{X}] = \Theta\mathbf{X} - \mathbf{X}\Theta = 0 \quad \text{et} \quad \{\Theta, \mathbf{P}\} = \Theta\mathbf{P} + \mathbf{P}\Theta = 0. \quad (\text{II.6})$$

Or, ceci n'est compatible avec les relations de commutations canoniques

$$[X_n, P_m] = i\hbar\delta_{n,m}, \quad (\text{II.7})$$

que si Θ est un opérateur anti-linéaire, *i.e.* :

$$\Theta(\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = \lambda_1^*\Theta|\Psi_1\rangle + \lambda_2^*\Theta|\Psi_2\rangle, \quad (\text{II.8})$$

et même anti-unitaire ($\Theta^\dagger = \Theta^{-1}$) d'après le théorème de Wigner.

On peut toujours écrire un opérateur anti-unitaire comme le produit d'un opérateur unitaire et d'un opérateur de conjugaison complexe, où on appelle opérateur de conjugaison complexe dans la base $\{|\phi_i\rangle\}$, noté $K_{\{|\phi_i\rangle\}}$, l'opérateur anti-unitaire vérifiant

$$\forall i, \quad K_{\{|\phi_i\rangle\}}|\phi_i\rangle = |\phi_i\rangle. \quad (\text{II.9})$$

Le renversement du temps devant inverser le sens des spins ($\{\Theta, \mathbf{S}\} = 0$) on choisit en général

$$\Theta = e^{-i\pi S_y/\hbar} K_{\{|\mathbf{r}, S_z\rangle\}}, \quad (\text{II.10})$$

où la base $\{|\mathbf{r}, S_z\rangle\}$ est donnée par les vecteur propres communs de l'opérateur position $\hat{\mathbf{r}}$ et de l'opérateur S_z . Pour des spins 1/2, cette expression peut se simplifier en :

$$\Theta = -is_y K_{\{|\mathbf{r}, S_z\rangle\}}, \quad (\text{II.11})$$

où s_y est la deuxième matrice de Pauli agissant sur l'espace des spins.

1.3 Notations pour les opérateurs anti-linéaires

Si A est un opérateur anti-linéaire, $\langle\chi|(A|\phi\rangle)$ est une fonctionnelle anti-linéaire de ϕ , donc son conjugué est une fonctionnelle linéaire. On peut donc trouver $\langle\chi'|$ tel que

$$\langle\chi'|\phi\rangle = \left(\langle\chi|(A|\phi\rangle)\right)^*. \quad (\text{II.12})$$

Cela permet de définir l'action de A sur un bra par :

$$\left(\langle\chi|A\right) = \langle\chi'|, \quad (\text{II.13})$$

et on obtient

$$\left(\langle\chi|A\right)|\phi\rangle = \left(\langle\chi|(A|\phi\rangle)\right)^*. \quad (\text{II.14})$$

On observe donc que, contrairement aux opérateurs linéaires, la notation bra/ket n'est pas entièrement adaptée aux opérateurs anti-linéaires, pour lesquels l'utilisation de parenthèses est nécessaire. Dans la suite de ce manuscrit, l'omission des parenthèses signifiera que l'opérateur anti-linéaire agit sur le ket qui le suit.

Comme pour les opérateurs linéaires, on définit l'adjoint A^\dagger d'un opérateur anti-unitaire A par

$$(A|\phi\rangle)^\dagger = (\langle\phi|A^\dagger). \quad (\text{II.15})$$

On obtient alors le formulaire :

$$\begin{aligned} \langle\chi|A|\phi\rangle &= (\langle\chi|A)|\phi\rangle^* = (\langle\phi|A^\dagger|\chi\rangle)^* = \langle\phi|A^\dagger|\chi\rangle, \\ (\langle\chi|A)|\phi\rangle &= \langle\chi|A|\phi\rangle^* = (\langle\phi|A^\dagger|\chi\rangle)^* = \langle\phi|A^\dagger|\chi\rangle^*. \end{aligned} \quad (\text{II.16})$$

1.4 Théorème de Kramers

Dans ce manuscrit, on s'intéresse à des fonctions d'onde fermioniques à une particule de spin 1/2. Le théorème de Kramers s'applique donc.

Théorème de Kramers :

Les niveaux d'énergie d'un système invariant par renversement du temps sont tous dégénérés si le système comprend un nombre impair de spins demi-entiers.

L'argument central pour prouver le théorème de Kramers est que pour un système comprenant un nombre impair de spins 1/2, et donc en particulier pour des systèmes à un électron, le carré de l'opérateur renversement du temps vaut moins l'identité :

$$\Theta^2 = -Id. \quad (\text{II.17})$$

Nous allons démontrer ici un théorème un peu plus général :

Soit A un opérateur anti-unitaire qui commute avec l'Hamiltonien H d'un système et dont le carré vaut $A^2 = e^{i\phi}$ avec $\phi \neq 0 \pmod{2\pi}$. Alors, pour tout $|\Psi\rangle$ vecteur propre de H , $A|\Psi\rangle$ est aussi vecteur propre de H pour la même valeur propre ; et on a $\langle\Psi|A|\Psi\rangle = 0$.

Le fait que $A|\Psi\rangle$ soit un état propre de H s'obtient directement de la commutativité de A et de H et du fait que les valeurs propres de H , les énergies, sont réelles :

$$HA|\Psi\rangle = AH|\Psi\rangle = AE|\Psi\rangle = EA|\Psi\rangle. \quad (\text{II.18})$$

L'orthogonalité, quant à elle, découle des égalités suivantes :

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \langle\Psi|A^\dagger AA|\Psi\rangle = \langle\Psi|A^\dagger e^{i\phi}|\Psi\rangle = e^{-i\phi}\langle\Psi|A^\dagger|\Psi\rangle = e^{-i\phi}\langle\Psi|A|\Psi\rangle. \quad (\text{II.19})$$

La première égalité est due à l'anti-unitarité de A . La deuxième est une conséquence directe de l'hypothèse sur le carré de A . La troisième vient de l'anti-linéarité. Et la dernière vient de l'équation (II.16). On observe donc que si $e^{i\phi} \neq 1$, alors nécessairement $\langle\Psi|A|\Psi\rangle = 0$.

1. La symétrie par renversement du temps

1.5 Conséquence pour les Hamiltoniens périodiques

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 1.2 du chapitre I, lors de l'étude d'Hamiltoniens périodiques, il est souvent préférable de travailler dans la base des ondes planes $|\mathbf{k}\rangle$ plutôt que dans la base des positions $|\mathbf{r}\rangle$.

En remarquant que

$$K_{\{\mathbf{r}, S_z\}} = \sum_{\mathbf{k}} |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| K_{\{\mathbf{k}, S_z\}}, \quad (\text{II.20})$$

on peut réécrire l'opérateur de renversement du temps comme

$$\Theta = -is_y \sum_{\mathbf{k}} |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| K_{\{\mathbf{k}, S_z\}}. \quad (\text{II.21})$$

Dans la suite, on omettra souvent de préciser l'indice de l'opérateur conjugaison complexe, lorsque le contexte sera suffisamment clair.

Nous avons vu que l'étude de l'Hamiltonien de Bloch $H_{\mathbf{k}}$ défini à l'équation (I.13) est suffisante pour définir la structure de bandes. En effet, on peut construire les états propres de l'Hamiltonien (les $|\Psi_{\mathbf{k}, n}\rangle$) à partir des états propres de l'Hamiltonien de Bloch (les $|u_{\mathbf{k}, n}\rangle$). Dans le cadre du modèle des liaisons fortes, $H_{\mathbf{k}}$ est une matrice dépendant de \mathbf{k} et de taille $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$, où \mathcal{N} est le nombre d'orbitales atomiques considérées par cellule unité (\mathcal{N} prend donc aussi en compte la présence éventuelle de plusieurs sous-réseaux). De manière générale, on peut alors écrire l'opérateur renversement du temps sous la forme :

$$\Theta = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Theta} |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| K_{\{\mathbf{k}, S_z\}}, \quad (\text{II.22})$$

où $\hat{\Theta}$ est une matrice agissant sur l'espace des orbitales atomiques. La condition d'invariance par renversement du temps devient alors :

$$\hat{\Theta} H_{\mathbf{k}}^* \hat{\Theta}^{-1} = H_{-\mathbf{k}}. \quad (\text{II.23})$$

En observant que Θ envoie un état de vecteur d'onde \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$, on comprend que certains points de la zone de Brillouin joueront un rôle particulier : les points $\mathbf{\Gamma}$ tels que $-\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma} + \mathbf{G}$ avec \mathbf{G} un vecteur du réseau réciproque. On les appelle vecteurs d'onde invariants par renversement du temps (TRIM). En deux dimensions, les TRIM sont au nombre de quatre (à des vecteurs du réseau réciproque près). En ces points, le théorème de Kramers assure que les états propres de H viennent par paires dégénérées qu'on peut ré-indexer $|\Psi_{\alpha, \mathbf{\Gamma}}^I\rangle$ et $|\Psi_{\alpha, \mathbf{\Gamma}}^{II}\rangle$, où α prend ses valeurs dans $\llbracket 1, \mathcal{N}/2 \rrbracket$.

On peut étendre la redéfinition des états propres à l'ensemble de la zone de Brillouin en écrivant les états propres de l'Hamiltonien sous forme de paires d'états $|\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}^I\rangle$ et $|\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}^{II}\rangle$. On supposera dans la suite que les paires de bandes sont séparées : en chaque point \mathbf{k} il existe un gap fini entre la paire de bandes α et toute autre paire de bandes α' (sauf évidemment dans le cas spécial des transitions de phase). Cela permet de traiter chaque paire de bandes séparément et simplifie la présentation. Les résultats sont généralisables à des bandes non séparées en utilisant la courbure de Berry non Abélienne (*cf.* I 3.1).

L'ensemble des grandeurs définies au chapitre précédent et portant un indice de bande n peuvent être redéfinies simplement en fonction des nouveaux indices α et I/II .

1.6 Choix de jauge

Dans un système invariant par renversement du temps, pour une paire de bandes α donnée, le premier nombre de Chern total est nul. En effet, la courbure de Berry est impaire sous renversement du temps :

$$\Theta : F(\mathbf{k}) \rightarrow -F(-\mathbf{k}). \quad (\text{II.24})$$

La symétrie par renversement du temps assure donc que $F(\mathbf{k}) = -F(-\mathbf{k})$ et donc

$$C_1 = \sum_{n \text{ occ.}} \frac{1}{2\pi} \iint_{BZ} F_n(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} = 0. \quad (\text{II.25})$$

On peut donc toujours trouver $|\tilde{\Psi}_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ et $|\tilde{\Psi}_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle$, définis continument sur la zone de Brillouin vue comme un tore (donc respectant l'équation I.4) et tels que, en tout point \mathbf{k} , l'espace vectoriel engendré par $|\tilde{\Psi}_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ et $|\tilde{\Psi}_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle$ soit égal à celui engendré par $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ et $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle$. Le nombre de Chern associé à chaque bande (I et II) sera donc lui aussi nul. Cependant les $|\tilde{\Psi}\rangle$ ne sont pas nécessairement des états propres de H . On appelle un tel choix de jauge une jauge lisse.

Un autre choix possible est de respecter la symétrie par renversement du temps en choisissant des $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ et $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle$ états propres de H et respectant

$$\begin{aligned} |\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle &= -e^{i\chi_{\alpha,\mathbf{k}}}\Theta|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle, \\ |\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^{II}\rangle &= e^{i\chi_{\alpha,-\mathbf{k}}}\Theta|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle. \end{aligned} \quad (\text{II.26})$$

On appelle cette jauge la jauge symétrique.

Dans le cas des Hamiltoniens conservant S^z , les spins *up* et *down* sont séparés. On peut alors choisir les spins *up* comme bande I et les spins *down* comme bande II , le renversement du temps changeant *up* en *down*. Cela permet d'avoir une vision plus intuitive de la jauge symétrique. Attention cependant, en présence d'un couplage spin orbite, S^z n'est généralement pas conservé.

Pour les isolants triviaux, il est en général possible de respecter les deux jauges à la fois. Nous verrons qu'il existe une classe d'isolants non triviaux, caractérisée par un invariant topologique Z_2 , pour laquelle respecter les deux jauges en même temps n'est pas possible. Dans le même esprit que pour un isolant de Chern, nous verrons qu'une valeur non nulle de cet invariant est donc une obstruction à définir une jauge à la fois lisse et symétrique.

Il est toutefois possible de définir une troisième jauge¹, plus contrainte que la jauge symétrique, mais toujours valable pour les isolants triviaux et topologiques. Cette jauge, qu'on appelle la jauge cylindrique, est une jauge symétrique qui est de plus continue sur la zone de Brillouin vue comme un cylindre (respectant donc l'équation (I.65)).² La jauge cylindrique est intéressante, car, dans cette jauge, la discontinuité empêchant d'avoir une jauge lisse a été repoussée aux bords du

1. La possibilité de construire une telle jauge sera prouvée a posteriori dans la section 1 du chapitre III, où elle sera construite explicitement.

2. Attention, la définition de la jauge cylindrique est légèrement différente de celle de la référence [SV12].

2. Invariant topologique Z_2

cylindre (à $k_y = \pm\pi$). Comme nous le verrons dans le Chapitre III, on peut donc déterminer la topologie du système en s'intéressant à la présence d'une discontinuité entre les deux extrémités du cylindre.

En résumé, il existe trois jauges importantes continues sur la BZ :

- **la jauge lisse**, qui est continue sur la BZ vue comme un tore,
- **la jauge symétrique**, qui respecte l'équation (II.26),
- **la jauge cylindrique**, qui est symétrique est respecte en plus (I.65) (les bandes I et II sont séparées et continues sur la BZ vue comme un cylindre).

Dans le cas topologique, la première jauge n'est pas compatible avec les deux autres.

2 Invariant topologique Z_2

Dans cette section nous utiliserons les propriétés de l'invariance par renversement du temps, et en particulier l'écriture des états propre de l'Hamiltonien sous forme de paires de bandes (Eq.(II.26)) pour définir un invariant topologique Z_2 . Comme le nombre de Chern, cet invariant sera relié à la polarisation, et caractérisera la topologie du système.

2.1 Polarisation de renversement du temps

Comme dans le paragraphe 3.4 du chapitre I, on considère ici un modèle de liaisons fortes sur un réseau carré de pas $a = 1$. Sur ce réseau, les TRIM sont donnés par $\Gamma = (\Gamma_x, \Gamma_y)$ avec $\Gamma_x, \Gamma_y \in \{0, \pi\}$. On traite de plus asymétriquement les directions \mathbf{x} et \mathbf{y} en définissant les fonctions de Wannier hybrides comme dans l'équation (I.64).

La polarisation définie à l'équation (I.67) peut être décomposée en deux contributions, venant des bandes indexées par I et II :

$$P_{k_y} = P_{k_y}^I + P_{k_y}^{II}, \quad (\text{II.27})$$

où

$$P_{k_y}^s = \sum_{\alpha \text{ occ.}} \langle 0, k_y, \alpha, s | \hat{\mathbf{x}} | 0, k_y, \alpha, s \rangle, \quad s \in \{I, II\}. \quad (\text{II.28})$$

Comme précédemment, on peut réécrire les polarisations partielles en fonction de la connexion de Berry sous la forme :

$$P_{k_y}^s = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha \text{ occ.}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x A_{\alpha, k_y}^s(k_x), \quad (\text{II.29})$$

avec

$$A_{\alpha, k_y}^s(k_x) = i \langle u_{\alpha, k_x, k_y}^s | \nabla_{k_x} | u_{\alpha, k_x, k_y}^s \rangle. \quad (\text{II.30})$$

En utilisant les propriétés de l'opérateur renversement du temps et en se plaçant dans une jauge symétrique (ou cylindrique), on peut montrer que

$$A_{\alpha, -k_y}^I(-k_x) = A_{\alpha, k_y}^{II}(k_x) + \nabla_{k_x} \chi_{\alpha, \mathbf{k}}. \quad (\text{II.31})$$

La différence de polarisation définie à l'équation (I.69) (et qui correspond au premier nombre de Chern) se réécrit alors

$$\Delta P = P_\pi - P_{-\pi} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha \text{ occ.}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \nabla_{k_x} (\chi_{\alpha, k_x, -\pi} - \chi_{\alpha, k_x, \pi}). \quad (\text{II.32})$$

Dans une jauge cylindrique, on peut aussi montrer que :

$$N_\chi = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha \text{ occ.}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \nabla_{k_x} \chi_{\alpha, k_x, k_y} \quad (\text{II.33})$$

est un entier indépendant de k_y . On obtient alors

$$\Delta P = 0. \quad (\text{II.34})$$

Du point de vue des isolants de Chern, un système invariant par renversement du temps est donc bien trivial, comme montré dans le paragraphe 1.6, les bandes I et II se compensant pour donner un nombre de Chern égal à zéro. On peut cependant se demander quelle information est contenue, non pas dans la somme, mais dans la différence des polarisations partielles $P_{k_y}^I$ et $P_{k_y}^{II}$.

Fu et Kane répondent à cette question en 2006 [FK06]. Ils définissent la polarisation de renversement du temps comme

$$P_{k_y}^\ominus = P_{k_y}^I - P_{k_y}^{II}. \quad (\text{II.35})$$

Ils expliquent que tout comme la polarisation P , P^\ominus n'est pas invariant de jauge par lui-même, mais que la différence de polarisation de renversement du temps entre $k_y = 0$ et $k_y = \pi$ est invariante. Ils définissent donc un invariant topologique Z_2 par :

$$\Delta = P_\pi^\ominus - P_0^\ominus \text{ mod } 2. \quad (\text{II.36})$$

L'équation II.31, une fois intégrée, donne :

$$P_{k_y}^I = P_{-k_y}^{II} + N_\chi. \quad (\text{II.37})$$

Cela permet de montrer que, **dans une jauge cylindrique**, une définition équivalente de Δ est :

$$\Delta = P_\pi^I - P_{-\pi}^I \text{ mod } 2 = P_{-\pi}^{II} - P_\pi^{II} \text{ mod } 2. \quad (\text{II.38})$$

qui n'est autre que la parité du premier nombre de Chern associé aux bandes indexées I (ou II). On comprend donc ici l'impossibilité d'avoir une jauge lisse et symétrique dans le cas d'un isolant topologique. En effet, avoir une jauge lisse implique d'avoir un nombre de Chern nul pour chacune des deux bandes, puisqu'il n'y a pas d'obstruction. Mais si la jauge est aussi cylindrique, alors l'équation (II.38) nous donne $\Delta = 0$. On en déduit finalement que si $\Delta = 1$, alors on ne peut avoir une jauge à la fois lisse et symétrique. Au même titre qu'un nombre de Chern non nul, un invariant Z_2 non nul définit bien une obstruction.

Dans le cas d'un Hamiltonien conservant S^z , on obtient

$$\Delta = c^\uparrow \text{ mod } 2 = c^\downarrow \text{ mod } 2 = \frac{c^\uparrow - c^\downarrow}{2} \text{ mod } 2, \quad (\text{II.39})$$

où c^\uparrow (resp. c^\downarrow) correspond au nombre de Chern calculé pour les états de spin *up* (resp. *down*) occupés [SWSH06].

2.2 Expression en fonction de la matrice w

Dans leur article de 2006, Fu et Kane montrent de plus que l'invariant topologique peut se réécrire en fonction de la matrice w définie par³ :

$$w(\mathbf{k})_{mn} = \langle \Psi_{m,-\mathbf{k}} | \Theta | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (\text{II.40})$$

où m et n parcourent les bandes remplies.

Cette matrice possède trois propriétés importantes :

$$\begin{aligned} w(\mathbf{k})^\dagger w(\mathbf{k}) &= Id, \\ w(-\mathbf{k})^t &= -w(\mathbf{k}), \\ \det[w(-\mathbf{k})] &= \det[w(\mathbf{k})]. \end{aligned} \quad (\text{II.41})$$

Les deux premières égalités s'obtiennent en utilisant l'anti-unitarité de Θ et le fait que $\Theta^2 = -1$. La troisième équation est une conséquence directe de la deuxième et du fait que w est une matrice de dimension paire.

Associée à l'unitarité de w cette troisième équation a un corollaire important : $\det[w(\mathbf{k})]$ est continue et n'a pas d'enroulement sur la zone de Brillouin vue comme un tore. Pour prouver cela, on montre tout d'abord que, étant donnée une définition continue des $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ (et donc de $w(\mathbf{k})$) pour tout $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$, alors $\det[w(\mathbf{k})]$ est continue sur la zone de Brillouin vue comme un tore. Cela vient du fait que, même si l'ensemble des $\{|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle\}_n$ et l'ensemble des $\{|\Psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle\}_n$, pour n parcourant les bandes remplies, peuvent être différents, ils sont reliés par un changement de base unitaire. Le déterminant ne dépendant pas de la base unitaire choisie, on a $\det[w(\mathbf{k})] = \det[w(\mathbf{k} + \mathbf{G})]$. L'anti-unitarité impose de plus que le déterminant de la matrice w est un nombre complexe de module 1. Il reste donc à montrer que, pour un chemin C quelconque, l'enroulement de la phase de $\det[w(\mathbf{k})]$ le long de ce chemin est nul. La continuité permet de ne considérer que les chemins tels que $C = -C$ (en effet tout chemin peut être modifié continument en un chemin respectant cette propriété). Enfin, la troisième équation de (II.41) permet de montrer que, sur un tel chemin, l'enroulement de la phase est nécessairement nul.

Cette condition de non-enroulement est très importante car elle permet de définir le logarithme et la racine carrée de ce déterminant de manière monovaluée et continue sur la zone de Brillouin vue comme un tore, ce qui est une condition indispensable pour une définition de l'invariant topologique cohérente, comme on pourra le remarquer à l'équation (II.42) de ce déterminant. Si ce n'était pas le cas, la racine carrée aux TRIM de ce déterminant ne serait définie que modulo 1, ce qui est embêtant quand on cherche à calculer une quantité modulo 2...

Enfin, **dans une jauge lisse**, la matrice w est antisymétrique aux TRIM. En effet, dans une telle jauge, $w(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = w(\mathbf{k})$, pour tout \mathbf{G} vecteur du réseau réciproque, ce qui nous permet de réécrire la deuxième ligne de l'équation (II.41) comme $w(\mathbf{k})^t = -w(\mathbf{k})$. D'où, l'anti-symétrie.

3. Cette matrice se nomme *sewing matrix* en anglais, mais "matrice de couture" étant particulièrement inélégant, nous l'appellerons simplement matrice w .

L'invariant topologique peut alors être relié à la valeur de la matrice w aux quatre TRIM de la manière suivante [FK06] :

$$(-1)^\Delta = \prod_i \frac{\sqrt{\det[w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]}, \quad (\text{II.42})$$

où les Γ_i correspondent aux quatre TRIM et Pf est utilisé pour Pfaffien. Bien que cette expression semble ne nécessiter que la connaissance des états aux TRIM, elle doit être calculée dans une jauge lisse. En effet, $\sqrt{\det[w(\mathbf{k})]}$ doit être définie continument afin de pouvoir choisir la même branche pour la racine carré aux quatre TRIM. Mais aussi, pour que le Pfaffien soit défini, w doit être antisymétrique aux TRIM. Bien que concise, cette expression est donc difficilement utilisable, surtout numériquement, pour calculer Δ . Elle permet cependant une généralisation de la notion d'isolant topologique Z_2 à trois dimensions, comme nous le verrons dans le paragraphe 2.5.

Nous allons maintenant démontrer le passage de l'équation (II.36) à l'équation (II.42). Le lecteur pressé pourra sauter cette partie, plus technique, et passer directement au paragraphe 2.3.

On se place tout d'abord **dans une jauge cylindrique**. Dans ce cas, l'équation (II.26) permet de montrer que la matrice w est diagonale par bloc, avec des blocs 2×2 de la forme⁴ :

$$\begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\chi_{\alpha,\mathbf{k}}} \\ e^{-i\chi_{\alpha,-\mathbf{k}}} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.43})$$

Pour simplifier l'écriture de la démonstration, nous allons donc nous contenter d'étudier une seule paire de bandes, et on omettra donc l'indice α et les sommes correspondantes. La démonstration à plusieurs paires de bandes ne présente pas de difficultés supplémentaires, si ce n'est dans la notation.

L'équation II.31 est valable dans la jauge cylindrique, et permet d'écrire

$$\begin{aligned} P_{k_y}^I &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk_x (A_{k_y}^I(k_x) + A_{k_y}^I(-k_x)) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk_x (A_{k_y}^I(k_x) + A_{-k_y}^{II}(k_x) + \nabla_{k_x} \chi_{k_x, -k_y}). \end{aligned} \quad (\text{II.44})$$

De plus on montre que, pour $k_y = \pi$, on a :

$$\begin{aligned} A_{-\pi}^s(k_x) &= A_\pi^s(k_x) + \nabla_{k_x} \gamma_y^s(k_x), \\ \nabla_{k_x} \chi_{k_x, -\pi} &= \nabla_{k_x} \chi_{k_x, \pi} + \nabla_{k_x} \gamma_y^I(-k_x) - \nabla_{k_x} \gamma_y^{II}(k_x), \end{aligned} \quad (\text{II.45})$$

avec les γ définies à l'équation (I.65) ($\gamma_y^s(k_x, k_y)$ étant toujours évalué en $k_y = -\pi$ dans cette démonstration, on omet k_y). L'équation (3.18) de [FK06] doit donc être corrigée en :

$$\begin{aligned} P_0^I &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk_x (A_0(k_x) + \nabla_{k_x} \chi_{k_x, 0}), \\ P_\pi^I &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk_x (A_\pi(k_x) + \nabla_{k_x} \chi_{k_x, \pi} + \nabla_{k_x} \gamma_y^I(-k_x)). \end{aligned} \quad (\text{II.46})$$

4. Attention, dans cette jauge, cette matrice n'est pas nécessairement antisymétrique, même aux TRIM. En effet, rien n'assure que $e^{-i\chi_{\alpha,\Gamma}} = e^{-i\chi_{\alpha,-\Gamma}}$ si on ne travaille pas dans une jauge lisse. Le Pfaffien ne peut donc pas être utilisé dans cette jauge.

2. Invariant topologique Z_2

On peut alors utiliser que $P^\Theta = 2P^I - P$ pour écrire :

$$\begin{aligned} P_0^\Theta &= \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^\pi dk_x A_0(k_x) - \int_{-\pi}^0 dk_x A_0(k_x) + 2 \int_0^\pi dk_x \nabla_{k_x} \chi_{k_x,0} \right), \\ P_\pi^\Theta &= \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^\pi dk_x A_\pi(k_x) - \int_{-\pi}^0 dk_x A_\pi(k_x) + 2 \int_0^\pi dk_x (\nabla_{k_x} \chi_{k_x,\pi} + \nabla_{k_x} \gamma_y^I(-k_x)) \right). \end{aligned} \quad (\text{II.47})$$

En remarquant que

$$\begin{aligned} \int_0^\pi dk_x A_0(k_x) - \int_{-\pi}^0 dk_x A_0(k_x) &= - \int_0^\pi dk_x i \nabla_{k_x} \log \det[w(k_x, 0)], \\ \int_0^\pi dk_x A_\pi(k_x) - \int_{-\pi}^0 dk_x A_\pi(k_x) &= - \int_0^\pi dk_x (i \nabla_{k_x} \log \det[w(k_x, \pi)] \\ &\quad + \nabla_{k_x} \gamma_y^I(-k_x) + \nabla_{k_x} \gamma_y^{II}(-k_x)), \end{aligned} \quad (\text{II.48})$$

on peut finalement écrire l'invariant topologique sous la forme :

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^\pi dk_x (\nabla_{k_x} \log \det[w(k_x, \pi)] - \nabla_{k_x} \log \det[w(k_x, 0)]) \\ &\quad + \frac{1}{2\pi} [\gamma_y^I(-\pi) - \gamma_y^{II}(-\pi) - \gamma_y^I(0) + \gamma_y^{II}(0)] \\ &\quad + \frac{1}{\pi} [\chi_{\pi,\pi} - \chi_{0,\pi} - \chi_{\pi,0} + \chi_{0,0}] \pmod{2}. \end{aligned} \quad (\text{II.49})$$

Cette expression, certes peu concise, a cependant le mérite d'être invariante de jauge si on ne considère que des jauges qui respectent l'équation (I.65) (ce qui est le cas de la jauge cylindrique et de la jauge lisse).⁵

La démonstration de l'invariance de jauge est longue et fastidieuse, et ne sera donc pas reproduite ici. Nous présentons ici uniquement les principales étapes :

- on montre tout d'abord qu'une transformation $U(1)$ (dépendante de \mathbf{k} mais continue et qui respecte (I.65)) laisse l'expression (II.49) invariante,
- on montre que, grâce à une telle transformation, on peut toujours trouver une jauge telle que $\gamma_y^I(k_x) = -\gamma_y^{II}(k_x)$,
- on montre que, pour un TRIM Γ , $e^{i\chi_{\mathbf{r}} - \mathbf{r}} e^{-i\gamma^I} + e^{i\chi_{\mathbf{r}}} e^{-i\gamma^{II}}$ est invariant sous une transformation $SU(2)$,
- on déduit que l'expression (II.49) est invariante sous une transformation $SU(2)$ qui respecte (I.65) et $\gamma_y^I(k_x) = -\gamma_y^{II}(k_x)$,
- on conclut sur l'invariance $U(2)$.

L'invariance de jauge permet donc d'utiliser cette expression dans le cas d'une jauge lisse. On pourrait se demander comment définir les χ_Γ dans une jauge lisse. En effet, dans une jauge cylindrique, les $e^{i\chi_{\mathbf{k}}}$ sont définis pour tout \mathbf{k} , ce qui permet de définir les $\chi_{\mathbf{k}}$ de manière continue et d'obtenir ainsi une définition cohérente

5. Une expression plus générale, et invariante de jauge (quelle-que soit la jauge) ferait aussi intervenir les γ_x (qui ici sont nuls), mais une telle expression n'aurait que peu de sens dans ce contexte. En effet, le but ici est de relier le nombre de Chern et la polarisation comme dans l'équation (I.63). Or cela nécessite de respecter l'équation (I.65).

des χ_{Γ} . Dans le cas d'une jauge lisse, l'équation (II.26) n'est plus nécessairement valide, et les $e^{i\chi_{\mathbf{k}}}$ ne sont définis qu'aux TRIM, grâce au théorème de Kramers. Les χ_{Γ} ne sont alors définis qu'à 2π près, et rien n'impose de conditions pour un choix cohérent à tous les TRIM. Cependant, l'équation (II.49) fait intervenir $\frac{1}{\pi}\chi_{\Gamma} \bmod 2$, qui ne dépend pas du choix de l'antécédent. Ainsi, le problème de définition des χ_{Γ} dans la jauge lisse disparaît.

Dans une jauge lisse, les γ sont tous nuls et la matrice w est antisymétrique, ce qui permet de réécrire l'invariant topologique sous la forme :

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{2\pi i} \left(\int_0^\pi dk_x (\nabla_{k_x} \log \det[w(k_x, \pi)] - \nabla_{k_x} \log \det[w(k_x, 0)]) \right. \\ &\quad \left. - 2 \log \left(\frac{\text{Pf}[w(\pi, \pi)]\text{Pf}[w(0, 0)]}{\text{Pf}[w(0, \pi)]\text{Pf}[w(\pi, 0)]} \right) \right) \bmod 2. \end{aligned} \quad (\text{II.50})$$

L'équation (II.42) n'étant qu'une écriture alternative de cette équation, la démonstration est donc achevée.

2.3 Cas particulier de la symétrie par inversion

Nous venons de voir que l'invariant topologique Z_2 d'un système invariant par renversement du temps peut s'écrire de manière concise (*cf.* Eq.II.42)); cette expression est toutefois peu pratique à calculer, surtout numériquement. En 2007, Fu et Kane montrent que pour des systèmes possédant en plus un centre d'inversion, l'invariant topologique peut s'écrire [FK07] :

$$(-1)^\Delta = \prod_i \prod_{\alpha \text{ occ}} \xi_\alpha(\Gamma_i), \quad (\text{II.51})$$

où $\xi_\alpha(\Gamma_i) = \pm 1$ est la valeur propre de l'opérateur parité P pour l'état propre $|\Psi_{\alpha, \Gamma_i}^I\rangle$. Cette expression est beaucoup plus simple à utiliser car elle ne demande que la connaissance des états propres aux TRIM, et ne se soucie pas de la jauge utilisée pour décrire les bandes. Elle a ainsi permis d'identifier un certain nombre d'isolants topologiques à partir de calculs de structure de bandes (voir, entre autres, [FK07, TFK08, GF09, ZLQ⁺09, PB10])

La démonstration de Fu et Kane [FK07] s'appuie sur le fait que dans un tel système, la courbure de Berry s'annule en tout point \mathbf{k} . En effet, la courbure de Berry doit être impaire à cause de la symétrie par renversement du temps, et paire à cause de la symétrie d'inversion. Il existe donc une jauge où la connexion de Berry s'annule en tout point \mathbf{k} . Ils prouvent enfin que, dans une telle jauge, l'équation (II.42) peut se réécrire comme dans (II.51).

Les systèmes invariants par renversement du temps et inversion possèdent deux propriétés intéressantes que nous discutons ici.

Tout d'abord, l'opérateur $P\Theta = \Theta P$ est anti-unitaire et de carré -1 . Le théorème de Kramers s'applique donc. Cependant, contrairement au renversement du temps seul, cet opérateur envoie un état de vecteur d'onde \mathbf{k} vers un autre état de même vecteur d'onde. Ainsi, pour chaque état propre de l'Hamiltonien, il existe

2. Invariant topologique Z_2

un autre état propre de même énergie et de même vecteur d'onde. On obtient donc des paires de bandes complètement dégénérées.

De plus, si on pose $|\Psi_{\alpha, -\Gamma_i}^s\rangle = |\Psi_{\alpha, \Gamma_i}^s\rangle$ ⁶, on peut montrer que pour une bande α et un TRIM Γ donnés, $|\Psi_{\alpha, \Gamma_i}^I\rangle$ et $|\Psi_{\alpha, \Gamma_i}^{II}\rangle$ sont vecteurs propres de P pour la même valeur propre $\xi_\alpha(\Gamma_i) = \pm 1$. Ainsi, l'équation (II.51) ne dépend ni du choix de la jauge, ni du partenaire de Kramers choisi pour calculer $\xi_\alpha(\Gamma_i)$

2.4 États de bord des isolants topologiques Z_2

Dans ce paragraphe nous nous intéressons à la correspondance *bulk-edge* pour les isolants topologiques Z_2 . Comme nous l'avons vu, un système invariant par renversement du temps peut être séparé en paires de Kramers reliées par le renversement du temps. Pour simplifier l'explication, nous supposons ici que S^z est conservé, ce qui permet d'identifier la bande I (resp. II) aux spins *up* (resp. *down*). Dans ce cas l'Hamiltonien se décompose en :

$$H = H_\uparrow \otimes Id_\downarrow + Id_\uparrow \otimes H_\downarrow, \quad (\text{II.52})$$

où H_\uparrow (resp. H_\downarrow) agit exclusivement sur les spins *up* (resp. *down*). Il suffit alors de calculer la structure de bandes de H_\uparrow et obtenir celle de H_\downarrow grâce à la symétrie de renversement du temps. On note c_\uparrow (resp. c_\downarrow) le nombre de Chern associé à H_\uparrow (resp. H_\downarrow). La symétrie par renversement du temps donne $c_\uparrow = -c_\downarrow$. On peut donc s'attendre, d'après la discussion sur la correspondance *bulk-edge* pour les isolants de Chern, à obtenir $|c_\uparrow|$ état de bord de spin *up* longeant le bord dans une direction, et le même nombre d'état de spin *down*, allant dans la direction opposée. Si tous ces états étaient topologiquement stables, cela entraînerait une classification \mathbb{Z} des isolants topologiques, et non Z_2 . Cependant, Kane et Mele [KM05b] ont montré que deux paires d'états de bord *up* et *down*, peuvent rétrodiffuser élastiquement. En présence de désordre faible, ces états auront donc tendance à se localiser, et ne seront pas topologiquement stables. On peut donc faire disparaître les paires d'états de bord deux par deux. La quantité topologiquement stable devient alors la parité du nombre de paire d'états de bord, ou dans notre cas, la parité du nombre d'états de bord de spin *up*. On montre ainsi que la classification est bien Z_2 .

Une autre façon de comprendre la classification Z_2 et la correspondance *bulk-edge* est de considérer le bord d'un système générique invariant par renversement du temps. À deux dimensions, la symétrie de translation permet de ne conserver qu'une seule composante du vecteur d'onde comme bon nombre quantique, qu'on notera k . De manière générale, il peut y avoir des états de bord ou pas, selon le détail de l'Hamiltonien sur le bord. Si il y en a, le théorème de Kramers s'applique et force une double dégénérescence au TRIM. En dehors de ces points les bandes peuvent être séparées, mais le théorème de Kramers force la symétrie $k \rightarrow -k$. On peut donc se contenter d'étudier la moitié de la zone de Brillouin, par exemple $k \in [0, \pi]$. Les états deux fois dégénérés à $k = 0$ et $k = \pi$ peuvent être reliés de deux manières différentes, comme on peut le voir sur la figure II.1. Dans le

6. Ici la jauge n'a pas besoin d'être lisse. Il peut y avoir des discontinuités à l'intérieur de la zone de Brillouin.

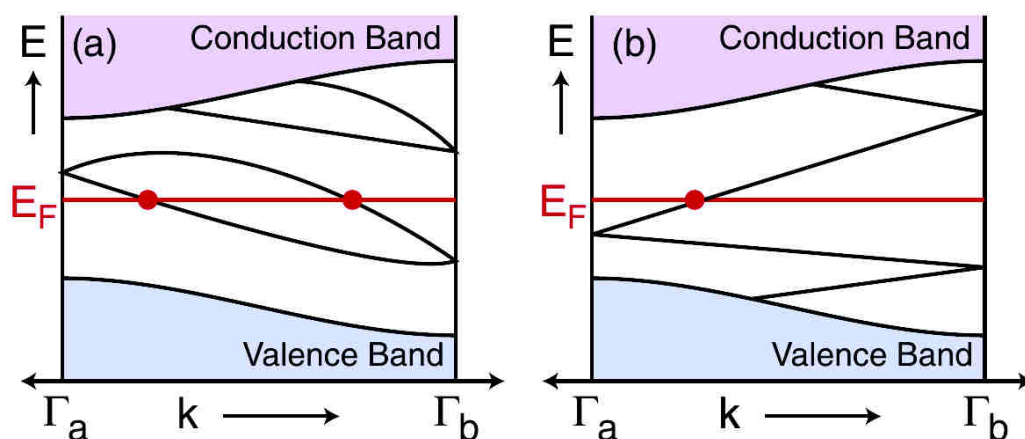


Figure II.1 – Relation de dispersion des états de bord entre $k = \Gamma_a = 0$ et $k = \Gamma_b = \pi$. À gauche les paires d'états dégénérées en 0 et π sont reliées paire à paire. L'énergie de Fermi croise toujours un nombre pair d'états de bord. Ces états de bord peuvent être poussés dans le *bulk* sans fermeture du gap. L'isolant est topologiquement trivial. À droite, les paires d'états dégénérées en 0 et π sont reliées en mélangeant les paires. L'énergie de Fermi croise toujours un nombre impair d'états de bord. On ne peut pas faire disparaître ces états sans fermer le gap. L'isolant est topologique. Figure extraite de [HK10].

premier cas, les états de bord peuvent être "poussés" dans le *bulk*, en modifiant localement l'Hamiltonien et sans fermer le gap. L'isolant est trivial. On observe de plus qu'une énergie de Fermi dans le gap croiera toujours un nombre pair d'états de bord entre $k = 0$ et $k = \pi$. En revanche, dans le deuxième cas, une ligne d'états de bord traverse tout le gap. Ces états de bord ne peuvent disparaître sans passer par une transition de phase quantique, c'est-à-dire sans fermer le gap. L'isolant est topologique. Il se distingue par le fait que l'énergie de Fermi croise toujours un nombre impair d'états de bord entre $k = 0$ et $k = \pi$.

En conclusion, la correspondance *bulk-edge* pour les isolants topologiques Z_2 se traduit dans la parité du nombre de paires d'états de bord. Dans le cas d'un isolant trivial, on observe un nombre pair de paires d'états de bord, tandis que ce nombre est impair dans le cas d'un isolant topologique.

2.5 Isolants topologiques Z_2 à trois dimensions

De nombreuses autres expressions de l'invariant topologique ont été proposées au fil du temps [KM05a, FK06, FK07, FH07, MB07, FFH08, QH08, Roy09, WQZ10]. Celle de Fu et Kane reste cependant l'une des plus simples à généraliser à trois dimensions.

En 3 dimensions, il existe 8 TRIM (au lieu de 4 à deux dimensions) qui permettent de définir quatre invariants Z_2 indépendants [FK07]. Le premier invariant ν_0 peut être calculé à partir de l'équation (II.42), en faisant le produit sur l'ensemble des 8 TRIM. Une valeur non nulle de cet invariant caractérise un isolant topologique dit fort.

3. Un exemple d'isolant topologique Z_2 : le puit quantique HgTe/CdTe

Les trois autres invariants peuvent être calculés à partir de l'équation (II.42), en faisant courir le produit sur les quatre TRIM du plan $k_x = \pi$ (resp. $k_y = \pi$ ou $k_z = \pi$). Une valeur non nulle d'au moins un de ces trois invariants et une valeur nulle de ν_0 définissent un isolant topologique dit faible. Les isolants topologiques faibles peuvent être vus comme un "empilement" d'isolants topologiques à deux dimensions, tandis que la notion d'isolant topologique fort est purement tridimensionnelle.

3 Un exemple d'isolant topologique Z_2 : le puit quantique HgTe/CdTe

En 2006, Bernevig, Hughes et Zhang (BHZ) [BHZ06] ont introduit un modèle simple pour décrire la physique d'un puits quantique HgTe/CdTe (composé d'une couche de tellure de mercure comprise entre deux couches de tellure de cadmium). Ils montrent qu'en variant l'épaisseur du puits quantique on peut faire passer le système de la phase triviale à une phase topologique. Après avoir discuté les propriétés des tellures de cadmium et de mercure, nous présentons l'Hamiltonien de BHZ. Nous étudions ensuite ses caractéristiques topologiques ainsi que ses éventuels états de bord.

3.1 L'Hamiltonien de BHZ

Le tellure de cadmium présente une structure de bandes conventionnelle, avec un gap d'ordre 1.6eV entre la bande de valence de type-s, Γ_6 , et la double bande de conduction de type p, Γ_8 (cf. Fig.II.2). Γ_8 est séparé grâce au couplage spin orbite. Pour le tellure de mercure, les bandes sont inversées, avec une bande Γ_6 d'énergie plus faible que Γ_8 . La bande de trous légers du CdTe devient alors la bande de conduction du HgTe, tandis que la bande de trous lourds devient la bande de valence. Pour les deux matériaux, on néglige les bandes inférieures. On se retrouve donc avec un modèle à 6 bandes (en comptant le spin). Dans le cas d'un puits quantique, seules quatre de ces bandes sont d'intérêt :

- deux bandes de symétrie s : $|E_1, \uparrow\rangle$ et $|E_1, \downarrow\rangle$, issues des bandes Γ_6 et des bandes Γ_8 avec $m_J = \pm 1/2$,
- deux bandes de symétrie p : $|H_1, \uparrow\rangle$ et $|H_1, \downarrow\rangle$, issues des bandes Γ_8 avec $m_J = \pm 3/2$.

Selon l'épaisseur du puits quantique, l'énergie de ces deux paires de bandes varie. Si le puits est fin, l'énergie des bandes H_1 sera plus faible. Intuitivement, si le puits est suffisamment fin, son influence est négligeable, et l'ordre des bandes suit l'ordre conventionnel de CdTe. En revanche, pour des puits plus larges, l'énergie des bandes E_1 devient inférieure à celle des bandes H_1 . On retrouve alors l'ordre inversé des bandes de HgTe. L'inversion de bandes a lieu pour une épaisseur de l'ordre de 6.3 nm (cf. Fig.II.2).

Pour décrire cette physique, Bernevig, Hughes et Zhang ont donc proposé un modèle effectif, construit de manière à respecter les symétries du système. C'est un

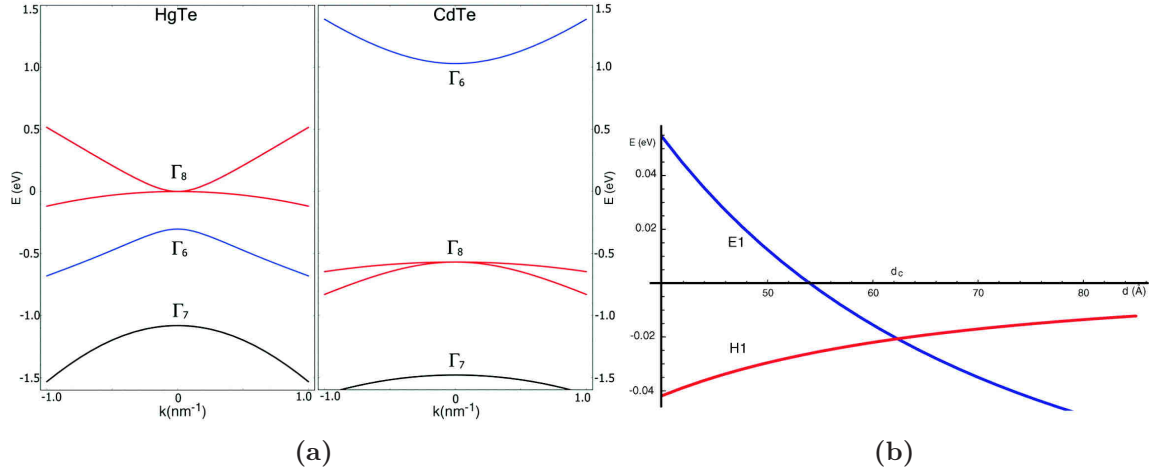


Figure II.2 – (a) Structure de bandes de HgTe et CdTe. L'organisation des bandes est conventionnelle pour CdTe mais inversée pour HgTe. (b) Énergie des états E_1 et H_1 en fonction de l'épaisseur du puits quantique. Une inversion a lieu pour une épaisseur de l'ordre de 6.3 nm. Figures extraites de [BHZ06]

Hamiltonien de liaisons fortes défini sur un réseau carré donné par $\mathbf{R} = pa\hat{\mathbf{X}} + qa\hat{\mathbf{Y}}$ (avec $p, q \in \mathbb{Z}$). Une cellule unité \mathbf{R} possède quatre états à un seul électron notés $|\mathbf{R}, n\rangle$: deux de symétrie s , $|\uparrow, s\rangle$ et $|\downarrow, s\rangle$, et deux de symétrie p , $|\uparrow, p_x + ip_y\rangle$ et $|\downarrow, p_x - ip_y\rangle$. Dans la suite, on utilisera l'indice ν pour représenter les états d'orbitale s ($\nu = +$) et les états d'orbitale p ($\nu = -$). De même, on utilisera l'indice σ pour noter le spin ($\sigma = +$ pour les spins *up*, et $\sigma = -$ pour les spins *down*). Dans cette base, l'Hamiltonien de BHZ s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{BHZ} = & \sum_{\mathbf{R}, \sigma, \nu} (\mu + \nu \Delta \mu) c_{\sigma, \nu}^\dagger(\mathbf{R}) c_{\sigma, \nu}(\mathbf{R}) \\
 & + \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma, \nu} (t + \nu \Delta t) (c_{\sigma, \nu}^\dagger(\mathbf{R}) c_{\sigma, \nu}(\mathbf{R}') + h.c.) \\
 & - \sum_{\mathbf{R}, \sigma, \nu} i\alpha \sigma (c_{\sigma, \nu}^\dagger(\mathbf{R} + a\hat{\mathbf{X}}) c_{\sigma, -\nu}(\mathbf{R}) - h.c.) \\
 & + \sum_{\mathbf{R}, \sigma, \nu} \alpha \nu (c_{\sigma, \nu}^\dagger(\mathbf{R} + a\hat{\mathbf{Y}}) c_{\sigma, -\nu}(\mathbf{R}) + h.c.). \tag{II.53}
 \end{aligned}$$

Le premier terme ($\mu_\pm = \mu \pm \Delta \mu$) provient de la différence d'énergie entre l'état de symétrie s et l'état de symétrie p . Le second est un terme de saut premier voisin avec une amplitude différente selon l'orbitale, $t_\pm = t \pm \Delta t$. Enfin, les deux derniers représentent le couplage spin orbite, d'amplitude α .

L'invariance par translation permet de définir l'Hamiltonien de Bloch

$$H_{BHZ}(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}} \mathcal{H}_{BHZ} e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{R}}}, \tag{II.54}$$

3. Un exemple d'isolant topologique Z_2 : le puit quantique HgTe/CdTe

et on obtient :

$$\begin{aligned}
H_{BHZ}(\mathbf{k}) &= \mu + 2t \cos(ak_X) + 2t \cos(ak_Y) \\
&\quad + (\Delta\mu + 2\Delta t \cos(ak_X) + 2\Delta t \cos(ak_Y))\tau^z \\
&\quad - 2\alpha \sin(ak_X)s^z\tau^x + 2\alpha \sin(ak_Y)\tau^y,
\end{aligned} \tag{II.55}$$

où s^a et τ^b ($a, b \in x, y, z$) sont les matrices de Pauli agissant respectivement dans l'espace des spins et dans l'espace des orbitales.

3.2 Diagramme de Phase

L'Hamiltonien de BHZ est invariant sous l'opération de renversement du temps Θ et d'inversion P , qu'on peut écrire :

$$\begin{aligned}
\Theta &= \sum_{\mathbf{R}} \hat{\Theta} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R} | K_{\{\mathbf{R}\}} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Theta} |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k} | K_{\{\mathbf{k}\}} \quad \text{avec } \hat{\Theta} = is^y, \\
P &= \sum_{\mathbf{R}} \hat{P} |-\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R} | = \sum_{\mathbf{k}} \hat{P} |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k} | \quad \text{avec } \hat{P} = \tau^z.
\end{aligned} \tag{II.56}$$

En effet, P laisse les orbitales s invariantes mais change le signe des orbitales p . On peut donc utiliser la formule (II.51), qui fait intervenir les valeurs propres de l'opérateur parité, pour calculer l'invariant topologique.

Aux TRIM, $H_{BHZ}(\mathbf{\Gamma})$ se réduit à

$$H_{BHZ}(\mathbf{\Gamma}) = d_1(\mathbf{\Gamma}) + d_2(\mathbf{\Gamma})\tau^z = d_1(\mathbf{\Gamma}) + d_2(\mathbf{\Gamma})\hat{P}, \tag{II.57}$$

où les $d_1(\mathbf{\Gamma})$ et les $d_2(\mathbf{\Gamma})$ sont donnés dans le tableau suivant :

	$\mathbf{\Gamma} = (0, 0)$	$\mathbf{\Gamma} = (0, \pi)$	$\mathbf{\Gamma} = (\pi, 0)$	$\mathbf{\Gamma} = (\pi, \pi)$
$d_1(\mathbf{\Gamma})$	$\mu + 4t$	μ	μ	$\mu - 4t$
$d_2(\mathbf{\Gamma})$	$\Delta\mu + 4\Delta t$	$\Delta\mu$	$\Delta\mu$	$\Delta\mu - 4\Delta t$

L'énergie des état propres aux TRIM est donnée par

$$E_{\pm}(\mathbf{\Gamma}) = d_1(\mathbf{\Gamma}) \pm d_2(\mathbf{\Gamma}). \tag{II.58}$$

C'est le signe de $d_2(\mathbf{\Gamma})$ qui définit quelle énergie est la plus basse et donc quel état sera occupé à demi-remplissage. Mais selon l'équation (II.57), on observe que la valeur propre de l'opérateur parité pour les états d'énergie E_+ vaut $+1$, et -1 pour les états d'énergie E_- . Ainsi, la parité de la paire d'état occupée à demi-remplissage est aussi définie par le signe de $d_2(\mathbf{\Gamma})$. On obtient donc une phase topologique lorsque $\Delta\mu + 4\Delta t$ et $\Delta\mu - 4\Delta t$ sont de signes opposés, et donc lorsque $|\Delta\mu| < 4|\Delta t|$ (*cf.* II.3).

On observe que α n'intervient pas dans le diagramme de phase. Son rôle est néanmoins important, car une valeur non nulle de α permet d'assurer l'existence d'un gap entre les deux paires de bandes, et donc de bien obtenir un isolant.

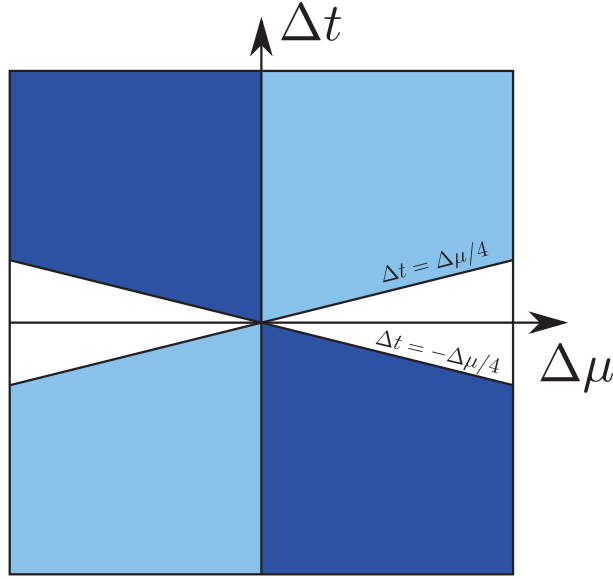


Figure II.3 – Diagramme de phase du modèle de BHZ. En foncé et en clair, sont représentées les phases isolantes topologiques. Dans la zone foncée, les états de bord à $E = 0$ se situent à $k_y = 0$. Dans la zone claire, ils se situent à $k_y = \pi$. La partie blanche correspond à la phase triviale. Le diagramme de phase est indépendant de α . Cependant, une valeur non nulle de α est nécessaire afin d'ouvrir le gap dans toute la zone de Brillouin et obtenir un isolant.

3.3 Construction des états de bord

Pour le modèle de BHZ, la construction des états de bord peut se faire de manière analytique. Nous reproduisons ici cette construction inspirée de [KBWM⁺08]. Dans ce paragraphe, on choisit $a = 1$.

On peut tout d'abord remarquer que l'Hamiltonien de BHZ conserve S^z . Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 2.4, on peut donc se contenter d'étudier l'Hamiltonien $H_\uparrow(\mathbf{k})$ pour les spins *up* donné par :

$$\begin{aligned} H_\uparrow(\mathbf{k}) &= \mu + 2t \cos(k_X) + 2t \cos(k_Y) \\ &\quad + (\Delta\mu + 2\Delta t \cos(k_X) + 2\Delta t \cos(k_Y))\tau^z \\ &\quad + 2\alpha \sin(k_X)\tau^x - 2\alpha \sin(k_Y)\tau^y, \end{aligned} \quad (\text{II.59})$$

On choisit de plus $\mu = 0$, sans perte de généralité. En effet μ joue simplement le rôle d'un *offset* pour les énergies. On choisit de plus $t = 0$. On considère cet Hamiltonien sur le plan semi-infini $x > 0$. Dans ce cas, k_y reste un bon nombre quantique, mais pas k_x qu'il faut donc remplacer par $-i\partial_x$. De plus, on cherche des états exponentiellement localisés sur les bords. On utilise donc un *ansatz* de la forme $\Psi(x, k_y) = e^{\lambda x} \phi(k_y)$ pour les états de bord, où $\phi(k_y)$ est un spineur indépendant de x . L'équation aux valeurs propres

$$H_\uparrow(-i\partial_x, k_y)\Psi(x, k_y) = E_{k_y}\Psi(x, k_y), \quad (\text{II.60})$$

devient donc

$$H_\uparrow(-i\lambda, k_y)\phi(k_y) = E_{k_y}\phi(k_y). \quad (\text{II.61})$$

4. Méthodes expérimentales de détection des isolants topologiques

König *et al.* utilisent des arguments de symétrie pour justifier la recherche d'états de bord à $E = 0$ (qui est bien dans le gap) et uniquement à $k_y = 0$. On note $\phi = \phi(0)$. Dans ce cas, l'équation aux valeurs propres se simplifie encore et devient :

$$(\Delta\mu + 2\Delta t(\cosh(\lambda) + 1))\tau^z\phi = 2i\alpha \sinh(\lambda)\tau^x\phi. \quad (\text{II.62})$$

En multipliant cette équation à droite par τ^x et en simplifiant par $-i$ on obtient :

$$(\Delta\mu + 2\Delta t(\cosh(\lambda) + 1))\tau^y\phi = -2\alpha \sinh(\lambda)\phi. \quad (\text{II.63})$$

Or, τ_y a pour valeur propre ± 1 avec pour vecteurs propres associés $\phi_{\pm} = (1, \pm i)$. Les solutions de l'équation aux valeurs propres sont donc données par $\phi = \phi_{\pm}$ et λ solution de :

$$\Delta\mu + 2\Delta t(\cosh(\lambda) + 1) \pm 2\alpha \sinh(\lambda) = 0. \quad (\text{II.64})$$

Cette équation se réduit à une équation quadratique en e^{λ} . En remarquant que si λ est solution pour l'équation avec un "+", $-\lambda$ est solution de l'équation avec un "-", on montre qu'une solution générale de l'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\Psi(x, 0) = (c_1^+ e^{\lambda_1 x} + c_2^+ e^{\lambda_2 x})\phi_+ + (c_1^- e^{-\lambda_1 x} + c_2^- e^{-\lambda_2 x})\phi_-, \quad (\text{II.65})$$

avec

$$e^{\lambda_{(1,2)}} = -\frac{\Delta\mu + 2\Delta t \pm \sqrt{4\alpha^2 + 4\Delta\mu\Delta t + \Delta\mu^2}}{2(t + \alpha)}. \quad (\text{II.66})$$

et où les c sont des constantes à déterminer. Pour que les solutions aient un sens physique, on souhaite qu'elles soient normalisables. Cela implique de ne garder que les termes tels que $|e^{\lambda}| < 1$. De plus, loin du bord, dans le vide (donc pour x très négatif), la fonction d'onde doit s'annuler. On choisit de représenter cela par une condition au bord ouverte donnée par la condition $\Psi(x = 0, 0) = 0$. Ainsi, il existe un état de bord à $E = 0$ et $k_y = 0$ si et seulement si $|e^{\lambda_i}| < 1$ pour $i = 1$ et $i = 2$, ou $|e^{-\lambda_i}| < 1$ pour $i = 1$ et $i = 2$.

On peut alors montrer que sous ces conditions, il existe un état de bord en $E = 0$ et $k_y = 0$ pour $-4\Delta t < \Delta\mu < 0$ ou $0 < \Delta\mu < -4\Delta t$. Cependant cela ne correspond pas au diagramme de phase obtenu dans le paragraphe 3.2. En effet l'argument de König *et al.* ne prend pas en compte la possibilité d'un état de bord en $k_y = \pm\pi$ à $E = 0$. Le calcul précédent peut cependant être réalisé pour $k_y = \pm\pi$, et on obtient un état de bord si $4\Delta t < \Delta\mu < 0$ ou $0 < \Delta\mu < 4\Delta t$ (*cf.* II.3). On peut aussi vérifier que, pour $E = 0$, on ne peut pas avoir d'état de bord pour d'autres valeurs de k_y dans la BZ.

On obtient donc une parfaite correspondance entre la valeur de l'invariant topologique et la parité du nombre de paires d'états de bord à $E = 0$.

4 Méthodes expérimentales de détection des isolants topologiques

De nombreuses expériences ont été réalisées afin d'identifier et de caractériser les isolants topologiques. Dans cette section, nous discutons brièvement les

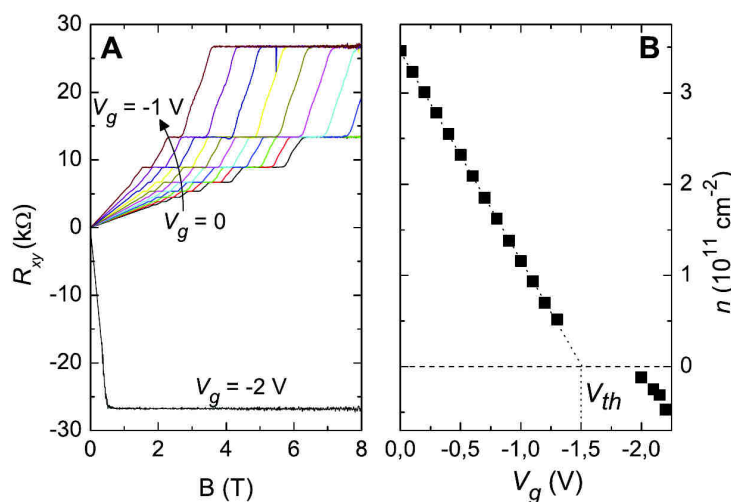


Figure II.4 – (a) Résistance de Hall mesurée pour différentes valeurs de la tension de grille V_G dans des barres de Hall de grande taille ($600 \times 200 \mu\text{m}$), en fonction du champ magnétique. (b) Densité de porteurs de charge en fonction de la tension de grille. Pour des tensions de grille comprises entre 0 et $-1V$, l'énergie de Fermi est dans la bande de valence. À partir de $V_G = -2V$, l'énergie de Fermi est dans la bande de conduction. Pour des valeurs de V_G intermédiaires, l'énergie de Fermi traverse le gap. Figure extraite de [KBWM⁺08]

méthodes employées, d'abord à deux, puis à trois dimensions. Enfin nous discutons une méthode basée sur les oscillations quantiques, que nous avons proposée pour différencier les isolants topologiques forts des isolants topologiques faibles ou triviaux à trois dimensions.

4.1 Systèmes à 2 dimensions : mesures de transport

La principale méthode utilisée pour identifier les isolants topologiques à deux dimensions est une mesure de transport. Nous discutons en particulier ici, les expériences réalisées sur le puits quantique HgTe/CdTe par König *et al.* [Kö07, KWB⁺07, KBWM⁺08].

Pour l'expérience, on donne au matériau une géométrie de barre de Hall (*cf.* Fig.I.1). Une première série de mesures est réalisée sur des barres de Hall de grande taille ($600 \times 200 \mu\text{m}$), en présence d'un champ magnétique. La mesure de la résistance de Hall en fonction du champ magnétique permet d'évaluer la densité de porteurs de charge. Cette mesure peut aussi être effectuée tout en variant la tension de grille V_G , de 0 à $-2V$. On observe que lorsque V_G décroît de 0 à $-1V$, le nombre de porteurs de charge diminue. Si on diminue encore V_G , le système devient isolant. Enfin, si V_G atteint $-2V$, le système devient à nouveau conducteur. Ces mesures peuvent être comprises en considérant que la diminution de la tension de grille a pour effet de diminuer l'énergie de Fermi. Ainsi, pour $V_G = 0$, l'énergie de Fermi E_F se trouve dans la bande de conduction. Diminuer V_G diminue ainsi le nombre de porteurs de charge, jusqu'à ce que E_F soit dans le gap et que le ma-

4. Méthodes expérimentales de détection des isolants topologiques

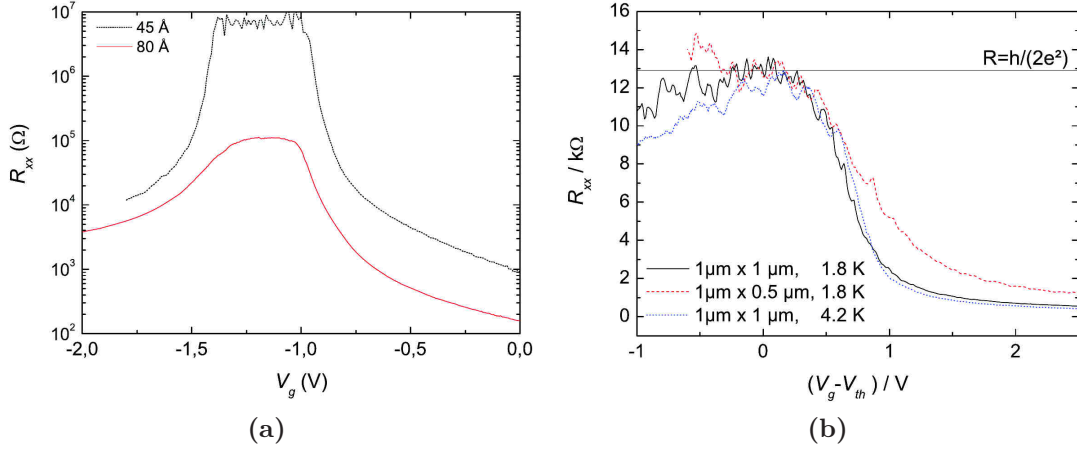


Figure II.5 – (a) Mesure de la résistance longitudinale pour des barres de Hall de dimensions $20 \times 13.3 \mu\text{m}$ et d'épaisseur 4.5 nm (courbe pointillée noire) et 8.0 nm (courbe rouge). Pour une épaisseur inférieure à l'épaisseur critique $d_c \sim 6.3 \text{ nm}$, on observe une résistance longitudinale de plusieurs méga-Ohms, lorsque l'énergie de Fermi est dans le gap. En revanche, cette résistance n'est que d'une centaine de kilo-Ohms lorsque $d > d_c$. (b) Mesure de la résistance longitudinale pour des barres de Hall de dimensions $1 \times 1 \mu\text{m}$ et $1 \times 0.5 \mu\text{m}$ et une épaisseur supérieure à l'épaisseur critique. On observe des résistances longitudinales très proches de $12.9 \text{ k}\Omega$ lorsque E_F est dans le gap. Figures extraites de [KBWM+08]

tériau devienne isolant. Si on continue à diminuer V_G , E_F arrive au niveau de la bande de valence, et le matériau est de nouveau conducteur. Cette première série de mesures permet donc d'évaluer les valeurs de V_G pour lesquelles E_F est dans le gap. (*cf.* Fig.II.4)

Une deuxième série d'expériences est réalisée avec des barres de Hall de plus petites dimensions ($20 \times 13.3 \mu\text{m}$) et des épaisseurs variables. On observe alors des comportements différents selon que l'épaisseur du puits quantique est plus grande ou plus petite que l'épaisseur critique $d_c \sim 6.3 \text{ nm}$. Lorsque $d < d_c$, on observe une résistance longitudinale de plusieurs méga-Ohms, lorsque l'énergie de Fermi est dans le gap. En revanche, cette résistance n'est que d'une centaine de kilo-Ohms lorsque $d > d_c$ (*cf.* Fig.(II.5)). C'est un premier signe du caractère topologique du système lorsque $d > d_c$. En effet, l'énergie de Fermi se trouvant dans le gap, le transport est assuré par les états de bord. Cependant cette résistance est supérieure à celle attendue ($12.9 \text{ k}\Omega$) sur une telle géométrie pour les états de bord prédits analytiquement. Cette différence peut être expliquée par des effets de diffusion inélastique. Le libre parcours élastique moyen pouvant être estimé à $1 \mu\text{m}$ dans ce matériau, une troisième série d'expérience est réalisée sur des barres de Hall de dimensions $1 \times 1 \mu\text{m}$ et $1 \times 0.5 \mu\text{m}$. On observe alors des résistances longitudinales très proches de $12.9 \text{ k}\Omega$ lorsque E_F est dans le gap et que $d > d_c$, confirmant le caractère topologique de tels matériaux (*cf.* Fig.(II.5)).

D'autres types d'expériences de transport peuvent aussi être réalisées, telles que des mesures de magnétorésistance [Kö07, KWB+07] ou des mesures sur des barres de Hall de géométrie plus complexe [RBB+09].

4.2 Systèmes à 3 dimensions : ARPES, STS et oscillations quantiques

Pour les systèmes à 3 dimensions, de nombreuses mesures de transport ont été réalisées (entre autres, [ACC⁺10, BKS⁺10, CQY⁺10, ERT⁺10, SGLJH10, TLQG11, AMR⁺10, LFP⁺10, SJS⁺10]). Les résultats sont cependant beaucoup plus difficiles à interpréter, à cause de la présence d'une densité de porteurs de charge résiduelle dans le *bulk*, due aux impuretés et défauts des matériaux utilisés, ou d'une densité de porteurs de charge intrinsèque.

Ainsi, les principales confirmations de phases isolantes topologiques ont été obtenues par l'étude directe des propriétés des surfaces, avec des techniques telles que la spectroscopie photoélectronique à résolution angulaire (ARPES) avec ou sans résolution de spin, ou la spectroscopie et microscopie à effet tunnel (STS et STM). Ces techniques ont ainsi permis de mettre en évidence la nature topologique des composants tels que le $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ [HQW⁺08, RSP⁺09], le Bi_2Se_3 [XQH⁺09], ou encore le Bi_2Te_3 [CAC⁺09, HXQ⁺09, ZCC⁺09, AAC⁺10]. Ces techniques peuvent cependant être extrêmement difficiles à mettre en place selon les matériaux, en particulier pour obtenir des résolutions suffisantes ([XSB⁺13, NAX⁺13]).

Nous avons proposé une méthode basée sur l'étude des oscillations magnétiques quantiques dues aux états de surface pour tenter d'identifier les isolants topologiques forts de manière simple.

L'idée de la méthode est la suivante : si on considère la surface d'un matériau à trois dimensions, les isolants topologiques forts se distinguent des isolants topologiques faible ou triviaux par la parité du nombre de surfaces de Fermi fermées, ce nombre étant impair pour les isolants topologiques forts [RBP15].

En effet, la zone de Brillouin d'un système à trois dimensions possède huit TRIM, données par

$$\Gamma_{i=(n_1, n_2, n_3)} = \frac{1}{2}(n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3), \quad (\text{II.67})$$

avec \mathbf{b}_l les vecteurs de base du réseau réciproque, et $n_l \in \{0, 1\}$. L'invariant topologique fort s'écrit :

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{i=1}^8 \delta(\Gamma_i), \quad (\text{II.68})$$

où les $\delta(\Gamma_i)$ peuvent être obtenus de l'équation (II.42). On peut associer les $\delta(\Gamma_i)$ par paires, en définissant par exemple

$$\pi_{j=(n_1, n_2)} = \delta(\Gamma_{i=(n_1, n_2, 0)}) \delta(\Gamma_{i=(n_1, n_2, 1)}) \pmod{2}. \quad (\text{II.69})$$

Cette définition est utile lorsque l'on considère la zone de Brillouin bidimensionnelle de la surface d'un système à trois dimensions. En effet, aux quatre TRIM de cette BZ surfacique, notés $\tilde{\Gamma}_j$, on peut associer un entier $\pi_j = \pm 1$, produit de deux $\delta(\Gamma_i)$ ⁷. L'invariant topologique fort s'écrivant alors

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{j=1}^4 \pi_j, \quad (\text{II.70})$$

7. L'exemple d'appariement donné à l'équation II.69 correspond à la surface (0,0,1), et est à adapter en fonction de la surface considérée.

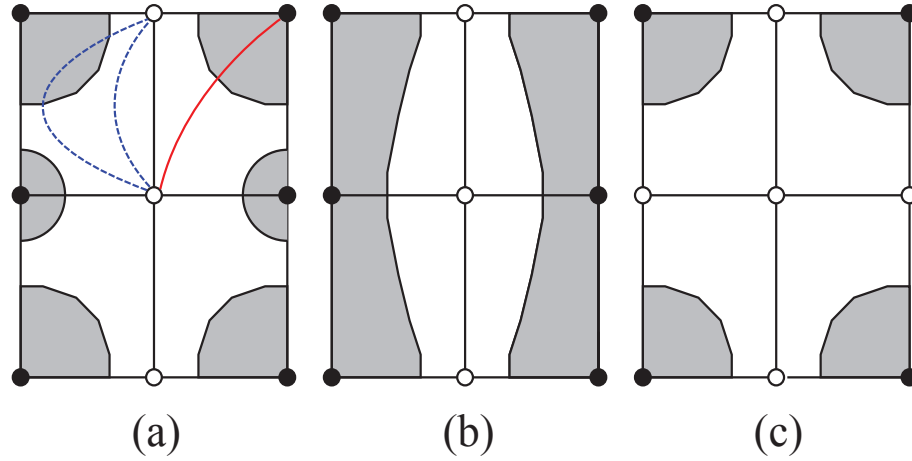


Figure II.6 – Première zone de Brillouin de la surface d’un système tridimensionnel. Les cercles vides et pleins correspondent respectivement aux TRIM avec $\pi = 1$ et $\pi = -1$. Les arcs bleus représentent deux exemples de chemins reliant des TRIM avec des valeurs de π_j identiques et devant donc croiser la surface de Fermi un nombre pair de fois. L’arc rouge représente un exemple de chemin reliant des TRIM avec des valeurs de π_j opposées et devant donc croiser la surface de Fermi un nombre impair de fois. Les figures (a) et (b) représentent les configurations de surface de Fermi générique d’un isolant topologique faible. Dans les deux cas, le nombre de surfaces de Fermi fermées est pair. La figure (c) représente la configuration de surface de Fermi générique d’un isolant topologique fort, comportant un nombre impair de surfaces de Fermi fermée.

un isolant topologique fort est caractérisé par un nombre impair de π valant -1 . Or, en s’inspirant des isolants topologiques à deux dimensions, on montre qu’un chemin dans la zone de Brillouin joignant deux TRIM $\tilde{\Gamma}_j$ et $\tilde{\Gamma}_{j'}$, avec des valeurs π_j et $\pi_{j'}$ opposées doit traverser un nombre impair de fois la surface de Fermi, tandis que ce nombre doit être pair si π_j et $\pi_{j'}$ sont égaux. Un isolant topologique fort étant caractérisé par un nombre impair de π_j égaux à -1 , on montre alors que le nombre de surfaces de Fermi fermées est impair pour les isolants topologiques forts, tandis que ce nombre est pair pour les isolants topologiques faibles ou les isolants triviaux. (Fig.II.6). Il peut y avoir en plus des surfaces de Fermi ouvertes, mais, à cause de la symétrie de renversement du temps, cela n’influe pas sur le lien entre la parité du nombre de surface de Fermi fermée et la nature triviale ou topologique de l’isolant.

L’intérêt de l’utilisation des mesures d’oscillations magnétiques quantiques est de pouvoir compter le nombre de surfaces de Fermi fermées en comptant le nombre de fréquences fondamentales dans le spectre des oscillations quantiques des états de surface du matériau étudié. En effet, les surfaces de Fermi ouvertes ne contribuent pas aux oscillations quantiques.

En pratique, on peut d’abord déterminer la nature surfacique ou volumique de la poche de porteurs de charge considérée en observant la dépendance des oscillations quantiques en fonction de la direction du champs magnétique par rapport à la surface. En effet la fréquence d’oscillation est proportionnelle à la section transverse (par rapport au champ magnétique) de la surface de Fermi. Pour des

porteurs de charge volumiques, la surface de Fermi est plus ou moins sphérique, et la surface de la section transverse dépendra peu de l'orientation du champ magnétique. Pour des porteurs de charge surfaciques, en revanche, la surface de Fermi peut être assimilée à un disque, et la section transverse dépend alors pleinement de l'orientation du champ magnétique.⁸

Une fois les contributions dues à la densité résiduelle de porteurs de charge volumiques éliminées, différentes fréquences fondamentales peuvent être résolues en observant les pics dans la transformée de Fourier des données des oscillations quantiques. De plus, si deux fréquences F_1 et F_2 étaient trop proches pour être résolues ainsi, elles pourraient toujours être observées par l'apparition d'un facteur de modulation pour les oscillations quantiques

$$\mathcal{R} = \cos\left(\pi \frac{\delta F}{H}\right), \quad (\text{II.71})$$

où $\delta F = F_1 - F_2$. On observerait ainsi une disparition des oscillations quantiques pour certaines orientations et intensités du champ magnétique, connue sous le nom de *spin zeros* [Sho09].

On peut argumenter que deux surfaces de Fermi de même taille donneront la même fréquence fondamentale et ne seront donc pas discernables. En effet, il peut exister des situations où l'effet Zeeman, le couplage spin orbite, le désordre ou même une pression uni-axiale ne permettent pas de lever la dégénérescence des surfaces de Fermi. On suppose cependant que ces cas sont rares, et que l'étude des oscillations quantiques permettrait une première évaluation de la nature topologique forte ou non des matériaux tridimensionnels.

⁸. Avec une dépendance typique en $\cos(\vartheta)$ où ϑ est l'angle entre la direction du champ magnétique et la normale à la surface de Fermi.

Chapitre III

Méthodes Numériques

Sommaire

1	Obtention d'une jauge cylindrique ou lisse	52
1.1	Position du problème	52
1.2	Méthode de transport parallèle	53
1.3	Construction d'une jauge cylindrique	54
1.4	Méthode de la phase de jonction	57
1.5	Exemple d'application	58
1.6	Construction d'une jauge lisse	59
2	Construction des centres de charge des fonctions de Wannier	60
2.1	Méthode des centres de charge des fonctions de Wannier	61
2.2	Propriétés des centres de charge des fonctions de Wannier	62
2.3	Exemple d'application	63
3	Construction des états de bord	64
3.1	Principe de construction	64
3.2	Méthode de construction explicite des états de bord . .	64
3.3	Exemple d'application	65
4	Nombre de Chern	67
4.1	Méthode de calcul direct du nombre de Chern	67
4.2	Exemple d'application	68

Dans ce chapitre, nous discutons les différentes méthodes numériques que j'ai employées au cours de ma thèse. Nous verrons tout d'abord comment définir les états de Bloch dans une jauge cylindrique ou lisse numériquement. Une fois la jauge cylindrique obtenue, nous discutons deux méthodes pour le calcul de l'invariant de Chern, la première s'appuyant sur la présence d'une obstruction, et la deuxième sur le déplacement des centres de Wannier. Nous montrons ensuite comment adapter numériquement la méthode de construction des états de bord proposée par [KBWM⁺08] pour des cas plus complexes. Enfin, nous verrons que dans certains cas, il est possible d'obtenir la valeur de l'invariant topologique en calculant directement le nombre de Chern des bandes partenaires de Kramers. On ne considère ici que des systèmes sur réseau carré, avec un pas de réseau $a = 1$ afin de simplifier les notations. Les méthodes sont cependant adaptables à d'autres géométries de réseau.

1 Obtention d'une jauge cylindrique ou lisse

Comme nous l'avons vu dans les deux chapitres précédents, la description de la topologie d'une structure de bandes donnée s'appuie fortement sur la possibilité de définir les états propres de l'Hamiltonien de manière continue à l'intérieur de la zone de Brillouin. Dans le cas de la présence des symétries Θ et P simultanément, on peut calculer l'invariant topologique en ne considérant que les TRIM. Mais cela reste une exception, et de manière générale, les calculs présentés précédemment doivent être réalisés dans une jauge lisse ou cylindrique. Nous discutons ici l'obtention d'une telle jauge numériquement.

1.1 Position du problème

Dans certains cas simples, un calcul manuel ou un logiciel de calcul formel peuvent nous donner une expression des énergies et des fonctions d'onde en fonction de \mathbf{k} . Si cette expression ne contient pas de singularité (ou si les singularités sont facilement traitables), on peut alors procéder au calcul de l'invariant topologique. Le plus souvent en revanche, une telle expression, si elle existe, est trop complexe pour être utilisable. On doit alors se contenter de diagonaliser numériquement $H_{\mathbf{k}}$ pour un certain nombre de points de la BZ.

En pratique, une fois les paramètres du Hamiltonien fixés, on se donne une grille de $N \times N$ points sur la BZ. On diagonalise alors $H_{\mathbf{k}}$ pour chacun des points de la grille indépendamment. Le problème vient du fait que, en faisant ainsi, on obtient une définition fortement discontinue des fonctions d'onde.

En effet, considérons par exemple deux points voisins de la grille, \mathbf{k} et $\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}$, et les sous-espaces propres de plus basse énergie $\mathbb{E}_{\mathbf{k}}^0$ et $\mathbb{E}_{\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}}^0$, en chacun de ces points.¹ Dans le cas où ces sous-espaces sont de dimension 1, $\mathbb{E}_{\mathbf{k}}^0$ est engendré par $|u_{\mathbf{k}}^0\rangle$, et $\mathbb{E}_{\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}}^0$ par $|u_{\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}}^0\rangle$. Si les $|u^0\rangle$ sont définis continument, on doit avoir

$$\lim_{\Delta\mathbf{k} \rightarrow 0} \langle u_{\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}}^0 | u_{\mathbf{k}}^0 \rangle = 1. \quad (\text{III.1})$$

1. La discussion qui suit reste valide quel que soit le sous-espace propre considéré.

1. Obtention d'une jauge cylindrique ou lisse

Sur la grille, on peut donc considérer que la définition des $|u^0\rangle$ est continue si $\langle u_{\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}}^0 | u_{\mathbf{k}}^0 \rangle$ est très proche de 1. Cependant, même pour des grilles suffisamment fines, on obtient des $|u^0\rangle$ tels que

$$\langle u_{\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}}^0 | u_{\mathbf{k}}^0 \rangle = r e^{i\theta}, \quad (\text{III.2})$$

où r est réel et très proche de 1, mais θ prend des valeurs aléatoires dans $[-\pi, \pi]$.

Si $\mathbb{E}_{\mathbf{k}}^0$ est de dimension \mathcal{N} , en chaque point \mathbf{k} la diagonalisation numérique nous donne \mathcal{N} vecteurs $u_{\mathbf{k},n}^0$. La matrice de recouvrement $M_{mn}^{\mathbf{k},\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}}$, donnée par

$$M_{mn}^{\mathbf{k},\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}} = \langle u_{m,\mathbf{k}}^0 | u_{n,\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}}^0 \rangle, \quad (\text{III.3})$$

devrait tendre vers l'identité lorsque $\Delta\mathbf{k}$ tend vers zéro, dans le cas continu. Cependant, numériquement, au lieu d'obtenir une matrice M presque égale à l'identité pour une valeur finie de $\Delta\mathbf{k}$, on obtient une matrice très proche d'une matrice unitaire, mais pas nécessairement de l'identité.

Dans les deux cas, une redéfinition des $|u_{n,\mathbf{k}}^0\rangle$ est nécessaire afin de rétablir la continuité. C'est ici qu'intervient la méthode dite de transport parallèle présentée dans le paragraphe suivant.

1.2 Méthode de transport parallèle

L'idée générale de la méthode est la suivante : étant donné un chemin discret dans la zone de Brillouin (on choisit par exemple $k_y = 0$ et k_x qui varie entre 0 et 2π par incréments de $\Delta k_x = 2\pi/N$), on va redéfinir les $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ de proche en proche de manière à avoir une définition la plus parallèle possible. Pour cela on va demander que pour deux points voisins \mathbf{k}_j et $\mathbf{k}_{j+1} = \mathbf{k}_j + \Delta\mathbf{k}_x$, les $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ soient définis tels que $\langle u_{n,\mathbf{k}_j} | u_{n,\mathbf{k}_{j+1}} \rangle$ soit réel et positif.

Pour une bande isolée, le principe est simple. Étant donné un ensemble d'états $\{|u_{\mathbf{k}_j}\rangle\}_{j=0..N}$ le long du chemin, la redéfinition continue sera donnée par les \tilde{u} construits en suivant :

- $|\tilde{u}_{\mathbf{k}_0}\rangle = |u_{\mathbf{k}_0}\rangle$,
- pour $j = 1$ à N successivement, $|\tilde{u}_{\mathbf{k}_j}\rangle = e^{-i\theta_j} |u_{\mathbf{k}_j}\rangle$ avec $\theta_j = \text{Im} \log \langle \tilde{u}_{\mathbf{k}_{j-1}} | u_{\mathbf{k}_j} \rangle$.

Si le chemin est fermé, l'état qui a été transporté peut différer de l'état initial par une phase. Dans notre exemple, cela revient à avoir

$$\langle \tilde{u}_{n,\mathbf{k}_0=(0,0)} | \tilde{u}_{n,\mathbf{k}_N=(2\pi,0)} \rangle = e^{i\tilde{\theta}}. \quad (\text{III.4})$$

On a donc une définition continue entre $k_x = 0$ et $k_x = 2\pi$, mais non périodique (sauf si $\tilde{\theta} = 0$). On peut alors rétablir la périodicité en répartissant la phase $\tilde{\theta} \in [-\pi, \pi]$ sur l'ensemble du chemin en définissant

$$|u'_{\mathbf{k}_j}\rangle = e^{-i\frac{j\tilde{\theta}}{N}} |\tilde{u}_{\mathbf{k}_j}\rangle. \quad (\text{III.5})$$

Dans le cas dégénéré², on ne peut pas traiter les bandes séparément. Il faut donc considérer des groupes de \mathcal{N} bandes isolées (séparées énergétiquement de

2. Par exemple pour les bandes deux fois dégénérées en présence de P et Θ .

l'ensemble des autres bandes). Une fois de plus, l'objectif est de redéfinir les $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ pas à pas pour obtenir une définition continue, où la matrice de recouvrement M définie à l'équation (III.3) est Hermitienne avec toutes ses valeurs propres positives. Pour $j = 1$ à N successivement, on réalise la décomposition en valeurs singulières de M

$$M = V\Sigma W^\dagger, \quad (\text{III.6})$$

où Σ est une matrice diagonale réelle positive et V et W sont unitaires. On applique alors la matrice unitaire $\mathcal{U} = WV^\dagger$ dans l'espace des états $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ en définissant :

$$|\tilde{u}_{m,\mathbf{k}_j}\rangle = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \mathcal{U}_{nm}^{\mathbf{k}_j} |u_{n,\mathbf{k}_j}\rangle. \quad (\text{III.7})$$

La nouvelle matrice de recouvrement \tilde{M} est alors de la forme $V\Sigma V^\dagger$, qui est bien Hermitienne et de valeurs propres positives. En réalisant cette transformation pour tous les \mathbf{k}_j du chemin successivement, on obtient un ensemble d'états $|\tilde{u}_{n,\mathbf{k}_j}\rangle$ définis continument.

Une fois de plus, si on transporte $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ le long d'un chemin fermé, on obtient des états en \mathbf{k}_N reliés aux états en \mathbf{k}_0 par une rotation unitaire Λ donnée par :

$$|\tilde{u}_{m,\mathbf{k}_0}\rangle = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \Lambda_{nm} |\tilde{u}_{n,\mathbf{k}_N}\rangle. \quad (\text{III.8})$$

Pour rétablir la périodicité, on utilise la même astuce que pour le cas non dégénéré. On commence par trouver la matrice unitaire R qui diagonalise Λ ,³ puis on l'applique à l'ensemble des états en chaque point \mathbf{k}_j . Cela permet de conserver la continuité, et on obtient une nouvelle matrice Λ diagonale, de valeurs propres $\lambda_n = e^{i\tilde{\theta}_n}$, $\tilde{\theta}_n \in [-\pi, \pi[$. On répartit alors ces phases en définissant :

$$|u'_{n,\mathbf{k}_j}\rangle = e^{-i\frac{j\tilde{\theta}_n}{N}} |\tilde{u}_{n,\mathbf{k}_j}\rangle. \quad (\text{III.9})$$

Pour un chemin fermé donné, on peut donc obtenir une définition des états propres de $H_{\mathbf{k}}$, continue et monovaluée (périodique).

1.3 Construction d'une jauge cylindrique

Nous allons maintenant montrer que la méthode de transport parallèle permet d'obtenir numériquement une jauge cylindrique pour les états propres de $H_{\mathbf{k}}$.

On considère un Hamiltonien de liaisons fortes, symétrique par renversement du temps, sur un réseau carré. On se donne une grille régulière de $N \times N$ points sur la zone de Brillouin, contenant $\mathbf{k} = (0, 0)$. On suppose que, en chacun de ces points, $H_{\mathbf{k}}$ a pu être diagonalisé, et que ses vecteurs propres $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ ont été classés par énergie croissante. De plus on considère un système isolant. Il existe donc un gap non nul entre les bandes remplies et la première bande de conduction. Si les bandes de valence sont séparées en groupes de bandes isolées, la procédure qui suit peut être appliquée à chaque groupe séparément. Dans ce qui suit, on considère donc un ensemble de $2\mathcal{N}$ bandes isolées et remplies.

3. R existe car Λ est unitaire, en tant que matrice de changement de base.

1. Obtention d'une jauge cylindrique ou lisse

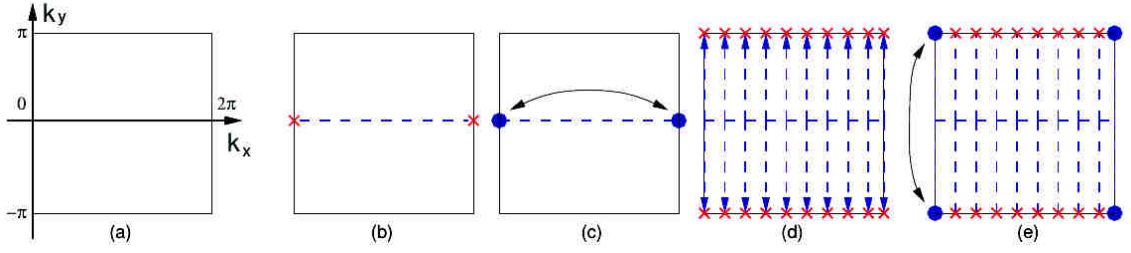


Figure III.1 – (a) Zone de Brillouin dans l’espace des \mathbf{k} . (b) Les états sont transportés parallèlement le long de $k_y = 0$. La périodicité n’est pas assurée. (c) La périodicité est restaurée à $k_y = 0$. (d) Pour chaque valeur de k_x , les états sont transportés de $k_y = 0$ à $k_y = \pm\pi$. (e) La périodicité est restaurée à $k_x = 0$ et $k_x = 2\pi$. Figure extraite de [SV12].

Procédure d’obtention d’une jauge cylindrique (cf. Fig.III.1)

i)-Choix de jauge à $\mathbf{k} = (0, 0)$.

À $\mathbf{k} = (0, 0)$ le théorème de Kramers s’applique. Les $2\mathcal{N}$ états peuvent donc être rassemblés en \mathcal{N} paires de Kramers ($|u_{\alpha,0}^I\rangle, |u_{\alpha,0}^{II}\rangle$). On conserve $|u_{\alpha,0}^I\rangle$ donné par la diagonalisation numérique, mais on redéfinit $|u_{\alpha,0}^{II}\rangle$ de telle sorte que $|u_{\alpha,0}^{II}\rangle = \hat{\Theta}K|u_{\alpha,0}^I\rangle$ (ou $\hat{\Theta}$ et K ont été définis à l’équation (II.22)).

ii)-Transport parallèle de $k_x = 0$ à $k_x = 2\pi$ pour $k_y = 0$.

En utilisant la méthode du paragraphe 1.2, on redéfinit les $|u_{\alpha,\mathbf{k}}^s\rangle$ pas à pas, pour obtenir une définition continue pour $k_y = 0$ et k_x variant de 0 à 2π . On rétablit ensuite la périodicité entre $k_x = 0$ et $k_x = 2\pi$. On obtient ainsi une définition continue des $|u_{\alpha,\mathbf{k}}^s\rangle$ sur la section circulaire $k_y = 0$ de la BZ vue comme un tore. La procédure ne modifie pas les $|u_{\alpha,\mathbf{k}}^s\rangle$ à $\mathbf{k} = (0, 0)$.

iii)-Transport parallèle selon k_y .

Pour chaque valeur de k_x , on utilise la méthode de transport parallèle d’abord de $(k_x, 0)$ à (k_x, π) puis de $(k_x, 0)$ à $(k_x, -\pi)$. La procédure ne modifie pas les $|u_{\alpha,\mathbf{k}}^s\rangle$ à $k_y = 0$. La procédure de transport parallèle est identique à $k_x = 0$ et $k_y = 2\pi$, grâce à la périodicité rétablie à l’étape précédente. Pour toutes valeurs de k_y , on a donc $|u_{\alpha,(0,k_y)}^s\rangle = |u_{\alpha,(2\pi,k_y)}^s\rangle$.

iv)-Périodicité selon k_y à $k_x = 0$.

Pour rétablir la périodicité entre $(0, \pi)$ et $(0, -\pi)$ il faut appliquer une transformation $T(k_y)$ (donnée par la procédure du paragraphe 1.2) en chaque point du chemin $(0, k_y)$. Cependant, cela briserait la continuité selon k_x en 0 . Pour éviter cela, pour un k_y donné, la transformation $T(k_y)$ est appliquée à l’ensemble des points (k_x, k_y) . Cela restaure donc aussi la périodicité à $k_x = 2\pi$.

Jusque là, l’ensemble des opérations effectuées conserve la symétrie par renversement du temps, de telle sorte que les états obtenues respectent

$$\begin{aligned} |u_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle &= -\hat{\Theta}K|u_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle, \\ |u_{\alpha,-\mathbf{k}}^{II}\rangle &= \hat{\Theta}K|u_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle. \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

On a donc obtenu une jauge continue sur la zone de Brillouin vue comme un

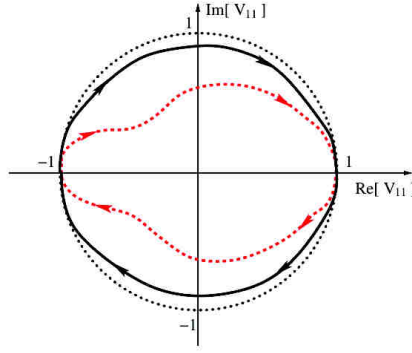


Figure III.2 – Trajectoire de $V_{11}(k_x)$ dans le plan complexe pour un modèle à deux bandes, avec k_x variant de 0 à 2π , avant (ligne pointillée rouge) et après (ligne noire) la minimisation. Après minimisation, la courbe est très proche du cercle unité (ligne pointillée noire). Figure extraite de [SV12]

cylindre, et qui respecte la symétrie par renversement du temps. Si on définit

$$V_{mn}(k_x) = \langle u_{m,(k_x,-\pi)} | u_{n,(k_x,\pi)} \rangle \quad (\text{III.11})$$

il suffit alors, pour obtenir une jauge cylindrique telle que définie dans le paragraphe 1.6, que $V(k_x)$ soit diagonale pour tout k_x . En effet, cela est nécessaire pour respecter l'équation (I.65), dernière condition pour l'obtention d'une jauge cylindrique. Il peut exister des cas particuliers où la présence de symétries supplémentaires⁴ rend les $V(k_x)$ diagonaux pour toutes valeurs de k_x dès cette étape. La jauge est donc cylindrique, et la procédure est terminée. Cependant, de manière générale, il faut diagonaliser $V(k_x)$ pour obtenir une jauge cylindrique. Grâce à l'étape *iv*) de la procédure, $V(k_x)$ est diagonale pour $k_x = 0$ et $k_x = 2\pi$. Toutefois, pour $k_x \in]0, 2\pi[$, $V(k_x)$ est unitaire mais pas nécessairement diagonale. Deux étapes supplémentaires sont alors nécessaires pour obtenir une jauge cylindrique.

v)-Minimisation de \mathcal{V}

On introduit

$$\mathcal{V} = \frac{1}{N} \sum_{k_x} \sum_{m \neq n} |V_{mn}(k_x)|^2, \quad (\text{III.12})$$

qui mesure la distance de $V(k_x)$ à une matrice diagonale. On utilise alors la liberté sur le choix des $|u_{\alpha,0}^I\rangle$ au tout début de la procédure, pour essayer d'avoir des matrices $V(k_x)$ aussi diagonales que possible. Cela peut être réalisé avec un algorithme de minimisation [SV12], ou simplement en testant plusieurs valeurs de $|u_{\alpha,0}^I\rangle$ et en choisissant celle qui donne la plus petite valeur de \mathcal{V} . On obtient ainsi des matrices $V(k_x)$ avec des éléments diagonaux très grands devant les éléments non-diagonaux (*cf.* Fig. III.2).⁵

vi)-Diagonalisation de $V(k_x)$

La matrice $V(k_x)$ est unitaire et à diagonale dominante. Elle peut donc être dia-

4. Par exemple, si S^z est conservé et que $|u_{\alpha,0}^I\rangle$ et $|u_{\alpha,0}^{II}\rangle$ appartiennent à des secteurs distincts de S^z .

5. Pour une paire de bandes, on peut facilement espérer des éléments hors diagonaux de l'ordre de 10^{-2} .

1. Obtention d'une jauge cylindrique ou lisse

gonalisée par une matrice unitaire $\mathcal{U}(k_x)$ très proche de l'identité (on peut de plus choisir les éléments diagonaux de $\mathcal{U}(k_x)$ réels et positifs). Pour chaque valeur de k_x , on applique alors $\mathcal{U}(k_x)$ dans l'ensemble des états au point (k_x, k_y) . L'écart de $\mathcal{U}(k_x)$ à l'identité est du même ordre de grandeur que l'écart de $V(k_x)$ à une matrice diagonale. L'intérêt de minimiser \mathcal{V} est donc de préserver la continuité lors de l'application de $\mathcal{U}(k_x)$.

Ces deux dernières étapes préservent elles aussi la condition de l'équation (III.10), ainsi que la périodicité selon k_x . Ayant diagonalisé $V(k_x)$, on obtient bien une jauge cylindrique. La jauge cylindrique ayant été construite pour les $|u_{\alpha,\mathbf{k}}^s\rangle$ états propres de $H_{\mathbf{k}}$, on peut de manière directe transposer les résultats aux états $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^s\rangle$ vecteurs propres de H .

Méthode d'identification des isolants topologiques :

1.4 Méthode de la phase de jonction

Dans ce paragraphe nous discutons la première méthode d'identification des isolants topologiques.

Dans le paragraphe 1.6 du chapitre II, nous avons vu qu'une valeur non nulle de l'invariant topologique Z_2 est une obstruction à définir une jauge lisse qui respecte la symétrie par renversement du temps de l'équation (III.10). En effet, pour un isolant topologique non trivial, le respect de la symétrie de renversement du temps impose la présence d'une discontinuité dans la définition des états propres sur le tore. Dans le cas de la jauge cylindrique, cette discontinuité a été repoussée aux extrémités $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$ de la zone de Brillouin vue comme un cylindre. Pour caractériser la nature triviale ou topologique d'un l'isolant, il suffit donc d'étudier cette discontinuité .

On considère ici une unique paire de bandes α . En effet, $V(k_x)$ ayant été diagonalisée, les bandes sont maintenant indépendantes les unes des autres, permettant de considérer les paires de bandes séparément. Pour étudier la discontinuité aux bords du cylindre, on observe la phase de jonction $\phi_\alpha(k_x)$ définie par

$$e^{i\phi_\alpha(k_x)} = \langle u_{\alpha,(k_x,-\pi)}^I | u_{\alpha,(k_x,\pi)}^I \rangle. \quad (\text{III.13})$$

Son enroulement est caractéristique de la topologie de la discontinuité. En effet, le nombre de tours (comptés algébriquement) que fait $e^{i\phi_\alpha(k_x)}$ autour de l'origine lorsque k_x parcourt $[0, 2\pi]$, noté Δ_α , est un entier qui ne peut être modifié sans briser la condition de symétrie par renversement du temps de l'équation (III.10), et qui correspond au nombre de Chern de la bande $|u_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$. On observe par ailleurs que la phase de jonction pour l'autre bande (II) s'enroule dans l'autre sens, ce qui est cohérent avec une valeur du nombre de Chern opposée. Lorsque l'enroulement est nul, la phase $\phi_\alpha(k_x)$, peut être absorbée dans une redéfinition continue des états $|u_{\alpha,\mathbf{k}}^s\rangle$ (cf. paragraphe 1.6). On peut alors obtenir une jauge lisse qui respecte la symétrie de renversement du temps. En revanche, lorsque la phase s'enroule, cela n'est pas possible⁶.

6. On peut relier cela au fait qu'une valeur de l'invariant topologique Z_2 non nulle est une obstruction à définir une jauge à la fois lisse et cylindrique.

L'équation (II.38) montre que l'invariant topologique peut être calculé, dans une jauge cylindrique, à partir des nombres de Chern des bandes indexées I remplies. On peut donc réécrire l'invariant topologique en fonction des enroulements Δ_α , comme :

$$\Delta = \sum_{\alpha} \Delta_{\alpha} \bmod 2. \quad (\text{III.14})$$

Il est en fait possible d'obtenir les Δ_α dès l'étape *iv*) de la procédure du paragraphe 1.3. À cette étape, $V(k_x)$ n'est pas encore diagonalisée. Les éléments diagonaux de $V(k_x)$, les $\langle u_{\alpha,(k_x,-\pi)}^I | u_{\alpha,(k_x,\pi)}^I \rangle$, ne sont donc pas en général une phase pure mais un nombre complexe de module inférieur ou égal à 1. Leurs enroulements sont cependant bien définis, comme on peut le voir sur la figure III.2, qui décrit une bande non triviale (qui s'enroule une et une seule fois). Cela permet donc de gagner du temps en déterminant la phase topologique sans avoir à diagonaliser $V(k_x)$.

1.5 Exemple d'application

Dans ce paragraphe, on illustre la méthode de la phase de jonction en l'appliquant à l'Hamiltonien de BHZ donné par l'équation (II.55). On fixe $\mu = 0$, $\Delta\mu = 5$, $t = 1$, et $\alpha = 2$. Afin d'explorer les différentes zones de diagramme de phase présenté à la figure II.3, on teste trois valeurs de Δt : 2, 0 et -2 . D'après le diagramme de phase, on doit obtenir la phase triviale pour $\Delta t = 0$ et une phase topologique pour $\Delta t = 2$ et $\Delta t = -2$. Pour rappel, l'Hamiltonien de BHZ est un Hamiltonien à quatre bandes. Grâce à la symétrie de renversement du temps et à la symétrie d'inversion, chaque bande est deux fois dégénérée. On obtient donc deux paires de bandes, qu'on indexe $\alpha = 1$ et $\alpha = 2$, chacune composée d'une bande I et d'une bande II . À demi-remplissage, seule la paire de bandes $\alpha = 1$ est remplie.

L'Hamiltonien conserve S_z . Ainsi, on a pu s'arrêter à l'étape *iv*) de la procédure d'obtention d'une jauge cylindrique décrite dans le paragraphe 1.3 du chapitre III, et tout de même obtenir que le produit scalaire $V_{11}(k_x) = \langle u_{\alpha,(k_x,-\pi)}^I | u_{\alpha,(k_x,\pi)}^I \rangle$ nous donne uniquement une phase notée $e^{i\phi_\alpha(k_x)}$. Ainsi, le tracé de $V_{11}(k_x)$ dans le plan complexe comme une fonction paramétrique de k_x donne un cercle ou un arc de cercle de rayon 1 (on observe des ellipses dans la figure III.3, à cause du choix d'échelle pour les axes). On a fait le choix de tracer aussi $\phi_\alpha(k_x)$ pour k_x variant de 0 à 2π . Cela permet de compter réellement combien de fois la phase s'enroule, ce qui n'est pas visible sur un tracé paramétrique. Dans la figure III.3, chaque paire de colonnes correspond à une paire de bandes différente. Les paires de bandes sont classées par énergie croissante.

Pour $\Delta t = -2$ et $\Delta t = 2$, on observe que la phase s'enroule une unique fois pour chaque paire de bandes. On obtient donc bien un isolant topologique à demi-remplissage, et un isolant trivial pour un remplissage total (car pour le remplissage total, il faut sommer la contribution des deux paires de bandes).

Pour $\Delta t = 0$, on observe que la phase ne s'enroule pas. En fait, les phases $\phi_\alpha(k_x)$ sont identiquement égales à 0 dans ce cas, ce qui permet de montrer qu'on

1. Obtention d'une jauge cylindrique ou lisse

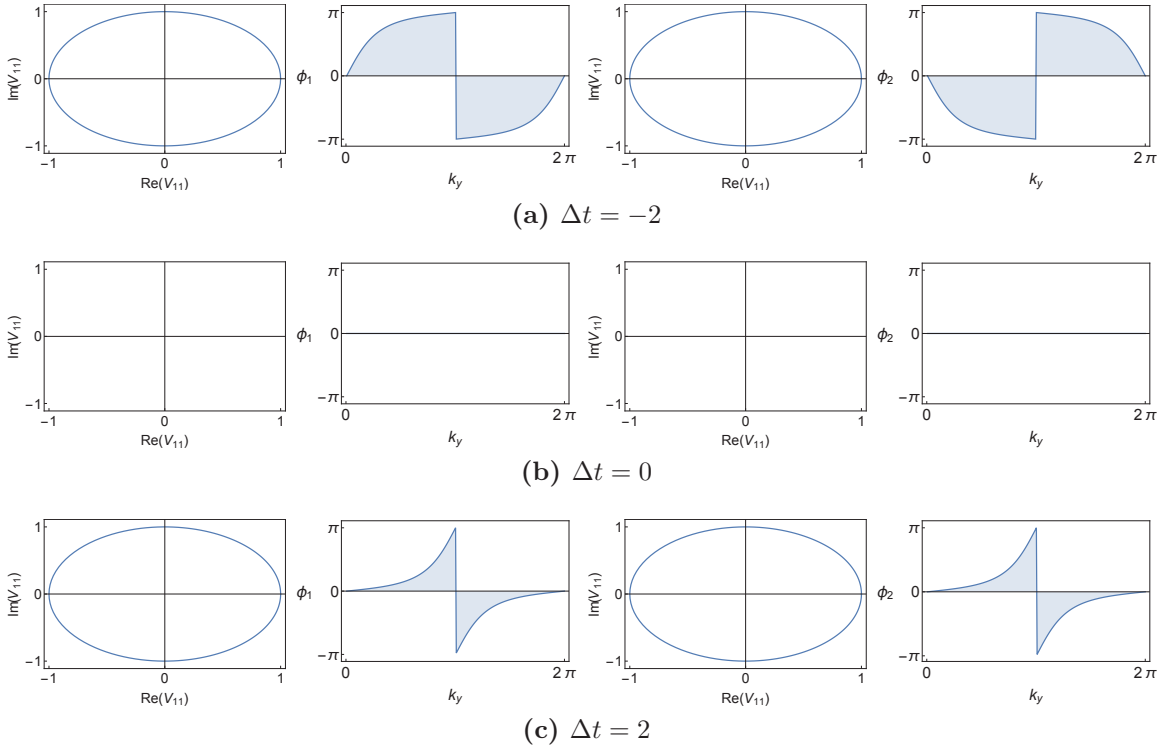


Figure III.3 – Résultats de la méthode de la phase de jonction pour $\mu = 0$, $\Delta\mu = 5$, $t = 1$, $\alpha = 2$ et différentes valeurs de Δt . Les colonnes 1 et 3 correspondent au tracé de $V_{11}(k_x)$ dans le plan complexe comme une fonction paramétrique de k_x pour les bandes $\alpha = 1$ et $\alpha = 2$ respectivement. Les colonnes 2 et 4 correspondent au tracé en fonction de k_x de ϕ_1 et ϕ_2 respectivement. Cela permet de vérifier, dans les cas où $e^{i\phi_\alpha}$ s'enroule autour de l'origine du plan complexe, combien de tours (comptés algébriquement) sont réalisés lorsque k_y parcourt $[0, 2\pi]$.

a réussi à obtenir une jauge à la fois lisse et symétrique. On obtient donc bien un isolant trivial à la fois pour un demi-remplissage et pour un remplissage total.

On peut remarquer que les comportements de la paire de bandes de valence et de la paire de bandes de conduction sont très similaires. Cependant, pour $\Delta t = -2$, l'enroulement pour les deux paires de bandes se fait dans des sens différents, tandis qu'il se fait dans le même sens pour $\Delta t = 2$. Cela n'est pas dû à une erreur dans un des deux cas. En effet, le sens d'enroulement est décidé en fonction du choix de $|u_{\alpha, \vec{0}}^I\rangle$, au début de la procédure pour obtenir une jauge lisse, et ce choix est aléatoire dans notre algorithme.

1.6 Construction d'une jauge lisse

Dans ce paragraphe, nous allons construire une jauge lisse à partir de la jauge cylindrique. Une fois de plus, $V(k_x)$ ayant été diagonalisée, on peut considérer les paires de bandes indépendamment.

Pour une paire de bandes α dont la phase de jonction ne s'enroule pas, appliquer la transformation

$$W(k_x, k_y) = \left(V^\dagger(k_x) \right)^{k_y/2\pi}, \quad (\text{III.15})$$

en chaque point (k_x, k_y) permet d'obtenir une jauge à la fois lisse et cylindrique. Cette transformation est en effet continue et préserve la relation de symétrie par renversement du temps de l'équation (III.10), tout en changeant $V(k_x)$ en l'identité, et donc en supprimant la discontinuité.

Pour une paire de bandes qui s'enroulent, une telle transformation ne permet pas d'obtenir une jauge lisse. On a en effet besoin d'une transformation unitaire $\mathcal{S}_C(\mathbf{k})$ discontinue et dont l'enroulement compense celui de $V(k_x)$. Une telle transformation peut cependant être obtenue simplement. Par exemple, dans le cas d'une paire de bandes qui ne s'enroulent qu'une fois, on peut résoudre le problème en s'inspirant de la solution du modèle de Haldane. En effet, la fonction \mathcal{U}_{Hal} qui diagonalise l'Hamiltonien de Haldane permet de changer les deux bandes topologiquement triviales $|u_{\mathbf{k}}^I\rangle = (1, 0)$ et $|u_{\mathbf{k}}^{II}\rangle = (0, 1)$ (qui ne sont rien d'autre que les vecteurs de base du modèle de liaisons fortes) en deux bandes non triviales de nombre de Chern 1 et -1 : les états propres de l'Hamiltonien. Ainsi, \mathcal{U}_{Hal}^{-1} permet de changer deux bandes qui s'enroulent en deux bandes sans enroulement. On choisit donc $\mathcal{S}_C(\mathbf{k}) = \mathcal{U}_{Hal}^{-1}$.

On peut noter qu'il est possible de créer des modèles de Haldane modifiés, en rajoutant des termes de saut au-delà des seconds voisins, dont les bandes possèdent un nombre de Chern quelconque [SPF⁺12]. Ainsi, pour des bandes qui s'enroulent plusieurs fois, il est toujours possible de trouver la transformation $\mathcal{S}_C(\mathbf{k})$ adéquate. De plus, pour les systèmes à plusieurs bandes, il est possible d'appliquer une telle transformation paire de bandes par paire de bandes, pour obtenir une jauge lisse pour l'ensemble des bandes. Une fois l'enroulement de $V(k_x)$ supprimé, il peut rester une discontinuité sans enroulement qu'il est possible d'enlever grâce à une transformation comme celle de l'équation (III.15). On obtient alors une jauge lisse. Cependant, les transformations $\mathcal{S}_C(\mathbf{k})$ ne conservent pas la relation de renversement du temps de l'équation (III.10).

En conclusion, on a montré qu'il est toujours possible d'obtenir une jauge lisse ou cylindrique numériquement, et on a présenté une procédure pour les construire. On a aussi montré que pour certains isolants triviaux il est possible d'obtenir une jauge à la fois lisse et cylindrique.

2 Construction des centres de charge des fonctions de Wannier

Au paragraphe 3.4 du chapitre I, on a défini les fonctions de Wannier hybrides selon \hat{x} comme :

$$|x, k_y, n\rangle = \frac{\sqrt{N_x}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x e^{-ik_x x} |\Psi_{k_x, k_y, n}\rangle. \quad (\text{III.16})$$

On a ensuite montré que, dans une jauge périodique selon k_x , la position de leurs centres de charge selon \vec{x} sommée sur l'ensemble des bandes remplies est une fonction de k_y (qu'on a appelé la polarisation P_{k_y}) dont la variation entre $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$ donne le nombre de Chern du système considéré.

2. Construction des centres de charge des fonctions de Wannier

Enfin, on a montré que pour un système symétrique par renversement du temps, dans une jauge cylindrique, la variation entre $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$ de la polarisation calculée pour l'ensemble des bandes indexées I (notée $P_{k_y}^I$) permet d'obtenir l'invariant topologique Z_2 modulo 2 (*cf.* Eq.II.38).

L'idée ici est donc de construire explicitement $P_{k_y}^I$ afin de pouvoir suivre son évolution en fonction de k_y .

Méthode d'identification des isolants topologiques :

2.1 Méthode des centres de charge des fonctions de Wannier

On définit donc le centre de charge de la fonction de Wannier (WCC) hybride $|0, s, \alpha, k_y\rangle$ comme [KSV93, SV11] :

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^s = \langle 0, s, \alpha, k_y | \hat{x} | 0, s, \alpha, k_y \rangle, \quad (\text{III.17})$$

où s prend ses valeurs dans $\{I, II\}$. On peut alors montrer que :

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^s = i \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \langle u_{\alpha, k_x, k_y}^s | \nabla_{k_x} | u_{\alpha, k_x, k_y}^s \rangle. \quad (\text{III.18})$$

Dans le paragraphe 1.3, on a construit une jauge cylindrique sur une grille de $N \times N$ points de la BZ. Dans cette jauge⁷ on montre, en discrétisant le gradient, que :

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^s = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N \text{Im} \langle u_{\alpha, j, k_y}^s | u_{\alpha, j-1, k_y}^s \rangle. \quad (\text{III.19})$$

Cette quantité est alors simplement calculable en fonction de k_y . On observe que, même si $\bar{x}_{k_y, \alpha}^s$ n'est pas invariant de jauge, car défini modulo un nombre entier de pas du réseau, on peut obtenir une fonction continue de k_y , ce qui nous permet de suivre son évolution entre $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$.

On obtient alors la valeur de l'invariant topologique par

$$\Delta = \sum_{\alpha} (\bar{x}_{-\pi, \alpha}^I - \bar{x}_{\pi, \alpha}^I) \text{ mod } 2, \quad (\text{III.20})$$

où α est sommé sur l'ensemble des paires de bandes occupées. La différence $\bar{x}_{-\pi, \alpha}^I - \bar{x}_{\pi, \alpha}^I$ est bien un entier, car $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$ étant équivalents, la position des WCC doit être la même à une translation du réseau près, or ici, $a = 1$.

La méthode présentée ici est proche de la méthode de jonction de phase. Toutes deux s'appuient en effet sur l'obtention d'une jauge cylindrique. La première méthode met cependant plutôt l'accent sur l'invariant topologique en tant qu'observation, tandis que cette méthode s'appuie d'avantage sur le lien entre invariant topologique et polarisation. Ainsi, bien qu'équivalentes, ces deux méthodes mettent en valeur des aspects différents de la notion de topologie.

7. Les propriétés de la jauge cylindrique utiles ici sont la continuité et périodicité selon k_x , et la séparation des bandes I et II . La continuité selon k_y n'est pas nécessaire.

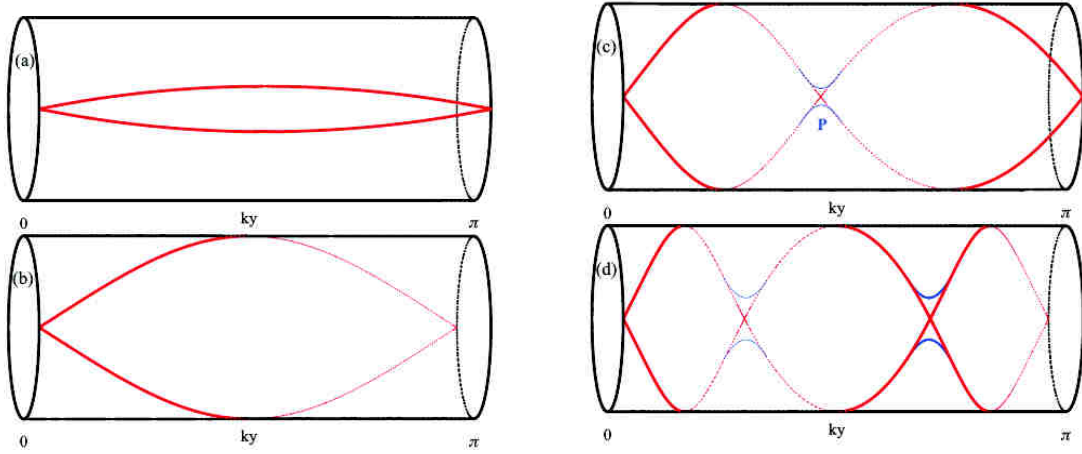


Figure III.4 – Schéma de positions des centres de Wannier des bandes I et II entre $k_y = 0$ et $k_y = \pi$. Le comportement entre $k_y = -\pi$ et $k_y = 0$ peut être obtenu par symétrie. On notera que les traits épais correspondent aux WCC sur l'avant du cylindre, tandis que les traits fins et pointillés correspondent aux WCC à l'arrière du cylindre. (a) Cas trivial : les centres de Wannier ne s'enroulent pas sur le cylindre. (b) Chaque centre de Wannier tourne une fois autour du cylindre entre $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$. C'est le cas typique pour un isolant topologique. (c) Chaque centre de Wannier tourne deux fois autour du cylindre entre $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$. Cependant, le point de croisement P n'est pas protégé par le renversement du temps et peut être évité en présence d'un terme perturbatif. Si le croisement est évité, ce cas est équivalent au premier. (d) Chaque centre de Wannier tourne trois fois autour du cylindre entre $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$. Si les deux croisements non protégés sont évités, ce cas est équivalent à (b). Figure extraite de [YQB⁺11].

2.2 Propriétés des centres de charge des fonctions de Wannier

Les centres de charge des fonctions de Wannier possèdent un certain nombre de propriétés que nous discutons ici.

Pour un système symétrique par renversement du temps, dans la jauge cylindrique obtenue précédemment, on montre que :

$$\Theta|X, I, \alpha, k_y\rangle = |X, II, \alpha, -k_y\rangle, \quad (\text{III.21})$$

ce qui nous donne

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^I = \bar{x}_{-k_y, \alpha}^{II}. \quad (\text{III.22})$$

On retrouve bien que les bandes I et II donnent une valeur opposée de l'invariant topologique. Mais cet invariant n'étant défini que modulo deux, cela n'a pas d'importance. C'est aussi cette égalité qui permet de relier l'invariant topologique de Fu et Kane (Eq.(II.36)) à la formule (III.20), en montrant qu'il est équivalent d'étudier les deux bandes I et II entre 0 et π , où d'étudier uniquement la bande I (ou la bande II) entre $-\pi$ et π .

Si le système est aussi symétrique par inversion, on a :

$$P|X, I, \alpha, k_y\rangle = |-X, I, \alpha, -k_y\rangle, \quad (\text{III.23})$$

2. Construction des centres de charge des fonctions de Wannier

ce qui cette fois correspond à :

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^I = -\bar{x}_{-k_y, \alpha}^I, \quad (\text{III.24})$$

tandis que l'action combinée de P et Θ donne

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^I = -\bar{x}_{k_y, \alpha}^{II}. \quad (\text{III.25})$$

Cela signifie que, pour un tel système, le centre de charge total pour les deux bandes est immobile, au centre de la cellule unité.

Enfin, on peut comprendre la classification Z_2 grâce à l'étude des fonctions de Wannier (*cf.* Fig.III.4). En effet, dans le cas où $\bar{x}_{-\pi, \alpha}^I - \bar{x}_{\pi, \alpha}^I = 2$ par exemple, cela implique que $\bar{x}_{k_y, \alpha}^I$ et $\bar{x}_{k_y, \alpha}^{II}$ se croisent deux fois en dehors des TRIM, en deux points k_y^c et $-k_y^c$. Ces croisements n'étant pas protégés par le renversement du temps, ils peuvent être évités en présence de perturbations. En revanche, la symétrie par renversement du temps assure que si un croisement est évité, l'autre l'est aussi. Pour la nouvelle courbe, qui évite le croisement, on a $\bar{x}_{-\pi, \alpha}^I - \bar{x}_{\pi, \alpha}^I = 0$. On peut ainsi relier sans fermer le gap, le cas $\bar{x}_{-\pi, \alpha}^I - \bar{x}_{\pi, \alpha}^I = 2$ et le cas $\bar{x}_{-\pi, \alpha}^I - \bar{x}_{\pi, \alpha}^I = 0$. D'où la classification Z_2 .

2.3 Exemple d'application

Dans ce paragraphe, on illustre la méthode de la phase des centres de charge des fonctions de Wannier hybrides en l'appliquant à l'Hamiltonien de BHZ. Comme précédemment, on fixe $\mu = 0$, $\Delta\mu = 5$, $t = 1$, et $\alpha = 2$, et on teste trois valeurs de Δt : 2, 0 et -2 . On a utilisé la jauge cylindrique obtenue par la procédure décrite paragraphe 1.3.

Les résultats sont présentés à la figure III.5. On observe que le système est topologique pour $\Delta t = -2$ et $\Delta t = 2$, et trivial pour $\Delta t = 0$. On peut de plus remarquer que les propriétés des WCC décrites au paragraphe précédent sont bien vérifiées.

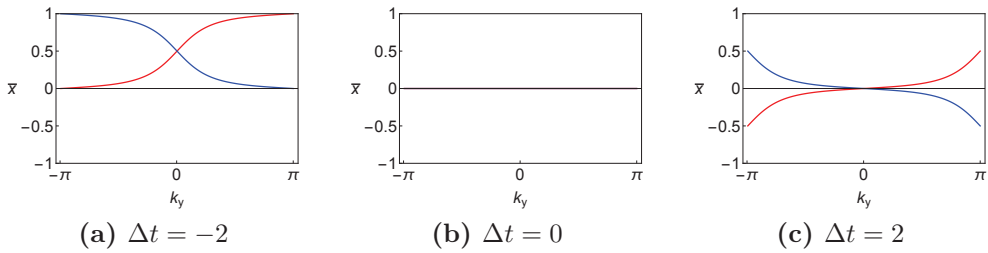


Figure III.5 – Tracé des positions des centres de charge des fonctions de Wannier hybrides en fonction de k_y , pour la paire de bandes de valence, pour différentes valeurs de Δt . Comme précédemment, on a choisi $\mu = 0$, $\Delta\mu = 5$, $t = 1$ et $\alpha = 2$. Les deux couleurs (bleu et rouge) correspondent aux deux bandes de valence I et II . On peut ainsi observer que les différentes propriétés des WCC présentées au paragraphe 2.2 sont bien respectées. On observe que le système est topologique pour $\Delta t = -2$ et $\Delta t = 2$, et trivial pour $\Delta t = 0$.

3 Construction des états de bord

Dans le paragraphe 3.3 du chapitre II, on a montré qu'il était possible de construire de manière analytique les états de bord du modèle de BHZ. Cependant la méthode reposait sur la faible complexité du modèle (pour pouvoir obtenir une équation aussi simple que (II.63)) et sur un certain nombre d'approximations difficiles à contrôler (on peut rater des états de bord si on ne les cherche qu'en $k_y = 0$ [KBWM⁺08]). On propose donc ici une méthode numérique de construction des états de bord qui peut être appliquée à un plus grand nombre de systèmes.

3.1 Principe de construction

L'Hamiltonien de BHZ conserve S^z . Cela nous a permis, dans le chapitre II, de séparer l'Hamiltonien en deux parties, $H_\uparrow(\mathbf{k})$ et $H_\downarrow(\mathbf{k})$, agissant sur des sous-espaces de Hilbert supplémentaires et images l'un de l'autre par l'opération de renversement du temps. On considère ici qu'une séparation similaire a pu être réalisée, et que $H(\mathbf{k})$ se décompose en $H^I(\mathbf{k})$ et $H^{II}(\mathbf{k})$ connues. Ainsi, on peut se contenter de construire les états de bord de $H^I(\mathbf{k})$, et obtenir ceux de $H^{II}(\mathbf{k})$ par symétrie. On considère cet Hamiltonien sur le plan semi-infini $x > 0$. Comme précédemment k_y reste un bon nombre quantique, mais pas k_x qu'il faut donc remplacer par $-i\partial_x$, et on utilise un ansatz de la forme $\Psi(x, k_y) = e^{\lambda x} \phi(k_y)$ pour les états de bord, où $\phi(k_y)$ est un vecteur indépendant de x . On cherche donc les solutions de l'équation aux valeurs propres

$$H^I(-i\lambda, k_y)\phi(k_y) = E\phi(k_y). \quad (\text{III.26})$$

Pour une valeur donnée de E et de k_y , on obtient plusieurs couples de solutions $(\lambda_m, \phi_m(k_y))$ (où on n'a gardé que les λ_m tels que $\text{Re}(\lambda_m) < 0$, afin de pouvoir normaliser $\Psi(x, k_y)$). On peut alors construire un état de bord d'impulsion k_y et d'énergie E de la forme :

$$\Psi(x, k_y) = \sum_m c_m e^{\lambda_m x} \phi_m(k_y). \quad (\text{III.27})$$

Enfin, la fonction d'onde devant s'annuler pour de grandes valeurs négatives de x (loin du bord, dans le vide), on impose la condition au bord $\Psi(0, k_y) = 0$. Cela implique une condition d'existence pour les états de bord : il faut que les vecteurs de l'ensemble $\{\phi_m(k_y)\}_m$ soient linéairement dépendants.

Méthode d'identification des isolants topologiques :

3.2 Méthode de construction explicite des états de bord

En pratique, on choisit une énergie E dans le gap isolant que l'on souhaite étudier. Attention, dans certains cas, deux bandes peuvent être séparées par un gap en toutes valeurs de \mathbf{k} sans pour autant qu'il n'existe de gap global.⁸ Dans ce

8. Le minimum de la bande supérieure étant plus bas que le maximum de la bande inférieure, le système possède un gap indirect négatif.

3. Construction des états de bord

cas, on ne peut jamais trouver une énergie entièrement dans le gap, et la méthode ne peut pas s'appliquer.

Une fois l'énergie choisie, on se donne un ensemble de N valeurs de k_y qu'on note $\{k_y^j\}_{j=1..N}$ et qu'on choisit en général réparties de manière homogène entre 0 et 2π : $k_y^j = 2\pi j/N$. On résout alors numériquement

$$\det(H^I(-i\lambda, k_y^j) - E) = 0 \quad (\text{III.28})$$

en fonction de λ pour chaque valeur de k_y^j . Pour chaque λ_m solution de (III.28), on cherche alors le, ou les, $\phi_m(k_y^j)$ solutions de l'équation (III.26). On a donc simplifié le problème de la résolution de (III.26) pour λ et $\phi(k_y^j)$ simultanément, en deux problèmes moins complexes à résoudre.

Le problème n'est cependant pas toujours simple, car $H^I(-i\lambda, k_y^j)$ n'est pas, en général, une matrice hermitienne. Son déterminant est donc complexe et la matrice n'est pas nécessairement diagonalisable. La recherche des zéros d'une fonction complexe n'est pas un problème évident ; et il faut être particulièrement critique sur les vecteurs propres obtenus, les imprécisions numériques pouvant donner deux vecteurs propres là où en réalité il n'y a qu'un seul vecteur propre mais un sous-espace caractéristique de dimension supérieur à un⁹.

En général, lorsque H^I est de dimension \mathcal{N} , on trouve \mathcal{N} couples $(\lambda_m, \phi_m(k_y))$ solutions, avec $\text{Re}(\lambda_m) > 0$ et $\phi_m(k_y)$ normalisé (pour des couplages plus proche voisins). On considère alors la matrice carré $\Phi(k_y)$, dont la m -ième colonne est $\phi_m(k_y)$. Pour que les vecteurs de l'ensemble $\{\phi_m(k_y)\}_m$ soient linéairement dépendants, et qu'on ait donc un état de bord, il suffit donc que $\det \Phi(k_y) = 0$. On peut donc tracer $|\det \Phi(k_y)|$ en fonction de k_y et regarder quand cette fonction s'annule. Il suffit alors de compter le nombre de fois où le déterminant s'annule pour savoir combien de paires d'état de bord H possède à l'énergie E . Ce nombre sera pair pour un isolant trivial et impair pour un isolant topologique (*cf.* 2.4). On obtient donc une troisième méthode pour caractériser numériquement la nature triviale ou topologique d'un isolant, et donc la valeur de son invariant topologique.

On pourrait argumenter que comme on n'échantillonne $|\det \Phi(k_y)|$ que pour des valeurs discrètes de k_y , on ne peut en général pas être sûr que $|\det \Phi(k_y)|$ s'annule réellement, même si cette fonction est continue. En pratique, cependant, on peut augmenter la densité de points k_y et obtenir ainsi une valeur arbitrairement proche de zéro pour $|\det \Phi(k_y)|$. De plus, cette méthode de calcul de l'invariant topologique vient en complément des deux autres méthodes présentées précédemment. Jusqu'à maintenant, les résultats des trois méthodes, lorsqu' applicables, ont toujours été cohérents.

3.3 Exemple d'application

Dans ce paragraphe, on illustre la méthode de construction explicite des états de bord en l'appliquant à l'Hamiltonien de BHZ (en fait, à la partie correspondant aux spins up, H^\uparrow). Comme précédemment, on fixe $\mu = 0$, $\Delta\mu = 5$, $t = 1$ et $\alpha = 2$, et on teste trois valeurs de Δt : 2, 0 et -2. Contrairement à la construction analytique

9. Dans le cas des matrices trigonalisables mais non diagonalisables.

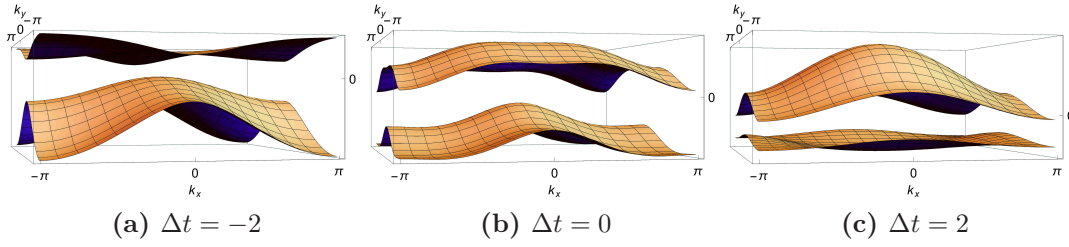


Figure III.6 – Relation de dispersion pour $\mu = 0$, $\Delta\mu = 5$, $t = 1$ et $\alpha = 2$ et différentes valeurs de Δt . On observe que, pour ces valeurs, il existe toujours un gap indirect positif à demi-remplissage. La méthode de construction explicite des états de bord peut donc être utilisée.

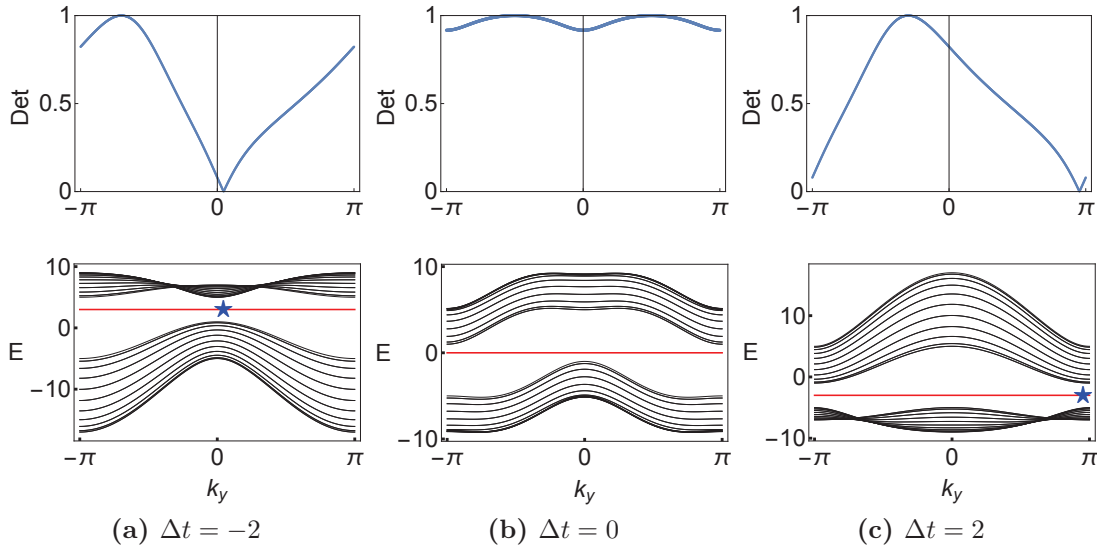


Figure III.7 – Sur la première ligne est tracée la valeur absolue du déterminant de la matrice $\Phi(k_y)$ en fonction de k_y . On rappelle qu'un zéro de cette fonction correspond à la présence d'un état de bord pour ce k_y , et cette énergie. Sur la deuxième ligne, la relation de dispersion projetée sur k_x est tracée en noir pour différentes valeurs des paramètres. Les lignes rouges correspondent aux énergies auxquelles nous avons cherché des états de bord. Les étoiles bleues correspondent aux états de bord de spin up que nous avons trouvé. Un nombre pair d'états de bord de spin up sur une ligne d'énergie donnée correspond à un isolant trivial, tandis qu'un nombre impair de tels états correspond à un isolant topologique.

4. Nombre de Chern

des états de bord, réalisée au paragraphe 3.3 du chapitre II, ici nous ne prenons pas $t = 0$ afin de simplifier le calcul, mais traitons le cas $t = 1$, plus générique. On peut vérifier (Fig.III.6) que pour ces valeurs, il existe toujours un gap indirect positif à demi-remplissage, permettant l'utilisation de la méthode de construction explicite des états de bord. On réalise la construction pour une énergie valant 3, 0 et -3 respectivement, pour $\Delta t = -2, 0$ et 2 .

Les résultats sont présentés à la figure III.7. La position des états de bord n'est pas exactement la même que pour le calcul analytique du paragraphe 3.3 du chapitre II, à cause du terme $t \neq 0$. Cependant on trouve bien un état de bord autour de $k_y = 0$ pour $\Delta t = -2$ et autour de $k_y = \pi$ pour $\Delta t = 2$. Dans les deux cas, on a donc affaire à un isolant topologique. Pour $\Delta t = 0$, il n'y a pas d'états de bord, signature d'un isolant trivial.

On peut de plus noter qu'avec cette méthode nous n'avons pas eu besoin de faire appel à des arguments de symétrie pour savoir où chercher les états de bord. En effet, on peut explorer l'ensemble des valeurs possibles de k_y .

4 Nombre de Chern

Méthode d'identification des isolants topologiques :

4.1 Méthode de calcul direct du nombre de Chern

Comme dans la section précédente (3), on considère ici des Hamiltoniens qui peuvent être simplement séparés en $H^I(\mathbf{k})$ et $H^{II}(\mathbf{k})$. Dans ce cas, le calcul du nombre de Chern pour les bandes occupées de $H^I(\mathbf{k})$ (ou de $H^{II}(\mathbf{k})$, qui nous donnera le résultat opposé), nous donne accès à l'invariant topologique Z_2 (cf. II.38). On suppose de plus ici que $H^I(\mathbf{k})$ est non dégénéré en tout point \mathbf{k} .

Pour une bande donnée (α, I), le premier nombre de Chern C_α^I est donné par l'intégrale sur la zone de Brillouin de la courbure de Berry de cette bande (divisée par 2π) :

$$C_\alpha^I = \frac{1}{2\pi} \iint_{BZ} F_\alpha^I(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k}, \quad (\text{III.29})$$

où $F_\alpha^I(\mathbf{k})$ peut être exprimé comme (cf. Eqs. (I.41) et (I.42))

$$\begin{aligned} F_\alpha^I(\mathbf{k}) &= i\langle \partial_{k_x} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I | \partial_{k_y} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I \rangle - i\langle \partial_{k_y} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I | \partial_{k_x} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I \rangle \\ &= 2 \operatorname{Im} \langle \partial_{k_y} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I | \partial_{k_x} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I \rangle. \end{aligned} \quad (\text{III.30})$$

Dans le cas non dégénéré, on obtient alors [Ber84] :

$$F_\alpha^I(\mathbf{k}) = 2 \sum_{\beta \neq \alpha} \operatorname{Im} \langle \partial_{k_y} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I | u_{\beta,\mathbf{k}}^I \rangle \langle u_{\beta,\mathbf{k}}^I | \partial_{k_x} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I \rangle. \quad (\text{III.31})$$

En utilisant le fait que :

$$\langle u_{\beta,\mathbf{k}}^I | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha,\mathbf{k}}^I \rangle = \langle u_{\beta,\mathbf{k}}^I | \nabla_{\mathbf{k}} H^I(\mathbf{k}) | u_{\alpha,\mathbf{k}}^I \rangle / (E_{\alpha,\mathbf{k}}^I - E_{\beta,\mathbf{k}}^I), \quad (\text{III.32})$$

on a

$$F_{\alpha}^I(\mathbf{k}) = 2 \operatorname{Im} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle u_{\alpha, \mathbf{k}}^I | \partial_{k_y} H^I(\mathbf{k}) | u_{\beta, \mathbf{k}}^I \rangle \langle u_{\beta, \mathbf{k}}^I | \partial_{k_x} H^I(\mathbf{k}) | u_{\alpha, \mathbf{k}}^I \rangle}{(E_{\alpha, \mathbf{k}}^I - E_{\beta, \mathbf{k}}^I)^2}. \quad (\text{III.33})$$

Cette expression peut ensuite être calculée pour chaque paire de bandes, et les différentes contributions, une fois sommées, donnent la valeur de l'invariant topologique.

L'intérêt de l'expression (III.33), est que la dérivée qui agit normalement sur les états $|u_{\alpha, \mathbf{k}}^I\rangle$, a été déplacée sur l'Hamiltonien $H^I(\mathbf{k})$. L'expression de $H^I(\mathbf{k})$ étant connue, sa dérivée est simple à obtenir, ce qui n'est pas le cas pour les $|u_{\alpha, \mathbf{k}}^I\rangle$, pour lesquels il faudrait d'abord trouver une jauge continue et dérivable. Ainsi, cette expression est utilisable quelle que soit la jauge choisit, même si celle si est discontinue.

Toutefois, en pratique, on a utilisé l'expression (III.33) uniquement dans des cas simples où on peut obtenir une expression analytique des $|u_{\alpha, \mathbf{k}}^I\rangle$ normalisés (et donc de F) ou lorsque la matrice $H^I(\mathbf{k})$ est de petite dimension. En effet, $F_{\alpha}^I(\mathbf{k})$ est une fonction sur un espace à deux dimensions, et souvent très piquée par endroit. Son intégrale demande donc le calcul d'un grand nombre de points pour être précise. Or, pour chaque point, il faut diagonaliser $H^I(\mathbf{k})$ et normaliser ses états propres. Pour un nombre de points de l'ordre du 10^8 (et une précision de l'ordre de 10^{-4} , si les points sont pris sur une grille uniforme), il faut compter plusieurs heures, voire plusieurs jours de calculs (selon la dimension de $H^I(\mathbf{k})$), pour ce qui ne prend que quelques secondes et donne une meilleure précision (10^{-8}) si on dispose d'une expression analytique et d'un bon logiciel de calcul formel.

On pourrait cependant améliorer la méthode d'intégration lorsque l'on ne dispose pas d'une expression analytique (avec une méthode de Monte-Carlo par exemple), mais cela n'a pas fait parti du cadre de la thèse¹⁰.

Quoiqu'il en soit, on dispose ainsi d'une quatrième méthode numérique de calcul de l'invariant topologique qui s'appuie sur le calcul direct du nombre de Chern sur les bandes I ou II .

4.2 Exemple d'application

Dans ce paragraphe, on illustre la méthode de calcul direct du nombre de Chern en l'appliquant à l'Hamiltonien de BHZ. Comme précédemment, on fixe $\mu = 0$, $\Delta\mu = 5$, $t = 1$ et $\alpha = 2$, et on teste trois valeurs de Δt : 2, 0 et -2 . Les différentes courbures de Berry obtenues sont présentées Fig.III.8. Pour la bande de valence I , on trouve un nombre de Chern égal à 1 pour $\Delta t = -2$ et $\Delta t = 2$, et une valeur nulle pour $\Delta t = 0$; en parfait accord avec les résultats attendus.

¹⁰. On aurait aussi pu considérer qu'une précision de l'ordre de 10^{-2} ou 10^{-3} (qu'on peut obtenir avec beaucoup moins de points) est suffisante pour le calcul d'un invariant qui est un entier.

4. Nombre de Chern

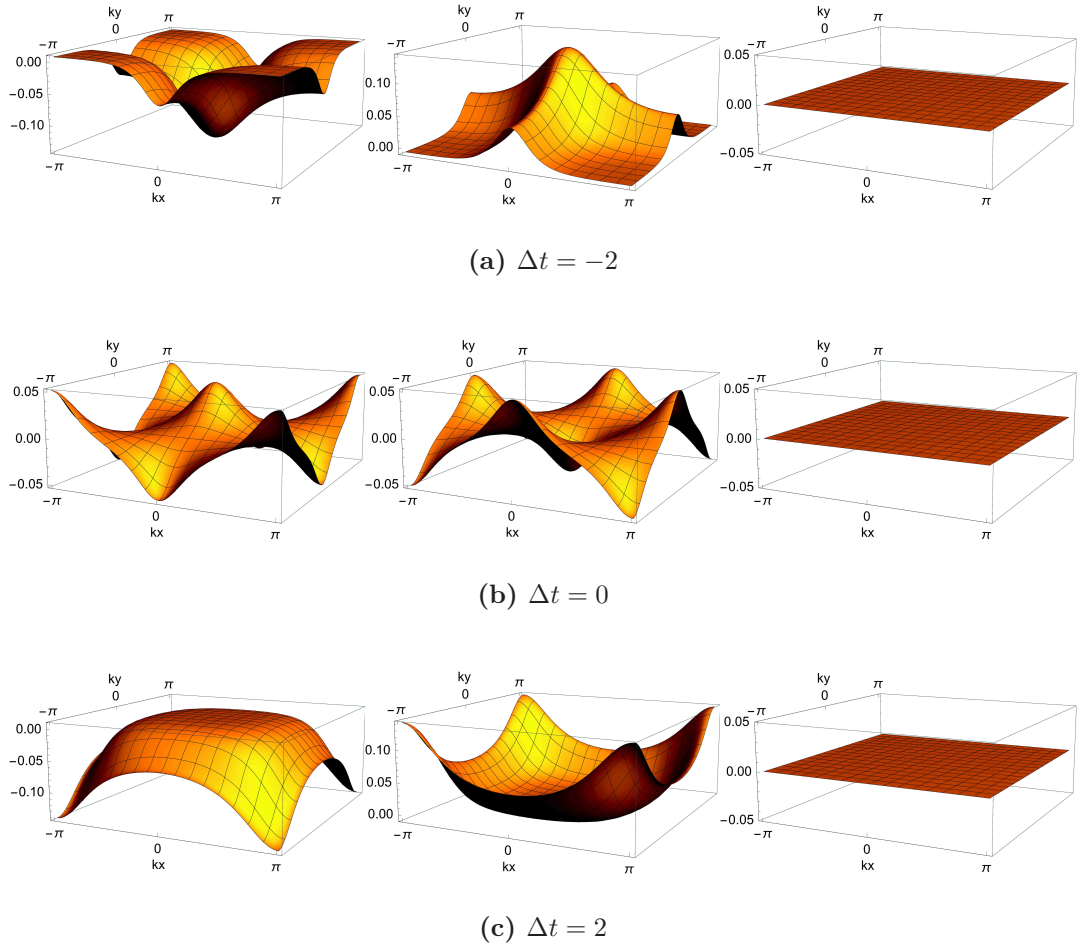


Figure III.8 – Courbure de Berry calculée pour $\mu = 0$, $\Delta\mu = 5$, $t = 1$, $\alpha = 2$ et différentes valeurs de Δt . La première colonne correspond à la courbure de Berry de la bande de valence de spin up, et la deuxième colonne, à celle de la bande de conduction de spin up. La troisième colonne correspond à la somme des deux courbes précédentes. On observe bien que pour H^\dagger , la courbure de Berry totale est nulle en tout point \mathbf{k} .

Chapitre IV

Isolants Topologiques Antiferromagnétiques

Sommaire

1	Introduction d'une aimantation alternée en dimension 2	72
1.1	Aimantation alternée et réseau	72
1.2	Hamiltonien de Bloch	73
1.3	Deux nouvelles symétries : Θ_{AF} et \mathcal{P}_{AF}	74
1.4	Choix de jauge	76
2	Invariant topologique antiferromagnétique	78
2.1	Travaux précurseurs à trois dimensions	78
2.2	Travaux précurseurs à deux dimensions	78
2.3	Expression analytique de l'invariant topologique à deux dimensions	80
3	Adaptation des méthodes numériques	83
3.1	Transport parallèle et phase de jonction	83
3.2	Centres de charge des fonctions de Wannier	84
3.3	Construction des états de bord	85
3.4	Calcul direct du nombre de Chern	86

Dans les deux chapitres précédents, nous nous sommes intéressés à la classification Z_2 des isolants symétriques par renversement du temps. Nous avons vu que l'application du théorème de Kramers permet de séparer les états propres de l'Hamiltonien en deux groupes, que nous avons notés I et II . L'étude de ces groupes d'états propres (du nombre de Chern associé en particulier) a permis de définir un invariant Z_2 caractérisant la nature triviale ou topologique du système étudié. Nous avons de plus relié la présence (et la parité) d'états de bord à la valeur de cet invariant.

On peut alors se demander si cette description peut survivre en présence de symétries plus faibles. La présence d'un ordre antiferromagnétique par exemple réduit le groupe de symétries, en brisant la symétrie par renversement du temps. Dans ce chapitre nous nous intéressons à de tels systèmes. Nous discutons tout d'abord les symétries d'intérêt pour ces systèmes. Nous établissons ensuite une expression analytique d'un invariant topologique pour les systèmes antiferromagnétiques, sous certaines conditions de symétrie. Nous discutons ensuite la manière d'adapter les méthodes numériques du chapitre précédent à la présence de ces nouvelles symétries.

1 Introduction d'une aimantation alternée en dimension 2

1.1 Aimantation alternée et réseau

On considère un Hamiltonien de liaisons fortes défini sur un réseau carré (défini par les vecteurs $\mathbf{R} = pa\vec{\mathbf{X}} + qa\vec{\mathbf{Y}}$ avec $p, q \in \mathbb{Z}$, comme dans la figure IV.1) et invariant par renversement du temps. Pour étudier les effets de l'ordre antiferromagnétique (AF), on introduit une aimantation alternée d'amplitude m vérifiant

$$m(\mathbf{R} + a\mathbf{X}) = m(\mathbf{R} + a\mathbf{Y}) = -m(\mathbf{R}). \quad (\text{IV.1})$$

Dans notre modèle sur réseau, cela se traduit par l'introduction d'un terme de la forme [FGB13, KT84, Ram08, Ram09, GFS11] :

$$\sum_{\mathbf{R}, \sigma, n} (-1)^{\mathbf{x}+\mathbf{y}} \sigma m c_{\sigma, n}^\dagger(\mathbf{R}) c_{\sigma, n}(\mathbf{R}), \quad (\text{IV.2})$$

où σ correspond au spin et n représente l'ensemble des autres degrés de liberté des orbitales atomiques. On introduit donc ici l'ordre antiferromagnétique de manière purement phénoménologique et indépendamment de la forme précise des interactions qui donnent naissance au magnétisme. On néglige de plus les fluctuations thermiques et quantiques de l'ordre magnétique, ce qui est justifié pour des moments magnétiques de l'ordre du magnéton de Bohr et des températures très inférieures à la température de Néel.

L'aimantation alternée a pour effet de doubler la taille de la cellule unité, en réduisant la symétrie de translation. Le nouveau réseau de Bravais est donc donné par les vecteurs $\mathbf{r} = pa\sqrt{2}\vec{\mathbf{x}} + qa\sqrt{2}\vec{\mathbf{y}}$ avec $p, q \in \mathbb{Z}$, et chaque cellule unité contient deux sites, A et B , positionnés en $\mathbf{R}_A = \mathbf{r} - \frac{a}{2}\vec{\mathbf{X}}$ et $\mathbf{R}_B = \mathbf{r} + \frac{a}{2}\vec{\mathbf{X}}$ respectivement (cf. Fig.IV.1). Dans la suite, on fixe $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

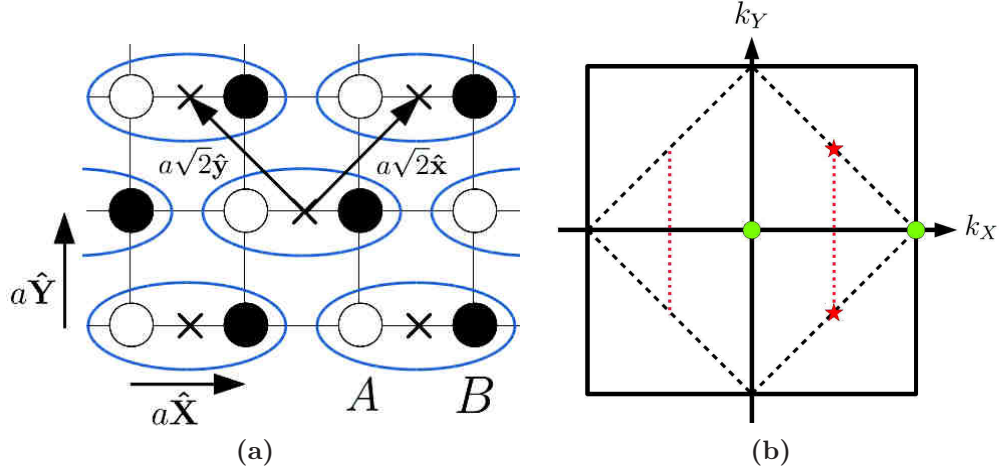


Figure IV.1 – (a) Réseau carré sur lequel sont définis les Hamiltoniens considérés. En l'absence de l'aimantation alternée, les vecteurs de base du réseau de Bravais sont donnés par $a\hat{\mathbf{X}}$ et $a\hat{\mathbf{Y}}$. En présence de l'aimantation alternée, les vecteurs de base du réseau dimérisé sont donnés par $a\tilde{\mathbf{x}}$ et $a\tilde{\mathbf{y}}$. Dans ce cas, une cellule unité (ovale bleu) comporte deux sites, A et B (disques blancs et noirs respectivement). Le centre de la cellule unité, noté \mathbf{r} dans le texte principal, est représenté par une croix. (b) Les lignes noires délimitent la zone de Brillouin paramagnétique, qui, en présence d'une aimantation alternée, se réduit à la zone de Brillouin antiferromagnétique (lignes pointillées noires). Les pointillés rouges représentent les points de la BZ AF où $\Theta_{AF}^2 = 1$. Le fait que ces pointillés rouges n'aient pas d'équivalents horizontaux est lié à la manière dont nous avons dimérisé le réseau. Nous avons en effet choisi les sites A et B d'une même cellule unité séparés de $a\hat{\mathbf{X}}$ plutôt que de $a\hat{\mathbf{Y}}$ par exemple. Les étoiles rouges représentent les deux A-TRIM, où $\Theta_{AF}^2 = 1$ tandis que les cercles verts représentent les B-TRIM, où $\Theta_{AF}^2 = -1$.

1.2 Hamiltonien de Bloch

Pour les réseaux avec plusieurs sites par cellule unité, il existe deux manières principales de définir l'Hamiltonien de Bloch (et donc la transformée de Fourier) à partir de l'équation (I.13) (*cf.* [BM09, FCG14]), qui se traduisent par des choix différents de la phase relative entre les différents sites de la cellule unité.

Dans une première représentation, on peut définir l'Hamiltonien de Bloch comme

$$H_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} H e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}, \quad (\text{IV.3})$$

où $\hat{\mathbf{r}}$ est l'opérateur donnant la position du centre de la cellule unité. L'Hamiltonien de Bloch ainsi défini possède la propriété $H_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = H_{\mathbf{k}}$, pour tout vecteur \mathbf{G} du réseau réciproque.

Dans la deuxième représentation, on prend en compte la position réelle des sites des sous-réseaux, en définissant l'Hamiltonien de Bloch comme

$$H_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{R}}} H e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{R}}}, \quad (\text{IV.4})$$

où cette fois, $\hat{\mathbf{R}}$ agit comme $\hat{\mathbf{r}} - \frac{a}{2}\hat{\mathbf{X}}$ sur les sites du sous-réseau A et comme $\hat{\mathbf{r}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{X}}$ sur les sites du sous-réseau B . Cette définition a pour intérêt de mieux prendre en

compte les symétries du réseau [FCG14], mais en contrepartie on perd la propriété $H_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = H_{\mathbf{k}}$, qui est remplacée par une version plus faible : $H_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} = U^\dagger H_{\mathbf{k}} U$, avec U une matrice unitaire.

Dans la suite, nous avons choisi la première convention, la périodicité étant particulièrement importante ici, puisque l'un de nos objectifs principaux est d'obtenir une jauge continue et périodique (au moins dans une direction) pour nos états propres.

1.3 Deux nouvelles symétries : Θ_{AF} et \mathcal{P}_{AF}

L'introduction de l'aimantation alternée brise la symétrie de renversement du temps. En effet, l'action de Θ inverse l'aimantation locale. Il en est de même pour une translation de $a\vec{\mathbf{X}}$ (notée T)¹ qui échange les sous-réseaux A et B . Ainsi, aucune de ces deux transformations ne reste une symétrie de l'Hamiltonien. En revanche, le produit

$$\Theta_{AF} = T\Theta, \quad (\text{IV.5})$$

reste une symétrie du problème. Nous avons vu que l'opérateur renversement du temps était central pour la description des isolants topologiques Z_2 telle que présentée dans les chapitres précédents. On peut donc se poser la question de la robustesse de cette description lorsque la symétrie est réduite de Θ à Θ_{AF} . C'est à cette question que nous répondons dans la suite de ce manuscrit.

On s'intéresse donc tout d'abord aux propriétés de base de Θ_{AF} . En premier lieu, Θ_{AF} est un opérateur anti-unitaire, en tant que produit d'un opérateur unitaire et d'un opérateur anti-unitaire. De plus, comme Θ commute avec n'importe quelle transformation spatiale (et donc avec T), on obtient

$$\Theta_{AF}^2 = -T^2. \quad (\text{IV.6})$$

Contrairement à T , T^2 est bien une symétrie de l'Hamiltonien. Il agit sur un état $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ comme $T^2|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{-i2a\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{X}}}|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$. On peut donc écrire :

$$\Theta_{AF}^2 = \sum_{\mathbf{k}} -e^{-i2a\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{X}}}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = -\sum_{\mathbf{k}} e^{i\phi_{\mathbf{k}}}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|. \quad (\text{IV.7})$$

La notation avec $\phi_{\mathbf{k}}$ ² sera utilisée dans la suite, car plus concise, mais on peut dès à présent noter deux propriétés importantes de $\phi_{\mathbf{k}}$:

- $\phi_{\mathbf{k}}$ est impaire : $\phi_{-\mathbf{k}} = -\phi_{\mathbf{k}}$,
- $\phi_{\mathbf{k}}$ ne dépend que de $k_X = k_{x-y}$.

Il existe donc des points de la zone de Brillouin (ceux où $k_X = \pi/(2a) \bmod \pi/a$), pour lesquels Θ_{AF}^2 agit comme l'identité (cf. Fig.IV.1). En ces points, le théorème de Kramers ne s'applique plus, et la dégénérescence n'est plus assurée. En particulier les TRIM se séparent maintenant en deux catégories :

1. Ici, la translation est choisie de telle sorte que son action sur une fonction f de \mathbf{R} soit donnée par $Tf(\mathbf{R}) = f(\mathbf{R} - a\mathbf{X})$.

2. Cette notation ne doit pas être confondue avec les ϕ_α qui correspondent aux phases de reconnexion définies à l'équation III.13. Le contexte et le fait que la nature des deux indices différent permettent cependant de toujours aisément distinguer une notation de l'autre.

1. Introduction d'une aimantation alternée en dimension 2

- les A-TRIM ($k_x = 0, k_y = \pi$ ou $k_x = \pi, k_y = 0$), où $\Theta_{AF}^2 = 1$ et le théorème de Kramers ne s'applique plus (cf. II.1.4),
- les B-TRIM ($k_x = 0, k_y = 0$ ou $k_x = \pi, k_y = \pi$), où $\Theta_{AF}^2 = -1$ et le théorème de Kramers s'applique toujours.

Il peut alors être intéressant de considérer une symétrie supplémentaire, la symétrie d'inversion, qu'on note \mathcal{P}_{AF} . Remarquons tout d'abord que nous avons modifié la notation par rapport à la partie précédente, où l'opérateur inversion était noté P . En effet, l'opération d'inversion considérée ici est l'inversion par rapport à un site B tandis que P correspond à l'inversion par rapport au centre de la cellule unité. Ainsi, P échange les sites A et B , alors que \mathcal{P}_{AF} envoie un site A sur un site A (et un site B sur un site B). On peut cependant montrer que P et \mathcal{P}_{AF} ne diffèrent que d'une translation. On a en effet $\mathcal{P}_{AF} = TP$. À cause de l'aimantation alternée, P ne peut pas être une symétrie, contrairement à \mathcal{P}_{AF} .

Si le système est aussi invariant sous l'action de l'opérateur inversion \mathcal{P}_{AF} ³, on peut retrouver une dégénérescence du type Kramers. En effet, Θ commute avec toute transformation purement spatiale, donc avec \mathcal{P}_{AF} . De plus, on a $T\mathcal{P}_{AF} = \mathcal{P}_{AF}T^{-1}$ et $\mathcal{P}_{AF}^2 = 1$. On en déduit que $\mathcal{P}_{AF}\Theta_{AF}$ est un opérateur anti-unitaire de carré -1 . Ainsi le théorème de Kramers s'applique. Dans ce cas cependant, $\Theta_{AF}\mathcal{P}_{AF}$ envoie un état d'impulsion \mathbf{k} sur un état orthogonal au même point \mathbf{k} . Cela permet donc toujours de protéger la double dégénérescence à tous les TRIM.

Dans le même esprit que précédemment, on peut noter

$$\Theta_{AF} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Theta}_{AF}(\mathbf{k}) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| K_{\{|\mathbf{k}, S_z\rangle\}}, \quad (\text{IV.8})$$

et

$$\mathcal{P}_{AF} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{P}}_{AF}(\mathbf{k}) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|. \quad (\text{IV.9})$$

où $\hat{\Theta}_{AF}(\mathbf{k})$ et $\hat{\mathcal{P}}_{AF}(\mathbf{k})$ sont des matrices agissant dans l'espace des orbitales atomiques, mais qui dépendent cette fois de \mathbf{k} . Comme nous le verrons, c'est cette dépendance en \mathbf{k} qui donne toute sa complexité au problème antiferromagnétique.

Le fait que \mathcal{P}_{AF} et Θ_{AF} commutent avec l'Hamiltonien se traduit, pour l'Hamiltonien de Bloch, en :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}}_{AF}(\mathbf{k}) H_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{P}}_{AF}^{-1}(\mathbf{k}) &= H_{-\mathbf{k}}, \\ \hat{\Theta}_{AF}(\mathbf{k}) H_{\mathbf{k}}^* \hat{\Theta}_{AF}^{-1}(\mathbf{k}) &= H_{-\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (\text{IV.10})$$

Dans la suite de ce manuscrit, sauf si cela est expressément stipulé, on considère des systèmes qui possèdent les deux symétries Θ_{AF} et \mathcal{P}_{AF} . Ainsi, sauf mention contraire, la structure de bandes des Hamiltoniens considérés s'organisera en paires de bandes indexées α , deux fois dégénérées en tout points \mathbf{k} . Comme précédemment, on peut donc organiser les états en $|\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}^I\rangle$ et $|\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}^{II}\rangle$, qui ont cependant maintenant la même énergie pour toute valeur de \mathbf{k} .

3. En pratique, n'importe quelle symétrie unitaire, changeant \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$ et telle que $(\mathcal{P}_{AF}\Theta_{AF})^2 = -1$ convient.

1.4 Choix de jauge

Comme dans le cas paramagnétique, l'action de Θ_{AF} sur la courbure de Berry permet de montrer qu'une paire de bandes α donnée possède un nombre de Chern total nul [FK07]. Il est donc toujours possible de définir une jauge lisse pour les états propres, où chaque bande I et II sera définie continument et périodiquement.

Cependant, ce sont surtout les jauges symétriques et cylindriques qui nous ont été utiles dans le cas paramagnétique pour définir et calculer l'invariant topologique, et on souhaite donc obtenir des jauges équivalentes dans le cas antiferromagnétique. Dans le cas paramagnétique, une propriété clef de ces jauges est que les bandes I et II soient reliées par l'action de l'opérateur Θ (*cf.* Eq.(II.26)). Dans le même esprit, on souhaite donc relier la définition des bandes I et II par l'action de Θ_{AF} (*cf.* Eq.(II.26)). Si on se donne une définition des $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ continue sur la zone de Brillouin, on veut alors définir la bande $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle$ sous la forme :

$$|\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^{II}\rangle = e^{i\chi_{\alpha,-\mathbf{k}}}\Theta_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle. \quad (\text{IV.11})$$

Cependant, si on applique Θ_{AF} sur cette égalité, et qu'on échange \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$, au lieu de la première ligne de l'équation (II.26), on obtient

$$|\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle = -e^{i\chi_{\alpha,\mathbf{k}}}e^{i\phi_{\mathbf{k}}}\Theta_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle, \quad (\text{IV.12})$$

où, pour rappel, $\phi_{\mathbf{k}}$ provient du carré de Θ_{AF} et a été défini à l'équation (IV.7).

On préfère en général des définitions plus symétriques, on définira donc la jauge symétrique comme une jauge continue sur la zone de Brillouin et qui respecte :

$$\begin{aligned} |\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle &= -e^{i\chi_{\alpha,\mathbf{k}}}e^{i\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}}\Theta_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle, \\ |\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^{II}\rangle &= e^{i\chi_{\alpha,-\mathbf{k}}}e^{i\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}}\Theta_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV.13})$$

Comme précédemment, une jauge cylindrique sera définie comme une jauge symétrique et continue sur la zone de Brillouin vue comme un tore.

Dans la suite, nous allons souvent supposer que les $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ sont donnés dans une jauge cylindrique. Nous allons donc maintenant prouver qu'il est toujours possible de construire une telle jauge lorsque le système possède les deux symétries Θ_{AF} et \mathcal{P}_{AF} . Une fois de plus, le lecteur pressé pourra sauter cette partie et passer directement à la section suivante (2).

Nous avons vu que le théorème de Kramers permet de montrer que les états $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ et $\mathcal{P}_{AF}\Theta_{AF}|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ possèdent la même énergie, et le même vecteur d'onde \mathbf{k} , tout en étant orthogonaux. Il en est donc de même pour $\Theta_{AF}|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ et $\mathcal{P}_{AF}|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ (on peut montrer cela en utilisant le fait que Θ_{AF}^2 agit comme une phase pure sur un état $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$).

Ainsi, si on arrive à trouver une définition des $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ continue sur la zone de Brillouin cylindrique et telle que :

$$\mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle = e^{i\varphi(\mathbf{k})}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle, \quad (\text{IV.14})$$

il suffit alors de construire $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle = \Theta_{AF}\mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ pour obtenir une jauge cylindrique. En effet, la continuité de $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle$ sur le cylindre découle de la continuité de

1. Introduction d'une aimantation alternée en dimension 2

$|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$, et l'orthogonalité entre la bande I et II est obtenue grâce aux propriétés de $\Theta_{AF}\mathcal{P}_{AF}$. Enfin, l'équation (IV.13) est une conséquence directe de (IV.14), en remplaçant $\varphi(\mathbf{k})$ par $-\chi_{\alpha,-\mathbf{k}} - \frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}$. Il nous reste donc à démontrer qu'il est possible de trouver une définition des $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ continue sur le cylindre, et respectant l'équation (IV.14).

On suppose qu'il est toujours possible de construire des $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ localement continus. On commence donc par se donner une définition continue des $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ pour $k_y = 0$ et $k_x \in [0, \pi]$, et telle que $\mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{\Gamma}}^I\rangle$ est proportionnel à $|\Psi_{\alpha,\mathbf{\Gamma}}^I\rangle$ en $\mathbf{\Gamma} = (0, 0)$ et $\mathbf{\Gamma} = (0, \pi)$. On construit ensuite les états pour $k_y = 0$ et $k_x \in]-\pi, 0[$ à partir des états précédents en choisissant $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle = \mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle$. Cela permet d'assurer le respect de l'équation (IV.14), mais en faisant ce choix, on peut avoir des discontinuités en $k_x = 0$ et $k_x = \pi$. Cependant, on a :

$$\begin{aligned} \lim_{k_x \rightarrow 0^+} |\Psi_{\alpha,-k_x,k_y=0}^I\rangle &= \lim_{k_x \rightarrow 0^+} \mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,k_x,k_y=0}^I\rangle \\ &= \mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,k_x=0,k_y=0}^I\rangle \\ &= e^{i\tilde{\varphi}(0)}|\Psi_{\alpha,k_x=0,k_y=0}^I\rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV.15})$$

ainsi qu'une phase similaire qui apparaît en $k_x = \pi$. On peut donc se débarrasser de la discontinuité en 0 et en π en multipliant tous les états en $k_y = 0$ et $k_x \in]-\pi, 0[$ par une phase continue $e^{-i\tilde{\varphi}(k_x)}$ respectant :

$$\lim_{k_x \rightarrow 0^-} e^{i\tilde{\varphi}(k_x)} = e^{i\tilde{\varphi}(0)} \quad \text{et} \quad \lim_{k_x \rightarrow -\pi} e^{i\tilde{\varphi}(k_x)} = e^{i\tilde{\varphi}(\pi)}. \quad (\text{IV.16})$$

On obtient donc une définition des $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ continue sur le cercle $k_y = 0$ et qui respecte l'équation (IV.14). On peut alors étendre continument cette définition à l'ensemble de la moitié haute de la zone de Brillouin ($k_y \in]0, \pi]$), et construire les états pour la moitié basse ($k_y \in]-\pi, 0[$) en appliquant \mathcal{P}_{AF} . Une fois de plus, une discontinuité peut apparaître en traversant la ligne $k_y = 0$. En effet, on a :

$$\begin{aligned} \lim_{k_y \rightarrow 0^+} |\Psi_{\alpha,k_x,-k_y}^I\rangle &= \lim_{k_y \rightarrow 0^+} \mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,-k_x,k_y}^I\rangle \\ &= \mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,-k_x,k_y=0}^I\rangle \\ &= e^{i\varphi(k_x,0)}|\Psi_{\alpha,k_x,k_y=0}^I\rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV.17})$$

On peut cependant récupérer la continuité en multipliant tous les états en (k_x, k_y) avec $k_y < 0$ par la phase $e^{-i\varphi(k_x,0)}$. En utilisant l'opérateur $\Theta_{AF}\mathcal{P}_{AF}$ pour construire les $|\Psi_{\alpha,k_x,k_y}^{II}\rangle$ on obtient alors une définition des états continue sur la zone de Brillouin cylindrique (avec pour bords $k_y = \pi$ et $k_y = -\pi$) qui respecte l'équation (IV.13). Il ne reste plus qu'à séparer les bandes pour obtenir une définition qui respecte aussi l'équation (I.65). Cela peut s'obtenir avec une transformation similaire à celle de l'étape *vi*) de la procédure décrite dans le paragraphe 1.3 du chapitre III. Cela finit donc de prouver qu'il est toujours possible de construire une jauge cylindrique lorsque le système possède les deux symétries Θ_{AF} et \mathcal{P}_{AF} .

2 Invariant topologique antiferromagnétique

Comme nous venons de le voir, on peut trouver un certain nombre de similarités entre les systèmes invariants par renversement du temps, et ceux invariants sous l'action de Θ_{AF} uniquement. Mais on trouve aussi des disparités, comme l'existence des A-TRIM, des TRIM où $\Theta_{AF}^2 = 1$ et où le théorème de Kramers ne s'applique pas. On peut donc se demander si des systèmes possédant un ordre antiferromagnétique peuvent présenter des phases topologiquement non triviales, et si on peut les caractériser par un invariant topologique. Dans cette section, on commence par rappeler les travaux réalisés pour les systèmes AF à trois puis à deux dimensions. On dérive ensuite une expression de l'invariant topologique dans le cas bidimensionnel, avec comme point de départ la polarisation de renversement du temps.

2.1 Travaux précurseurs à trois dimensions

Plusieurs travaux ont mis en avant la question de l'existence d'un invariant topologique antiferromagnétique. Mong *et al.* [MEM10] en particulier, se sont intéressés à ce problème pour les systèmes tridimensionnels. Leur idée est de ne considérer que les B-TRIM (les TRIM où Θ_{AF} se comporte comme Θ), au nombre de quatre. Dans le plan formé par ces quatre B-TRIM, $\Theta_{AF}^2 = -1$. Ils construisent donc un invariant Z_2 dans ce plan, en le considérant comme un système à deux dimensions. Ils argumentent ensuite que la structure topologique de ce plan est représentative de ce qui se passe à trois dimensions. Ils montrent ensuite, à travers deux modèles, que l'invariant qu'ils construisent peut être relié à la présence d'états de bord. Il y a cependant une différence majeure entre le cas antiferromagnétique et le cas paramagnétique. En effet, il a été mentionné précédemment que l'existence des états de bord est tributaire de la manière dont est créé le bord. En particulier, le bord doit posséder les symétries qui protègent la topologie, soit dans le cas antiferromagnétique, Θ_{AF} . Il peut ainsi exister des bons et des mauvais bords (*cf.* Fig.IV.2 dans le cas bidimensionnel). Moore *et al.* distinguent donc les bords antiferromagnétiques, qui présentent une aimantation alternée et où on observe des états de bord protégés, des bords ferromagnétiques, présentant une seule aimantation et où les états de bord disparaissent.

Plusieurs travaux ont suivi sur l'étude des isolants topologiques antiferromagnétiques à trois dimensions (voir par exemple [Liu13, ZL15, LZV14, FF15, FGB13]). Mais cela a aussi ouvert la voie à l'étude de systèmes possédant de nouvelles symétries. On appelle donc de manière générale isolants topologiques cristallins tridimensionnel les isolants topologiques protégés par Θ_{AF} , mais aussi ceux protégés par exemple par $C_2\Theta$ [LZV14, FF15], $C_4\Theta$ [ZL15, Fu11] ou encore par des symétries miroirs [KF13, LDF13].

2.2 Travaux précurseurs à deux dimensions

À deux dimensions, les travaux sont plus rares. En effet, à deux dimensions, il n'y a que deux B-TRIM, or il en faut au moins quatre pour pouvoir obtenir un

2. Invariant topologique antiferromagnétique

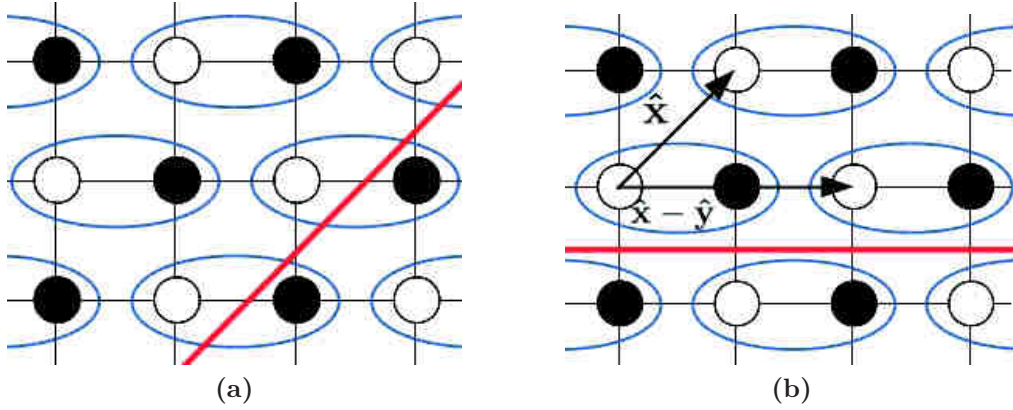


Figure IV.2 – Exemples de coupe pour le réseau carré dimérisé. (a) Un exemple d'un bord qui ne respecte pas la symétrie Θ_{AF} . (b) Le bord considéré dans ce manuscrit. Dans ce cas, k_{x-y} noté k_{\parallel} reste un bon nombre quantique.

invariant topologique en appliquant la formule (II.42) de Fu et Kane [FK06]. Ainsi, il n'y a pas de moyen direct d'étendre les formulations de l'invariant topologique dans le cas paramagnétique au cas antiferromagnétique en deux dimensions.

Guo *et al.* [GFS11] ont cependant montré que le modèle de BHZ, à deux dimensions et en présence d'une aimantation antiferromagnétique, réalise une inversion de bandes lorsque l'on fait varier les paramètres du système : le gap se ferme puis se rouvre après avoir échangé la nature de la bande de valence et de la bande de conduction. Ils montrent aussi que, autour de cette inversion de bandes, la parité du nombre d'états de bord change. L'inversion de bandes est donc accompagnée d'une transition de la phase triviale à une phase topologique. C'est le premier indice de la possibilité d'obtenir un invariant topologique qui nous renseigne a priori sur la parité du nombre d'états de bord dans les systèmes bidimensionnels symétriques par Θ_{AF} et \mathcal{P}_{AF} .

Un peu plus tard, Fang *et al.* [FGB13] ont proposé une expression de cet invariant topologique. Leur expression s'appuie sur les travaux de Fu et Kane [FK07] sur les systèmes paramagnétiques invariants par inversion, où ils montrent que l'invariant topologique peut s'écrire en fonction des valeurs propres de l'opérateur de parité de la moitié des bandes, comme dans l'équation (II.51). Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 2.3 du chapitre II, cette expression utilise le fait que pour une paire de bandes α donnée, aux TRIM, $|\Psi_{\alpha, \Gamma_i}^I\rangle$ et $|\Psi_{\alpha, \Gamma_i}^{II}\rangle$ sont tous les deux vecteurs propres de l'opérateur parité, avec la même valeur propre $\xi_{\alpha}(\Gamma_i) = \pm 1$. Dans le cas antiferromagnétique, en revanche, cela n'est vrai qu'aux B-TRIM. Aux A-TRIM, en effet, l'espace vectoriel engendré par $|\Psi_{\alpha, \Gamma_A}^I\rangle$ et $|\Psi_{\alpha, \Gamma_A}^{II}\rangle$ n'est pas un espace propre de \mathcal{P}_{AF} , et, si on choisit une jauge où les deux vecteurs sont états propres de \mathcal{P}_{AF} , ils auront nécessairement des valeurs propres opposées (+1 pour l'un et -1 pour l'autre). Ainsi une expression de l'invariant topologique comme celle de Fu et Kane (Eq.(II.51)), qui ne s'intéresse qu'à une définition des $|\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}^s\rangle$ aux TRIM, n'aurait que peu de sens, car il suffirait d'inverser, à un TRIM, les indices I et II pour changer la valeur de l'invariant topologique.

On peut cependant penser que, si on définit continument les états sur la zone

de Brillouin en respectant l'équation (IV.13) (donc dans une jauge symétrique), les indices I et II aux TRIM seront définis de manière cohérente. Ainsi, il ne sera pas possible d'échanger les indices I et II à un unique TRIM et on pourra obtenir une définition de l'invariant topologique en fonction du comportement des fonctions d'ondes aux quatre TRIM, mais dans une jauge continue.

Fang *et al.* [FGB13] ont cependant fait un autre choix en définissant un invariant topologique ζ_0 par :

$$(-1)^{\zeta_0} = \prod_{\Gamma_i \in \text{B-TRIM}} \prod_{\alpha=1}^N \xi_\alpha(\Gamma_i), \quad (\text{IV.18})$$

où le produit des valeurs propres de l'opérateur de parité est réalisé pour l'ensemble des paires de bandes α remplies, mais uniquement aux B-TRIM. Il est vrai que ζ_0 est un invariant de jauge, le produit des $\xi_\alpha(\Gamma_i)$ à un B-TRIM donné étant invariant de jauge. Cependant, cette définition n'est pas reliée (du moins à notre connaissance) à une variation de polarisation ou à un nombre de Chern de l'Hamiltonien. Il est donc difficile d'établir la correspondance *bulk-edge* dans ce cas, c'est à dire d'établir un lien entre la valeur de cet invariant et la parité du nombre d'états de bord. Cette expression, qui efface purement et simplement les problèmes liés aux A-TRIM, peut cependant être reliée à la parité du nombre d'états de bord, quand rien de spécial ne se passe en ces points. En particulier, pour les systèmes possédant en plus une symétrie C_4 , les deux A-TRIM sont reliés par symétrie. Il ne peut donc y avoir une inversion de bandes à un A-TRIM, sans que celle-ci n'ait lieu en même temps à l'autre A-TRIM. Ainsi, toute variation de la valeur du nombre de paires d'états de bord due à une inversion de bandes à un A-TRIM serait compensée par l'inversion de bandes à l'autre A-TRIM.

Dans le paragraphe suivant, on se propose d'établir une nouvelle expression de l'invariant topologique, prenant aussi en compte les possibilités d'inversion de bandes à un unique A-TRIM, lorsque la symétrie C_4 supplémentaire n'est pas présente.

2.3 Expression analytique de l'invariant topologique à deux dimensions

Dans ce paragraphe, nous allons adapter les démonstrations des paragraphes 2.1 et 2.2 du chapitre II, au cas antiferromagnétique.

On se place donc dans une jauge cylindrique, mais on ne choisit plus nécessairement k_x et k_y comme axes du cylindre, mais plutôt deux vecteurs k_a et k_b , non nécessairement orthogonaux, et qui engendrent le réseau réciproque. Cela nous laisse ainsi une certaine liberté sur le choix de k_a et k_b , qui seront fixés un peu plus loin de manière naturelle. On choisit donc une jauge périodique selon k_a , et les bords du cylindre sont donnés par $k_b = \pm\pi_b$. Les quatre TRIM sont alors donnés par $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi_a, 0)$, $\mathbf{k} = (0, \pi_b)$ et $\mathbf{k} = (\pi_a, \pi_b)$, où $\mathbf{k} = (k_a, k_b)$.

De la même manière que précédemment, on définit les fonctions de Wannier hybrides (Eq.(I.64)) et les polarisations partielles $P_{k_b}^s$ (Eq.(II.28)), et on souhaite calculer $P_{\Gamma_b}^{\Theta AF} = P_{\Gamma_b}^I - P_{\Gamma_b}^{II}$, pour $\Gamma_b = 0$ et $\Gamma_b = \pi_b$.

2. Invariant topologique antiferromagnétique

Comme avant, on montre que

$$P_{\Gamma_b}^I = \frac{1}{2\pi_a} \int_0^{\pi_a} dk_a [A_{\Gamma_b}^I(k_a) + A_{\Gamma_b}^I(-k_a)]. \quad (\text{IV.19})$$

Cependant, l'équation (II.31) n'est plus valide. En effet, de manière générale, $\hat{\Theta}_{AF}$ et $\phi_{\mathbf{k}}$ dépendent de k_a , et on obtient :

$$\begin{aligned} A_{-k_b}^I(-k_a) &= A_{k_b}^{II}(k_a) + \sum_{\alpha} \nabla_{k_a} (\chi_{\alpha, k_a, k_b} + \frac{1}{2} \phi_{k_a, k_b}) \\ &+ i \sum_{\alpha} \langle u_{\alpha, k_a, k_b}^{II} | (\nabla_{k_a} \hat{\Theta}_{AF}(\mathbf{k})) \hat{\Theta}_{AF}(\mathbf{k})^{\dagger} | u_{\alpha, k_a, k_b}^{II} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{IV.20})$$

À cause des dérivées sur $\hat{\Theta}_{AF}$ et ϕ , cette expression peut ne pas sembler très utile, mais $\hat{\Theta}_{AF}$ et ϕ ne dépendent tous deux que de $k_x - k_y$. Ainsi, si on choisit $k_a = k_x$ et $k_b = k_x - k_y$, on obtient à nouveau

$$A_{-k_b}^I(-k_a) = A_{k_b}^{II}(k_a) + \sum_{\alpha} \nabla_{k_a} \chi_{\alpha, k_a, k_b}. \quad (\text{IV.21})$$

Si on définit alors l'invariant topologique de manière similaire à Fu et Kane (Eq.(II.36)) [FK06] :

$$\Delta = P_{\pi_b}^{\Theta_{AF}} - P_0^{\Theta_{AF}} \text{ mod } 2, \quad (\text{IV.22})$$

avec $P^{\Theta_{AF}} = P^I - P^{II}$, on montre alors que dans une jauge cylindrique, avec les bons choix de vecteurs de base pour le réseau réciproque ($k_a = k_x$ et $k_b = k_x - k_y$), on a :

$$\Delta = P_{\pi_b}^I - P_{-\pi_b}^I \text{ mod } 2 = P_{-\pi_b}^{II} - P_{\pi_b}^{II} \text{ mod } 2. \quad (\text{IV.23})$$

On peut donc relier le nombre de Chern des bandes I ou II dans une jauge cylindrique, à l'invariant topologique de Fu et Kane, si on se donne un bon choix de vecteurs de base pour le réseau réciproque.

On peut remarquer qu'avec ce choix de base, les B-TRIM sont donnés par $\mathbf{k} = (0, 0)$ et $\mathbf{k} = (\pi_a, 0)$ et les A-TRIM par $\mathbf{k} = (0, \pi_b)$ et $\mathbf{k} = (\pi_a, \pi_b)$. De plus, on a $\pi_a = \pi$ et $\pi_b = \sqrt{2}\pi$.

On souhaite maintenant réécrire l'invariant topologique en fonction de la matrice \tilde{w} définie par :

$$\tilde{w}(\mathbf{k})_{mn} = \langle \Psi_{m, -\mathbf{k}} | \Theta_{AF} | \Psi_{n, \mathbf{k}} \rangle. \quad (\text{IV.24})$$

Cette matrice possède les propriétés suivantes (ces égalités sont démontrées à la fin de ce paragraphe) :

$$\begin{aligned} \tilde{w}(\mathbf{k})^{\dagger} \tilde{w}(\mathbf{k}) &= Id, \\ \tilde{w}^t(-\mathbf{k}) &= -e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \tilde{w}(\mathbf{k}), \\ \det(e^{i\phi_{-\mathbf{k}}/2} \tilde{w}(-\mathbf{k})) &= \det(e^{i\phi_{\mathbf{k}}/2} \tilde{w}(\mathbf{k})). \end{aligned} \quad (\text{IV.25})$$

On observe donc une première conséquence importante de l'ordre antiferromagnétique : même dans une jauge lisse, où $\tilde{w}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = \tilde{w}(\mathbf{k})$, avec \mathbf{G} un vecteur du réseau réciproque, \tilde{w} n'est pas antisymétrique à tous les TRIM. En effet, aux B-TRIM, $k_b = 0$, donc $e^{i\phi_{\mathbf{k}}} = 1$, et on obtient bien une matrice \tilde{w} antisymétrique,

mais aux A-TRIM, $k_b = \pi_b$, et $e^{i\phi_k} = -1$. La deuxième ligne de l'équation (IV.25) montre alors que \tilde{w} est antisymétrique aux A-TRIM. Une formule pour l'invariant topologique similaire à celle de l'équation (II.42) est donc sans espoir, puisque le Pfaffien de \tilde{w} ne peut même pas être défini aux A-TRIM.

Toutefois, le fait que, pour un bon choix de vecteurs de base, on puisse toujours écrire l'équation (IV.21), permet de reproduire la démonstration du paragraphe 2.2 du chapitre II, et de prouver une égalité similaire à celle de l'équation (II.49). L'invariance de jauge étant toujours vraie, on montre alors que dans une jauge lisse,

$$\Delta = \sum_{\Gamma^b \in \{0, \pi_b\}} \left[\frac{1}{2\pi i} \int_0^\pi dk_a \nabla_{k_a} \log \det[\tilde{w}_{\Gamma_b}(k_a)] + \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} (\chi_{\alpha, 0, \Gamma_b} + \chi_{\alpha, \pi, \Gamma_b}) \right] \text{ mod } 2. \quad (\text{IV.26})$$

On peut tout d'abord remarquer que cette expression est exactement équivalente à celle des isolants symétriques par renversement du temps (II.50), où on a remplacé les Pfaffiens par leurs valeurs en fonctions de $\chi_{\alpha, \mathbf{k}}$. Elle n'est certes valide que pour un choix particulier des vecteurs de base k_a et k_b , mais elle permet tout de même de relier la notion d'isolant topologique antiferromagnétique à celle des isolants topologiques symétriques par renversement du temps, et donc d'étendre un certain nombre de propriétés (comme la parité du nombre de paires d'états de bords) au cas antiferromagnétique. Dans le cas paramagnétique, on utilise de plus le fait que $\det[w(\mathbf{k})]$ n'a pas d'enroulement, et qu'il est donc possible de définir sa racine carrée ou son logarithme de manière cohérente aux quatre TRIM. La troisième équation de (IV.25) permet de montrer que cette fois, c'est $\det[e^{i\phi_k/2} \tilde{w}(\mathbf{k})]$ qui ne s'enroule pas aux TRIM. Cependant, dans l'expression (IV.26), on peut remplacer $\det[\tilde{w}(\mathbf{k})]$ par $\det[e^{i\phi_k/2} \tilde{w}(\mathbf{k})]$ (car on se place uniquement à $k_b = \Gamma_b$). Il n'y a donc pas de problèmes liés à l'enroulement de $\det[\tilde{w}(\mathbf{k})]$.

Enfin, on peut noter que la seule expression de Δ qui ne dépend pas du choix des axes du cylindre est l'équation (IV.23), qui relie l'invariant topologique Z_2 au nombre de Chern de la bande I (ou II), dans une jauge cylindrique. On choisit donc cette expression comme définition de l'invariant topologique Z_2 , et les équations (IV.26) et (IV.22) sont alors considérées comme des réécritures de l'invariant topologique, dans le cas où $k_a = k_x$ et $k_b = k_x - k_y$. Ce point est important, car il modifie la définition de l'invariant topologique. Dans le cas paramagnétique, les trois expressions étaient parfaitement équivalentes, et le choix de l'une ou de l'autre comme définition n'avait que peu d'importance. Ici cependant, à cause de la dépendance en \mathbf{k} de Θ_{AF} , les expressions ne sont plus interchangeables. Le choix le plus cohérent va donc à l'expression qui ne dépend pas du choix des axes de la zone de Brillouin cylindrique.

Démonstrations des propriétés de \tilde{w} :

- $\tilde{w}(\mathbf{k})^\dagger \tilde{w}(\mathbf{k}) = Id :$

3. Adaptation des méthodes numériques

$$\begin{aligned}
(\tilde{w}(\mathbf{k})^\dagger \tilde{w}(\mathbf{k}))_{mn} &= \sum_l (\tilde{w}(\mathbf{k}))_{lm}^* (\tilde{w}(\mathbf{k}))_{ln} \\
&= \sum_l \langle \Psi_{l,-\mathbf{k}} | \Theta_{AF} | \Psi_{m,\mathbf{k}} \rangle^* \langle \Psi_{l,-\mathbf{k}} | \Theta_{AF} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \\
&= \sum_l (\langle \Psi_{m,\mathbf{k}} | \Theta_{AF}^\dagger | \Psi_{l,-\mathbf{k}} \rangle \langle \Psi_{l,-\mathbf{k}} | \Theta_{AF} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle) \\
&= (\langle \Psi_{m,\mathbf{k}} | \Theta_{AF}^\dagger \Theta_{AF} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle) \\
&= \langle \Psi_{m,\mathbf{k}} | \Theta_{AF}^\dagger \Theta_{AF} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle^* \\
&= \langle \Psi_{m,\mathbf{k}} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle^* \\
&= \delta_{mn}.
\end{aligned} \tag{IV.27}$$

- $\tilde{w}^t(-\mathbf{k}) = -e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \tilde{w}(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned}
(\tilde{w}^t(-\mathbf{k}))_{mn} &= (\tilde{w}(-\mathbf{k}))_{nm} \\
&= \langle \Psi_{n,\mathbf{k}} | \Theta_{AF} | \Psi_{m,-\mathbf{k}} \rangle \\
&= \langle \Psi_{m,-\mathbf{k}} | \Theta_{AF}^\dagger | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \\
&= \langle \Psi_{m,-\mathbf{k}} | (-e^{-i\phi_{\mathbf{k}}}) \Theta_{AF} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \\
&= -e^{i\phi_{\mathbf{k}}} (\tilde{w}(\mathbf{k}))_{mn}.
\end{aligned} \tag{IV.28}$$

- $\det(e^{i\phi_{-\mathbf{k}}/2} \tilde{w}(-\mathbf{k})) = \det(e^{i\phi_{\mathbf{k}}/2} \tilde{w}(\mathbf{k}))$:

C'est une conséquence directe de l'équation précédente et du fait que $e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} = e^{i\phi_{-\mathbf{k}}}$.

3 Adaptation des méthodes numériques

Dans la section précédente, on s'est donné une définition de l'invariant topologique antiferromagnétique en fonction du nombre de Chern des bandes indexées I . Le but de cette section est donc de voir comment adapter les méthodes numériques présentées précédemment au calcul de ce nouvel invariant topologique. Certains paragraphes seront extrêmement courts, les méthodes s'adaptant parfaitement.

3.1 Transport parallèle et phase de jonction

Pour la méthode de transport parallèle, il y a peu de choses à modifier. En effet, le seul élément important est le choix des états à l'origine. Une fois $|u_{\alpha,0}^I\rangle$ fixé, il faut maintenant choisir $|u_{\alpha,0}^{II}\rangle$ tel que $|u_{\alpha,0}^{II}\rangle = \hat{\Theta}_{AF} K |u_{\alpha,0}^I\rangle$. En faisant ce choix, la procédure du paragraphe 1.3 du chapitre III permet d'obtenir une jauge cylindrique qui respecte

$$\begin{aligned}
|\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle &= -e^{i\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}} \Theta_{AF} |\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle, \\
|\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^{II}\rangle &= e^{i\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}} \Theta_{AF} |\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle.
\end{aligned} \tag{IV.29}$$

Nous avons discuté, dans la section précédente, l'importance du choix des axes du cylindre pour la jauge cylindrique. En effet, pour que les trois formulations de

l'invariant topologiques des équations (IV.22), (IV.23) et (IV.26) soient équivalentes il faut faire le bon choix d'axes k_a et k_b . Il aurait donc pu être intéressant de faire le transport parallèle, d'abord selon k_a , puis selon k_b . Ce n'est cependant pas le choix que nous avons fait ici. En effet, pour des raisons de simplicité numérique, nous avons choisi de faire le transport parallèle d'abord selon k_x puis selon k_y (comme dans le cas paramagnétique). Ainsi, la jauge cylindrique que nous obtenons n'est pas la même que celle du paragraphe 2.3. Ici, la continuité est obtenue selon k_x , et les bords du cylindre sont donnés par $k_y = \pm\pi$. Dans cette jauge, on ne peut donc pas utiliser les équations (IV.26) et (IV.22) pour calculer l'invariant topologique, car les dérivées de Θ_{AF} et de $\phi_{\mathbf{k}}$ ne s'annulent pas dans l'équation (IV.20). Cependant l'équation (IV.23) est toujours valable. On peut donc utiliser la méthode de la phase de jonction pour calculer le nombre de Chern des bandes indexées I , et ainsi avoir accès à l'invariant topologique.

3.2 Centres de charge des fonctions de Wannier

La construction des fonctions de Wannier ne diffère pas de ce qui a été présenté dans la section 2 du chapitre III. Cependant, à cause du choix de k_x et k_y comme axes du cylindre dans la procédure de transport parallèle, un certain nombre de propriétés des centres de charge des fonctions de Wannier décrites dans le paragraphe III.2.2 ne sont plus valides. En effet, on pouvait montrer, que dans la jauge cylindrique obtenue par le transport parallèle,

$$\Theta|X, I, \alpha, k_y\rangle = |X, II, \alpha, -k_y\rangle. \quad (\text{IV.30})$$

Ici, cependant, on obtient :

$$\begin{aligned} \Theta_{AF}|X, I, \alpha, k_y\rangle &= \Theta_{AF} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x e^{-ik_x X} |\Psi_{\alpha, k_x, k_y}^I\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x e^{ik_x X} \Theta_{AF} |\Psi_{\alpha, k_x, k_y}^I\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x e^{ik_x X} e^{-i\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}} |\Psi_{\alpha, -k_x, -k_y}^{II}\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x e^{-ik_x X} e^{-i\frac{\phi_{-k_x, k_y}}{2}} |\Psi_{\alpha, k_x, -k_y}^{II}\rangle \\ &\neq |X, II, \alpha, -k_y\rangle. \end{aligned} \quad (\text{IV.31})$$

Ainsi, la dépendance de $\hat{\Theta}_{AF}$ en \mathbf{k} , qui s'exprime ici par la présence de la phase ϕ empêche la simplification. Le même problème apparaît pour d'autres propriétés des centres de charge des fonctions de Wannier. Ainsi, désormais,

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^I \neq -\bar{x}_{-k_y, \alpha}^I, \quad (\text{IV.32})$$

et :

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^I \neq \bar{x}_{-k_y, \alpha}^{II}. \quad (\text{IV.33})$$

Dans le cas paramagnétique, où ces égalités sont vérifiées, les fonctions $\bar{x}_{k_y, \alpha}^I$ et $\bar{x}_{k_y, \alpha}^{II}$ doivent nécessairement être égales (modulo un entier) en $k_y = -\pi, 0$ et π ,

3. Adaptation des méthodes numériques

et leurs valeurs entre $-\pi$ et 0 peuvent être directement déduites de leurs valeurs entre 0 et π . Dans le cas antiferromagnétique, cela n'est plus vrai. La connaissance de $\bar{x}_{k_y, \alpha}^I$ et $\bar{x}_{k_y, \alpha}^{II}$ uniquement entre 0 et π ne nous renseigne pas sur leurs valeurs entre $-\pi$ et 0 , et on ne peut donc pas conclure sur l'écoulement des centres de charge des fonctions de Wannier avec aussi peu d'informations.

Cela permet donc de comprendre pourquoi, pour un choix quelconque de vecteurs de base du réseau réciproque, la définition de l'invariant topologique en fonction de la variation de la polarisation $P_{AF}^\Theta = P^I - P^{II}$ entre 0 et π (Eq.(IV.22)) ne peut pas être correcte. En effet, elle ne contient pas toute l'information sur le système.

Cependant, comme le produit $\mathcal{P}_{AF}\Theta_{AF}$ ne dépend pas de \mathbf{k} , on conserve la propriété

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^I = -\bar{x}_{k_y, \alpha}^{II}. \quad (\text{IV.34})$$

Ainsi, la connaissance de $\bar{x}_{k_y, \alpha}^I$ entre $-\pi$ et π nous donne directement accès aux valeurs de $\bar{x}_{k_y, \alpha}^{II}$. Il est donc suffisant d'étudier les variations de $\bar{x}_{k_y, \alpha}^I$ entre $-\pi$ et π , qui correspond à l'expression de l'invariant topologique de l'équation (IV.23).

3.3 Construction des états de bord

Mong *et al.* [MEM10] ont discuté l'importance du choix du bord pour les isolants topologiques antiferromagnétiques à trois dimensions, et en particulier le fait que la présence des états bord dépend de ce choix. En effet, pour pouvoir observer des états de bord, il faut considérer un bord possédant les symétries du *bulk*, c'est-à-dire du cœur du système. Cela a une conséquence directe pour notre algorithme de construction des états de bord. Il faut en effet choisir un bon bord, comme défini dans la figure IV.2, c'est-à-dire un bord présentant une alternance de sites A et B.

Lorsque nous procédons à la construction explicite des états de bord, on choisit donc pour vecteurs de base du réseau \hat{x} et $\hat{x} - \hat{y}$, et on considère un bord le long de $\hat{x} - \hat{y}$. La non-orthogonalité des vecteurs de bases nécessite cependant d'être particulièrement prudent lors de l'établissement d'une équation similaire à (III.26). En effet, $k_{\hat{x}-\hat{y}}$ est un bon nombre quantique, mais son expression en fonction de k_x et k_y varie selon le choix du second vecteur de base. La définition de la dérivation, dans cette base non orthogonale, est aussi à réaliser prudemment.

Une méthode plus pédestre, mais aussi plus facilement contrôlable, est de repartir de l'Hamiltonien écrit dans l'espace réel, avec les opérateurs de création et d'annihilation $c^\dagger(\mathbf{r})$ et $c(\mathbf{r})$. Si on choisit \hat{x} et $\hat{x} - \hat{y}$ comme vecteurs de base du réseau, alors chaque centre de cellule unité \mathbf{r} peut être représenté par un couple d'entiers p et q tel que $\mathbf{r} = p\hat{x} + q(\hat{x} - \hat{y})$. L'invariance selon $\hat{x} - \hat{y}$ permet de réaliser la transformation de Fourier suivante :

$$c_n^\dagger(p, q) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q e^{ikq} c_n^\dagger(p, k). \quad (\text{IV.35})$$

où n représente l'ensemble des degrés de liberté des orbitales de la cellule unité (spins, site A et B, etc). Comme précédemment, on sépare H en H^I et H^{II} . Si

les termes de saut de l'Hamiltonien ne font intervenir que des cellules unités dont l'entier p ne diffère au plus que d'une unité, H^I se réécrit alors :

$$H^I = \sum_{p,k} (c^\dagger(p,k)\mathcal{M}c(p,k) + c^\dagger(p,k)\mathcal{T}c(p+1,k) + c^\dagger(p+1,k)\mathcal{T}^\dagger c(p,k)), \quad (\text{IV.36})$$

où \mathcal{M} et \mathcal{T} sont des matrices, à déterminer, agissant dans l'espace des orbitales et dépendant de k , mais pas de p .

De manière similaire à ce qui a été fait dans la section 3 du chapitre III, on cherche alors les états de bord de la forme

$$\Psi(p,k) = e^{\lambda p}\phi(k). \quad (\text{IV.37})$$

Pour une énergie E donnée, et pour différentes valeurs de k , on cherche donc les couples (λ, ϕ) solutions de

$$(e^{-\lambda}\mathcal{T}(k) + e^{\lambda}\mathcal{T}(k)^\dagger + \mathcal{M}(k) - E)\phi = 0. \quad (\text{IV.38})$$

La suite de la procédure est la même que dans le paragraphe 3 du chapitre III : on construit, pour différentes valeurs de k , une matrice $\Phi(k)$, avec les $\phi(k)$ correspondant à un λ de partie réelle négative. Lorsque le déterminant de cette matrice s'annule, pour une valeur donnée de k , cela signifie qu'on obtient un état de bord pour ce k et pour l'énergie E . De plus, comme on a étudié uniquement H^I , on déduit qu'un état de bord est donné par H^{II} , pour la même énergie et en $-k$.

3.4 Calcul direct du nombre de Chern

Ici, rien ne change par rapport à ce qui a été présenté dans la section 4 du chapitre III. Une fois l'Hamiltonien séparé en H^I et H^{II} reliés par Θ_{AF} , on peut calculer le nombre de Chern de la bande I comme indiqué dans le chapitre III.

Chapitre V

Applications

Sommaire

1	Le modèle de BHZ en présence d'ordre AF	88
1.1	Présentation du modèle	88
1.2	Travaux précurseurs et diagramme de Phase	89
1.3	Résultats	91
2	Brisure de la symétrie d'inversion	96
2.1	Présentation du modèle	96
2.2	Résultats	96
3	Brisure de la symétrie C_4	99
3.1	Présentation du modèle	100
3.2	Résultats	101

Dans le chapitre précédent, nous avons discuté l'extension de la notion d'isolants topologiques en présence d'un ordre antiferromagnétique. Nous avons montré comment l'expression de l'invariant topologique ainsi que différentes méthodes pour le calculer peuvent être adaptées au cas AF. Dans ce chapitre, nous utilisons ces méthodes sur un certain nombre de modèles.

On s'intéresse tout d'abord à un système bien connu, le modèle de BHZ, qu'on modifie pour y introduire l'ordre antiferromagnétique (tel que présenté dans l'équation (IV.2)). Ce modèle présente aussi une symétrie C_4 . On peut ainsi tester nos méthodes en comparant les résultats obtenus au diagramme de phase attendu selon l'expression de Fang *et al.* [FGB13] pour l'invariant topologique, discuté au paragraphe 2.2 du chapitre IV.

On modifie ensuite ce modèle afin de briser la symétrie \mathcal{P}_{AF} , tout en conservant la symétrie Θ_{AF} . Dans ce cas, l'expression de Fang *et al.* ne peut pas être utilisée. En revanche, notre conception de l'invariant topologique AF ne fait intervenir \mathcal{P}_{AF} qu'afin d'assurer la dégénérescence de Kramers à tous les TRIM, et de nous permettre de séparer les bandes en bandes *I* et *II*. Si ces propriétés peuvent être produites par d'autres mécanismes (par exemple d'autres symétries), les discussions précédentes doivent rester valides.

On s'intéresse enfin à un modèle qui brise la symétrie C_4 , et pour lequel on peut réaliser une inversion de bandes à un des deux A-TRIM, indépendamment de ce qui se passe à l'autre A-TRIM. On montre alors que les différentes méthodes que nous avons présentées permettent de calculer la valeur de notre invariant topologique, qui, bien que différent de la valeur attendue selon l'expression de Fang *et al.*, est en parfait accord avec le nombre d'états de bord observé. Cela montre que le comportement aux A-TRIM est important, et qu'il doit être pris en compte dans une expression cohérente de l'invariant topologique.

1 Le modèle de BHZ en présence d'ordre AF

On s'intéresse tout d'abord au modèle de BHZ défini à l'équation (II.53) auquel on ajoute le terme d'aimantation alternée défini à l'équation (IV.2). Nous avons vu que sans l'ordre AF le modèle présente deux phases, l'une triviale et l'autre topologique. Deux questions se posent alors :

- une phase topologique peut-elle survivre pour des valeurs finies de l'aimantation alternée ?
- si on se place dans la phase triviale pour $m = 0$, peut-on obtenir une phase topologique simplement en faisant varier m ?

Ce sont à ces questions que nous répondons dans la suite de cette section.

1.1 Présentation du modèle

En respectant la prescription (IV.3) pour la transformée de Fourier, l'Hamiltonien de Bloch du modèle de BHZ en présence d'une aimantation alternée peut

1. Le modèle de BHZ en présence d'ordre AF

s'écrire :

$$\begin{aligned}
H(\mathbf{k}) &= \mu + \Delta\mu\tau^z + ms^z\sigma^z \\
&+ (2C_-^2 + 2C_-C_+)(t\sigma^x + \Delta t\tau^z\sigma^x) \\
&+ (2C_-S_- + 2C_+S_-)(t\sigma^y + \Delta t\tau^z\sigma^y) \\
&- 2\alpha S_-(C_-s^z\tau^x\sigma^x + S_-s^z\tau^x\sigma^y) \\
&+ 2\alpha S_+(C_- \tau^y\sigma^x + S_- \tau^y\sigma^y),
\end{aligned} \tag{V.1}$$

où $C_{\pm} \equiv \cos[(k_x \pm k_y)/2]$ et $S_{\pm} \equiv \sin[(k_x \pm k_y)/2]$, tandis que s , τ et σ sont des matrices de Pauli agissant dans l'espace des spins, dans l'espace des orbitales s et p et dans l'espace des sous-réseaux A et B, respectivement. Lorsqu'un opérateur agit comme l'identité dans un espace donné, il n'est pas représenté dans cette notation. Ainsi, le terme d'aimantation alternée par exemple, noté $s^z\sigma^z$, correspond en fait à la matrice $s^z \otimes Id \otimes \sigma^z$. Dans la suite, on notera souvent $t_{\pm} = t \pm \Delta t$.

Cet Hamiltonien est symétrique sous l'action de l'opérateur anti-unitaire $\Theta_{AF} = T\Theta$ qui vérifie :

$$\begin{aligned}
\Theta_{AF} &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Theta}_{AF}(\mathbf{k}) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| K \\
&= \sum_{\mathbf{k}} i e^{i\frac{k_x - k_y}{2}} s^y \otimes (C_- \sigma^x - S_- \sigma^y) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| K,
\end{aligned} \tag{V.2}$$

et sous l'action de l'opérateur inversion noté

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{AF} &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{P}}_{AF}(\mathbf{k}) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \\
&= \sum_{\mathbf{k}} e^{i\frac{k_x - k_y}{2}} \tau^z \otimes (C_- Id + iS_- \sigma^z) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|.
\end{aligned} \tag{V.3}$$

On peut aussi noter que l'Hamiltonien de BHZ tel qu'il est écrit à l'équation (II.55) est invariant sous l'action de

$$\mathcal{R}_{\pi/4} = \sum_{\mathbf{R}} \hat{\mathcal{R}}_{\pi/4} | -Y, X \rangle \langle X, Y | = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{R}}_{\pi/4} | -k_Y, k_X \rangle \langle k_X, k_Y |, \tag{V.4}$$

où $\hat{\mathcal{R}}_{\pi/4}$ est une matrice diagonale, de diagonale $(-1, i, 1, i)$, dans la base $spin \otimes orbitale$. Le terme d'aimantation est aussi invariant sous cette transformation ; il en est donc de même pour l'Hamiltonien total. Cette invariance correspond à une symétrie C_4 et impose donc un comportement identique aux deux A-TRIM. L'expression de l'invariant topologique donnée par Fang *et al.* [FGB13] peut donc s'appliquer.

1.2 Travaux précurseurs et diagramme de Phase

Guo, Feng et Shen [GFS11] sont les premiers à s'intéresser à ce modèle. Ils s'intéressent en particulier à la présence d'inversions de bandes aux B-TRIM qui peuvent modifier la valeur propre sous l'action de l'opérateur parité des états propres occupés en ces TRIM. Sans le dire explicitement, ils s'intéressent donc

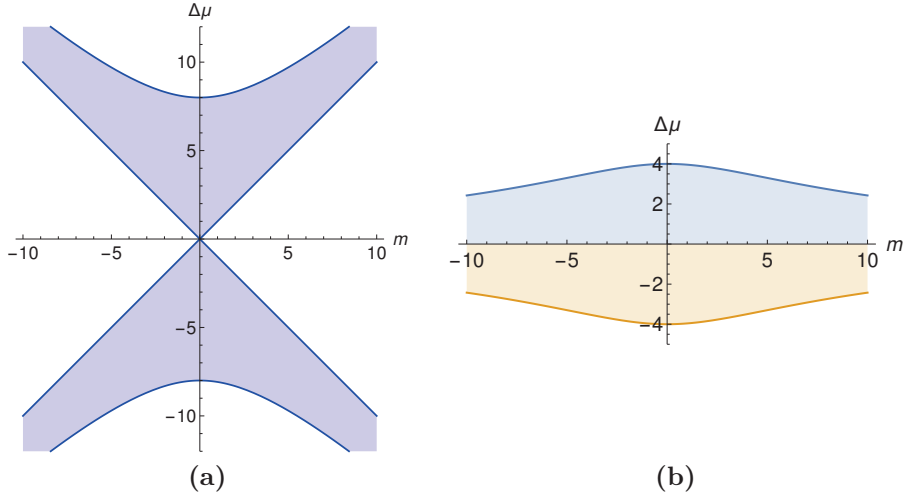


Figure V.1 – Diagramme de phase de l’Hamiltonien de BHZ en présence d’une aimantation alternée, pour $t_+ = 3$ et $t_- = 1$, et en fonction de m et $\Delta\mu$. (a) Le diagramme de phase à demi-remplissage. La région bleue correspond à la phase topologique. La ligne verticale $m = 0$ correspond au diagramme de phase de l’Hamiltonien de BHZ. On observe qu’une phase topologique à $m = 0$ survit jusqu’à ce que $|m| = |\Delta\mu|$, et on obtient un isolant trivial pour des valeurs supérieures de m . De plus, on observe qu’en partant d’une phase triviale pour $m = 0$, on peut obtenir une phase topologique pour des valeurs finies de m . (b) Superposition des diagrammes de phases à $1/4$ et $3/4$ de remplissage. La zone bleue correspond à une phase topologique pour un remplissage de $1/4$, tandis que la région jaune correspond à un remplissage de $3/4$.

à une formulation de l’invariant topologique équivalente à celle de Fang *et al.* [FGB13]. Ils observent ainsi un certain nombre de transitions de phases, et caractérisent les phases observées en résolvant le système sur une bande de largeur finie, mais de longueur infinie. Ils obtiennent ainsi la nature topologique ou triviale du système en comptant le nombre d’états de bord (sur des bords respectant la symétrie Θ_{AF}). Leurs résultats sont en accord avec le diagramme de phase attendu en appliquant la formule de Fang *et al.* (IV.18) qu’on peut obtenir avec une méthode similaire à celle du paragraphe 3.2 du chapitre II, et qui montre qu’on peut simplement évaluer la parité des états propres aux B-TRIM en fonction des paramètres de l’Hamiltonien. La figure (V.1 (a)) présente le diagramme de phase à demi-remplissage pour $t_+ = 3$ et $t_- = 1$, en fonction de m et $\Delta\mu$. Le diagramme de phase est indépendant de μ , mais aussi de α (qu’on fixe égal à 2), l’intensité du couplage spin-orbite, dont le rôle est néanmoins très important. En effet, c’est ce couplage spin-orbite qui permet d’ouvrir le gap à demi-remplissage et ainsi obtenir un isolant.

Ce diagramme de phase permet de répondre aux deux questions posées en introduction de cette section. En effet, on observe que si on se place dans une situation où le système est topologique pour $m = 0$, alors la phase reste topologique quand on augmente m , jusqu’à atteindre $|m| = |\Delta\mu|$. En outre, si on se place dans la phase triviale à $m = 0$, il existe un ensemble de valeurs de m pour lesquelles le système deviendra topologique, qui correspondent à des régions où $|m| < |\Delta\mu|$ et

1. Le modèle de BHZ en présence d'ordre AF

$$2|\Delta\mu| < \sqrt{m^2 + 16t_+^2} + \sqrt{m^2 + 16t_-^2}.$$

De plus, à cause de l'aimantation alternée, on est passé d'un système à 4 bandes réunies en 2 paires de bandes dégénérées (et donc avec un seul gap possible), à un système à 8 bandes, réunies en 4 paires de bandes dégénérées. Il est donc possible dans ce système d'ouvrir des gaps à 1/4 et à 3/4 de remplissage, qui n'ont pas d'équivalent dans le modèle de BHZ. Nous nous sommes aussi intéressés à l'éventuelle présence de phases topologiques à ces remplissages. En utilisant l'expression de Fang *et al.* on obtient le diagramme de phase présenté dans la figure (V.1 (b)). On observe qu'il existe en effet des valeurs des paramètres où l'organisation des bandes est topologique. Cependant, il ne semble pas possible d'obtenir à la fois une organisation topologique des bandes et un isolant à 1/4 et 3/4 de remplissage sans considérer des termes supplémentaires dans l'Hamiltonien. En effet, bien qu'il existe un gap direct en chaque point \mathbf{k} , on observe un gap indirect négatif lorsque l'organisation des bandes est topologique.

1.3 Résultats

Nous avons appliqué nos méthodes d'identification des isolants topologiques à ce modèle, et nous présentons les résultats ici.

Nous nous intéressons particulièrement dans ce manuscrit à quatre points du diagramme de phase présenté dans la figure V.1, donnés par $m = 2$ ou 5 , et $\Delta\mu = 3$ ou 9 . Nous avons choisi ces points car ils sont représentatifs des différentes situations qui peuvent se présenter, mais nous avons bien évidemment testé nos méthodes sur un vaste choix de paramètres.

Lorsque $\Delta\mu = 3$, pour $m = 0$, le système est dans une phase topologique à demi-remplissage. On a donc choisi une valeur de m de chaque côté de la transition, qui a lieu pour $|m| = |\Delta\mu|$. Ainsi pour $m = 2$, le système doit se trouver dans une phase topologique, et dans la phase triviale pour $m = 5$. Pour les deux valeurs de m , la phase doit être topologique pour un remplissage 1/4, et triviale pour un remplissage 3/4.

Lorsque $\Delta\mu = 9$, pour $m = 0$, le système est dans la phase triviale à demi-remplissage. On a une fois de plus choisi une valeur de m de chaque côté de la transition isolant trivial/isolant topologique. Ainsi pour $m = 2$, le système doit se trouver dans la phase triviale et dans la phase topologique pour $m = 5$. Pour les deux valeurs de m , la phase doit être triviale pour un remplissage 1/4 ou 3/4.

On s'intéresse tout d'abord à la méthode de la phase de jonction. Les résultats sont présentés dans la figure V.2 pour les quatre points $(\Delta\mu = 3, m = 2)$, $(\Delta\mu = 3, m = 5)$, $(\Delta\mu = 9, m = 2)$ et $(\Delta\mu = 9, m = 5)$ dans cet ordre, de haut en bas. L'Hamiltonien conserve S_z . Ainsi, on a pu s'arrêter à l'étape *iv*) de la procédure d'obtention d'une jauge cylindrique décrite dans le paragraphe 1.3 du chapitre III, et tout de même obtenir que le produit scalaire $\langle u_{\alpha, (kx, -\pi)}^I | u_{\alpha, (kx, \pi)}^I \rangle$ nous donne uniquement une phase notée $e^{i\phi_{\alpha}(kx)}$ ¹. Cela se traduit par le fait que le tracé de $\langle u_{\alpha, (kx, -\pi)}^I | u_{\alpha, (kx, \pi)}^I \rangle$ dans le plan complexe comme une fonction paramétrique de

1. On rappelle que cette phase ne doit pas être confondue avec la phase $\phi_{\mathbf{k}}$ provenant du carré de Θ_{AF} .

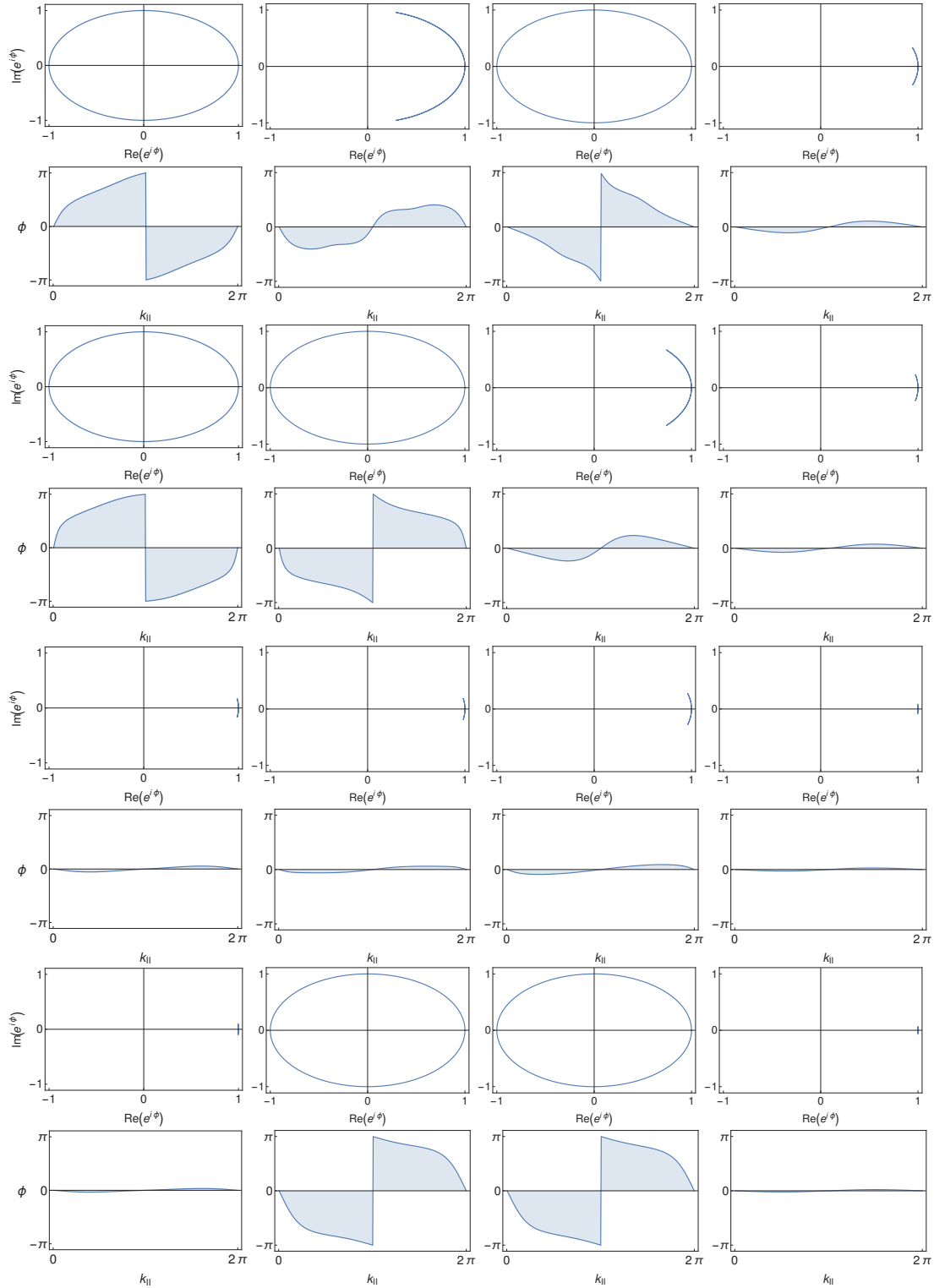


Figure V.2 – Résultats de la méthode de la phase de jonction. Chaque paire de lignes correspond à un jeu de paramètres $(\Delta\mu, m)$ différents (de haut en bas, $(\Delta\mu = 3, m = 2)$, $(\Delta\mu = 3, m = 5)$, $(\Delta\mu = 9, m = 2)$ et $(\Delta\mu = 9, m = 5)$). Les colonnes correspondent aux différentes bandes, classées par énergie croissante de gauche à droite. Les lignes impaires correspondent à la phase de jonction $e^{i\phi_\alpha}$ (définie à l'équation (III.13)) tracée dans le plan complexe comme fonction paramétrique de $k_{||} = k_x$. Les lignes paires correspondent au tracé de ϕ_α en fonction de $k_{||}$. Cela permet de vérifier, dans les cas où $e^{i\phi_\alpha}$ s'enroule autour de l'origine du plan complexe, combien de tours (comptés algébriquement) sont réalisés lorsque $k_{||}$ parcourt $[0, 2\pi]$.

1. Le modèle de BHZ en présence d'ordre AF

k_x donne un cercle ou un arc de cercle de rayon 1 (on observe des ellipses et des arcs d'ellipse dans la figure V.2, à cause du choix d'échelle pour les axes). On a fait le choix de tracer aussi $\phi_\alpha(k_x)$ pour k_x variant de 0 à 2π . Cela permet de compter réellement combien de fois la phase s'enroule, ce qui n'est pas visible sur un tracé paramétrique. De plus dans la figure V.2, chaque colonne correspond à une paire de bandes différente. On a donc accès à la topologie de chaque paire de bandes indépendamment. Les bandes ont été classées par énergie croissante. Ainsi, pour connaître la valeur de l'invariant topologique à un remplissage donné, il faut sommer les contributions de toutes les bandes remplies.

Ainsi, si on s'intéresse par exemple à la valeur de l'invariant topologique pour $\Delta\mu = 3$ et $m = 2$, il faut regarder les deux premières lignes. La première colonne nous apprend que la paire de plus basse énergie, donnée par $\alpha = 1$, donne une valeur de $\Delta_1 = 1$. Le système est donc topologique pour un remplissage de $1/4$. La paire de bandes suivante ne s'enroulant pas, on a $\Delta_2 = 0$. La valeur de l'invariant topologique total n'est donc pas modifiée, et le système est topologique à demi-remplissage. La troisième paire de bandes s'enroule elle aussi une seule fois, et on a donc $\Delta_3 = 1$. On obtient alors une valeur nulle pour l'invariant topologique total pour un remplissage de $3/4$. La dernière colonne permet simplement de vérifier qu'on obtient bien une valeur de l'invariant topologique nulle si on somme sur l'ensemble des bandes du système.

On peut donc obtenir la valeur de l'invariant topologique pour un jeu de paramètres donné et un remplissage de notre choix. Les résultats présentés ici sont en parfait accord avec le diagramme de phase attendu (il en est de même pour l'ensemble des résultats que nous avons pu obtenir pour d'autres jeux de paramètres).

On s'intéresse maintenant à la méthode des centres de charge des fonctions de Wannier. Les résultats sont présentés à la figure V.3 pour les mêmes couples $(\Delta\mu, m)$. On observe que pour $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$, la position des centres de charge des fonctions de Wannier, donnée par $\bar{x}_n(-\pi)$ et $\bar{x}_n(\pi)$, est la même, modulo un entier. C'est justement cet entier qui nous intéresse. Le tracé de \bar{x}_n en fonction de k_y nous donne directement accès à cet entier, en observant l'écoulement de la position des centres de charge entre $k_y = -\pi$ et $k_y = \pi$. Pour une paire de bandes α donnée, cet entier n'est autre que Δ_α . On peut donc une fois de plus obtenir Δ_α pour les différentes paires de bandes, et la valeur de l'invariant topologique pour un remplissage donné est obtenue comme précédemment en sommant les contributions des bandes remplies. Les résultats sont encore une fois en parfait accord avec le diagramme de phase attendu.

Enfin, pour ce système, nous nous sommes aussi intéressés à la construction explicite des états de bord, dont les résultats sont présentés sur la figure V.4. Chaque fois qu'un gap indirect positif existe, nous avons choisi une énergie dans le gap et réalisé la construction des états de bord de spin up à cette énergie. En effet, S^z est conservé par cet Hamiltonien, ce qui nous permet de séparer l'Hamiltonien en H^\uparrow et H^\downarrow . On utilise ensuite la méthode décrite dans la section 3.3 du chapitre IV pour construire les états de bord de spin up. Chaque fois que cette construction est possible, nous trouvons un nombre d'états de bord de spin up en accord avec la valeur de l'invariant topologique calculé par les autres méthodes, confirmant ainsi

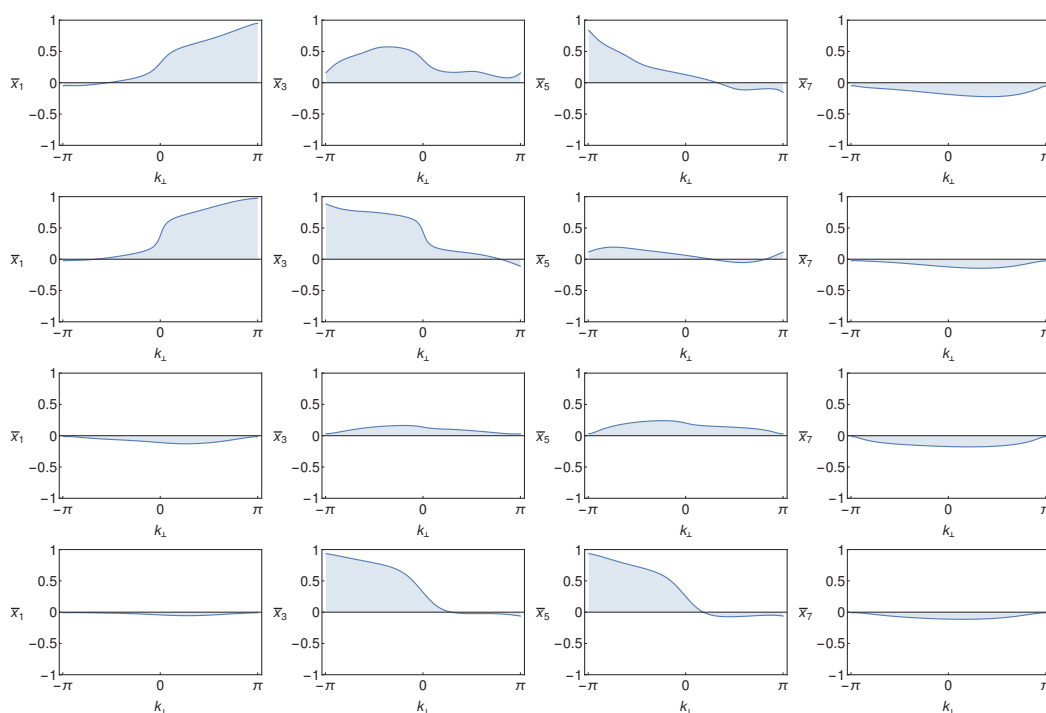


Figure V.3 – Tracé des positions des centres de charge des fonctions de Wannier en fonction de $k_\perp = k_y$. Comme précédemment, les différentes lignes correspondent à (de haut en bas) $(\Delta\mu = 3, m = 2)$, $(\Delta\mu = 3, m = 5)$, $(\Delta\mu = 9, m = 2)$ et $(\Delta\mu = 9, m = 5)$. les différentes colonnes correspondent à un représentant de la première, deuxième, troisième et quatrième paire de bandes, dans cet ordre.

1. Le modèle de BHZ en présence d'ordre AF

la correspondance *bulk-edge* dans ce système. Cependant, comme on peut le voir sur la figure V.4, il existe des valeurs de paramètres pour lesquelles il n'existe pas de gap indirect à 1/4 ou 3/4 de remplissage.

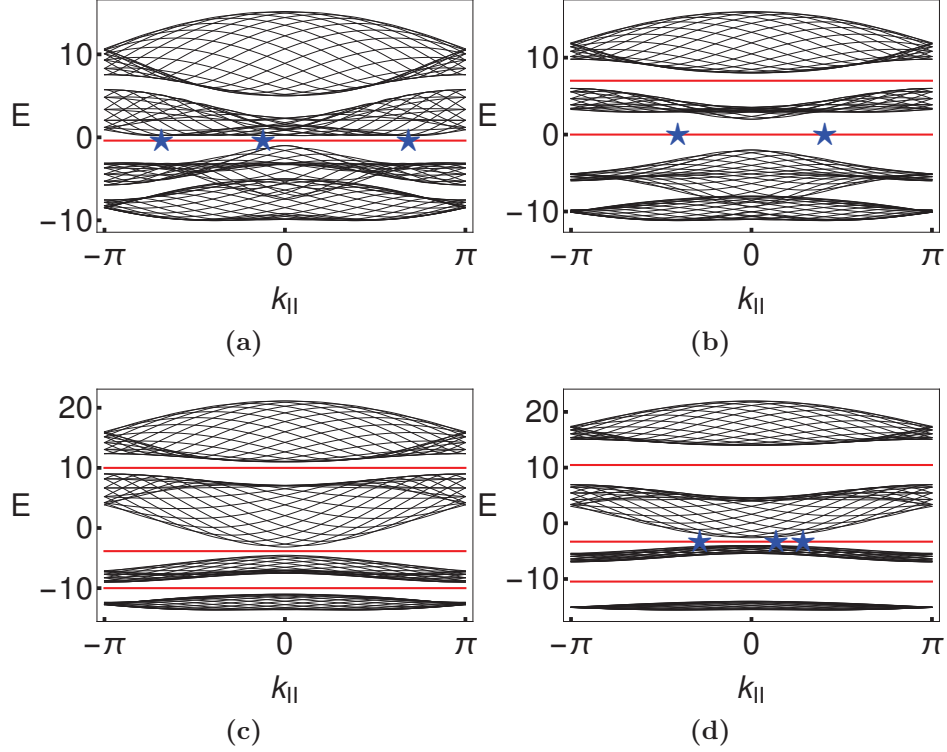


Figure V.4 – La relation de dispersion projetée sur $k_{\parallel} = k_{x-y}$ est tracée en noir pour différentes valeurs des paramètres. Les lignes rouges correspondent aux énergies auxquelles nous avons cherché des états de bord, en utilisant la méthode décrite dans la section 3.3 du chapitre IV. Les étoiles bleues correspondent aux états de bords de spin up que nous avons trouvés. Un nombre pair d'états de bord de spin up sur une ligne d'énergie donnée, et donc pour un remplissage donné, correspond à un isolant trivial, tandis qu'un nombre impair de tels états correspond à un isolant topologique. (a) $\Delta\mu = 3$, $m = 2$. (b) $\Delta\mu = 3$, $m = 5$. (c) $\Delta\mu = 9$, $m = 2$. (d) $\Delta\mu = 9$, $m = 5$. Une fois de plus les résultats sont en parfait accord avec le diagramme de phase de la figure V.1. Pour (a) et (b), certains remplissages n'ont pas pu être étudiés à cause de l'existence d'un gap indirect négatif. Ainsi, l'organisation topologique de la première paire de bandes en (a) et (b) n'a pas pu être étudiée par cette technique.

En conclusion, nous avons utilisé le modèle de BHZ en présence d'un ordre antiferromagnétique pour tester nos différentes méthodes. Il a permis de prouver leur validité dans ce cadre, à la fois en comparant nos résultats à ceux attendus en utilisant l'expression de l'invariant de Fang *et al.* [FGB13], mais aussi en comparant la valeur de l'invariant topologique calculé dans le *bulk* au nombre d'états de bord. Il semble donc pouvoir exister des phases topologiques, avec des états de bord protégés par des symétries, en présence d'ordre antiferromagnétique.

Dans les sections suivantes, nous allons utiliser ces techniques pour des systèmes

pour lesquels il n'existe pas pour l'instant de méthode pour calculer la valeur de l'invariant topologique.

2 Brisure de la symétrie d'inversion

On s'intéresse ici à un Hamiltonien symétrique sous l'action de Θ_{AF} mais qui brise \mathcal{P}_{AF} . Ainsi, l'expression de Fang *et al.* ne peut pas s'appliquer, cette expression faisant explicitement appel aux valeurs propres de l'opérateur \mathcal{P}_{AF} . On montre cependant que les méthodes développées dans le chapitre III, et que nous avons adaptées dans le chapitre IV, peuvent être utilisées et permettent de caractériser les différentes phases. On montre en particulier sur un exemple que ces méthodes permettent de capturer une transition isolant topologique/isolant trivial dans le cas où \mathcal{P}_{AF} est brisée.

2.1 Présentation du modèle

On s'intéresse ici à l'Hamiltonien précédent (*i.e.* l'Hamiltonien de BHZ en présence d'une aimantation alternée), auquel on va ajouter deux termes brisant la symétrie \mathcal{P}_{AF} , qu'on regroupe sous la notation H_P , donnés par

$$H_P(\delta_1, \delta_2) = \delta_1 \tau^x + 2\delta_2 (\sin(k_x) + \sin(k_y)) \sigma^z, \quad (\text{V.5})$$

où, comme précédemment, la matrice τ agit dans l'espace des orbitales s et p , et la matrice σ agit dans l'espace des sous-réseaux A et B. Le premier terme peut être interprété comme un terme d'hybridation des deux orbitales s et p , tandis que le deuxième terme correspond à un terme de saut d'un sous-réseau au même sous-réseau. Chacun de ces termes, pris individuellement, brise la symétrie \mathcal{P}_{AF} mais conserve la symétrie Θ_{AF} . Nous considérons ici une combinaison de ces deux termes, permettant d'illustrer nos propos avec un exemple d'ordre un peu plus général.

Nous avons montré que la symétrie $\mathcal{P}_{AF}\Theta_{AF}$ permettait d'assurer une double dégénérescence des états en chaque point \mathbf{k} de la zone de Brillouin. Ici cependant, le fait de briser la symétrie \mathcal{P}_{AF} tout en conservant la symétrie Θ_{AF} implique que $\mathcal{P}_{AF}\Theta_{AF}$ n'est plus une symétrie du système. De manière générale, la double dégénérescence peut donc être levée en tout point \mathbf{k} , excepté aux B-TRIM, où cette dégénérescence est protégée par la symétrie Θ_{AF} . En pratique cependant, on conserve la double dégénérescence sur un ensemble de lignes dans la zone de Brillouin, reliant les différents TRIM. (*cf.* Fig.V.5). Il est donc toujours possible de définir une bande I et une bande II reliées par l'opérateur Θ_{AF} , comme dans l'équation (IV.13). On peut donc utiliser les méthodes du chapitre III.

2.2 Résultats

Le but ici est simplement d'illustrer que les techniques du chapitre III peuvent s'appliquer même lorsque \mathcal{P}_{AF} est brisée. On ne dresse donc pas le diagramme de

2. Brisure de la symétrie d'inversion

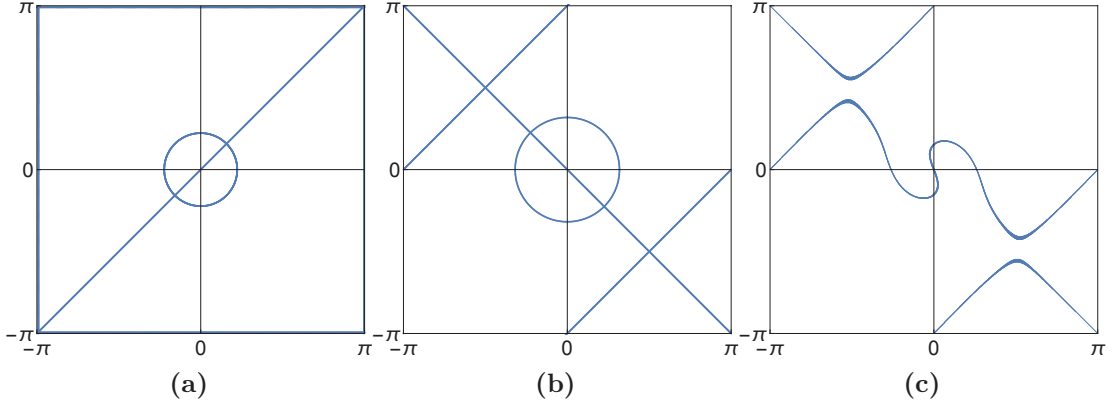


Figure V.5 – Représentation du sous-espace de la zone de Brillouin antiferromagnétique où la double dégénérescence subsiste pour la paire de bandes 2, c'est à dire les bandes 3 et 4. On remarque que, en plus des B-TRIM où cette dégénérescence est protégée par Θ_{AF} , il existe des lignes dans la zone de Brillouin, reliant les différents TRIM, où la double dégénérescence subsiste. Les valeurs des paramètres utilisés sont $\Delta\mu = 9$, $m = 5$ et : (a) $\delta_1 = 1.5$, $\delta_2 = 0$ (b) $\delta_1 = 0$, $\delta_2 = 0.5$ (c) $\delta_1 = 1.5$, $\delta_2 = 0.5$.

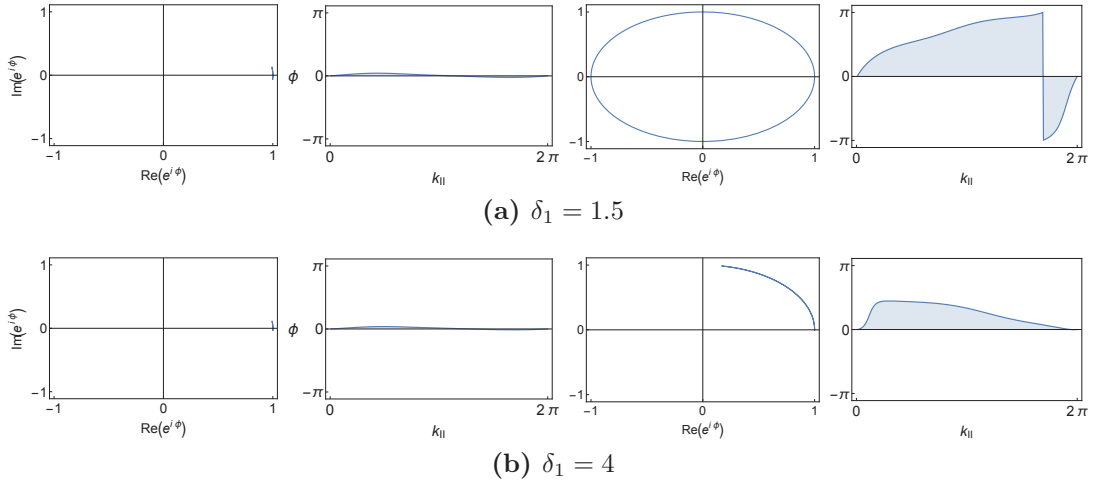


Figure V.6 – Résultats de la méthode de la phase de jonction. Chaque ligne correspond à un jeu de paramètres différent. La ligne supérieure correspond à $\delta_1 = 1.5$, tandis que la ligne inférieure correspond à $\delta_1 = 4$. Les deux premières colonnes correspondent aux tracés paramétriques de $\text{Arg}[V_{11}]$ défini chapitre III, et au tracé de la phase ϕ_α pour la première paire de bandes, tandis que les deux dernières colonnes correspondent à la deuxième paire de bandes remplie. On observe que, à demi-remplissage, le système est topologique pour $\delta_1 = 1.5$ et trivial pour $\delta_1 = 4$.

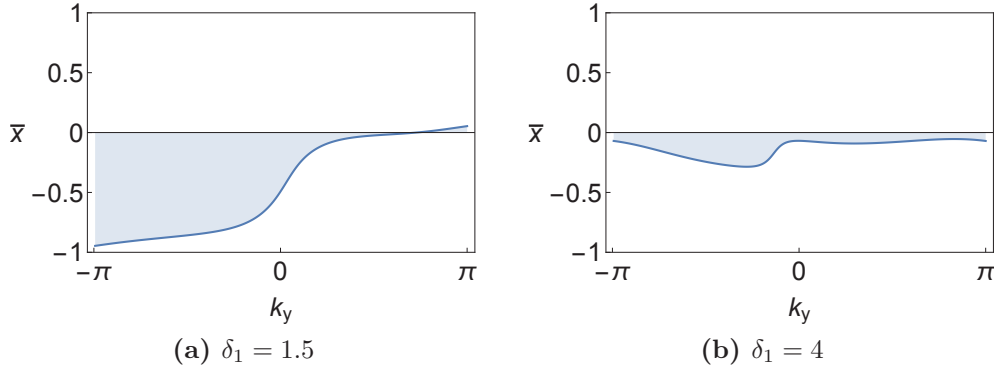


Figure V.7 – Positions des centres de charge des fonctions de Wannier sommées sur les deux bandes indexées I remplies, dans le cas où \mathcal{P}_{AF} est brisée. Comme précédemment on a choisi $t_+ = 3$, $t_- = 1$ et $\alpha = 2$, ainsi que $\Delta\mu = 9$, $m = 5$ et $\delta_2 = 0.5$. La transition est obtenue en faisant varier δ_1 et le point critique est donné par $\delta_1^* \simeq 3.2$. (a) correspond à $\delta_1 = 1.5$, tandis que (b) correspond à $\delta_1 = 4$.

phase complet de ce système, mais on s'intéresse uniquement à quelques valeurs des paramètres qui capturent une transition de phase.

Pour $\delta_1 = \delta_2 = 0$, on a obtenu un isolant topologique dans la section précédente pour $\Delta\mu = 9$ et $m = 5$, à demi-remplissage. On choisit donc ces paramètres, et on veut voir si la phase topologique survit à l'introduction d'un terme qui brise la symétrie \mathcal{P}_{AF} . Il se trouve qu'on peut faire varier δ_2 de 0 à 0.5, sans fermer le gap à demi-remplissage. Si on fixe ensuite $\delta_2 = 0.5$ et qu'on fait varier δ_1 , le gap se ferme à demi-remplissage pour $\delta_1^* \simeq 3.2$. Si le caractère topologique est préservé même lorsque la symétrie \mathcal{P}_{AF} est brisée, on devrait donc obtenir un isolant topologique pour $\delta_2 = 0.5$ et $\delta_1 < \delta_1^*$, et on ne peut espérer retrouver une phase triviale que pour $\delta_1 > \delta_1^*$. On choisit donc d'étudier les points $(\delta_1 = 1.5, \delta_2 = 0.5)$ et $(\delta_1 = 4, \delta_2 = 0.5)$. Les résultats obtenus par la méthode de la phase de jonction sont présentés à la figure V.6, et ceux des centres de charge des fonctions de Wannier sont présentés à la figure V.7. Comme nous nous intéressons uniquement à ce qu'il se passe à demi-remplissage, nous ne présentons que les résultats pour les deux premières paires de bandes pour la phase de jonction ; et la position des centres de charges présentée correspond en fait à la somme des bandes remplies indexées I .

On peut noter que, comme \mathcal{P}_{AF} est brisée, $\mathcal{P}_{AF}\Theta_{AF}$ n'est plus une symétrie du système. On perd donc la propriété des WCC

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^I = -\bar{x}_{k_y, \alpha}^{II}. \quad (\text{V.6})$$

Comme on peut le voir sur la figure V.8, il n'y a plus de lien immédiat entre la bande I et la bande II , excepté le fait que les deux bandes présentent toujours une variation opposée et entière entre $-\pi$ et π . Cela provient du fait que la paire de bandes considérée dans son ensemble doit être triviale et donc présenter une variation de la position des WCC nulle.

Dans les deux cas, on observe une phase topologique à demi-remplissage pour $\delta_1 = 1.5$, $\delta_2 = 0.5$, et une phase triviale à demi-remplissage pour $\delta_1 = 4$, $\delta_2 = 0.5$. Cela est donc bien en accord avec les résultats attendus. Cependant, le caractère

3. Brisure de la symétrie C_4

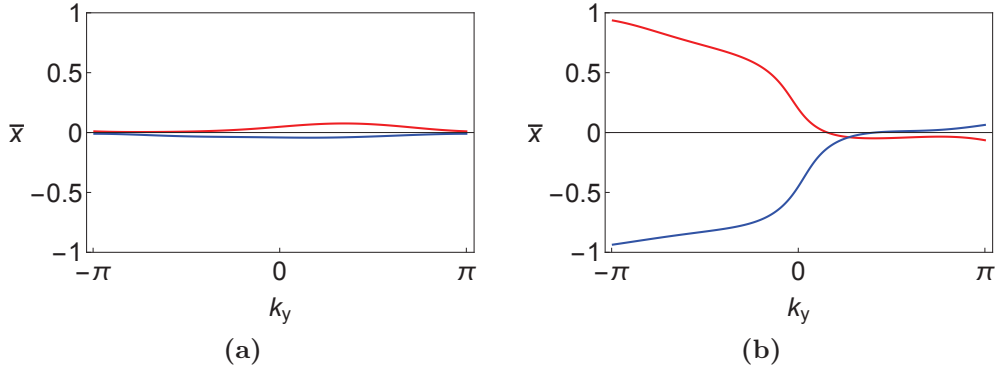


Figure V.8 – Positions des centres de charge des fonctions de Wannier pour $\delta_1 = 1.5$. En bleu, les bandes indexées I ; en rouge les bandes indexées II . (a) correspond à la paire de bandes de plus basse énergie, tandis que (b) correspond à la première bande de valence. Dans les deux cas, on n’observe pas de relation spéciale entre la courbe rouge et la courbe bleue, excepté qu’elles possèdent des variations opposées entre $-\pi$ et π .

topologique étant avant tout lié au nombre d’états de bord, nous avons voulu vérifier que la parité du nombre de paires d’états de bord est elle aussi cohérente avec une description topologique des phases même lorsque \mathcal{P}_{AF} est brisée. Pour cela, nous avons réalisé la construction explicite des états de bord discutée dans le paragraphe 3.3 du chapitre IV. Les résultats sont présentés figure V.9. On observe un unique état de bord de spin up pour $\delta_1 = 1.5$, qui disparaît pour $\delta_1 = 4$, correspondant au caractère topologique et trivial respectifs de ces phases.

En conclusion, nous montrons que nos différentes méthodes (étude de la phase de jonction et des WCC) s’appliquent même lorsque \mathcal{P}_{AF} est brisée, est qu’il est donc possible d’obtenir un invariant topologique dont la valeur permet de prédire la parité du nombre de paires d’états de bord, et ce, même lorsque \mathcal{P}_{AF} est brisée (cas pour lequel aucune autre méthode n’a été proposée au jour où est écrit ce manuscrit).

3 Brisure de la symétrie C_4

L’Hamiltonien de BHZ, même en présence d’une aimantation alternée, est invariant sous l’action de l’opérateur $\mathcal{R}_{\pi/4}$ dont l’expression est donnée à l’équation V.4, et qui peut être ramené à une symétrie C_4 . Cela entraîne que la structure de bandes se comporte de la même manière aux deux A-TRIM. Ainsi, si une inversion de bandes se produit à un A-TRIM, et devrait modifier la valeur de l’invariant topologique, une inversion de bandes équivalente se produit à l’autre A-TRIM, compensant la première. Il ne peut donc pas y avoir de modification de la valeur de l’invariant topologique à cause d’une fermeture du gap à un A-TRIM. L’expression de l’invariant topologique proposée par Fang *et al.* [FGB13] peut donc être utilisée. Dans cette section, nous souhaitons briser cette symétrie C_4 afin que les deux A-TRIM puissent se comporter de manière indépendante.

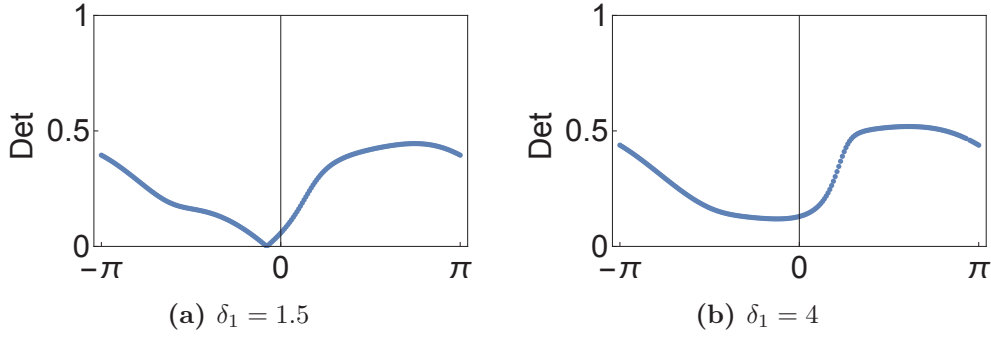


Figure V.9 – Tracé de la valeur absolue du déterminant de la matrice $\Phi(k_y)$ (définie à la section 3 du chapitre III) en fonction de k_y , pour une énergie dans le gap à demi-remplissage. On rappelle qu'un zéro de cette fonction correspond à la présence d'un état de bord pour ce k_y , et cette énergie. (a) correspond à $\delta_1 = 1.5$, tandis que (b) correspond à $\delta_1 = 4$.

On montre alors que l'expression de Fang *et al.* ne permet pas de capturer certaines transitions de phases. En revanche, les différentes méthodes que nous avons présentées permettent quant à elles d'avoir accès au diagramme de phase réel.

3.1 Présentation du modèle

Comme pour l'Hamiltonien de BHZ, on s'intéresse donc à un Hamiltonien de liaison forte sur réseau carré. La présence d'une aimantation antiferromagnétique nous impose de considérer, comme précédemment, deux sous-réseaux A et B . De plus on considère toujours les degrés de liberté dus au spin, et à deux types d'orbitales différentes, l'une de symétrie s , et l'autre de symétrie p . En utilisant les mêmes notations que précédemment, l'Hamiltonien considéré est alors donné par (dans l'espace des \mathbf{k}) :

$$\begin{aligned}
 H(\mathbf{k}) = & \mu + \Delta\mu\tau^z \\
 & - 2t(C_- + C_+)(C_- \sigma^x + S_- \sigma_y) \\
 & - 2(t'_x \cos(k_x) + t'_y \cos(k_y))\tau^z \\
 & + 2\alpha(S_+ C_+ s^y \tau^y \sigma^z - S_- C_- s^x \tau^y \sigma^z) \\
 & + m s^z \sigma^z.
 \end{aligned} \tag{V.7}$$

Comme précédemment, le premier terme ($\mu_{\pm} = \mu \pm \Delta\mu$) provient de la différence d'énergie entre l'orbitale de symétrie s et celle de symétrie p . Le deuxième terme correspond à un terme de saut de premier voisin, tandis que le troisième terme correspond à un terme de saut de second voisin. On choisit ce terme anisotropique et dépendant du sous-réseau. C'est ce terme qui brise la symétrie C_4 que posséderait sinon cet Hamiltonien. Le terme suivant hybride les deux orbitales et provient d'un couplage spin-orbitale. Ce terme est nécessaire pour obtenir l'ouverture d'un gap à demi-remplissage, et donc un comportement isolant. Le dernier terme, enfin, provient de l'aimantation alternée et représente l'ordre antiferromagnétique.

3. Brisure de la symétrie C_4

Dans la suite nous choisissons $\mu = 0, \Delta\mu = 3, t = 1, t'_x = 1, t'_y = 0.5, \alpha = 2$ et $m > 0$. Nous faisons un tel choix, afin d'augmenter la lisibilité des figures, mais les résultats sont aussi valables pour des choix de paramètres plus réalistes, comme $\alpha < t'_x, t'_y < t$.

3.2 Résultats

Si on fait varier m , l'expression de Fang *et al.* prévoit une unique transition de phase à $m = 6$, faisant passer le système d'une phase topologique (pour $m < 6$), à la phase triviale (pour $m > 6$). Cependant, on peut observer que le gap à demi-remplissage disparaît pour d'autres valeurs de m (*cf.* Fig.V.10), pouvant nous faire imaginer un diagramme de phase plus complexe. Et en effet, la méthode de la phase de jonction (*cf.* Fig.V.11) et la méthode des centres de Wannier (*cf.* Fig.V.12) font toutes les deux apparaître un diagramme de phase plus complexe. On observe en particulier que des fermetures du gap à un A-TRIM (pour $m = 2$ et $m = 4$) permettent de modifier la valeur de l'invariant topologique. On peut aussi noter que pour $m \simeq 2.25$, le gap se ferme en des endroits qui ne sont pas des TRIM, simultanément. En présence des symétries Θ_{AF} et \mathcal{P}_{AF} , cela ne devrait pas modifier la valeur de l'invariant topologique, et c'est bien ce qu'on observe.

Enfin cet Hamiltonien est aussi diagonal par bloc, et peut être séparé en deux blocs reliés par la symétrie Θ_{AF} . Ainsi, on peut ne travailler qu'avec un seul de ces blocs, et calculer le nombre de Chern de chacune des bandes (*cf.* section 4, chapitre III). On se place donc dans le sous-espace engendré par ($|\uparrow sA\rangle, |\uparrow sB\rangle, |\downarrow pA\rangle, |\downarrow pB\rangle$). On obtient une expression analytique des états propres en fonction de \mathbf{k} , et en utilisant l'équation (III.33), on a accès à la valeur de la courbure de Berry (tracée à la figure V.13), que l'on intègre sur la zone de Brillouin pour obtenir le premier nombre de Chern de la bande considérée. En sommant sur les bandes remplies, on obtient alors une valeur pour l'invariant topologique. On peut noter que le calcul de la courbure de Berry est analytique, et les seules erreurs numériques possibles peuvent uniquement provenir de l'intégration qui est réalisée numériquement. La précision de l'intégration étant facilement contrôlable, cette méthode permet de corroborer de façon fiable les résultats numériques obtenus par la méthode de la phase de jonction et la méthode des centres de charge des fonctions de Wannier (*cf.* Fig.V.14).

Pour confirmer la validité de nos résultats, on peut tenter de retrouver la correspondance *bulk-edge*. En effet, l'intérêt des isolants topologiques réside dans la présence d'états de bord protégés, et l'objectif de l'invariant topologique est de pouvoir prédire ce nombre d'états de bord. On souhaite donc réaliser la construction explicite des états de bord pour cet Hamiltonien, afin de pouvoir comparer la valeur de l'invariant topologique au nombre de paires d'états de bord.

On a cependant un problème si on tente de reproduire la méthode du paragraphe 3.3 du chapitre IV *verbatim*. Si on choisit un réseau avec deux sites par cellule unité et de vecteurs de base \hat{x} et $\hat{x} - \hat{y}$, et qu'on définit H^I comme la restriction de l'Hamiltonien au sous-espace engendré par ($|\uparrow sA\rangle, |\uparrow sB\rangle, |\downarrow pA\rangle, |\downarrow pB\rangle$), on obtient des termes de la forme $c^\dagger(p+2, q)c(p, q)$ (qui proviennent du

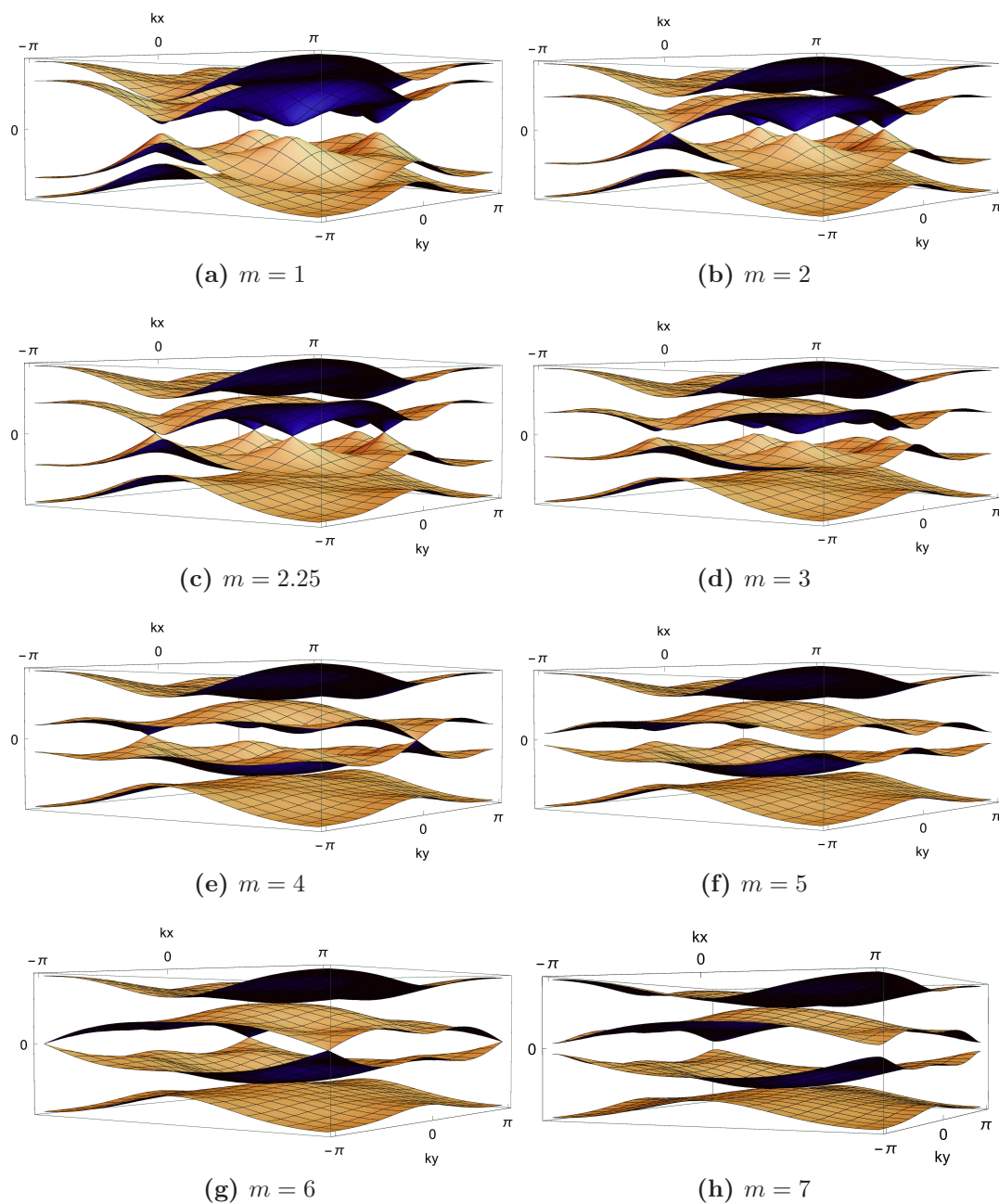


Figure V.10 – Relation de dispersion pour $\mu = 0, \Delta\mu = 3, t = 1, t'_x = 1, t'_y = 0.5, \alpha = 2$ et différentes valeurs de m . On observe que le gap à demi-remplissage se ferme à un B-TRIM pour $m = 6$, et à un A-TRIM pour $m = 2$ et $m = 4$. Pour les autres valeurs de m , le gap est ouvert sur toute la zone de Brillouin, excepté pour $m = 2.25$, où le gap se ferme pour des points qui ne sont pas des TRIM.

3. Brisure de la symétrie C_4

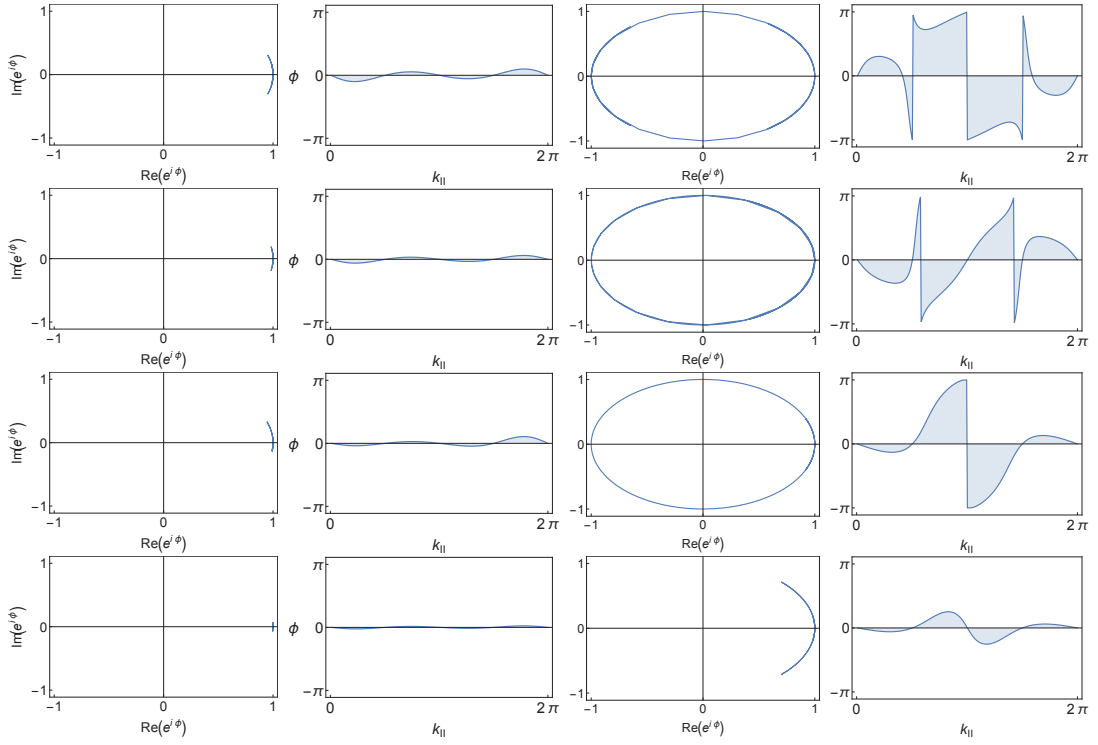


Figure V.11 – Résultats de la méthode de la phase de jonction. Chaque ligne correspond à un jeu de paramètres différent. De haut en bas, les lignes correspondent à $m = 1$, $m = 3$, $m = 5$ et $m = 7$. Les deux premières colonnes correspondent au tracé paramétrique de la phase de V_{11} défini chapitre III, et au tracé de la phase ϕ_{α} pour la première paire de bandes, tandis que les deux dernières colonnes correspondent à la deuxième paire de bandes remplie. On obtient une phase topologique pour $m = 1$ et 5 et la phase triviale pour $m = 3$ et 7 . En effet, pour $m = 3$, le tracé paramétrique laisse penser à une phase topologique, mais en fait V_{k_y} s'enroule deux fois, et la phase est bien triviale.

terme $-2\alpha S_C s^x \tau^y \sigma^z$). L'Hamiltonien H^I se réécrit alors

$$H^I = \sum_{p,k} (c_{p,k}^{\dagger} \mathcal{M} c_{p,k} + c_{p,k}^{\dagger} \mathcal{T}' c_{p+1,k} + c_{p+1,k}^{\dagger} \mathcal{T}'^{\dagger} c_{p,k} + c_{p,k}^{\dagger} \mathcal{T}'' c_{p+2,k} + c_{p+2,k}^{\dagger} \mathcal{T}''^{\dagger} c_{p,k}), \quad (\text{V.8})$$

ce qui pose problème pour la suite de la procédure. En effet, la fonction d'onde est maintenant définie par une suite linéaire d'ordre 2, et la condition au bord ouverte ne suffit pas à fixer entièrement la fonction d'onde. Il faut alors trouver une autre condition initiale, plus ou moins réaliste.

Cependant, le problème peut être contourné en considérant non pas une cellule unité à deux sites, mais une cellule unité à quatre sites. Les nouveaux vecteurs de bases deviennent alors $\hat{x} + \hat{y}$ et $\hat{x} - \hat{y}$. Après un petit travail de réécriture, on obtient alors une expression de H^I de la forme

$$H^I = \sum_{p,k} (c_{p,k}^{\dagger} \mathcal{M} c_{p,k} + c_{p,k}^{\dagger} \mathcal{T} c_{p+1,k} + c_{p+1,k}^{\dagger} \mathcal{T}^{\dagger} c_{p,k}). \quad (\text{V.9})$$

Ce qu'on a gagné sur le réseau (on travaille maintenant avec une base orthonormée), a été perdu sur la taille des matrices. En effet, H est désormais une matrice

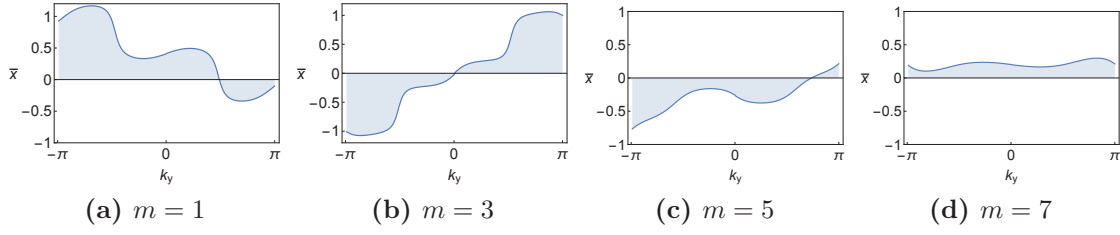


Figure V.12 – Position des WCC pour $\mu = 0$, $\Delta\mu = 3$, $t = 1$, $t'_x = 1$, $t'_y = 0.5$, $\alpha = 2$ et $m = 1, 3, 5, 7$, sommé sur l'ensemble des bandes indexées I remplies. Le saut de position entre $-\pi$ et π est égal (en valeur absolue) à 1, 2, 1 and 0 respectivement. On obtient donc une phase topologique pour $m = 1$ et 5 et la phase triviale pour $m = 3$ et 7.

carrée de taille 16, et donc \mathcal{M} et \mathcal{T} sont désormais des matrices de taille 8, ce qui augmente un peu le temps de calcul. Cela reste néanmoins faisable, et on obtient les résultats de la figure V.15. Le nombre d'états de bord observé est en parfait accord avec notre diagramme de phase de la figure V.14.

On a donc montré que des événements non triviaux peuvent avoir lieu aux A-TRIM, et ainsi modifier la parité du nombre de paires d'états de bord. Cependant, les différentes méthodes que nous avons mises en place permettent de capturer ces différentes transitions, et justifie l'expression de l'invariant topologique que nous avons proposée. Notre expression permet en effet de traiter les cas où le comportement aux deux A-TRIM n'est pas le même, les deux A-TRIM n'étant pas reliés par symétrie.

3. Brisure de la symétrie C_4

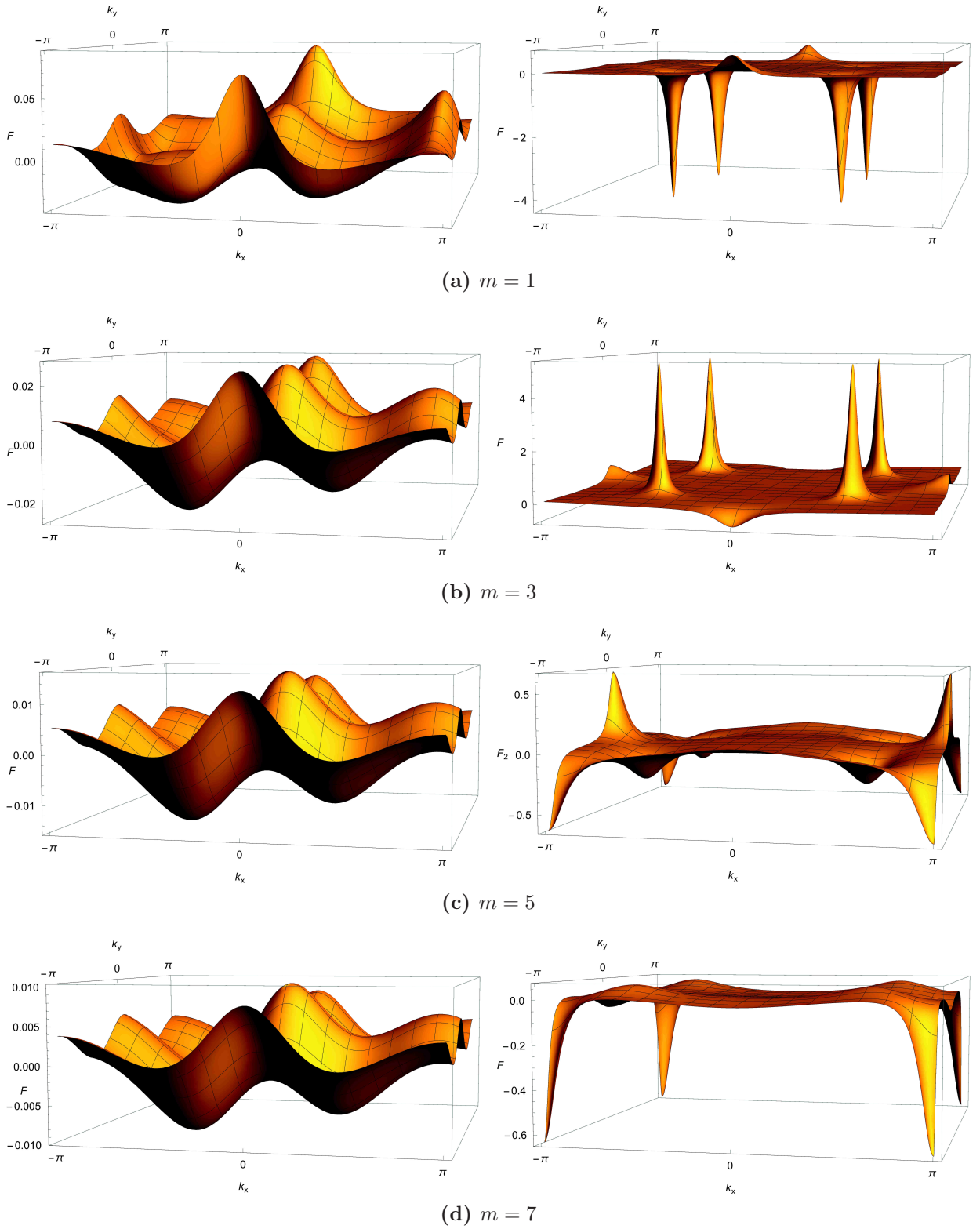


Figure V.13 – Tracé de la courbure de Berry calculée pour $\mu = 0, \Delta\mu = 3, t = 1, t'_x = 1, t'_y = 0.5, \alpha = 2$, et différentes valeurs de m . La première colonne correspond à la bande de plus basse énergie de H^{II} , et la deuxième colonne à la bande d'énergie suivante. On observe que les courbures de Berry sont très piquées pour certaines valeurs des paramètres.

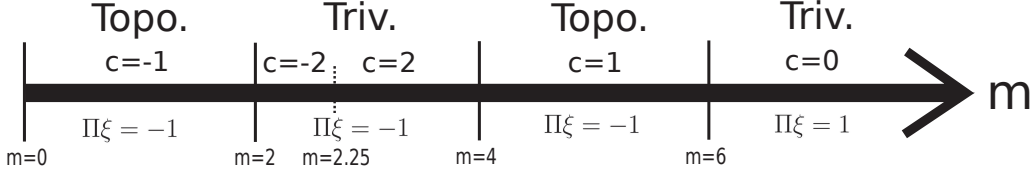


Figure V.14 – Diagramme de phase $\mu = 0$, $\Delta\mu = 3$, $t = 1$, $t'_x = 1$, $t'_y = 0.5$, $\alpha = 2$ et $m > 0$, avec nos différentes méthodes. Topo. correspond à la phase topologique, et Triv. à la phase triviale. En dessous, est donnée la valeur du nombre de Chern total des deux bandes de plus basse énergie de l'Hamiltonien restreint au sous-espace engendré par $(|\uparrow sA\rangle, |\uparrow sB\rangle, |\downarrow pA\rangle, |\downarrow pB\rangle)$. $\Pi\xi$ correspond à la valeur de l'invariant topologique proposé par Fang *et al.*. Pour $2 < m < 4$, on obtient une phase triviale tandis que $\Pi\xi = -1$, démontrant que $\Pi\xi$ ne peut caractériser la topologie de la phase.

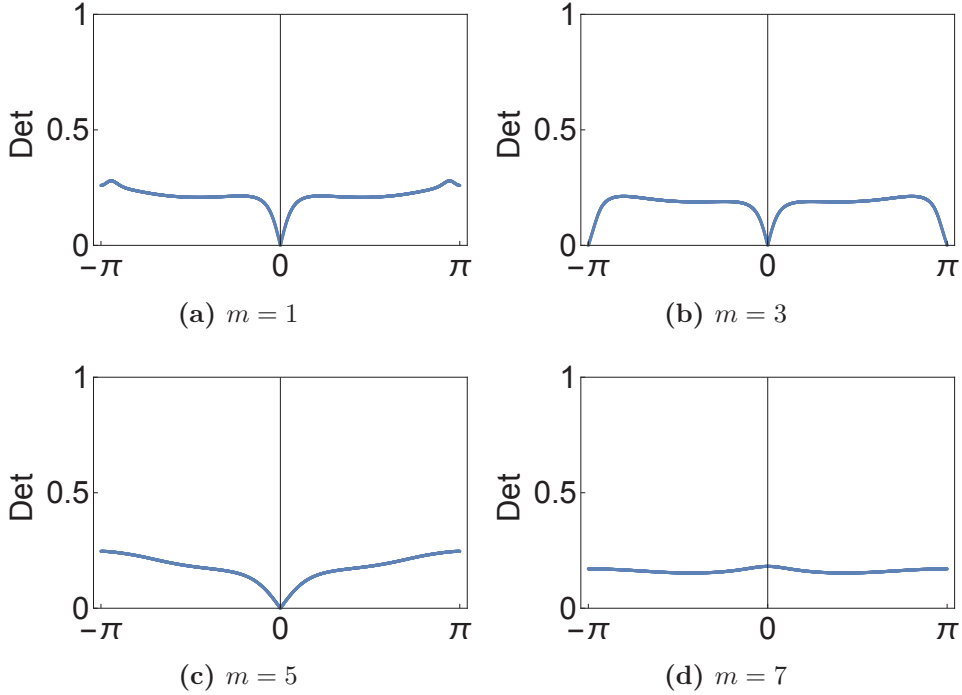


Figure V.15 – Tracé de la valeur absolue du déterminant de la matrice $\Phi(k_{||})$, définie à la section 3 du chapitre III, pour $\mu = 0$, $\Delta\mu = 3$, $t = 1$, $t'_x = 1$, $t'_y = 0.5$, $\alpha = 2$ et $m = 1, 3, 5, 7$. On rappelle qu'un zéro de cette fonction correspond à un état de bord pour H^I (et donc à une paire d'états de bord pour H). Pour $m = 1$ et $m = 5$, on observe un unique état de bord pour H^I , signature d'un comportement topologique. En revanche, pour $m = 3$ et $m = 7$, on observe un nombre pair d'états de bord pour H^I , signe de la phase triviale.

Conclusion et perspectives

Durant cette thèse, je me suis intéressé aux isolants topologiques. J'ai tout d'abord proposé une méthode expérimentale d'identification des isolants topologiques forts à trois dimensions, utilisant des mesures d'oscillations quantiques.

Je me suis ensuite particulièrement intéressé aux isolants topologiques à deux dimensions en présence d'un ordre antiferromagnétique. La question principale a été de savoir si la description topologique des phases garde un sens lorsque la symétrie de renversement du temps est brisée par une aimantation alternée. Après avoir introduit une formulation de l'invariant topologique inspirée des travaux de Fu et Kane [FK06, FK07] pour le cas paramagnétique, j'ai présenté quatre méthodes permettant d'évaluer cet invariant, que j'ai adapté du cas paramagnétique. La première, la méthode de la phase de jonction, s'appuie sur le fait qu'il n'est pas possible d'obtenir une jauge à la fois lisse et symétrique pour un isolant topologique. La deuxième, la méthode des centres de charge des fonctions de Wannier hybrides, utilise le fait que l'invariant topologique peut être défini en fonction de la polarisation, et en particulier de ses variations entre différents points de la zone de Brillouin. La troisième méthode, la construction explicite des états de bord, s'appuie sur la notion de correspondance *bulk-edge*, qui est à l'origine de l'intérêt pour les isolants topologiques, et qui lie la parité du nombre de paires d'états de bord au caractère trivial ou topologique du système. Enfin, la quatrième méthode est un calcul direct du nombre de Chern des différentes bandes, sous certaines conditions sur la définition des bandes.

Ces différentes méthodes ont enfin été utilisées pour déterminer la nature triviale ou topologique d'un certain nombre de modèles. Je me suis d'abord intéressé au modèle de Bernevig, Hughes et Zhang en présence d'ordre antiferromagnétique, qui a permis de tester la validité des différentes méthodes. En effet, pour ce système, une expression simple de l'invariant topologique, proposée par Fang *et al.* [FGB13], permet d'obtenir un diagramme de phase servant de point de comparaison. Je me suis ensuite intéressé à un Hamiltonien où la symétrie d'inversion, présente pour les autres systèmes, est brisée ; et pour lequel aucune expression de l'invariant n'avait été proposée. J'ai montré que les différentes méthodes discutées précédemment, et que j'ai adapté au cas antiferromagnétique, peuvent s'appliquer, et qu'on retrouve bien la correspondance *bulk-edge* dans ces systèmes. Enfin, je me suis intéressé à une autre brisure de symétrie, une symétrie C_4 , et j'ai montré que dans ce cas, l'expression de Fang *et al.* peut être prise en défaut. En effet, une fois la symétrie C_4 brisée, des transitions non triviales peuvent se produire aux A-TRIM. L'expression de Fang *et al.* s'intéressant uniquement à ce qui se passe aux B-TRIM, ne peut donc pas capturer ces transitions.

De futurs travaux pourraient poursuivre le travail effectué dans cette thèse de multiples façons.

Tout d'abord, des calculs de diagonalisation exacte ou s'appuyant sur la théorie de la fonctionnelle densité (DFT) pourraient être réalisées pour des systèmes définis sur des bandes de largeur finie, mais de longueur infinie, pour les différents Hamiltoniens discutés précédemment. Cela permettrait de vérifier par une autre méthode la présence des états de bord, et donc d'étayer encore d'avantage nos arguments. Une étude de la dépendance des états de bord selon l'orientation du bord pourrait aussi être réalisée.

Pour ce qui est des méthodes, la méthode de calcul direct du nombre de Chern pourrait être améliorée. En effet, nous nous sommes contentés ici de l'utiliser dans des cas où une expression analytique des fonctions d'ondes était accessible, et où il était donc possible d'obtenir une expression analytique de la courbure de Berry, plus simple à intégrer. Un algorithme de Monte-Carlo pourrait par exemple être utilisé. Il permettrait en effet d'échantillonner intelligemment la zone de Brillouin afin de se concentrer d'avantages sur les zones "très piquées" lors de l'intégration, pour obtenir une valeur fiable du nombre de Chern. Il faudrait alors recalculer la valeur de la courbure de Berry en chacun de ces points. Cela peut être long, car l'Hamiltonien doit être diagonalisé en chacun de ces points, mais cela permettrait d'appliquer la méthode du calcul direct du nombre de Chern à un plus grand nombre de modèles.

On pourrait aussi s'intéresser, dans le cas de l'Hamiltonien de BHZ en présence d'une aimantation alternée, à ce qu'il se passe à $1/4$ et $3/4$ de remplissage. Nous avons montré en effet qu'il était possible d'obtenir une organisation topologique des bandes à ces remplissages, mais nous n'avons pas été en mesure d'obtenir un vrai isolant topologique. En effet, chaque fois que nous avons pu observer un comportement topologique à ces remplissages, nous avons aussi observé un gap indirect négatif, et le système n'était donc pas isolant. Cependant, d'autres termes pourraient être ajoutés à l'Hamiltonien, afin de surmonter ce problème.

De plus, les travaux réalisés durant cette thèse se sont surtout intéressés au problème de l'ordre antiferromagnétique d'un point de vue théorique. La recherche d'Hamiltoniens plus réalistes réalisant les phases topologiques décrites dans ce manuscrit pourrait aussi être intéressante, afin de faciliter la recherche de matériaux réels présentant un comportement d'isolant topologique antiferromagnétique bidimensionnel.

Enfin, et surtout, l'extension des résultats à trois dimensions pourrait être un réel enjeu pour la compréhension des phases topologiques antiferromagnétiques. La plupart des critères utilisés aujourd'hui pour caractériser ces matériaux s'appuient en effet sur le comportement des fonctions d'ondes aux B-TRIM (définis au paragraphe IV.1.3). Or, nous avons montré ici que, à deux dimensions, le comportement aux A-TRIM est aussi important. L'étude de l'importance de comportements similaires à trois dimensions pourrait donc être particulièrement intéressante.

Bibliographie

- [AAC⁺10] Z. Alpichshev, J. G. Analytis, J.-H. Chu, I. R. Fisher, Y. L. Chen, Z. X. Shen, A. Fang, and A. Kapitulnik. STM imaging of electronic waves on the surface of bi_2te_3 : Topologically protected surface states and hexagonal warping effects. *Phys. Rev. Lett.*, 104 :016401, Jan 2010. (page 48)
- [ACC⁺10] J. G. Analytis, J.H. Chu, Y. Chen, F. Corredor, R. D. McDonald, Z. X. Shen, and I. R. Fisher. Bulk fermi surface coexistence with dirac surface state in bi_2se_3 : A comparison of photoemission and shubnikov–de haas measurements. *Phys. Rev. B*, 81 :205407, May 2010. (page 48)
- [AM76] N. W. Ashcroft and D. N. Mermin. *Solid State Physics*. Toronto : Thomson Learning, Jan 1976. (pages 4 and 7)
- [AMR⁺10] J. G. Analytis, R. D. McDonald, S. C. Riggs, J.-H. Chu, G.S. Boebinger, and I. R. Fisher. Two-dimensional surface state in the quantum limit of a topological insulator. *Nature Physics*, 6(12) :960–964, 2010. (page 48)
- [AS84] J.E. Avron and R. Seiler. On the quantum hall effect. *Journal of Geometry and Physics*, 1(3) :13 – 23, 1984. (page 17)
- [Ber84] 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. (page 67)
- [BHZ06] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, 314(5806) :1757–1761, 2006. (pages 2, 28, 41, and 42)
- [BKS⁺10] N. P. Butch, K. Kirshenbaum, P. Syers, A. B. Sushkov, G. S. Jenkins, H. D. Drew, and J. Paglione. Strong surface scattering in ultrahigh-mobility bi_2se_3 topological insulator crystals. *Phys. Rev. B*, 81 :241301, Jun 2010. (page 48)
- [BM09] C. Bena and G Montambaux. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New Journal of Physics*, 11(9) :095003, 2009. (page 73)

- [BO27] M. Born and R. Oppenheimer. Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 389(20) :457–484, 1927. (page 4)
- [CAC⁺09] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z.-X. Shen. Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi_2Te_3 . *Science*, 325(5937) :178–181, 2009. (page 48)
- [Cay13] J. Cayssol. Introduction to dirac materials and topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, 14(9–10) :760 – 778, 2013. (page 23)
- [CNGP⁺09] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81 :109–162, Jan 2009. (page 20)
- [CQY⁺10] J. Chen, H. J. Qin, F. Yang, J. Liu, T. Guan, F. M. Qu, G. H. Zhang, J. R. Shi, X. C. Xie, C. L. Yang, K. H. Wu, Y. Q. Li, and L. Lu. Gate-voltage control of chemical potential and weak antilocalization in Bi_2Se_3 . *Phys. Rev. Lett.*, 105 :176602, Oct 2010. (page 48)
- [CV09] S. Coh and D. Vanderbilt. Electric polarization in a Chern insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :107603, Mar 2009. (page 24)
- [ERT⁺10] K. Eto, Z. Ren, A. A. Taskin, K. Segawa, and Y. Ando. Angular-dependent oscillations of the magnetoresistance in Bi_2Se_3 due to the three-dimensional bulk fermi surface. *Phys. Rev. B*, 81 :195309, May 2010. (page 48)
- [FC13] M. Fruchart and D. Carpentier. An introduction to topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, 14(9–10) :779 – 815, 2013. (pages 19 and 23)
- [FCG14] M. Fruchart, D. Carpentier, and K. Gawędzki. Parallel transport and band theory in crystals. *EPL (Europhysics Letters)*, 106(6) :60002, 2014. (pages 73 and 74)
- [FF15] C. Fang and L. Fu. New classes of three-dimensional topological crystalline insulators : Nonsymmorphic and magnetic. *Phys. Rev. B*, 91 :161105, Apr 2015. (pages 2 and 78)
- [FFH08] T. Fukui, T. Fujiwara, and Y. Hatsugai. Topological meaning of z_2 numbers in time reversal invariant systems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 77(12) :123705, 2008. (page 40)
- [FGB13] C. Fang, M. J. Gilbert, and B. A. Bernevig. Topological insulators with commensurate antiferromagnetism. *Phys. Rev. B*, 88 :085406, Aug 2013. (pages 2, 72, 78, 79, 80, 88, 89, 90, 95, 99, and 107)

Bibliographie

- [FH07] T. Fukui and Y. Hatsugai. Quantum spin hall effect in three dimensional materials : Lattice computation of z_2 topological invariants and its application to bi and sb. *Journal of the Physical Society of Japan*, 76(5) :053702, 2007. (page 40)
- [FK06] L. Fu and C. L. Kane. Time reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump. *Phys. Rev. B*, 74 :195312, Nov 2006. (pages 34, 36, 40, 79, 81, and 107)
- [FK07] L. Fu and C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 76 :045302, Jul 2007. (pages 38, 40, 76, 79, and 107)
- [FKM07] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele. Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :106803, Mar 2007. (page 2)
- [Fu11] L. Fu. Topological crystalline insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 106 :106802, Mar 2011. (pages 2 and 78)
- [GF09] H.-M. Guo and M. Franz. Three-dimensional topological insulators on the pyrochlore lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :206805, Nov 2009. (page 38)
- [GFS11] H. Guo, S. Feng, and S.-Q. Shen. Quantum spin hall effect induced by nonmagnetic and magnetic staggered potentials. *Phys. Rev. B*, 83 :045114, Jan 2011. (pages 72, 79, and 89)
- [Gir99] S. M. Girvin. *Topological aspects of low dimensional systems*, chapter The Quantum Hall Effect : Novel Excitations And Broken Symmetries, pages 53–175. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1999. (page 14)
- [Goe09] M. O. Goerbig. Quantum Hall Effects. *Ultracold Gases and Quantum Information : Lecture Notes of the Les Houches Summer School in Singapore*, 91, July 2009. (page 14)
- [Hal88] F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels : Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61 :2015–2018, Oct 1988. (page 18)
- [HK10] M. Z. Hasan and C. L. Kane. *Colloquium* : Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82 :3045–3067, Nov 2010. (pages 10, 23, and 40)
- [HQW⁺08] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. A topological dirac insulator in a quantum spin hall phase. *Nature*, 452(7190) :970–974, 2008. (pages 2 and 48)
- [Hu94] C.-R. Hu. Midgap surface states as a novel signature for $d_{xa}^2-x_b^2$ -wave superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 72 :1526–1529, Mar 1994. (page 23)

- [HXQ⁺09] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, J. H. Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, J. G. Checkelsky, N. P. Ong, et al. A tunable topological insulator in the spin helical dirac transport regime. *Nature*, 460(7259) :1101–1105, 2009. (page 48)
- [JMD⁺14] Gregor Jotzu, Michael Messer, Rémi Desbuquois, Martin Lebrat, Thomas Uehlinger, Daniel Greif, and Tilman Esslinger. Experimental realization of the topological haldane model with ultracold fermions. *Nature*, 515(7526) :237–240, 2014. (page 22)
- [JR76] R. Jackiw and C. Rebbi. Solitons with fermion number $\frac{1}{2}$. *Phys. Rev. D*, 13 :3398–3409, Jun 1976. (page 23)
- [KBWM⁺08] M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. Hughes, C.-X. Liu, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. The quantum spin hall effect : theory and experiment. *Journal of the Physical Society of Japan*, 77(3) :031007, 2008. (pages 44, 46, 47, 52, and 64)
- [KDP80] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45 :494–497, Aug 1980. (pages 1, 10, and 11)
- [KF13] M. Kargarian and G. A. Fiete. Topological crystalline insulators in transition metal oxides. *Phys. Rev. Lett.*, 110 :156403, Apr 2013. (pages 2 and 78)
- [Kit06] A. Kitaev. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Annals of Physics*, 321(1) :2–111, 2006. (page 10)
- [Kla05] K. v. Klaus. Developments in the quantum hall effect. *Philosophical Transactions : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 363(1834) :2203–2219, 2005. (page 11)
- [KM05a] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :226801, Nov 2005. (pages 2 and 40)
- [KM05b] C. L. Kane and E. J. Mele. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :146802, Sep 2005. (pages 2 and 39)
- [KSV93] R. D. King-Smith and D. Vanderbilt. Theory of polarization of crystalline solids. *Phys. Rev. B*, 47 :1651–1654, Jan 1993. (pages 24 and 61)
- [KT84] N. I. Kulikov and V. V. Tugushev. Spin-density waves and itinerant antiferromagnetism in metals. *Physics-Uspekhi*, 27(12) :954–976, 1984. (page 72)

Bibliographie

- [KWB⁺07] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851) :766–770, 2007. (pages 2, 46, and 47)
- [Kö07] M. König. *Spin-related transport phenomena in HgTe-based quantum well structures*. PhD thesis, Bayerischen Julius-Maximilians-Universität Würzburg, 2007. (pages 46 and 47)
- [Lax74] M. Lax. *Symmetry principles in solid state and molecular physics*. Courier Corporation, 1974. (page 6)
- [LDF13] J. Liu, W. Duan, and L. Fu. Two types of surface states in topological crystalline insulators. *Phys. Rev. B*, 88 :241303, Dec 2013. (pages 2 and 78)
- [LFP⁺10] A. D. LaForge, A. Frenzel, B. C. Pursley, T. Lin, X. Liu, J. Shi, and D. N. Basov. Optical characterization of bi_2se_3 in a magnetic field : Infrared evidence for magnetoelectric coupling in a topological insulator material. *Phys. Rev. B*, 81 :125120, Mar 2010. (page 48)
- [Liu13] C.-X. Liu. Antiferromagnetic crystalline topological insulators. *ArXiv e-prints*, April 2013. (pages 2 and 78)
- [LPL⁺80] E.M. Lifshitz, L. P. Pitaevskii, L. D. Landau, J. B. Sykes, and M.J. Kearsley. *Statistical Physics : Theory of the Condensed State*. Butterworth-Heinemann, 1980. (page 6)
- [LZV14] C.-X. Liu, R.-X. Zhang, and B. K. VanLeeuwen. Topological non-symmorphic crystalline insulators. *Phys. Rev. B*, 90 :085304, Aug 2014. (pages 2 and 78)
- [MB07] J. E. Moore and L. Balents. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, 75 :121306, Mar 2007. (pages 2 and 40)
- [Mea92] C. A. Mead. The geometric phase in molecular systems. *Rev. Mod. Phys.*, 64 :51–85, Jan 1992. (page 18)
- [MEM10] R. S. K. Mong, A. M. Essin, and J. E. Moore. Antiferromagnetic topological insulators. *Phys. Rev. B*, 81 :245209, Jun 2010. (pages 2, 78, and 85)
- [MR91] G. Moore and N. Read. Nonabelions in the fractional quantum hall effect. *Nuclear Physics B*, 360(2) :362–396, 1991. (page 10)
- [Nak03] M. Nakahara. *Geometry, topology and physics*. CRC Press, 2003. (page 19)

- [NAX⁺13] M. Neupane, N. Alidoust, S.Y. Xu, T. Kondo, Y. Ishida, D.-J. Kim, C. Liu, I. Belopolski, Y. J. Jo, T.-R. Chang, et al. Surface electronic structure of the topological kondo-insulator candidate correlated electron system smb6. *Nature communications*, 4, 2013. (page 48)
- [PB10] D. Pesin and L. Balents. Mott physics and band topology in materials with strong spin-orbit interaction. *Nature Physics*, 6(5) :376–381, 2010. (page 38)
- [QH08] X.-L. Qi and S.-C. Hughes, T. and Zhang. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. *Phys. Rev. B*, 78 :195424, Nov 2008. (page 40)
- [QZ11] X.-L. Qi and S.-C. Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 83 :1057–1110, Oct 2011. (page 10)
- [Ram08] R. Ramazashvili. Kramers degeneracy in a magnetic field and zee-man spin-orbit coupling in antiferromagnetic conductors. *Phys. Rev. Lett.*, 101 :137202, Sep 2008. (page 72)
- [Ram09] R. Ramazashvili. Kramers degeneracy in a magnetic field and zee-man spin-orbit coupling in antiferromagnetic conductors. *Phys. Rev. B*, 79 :184432, May 2009. (page 72)
- [RBB⁺09] A. Roth, C. Brüne, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. Nonlocal transport in the quantum spin hall state. *Science*, 325(5938) :294–297, 2009. (page 47)
- [RBP15] R. Ramazashvili, F. Bègue, and P. Pujol. Diagnosing a strong topological insulator by quantum oscillations. In *Journal of Physics : Conference Series*, volume 592, page 012127. IOP Publishing, 2015. (page 48)
- [Roy09] R. Roy. Z_2 classification of quantum spin hall systems : An approach using time-reversal invariance. *Phys. Rev. B*, 79 :195321, May 2009. (page 40)
- [RR99] N. Read and E. Rezayi. Beyond paired quantum hall states : parafermions and incompressible states in the first excited landau level. *Phy. Rev. B*, 59(12) :8084, 1999. (page 10)
- [RSP⁺09] P. Roushan, J. Seo, C. V. Parker, Y.S. Hor, D. Hsieh, D. Qian, A. Richardella, M. Z. Hasan, R. J. Cava, and A. Yazdani. Topological surface states protected from backscattering by chiral spin texture. *Nature*, 460(7259) :1106–1109, 2009. (page 48)
- [SGLJH10] H. Steinberg, D. R. Gardner, Y. S. Lee, and P. Jarillo-Herrero. Surface state transport and ambipolar electric field effect in bi2se3 nanodevices. *Nano letters*, 10(12) :5032–5036, 2010. (page 48)

Bibliographie

- [Sho09] D. Shoenberg. *Magnetic oscillations in metals*. Cambridge University Press, 2009. (page 50)
- [Sit12] M. Sitte. *Quantum Hall Effect and Surface Criticality in 3D Topological Insulators*. PhD thesis, Universität zu Köln, 2012. (page 11)
- [SJS⁺10] A. B. Sushkov, G. S. Jenkins, D. C. Schmadel, N. P. Butch, J. Paglione, and H. D. Drew. Far-infrared cyclotron resonance and faraday effect in bi_2se_3 . *Phys. Rev. B*, 82 :125110, Sep 2010. (page 48)
- [Sla29] J. C. Slater. The theory of complex spectra. *Phys. Rev.*, 34 :1293–1322, Nov 1929. (page 5)
- [SPF⁺12] D. Sticlet, F. Piéchon, J. N. Fuchs, P. Kalugin, and P. Simon. Geometrical engineering of a two-band Chern insulator in two dimensions with arbitrary topological index. *Phys. Rev. B*, 85 :165456, Apr 2012. (page 60)
- [SSH80] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. Soliton excitations in polyacetylene. *Phys. Rev. B*, 22 :2099–2111, Aug 1980. (page 23)
- [SV11] A. A. Soluyanov and D. Vanderbilt. Computing topological invariants without inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 83 :235401, Jun 2011. (page 61)
- [SV12] A. A. Soluyanov and D. Vanderbilt. Smooth gauge for topological insulators. *Phys. Rev. B*, 85 :115415, Mar 2012. (pages 32, 55, and 56)
- [SWSH06] D. N. Sheng, Z. Y. Weng, L. Sheng, and F. D. M. Haldane. Quantum spin-hall effect and topologically invariant Chern numbers. *Phys. Rev. Lett.*, 97 :036808, Jul 2006. (page 34)
- [Teo11] C. Y. J. Teo. *Topological insulators and superconductors*. PhD thesis, University of Pennsylvania, 2011. (page 13)
- [TFK08] J. C. Y. Teo, L. Fu, and C. L. Kane. Surface states and topological invariants in three-dimensional topological insulators : Application to $\text{bi}_{1-x}\text{sb}_x$. *Phys. Rev. B*, 78 :045426, Jul 2008. (page 38)
- [TKNdN82] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :405–408, Aug 1982. (pages 1, 9, and 14)
- [TLQG11] H. Tang, D. Liang, R. L. J. Qiu, and X. P. A. Gao. Two-dimensional transport-induced linear magneto-resistance in topological insulator bi_2se_3 nanoribbons. *Acs Nano*, 5(9) :7510–7516, 2011. (page 48)
- [Wal47] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, 71 :622–634, May 1947. (page 20)

- [Wen95] X.-G. Wen. Topological orders and edge excitations in fractional quantum hall states. *Advances in Physics*, 44(5) :405–473, 1995. (page 10)
- [WN90] X. G. Wen and Q. Niu. Ground-state degeneracy of the fractional quantum hall states in the presence of a random potential and on high-genus riemann surfaces. *Phys. Rev. B*, 41 :9377–9396, May 1990. (page 10)
- [WQZ10] Z. Wang, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. Equivalent topological invariants of topological insulators. *New journal of physics*, 12(6) :065007, 2010. (page 40)
- [WZ84] F. Wilczek and A. Zee. Appearance of gauge structure in simple dynamical systems. *Phys. Rev. Lett.*, 52 :2111–2114, Jun 1984. (page 18)
- [XQH⁺09] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, DHYS Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, et al. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface. *Nature Physics*, 5(6) :398–402, 2009. (pages 2 and 48)
- [XSB⁺13] N. Xu, X. Shi, P. K. Biswas, C. E. Matt, R. S. Dhaka, Y. Huang, N. C. Plumb, M. Radović, J. H. Dil, E. Pomjakushina, K. Conder, A. Amato, Z. Salman, D. McK. Paul, J. Mesot, H. Ding, and M. Shi. Surface and bulk electronic structure of the strongly correlated system SmB_6 and implications for a topological kondo insulator. *Phys. Rev. B*, 88 :121102, Sep 2013. (page 48)
- [YQB⁺11] R. Yu, X. L. Qi, A. Bernevig, Z. Fang, and X. Dai. Equivalent expression of F_2 topological invariant for band insulators using the non-abelian berry connection. *Phys. Rev. B*, 84 :075119, Aug 2011. (page 62)
- [Zak64a] J. Zak. Magnetic translation group. ii. irreducible representations. *Phys. Rev.*, 134 :A1607–A1611, Jun 1964. (page 14)
- [Zak64b] J. Zak. Magnetic translation group. ii. irreducible representations. *Phys. Rev.*, 134 :A1607–A1611, Jun 1964. (page 14)
- [ZCC⁺09] T. Zhang, P. Cheng, X. Chen, J.-F. Jia, X. Ma, K. He, L. Wang, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang, X. Xie, and Q.-K. Xue. Experimental demonstration of topological surface states protected by time-reversal symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :266803, Dec 2009. (page 48)
- [ZL15] R.-X. Zhang and C.-X. Liu. Topological magnetic crystalline insulators and corepresentation theory. *Phys. Rev. B*, 91 :115317, Mar 2015. (pages 2 and 78)

Bibliographie

- [ZLQ⁺09] H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. *Nature physics*, 5(6) :438–442, 2009. (page 38)

Isolants Topologiques et Magnétisme

La découverte de l'effet Hall quantique par von Klitzing en 1980 a ouvert la voie à ce qui sera connu plus tard comme la *théorie topologique des bandes*. Dans le cadre de cette théorie, on ne s'intéresse plus uniquement à la relation de dispersion énergétique des électrons dans les cristaux, mais aussi à l'organisation topologique de la structure de bande. Cette théorie a permis la découverte d'une nouvelle phase de la matière, représentée par les *isolants topologiques*. Ces isolants topologiques ont de particulier qu'ils se comportent comme des isolants normaux dans le bulk, mais présentent des états de surface conducteurs. Dans cette thèse, on s'intéresse particulièrement aux isolants topologiques dits Z_2 , pour lesquels les états de surface sont protégés par la symétrie de renversement du temps : ils ne peuvent disparaître en présence d'une perturbation qui préserve cette symétrie sans que le système ne traverse une transition de phase quantique.

Pour les isolants topologiques à trois dimensions, nous proposons dans cette thèse, un critère expérimental utilisant les oscillations quantiques magnétiques, permettant d'identifier un type particulier d'isolants topologiques : les isolants topologiques forts.

Pour les systèmes à deux dimensions, nous nous sommes intéressés aux phénomènes liés à la rupture de la symétrie par renversement du temps à cause de la présence d'un ordre antiferromagnétique. Dans ce cas, la symétrie d'importance devient le renversement du temps fois une translation. Dans ce contexte, nous avons tout d'abord établi analytiquement l'expression d'un invariant topologique pour les systèmes présentant aussi la symétrie d'inversion. Nous avons ensuite adapté trois méthodes numériques normalement utilisées dans le cadre des isolants topologiques invariants par renversement du temps : la méthode de la phase de jonction, la méthode des centres de charge des fonctions de Wannier et la construction explicite des états de bord. Nous avons montré qu'elles permettaient de tester la nature triviale ou topologique de plusieurs modèles théoriques pour lesquelles aucune méthode n'existait, par exemple les systèmes sans symétrie d'inversion.

Mots-Clés : Isolants topologiques, Oscillations quantiques magnétiques, Antiferromagnétisme.

Topological Insulators and Magnetism

The discovery of the quantum Hall effect by von Klitzing in 1980 paved the way for what is now known as *topological band theory*. In this theory, we are interested not only in the energy spectra of the electrons in crystals, but also in the topological structure of the bands. A new phase of matter was discovered thanks to this theory : the *topological insulators*. Topological insulators are unique in the sense that they behave like trivial insulators in the bulk, but possess metallic edge states. In this thesis, we are particularly interested in so-called Z_2 topological insulators, whose edge states are protected by time reversal symmetry : they cannot disappear in the presence of a perturbation that respects this symmetry, without the system undergoing a quantum phase transition.

For three-dimensional topological insulators, we propose an experimental criterion based on magnetic quantum oscillations to identify a special kind of topological insulators : the strong topological insulator.

In two dimensions, we study the consequences of time reversal symmetry breaking due to anti-ferromagnetic order. In this case, the important symmetry is time reversal times a translation. In this context, we first establish an analytical expression for systems that also have inversion symmetry. We then adapt three numerical methods usually employed for time reversal symmetric systems : the reconnection phase method, the Wannier charge center method and the explicit construction of edge states. We show that they are useful to probe the topology of models for which no methods were available ; such as non-centrosymmetric systems.

Keywords : Topological insulators, Magnetic quantum oscillations, Anti-ferromagnetism.