

# Interaction entre le champ des axions et les vibrations du réseau dans les isolants

par

Mohamed Nabil Yacine Lhachemi

Mémoire présenté au département de physique  
en vue de l'obtention du grade de maître ès sciences (M.Sc.)

FACULTÉ des SCIENCES  
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 5 novembre 2022

Le 5 novembre 2022

*le jury a accepté le mémoire de Monsieur Mohamed Nabil Yacine Lhachemi dans sa version finale.*

Membres du jury

Professeur Ion Garate  
Directeur de recherche  
Département de physique

Professeur Mathieu Juan  
Membre interne  
Département de physique

Professeur Stefanos Kourtis  
Président rapporteur  
Département de physique

À mes parents  
À la mémoire de mon grand père Lhachemi Mohamed

# Sommaire

Ce mémoire vise à étudier l'impact des vibrations du réseau sur les propriétés topologiques des isolants tridimensionnels. Le principal objectif est de déterminer de nouveaux effets mesurables expérimentalement, reliés à la topologie des isolants et issus des phonons.

Nous commencerons ce mémoire par étudier les propriétés topologiques des isolants. Nous verrons tout d'abord comment la topologie est arrivée à la matière condensée dans l'optique d'introduire les isolants topologiques et les effets qui caractérisent ces matériaux exotiques. Ensuite, nous présenterons brièvement l'équation du mouvement des phonons. Ceci nous permettra d'introduire un concept relié aux phonons mais qui est souvent négligé : la charge effective des phonons. Nous finirons par parler de l'impact des phonons sur les isolants topologiques.

Par la suite, nous présenterons la théorie développée pour pouvoir déterminer l'impact des vibrations du réseau sur la topologie des isolants. Nous montrerons que les phonons peuvent se coupler aux photons de façon à induire un terme topologique au sein de l'action du système considéré. Cette théorie est en fait une adaptation à la matière condensée de concepts de théorie des champs généralement utilisés en physique des particules.

Enfin, nous présenterons les effets physiques issus des phonons dans les isolants topologiques. Nous verrons notamment que les phonons peuvent induire un effet magnétique chiral et un (potentiel) effet Witten au sein du volume du système. De plus, nous montrerons que les phonons peuvent être à l'origine d'effets magnéto-électriques topologiques au niveau des surfaces du matériau. Pour finir, nous discuterons de l'impact des résultats de notre théorie sur l'absorption du matériau et la séparation LO-TO. Ces deux derniers effets représentent des concepts complètement inédits.

**Mots clés :** Isolant topologique, Axion, Phonon, Absorption, Séparation LO-TO, Effet magnéto-électrique topologique

# Remerciements

Je tiens à remercier tout d'abord mon directeur de recherche Ion Garate qui m'a permis de travailler sur ce projet. Merci d'avoir été très souvent disponible pour répondre à mes questions. Merci aussi à Sanghita Sengupta qui a été la première, avec Ion, à croire en mes capacités de chercheur.

Merci à ma famille qui m'a soutenu pendant toutes ces années d'études. Merci à ma tante Zeineb et mes cousins Taha et Racha pour m'avoir accueilli chez eux pendant mon passage au Canada. Enfin, un grand merci à mes parents, Salim et Karima, qui sont en grande partie responsable de la réussite dans mes études.

Cette recherche a été menée grâce, en partie, au soutien financier du Fonds d'excellence en recherche Apogée Canada.

# Table des matières

<b>Sommaire</b>	<b>iii</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Contexte théorique</b>	<b>2</b>
1.1 Matière condensée topologique	2
1.1.1 Transport parallèle et phase de Berry	4
1.1.2 Premier nombre de Chern et effet Hall anormal quantifié	7
1.1.3 Prémices des isolants topologiques 3-D	9
1.2 Effets physiques des isolants topologiques 3-D	12
1.2.1 Axions et isolants topologiques	13
1.2.2 Invariant $\theta$ et symétrie	14
1.2.3 Invariant $\theta$ et effet Hall anormal semi-quantifié	15
1.2.4 Isolants topologiques magnétiques	19
1.3 Phonons	19
1.3.1 Absorption IR	22
1.3.2 Séparation LO-TO	22
1.3.3 Charge effective dans les isolants topologiques 3-D	23
<b>2 Quasi-particule axionique issue des fluctuations des phonons dans les isolants</b>	<b>25</b>
2.1 $S_\theta$ induite par les phonons au sein de l'action effective des isolants	25
2.1.1 Modèle	26
2.1.2 Intégrer les électrons	28
2.1.3 Champ axionique dynamique induit par les phonons	30
2.1.4 Charge effective induite par le champ axionique	34
2.2 Dépendance en fréquence et température de la charge effective et du champ des axions	36
2.2.1 Calcul en température nulle	36
2.2.2 Calcul en température finie	42
<b>3 Effets physiques induits par la quasi-particule axionique</b>	<b>47</b>
3.1 Effets magnétique chiral et magnéto-électriques topologiques induits par les phonons	47
3.2 Effets créés par la charge effective induite par le champ des axions	51
3.2.1 Écrantage dans les isolants	52

<i>TABLE DES MATIÈRES</i>	vi
3.2.2 Absorption IR induite par le champ des axions . . . . .	55
3.2.3 Séparation LO-TO induite par le champ des axions . . . . .	56
<b>Conclusion</b>	<b>57</b>
<b>A Intégrale avec ligne de coupure</b>	<b>60</b>
<b>B Théorème de Sokhotski-Plemelj pour une fonction arbitraire</b>	<b>63</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>64</b>

# Table des figures

1.1	Différentes surfaces classées en fonction de leur genre $g$ (ou nombre de trous).	3
1.2	Transport parallèle sur deux surfaces différentes : un cylindre et une sphère. Il est possible de voir que l'holonomie est nulle sur le cylindre car ce dernier possède une courbure de Gauss nulle. Cependant, l'holonomie est non nulle sur la sphère.	5
1.3	Déformation permettant de montrer que la zone de Brillouin à deux dimensions (à gauche) est un tore. Cette observation permet d'utiliser le théorème de Gauss-Bonnet-Berry (équation 1.18) dans le calcul de la conductivité de Hall.	8
1.4	Isolant topologique 2D entouré d'un isolant trivial (ou du vide). Les lignes vertes représentent les états conducteurs protégés topologiquement. Il est possible de voir que ces états conducteurs sont localisés aux frontières de l'isolant, i.e. au niveau de l'interface séparant les deux milieux associés à des nombres de Chern différents.	9
1.5	Schémas permettant de clarifier la notation utilisée lors de la présentation de l'invariant de Fu-Kane et de son utilisation dans les systèmes à trois dimensions.	10
1.6	Spectre d'énergie de l'hamiltonien 1.23. La partie droite de la figure montre le résultat du processus d'inversion de bande. À noter que nous considérons ici une masse de Dirac $m$ indépendante du vecteur d'onde $k$ .	11
1.7	Isolant topologique ( $\theta = \pi$ ) entouré du vide ( $\theta = 0$ ). Ce schéma montre qu'au niveau des surfaces de l'isolant topologique, le gradient de $\theta$ devient non nul.	17
1.8	Impact des modes de phonons <b>(a)</b> acoustiques et <b>(b)</b> - <b>(c)</b> optiques sur une cellule unité possédant deux ions positifs (bleu) et deux ions négatifs (rouge). Le centre de masses des ions positifs et négatifs est représenté en pointillés. La charge effective des phonons est nulle pour les figures <b>(a)</b> et <b>(b)</b> , car le centres de masses ne sont pas affectés par le mode de vibration, tandis que la charge effective des phonons est non nulle pour la figure <b>(c)</b> .	21
2.1	Différents vertex décrivant chacun des termes de $S_{\text{int}}$ . Le vertex de gauche représente l'interaction électrons-photon, celui du milieu l'interaction électrons-phonon et le dernier l'interaction électrons-magnon.	28

2.2	Diagrammes de Feynman issus du troisième ordre de la théorie des perturbations et pouvant avoir une structure similaire à $S_\theta$ . Les lignes pleines, ondulées et pointillées représentent des fermions de Dirac, photons et magnons, respectivement. Les doubles lignes pointillées représentent des phonons. . . .	32
2.3	Dépendance du rapport entre la charge effective induite par le champ des axions et la charge de l'électron en fonction de la masse de axiale $m_5$ (gauche) et de la masse de Dirac $m$ (droite) dans le régime $\Delta \gg \hbar q_0$ et $T = 0$ (cf. équation 2.66). . . . .	38
2.4	Comportement du ratio entre le module complexe de la charge effective issue des axions et de la charge de l'électron en fonction de la masse axiale $m_5$ dans le régime des masses arbitraires et à température nulle. Ce comportement est présenté dans le cas où $m > \hbar q_0/2$ (gauche), $m = \hbar q_0/2$ (milieu) et $m < \hbar q_0/2$ (droite). Les lignes en pointillées représente les valeurs de $m_5$ pour lesquelles $\Delta = \hbar q_0$ . . . . .	41
2.5	Comportement du ratio entre le module complexe de la charge effective issue des axions et de la charge de l'électron en fonction de la masse de Dirac $m$ dans le régime des masses arbitraires et à température nulle. Ce comportement est présenté dans le cas où $m_5 > \hbar q_0/2$ (gauche), $m_5 = \hbar q_0/2$ (milieu) et $m_5 < \hbar q_0/2$ (droite). Les lignes en pointillées représente les valeurs de $m$ pour lesquelles $\Delta = \hbar q_0$ . . . . .	43
2.6	Les différents parcours d'intégration utilisés pour faire la somme de Matsubara présente à l'équation 2.98. Les croix représentent les pôles de la fonction $f_m(z)/(e^{\beta z} + 1)$ . . . . .	45
A.1	Parcours dans le plan complexe utilisé pour calculer $I$ . La ligne en pointillées rouge représente la ligne de coupure associée au radicale présent dans l'intégrande. La ligne de coupure se connecte à l'infini. . . . .	61
B.1	Parcours utilisés pour démontrer le théorème de Sokhotski-Plemelj. . . . .	63

# Introduction

La matière condensée topologique constitue un nouveau paradigme de la matière condensée où les propriétés topologiques intrinsèques des matériaux sont utilisées pour pouvoir expliquer ou prédire des effets physiques. Malgré les travaux entrepris dans les années 80 [1] permettant d'expliquer l'origine topologique de l'effet Hall anormal quantifié, il faut attendre la fin des années 2000 pour réellement avoir un emballement de la communauté scientifique autour de cette théorie. Depuis, de nombreux travaux théoriques ont permis de prédire l'existence d'une multitude de phases topologiques et de matériaux topologiques [2, 3, 4]. Parmi ces derniers se trouvent les isolants topologiques. Ces matériaux exotiques sont des isolants qui possèdent des états conducteurs, protégés contre des changements continus des paramètres du système, et se situant au niveau des frontières de l'isolant. Les isolants topologiques jouent un rôle important en matière condensée topologique car leur compréhension est à l'origine de l'intérêt apporté à cette nouvelle théorie. En effet, les travaux visant à mettre en lien la topologie et l'effet Hall anormal quantifié démontrèrent en fait l'existence des isolants topologiques bidimensionnels [1]. De plus, la découverte des isolants topologiques tridimensionnels marque le début de l'intérêt apporté à la matière condensée topologique [5, 6, 7]. Par la suite, un effort expérimental a été entrepris pour vérifier l'existence réelle des matériaux topologiques [8].

Actuellement, la majorité des travaux expérimentaux entrepris pour essayer de détecter le comportement topologique des matériaux reposent principalement sur des propriétés électroniques [9]. Effectivement, les principales directions de recherche expérimentale se basent sur la détection des effets topologiques sur les structures de bandes électroniques ou sur les propriétés de transport électroniques. Cependant, les effets topologiques n'affectent pas exclusivement les propriétés associées aux électrons. Il existe certains travaux défendant le fait que la topologie des matériaux puisse aussi affecter le comportement des phonons, ouvrant ainsi la possibilité de détecter la topologie des matériaux grâce à des particules bosoniques [10]. Dans ce travail, nous nous sommes proposés d'étudier l'interaction entre les propriétés topologiques des isolants tridimensionnels et les vibrations du réseau. Plus précisément, nous avons essayé de développer une théorie montrant comment les phonons peuvent affecter le caractère topologique des isolants. De plus, nous avons déterminé une nouvelle façon de détecter la topologie des isolants qui implique les phonons au lieu des électrons.

# Chapitre 1

## Contexte théorique

Avant de plonger dans les calculs illustrant les principaux résultats de ce mémoire, il est important de présenter les bases théoriques nécessaires à la compréhension des chapitres suivants. Ce chapitre a donc pour objectif de mettre en place tous les concepts théoriques de base requis pour apprécier les aboutissements de ce projet. Pour ce faire, nous commencerons par faire une brève revue de la matière condensée topologique, ce qui permettra d'introduire les isolants topologiques 3-D qui sont les matériaux considérés dans ce travail. Ensuite, nous présenterons le formalisme des intégrales de chemin et son application à la matière condensée. Ceci permettra d'introduire la notion d'axion. Plus précisément, nous verrons comment il est possible d'avoir des quasi-particules axioniques dans les isolants topologiques. Nous montrerons aussi comment ce comportement non trivial peut affecter l'électrodynamique des isolants 3-D, impliquant de nombreux effets physiques potentiellement observables. Enfin, nous montrerons que les vibrations du réseau, aussi appelé phonons, peuvent induire une transition de phase topologique. De plus, nous présenterons une quantité importante associée aux phonons : la charge effective des phonons.

### 1.1 Matière condensée topologique

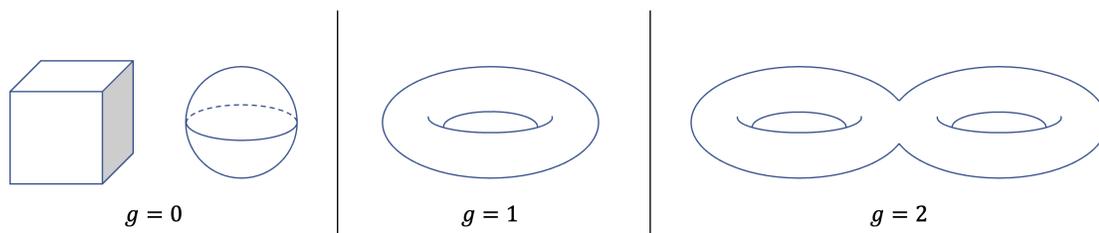
---

La topologie est initialement une branche des mathématiques qui vise à étudier les propriétés des objets géométriques qui sont invariantes sous déformation continue [11]. En d'autres mots, la topologie permet d'identifier les propriétés des variétés qui restent inchangées lorsqu'elles subissent une déformation n'impliquant aucun déchirement et recollement, laissant ainsi le nombre de *trous* associés à l'objet invariant. De ce fait, si une variété peut être déformée continuellement de façon à obtenir une autre variété, alors les deux variétés sont topologiquement équivalentes. Par exemple, la surface d'une sphère (possédant 0 trou) est topologiquement équivalente à la surface d'un cube (possédant 0 trou), alors que ces deux surfaces ne sont pas topologiquement équivalentes à la surface d'un tore (possédant 1 trou). Il est donc possible en topologie de classer différents objets géométriques en fonction de leur invariant topologique, i.e. un entier qui prend la même

valeur pour des objets topologiquement équivalents (voir figure 1.1). En mathématique, l'invariant topologique est le nombre de trous associés à l'objet en question. Le théorème qui permet de résumer le concept d'équivalence topologique est le théorème de Gauss-Bonnet [12]. Pour des surfaces à 2D dans un espace à 3 dimensions spatiales, ce théorème peut s'écrire comme

$$\frac{1}{2\pi} \oint_S K dS = 2(1 - g). \quad (1.1)$$

Ici,  $K$  représente la courbure de Gauss de la surface  $S$  et  $g$  est le *genre* (équivalent au nombre de trous) de la surface  $S$ . Le membre de droite du théorème dénote en fait la caractéristique d'Euler-Poincaré. L'équation 1.1 montre bien que si deux surfaces  $S$  et  $S'$  possèdent la même caractéristique d'Euler-Poincaré (donc le même nombre de trous), alors l'intégrale de leurs courbures de Gauss  $K$  et  $K'$  sera la même, malgré le fait que les courbures soient localement différentes. Aussi, le théorème de Gauss-Bonnet peut être généralisé à des espaces associés à des dimensions spatiales supérieures ou à des espaces abstraits. Historiquement, malgré les travaux faits par Euler en 1736 concernant le problème des 7 ponts de Königsberg, la topologie est devenue une branche importante en mathématique suite aux travaux de Poincaré à la fin du XIX<sup>e</sup> [11]. Depuis ce temps, la topologie est arrivée à trouver des applications en physique, et plus précisément en matière condensée, donnant ainsi naissance à un nouveau paradigme en matière condensée : la matière condensée topologique.



**FIGURE 1.1** Différentes surfaces classées en fonction de leur genre  $g$  (ou nombre de trous).

Un des objectifs de la matière condensée est de pouvoir classer les différents matériaux. Une façon de procéder est d'utiliser la classification de Landau qui consiste à classer les matériaux en fonction des symétries qu'ils préservent en utilisant la théorie de Ginzburg-Landau [13]. La matière condensée topologique propose une nouvelle façon de classer les matériaux qui consiste à les catégoriser en fonction de leurs invariants topologiques. Il est alors possible de parler de phase topologique de la matière, i.e. une phase associée à une valeur non nulle d'un invariant topologique. De plus, la notion de transition de phase topologique, associée au changement de la valeur d'un invariant topologique, peut être introduite. En outre, la matière condensée topologique est un exemple de théorie topologique nécessitant un espace abstrait. En effet, les propriétés topologiques des matériaux sont déterminées dans l'espace d'Hilbert associé à la fonction d'onde du système. Suite à cette brève introduction à la topologie, nous pouvons passer à la présentation d'un concept clé dans ce domaine : la phase de Berry.

### 1.1.1 Transport parallèle et phase de Berry

Le concept à l'origine de la matière condensée topologique est la phase de Berry. Cette dernière fut découverte en 1984 par Michael Berry [14]. Néanmoins, la découverte de cette phase ne s'est pas fait dans un contexte purement associé à la matière condensée. La découverte de la phase de Berry découle du fait que le transport adiabatique d'une particule devrait ajouter à la fonction d'onde du système une phase différente de la phase dynamique. Il faut attendre les travaux de Joshua Zak qui fut le premier à appliquer les résultats obtenus par Berry à la matière condensée [15]. De plus, les travaux du mathématicien Barry Simon ont permis de comprendre le lien entre la phase de Berry et la topologie [16]. Dans cette section, nous calculons la phase de Berry et montrons le lien entre cette quantité et la topologie.

Tout d'abord, pour bien comprendre le lien entre la phase de Berry et la topologie, il est important de présenter le concept de transport parallèle en géométrie. Pour cela, considérons une surface  $S$  possédant une courbure non nulle (par exemple une sphère) et une base de vecteurs orthonormée  $\{\mathbf{n}, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$  tel que  $\mathbf{n}$  soit le vecteur unitaire normal à la surface et  $\mathbf{e}_1$  et  $\mathbf{e}_2$  soient les vecteurs unitaires tangents à  $S$ . L'objectif ensuite est de faire transporter les deux vecteurs tangents le long d'un parcours fermé  $\mathcal{C} \equiv \{\mathbf{r}(t) | t \in [0, T]\}$  appartenant à la surface de façon à ce que  $\mathbf{e}_1$  et  $\mathbf{e}_2$  ne puissent pas subir de rotation dans le plan tangent à  $S$ . L'équation du mouvement des vecteurs tangents peut être calculée donnant comme résultat  $\dot{\mathbf{e}}_r = -\mathbf{n}(\mathbf{e}_r \cdot \dot{\mathbf{n}})$  pour  $r = 1, 2$  [17]. En prenant une combinaison linéaire des vecteurs tangents  $\boldsymbol{\varphi} = (\mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2)/\sqrt{2}$ , les deux équation du mouvement peuvent s'écrire

$$\boldsymbol{\varphi}^* \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} = 0. \quad (1.2)$$

Cette dernière équation représente la loi du transport parallèle. Elle permet notamment de montrer que lorsque  $\mathbf{e}_1$  et  $\mathbf{e}_2$  reviennent à leurs positions initiales, ils ne pointent plus dans la même direction. Donc, lors du transport le long de  $\mathcal{C}$ , les vecteurs tangents subissent une rotation d'un angle  $\gamma$  qui dépend du parcours  $\mathcal{C}$ . Cette angle peut être calculé en prenant compte une nouvelle base orthonormée  $\{\mathbf{n}(\mathbf{r}), \mathbf{t}_1(\mathbf{r}), \mathbf{t}_2(\mathbf{r})\}$  composée de vecteurs fixes. Ainsi, en définissant la combinaison linéaire  $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (\mathbf{t}_1(\mathbf{r}) + i\mathbf{t}_2(\mathbf{r}))/\sqrt{2}$ , et en utilisant le lien entre la base fixe et la base qui subit le transport parallèle

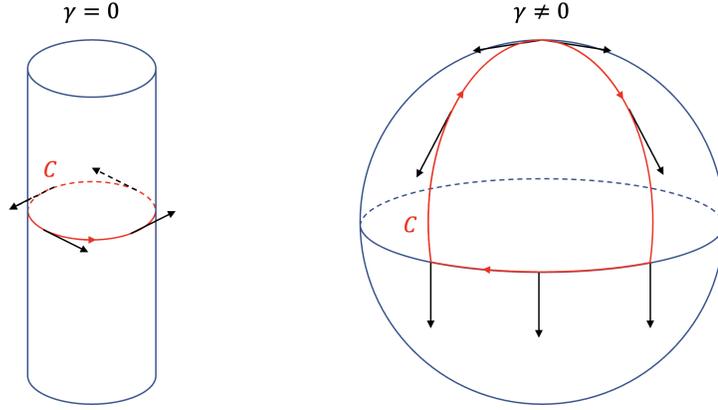
$$\boldsymbol{\varphi}(t) = e^{-i\gamma(t)} \mathbf{u}(\mathbf{r}(t)), \quad (1.3)$$

l'angle  $\gamma$  peut être calculé donnant ainsi

$$\dot{\gamma} = \text{Im}(\mathbf{u}^* \cdot \dot{\mathbf{u}}). \quad (1.4)$$

Cette angle porte le nom d'*holonomie*. À noter que cette angle peut être obtenu uniquement lorsqu'un vecteur est transporté parallèlement sur une surface courbe, i.e. cet angle est nul si le vecteur est transporté sur la surface d'un cylindre par exemple (voir figure 1.2).

Contrairement au cas classique, où c'est un vecteur qui subit un transport sur un parcours fermé, en mécanique quantique c'est la fonction d'onde du système considéré qui subit un tel processus. Soit un système associé à un hamiltonien  $H(\mathbf{R})$  qui peut être paramétrisé par



**FIGURE 1.2** Transport parallèle sur deux surfaces différentes : un cylindre et une sphère. Il est possible de voir que l'holonomie est nulle sur le cylindre car ce dernier possède une courbure de Gauss nulle. Cependant, l'holonomie est non nulle sur la sphère.

un vecteur  $\mathbf{R}(t) = (R_1(t), R_2(t), \dots)$  (ce vecteur peut être un champ magnétique, vecteur d'onde des électrons de Bloch, etc.). Il est possible de considérer une base orthonormée de vecteurs propres  $|n, \mathbf{R}\rangle$  de  $H(\mathbf{R})$  associés à l'énergie  $E_n(\mathbf{R})$  qui vérifient l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$H(\mathbf{R}) |n, \mathbf{R}\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n, \mathbf{R}\rangle. \quad (1.5)$$

L'objectif est de faire évoluer de façon adiabatique la fonction d'onde du système  $|\psi(t)\rangle$  sur un parcours  $C \equiv \{\mathbf{R}(t) | t \in [0, T]\}$  et de calculer la phase de la fonction d'onde à  $t = T$ . À  $t = 0$ , il est supposé que le système se trouve dans l'état  $|\psi(0)\rangle = |n, \mathbf{R}(0)\rangle$ . Comme  $|\psi(t)\rangle$  doit être une solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle, \quad (1.6)$$

il est possible d'écrire

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\delta_n(t)} |\varphi_n(t)\rangle, \quad (1.7)$$

où  $|\varphi_n(t)\rangle$  est une fonction d'onde auxiliaire possédant une phase dynamique nulle [17] et  $\delta_n(t)$  est la phase dynamique [18] donnée par

$$\delta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\mathbf{R}(t')). \quad (1.8)$$

En insérant l'équation 1.7 dans l'équation 1.6, et en projetant sur  $\langle\psi(t)|$ , le membre de droite de 1.6 peut s'écrire grâce au théorème adiabatique de la manière suivante

$$\langle\psi(t)|H(\mathbf{R}(t))|\psi(t)\rangle = E_n(\mathbf{R}(t)), \quad (1.9)$$

tandis que le membre de gauche donne

$$i\hbar \langle\psi(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = i\hbar \langle\varphi_n(t)|\dot{\varphi}_n(t)\rangle + E_n(\mathbf{R}(t)), \quad (1.10)$$

où le fait que  $\langle \varphi_n(t) | \varphi_n(t) \rangle = 1$  et

$$\frac{\partial F(x)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \int_0^x dx' f(x') = f(x),$$

pour toute fonction  $f$  continue et intégrable, a été utilisé (cette condition est vérifiée pour la fonction du temps  $E_n$  car l'évolution est adiabatique). Donc, en égalisant les équations 1.10 et 1.9, nous obtenons

$$\langle \varphi_n(t) | \dot{\varphi}_n(t) \rangle = 0 \quad (1.11)$$

qui est l'équivalent quantique de l'équation 1.2. Cette équivalence permet de déduire qu'une évolution adiabatique de la fonction d'onde sur un parcours  $\mathcal{C}$  est l'équivalent quantique du transport parallèle. Ensuite, pour pouvoir étudier la phase de la fonction d'onde auxiliaire, il suffit de poser

$$|\varphi_n(t)\rangle = e^{-i\gamma_n(t)} |n, \mathbf{R}(t)\rangle, \quad (1.12)$$

où  $\gamma_n$  est une phase (différente de  $\delta_n$ ) qu'il faut déterminer. À noter que cette réécriture de la fonction d'onde auxiliaire en fonction des vecteurs propres de  $H$  est équivalente à ce qui a été fait à l'équation 1.3 pour le cas classique. Pour ce faire, il suffit d'insérer l'équation 1.12 dans l'équation de Schrödinger dépendante du temps et de prendre le produit scalaire avec  $\langle n, \mathbf{R}(t) |$ . Ainsi, la nouvelle phase obéit à l'équation

$$\dot{\gamma}_n(t) = -i \langle n, \mathbf{R}(t) | \partial_t | n, \mathbf{R}(t) \rangle = \text{Im} (\langle n, \mathbf{R}(t) | \partial_t | n, \mathbf{R}(t) \rangle). \quad (1.13)$$

Cette phase est la phase non triviale de Berry. Il est possible de voir que cette dernière équation est équivalente à l'équation de l'holonomie 1.4. En conséquence, nous pouvons conclure que la phase de Berry est en fait l'équivalent quantique de l'holonomie. De plus, la phase de Berry découle du fait que l'état à  $t$  et  $t + dt$  n'est pas le même [19]. L'équation 1.13 permet de calculer la phase de Berry quelque soit  $t$ . Cependant, la dépendance en temps de cette équation peut être supprimée. En intégrant sur  $t$  et en rappelant que la fonction d'onde évolue sur un chemin fermé  $\mathcal{C}$ , l'équation 1.13 devient

$$\gamma_n = -i \int_0^T dt' \langle n, \mathbf{R}(t') | \partial_{t'} | n, \mathbf{R}(t') \rangle = -i \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \langle n, \mathbf{R} | \partial_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle. \quad (1.14)$$

La phase de Berry est donc une quantité qui dépend du chemin parcouru par la fonction d'onde et est indépendante du temps  $T$ .

Jusque là, les calculs ont été faits dans un espace abstrait associé au vecteur  $\mathbf{R}$ . En matière condensée topologique, lorsqu'un système sans interactions est considéré, le paramètre le vecteur d'onde des électrons de Bloch  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ . De ce fait,

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = -i \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{k} \cdot \langle n, \mathbf{k} | \partial_{\mathbf{k}} | n, \mathbf{k} \rangle = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n(\mathbf{k}), \quad (1.15)$$

où  $\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = -i \langle n, \mathbf{k} | \partial_{\mathbf{k}} | n, \mathbf{k} \rangle$  est la connexion de Berry aussi appelé potentiel vecteur de Berry. Ce vecteur se transforme lors d'une transformation de jauge de la même façon qu'un potentiel vecteur en électromagnétisme. Donc  $\mathcal{A}_n(\mathbf{k})$  joue le rôle d'un potentiel vecteur dans l'espace  $\mathbf{k}$ . Dans le cas où les vecteurs  $|n, \mathbf{k}\rangle$  sont dégénérés, la connexion de Berry devient

une matrice  $\mathcal{A}_j^{nm}(\mathbf{k}) = -i \langle n, \mathbf{k} | \partial_{k_j} | m, \mathbf{k} \rangle$  et est appelée connexion de Berry non-abélienne. Il est aussi possible d'avoir l'équivalent d'un champ magnétique. En effet, le théorème de Stokes permet d'écrire

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \int_S d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}), \quad (1.16)$$

où  $S$  est une surface quelconque<sup>1</sup> bordée par le parcours  $\mathcal{C}$  et  $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\partial} \times \mathcal{A}_n(\mathbf{k})$  est la courbure de Berry. Encore une fois, si les états propres de l'hamiltonien sont dégénérés, la courbure de Berry devient une matrice appelée courbure de Berry non-abélienne donnée par

$$\Omega_{ij}^{nm} = \partial_{k_i} \mathcal{A}_j^{nm} - \partial_{k_j} \mathcal{A}_i^{nm} + i [\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j]^{nm}. \quad (1.17)$$

Lors d'une transformation de jauge, la courbure de Berry est invariante, de la même façon qu'un champ magnétique en électromagnétisme. De ce fait, il est possible d'interpréter  $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k})$  comme un champ magnétique dans l'espace associé à  $\mathbf{k}$ . Dans le cas où la surface  $S$  est fermée, la relation suivante peut être démontrée [20] :

$$\frac{1}{2\pi} \oint_S d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = C_n, \quad (1.18)$$

$C_n$  étant le nombre de Chern. Ce nombre est un invariant topologique, i.e.,  $C_n$  est inchangé lorsque  $S$  ou l'hamiltonien subissent une déformation continue<sup>2</sup>. dans le contexte considéré dans cette discussion, le fait que  $C_n$  soit un invariant topologique implique que ce dernier ne change pas lorsque  $S$  ou l'hamiltonien du système est modifiée de façon continue. L'équation 1.18 est en fait la généralisation dans l'espace associé à  $\mathbf{k}$  du théorème de Gauss-Bonnet 1.1. En effet, le vecteur  $\boldsymbol{\Omega}$  est l'équivalent de la courbure de Gauss, d'où l'appellation *courbure de Berry*, et le nombre de Chern est l'équivalent du nombre de trous. L'équation 1.18 permet donc de bien voir que la phase de Berry découle du caractère topologique de la mécanique quantique.

### 1.1.2 Premier nombre de Chern et effet Hall anormal quantifié

Le nombre de Chern joue un rôle important en matière condensée topologique. En effet,  $C_n$  est un invariant topologique. De ce fait, la valeur de  $C_n$  est protégée topologiquement contre des perturbations continues. Le nombre de Chern est aussi à l'origine de l'effet Hall anormal quantifié. Détaillons cette dernière déclaration en considérant un isolant à température nulle. Dans le cas semiclassique, la vitesse des électrons de Bloch de la bande  $n$ , soumis à un faible champ électrique  $\mathbf{E}$  et pour un champ magnétique nulle, est donnée par

$$\dot{r}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}), \quad (1.19)$$

où  $\mathcal{E}_n$  est l'énergie totale des électrons de la bande  $n$  [21, 22]. Le deuxième terme représente la vitesse anormale issue de la courbure de Berry, donc de la topologie du système. Le

1.  $S$  est quelconque tant qu'elle n'entre pas en contact avec une singularité de la courbure de Berry.

2. Pour l'hamiltonien, une déformation continue est une déformation qui n'entraîne pas de fermeture du gap.

courant peut être exprimé comme

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= -\frac{e}{(2\pi)^2} \sum_n \int_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} d^2k f_n(\mathbf{k}) \dot{r}_n(\mathbf{k}) \\ &= -\frac{e}{\hbar(2\pi)^2} \sum_n \int_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} d^2k f_n(\mathbf{k}) \left[ \frac{\partial \mathcal{E}_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + e\mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) \right], \end{aligned} \quad (1.20)$$

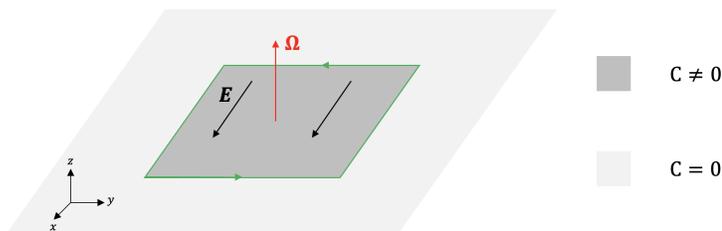
où BZ dénote la zone de Brillouin,  $f_n(\mathbf{k})$  est la distribution de Fermi-Dirac et la somme est faite sur les états occupés. Dans le cas où la température est nulle, alors  $f_n(\mathbf{k}) = 1$ . Le premier terme décrit alors un courant parallèle au champ électrique alors que le deuxième terme décrit un courant perpendiculaire au champ électrique appliqué. Ensuite, comme le système considéré est un isolant à température nulle, alors chaque bande est soit complètement remplie soit complètement vide, entraînant que la zone de Brillouin est un tore (voir figure 1.3), ce qui implique que l'intégrale sur  $\mathbf{k}$  est une intégrale sur une surface fermée. Donc, pour  $\mathbf{E} = E\hat{x}$  et  $\boldsymbol{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \Omega_n(\mathbf{k})\hat{z}$  il est possible d'écrire la conductivité de Hall

$$\sigma_{yx} = \frac{e^2}{h} \sum_{n \in \text{occupés}} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} d^2k \Omega_n(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{h} \sum_{n \in \text{occupés}} C_n = \frac{e^2}{h} C_1, \quad (1.21)$$

où le théorème de Gauss-Bonnet-Berry 1.18 a été utilisé. L'équation 1.21 représente la formule Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs (TKNN) [1] qui est un résultat célèbre en matière condensée topologique. En effet, cette formule a permis de relier le nombre de Chern, qui émane de la topologie, et l'effet Hall (anormal) quantifié, faisant ainsi de ce dernier le premier effet associé à un isolant topologique à avoir été découvert. Le fait que la conductivité de Hall dépende du nombre de Chern implique que  $\sigma_{yx}$  est une quantité quantifiée et qui est robuste devant les impuretés, imperfections, etc. Chronologiquement, la formule TKNN fut introduite avant le travail de Berry et il faut attendre le travail de Simon pour pouvoir faire le lien entre la formule TKNN et la phase de Berry [16]. Par la suite, Kohmoto a démontré que la formule TKNN pouvait être écrite en utilisant le premier nombre de Chern [23]. Enfin, les travaux de Haldane ont permis de démontrer que lors du passage d'un milieu à un autre, tous deux associés à des valeurs distincts d'un invariant topologique, des états métalliques protégés topologiquement voient le jour au niveau de l'interface [24].



**FIGURE 1.3** Déformation permettant de montrer que la zone de Brillouin à deux dimensions (à gauche) est un tore. Cette observation permet d'utiliser le théorème de Gauss-Bonnet-Berry (équation 1.18) dans le calcul de la conductivité de Hall.



**FIGURE 1.4** Isolant topologique 2D entouré d'un isolant trivial (ou du vide). Les lignes vertes représentent les états conducteurs protégés topologiquement. Il est possible de voir que ces états conducteurs sont localisés aux frontières de l'isolant, i.e. au niveau de l'interface séparant les deux milieux associés à des nombres de Chern différents.

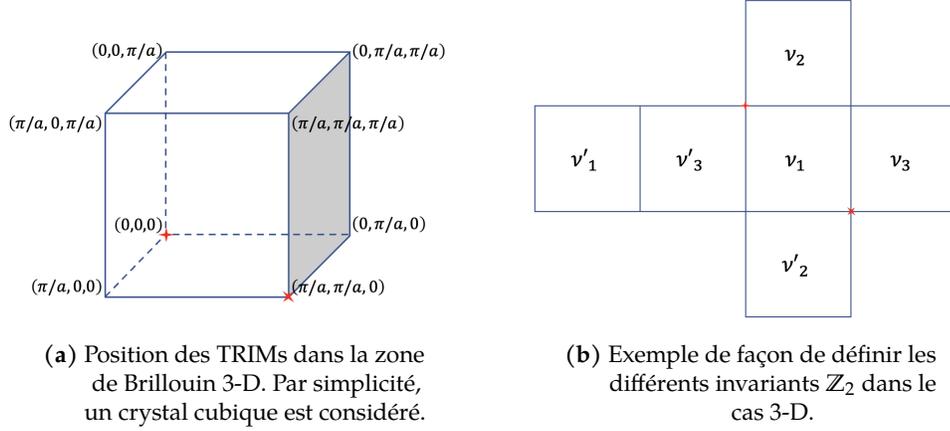
Ceci permet d'expliquer l'existence du courant de Hall au niveau des frontières de l'isolant bidimensionnel (voir figure 1.4).

Le nombre de Chern est un exemple d'invariant topologique pouvant induire des effets physiques. En réalité, le nombre de Chern présenté à l'équation 1.21 est le premier nombre de Chern. Il existe d'autres nombres de Chern associés à des systèmes ayant des dimensions supérieures. Cependant, ces invariants topologiques peuvent caractériser des systèmes à dimensions spatiales paires uniquement [19]. Suite à la découverte de l'origine topologique de l'effet Hall anormal quantifié, un effort de la communauté scientifique a été entrepris pour démontrer l'existence d'effets topologiques dans des matériaux tridimensionnels. Cet effort a permis de découvrir de nouveaux invariants topologiques qui permettent de caractériser les semi-métaux de Weyl et de Dirac [2], les supraconducteurs [3] ou les encore isolants à trois dimensions. Dans ce mémoire, nous concentrerons la discussion sur les isolants topologiques 3-D.

### 1.1.3 Prémices des isolants topologiques 3-D

Nous avons montré qu'un isolant 2-D peut abriter un effet Hall anormal quantifié. En d'autres mots, l'effet Hall anormal est un effet permettant aux isolants d'isoler à deux dimensions et de posséder des états conducteurs protégés topologiquement à une 1 dimension. Donc au niveau des frontières du système le courant peut passer. De façon analogue, un isolant topologique à 3 dimensions est un matériau qui isole dans son volume et qui possède des états de surfaces conducteurs protégés topologiquement. Cette nouvelle classe d'isolants topologiques vit le jour suite à la découverte que l'effet Hall quantique de spin pouvait être généralisé à 3 dimensions [5, 6, 7]. Par la suite, la présence de cette phase de la matière fut prédite théoriquement dans des matériaux réels [8] et a été ensuite reportée expérimentalement dans le  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  [25] et  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [26].

Comme discuté ci-haut, les phases topologiques d'un isolant 3-D ne sont pas caractérisées



**FIGURE 1.5** Schémas permettant de clarifier la notation utilisée lors de la présentation de l'invariant de Fu-Kane et de son utilisation dans les systèmes à trois dimensions.

par un nombre de Chern mais plutôt par des invariants dits  $\mathbb{Z}_2$ <sup>3</sup>. En effet, lorsque le matériau préserve la symétrie d'inversion de l'espace, il est possible de définir un invariant  $\mathbb{Z}_2$ , aussi appelé invariant de Fu-Kane [8], associé à chaque face de la zone de Brillouin invariante sous inversion du temps tel que

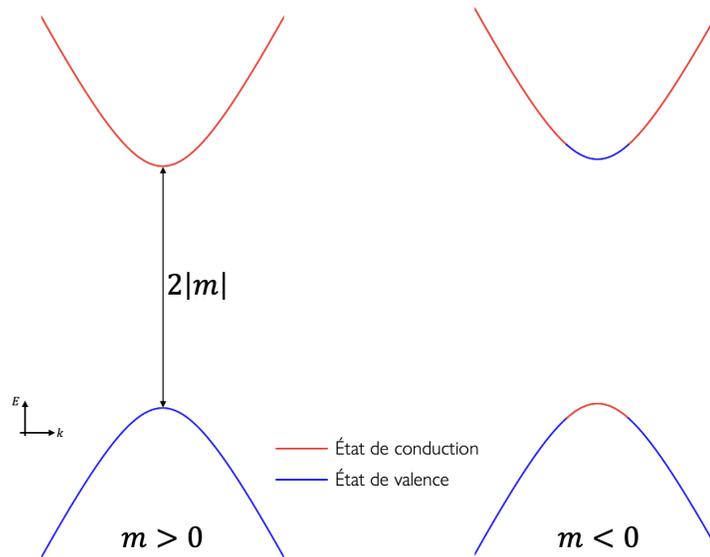
$$(-1)^{\nu} = \prod_{i \in \{\text{TRIM}\}} \delta_i, \quad (1.22)$$

où  $\nu$  est l'invariant  $\mathbb{Z}_2$  de la face considérée,  $i$  est l'indice associé aux points de la zone de Brillouin invariants sous inversion du temps (aussi appelés TRIM, voir figure 1.5a) et  $\delta_i = \pm 1$  est la valeur propre de l'opérateur de parité évaluée au point  $i$ . Il est ainsi possible de déduire que  $\nu$  peut prendre uniquement deux valeurs, 0 ou 1. Dans le cas 3-D, il existe six faces invariantes sous inversion du temps dans la zone de Brillouin. Il est donc possible de définir 6 invariants de Fu-Kane notés  $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu'_1, \nu'_2, \nu'_3$ . Dans cette notation, chaque paire d'invariant  $\nu_j$  et  $\nu'_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) est associée à des faces opposées (voir figure 1.5b). Cependant, les six invariants ne sont pas indépendants, et vérifient les relations  $\nu_1 + \nu'_1 = \nu_2 + \nu'_2 = \nu_3 + \nu'_3$ . Ceci établit deux contraintes qui permettent de réduire le nombre d'invariants  $\mathbb{Z}_2$  à quatre. Par convention, ces invariants sont notés  $(\nu_0; \nu_1, \nu_2, \nu_3)$ , tel que  $\nu_0 = \nu_1 + \nu'_1$ . Un isolant est trivial lorsqu'il est associé aux valeurs  $(0; 0, 0, 0)$ . Pour la phase topologique, il est possible de distinguer deux cas : la phase topologique faible et la phase topologique forte. Pour avoir une phase topologique faible il faut que  $\nu_0 = 0$  et qu'au moins un des trois autres invariants soit non nul. Pour la phase topologique forte, il faut que  $\nu_0 = 1$  uniquement. Ceci a permis d'introduire l'appellation *invariant topologique fort* pour  $\nu_0$  et *invariants topologiques faibles* pour  $\nu_1, \nu_2$  et  $\nu_3$ .

En plus d'avoir introduit de nouveaux invariants topologiques, un nouvel hamiltonien décrivant la structure de bande des isolants a été déterminé. Ce dernier est donné par

$$h_{3-D} = \mathbf{k} \cdot \sigma \tau^z + m \tau^x. \quad (1.23)$$

3. À l'exception des isolants 3D construits en empilant des isolants de Chern 2D.



**FIGURE 1.6** Spectre d'énergie de l'hamiltonien 1.23. La partie droite de la figure montre le résultat du processus d'inversion de bande. À noter que nous considérons ici une masse de Dirac  $m$  indépendante du vecteur d'onde  $k$ .

où  $\sigma^i$  et  $\tau^i$  représentent les matrices de Pauli associées à l'espace des spins et des orbitales. Cet hamiltonien est en fait un hamiltonien de Dirac, et  $m$  représente la masse de Dirac. Cette dernière peut dépendre du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ . Cependant, dans ce mémoire nous ne considérons pas une telle dépendance. Le spectre d'énergie associé à cette hamiltonien peut être représenté par une bande de conduction et une bande de valence toutes les deux doublées dégénérées et séparées par un gap  $2|m|$  (voir figure 1.6). La masse de Dirac permet d'identifier la phase topologique dans laquelle se trouve l'isolant 3-D. En effet, un changement de signe de la masse de Dirac implique un changement de l'invariant topologique, et donc implique une transition de phase topologique. De ce fait, pour pouvoir avoir une telle transition, il faut pouvoir fermer le gap et le rouvrir de façon à inverser le signe de la masse de Dirac. Pour ce faire, il faut que le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction s'inverse, de façon à ce que les états propres soient modifiés (voir figure 1.6). Ce processus porte le nom d'*inversion de bande*. Il a été démontré expérimentalement que dans certains isolants topologiques 3-D, le couplage spin-orbite ou encore l'utilisation de la pression [27] permet d'induire une inversion de bande. De plus, il est aussi possible d'avoir une transition de phase topologique induite par les phonons [10, 28]. Nous verrons plus tard que cette dernière façon d'induire une inversion de bande peut donner lieu à de nombreux nouveaux effets physiques.

Par la suite, des travaux de Qi, Hughes et Zhang [29] ont permis d'introduire un nouvel invariant topologique associé aux isolants topologiques forts, qui peut être relié à  $\nu_0$  lorsque l'inversion de l'espace est présente et qui est responsable d'effets physiques au sein des isolants topologiques 3-D. Cet invariant représente la quantité central de ce mémoire.

## 1.2 Effets physiques des isolants topologiques 3-D

Une autre direction de recherche choisie dans l'objectif d'obtenir une théorie illustrant les isolants topologiques 3-D a été d'étudier les systèmes à dimensions supérieures en faisant appel à la théorie des champs topologique. Plus précisément, l'emphase a été mise sur des isolants abstraits : les isolants de Chern à  $4 + 1$  dimensions. Tel que mentionné plus haut, ces systèmes peuvent être caractérisés par le deuxième nombre de Chern, car ils possèdent un nombre paire de dimensions spatiales. La partie topologique associée à ce système peut s'écrire comme une action de Chern-Simons 4-D

$$S_{4+1}^{\text{topo}}[A] = \frac{C_2}{24\pi^2} \int d^4x dw \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} A_\mu \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau, \quad (1.24)$$

où  $d^4x = dt dx dy dz$ ,  $dw$  est l'élément différentiel associé à la quatrième dimension spatiale et  $A_\mu = (A_0, A_1, A_2, A_3, A_4)$  où  $A_0$  est le potentiel électrique et  $A_1, A_2, A_3$  et  $A_4$  sont les composantes du potentiel vecteur [29]. De plus,  $C_2$  est le deuxième nombre de Chern,  $\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau}$  est le tenseur de Levi-Civita à quatre dimensions et chaque indice peut prendre les valeurs 0, 1, 2, 3 et 4. L'action 1.24 montre bien que toutes les contractions entre des indices covariants et contravariants ne se font pas à travers le tenseur métrique. De ce fait, l'action 1.24 est indépendante de la métrique, i.e.,  $\delta S_{4+1}^{\text{topo}} / \delta g_{\mu\nu} = 0$ , ce qui est cohérent avec le fait que l'action 1.24 soit reliée exclusivement à la topologie du système. Tout comme le premier nombre de Chern, il est possible de relier le second nombre de Chern à la courbure de Berry non-abélienne tel que

$$C_2 = \frac{1}{32\pi^2} \int_{\text{BZ}} d^3k dk_w \varepsilon^{ijkl} \text{tr} [\Omega_{ij} \Omega_{kl}], \quad (1.25)$$

où  $d^3k = dk_x dk_y dk_z$  et  $i, j, k, l = 1, 2, 3, 4$  [29]. Enfin, l'intégrale est faite sur la zone de Brillouin 4-D et la trace est faite sur les états occupés. De plus,  $C_2$  peut être relié à l'effet Hall à quatre dimensions. Le but de l'étude du système associé à l'action 1.24 était d'appliquer une réduction de dimension pour passer d'une théorie à  $4 + 1$  dimensions à une théorie à  $3 + 1$  dimensions, i.e. passer de l'étude d'un isolant de Chern 4-D à l'étude d'un isolant 3-D [29]. En procédant de cette façon, un nouvel invariant topologique fut découvert. Ce dernier est la 3ème forme de Chern-Simons qui est donnée par :

$$\theta = \frac{1}{4\pi} \int_{\text{BZ}} d^3k \varepsilon^{ljk} \text{tr} \left( \mathcal{A}_l \partial_k \mathcal{A}_j + \frac{2i}{3} \mathcal{A}_l \mathcal{A}_j \mathcal{A}_k \right), \quad (1.26)$$

où  $\mathcal{A}$  est la connexion de Berry non-abélienne,  $\varepsilon^{ljk}$  est le symbol de Levi-Civita et la trace est effectuée sur les états occupés uniquement<sup>4</sup>. Il est important de noter que  $A$  est le champ de jauge  $U(1)$  tandis que  $\mathcal{A}$  est le champ de jauge  $U(3)$ . À partir de cette équation il est possible de mieux comprendre pourquoi une inversion de bande permet d'induire une transition de phase topologique. En effet, à travers une inversion de bande, les états propres de l'hamiltonien sont modifiés (voir figure 1.6) entraînant ainsi un changement de la connexion de Berry non-abélienne, et donc un changement de la valeur de  $\theta$ . Or, comme

4. À noter que le paramètre  $\theta$  de ce mémoire est équivalent à  $P_3(x, t)$  des références [29] et [19].

le changement de la valeur d'un invariant topologique ne peut se faire qu'à travers une transition de phase topologique, il est possible de conclure qu'une inversion de bande induit bien une transition de phase topologique. La partie topologique de la théorie des champs des isolants topologiques 3-D peut aussi être déterminée via l'action 1.24 [29], donnant ainsi

$$S_{3+1}^{\text{topo}}[A] = S_\theta[A] = \frac{e^2}{32\pi^2\hbar} \int d^4x \theta(\mathbf{x}, t) \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\alpha\beta} F_{\mu\nu} = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \int d^4x \theta(\mathbf{x}, t) \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}, \quad (1.27)$$

$F_{\alpha\beta} = \partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha$  étant le tenseur de Faraday et  $\alpha, \beta, \mu, \nu = 0, 1, 2, 3$ . Cette action peut être réécrite en fonction des potentiels comme

$$S_\theta[A] = \frac{e^2}{8\pi^2\hbar} \int d^4x \theta(\mathbf{x}, t) \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu A_\nu \partial_\alpha A_\beta. \quad (1.28)$$

De même que pour 1.24, l'action  $S_\theta$  ne dépend pas du tenseur métrique, impliquant ainsi que  $S_\theta$  est bien une action associée à la topologie du système.

Comme le montre l'équation 1.27, l'invariant  $\theta$ , aussi appelé champ des axions, peut dépendre de l'espace et du temps. Cependant, il existe des systèmes où  $\theta$  est quantifié. Cette quantification découle des symétries que peut avoir l'isolant considéré. De plus, la dépendance en champ électrique et magnétique de  $S_\theta$  suggère que cette action puisse affecter les propriétés électrodynamiques de l'isolant. Les sous sections suivantes visent à détailler ces deux affirmations.

### 1.2.1 Axions et isolants topologiques

Les axions sont des particules dont l'existence a été postulée en 1977 par Peccei et Quinn [30]. L'existence de ces nouvelles particules découle d'une théorie, nommée théorie Peccei-Quinn, qui s'inscrit dans le cadre de la physique au delà du modèle standard. En effet, cette théorie fut développée pour résoudre un problème rencontré par le modèle standard : le problème  $\mathcal{CP}$  de la chromodynamique quantique (QCD) [31]. Ce problème émane du fait que selon le modèle standard, la QCD devrait briser la symétrie  $\mathcal{CP}$ , où  $\mathcal{C}$  représente la conjugaison de charge et  $\mathcal{P}$  la parité. Cependant, aucune validation expérimentale n'a permis de montrer l'existence de cette brisure de symétrie. Par exemple, un des effets associé à la brisure de la symétrie  $\mathcal{CP}$  est la création d'un moment dipolaire non nul au neutron. En effet, cette quantité brise la symétrie d'inversion du temps  $\mathcal{T}$  et donc brise la symétrie  $\mathcal{CP}$ <sup>5</sup> [32]. Cependant, lorsque le moment dipolaire du neutron est mesuré, la valeur obtenue est  $|\mathbf{d}| < 1.8 \times 10^{-26} \text{ ecm}$  [33]. Ainsi, dans l'objectif de déterminer une explication physique, Peccei et Quinn ont introduit une nouvelle symétrie et un nouveau champ scalaire qui, au travers d'un processus de brisure de symétrie spontanée, donne naissance à un nouveau Boson ; l'axion [34, 35]. Néanmoins, l'existence de l'axion reste purement théorique, car aucune validation expérimentale n'a encore été reportée. Il s'avère cependant que le développement mathématique représentant le couplage entre l'axion avec les photons joue

5. Pour qu'une théorie des champs soit invariante de Lorentz, il faut qu'elle préserve la symétrie  $\mathcal{CPT}$ . Donc une brisure de la symétrie  $\mathcal{T}$  implique une brisure de la symétrie  $\mathcal{CP}$  pour que  $\mathcal{CPT}$  soit conservée.

un rôle important en matière condensée topologique. En effet, l'action représentant le couplage entre le champ scalaire  $\theta_a$  illustrant les axions et le champ électromagnétique est donnée par [31]

$$S_{\text{axion-photon}} \sim \int d^4x \theta_a \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}. \quad (1.29)$$

Cette action possède la même forme que l'action 1.27. Donc, l'action topologique des isolants 3-D possède la même forme que l'action représentant le couplage entre le champ des axions et les photons en physique des particules. Cette correspondance a valeur à l'invariant topologique  $\theta$  l'appellation *champ des axions*. En outre, les travaux de Wilczek ont permis de montrer que l'existence de l'action 1.29 permet de modifier les équations de Maxwell du vide [34]. Ainsi, l'équivalence entre le concept d'axion en physique des particules et l'invariant topologique  $\theta$  en matière condensée suggère que ce dernier puisse aussi affecter les équations de Maxwell du matériau.

### 1.2.2 Invariant $\theta$ et symétrie

Revenons maintenant à la matière condensée et commençons par considérer les isolants topologiques 3-D qui préservent l'inversion du temps  $\mathcal{T}$ . Cette classe de matériaux est celle qui a été traitée lors de l'application de la théorie des champs topologiques aux isolants à 3 + 1 dimensions [29]. Il s'avère que ces matériaux possèdent une valeur de  $\theta$  qui est constante et quantifiée.

Tout d'abord, il est possible de montrer que lorsque  $\theta$  est constant et que les flux électriques et magnétiques sont quantifiés, alors l'action  $S_\theta$  est quantifiée et égale à un entier fois  $\theta\hbar$ , i.e.  $S_\theta = n\theta\hbar$  pour  $n \in \mathbb{Z}$  [36]. Ceci permet de montrer que seule les valeurs de  $\theta$  comprises entre 0 et  $2\pi$  sont physiquement distinctes. En effet, la fonction de partition associée à  $S_\theta$  peut être écrite comme

$$Z_\theta = \int \mathcal{D}[A] e^{iS_\theta[A]/\hbar} = \int \mathcal{D}[A] e^{in\theta}. \quad (1.30)$$

Cette dernière équation permet de déduire que le remplacement  $\theta \rightarrow \theta + 2m\pi$  pour  $m \in \mathbb{Z}$  n'affecte pas les observables du système. Donc, la valeur de  $\theta$  est définie modulo  $2\pi$ , i.e., toute théorie associée à  $\theta$  donnera les mêmes résultats physiques qu'une théorie associée à  $\theta + 2m\pi$ . Maintenant, la condition que le système préserve l'inversion du temps, i.e.  $\mathcal{T}Z\mathcal{T}^{-1} = Z$ , implique une autre contrainte sur la valeur de  $\theta$ . La fonction de partition associée à l'action électromagnétique totale des isolants topologiques 3-D est donnée par ( $c \equiv 1$ )

$$Z = \int \mathcal{D}[A] e^{iS_{\text{tot}}/\hbar} \quad (1.31)$$

avec

$$S_{\text{tot}} = S_{\text{max}} + S_\theta = -\frac{1}{16\pi} \int d^4x F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{e^2\theta}{32\pi^2\hbar} \int d^4x \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\alpha\beta} F_{\mu\nu}, \quad (1.32)$$

où le premier terme de cette dernière équation représente l'action de Maxwell. En terme des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$ , le premier invariant de Lorentz peut s'écrire comme

$$\frac{1}{2} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \mathbf{B}^2 - \mathbf{E}^2. \quad (1.33)$$

Ensuite, le champ électrique n'est pas affecté par l'opérateur  $\mathcal{T}$  car c'est un vecteur ( $\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{E}$ ), tandis que le champ magnétique change de signe sous l'application de l'opérateur  $\mathcal{T}$  car c'est un pseudo-vecteur ( $\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$ ). Comme l'action de Maxwell n'implique que le carré de ces deux champs, alors nous pouvons conclure que le premier terme de  $S_{\text{tot}}$  préserve la symétrie d'inversion du temps. Cependant, l'action  $S_\theta$  brise cette symétrie, car  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ . Ainsi, l'invariance du système sous  $\mathcal{T}$  implique que

$$\mathcal{T}Z\mathcal{T}^{-1} = \int \mathcal{D}[A]e^{iS_{\text{max}}/\hbar - in\theta} = Z = \int \mathcal{D}[A]e^{iS_{\text{max}}/\hbar + in\theta}, \quad (1.34)$$

et donc l'invariant  $\theta$  doit vérifier

$$e^{in\theta} = e^{-in\theta}. \quad (1.35)$$

Une solution triviale à cette équation est  $\theta = 0$ . Dans ce cas là, l'action topologique est nulle et donc aucun comportement topologique n'est observé. Ainsi,  $\theta = 0$  est associé à la phase triviale des isolants. Il existe cependant une autre solution à l'équation 1.35. Comme  $\theta$  est défini modulo  $2\pi$ , alors  $\theta = \pi$  est aussi solution de l'équation. Cette valeur de  $\theta$  est associée à la phase topologique des isolants. De façon générale, il est possible d'écrire  $\theta = (2n + 1)\pi$ . Le même raisonnement peut être appliqué pour montrer que  $\theta$  est aussi quantifié pour être égale à 0 ou  $\pi$  lorsque l'inversion de l'espace  $\mathcal{P}$  est préservée par l'isolant, même lorsque ce dernier brise  $\mathcal{T}$ <sup>6</sup>. Dans ce cas là, il est possible de relier  $\theta$  à l'invariant fort de Fu-Kane, présenté à la section 1.1.3, tel que  $\theta/\pi = \nu_0$ . De plus, les systèmes qui préservent une symétrie d'invariance du temps effective, i.e., les systèmes qui brisent  $\mathcal{T}$  tout en préservant la combinaison de  $\mathcal{T}$  et d'une symétrie de translation ou de rotation, peuvent aussi avoir un  $\theta$  qui est quantifié. Par contre, lorsqu'un système brise les symétries  $\mathcal{P}$ ,  $\mathcal{T}$  et la symétrie d'invariance du temps effective, tout en préservant le produit  $\mathcal{PT}$ , alors

$$(\mathcal{PT})^{-1} Z (\mathcal{PT}) = \int \mathcal{D}[A]e^{iS_{\text{max}}/\hbar + in\theta} = Z. \quad (1.36)$$

Cette équation montre qu'il n'existe aucune contrainte additionnelle venant des symétries sur  $\theta$ . Il est donc possible de conclure que pour ces systèmes,  $\theta$  n'est pas quantifié et peut prendre n'importe laquelle des valeurs comprises entre 0 et  $2\pi$  (en effet la règle d'invariance modulo  $2\pi$  reste tout de même valide).

### 1.2.3 Invariant $\theta$ et effet Hall anormal semi-quantifié

Maintenant que nous comprenons l'origine de l'invariant  $\theta$ , nous pouvons passer aux manifestations physiques de cette quantité intrinsèque des isolants. L'ajout du terme  $S_\theta$  au sein du lagrangien électromagnétique des isolants 3-D a pour conséquence de modifier les équations de Maxwell, donnant ainsi lieu à des effets exotiques dans ces matériaux.

Comme indiqué plus haut, un isolant associé à  $\theta = 0$  est un isolant trivial. Donc aucun nouvel effet ne peut être observé dans ces matériaux. Nous considérons ainsi dans cette section les isolants invariants sous  $\mathcal{T}$  (ou  $\mathcal{P}$ ) et se trouvant dans la phase topologique,

6. En rappelant que  $\mathbf{B}$  n'est pas affecté par  $\mathcal{P}$  alors que  $\mathbf{E}$  change de signe.

i.e.,  $\theta = \pi$ . À partir de l'action totale 1.32 il est possible de déterminer les équations de Maxwell associées à l'isolant en utilisant le principe de moindre action. Ainsi, en substituant  $A_\nu \rightarrow A_\nu + \delta A_\nu$  où  $\delta A_\nu$  est un élément de surface et en gardant les termes linéaires en ce dernier :

$$\begin{aligned}\delta (F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}) &= 4F^{\mu\nu} \partial_\mu \delta A_\nu \\ \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \delta (F_{\alpha\beta} F_{\mu\nu}) &= 4\varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \partial_\mu \delta A_\nu,\end{aligned}\quad (1.37)$$

où les propriétés antisymétriques des tenseurs de Faraday et de Levi-Civita ont été utilisées pour arriver à ces résultats, il est possible de déterminer la correction à l'action totale

$$\begin{aligned}\delta S_{\text{tot}} &= -\frac{1}{4\pi} \int d^4x F^{\mu\nu} \partial_\mu \delta A_\nu - \frac{e^2\theta}{8\pi^2\hbar} \int d^4x \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \partial_\mu \delta A_\nu \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d^4x \delta A_\nu \left[ \partial_\mu F^{\mu\nu} + \frac{e^2\theta}{2\pi\hbar} \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu F_{\alpha\beta} \right].\end{aligned}\quad (1.38)$$

Ici, nous avons intégré par partie pour passer de la ligne une à la ligne deux. De plus, le théorème de la divergence généralisé à quatre dimensions a été utilisé :

$$\int d^4x \partial_\mu (F^{\mu\nu} \delta A_\nu) = \oint da_\mu F^{\mu\nu} \delta A_\nu. \quad (1.39)$$

Toutefois, cette intégrale est nulle et ne contribue donc pas dans  $\delta S_{\text{tot}}$ . En effet, le membre de droite de l'équation 1.39 représente une intégrale sur une l'entièreté de l'espace temps. Or, d'après le principe de moindre action, les variations  $\delta A_\nu$  doivent s'annuler au niveau des frontières, induisant que l'intégrale 1.39 s'annule. Finalement, comme  $\delta S_{\text{tot}}$  doit s'annuler pour toute variation  $\delta A_\nu$ , alors nous pouvons déduire que (en unités cgs)

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + \frac{e^2\theta}{2\pi\hbar} \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu F_{\alpha\beta} = 0. \quad (1.40)$$

Cette équation covariante représente les équations de Gauss pour le champ électrique et la loi d'Ampère dans l'isolant, modifiés par l'action 1.27. La loi Gauss pour le champ magnétique et la loi de Faraday peuvent s'écrire sous forme covariante de la façon suivante :

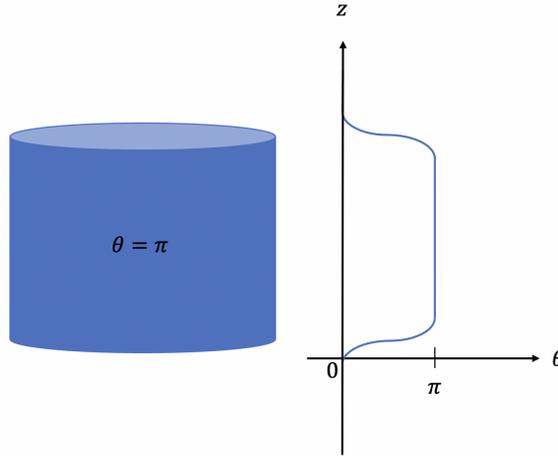
$$\frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu F_{\alpha\beta} = 0. \quad (1.41)$$

Cette équation porte le nom d'identité de Bianchi [37], et est reliée au fait que le tenseur  $F_{\mu\nu}$  est antisymétrique. Elle ne découle pas de la minimisation de l'action 1.32 car les lois de Faraday et de Gauss sont toutes les deux des équations empiriques. En réalité, pour pouvoir trouver l'équation 1.41 à partir d'une action, il faut écrire l'équivalent de l'action  $S_{\text{max}}$  pour des champs électriques et magnétiques induits par des monopoles magnétiques. De plus, l'équation 1.41 montre que l'invariant  $\theta$  n'a aucun impact sur l'équation de Faraday et de Gauss pour le champ magnétique. Il existe néanmoins dans la littérature des travaux qui montrent que toutes les équations devraient être modifiées par le champ  $\theta$  [36, 38]. Cependant, ces travaux semblent, à priori, violer le fait que le système doit être invariant lorsque  $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$ . De ce fait, nous ne considérons pas dans ce mémoire que l'identité

de Bianchi soit modifiée par le champ  $\theta$ . Par conséquent, l'équation 1.41 implique que le deuxième terme de l'équation 1.40 s'annule, donnant ainsi l'équation de Maxwell covariante classique  $\partial_\mu F^{\mu\nu} = 0$ . Une naïve conclusion consisterait à dire qu'aucun effet associé à  $\theta$  ne peut être observé, vu que la contribution de  $\theta$  aux équations de Maxwell s'annule. Ceci est faux. En effet, jusque là nous avons supposé que  $\theta = \pi$  partout dans l'espace. Cette supposition est erronée car si le matériau topologique associé à  $\theta = \pi$  est entouré d'un matériau adiabatiquement relié au vide (ou entouré du vide lui-même), donc associé à  $\theta = 0$ , alors l'invariant  $\theta$  dépendra de l'espace au niveau des surfaces de l'isolant topologique (voir figure 1.7). Dans ce cas, l'équation 1.27 devient

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + \frac{e^2}{2\pi\hbar} \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu (\theta(\mathbf{x}) F_{\alpha\beta}) = 0 \quad (1.42)$$

au niveau des surfaces. Donc, il est possible de conclure que lorsque  $\theta$  est constant dans un matériau, ses effets sont observables uniquement au niveau des surfaces du matériau.



**FIGURE 1.7** Isolant topologique ( $\theta = \pi$ ) entouré du vide ( $\theta = 0$ ). Ce schéma montre qu'au niveau des surfaces de l'isolant topologique, le gradient de  $\theta$  devient non nul.

Cette conclusion peut être mieux comprise en considérant l'action 1.28. Cette action peut être réécrite, lorsque  $\theta$  est constant, comme

$$S_\theta = \frac{e^2\theta}{8\pi^2\hbar} \int d^4x \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu (A_\nu \partial_\alpha A_\beta), \quad (1.43)$$

qui est une dérivée totale. En posant  $\mu = i = 1, 2, 3$  et en remarquant que  $\varepsilon^{i\nu\alpha\beta} = \varepsilon^{\nu\alpha\beta}$ , cette équation devient

$$\begin{aligned} S_\theta &= \frac{e^2\theta}{8\pi^2\hbar} \int d^4x \varepsilon^{i\nu\alpha\beta} \partial_i (A_\nu \partial_\alpha A_\beta) \\ &= \frac{e^2\theta}{8\pi^2\hbar} \int d^2x dt \varepsilon^{\nu\alpha\beta} A_\nu \partial_\alpha A_\beta, \end{aligned} \quad (1.44)$$

qui est une action représentant une surface. En fait, cette action est une action de Chern-Simons 2-D [39]. De ce fait, lorsque  $\theta$  est constant,  $S_\theta$  est une action de surface. En supposant

que la surface séparant l'isolant topologique du vide se trouve à  $x' = (x', t')$ , le courant de surface peut être calculé tel que

$$\begin{aligned} J_i(x') &= \frac{\delta S_\theta}{\delta A^i(x')} = \frac{e^2\theta}{8\pi^2\hbar} \varepsilon^{\nu\alpha\beta} \int d^2x dt \left[ \frac{\delta A_\nu(x)}{\delta A^i(x')} \partial_\alpha A_\beta - \frac{\delta A_\beta(x)}{\delta A^i(x')} \partial_\alpha A_\nu \right] \\ &= -\frac{e^2\theta}{4\pi^2\hbar} \varepsilon_{ij} E^j(x') = \sigma_{ij} E^j(x'), \end{aligned} \quad (1.45)$$

où la relation  $\delta A_\alpha(x)/\delta A^\beta(x') = \delta_{\alpha\beta}\delta^3(x-x')$  a été utilisée. Le courant de surface est donc un courant de Hall. En rappelant que  $\theta = (2n+1)\pi$  avec  $n \in \mathbb{Z}$ , la conductivité pour  $i = y$  et  $j = x$  est donnée par

$$\sigma_{yx} = \frac{e^2\theta}{4\pi^2\hbar} = \frac{e^2}{h} \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.46)$$

Cette conductivité possède la même forme que celle présentée à l'équation 1.21, à l'exception que cette fois ci la quantification n'est pas associée à un entier mais plutôt à un demi entier. Par conséquent, le courant de surface est associé à un effet Hall anormal semi-quantifié. Donc, l'équation 1.46 montre qu'un  $\theta$  constant mais non nul au sein d'un matériau produit un effet Hall semi-quantifié sur les surfaces du matériau.

En réalité, cet effet Hall est un exemple d'effet magnéto-électrique topologique. Le coefficient de couplage magnéto-électrique linéaire peut être écrit comme

$$\alpha_{ij} = \frac{\partial M_j^\theta}{\partial E_i} = \frac{\partial P_j^\theta}{\partial B_i} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}_\theta}{\partial E_i \partial B_j'} \quad (1.47)$$

où  $\mathbf{M}^\theta$  ( $\mathbf{P}^\theta$ ) est la magnétisation (polarisation électrique), et  $\mathcal{L}_\theta$  est le lagrangien associé à l'action 1.27. De ce fait ce coefficient est donné par

$$\alpha_{ij} = \frac{e^2\theta}{4\pi^2\hbar} \delta_{ij}. \quad (1.48)$$

Ainsi, l'invariant  $\theta$  crée une polarisation électrique induite par un champ magnétique et une magnétisation induite par un champ électrique. Cette dernière est la quantité responsable de l'existence d'un effet Hall anormal semi-quantifié dans les isolants associés à  $\theta = \pi$ . À moins que la brisure de  $\mathcal{P}$  et  $\mathcal{T}$  ne soit confinée à la surface de l'isolant, l'observation de  $\mathbf{M}^\theta$  et  $\mathbf{P}^\theta$  ne peut pas se faire simultanément dans des matériaux qui ne brisent pas toutes les symétries et qui sont associés à  $\theta = \pi$ . En effet, pour observer  $\mathbf{M}^\theta$  ( $\mathbf{P}^\theta$ ) il faut que le système brise  $\mathcal{T}$  ( $\mathcal{P}$ ), et pour que  $\theta$  soit constant, il faut que le système préserve  $\mathcal{P}$  ( $\mathcal{T}$ ) [40].

Ainsi, nous avons montré qu'un  $\theta$  constant peut induire des effets magnéto-électriques au niveau des surfaces d'un isolant préservant  $\mathcal{T}$  ou  $\mathcal{P}$ , i.e., un isolant associé à  $\theta = \pi$ . Toutefois, il existe des matériaux qui brisent les deux symétries d'inversion du temps et de l'espace, impliquant que le champ  $\theta$  dépende de l'espace et du temps dans le volume aussi.

### 1.2.4 Isolants topologiques magnétiques

Les isolants topologiques magnétiques sont un exemple de matériaux où il est possible d'avoir un invariant  $\theta$  dynamique. En effet, ces matériaux brisent à la fois  $\mathcal{T}$  et  $\mathcal{P}$  et préservent la combinaison  $\mathcal{PT}$ , ce qui implique que  $\theta$  n'est pas quantifié, tel que discuté plus haut. De plus, il a été démontré que les fluctuations du champ de Néel antiferromagnétiques  $\delta m_5$  peuvent se coupler aux photons comme

$$S_{\text{magnon-photon}} \sim \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \int d^4x \delta m_5(\mathbf{x}, t) \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}, \quad (1.49)$$

dans ces matériaux [41]. De ce fait, les fluctuations antiferromagnétiques induisent un terme topologique au sein de l'action de l'isolant. Ce terme topologique peut être associé à un champ dynamique  $\delta\theta_m$  tel que  $\delta\theta_m \sim \delta m_5$ . Or, la fonction  $\delta m_5$  dépend du temps et de l'espace dans tout le matériau, pas uniquement au surfaces. Ainsi, pour les matériaux pouvant abriter un terme similaire à l'action 1.49, les équations de Gauss pour le champ électrique et la loi d'Ampère sont données par

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + \frac{e^2}{2\pi\hbar} \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu (\delta\theta_m F_{\alpha\beta}) = 0, \quad (1.50)$$

et sont cette fois ci modifiées partout dans le matériau. Par conséquent, il est possible d'observer dans ces matériaux à la fois les effets de  $\mathbf{P}^\theta$  et  $\mathbf{M}^\theta$ . Les premiers matériaux à avoir été proposés pour abriter un champ dynamique  $\theta$  issu de fluctuations magnétiques sont en fait des isolants topologiques dopés magnétiquement  $\text{Bi}(\text{Fe})_2\text{Se}_3$  [41]. Par la suite d'autres travaux ont montré qu'un champ  $\theta$  dynamique peut être aussi obtenu dans des super-réseaux isolants topologiques magnétiques [42] et dans des isolants de Mott [43]. Cependant, uniquement les contributions magnétiques (magnons) associées à  $\theta$  ont été étudiées. Il est donc possible de se demander si les vibrations du réseau (phonons) peuvent aussi induire un champ  $\theta$  dynamique et, le cas échéant, comment ce champ topologique induit par les phonons peut affecter les effets topologiques des isolants 3-D.

## 1.3 Phonons

---

À l'équilibre, les cristaux sont constitués d'un arrangement périodique d'atomes qui interagissent entre eux avec des forces électriques. De façon générale, ces atomes oscillent constamment autour de leurs positions d'équilibres. Lorsqu'un atome se met à osciller, son mouvement va être transmis à ces voisins, qui vont donc se mettre à osciller aussi autour de leurs positions d'équilibres. Ensuite, ces atomes vont eux aussi affecter leurs propres voisins, faisant ainsi que tous les atomes du cristal se mettent à osciller. De ce fait, les vibrations du réseau d'atomes d'un cristal sont des vibrations collectives qui se propagent sous la forme d'une onde. Il est donc possible d'associer une fréquence et un vecteur d'onde aux vibrations du réseau. Le quantum associé à ces vibrations collectives est un Boson appelé *phonon*. Il est possible de définir une coordonnée  $u(\mathbf{x}, t)$  représentant la coordonnée de déplacement

normale d'un atome du crystal. En terme des modes propres de vibrations, il est possible d'écrire

$$\ddot{u}(\mathbf{q}, t) + \rho \dot{u}(\mathbf{q}, t) + q_0^2 u(\mathbf{q}, t) = 0, \quad (1.51)$$

où  $u(\mathbf{q}, t)$  est le mode propre de vibration, i.e., la transformée de Fourier spatiale de  $u(\mathbf{x}, t)$ ,  $\rho$  est un coefficient de friction et  $q_0$  est la fréquence du phonon qui peut être une fonction du vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  des phonons. Bien entendu, il existe autant d'équations associées à la coordonnée normale que d'atomes dans le crystal. L'équation 1.51 est en fait l'équation d'un oscillateur harmonique amorti. Cependant, dans ce mémoire, nous considérons que  $\rho = 0$ , impliquant que l'équation 1.51 est l'équation d'un oscillateur harmonique pour  $u$ , donnant une onde plane comme solution, i.e.,  $u(\mathbf{x}, t) \sim e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x} - iq_0 t}$ .

L'équation 1.51 est en générale présentée dans n'importe quel livre traitant de la matière condensée [44]. Toutefois, cette équation ne présente pas toute la phénoménologie pouvant être attribuée aux phonons. En effet les vibrations du réseau peuvent induire l'existence d'un moment dipolaire électrique associé à la cellule unité. De ce fait, la polarisation totale peut s'écrire comme  $\mathbf{P} = \mathbf{P}_0 + \mathbf{P}_{\text{ph}}$ , où  $\mathbf{P}_{\text{ph}}$  représente la contribution à la polarisation induite par les phonons et  $\mathbf{P}_0$  regroupe toutes les autres contributions. Ce comportement n'est pas présent à l'équation 1.51. De ce fait, cette équation doit être modifiée de façon à inclure cet effet. L'équation est donc donnée par

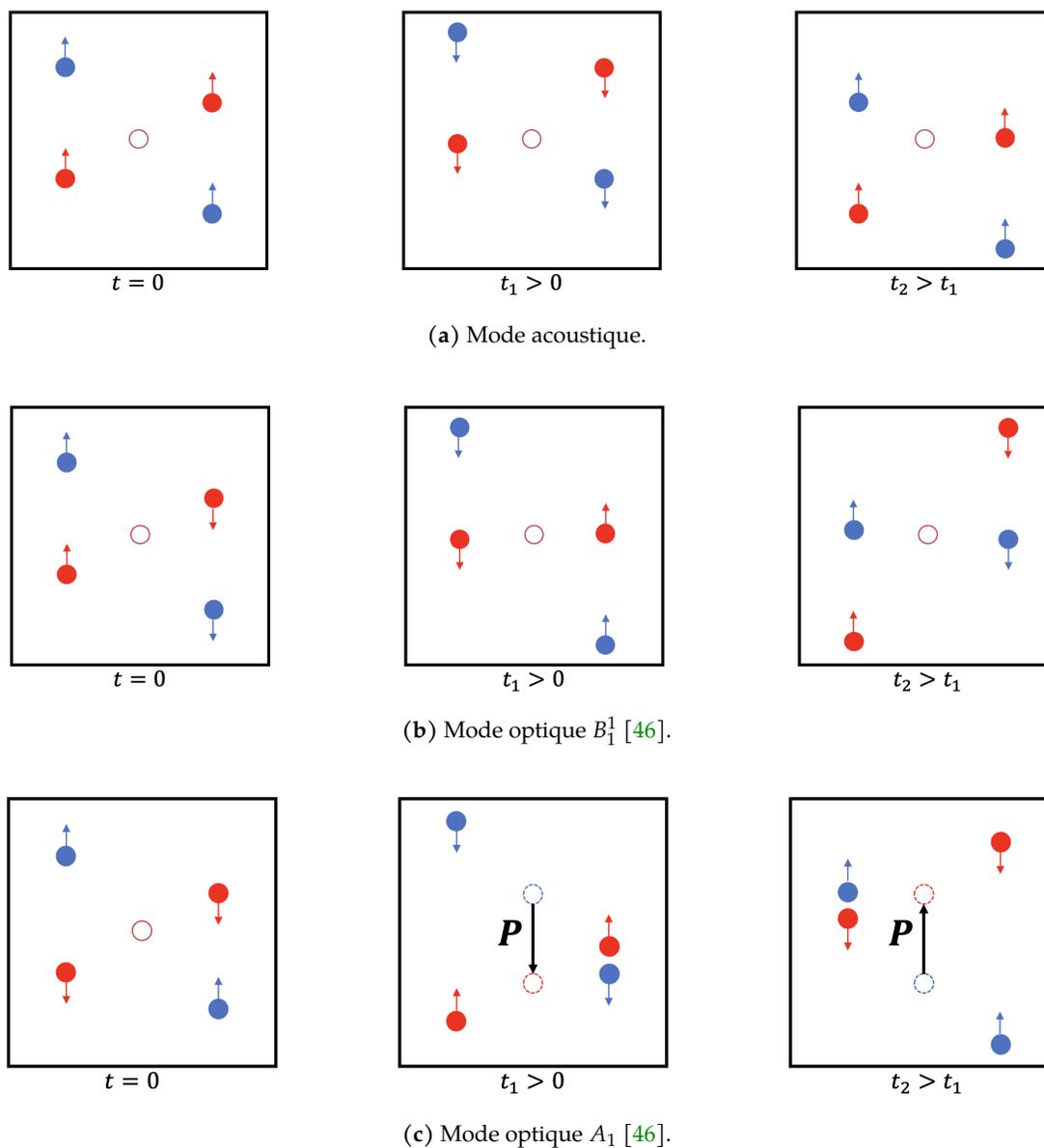
$$\ddot{u}(\mathbf{q}, t) + q_0^2 u(\mathbf{q}, t) = \mathbf{Q}(\mathbf{q}, t) \cdot \mathbf{E}, \quad (1.52)$$

où  $\mathbf{E}$  est le champ électrique total et

$$\mathbf{Q} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial u} \quad (1.53)$$

est appelée *charge effective des phonons* [45, 46, 47]. Ce nouveau terme ne peut être observé que si le mode de phonon considéré affecte le centre de masse des ions positifs et négatifs. Plus précisément, si le mode considéré est un mode de phonon acoustique avec un vecteur d'onde nul, alors tous les ions de la cellule unité oscillent en phase, donc le centre de masses des ions positifs et négatifs n'est pas touché par ce mode, et donc  $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$  (voir figure 1.8a). Cependant, si nous considérons un mode optique, alors dans ce cas les ions de la cellule unité oscillent en anti-phase, le centre de masse des ions positifs et négatifs peut alors être affecté impliquant que  $\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$ . Il existe tout de même des modes optiques pour lesquels  $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$  (voir les figures 1.8b et 1.8c).

Le terme de droite de l'équation 1.52 est à l'origine de certains effets physiques. En effet, le champ électrique présent dans cette équation est le champ électrique total, qui peut s'écrire comme  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{ext}} + \mathbf{E}_{\text{int}}$ . Ici,  $\mathbf{E}_{\text{ext}}$  décrit un champ électrique extérieur et, lorsqu'il est non nul, peut jouer un rôle important au niveau de l'absorption optique de l'isolant.  $\mathbf{E}_{\text{int}}$  quant à lui représente le champ électrique interne dû aux vibrations des atomes, et peut être à l'origine d'un effet important : la séparation LO-TO (longitudinale optique - transverse optique). Dans les sections suivantes, nous allons détailler ces deux effets physiques. De plus, nous montrerons qu'il est possible de penser à avoir une charge effective des phonons induite par l'action topologique 1.27.



**FIGURE 1.8** Impact des modes de phonons (a) acoustiques et (b)-(c) optiques sur une cellule unitaire possédant deux ions positifs (bleu) et deux ions négatifs (rouge). Le centre de masses des ions positifs et négatifs est représenté en pointillés. La charge effective des phonons est nulle pour les figures (a) et (b), car les centres de masses ne sont pas affectés par le mode de vibration, tandis que la charge effective des phonons est non nulle pour la figure (c).

### 1.3.1 Absorption IR

Le terme de droite de l'équation 1.52 peut être utilisé pour classifier les phonons selon leur réponse à un champ électromagnétique externe. En effet, en considérant le lien entre la charge effective et la polarisation de la cellule unité induite par les phonons  $\mathbf{P}_{\text{ph}}$ , il est possible d'écrire  $u\mathbf{E} \cdot \mathbf{Q} \sim \mathbf{E} \cdot \mathbf{P}_{\text{ph}}$ , ce qui correspond (à un signe près) à l'énergie de la polarisation  $\mathbf{P}_{\text{ph}}$  lorsqu'elle se trouve dans un champ électrique  $\mathbf{E}$ . Cependant, le champ  $\mathbf{E}$  est le champ électrique total. En supposant que  $\mathbf{E}_{\text{ext}} = \mathbf{E}_{\text{em}}$  soit le champ électrique d'un photon incident sur le matériau, il est alors possible d'avoir un terme dans l'équation du mouvement des phonons de la forme  $\mathbf{E}_{\text{em}} \cdot \mathbf{P}_{\text{ph}}$ . Ce terme permet de représenter le couplage phonon-photon. De plus, ce terme permet de savoir si un mode de phonon est apte à absorber le photon incident. Effectivement, si  $\mathbf{E}_{\text{em}} \cdot \mathbf{P}_{\text{ph}} = 0$ , alors le mode de phonon considéré n'interagit pas directement avec le photon, et donc le mode ne peut pas absorber le photon incident. Il est donc possible de conclure que tout mode de phonon ayant une charge effective nulle ou perpendiculaire au champ électrique d'un photon incident sur le matériau ne pourra pas absorber ce dernier. Dans ce cas là, le mode de vibration est *optiquement inactif*. Ensuite, si  $\mathbf{E}_{\text{em}} \cdot \mathbf{P}_{\text{ph}} \neq 0$ , alors le mode de phonon en question peut absorber le photon incident. De ce fait, les modes de phonons ayant une charge effective non nulle et qui n'est pas perpendiculaire au champ électrique externe peuvent absorber le photon incident. Ce mode de vibration est alors qualifié d'*optiquement actif*.

### 1.3.2 Séparation LO-TO

Traisons maintenant du cas où  $\mathbf{E}_{\text{ext}} = \mathbf{0}$  et  $\mathbf{E}_{\text{int}}$  est non nul. Le champ électrique interne peut être relié à la polarisation induite par les phonons. En effet, de façon générale, le champ électrique interne est parallèle au vecteur d'onde des phonons car il est supposé que  $\mathbf{q} \times \mathbf{E}_{\text{int}} = \mathbf{0}$ . Cette supposition est justifiée par le fait que le champ magnétique créé par les phonons varie très peu dans le temps, impliquant donc que le membre de droite de la loi de Faraday soit nul, i.e.,  $\partial \mathbf{B}_{\text{int}} / \partial t \sim 0$ . De ce fait,  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_{\text{int}} = qE_{\text{int}}$ . Ensuite, la polarisation peut être décomposée comme  $\mathbf{P}_{\text{ph}} = \hat{q}P_{\text{long}} + \mathbf{P}_{\text{trans}}$ , où  $P_{\text{long}}$  est la composante parallèle au vecteur d'onde des phonons et  $\mathbf{P}_{\text{trans}}$  est la composante transverse. Ainsi, il est possible de déduire que  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{P}_{\text{ph}} = qP_{\text{long}}$ . La relation entre le champ électrique interne et la polarisation permet ensuite d'écrire que  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_{\text{int}} \sim -\mathbf{q} \cdot \mathbf{P}_{\text{ph}} / \epsilon$ , ce qui implique  $E_{\text{int}} \sim -P_{\text{ph}} / \epsilon$ . Ici,  $\epsilon$  représente la permittivité du matériau. Or, nous savons que la polarisation peut être reliée à la charge effective  $\mathbf{P}_{\text{ph}} \propto u\mathbf{Q}$ . Par conséquent, il est possible d'écrire  $E_{\text{int}} \propto -uQ / \epsilon$ . En insérant ce résultat dans l'équation 1.52, nous obtenons

$$\ddot{u} + q_0^2 u = -\frac{Q^2}{\epsilon} u. \quad (1.54)$$

Cette équation nous montre que la fréquence des phonons est modifiée par la charge effective des phonons. Plus précisément, cette équation montre que la fréquence (donc l'énergie) des modes de phonons longitudinaux est supérieure à la fréquence des modes transverses [46, 47]. En effet, les modes de phonons transversaux possèdent une polarisation

$\mathbf{P}_{\text{ph}} \perp \mathbf{q}$  impliquant qu'ils ne produisent pas de champ électrique. De ce fait, le membre de droite de l'équation 1.52 est absent pour les modes transversaux. Ce phénomène relié exclusivement à la charge effective des phonons porte le nom de *séparation longitudinale optique transverse optique* (LO-TO).

### 1.3.3 Charge effective dans les isolants topologiques 3-D

L'équation 1.53 peut être réécrite de façon à faire introduire le lagrangien du système :

$$\mathbf{Q} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial u} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial u \partial \mathbf{E}}. \quad (1.55)$$

Dans le cas des isolants topologiques, le lagrangien est celui associé à 1.32. Il est donc possible de voir qu'il existe deux termes distincts à la charge effective :

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^{(0)} + \mathbf{Q}_\theta, \quad (1.56)$$

où

$$\mathbf{Q}_\theta = \frac{\partial^2 \mathcal{L}_\theta}{\partial u \partial \mathbf{E}}. \quad (1.57)$$

Ce résultat montre que dans les isolants topologiques 3-D, il est possible d'avoir une charge effective des phonons induite par le terme topologique. D'après l'action 1.27, cette charge effective non triviale est donnée par

$$\mathbf{Q}_\theta = \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar} \mathbf{B} \frac{\partial \theta}{\partial u} = \frac{\partial \mathbf{P}^\theta}{\partial u}, \quad (1.58)$$

où  $\mathbf{P}^\theta$  est la polarisation reliée au tenseur  $\alpha_{ij}$  présenté à l'équation 1.48. Donc cette charge effective est reliée à l'effet magnéto-électrique topologique. L'équation 1.58 permet de voir que  $\mathbf{Q}_\theta$  est induite par un champ magnétique externe  $\mathbf{B}$  et est non nulle si et seulement si l'invariant topologique  $\theta$  dépend de la coordonnée des phonons  $u$ . Il est donc naturel de se demander si  $\theta$  peut dépendre de  $u$ .

Lorsque les phonons sont considérés dans les isolants topologiques, la masse de Dirac devient une quantité dynamique :

$$m(\mathbf{x}, t) = m + [g_+(\mathbf{x}) - g_-(\mathbf{x})] u(\mathbf{x}, t), \quad (1.59)$$

où  $g_+$  ( $g_-$ ) est le potentiel de déformation de la bande de conduction (valence) et qui est créé par les phonons et  $m$  est la masse de Dirac non perturbée. Le deuxième terme du membre de droite de l'équation 1.59 représente la masse de Dirac induite par les phonons. Ce terme est permis car il ne brise pas de symétrie du système, et les isolants ne possèdent pas une symétrie électron-trou (faisant en sorte qu'il est possible d'avoir  $g_+ \neq g_-$ ). Or, tel que mentionné à la section 1.1.3, la masse de Dirac peut être reliée au gap de l'isolant 3D. De ce fait, l'équation 1.59 montre qu'en présence des phonons, le gap du matériau devient dynamique. Ceci peut être à l'origine d'une transition de phase induite par les phonons. En effet, si un matériau vérifie la condition  $2|m| > u|g_+ - g_-|$ , alors les phonons

ne pourront pas affecter les propriétés topologiques du matériau car le deuxième terme du membre de droite de l'équation 1.59 ne pourra pas changer le signe de la masse de Dirac. Cependant, si  $2|m| < u|g_+ - g_-|$ , alors les phonons pourront changer le signe de la masse de Dirac, i.e., les phonons pourront induire une transition de phase topologique. Comme la valeur de l'invariant  $\theta$  change à travers une transition de phase topologique, il est alors possible de conclure que  $\theta \propto u$  à travers une transition de phase topologique. Ainsi, il devrait être possible d'observer un  $\mathbf{Q}_\theta$  non nulle proche d'une transition de phase topologique. Historiquement, l'existence théorique [48, 49] et expérimentale [50] de  $\mathbf{Q}_\theta$  a été faite dans les semi-métaux de Weyl, i.e., des matériaux de Dirac ayant une masse de Dirac nulle. Il est donc possible de se demander si une telle quantité, ainsi que les effets qui lui sont associés, existent dans les isolants 3-D.

## Chapitre 2

# Quasi-particule axionique issue des fluctuations des phonons dans les isolants

Jusque là, nous avons discuté de l'existence des quasi-particules axioniques issues des fluctuations du paramètre d'ordre magnétique au sein des isolants. En effet, nous avons montré à la section 1.2.4 que des perturbations du champ de Néel peuvent induire l'apparition d'un terme axionique (proportionnel à  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ ) dans l'action effective du système. De plus, nous avons vu à la section 1.3.3 que les vibrations du réseau peuvent, à priori, affecter les propriétés topologiques du système lorsqu'elles induisent une transition de phase topologique. Il est donc naturel de se demander, dans un premier temps, si les vibrations du réseau peuvent induire un champ dynamique de type axion, i.e.  $\delta\theta(\mathbf{x}, t) \propto u(\mathbf{x}, t)$ , et dans un deuxième temps, comment les propriétés des phonons sont modifiées par ce champ induit. Nous nous proposons de répondre à ces questions dans ce chapitre. Pour ce faire, nous commencerons par écrire la fonction de partition du système en utilisant des intégrales de chemin dans un espace Euclidien. Par la suite, nous intégrerons les électrons et montrerons que les fluctuations de la masse de Dirac induites par les phonons se comportent de la même façon qu'un champ axionique dynamique. Enfin, nous présenterons les effets de ce champ sur la charge effective des phonons dans différents régimes.

### 2.1 $S_\theta$ induite par les phonons au sein de l'action effective des isolants

---

Pour la première partie de ce chapitre, nous commencerons par montrer qu'il existe un terme au sein de l'action des isolants 3D qui est à la fois proportionnel à la coordonnée des phonons et à  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ . Ce terme est en fait le terme qui permet de déduire que les phonons peuvent se comporter comme des axions dans les isolants. Nous montrerons par la suite que ce terme non trivial peut avoir une contribution non nulle à la charge effective.

### 2.1.1 Modèle

Pour écrire la fonction de partition  $Z$  de notre système, il nous suffit d'écrire l'action  $S$  du système et d'utiliser le lien entre  $Z$  et  $S$

$$Z = \int \mathcal{D}[\psi, \bar{\psi}, A, n, u] e^{-S}. \quad (2.1)$$

Les références [51, 52] permettent d'expliquer le lien entre la fonction de partition et l'action du système. Dans cette équation,  $\psi$  et  $\bar{\psi} = \gamma^0 \psi^\dagger$  (voir plus bas pour la définition de  $\gamma^0$ ) représentent les champs fermioniques de Grassmann,  $n$  est le champ associé aux fluctuations magnétiques,  $u$  est le champ des phonons et la notation  $A = (\mathbf{A}, A_0)$  est utilisée, où  $\mathbf{A}$  est le potentiel vecteur et  $A_0$  le potentiel électrique. De plus, l'équation 2.1 est écrite dans un espace Euclidien.

L'action est donnée par

$$S = S_{\text{ph}}^{(0)}[u] + S_{\text{m}}^{(0)}[n] + S_{\text{em}}^{(0)}[A] + S_e[\psi, \bar{\psi}] + S_{\text{int}}[\psi, \bar{\psi}, A, u, n] \quad (2.2)$$

où les trois premiers termes représentent les termes cinétiques des phonons [45], des fluctuations magnétiques [41, 42, 40] et des photons :

$$S_{\text{ph}}^{(0)}[u] = \int_0^\beta d\tau \int d^3x (-\partial_\mu u \partial^\mu u + v^2 u^2), \quad (2.3)$$

$$S_{\text{m}}^{(0)}[n] = \int_0^\beta d\tau \int d^3x (\partial_\mu n \partial^\mu n - m^2 n^2), \quad (2.4)$$

$$S_{\text{em}}^{(0)}[A] = -\frac{1}{4} \int_0^\beta d\tau \int d^3x F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left( \epsilon \mathbf{E}^2 - \frac{\mathbf{B}^2}{\mu_0} \right). \quad (2.5)$$

L'équation 2.5 a déjà été présentée à la section 1.2.2. Les actions et 2.4 et 2.3 possèdent la même forme que l'action de Klein-Gordon. De ce fait, les phonons (magnons) obéissent à une équation de Klein-Gordon, avec  $\omega$  et  $\mathbf{q}$  comme paramètres représentant la fréquence et le vecteur d'onde des phonons (magnons), respectivement. De plus, conformément à la discussion faite à la section 1.3, uniquement les modes optiques permettent d'avoir une charge effective non nulle. Or, dans ce mémoire, nous considérons uniquement aux phonons ayant une grande longueur d'onde, i.e.,  $\omega \gg v|\mathbf{q}|$ , où  $v$  représente la vitesse de Fermi et  $|\mathbf{q}| = (q_x^2 + q_y^2 + q_z^2)^{1/2}$ . Dans cette approximation, l'équation 2.3 devient

$$S_{\text{ph}}^{(0)}[u] \approx \frac{M}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^3x (-(\partial_\tau u)^2 + v u^2). \quad (2.6)$$

Il est ainsi possible de voir qu'en revenant à l'espace de Minkowski, associé au temps réel  $t$ , l'action  $S_{\text{ph}}^{(0)}[u]$  représente l'action d'un oscillateur harmonique, et donc les phonons se comportent comme des oscillateurs harmoniques qui oscillent à une fréquence  $\nu$ .

Ensuite,  $S_e$  représente l'action des fermions libres, qui n'est autre qu'une action de Dirac

$$S_e[\psi, \bar{\psi}] = \int_0^\beta d\tau \int d^3x \psi^\dagger (\partial_\tau + h_0) \psi, \quad (2.7)$$

où  $h_0$  est un hamiltonien de Dirac donné par

$$h_0 = -i\tau^z \sigma \cdot \partial + m\tau^x + m_5\tau^y, \quad (2.8)$$

où la vitesse de Fermi  $v = 1$ . Dans cette dernière équation,  $\sigma^i$  et  $\tau^i$  représentent les matrices de Pauli associées à l'espace des spins et des orbitales, respectivement,  $m$  est la masse de Dirac et  $m_5$  est la masse axiale. Cette dernière brise la parité  $\mathcal{P}$  et l'inversion du temps  $\mathcal{T}$  au sein du volume du matériau. En effet, en terme des matrices de Pauli, ces deux symétries peuvent s'écrire comme  $\mathcal{P} = \tau^x$  et  $\mathcal{T} = \sigma^y \mathcal{K}$  où  $\mathcal{K}$  représente la conjugaison complexe [19]. En utilisant  $\mathbf{k} = -i\partial$  où  $\mathbf{k}$  est le vecteur d'onde des fermions, il est aisé de voir que

$$\mathcal{P}h_0(\mathbf{k})\mathcal{P}^{-1} = h_0(-\mathbf{k}) \quad (2.9)$$

$$\mathcal{T}h_0(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1} = h_0(-\mathbf{k}) \quad (2.10)$$

lorsque  $m_5 = 0$ , ce qui montre que le système préserve  $\mathcal{P}$  et  $\mathcal{T}$  dans ce cas. Pour une masse axiale non nulle, les deux symétries sont brisées individuellement par le terme proportionnel à  $m_5$ , mais la combinaison  $\mathcal{PT}$  est préservée

$$(\mathcal{PT})h_0(\mathbf{k})(\mathcal{PT})^{-1} = h_0(-\mathbf{k}). \quad (2.11)$$

L'hamiltonien 2.8 représente l'hamiltonien d'un isolant de Dirac avec un gap  $\Delta = 2(m^2 + m_5^2)^{1/2}$ . Effectivement, les énergies propres de l'hamiltonien sont données par

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 + m^2 + m_5^2}, \quad (2.12)$$

et sont chacune doublement dégénérées. Ce spectre d'énergie représente bien un cône de Dirac avec un gap  $\Delta$  à  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ . Les calculs ont été faits dans la limite où le potentiel chimique est nul  $\mu = 0$ . De plus, pour faciliter le calcul, l'action des fermions libres est réécrite de la façon suivante :

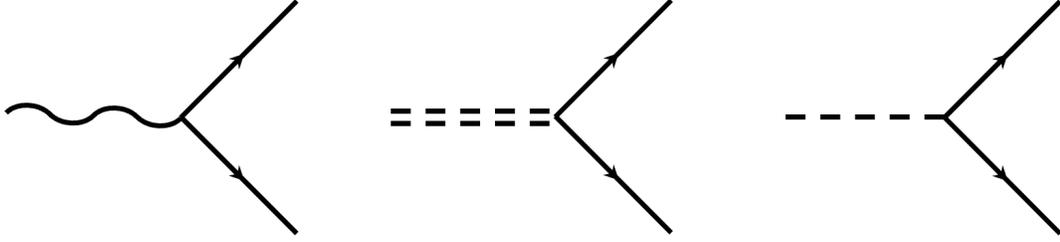
$$S_e[\psi, \bar{\psi}] = \int_0^{\beta} d\tau \int d^3x \bar{\psi} (-i\partial + m + im_5\gamma^5) \psi, \quad (2.13)$$

où la notation de Feynman  $\partial = \gamma^\mu \partial_\mu = \boldsymbol{\gamma} \cdot \partial + \gamma^4 \partial_4$  est utilisée avec  $\gamma^\mu = (\boldsymbol{\gamma}, \gamma^4)^T = (-i\tau^y \sigma, i\tau^x)^T$  et  $\partial_4 = \partial_\tau$ . Cette réécriture a l'avantage de faire apparaître les matrices de Dirac. Dans un espace Euclidien, ces matrices sont toutes anti-hermitiennes  $\gamma^\mu = -(\gamma^\mu)^\dagger$ . De plus, elles vérifient la relation d'anti-commutation  $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} = -2\delta_{\mu\nu}$ , et les identités suivantes

$$\begin{aligned} \text{tr}(\# \text{ impair de } \gamma^\mu) &= \text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^5) = \text{tr}(\gamma^5 \times \# \text{ impair de } \gamma^\mu) = 0, \\ \text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma) &= 4(\delta^{\mu\nu} \delta^{\rho\sigma} - \delta^{\mu\rho} \delta^{\nu\sigma} + \delta^{\mu\sigma} \delta^{\nu\rho}), \\ \text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma \gamma^5) &= -4\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}, \\ \text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu) &= -4\delta_{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

où nous avons utilisé  $g^{\mu\nu} = -\delta_{\mu\nu}$ . Ces identités nous seront utiles plus tard lors du calcul des traces. La cinquième matrice, souvent appelée matrice chirale,  $\gamma^5 = \gamma^4 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 = \tau^z$  anti-commute avec toutes les autres matrices de Dirac  $\{\gamma^\mu, \gamma^5\} = 0$  [53]. En fonction des matrices de Dirac, l'hamiltonien 2.8 s'écrit dans l'espace de Fourier comme

$$h_0(\mathbf{k}) = -i\gamma^4 (\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{k} + m + im_5\gamma^5). \quad (2.15)$$



**FIGURE 2.1** Différents vertices décrivant chacun des termes de  $S_{\text{int}}$ . Le vertex de gauche représente l'interaction électrons-photon, celui du milieu l'interaction électrons-phonon et le dernier l'interaction électrons-magnon.

Enfin, le dernier terme de l'équation 2.2 est donné par

$$S_{\text{int}}[\psi, \bar{\psi}, A, u, n] = \int_0^\beta d\tau \int d^3x \bar{\psi} (-\mathcal{A} + \delta m(u) + i\delta m_5(n)\gamma^5) \psi, \quad (2.16)$$

où  $\delta m$  représente la correction de la masse de Dirac induite par les phonons, i.e.  $\delta m \propto u$ , et  $\delta m_5$  représente la correction de la masse axiale induite par les fluctuations magnétiques, i.e.  $\delta m_5 \propto n$ . Ce dernier terme contient toutes les interactions considérées dans ce travail. Le premier terme de l'action 2.16 est obtenu par couplage minimale ( $\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu - iA_\mu$ ) et représente l'interaction entre les fermions et les photons. Les deux derniers termes décrivent les interactions fermions-phonons et fermions-magnons. Chacun de ces termes peut être interprété comme un vertex reliant deux fermions et un boson (photon, phonon ou magnon). La figure 2.1 montre ces différents vertices.

Comme mentionné en introduction de ce chapitre, notre objectif est d'intégrer les électrons pour obtenir une action effective pour les variables collectives (photons, phonons, magnons). Pour ce faire, uniquement les termes de l'action du système qui dépendent des champs fermioniques de grassmann seront nécessaires pour faire ce calcul. Ainsi, les seuls termes qui interviennent dans l'intégration sont  $S_e$  et  $S_{\text{int}}$ .

### 2.1.2 Intégrer les électrons

La fonction de partition peut être réécrite comme

$$Z = \int \mathcal{D}[A, n, u] Z_\psi e^{-S_{\text{ph}}^{(0)} - S_{\text{m}}^{(0)} - S_{\text{em}}^{(0)}} \quad (2.17)$$

de façon à faire ressortir la partie qui ne dépend que des champs de grassmann

$$Z_\psi = \int \mathcal{D}[\psi, \bar{\psi}] e^{-S_e - S_{\text{int}}}. \quad (2.18)$$

Cette équation contient l'ensemble des termes intervenant dans l'intégration des électrons. Premièrement, l'exposant de l'exponentielle peut être écrit de façon à introduire la fonction

de Green des fermions libres. En effet, les équations 2.13 et 2.16 permettent d'écrire

$$\begin{aligned} S_e + S_{\text{int}} &= \int_0^\beta d\tau \int d^3x \bar{\psi} (-i\cancel{\partial} + m + im_5\gamma^5 - \mathcal{A}(x) + \delta m(x) + i\delta m_5(x)\gamma^5) \psi \\ &= \int_0^\beta d\tau \int d^3x \bar{\psi} (G_0^{-1} + V(x)) \psi, \end{aligned} \quad (2.19)$$

où

$$G_0^{-1} = -i\cancel{\partial} + m + im_5\gamma^5 \quad (2.20)$$

est l'inverse de la fonction de Green des fermions libres, et

$$V(x) = -\mathcal{A}(x) + \delta m(x) + i\delta m_5(x)\gamma^5 \quad (2.21)$$

exprime la perturbation, avec  $x = (\mathbf{x}, \tau)$ . Par la suite, en suivant les manipulations habituelles [51, 52], il est possible d'intégrer les électrons :

$$\begin{aligned} Z_\psi &= \int \mathcal{D}[\psi, \bar{\psi}] \exp \left[ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \bar{\psi} (G_0^{-1} + V(x)) \psi \right] \\ &= \det \beta (G_0^{-1} + V(x)) \\ &= \exp \left[ \text{Tr} \ln \beta (G_0^{-1} + V(x)) \right], \end{aligned} \quad (2.22)$$

ce qui implique

$$Z = \int \mathcal{D}[A, n, u] e^{-S^{\text{eff}}}, \quad (2.23)$$

où

$$S^{\text{eff}}[A, u, n] = S_{\text{ph}}^{(0)}[u] + S_{\text{m}}^{(0)}[n] + S_{\text{em}}^{(0)}[A] - \text{Tr} \ln \left[ \beta (G_0^{-1} + V(x)) \right] \quad (2.24)$$

représente l'action effective du champ des phonons, du champ des fluctuations magnétiques et du champ électromagnétique. L'opérateur  $\text{Tr}$  représente la trace sur l'espace temps et l'espace des spins et pseudospins. À cause de cette trace, le dernier terme de l'équation 2.24, issu de l'intégration des fermions, ne peut être calculé exactement. Il faut donc faire un calcul perturbatif. Pour ce faire, le logarithme est réécrit en utilisant le développement de Taylor de la fonction  $\ln(1+x) = -\sum_{j=1}^{\infty} (-x)^j / j$  pour  $x \ll 1$ , ce qui se traduit dans notre cas par

$$\begin{aligned} \text{Tr} \ln [\beta(G_0^{-1} + V)] &= \text{Tr} \ln [\beta G_0^{-1}] + \text{Tr} \ln [1 + G_0 V] \\ &= \text{Tr} \ln [\beta G_0^{-1}] - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} \text{Tr} [-G_0 V]^j. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Ainsi, l'action effective devient

$$S^{\text{eff}}[A, u, n] = S_{\text{ph}}^{(0)}[u] + S_{\text{m}}^{(0)}[n] + S_{\text{em}}^{(0)}[A] - \text{Tr} \ln [\beta G_0^{-1}] - \sum_{j=1}^{\infty} S_j[A, u, n], \quad (2.26)$$

avec  $S_j = -\text{Tr} [-G_0 V]^j / j$ . L'action  $S_j$  représente la correction issue de la théorie des perturbations d'ordre  $j$ . Ce terme peut être décrit par un diagramme de Feynman comportant

une boucle de fermion et  $j$  perturbations bosoniques. Bien sûr, seuls quelques-uns de ces termes peuvent avoir une structure analogue à l'action 1.27, et donc seuls les termes vérifiant cette condition seront pris en compte par la suite. Enfin, le terme  $\text{Tr} \ln[\beta G_0^{-1}]$  ne dépend d'aucun champ bosonique, il est donc négligé pour la suite de la discussion.

### 2.1.3 Champ axionique dynamique induit par les phonons

Maintenant que nous avons déterminé l'action effective, nous pouvons commencer à rechercher les termes de  $S^{\text{eff}}$  qui ont une structure similaire à celle de l'action 1.27. À cet effet, seuls les termes possédant au moins trois perturbations sont pris en compte. En effet, pour avoir un terme ayant une structure  $\theta \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ , nous devons avoir deux perturbations électromagnétiques et au moins une autre perturbation issue d'un champ décrivant un boson autre qu'un photon. En d'autres termes, nous cherchons un terme qui peut être décrit par le diagramme de l'anomalie chirale [53]. Les premiers termes susceptibles de vérifier cette condition sont les termes issus de la correction au troisième ordre de la théorie des perturbations :

$$S_3 = \frac{1}{3} \text{Tr} (G_0 V G_0 V G_0 V) = \frac{1}{3\beta\mathcal{V}} \text{tr} \sum_k \langle k | G_0 V G_0 V G_0 V | k \rangle, \quad (2.27)$$

où  $\mathcal{V}$  dénote le volume du système,  $k = (\mathbf{k}, \kappa_n)$  et  $\text{tr}$  décrit la trace sur l'espace des spins et pseudospins. Ici,  $\kappa_n = \pi(2n + 1)/\beta$  représente les fréquences de Matsubara fermioniques. Dans la limite  $T \rightarrow 0$ , cette fréquence devient continue;  $\kappa_n \rightarrow \kappa$  [52, 51]. L'utilisation de la relation de fermeture  $\frac{1}{\beta\mathcal{V}} \sum_k |k\rangle \langle k| = \mathbb{I}$ , où  $\mathbb{I}$  est l'identité dans l'espace des phases, permet d'écrire

$$S_3 = \frac{1}{3\beta^3\mathcal{V}^3} \text{tr} \sum_{k,k',k''} G_0(k) V(k-k') G_0(k') V(k'-k'') G_0(k'') V(k''-k). \quad (2.28)$$

Dans cette égalité,

$$G_0(k) = -i\gamma^4 \frac{i\kappa_n + h_0}{\kappa_n^2 + E_{\mathbf{k}}^2} = \frac{-\not{k} + m + im_5\gamma^5}{-k^2 + m^2 + m_5^2} \quad (2.29)$$

est la fonction de Green dans l'espace de Fourier, où  $k^2 = k^\mu k_\mu = -\mathbf{k}^2 - \kappa_n^2$ . De même,

$$V(k) = -\mathcal{A}(k) + \delta m(k) + i\delta m_5(k)\gamma^5 \quad (2.30)$$

désigne la perturbation dans ce même espace. Ces résultats sont obtenus en utilisant le fait que les électrons libres suivent la symétrie de translation qui implique

$$\langle k | G_0 | k' \rangle = \beta\mathcal{V} G_0(k) \delta_{kk'}. \quad (2.31)$$

De plus,

$$\begin{aligned} \langle k | V | k' \rangle &= \int d^4x d^4x' \langle k | x \rangle \langle x | V | x' \rangle \langle x' | k' \rangle \\ &= \int d^4x d^4x' V(x) \delta(x-x') e^{ik \cdot x} e^{ik' \cdot x'} \\ &= \int d^4x V(x) e^{ix \cdot (k-k')} = V(k-k'). \end{aligned} \quad (2.32)$$

La convention utilisée pour les transformées de Fourier est celle du livre de Nagaosa [51] où dans le cas continu et à  $T = 0$

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}, \tau) &= \int \frac{d\kappa}{2\pi} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi(\mathbf{k}, \kappa) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \kappa\tau)} \\ \psi(\mathbf{k}, \kappa) &= \int d\tau \int d^3x \psi(\mathbf{x}, \tau) e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \kappa\tau)}.\end{aligned}\quad (2.33)$$

L'action devient alors

$$S_3 = \frac{1}{3} \int_{kk'k''} \text{tr} [G_0(k)V(k-k')G_0(k')V(k'-k'')G_0(k'')V(k''-k)], \quad (2.34)$$

où  $\int_k = \int d^4k / (2\pi)^4$  avec  $d^4k = d^3k d\kappa$ . L'équation 2.34 possède au total 27 termes représentants chacun un diagramme de Feynman avec trois perturbations. Toutefois, seuls les termes possédants deux perturbations électromagnétiques et une perturbation phononique ou antiferromagnétique nous intéressent. En effet, l'invariant de Lorentz associé à l'action 1.27 peut être réécrit en fonction des potentiels :

$$\delta\theta \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = \frac{\delta\theta}{8} \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\mu\nu} F_{\alpha\beta} = \frac{\delta\theta}{2} \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu A_\nu \partial_\alpha A_\beta. \quad (2.35)$$

En conséquence, nous pouvons voir que  $S_\theta$  est bien proportionnelle au carré du quadri-potentiel vecteur et possède une troisième perturbation, ce qui est en accord avec la condition énoncée plus haut. En insérant l'équation 2.30 dans l'équation 2.34, nous pouvons voir qu'uniquement 6 termes des 27 satisfont à ces exigences. Ainsi, la contribution de  $S_3$  ayant la même forme que  $S_\theta$  est donnée par

$$\begin{aligned}S_3^\theta &= \frac{1}{3} \int_{kk'k''} \text{tr} [G_0(k)\mathcal{A}(k-k')G_0(k')\mathcal{A}(k'-k'')G_0(k'')(\delta m(k''-k) + i\delta m_5(k''-k)\gamma^5) \\ &\quad + G_0(k)\mathcal{A}(k-k')G_0(k')(\delta m(k'-k'') + i\delta m_5(k'-k'')\gamma^5)G_0(k'')\mathcal{A}(k''-k) \\ &\quad + G_0(k)(\delta m(k-k') + i\delta m_5(k-k')\gamma^5)G_0(k')\mathcal{A}(k'-k'')G_0(k'')\mathcal{A}(k''-k)].\end{aligned}\quad (2.36)$$

Chacune des lignes de l'équation précédente possède une contribution équivalente à  $S_3^\theta$ . Cette affirmation est justifiée par le fait que la trace est un opérateur cyclique, i.e.  $\text{tr} [AB] = \text{tr} [BA]$ . En outre, physiquement, chaque ligne représente le même diagramme de Feynman à une rotation près. Donc, un changement de variable permet d'écrire

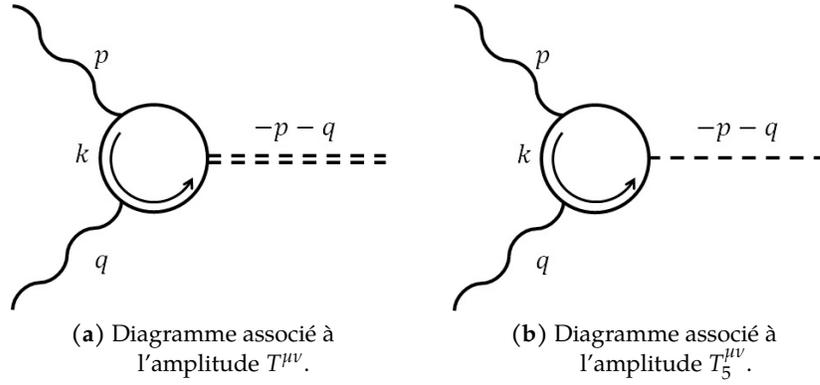
$$S_3^\theta = \int_{qp} A_\mu(q)A_\nu(p) [\delta m(-q-p)T^{\mu\nu}(q,p) + i\delta m_5(-q-p)T_5^{\mu\nu}(q,p)], \quad (2.37)$$

où

$$T^{\mu\nu}(q,p) = \int_k \text{tr} [G_0(k)\gamma^\mu G_0(k-q)\gamma^\nu G_0(k-q-p)] \quad (2.38)$$

représente l'amplitude phononique qui correspond au diagramme triangulaire comportant deux photons et un phonon. Ce diagramme est présenté à la figure 2.2a. De manière analogue,

$$T_5^{\mu\nu}(q,p) = \int_k \text{tr} [G_0(k)\gamma^\mu G_0(k-q)\gamma^\nu G_0(k-q-p)\gamma^5] \quad (2.39)$$



**FIGURE 2.2** Diagrammes de Feynman issus du troisième ordre de la théorie des perturbations et pouvant avoir une structure similaire à  $S_\theta$ . Les lignes pleines, ondulées et pointillées représentent des fermions de Dirac, photons et magnons, respectivement. Les doubles lignes pointillées représentent des phonons.

représente l'amplitude antiferromagnétique qui correspond au diagramme triangulaire comportant deux photons et un magnon, tel que présenté à la figure 2.2b. L'utilisation des identités des matrices de Dirac présentées à l'équation 2.14 permet de calculer les traces des équations 2.38 et 2.39 pour trouver

$$T^{\mu\nu}(q, p) = \int_k \frac{M^{\mu\nu}(k, q, p) + 4m_5 q_\alpha p_\beta \varepsilon^{\mu\alpha\nu\beta}}{D_3(k, q, p)} \quad (2.40)$$

$$T_5^{\mu\nu}(q, p) = \int_k \frac{M_5^{\mu\nu}(k, q, p) - 4im q_\alpha p_\beta \varepsilon^{\mu\alpha\nu\beta}}{D_3(k, q, p)}, \quad (2.41)$$

où

$$D_3(k, q, p) = (\kappa^2 + E_k^2) \left( (\kappa - \nu)^2 + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2 \right) \left( (\kappa - \nu - \nu')^2 + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}}^2 \right). \quad (2.42)$$

Dans la limite de température finie,  $\nu \rightarrow \nu_m = 2\pi m/\beta$  et  $\nu' \rightarrow \nu'_j = 2\pi j/\beta$  avec  $m, j \in \mathbb{Z}$  car  $q = (\mathbf{q}, \nu)$  et  $p = (\mathbf{p}, \nu')$  représentent des quadri-vecteurs potentiels associés à des bosons [52, 51]. Les tenseurs  $M^{\mu\nu}$  et  $M_5^{\mu\nu}$  rassemblent l'ensemble des termes qui ne comportent pas de tenseur de Levi-Civita. De ce fait, ils ne donneront pas lieu à des termes semblables à l'équation 2.35, et sont donc négligés pour la suite de la discussion. Ainsi,

$$T^{\mu\nu}(q, p) \sim -4i \int_k \frac{m_5}{D_3(k, q, p)} q_\alpha p_\beta \varepsilon^{\mu\alpha\nu\beta} \quad (2.43)$$

$$T_5^{\mu\nu}(q, p) \sim -4 \int_k \frac{m}{D_3(k, q, p)} q_\alpha p_\beta \varepsilon^{\mu\alpha\nu\beta}. \quad (2.44)$$

En insérant ces deux résultats dans l'équation 2.37, nous obtenons

$$S_3^\theta = -4i \int_{qp} q_\alpha A_\mu(q) p_\beta A_\nu(p) \varepsilon^{\alpha\mu\beta\nu} [m_5 \delta m(-q-p) + m \delta m_5(-q-p)] \mathcal{I}_3(q, p), \quad (2.45)$$

où  $\mathcal{I}_3$  représente l'intégrale sur la boucle de fermion

$$\mathcal{I}_3(q, p) = \int_k \frac{1}{D_3(k, q, p)}. \quad (2.46)$$

Il est désormais possible de voir que  $S_3^\theta$  possède une structure identique à  $S_\theta$ . En effet, la transformée de Fourier du tenseur de Faraday

$$F_{\mu\nu}(q) = -i [q_\mu A_\nu(q) - q_\nu A_\mu(q)] \quad (2.47)$$

permet de montrer que

$$q_\alpha A_\mu(q) p_\beta A_\nu(p) \varepsilon^{\alpha\mu\beta\nu} = \mathbf{E}(q) \cdot \mathbf{B}(p) + \mathbf{E}(p) \cdot \mathbf{B}(q). \quad (2.48)$$

De plus, nous nous intéressons au cas où le champ magnétique est uniforme et statique dans l'espace réel, i.e.  $\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}_0$ . Ce choix est justifié par le fait qu'il est plus facile de faire des expériences à champ magnétique constant et homogène. Ceci implique que

$$\mathbf{B}(k) = \int_0^\beta d\tau \int d^3x e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \mathbf{B}(x) = \mathbf{B}_0 \int_0^\beta d\tau \int d^3x e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = (2\pi)^4 \mathbf{B}_0 \delta(k). \quad (2.49)$$

Physiquement, à cause de la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, le fait que le champ magnétique ne dépende ni de l'espace ni du temps implique que l'un des deux photons et le phonon (magnon) du diagramme présenté à la figure 2.2a (figure 2.2b) possèdent une énergie et une quantité de mouvement opposée. Aussi, tel que discuté plus haut, la contribution de  $\mathbf{q}$  à l'équation 2.42 peut être négligée. Donc d'après l'équation 2.45, l'action devient

$$S_3^\theta[A, u, n] = S_3^\theta[A, n] + S_3^\theta[A, u] \quad (2.50)$$

avec

$$S_3^\theta[A, n] \approx -8im \int_q \mathbf{E}(q) \cdot \mathbf{B}_0 \delta m_5(-q) \mathcal{I}_3(\nu) = -\frac{1}{4\pi^2} \int_q \delta\theta_m(-q) \mathbf{E}(q) \cdot \mathbf{B}_0 \quad (2.51)$$

$$S_3^\theta[A, u] \approx -8im_5 \int_q \mathbf{E}(q) \cdot \mathbf{B}_0 \delta m(-q) \mathcal{I}_3(\nu) = -\frac{1}{4\pi^2} \int_q \delta\theta_{\text{ph}}(-q) \mathbf{E}(q) \cdot \mathbf{B}_0 \quad (2.52)$$

et

$$\mathcal{I}_3(\nu) = \mathcal{I}_3(\nu, 0) = \int_k \frac{1}{D_3(k, \nu, 0)} = \int_k \frac{1}{(\kappa^2 + E_{\mathbf{k}}^2) ((\kappa - \nu)^2 + E_{\mathbf{k}}^2)^2}. \quad (2.53)$$

Le premier terme de  $S_3^\theta$  montre que des fluctuations antiferromagnétiques peuvent se comporter comme des axions au sein des isolants. Ce résultat a déjà été découvert dans la littérature [41, 42, 43]. Cependant le deuxième terme de  $S_3^\theta$  constitue un résultat inédit. En effet, ce terme montre que les phonons optiques peuvent interagir avec les photons de la même manière que les axions, impliquant ainsi que les modes de phonons optiques peuvent faire office de quasi-particule axionique. La variation de l'invariant topologique  $\theta$  due aux phonons optiques est donnée par

$$\delta\theta_{\text{ph}}(q) = 32\pi^2 im_5 \delta m(q) \mathcal{I}_3(\nu), \quad (2.54)$$

En réalité, les phonons peuvent induire des fluctuations du champ de Néel, ce qui se traduit mathématiquement par le fait qu'il est possible d'avoir  $\delta m_5(\mathbf{x}, t) \propto u(\mathbf{x}, t)$ . Néanmoins, ce ne sont pas tous les modes de phonons qui peuvent induire une dépendance de la sorte. Seuls

les modes associés à des vecteurs d'ondes de l'ordre de la zone de Brillouin, i.e.  $|\mathbf{q}| \sim \pi/a$ <sup>1</sup>, peuvent conduire à tel effet [54]. Or, les modes considérés dans ce mémoire sont associés à des vecteurs d'ondes négligeables, ce qui explique pourquoi nous n'avons pas considéré que l'action 2.51 dépend du champ phononique. Ainsi, pour la suite de la discussion, l'action 2.51 est négligée donnant ainsi pour l'action effective des phonons

$$S_{\text{ph}}^{\text{eff}}[A, u] = S_{\text{ph}}^{(0)}[u] - S_3^{\theta}[A, u] + \dots \quad (2.55)$$

Nous avons ainsi réussi à démontrer qu'un terme semblable à l'équation 1.27 peut être induit par les vibrations du réseau dans les isolants lorsque les corrections de la théorie des perturbations au troisième ordre sont pris en compte, induisant donc l'existence de quasi-particules axioniques issues des phonons optiques dans ces matériaux. Il nous reste cependant à déterminer comment  $\delta\theta_{\text{ph}}$  dépend de  $q$ . De plus, il est aussi possible de se demander si ce terme exotique peut affecter le comportement des phonons dans les isolants.

#### 2.1.4 Charge effective induite par le champ axionique

La dynamique des phonons en présence du couplage photon-phonon, qui se fait à travers la matière, peut être déduite de l'équation 2.55. En effet, en appliquant le principe de moindre action, il est possible de déterminer l'équation du mouvement associée aux phonons. Comme le degré de liberté associé aux phonons est le champ  $u$ , il n'y a donc qu'une seule équation du mouvement pour les phonons et il suffit de minimiser  $S_{\text{ph}}^{\text{eff}}$  par rapport à  $u$  pour l'obtenir. Le calcul de l'équation du mouvement se fait dans l'espace de Minkowski. Tout d'abord, après être passé au temps réel, la transformée de Fourier de l'équation 2.6 est donnée par

$$S_{\text{ph}}^{(0)}[u] = \frac{M}{2} \int_q (\omega^2 - v^2) u(q)u(-q) - \int_q \mathbf{Q}^{(0)}(-q) \cdot \mathbf{E}(q)u(-q). \quad (2.56)$$

En substituant  $u \rightarrow u + \delta u$ , l'action effective des phonons devient

$$S_{\text{ph}}^{\text{eff}}[A, u] \rightarrow S_{\text{ph}}^{\text{eff}}[A, u + \delta u] \approx S_{\text{ph}}^{\text{eff}}[A, u] + \delta S^{\text{eff}}[A, u], \quad (2.57)$$

où  $\delta S^{\text{eff}}$  est la variation de l'action effective au premier ordre en  $\delta u$ . Ensuite grâce aux équations 2.52 et 2.56 et en utilisant la relation  $\delta m(q) = g(q)u(q)$  où  $g = g_+ - g_-$  est la fonction qui décrit le couplage électron-phonon,  $\delta S^{\text{eff}}$  peut être écrite comme

$$\begin{aligned} \delta S^{\text{eff}}[A, u] = \int_q \left\{ M (\omega^2 - v^2) u(-q) - \mathbf{Q}^{(0)}(q) \cdot \mathbf{E}(-q) \right. \\ \left. + 8m_5g(q)\mathcal{I}_3(v)\mathbf{E}(-q) \cdot \mathbf{B}_0 \right\} \delta u(q). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Enfin, d'après le principe de moindre action,  $\delta S^{\text{eff}}$  doit s'annuler pour n'importe quelle variation  $\delta u$ , ce qui implique que les termes entre crochet de l'équation précédente s'annulent.

1. Ici  $a$  représente le pas du réseau qui est de l'ordre du nm.

L'équation du mouvement des phonons est donc

$$\begin{aligned} M(\omega^2 - \nu^2) u(q) &= \mathbf{E}(q) \cdot \left( \mathbf{Q}^{(0)}(-q) - 8m_5 g(-q) \mathcal{I}_3(\nu) \mathbf{B}_0 \right) \\ &= \mathbf{E}(q) \cdot \left( \mathbf{Q}^{(0)}(-q) + \mathbf{Q}_\theta(-q) \right). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Le deuxième terme du membre de droite de l'équation ci-dessus montre l'existence d'une charge effective des phonons induite par l'action 2.52. Par identification, il est facile de voir que

$$\mathbf{Q}_\theta(q) = -8 \frac{e^2}{\hbar} m_5 g(\mathbf{q}) \mathcal{I}_3(\nu) \mathbf{B}_0, \quad (2.60)$$

où les unités S.I. ont été restaurées. Cette nouvelle charge effective est parallèle au champ magnétique appliqué. De ce fait, elle peut être contrôlée au laboratoire à travers  $\mathbf{B}_0$ . De plus,  $\mathbf{Q}_\theta$  est proportionnelle à la masse chirale  $m_5$ . Ceci signifie que pour pouvoir avoir une charge effective induite par les axions dans un isolant, il faut que ce dernier brise les deux symétries d'inversion spatiale et d'inversion du temps. En effet, nous rappelons que le terme de l'hamiltonien 2.8 relatif à  $m_5$  brise les deux symétries  $\mathcal{P}$  et  $\mathcal{T}$ . Aussi,  $\mathbf{Q}_\theta$  est, à priori, une quantité dynamique de par sa dépendance en  $q$ , qui dans l'espace réel se traduit par une dépendance en  $t$  et  $\mathbf{x}$ . L'équation 2.60 montre que cette dépendance vient du couplage électron-phonon et de l'intégrale sur la boucle de fermion  $\mathcal{I}_3$ . Comme les modes de phonons considérés dans ce mémoire sont des modes optiques, associés à un faible vecteur d'onde, il est possible de négliger la dépendance en  $\mathbf{q}$  de  $g$ ;  $g(\mathbf{q}) \approx g$ . Cette approximation implique que le comportement dynamique de la charge effective induite par les axions vient exclusivement de  $\mathcal{I}_3$ . En plus, la propriété

$$\mathbf{Q}_\theta(-q) = \mathbf{Q}_\theta(q) \quad (2.61)$$

est valide dans cette approximation car  $\mathcal{I}_3$  est paire en  $\nu$ . À noter que le fait que  $\mathbf{Q}_\theta$  soit symétrique dans l'espace de Fourier n'implique pas forcément qu'elle soit purement réel, compte tenu du fait qu'une charge effective peut avoir une partie imaginaire non nulle dans l'espace réel. Cependant, l'équation 2.61 permet de déduire que la charge effective issue des axions est symétrique dans l'espace réel aussi.

Pour connaître la dépendance en  $q$  de  $\mathbf{Q}_\theta$ , il suffit de calculer l'intégrale  $\mathcal{I}_3$ . Les sections suivantes détaillent le calcul de cette intégrale dans différents régimes.

## 2.2 Dépendance en fréquence et température de la charge effective et du champ des axions

---

### 2.2.1 Calcul en température nulle

Dans cette section, nous présentons le calcul de  $\mathbf{Q}_\theta$  et  $\delta\theta_{\text{ph}}$  dans la limite  $T \rightarrow 0$ . Dans cette limite, les fréquences de Matsubara sont des variables continues. De ce fait, il suffit de calculer  $\mathcal{I}_3$  en intégrant sur les variables  $\kappa$  et  $\mathbf{k}$ , comme le montre l'équation 2.53. Le calcul de l'intégrale est fait dans deux régimes distincts. Pour le premier cas, nous supposons que le gap de l'isolant est plus grand que la fréquence réelle des phonons ;  $\Delta = 2(m^2 + m_5^2)^{1/2} \gg \hbar q_0 \sim 10\text{meV}$ . Par la suite, l'intégrale est effectuée dans le régime où le gap peut prendre une valeur quelconque.

#### 2.2.1.1 Régime des grandes masses

Lorsque les valeurs de la masse de Dirac et de la masse axiale sont suffisamment grandes par rapport à la fréquence des phonons, il est possible d'effectuer un développement de Taylor à l'ordre 0 en  $\nu$ . Dans ce cas là, l'intégrale  $\mathcal{I}_3$  devient indépendante de  $\nu$  (donc indépendante de  $q$  car le vecteur d'onde des phonons est négligé), et la charge effective des phonons induite par les axions devient ainsi statique ;  $\mathbf{Q}_\theta(\nu) \approx \mathbf{Q}_\theta$ . En outre, le résultat pour la charge effective dans l'espace de Minkowski est le même que celui de l'espace Euclidien dans ce régime. Donc, d'après l'équation 2.53, l'intégrale devient

$$\mathcal{I}_3(\nu) \approx \mathcal{I}_3(0) = \int_k \frac{1}{(\kappa^2 + E_{\mathbf{k}}^2)^3} = \int_k \frac{1}{(-k^2 + m^2 + m_5^2)^3}, \quad (2.62)$$

où l'énergie propre 2.12 a été utilisée et où  $k^2 = -\kappa^2 - \mathbf{k}^2$ . Le fait que l'intégrale soit écrite dans l'espace Euclidien permet d'utiliser les coordonnées de la 3-sphère pour la calculer. En effet, en posant le changement de variable

$$\begin{aligned} \kappa &= \sqrt{\kappa^2 + \mathbf{k}^2} \cos(\psi) \\ k_x &= \sqrt{\kappa^2 + \mathbf{k}^2} \sin(\psi) \cos(\theta) \\ k_y &= \sqrt{\kappa^2 + \mathbf{k}^2} \sin(\psi) \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ k_z &= \sqrt{\kappa^2 + \mathbf{k}^2} \sin(\psi) \sin(\theta) \sin(\varphi), \end{aligned} \quad (2.63)$$

et en utilisant le Jacobien correspondant  $|J| = (\kappa^2 + \mathbf{k}^2)^{3/2} \sin^2(\psi) \sin(\theta) = ik^3 \sin^2(\psi) \sin(\theta)$ , l'intégrale devient

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_3(0) &= \frac{-i}{(2\pi)^4} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\psi \sin^2(\psi) \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \int_0^\infty dk \frac{k^3}{(k^2 - m^2 - m_5^2)^3} \\ &= \frac{i}{32\pi^2} \frac{1}{m^2 + m_5^2}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

À noter que ce résultat concorde avec la célèbre formule

$$\int \frac{d^n k}{(k^2 - M^2)^\alpha} = i^{1-2\alpha} \pi^{n/2} \frac{\Gamma(\alpha - \frac{n}{2})}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{M^{2\alpha-n}}, \quad (2.65)$$

pour  $n = 4$  et  $\alpha = 3$  [55, 56]<sup>2</sup>. Ainsi, l'équation 2.60 permet d'écrire

$$\mathbf{Q}_\theta(T=0) = -\frac{ig^2}{4\pi^2\hbar} \frac{m_5}{m^2 + m_\xi^2} \mathbf{B}_0. \quad (2.66)$$

La figure 2.3 montre comment  $\mathbf{Q}_\theta$  dépend des deux masses  $m$  et  $m_5$ . Ensuite, l'équation 2.54 donne

$$\delta\theta_{\text{ph}}(q_0) = -gu(q_0) \frac{m_5}{m^2 + m_\xi^2}. \quad (2.67)$$

La correction à l'invariant topologique due aux phonons reste donc une quantité dynamique de par sa dépendance en  $u$ . En utilisant la transformée de Fourier inverse,  $\delta\theta_{\text{ph}}$  peut être écrit dans l'espace réel

$$\delta\theta_{\text{ph}}(t) = -gu(t) \frac{m_5}{m^2 + m_\xi^2}. \quad (2.68)$$

Comme mentionné plus haut, les résultats 2.68 et 2.66 sont bons uniquement pour des valeurs de  $m$  et  $m_5$  très grandes par rapport à la fréquence d'oscillation des phonons. De ce fait, ces résultats ne sont plus valides dans des isolants qui possède un gap qui est proche de l'inversion de bande. En d'autres mots, les résultats ci-dessus ne sont pas valides pour des matériaux avec un gap de l'ordre ou inférieur à la fréquence réelle des phonons, i.e.  $\Delta \sim \hbar q_0$  et  $\Delta < \hbar q_0$ .

### 2.2.1.2 Régime des masses arbitraires

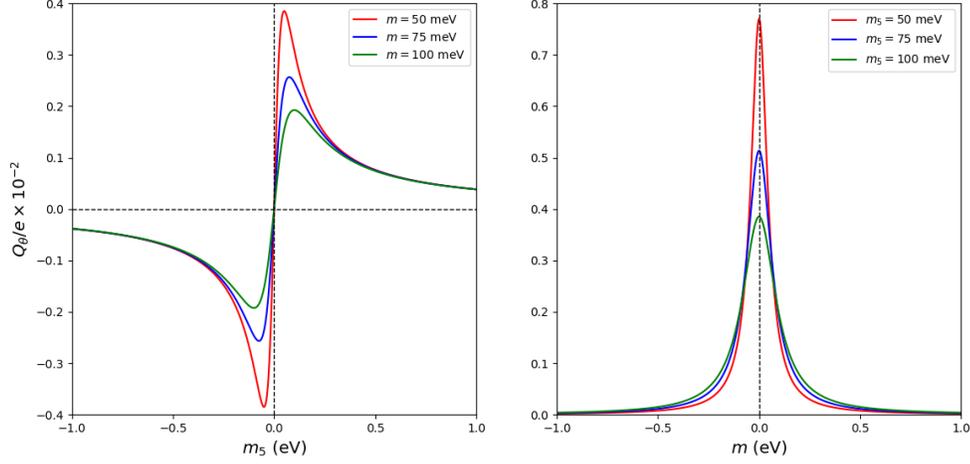
Dans le cas où les valeurs des masses sont arbitraires, le développement de Taylor fait à l'équation 2.62 n'est plus valide, et il faut donc calculer l'intégrale 2.53 en gardant la contribution de la fréquence  $\nu$ . À cette fin, il est utile de réécrire  $\mathcal{I}_3$  à l'aide d'une paramétrisation de Feynman [57]. En effet,

$$\frac{1}{a_1^{\rho_1} a_2^{\rho_2} \dots a_n^{\rho_n}} = \frac{\Gamma(R)}{\gamma} \int_0^1 dx_1 \dots dx_n \delta(\sum x_i - 1) \frac{\prod x_i^{\rho_i - 1}}{(\sum x_i a_i)^R}, \quad (2.69)$$

où  $i = 1, 2, \dots, n$  et chaque somme ou produit est fait sur l'indice  $i$ . De plus,  $R = \sum \rho_i$  et  $\gamma = \prod \Gamma(\rho_i)$  avec  $\Gamma$  étant la fonction Gamma caractérisée par  $\Gamma(x) = (x-1)!$  pour tout  $x$  entier positif non nul. Ainsi,  $\mathcal{I}_3$  peut être réécrite comme

$$\mathcal{I}_3(\nu) = 2 \int_k \int_0^1 dx \frac{1-x}{((\kappa^2 + E_{\mathbf{k}}^2)x + ((\kappa - \nu)^2 + E_{\mathbf{k}}^2)(1-x))^3}. \quad (2.70)$$

2. À noter que  $\Gamma$  représente la fonction gamma qui vérifie  $\Gamma(x) = (x-1)!$  pour  $x \in \mathbb{R}^*$ .



**FIGURE 2.3** Dépendance du rapport entre la charge effective induite par le champ des axions et la charge de l'électron en fonction de la masse de axiale  $m_5$  (gauche) et de la masse de Dirac  $m$  (droite) dans le régime  $\Delta \gg \hbar q_0$  et  $T = 0$  (cf. équation 2.66).

En utilisant l'équation 2.12 et en rappelant que

$$\begin{aligned} k^2 &= -\kappa^2 - \mathbf{k}^2 \\ q^2 &= -v^2 - \mathbf{q}^2 \approx -v^2 \\ \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} &= -\kappa v - \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} \approx -\kappa v, \end{aligned} \quad (2.71)$$

il est possible de réécrire le dénominateur de cette dernière équation comme

$$\mathcal{I}_3(v) = 2 \int_k \int_0^1 dx \frac{x-1}{(k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{P} - M^2)^3}, \quad (2.72)$$

où

$$\begin{aligned} P &= q(1-x) \\ M^2 &= q^2(x-1) + m^2 + m_5^2. \end{aligned} \quad (2.73)$$

De cette façon, l'intégrale sur  $k$  peut être faite en utilisant la généralisation de l'équation 2.65 utilisée précédemment [55, 56]

$$\int \frac{d^n k}{(k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{P} - M^2)^\alpha} = i^{1-2\alpha} \pi^{n/2} \frac{\Gamma(\alpha - \frac{n}{2})}{\Gamma(\alpha)} \frac{1}{(M^2 + P^2)^{\alpha - n/2}}, \quad (2.74)$$

donnant ainsi pour  $n = 4$  et  $\alpha = 3$

$$\mathcal{I}_3(v) = -\frac{i}{16\pi^2} \int_0^1 dx \frac{x-1}{-v^2(x-1)x + m^2 + m_5^2}. \quad (2.75)$$

À noter qu'il est possible de retrouver le résultat de l'équation 2.64 en prenant la limite où les masses sont considérées comme étant les plus grands paramètres dans cette dernière intégrale.

Avant de calculer l'intégrale sur le paramètre de Feynman  $x$ , il faut d'abord revenir à l'espace de Minkowski associé au temps réel. Pour ce faire, il suffit d'utiliser la continuation analytique  $i\nu \rightarrow q_0 + i\eta$  où  $q_0$  est la fréquence des phonons réelle et  $\eta$  est une partie imaginaire infinitésimale, i.e.  $\eta \rightarrow 0^+$  [52]. Le fait que  $\eta \rightarrow 0^+$  est justifié par le fait que le désordre n'est pas pris en compte dans cette théorie. De la sorte, l'intégrale devient

$$\mathcal{I}_3(q_0) = -\frac{i}{16\pi^2 q_0^2} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^1 dx \frac{x-1}{f(x) + i\eta}, \quad (2.76)$$

où  $f(x) = (x - x_-)(x - x_+)$  et  $x_{\pm} = 1/2 \pm \sqrt{1 - \zeta^2}/2$  avec

$$\zeta = \frac{\Delta}{\hbar q_0} \quad (2.77)$$

où les unités ont été restaurées pour que  $\zeta$  soit sans dimension. Ensuite, la formule d'intégration suivante

$$\int dx \frac{x-1}{f(x) + i\eta} = \frac{1}{2} \ln |f(x) + i\eta| + \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{\eta}{f(x)} \right) - \frac{1}{2} \int \frac{dx}{f(x) + i\eta} + D \quad (2.78)$$

implique que

$$\mathcal{I}_3(q_0) = \frac{i}{32\pi^2 q_0^2} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^1 \frac{dx}{f(x) + i\eta}. \quad (2.79)$$

Le deuxième terme de l'équation 2.78 vient de la définition du logarithme complexe  $\text{Ln}(z) = \ln |z| + i \arg(z)$  [58, 59]. Le passage de l'équation 2.76 à l'équation 2.79 se fait en remarquant que les deux premiers termes de 2.78 s'annulent lorsqu'ils sont évalués sur les bornes d'intégrations car  $f(1) = f(0)$ . Ensuite, comme la partie réelle du dénominateur de l'intégrande de l'équation 2.79 est un polynôme d'ordre 2, alors il est possible d'appliquer le théorème Sokhotski-Plemelj pour une fonction arbitraire (voir l'annexe B). Ainsi, l'équation 2.79 devient

$$\mathcal{I}_3(q_0) = \frac{i}{32\pi^2 q_0^2} \left[ \mathfrak{P} \int_0^1 \frac{dx}{f(x)} - i\pi \sum_{n=\pm} \frac{1}{|2x_n - 1|} \Theta(x_n) \Theta(1 - x_n) \right], \quad (2.80)$$

où  $\mathfrak{P}$  dénote la partie principale de Cauchy,  $\Theta$  est la fonction de Heaviside et où la relation suivante a été utilisée :

$$\int_a^b h(x) \delta(g(x)) = \sum_n \frac{h(x_n)}{|g'(x_n)|} \Theta(x_n - a) \Theta(b - x_n), \quad (2.81)$$

$x_n$  étant la  $n$ -ième racine de  $g$ . De l'équation 2.80, il est possible de voir que la partie réelle de  $\mathcal{I}_3$  est nulle uniquement si  $x_{\pm}$  n'appartiennent pas à l'intervalle d'intégration de 2.79. En effet, dans ce cas il n'est pas nécessaire de faire appel au théorème de Sokhotski-Plemelj

pour calculer la limite, car aucun pôle ne se trouve sur le parcours d'intégration et donc l'intégrande est Riemann intégrable. De façon générale

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \mathcal{I}_3 &= 0 \quad \text{si et seulement si} \quad \zeta > 1, \\ \operatorname{Re} \mathcal{I}_3 &\neq 0 \quad \text{si et seulement si} \quad \zeta < 1. \end{aligned}$$

Le cas  $\zeta = 1$  est particulier. Dans ce cas, les racines de  $f$  sont confondues ;  $x_- = x_+ = 1/2$  et donc l'intégrande de l'équation 2.79 possède un pôle double à  $x = 1/2$ . En conséquence, il n'est plus possible d'utiliser le théorème de Sokhotski-Plemelj pour contourner le pôle de l'intégrande. Ainsi, lorsque  $\Delta = q_0$  (autrement dit pour  $\zeta = 1$ ), l'intégrale  $\mathcal{I}_3$  est discontinue et divergente. L'origine physique de cette divergence nous est toujours inconnue. Le calcul de  $\mathcal{I}_3$  peut maintenant être fait pour les deux autres cas.

(i) **Cas  $\zeta > 1$  :** Dans ce cas, tel que discuté ci-dessus, l'équation 2.80 devient

$$\mathcal{I}_3(q_0) = \frac{i}{32\pi^2 q_0^2} \int_0^1 dx \frac{1}{f(x)}, \quad (2.82)$$

et peut être résolue en utilisant la formule suivante :

$$\int \frac{dx}{ax^2 + bx + c} = \frac{2}{\sqrt{4ac - b^2}} \arctan \left( \frac{2ax + b}{\sqrt{4ac - b^2}} \right) + D, \quad (2.83)$$

où il est supposé que  $4ac - b^2 > 0$  pour  $a, b, c$  et  $D$  des constantes [59]. Dans le cas de l'intégrale  $\mathcal{I}_3$ ,  $a = 1, b = -1$  et  $c = \zeta^2/4$  et donc  $4ac - b^2 = \zeta^2 - 1 > 0$  ce qui coïncide bien avec le cas considéré dans cette section. Enfin, ceci permet d'écrire

$$\mathcal{I}_3(q_0) = \frac{i}{8\pi^2 q_0^2} \frac{1}{\sqrt{\zeta^2 - 1}} \arctan \left( \frac{1}{\sqrt{\zeta^2 - 1}} \right). \quad (2.84)$$

Lorsque  $\zeta \ll 1$ , donc dans le régime des grandes masses, l'identité  $\arctan(x) \approx x$  pour  $x \gg 1$  implique que

$$\mathcal{I}_3(q_0) \approx \frac{i}{8\pi^2 q_0^2} \frac{1}{|\zeta|^2} = \frac{i}{32\pi^2 q_0^2} \frac{1}{m^2 + m_5^2}, \quad (2.85)$$

ce qui concorde avec l'équation 2.64. Finalement,

$$\mathbf{Q}_\theta(q_0) = -i \frac{ge^2}{\pi^2 \hbar} \mathbf{B}_0 \frac{m_5}{q_0^2 \sqrt{\zeta^2 - 1}} \arctan \left( \frac{1}{\sqrt{\zeta^2 - 1}} \right), \quad (2.86)$$

et

$$\delta\theta_{\text{ph}}(q_0) = -4m_5 g \frac{u(q_0)}{q_0^2 \sqrt{\zeta^2 - 1}} \arctan \left( \frac{1}{\sqrt{\zeta^2 - 1}} \right). \quad (2.87)$$

Naturellement, tous les résultats présentés dans cette section montrent que  $\mathbf{Q}_\theta$  et  $\delta\theta_{\text{ph}}$  sont proportionnels à  $m_5$ . Cependant, en supposant que  $m = \hbar q_0/2$ , alors  $\zeta^2 - 1 = 4m_5^2/q_0^2$ , ce

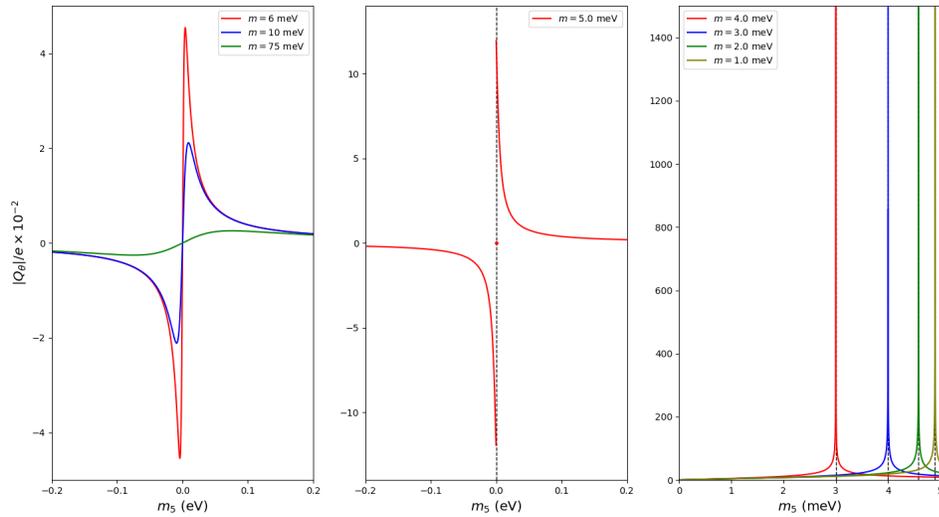
qui implique que

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_\theta(q_0) &= -i \frac{ge^2}{4\pi^2\hbar} \mathbf{B}_0 \operatorname{sgn}(m_5) \arctan\left(\frac{q_0}{2m_5}\right) \\ \delta\theta_{\text{ph}}(q_0) &= -4gu(q_0) \operatorname{sgn}(m_5) \arctan\left(\frac{q_0}{2m_5}\right). \end{aligned} \quad (2.88)$$

De ce fait, en prenant la limite  $m_5 \rightarrow 0^+$  et en utilisant  $\lim_{x \rightarrow \infty} \arctan(x) = \pi/2$ , ces deux équations deviennent

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_\theta(q_0) &= -i \frac{ge^2}{8\pi\hbar} \mathbf{B}_0 \\ \delta\theta_{\text{ph}}(q_0) &= -2\pi gu(q_0). \end{aligned} \quad (2.89)$$

Ces résultats montrent qu'il est possible d'observer les effets du champ dynamique des axions issu des phonons et de la charge effective issue des axions dans des matériaux brisant les symétries d'inversion du temps et de l'espace de façon infinitésimale, i.e.  $m_5 \rightarrow 0^+$ .



**FIGURE 2.4** Comportement du ratio entre le module complexe de la charge effective issue des axions et de la charge de l'électron en fonction de la masse axiale  $m_5$  dans le régime des masses arbitraires et à température nulle. Ce comportement est présenté dans le cas où  $m > \hbar q_0/2$  (gauche),  $m = \hbar q_0/2$  (milieu) et  $m < \hbar q_0/2$  (droite). Les lignes en pointillées représente les valeurs de  $m_5$  pour lesquelles  $\Delta = \hbar q_0$ .

(ii) **Cas  $\xi < 1$**  : Ici, en faisant la somme sur  $n$  de la partie réelle de l'équation 2.80, l'intégrale est donnée par

$$\mathcal{I}_3(q_0) = \frac{i}{32\pi^2 q_0^2} \left[ \Im \int_0^1 \frac{dx}{f(x)} - i\pi \frac{2}{\sqrt{1-\xi^2}} \right]. \quad (2.90)$$

Il faut donc calculer la partie imaginaire. À cette fin, il est nécessaire d'utiliser la définition de la partie principale de Cauchy

$$\mathfrak{P} \int_a^b dx g(x) = \lim_{\epsilon_1, \dots, \epsilon_n \rightarrow 0^+} \left( \int_a^{x_1 - \epsilon_1} + \int_{x_n + \epsilon_n}^a + \sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_i + \epsilon_i}^{x_{i+1} - \epsilon_{i+1}} \right) g(x) dx, \quad (2.91)$$

où  $g$  est une fonction possédant  $n$  pôles sur l'intervalle  $[a, b]$  [58], et l'intégrale suivante

$$\int \frac{1}{ax^2 + bx + c} = \frac{1}{\sqrt{b^2 - 4ac}} \ln \left| \frac{2ax + b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2ax + b + \sqrt{b^2 - 4ac}} \right| + D \quad (2.92)$$

valide lorsque  $4ac - b^2 = \zeta^2 - 1 < 0$  [59], ce qui est bien le cas considéré ici. Ainsi l'équation 2.90 donne

$$\mathcal{I}_3(q_0) = \frac{i}{16\pi^2 q_0^2} \frac{1}{\sqrt{1 - \zeta^2}} \left[ \ln \left| \frac{1 - \sqrt{1 - \zeta^2}}{1 + \sqrt{1 - \zeta^2}} \right| - i\pi \right]. \quad (2.93)$$

Enfin,

$$\mathbf{Q}_\theta(q_0) = -\frac{ge^2}{2\pi^2 \hbar} \mathbf{B}_0 \frac{m_5}{q_0^2 \sqrt{1 - \zeta^2}} \left[ \pi + i \ln \left| \frac{1 - \sqrt{1 - \zeta^2}}{1 + \sqrt{1 - \zeta^2}} \right| \right] \quad (2.94)$$

et

$$\delta\theta_{\text{ph}}(q_0) = -2m_5 g \frac{u(q_0)}{q_0^2 \sqrt{1 - \zeta^2}} \left[ \ln \left| \frac{1 - \sqrt{1 - \zeta^2}}{1 + \sqrt{1 - \zeta^2}} \right| - i\pi \right]. \quad (2.95)$$

Les figures 2.4 et 2.5 montrent le comportement de  $\mathbf{Q}_\theta$  dans les différents régimes considérés.

Maintenant que nous avons déterminé la dépendance en fréquence (donc, modulo une transformée de Fourier, la dépendance en temps) de  $\delta\theta_{\text{ph}}$  et  $\mathbf{Q}_\theta$  à  $T = 0$ , il est possible de passer au calcul à température finie. Ce dernier peut être intéressant car il se pourrait que la divergence rencontrée lorsque  $\zeta = 1$  disparaisse à température finie.

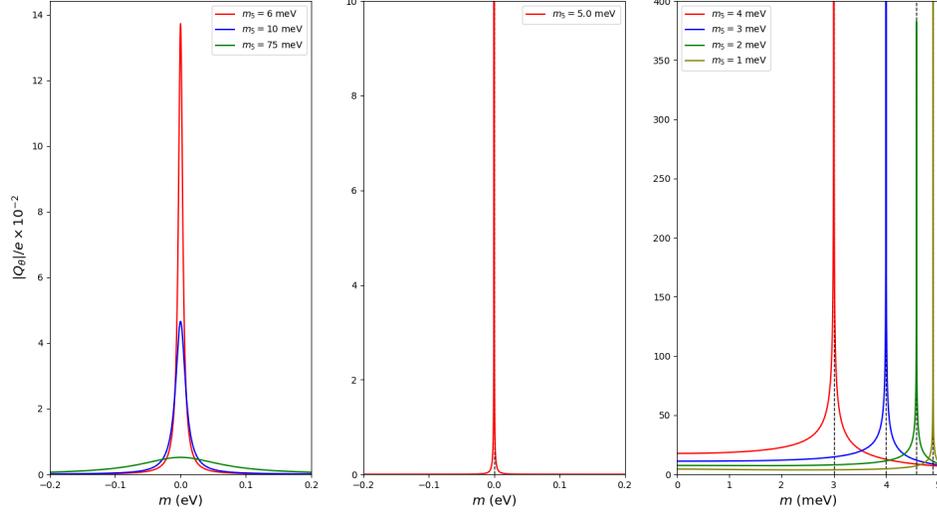
## 2.2.2 Calcul en température finie

Dans cette section, le calcul de  $\mathbf{Q}_\theta$  et  $\delta\theta_{\text{ph}}$  est fait dans la limite de température finie. Dans cette limite, les fréquences de Matsubara sont discrètes. De ce fait, l'intégrale sur la variable  $\kappa$  devient une somme sur  $i\kappa_n$  ;

$$\int \frac{d\kappa}{2\pi} \rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_{i\kappa_n}, \quad (2.96)$$

où  $\kappa_n = \pi(2n + 1)/\beta$  avec  $n \in \mathbb{Z}$  sont les fréquences de Matsubara fermioniques [52, 51]. L'intégrale 2.53 devient ainsi

$$\mathcal{I}_3(v_m) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\kappa_n} \int_{\mathbf{k}} \frac{1}{(\kappa_n^2 + E_{\mathbf{k}}^2) ((\kappa_n - v_m)^2 + E_{\mathbf{k}}^2)^2} \quad (2.97)$$



**FIGURE 2.5** Comportement du ratio entre le module complexe de la charge effective issue des axions et de la charge de l'électron en fonction de la masse de Dirac  $m$  dans le régime des masses arbitraires et à température nulle. Ce comportement est présenté dans le cas où  $m_5 > \hbar q_0/2$  (gauche),  $m_5 = \hbar q_0/2$  (milieu) et  $m_5 < \hbar q_0/2$  (droite). Les lignes en pointillées représente les valeurs de  $m$  pour lesquelles  $\Delta = \hbar q_0$ .

avec  $\int_{\mathbf{k}} = \int d^3k / (2\pi)^3$  et  $v_m = 2\pi m / \beta, m \in \mathbb{Z}$ . Il est possible de montrer via un changement de variable que

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_3(v_m) &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\kappa_n} \int_{\mathbf{k}} \frac{1}{(\kappa_n^2 + E_{\mathbf{k}}^2)^2 ((\kappa_n + v_m)^2 + E_{\mathbf{k}}^2)} \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_{i\kappa_n} \int_{\mathbf{k}} \frac{1}{((i\kappa_n)^2 - E_{\mathbf{k}}^2)^2 ((i\kappa_n + iv_m)^2 - E_{\mathbf{k}}^2)}. \end{aligned} \quad (2.98)$$

Cette dernière forme pour l'intégrale est plus pratique pour les calculs qui sont faits dans cette section. Comme pour la limite de température nulle, les calculs sont faits pour une valeur arbitraire du gap et pour un gap très grand par rapport a la fréquence réelle des phonons.

### 2.2.2.1 Régime des masses arbitraires

Pour pouvoir calculer la somme de Matsubara, il faut considérer l'intégrale suivante dans le plan complexe

$$\oint_C dz \frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1} = \oint_C \frac{dz}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{(z^2 - E_{\mathbf{k}}^2)^2 ((z + iv_m)^2 - E_{\mathbf{k}}^2)}. \quad (2.99)$$

L'intégrande de cette intégrale possède plusieurs pôles dans le plan complexe. En effet, il existe les pôles associés à la fonction  $f_m$ , qui se situent à  $z_{\pm} = \pm E_{\mathbf{k}}$  et  $z_{\pm}^m = \pm E_{\mathbf{k}} - iv_m$ . Le degré de ces pôles dépend de la valeur de  $m$ . Lorsque  $m = 0$ , alors  $z_{\pm}^0 = z_{\pm}$  et ces pôles deviennent des pôles d'ordre 3. Quand  $m \neq 0$ , alors les pôles  $z_{\pm}$  sont des pôles d'ordre 2 et  $z_{\pm}^m$  sont des pôles d'ordre 1. En outre, la distribution de Fermi-Dirac possède des pôles simples à  $z_n = i\pi(2n+1)/\beta = i\kappa_n$ . Tout d'abord le parcours  $C$  est choisi de façon à contenir uniquement les pôles  $z_n$  (voir figure 2.6). Par conséquent, le théorème des résidus permet d'écrire

$$\oint_C dz \frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1} = 2\pi i \sum_{z_n} R\left(\frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1}, z_n\right) \quad (2.100)$$

où  $R(g(z), z_j)$  représente le résidu de la fonction  $g$  au point  $z_j$ . Comme  $z_n$  est un pôle simple, le membre de droite de l'équation ci-dessus est donné par

$$R\left(\frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1}, z_n\right) = \lim_{z \rightarrow z_n} (z - z_n) \frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1} = -\frac{f_m(z_n)}{\beta}. \quad (2.101)$$

Or, il est facile de voir que

$$f_m(z_n) = \frac{1}{((i\kappa_n)^2 - E_{\mathbf{k}}^2)^2 ((i\kappa_n + iv_m)^2 - E_{\mathbf{k}}^2)}, \quad (2.102)$$

ce qui implique que

$$\mathcal{I}_3(v_m) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbf{k}} \oint_C dz \frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1}. \quad (2.103)$$

Maintenant, il est possible de déformer le parcours  $C$  de façon à inclure uniquement les pôles de  $f_m$ . Cette déformation est permise car  $\lim_{R \rightarrow \infty} R f_m(Re^{i\theta}) / (e^{Re^{i\theta}} + 1) = 0$ , et donc intégrer sur deux demi-cercles de rayon infini  $C_1$  et  $C_2$  englobants les pôles de  $f_m$  est équivalent à intégrer sur le parcours  $C$  (voir figure 2.6). Donc,

$$\oint_C dz \frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1} = \oint_{C_1 + C_2} dz \frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1} \quad (2.104)$$

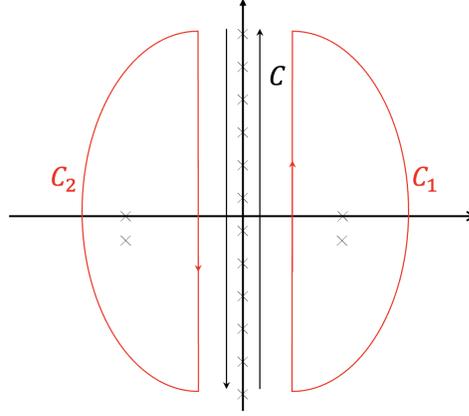
et d'après le théorème des résidus

$$\oint_{C_1 + C_2} dz \frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1} = 2\pi i \begin{cases} I_0 & \text{si } m = 0 \\ I_m & \text{si } m \neq 0 \end{cases}, \quad (2.105)$$

où

$$\begin{aligned} I_0 &= \sum_{j=\pm} R\left(\frac{f_0(z)}{e^{\beta z} + 1}, z_j^0\right) \\ I_m &= \sum_{j=\pm} \left[ R\left(\frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1}, z_j\right) + R\left(\frac{f_m(z)}{e^{\beta z} + 1}, z_j^m\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.106)$$

Les différents résidus peuvent être calculés à l'aide de la formule standard permettant de



**FIGURE 2.6** Les différents parcours d'intégration utilisés pour faire la somme de Matsubara présente à l'équation 2.98. Les croix représentent les pôles de la fonction  $f_m(z)/(e^{\beta z} + 1)$ .

calculer le résidu d'un pôle  $z_0$  d'ordre  $n$  associé à une fonction  $g$

$$R(g(z), z_0) = \frac{1}{n!} \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} \left( (z - z_0)g(z) \right) \quad (2.107)$$

En faisant appel à un logiciel de calcul symbolique (Mathematica) pour calculer les résidus, il est possible de montrer que

$$I_0 = \frac{1}{32E_{\mathbf{k}}^5} \left[ \beta E_{\mathbf{k}} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \left( \beta E_{\mathbf{k}} \tanh \left( \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) + 3 \right) - 6 \tanh \left( \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right] \quad (2.108)$$

$$I_m = \frac{1}{16E_{\mathbf{k}}^3 (4E_{\mathbf{k}}^2 \nu_m + \nu_m^3)^2} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \operatorname{sech} \left( \frac{1}{2} \beta (E_{\mathbf{k}} - i\nu_m) \right) \quad (2.109)$$

$$\times \operatorname{sech} \left( \frac{1}{2} \beta (E_{\mathbf{k}} + i\nu_m) \right) \left[ 16E_{\mathbf{k}}^3 \nu_m \sin(\beta \nu_m) \cosh^2 \left( \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) + \beta E_{\mathbf{k}} \nu_m^2 (4E_{\mathbf{k}}^2 + \nu_m^2) \cos(\beta \nu_m) \right. \\ \left. + \beta E_{\mathbf{k}} \nu_m^2 (4E_{\mathbf{k}}^2 + \nu_m^2) \cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) - \sinh(\beta E_{\mathbf{k}}) \left( \nu_m^2 (12E_{\mathbf{k}}^2 + \nu_m^2) \cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) - 8E_{\mathbf{k}}^4 \right. \right. \\ \left. \left. + 2E_{\mathbf{k}}^2 \nu_m^2 + (8E_{\mathbf{k}}^4 + 10E_{\mathbf{k}}^2 \nu_m^2 + \nu_m^4) \cos(\beta \nu_m) \right) \right].$$

Le résultat de la somme  $I_m$  peut être simplifié en utilisant le fait que  $\nu_m = 2\pi m/\beta$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  car  $\nu_m$  est une fréquence de Matsubara bosonique. Plus précisément, la forme de  $\nu_m$  entraîne que

$$\operatorname{sech} \left( \frac{1}{2} \beta (E_{\mathbf{k}} \pm i\nu_m) \right) = -\operatorname{sech} \left( \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \quad (2.110)$$

$$\cos(\beta \nu_m) = 1$$

$$\sin(\beta \nu_m) = 0,$$

et donc

$$I_m = \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right)}{8E_{\mathbf{k}}^3 (4E_{\mathbf{k}}^2 + v_m^2)^2} \left( \beta E_{\mathbf{k}} (4E_{\mathbf{k}}^2 + v_m^2) - \sinh(\beta E_{\mathbf{k}}) (12E_{\mathbf{k}}^2 + v_m^2) \right). \quad (2.111)$$

La somme  $I_0$  est associée au cas où la fréquence est nulle, et donc au cas où les phonons n'affectent pas le mouvement des atomes du système (nous rappelons que nous considérons que  $|\mathbf{q}| \sim 0$ ). De ce fait, nous ne considérerons pas cette somme par la suite. L'intégrale devient donc

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_3(v_m) &= \int_{\mathbf{k}} \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right)}{8E_{\mathbf{k}}^3 (4E_{\mathbf{k}}^2 + v_m^2)^2} \left( \beta E_{\mathbf{k}} (4E_{\mathbf{k}}^2 + v_m^2) - \sinh(\beta E_{\mathbf{k}}) (12E_{\mathbf{k}}^2 + v_m^2) \right) \\ &= \frac{1}{16\pi^2} \int_{\Delta/2}^{\infty} dE \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta E}{2}\right) \sqrt{E^2 - \Delta^2/4}}{E^2 (4E^2 + v_m^2)^2} \left( \beta E (4E^2 + v_m^2) - \sinh(\beta E) (12E^2 + v_m^2) \right). \end{aligned} \quad (2.112)$$

En faisant ensuite la continuation analytique  $iv_m \rightarrow q_0 + i\eta$ , nous obtenons

$$\mathcal{I}_3(q_0) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{\Delta/2}^{\infty} dE \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{\beta E}{2}\right) \sqrt{E^2 - \Delta^2/4}}{(4E^2 - q_0^2)^2 - i\eta} \left( \frac{\beta}{E} (4E^2 - q_0^2) - \frac{\sinh(\beta E)}{E^2} (12E^2 - q_0^2) \right). \quad (2.113)$$

La limite peut être calculée encore une fois en faisant appel au théorème de Sokhotski-Plemelj. En effet, l'intégrande de l'intégrale ci-dessus possède un seul pôle au sein du parcours d'intégration lorsque  $\zeta < 1$ . Cependant, ce pôle est un pôle double, donc d'après les résultats de l'annexe B, cette intégrale diverge lorsque  $\Delta < \hbar q_0$ . Ce résultat nous dit donc qu'à température finie et pour un matériau vérifiant  $\Delta < \hbar q_0$ , le terme  $S_3^\theta$  diverge, ce qui n'est pas physiquement acceptable. En examinant bien l'intégrale  $\mathcal{I}_3$ , nous pouvons voir que cette divergence (de même que la divergence obtenue à  $T = 0$  lorsque  $\zeta = 1$ ) découle du fait que  $\eta$  est considéré comme étant un paramètre infinitésimal. En effet, ces divergences disparaissent si  $\eta$  est une quantité finie. Or, la limite  $\eta \rightarrow 0^+$  a été choisie car le désordre n'a pas été considéré dans cette théorie. En effet, comme les phonons considérés dans ce travail sont des phonons avec une grande longueur d'onde, alors la fréquence de ces phonons est supérieure au taux de collisions dû aux impuretés, justifiant ainsi le choix  $\eta \rightarrow 0^+$ . Il est donc possible de supposer que le désordre devrait supprimer les divergences observées lorsque  $\zeta = 1$  à  $T = 0$  et lorsque  $\zeta < 1$  à température finie. Malheureusement, la désordre n'a pas pu être inclus dans la théorie présentée dans ce mémoire.

## Chapitre 3

# Effets physiques induits par la quasi-particule axionique

Nous avons démontré dans le chapitre précédent que les phonons peuvent se coupler aux photons comme les axions, entraînant ainsi l'existence d'une quasi-particule axionique issue des modes de vibrations dans les isolants. Nous avons aussi montré que cette quasi-particule peut aussi affecter le comportement des phonons via une contribution non nulle à la charge effective. Il reste cependant à savoir si ces effets peuvent être observables expérimentalement. Dans ce chapitre, nous nous proposons de répondre à cette question. Pour ce faire, nous allons tout d'abord montrer que le champ dynamique des axions issu des phonons  $\delta\theta_{\text{ph}}$  peut moduler l'effet magnétique chiral et les effets magnéto-électriques topologiques au sein du volume et des surfaces de l'isolant, respectivement. Ensuite, nous allons montrer que la charge effective des phonons induite par les axions  $\mathbf{Q}_\theta$  peut avoir un impact sur l'absorption et sur la séparation LO-TO de l'isolant. Enfin, nous utiliserons les propriétés de certains isolants brisant l'inversion du temps et de l'espace et pouvant avoir une phase topologique pour quantifier les effets physiques cités ci-haut et vérifier s'ils peuvent être mesurés expérimentalement. En outre, compte tenu du problème rencontré lors du calcul en température finie, tous les calculs de ce chapitre sont faits dans la limite  $T = 0$ .

### 3.1 Effets magnétique chiral et magnéto-électriques topologiques induits par les phonons

---

Tel que discuté à la section 1.2.4, un terme ayant une structure similaire à celle de l'équation 1.27 au sein de l'action des isolants 3D peut conduire à des effets électrodynamiques non triviaux dans ces matériaux [29]. Mathématiquement, ces effets sont représentés par l'apparition de nouveaux courants et d'une nouvelle densité de charge dans les équations de Maxwell, tous proportionnels au champ  $\theta$ . Nous avons aussi montré que ces effets inhabituels pouvaient être observés à la fois dans des systèmes associés à un champ  $\theta$  dynamique ou statique. De plus, certains travaux ont montré que les magnons pouvaient être à l'origine

de ces comportements exotiques [41, 42]. Dans cette section, nous montrons que les phonons peuvent aussi induire de tels comportements dans les isolants 3D.

L'action dans l'espace de Minkowski représentant la réponse électromagnétique des isolants 3D est donnée par [29, 41, 40]

$$S_{\text{tot}} = S_{\text{em}} + S_{\text{topo}} = -\frac{1}{16\pi} \int d^4x F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{e^2}{16\pi^2\hbar} \int d^4x (\theta + \delta\theta_{\text{ph}}) \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma} F_{\mu\nu}, \quad (3.1)$$

où le résultat de l'équation 2.52 a été inclut. À partir de cette action, il est possible de déterminer les équations de Maxwell modifiées par  $\theta$  et  $\delta\theta_{\text{ph}}$  dans les isolants. En minimisant l'action par rapport au champ  $A_\nu$ , et en imposant que la correction au premier ordre s'annule, i.e.  $\delta S / \delta A_\nu = 0$ , l'équation suivante est obtenue (en unité cgs) :

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + \frac{e^2}{2\pi\hbar} \varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \partial_\mu (\delta\theta_{\text{ph}} F_{\alpha\beta}) = 0. \quad (3.2)$$

Cette équation est équivalente à celle présentée à l'équation 1.50, à l'exception que cette fois ci, le deuxième terme du membre de gauche de l'équation est issu des phonons. En outre, il est supposé dans cette théorie que le terme  $S_{\text{topo}}$  n'affecte pas l'identité de Bianchi<sup>1</sup>. L'équation de Gauss pour le champ électrique et la loi d'Ampère peuvent être déduites à partir de l'équation covariante 3.2 en substituant  $\nu = 0$  et  $\nu = i$ , respectivement, et en utilisant  $F_{0i} = -F^{0i} = E_i$  et  $F_{ij} = F^{ij} = -\varepsilon_{ijk} B_k$ . Ainsi, en unités S.I.<sup>2</sup>, ces équations sont

$$\partial \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_{\text{ph}}^\theta}{\epsilon} \quad (3.3)$$

$$\partial \times \mathbf{B} - \epsilon\mu\partial_t \mathbf{E} = \mu \mathbf{J}_{\text{ph}}^\theta = \mu \left[ \mathbf{J}_{\text{ph}}^{\text{chiral}} + \mathbf{J}_{\text{ph}}^{\text{H}} \right], \quad (3.4)$$

où

$$\rho_{\text{ph}}^\theta = \frac{\delta S_{\text{topo}}}{\delta A_0} = -\frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \partial \cdot (\delta\theta_{\text{ph}} \mathbf{B}) \quad (3.5)$$

$$\mathbf{J}_{\text{ph}}^\theta = \frac{\delta S_{\text{topo}}}{\delta \mathbf{A}} = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \left[ \partial_t (\delta\theta_{\text{ph}} \mathbf{B}) + \partial \times (\delta\theta_{\text{ph}} \mathbf{E}) \right]. \quad (3.6)$$

Le premier terme de l'équation 3.6 est le courant  $\mathbf{J}_{\text{ph}}^{\text{chiral}}$  présent à l'équation 3.4. Ce terme représente un effet magnétique chiral [60] créé par les phonons. En effet, ce terme peut être interprété comme un courant qui se propage dans la direction parallèle au champ magnétique et qui est proportionnel au champ des phonons  $u$ . Techniquement, ce courant est équivalent à un courant de polarisation

$$\mathbf{J}_{\text{ph}}^{\text{chiral}} = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \partial_t (\delta\theta_{\text{ph}} \mathbf{B}) = \partial_t \mathbf{P}_{\text{ph}}^\theta, \quad (3.7)$$

1. Tel que mentionné au chapitre 1.2.3, il existe des articles où il est montré que toutes les équations de Maxwell devraient être modifiées par le champ  $\theta$  [36, 38].

2. Le passage des unités cgs aux unités S.I. se fait en utilisant les remplacements suivants :  $\mathbf{E} \rightarrow \sqrt{4\pi\epsilon}\mathbf{E}$ ,  $e \rightarrow e/\sqrt{4\pi\epsilon}$ ,  $\mathbf{J} \rightarrow \mathbf{J}/\sqrt{4\pi\epsilon}$  et  $\mathbf{B} \rightarrow \sqrt{4\pi/\mu}\mathbf{B}$ .

associé à la polarisation électrique responsable de l'existence de la charge effective  $\mathbf{Q}_\theta \sim \partial \mathbf{P}_{\text{ph}}^\theta / \partial u$  :

$$\mathbf{P}_{\text{ph}}^\theta = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \delta\theta_{\text{ph}} \mathbf{B}. \quad (3.8)$$

Ensuite, le deuxième terme de l'équation 3.6 peut aussi être interprété comme un courant  $\mathbf{J}_{\text{ph}}^{\text{H}}$  crée par une magnétisation parallèle au champ électrique et qui dépend de la coordonnée des phonons. Donc, ce courant est induit par un champ électrique et se propage dans les directions perpendiculaires à ce champ. Il est ainsi possible de conclure que ce courant est en fait la correction des phonons au courant de Hall anormal. Ce résultat peut être relié à l'effet Hall quantique induit par l'interaction électron-phonon dont l'existence théorique a été proposée dans [61]. Mathématiquement, le courant de Hall peut être réécrit comme

$$\mathbf{J}_{\text{ph}}^{\text{H}} = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \boldsymbol{\partial} \times (\delta\theta_{\text{ph}} \mathbf{E}) = \boldsymbol{\partial} \times \mathbf{M}_{\text{ph}}^\theta. \quad (3.9)$$

Cette dernière expression permet de voir que  $\mathbf{J}_{\text{ph}}^{\text{H}}$  peut être interprété comme un courant lié issu de la magnétisation

$$\mathbf{M}_{\text{ph}}^\theta = \frac{e^2}{4\pi^2\hbar} \delta\theta_{\text{ph}} \mathbf{E}. \quad (3.10)$$

Le tenseur de conductivité de Hall induit par les phonons  $\sigma_{ij}^{\text{ph}}$  peut être obtenu via l'équation 3.9, donnant ainsi

$$\sigma_{ij}^{\text{ph}} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \varepsilon_{ikj} \partial_k (\delta\theta_{\text{ph}}). \quad (3.11)$$

De plus, les deux équations 3.8 et 3.10 représentent en fait des effets magnéto-électriques topologiques [29] induits par les phonons.

Enfin, l'équation 3.5 représente une densité de charges liées créée par une polarisation électrique parallèle au champ magnétique et qui dépend encore une fois du champ  $u$ . En effet, l'équation 3.5 peut être réécrite de façon à faire apparaître la polarisation définie à l'équation 3.8

$$\rho_{\text{ph}}^\theta = -\boldsymbol{\partial} \cdot \mathbf{P}_{\text{ph}}^\theta, \quad (3.12)$$

ce qui montre bien que  $\rho_{\text{ph}}^\theta$  est une densité de charges liées. En résumé, les équations 3.3 et 3.4 peuvent s'écrire

$$\boldsymbol{\partial} \cdot \mathbf{D}_{\text{ph}}^\theta = \boldsymbol{\partial} \cdot (\epsilon \mathbf{E} + \mathbf{P}_{\text{ph}}^\theta) = 0 \quad (3.13)$$

$$\boldsymbol{\partial} \times \mathbf{H}_{\text{ph}}^\theta = \boldsymbol{\partial} \times (\mathbf{B}/\mu - \mathbf{M}_{\text{ph}}^\theta) = \partial_t \mathbf{D}_{\text{ph}}^\theta. \quad (3.14)$$

Il existe un autre effet qui peut être associé à la densité de charge 3.5. En effet, en rappelant que  $\delta\theta_{\text{ph}}$  ne dépend pas de l'espace au sein du volume de l'isolant, et en supposant l'existence d'un monopole magnétique  $\boldsymbol{\partial} \cdot \mathbf{B} = \Phi_0 \delta(\mathbf{x})$ , où  $\Phi_0 = h/e$  est le quantum de flux magnétique, il est possible d'intégrer sur le volume l'équation 3.5 ce qui permet d'écrire

$$Q_{\text{ph}}^\theta = -\frac{e^2 \Phi_0}{4\pi^2 \hbar} \delta\theta_{\text{ph}} = -\frac{e}{2\pi} \delta\theta_{\text{ph}}. \quad (3.15)$$

Cette équation permet de déduire que, dans les conditions mentionnées ci-haut, les phonons peuvent induire l'existence d'une charge  $Q_{\text{ph}}^\theta$  se situant au centre du matériau. Cet effet est en fait un effet Witten induit par les phonons. L'effet Witten stipule qu'un monopole magnétique  $\Phi_0$ , se trouvant dans un milieu associé à un champ axionique  $\theta$  non nul, devrait porter une charge électrique  $Q \sim e\theta/2\pi$  [62]. Des travaux théoriques ont aussi montré qu'un tel effet peut exister dans les isolants topologiques [63].

Maintenant, en utilisant les résultats obtenus pour  $\delta\theta_{\text{ph}}$  à la section 2.2, il est possible de connaître la dépendance de ces différents effets en fonction de la coordonnée  $u$ . Dans le cas où le gap de l'isolant est très grand par rapport à la fréquence des phonons, i.e.  $\xi \gg 1$ , et dans la limite  $T \rightarrow 0$ ,  $\delta\theta_{\text{ph}}$  ne dépend que du temps (voir équation 2.68). De ce fait, dans le cas où le champ magnétique est statique, le courant chiral issu des phonons est donné par

$$\mathbf{J}_{\text{ph}}^{\text{chiral}}(t) = -\frac{ge^2}{2\pi h} \frac{m_5}{m^2 + m_\xi^2} \mathbf{B}_0 \partial_t u(t). \quad (3.16)$$

Comme  $\delta\theta_{\text{ph}}$  dépend du temps dans tout le volume du matériau, il est ainsi possible d'affirmer que les phonons optiques associés à une grande longueur d'onde permettent de moduler l'effet magnétique chiral du volume. Subséquemment, compte tenu du fait que l'effet Hall anormale et la densité de charges liées induits par les phonons impliquent uniquement des dérivés spatiales de  $\delta\theta_{\text{ph}}$ , comme le montre les équations 3.9 et 3.5, il est possible de conclure que les modes de phonons considérés dans cette théorie modulent ces effets uniquement à la surface. En effet, tel que mentionné à la section 1.2.3, un invariant topologique ne dépendant pas de l'espace peut acquérir une telle dépendance au niveau des surfaces de l'isolant [29, 40, 64]. Pour illustrer cela, il est judicieux de considérer un isolant de hauteur  $h$  dans la direction  $z$  abritant un  $\delta\theta_{\text{ph}}$  non nul et se situant dans le vide. Dans ces conditions, l'invariant topologique devient dépendant de la coordonnée  $z$  tel que  $\delta\theta_{\text{ph}}(z, t) = \delta\theta_{\text{ph}}(t) \Theta(z) \Theta(h - z)$ , où  $\Theta$  représente la fonction de Heaviside et  $\delta\theta_{\text{ph}}(t)$  est donné à l'équation 2.68. Ainsi

$$\partial_i \delta\theta_{\text{ph}}(z, t) = \delta_{iz} \delta\theta_{\text{ph}}(t) [\delta(z) - \delta(h - z)], \quad (3.17)$$

$\delta(z)$  étant un delta de Dirac et  $\delta_{ij}$  un delta de Kronecker. De la sorte, dans le cas où le champ magnétique est statique (donc lorsque  $\partial \times \mathbf{E} = \mathbf{0}$ ), le tenseur de conductivité de Hall induit par les phonons est donné par

$$\sigma_{yx}^{\text{ph}}(z, t) = -\frac{ge^2}{2\pi h} \frac{m_5}{m^2 + m_\xi^2} u(t) [\delta(z) - \delta(h - z)] \quad (3.18)$$

et  $\sigma_{xy}^{\text{ph}} = -\sigma_{yx}^{\text{ph}}$ . La présence des deltas de Dirac centrés en 0 et  $h$  montre bien que les courants de Hall sont localisés au niveau des surfaces  $z = 0$  et  $z = h$  qui séparent le matériau du vide. De la même façon, un champ magnétique pourra entraîner une densité de charge liées

$$\rho_{\text{ph}}^\theta(z, t) = \frac{ge^2}{2\pi h} B_0 \cos(\varphi) \frac{m_5}{m^2 + m_\xi^2} u(t) [\delta(z) - \delta(h - z)], \quad (3.19)$$

où  $\varphi$  est l'angle entre  $\mathbf{B}_0$  et le vecteur unitaire perpendiculaire à la surface. Ce résultat permet aussi de voir que les densités de charges sont localisées au niveau des surfaces  $z = 0$  et

$z = h$  et sont de signes opposés. À la surface  $z = 0$ , le deuxième terme de 3.19 s'annule et donc la densité de charge est positive, alors qu'à  $z = h$ , le premier terme de 3.19 s'annule et la densité de charge est négative au niveau de cette surface.

À noter que, dans le cas considéré ci-dessus, l'entière des effets présentés sont proportionnels à la masse axiale  $m_5$  quelque soit la valeur de la masse de Dirac  $m$ . Ainsi, ces effets induits par les phonons peuvent être observés uniquement dans des isolants qui brisent l'inversion du temps et de l'espace dans le volume. Des exemples de matériaux pouvant vérifier cette dernière contrainte sont le  $\text{Mn}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$  [65] et le  $\text{Mn}_2\text{Bi}_6\text{Te}_{11}$  [66, 67]. Néanmoins, les propriétés phononiques de ces matériaux n'ont pas encore été explorées, rendant la valeur du potentiel de déformation  $g$  de ces matériaux inconnue. De ce fait, pour pouvoir savoir si les effets proposés dans ce chapitre peuvent être mesurés expérimentalement, nous choisissons  $g \approx \delta D/a$ , avec  $\delta D \sim 10$  eV et  $a \sim 1$  nm. En réalité, ces valeurs sont inspirées des valeurs associées à l'isolant  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  [68], qui est un matériau assez proche de ceux mentionnés ci-haut. Ensuite, pour la coordonnée des phonons, il est possible d'écrire  $u \sim \sqrt{\langle x^2 \rangle} \sim \sqrt{\hbar/(M_c q_0)} \sim 8 \times 10^{-13}$  m dans la limite  $\hbar q_0 \gg k_B T$ , où  $M_c \sim 10^{-23}$  kg représente la masse de la cellule unité. Donc, pour  $m = 0$  et  $m_5 = 100$  meV (ces valeurs permettent d'être dans le régime  $\xi \gg 1$  et peuvent être atteintes expérimentalement pour les deux matériaux mentionnés [65, 66]), le coefficient numérique est donné par

$$\frac{\sigma_{yx}^{\text{ph}}(h)}{e^2/h} = \frac{g}{2\pi} \frac{um_5}{m^2 + m_5^2} \sim 3 \times 10^{-2}. \quad (3.20)$$

Ce résultat numérique permet de conclure que la conductivité de Hall induite par les phonons est inférieure au quantum de la conductivité de Hall  $e^2/h$ , mais que l'ordre de grandeur n'est pas très petit.

Il est aussi possible de penser à d'autres façons d'observer les effets induits par la polarisation 3.8 via notamment des effets impliquant  $\mathbf{Q}_\theta$ . La section suivante présente certaines conséquences de cet charge effective non triviale.

## 3.2 Effets créés par la charge effective induite par le champ des axions

---

Précédemment, nous avons montré les potentiels effets physiques résultants de l'existence de  $\delta\theta_{\text{ph}}$ . Nous pouvons donc maintenant passer aux conséquences physiques de l'existence de  $\mathbf{Q}_\theta$ , et donc accessoirement des conséquences physiques de la polarisation issue des phonons et de  $\delta\theta_{\text{ph}}$  (cf. équation 3.8) autres que l'effet magnéto-électrique et magnétique chiral mentionnés à la section précédente. En effet, en général la charge effective des phonons joue un rôle important au niveau de l'absorption infrarouge (IR) du matériau et de la séparation LO-TO [45]. Nous allons ainsi étudier les conséquences de  $\mathbf{Q}_\theta$  sur ces deux effets physiques. Nous commencerons cependant par déterminer comment la constante diélectrique du matériau est affectée par les phonons. Cette étape est nécessaire car si la correction des phonons à la constante diélectrique est trop importante, cette dernière pourrait rendre l'observation de  $\mathbf{Q}_\theta$  impossible.

### 3.2.1 Écrantage dans les isolants

Avant de rentrer dans les détails du calcul de l'absorption IR et de la séparation LO-TO, il est nécessaire de connaître l'impact des phonons sur la constante diélectrique. Effectivement, le coefficient d'absorption et de séparation LO-TO sont des effets qui dépendent tous deux de  $|\mathbf{Q}|^2/\epsilon_\infty$  où  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^{(0)} + \mathbf{Q}_\theta$  est la charge effective totale et  $\epsilon_\infty$  représente l'écrantage créé par les électrons qui se situent loin de l'énergie de Fermi. L'objectif de cette section est de calculer cette dernière quantité en présence des phonons et de voir si elle admet un point où elle diverge. Une divergence de  $\epsilon_\infty$  entraînerait  $|\mathbf{Q}|^2/\epsilon_\infty \rightarrow 0$ , et donc les effets de la charge effective issue des axions (ou la charge effective normale) ne serait pas observable expérimentalement.

Lorsque électrons proches du niveau de Fermi sont considérés,  $\epsilon_\infty$  devient une quantité dynamique et est donnée par

$$\epsilon_\infty \rightarrow \epsilon_\infty \epsilon(\mathbf{q}, q_0), \quad (3.21)$$

avec

$$\epsilon(\mathbf{q}, q_0) = 1 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty \mathbf{q}^2} \Pi(\mathbf{q}, q_0). \quad (3.22)$$

Ici  $\Pi$  est la fonction de polarisation qui s'écrit

$$\Pi(\mathbf{q}, q_0) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{n, n'} \int_{\mathbf{k}} |\langle \mathbf{k}, n | \mathbf{k} - \mathbf{q}, n' \rangle|^2 \frac{f_{\mathbf{k}, n} - f_{\mathbf{k} - \mathbf{q}, n'}}{E_{\mathbf{k}, n} - E_{\mathbf{k} - \mathbf{q}, n'} + q_0 + i\eta}, \quad (3.23)$$

où  $n$  est l'indice associé aux bandes,  $f_{\mathbf{k}, n}(E_{\mathbf{k}, n})$  est la distribution de Fermi Dirac (énergie) de la bande  $n$  au vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  et  $|\mathbf{k}, n\rangle$  est le vecteur propre de l'hamiltonien 2.8 associé à l'énergie  $E_{\mathbf{k}, n}$  [52]. La forme de la fonction de polarisation peut être déterminée via la fonction de partition du système en étudiant les corrections issues du deuxième ordre en théorie des perturbations. En d'autres mots,  $\Pi$  peut être calculée en suivant la démarche présentée à la section 2.1.2 et en s'intéressant à  $S_2$  (voir l'équation 2.26). Cependant, ces calculs ne sont pas faits ici car l'objectif de cette section n'est pas de redémontrer l'équation 3.23, mais plutôt de connaître la dépendance exacte de  $\Pi$  en  $\mathbf{q}$  et  $q_0$ . Il est important de garder la dépendance en  $\mathbf{q}$  de la fonction de polarisation. En effet, malgré le fait que les modes de phonons considérés dans ce mémoire sont des modes vérifiant  $|\mathbf{q}| \sim 0$ , la dépendance en  $\mathbf{q}$  de  $\Pi$  doit être déterminée pour pouvoir annuler le facteur  $1/|\mathbf{q}|^2$  présent à l'équation 3.22. En utilisant le développement de Taylor de

$$|\mathbf{k} - \mathbf{q}, n\rangle = |\mathbf{k}, n\rangle - \mathbf{q} \cdot \partial_{\mathbf{k}} |\mathbf{k} - \mathbf{q}, n\rangle \Big|_{\mathbf{q}=0} + \dots, \quad (3.24)$$

qui implique

$$\langle \mathbf{k}, n | \mathbf{k} - \mathbf{q}, n' \rangle = \delta_{n, n'} - i\mathbf{q} \cdot \mathcal{A}^{nn'} + \dots \quad (3.25)$$

où  $\mathcal{A}_j^{nn'} = -i \langle \mathbf{k}, n | \partial / \partial k_j | \mathbf{k}, n' \rangle$  est la connexion de Berry non abélienne. Cette dernière équation permet de voir que  $\Pi(\mathbf{0}, q_0) = 0$ , ce qui explique aussi pourquoi il est important de déterminer la dépendance de  $\Pi$  en  $\mathbf{q}$ . Par conséquent, l'équation 3.23 devient

$$\Pi(\mathbf{q}, q_0) \approx - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{nn'} \int_{\mathbf{k}} \left| \mathbf{q} \cdot \mathcal{A}^{nn'} \right|^2 \frac{f_{\mathbf{k}, n} - f_{\mathbf{k}, n'}}{E_{\mathbf{k}, n} - E_{\mathbf{k}, n'} + q_0 + i\eta}, \quad (3.26)$$

où la fraction a été évaluée à  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  car l'intégrande possède déjà une dépendance en  $|\mathbf{q}|^2$ , venant de l'élément de matrice, qui devrait permettre d'annuler la dépendance en  $\mathbf{q}$  de l'équation 3.22.

Les états propres de l'hamiltonien 2.8 peuvent être calculés en écrivant  $h_0$  sous forme matricielle et en le diagonalisant. Il a déjà été discuté à la section 2.1.1 que  $h_0$  possède deux énergies propres, présentées à l'équation 2.12, et que ces énergies sont deux doublement dégénérées. De ce fait, chaque énergie possède deux vecteurs propres. Ces derniers sont donnés par

$$\begin{aligned}
-E_{\mathbf{k}} : |\mathbf{k}, 1\rangle &= \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \sqrt{\frac{m^2 + m_5^2}{2}} \left( \frac{k_x - ik_y}{m + im_5}, -\frac{k_z + E_{\mathbf{k}}}{m + im_5}, 0, 1 \right)^T \\
|\mathbf{k}, 2\rangle &= \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \sqrt{\frac{m^2 + m_5^2}{2}} \left( \frac{k_z - E_{\mathbf{k}}}{m + im_5}, \frac{k_x + ik_y}{m + im_5}, 1, 0 \right)^T \\
+E_{\mathbf{k}} : |\mathbf{k}, 3\rangle &= \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \sqrt{\frac{m^2 + m_5^2}{2}} \left( \frac{k_x - ik_y}{m + im_5}, -\frac{k_z - E_{\mathbf{k}}}{m + im_5}, 0, 1 \right)^T \\
|\mathbf{k}, 4\rangle &= \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \sqrt{\frac{m^2 + m_5^2}{2}} \left( \frac{k_z + E_{\mathbf{k}}}{m + im_5}, \frac{k_x + ik_y}{m + im_5}, 1, 0 \right)^T.
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Dans la limite de température nulle,  $f_{\mathbf{k},1} = f_{\mathbf{k},2} = 1$  et  $f_{\mathbf{k},3} = f_{\mathbf{k},4} = 0$ . Il en résulte que

$$\Pi(\mathbf{q}, q_0) = - \sum_{n=\pm} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{\mathbf{k}} \frac{q_j^2}{2E_{\mathbf{k}} + nq_0 \pm + ni\eta} \left( |\mathcal{A}_j^{31}|^2 + |\mathcal{A}_j^{32}|^2 + |\mathcal{A}_j^{41}|^2 + |\mathcal{A}_j^{42}|^2 \right). \tag{3.28}$$

Ensuite, il est possible de montrer que

$$\begin{aligned}
\partial_{k_j} |\mathbf{k}, 1\rangle &= -\frac{k_j}{E_{\mathbf{k}}^2} |\mathbf{k}, 1\rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \sqrt{\frac{m^2 + m_5^2}{2}} \frac{1}{m + im_5} \left( \delta_{xj} - i\delta_{yj}, -\delta_{zj} - \frac{k_j}{E_{\mathbf{k}}}, 0, 0 \right)^T \\
\partial_{k_j} |\mathbf{k}, 2\rangle &= -\frac{k_j}{E_{\mathbf{k}}^2} |\mathbf{k}, 2\rangle + \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \sqrt{\frac{m^2 + m_5^2}{2}} \frac{1}{m + im_5} \left( \delta_{zj} - \frac{k_j}{E_{\mathbf{k}}}, \delta_{xj} + i\delta_{yj}, 0, 0 \right)^T,
\end{aligned} \tag{3.29}$$

où l'identité  $\partial_{k_j} (1/E_{\mathbf{k}}) = -k_j/E_{\mathbf{k}}^3$  a été utilisée. Ceci permet de calculer les composantes de

la connexion de Berry non abélienne intervenant dans la fonction de polarisation :

$$\begin{aligned}
|\mathcal{A}_j^{31}|^2 &= \frac{1}{4E_{\mathbf{k}}^4} \left( (k_y\delta_{xj} - k_x\delta_{yj})^2 + \frac{(k_zk_j - E_{\mathbf{k}}^2\delta_{zj})^2}{E_{\mathbf{k}}^2} \right) \\
|\mathcal{A}_j^{42}|^2 &= \frac{1}{4E_{\mathbf{k}}^4} \left( (k_y\delta_{xj} - k_x\delta_{yj})^2 + \frac{(k_zk_j - E_{\mathbf{k}}^2\delta_{zj})^2}{E_{\mathbf{k}}^2} \right) \\
|\mathcal{A}_j^{32}|^2 &= \frac{1}{4E_{\mathbf{k}}^4} \left( \left( k_x\delta_{zj} - k_z\delta_{xj} + \frac{E_{\mathbf{k}}^2\delta_{xj} - k_xk_j}{E_{\mathbf{k}}} \right)^2 + \left( k_y\delta_{zj} - k_z\delta_{yj} + \frac{E_{\mathbf{k}}^2\delta_{yj} - k_yk_j}{E_{\mathbf{k}}} \right)^2 \right) \\
|\mathcal{A}_j^{41}|^2 &= \frac{1}{4E_{\mathbf{k}}^4} \left( \left( k_x\delta_{zj} - k_z\delta_{xj} - \frac{E_{\mathbf{k}}^2\delta_{xj} - k_xk_j}{E_{\mathbf{k}}} \right)^2 + \left( k_y\delta_{zj} - k_z\delta_{yj} - \frac{E_{\mathbf{k}}^2\delta_{yj} - k_yk_j}{E_{\mathbf{k}}} \right)^2 \right).
\end{aligned} \tag{3.30}$$

En insérant ces éléments de matrice dans l'équation 3.28, la fonction de polarisation est donnée par

$$\Pi(\mathbf{q}, q_0) = -\frac{\mathbf{q}^2}{3\pi^2} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{\Delta/2}^{\infty} dE \frac{\sqrt{E^2 - \Delta^2/4}}{E^5(E + q_0/2)} \left( 4E^4 - \frac{E^2\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^4}{16} \right) \frac{1}{E - q_0/2 - i\eta}. \tag{3.31}$$

Comme pour l'intégrale présentée à l'équation 2.79, le calcul de l'intégrale ci dessus dépend de la valeur de  $\zeta = \Delta/\hbar q_0$ . Lorsque  $\zeta \geq 1$ , aucun pôle de l'intégrande ne se trouve dans le parcours d'intégration, et donc dans ce cas la limite est triviale. Tandis que lorsque  $\zeta < 1$ , le pôle qui se situe à  $E = q_0/2$  appartient au parcours d'intégration, et il faut donc faire appel au théorème de Sokhtoski-Plemelj pour pouvoir calculer la limite. À la différence de l'intégrale de l'équation 2.79, ici l'intégrande ne possède pas de pôle d'ordre 2 lorsque  $\zeta = 1$ , ce qui fait que la fonction de polarisation ne diverge pas dans ce cas, et peut donc être calculée. L'intégrale peut maintenant être déterminée pour les différents cas.

(i) **Cas  $\zeta \geq 1$  :** Ici, aucun pôle de l'intégrande ne se trouve sur le parcours d'intégration. De ce fait, la limite peut être calculée, donnant ainsi

$$\Pi(\mathbf{q}, q_0) = -\frac{\mathbf{q}^2}{3\pi^2} \int_{\Delta/2}^{\infty} dE \frac{\sqrt{E^2 - \Delta^2/4}}{E^5(E^2 - q_0^2/4)} \left( 4E^4 - \frac{E^2\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^4}{16} \right). \tag{3.32}$$

En utilisant les résultats de l'annexe A, il es possible demontrer que

$$\Pi(\mathbf{q}, q_0) = -\frac{\mathbf{q}^2}{6\pi} \left( R(0) + R(q_0/2) + R(-q_0/2) \right), \tag{3.33}$$

$R(z_i)$  étant le résidu de l'intégrande au pôle  $z_i = 0, \pm q_0/2$ . Le résultat de l'annexe A peut être utilisé car l'intégrande de l'équation 3.32 tend vers 0 plus vite que  $1/E^2$ . À noter que  $z = 0$  est un pôle d'ordre 5 et  $z = \pm q_0/2$  sont des pôles simples. Enfin, l'équation 2.107 permet de calculer les différents résidus donnant comme résultat

$$\Pi(\mathbf{q}, q_0) = \frac{\mathbf{q}^2}{24\pi q_0^6} \left( 8 \left( \Delta^4 + 4q_0^4 - 2\Delta^2 q_0^2 \right) \sqrt{\Delta^2 - q_0^2} + 20\Delta^3 q_0^2 - 8\Delta^5 - 39\Delta q_0^4 \right). \tag{3.34}$$

(ii) **Cas  $\xi < 1$**  : Dans ce cas, le théorème de Sokhotski-Plemelj donne

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{q}, q_0) = -\frac{\mathbf{q}^2}{3\pi^2} \left[ \mathfrak{P} \int_{\Delta/2}^{\infty} dE \frac{\sqrt{E^2 - \Delta^2/4}}{E^5(E^2 - q_0^2/4)} \left( 4E^4 - \frac{E^2\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^4}{16} \right) \right. \\ \left. + i\pi \int_{\Delta/2}^{\infty} dE \frac{\sqrt{E^2 - \Delta^2/4}}{E^5(E + q_0/2)} \left( 4E^4 - \frac{E^2\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^4}{16} \right) \delta(E - q_0/2) \right]. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Comme  $q_0 > \Delta$  (car  $\xi < 1$ ), alors il est possible d'évaluer la partie imaginaire. Ensuite, l'utilisation des résultats de l'annexe A permet de déterminer

$$\Pi(\mathbf{q}, q_0) = \frac{\mathbf{q}^2}{24\pi q_0^6} \left[ 20\Delta^3 q_0^2 - 8\Delta^5 - 39\Delta q_0^4 - i\sqrt{q_0^2 - \Delta^2} \left( 32q_0^4 - 16q_0^2\Delta^2 + \frac{q_0^4}{2} \right) \right]. \quad (3.36)$$

Il est important d'observer que la partie réelle de  $\Pi$  est continue même lorsque  $\xi = 1$ .

Finalement, le calcul de la fonction de polarisation montre que cette dernière n'admet aucun point où elle diverge. Par conséquent, les effets de la charge effective issue des axions sur l'absorption IR et la séparation LO-TO peuvent être, à priori, observés car ils ne sont pas fortement supprimés par l'écrantage. Nous pouvons donc passer au calcul du coefficient d'absorption et de la différence LO-TO.

### 3.2.2 Absorption IR induite par le champ des axions

À la section 2.1.4, nous avons démontré que le champ des axions peut induire un terme dans l'équation du mouvement des phonons (équation 2.59) qui se comporte comme une charge effective. De plus, suivant la discussion faite à la section 1.3, nous savons que le membre de droite de l'équation 2.59 peut contribuer à l'absorption du matériau. Le but de cette section est de déterminer l'impact de  $\mathbf{Q}_\theta$  sur l'absorption optique des isolants brisant l'inversion du temps et de l'espace.

L'absorption  $\mathbb{A}$  d'un matériau est donnée par

$$\mathbb{A}(\omega) = \text{Im}(\chi(\omega)) = \frac{|\mathbf{Q}(q_0)|^2}{4\pi\epsilon_o\epsilon_\infty M_c \mathcal{V}_c} \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(q_0)(q_0^2 - \omega^2)} \right), \quad (3.37)$$

où  $\chi$  représente la susceptibilité du réseau ionique associé à un mode de phonon optique,  $M_c(\mathcal{V}_c)$  est la masse (volume) de la cellule unité et  $\omega$  est la fréquence des photons [45]. À noter que l'absorption est une quantité sans dimension. Dans la configuration où le matériau vérifie que  $\xi > 1$ , alors d'après l'équation 3.34 la fonction  $\epsilon$  est purement réelle pour tout  $q_0$ . Donc pour avoir une susceptibilité possédant une partie imaginaire non nulle, il faut utiliser le remplacement  $\omega \rightarrow \omega + i\nu_0$  où  $\nu_0$  est la probabilité de désintégration d'un phonon optique de vecteur d'onde nul par unité de temps. Cette probabilité vérifie la condition  $\nu_0/q_0 \sim 0,01$  [45], ce qui entraîne que les termes d'ordres  $\nu_0^2$  sont négligés. Enfin,

en considérant exclusivement la contribution axionique à la charge effective, l'absorption devient

$$\mathbb{A}_\theta(\omega) \approx \frac{|\mathbf{Q}_\theta(q_0)|^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_\infty\epsilon(q_0)M_c\mathcal{V}_c} \frac{2\omega\nu_0}{(\omega^2 - q_0^2)^2 + 4\omega^2\nu_0^2}. \quad (3.38)$$

La valeur numérique de  $\nu_0$  fait que cette formule possède la forme d'une Lorentzienne pour tout  $\omega$ . La largeur à mi-hauteur de cette fonction est donnée par  $2\omega\nu_0$  et le maximum est atteint lorsque  $\omega = q_0$ . Pour  $m = 0$  et  $m_5 = 100$  meV, la charge effective induite par le champ des axions est donnée approximativement par  $|\mathbf{Q}_\theta| \sim 0,4e$ . De plus, avec  $\epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12}$  Fm<sup>-1</sup>,  $\mathcal{V}_c \sim 10^{-27}$  m<sup>3</sup> et  $\epsilon_\infty \sim 40$  (encore une fois cette valeur est inspirée de la valeur de  $\epsilon_\infty$  pour le Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> [68]) il est possible de calculer le maximum de l'absorption

$$\max(\mathbb{A}_\theta(\omega)) = \mathbb{A}_\theta(q_0) = \frac{|\mathbf{Q}_\theta(q_0)|^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_\infty\epsilon(q_0)M_c\mathcal{V}_cq_0\nu_0} \sim 2 \times 10^{-2}. \quad (3.39)$$

Dans les matériaux ordinaires où  $\epsilon \sim 1$ ,  $\epsilon_\infty \sim 10$  et  $Q^{(0)} \sim e$ , le maximum d'absorption est donné par  $\max(\mathbb{A}(\omega)) \sim 1,2 \times 10^{-6}$ . Le fait que  $\mathbb{A}_\theta(q_0) > \mathbb{A}(q_0)$  implique que la contribution des phonons axioniques à l'absorption des matériaux peut être mesurée. Lorsque  $\xi = 1$ , la fonction  $\epsilon$  reste purement réelle. Cependant, comme discuté à la section 2.2.1.2, la charge effective induite par les axions diverge. Par conséquent, selon l'équation 3.37, lorsque  $\Delta = \hbar q_0$ , le matériau devrait absorber l'entièreté des photons incidents. Cette observation devrait disparaître si le désordre est inclus dans la théorie. Ensuite, dans le cas où  $\xi < 1$ , la fonction  $\epsilon$  acquiert une partie imaginaire comme le suggère l'équation 3.36. En écrivant  $\epsilon = \text{Re}(\epsilon) + i \text{Im}(\epsilon)$ , l'absorption est donnée par

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_\theta(\omega) &\approx \frac{|\mathbf{Q}_\theta(q_0)|^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_\infty\epsilon(q_0)M_c\mathcal{V}_c} \\ &\times \frac{2\omega\nu_0\text{Re}(\epsilon) - \text{Im}(\epsilon)(q_0^2 - \omega^2)}{(\text{Re}(\epsilon)(q_0^2 - \omega^2) + 2\omega\nu_0\text{Im}(\epsilon))^2 + (\text{Im}(\epsilon)(q_0^2 - \omega^2) - 2\omega\nu_0\text{Re}(\epsilon))^2}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

L'ajout de la partie imaginaire de  $\epsilon$  ne crée pas de nouveaux pics d'absorptions. En effet la parti imaginaire ne fait que modifier l'allure de l'absorption autour du pic associé à  $\omega = q_0$ . Donc le maximum de l'absorption est aussi donné par 3.39.

### 3.2.3 Séparation LO-TO induite par le champ des axions

La charge effective des phonons joue aussi un rôle important au niveau de la séparation dite "LO-TO". En effet, dans certains matériaux, la dégénérescence des phonons optiques transverses (TO) et optiques longitudinaux (LO) à vecteur d'onde nul disparaît, induisant ainsi que l'énergie des modes LO soit supérieures à celle des modes TO (voir la section 1.3.2). De ce fait, suivant les résultats de ce mémoire, il est possible de se demander si  $\mathbf{Q}_\theta$  peut aussi avoir un impact sur cet effet physique.

Mathématiquement, la différence d'énergie entre les modes LO et TO est donnée par

$$q_{0,L}^2 = q_{0,T}^2 + \frac{|\mathbf{Q}(q_0)|^2}{\epsilon_0\epsilon_\infty\epsilon(q_0)M_c\mathcal{V}_c}, \quad (3.41)$$

où  $q_{0,L}$  ( $q_{0,T}$ ) est la fréquence du mode optique longitudinal (transverse) [46, 47]. Dans les cas considérés dans ce travail, les fréquences sont de l'ordre de l'infrarouge, donc il est possible de considérer que

$$q_{0,T}^2 \gg \frac{|\mathbf{Q}(q_0)|^2}{\epsilon_0 \epsilon_\infty \epsilon(q_0) M_c \mathcal{V}_c}, \quad (3.42)$$

ce qui permet d'écrire

$$q_{0,L} - q_{0,T} \approx \Delta^{\text{LO-TO}} = \frac{|\mathbf{Q}(q_0)|^2}{2\epsilon_0 \epsilon_\infty \epsilon(q_0) M_c \mathcal{V}_c q_{0,T}}. \quad (3.43)$$

Cette dernière équation représente la séparation LO-TO. En gardant uniquement la contribution axionique à la charge effective, il est possible de déterminer la séparation LO-TO induite par le champ des axions

$$\Delta_\theta^{\text{LO-TO}} = \frac{|\mathbf{Q}_\theta(q_0)|^2}{2\epsilon_0 \epsilon_\infty \epsilon(q_0) M_c \mathcal{V}_c q_{0,T}}. \quad (3.44)$$

Ensuite, en gardant les mêmes valeurs numériques que celles utilisées lors du calcul de l'absorption, et en prenant  $\hbar q_{0,T} \sim 10$  meV, il est possible de calculer la valeur numérique du gap d'énergie entre les modes LO et TO donnant ainsi (les valeurs numériques considérées sont celles utilisées lors du calcul de  $\max(\mathcal{A}_\theta)$ )

$$\Delta_\theta^{\text{LO-TO}} \sim 1,2 \times 10^7 \text{ s}^{-1}. \quad (3.45)$$

La limite expérimentale de mesure de la séparation LO-TO est d'environ  $3 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  [69]. Donc, la séparation LO-TO induite par les axions est trop petite pour être mesurée. Cependant, en écrivant  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^{(0)} + \mathbf{Q}_\theta$ , il est possible d'avoir un autre terme où le champ des axions peut entrer en jeu :

$$\Delta_{\theta-0}^{\text{LO-TO}} = \frac{\mathbf{Q}^{(0)} \cdot \mathbf{Q}_\theta^*}{2\epsilon_0 \epsilon_\infty M_c \mathcal{V}_c q_{0,T}}. \quad (3.46)$$

En considérant que  $Q^{(0)} \sim e$ , il est possible de déterminer la valeur minimale de  $Q_\theta$  nécessaire pour mesurer la séparation LO-TO. En écrivant  $Q^{(0)} + Q_\theta \rightarrow Q^{(0)} + Q_\theta + \delta Q$ ,  $q_{0,L} \rightarrow q_{0,L} + \delta q_0$  et  $q_{0,T} \rightarrow q_{0,T} + \delta q_0$ , où  $\delta Q$  ( $\delta q_0$ ) est l'incertitude sur la charge effective (fréquence), il est possible de trouver

$$\delta Q = \frac{\epsilon_0 \epsilon_\infty M_c \mathcal{V}_c}{Q^{(0)} + Q_\theta} (q_{0,L} - q_{0,T}) \delta q_0. \quad (3.47)$$

Ensuite, en prenant  $\delta q_0 \sim 1,5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  et  $q_{0,L} - q_{0,T} \sim 2,2 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$  [69], il est possible d'avoir

$$\delta Q \sim 0,02e. \quad (3.48)$$

Ainsi, ce dernier résultat permet de conclure que  $\Delta_{\theta-0}^{\text{LO-TO}}$  ne peut pas être mesuré expérimentalement. Encore une fois, les résultats de la section 2.2.1.2 montrent que la séparation LO-TO est infinie lorsque  $\xi = 1$ . Ceci se traduit par le fait d'avoir des modes optiques longitudinaux ayant une énergie infiniment plus grande que celle des modes transverses. Néanmoins, l'inclusion du désordre devrait régler ce problème.

# Conclusion

Dans ce mémoire, une théorie permettant d'étudier les interactions entre les vibrations du réseau et le champ axionique dans les isolants topologiques tridimensionnels a été présentée. Le principal objectif de cette théorie était de voir si les vibrations du réseau peuvent affecter l'invariant topologique associé aux isolants 3D et, le cas échéant, déterminer si ce comportement peut être observé expérimentalement. Pour ce faire, un calcul perturbatif a été fait pour démontrer que le couplage entre les électrons du matériau et les vibrations du réseau peut induire un terme topologique au sein de l'action du système considéré. Par la suite, les conséquences physiques de ce nouveau terme ont été analysées. Les matériaux considérés dans cette étude sont des isolants brisant à la fois la symétrie d'inversion du temps et de l'espace au niveau de leur volume, mais préservant le produit de ces deux symétries. De plus, uniquement les modes de phonons possédant une très grande longueur d'onde ont été considérés.

Le premier chapitre a permis tout d'abord d'introduire certains concepts clés de la topologie et de leurs applications à la matière condensée. En effet, la phase de Berry et son lien avec certains invariants topologiques pertinents en matière condensée y a été présentée. Ensuite, les isolants topologiques tridimensionnels et les effets physiques associés à ces matériaux non triviaux ont été décrits. L'emphase a été mise sur les conséquences physiques de l'invariant  $\theta$ . En outre, une classe d'isolant pouvant abriter un invariant  $\theta$  dynamique a été présentée. Enfin, l'impact des phonons sur les isolants topologiques a été mis en évidence. Ceci nous a permis de démontrer l'existence d'un maximum dans la charge effective des phonons induite par le champs des axions lorsque le matériau est proche d'une transition de phase topologique.

Le deuxième chapitre regroupe l'ensemble des calculs effectués dans l'optique de répondre à la problématique de ce projet. Plus précisément, la fonction de partition totale du système a été écrite pour pouvoir intégrer sur le champ associé aux électrons. L'étude perturbative a ensuite permis de découvrir que les phonons peuvent se coupler aux photons de la même façon que les axions, faisant ainsi de ces phonons des quasi-particules axioniques. De plus, ce nouveau terme dans l'action du système montre que les phonons peuvent induire un champ  $\theta$  dynamique. L'impact sur le comportement des phonons de ce nouveau champ a ensuite été exploré, révélant l'existence d'une charge effective des phonons induite par le champ axionique dynamique. La dépendance en fréquence et température de ces nouvelles quantités a finalement été calculée.

Au dernier chapitre, la discussion s'est concentrée sur les effets physiques créés par le champ  $\theta$  dynamique induit par les phonons et la charge effective induite par le champ axionique dynamique. Il a été démontré que les phonons optiques peuvent moduler l'effet magnétique chiral l'effet Witten au sein du volume du matériau. De plus, ces modes de phonons peuvent aussi induire des effets magnéto-électriques topologiques au niveau des surfaces de l'isolant. Ensuite, les effets physiques de la charge effective induite par le champ axionique ont été étudiés. Il a notamment été montré que cette nouvelle charge effective peut avoir un impact sur l'absorption et sur la séparation LO-TO du matériau, et que ces effets peuvent à priori être mesurés dans des matériaux réels. Ces deux derniers effets représentent de nouvelles façons de détecter la topologie des isolants en utilisant des phonons.

Ce projet a donc permis de répondre aux principales questions qui ont été posées plus haut. Cependant, ce travail peut être perfectionné. En effet, il est tout d'abord possible de refaire la théorie présentée au chapitre 2 en incluant certains comportements qui ont été négligés dans ce projet tel que l'effet Zeeman, les niveaux de Landau ou encore les interactions électrons-électrons. De plus, il est possible de se demander quel serait l'effet du désordre sur les effets présentés dans ce mémoire. Inclure le désordre permettrait de supprimer les divergences observées à température finie ou lorsque  $\Delta = \hbar q_0$ . En outre, l'inclusion du désordre permettrait aussi de déterminer si les phonons acoustiques peuvent induire des quasi-particules axioniques. Cette théorie peut aussi être appliquée dans une nouvelle classe de matériaux topologiques : les isolants topologiques d'ordre supérieur [70]. Ces nouveaux matériaux sont définis comme étant des isolants qui possèdent des états conducteurs protégés topologiquement au niveau des arêtes ou des sommets du matériau. Enfin, il serait intéressant aussi de vérifier si la théorie présentée dans ce mémoire peut être utile pour la détection de la matière noire. En effet, il existe certains travaux dans la littérature proposant de détecter la matière noire en utilisant des phonons [71] ou des isolants topologiques [72]. Comme ces deux ingrédients sont présents dans ce mémoire, il est possible de se demander si cette théorie peut être pertinente pour la détection de la matière noire.

## Annexe A

# Intégrale avec ligne de coupure

Dans cette section, nous montrons le calcul de l'intégrale

$$I = \int_a^\infty dx f(x) \sqrt{x^2 - a^2},$$

où  $a$  est une constante réelle non nulle et  $f$  une fonction qui tend vers 0 plus vite que  $1/x^2$  à  $x \rightarrow \infty$ . Nous considérons d'abord que  $f$  ne possède pas de pôles sur l'intervalle  $[a, \infty[$  et aux alentours de l'axe réel. Cette annexe présente les détails permettant d'obtenir les équations 3.33 et 3.36.

Pour calculer cette intégrale, considérons l'intégrale suivante dans le plan complexe

$$I_c = \oint_C dz f(z) \sqrt{a^2 - z^2},$$

où  $C$  est représenté à la figure A.1. L'intégrale peut alors être écrite sur chaque branche du parcours

$$I_c = \sum_{i=1}^8 \int_{C_i} dz f(z) \sqrt{a^2 - z^2},$$

où  $C_1$  est la ligne droite allant de  $a$  à l'infini au dessus de la ligne de coupure et le sens direct (sens contraire des aiguilles d'une montre) est considéré. Les intégrales sur les deux demi-cercles peuvent être calculées en utilisant le changement de variable  $z = Re^{i\varphi}$  avec  $R \rightarrow \infty$  donnant ainsi

$$\begin{aligned} \int_{C_2} dz f(z) \sqrt{a^2 - z^2} &= \lim_{R \rightarrow \infty} iR \int_0^\pi d\varphi e^{i\varphi} f(Re^{i\varphi}) \sqrt{a^2 - R^2 e^{2i\varphi}} = 0 \\ \int_{C_6} dz f(z) \sqrt{a^2 - z^2} &= \lim_{R \rightarrow \infty} iR \int_\pi^0 d\varphi e^{i\varphi} f(Re^{i\varphi}) \sqrt{a^2 - R^2 e^{2i\varphi}} = 0, \end{aligned}$$

car par supposition  $f$  tend vers 0 plus vite que  $1/x^2$  à  $x \rightarrow \infty$ . Ensuite, les intégrales sur les deux petits demi-cercles peuvent être calculées en posant  $z = \pm\Delta/2 + \epsilon e^{i\varphi}$  avec  $\epsilon \rightarrow 0$ . Ce

changement de variable donne

$$\int_{C_4} dz f(z) \sqrt{a^2 - z^2} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i\epsilon^{3/2} \int_{\pi}^{-\pi} d\varphi e^{i\varphi/2} \sqrt{\Delta + \epsilon e^{i\varphi}} f(-\Delta/2 + \epsilon e^{i\varphi}) = 0$$

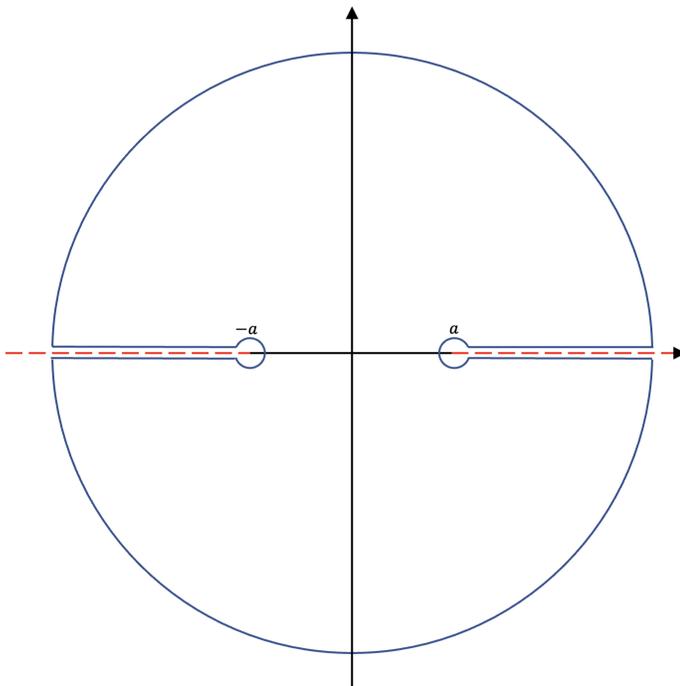
$$\int_{C_8} dz f(z) \sqrt{a^2 - z^2} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i\epsilon^{3/2} \int_{2\pi}^0 d\varphi e^{i\varphi/2} \sqrt{\Delta + \epsilon e^{i\varphi}} f(\Delta/2 + \epsilon e^{i\varphi}) = 0.$$

Il reste maintenant les intégrales sur les lignes droites. À cause de la ligne de coupure, les contributions à  $I_c$  des quatre lignes droites ne s'annulent pas. En effet, la ligne de coupure implique que l'argument du radical de l'intégrande n'est pas le même lorsque l'on se trouve au dessus ou en dessous de la ligne de coupure. Plus précisément, pour  $x > a$ , nous avons

$$\begin{aligned} \sqrt[+]{a^2 - z^2} &= i\sqrt{z^2 - a^2} \\ \sqrt[-]{a^2 - z^2} &= -i\sqrt{z^2 - a^2}, \end{aligned}$$

où l'indice  $+$  ( $-$ ) signifie que nous nous trouvons au dessus (en dessous) de la ligne de coupure. Pour le cas  $x < a$ , chacune des racines ci-haut est multipliée par un facteur  $e^{i\pi} = -1$ . Ainsi, nous pouvons écrire

$$I_c = 4i \int_a^{\infty} dx f(x) \sqrt{x^2 - a^2} = 4iI.$$



**FIGURE A.1** Parcours dans le plan complexe utilisé pour calculer  $I$ . La ligne en pointillés rouge représente la ligne de coupure associée au radicale présent dans l'intégrande. La ligne de coupure se connecte à l'infini.

Par la suite, le théorème des résidus permet d'écrire

$$I_c = 2\pi i \sum_{z_j \in C} R\left(f(z) \sqrt{a^2 - z^2}, z_j\right),$$

où  $z_j$  est l'ensemble des pôles de  $f$  se trouvant à l'intérieur du parcours  $C$ . En conclusion

$$\int_a^\infty dx f(x) \sqrt{x^2 - a^2} = \frac{\pi}{2} \sum_{z_j \in C} R\left(f(z) \sqrt{a^2 - z^2}, z_j\right). \quad (\text{A.1})$$

Si maintenant nous supposons que  $f$  possède des pôles sur l'intervalle  $[a, \infty[$ , il est alors possible de calculer l'intégrale en utilisant le parcours  $C$  déformé de façon à contourner les pôles se trouvant sur l'intervalle. Nous serons cependant contraint à pouvoir calculer la partie principale de l'intégrale  $I$ . En suivant les mêmes étapes que celles présentées ci-haut, il est possible de démontrer que

$$\mathfrak{P} \int_a^\infty dx f(x) \sqrt{x^2 - a^2} = \frac{\pi}{2} \sum_{z_j \in C} R\left(f(z) \sqrt{a^2 - z^2}, z_j\right), \quad (\text{A.2})$$

où  $P$  dénote la partie principale de Cauchy. À noter que ce résultat est valide si et seulement si les pôles se trouvant sur l'intervalle  $[a, \infty[$  sont des pôles simples. Si l'ordre des pôles est supérieur, l'intégrale diverge.

## Annexe B

# Théorème de Sokhotski-Plemelj pour une fonction arbitraire

Dans cette annexe, nous montrons le calcul de la limite

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_a^b dx \frac{f(x)}{g(x) \pm i\eta},$$

où  $f$  est une fonction quelconque supposée régulière aux alentours de l'axe réel et  $g$  est un polynôme d'ordre  $n$

$$g(x) = \prod_{j=1}^n (x - x_j),$$

tel que  $x_j \in \mathbb{R}$  et  $a < x_j < b \forall j$ . Cette annexe présente les détails permettant d'obtenir l'équation 2.80 et permettant de conclure que l'équation 2.113 diverge.

Pour ce faire, considérons l'intégrale

$$\int_C dz \frac{f(z)}{g(z)}$$

sur le parcours  $C$  présenté à la figure B.1. En décomposant cette intégrale sur les différentes branches du parcours, il est possible d'avoir

$$\int_C dz \frac{f(z)}{g(z)} = \left[ \lim_{\epsilon_1 \rightarrow 0} \int_a^{x_1 - \epsilon_1} + \lim_{\epsilon_n \rightarrow 0} \int_{x_n - \epsilon_n}^b + \sum_{j=1}^{n-1} \lim_{\epsilon_j, \epsilon_{j+1} \rightarrow 0} \int_{x_j + \epsilon_j}^{x_{j+1} - \epsilon_{j+1}} \right] dx \frac{f(x)}{g(x)} + \sum_{j=1}^n \int_{C_j} dz \frac{f(z)}{g(z)}.$$



FIGURE B.1 Parcours utilisés pour démontrer le théorème de Sokhotski-Plemelj.

Les trois premiers termes représentent la partie principale de Cauchy de l'intégrale. La dernière intégrale peut se calculer en utilisant le changement de variable  $z = x_j + \epsilon_j e^{i\varphi_j}$  avec  $\epsilon_j \rightarrow 0$  :

$$\begin{aligned} \int_{C_j} dz \frac{f(z)}{g(z)} &= i \lim_{\epsilon_j \rightarrow 0} \int_{\pi}^0 d\varphi_j \epsilon_j e^{i\varphi_j} \frac{f(x_j + \epsilon_j e^{i\varphi_j})}{g(x_j + \epsilon_j e^{i\varphi_j})} \\ &= i \frac{f(x_j)}{|g'(x_j)|} \int_{\pi}^0 d\varphi_j = -i\pi \frac{f(x_j)}{|g'(x_j)|}. \end{aligned}$$

Pour passer de la première ligne à la deuxième ligne, nous avons utilisé le fait que  $f(x_j + \epsilon_j e^{i\varphi_j}) \sim f(x_j)$ , car  $f$  est supposée bien se comporter autour de l'axe réel. De plus,  $g(x_j + \epsilon_j e^{i\varphi_j}) = |g'(x_j)| \epsilon_j e^{i\varphi_j}$ . Il est possible de réécrire l'intégrale sur  $C_j$  comme

$$\int_{C_j} dz \frac{f(z)}{g(z)} = -i\pi \int_a^b dx \frac{f(x)}{|g'(x)|} \delta(x - x_j) = -i\pi \int_a^b dx f(x) \delta(g(x)). \quad (\text{B.1})$$

Ainsi,

$$\int_C dz \frac{f(z)}{g(z)} = P \int_a^b dx \frac{f(x)}{g(x)} - i\pi \int_a^b dx f(x) \delta(g(x)).$$

Ensuite, comme  $f$  ne possède pas de pôle autour de l'axe réel, il est possible de déformer le parcours de façon à intégrer sur  $C'$  (voir figure B.1). Le théorème de Cauchy permet d'écrire

$$\int_C dz \frac{f(z)}{g(z)} = \int_{C'} dz \frac{f(z)}{g(z)} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{a+i\eta}^{b+i\eta} dz \frac{f(z)}{g(z)} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_a^b dz \frac{f(x+i\eta)}{g(x+i\eta)}.$$

Il est alors possible d'écrire  $f(x+i\eta) = f(x)$  et  $g(x+i\eta) \approx g(x) + i\eta$ . Donc

$$\int_{C'} dz \frac{f(z)}{g(z)} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_a^b dz \frac{f(x)}{g(x) + i\eta},$$

ce qui permet de conclure

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_a^b dz \frac{f(x)}{g(x) + i\eta} = \mathfrak{P} \int_a^b dx \frac{f(x)}{g(x)} - i\pi \int_a^b dx f(x) \delta(g(x)). \quad (\text{B.2})$$

Pour résumer, ce résultat est valide si  $f$  ne possède pas de pôles très proches de l'axe réel et si  $g$  ne possède que des pôles simples sur l'intervalle  $[a, b]$ . En effet, si par exemple le pôle  $x_1$  de  $g$  possédait un ordre supérieur, alors  $g'(x_1) = 0$ , et donc l'équation B.1 divergerait. Ceci donne la raison mathématique de la divergence obtenue lors du calcul à température finie.

# Bibliographie

- [1] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, et M. den Nijs. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [2] N. P. Armitage, E. J. Mele, et A. Vishwanath. *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
- [3] M. Sato et Y. Ando. *Rep. Prog. Phys.* **80**, 076501 (2017).
- [4] X.-L. Qi et S.-C. Zhang. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [5] J. E. Moore et L. Balents. *Phys. Rev. B* **75**, 121306 (2007).
- [6] L. Fu, C. L. Kane, et E. J. Mele. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803 (2007).
- [7] R. Roy. *Phys. Rev. B* **79**, 195322 (2009).
- [8] L. Fu et C. L. Kane. *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007).
- [9] M. Fruchart et D. Carpentier. *Comptes Rendus Physique* **14**, 779 (2013).
- [10] I. Garate. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 046402 (2013).
- [11] I. M. James. *History of topology*. Elsevier, (1999).
- [12] A. N. Pressley. *Elementary differential geometry*. Springer Science & Business Media, (2010).
- [13] S. M. Girvin et K. Yang. *Modern condensed matter physics*. Cambridge University Press, (2019).
- [14] M. V. Berry. *Proc. Roy. Soc. London. A* **392**, 45 (1984).
- [15] J. Zak. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2747 (1989).
- [16] B. Simon. *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2167 (1983).
- [17] P. Bruno. *arXiv cond-mat/0506270* (2005).
- [18] J. J. Sakurai et J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics. 2-nd edition*. Person New International edition, (2014).
- [19] B. A. Bernevig. *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton university press, (2013).
- [20] D. Vanderbilt. *Berry phases in electronic structure theory : electric polarization, orbital magnetization and topological insulators*. Cambridge University Press, (2018).
- [21] M. P. Marder. *Condensed matter physics*. John Wiley & Sons, (2010).
- [22] D. Xiao, M.-C. Chang, et Q. Niu. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).

- [23] M. Kohmoto. *Ann. Phys.* **160**, 343 (1985).
- [24] F. D. M. Haldane. *Physical review letters* **61**, 2015 (1988).
- [25] D. Hsieh et al. *Nature* **452**, 970 (2008).
- [26] Y. Xia et al. *Nat. Phys.* **5**, 398 (2009).
- [27] X. Xi et al. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 155701 (2013).
- [28] K. Saha et I. Garate. *Phys. Rev. B* **89**, 205103 (2014).
- [29] X.-L. Qi, T. L. Hughes, et S.-C. Zhang. *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008).
- [30] R. D. Peccei et H. R. Quinn. *Phys. Rev. Lett* **38**, 1440 (1977).
- [31] M. Kuster, G. Raffelt, et B. Beltrán. *Axions : Theory, cosmology, and experimental searches*, volume 741. Springer, (2007).
- [32] F. Chadha-Day, J. Ellis, et D. J. E. Marsh. *Sci. Adv.* **8**, eabj3618 (2022).
- [33] C. Abel et al. *Phys. Rev. Lett.* **124**, 081803 (2020).
- [34] F. Wilczek. *Phys. Rev. Lett.* **40**, 279 (1978).
- [35] S. Weinberg. *Phys. Rev. Lett.* **40**, 223 (1978).
- [36] A. Karch. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 171601 (2009).
- [37] K. S. Thorne, C. W. Misner, et J. A. Wheeler. *Gravitation*. Freeman San Francisco, CA, (2000).
- [38] L. Visinelli. *Mod. Phys. Lett. A* **28**, 1350162 (2013).
- [39] A. Comtet, T. Jolicœur, S. Ouvry, et F. David. *Aspects topologiques de la physique en basse dimension. Topological Aspects of Low Dimensional Systems*, volume 69. Springer Science & Business Media, (2000).
- [40] A. Sekine et K. Nomura. *J. Appl. Phys.* **129**, 14101 (2021).
- [41] R. Li, J. Wang, X.-L. Qi, et S.-C. Zhang. *Nat. Phys.* **6**, 84 (2010).
- [42] J. Wang, B. Lian, et S.-C. Zhang. *Phys. Rev. B* **93**, 045115 (2016).
- [43] A. Sekine et K. Nomura. *Phys. Rev. Lett.* **116**, 096401 (2016).
- [44] N. W. Ashcroft et N. D. Mermin. *Solid state physics*. Cengage Learning, (2022).
- [45] Y. A. Il'inskii et L. V. Keldysh. *Electromagnetic response of material media*. Springer Science & Business Media, (2013).
- [46] M. A. Stroschio et M. Dutta. *Phonons in nanostructures*. Cambridge University Press, (2001).
- [47] M. Cardona et Y. Y. Peter. *Fundamentals of semiconductors*, volume 619. Springer, (2005).
- [48] P. Rinkel, P. L. S. Lopes, et I. Garate. *Phys. Rev. Lett.* **119**, 107401 (2017).
- [49] P. Rinkel, P. L. S. Lopes, et I. Garate. *Phys. Rev. B* **99**, 144301 (2019).
- [50] X. Yuan et al. *Nat. Comm.* (1), 1 (2020).
- [51] N. Nagaosa. *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Springer Science & Business Media, (1999).
- [52] P. Coleman. *Introduction to Many Body Physics*. Cambridge University Press, (2015).

- [53] K. Fujikawa et H. Suzuki. *Path Integrals and Quantum Anomalies*. Oxford University Press on Demand, (2004).
- [54] H. Padmanabhan et al. *Nat. Comm.* **13**, 1929 (2022).
- [55] R. A. Bertlmann. *Anomalies in quantum field theory*. Oxford University Press, (2000).
- [56] G. 't Hooft et M. Veltman. *Nucl. Phys. B* **44**, 189 (1972).
- [57] M. E. Peskin et D. V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. CRC press, (1995).
- [58] M. J. Ablowitz et A. S. Fokas. *Complex variables : introduction and applications*. Cambridge University Press, (2003).
- [59] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik. *Table of integrals, series, and products*. Academic press, (2014).
- [60] K. Fukushima, D. E. Kharzeev, et H. J. Warringa. *Phys. Rev. D* **78**, 074033 (2008).
- [61] A. Sinner et K. Ziegler. *Ann. Phys.* **418**, 168199 (2020).
- [62] E. Witten. *Phys. Lett. B* **86**, 283 (1979).
- [63] G. Rosenberg et M. Franz. *Phys. Rev. B* **82**, 035105 (2010).
- [64] N. P. Armitage et L. Wu. *SciPost Physics* **6**, 046 (2019).
- [65] J. Zhang et al. *Chin. Phys. Lett.* **37**, 077304 (2020).
- [66] H. Wang et al. *Phys. Rev. B* **101**, 081109 (2020).
- [67] P. Wang et al. *The Innovation* **2**, 100098 (2021).
- [68] B.-L. Huang et M. Kaviany. *Phys. Rev. B* **77**, 125209 (2008).
- [69] A. R. Goni et al. *Phys. Rev. B* **64**, 035205 (2001).
- [70] F. Schindler et al. *Sci. Adv.* **4**, eaat0346 (2018).
- [71] A. Mitridate et al. *Phys. Rev. D* **102**, 095005 (2020).
- [72] D. J. E. Marsh et al. *Phys. Rev. Lett.* **123**, 121601 (2019).