

Dynamique du réseau dans les semimétaux de Weyl sous champ magnétique

par

Pierre Rinkel

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

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 4 janvier 2019

Le 4 janvier 2019

le jury a accepté la thèse de Monsieur Pierre Rinkel dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur Ion Garate
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Louis Taillefer
Membre interne
Département de physique

Michel Côté
Professeur
Membre externe
Département de Physique
Université de Montréal

Professeur André-Marie Tremblay
Président rapporteur
Département de physique

Sommaire

Cette thèse a pour objet l'étude de la dynamique du réseau en interaction avec les électrons dans les semimétaux de Weyl. L'objectif premier est de prédire un effet observable sur les modes de phonons en lien direct avec l'anomalie chirale, phénomène topologique inhérent à la présence de fermions de Weyl.

Dans un premier temps, nous introduirons la physique des semimétaux de Weyl ainsi que leurs propriétés topologiques particulières. Nous dériverons le terme d'axion dans le but d'introduire la façon dont la dynamique du réseau peut interagir singulièrement avec les électrons de basse énergie et les champs électromagnétiques dans les semimétaux de Weyl. Ensuite on présentera les concepts clés dans la description des vibrations du réseau et de leurs modes propres, les phonons. Notamment, nous expliquerons comment arriver à l'équation de dispersion des phonons ainsi qu'une manière standard de calculer perturbativement l'impact des électrons sur ces derniers, par l'intermédiaire d'un couplage local.

Nous entrerons ensuite dans le vif du sujet en montrant comment le calcul diagrammatique amenant au phénomène d'anomalie chirale prédit une empreinte dans la dispersion des phonons optiques, sous condition d'avoir un couplage électron-phonon de type pseudoscalaire et un champ magnétique statique et uniforme. Les conséquences seront une activité optique infrarouge induite par l'anomalie, ainsi qu'une résonance dans la self énergie des phonons et dans le tenseur Raman. Cette première partie est basée sur des travaux de physique des hautes énergies dans lesquels le potentiel chimique est ignoré. Elle est donc adaptée à la description d'un semimétal parfait, dans lequel les noeuds de Weyl sont exactement au niveau de Fermi. Nous adopterons par la suite un formalisme plus standard en matière condensée et valide pour toute valeur de potentiel chimique et de température.

Ainsi, dans la dernière partie de ce travail, nous inclurons directement le champ magnétique dans la structure électronique des électrons de Weyl. L'effet du champ magnétique, qui était calculé perturbativement dans la partie précédente, est maintenant inclus à tous les

ordres. Cela nous permettra également de prendre en compte plus aisément un potentiel chimique fini. De plus nous étudierons séparément l'effet des niveaux de Landau chiraux, qui dominent la physique de basse énergie à fort champ magnétique et sont responsables de l'anomalie chirale. Notamment, on constatera dans ce cas que l'écrantage des interactions par les niveaux de Landau chiraux entraîne une hybridation plasmon-phonon-optique résonante contrôlée par l'amplitude et la direction du champ magnétique, phénomène potentiellement observable dans des mesures de spectroscopie Raman. Enfin, nous verrons que les niveaux de Landau à plus haute énergie peuvent également contribuer à une hybridation observable dans le spectre des phonons optiques, ainsi que des oscillations quantiques pouvant se manifester dans la vitesse du son.

Remerciements

Mes premiers remerciements vont à mon directeur Ion Garate, qui m'a toujours donné très généreusement de son temps et dont j'ai profité des grandes qualités de pédagogues, cela additionné à une personne d'une grande gentillesse, qui a toujours su m'encourager dans mon travail.

J'aimerais ensuite remercier les membres de mon comité de thèse, André-Marie Tremblay, Louis Taillefer et Michel Côté qui ont pris le temps de lire et d'évaluer mon manuscrit.

Merci à mon collègue et ami Pedro L. S. Lopes qui, depuis son arrivée à Sherbrooke, m'a fait profiter de son expérience avec une bienveillance rare. Sa curiosité et sa bonne humeur contagieuse m'ont été d'une grande aide autant sur le plan professionnel que personnel.

Mon expérience à Sherbrooke n'aurait pas été aussi positive sans les belles rencontres que j'y ai faites, à commencer avec mes amis et colocataires avec qui j'ai partagé de beaux moments : Shaheen, Simon, Annaëlle, Alexis et Émilie. J'espère vous revoir bientôt devant un bon kebab (ou une poutine) et qu'on remette ça. Merci aux gens du département de physique qui font de ce lieu un espace de travail particulièrement agréable et chaleureux. Merci notamment à Samuel, Charles-David, Reza, Maude et tous les autres.

Merci à Jean-Baptiste, à ses sages conseils et son expertise sur Halo 5 dont j'ai eu la chance de profiter tout au long du doctorat et même bien avant. Merci à Nicolas, avec son esprit curieux et son quatrième degré que j'espère retrouver sous peu.

Merci à ma famille que j'ai pu suivre de loin pendant ces quatre années et qui a toujours été une grande source de soutien. Merci Mami Yolande, Maud, Jean et Suzana, Séverin, et tous les petits qui vous accompagnent. Enfin, un merci spécial à mes parents, Hélène et Jean-Marc, qui sont en (très) grande partie responsables de mon goût pour les sciences dures. Merci pour toutes ces heures passées sur Skype qui ont été bien plus qu'un détail dans mon équilibre de vie à Sherbrooke. Merci pour votre soutien sans faille qui m'a accompagné tout au long de mes études.

Table des matières

Sommaire	i
Remerciements	iv
Introduction	1
1 Contexte et bases théoriques sur les semimétaux de Weyl	3
1.1 Fermions de Weyl et de Dirac : généralités	3
1.1.1 Fermions de Dirac	3
1.1.1.1 Équation de Dirac	3
1.1.1.2 Matrices de Dirac et chiralité	5
1.1.2 Robustesse des semimétaux de Weyl	8
1.1.3 Monopôles de Berry et arcs de Fermi	11
1.1.3.1 Modèle minimal	11
1.1.3.2 Monopôle de Berry et nombre de Chern	12
1.1.3.3 États de bord topologiques et arcs de Fermi	13
1.2 Anomalie chirale et axion	14
1.2.1 Anomalie chirale façon matière condensée	14
1.2.1.1 Anomalie chirale en une dimension	14
1.2.1.2 Hamiltonien de Weyl sous champ magnétique et niveaux de Landau chiraux	15
1.2.1.3 Anomalie chirale en 3D	17
1.2.2 Théorie des champs, axion et anomalie chirale	20
1.2.2.1 Axion dans un semimétal de Weyl sans interaction	20
1.2.2.2 Aparté sur la conséquence de l'axion sur les équations de Maxwell	25
1.2.2.3 Conséquence d'un champ axial fluctuant et lien avec les phonons	28

2	Phonons : généralités	29
2.1	Hamiltonien du réseau et premières approximations	29
2.2	Dispersion des phonons sans interaction	32
2.2.1	Les modes propres de vibrations du cristal	32
2.2.2	Charge de Born	36
2.2.2.1	Dérivation de l'action des phonons en présence du champ électromagnétique	36
2.2.2.2	Interprétation de la charge de Born	38
2.2.2.3	Hybridation plasmon-phonon	41
2.3	Interactions électron-phonon	42
2.3.1	Les différents type d'interaction	42
2.3.2	Expression du couplage électron-phonon	46
2.3.2.1	Couplage local	46
2.3.2.2	Couplage non local	47
2.4	Phonons et théorie des groupes	48
2.4.1	Représentations irréductibles et modes de vibration	48
2.4.2	Règle de sélection pour le couplage entre phonon et électrons de Weyl	50
3	Effet de l'anomalie chirale sur les phonons	51
3.1	Interaction entre électrons de Weyl et phonons	51
3.1.1	Interaction avec les électrons de basse énergie	52
3.1.1.1	Dérivation de l'hamiltonien d'interaction entre phonons et électrons de Weyl	52
3.1.1.2	Conditions de symétrie pour les vertex	54
3.2	Dispersion des phonons en présence des électrons de Weyl	57
3.2.1	Dérivation de l'action effective	57
3.2.2	Correction au second ordre S^2	59
3.2.3	Correction au troisième ordre S^3	62
3.2.4	Dispersion des phonons en présence des fermions de Weyl	68
3.2.4.1	Forme générale et simplifications	68
3.2.4.2	Quelques estimations numériques	73
3.2.5	Susceptibilité du réseau et diffusion Raman	75
3.2.5.1	Susceptibilité du réseau	75
3.2.5.2	Diffusion Raman	76
4	Étude non perturbative en champ magnétique	79
4.1	Électrons sous un champ magnétique statique	80
4.1.1	Propagateur électronique de Schwinger	80

4.2	Action effective pour les phonons	82
4.2.1	Les différentes parties de l'action	82
4.2.2	Obtention de l'action effective pour les phonons	83
4.2.2.1	Transformation de Hubbard-Stratonovitch	83
4.2.2.2	Intégration sur les degrés de liberté électronique	84
4.2.2.3	Expressions générales des fonctions de polarisation, à $b_0 = 0$	86
4.2.2.4	Fonctions de polarisation dans la limite quantique	88
4.2.2.5	Polarisations avec $b_0 \neq 0$	89
4.2.2.6	Polarisation et anomalie chirale	90
4.3	Dispersion des phonons	91
4.3.1	Phonons optiques	91
4.3.1.1	Limite quantique	92
4.3.1.2	Champ intermédiaire	97
4.3.2	Phonons acoustiques	102
4.3.2.1	Limite quantique	104
4.3.2.2	Champ intermédiaire et oscillations quantiques	105
4.3.3	Polarisation à bas champ et lien avec les résultats du chapitre 3	108
	Conclusion	109
	Annexes	112
	A. Robustesse du pôle de l'anomalie chirale avec le cutoff ultra-violet	113
	B. Dérivation des fonctions Π_{VV} et Π_{VA}	114
	Bibliographie	118

Table des figures

1.1	Bandes électroniques du semimétal de Weyl TaAs.	6
1.2	Dispersion correspondant à l'hamiltonien (1.10) avec différentes perturbations.	9
1.3	Dispersion correspondant à (1.12).	10
1.4	Représentation d'arcs de Fermi dans un semimétal avec une seule paire de noeuds de Weyl et mesure ARPES de densité d'état à la surface de TaAs.	13
1.5	Dispersion électronique unidimensionnel.	14
1.6	Structure électronique pour une paire de fermions de Weyl de chiralités opposées, plongés dans un champ magnétique.	18
1.7	Dispersion de phonon-polaritons correspondant à l'équation (1.55).	27
2.1	Différents modes de phonons optiques dans le matériau TaAs.	34
2.2	Trois modes propres de vibrations dans une cellule unité à quatre atomes.	40
2.3	Dispersion des phonons dans Si et GaAs.	41
3.1	Schéma du vertex électron-phonon correspondant à l'équation (3.3).	53
3.2	Diagramme VVA.	63
3.3	Solutions de l'équation de dispersion (3.51).	73
3.4	Impact de l'anomalie chirale sur la dispersion des phonons. Parties réelles et imaginaires des solutions de (3.51) pour différents champs magnétiques.	74
4.1	Développement du diagramme VA au premier ordre au champ magnétique.	85
4.2	Comparaison des contributions à la polarisation provenant des différents types de transitions électroniques dans la limite quantique.	89
4.3	Dispersion (4.32) et (4.33).	94
4.4	Solutions de la dispersion (4.28) à $\omega_0 = \omega_p$ en fonction du champ magnétique.	96
4.5	Fonction spectrale de phonon en fonction de ω/ω_0 et du champ magnétique.	97
4.6	Densités spectrales de phonon en fonction de ω et de $ \mathbf{q} $ pour des couplages purement scalaires ou purement pseudoscalaires.	99
4.7	Densité spectrale de phonon en fonction de ω et du champ magnétique.	100

4.8	Densités spectrale de phonon à $b_0 \neq 0$	102
4.9	Dépendance de la vitesse du son $c_s(\theta) \equiv \partial\omega/\partial\mathbf{q} $ en fonction de l'angle entre le moment du phonon acoustique et le champ magnétique.	105
4.10	Oscillations quantiques dans la vitesse du son.	106
4.11	Oscillations dans la vitesse du son à différentes températures.	107

Introduction

Les semimétaux de Weyl [1,2] constituent l'une des découvertes majeures de la dernière décennie dans le domaine des matériaux quantiques. Malgré cet engouement récent pour ces nouveaux matériaux, leur histoire remonte à près d'un siècle, avec la première description en physique quantique d'électrons relativistes par Paul Dirac [3] suivie un an plus tard par la description de fermions relativistes sans masse par Hermann Weyl [4]. Ces derniers étant initialement inventés dans le but de décrire les neutrinos (qui se sont finalement avérés être massifs), ils n'ont finalement jamais trouvé de représentants réels dans le spectre de la physique des particules. Cependant, une décennie après la parution de l'article de Weyl, Conyers Herring suggéra que des fermions semblables aux fermions de Weyl peuvent exister dans certains cristaux, et ont pour cause la présence de dégénérescences accidentelles des bandes électroniques [5]. C'est probablement en partie à cause de la difficulté à détecter ces points de dégénérescence accidentelles dans la zone de Brillouin (contrairement aux dégénérescences imposées par les symétries du cristal qui peuvent par exemple être déduites de la théorie des groupes) que des prédictions numériques réalistes sont apparues plus de sept décennies plus tard (entre autres : [6–11]). Ces résultats seront suivis de peu des premières preuves expérimentales de l'existence de tels matériaux [12–16], appelés communément semimétaux de Weyl.

Ce terme provient de la dénomination « noeuds de Weyl » des croisements prédits par Herring [6]. Ces croisements entre des bandes de dispersion linéaire et non dégénérées sont topologiquement robustes et existent systématiquement par paires de noeuds de chiralités opposées [17]. Cette quantité, prenant les valeurs ± 1 , désigne l'alignement ou l'anti-alignement entre le spin et le moment. Un phénomène topologique clé des semimétaux de Weyl est l'anomalie chirale, qui correspond à un transfert d'électrons d'un noeud de Weyl vers son partenaire, sous l'application de champs électrique \mathbf{E} et magnétique \mathbf{B} parallèles. Dans un semimétal comportant deux noeuds séparés de (b_0, \mathbf{b}) en énergie et en moment, l'anomalie chirale se manifeste par une réponse électromagnétique inhabituelle à travers la densité lagrangienne $\mathcal{L}_{\text{ax}} = \theta \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ [18,19], où $\theta = b_0 t / \hbar - \mathbf{b} \cdot \mathbf{r}$ est le champ d'une

particule fictive appelée axion [20]. Les principales preuves expérimentales de l'anomalie chirale se basent sur des propriétés de transport électroniques [21], propriétés qui ne lui sont néanmoins pas exclusives [22, 23]. Afin de compléter ces expériences de transport, d'autres propositions théoriques de mesures de l'anomalie ont été l'objet de nombreux travaux [24–30]. Ces propositions sont basées sur les propriétés purement électroniques, et requièrent pour la plupart un ordre électronique ou d'un système hors équilibre.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au rapport entre les fermions de Weyl, l'anomalie chirale et les vibrations du réseau cristallin. Ces dernières sont présentes à l'équilibre et ne nécessitent pas d'ordre particulier. De plus, l'influence de la dynamique du réseau sur des propriétés électroniques particulières des matériaux topologiques a déjà donné lieu à plusieurs travaux théoriques [31–36]. La principale question derrière la présente thèse est la suivante : les électrons de Weyl et l'anomalie chirale peuvent-ils laisser des traces observables dans les propriétés dynamiques du réseau ? Nous allons tenter d'y répondre en étudiant comment les vibrations peuvent induire des fluctuations dans le terme d'axion θ à travers leurs interactions avec les électrons de Weyl. Ceci est également motivé par des preuves expérimentales récentes de la présence d'interactions significatives entre électrons de Weyl et vibrations du cristal [37].

Chapitre 1

Contexte et bases théoriques sur les semimétaux de Weyl

Dans ce chapitre, nous commencerons par donner les ingrédients nécessaires à l'obtention d'un fermion de Dirac, ce dernier formant un modèle de base pour une grande partie des matériaux topologiques [38]. À partir de là, nous verrons comment obtenir des fermions de Weyl et leur robustesse caractéristique. Les deux dernières sections seront consacrées aux propriétés topologiques remarquables des semimétaux de Weyl. La première est la présence de monopôles de Berry séparés dans la zone de Brillouin, dont émergent des arcs de Fermi typiques à ces matériaux [6]. La deuxième, qui sera centrale dans le présent travail, est l'anomalie chirale. Dans les semimétaux de Weyl, cette dernière est liée à la présence d'un champ axionique dont nous expliquerons certaines des conséquences physiques et finalement, un lien possible avec la dynamique du réseau cristallin.

1.1 Fermions de Weyl et de Dirac : généralités

1.1.1 Fermions de Dirac

1.1.1.1 Équation de Dirac

Parmi les emprunts faits à la physique des hautes énergies par celle de la matière condensée, les fermions de Dirac [3] et de Weyl [4] sont probablement les plus usités actuellement, et ce depuis l'avènement des matériaux dits topologiques dans les années 2000, notamment le graphène [39,40], les isolants topologiques [41–43], et plus récemment les semimétaux

topologiques tridimensionnels [1, 2, 44, 45]. Dans ces matériaux les électrons proches de l'énergie de Fermi (dits électrons de basse énergie) se comportent comme des fermions relativistes dans le sens où leurs fonctions d'onde obéissent à l'équation de Dirac

$$\hbar (\sigma_0 \otimes \tau_0 (-i\partial_t) + \tau_z \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot v\mathbf{P} + \tau_x \otimes \sigma_0 m/\hbar) \Psi = 0 \quad (1.1)$$

où le paramètre m , appelée masse, a la dimension d'une énergie, \mathbf{P} est l'opérateur impulsion, v est une vitesse, et les matrices de Pauli τ_i et σ_i opèrent dans des espaces disjoints¹. Ψ est un spineur à quatre composantes $\Psi_{\tau\sigma}$ avec $\tau, \sigma = \pm 1$ étant les valeurs propres des opérateurs τ_z et σ_z , respectivement. $\sigma/2$ correspond au spin et τ au caractère particule ou antiparticule. La structure de l'équation (1.1), linéaire à la fois en moment et dans la dérivée temporelle, est invariante de Lorentz, ce qui est un prérequis nécessaire à l'obtention d'une particule relativiste. Le choix des matrices n'est non plus pas anodin. En effet, pour avoir des énergies propres de type relativiste, on a besoin de quatre matrices (en facteur des moments et de la masse dans l'hamiltonien) hermitiennes, unitaires et qui anticommulent toutes entre elles. L'ensemble minimal de matrices respectant ces règles est formé de matrices 4×4 ². On obtient ainsi des énergies propres

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{m^2 + \hbar^2 v^2 \mathbf{k}^2} \quad (1.2)$$

où $\hbar\mathbf{k}$ est le nombre (ou vecteur) quantique associé au moment conservé \mathbf{P} . L'équation (1.2) reproduit l'énergie d'une particule relativiste avec en supplément son opposée, interprétée comme l'énergie de son antiparticule. Cette dernière notion n'a pas d'équivalent en physique classique. Cependant, en physique de la matière condensée l'existence de ces deux types de particule est analogue à celle des bandes d'énergie de valence et de conduction. En réalité, la présence de fermions de Dirac à basse énergie dans un matériau n'est pas nécessairement reliée à une propriété relativiste des électrons. Par exemple, la dispersion électronique du fameux graphène exhibe des *cônes de Dirac*, c'est-à-dire des bandes de dispersion linéaires dégénérées en spin (doublement dégénérées), semblables donc à des fermions de Dirac sans masse. Outre les propriétés de conductions particulières directement liées à cette dispersion linéaire [46], de nouvelles propriétés topologiques apparaissent quand on passe aux fermions de Dirac dans la troisième dimension.

Une grande partie des propriétés topologiques requière un couplage spin-orbite important (ce qui n'est pas le cas dans le graphène). En ce sens, l'analogie avec la physique des hautes énergies n'est pas uniquement formelle puisque le couplage spin-orbite est une

1. Pour simplifier les notations, on utilisera toujours de manière abusive $\tau_j \sigma_i = \tau_j \otimes \sigma_i$ et on oubliera d'écrire l'identité.

2. Bien sûr, d'autres choix de combinaisons de matrices de Pauli que celui pris en (1.1) sont possibles.

propriété intrinsèquement relativiste, due au fort moment angulaire des électrons³. Par exemple, dans certains semiconducteurs qui ont la particularité d'être décrits par des électrons de Dirac massifs à basse énergie, le couplage spin-orbite peut induire une inversion du signe de la masse [47]. Si par exemple le système comporte une symétrie d'inversion spatiale, les parités des bandes de conduction et de valence sont échangées par cette inversion de la masse, au voisinage de $\mathbf{k} = 0$. Cette structure pathologique des bandes de valence et de conduction a pour conséquence la naissance d'états de bord à énergie nulle quand un tel semiconducteur (ou isolant) dit topologique est mis en contact avec un autre matériau plus conventionnel, c'est-à-dire avec un couplage spin-orbite moindre et des parités des bandes électroniques différentes⁴.

Dans ce travail, le type de système qui nous intéressera est celui de fermions de Dirac sans masse, en trois dimensions. Dans ce cas, le rôle du couplage spin-orbite peut être de séparer en moment les deux espèces de spin différentes. Comme on l'expliquera dans les sections suivantes, cela n'ouvre pas de gap comme c'est le cas en deux dimensions mais sépare bien le cône de Dirac doublement dégénéré en deux cônes non dégénérés, chacun étant associé à une espèce de spin. Les fermions de Dirac deviennent alors des fermions de Weyl. Dans ce cas, les croisements n'apparaissent plus en des points de haute symétrie de la zone de Brillouin, comme cela est illustré sur la figure 1.1. Le scindement du noeud de Dirac en deux noeuds de Weyl permet une certaine protection contre l'ouverture d'un gap, et est à l'origine de nouvelles propriétés physiques. Avant de détailler ces dernières, présentons un concept clé dans la description de ces fermions de Weyl.

1.1.1.2 Matrices de Dirac et chiralité

Commençons par faire le point sur la notation usuelle en théorie des champs. Par exemple, on retrouvera souvent dans la littérature une équation équivalente à (1.1), appelée notation covariante de l'équation de Dirac :

$$(\gamma^\mu p_\mu + m) \Psi = 0. \quad (1.3)$$

3. Ce qui demande des composés avec de grands nombres atomiques.

4. Les propriétés topologiques liés à l'inversion de la masse de Dirac ne requièrent pas la symétrie d'inversion et donc une parité bien définie [48]. Cependant là n'est pas le sujet central de ce manuscrit et nous laisserons là la discussion.

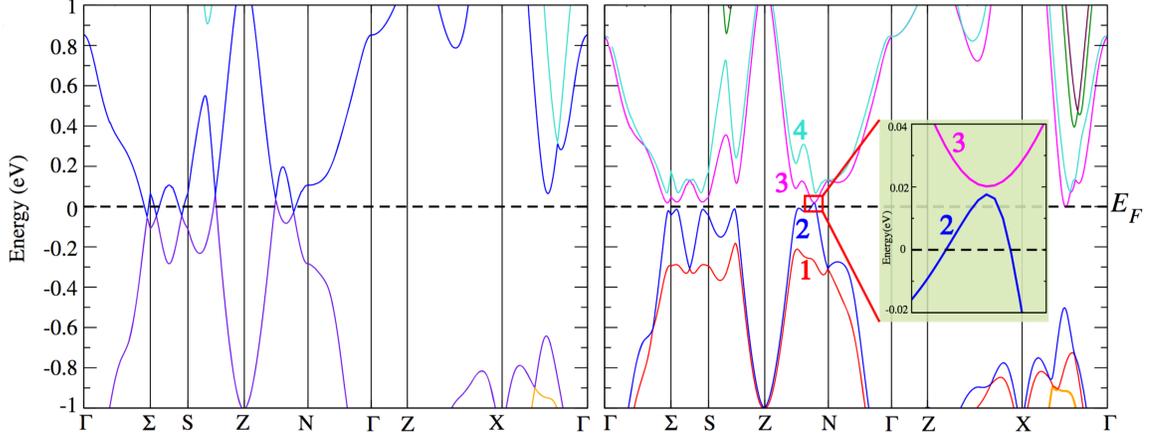


FIGURE 1.1 Figures extraites de [8]. Calcul ab-initio des bandes électroniques du semimétal de Weyl TaAs sans prendre en compte le couplage spin-orbite (gauche) et en le prenant en compte (droite). Sans couplage spin-orbite, on observe des croisements de bandes le long des axes de symétrie. Si on pouvait observer la dispersion avec une dimension supplémentaire dans la zone de Brillouin, on verrait que ces croisements suivent des lignes. On aurait alors affaire à un autre type de semimétal. Avec le couplage spin-orbite, les lignes de croisement s'ouvrent, excepté en des points isolés qui deviennent alors les noeuds de Weyl. Ces noeuds ne sont pas situés sur les principaux axes de symétrie de la zone de Brillouin et sont donc difficiles à repérer par de simples calculs de bande électronique. C'est pour cette raison qu'on n'aperçoit pas de noeuds de Weyl sur cette figure. En outre, leur présence peut être détectée par le calcul de nombre de Chern ou bien par la détection expérimentale d'arcs de Fermi, comme il sera expliqué dans la section 1.1.3.

La somme sur les indices répétés est implicite (notation d'Einstein), et faite dans la métrique de Minkowsky

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Cela signifie que $\gamma^\mu p_\mu \equiv \gamma^\mu g_{\mu\nu} p^\nu = \gamma^0 i\partial_t - \boldsymbol{\gamma} \cdot v_F \mathbf{P}$. $p = (i\partial_t, v_F \mathbf{P})$ est le quadrivecteur moment. Plus tard, nous utiliserons également le quadrivecteur position $x \equiv (t, \mathbf{r}/v_F)$ ainsi que le quadrivecteur électromagnétique $A = (e\phi, ev_F \mathbf{A})$, où ϕ et \mathbf{A} sont les potentiels scalaire et vecteur. Par la suite, les lettres grasses seront attribuées aux vecteurs (en trois dimensions) tandis que nous réserverons les lettres en italique pour les quadrivecteurs. La vitesse v utilisée dans nos définitions de quadrivecteurs n'est pas celle de la lumière. On verra dans

le cas des semimétaux de Weyl qu'elle correspond à la vitesse de Fermi des électrons qui est de l'ordre de $10^5 - 10^6 \text{ms}^{-1}$ et est donc bien inférieure à c . Cela en fait donc un choix naturel pour la définition des quadrivecteurs, outre le fait que cela nous permettra d'écrire l'équation des électrons de Weyl sous la forme (1.3). Notons également que nous poserons $\hbar = e = 1$ à chaque fois que nous utiliserons les notations relativistes avec quadrivecteurs et matrices γ . De cette façon, les quadrivecteurs p et A ont des unités d'énergie tandis que x a l'unité inverse d'une énergie.

Les quatre matrices (4×4) γ , appelées matrices de Dirac, forment une algèbre de Clifford. Elles vérifient ainsi les règles d'anticommuation

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{I}_{4 \times 4}$$

Le choix de leur représentation est arbitraire. Une matrice d'importance se rajoute à cet ensemble : $\gamma^5 \equiv -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$, qui anticommute avec les quatre matrices de Dirac. Avant de donner une signification physique à γ^5 , rappelons que les fermions de Dirac sont caractérisés par deux observables discrètes, chacun ajoutant deux dimensions à l'espace de Hilbert. L'un peut être interprété comme le spin (et est représenté par les matrices σ_i dans la représentation (1.1)), et l'autre comme la dualité particule-trou (représentée par les matrice τ_i). Dans un système sans masse ($m = 0$), cette dernière peut également être aussi interprétée comme la chiralité. En effet, en l'absence de masse, l'opérateur τ_z commute avec l'hamiltonien (1.1) et la chiralité, qui correspond aux valeurs propres $\tau = \pm 1$ de τ_z , est conservée. γ^5 représente la chiralité et peut donc être identifiée à τ_z . On pourra écrire alors les opérateurs fermioniques sous la forme

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix},$$

où Ψ_+ et Ψ_- sont des spineurs à deux composantes qui correspondent respectivement aux fermions de chiralités positive et négative, ou couramment appelés fermions droite et gauche. Étant donné qu'aucune masse ne couple les deux espèces de fermions, on peut séparer le problème en deux, avec un hamiltonien pour les fermions de gauche et un autre pour les fermions de droite.

Pour correspondre à l'hamiltonien (1.1), on fait le choix

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \tau_x \\ \gamma^i &= -i\tau_y\sigma_i \text{ pour } i = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

et on retrouve (1.1) en multipliant le côté gauche de (1.3) par γ^0 .

Notons au passage les propriétés de trace des matrices γ qui pourront nous être utiles par la suite :

$$\text{tr} [\text{\#impaire de } \gamma^\mu] = 0 \quad (1.4)$$

$$\text{tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu] = -4g^{\mu\nu} \quad (1.5)$$

$$\text{tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\alpha \gamma^\beta] = 4 \left(g^{\mu\nu} g^{\alpha\beta} - g^{\mu\alpha} g^{\nu\beta} + g^{\mu\beta} g^{\nu\alpha} \right) \quad (1.6)$$

$$\text{tr} [(\text{\#impaire de } \gamma^\mu) \gamma^5] = 0 \quad (1.7)$$

$$\text{tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^5] = 0 \quad (1.8)$$

$$\text{tr} [\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\alpha \gamma^\beta \gamma^5] = -4i\varepsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \quad (1.9)$$

1.1.2 Robustesse des semimétaux de Weyl

Pour les isolants topologiques, ou de façon plus générale les phases de type SPT (*Symmetry Protected Topology* dans la littérature), on a des phases qui ne peuvent pas être détruites que par des perturbations qui brisent certaines symétries, comme la symétrie par renversement du temps dans le cas de l'effet Hall quantique de spin et des isolants topologiques 3D. Un tel système est donc robuste tant qu'un champ magnétique ou une aimantation sont absents. À l'inverse, les semimétaux de Weyl ne requièrent le respect d'aucune symétrie. Au contraire, ils nécessitent la violation d'au moins une des symétries suivantes : le renversement du temps ou l'inversion. En effet, la présence simultanée des deux symétries imposent la double dégénérescence des bandes électroniques. Dans ce cas, le croisement des bandes de conduction et de valence donne naissance à des points quadruplement dégénérés dans la zone de Brillouin, ce qui est communément appelé phase de semimétal de Dirac. Si par contre une des symétries est brisée, la dégénérescence des bandes est levée, excepté aux points de croisement appelés maintenant noeuds de Weyl. Faisons un petit aparté pour préciser que n'importe quelle perturbation ne peut pas transformer un semimétal de Dirac en semimétal de Weyl. Autrement dit, la séparation des cônes de Dirac ne donne pas forcément naissance à des points de croisement isolés. Illustrons ce point avec l'exemple de l'hamiltonien de Dirac sans masse

$$\tau_z \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}, \quad (1.10)$$

auquel on ajoute une perturbation $\tau_z \Delta$ qui brise la symétrie d'inversion. Les deux cônes se séparent en énergies et leurs dispersions se croisent sur la sphère $\mathbf{k}^2 = (\Delta/\hbar v_F)^2$, comme illustré sur la figure 1.2 (panneau du milieu). Remarquons qu'on a bien dans ce cas deux noeuds de Weyl à des énergies différentes, mais non séparés dans la zone de Brillouin. On ne peut donc pas qualifier une telle phase de semimétal de Weyl mais de semimétal

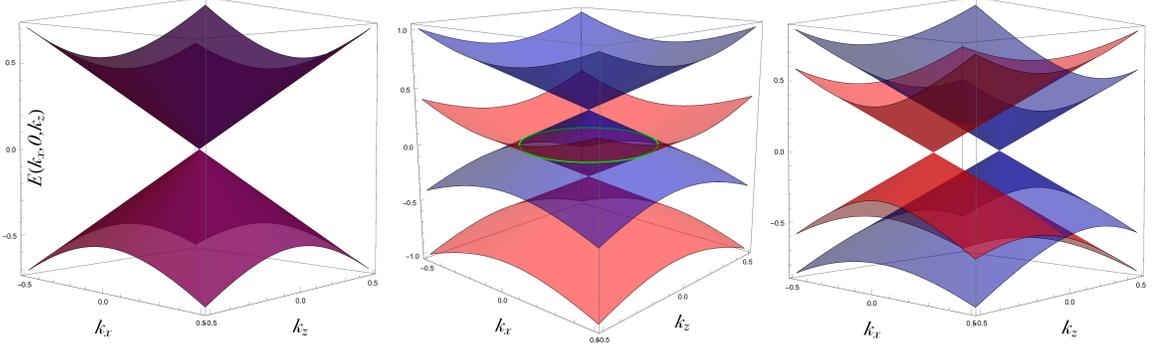


FIGURE 1.2 De gauche à droite sont tracés les dispersions correspondant à (1.10) avec, respectivement, pas de perturbation, une perturbation $\tau_z \Delta$, et une perturbation $\sigma_z \tilde{\Delta}$. Sur le graphique du milieu, la ligne nodale est souligné en vert.

à ligne de noeud (*nodal line semimétal* en anglais [49]) à cause de la présence d'une ligne de croisements au niveau de Fermi. Pour donner lieu à un semimétal de Weyl en brisant seulement la symétrie d'inversion, il est en fait nécessaire d'avoir au moins deux paires de fermions de Dirac [50]. Sinon on a besoin d'une dépendance en spin de la perturbation, qui peut en générale être apportée par le couplage spin-orbite. Par exemple, avec la perturbation $\sigma_z \tilde{\Delta}$, on obtient bien deux noeuds de Weyl aux points $\mathbf{k}_{\pm} = (0, 0, \pm \tilde{\Delta} / \hbar v_F)$, comme illustré sur la figure 1.2 (panneau de droite). La nature des dégénérescences dues aux croisements de bandes aux noeuds de Weyl est maintenant *accidentelle*, c'est-à-dire qu'elles ne sont imposées par aucune symétrie du cristal. Cela implique qu'aucun gap ne peut y être ouvert à moins que deux points de Weyl se rencontrent à nouveau ou qu'il y ait d'importantes interactions à courte portée. Une façon formelle d'expliquer cette robustesse face à l'ouverture d'un gap est d'écrire l'hamiltonien de Bloch au voisinage d'un noeud de Weyl. Le système est décrit localement par deux bandes se croisant en un point. C'est l'équivalent dans l'espace réciproque de l'équation de Dirac, d'où l'hamiltonien de Bloch projeté au voisinage d'un noeud⁵ :

$$h_{\mathbf{k}}^{\tau} = \tau \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}. \quad (1.11)$$

$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sont les matrices de Pauli et $\tau = \pm 1$ désigne la chiralité du noeud de Weyl, quantité importante comme on le verra par la suite. Cette projection aux niveaux des noeuds de Weyl peut être faite à partir d'un hamiltonien de Bloch. Par exemple, on peut imaginer

5. Attention, la forme de l'hamiltonien de Weyl (1.11), bien qu'identique à celle de (1.10), ne décrit pas le même système. Pour l'hamiltonien de Dirac (1.10), le moment \mathbf{k} est exprimé par rapport à un point de Dirac. C'est en général un point de haute symétrie dans la zone de Brillouin, puisque la dégénérescence n'y est pas accidentelle. Dans le cas de l'hamiltonien de Weyl (1.11), le moment est exprimé par rapport deux points différents (*i.e.* aux noeuds de Weyl) suivant les valeurs de τ .

comme exemple le plus simple un hamiltonien de Bloch

$$H_{\mathbf{p}} = t [\sigma_x \sin p_x + \sigma_y \sin p_y] + \sigma_z [m (2 - \cos p_x - \cos p_y) + t_z (\cos Q - \cos p_z)], \quad (1.12)$$

où t_0 , t , Q et m sont des constantes. Pour $m < t_z \frac{1 - \cos Q}{2}$, la dispersion correspondant à (1.12) comprend deux noeuds de Weyl situés en $\mathbf{p}_{\pm} = (0, 0, \pm Q)$. En faisant le développement au voisinage des points \mathbf{p}_{\pm} , on trouve $H_{\mathbf{p}_{\pm} + \mathbf{k}} \simeq t (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) \pm t_z \sin Q \sigma_z k_z$. En définissant $t \equiv \hbar v_F$, en effectuant la transformation unitaire $U = e^{i\frac{\pi}{2}\sigma_z}$ ainsi que le changement de variable $k_z \rightarrow \frac{t}{t_z \sin Q} k_z$ on montre que cet hamiltonien est équivalent à (1.11). La dispersion déduite de l'hamiltonien (1.12) est tracée sur la figure (1.3). Notons qu'on pourrait également rajouter un terme $t_0 \sin p_z$ dans (1.12) qui induirait une différence d'énergie de $2t_0 \sin Q$ entre les électrons de Weyl en \mathbf{p}_{\pm} .

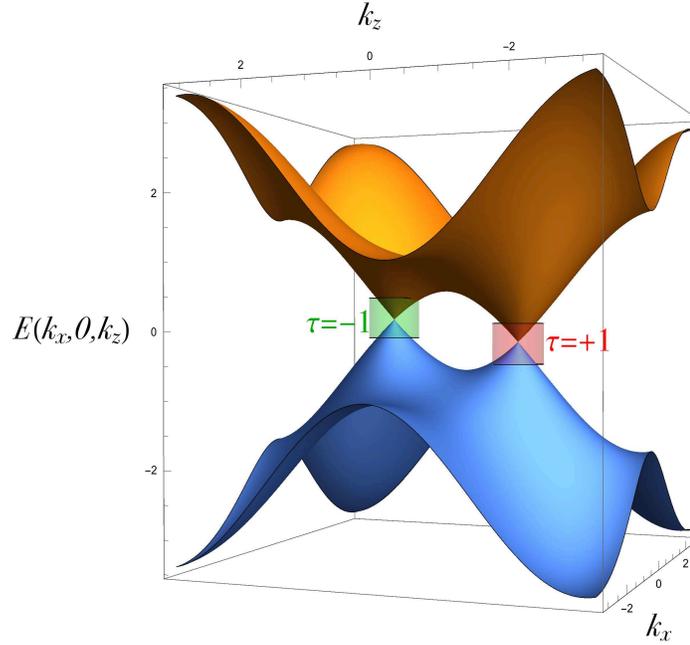


FIGURE 1.3 Dispersion correspondant à (1.12), avec $k_y = 0$ et les paramètres $m = 0.8$, $t = 1.04$, $t_z = 1.2$, $Q = \pi/3$, et $t_0 = 0.2$. Les cylindres vert et rouge délimitent la zone autour des noeuds de Weyl où l'approximation linéaire est valide.

Comme cela apparaît dans l'hamiltonien (1.11), la chiralité correspond à l'alignement ou à l'anti-alignement du moment \mathbf{k} avec le pseudo-spin σ ⁶. La possibilité de considérer chaque noeud comme un système indépendant à deux niveaux vient du fait que ce sont des dégénérescences accidentelles. Si deux noeuds étaient situés au même point de la zone de

6. Le terme *pseudo-spin* est utilisé ici car σ ne correspond pas forcément au spin des électrons mais plus généralement à un système à deux degrés de liberté.

Brillouin, on devrait considérer ces deux noeuds comme un seul système à quatre niveaux. De même, s'il existe des perturbations dont le moment caractéristique correspond à la séparation des noeuds, on pourrait les considérer comme un système à quatre niveaux, avec un gap augmentant avec l'amplitude de ces perturbations. Cependant, si aucun de ces deux cas de figure n'est présent, l'hamiltonien (1.11) suffit à décrire les électrons aux voisinage d'un noeud, et une perturbation dans cet espace à deux niveaux n'aura pour seul effet que de déplacer le noeud dans la zone de Brillouin. Cette particularité est propre à la troisième dimension où le nombre de directions possibles pour \mathbf{k} (trois) est égale au nombre de générateurs d'un système à deux niveaux (trois matrices de Pauli), excepté l'identité.

Enfin, il est important de rappeler que l'utilisation de l'hamiltonien (1.11) sous sa forme matricielle $\tau_z \hbar v \sigma \cdot \mathbf{k}$ peut être trompeuse du fait qu'il est identique à un hamiltonien de Dirac qui décrit deux cônes de Dirac dégénérés. Il faut donc garder à l'esprit que cela cache le fait que les noeuds de Weyl sont éloignés en moment et/ou en énergie. Si une perturbation à courte portée couple les électrons des deux noeuds de Weyl, cet hamiltonien n'est plus valide. Également, pour tout phénomène qui dépend quantitativement de la distance entre les noeuds de Weyl, l'hamiltonien à basse énergie n'est plus pertinent.

1.1.3 Monopôles de Berry et arcs de Fermi

1.1.3.1 Modèle minimal

Notons que dans la littérature [18, 22, 51], on retrouve parfois l'hamiltonien minimal 4×4 pour un métal⁷ de Weyl à une paire de noeuds,

$$H_{\mathbf{k}} = \hbar v_F \sigma \cdot (\mathbf{k} \tau_z + \mathbf{b}) + \tau_z b_0 \quad (1.13)$$

qui décrit un système de deux noeuds de Weyl, séparés dans la zone de Brillouin par un moment $2\mathbf{b}$, et en énergie par $2b_0$. Notons au passage que sans \mathbf{b} et b_0 , le système est équivalent à un semimétal de Dirac. En brisant la symétrie par renversement du temps et la symétrie d'inversion, on crée respectivement \mathbf{b} et b_0 qui lèvent la dégénérescence. Cependant, il faut garder à l'esprit que l'hamiltonien (1.13) n'est en général pas valide sur toute la zone de Brillouin mais est seulement une façon de représenter un système à deux noeuds de Weyl, en oubliant la partie de la dispersion entre les noeuds. Son utilité réside dans le fait que les termes \mathbf{b} et b_0 permettent de décrire des effets, qui, de par leur origine topologique, sont

7. En toute rigueur, un semimétal de Weyl a une densité d'état à l'énergie de Fermi nul. Autrement dit, ses noeuds doivent être situés au niveau de Fermi. On ne peut donc pas avoir de semimétal de Weyl dans le sens stricte si les noeuds sont à des énergies différentes. Cependant, on s'autorisera par la suite à continuer d'utiliser la dénomination de semimétal de Weyl, à condition que les noeuds restent proches du niveau de Fermi.

indépendants de la forme locale de l'hamiltonien dans la zone de Brillouin. En particulier, seul comptent la présence de croisements linéaires non dégénérés (des cônes de Weyl) ainsi que leur éloignement dans la zone de Brillouin (quantifié par \mathbf{b}) et, comme il sera expliqué dans la section suivante, de leur différence d'énergie (quantifiée par b_0).

1.1.3.2 Monopôle de Berry et nombre de Chern

Au voisinage du noeud de chiralité τ , la courbure de Berry, définie par [52]

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}} \equiv -i \nabla_{\mathbf{k}} \times \langle -, \mathbf{k} | \nabla_{\mathbf{k}} | -, \mathbf{k} \rangle, \quad (1.14)$$

où $|-, \mathbf{p}\rangle$ est le spineur associé à la bande de valence, prend la forme

$$\mathbf{B}_{\tau\mathbf{b}+\mathbf{k}} = \tau \frac{\hat{\mathbf{k}}}{k^2}. \quad (1.15)$$

L'expression (1.15) est l'équivalent d'un champ créé par un monopôle magnétique dans la zone de Brillouin [53]. On peut définir le flux de \mathbf{B} sur une surface fermée comme le nombre de Chern associé à cette surface (multiplié par un facteur 2π). On peut dériver de (1.15) l'expression de la divergence [54]

$$\nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{B}_{\mathbf{p}} = 4\pi \sum_{\tau} \delta(\mathbf{p} - \tau\mathbf{b}), \quad (1.16)$$

qui, associé au théorème de Gauss-Ostrogradsky⁸, signifie que le nombre de Chern est égal à la somme des noeuds de Weyl à l'intérieur de la surface, pondérée par la chiralité de chacun des noeuds :

$$C_S = \sum_{\text{noeud } \tau \in S} \tau. \quad (1.17)$$

Ceci peut se généraliser à un nombre quelconque de noeuds de Weyl. Avant de discuter la conséquence de ce théorème sur les états de bords, notons qu'il impose aux noeuds de Weyl d'exister par paires, chacune contenant deux noeuds de chiralités opposées. En effet, la périodicité de la zone de Brillouin implique que le flux de n'importe quel champ vectoriel (dont fait partie le nombre de Chern) à travers la surface la délimitant, est nul. En conséquence, la somme des chiralités est toujours nulle. Ceci constitue le théorème *No – go* de Nielsen-Ninomiya [55].

8. $\oint_{S=\partial\mathcal{V}} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_{\mathbf{p}} = \int_{\mathcal{V}} dV \nabla_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{B}_{\mathbf{p}}$ où S est la surface qui compose la bordure du volume \mathcal{V} . $d\mathbf{S}$ est l'élément de surface sortant, défini en tout point normal à S .

1.1.3.3 États de bord topologiques et arcs de Fermi

La théorie des isolants de Chern permet d'utiliser les notions de la section précédente pour expliquer les états de bords particuliers aux semimétaux de Weyl. Un isolant de Chern est un matériau bidimensionnel dont la somme des nombres de Chern des bandes de valence est non nulle. La conséquence physique est l'existence d'un nombre \mathcal{C} d'états de bord sur les contours du matériau (chapitre 8 de [48]). De plus, chacun de ces états est porteur d'un quantum de conductivité Hall $\frac{e^2}{h}$, donnant lieu à l'effet Hall quantique anormal (*i.e.* existence d'une conductivité de bord quantifiée, sans l'application d'un champ magnétique externe).

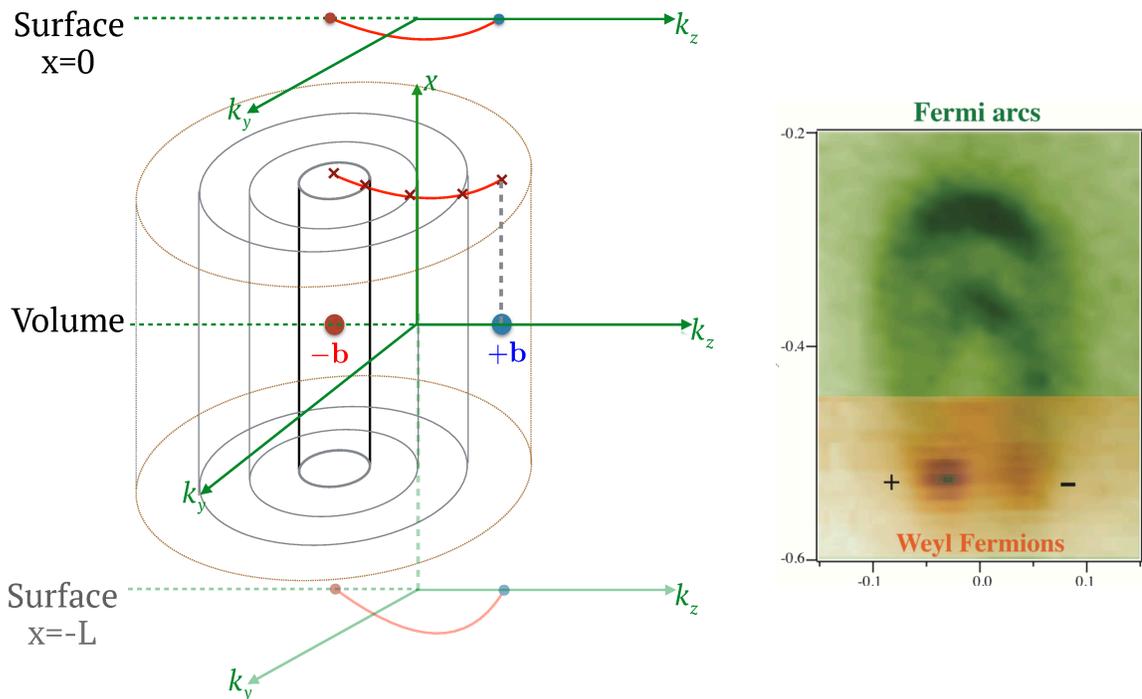


FIGURE 1.4 Gauche : représentation d'arcs de Fermi dans un semimétal avec une seule paire de noeuds de Weyl. Droite : Mesure ARPES (extrait de [12]) de densité d'état à la surface (001) de TaAs. On y distingue deux arcs du fait que deux paires sont superposées dans la direction (001).

Dans notre semimétal tridimensionnel on choisit une surface topologiquement équivalente à une zone de Brillouin en deux dimensions : prenons un cylindre⁹ le long de la direction k_x , et entourant un noeud de Weyl situé en $-\mathbf{b}$ (voir Fig.1.4). Tant que le rayon de ce cylindre n'excède pas $2|\mathbf{b}|$, son nombre de Chern reste égal à -1 et on peut lui associer un état de bord sur la surface parallèle à \mathbf{b} , ainsi qu'un quantum de conductance Hall. Une fois que le rayon dépasse la séparation entre les noeuds de Weyl, le nombre de Chern est nul et on n'a plus d'état de bord associé. Ainsi, si on scrute la densité d'état à l'énergie de Fermi

9. qui est en fait un tore car les bouts à $k_x = \pm\pi$ se rejoignent

sur les surfaces parallèles à \mathbf{b} , on observe des lignes reliant les projections des noeuds de Weyl sur les surfaces : ce sont des arcs de Fermi. Notons que la forme de ces arcs dépend des conditions de bord et n'est pas universelle [56].

En additionnant, si on somme la contribution de tous les états de bords formant ces arcs, on obtient la conductivité Hall anormale

$$\sigma_H = -2 |\mathbf{b}| \frac{e^2}{h}. \quad (1.18)$$

En dérivant les équations de Maxwell en présence des fermions de Weyl, on retrouvera cette conductivité Hall, avec en addition un second terme "anormal" proportionnel à b_0 . Ces deux termes sont intimement liés à l'anomalie chirale, comme on va le voir dans la section suivante.

1.2 Anomalie chirale et axion

1.2.1 Anomalie chirale façon matière condensée

1.2.1.1 Anomalie chirale en une dimension

L'anomalie chirale se dérive de façon très simple en matière condensée et plus particulièrement pour un gaz d'électrons unidimensionnel [57]. Prenons un système décrit à basse énergie par une bande comme sur la figure 1.5.

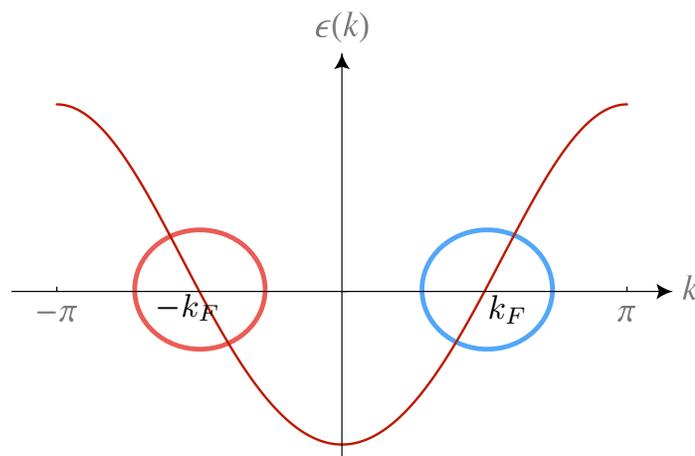


FIGURE 1.5 Dispersion électronique unidimensionnel. Les électrons au niveau de Fermi ont des moments $\pm k_F$ et dispersent linéairement si l'on se place suffisamment proche de $\pm k_F$.

En se focalisant sur les électrons porteurs de charges (*i.e.* à l'énergie de Fermi), on peut les séparer en deux espèces : les électrons de gauche avec une énergie $\epsilon_+(k) = -\hbar v_F k$ et les électrons de droite d'énergie $\epsilon_-(k) = \hbar v_F k$, k étant le moment électronique et $\hbar v_F$ la pente de la dispersion pour $k \simeq k_F$. On note également ϵ_{F+} l'énergie de Fermi des électrons à gauche et ϵ_{F-} celle des électrons à droite. Naturellement, sans perturbation extérieur, $\epsilon_{F-} = \epsilon_{F+}$. Avec l'application d'un champ électrique E , l'équation du mouvement pour le moment électronique donne

$$\epsilon_{F\tau} \dot{X} = \dot{\epsilon}_\tau(k) = -\tau \hbar v_F \dot{k} = -\tau v_F e E,$$

avec la notation $\dot{X} \equiv \partial_t X$. En conséquence, le nombre d'électrons à droite (N_-) et à gauche¹⁰ (N_+) augmentent et diminuent respectivement avec le temps, ce qui se traduit par la loi de conservation

$$\begin{aligned} \dot{N}_\tau &= -\tau e E \frac{L}{2\pi \hbar} \\ \rightarrow \dot{n}_\tau &= \tau \frac{e}{\hbar} E, \end{aligned} \quad (1.19)$$

où n_τ est le nombre d'électrons τ par unité de longueur et L la longueur du système. L'équation (1.19) est un cas particulier de la non conservation du courant chirale $j_5 \equiv j_+ - j_-$ où $\mathbf{j}_\tau = (en_\tau, \mathbf{j}_\tau)$ est un vecteur comportant la charge et le courant associés aux fermions de chiralité τ . Dans ce cas particulier le système est invariant par translation et $\nabla \cdot \mathbf{j}_\tau = 0$, ce qui donne bien

$$e(\dot{n}_+ - \dot{n}_-) + \nabla \cdot (\mathbf{j}_+ - \mathbf{j}_-) = 2 \frac{e^2}{\hbar} E. \quad (1.20)$$

Les dispersions linéaires et de pentes opposées des fermions droite et gauche sont à l'origine de cette loi de (non-)conservation qui constitue, par définition, l'anomalie chirale en une dimension.

1.2.1.2 Hamiltonien de Weyl sous champ magnétique et niveaux de Landau chiraux

Quand on passe de la première à la troisième dimension spatiale¹¹, un ingrédient supplémentaire est nécessaire pour obtenir l'anomalie chirale : c'est le champ magnétique. Prenons donc un modèle minimal d'électrons de Weyl dans un champ magnétique uniforme

10. On définit $N_\tau \equiv \sum_{0 < k < |k_{F\tau}|} = \frac{L}{2\pi} \int_0^{|k_{F\tau}|} dk = L_z \epsilon_{F\tau} / (\hbar v_F)$.

11. Notons qu'il n'y a pas d'anomalie chirale en dimension impaire (c'est-à-dire une dimension spatiale paire additionnée de la dimension temps). Cela vient du fait qu'on a besoin de se ramener à un système spatiotemporel en 1+1D, notamment avec l'application d'un champ magnétique. Cela n'est pas possible en dimension paire. On peut également relier cela au fait qu'on ne peut pas définir de fonction équivalente à γ^5 en dimension impaire [58]. Plus précisément, en $D = 2n + 1$ dimensions, on peut avoir une équation de Dirac $\gamma^\mu \partial_\mu \Psi = 0$ en définissant D matrices de Dirac vérifiant l'algèbre de Clifford, mais on ne pourra pas définir de matrice $\gamma^{D+1} = i\gamma^1 \gamma^2 \dots \gamma^D$ qui anticommute avec les D matrices de Dirac.

et statique. Appliquons ce champ magnétique dans la direction $\hat{\mathbf{z}}$. Les électrons de chiralité τ sont régis par l'hamiltonien $\tau\hbar v\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ en l'absence de champ, où \mathbf{p} est le moment défini par rapport au moment du noeud de Weyl de chiralité τ . Le couplage minimal du champ électromagnétique avec les électrons transforme l'hamiltonien en $\tau\hbar v(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\cdot\boldsymbol{\sigma} - eA_0$ où \mathbf{A} et A_0 sont les potentiels vecteur et scalaire du champ électromagnétique. Dans la jauge de Landau on a $A_0 = 0$ et $\mathbf{A} = (0, x, 0) B$ (on notera B la norme du champ magnétique). Le système perd ainsi son invariance par translation dans la direction x (perpendiculaire à \mathbf{B}), et le moment est conservé dans les directions y et z . On réécrit l'hamiltonien

$$\tau v_F (p_z \sigma_z + \mathbf{\Pi}_\perp \cdot \boldsymbol{\sigma}_\perp) + \tau b_0, \quad (1.21)$$

avec $\mathbf{\Pi}_\perp = (\Pi_x, \Pi_y) \equiv (p_x, p_y + xeB)$. En utilisant la fameuse relation de commutation $[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$, on montre facilement qu'on peut définir des opérateurs d'échelle

$$\begin{aligned} a &= \frac{\Pi_x - i\Pi_y}{\sqrt{2}\ell_B^{-1}} \\ a^\dagger &= \frac{\Pi_x + i\Pi_y}{\sqrt{2}\ell_B^{-1}} \end{aligned} \quad (1.22)$$

vérifiant $[a, a^\dagger] = 1$, avec lesquels l'hamiltonien de Weyl s'écrit finalement

$$h_\tau(k_z) = \tau\hbar v_F \left[\sigma_z k_z + \sqrt{2}\ell_B^{-1} (a\sigma^+ + a^\dagger\sigma^-) \right]. \quad (1.23)$$

L'opérateur $a^\dagger a$ a pour états propres l'ensemble $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ avec les valeurs propres associées égales aux entiers n . Les fonctions d'onde associées à ces états sont [59]

$$\langle x, y, z | n, X, k_z \rangle = e^{ik_z z} \frac{e^{-iyX/\ell_B^2}}{\sqrt{L_y L_z \ell_B}} \frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-X}{\ell_B}\right)^2}}{2^n n! \sqrt{\pi}} H_n \left(\frac{x-X}{\ell_B} \right), \quad (1.24)$$

où H_n est le polynôme d'Hermite de degré n et $X \equiv -k_y \ell_B^2$ est le centre d'une orbite cyclotron. Il est à noter que les énergies propres dépendent seulement de k_z et n , et que tous les niveaux n associés à des orbites cyclotrons différentes sont dégénérés en énergie. Le facteur $e^{ik_z z} / \sqrt{L_z}$ provient de l'invariance par translation et du caractère d'onde plane de l'état électronique dans la direction z . Pour résoudre l'hamiltonien (1.23), on utilise les propriétés des états propres (en oubliant les indices k_z et X pour simplifier la notation)

$$\begin{aligned} a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned}$$

On trouve ainsi des états propres, indicés par des entiers naturels n , qu'on appelle niveaux de Landau. La grande particularité de cet ensemble d'états est la différence qualitative suivante entre les états d'indices strictement positifs et les états à $n = 0$. À l'entier $n > 0$ correspondent deux niveaux, c'est-à-dire à deux spineurs $|\Psi_{n,\tau}^{\pm}(k_z)\rangle$ avec les énergies propres $\epsilon_{n\tau\lambda}(k_z)$

$$|\Psi_{n,\tau}^{\lambda}(k_z)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \lambda\tau\sqrt{1 + \lambda\tau\frac{\hbar v_F k_z}{E_{nk_z}}} |n-1\rangle \\ \sqrt{1 - \lambda\tau\frac{\hbar v_F k_z}{E_{nk_z}}} |n\rangle \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

$$\epsilon_{n\tau\lambda}(k_z) = \tau b_0 - \tau\lambda\hbar v_F \sqrt{2\ell_B^{-2}n + k_z^2} \quad (1.26)$$

où $\ell_B \equiv \sqrt{\hbar/eB}$ est définie comme la longueur magnétique, $\lambda = \pm 1$, et $E_{nk_z} \equiv \hbar v_F \sqrt{2\ell_B^{-2}n + k_z^2}$. Par ailleurs, $n = 0$ n'est associé qu'à un seul état propre

$$|\Psi_{0\tau}(k_z)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}$$

$$\epsilon_{0\tau}(k_z) = \tau b_0 - \tau\hbar v_F k_z$$

qui est appelé niveau de Landau chiral puisqu'il ne disperse que dans une seule direction (*i.e.* $\partial_{k_z}\epsilon_{0\tau}(k_z) = -\tau\hbar v_F$ garde le même signe quelque soit k_z , voir figure 1.6).

Remarquons qu'on obtient un système unidimensionnel effectif avec une infinité de bandes. Le gap énergétique entre les niveaux de Landau chiraux et le reste des niveaux étant égal à $v\sqrt{2\hbar eB}$, on peut augmenter le champ magnétique de telle manière à ce que le potentiel chimique coupe seulement les niveaux de Landau chiraux et reste bien en-dessous de ce gap. Dans ce cadre, on appelle *limite quantique* cette situation où seuls les niveaux de Landau d'indice $n = 0$ sont au niveau de Fermi [60]. Ainsi, à champ magnétique suffisamment fort, les propriétés du système sont principalement gouvernées par les niveaux chiraux et l'anomalie doit pouvoir être observée.

1.2.1.3 Anomalie chirale en 3D

Une fois qu'on a obtenu un système unidimensionnel effectif gouverné par deux états électroniques chiraux, la discussion est essentiellement la même que pour le cas unidimensionnel. La principale différence est l'ajout du facteur de dégénérescence de ces niveaux chiraux qui est $\frac{\Phi_B}{\Phi_0} = L_x L_y eB/h$ [60, 61], où Φ_B est le flux du champ magnétique à travers le

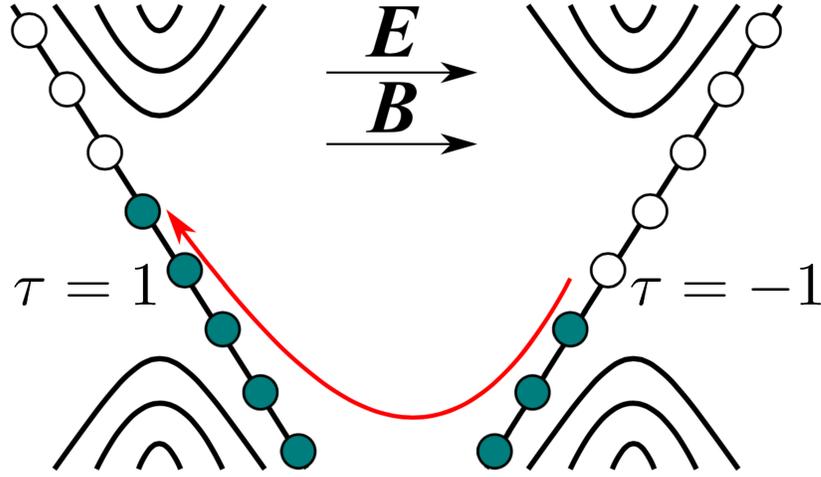


FIGURE 1.6 Structure électronique pour une paire de fermions de Weyl de chiralités opposées, plongés dans un champ magnétique. On y distingue les deux niveaux de Landau chiraux qui ont des pentes bien définies, et les niveaux non-chiraux. Appliquer un champ électrique parallèle au champ magnétique induit un transfert de fermions de chiralité - vers les fermions de chiralité +. Figure extraite de [1].

cristal et $\Phi_0 = h/e$ est le quantum de flux. L'application d'un champ électrique E_z accélère les électrons selon la direction du champ magnétique, \hat{z} . Si en l'absence de E_z , l'énergie de Fermi croise seulement les niveaux de Landau 0, on a pour chaque nœud τ une variation de l'énergie de Fermi $\epsilon_{F\tau}$ qui, à cause de la dispersion linéaire de ces niveaux, est proportionnelle à E_z :

$$\epsilon_{F\tau} = -\tau v e E_z. \quad (1.27)$$

La variation du nombre d'électrons suit donc la même égalité que dans le cas unidimensionnel (équation 1.19) au facteur de dégénérescence près :

$$\begin{aligned} \dot{N}_\tau &= -\tau e E_z \frac{L_z}{2\pi \hbar} \frac{\Phi_B}{\Phi_0} \\ \rightarrow \dot{n}_\tau &= \tau \frac{e^2}{h^2} B E_z = \tau \frac{e^2}{h^2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}, \end{aligned} \quad (1.28)$$

n_τ étant le nombre d'électrons τ par unité de volume. Comme dans le cas en une dimension, l'équation (1.28) est un cas particulier de l'anomalie chirale, mais en 3+1 dimensions. Cette dernière s'écrit

$$e(\dot{n}_+ - \dot{n}_-) + \nabla \cdot (\mathbf{j}_+ - \mathbf{j}_-) = 2 \frac{e^2}{h^2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}. \quad (1.29)$$

Jusque là, nous n'avons pas mentionné la séparation des nœuds de Weyl, qui n'apparaît pas dans l'hamiltonien utilisé (équations (1.21) et (1.23)). Pourtant celle-ci peut être

importante dans les propriétés de transport anormales. En effet, la non conservation de N_τ implique un taux de transfert d'impulsion (par unité de volume) d'un nœud à l'autre :

$$\partial_t \mathbf{P} = \sum_\tau \dot{n}_\tau \hbar \mathbf{k}_\tau = 2 \frac{e^2}{\hbar^2} \hbar (\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{b}, \quad (1.30)$$

où $2\mathbf{b} = \mathbf{k}_+ - \mathbf{k}_-$ est la séparation des nœuds de Weyl dans l'espace de moments. On peut interpréter $\partial_t \mathbf{P}$ comme une force de Lorentz :

$$\partial_t \mathbf{P} = \rho_H \mathbf{E} + \mathbf{j}_H \wedge \mathbf{B} \quad (1.31)$$

qui correspond à (1.30) pour $\rho_H = \frac{e^2}{\hbar} 2\mathbf{b} \cdot \mathbf{B}$ et $\mathbf{j}_H = \mathbf{E} \wedge (\frac{e^2}{\hbar} 2\mathbf{b})$. Finalement, on voit que l'existence de l'anomalie chirale associée à une séparation des nœuds aboutit à une conductivité Hall

$$\sigma_{Hij} = \epsilon^{ijl} \frac{e^2}{\hbar} 2b_l, \quad (1.32)$$

où ϵ^{ijl} est le tenseur antisymétrique de Levi-Civita de rang 3 (avec $i, j, l = x, y$ ou z). Comme on le verra par la suite, on peut ajouter à \mathbf{j}_H un courant proportionnel à \mathbf{B} dans (1.30) sans que cela ne change la force de Lorentz dans (1.31). On aura ainsi deux types de courant anormaux émergeant avec l'anomalie chirale.

Il est important de mentionner le lien entre l'anomalie chirale et la magnéto-résistance négative. On peut réécrire l'équation (1.27) comme un transfert de moment, si l'on rajoute un taux de diffusion Γ entre les deux nœuds [62] :

$$\hbar p_z = -eE_z + \hbar p_z \Gamma. \quad (1.33)$$

Cela qui amène à un courant longitudinal stationnaire (en prenant en compte la dégénérescence des niveaux de Landau)

$$j_z = \frac{1}{2\pi\mathcal{V}} \frac{e^2}{\hbar} \frac{L_z}{2\pi\hbar} \frac{\Phi_B}{\Phi_0} e v_F p_z = \frac{v_F \Gamma}{4\pi^2} \frac{e^2}{\hbar} \frac{e}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{E} = \frac{v_F \Gamma}{4\pi^2} \frac{e^2}{\hbar} \ell_B^{-2} E_z, \quad (1.34)$$

où $\mathcal{V} = L_x L_y L_z$ est le volume du système. Il y a donc une contribution à la conductivité induite par le champ magnétique et qui augmente de façon monotone avec l'amplitude de \mathbf{B} , d'où le terme de magnéto-résistance négative. Notons que la dépendance linéaire en B de cette magnétoconductivité n'est plus valide à faible champ magnétique, quand la quantification des niveaux de Landau n'est plus pertinente. Notamment, les auteurs de [28, 62] ont montré dans un cadre semi-classique que la contribution des nœuds de Weyl à la magnétoconductivité est proportionnelle à B^2 à faible champ.

1.2.2 Théorie des champs, axion et anomalie chirale

Dans cette section, nous allons introduire le concept d'axion, qui jouera un rôle important dans le reste de ce travail. Afin de faire une analogie explicite avec la théorie des champs dont sont originaires les fermions de Weyl et ce terme d'axion, utilisons les matrices γ . Elles nous permettent d'écrire l'hamiltonien de Weyl sous sa forme covariante :

$$\mathcal{H}_W = \int d^3\mathbf{r} \bar{\Psi}(\mathbf{r}) \left[-\gamma^0 (i\partial_t + eA_0 + ea_0 + a_0^5 \gamma^5) + \boldsymbol{\gamma} \cdot (\mathbf{P} + e\mathbf{A} + e\mathbf{a} + \mathbf{a}^5 \gamma^5) \right] \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.35)$$

$$\equiv \int d^3\mathbf{r} \bar{\Psi}(\mathbf{r}) \left[\gamma^\mu \not{D}_\mu + \gamma^\mu a_\mu + \gamma^\mu a_\mu^5 \gamma^5 \right] \Psi(\mathbf{r}), \quad (1.36)$$

avec $\bar{\Psi} \equiv \Psi^\dagger \gamma^0$, et $\not{D}^\mu = p^\mu + eA^\mu$. Dans cette hamiltonien, les fermions, représentés par le champ Ψ , sont en couplage minimal avec le champ électromagnétique A^μ , un champ dit *vecteur*, dénoté a^μ , et un champ dit *axial* et dénoté $a^{5\mu}$. Le champ électromagnétique est naturellement un champ de type vecteur. Les deux autres champs a^μ et $a^{5\mu}$ peuvent avoir diverses origines, notamment des modes collectifs qui interagissent avec les électrons. Les conséquences de tels modes ont été sujets de plusieurs travaux [25, 51].

Rappelons que 1.35 peut se récrire dans la même notation matricielle que 1.13 :

$$\mathcal{H}_W = \int d^3\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left[\tau^z \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{P} + e\mathbf{A} + \mathbf{a} + \mathbf{a}^5 \tau^z) - eA_0 - a_0 - a_0^5 \tau^z \right] \Psi(\mathbf{r}). \quad (1.37)$$

On constate que les champs axiaux créent une différence en énergie (a_0^5) et en moment (\mathbf{a}^5) entre les deux fermions de Weyl, de la même façon que les termes b_0 et \mathbf{b} dans 1.13.

1.2.2.1 Axion dans un semimétal de Weyl sans interaction

Revenons à l'action pour les fermions de Weyl sans interaction

$$\mathcal{S}_W = \int d^4x \bar{\Psi}(x) i\gamma^\mu [\partial_\mu + iA_\mu + ib_\mu \gamma^5] \Psi(x), \quad (1.38)$$

qui correspond à (1.36) si l'on suppose $a_\mu = 0$ et $a_\mu^5 = b_\mu$. Notons la similarité avec l'hamiltonien (1.13) : le champ axial $b^\mu = (b_0, \mathbf{b})$, correspond à la séparation en énergie et en moment entre les noeuds de Weyl et est une constante.

Si on utilise les états propres ψ découlant du Lagrangien de l'action (1.38), on peut calculer simplement $\partial_\mu (\bar{\psi} \gamma^\mu \gamma^5 \psi) = 0$, ce qui semble indiquer la conservation du courant

chiral¹². Pourtant, le courant chiral défini comme $j_\mu^5 = \bar{\Psi}\gamma^\mu\gamma^5\Psi$ ne l'est pas, d'où le nom "anomalie chirale". En effet, dans cette section nous allons montrer que

$$\partial^\mu \langle j_\mu^5 \rangle = \partial_\mu \text{Tr}[\bar{\Psi}\gamma^\mu\gamma^5\Psi] \neq 0,$$

où l'opération notée Tr correspond à une somme sur tous les états fermioniques possibles et n'a rien d'une simple trace de matrice. Également, on verra que l'effet du terme $b_\mu\gamma^5$ dans (1.38) donnera lieu à un terme de courant dans les équations du champ électromagnétique.

La méthode que nous présentons ici provient de Fujikawa [63]. Elle consiste à éliminer le terme axial $b_\mu\gamma^5$ de l'action par un changement de variable du champ fermionique, et d'étudier le terme effectif (*i.e.* indépendant du champ fermionique) qui résulte de ce changement de variable. Commençons par remarquer que le terme $b_\mu\gamma^5$ dans (1.38) est éliminé par la rotation chirale $\Psi \rightarrow \Psi e^{-ib_\mu x_\mu \gamma^5}$. Le lagrangien classique respecte la symétrie chirale, cependant, ce système n'est pas invariant sous la transformation de jauge précédente, d'où l'apparition de l'anomalie chirale. Si le système était invariant sous rotation chirale, le terme $b_\mu\gamma^5$ ne jouerait pas sur les équations du mouvement. L'anomalie vient du fait que ce changement de jauge doit s'accompagner d'un changement de la mesure $D\Psi$ de l'intégrale de chemin dans la fonction de partition fermionique

$$\mathcal{Z} = \int D\Psi D\Psi e^{\mathcal{S}}. \quad (1.39)$$

Pour montrer cela, commençons par effectuer une transformation de jauge chirale infinitésimale :

$$\begin{aligned} \Psi &\rightarrow \Psi' = [1 - ids b_\mu x_\mu \gamma^5] \Psi \\ \bar{\Psi} &\rightarrow \bar{\Psi}' = \bar{\Psi} [1 - ids b_\mu x_\mu \gamma^5] \end{aligned} \quad (1.40)$$

avec ds le paramètre infinitésimal de la transformation. L'action (1.38) devient alors, au

12. Le courant total $j_\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ est déduit de l'équation de continuité $\nabla \cdot \mathbf{j} + \partial_t |\psi|^2 = 0$. On a $\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$, ce qui donne $j_\mu = \bar{\psi}_+ \gamma^\mu \psi_+ + \bar{\psi}_- \gamma^\mu \psi_- = j_\mu^+ + j_\mu^-$. Les composantes ψ_\pm ayant une chiralité bien définie, on voit ainsi que le terme $j_\mu^5 = \bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi$ est égal à la différence en courant des états de chiralités opposées : $j_\mu^5 = j_\mu^+ - j_\mu^-$.

premier ordre en ds :

$$\begin{aligned}
\mathcal{S} &= \int d^4x \bar{\Psi} [1 - idsb_\mu x_\mu \gamma^5] i\gamma^\mu [\partial_\mu + iA_\mu + ib_\mu \gamma^5] [1 - idsb_\mu x_\mu \gamma^5] \Psi \quad (1.41) \\
&= \int d^4x \bar{\Psi} i\gamma^\mu [1 + idsb_\mu x_\mu \gamma^5] [\partial_\mu + iA_\mu + ib_\mu \gamma^5] [1 - idsb_\mu x_\mu \gamma^5] \Psi \\
&= \int d^4x \bar{\Psi} i\gamma^\mu [\partial_\mu + iA_\mu + (1 - ds) ib_\mu \gamma^5] \Psi.
\end{aligned}$$

Ainsi, à l'étape s (*i.e.* on a effectué l'opération (1.40) jusqu'à obtenir une rotation de $isb_\mu x_\mu \gamma^5$), l'action devient $\int d^4x \bar{\Psi} i\mathcal{D}'_s \Psi$, avec $\mathcal{D}'_s = \gamma^\mu [\partial_\mu + iA_\mu + (1 - s) ib_\mu \gamma^5]$. Le terme $b_\mu \gamma^5$ est finalement éliminé pour $s = 1$.

Regardons maintenant le changement dans la mesure apportée par un changement de jauge infinitésimal. Autrement dit, trouvons le Jacobien de la transformation $\Psi \rightarrow \Psi' = [1 - idsb_\mu x_\mu \gamma^5] \Psi$. Plaçons nous pour cela à l'étape s et décomposons les opérateurs fermioniques :

$$\begin{aligned}
\Psi &= \sum_i a_i \phi_i \rightarrow \Psi' = \sum_i a'_i \phi_i \quad (1.42) \\
\bar{\Psi} &= \sum_i b_i \phi_i^\dagger \rightarrow \bar{\Psi}' = \sum_i b'_i \phi_i^\dagger,
\end{aligned}$$

où les ϕ_i sont les états propres orthonormaux de l'opérateur \mathcal{D}'_s . On a alors $D\Psi = \prod_i da_i$ et $D\Psi' = \prod_i da'_i = D\Psi \det(C^{-1})$ avec $C_{ij} = \frac{\delta a'_i}{\delta a_j}$. En utilisant l'orthonormalité $\int d^4x \phi_i^\dagger(x) \phi_j(x) = \delta_{ij}$, on a

$$a'_i = \sum_j a_j \left\{ \delta_{ij} - \int d^4x \phi_i^\dagger(x) idsb_\mu x_\mu \gamma^5 \phi_j(x) \right\}$$

et ainsi

$$C_{ij} = \delta_{ij} - ids \int d^4x \phi_i^\dagger(x) b_\mu x_\mu \gamma^5 \phi_j(x) = e^{-ids \sum_j \int d^4x \phi_i^\dagger(x) b_\mu x_\mu \gamma^5 \phi_j(x)}.$$

La transformation de $\bar{\Psi}$ donne le même Jacobien, *i.e.* $\frac{\delta b'_i}{\delta b_j} = C_{ji}$. On a donc

$$\begin{aligned}
D\bar{\Psi}' D\Psi' &= D\bar{\Psi} D\Psi \det(C)^{-2} \quad (1.43) \\
&= D\bar{\Psi} D\Psi e^{-2 \ln \det(C)} = D\bar{\Psi} D\Psi e^{-2 \text{tr} \ln(C)} \\
&= D\bar{\Psi} D\Psi e^{2ids \int d^4x b^\mu x_\mu I(x)},
\end{aligned}$$

avec $I(x) \equiv \sum_i \phi_i^\dagger(x) \gamma^5 \phi_i(x)$. Il est maintenant important de noter que ce terme $I(x)$ correspond à l'anomalie chirale. En effet, $x^\mu I(x)$ est la correction à l'action \mathcal{S} apportée par

un champ axial infinitésimal, ici donnée par $a_\mu^5 = ds b_\mu \gamma_\mu$. On a donc

$$\begin{aligned} I(x) &= \frac{i}{2} \partial_{x_\mu} \left(\frac{\delta S}{\delta a_\mu^5} \right) \\ &= \partial_{x_\mu} j_\mu^5 \end{aligned} \quad (1.44)$$

par définition du courant chirale. Si $I(x) \neq 0$, le courant axial n'est pas conservé ce qui démontre l'anomalie chirale. La somme $\sum_i \phi_i^\dagger(x) \gamma^5 \phi_i(x)$ n'est pas bien définie telle quelle du fait qu'elle contient deux infinis qui s'annulent. Ces deux parties de la somme, nous pouvons les interpréter comme le nombre de fermions de chiralité positive (les états propres de γ^5 associés à la valeur propre 1) moins ceux de chiralité négative (associés à la valeur propre -1). En matière condensée, ces deux nombres seraient bien sûr finis et dépendraient d'un cutoff marquant la limite de la dispersion à basse énergie de type fermion de Weyl. On peut faire le lien avec ce calcul de type Physique des hautes énergies en poussant le cutoff à l'infini et obtenir, espérons le, un résultat indépendant de tout cutoff. Dans cette section on introduira un cutoff à l'aide d'une régularisation gaussienne en suivant la méthode de Fujikawa [54, 63, 64]. On note ce cutoff M :

$$I(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_i \phi_i^\dagger(x) \gamma^5 e^{-\frac{\lambda_i^2}{M^2}} \phi_i(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_i \phi_i^\dagger(x) \gamma^5 e^{-\frac{(i\mathcal{D}_s)^2}{M^2}} \phi_i(x) \quad (1.45)$$

où λ_i est la valeur propre de $i\mathcal{D}_s$ associée à ϕ_i . Pour commencer, on décompose les $\phi_i(x)$ selon leurs composantes de Fourier $\phi_i(k)$. Puis on insert la relation de complétude $\sum_i \phi_i^\dagger(k) \phi_i(k') = \delta(k - k')$ dans la somme (1.45). Du fait que $\phi_i(k)$ est vecteur propre de $\gamma^5 e^{-\frac{(i\mathcal{D}_s)^2}{M^2}}$, cela donne $\sum_i \phi_i^\dagger(k) e^{-ik \cdot x} \gamma^5 e^{-\frac{(i\mathcal{D}_s)^2}{M^2}} e^{ik' \cdot x} \phi_i(k') = \text{tr} \left[e^{-ik \cdot x} \gamma^5 e^{-\frac{(i\mathcal{D}_s)^2}{M^2}} e^{ik \cdot x} \right]$, et

$$I(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{ikk'} \phi_i^\dagger(k) e^{-ik \cdot x} \gamma^5 e^{-\frac{(i\mathcal{D}_s)^2}{M^2}} \phi_i(k') e^{ik' \cdot x} = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_k e^{-ik \cdot x} \text{tr} \gamma^5 e^{-\frac{(i\mathcal{D}_s)^2}{M^2}} e^{ik \cdot x}. \quad (1.46)$$

Par ailleurs, on a

$$\begin{aligned} (i\mathcal{D}_s)^2 &= -\gamma^\mu [D_\mu + \gamma^5(1-s)b_\mu] \gamma^\nu [D_\nu + \gamma^5(1-s)b_\nu] \\ &= -\gamma^\mu \gamma^\nu [D_\mu - \gamma^5(1-s)b_\mu] [D_\nu + \gamma^5(1-s)b_\nu] \\ &= -D_\mu D_\nu - (1-s)^2 b_\mu b_\nu + \frac{i}{4} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] F_{\mu\nu} + i(1-s) [\gamma^\mu, \gamma^\nu] b_\mu D_\nu \gamma^5, \end{aligned} \quad (1.47)$$

où $D_\mu = \partial_\mu + iA_\mu = \mathcal{D}_{s=1}$ et où on a utilisé $[D_\mu, D_\nu] = iF_{\mu\nu} = i(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)$. En

appliquant $e^{-\frac{(i\cancel{p}_s)^2}{M^2}}$ à $e^{ik \cdot x}$ dans (1.46), on obtient

$$I(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \text{tr} \left[\gamma^5 \exp \left[\frac{(ik + D)^2}{M^2} + \frac{(1-s)^2 b^2}{M^2} - \frac{i}{4M^2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] F_{\mu\nu} - \frac{i(1-s)}{M^2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] b_\mu (ik_\nu + D_\nu) \right] \right].$$

L'astuce est de faire ensuite le changement de variable $k \rightarrow Mk$ et de faire le développement de Taylor pour $M^{-2} \rightarrow 0$ dans l'exponentielle. Il faut aussi utiliser les identités présentées en section 1.1.1.2, notamment :

$$\begin{aligned} \text{tr} \gamma^5 &= \text{tr} (\gamma^5 \gamma^\mu \gamma^\nu) = \text{tr} ([\gamma^\mu, \gamma^\nu]) = 0 \\ \text{tr} \left(\gamma^5 [\gamma^\mu, \gamma^\nu] [\gamma^\alpha, \gamma^\beta] \right) &= -16i \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Les termes au premier ordre en M^2 sont proportionnels à γ^5 ou $[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ dont les traces sont nulles. Les termes d'ordre supérieur ou plus sont supprimés par la limite $M \rightarrow \infty$. Il ne reste que

$$I(x) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\mu\nu} F_{\alpha\beta} \int d^4 k e^{-k^2} = -\frac{1}{32\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\mu\nu} F_{\alpha\beta}. \quad (1.48)$$

On voit que $I(x)$ ne dépend finalement pas du paramètre s , ce qui nous permet directement d'écrire directement pour $s = 1$:

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\Psi} D\Psi e^{-i \int d^4 x \bar{\Psi} D_\mu \gamma^\mu \Psi} e^{\mathcal{S}_\theta} \quad (1.49)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_\theta &= -\frac{i}{32\pi^2} \int d^4 x \theta(x) \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\mu\nu} F_{\alpha\beta} \\ &= -\frac{i}{8\pi^2} \int d^4 x \partial_\mu \theta(x) \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} A_\nu \partial_\alpha A_\beta \\ &= -\frac{i}{8\pi^2} \int d^4 x \theta(x) \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \end{aligned} \quad (1.50)$$

Ici, $\theta(x) = 2b^\mu x_\mu = 2(\mathbf{b} \cdot \mathbf{r} - b_0 t)$. Cette démonstration nous a permis de voir que l'anomalie chirale associée à une séparation de noeuds de Weyl (correspondant aux termes \mathbf{b} et b_0) amène à un couplage effectif particulier¹³ entre les champs électriques et magnétique [19] (ce qui peut finalement se résumer en parcourant les équations (1.40), puis (1.43), (1.44), (1.48),

13. De façon plus standard, l'intégration des degrés de liberté électroniques ajoute des termes quadratiques en \mathbf{E}^2 et \mathbf{B}^2 à l'action effective du champ électromagnétique. Cela se traduit par une renormalisation de la fonction diélectrique du matériau.

et enfin (1.50)). On associe à ce couplage électromagnétique une particule, appelée axion, représentée par le champ $\theta(x)$. C'est la variation de θ dans l'espace et dans le temps qui va donner lieu à un effet observable dans les équations du champ électromagnétique.

Ce type de couplage électromagnétique se retrouve dans les isolants topologiques. Notamment, dans un isolant topologique tridimensionnel respectant la symétrie par renversement du temps, $\theta = \pi$ dans la phase topologique et $\theta = 0$ dans la phase triviale [65]. Ainsi la variation de θ à la surface du matériau topologique donne lieu à des courants de bord. Comme on va le voir, le terme θ des semimétaux de Weyl donne toujours naissance à des courants de volume, du fait de sa variation uniforme dans l'espace.

1.2.2.2 Aparté sur la conséquence de l'axion sur les équations de Maxwell

Dans cette sous-section, nous allons voir comment l'anomalie chirale modifie les équations de Maxwell en ajoutant des termes anormaux. Ceux-ci correspondent à la présence d'une polarisation induite par un champ magnétique $\mathbf{P}_\theta = \frac{1}{8\pi^2}\theta(x)\mathbf{B}$, qui induit une densité de charge $-\nabla \cdot \mathbf{P}_\theta$ et un courant volumique $-\partial_t \mathbf{P}_\theta$. Les équations de Maxwell deviennent ainsi dans l'espace de Fourier

$$\mathbf{k} \cdot \epsilon(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) = -i\epsilon_0 \frac{2\alpha}{\pi} c \mathbf{b} \cdot \mathbf{B}(\omega, \mathbf{k}) \quad (1.51)$$

$$\mathbf{k} \wedge \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) = \omega \mathbf{B}(\omega, \mathbf{k}) \quad (1.52)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}(\omega, \mathbf{k}) = 0 \quad (1.53)$$

$$\mathbf{k} \wedge \mathbf{B}(\omega, \mathbf{k}) = -\omega \mu \epsilon(\omega, \mathbf{k}) \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) + i \frac{2\alpha}{\pi} \frac{1}{c} (\mathbf{b} \wedge \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) + \frac{b_0}{\hbar} \mathbf{B}(\omega, \mathbf{k})), \quad (1.54)$$

où $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ et μ sont respectivement la permittivité électrique et la perméabilité magnétique totales du matériau, cette dernière étant supposée constante pour simplifier les équations¹⁴. α est la constante de structure fine. Notons au passage qu'on peut voir de façon équivalente l'effet de l'axion comme la création d'un courant $\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{AH}} + \mathbf{j}_{\text{CME}}$ avec $\mathbf{j}_{\text{AH}} = \frac{2\alpha}{\pi} \frac{1}{c} \mathbf{b} \wedge \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k})$ et $\mathbf{j}_{\text{CME}} = \frac{2\alpha}{\pi} \frac{1}{c} \frac{b_0}{\hbar} \mathbf{B}(\omega, \mathbf{k})$. \mathbf{j}_{AH} représente un courant Hall anormal (*i.e.* un effet Hall en l'absence de champ magnétique) directement relié à la discussion de la sous-section 1.1.3.3. \mathbf{j}_{CME} correspond à un effet chirale magnétique. Ce dernier a été l'objet de nombreux travaux, notamment pour étudier son lien avec l'anomalie chirale [66–68] du fait qu'il peut provenir d'origines autres que les noeuds de Weyl. À potentiel chimique fini, il est possible de montrer de façon plus générale que le courant chirale magnétique comporte un terme proportionnel à la différence des potentiels chimiques au voisinage des différents noeuds de Weyl [68]. Ce

14. Si la permittivité et la perméabilité magnétique dépendent toutes deux du temps, on devrait écrire, dans l'espace de Fourier, le produit de convolution $[\mu * \epsilon](\omega)$ au lieu du simple produit.

courant est donc induit hors-équilibre, par exemple par un champ électrique parallèle au champ magnétique, et peut ainsi être interprété comme la magnétoconductivité positive (ou magnétorésistance négative) discutée en 1.2.1.3.

Notons que la permittivité $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ peut comporter une partie imaginaire proportionnelle à la partie réelle de la conductivité [69, 70]. À priori, cette conductivité peut comprendre une partie dépendante du champ magnétique et du taux de diffusion entre les nœuds de Weyl comme la magnétoconductivité discutée précédemment.

La modification des équations de Maxwell a pour conséquence évidente la modification de la propagation des ondes électromagnétiques. Les phénomènes résultants sont appelés dichroïsme linéaire, rotation de Kerr et rotation de Faraday [71]. Par l'intermédiaire de $\epsilon(\omega)$, cela change la dispersion des polaritons, c'est-à-dire les modes résultant du couplage fort entre les modes du milieu et les ondes électromagnétiques. Les principaux concernés sont les polaritons de plasmons et de phonons qui sont directement liés à $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$. Les fréquences de ces modes propres sont données par l'équation au déterminant nul correspondant à (1.54). En prenant $\mathbf{B} = \mathbf{k} \wedge \mathbf{E}/\omega$ et en appliquant $\mathbf{k} \wedge$ à tous les termes, on voit ainsi que les solutions non triviales de (1.54) sont données par

$$\det \left[\mathbf{k}^2 - \overline{\mathbf{k}\mathbf{k}} - \omega^2 \mu \epsilon(\omega) + i \frac{2\alpha}{\pi} \frac{\omega}{c} (\overline{\mathbf{b}}_{\mathbf{C}} + \frac{b_0}{\hbar\omega} \overline{\mathbf{k}}_{\mathbf{C}}) \right] = 0 \quad (1.55)$$

où $\overline{\mathbf{k}\mathbf{k}}$, $\overline{\mathbf{b}}_{\mathbf{C}}$ et $\overline{\mathbf{k}}_{\mathbf{C}}$ sont les matrices dont les composantes ij sont données respectivement par $k_i k_j$ ($\overline{\mathbf{k}\mathbf{k}}\mathbf{E} = \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E})$), $\epsilon_{ijl} b_l$ ($\overline{\mathbf{b}}_{\mathbf{C}}\mathbf{E} = \mathbf{b} \wedge \mathbf{E}$) et $\epsilon_{ijl} k_l$ ($\overline{\mathbf{k}}_{\mathbf{C}}\mathbf{E} = \mathbf{k} \wedge \mathbf{E}$). Prenons l'exemple de phonons polaires optiques qui participent à la permittivité d'un terme $\epsilon_{\text{ph}}(\omega) = \epsilon_{\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{\text{LO}}^2}{\omega^2 - \omega_{\text{TO}}^2}$ (où ϵ_{∞} est la permittivité dans la limite de fréquence infinie; voir section 2.2.2). On négligera de plus la conductivité électronique de telle sorte que $\epsilon = \epsilon_{\text{ph}}$. Dans ce cas, en l'absence des termes anormaux, les solutions de l'équation (1.55) sont simples. Une correspond à un champ électrique longitudinal (*i.e.* parallèle à sa direction de propagation $\hat{\mathbf{k}}$) dont la fréquence vérifie $\epsilon(\omega) = 0$, c'est à dire $\omega = \omega_{\text{LO}}$. Cette solution est le champ électrique créé par le phonon optique longitudinal. Les deux autres solutions sont transverses et ont pour dispersion $\mathbf{k}^2 - \omega^2 \mu \epsilon(\omega) = 0$. Dans notre cas, ces solutions sont

$$\omega^2 = \frac{c_m^2 \mathbf{k}^2 + \omega_{\text{LO}}^2 \pm \sqrt{(c_m^2 \mathbf{k}^2 + \omega_{\text{LO}}^2)^2 - 4c_m^2 \mathbf{k}^2 \omega_{\text{TO}}^2}}{2}, \quad (1.56)$$

où $c_m = \sqrt{1/\mu\epsilon_{\infty}}$ est la vitesse de la lumière dans le matériau. Ces solutions sont tracées sur la figure 1.7 Le terme \mathbf{b} s'apparente à un terme de gyrotropie [72, 73]. Il couple les champ transverses et longitudinaux entre eux et lève ainsi la dégénérescence à $\mathbf{k} = 0$,

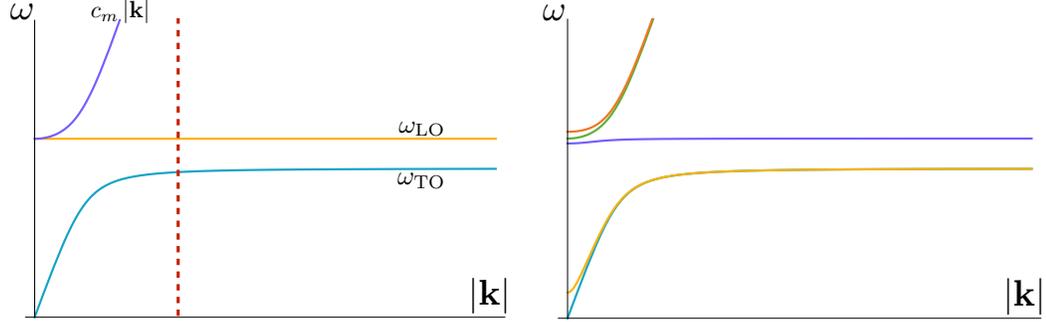


FIGURE 1.7 Dispersion de phonon-polaritons correspondant à (1.55) pour \mathbf{b} et b_0 nuls (panneau de gauche) et pour \mathbf{b} non nul avec $\mathbf{k} \perp \mathbf{b}$ (panneau de droite). À petit moment $|\mathbf{k}| \lesssim \omega_{\text{LO}}/c_m$, région délimitée par la ligne en pointillés sur la figure gauche, les modes de vibrations et électromagnétiques sont couplés et donnent lieu à une dispersion différente que celles des phonons et des photons pris indépendamment. La différence dans la dispersion apportée par le terme anormal \mathbf{b} arrive seulement dans cette région. Notons que la dispersion de photon pour $\mathbf{k} \rightarrow 0$ est doublement dégénérée. La dispersion proche de zéro qui apparaît pour $\mathbf{b} \neq 0$ correspond à une hybridation entre un photon et un phonon transverse et ne doit bien sûr pas être interprétée comme un photon ayant acquis une masse.

comme on peut le voir sur la figure 1.7 droite. Le terme b_0 , qui s'apparente à de l'activité optique, [74] couple entre eux les modes transverse et lève leur dégénérescence. Cependant, seul le mode qui devient un mode de photon pur à $|\mathbf{k}| > \omega_{\text{LO}}/c_m$ garde cette levée de dégénérescence. Dans ce cas, les photons de polarisations différentes acquièrent des vitesses différentes. Malgré ces effets possibles sur les phonons-polaritons et éventuellement les photons, les phonons purs ne sont pas influencés par les termes anormaux. En effet, dans l'équation 1.55, on voit que les solutions à plus grand $|\mathbf{k}|$ (tel que $|\mathbf{k}| \gg \omega_{\text{LO}}/c_m$) sont, soit totalement transverse (les solutions du champ électromagnétique et le mode de vibration transverse), soit totalement longitudinale (le mode de vibration de fréquence ω_{LO}). Ainsi les photons et les phonons deviennent découplés, ce qui est en accord avec le fait que les photons deviennent beaucoup plus énergétiques que les phonons dans cette région.

On a donc vu que l'activité optique engendrée par la topologie particulière des semi-métaux de Weyl a un impact sur la dispersion des phonon-polaritons et donc, dans une certaine mesure, sur les phonons à très grande longueur d'onde. Cet impact est indirect puisqu'il s'agit ici de la structure électronique qui modifie les ondes électromagnétiques qui modifient à leur tour les modes de vibrations optiquement actives. Dans le présent travail, on a pour motivation de déceler une influence plus directe des électrons de Weyl sur les phonons. Comme on peut le deviner, cela se fera en étudiant les effets du couplage phonon-électrons de Weyl. Comme on le verra par la suite, cela ne se limitera pas aux phonons à très petit moment ou aux phonons optiquement actifs (comme c'est le cas pour

les phonon-polaritons). L'autre limitation de l'étude de l'activité optique est que l'on peut retrouver des effets similaires dans des matériaux qui ne sont pas des semimétaux de Weyl, ce qui ne peut pas remplir une de nos premières motivations : celle d'obtenir un moyen direct de détecter l'anomalie chirale.

1.2.2.3 Conséquence d'un champ axial fluctuant et lien avec les phonons

L'action axionique \mathcal{S}_θ (équation (1.50)) émerge de la seule structure électronique des semimétaux de Weyl, notamment de la séparation dans la zone de Brillouin et en énergie des différents noeuds. Cette séparation engendre un champ axial uniforme et constant, ce qui confère la forme simple (1.50) à l'action \mathcal{S}_θ . La principale conséquence de cet axion est la modification de la propagation du champ électromagnétique. Ces conséquences sont semblables à des effets ferromagnétiques dont la cause serait indépendante de l'anomalie chirale, comme la gyrotropie et l'activité optique. Il est alors intéressant de se demander si la fluctuation de la séparation des noeuds de Weyl apporterait une information supplémentaire sur l'anomalie chirale. Une telle fluctuation ne peut naturellement pas être pris en compte dans la dispersion électronique sans interaction du semimétal de Weyl, et ne peut non plus provenir du champ électromagnétique puisque la lumière se couple comme un champ de vecteurs aux fermions de Weyl. Elle nécessite donc le couplage des électrons de Weyl avec certains modes du cristal. Ainsi, le point de départ de ce travail repose sur les questions suivantes :

- Peut-on avoir un mode du matériau qui se couple aux électrons à la façon d'un champ axial $a^{5\mu}$?
- Si oui, comment l'anomalie chirale se manifeste-t-elle à travers ces modes ?

Ces questions ont fait l'objet de travaux sur certains modes collectifs tels les magnons [25] et les ondes de densité de charge [29], ou bien les modes de plasmon [26] et magnétoplasmon [28]. Dans la présente étude, on s'intéresse plutôt à l'impact sur la dynamique du réseau, en particulier les modes de vibrations du cristal. Ceux-ci sont inhérents à n'importe quel cristal et ne nécessitent pas de forte interaction ou quelque phase exotique . Leur autre intérêt est leur potentielle application à des expériences, principalement optiques, et complémentaires aux mesures de transport électronique qui constituent actuellement le principal moyen de détection de l'anomalie chirale dans les semimétaux de Weyl. On peut également ajouter que, contrairement à la détection d'une magnétorésistance négative, la mesure du spectre des phonons optiques peut constituer, sous certaines conditions, une preuve univoque de l'anomalie chirale comme il sera montré dans le chapitre 3.

Chapitre 2

Phonons : généralités

Dans ce chapitre, nous introduirons le second ingrédient principal de cette thèse : les modes de vibration du réseau cristallin. La première étape sera de résumer comment, à partir de l'hamiltonien régissant les ions du cristal et quelques approximations, on arrive aux équations simplifiées de la dynamique du réseau, ces dernières pouvant être vu comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques couplés. Puis nous expliquerons la résolution classique de ces équations, menant aux modes propres de vibrations du réseau, les phonons. On introduira également une propriété propre à certains de ces modes, conférant des propriétés optiques au cristal : la charge de Born. Ce concept sera important dans la suite de nos travaux. Ensuite sera présenté un formalisme standard permettant de décrire le couplage électron-phonon local, formalisme qui sera repris pour étudier l'influence des électrons de Weyl sur les phonons. Enfin, nous ferons un très bref rappel de théorie des groupes. Ce domaine est aujourd'hui indissociable de l'étude des phonons.

2.1 Hamiltonien du réseau et premières approximations

Un cristal comprend deux types de particules chargées : les électrons d'une part et les ions d'autre part. L'étude des ions ne peut se faire sans prendre en compte les électrons du fait des interactions entre ces deux espèces. On peut en effet écrire l'hamiltonien classique

des ions et des électrons du cristal comme [75]

$$H_{ions-e}(\{\mathbf{R}_i\}, \{\mathbf{r}_j\}) = \sum_s \frac{\mathbf{P}_s^2}{2M_s} + \frac{1}{2} \sum_{s \neq l} Z_s Z_l V_C(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_l) \quad (2.1)$$

$$- \sum_{s,l} Z_s V_C(\mathbf{R}_s - \mathbf{r}_l) + \frac{1}{2} \sum_{s \neq l} V_C(\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_l),$$

où \mathbf{R}_s et \mathbf{r}_l correspondent respectivement aux positions des ions et des électrons, \mathbf{P}_s aux quantités de mouvement des ions, Z_s à leurs charges, et M_s à leurs masses. V_C est le potentiel de Coulomb. La résolution exacte du mouvement des ions en partant de l'hamiltonien (2.1) est très difficile étant donné qu'elle nécessite de résoudre simultanément le cas des ions avec celui des électrons. Une première idée est de négliger totalement la contribution des électrons dans l'hamiltonien (2.1). Cependant, cette approximation est trop drastique. En effet, les résultats numériques obtenus au fil des années avec cette dernière ont montré une trop grande différence avec le calcul incluant les électrons ainsi qu'avec les résultats expérimentaux [76]. Heureusement, l'approximation *adiabatique de Born-Oppenheimer* permet d'inclure une partie de la contribution électronique. Cette approximation scinde le problème en deux en s'appuyant sur le fait que les électrons se déplacent beaucoup plus vite que les ions du fait de leur faible masse. Plus précisément, l'inertie des électrons est négligeable par rapport à celle des ions. Ainsi, à l'échelle de temps des ions, les positions des électrons s'adaptent instantanément aux déplacements des ions et peuvent être traitées comme des paramètres et non des variables dans la dynamique des ions. En pratique, cela permet de calculer les termes électroniques (la deuxième ligne de l'équation (2.1)) à partir des états électroniques stationnaires, c'est-à-dire les états électroniques de l'hamiltonien total (ions et électrons) évalués aux positions d'équilibre fixes des atomes, notées $(\mathbf{R}_1^{(0)}, \dots, \mathbf{R}_N^{(0)})$.

Ce qui nous intéresse étant la dynamique des positions atomiques, on peut considérer que l'hamiltonien (2.1) évalué aux positions d'équilibre est une constante qu'on oubliera par la suite. La dynamique est régie par les déplacements dits hors équilibres, notés \mathbf{w}_{1s} (le lecteur notera qu'on utilise une notation avec deux indices, l désignant la position d'une cellule unité et s un atome de cette cellule). L'approximation *harmonique* consiste à négliger les termes d'ordre supérieur à deux en \mathbf{w}_{1s} dans l'énergie du réseau atomique. Ainsi on peut approximer

$$H_{ions}(\{\mathbf{w}_{1s}\}) \simeq \frac{1}{2} \sum_{1s} M_s \dot{\mathbf{w}}_{1s}^2 + \frac{1}{2} \sum_{ll' ss' ij} Z_s Z_{s'} \frac{\partial^2 V_C(\mathbf{R}_{1s} - \mathbf{R}_{1's'})}{\partial R_{1si} \partial R_{1's'j}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}^{(0)}} w_{1si} w_{1's'j} \quad (2.2)$$

$$- \sum_{\mathbf{r}_e} \sum_{ll' ss' ij} Z_s \frac{\partial^2 V_C(\mathbf{R}_{1s} - \mathbf{r}_e)}{\partial R_{1si} \partial R_{1's'j}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}^{(0)}} w_{1si} w_{1's'j},$$

où \mathbf{r}_e désigne la position d'un électron et les indices i, j désignent les coordonnées spatiales. La première ligne de (2.2) représente le changement d'énergie des atomes dû à leur vibration tandis que la seconde ligne représente le changement du potentiel d'interaction entre ions et électrons. La deuxième ligne peut être calculée grâce au théorème de Hellmann-Feynman [77], ce dernier se traduisant par

$$\frac{\partial V_C(\mathbf{R}_{\text{Is}} - \mathbf{r}_e)}{\partial \mathbf{R}_{\text{Is}}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}^{(0)}} = \sum_n \left\langle \Psi_n \left| \frac{\partial V_C(\mathbf{R}_{\text{Is}}^{(0)} - \hat{\mathbf{r}}_e)}{\partial \mathbf{R}_{\text{Is}}} \right| \Psi_n \right\rangle, \quad (2.3)$$

où $|\Psi_n\rangle$ est l'état électronique stationnaire n . Cela mène à l'hamiltonien

$$H_{\text{ions}}(\{\mathbf{w}_{\text{Is}}\}) \simeq \frac{1}{2} \sum_{\text{Is}} M_s \dot{\mathbf{w}}_{\text{Is}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\text{II}'ss'jj'} A_{si,s'j'} (\mathbf{1} - \mathbf{I}') w_{\text{Is}i} w_{\text{I}'s'j'} \quad (2.4)$$

avec

$$\begin{aligned} A_{si,s'j'} (\mathbf{1} - \mathbf{I}') &\equiv Z_s Z_{s'} \left\{ \frac{\partial^2 V_C(\mathbf{R}_{\text{Is}} - \mathbf{R}_{\text{I}'s'})}{\partial R_{\text{Is}i} \partial R_{\text{I}'s'j}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}^{(0)}} \right. \\ &+ \sum_n \left[\left\langle \Psi_n \left| \frac{\partial^2 V_C(\mathbf{R}_{\text{Is}} - \hat{\mathbf{r}}_e)}{\partial R_{\text{Is}i} \partial R_{\text{I}'s'j}} \right| \Psi_n \right\rangle \right. \\ &\left. \left. + \left\langle \Psi_n \left| \frac{\partial V_C(\mathbf{R}_{\text{Is}} - \hat{\mathbf{r}}_e)}{\partial R_{\text{Is}i}} \right| \frac{\partial \Psi_n}{\partial R_{\text{I}'s'j}} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \Psi_n}{\partial R_{\text{I}'s'j}} \left| \frac{\partial V_C(\mathbf{R}_{\text{Is}} - \hat{\mathbf{r}}_e)}{\partial R_{\text{Is}i}} \right| \Psi_n \right\rangle \right] \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}^{(0)}} \right\}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Notons que l'équation (2.5) requiert la connaissance des états stationnaires mais aussi de leur réponse linéaire (statique) face à une distorsion du réseau (à cause des termes $\partial \Psi_n / \partial R_{\text{I}'s'j}$). Ces états stationnaires sont généralement calculés dans la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) [78]. Notons que l'interaction électron-électron $\frac{1}{2} \sum_{s \neq l} V_C(\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_l)$, qui n'apparaît pas explicitement dans (2.5), est en fait requise dans le calcul de ces états stationnaires. La réponse linéaire fait appelle au calcul de la susceptibilité électronique $\chi_e(\mathbf{q}, \omega = 0)$ du système. Autrement dit, la partie statique des interactions entre les électrons et les ions est bien incluse dans le système régit par l'hamiltonien (2.4). La partie dite « interagissante » est donc la partie dynamique des interactions, c'est-à-dire la dépendance en fréquence. L'objectif du présent travail ne réside en rien sur l'obtention quantitative des paramètres entrant dans les équations (2.4) et (2.5). Ainsi nous considérerons un système sans interaction déjà établi et étudierons comment les interactions entre les vibrations et les électrons (en particulier les électrons de Weyl) modifient la dynamique de ces vibrations.

Dans la prochaine section de ce chapitre, on détaillera le calcul des modes propres de vibration, appelés phonons. Ensuite, on présentera la façon de prendre en compte les

effets des électrons sur ces modes de vibrations en construisant l'hamiltonien d'interaction électron-phonon. L'inclusion de l'énergie d'interaction dans la dynamique des vibrations sera laissée aux chapitres suivants.

2.2 Dispersion des phonons sans interaction

Le but de cette section est de rappeler comment établir la dispersion des phonons dans le cadre le plus simple, c'est-à-dire en ne prenant que les termes quadratiques en vibrations (approximation harmonique) et dans l'approximation adiabatique. On adoptera des notations similaires à l'ouvrage [79].

2.2.1 Les modes propres de vibrations du cristal

Partons de l'hamiltonien du réseau

$$\mathcal{H}_r = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}s_j} \left[M_s \dot{w}_{\mathbf{l}s_j}^2 + \sum_{\mathbf{l}'s'_j} A_{s_j, s'_j} (\mathbf{1} - \mathbf{l}') w_{\mathbf{l}s_j} w_{\mathbf{l}'s'_j} \right], \quad (2.6)$$

où $w_{\mathbf{l}s_j}$ est la composante j du vecteur $\mathbf{w}_{\mathbf{l}s}$, et $A_{s_j, s'_j} (\mathbf{1} - \mathbf{l}')$ est appelé le tenseur des forces interatomiques du cristal [75] ou le tenseur élastique. Comme on l'a vu dans la section précédente, il représente le couplage électrostatique entre toutes les paires d'atomes du cristal ainsi qu'entre les ions et électrons. On en extrait les équations du mouvement pour toutes les composantes $w_{\mathbf{l}s_j}$:

$$M_s \ddot{w}_{\mathbf{l}s_j} + \sum_{\mathbf{l}'s'_j} A_{s_j, s'_j} (\mathbf{1} - \mathbf{l}') w_{\mathbf{l}'s'_j} = 0. \quad (2.7)$$

L'équation (2.7) correspond à un ensemble d'oscillateurs harmoniques couplés. On cherchera donc à décomposer les vibrations $\mathbf{w}_{\mathbf{l}s}$ en des sommes d'oscillateurs harmoniques, c'est-à-dire en des modes de vibrations dont les amplitudes oscillent comme des exponentielles complexes $\sim e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{l} - \omega t)}$. On note $\mathbf{p}_{\mathbf{q}\mathbf{l}s} = \mathbf{p}_{\mathbf{q}s} e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{l} - \omega_{\mathbf{q}} t)}$ une des solutions de (2.7). La dépendance dans le moment \mathbf{q} de la fréquence $\omega_{\mathbf{q}}$ de la vibration sera déterminée par la suite.

Commençons par utiliser l'invariance par translation du tenseur élastique pour définir sa transformée de Fourier

$$A_{sj,s'j'}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{l}} A_{sj,s'j'}(\mathbf{l}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}} \quad (2.8)$$

$$A_{sj,s'j'}(\mathbf{l}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} A_{sj,s'j'}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}}, \quad (2.9)$$

où N est le nombre de cellules unité du cristal. Une fois (2.9) insérée dans (2.7), avec la solution $\mathbf{p}_{\mathbf{q}\mathbf{l}s}$ à la place de $\mathbf{w}_{\mathbf{l}s}$, on obtient

$$-\omega_{\mathbf{q}}^2 M_s p_{\mathbf{q}s j} e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{l} - \omega t)} + \frac{1}{N} \sum_{s'j'} \sum_{\mathbf{q}'\mathbf{l}'} A_{sj,s'j'}(\mathbf{q}') p_{\mathbf{q}'s'j'} e^{i(\mathbf{q}'\cdot\mathbf{l}' - \omega t)} e^{i\mathbf{q}'\cdot(\mathbf{l} - \mathbf{l}')} = 0,$$

où $p_{\mathbf{q}s j}$ est la $j^{\text{ième}}$ composante du vecteur $\mathbf{p}_{\mathbf{q}s}$. On utilise ensuite la formule $\sum_{\mathbf{l}'} e^{i\mathbf{l}'\cdot(\mathbf{q} - \mathbf{q}')} = N \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ (N étant le nombre de cellules unité du cristal) pour obtenir une simple équation matricielle

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 M_s p_{\mathbf{q}s j} = \sum_{s'j'} A_{sj,s'j'}(\mathbf{q}) p_{\mathbf{q}'s'j'}. \quad (2.10)$$

On peut en effet considérer les termes $A_{sj,s'j'}$ comme les éléments d'une matrice hermitienne $3r \times 3r$, où 3 vient des trois composantes de vecteurs possibles en trois dimension et r est le nombre d'atomes dans la cellule unité. On a donc $3r$ solutions pour $\omega_{\mathbf{q}}^2$ appelées fréquences propres et qu'on distinguera par des indices $\lambda = 1, 2, \dots, 3r$. On notera également $\mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda}$ les vecteurs propres associés, choisis sans dimensions. Tout ceci peut se résumer simplement par le fait que l'agencement des atomes dans le cristal favorise certains mouvements des atomes et en inhibent d'autres. Finalement, les mouvements autorisés peuvent toujours être exprimés comme une combinaison linéaire des vibrations élémentaires $\mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda}$ (comme on le verra dans l'équation (2.15)). Ainsi, pour un mode (\mathbf{q}, λ) fixé, l'ensemble des vecteurs $\mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda}$ représente la façon dont chacun des atomes se mouvrait dans la cellule unité s'il obéissait uniquement à ce mode, comme représenté sur la figure 2.1.

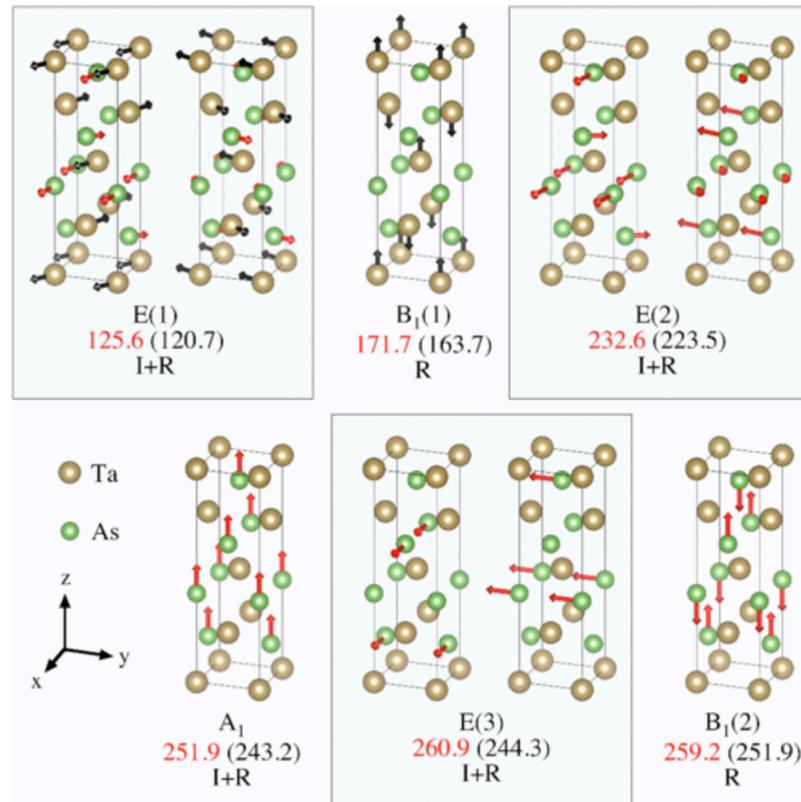


FIGURE 2.1 Différents modes de phonons optiques dans le matériau TaAs. Les lettres E, A1 et B1 correspondent aux représentations irréductibles associées à chacun des modes. Les lettres I et R signifient respectivement actif infrarouge et Raman. Enfin, les chiffres rouges (entre parenthèses) correspondent aux fréquences propres mesurées expérimentalement (calculées numériquement). Extraite de [80].

L'ensemble des $\{\mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda}\}_{s=1}^r$ doit respecter les symétries du réseau cristallin. Cette dernière affirmation (certes un peu vague) se traduit par le fait que chaque mode de vibration λ se transforme comme une représentation irréductible du groupe d'espace associé au point \mathbf{q} , c'est-à-dire le groupe des opérations de rotation et de translation qui laisse \mathbf{q} invariant modulo un vecteur du réseau réciproque [81]. Ceci sera expliqué brièvement en section (2.4). Les modes de vibrations associés à $\mathbf{q} = 0$ correspondent à un mouvement des atomes uniformément réparti sur tout le cristal, c'est-à-dire au même mouvement des atomes d'une cellule unité à l'autre. Du fait qu'on peut toujours déplacer l'entièreté du matériau selon l'un de ses trois axes, on a toujours au moins trois modes de vibrations, dont trois correspondent à ces translations uniformes. Ces translations ne coûtant aucune énergie vibrationnelle au cristal, ces trois modes ont une énergie (ou une fréquence propre) nulle à $\mathbf{q} = 0$. Ce sont les trois branches acoustiques du cristal. Tout autre mode implique un déplacement des atomes les uns par rapport aux autres au sein de chaque cellule unité. Ces modes, toujours

d'énergies finies, sont appelés les branches optiques du cristal. La dénomination de phonons *acoustiques* vient de leur dispersion linéaire en moment, tel les ondes sonores. Notons que ces modes de vibrations peuvent être longitudinaux mais aussi transverses, à la différence des ondes sonores. Le terme de phonons *optiques* est relié à l'ordre de grandeur de leurs fréquences propres qui sont du même ordre de grandeur que celles des ondes infrarouges.

Afin d'y voir un peu plus clair dans la résolution de (2.10), on réécrit l'équation (2.10)

$$M\omega_{\mathbf{q}\lambda}^2 \tilde{p}_{\mathbf{q}s\lambda j} = \sum_{s'j'} \tilde{A}_{sj,s'j'}(\mathbf{q}) \tilde{p}_{\mathbf{q}s'\lambda j'}, \quad (2.11)$$

avec $\tilde{\mathbf{p}}_{\mathbf{q}s\lambda} \equiv \sqrt{\frac{M_s}{M}} \mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda}$ et $\tilde{A}_{sj,s'j'} \equiv \frac{M}{\sqrt{M_s M_{s'}}} A_{sj,s'j'}$, $M = \sum_s M_s$ étant la masse totale de la cellule unité. La matrice $\tilde{A}_{sj,s'j'}$ est appelée la matrice dynamique [76], à un facteur M près suivant les définitions. Cette dernière étant hermitienne et définie positive (car l'énergie potentielle apportée par les vibrations hors équilibre doit être positive), $\omega_{\mathbf{q}}^2 \geq 0$, et on peut choisir ses vecteurs propres orthonormaux, tels que

$$\sum_s \tilde{\mathbf{p}}_{\mathbf{q}s\lambda}^* \cdot \tilde{\mathbf{p}}_{\mathbf{q}s\lambda} = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (2.12)$$

Les vecteurs de polarisation vérifient donc

$$\sum_s M_s \mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda}^* \cdot \mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda} = M \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (2.13)$$

En définissant $\tilde{\mathbf{w}}_{\mathbf{I}s} \equiv \sqrt{\frac{M_s}{M}} \mathbf{w}_{\mathbf{I}s}$ on peut enfin décomposer les vibrations en modes propres

$$\tilde{\mathbf{w}}_{\mathbf{I}s} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}\lambda} v_{\mathbf{q}\lambda} \tilde{\mathbf{p}}_{\mathbf{q}s\lambda} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}}, \quad (2.14)$$

et par extension

$$\mathbf{w}_{\mathbf{I}s} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}\lambda} v_{\mathbf{q}\lambda} \mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}}, \quad (2.15)$$

où la dépendance temporelle est contenue dans les termes $v_{\mathbf{q}\lambda}(t) \sim e^{-i\omega_{\mathbf{q}\lambda}t}$, appelés coordonnées normales, celles-ci ayant la dimension d'une longueur. Les vecteurs $\mathbf{w}_{\mathbf{I}s}$ étant réels, on doit pouvoir vérifier $v_{-\mathbf{q}\lambda} \mathbf{p}_{-\mathbf{q}s\lambda} = (v_{\mathbf{q}\lambda} \mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda})^*$, ce qui permet de choisir $\mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda}^* = \mathbf{p}_{-\mathbf{q}s\lambda}$ et $v_{\mathbf{q}\lambda}^* = v_{-\mathbf{q}\lambda}$. Ces dernières relations seront très utiles pour simplifier les équations du mouvement dans les chapitres suivants. En inversant l'égalité (2.15) grâce à (2.13), on a

$$v_{\mathbf{q}\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} \frac{M_s}{M} \mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda}^* \cdot \mathbf{w}_{\mathbf{I}s} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}}. \quad (2.16)$$

Ces coordonnées vont nous permettre d'écrire l'hamiltonien des vibrations (2.6) sous sa forme la plus simple, en utilisant (2.15)

$$\mathcal{H}_{\text{rés}} = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{\text{Isj}} \left\{ M_s \sum_{\mathbf{q}\lambda\mathbf{q}'\lambda'} \left(\dot{v}_{\mathbf{q}\lambda} \mathbf{P}_{\mathbf{q}s\lambda} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{1}} \right) \cdot \left(\dot{v}_{\mathbf{q}'\lambda'} \mathbf{P}_{\mathbf{q}'s\lambda'} e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{1}} \right) \right. \quad (2.17)$$

$$\left. + \sum_{\mathbf{q}\lambda} \left(v_{\mathbf{q}\lambda} \mathbf{P}_{\mathbf{q}s\lambda} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{1}} \right) \cdot \sum_{\mathbf{q}''\lambda''} A_{s_j, s'_j} e^{i\mathbf{q}''\cdot(\mathbf{1}-\mathbf{l}')} \sum_{\mathbf{q}'\lambda'} \left(v_{\mathbf{q}'\lambda} \mathbf{P}_{\mathbf{q}'s'\lambda'} e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{l}'} \right) \right\}$$

$$= \frac{1}{2} M \sum_{\mathbf{q}\lambda} \left[\dot{v}_{\mathbf{q}\lambda} \dot{v}_{-\mathbf{q}\lambda} + \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2 v_{\mathbf{q}\lambda} v_{-\mathbf{q}\lambda} \right], \quad (2.18)$$

dont les premiers et second termes sont respectivement associés à l'énergie cinétique et l'énergie potentiel du réseau. Dans le lagrangien et l'action correspondants, le signe devant l'énergie potentielle est inversé. L'action des phonons écrite dans la base des modes propres est donc

$$\mathcal{S}_{\text{ph}}^{(0)} = -\frac{1}{2} M \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \left[-\omega^2 + \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2 \right] v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) v_{-\mathbf{q}\lambda}(-\omega), \quad (2.19)$$

où le champ $v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} v_{\mathbf{q}\lambda}(t)$ a la dimension d'une longueur multipliée par un temps. L'action (2.19) correspond une somme d'oscillateurs harmoniques découplés, chacun prenant le titre de phonon, c'est-à-dire un mode élémentaire de vibration. L'équation du mouvement classique est donnée par l'équation $\frac{\delta \mathcal{S}_{\text{ph}}^{(0)}}{\delta v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega)} = 0$, ce qui dans ce cas donne trivialement la fréquence propre $\omega^2 = \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2$.

2.2.2 Charge de Born

2.2.2.1 Dérivation de l'action des phonons en présence du champ électromagnétique

Dans la section précédente, nous n'avons pas pris en compte les couplages éventuels entre les fluctuations de charges dues aux vibrations des atomes et le champ électromagnétique. Cependant, les vibrations atomiques peuvent engendrer des dipôles électriques qui se couplent avec le champ électromagnétique environnant. Nous allons voir dans cette section comment ils modifient l'action (2.19) et les équations du mouvements des phonons. Revenons pour cela à l'action gouvernant les vibrations atomiques, ainsi que leur couplage avec le

champ électromagnétique, notée $S_{\text{ph-EM}}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{ph}}^{(0)} + S_{\text{ph-EM}} = & - \int dt \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}s_j} \left[-M_s \ddot{w}_{\mathbf{l}s_j}^2 + \sum_{\mathbf{l}'s'j'} A_{s_j,s'j'} (\mathbf{l} - \mathbf{l}') w_{\mathbf{l}s_j} w_{\mathbf{l}'s'j'} \right] \right. \\ & \left. - \int d\mathbf{r} (\mathbf{j}_a(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \rho_a(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r})) \right\}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

où ϕ , \mathbf{A} sont les potentiels électromagnétiques scalaire et vecteur, et ρ_a , \mathbf{j}_a les densités de charge et de courant engendrées par les vibrations atomiques. Pour simplifier le problème, on utilise l'approximation standard qui consiste à considérer les atomes comme des points au positions $\mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)}$ à l'équilibre, menant ainsi à

$$\begin{aligned} \rho_a(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{l}s} Z_s \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)} + \mathbf{w}_{\mathbf{l}s})) \\ &\simeq \rho_a^{(0)}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{l}s} Z_s \mathbf{w}_{\mathbf{l}s} \cdot \frac{\partial \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)})}{\partial \mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

où Z_s est le nombre de charge effectif de l'atome s (il est négatif pour un anion et positif pour un cation) et $\rho_a^{(0)}$ est la densité d'ions à l'équilibre. Ce dernier est une constante indépendante du temps et ne jouera pas dans la dynamique du réseau. On déduit le courant avec l'équation de continuité $\dot{\rho}_a + \nabla \cdot \mathbf{j}_a = 0$:

$$\mathbf{j}_a(\mathbf{r}, t) = - \sum_{\mathbf{l}s} Z_s \dot{\mathbf{w}}_{\mathbf{l}s} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)}). \quad (2.22)$$

En injectant (2.22) et (2.21) dans (2.20) et en effectuant une intégration par partie dans $S_{\text{ph-EM}}$, on obtient

$$\mathcal{S}_{\text{ph}}^{(0)} + S_{\text{ph-EM}} = - \frac{1}{2} \int dt \sum_{\mathbf{l}s} \left[-M_s \dot{\mathbf{w}}_{\mathbf{l}s}^2 + \sum_{\mathbf{l}'s'j'} A_{s_j,s'j'} (\mathbf{l} - \mathbf{l}') w_{\mathbf{l}s_j} w_{\mathbf{l}'s'j'} - Z_s \mathbf{w}_{\mathbf{l}s} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)}) \right],$$

avec, rappelons-le, $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -[\dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) + \nabla \phi(\mathbf{r})]$. L'équation du mouvement pour les vibrations, $\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \mathbf{w}_{\mathbf{l}s}} = 0$, s'écrit alors comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques forcés :

$$-M_s \ddot{w}_{\mathbf{l}s_j} + \sum_{\mathbf{l}'s'j'} A_{s_j,s'j'} (\mathbf{l} - \mathbf{l}') w_{\mathbf{l}'s'j'} = Z_s E_j(\mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)}). \quad (2.23)$$

La définition (2.16) des coordonnées normales nous donnent l'idée de multiplier tous les membres de l'équation (2.23) par $p_{\mathbf{q}s\lambda}^* e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}}$ puis de sommer sur \mathbf{l} , s et j , pour finalement

obtenir

$$M \left(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2 \right) v_{\mathbf{q}\lambda} = \sqrt{N} \mathbf{Q}_{-\mathbf{q}\lambda}^{(0)} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega). \quad (2.24)$$

Le terme $\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)}$, appelé charge de Born effective¹, a la dimension d'une charge et est définie comme

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)} \equiv \sum_s e Z_s e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{t}_s} \mathbf{p}_{\mathbf{q}s\lambda} = \mathbf{Q}_{-\mathbf{q}\lambda}^{(0)*} \quad (2.25)$$

où \mathbf{t}_s est la position de l'atome s dans la cellule unité, apparaissant dans $\mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)} = \mathbf{l} + \mathbf{t}_s$. De plus, on a utilisé l'approximation

$$\int dt e^{i\omega t} \sum_{\mathbf{l}} \mathbf{E} \left(\mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)}, t \right) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{l}s}^{(0)}} \simeq \frac{1}{V} \int dt e^{i\omega t} \int d^3 \mathbf{r} \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \equiv \mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega).$$

Cette approximation n'est pas triviale puisqu'elle néglige la variation spatiale du champ magnétique à l'échelle d'une cellule unité. En effet, le champ électrique peut en général se décomposer en une somme de composantes lentes (*i.e.* variant lentement à l'échelle de la cellule unité) et rapides. Dans la plupart des cas (que nous considérerons par la suite), les composantes rapides du champ ont des longueurs d'onde bien inférieures au champ externe servant de mesure optique (autrement dit les photons ont des moments inférieurs à ceux des phonons). Leurs origines peuvent donc être entièrement attribuées aux fluctuations atomiques, ce qui permet de les absorber dans le tenseur des forces $\tilde{A}_{sj,s'j'}$. Malheureusement, cela amène à une complication du problème puisque cela peut entraîner la non-hermiticité de $\tilde{A}_{sj,s'j'}$ et donc des fréquences propres avec une partie imaginaire. Pour simplifier la discussion, nous négligerons ces parties imaginaires et ne considérerons explicitement que la partie *lente* du champ électrique : $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega)$. L'action correspondant à l'équation du mouvement (2.24) est maintenant

$$\mathcal{S}_{\text{ph}}^{(0)} + \mathcal{S}_{\text{ph-EM}} = \frac{1}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \left[M \left(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2 \right) v_{\mathbf{q}\lambda} v_{-\mathbf{q}\lambda} + \sqrt{N} \mathbf{Q}_{-\mathbf{q}\lambda}^{(0)} v_{-\mathbf{q}\lambda} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega) \right]. \quad (2.26)$$

2.2.2.2 Interprétation de la charge de Born

Dans la limite des grandes longueur d'onde (ou petit moment \mathbf{q}), l'équation (2.25) peut être interprétée comme le changement de polarisation dans la cellule unité induit par les déplacements atomiques, ou autrement dit, un moment dipolaire induit au sein de la cellule

1. Il existe en fait plusieurs définitions de la charge de Born dans la littérature. Par exemple, dans la référence [82], notre définition de la charge de Born (équation (2.25)) correspond à ce que l'auteur appelle *mode-effective charge vector* (voir équation (53) dans cette référence). La quantité appelée charge de Born dans [82] serait dans notre cas le tenseur $\delta \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)} / \delta \mathbf{p}_{\mathbf{q}\lambda s}$, qui est indépendant du mode λ et dépend de l'atome s (voir équation (39) dans cette même référence).

unité. Cette charge effective ne peut pas être engendrée par n'importe quel mode de vibration, et exige une symétrie particulière de ce mode. En effet, seuls les modes de vibration se transformant comme un vecteur, appelés modes polaires, sont susceptibles d'engendrer une polarisation. Ils sont également dits actifs infrarouge puisqu'ils absorbent des radiations dans le domaine infrarouge (typiquement, $\hbar\omega_{\mathbf{q}=0} \gtrsim 10\text{meV}$). Notons que les phonons acoustiques à grande longueur d'onde n'engendrent pas de charge de Born puisqu'ils correspondent au déplacement simultané de tous les atomes de la cellule unité, c'est-à-dire que tous les $\mathbf{p}_{\mathbf{q}\lambda}$ sont identiques, et que chaque cellule unité est neutre ($\sum_s Z_s = 0$). Ceci est illustré sur la figure 2.2.

La polarisation induite par l'ensemble des modes de vibration s'écrit

$$\mathbf{P}_{\mathbf{q}}^{\text{at}} = \frac{1}{\sqrt{N}\mathcal{V}_{\text{cell}}} \sum_{\lambda} \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)} v_{\mathbf{q}\lambda}.$$

En utilisant l'équation du mouvement pour le mode $v_{\mathbf{q}\lambda}$ provenant de (2.26), on trouve $P_{\mathbf{q}i}^{\text{at}}(\omega) = \chi_{\mathbf{q}ij}^{\text{at}}(\omega) E_{\mathbf{q}j}(\omega)$ avec

$$\chi_{\mathbf{q}ij}^{\text{at}}(\omega) = - \sum_{\lambda} \frac{Q_{-\mathbf{q}\lambda i}^{(0)} Q_{\mathbf{q}\lambda j}^{(0)}}{M\mathcal{V}_{\text{cell}} (\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2)}. \quad (2.27)$$

Dans le cas simple d'un isolant isotrope on peut considérer que la partie électronique de la fonction diélectrique est constante, à condition que la fréquence des modes optiques soit bien inférieure au gap isolant. Si de plus on a un seul mode optiquement actif de fréquence propre ω_0 et qu'on considère un milieu isotrope, le tenseur diélectrique devient la fonction diélectrique

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{q}) = 1 + \chi_{\mathbf{q}}^{\text{at}}(\omega) / \varepsilon_{\infty} \quad (2.28)$$

$$= \frac{\omega^2 - \omega_0^2 - \frac{|Q_{\mathbf{q}}^{(0)}|^2}{\varepsilon_{\infty} M \mathcal{V}_{\text{cell}}}}{\omega^2 - \omega_0^2}. \quad (2.29)$$

où ε_{∞} est la permittivité du milieu à fréquence infinie². Dans les matériaux qui nous intéressent (les semimétaux de Weyl), il n'y a pas de gap et la partie électronique de la fonction diélectrique ne peut être considérée comme constante, et de façon général, la forme de la fonction diélectrique est plus compliquée que (2.28). Cependant, le fait que la présence de modes de vibration optiquement actifs ajoutent des zéros à la fonction diélectrique est

2. Dans notre convention, la fonction diélectrique $\varepsilon(\omega, \mathbf{q})$ est une quantité sans dimension et la permittivité est définie comme $\epsilon = \varepsilon_{\infty} \times \varepsilon(\omega, \mathbf{q})$.

général. Dans un isolant, ces zéros sont égaux à des fréquences de modes longitudinaux.

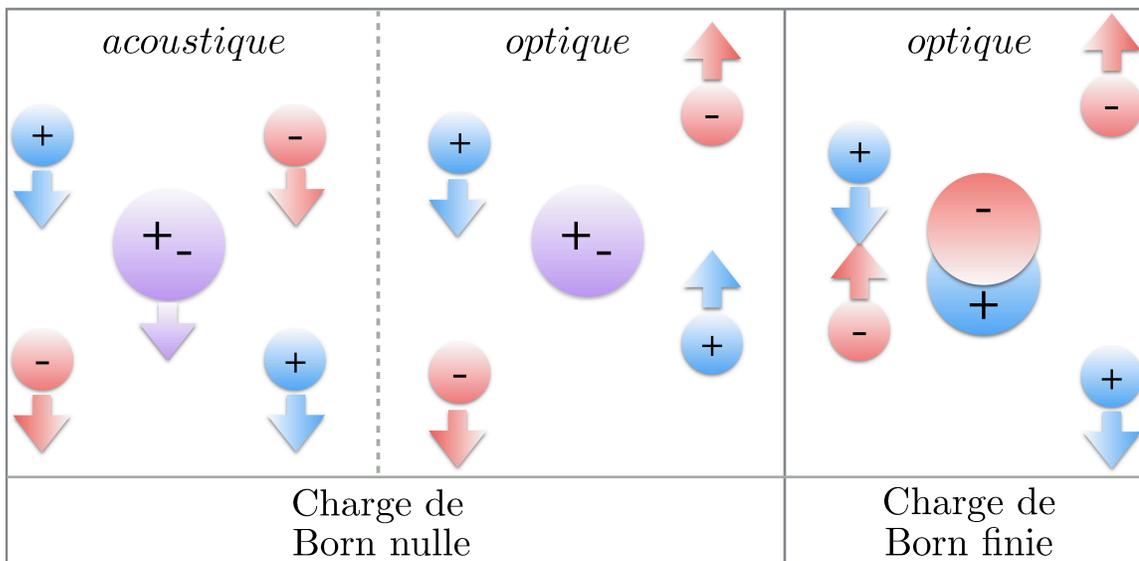


FIGURE 2.2 Trois modes propres de vibrations dans une cellule unité à quatre atomes. Dans chaque figure, le ou les cercles centraux représentent les barycentres des charges négatives et positives. Dans les deux premières images, ces barycentres occupent la même position. Seul le mode de droite donne lieu à un moment dipolaire au sein de la cellule unité et donc à une charge de Born.

En effet, en prenant en compte le champ électrique interne engendré par les phonons, on va montrer que la charge de Born peut amener une levée de dégénérescence dans la dispersion des phonons optiques. Prenons un système isotrope, comme un cristal cubique tel GaAs ou Si. Dans ce cas, on a trois fréquences optiques dégénérés ω_O correspondant à trois modes de polarisations différents à $\mathbf{q} = 0$. Pour un moment \mathbf{q} fini, on peut séparer ces trois modes en deux transverses (notés TO), c'est-à-dire de polarisations $\mathbf{p}_{\mathbf{q}\lambda_s}$ orthogonale à \mathbf{q} , et un mode longitudinal (noté LO) de polarisation parallèle à \mathbf{q} . D'après l'équation (2.25), chacun des modes produit une polarisation électrique $\mathbf{P}_{\mathbf{q}TO/LO} = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathbf{Q}_{\mathbf{q}TO/LO}^{(0)} v_{\mathbf{q}TO/LO}$ transverse ou longitudinale. D'après les équations de Maxwell, le champ électrique résultant $\mathbf{E}^{\text{int}} = \mathbf{E}^{\text{long}} + \mathbf{E}^{\text{trans}}$ vérifie

$$|\mathbf{q}| \varepsilon_0 \mathbf{E}^{\text{long}} = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{q}LO}^{(0)} v_{\mathbf{q}LO} \quad (2.30)$$

$$\mathbf{q}^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}^{\text{trans}} = -\sum_{\lambda_T} \frac{\omega^2}{c_m^2} \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda_T}^{(0)} v_{\mathbf{q}\lambda_T}, \quad (2.31)$$

où λ_T désigne un mode transverse, $c_m = (\mu \varepsilon_\infty)^{-1/2}$ est la vitesse de la lumière dans le cristal et où l'on a négligé tout courant ou densité électroniques. Sauf si on est dans le régime des

polaritons à très petit moment \mathbf{q} , comme mentionné en section (1.2.2.2), la dispersion des phonons optiques est telle que $\omega^2 \ll c_m^2 \mathbf{q}^2$. Ainsi la partie transverse du champ 2.31 est négligeable devant la partie longitudinale (2.30) et seul le mode longitudinal contribue de façon significative au champ électrique interne. Son équation de dispersion (2.24) devient donc

$$M \left(\omega^2 - \omega_0^2 - \frac{1}{\varepsilon_0 M V_{cell}} \left| \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{qLO}}^{(0)} \right|^2 \right) v_{\mathbf{qLO}} = 0. \quad (2.32)$$

Le mode longitudinal obtient donc une fréquence propre $\omega_{LO} = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{1}{\varepsilon_0 M V_{cell}} \left| \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{qLO}}^{(0)} \right|^2}$ tandis que les modes transverse gardent la fréquence ω_0 .

Deux matériaux à la structure cristalline simple (seulement deux atomes par cellule unité et donc six modes de phonons) illustrent bien ce point : les semiconducteurs silicium (Si) et arsénure de galium (GaAs). La dispersion des phonons y a été extensivement étudiée depuis les années 1970 [83,84]. Dans GaAs, les deux atomes de charges différentes permettent l'existence d'une charge de Born alors que ce n'est pas le cas dans Si. Ainsi, à faible moment (au voisinage du point Γ de la zone de Brillouin), GaAs présente un mode de phonon optique longitudinal de fréquence plus élevée que les deux autres modes optiques, tandis que les trois modes optiques sont dégénérés dans Si. Ceci est illustré sur la figure 2.3.

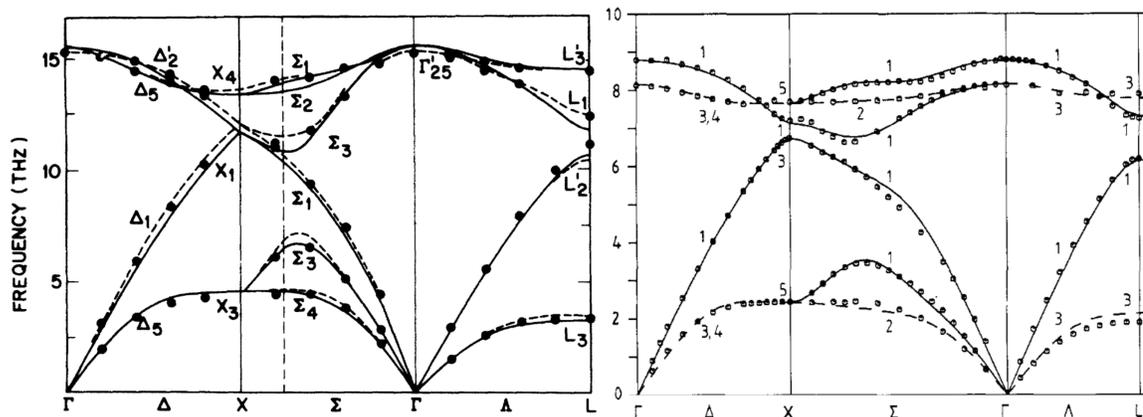


FIGURE 2.3 Dispersion des phonons dans Si (gauche) et GaAs (droite), respectivement extraites de [83] et [84]. Les marqueurs proviennent de données expérimentales tandis que les lignes continues sont issues de calculs numériques.

2.2.2.3 Hybridation plasmon-phonon

Les zéros de la contribution électronique à la fonction diélectrique correspondent à une onde de densité de charge appelée plasmon. En générale, la dispersion en fréquence du plasmon, notée ω_p , dépend fortement de la densité électronique du matériau. Par exemple,

dans un métal tridimensionnel, ω_p est proportionnelle à la densité électronique et est bien supérieure aux fréquences des phonons. Par contre, dans un semiconducteur, ω_p peut devenir égale à une fréquence optique. Si cette fréquence correspond à un mode de vibration longitudinal optiquement actif, alors on peut observer une hybridation résonante entre les deux modes. On peut formaliser cela en écrivant la fonction diélectrique comprenant les contributions de la charge de Born (*i.e.* du phonon optique longitudinal) et des électrons. On obtient

$$\varepsilon(\omega) \simeq \frac{\omega^2 - \omega_{LO}^2}{\omega^2 - \omega_0^2} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

où le terme ω_p^2/ω^2 est la contribution électronique des électrons, et provient de la fonction de polarisation électronique à grande longueur d'onde [85]. Pour $\omega_p \ll \omega_{LO}$ ou $\omega_p \gg \omega_{LO}$, les deux zéros de $\varepsilon(\omega)$ sont ω_{LO} et ω_p . Pour $\omega_p \simeq \omega_{LO}$ on peut observer un anticroisement entre les deux solutions. Ce concept d'hybridation résonante sera important dans le chapitre 4, où l'on étudiera un phénomène semblable, mais induit par un champ magnétique et des interactions électron-phonon.

2.3 Interactions électron-phonon

2.3.1 Les différents type d'interaction

En toute rigueur les couplages entre les degrés de liberté électroniques et les mouvements des atomes sont compris dans l'hamiltonien (2.1) et ont tous pour origine les interactions de Coulomb entre les ions chargés et les électrons environnants. Cependant, il peut être nécessaire de détailler leurs origines physiques afin de distinguer certains types de vibrations ou certaines symétries du cristal pouvant amener à des effets observables différents. Dans cette sous-section, on s'appuyera principalement sur la section 3.3 de [86].

Potentiel de déformation pour des phonons acoustiques

En général, on connaît l'hamiltonien électronique H_e seulement aux positions d'équilibre des atomes. Si on applique un déplacement macroscopique $\delta\mathbf{R}$ des atomes³, l'énergie

3. $\delta\mathbf{R}$ est une fonction continue de l'espace qui ignore les positions discrètes des atomes. Elle représente un déplacement des atomes moyenné sur plusieurs cellules unités, et ne prend donc pas en compte les vibrations microscopiques à l'intérieur d'une cellule unité.

des électrons est modifiée au premier ordre [86]

$$H_e(\mathbf{R}) \simeq H_e(\mathbf{R}_0) + \sum_i \left(\frac{\partial H_e}{\partial R_i} \right)_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \cdot \delta R_i, \quad (2.33)$$

où \mathbf{R} et \mathbf{R}_0 représentent les positions des atomes à l'échelle macroscopique (autrement dit, la forme du matériau) à l'équilibre et après la distortion $\delta\mathbf{R}$, respectivement. L'équation 2.33 signifie que les bandes électroniques $E_{n\mathbf{k}}$ sont renormalisées par un terme additionnel $\delta E_{n\mathbf{k}} = \sum_i \left(\frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial R_i} \right)_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \cdot \delta R_i$. Pour l'instant, l'origine du déplacement δR_i n'est pas encore précisé. Il peut provenir d'une contrainte exercée sur le cristal ou d'une onde sonore.

Prenons par exemple un mode de phonon acoustique créant un déplacement des atomes modulé par $\delta\mathbf{R} = \delta\mathbf{R}^0 \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ ⁴. On sait qu'à très grande longueur d'onde (*i.e.* $\mathbf{q} \simeq 0$), ce mode correspond à une translation uniforme de tout le cristal et ne modifie donc pas l'énergie du système. Seul la variation spatiale de l'onde $\delta\mathbf{R}$ peut amener à un changement d'énergie. À grande longueur d'onde (\mathbf{q} proche de $\mathbf{0}$), la variation en énergie s'écrit donc

$$\delta E_{n\mathbf{k}} \simeq \sum_{ij} \left(\frac{\partial E_{n\mathbf{k}}}{\partial R_i} \right)_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} d_{ij} \delta R_j^0, \quad (2.34)$$

avec $d_{ij} = \frac{\partial \delta R_i}{\partial R_j} = q_j \delta R_i^0 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \simeq q_j \delta R_i^0$. Un mode acoustique longitudinal ne fait apparaître que les termes diagonaux d_{ii} et engendre un changement d'énergie $\delta E_{n\mathbf{k}} \simeq a_{n\mathbf{k}} \mathbf{q} \cdot \delta\mathbf{R}$. Dans ce cas, $a_{n\mathbf{k}}$ est une constante appelé potentiel de déformation du volume. Cette dénomination vient du fait que la contrainte apportée par le mode longitudinal est identique à celle exercée en compressant le matériau et en diminuant son volume \mathcal{V} de $\delta\mathcal{V}$ [86]. Dans ce cas, la trace du tenseur d_{ij} est égale à $\delta\mathcal{V}/\mathcal{V}$ et les bandes électroniques se voient augmenter de $\delta E_{n\mathbf{k}} \simeq a_{n\mathbf{k}} \delta\mathcal{V}/\mathcal{V}$. Ainsi $a_{n\mathbf{k}}$ se mesure en appliquant une pression hydrostatique sur le matériau. De façon générale, le tenseur d_{ij} peut se décomposer en une partie symétrique

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \delta R_i}{\partial R_j} + \frac{\partial \delta R_j}{\partial R_i} \right)$$

appelée tenseur de contrainte, et d'une partie antisymétrique

$$f_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \delta R_i}{\partial R_j} - \frac{\partial \delta R_j}{\partial R_i} \right)$$

4. Dans la limite continue, les positions discrètes \mathbf{l} des cellules unités se transforment en une variable continue \mathbf{r} , et le déplacement moyen des atomes s dans la cellule unité \mathbf{l} dû aux vibrations $\mathbf{w}_{\mathbf{l}s}$,

$$\delta\mathbf{R}_{\mathbf{l}} = \frac{1}{N_s} \sum_s \mathbf{w}_{\mathbf{l}s},$$

devient une fonction continue $\delta\mathbf{R}(\mathbf{r}, t) = \sum_s \mathbf{w}_s(\mathbf{r}, t) / N_s$.

appelée tenseur de stress. Ce dernier correspond à une rotation du cristal et ne change pas l'énergie des électrons. Il reste donc les six composantes du tenseur symétriques, qu'on regroupe dans l'expression

$$\delta E_{n\mathbf{k}} = \sum_{l=1}^6 D_{n\mathbf{k}}^l e_l, \quad (2.35)$$

où e_l est une des six composantes du tenseur de contrainte et D_l est le potentiel de déformation associé à cette contrainte et à la bande n , qu'on considérera constant en général. Bien sûr, les symétries du cristal peuvent amener à réduire le nombre de composantes non nulles de D_l . Pour obtenir l'hamiltonien électron-phonon correspondant, il faut remplacer dans (2.35) e_l par les déformations engendrées par les différents modes de phonons acoustiques. On obtiendra ainsi un hamiltonien au premier ordre dans le moment du mode de vibration.

Potentiel de déformation pour des phonons optiques

À l'inverse des phonons acoustiques de grandes longueurs d'onde, les phonons optiques correspondent à des vibrations microscopiques. Ils en résultent un changement des recouvrements entre les différentes orbitales atomiques au sein de la cellule unité et donc un changement de l'énergie électronique (cela nécessite bien sûr d'avoir plusieurs atomes par cellule unité). Le déplacement associé au phonon optique peut être vu comme une contrainte interne et ne peut pas être décrite par un tenseur macroscopique, comme c'est le cas pour les phonons acoustiques. À très grande longueur d'onde, un mode de vibration optique produit la même contrainte dans chaque cellule unité. Il en résulte un changement de l'énergie électronique qui dépend seulement des déplacements [86] :

$$\delta E_{n\mathbf{k}} = \sum_{\lambda} \frac{D_{n\mathbf{k}}^{\lambda}}{a_0} v_{\lambda}, \quad (2.36)$$

où v_{λ} est la coordonnée normale du phonon λ , $D_{n\mathbf{k}}^{\lambda}$ est le potentiel de déformation optique associé, et a_0 est une distance typique entre atomes de la cellule unité.

Couplage de Fröhlich

Comme nous l'avons vu dans la section 2.2.2, les phonons optiques polaires engendrent un dipôle électrique au sein de chaque cellule unité. Outre le fait que la présence de ces dipôles va renormaliser la fréquence des modes longitudinaux (voir équation (2.32)), celle-ci va également mener à une interaction entre la densité de dipôles et la densité électronique.

Un moyen d'exprimer ce couplage dans l'espace des moments est

$$H_{Fr} \propto -e \sum_{\mathbf{q}} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{qLO}}^{(0)} v_{\mathbf{q}}}{q^2} \rho(-\mathbf{q})$$

où $\frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{qLO}}^{(0)} v_{\mathbf{q}}}{q^2}$ est proportionnel au potentiel scalaire créé par la charge de Born et $\rho(\mathbf{q})$ est la transformée de Fourier de la densité électronique. On verra plus en détail un moyen de prendre en compte cette interaction dans la section 4.2.

Couplage piezoélectrique

Le couplage piézoélectrique peut être vu comme un homologue du couplage de Fröhlich pour les phonons acoustiques. Comme dans le cas du potentiel de déformation pour les phonons acoustiques, il est directement lié à une propriété macroscopique du cristal : le tenseur de contrainte e_{ij} . Dans un matériau sans symétrie d'inversion, l'application d'une contrainte induit un champ électrique qui s'écrit, au premier ordre en e_{ij} :

$$E_l^{\text{piez}} = -\frac{1}{\epsilon_{\infty}} \sum_{ij} e_{lij}^{(m)} e_{ij} \quad (2.37)$$

où $e_{lij}^{(m)}$ est un tenseur de rang 3 appelé tenseur électromécanique. D'une part, on peut remplacer la contrainte e_{ij} par la dérivée de l'onde acoustique $iq_i \delta R_j$ comme on l'a fait dans le cas du potentiel de déformation. D'autre part, le potentiel électrique correspondant au champ \mathbf{E}^{piez} est $\phi^{\text{piez}}(\mathbf{q}) = i\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}^{\text{piez}} / q^2$. On obtient ainsi le couplage entre la vibration $\delta \mathbf{R}$ et la densité électronique :

$$H^{\text{piez}} = -e \sum_{\mathbf{q}} \rho(-\mathbf{q}) \frac{1}{\epsilon_{\infty}} \sum_{lij} \frac{q_l e_{lij}^{(m)} q_i}{q^2} \delta R_j(\mathbf{q}).$$

Tandis que le couplage par potentiel de déformation dépend linéairement dans la norme du moment \mathbf{q} , le couplage piézoélectrique ne dépend que de son orientation.

On a remarqué précédemment que l'existence du couplage de Fröhlich est indissociable de celle d'une charge de Born effective qui va renormaliser la fréquence des modes optiques longitudinaux, même en l'absence d'interactions électron-phonon. Il en va de même avec la piézoélectricité qui joue un rôle important dans la vitesse du son (*i.e.* la vitesse de groupe des ondes acoustiques). On peut expliquer cela par l'énergie électrique $\epsilon_{\infty} |\mathbf{E}^{\text{piez}}|^2$ apportée au système par le champ piézoélectrique. Cette énergie est à la fois quadratique dans le déplacement des atomes et dans le moment du phonon. Un tel terme ajouté à (2.19) (en

prenant par exemple la dispersion acoustique $\omega_{\mathbf{q}} = c_s |\mathbf{q}|$) renormalise donc la vitesse du son.

2.3.2 Expression du couplage électron-phonon

On s'intéressera dans cette section à l'expression du couplage entre les modes normaux de phonons et les électrons de Bloch du cristal. Nous dériverons en détail le couplage local qui sera au centre de notre étude dans les chapitres 3 et 4.

2.3.2.1 Couplage local

Si le couplage est local, il peut s'écrire comme le produit de la densité électronique et du potentiel résultant des vibrations du réseau. Le potentiel cristallin développé au premier ordre dans les petits déplacement atomiques, $\mathbf{w}_{\mathbf{l}s}(t)$, s'écrit

$$U(\mathbf{r}, t) \simeq U_{\text{eq}}(\mathbf{r}) + \delta U(\mathbf{r}, t),$$

avec

$$\delta U(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{l}, s} \mathbf{w}_{\mathbf{l}s}(t) \cdot \frac{\partial U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{l}s})}{\partial \mathbf{R}_{\mathbf{l}s}} + \mathcal{O}(\mathbf{w}^2), \quad (2.38)$$

où $\mathbf{R}_{\mathbf{l}s} = \mathbf{l} + \mathbf{t}_s$ comprend la position de la cellule unité \mathbf{l} et la position \mathbf{t}_s de l'atome s . L'interaction entre la densité électronique et $U_{\text{eq}}(\mathbf{r})$ permet de construire l'hamiltonien électronique sans interaction mais ne fait pas intervenir les vibrations atomiques. Nous sommes donc exclusivement intéressés par le terme de couplage

$$\mathcal{H}_{\text{ep}} = \int_{\mathbf{r}} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \delta U(\mathbf{r}, t) \quad (2.39)$$

entre la densité électronique $\rho(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$ et le potentiel cristallin. Notons que nous ne prendrons pas en compte de couplage de type magnétique (*i.e.* couplage entre la densité de courant électronique et un potentiel vecteur créé par les vibrations atomiques) du fait que la vitesse de vibration des atomes est trop lente pour subir une force de Lorentz significative. De façon générale, l'opérateur électronique peut se décomposer dans la base des fonctions de Bloch :

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{p}n} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{p}n}(\mathbf{r}) c_{\mathbf{p}n}, \quad (2.40)$$

où n est l'indice de bande et \mathbf{p} le moment électronique. Finalement, on inclut (2.40) et (2.38), ainsi que la décomposition en modes propres de phonons (2.15) dans (2.39), pour obtenir

$$\mathcal{H}_{\text{ep}} \simeq \sum_{\lambda} \mathcal{H}_{\text{ep}}^{\lambda} \equiv \sum_{\lambda} \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{l}_s} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'nm} \int_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{p}n}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{p}'m}(\mathbf{r}) c_{\mathbf{p}n}^{\dagger} c_{\mathbf{p}'m} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}_s} v_{\mathbf{q}\lambda} \mathbf{p}_{\mathbf{q}\lambda s} \cdot \frac{\partial U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{l}_s})}{\partial \mathbf{R}_{\mathbf{l}_s}}. \quad (2.41)$$

La formule qui précède peut être simplifiée en utilisant l'invariance par translation des fonctions de Bloch : $u_{\mathbf{p}n}(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = u_{\mathbf{p}n}(\mathbf{r})$. Ainsi, il suffit de décomposer l'intégrale sur l'espace en une somme sur toutes les cellules unités. On réécrit (2.41)

$$\mathcal{H}_{\text{ep}}^{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{l}_s} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'nm} \int_{\mathbf{r} \in \text{unit cell}} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{l}} u_{\mathbf{p}n}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{p}'m}(\mathbf{r}) c_{\mathbf{p}n}^{\dagger} c_{\mathbf{p}'m} v_{\mathbf{q}\lambda} \mathbf{p}_{\mathbf{q}\lambda s} \cdot \frac{\partial U(\mathbf{r} - \mathbf{t}_s)}{\partial \mathbf{t}_s} \quad (2.42)$$

pour ensuite utiliser la relation

$$\sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} = N \delta_{\mathbf{k}\mathbf{0}} \quad (2.43)$$

si \mathbf{k} appartient à la première zone de Brillouin. Le couplage se simplifie alors à

$$\mathcal{H}_{\text{ep}}^{\lambda} \simeq \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{nm} c_{\mathbf{p}n}^{\dagger} c_{\mathbf{p}-\mathbf{q}m} g_{nm}^{\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}, \quad (2.44)$$

avec

$$g_{nm}^{\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \frac{1}{\sqrt{N} \mathcal{V}_{\text{cell}}} \int_{\mathbf{r} \in \text{unit cell}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{p}n}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{p}-\mathbf{q}m}(\mathbf{r}) \sum_s \mathbf{p}_{\mathbf{q}\lambda s} \cdot \frac{\partial U(\mathbf{r} - \mathbf{t}_s)}{\partial \mathbf{t}_s}, \quad (2.45)$$

où on note $\mathcal{V}_{\text{cell}} = \mathcal{V}/N$ le volume d'une cellule unité. De par sa définition, $v_{\mathbf{q}\lambda}$ dépend du volume du cristal comme $\sim \sqrt{N}$. Le vertex $g_{nm}^{\lambda}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}$ est donc bien une quantité intensive.

2.3.2.2 Couplage non local

De manière générale, deux types de couplages peuvent être considérés. Celui présenté dans le précédent paragraphe représente des électrons plongés dans un potentiel créé par les vibrations atomiques et est souvent référé comme couplage de Holstein, du nom de l'auteur de [87]. Le type de couplage non local que nous ne considérons pas dans ce travail, appelé couplage SSH (Su-Schrieffer-Heeger étant les auteurs du modèle initial [88]), correspond à la modification de l'énergie cinétique des électrons due aux changements des distances entre orbitales, ces changements étant causé par les vibrations atomiques. Bien que nous ne considérerons pas de tel couplage, il se doit d'être mentionné à cause de son importance potentielle dans les semimétaux de Weyl. Notamment, dans le graphène [34, 89, 90] ainsi que

dans les semimétaux de Weyl [51,91], il a été montré dans des modèle de liaisons fortes que ce type de couplage a le même effet sur les électrons de basse énergie qu'un couplage avec un champ électromagnétique axial de forte amplitude. Cet effet est propre à la dispersion relativiste des électrons de basse énergie dans le graphène et les semimétaux de Dirac ou de Weyl tridimensionnels. À ce jour, cet effet n'a été observé expérimentalement que dans le graphène [92].

2.4 Phonons et théorie des groupes

Dans la section précédente, nous avons exposé une théorie microscopique du couplage électron-phonon qui ne permet à priori pas de déterminer quels types de couplage sont permis. La théorie des groupes est un outil indispensable pour déterminer, selon les symétries du cristal, quels modes de vibrations peuvent se coupler avec les électrons (en particulier les électrons de basse énergie, pour ce qui nous intéresse). L'objectif de cette section n'est pas de donner un exposé rigoureux sur la théorie des groupes et sur les représentations, mais de justifier brièvement l'utilisation des représentations dans l'étude des phonons, ainsi que de donner une formule importante pour notre étude avec les électrons de Weyl. On se référera aux ouvrages [93,94] pour les notions complètes de groupe, de caractères des représentations, ainsi que des sommes et produits directes de représentations.

2.4.1 Représentations irréductibles et modes de vibration

De façon générale, les modes propres d'un système (ou d'un hamiltonien) peuvent être vus comme des objets obéissant aux transformations élémentaires de symétrie du système. Tout état évoluant dans le système (par exemple une fonction d'onde électronique, des vibrations atomiques) étant une combinaison linéaire de modes propres, la façon dont il se transforme est une somme des transformations élémentaires associées à chacun de ces modes propres.

À titre d'exemple, prenons un système extrêmement simple (par exemple une molécule) qui ne comporte que la symétrie de réflexion par un miroir. Dans ce cas, on a deux types de modes propres (par exemple des fonctions d'onde) : ceux qui sont impairs sous l'opération de réflexion (les fonctions d'onde dont le signe est inversé) et ceux qui sont pairs (les fonctions d'onde dont le signe est inchangé). Notons au passage que la physique se base sur le principe que les modes propres qui se transforment de la même façon (dans ce cas simplifié, ce sont les modes pairs d'une part et les modes impairs d'autres part) sont dégénérés en

énergie. Bien sûr, si on ajoute des symétries au système, la dégénérescence des modes pairs d'une part et des modes impairs d'autre part, va être levée. Dans cette lignée, compliquons le problème en ajoutant une opération de symétrie, par exemple un axe de rotation. Cela ajoute des possibilités de transformation et rend plus complexe la classification des modes propres. Mais on voit ici un problème apparaître : si on ne précise pas la nature des modes propres recherchés (des orbitales atomiques? des vibrations?), il est difficile de donner une description générale et concrète de la façon dont les objets du système se transforment.

C'est ainsi qu'intervient la théorie des représentations. D'un point de vue mathématique, une représentation, notée Γ , est une application qui, à chaque élément g du groupe de symétrie, associe une application linéaire $\Gamma(g)$ (ou de façon équivalente, une matrice) et qui doit préserver l'opération de multiplication du groupe⁵. L'ensemble maximal de représentations non équivalentes permettant de décrire l'ensemble des transformations du système forme l'ensemble des représentations irréductibles (irreps). On peut alors montrer que le nombre d'irreps d'un groupe est égal au nombre d'opérations non équivalentes du groupe. Dans le premier cas très simplifié, avec comme seules symétries l'identité et la réflexion, on avait alors deux représentations irréductibles correspondant aux deux types de modes propres, pairs et impairs. De façon générale, on associera chaque mode propre du système à une irrep du groupe de symétrie du système. Une irrep à N dimensions correspondra à N modes propres dégénérés en énergie : c'est ce qu'on entend en parlant de N modes se transformant de la même façon.

Tout objet évoluant dans le système est associé à une représentation, elle même pouvant s'écrire comme une somme directe d'irreps (de la même façon que chaque objet est une combinaison linéaire de modes propres). Il faut donc en premier se poser la question de quel objet est une vibration puis quelle est sa représentation associée. Un mode de vibration dans un cristal prend en compte deux éléments : l'ensemble des atomes équivalents d'une part, et les directions de vibration de chaque atome d'autre part. Un mode de vibration est donc associé au produit direct des représentations $\Gamma^V \otimes \Gamma^{a.s.}$, où Γ^V est la représentation associée à l'objet vecteur (la direction de vibration dans notre cas) et $\Gamma^{a.s.}$ est la représentation qui engendre les transformations entre atomes équivalents du cristal [93]. La décomposition de $\Gamma^V \otimes \Gamma^{a.s.}$ en une somme de irreps nous donnent alors l'ensemble des différents modes propres de vibrations. En guise d'exemple, la figure 2.1 illustre les différents modes de phonons optiques à grande longueur d'onde dans la matériau TaAs. Du fait que les phonons acoustiques à grande longueur d'onde correspondent à une translation identique de tous les atomes de la cellule unité, ceux-ci se transforment comme Γ^V (égale à la décomposition

5. C'est-à-dire que pour tous éléments g et g' de groupe, le produit de matrices $\Gamma(g)\Gamma(g')$ est égal à la matrice $\Gamma(gg')$.

en irreps $A_1 \oplus E$ dans le groupe ponctuel C_{4v} de TaAs [95]).

2.4.2 Règle de sélection pour le couplage entre phonon et électrons de Weyl

On appelle caractère χ d'une représentation Γ l'ensemble des traces associés à cette représentation. Autrement dit, $\text{tr} [\Gamma (g)] = \chi (g)$ pour tout élément g du groupe. Un caractère détermine de façon univoque une représentation, à une transformation d'équivalence près. Les caractères sont pour cette raison les objets qui vont nous permettre de calculer les règles de sélection de couplage entre des modes propres du système.

En particulier, la formule extraite de [94],

$$a_1 = \frac{1}{h} \sum_{g \in G_{\mathbf{k}_i} \cap G_{\mathbf{q}} \cap G_{\mathbf{k}_f}} \left(\chi_{\mathbf{k}_i}^{(i)} (g) \right)^* \chi_{\mathbf{q}}^\lambda (g) \chi_{\mathbf{k}_f}^{(f)} (g), \quad (2.46)$$

permet de conclure si le couplage entre un mode de phonon λ de moment \mathbf{q} peut induire une transition entre les états électroniques de moment \mathbf{k}_i et \mathbf{k}_f . $\chi_{\mathbf{k}_i}^{(i)}$ et $\chi_{\mathbf{k}_f}^{(f)}$ sont les caractères des irreps associés aux électrons de moments \mathbf{k}_i et \mathbf{k}_f , et $\chi_{\mathbf{q}}^\lambda$ est le caractère associé à la représentation phonon. a_1 est le nombre de fois que le produit des trois représentations contient la représentation triviale. Enfin, $G_{\mathbf{k}}$ est le groupe du vecteur d'onde \mathbf{k} . Le couplage entre le phonon λ et les deux états électroniques est permis seulement si a_1 est non nul.

Dans le cas du couplage entre un phonon et des électrons de Weyl, les moments des noeuds de Weyl sont situés à des points quelconques de la zone de Brillouin. Autrement dit, leur groupe est seulement composé de l'opération identité. La formule (2.46) permet donc de conclure que a_1 n'est jamais nul dans ce cas. Ainsi, tous les modes de phonon peuvent se coupler aux électrons de Weyl.

Chapitre 3

Effet de l'anomalie chirale sur les phonons

Dans un semimétal de Weyl, la présence en simultanée d'un champ axial et d'un champ magnétique modifie de façon singulière la polarisation électronique. Comme on le verra dans la section 3.2.3, cela peut être montré par un calcul de la fonction de réponse densité-densité aux champs axiaux et magnétiques. Le problème fait donc intervenir trois espèces (ou trois champs) dans le cristal : les phonons, les électrons et les photons. En termes diagrammatiques, on s'intéressera particulièrement au diagramme triangle VVA [96,97], autrement dit à la fonction de réponse comprenant deux vertex de type vecteur et un de type axial. Pour ce faire, nous emprunterons à la physique des particules des résultats valides seulement à potentiel chimique et température nuls, autrement dit pour un semimétal de Weyl parfait. L'effet de ces deux paramètres ne fera pas l'objet d'une discussion détaillée dans ce chapitre et sera négligé. Cependant, le formalisme qu'on utilisera dans le chapitre 4 sera plus propice à leur prise en compte.

Les résultats présentés dans ce chapitre ont été publiés dans [98].

3.1 Interaction entre électrons de Weyl et phonons

Dans cette section, nous allons limiter les degrés de liberté électroniques aux électrons près de la surface de Fermi, c'est-à-dire à ceux susceptibles d'avoir le plus grand impact sur la dynamique des phonons, qualitativement parlant. On supposera que l'effet des électrons des hautes énergies ont pour effet de renormaliser les paramètres entrant dans la dispersion. Entre autre, la permittivité du vide ϵ_0 sera remplacée par $\epsilon_\infty > \epsilon_0$. L'évaluation de ces paramètres sort du cadre de ce travail et pourrait faire l'objet de calculs *ab-initio*.

Nous partons d'une interaction dans l'approximation du potentiel de déformation, comme décrit en (2.3.2.1). Le but est d'extraire les types de couplage : nous allons voir que certains modes de phonon peuvent se coupler de la même façon qu'un champ électromagnétique (couplages de types scalaire et vecteur) ou bien comme un champ axial (couplages de types pseudoscalaire et vecteur axial). Comme nous l'avons expliqué en (1.2.2), c'est ce dernier type de couplage qui permet de mettre en évidence l'anomalie chirale et sur lequel nous nous concentrerons.

3.1.1 Interaction avec les électrons de basse énergie

3.1.1.1 Dérivation de l'hamiltonien d'interaction entre phonons et électrons de Weyl

Les propriétés physiques à basse énergie sont dominées par les électrons se situant au voisinage de la surface de Fermi et qui dans notre cas ont une dispersion de type fermions de Weyl. En partant du développement (2.40), on focalise le problème sur ces électrons en ne gardant que les bandes qui forment les noeuds de Weyl puis en développant les fonctions de Bloch au voisinage des noeuds de Weyl¹, dont on dénote les positions \mathbf{k}_τ . On obtient ainsi le champ électronique à basse énergie

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\tau} e^{i\mathbf{k}_\tau \cdot \mathbf{r}} \sum_{|\mathbf{k}| < \Lambda, \sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\sigma\tau}(\mathbf{r}) c_{\mathbf{k}\sigma\tau} + \mathcal{O}\left(\frac{|\mathbf{k}|}{\Lambda}\right) + \text{contributions à haute énergie}, \quad (3.1)$$

où $\sigma = \pm$ est l'indice correspondant aux deux bandes et $u_{\sigma\tau}(\mathbf{r}) \equiv u_{\mathbf{k}_\tau\sigma}(\mathbf{r})$. Λ est un cutoff qui délimite la zone dans laquelle la dispersion de type fermions de Weyl est valide. Il est important de remarquer que les bandes électroniques à haute énergie ne peuvent être totalement ignorées. Cependant, leur prise en compte explicite nécessiterait l'emploi de méthodes numériques sophistiquées et sort du cadre de ce travail. Ainsi, on supposera que ces bandes peuvent être prises en compte *a posteriori* par la renormalisation des constantes faisant intervenir les électrons (notamment la permittivité diélectrique).

L'analyse est également simplifiée par le fait que la dépendance des fonctions de Bloch $u_{\sigma\tau}$ dans le moment \mathbf{p} est remplacée par un degré de liberté discret : la chiralité τ . En appliquant le même cheminement qui a mené à l'hamiltonien (2.44), mais en ne gardant que les opérateurs fermioniques de basse énergie (3.1) à la place de (2.40), on obtient le couplage

1. On utilise ici une approximation de type Kohn-Luttinger similaire à celle présentée dans [99].

entre phonons et électrons de Weyl :

$$\tilde{H}_{\text{ep}}^{\lambda} \simeq \sum_{\tau\tau'\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} g_{\sigma\sigma',\tau\tau'}^{\lambda}(\mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}(t) c_{\mathbf{k}\sigma\tau}^{\dagger} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{k}_{\tau}-\mathbf{k}_{\tau'}\sigma'\tau'}, \quad (3.2)$$

où le vertex

$$g_{\sigma\sigma',\tau\tau'}^{\lambda}(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{\sqrt{N}\mathcal{V}_{\text{cell}}} \int_{\text{unit cell}} d^3\mathbf{r} u_{\sigma\tau}^*(\mathbf{r}) u_{\sigma'\tau'}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{s}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{p}_{\mathbf{q}\lambda\mathbf{s}} \cdot \frac{\partial U(\mathbf{r}-\mathbf{t}_{\mathbf{s}})}{\partial \mathbf{t}_{\mathbf{s}}} \quad (3.3)$$

ne dépend plus que du moment \mathbf{q} du phonon. La somme sur les moments $\sum'_{\mathbf{k}\mathbf{q}}$ est limitée aux voisinages des noeuds de Weyl de telle sorte que $|\mathbf{k}-\mathbf{q}| < \Lambda$ et $|\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{k}_{\tau}-\mathbf{k}_{\tau'}| < \Lambda$. Comme on s'intéressera exclusivement à la dynamique des phonons à grande longueur d'onde, on peut considérer $\mathbf{q} < \Lambda$. De plus, on considèrera que les noeuds sont suffisamment éloignés afin que $\Lambda < |\mathbf{k}_{\tau}-\mathbf{k}_{\tau'}|$ pour $\tau \neq \tau'$. La seule possibilité est donc d'avoir $\tau = \tau'$, dans la somme (3.2) qui devient

$$\tilde{H}_{\text{ep}}^{\lambda} \simeq \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'\tau} g_{\sigma\sigma',\tau}^{\lambda}(\mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}(t) c_{\mathbf{k}\tau\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\tau\sigma'},$$

avec $g_{\sigma\sigma',\tau}^{\lambda} \equiv g_{\sigma\sigma',\tau\tau}^{\lambda}$. Ce vertex électron-phonon est représenté sur la figure 3.1.

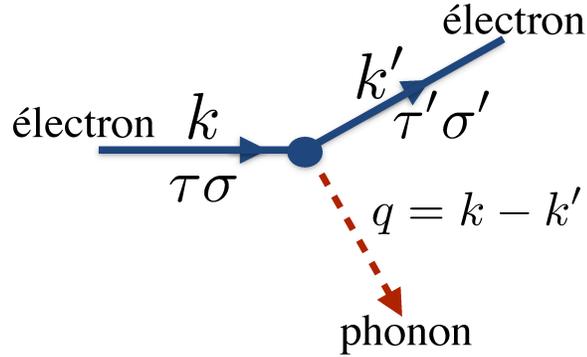


FIGURE 3.1 Schéma du vertex électron-phonon correspondant à l'équation (3.3).

Désormais, autour de chaque noeud τ , on a seulement deux degrés de liberté discrets. On peut donc décomposer le vertex g comme une somme de matrices de Pauli

$$\hat{g}^{\lambda} = g_{00}^{\lambda} \sigma_0 \tau_0 + \mathbf{g}_0^{\lambda} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \tau_z \left(g_{0z}^{\lambda} \sigma_0 + \mathbf{g}_z^{\lambda} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \quad (3.4)$$

avec

$$g_{00}^\lambda(\mathbf{q}) = \sum_{\sigma\tau} g_{\sigma\sigma,\tau}^\lambda(\mathbf{q})/4 \quad (3.5)$$

$$\mathbf{g}_0^\lambda(\mathbf{q}) = \sum_{\sigma\sigma'\tau} \sigma_{\sigma\sigma'} g_{\sigma\sigma',\tau}^\lambda(\mathbf{q})/4 \quad (3.6)$$

$$g_{0z}^\lambda(\mathbf{q}) = \sum_{\sigma\tau} \tau g_{\sigma\sigma,\tau}^\lambda(\mathbf{q})/4 \quad (3.7)$$

$$\mathbf{g}_z^\lambda(\mathbf{q}) = \sum_{\sigma\sigma'\tau} \tau \sigma_{\sigma\sigma'} g_{\sigma\sigma',\tau}^\lambda(\mathbf{q})/4. \quad (3.8)$$

En comparaison direct avec l'hamiltonien de Weyl (1.37), on définit le quadrivecteur

$$a^{\lambda\mu} \equiv \left(g_{00}^\lambda(\mathbf{q}), \mathbf{g}_z^\lambda(\mathbf{q}) \right) v_{\mathbf{q}\lambda} \quad (3.9)$$

ainsi que le quadrivecteur axial

$$a_5^{\lambda\mu} \equiv \left(g_{0z}^\lambda(\mathbf{q}), \mathbf{g}_0^\lambda(\mathbf{q}) \right) v_{\mathbf{q}\lambda}. \quad (3.10)$$

Désormais, on se référera à (3.9) et (3.10) comme les vertex vecteur et axial du couplage électron-phonon, respectivement. En particulier, g_{00}^λ sera appelé couplage scalaire et g_{0z}^λ couplage pseudoscalaire. Il sera utile pour la suite de remarquer ces derniers vérifient

$$\begin{aligned} g_{00}^\lambda(-\mathbf{q}) &= g_{00}^\lambda(\mathbf{q})^* \\ g_{0z}^\lambda(-\mathbf{q}) &= g_{0z}^\lambda(\mathbf{q})^*. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Rappelons (voir section 1.2.2) que le vertex axial induit une fluctuation de la différence en énergie et moment entre les noeuds de Weyl de chiralités opposées. Une différence statique induit un couplage électromagnétique sous la forme de l'axion, couplage qui découle de l'anomalie chirale comme on l'a détaillé dans la section 1.2.2. Dans le cas d'une différence fluctuante, comme celle induite par (3.10), on obtient aussi un couplage entre les champs électriques et magnétiques. Cependant, on va montrer qu'un des trois champs couplés (axial, électrique ou magnétique) doit être constant afin d'obtenir l'action effective reliée à l'anomalie chirale. Dans notre cas, on considérera un champ magnétique constant.

3.1.1.2 Conditions de symétrie pour les vertex

Discutons des symétries requises du cristal pour l'existence des différents types de couplage mentionnés dans la section précédente.

L'action \mathcal{R} du groupe ponctuel d'un cristal sur un état de Bloch $|\psi_{\mathbf{k}n}\rangle$ change son vecteur

d'onde \mathbf{k} en \mathcal{Rk} [81]. Cependant \mathcal{R} , de même que toutes les opérations du groupe ponctuel, laisse invariant la densité électronique. En particulier, prenons les opérations d'inversion et de réflexion par un miroir. La première inverse le signe de \mathbf{k} tandis que la deuxième change le signe d'une seule composante de \mathbf{k} (celle orthogonale au miroir). Dans les deux cas, cela implique de changer la chiralité de signe. De ce fait si le cristal a l'une des deux symétries, on a $\sum_{\sigma} |u_{\sigma\tau}(r)|^2 = \sum_{\sigma} |u_{\sigma(-\tau)}(r)|^2$, ce qui implique $g_{0z}(\mathbf{q}) = 0$. Autrement dit, ce couplage pseudoscalaire ne peut être présent que dans les cristaux dits énantiomorphes. Dans notre modèle à basse énergie et à deux noeuds, la seule quantité qui indique la brisure de symétrie miroir ou d'inversion et le décalage en énergie des noeuds de Weyl, b_0 . On peut donc supposer que l'amplitude de g_{0z} est proportionnelle à b_0 . Ceci-dit, il faut faire attention à cet argument microscopique qui est lié au fait que l'on considère un couplage local par l'intermédiaire du potentiel de déformation. De manière plus générale, la théorie des groupes n'interdit pas d'avoir un couplage pseudoscalaire dans un matériau possédant des symétries miroirs. En effet, le couplage pseudoscalaire entre un mode de phonon à $\mathbf{q} \simeq 0$ de coordonnée v et les électrons de Weyl peut s'écrire comme l'élément de matrice

$$g_{0z} = \sum_{\sigma\tau} \tau \left\langle u_{\sigma\tau} \left| \frac{\partial U}{\partial v} \right| u_{\sigma\tau} \right\rangle$$

où U est le potentiel cristallin, invariant sous les opérations de symétrie du cristal. Une opération de réflexion par un miroir, si elle est présente dans le système, inverse la chiralité². On a donc

$$\begin{aligned} g_{0z} &= \sum_{\sigma\tau} \tau \left\langle u_{\sigma\tau} \left| MM \frac{\partial U}{\partial v} MM \right| u_{\sigma\tau} \right\rangle \\ &= \sum_{\sigma\tau} \tau \left\langle u_{\sigma(-\tau)} \left| M \frac{\partial U}{\partial v} M \right| u_{\sigma(-\tau)} \right\rangle \\ &= - \sum_{\sigma\tau} \tau \left\langle u_{\sigma\tau} \left| M \frac{\partial U}{\partial v} M \right| u_{\sigma\tau} \right\rangle. \end{aligned}$$

Par conséquent, g_{0z} est nul si le mode de phonon est invariant sous la symétrie miroir (donc si c'est un mode scalaire) et est non nul si le mode est pseudoscalaire (si v change de signe sous l'opération miroir). Inversement, g_{00} sera nul si le mode est pseudoscalaire et fini s'il est scalaire. Dans un matériau énantiomorphe, il n'y a plus de distinction entre les modes scalaires et pseudoscalaires. Dans ce cas, un mode peut contribuer à la fois à g_{00} et à g_{0z} .

2. La chiralité indique l'alignement ou l'anti-alignement entre un spin et un moment. Si le moment est parallèle au plan du miroir, il est inchangé par l'opération miroir. Le spin parallèle au miroir change lui de signe car il se transforme comme un vecteur axial, ou pseudo-vecteur. Dans le cas où le moment et le spin sont orthogonaux au miroir, c'est l'inverse : le moment change de signe et le spin garde le même. Dans tous les cas la chiralité change de signe sous l'opération.

3.2 Dispersion des phonons en présence des électrons de Weyl

3.2.1 Dérivation de l'action effective

Maintenant que nous avons isolé les électrons de basse énergie et leur couplage avec les phonons, utilisons une théorie de perturbation pour évaluer leur impact sur la dynamique des phonons. Nous travaillons avec l'action des phonons isolés $S_{\text{ph}}^{(0)}[v, \mathbf{E}] = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \mathcal{L}_{\text{ph}}^{(0)}(\omega, \mathbf{q})$ avec la densité lagrangienne exprimée dans l'espace réciproque

$$\mathcal{L}_{\text{ph}}^{(0)}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\lambda} \left[\frac{1}{2} M(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2) v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) v_{-\mathbf{q}\lambda}(-\omega) + \sqrt{N} \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)} \cdot \mathbf{E}_{-\mathbf{q}}(-\omega) v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) \right],$$

et celle des électrons de Weyl $S_W[\bar{\Psi}, \Psi, v, \mathbf{E}] = \frac{1}{V} \int dt d^3\mathbf{r} \mathcal{L}_W(x)$ avec

$$\mathcal{L}_W(x) = \bar{\Psi}(x) \left[-\gamma^0 (i\partial_t + ec_0 + c_0^5 \gamma^5) + \boldsymbol{\gamma} \cdot (\mathbf{P} + e\mathbf{c} + \mathbf{c}^5 \gamma^5) \right] \Psi(x) \quad (3.12)$$

où l'on a repris l'hamiltonien 1.11 écrit sous sa forme covariante, et inclut le couplage électron-phonon dérivé en 3.1.1.1 par l'intermédiaire des champs

$$\begin{aligned} c_0(\mathbf{r}, t) &= A_0(\mathbf{r}, t) + \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\lambda} g_{00}^{\lambda}(\mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}(t) \\ c_0^5(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\lambda} g_{0z}^{\lambda}(\mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}(t) \\ \mathbf{c}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\lambda} \mathbf{g}_z^{\lambda}(\mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}(t) \\ \mathbf{c}^5(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\lambda} \mathbf{g}_0^{\lambda}(\mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}(t) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Maintenant que nous avons à disposition les vertex de couplage électron-phonon, nous allons pouvoir intégrer sur le champ fermionique Ψ . Le but de cette manoeuvre est d'enlever la dépendance explicite de l'action des phonons en Ψ , pour ensuite obtenir un terme effectif dans l'équation du mouvement des phonons, réminiscent de l'effet des électrons sur ces derniers. C'est grâce à l'action effective obtenue, $S^{\text{eff}}[v]$, que nous déduirons l'équation du mouvement (classique) des phonons : $\frac{\delta S^{\text{eff}}[v]}{\delta v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega)} = 0$.

Rappelons comment se déroule l'intégration sur le champ électronique. On commence

avec la fonction de partition du système électrons-phonons

$$\mathcal{Z} = \int D(\bar{\Psi}\Psi) \left(\prod_{\lambda} Dv_{\lambda} \right) DA^{\mu} e^{-S_W[\bar{\Psi},\Psi,v,A^{\mu}] - S_{\text{ph}}^{(0)}[v,A^{\mu}]}.$$

On utilise ensuite la formule pour l'intégrale gaussienne $\int D(\bar{\Psi}\Psi) e^{-S_W} = \det(G^{-1}) = e^{\text{Tr}(\ln G^{-1})}$ [100], où G est le propagateur (ou fonction de Green) des fermions de Weyl, et vérifie $\mathcal{L}_W(x) = \bar{\Psi}(x) G^{-1}(x) \Psi(x)$ ³ (voir équation (3.12)). On obtient la fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \pi \int Dv DA^{\mu} e^{-S_{\text{eff}}[v,A^{\mu}] - S_{\text{ph}}^{(0)}[v,A^{\mu}]}, \quad (3.14)$$

avec $S_{\text{eff}} = -\text{Tr}[\ln G^{-1}]$. Ici la trace "Tr"⁴ est effectuée sur tous les états possibles du système, aussi bien continus que discrets. Cette trace ne peut être effectuée exactement. Nous la limiterons aux premier et deuxième ordres non nuls dans les champs vecteurs et axiaux. Pour cela on introduit la fonction de Green des électrons de Weyl libres,

$$\begin{aligned} G^0 &= (\gamma^0 i\partial_t - v_F \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{P})^{-1} \\ &= (\gamma^{\mu} \partial_{\mu})^{-1}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

où le quadrivecteur moment est défini $\partial_{\mu} \equiv \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = (i\partial_t, v_F \mathbf{P})$. Il est utile de souligner ici que le terme de vitesse utilisée dans les quadrivecteurs est bien la vitesse de Fermi et non celle de la lumière. Le prix à payer se situe au niveau des photons (*i.e.* le champ électromagnétique) qui ne sont plus *on-shell*, c'est-à-dire que pour le champ électromagnétique $A(k)$, on a $k^2 \neq 0$.

La fonction de Green (3.15) est identique à celle de fermions de Dirac sans masse⁵ et ne comporte pas de terme de séparation en moment entre les noeuds de Weyl. Cela est dû au fait qu'on est dans une théorie de basse énergie où les deux noeuds sont indépendants. Dans la théorie de perturbation, les champs qui se coupleront aux électrons de basse énergie devront posséder de ce fait un moment suffisamment petit afin de ne pas coupler les différents noeuds de Weyl.

Ce sera plus commode de travailler dans l'espace réciproque (en quatre dimensions) dans lequel la fonction de Green s'écrit

$$G^0(k) = (\gamma^{\mu} k_{\mu})^{-1} = \frac{\gamma^{\mu} k_{\mu}}{k^2}. \quad (3.16)$$

3. Dans ce cas particulier, le système est invariant par translation et le propagateur est une fonction d'une seule coordonnée.

4. On notera "tr" pour les traces matricielles, c'est-à-dire la trace sur les degrés de liberté discrets.

5. Dans la littérature de physique des hautes énergies, on définit souvent le fermion de Weyl comme un fermion de Dirac de masse nulle.

On utilise ici la notation $k^2 = k^\mu k_\mu = k_0^2 - v_F^2 \mathbf{k}^2$ (k_0 étant la fréquence) et de façon plus générale le produit scalaire $k \cdot x = k^\mu x_\mu = k_0 t - v_F \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ (voir section 1.1.1.2).

On fait ensuite le développement

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{eff} &= -\text{Tr} \left(\ln \left[\left(G^{(0)} \right)^{-1} + \gamma^\mu c_\mu + \gamma^\mu c_\mu^5 \gamma^5 \right] \right) \\ &= -\text{Tr} \left(\ln \left[\left(G^{(0)} \right)^{-1} \left(1 + G^{(0)} \left(\gamma^\mu c_\mu + \gamma^\mu c_\mu^5 \gamma^5 \right) \right) \right] \right) \\ &= -\text{Tr} \left(\ln \left[\left(G^{(0)} \right)^{-1} \right] \right) - \text{Tr} \left\{ G^{(0)} \left(\gamma^\mu c_\mu + \gamma^\mu c_\mu^5 \gamma^5 \right) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \left[G^{(0)} \left(\gamma^\mu c_\mu + \gamma^\mu c_\mu^5 \gamma^5 \right) \right]^2 \right\} \\ &\quad - \frac{1}{3} \text{Tr} \left\{ \left[G^{(0)} \left(\gamma^\mu c_\mu + \gamma^\mu c_\mu^5 \gamma^5 \right) \right]^3 \right\} + \dots \end{aligned}$$

Le terme $\text{Tr} \left(\ln \left[G^{(0)-1} \right] \right)$ ne dépend pas des phonons et du champs électromagnétique, on l'ignorera donc par la suite. Le terme au premier ordre s'écrit dans l'espace de Fourier [101]

$$\int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \text{tr} \left\{ G^{(0)}(k) \left(\gamma^\mu c_\mu(0) + \gamma^\mu c_\mu^5(0) \gamma^5 \right) \right\}$$

et ne fait intervenir que les termes à fréquence et moment nuls des champs scalaire c_μ et axial c_μ^5 . On pourra donc ignorer ce terme dans les équations du mouvement⁶.

On notera les termes restants S^2 et S^3 . Pour rester dans l'approximation harmonique, nous ne garderons que les termes d'ordre inférieur ou égal à deux dans les vibrations du réseau.

3.2.2 Correction au second ordre S^2

On réécrit la partie S^2 de l'action effective

$$\begin{aligned} S^2 &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[G^{(0)} \gamma^\mu c_\mu G^{(0)} \gamma^\nu c_\nu \right] + \frac{1}{2} \text{Tr} \left[G^{(0)} \gamma^\mu c_\mu^5 G^{(0)} \gamma^\nu c_\nu^5 \right] \\ &\quad + \text{Tr} \left[G^{(0)} \gamma^\mu c_\mu G^{(0)} \gamma^\nu c_\nu^5 \gamma^5 \right], \end{aligned} \quad (3.17)$$

6. Dans le cas particulier de la fonction de Green (3.16), on trouve facilement que ces intégrales s'annulent.

où l'on a utilisé le fait que γ^5 anticommute avec γ^μ et G^0 ⁷ et $(\gamma^5)^2 = 1$. Prenons le premier terme de la première ligne et écrivons explicitement la trace

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left[G^{(0)} \gamma^\mu c_\mu G^{(0)} \gamma^\nu c_\nu \right] &\equiv \int d^4x d^4x' \text{tr} \left[G^{(0)}(x-x') \gamma^\mu c_\mu(x') G^{(0)}(x'-x) \gamma^\nu c_\nu(x) \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^8} \int d^4x d^4x' d^4k_1 d^4k_2 e^{i(k_1-k_2)x} e^{-i(k_1-k_2)x} \\
&\times \text{tr} \left[G^{(0)}(k_1) \gamma^\mu G^{(0)}(k_2) \gamma^\nu \right] c_\mu(x') c_\nu(x) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^8} \int d^4k d^4q \text{tr} \left[G^{(0)}(k) \gamma^\mu G^{(0)}(k-q) \gamma^\nu \right] c_\mu(q) c_\nu(-q) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4q \Pi_{VV}^{\mu\nu}(q) c_\mu(q) c_\nu(-q),
\end{aligned} \tag{3.18}$$

où

$$\Pi_{VV}^{\mu\nu}(q) \equiv \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k \text{tr} \left[G^{(0)}(k) \gamma^\mu G^{(0)}(k-q) \gamma^\nu \right]$$

est appelé tenseur de polarisation vecteur-vecteur car il comporte deux vertex de type vecteurs γ^μ et γ^ν . De la même façon, la seconde ligne de (3.17) peut s'écrire

$$\text{Tr} \left[G^{(0)} \gamma^\mu c_\mu G^{(0)} \gamma^\nu c_\nu^5 \gamma^5 \right] = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4q \Pi_{VA}^{\mu\nu}(q) c_\mu(q) c_\nu^5(-q), \tag{3.19}$$

où

$$\Pi_{VA}^{\mu\nu}(q) \equiv \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k \text{tr} \left[G^{(0)}(k) \gamma^\mu G^{(0)}(k-q) \gamma^\nu \gamma^5 \right] \tag{3.20}$$

est le tenseur de polarisation vecteur-axial, γ^μ étant un vertex vecteur et $\gamma^\nu \gamma^5$ un vertex axial. Ce dernier terme s'annule comme on peut le voir en utilisant (1.9) :

$$\Pi_{VA}^{\mu\nu}(q) = \frac{-4i}{(2\pi)^4} \int d^4k \varepsilon^{\alpha\mu\beta\nu} \frac{k_\alpha k_\beta - k_\alpha q_\beta}{k^2 (k-q)^2}. \tag{3.21}$$

L'intégrande $\varepsilon^{\alpha\mu\beta\nu} k_\alpha k_\beta$ est nulle. Pour le terme restant, on peut vérifier (par exemple en coordonnées hypersphériques) que l'intégrale $\int d^4k \frac{k_\alpha q_\beta}{k^2 (k-q)^2}$ est non nulle seulement pour

7. Pour une fonction de Green de fermions de Dirac *massifs*, la fonction de Green et γ^5 n'anticommulent plus, ce qui rendrait l'analyse un peu plus compliquée.

$\alpha = \beta$ alors que $\varepsilon^{\alpha\mu\alpha\nu} = 0$, ce qui conclut $\Pi_{VA}^{\mu\nu}(q) = 0$.⁸ On a finalement

$$S^2 = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4q \Pi_{VV}^{\mu\nu}(q) \left[c_\mu(q) c_\nu(-q) + c_\mu^5(q) c_\nu^5(-q) \right]. \quad (3.22)$$

Afin d'écrire S^2 comme l'action d'un champ électromagnétique, on utilise la structure tensoriel de la polarisation électronique, identique à la celle des photons,

$$\Pi_{VV}^{\mu\nu}(q) = \Pi(q^2) [q^\mu q^\nu - q^2 \delta_{\mu\nu}]. \quad (3.23)$$

Rappelons que ce résultat n'est valide que pour les électrons de basse énergie dont l'action est invariante de Lorentz [58]. Si on ajoute à cela la contrainte de conservation de la charge $q_\mu \Pi_{VV}^{\mu\nu}(q) = \Pi_{VV}^{\mu\nu}(q) q_\nu = 0$, seule la forme 3.23 est permise. Grâce à cela, S^2 , qui comporte à la fois les photons et les phonons, s'écrit comme l'intégrale d'une densité d'énergie quadratique dans les champs électriques et magnétiques totaux :

$$\begin{aligned} S_2 \simeq & \frac{1}{2} \frac{e^2 \mathcal{V}}{\hbar v_F} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \Pi(q^2) \left[\left(\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) \right) \cdot \left(\mathbf{E}_{-\mathbf{q}}(-\omega) + \mathbf{E}_{-\mathbf{q}}^{\text{ph}}(-\omega) \right) \right. \\ & \left. - v_F^2 \left(\mathbf{B}_{\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{B}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) \right) \cdot \left(\mathbf{B}_{-\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{B}_{-\mathbf{q}}^{\text{ph}}(-\omega) \right) \right] \\ & + \frac{1}{2} \frac{e^2 \mathcal{V}}{\hbar v_F} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \Pi(q^2) \left[|\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{q}}(\omega)|^2 - v^2 |\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{q}}(\omega)|^2 \right], \end{aligned} \quad (3.24)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) &= \frac{i}{e v_F} \sum_{\lambda} [v_F \mathbf{q} g_{00}(\mathbf{q}) - q_0 \mathbf{g}_z(\mathbf{q})] v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) \\ \mathbf{B}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) &= \frac{i}{e v_F} \sum_{\lambda} [\mathbf{q} \times \mathbf{g}_z(\mathbf{q})] v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) \\ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{q}}(\omega) &= \frac{i}{e v_F} \sum_{\lambda} [v_F \mathbf{q} g_{0z}(\mathbf{q}) - \omega \mathbf{g}_0(\mathbf{q})] v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) \\ \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{q}}(\omega) &= \frac{i}{e v_F} \sum_{\lambda} [\mathbf{q} \times \mathbf{g}_0(\mathbf{q})] v_{\mathbf{q}\lambda}(\omega). \end{aligned} \quad (3.25)$$

$\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(q_0)$ et $\mathbf{B}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(q_0)$ correspondent à des champs électromagnétiques effectifs dérivant du champ vecteur $(g_{00}(\mathbf{q}), v \mathbf{g}_z(\mathbf{q})) v_{\mathbf{q}\lambda}(q_0)$ tandis que $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(q_0)$ et $\mathbf{B}_{\mathbf{q}}(q_0)$ sont les véritables champs

8. On verra dans le chapitre 4 que cette fonction de polarisation devient non nulle quand un champ magnétique est pris en compte dans les états propres électroniques sans interaction. Cela permettra de faire un lien entre le calcul entrepris dans ce chapitre, qui est perturbatif au premier ordre en champ magnétique, et le calcul non perturbatif dans le champ électromagnétique qui sera l'objet du chapitre suivant.

électromagnétiques. $\epsilon_{\mathbf{q}}(q_0)$ et $\beta_{\mathbf{q}}(q_0)$ sont les champs électromagnétiques axiaux dérivant du pseudo-vecteur $(g_{0z}(\mathbf{q}), v\mathbf{g}_0(\mathbf{q})) v_{\mathbf{q}\lambda}(q_0)$.

Nous allons traiter le champ électromagnétique en résolvant les équations du mouvement pour $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(q_0)$ et $\mathbf{B}_{\mathbf{q}}(q_0)$ (*i.e.* les équations de Maxwell) et en incluant leurs solutions dans l'action des phonons. Ainsi, à l'action du champ électromagnétique sans interactions

$$S_{EM} = \frac{1}{2} \mathcal{V} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \epsilon_{\infty} \left(|\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(q_0)|^2 - c^2 |\mathbf{B}_{\mathbf{q}}(q_0)|^2 \right), \quad (3.26)$$

on doit ajouter S^2 ainsi que la charge de Born apparaissant dans l'équation du mouvement des phonons (2.24) et l'action S^3 que nous allons dériver. On étudiera un cas simplifié dans la section (3.2.4).

3.2.3 Correction au troisième ordre S^3

De la même façon que l'action effective S^2 s'écrit comme le produit d'une fonction de polarisation à deux vertex avec deux termes de couplage (voir équations (3.18) et (3.22)), l'action S^3 s'écrit avec une fonction de polarisation à trois vertex :

$$S^3 = \int_{k,k'} T_{\alpha\mu\nu}(k,k') \left(c^{\mu}(k) c^{\nu}(k') + c_5^{\mu}(k) c_5^{\nu}(k') \right) c_5^{\alpha}(-q), \quad (3.27)$$

où $q = k + k'$. Le tenseur $T_{\alpha\mu\nu}(k,k')$ doit être symétrique sous la permutations des indices et moments $(\mu, k) \leftrightarrow (\nu, k')$ [102]. Il s'écrit ainsi $T_{\alpha\mu\nu}(k,k') = \Gamma_{\alpha\mu\nu}(k,k') + \Gamma_{\alpha\nu\mu}(k',k)$ où

$$\Gamma_{\alpha\mu\nu}(k,k') = -i \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \text{tr} \left[\gamma_{\mu} G^{(0)}(p) \gamma_{\nu} G^{(0)}(p-k') \gamma_{\alpha} \gamma^5 G^{(0)}(p+k) \right] \quad (3.28)$$

correspond au diagramme triangle VVA car il comporte deux vertex vecteurs et un axial. Un tel diagramme est illustré sur la figure 3.2. Nous avons omis les diagrammes VVV où AAV dans l'action S^3 puisque ceux-ci sont interdits par le théorème de Furry [103] : à potentiel chimique nul, la conservation de la charge impose que tout diagramme avec un nombre impair de vertex vecteurs s'annule. Nous avons négligé le diagramme AAA (qui est équivalent au diagramme VVA pour des fermions sans masse), sinon cela impliquerait des corrections au troisième ordre dans les coordonnées de phonon.

$T_{\alpha\mu\nu}(k,k')$ peut être interprété comme la correction à la réponse courant-courant due à la présence d'un champ axial, le courant associé étant $\delta j_{\mu} \equiv \frac{\delta S^3}{\delta c^{\mu}(k)} = T_{\alpha\mu\nu}(k,k') c^{\nu}(k') c_5^{\alpha}(-q)$.

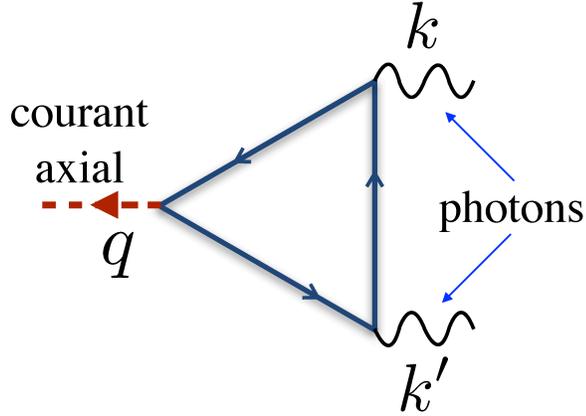


FIGURE 3.2 Diagramme VVA correspondant au couplage entre un champ axial de moment q et deux photons (*i.e.* deux champs de vecteurs) de moments k et $k' = k - q$ (voir équation (3.28)). Chaque côté du triangle correspond à un propagateur électronique sans interaction, $G^{(0)}$.

La conservation de ce courant amène à l'identité de Ward [58] pour le courant vecteur :

$$k^\mu T_{\alpha\mu\nu}(k, k') = k'^\nu T_{\alpha\mu\nu}(k, k') = 0. \quad (3.29)$$

Il est crucial de souligner ici que l'identité (3.29) est justifiée non pas par un calcul direct de $\Gamma_{\alpha\mu\nu}(k, k')$ mais par l'hypothèse de conservation de la charge. À vrai dire, le diagramme (3.28) n'est pas invariant de jauge dans le sens où une translation du moment interne p ne laisse pas l'intégrale invariante. On pourrait choisir la translation de façon à ce que le courant axial soit conservé et obtenir l'identité de Ward pour le courant axial

$$q^\alpha T_{\alpha\mu\nu}(k, k') = 0. \quad (3.30)$$

Cependant, les deux identités de Ward ne peuvent être obtenus simultanément. La physique ayant le dernier mot, le choix menant à (3.29) est fait tandis que $q^\alpha T_{\alpha\mu\nu}(k, k') \neq 0$. Cette dernière inégalité est d'ailleurs l'essence même de l'anomalie chirale, autrement dit la non-conservation du courant axial.

Par la suite on utilisera les résultats de [102] pour le calcul de $T_{\alpha\mu\nu}$. $T_{\alpha\mu\nu}(k, k')$ se décompose en deux parties : la partie directement liée à l'anomalie chirale, dite longitudinale, et une partie dite transverse. Pour reprendre la notation de [102], $T_{\alpha\mu\nu}(k, k')$ s'écrit

$$T_{\alpha\mu\nu}(k, k') = \frac{T_{\alpha\mu\nu}^{(l)}(k, k') - T_{\alpha\mu\nu}^{(t)}(k, k')}{8\pi^2}, \quad (3.31)$$

où les termes longitudinal et transverse vérifient respectivement $q^\alpha T_{\alpha\mu\nu}^{(t)}(k, k') = 0$ et $q^\alpha T_{\alpha\mu\nu}^{(l)}(k, k') \neq 0$. Le calcul de $T_{\alpha\mu\nu}^{(l)}(k, k')$ étant moins lourd que celui de $T_{\alpha\mu\nu}^{(t)}(k, k')$, on le présentera dans l'annexe A. Le résultat est

$$T_{\alpha\mu\nu}^{(l)}(k, k') = w_L(q^2) q_\alpha \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} k^\rho k'^\sigma, \quad (3.32)$$

où $w_L(q^2) = -i\frac{4}{q^2}$ est le facteur de forme longitudinal. La présence du pôle en $1/q^2$ sera cruciale dans la dispersion de phonons d'une part, et est essentielle à l'existence de l'anomalie chirale d'autre part. On reconnaît notamment $q^\alpha T_{\alpha\mu\nu}^{(l)}(k, k') A^\mu(k) A^\nu(k') = -i8\pi^2 q^\alpha j_\alpha^5 = -4i\mathbf{E}(k) \cdot \mathbf{B}(k')$, qui est semblable à l'équation de l'anomalie chirale discutée au chapitre 1 (voir équation (1.29)) mais dans l'espace réciproque. On voit que le pôle en $1/q^2$ est nécessaire pour que la quadridivergence $q^\alpha j_\alpha^5$ soit égale à $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ multiplié par une constante. Dans l'annexe A est montré pourquoi ce pôle est indépendant du cutoff ultraviolet. Il dépend des caractéristiques du matériau seulement au travers de la vitesse de Fermi contenue dans q^2 . De plus, l'anomalie n'est pas détruite par les effets qui brisent l'invariance de Lorentz du système à basse énergie (température finie, potentiel chimique, désordre...), mais le pôle se voit alors élargi par l'ajout d'une partie imaginaire au dénominateur. [104–106]

Le terme transverse n'est pas lié à l'anomalie chirale mais peut jouer un rôle dans la dynamique des phonons. Notamment, si k^2 ou k'^2 sont non nuls, il annule le pôle de $w_L(q^2)$ [102]. Son expression est plus compliquée que celle du terme longitudinal :

$$T_{\alpha\mu\nu}^{(t)}(k, k') = w_T^{(+)}(k^2, k'^2, q^2) t_{\alpha\mu\nu}^{(+)}(k, k') + w_T^{(-)}(k^2, k'^2, q^2) t_{\alpha\mu\nu}^{(-)}(k, k') + \tilde{w}_T^{(-)}(k^2, k'^2, q^2) \tilde{t}_{\alpha\mu\nu}^{(-)}(k, k'), \quad (3.33)$$

où les tenseurs $t_{\alpha\mu\nu}^{(\pm)}$ et $\tilde{t}_{\alpha\mu\nu}^{(-)}$ s'écrivent

$$\begin{aligned} t_{\alpha\mu\nu}^{(+)}(k, k') &= \left(k_\nu \epsilon_{\mu\alpha\rho\sigma} - k'_\mu \epsilon_{\nu\alpha\rho\sigma} \right) k^\rho k'^\sigma - (k \cdot k') \left(\epsilon_{\mu\nu\alpha\rho} (k - k')^\rho + 2 \frac{q_\alpha}{q^2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} k^\rho k'^\sigma \right) \\ t_{\alpha\mu\nu}^{(-)}(k, k') &= \left[(k - k')_\alpha - \frac{k^2 - k'^2}{q^2} q_\alpha \right] \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} k^\rho k'^\sigma \\ \tilde{t}_{\alpha\mu\nu}^{(-)}(k, k') &= \left(k_\nu \epsilon_{\mu\alpha\rho\sigma} + k'_\mu \epsilon_{\nu\alpha\rho\sigma} \right) k^\rho k'^\sigma - (k \cdot k') \epsilon_{\mu\nu\alpha\rho} q^\rho, \end{aligned}$$

et les facteurs de forme

$$w_T^{(+)}(s_1, s_2, s) = i \frac{s}{\sigma} + \frac{i}{2\sigma^2} \left[(s_{12} + s_2)(3s_1^2 + s_1(6s_{12} + s_2) + 2s_{12}^2) \ln \frac{s_1}{s} \right. \\ \left. + (s_{12} + s_1)(3s_2^2 + s_2(6s_{12} + s_1) + 2s_{12}^2) \ln \frac{s_2}{s} \right. \\ \left. + (s_1^2 s_2 + 2s_{12}^2 s_2 + s_1(2s_{12}^2 + 6s_{12}s_2 + s_2^2)) \phi(s_1, s_2) \right] \quad (3.34)$$

$$w_T^{(-)}(s_1, s_2, s) = i \frac{s_1 - s_2}{\sigma} + \frac{i}{2\sigma^2} \left[-(2(s_2 + s_{12})s_{12}^2 - s_1 s_{12}(3s_1 + 4s_{12}) + s_1 s_2(s_1 + s_2 + s_{12})) \ln \frac{s_1}{s} \right. \\ \left. + (2(s_1 + s_{12})s_{12}^2 - s_2 s_{12}(3s_2 + 4s_{12}) + s_1 s_2(s_1 + s_2 + s_{12})) \ln \frac{s_2}{s} \right. \\ \left. + (s_1 - s_2)(s_1 s_2 + 2s_{12}^2) \phi(s_1, s_2) \right] \quad (3.35)$$

$$\tilde{w}_T^{(-)}(s_1, s_2, s) = -w_T^{(-)}(s_1, s_2, s) \quad (3.36)$$

ne dépendent que des normes au carré k^2 , k'^2 et q^2 ⁹. On a défini $s_1 \equiv k^2$, $s_2 \equiv k'^2$, $s = q^2$, $s_{12} \equiv k \cdot k'$, $\sigma \equiv s_{12}^2 - s_1 s_2$ et

$$\phi(x, y) = \frac{1}{\lambda} \left\{ 2 [\text{Li}_2(-\rho x) + \text{Li}_2(-\rho y)] + \ln \frac{y}{x} \ln \frac{1 + \rho y}{1 + \rho x} + \ln(\rho x) \ln(\rho y) + \frac{\pi^2}{3} \right\},$$

avec $x = s_1/s$, $y = s_2/s$, $\rho = 2(1 - x - y + \lambda)^{-1}$, $\lambda = ((1 - x - y)^2 - 4xy)^{1/2}$ et Li_2 est la fonction dilogarithme. Utilisons ces résultats pour exprimer l'action S_3 en fonctions des champs électromagnétiques réels et effectifs.

On commence par le terme le plus simple qui inclut la partie longitudinale. Pour cela on utilise la relation

$$\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} k^\rho k'^\sigma c^\mu c^\nu = -\frac{1}{4} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \tilde{F}^{\rho\mu}(k) \tilde{F}^{\sigma\nu}(k') \\ = \tilde{\mathbf{E}}(k) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k') + \tilde{\mathbf{E}}(k') \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k),$$

avec les tenseurs électromagnétiques

$$\tilde{F}^{\alpha\beta}(k) = \int d^4x e^{ik \cdot x} \tilde{F}^{\alpha\beta}(x) = \int d^4x e^{ik \cdot x} [\partial^\alpha c^\beta(x) - \partial^\beta c^\alpha(x)] = -i[k^\alpha c^\beta(k) - k^\beta c^\alpha(k)]$$

dont dérivent les champs électriques et magnétiques totaux définis par $\tilde{\mathbf{E}}(k) = -i\mathbf{k}c^0 + ik_0\mathbf{c}$ et $\tilde{\mathbf{B}}(k) = i\mathbf{k} \wedge \mathbf{c}$. Dans la notation quadrivectorielle, on définit les transformées de Fourier

9. N'oublions pas que $k \cdot k' = (q^2 - k^2 - k'^2) / 2$

des champs réels

$$\mathbf{E}(k) = \int d^4x e^{iq \cdot x} \mathbf{E}(x) = \frac{e}{\hbar^3 v_F^2} \int d^3\mathbf{r} \int dt e^{iq_0 t} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{e\mathcal{V}}{\hbar^3 v_F^2} \mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega).$$

D'après (3.32), on obtient alors

$$\begin{aligned} T_{\alpha\mu\nu}^{(l)}(k, k') & \left(c^\mu(k) c^\nu(k') + c_5^\mu(k) c_5^\nu(k') \right) c_5^\alpha(-q) \\ & = \omega_L(q^2) q_\alpha c_5^\alpha(-q) \left[\tilde{\mathbf{E}}(k) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k') + \tilde{\mathbf{E}}(k') \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k) + \boldsymbol{\epsilon}(k) \cdot \boldsymbol{\beta}(k') + \boldsymbol{\epsilon}(k') \cdot \boldsymbol{\beta}(k) \right], \end{aligned} \quad (3.37)$$

où $\boldsymbol{\epsilon}(k) = -iv\mathbf{k}c_5^0 + ik_0\mathbf{c}_5$ et $\boldsymbol{\beta}(k) = iv\mathbf{k} \wedge \mathbf{c}_5$ sont les champs électromagnétiques axiaux qui apparaissent déjà dans l'équation (3.25) à une conversion d'unité près. De la façon dont nous avons défini les champs électromagnétiques et leurs transformées de Fourier, $\mathbf{E}(x) = \hbar v_F e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{B}(x) = \hbar v_F^2 e \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ ont des unités d'énergie², $\tilde{\mathbf{E}}(k)$ et $\tilde{\mathbf{B}}(k)$ des unités d'énergie⁻² à la différence des notations utilisés dans l'action des phonons, $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega)$ ($\mathbf{B}_{\mathbf{q}}(\omega)$) et $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega)$ ($\mathbf{B}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega)$), qui ont les unités (SI) de champs électriques et magnétiques multipliées par une unité de temps. Le lien entre les deux est simplement $\tilde{\mathbf{E}}(q) = \frac{e\mathcal{V}}{\hbar^3 v_F^2} \left(\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) \right)$.

La dérivation de la contribution de $T_{\alpha\mu\nu}^{(t)}$ à l'action S^3 se fait similairement à celle de (3.37) :

$$\begin{aligned} t_{\alpha\mu\nu}^{(+)}(k, k') a^\mu(k) a^\nu(k') a_5^\alpha(q) & = \frac{1}{4} \left[\tilde{\mathbf{E}}(k) \cdot \boldsymbol{\beta}(q) + \boldsymbol{\epsilon}(q) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k) \right] k_\nu c^\nu(k') \\ & + \frac{1}{4} \left[\tilde{\mathbf{E}}(k') \cdot \boldsymbol{\beta}(q) + \boldsymbol{\epsilon}(q) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k') \right] k'_\mu c^\mu(k) \\ & - (k \cdot k') \epsilon_{\mu\nu\alpha\rho} (k - k')^\rho c^\mu(k) c^\nu(k') c_5^\alpha(q) \\ & - \frac{1}{4} \frac{q^2 - k^2 - k'^2}{q^2} q_\alpha c_5^\alpha(q) \left[\tilde{\mathbf{E}}(k) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k') + \tilde{\mathbf{E}}(k') \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k) \right] \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$t_{\alpha\mu\nu}^{(-)}(k, k') a^\mu(k) a^\nu(k') a_5^\alpha(q) = \frac{1}{4} \left[(k - k')_\alpha - \frac{k^2 - k'^2}{q^2} q_\alpha \right] c_5^\alpha(q) \left[\tilde{\mathbf{E}}(k) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k') + \tilde{\mathbf{E}}(k') \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k) \right] \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{\alpha\mu\nu}^{(-)}(k, k') a^\mu(k) a^\nu(k') a_5^\alpha(q) & = \frac{1}{4} \left[\tilde{\mathbf{E}}(k) \cdot \boldsymbol{\beta}(q) + \boldsymbol{\epsilon}(q) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k) \right] k_\nu c^\nu(k') \\ & - \frac{1}{4} \left[\tilde{\mathbf{E}}(k') \cdot \boldsymbol{\beta}(q) + \boldsymbol{\epsilon}(q) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(k') \right] k'_\mu c^\mu(k) \\ & - (k \cdot k') \epsilon_{\mu\nu\alpha\rho} q^\rho c^\mu(k) c^\nu(k') c_5^\alpha(q). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Bien que chacun des termes apparaissant dans (3.38) et (3.40) ne soit pas invariant de jauge, leur somme l'est. La présence de termes en $k \cdot k'$ est d'ailleurs cruciale pour l'invariance de jauge. On voit que dans la partie transverse, des pôles en $1/q^2$ sont également présents. En

combinant (3.38) et (3.39) avec (3.34) et (3.35), on peut montrer sous certaines conditions que ces pôles annulent ceux de la partie longitudinale (3.32) [102]. La situation qui nous intéresse, et dans laquelle les fermions de Weyl auront le plus grand impact sur les phonons, est celle où ce pôle est conservé. Cette situation est possible en présence d'un champ magnétique \mathbf{B}_0 ou bien d'un champ électrique \mathbf{E}_0 statiques et uniformes. Autrement, le dernier terme de (3.38) annule le pôle du diagramme longitudinal. Nous nous concentrerons sur l'effet du champ magnétique \mathbf{B}_0 . Nous écartons la seconde situation du fait que la présence de \mathbf{E}_0 implique la présence de courants de transport dans le matériau, et nous souhaitons présenter un cadre pour des mesures de spectroscopie optique, qui se font en absence de tels courants. Le champ magnétique s'écrit ainsi

$$\tilde{\mathbf{B}}(k) \simeq (2\pi)^4 \mathbf{B}_0 \delta^{(4)}(k) + \text{partie dynamique}$$

où la partie dynamique peut être considérée comme négligeable devant le champ constant. De plus, sa contribution dans l'action S_3 ne comporte pas de pôle en $1/q^2$, et ainsi ne changera pas qualitativement la dispersion des phonons. Afin de simplifier le problème, en considèrera $\beta(q) = 0$, ce qui est toujours vrai si le cristal respecte la symétrie de renversement du temps. On trouve ainsi

$$\begin{aligned} t_{\alpha\mu\nu}^{(+)}(k, k') a^\mu(k) a^\nu(k') a_5^\alpha(q) &= \frac{(2\pi)^4}{4} \frac{k^2 + k'^2 - q^2}{q^2} \left[\mathbf{E}(k) \cdot \mathbf{B}_0 \delta^{(4)}(k') + \mathbf{E}(k') \cdot \mathbf{B}_0 \delta^{(4)}(k) \right] a_5^\alpha(q) = 0 \\ t_{\alpha\mu\nu}^{(-)}(k, k') a^\mu(k) a^\nu(k') a_5^\alpha(q) &= \frac{(2\pi)^4}{4} \left[(k - k')_\alpha - \frac{k^2 - k'^2}{q^2} q_\alpha \right] a_5^\alpha(q) \\ &\quad \left[\mathbf{E}(k) \cdot \mathbf{B}_0 \delta^{(4)}(k') + \mathbf{E}(k') \cdot \mathbf{B}_0 \delta^{(4)}(k) \right] = 0 \\ \tilde{t}_{\alpha\mu\nu}^{(-)}(k, k') a^\mu(k) a^\nu(k') a_5^\alpha(q) &= 0, \end{aligned}$$

où on a utilisé $k_\mu \delta^{(4)}(k) = 0$. Il ne reste ainsi que la contribution de la partie longitudinale

$$\begin{aligned} S_3 &= -\frac{i}{\pi^2 \hbar^2} \int_q \tilde{\mathbf{E}}(q) \cdot \mathbf{B}_0 \frac{q_\alpha c_5^\alpha(-q)}{q^2} \\ &= \sqrt{N} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{bh}}(\omega) \right) \cdot \delta \mathbf{Q}_{-\mathbf{q}\lambda}(-\omega) v_{-\mathbf{q}}(-\omega) \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\delta \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) = i \frac{e^2 \mathcal{V}}{\hbar^2 \pi^2 \sqrt{N}} \frac{\omega g_{0z}^\lambda(\mathbf{q}) - v_F \mathbf{q} \cdot \mathbf{g}_0^\lambda(\mathbf{q})}{\omega^2 - v_F^2 \mathbf{q}^2} \mathbf{B}_0. \quad (3.42)$$

Les expressions (3.41) et (3.42) forment l'un des résultats cruciaux de ce chapitre : d'une part elles montrent que l'application du champ magnétique statique et uniforme induit une charge de Born effective dans les phonons qui se couplent aux électrons comme des pseudoscalaires. De plus, cette charge de Born provient du diagramme responsable de

l'anomalie chirale et contient donc un pôle en $\omega^2 = v_F^2 |\mathbf{q}|^2$ qui est l'essence de l'anomalie chirale.

L'induction d'une charge de Born effective par un champ magnétique ne serait pas unique au semimétaux de Weyl et a déjà été observée dans les matériaux multiferroïques (par exemple, voir [107]). De façon générale, la théorie des groupes [108] nous dit qu'un phonon peut devenir actif infrarouge sous la présence d'un champ magnétique si sa représentation irréductible appartient au produit direct de représentations axiales et polaires. Dans le cas particulier d'un couplage $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$, le mode de phonon rendu actif infrarouge doit être pseudoscalaire. Ceci peut se comprendre simplement. D'une part, la charge de Born correspond à une polarisation électrique et se transforme donc comme un vecteur polaire. D'autre part, le champ magnétique se transforme comme un vecteur axial, c'est-à-dire le produit d'un vecteur polaire et d'un pseudoscalaire. Ainsi, pour que la charge de Born soit proportionnelle à un champ magnétique, il faut que le facteur de proportionnalité entre les deux (déterminé par la coordonnée du phonon) soit un pseudoscalaire.

3.2.4 Dispersion des phonons en présence des fermions de Weyl

3.2.4.1 Forme générale et simplifications

Utilisons maintenant les conclusions des sections (3.2.2) et (3.2.3) pour montrer l'impact du couplage phonons-électrons de Weyl sur la dispersion des phonons. On commencera par exprimer le champ électrique créé par les phonons. En effet, les actions S_2 et S_3 contiennent une partie électromagnétique (portée par les *vrais* champs électromagnétiques $\mathbf{E}_\mathbf{q}(\omega)$ et $\mathbf{B}_\mathbf{q}(\omega)$) et une partie due aux phonons, les deux étant couplés.

On peut simplifier le problème en ne considérant que le régime où $c |\mathbf{q}| \gg \omega$, c'est-à-dire que les effets dynamiques des interactions de Coulomb sont négligées. Autrement dit, on se place hors du régime de phonon-polaritons décrit dans la section 1.2.2.2. Cependant on verra que l'anomalie chirale fait apparaître un nouvel effet semblable, mais pour $\omega \sim v_F |\mathbf{q}|$.

Cette approximation implique que le champ électrique $\mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{int}}(\omega)$ dû aux vibrations du réseau est longitudinal, c'est à dire parallèle au moment \mathbf{q} . Cela s'explique par le fait que les vibrations engendrent une polarisation qui n'oscille pas assez vite pour induire un champ magnétique significatif et donc une partie transverse du champ électrique. Attention, $\mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{int}}(\omega)$ ne doit pas être confondu avec $\mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{ph}}(\omega)$ qui naît entièrement du couplage électron-phonon. On peut donc écrire le champ électrique comme la somme de deux champs externe et interne indépendants : $\mathbf{E}_\mathbf{q}(\omega) = \mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{ext}}(\omega) + \mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{int}}(\omega)$ avec $\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{ext}}(\omega) = 0$ et $\mathbf{q} \wedge \mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{int}}(\omega) = 0$. On notera par la suite $E_\mathbf{q}^{\text{int}}(\omega) = \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{E}_\mathbf{q}^{\text{int}}(\omega)$.

On peut de plus justifier le fait de négliger les termes magnétiques restant. Premièrement, $\mathbf{q} \wedge \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{int}}(\omega) \simeq 0$ revient à dire que la partie interne du champ est négligée tel que mentionné précédemment. Ensuite, les termes provenant de la partie constante du champ externe comportent une fonction $\delta(\omega)$. Ainsi ces termes ne peuvent faire intervenir que les phonons acoustiques de fréquence nulle et pourront donc être ignorés. Le champ magnétique restant est relié au champ électrique externe par $|\mathbf{B}^{\text{ext}}| = |\mathbf{E}^{\text{ext}}|/c$. Puisque $v_F/c \ll 1$, on peut négliger les termes en $v_F \mathbf{B}^{\text{ext}}$.

On trouve $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{int}}(q_0)$ grâce à l'équation de Gauss $\hat{\mathbf{q}} \cdot \frac{\delta S}{\delta \mathbf{E}_{-\mathbf{q}}^{\text{int}}(-\omega)} = \frac{\delta S}{\delta E_{-\mathbf{q}}^{\text{int}}(-\omega)} = 0$ où $S = S_{\text{ph}}^{(0)} + S_{\text{EM}} + S_2 + S_3$. Il nous reste donc à dériver, en omettant la dépendance en ω pour alléger la notation,

$$\begin{aligned}
S \simeq & \frac{1}{2} \frac{e^2 \mathcal{V}}{\hbar v_F} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \Pi(q^2) \left[\left(\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) \right) \cdot \left(\mathbf{E}_{-\mathbf{q}}(-\omega) + \mathbf{E}_{-\mathbf{q}}^{\text{ph}}(-\omega) \right) \right. \\
& \left. - v_F^2 \left(\mathbf{B}_{\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{B}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) \right) \cdot \left(\mathbf{B}_{-\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{B}_{-\mathbf{q}}^{\text{ph}}(-\omega) \right) \right] \\
& + \frac{1}{2} \frac{e^2 \mathcal{V}}{\hbar v_F} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \Pi(q^2) \left[|\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{q}}(\omega)|^2 - v_F^2 |\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{q}}(\omega)|^2 \right] \\
& + \frac{1}{2} \mathcal{V} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \varepsilon_{\infty} \left(|\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(q_0)|^2 - v_F^2 |\mathbf{B}_{\mathbf{q}}(q_0)|^2 \right) \\
& + \sqrt{N} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega) + \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) \right) \cdot \delta \mathbf{Q}_{-\mathbf{q}\lambda}(-\omega) v_{-\mathbf{q}}(-\omega) \\
& + \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \left[\sqrt{N} \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)} \cdot \mathbf{E}_{-\mathbf{q}}(-q_0) v_{\mathbf{q}\lambda}(q_0) + \frac{1}{2} M(q_0^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2) v_{\mathbf{q}\lambda}(q_0) v_{-\mathbf{q}\lambda}(-q_0) \right],
\end{aligned} \tag{3.43}$$

c'est-à-dire

$$\begin{aligned}
\frac{\delta S}{\delta E_{-\mathbf{q}}^{\text{int}}} = \frac{\delta}{\delta E_{-\mathbf{q}}^{\text{int}}} & \left[\frac{1}{2} \mathcal{V} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\frac{e^2}{\hbar v_F} \Pi(q^2) \left| \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{int}} + \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}} \right|^2 + \varepsilon_{\infty} \left| \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{int}} \right|^2 \right) \right. \\
& \left. + \sqrt{N} \sum_{\mathbf{q}\lambda} \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{E}_{-\mathbf{q}}^{\text{int}} \cdot \left(\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)} + \delta \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda} \right) v_{\mathbf{q}\lambda} \right],
\end{aligned} \tag{3.44}$$

où la première ligne provient des actions au second ordre dans le champ électrique, S_2 et S_{EM} , tandis que la seconde ligne provient de $S_{\text{ph}}^{(0)}$ et de S_3 . $\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)}$ (équation (2.25)) est la charge de Born due aux seuls vibrations des atomes (non nulle si le cristal est infra-rouge actif), et $\delta \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}(q_0)$ (équation (3.42)) est la charge de Born effective provenant du couplage électron-phonon sous champ magnétique. Notons également qu'on a raccourci la notation

grâce à $|\mathbf{E}_q^{\text{ph}}|^2 = \mathbf{E}_q^{\text{ph}} \cdot \mathbf{E}_{-q}^{\text{ph}}$. En notant $\tilde{\mathbf{Q}}_{q\lambda} \equiv \mathbf{Q}_{q\lambda}^{(0)} + \delta\mathbf{Q}_{q\lambda}$ on a

$$\mathbf{E}_q^{\text{int}}(v_{q\lambda}) = -\hat{\mathbf{q}} \cdot \left(\frac{\frac{e^2}{\hbar v_F} \Pi(q^2) \mathbf{E}_q^{\text{ph}} + \frac{\sqrt{N}}{\mathcal{V}} \sum_{\lambda} \tilde{\mathbf{Q}}_{q\lambda} v_{q\lambda}}{\varepsilon_{\infty} \varepsilon(q^2)} \right) \hat{\mathbf{q}}, \quad (3.45)$$

où $\varepsilon(q^2) = 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_{\infty} \hbar v_F} \Pi(q^2) = 1 + 4\pi\alpha \Pi(q^2)$ est la fonction diélectrique.

Finalement, on injecte (3.45) dans les termes de l'action totale contenant les coordonnées des phonons (équations (2.26, 3.24, 3.26, 3.41)) et on néglige les termes magnétiques en $\mathbf{B}_q(\omega)$ comme mentionné précédemment :

$$\begin{aligned} S_{\text{ph}}^{\text{eff}} \simeq & \frac{1}{2} \frac{e^2 \mathcal{V}}{\hbar v_F} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \Pi(q^2) \left[|\mathbf{E}_q^{\text{ph}}(\omega)|^2 + |\boldsymbol{\varepsilon}_q(\omega)|^2 - v_F^2 \left(|\mathbf{B}_q^{\text{ph}}(\omega)|^2 + |\boldsymbol{\beta}_q(\omega)|^2 \right) \right] \quad (3.46) \\ & - \frac{1}{2} \mathcal{V} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \varepsilon_{\infty} \varepsilon(q) \left| \hat{\mathbf{q}} \cdot \left(\frac{\frac{e^2}{\hbar v} \Pi(q^2) \mathbf{E}_q^{\text{ph}} + \frac{\sqrt{N}}{\mathcal{V}} \sum_{\lambda} \tilde{\mathbf{Q}}_{q\lambda} v_{q\lambda}}{\varepsilon_{\infty} \varepsilon(q^2)} \right) \right|^2 \\ & + \mathcal{V} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\frac{e^2}{\hbar v_F} \Pi(q^2) \mathbf{E}_{-q}^{\text{ph}}(-\omega) + \frac{\sqrt{N}}{\mathcal{V}} \tilde{\mathbf{Q}}_{-q\lambda}(-\omega) v_{-q}(-\omega) \right) \cdot \mathbf{E}_{-q}^{\text{ext}}(-\omega) \\ & + \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{q\lambda} \sqrt{N} \delta\mathbf{Q}_{-q\lambda}(-\omega) \cdot \mathbf{E}_q^{\text{ph}}(\omega) v_{-q}(-\omega) \\ & + \frac{1}{2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{q\lambda} M(\omega^2 - \omega_{q\lambda}^2) v_{q\lambda}(q_0) v_{-q\lambda}(-q_0). \end{aligned}$$

On simplifie le problème en supposant l'invariance par renversement du temps, et donc, comme mentionné dans la section 3.1.1.2, $\mathbf{g}_0 = \mathbf{g}_z = 0$, $\boldsymbol{\beta}_q = \mathbf{B}_q^{\text{ph}} = 0$, et $\mathbf{E}_q^{\text{ph}} \parallel \mathbf{q}$. On trouve ainsi, après quelques lignes de calculs

$$S_{\text{ph}}^{\text{eff}} \simeq \frac{1}{2} M \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{q\lambda\lambda'} v_{q\lambda}(\omega) D_{\lambda\lambda'}(\omega, \mathbf{q}) v_{-q\lambda'}(-\omega) + \sum_{q\lambda} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sqrt{N} v_{q\lambda} \left(\mathbf{Q}_{q\lambda}^{(1)} + \tilde{\mathbf{Q}}_{q\lambda} \right) \cdot \mathbf{E}_{-q}^{\text{ext}} \quad (3.47)$$

avec

$$\begin{aligned}
D_{\lambda\lambda'}(\omega, \mathbf{q}) = & (\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2) \delta_{\lambda\lambda'} + \frac{\mathcal{V}}{M} \frac{1}{\hbar v_F} \frac{\Pi(q^2) \mathbf{q}^2}{\varepsilon(q^2)} \text{Re} \left[g_{00}^\lambda(\mathbf{q}) g_{00}^{\lambda'}(\mathbf{q})^* + g_{0z}^\lambda(\mathbf{q}) g_{0z}^{\lambda'}(\mathbf{q})^* \right] \\
& + 2 \frac{\sqrt{N}}{Me} \frac{\text{Re} \left[-i \cdot \mathbf{q} g_{00}^{\lambda'}(\mathbf{q})^* \cdot \delta \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda} \right]}{\varepsilon(q^2)} \\
& - V_{\mathbf{q}} \frac{1}{\varepsilon(q^2)} \frac{1}{M} \text{Re} \left[\frac{1}{e^2 \mathcal{V}_{cell}} (\mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}) (\mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda'})^* - \mathcal{V} \left(\frac{1}{\hbar v_F} \Pi(q^2) \mathbf{q}^2 \right)^2 g_{0z}^\lambda(\mathbf{q}) g_{0z}^{\lambda'}(\mathbf{q})^* \right] \\
& - V_{\mathbf{q}} \frac{1}{\varepsilon(q^2)} \frac{1}{M e^2 \mathcal{V}_{cell}} \text{Re} \left[(\mathbf{q} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)}) (\mathbf{q} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda'}^{(0)*}) + 2\mathbf{q} \cdot (\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(1)} + \delta \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}) (\mathbf{q} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda'}^{(0)*}) \right],
\end{aligned} \tag{3.48}$$

où $V_{\mathbf{q}} = e^2 / (\varepsilon_\infty \mathbf{q}^2)$ est la transformée de Fourier du potentiel coulombien, et $\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(1)}$ peut être vu comme une charge de Born effective définie par

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(1)} = \frac{\mathcal{V}}{\sqrt{N}} \frac{e}{\hbar v_F} \Pi(q^2) i \mathbf{q} g_{00}^\lambda(\mathbf{q}). \tag{3.49}$$

La dispersion des phonons est donnée par $\det(D_{\lambda\lambda'}(\mathbf{q}))=0$. En plus de la dispersion sans interaction, la première ligne de l'équation (3.48) contient un terme de self énergie standard tel qu'on peut trouver dans [85]. La deuxième ligne nécessite la présence simultanée de couplages scalaire et pseudoscalaire et peut être interprété comme le couplage entre la charge effective induite par un champ magnétique (via le diagramme VVA) et le champ électrique effectif \mathbf{E}^{ph} (défini en (3.25)) induit par le couplage scalaire. Enfin, les deux dernières lignes correspondent aux couplage entre les charges de Born effectives induites par les interactions électron-phonon. Notons que la présence des facteurs N et \mathcal{V} est requise pour obtenir les bonnes unités ($D_{\lambda\lambda'}(\omega, \mathbf{q})$ a l'unité d'une fréquence au carré) ainsi qu'une équation du mouvement intensive (sachant que les couplages $g_{00}^\lambda(\mathbf{q})$ et $g_{0z}^\lambda(\mathbf{q})$ sont en $\sim N^{-1/2}$ et que les charges de Born sont elles-même des quantités intensives).

Nous sommes intéressés par les phonons optiques à grande longueur d'onde. La principale motivation réside dans leur détection possible avec les expériences de réflectivité infrarouge et de diffusion Raman. Notons également que les phonons acoustiques voient leur self énergie et leurs charges effectives s'annuler à $\mathbf{q} \rightarrow 0$, puisque $g_{00}(\mathbf{q} \rightarrow 0) = g_{0z}(\mathbf{q} \rightarrow 0) = 0$. De plus, la résonance à $\omega^2 = v_F^2 \mathbf{q}^2$ ne doit pas les affecter qualitativement du fait de leur dispersion $\omega^2 = c_s^2 \mathbf{q}^2$, avec une vitesse du son c_s beaucoup plus petite que la vitesse de Fermi.

Habituellement, les modes longitudinaux sont caractérisés par une charge de Born $\mathbf{Q}^{(0)}$

parallèle à \mathbf{q} , où \mathbf{q} est aligné avec un axe de symétrie du cristal. Inversement pour un mode transverse, $\mathbf{Q}^{(0)} \perp \mathbf{q}$. Ceci n'est plus le cas en présence d'un champ magnétique qui modifie la direction de la charge effective des phonons. Un mode de phonon originellement transverse peut acquérir une charge qui n'est plus orthogonale à \mathbf{q} . Un champ magnétique induit donc une hybridation entre les modes optiques longitudinaux et transverses. Cependant, pour mettre en évidence l'importance du champ magnétique sur le spectre des phonons, on se concentrera sur un seul mode de phonon se couplant de façon axial ($g_{0z} \neq 0$) avec les électrons de Weyl. On supposera également qu'il est suffisamment éloigné en fréquence des autres modes pour considérer seulement ce mode dans l'équation de dispersion, qui se réduit alors à $D_{\lambda\lambda}(\omega, \mathbf{q}) = 0$.

Si de plus ce mode est optiquement inactif sans interaction électrons-phonon ($\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)} = 0$), sa dispersion se réduit à

$$\omega^2 = \omega_{\mathbf{q}}^2 - \frac{1}{M\varepsilon(q^2)} \left\{ \frac{\Pi(q^2)\mathbf{q}^2}{\hbar v_F} \mathcal{V} (|g_{00}|^2 + |g_{0z}|^2) + \frac{\sqrt{N}}{e} 2\text{Re} [ig_{00}(\mathbf{q})\mathbf{q} \cdot \delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}^*] \right. \\ \left. + V_{\mathbf{q}} \left(\left(\frac{\Pi(q^2)\mathbf{q}^2}{\hbar v_F} \right)^2 \mathcal{V} |g_{0z}|^2 - \frac{|\mathbf{q} \cdot \delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}|^2}{e^2 \mathcal{V}_{cell}} \right) \right\}, \quad (3.50)$$

où l'on a omis l'indice de mode λ . Les termes en $\delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}$ comportent le pôle en $1/q^2$ qui va avoir un impact important sur la dispersion des phonons dans la région $v|\mathbf{q}| = \omega_{\mathbf{q}}$. Par ailleurs, les termes en $\Pi(q^2)$ sont logarithmiques en q^2 et auront pour effet principal de translater la solution en fréquence. Dans un objectif principalement qualitatif, on les ignorera. L'équation se simplifie alors grandement :

$$\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 + \frac{1}{\varepsilon(q^2)} \left[\kappa 2\text{Re} [ig_{00}(\mathbf{q})\mathbf{q} \cdot \delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}^*] - \eta \frac{|\hat{\mathbf{q}} \cdot \delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}|^2}{\varepsilon_{\infty}} \right] = 0, \quad (3.51)$$

avec $\kappa \equiv \sqrt{N}/(Me)$ et $\eta = (M\mathcal{V}_{cell})^{-1}$. Si l'on néglige la partie dynamique de la fonction diélectrique, (3.51) devient une équation du troisième ordre en ω^2 . Bien que $\varepsilon(q^2)$ diverge en $\log|\omega^2 - v_F^2\mathbf{q}^2|$ [26, 27], sa présence au dénominateur ne compense pas la divergence due au pôle de $\delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}(\omega)$. On a pu ainsi vérifier numériquement que le facteur d'écrantage n'apporte pas de différence qualitative au résultat illustré sur la figure (3.3). Sur cette figure, le pôle de l'anomalie chirale donne naissance à un mode $\omega \sim v_F|\mathbf{q}|$, qui découle de la dispersion des excitations particule-trou de Weyl. Ce mode quasi-linéaire, qui est un composite *magnéto-électro-phononique*, s'hybride avec le mode de phonon optique quand $v_F|\mathbf{q}|$ devient comparable à la fréquence du phonon en l'absence d'interaction. Cette hybridation est semblable à un phonon-polariton, dont l'amplitude est en loi de puissance de $\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0$. Si

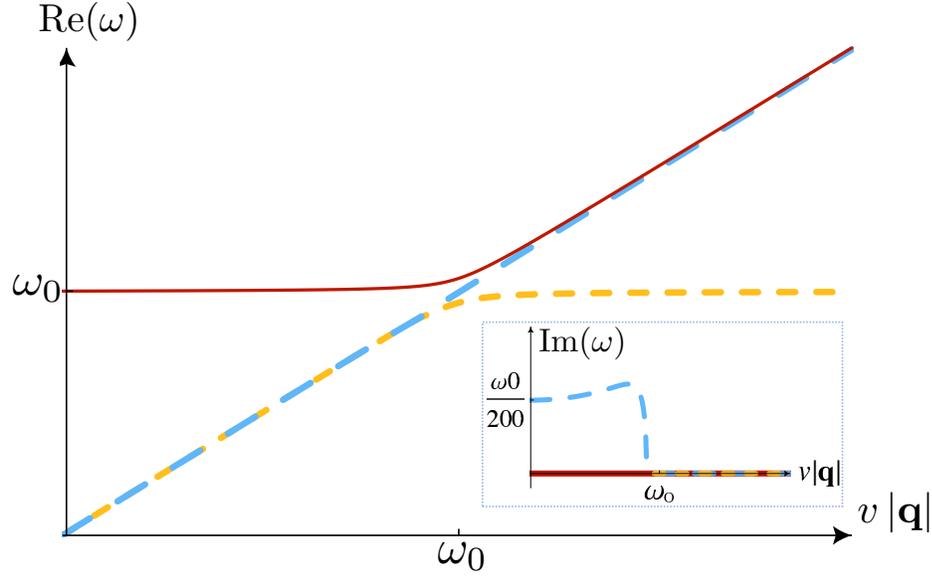


FIGURE 3.3 Solutions de (3.51) à $\varepsilon(q^2) = 1$ et $\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0 = -1T$. Les autres paramètres utilisés sont résumés dans la section 3.2.4.2. L'effet de l'anomalie chirale réside dans l'anticroisement qu'on observe à $v|\mathbf{q}| = \omega_0$.

on néglige le terme linéaire en \mathbf{B}_0 dans l'équation 3.51 (ou si l'on suppose $g_{00} = 0$ comme dans la figure 3.3), la séparation en fréquence entre les modes optique et quasi-linéaire à $\omega_0 = v|\mathbf{q}|$ évolue comme $(\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0)^{2/3}$. Si par contre, le terme linéaire domine, le gap en fréquence disparaît pour $\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0 > 0$ et croît comme $\sqrt{|\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0|}$ pour $\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0 < 0$ ¹⁰. Cela sera illustré dans le paragraphe suivant (voir figure 3.4).

3.2.4.2 Quelques estimations numériques

Estimons les paramètres entrant dans la dispersion des phonons (3.51) et notamment les paramètres utilisés pour la figure 3.3. Tout d'abord, on approxime la fréquence du phonon optique à une constante ω_0 puisque on est dans la région des grande longueurs d'onde. Pour g_{00} et , on utilise $\int d^3\mathbf{r} \sum_{\tau\sigma} |u_{\sigma\tau}(\mathbf{r})|^2 \frac{\partial U(\mathbf{r}-\mathbf{t}_s)}{\partial t_s} \sim \frac{I_0}{a_B} \mathcal{V}_{cell}$ où I_0 est un Rydberg et a_B est le rayon de Bohr. De cette façon, $\sqrt{N}g_{00} \sim \frac{I_0}{a_B} \simeq 5.10^{-8} \text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$. g_{0z} étant relié à b_0 , on considère $\sqrt{N}g_{0z} \sim \frac{b_0}{a_B} \sim \sqrt{N}g_{00}/10$. Ensuite on choisi $M \sim 10^{-25} \text{kg}$, $v_F \sim 10^5 \text{m s}^{-1}$, $\mathcal{V}_{cell} \sim 125 \text{\AA}$ et $\varepsilon_\infty \sim 10\varepsilon_0$, où ε_0 est la permittivité du vide. On peut ainsi réécrire l'équation (3.51) comme

$$\omega^2 - \omega_0^2 + K_{\text{lin}} \frac{\omega v_F |\mathbf{q}|}{\omega^2 - v_F^2 \mathbf{q}^2} - K_{\text{quad}} \frac{\omega^2}{(\omega^2 - v_F^2 \mathbf{q}^2)^2} = 0,$$

10. Cela suppose qu'on regarde les fréquences positives. C'est l'inverse pour les fréquences négatives (*i.e.* pas de gap pour $\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0 < 0$)

avec $K_{\text{lin}} = 1\text{meV}^2\text{T}^{-1} \times \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0$ et $K_{\text{quad}} = 1\text{meV}^4\text{T}^{-2} \times (\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0)^2$. On trouve également qu'à faible champ magnétique, la partie imaginaire de la solution croît comme $\sqrt{K_{\text{lin}}}$ tandis que le terme quadratique est dominant à plus grand champ et la partie imaginaire croît alors comme $K_{\text{quad}}^{1/4}$. Sur la figure 3.4 sont représentées les solutions de (3.51) pour différentes valeurs du champ magnétique.

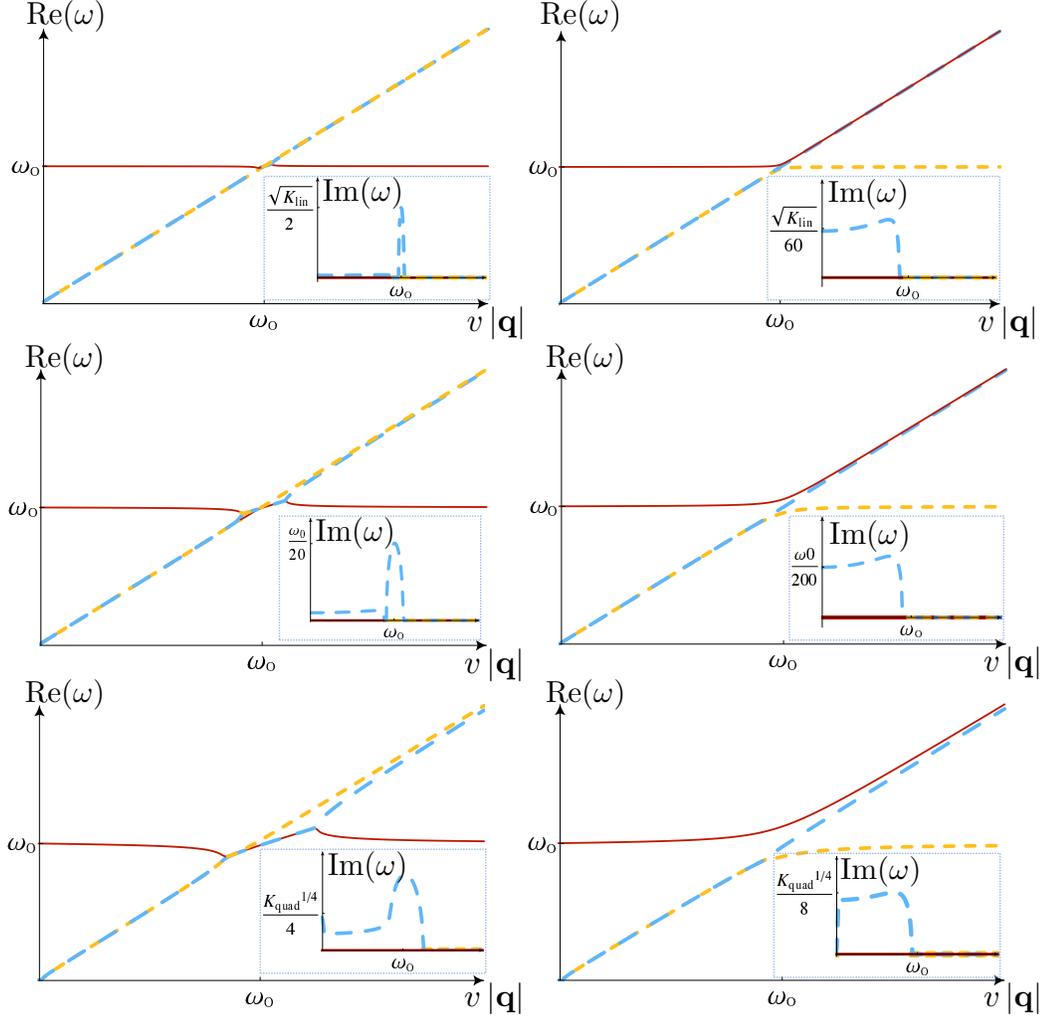


FIGURE 3.4 Impact de l'anomalie chirale sur la dispersion des phonons. Sont représentées les parties réelles et imaginaires des solutions de (3.51) avec les paramètres discutés dans le texte, ainsi que $\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{B}_0 = \pm 0.1\text{T}$, $\pm 1\text{T}$ et $\pm 5\text{T}$. Pour $v|\mathbf{q}| < \omega_0$, le mode quasi-linéaire est doublement dégénéré. Cependant, une de ces deux solutions est instable puisque la partie imaginaire de sa fréquence est négative. Seul les parties imaginaires positives des modes stables sont montrées dans les encadrés.

3.2.5 Susceptibilité du réseau et diffusion Raman

3.2.5.1 Susceptibilité du réseau

On veut ici extraire la contribution du réseau à la susceptibilité électrique. La polarisation totale est $\mathbf{P}_{\mathbf{q}} = \varepsilon_{\infty} \left(\chi_{\mathbf{q}}^{\text{ph}} + \chi^e \right) \mathbf{E}_{\mathbf{q}}$ où $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}$ est le champ total, $\chi_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}$ et χ^e sont les susceptibilités induites par les phonons et les électrons, respectivement. Précisons donc qu'on s'intéresse ici à la susceptibilité totale mesurée dans les expérience de réflectivité [109, 110]. Par ailleurs, la polarisation provenant du réseau, notée $\mathbf{P}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}$, est donnée par les termes se couplant linéairement au champ électrique dans l'action effective (3.43) des phonons et du champ électromagnétique. En négligeant à nouveau les termes magnétiques, on obtient

$$\mathbf{P}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}} = \frac{1}{\sqrt{N}\mathcal{V}_{\text{cell}}} \left[\sum_{\lambda} \left(\tilde{\mathbf{Q}}_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) \right) v_{\lambda\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \frac{e^2\mathcal{V}}{\hbar v_F \sqrt{N}} \Pi(q^2) \mathbf{E}_{\mathbf{q}}^{\text{ph}}(\omega) \right] \quad (3.52)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}\mathcal{V}_{\text{cell}}} \left[\sum_{\lambda} \left(\tilde{\mathbf{Q}}_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) + \tilde{\mathbf{Q}}_{\mathbf{q}\lambda}^{(1)}(\omega) \right) v_{\lambda\mathbf{q}} \right] \quad (3.53)$$

avec $\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(1)}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{e\mathcal{V}}{\hbar v_F \sqrt{N}} \Pi(q^2) i\mathbf{q} \sum_{\lambda} g_{00}^{\lambda}(\mathbf{q})$. Avec la même action (3.43), on peut exprimer $v_{\lambda\mathbf{q}}$ en fonction du champ total $\mathbf{E}_{\mathbf{q}}(\omega)$, ce qui nous donne finalement la susceptibilité

$$\chi_{\mathbf{q}ij}^{\text{ph}}(\omega) = \frac{1}{\varepsilon_{\infty}\mathcal{V}_{\text{cell}}} \sum_{\lambda\lambda'} \left(\tilde{\mathbf{Q}}_{\mathbf{q}\lambda}(\omega) + \mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(1)}(\omega) \right)_i D'_{\lambda\lambda'}{}^{-1} \left(\tilde{\mathbf{Q}}_{-\mathbf{q}\lambda'} + \mathbf{Q}_{-\mathbf{q}\lambda'}^{(1)} \right)_j \quad (3.54)$$

où

$$D'_{\mathbf{q}\lambda\lambda'}{}^{-1}(\omega) = (q_0^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2) \delta_{\lambda\lambda'} + \frac{\mathcal{V}}{M} \left[\frac{1}{\hbar v} \Pi(q^2) \mathbf{q}^2 \left[g_{00}^{\lambda}(\mathbf{q}) g_{00}^{\lambda'*}(\mathbf{q}) + g_{0z}^{\lambda}(\mathbf{q}) g_{0z}^{\lambda'*}(\mathbf{q}) \right] \right. \\ \left. + \text{Re} \left[g_{00}^{\lambda}(\mathbf{q}) g_{0z}^{\lambda'*}(\mathbf{q}) \right] \frac{e}{\hbar^2 \pi^2} \frac{\omega \mathbf{q} \cdot \mathbf{B}_0}{\omega^2 - v_F^2 \mathbf{q}^2} \right]. \quad (3.55)$$

L'équation (3.54) est similaire à l'équation (2.27) de la susceptibilité sans interaction électronique. Le dénominateur comporte les charges de Born effectives apportées par le couplage électron-phonon. Au dénominateur (on parle ici du terme $D'_{\mathbf{q}\lambda\lambda'}{}^{-1}(\omega)$) s'ajoute un terme de self énergie ainsi qu'un terme croisé correspondant au couplage des charges de Born effectives provenant des interactions. Notons que les termes contenant $\delta\mathbf{Q}$ apportent une anisotropie par rapport à la direction du champ magnétique. Autrement dit, la réponse en champ électrique est d'autant plus grande que le champ électrique entrant s'aligne avec à \mathbf{B}_0 .

Les termes en $\delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}(\omega)$ contiennent également une résonance à $\omega^2 = v_F^2 \mathbf{q}^2$. Elle n'est

malheureusement pas accessible avec des mesures optiques élastiques (par réflexion ou transmission) puisque les photons ont une dispersion $\omega^2 = c^2 \mathbf{q}^2$ avec $c \gg v_F$. Le régime de fréquences et de moments dans lequel apparaît la résonance pourrait être accessible avec des mesures alternatives telles la diffusion inélastique aux rayons X ou bien la spectroscopie par perte d'énergie électronique.

Le fait que les photons ont des moments très petits rend négligeables les termes contenant $\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(1)}$ dans la susceptibilité (3.54), puisque $\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(1)}$ s'annule quand $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Ainsi, le principal effet observable en réflectivité optique est l'induction d'une activité infrarouge par un champ magnétique. Cela est d'autant plus flagrant si le mode de phonon concerné est inactif infrarouge en absence de champ magnétique. Dans ce cas, l'activité infrarouge induite ne se fait que dans la direction du champ magnétique. Dans ce cas, deux dispositions sont pertinentes pour la mesure de réflectivité :

1. En incidence normale, le champ incident a une polarisation parallèle à la surface. On doit donc placer le champ magnétique suivant la surface pour obtenir le maximum de réflexion.
2. En incidence non-normale, avec le champ magnétique orthogonal à la surface, la réflexion est d'autant plus grande que le champ incident devient parallèle à la surface.

3.2.5.2 Diffusion Raman

La diffusion Raman à un phonon se définit comme la correction de la susceptibilité électronique au premier ordre dans le déplacement du réseau [111]. Son amplitude peut donc être calculée par un diagramme de Feynman triangulaire, comportant deux lignes externes de photons et une de phonon. Dans le cas d'un mode de phonon se couplant de façon axiale aux électrons, le tenseur Raman est lié au diagramme (3.31) par :

$$R_{ij}^{\text{ax}} \propto T_{\alpha\mu\nu}(k, k') \frac{\partial^3 [c_5^\alpha(q) A^\mu(k) A^\nu(k')]}{\partial E_j(k) \partial E_{j'}(k') \partial v_{\mathbf{q}}(\omega)} \quad (3.56)$$

où $\mathbf{E}(k)$ et $\mathbf{E}(k')$ sont respectivement les champs électriques incident et réfracté de moments et de fréquences $k = -(\omega_{\text{in}}, v_F \mathbf{k}_{\text{in}})$ et $k' = (\omega_{\text{out}}, v_F \mathbf{k}_{\text{out}})$. On notera leur polarisations $\hat{\mathbf{e}}_{\text{in}}$ et $\hat{\mathbf{e}}_{\text{out}}$. $c_5^\alpha(q)$ provient du couplage axial électron phonon (voir équation (3.13)) et $q = k + k' = (\omega_{\mathbf{q}}, v_F \mathbf{q}) = (\omega_{\text{out}} - \omega_{\text{in}}, v_F \mathbf{k}_{\text{out}} - v_F \mathbf{k}_{\text{in}})$ est la fréquence et le moment du phonon. On s'intéressera au cas sans champ magnétique statique. La contribution de la

partie longitudinale du diagramme VVA au tenseur Raman est

$$T_{\alpha\mu\nu}^{(l)} c_5^\alpha(q) A^\mu(k) A^\nu(k') = c_5^\alpha(q) A^\mu(k) A^\nu(k') \frac{q_\alpha}{q^2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} k^\rho k'^\sigma = \frac{q_\alpha c_5^\alpha(q)}{8\pi^2 q^2} [\mathbf{E}(k) \cdot \mathbf{B}(k') + k \leftrightarrow k'] \quad (3.57)$$

ce qui devient, avec la loi de Maxwell-Faraday,

$$\begin{aligned} T_{\alpha\mu\nu}^{(l)} c_5^\alpha(q) A^\mu(k) A^\nu(k') &= \frac{v_F}{8\pi^2} \frac{c_5^\alpha(q) q_\alpha}{q^2} \left[\frac{1}{k'_0} \mathbf{E}(k) \cdot [\mathbf{k}' \times \mathbf{E}(k')] + \frac{1}{k_0} \mathbf{E} \cdot [\mathbf{k} \times \mathbf{E}(k)] \right] \\ &= \frac{v_F}{8\pi^2} \frac{c_5^\alpha(q) q_\alpha}{q^2} \frac{v}{c_m} \left[\hat{\mathbf{e}}_{\text{out}} \cdot (\hat{\mathbf{k}}_{\text{in}} \times \hat{\mathbf{e}}_{\text{in}}) - \hat{\mathbf{e}}_{\text{out}} \cdot (\hat{\mathbf{k}}_{\text{out}} \times \hat{\mathbf{e}}_{\text{in}}) \right] E(k) E(k'), \end{aligned}$$

où c_m est la vitesse de la lumière dans le matériau. On a ainsi une contribution au tenseur Raman

$$R_{ij}^{\text{ax}(l)} \propto T_{\alpha\mu\nu}^{(l)}(k, k') \frac{\partial^3 [c_5^\alpha(q) A^\mu(k) A^\nu(k')]}{\partial E_j(k) \partial E_{j'}(k') \partial v_{\mathbf{q}}(\omega)} = \frac{v_F/c_m}{8\pi^2} \frac{q_\alpha}{q^2} \frac{\partial c_5^\alpha(\mathbf{q}, q_0)}{\partial v_{\mathbf{q}\lambda}(q_0)} (\hat{\mathbf{k}}_{\text{in}} - \hat{\mathbf{k}}_{\text{out}}) \cdot (\hat{\mathbf{e}}_{\text{in}} \times \hat{\mathbf{e}}_{\text{out}})$$

qui est antisymétrique sous l'échange de $\hat{\mathbf{e}}_{\text{in}}$ et $\hat{\mathbf{e}}_{\text{out}}$. D'après [111], dans l'approximation où les champs incidents et réfractés ont la même fréquence¹¹, la partie antisymétrique du tenseur Raman ne peut exister qu'en présence d'un champ magnétique. Cela semble en contradiction avec le fait que la composante $R_{ij}^{\text{ax}(l)}$ est non nulle dans un semimétal de Weyl qui respecte la symétrie par renversement du temps (avec $c_5^0(\mathbf{q}, q_0) \neq 0$ mais $\mathbf{c}_5(\mathbf{q}, q_0) = 0$). Cependant, cette composante est proportionnelle à $\omega_{\mathbf{q}}$ qui s'annule quand $\omega_{\text{in}} = \omega_{\text{out}}$, levant ainsi la contradiction.

Comme nous l'avons mentionné dans la section 3.2.3, on sait que que le pôle en $1/q^2$ de $R_{ij}^{\text{ax}(l)}$ va être annulé par la contribution du diagramme transverse (en se basant sur [102]) puisque k^2 et k'^2 sont en général tous deux non nuls dans une mesure de type Raman. On vérifie cela en regroupant tous les termes du diagramme VVA contenant le pôle en question :

$$T_{\alpha\mu\nu}^{\text{pôle}}(k, k') = \left[w_L - w_T^{(+)} \frac{2k \cdot k'}{q^2} + w_T^{(-)} \frac{k^2 - k'^2}{q^2} \right] q_\alpha \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} k^\rho k'^\sigma.$$

Rappelons que $w_L = -4i/q^2$ et que les facteurs de forme transverse n'ont pas de singularité quand $q^2 \rightarrow 0$ (à condition que k^2 et k'^2 soient non nuls). En utilisant les égalités 3.34 et 3.35, on fait un développement de Taylor en $q^2 = 0$ pour obtenir

$$T_{\alpha\mu\nu}^{\text{pôle}}(k, k') = \frac{i}{\pi^2 (k^2 - k'^2)^3} \left[k^4 \ln \left(\frac{k^2}{q^2} \right) - k'^4 \ln \left(\frac{k'^2}{q^2} \right) \right] q_\alpha \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} k^\rho k'^\sigma + \text{termes sans singularité en } q^2$$

11. Cette approximation est en générale valable pour des photons dans le spectre visible

Le pôle de w_L a été supprimé par le terme en $(s_1 - s_2) / \sigma$ dans l'expression 3.35 de $w_T^{(-)}$. Notons que cette annulation est valide seulement si q^2 tend vers 0 plus vite que k^2 ou k'^2 , ce qui constitue une situation pertinente dans une expérience Raman.

Finalement, on a vu que le couplage électron-phonon axial apporte une composante antisymétrique au tenseur Raman pouvant s'écrire

$$R_\lambda^{\text{ax}}(\hat{\mathbf{e}}_{\text{in}}, \hat{\mathbf{e}}_{\text{out}}) \propto q_\alpha \frac{\partial c_5^\alpha(\mathbf{q}, q_0)}{\partial v_{\mathbf{q}\lambda}(q_0)} \frac{1}{(k^2 - k'^2)^3} \left[k^4 \ln \left(\frac{k^2}{q^2} \right) - k'^4 \ln \left(\frac{k'^2}{q^2} \right) \right] (\hat{\mathbf{k}}_{\text{in}} - \hat{\mathbf{k}}_{\text{out}}) \cdot (\hat{\mathbf{e}}_{\text{in}} \times \hat{\mathbf{e}}_{\text{out}})$$

au voisinage de $q^2 = 0$. Le pôle en $1/q^2$ a été perdu mais il demeure une singularité en $\ln(q^2)$. L'observation de cette résonance logarithmique serait une marque du couplage entre phonons pseudoscalaires et électrons de basse énergie dans le semimétal de Weyl.

$$R_\lambda^{\text{ax}}(\hat{\mathbf{e}}_{\text{in}}, \hat{\mathbf{e}}_{\text{out}}) \propto q_0 \frac{1}{(k^2 - k'^2)^3} \left[k^4 \ln \left(\frac{k^2}{q^2} \right) - k'^4 \ln \left(\frac{k'^2}{q^2} \right) \right] (\hat{\mathbf{k}}_{\text{in}} - \hat{\mathbf{k}}_{\text{out}}) \cdot (\hat{\mathbf{e}}_{\text{in}} \times \hat{\mathbf{e}}_{\text{out}})$$

Chapitre 4

Étude non perturbative en champ magnétique

Dans le chapitre précédent, on a utilisé la théorie des perturbations en champ magnétique pour montrer que l'anomalie chirale laisse une marque observable dans la dispersion des phonons optiques pseudoscalaires, à savoir un anticroisement avec un mode linéaire semblable à ce que l'on observe dans un spectre phonon-polariton, mais à plus grande longueur d'onde. Cependant on négligeait l'importance du potentiel chimique et la dépendance en champ magnétique de la fonction de polarisation Π_{VV} . De ce fait, le diagramme VVA jouait le rôle le plus important dans l'influence des électrons sur les phonons.

À fort champ magnétique, les électrons forment une nouvelle structure électronique, les niveaux de Landau. On a alors des bandes qui ne dispersent plus que dans la direction du champ magnétique, et dont la dégénérescence est proportionnelle à ce champ. La forme analytique des fonctions de polarisation est alors totalement changée. On verra que dans ce cas, tous les diagrammes sont d'égale importance. De plus, étant donné qu'on ne considérera que des fonctions de polarisation à deux vertex, il sera plus aisé de retrouver un formalisme de type matière condensée et de prendre ainsi en compte le potentiel chimique dans nos calculs.

Les résultats présentés dans ce chapitre ont fait l'objet de l'article [112].

4.1 Électrons sous un champ magnétique statique

Nous commencerons par présenter le formalisme permettant de dériver les fonctions de polarisation électroniques entrant dans l'équation du mouvement des phonons. Le propagateur électronique que nous utiliserons comportera le champ magnétique et sera donc différent de celui du chapitre précédent (équation (3.15)).

Afin d'éviter la confusion, avertissons le lecteur que nous utilisons systématiquement dans ce chapitre une notation dans les unités du système international, ce qui différera du chapitre précédent qui présentait un langage proche de la physique des hautes énergies. Notamment, on notera $k = (\nu, \mathbf{k})$ la fréquence (on notera $i\nu$ à la place pour les fréquences de Matsubara) et le moment, $x = (t, \mathbf{r})$ les coordonnées temporelles et spatiales.

4.1.1 Propagateur électronique de Schwinger

Nous avons déjà présenté le comportement des électrons de Weyl plongés dans un champ magnétique uniforme et statique. Les énergies propres et les états propres sont décrits dans la section 1.2.1.2. Afin de dériver l'action effective pour les phonons comme nous l'avons fait dans la section 3.2.1, on utilisera cette fois la fonction de Green des électrons plongés dans un champ magnétique. Cette fonction, qu'on dénotera G , a été dérivée pour la première fois par Schwinger en 1951 [113]. À cause de la présence du champ magnétique, G n'est pas invariante par translation et on ne peut pas l'utiliser directement dans la dérivation des fonctions de polarisation comme nous l'avons fait dans les équations (3.18)-(3.20). Fort heureusement, dans la configuration qui nous intéresse, à savoir un champ magnétique statique et uniforme, elle peut s'écrire de façon simplifiée comme le produit d'une phase brisant l'invariance par translation avec une fonction \mathcal{G} invariante par translation [114] :

$$G(x, x') = e^{i\Phi(x, x')} \mathcal{G}(x - x'), \quad (4.1)$$

où la phase vérifie $\Phi(x, x') = -\Phi(x', x)$. Cela nous permettra de faire des calculs dans l'espace réciproque similairement à ce qui a été fait en (3.2.1). En effet, on pourra utiliser la transformée de Fourier $\mathcal{G}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int dt d^3\mathbf{r} \mathcal{G}(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$. On trouve une expression

de \mathcal{G} en fréquences de Matsubara dans [115, 116], à potentiel chimique μ fixé :

$$\mathcal{G}(k) = 2ie^{-k_{\perp}^2 \ell_B^2} \sum_n \frac{(-1)^n}{(\hbar iv + \mu)^2 - E_{nk_z}^2} \left\{ (\hbar iv + \mu - \tau_z \sigma_z \hbar v_F k_z) [L_n(t) \mathcal{P}_+ - L_{n-1}(t) \mathcal{P}_-] \right. \\ \left. + 2(\tau_z \sigma_{\perp} \cdot \mathbf{k}_{\perp}) L_{n-1}^1(t) \right\}, \quad (4.2)$$

où $t = 2\mathbf{k}_{\perp}^2 \ell_B^2$ et $L_n^{\alpha}(t)$ est le polynôme de Laguerre défini par

$$L_n^{\alpha}(t) = \begin{cases} \frac{1}{n!} e^t t^{-\alpha} \frac{d^n}{dt^n} (e^{-t} t^{n+\alpha}) & \text{pour } n \geq 0 \\ 0 & \text{pour } n < 0 \end{cases} \\ L_n(t) = L_n^0(t).$$

$\mathcal{P}_{\pm} \equiv (1 \mp \text{sign}(B) \sigma_z) / 2$ sont les projecteurs sur une des composantes du spineur dans la base des bandes σ , qui est la même base dans laquelle sont écrits les états propres (1.25). Les indices n correspondent aux indices des niveaux de Landau. Rappelons que les spineurs correspondant aux niveaux chiraux ($n = 0$) s'écrivent

$$\Psi_{\tau}^0 = \begin{cases} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \text{si } \mathbf{B} \text{ pointe dans la direction } +\hat{\mathbf{z}} \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \text{si } \mathbf{B} \text{ pointe dans la direction } -\hat{\mathbf{z}} \end{cases}$$

ce qui doit correspondre avec la définition des projecteur \mathcal{P}_{\pm} puisque la fonction de Green associée aux niveaux de Landau chiraux (qu'on obtient en ne gardant que $n = 0$ dans (4.2)) doit avoir comme état propre Ψ_{τ}^0 .

À la différence de la fonction de Green sans champ magnétique (équation (3.15)), \mathcal{G} ne respecte pas l'invariance de Lorentz. Seul la composante k_z du moment selon la direction du champ magnétique reste un bon nombre quantique. Le moment $\mathbf{k}_{\perp} = (k_x, k_y)$ orthogonal au champ est souvent qualifié de *quasi-moment*. On fera également attention au fait que les énergies $E_{nk_z} \equiv \hbar v_F \sqrt{k_z^2 + 2n\ell_B^{-2}}$ utilisées dans la définition (4.2) sont toujours positives. Afin de simplifier les expressions, nous avons ignoré le terme de différence d'énergie entre les noeuds de différentes chiralités. Cependant, ce terme ne fait qu'ajouter un *potentiel chimique axial* $-\tau_z b_0$. Du fait que la chiralité est conservée (notamment, le propagateur de phonon commute avec la matrice de chiralité τ_z), rajouter ce terme *a posteriori* ne pose pas de difficulté, comme on le verra à la fin de la section 4.2.

4.2 Action effective pour les phonons

4.2.1 Les différentes parties de l'action

Commençons par identifier les différents ingrédients qui vont permettre d'obtenir l'action effective des phonons et leur dispersion.

Couplage électron-phonon

On simplifiera l'étude en considérant un système avec la symétrie par renversement du temps. Ainsi seul les couplages scalaires $g_{00}^\lambda(\mathbf{q})$ et $g_{0z}^\lambda(\mathbf{q})$ définis dans le chapitre précédent (équations (3.5) et (3.7)) seront pris en compte. Ainsi l'hamiltonien d'interaction électron-phonon s'écrit

$$\mathcal{H}_{ep} = \int d^3\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) [\phi_0(\mathbf{r}, t) + \tau_z \phi_z(\mathbf{r}, t)] \Psi(\mathbf{r}), \quad (4.3)$$

où $\phi_{0(z)}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{V}^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{q}\lambda} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} g_{00(z)}^\lambda(\mathbf{q}) v_{\mathbf{q}\lambda}(t)$ et le champ électronique de basse énergie est défini par ses quatre composantes

$$\Psi_{\sigma\tau}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{|\mathbf{k}| < \Lambda} c_{\mathbf{k}\sigma\tau}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$

Dans cette analyse, on néglige implicitement l'influence du champ magnétique externe sur l'interaction électron-phonon. Autrement dit, seul les propagateurs électroniques seront modifiés par la présence d'un champ magnétique. La prise en compte de ce dernier dans le calcul des vertex d'interaction sort du cadre de ce travail et pourrait faire l'objet d'études postérieures.

Interactions électron-électron

L'hamiltonien du couplage électrostatique entre électrons s'écrit

$$\mathcal{H}_{el-el} = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}),$$

où $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = e^2 / (4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}|)$ est le potentiel de Coulomb et $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ est le champ électronique totale (contrairement à $\Psi(\mathbf{r})$ qui ne représente que les électrons de basse énergie). On ne gardera que les électrons de basses énergies (voir équation (3.1) dans la section (3.1.1.1)). On supposera que l'effet des bandes de haute énergie sur l'hamiltonien effectif de basse énergie est de renormaliser la permittivité ϵ_0 à une constante $\epsilon_\infty > \epsilon_0$. En ne gardant que les

interactions à longue portée (c'est-à-dire dont l'inverse de la longueur d'onde est inférieure à la séparation des noeuds de Weyl), on obtient un hamiltonien diagonal dans l'espace de Hilbert contenant les électrons de Weyl :

$$\mathcal{H}_{\text{el-el}} \simeq \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \rho(\mathbf{q}) \rho(-\mathbf{q}), \quad (4.4)$$

avec $V(\mathbf{q}) = e^2 / (\epsilon_{\infty} \mathbf{q}^2)$ et $\rho(\mathbf{q}) \equiv \sum_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \sum_{\sigma\tau} c_{\mathbf{k}\sigma\tau}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma\tau}$.

Charge de Born

Rappelons que les modes optiques longitudinaux peuvent engendrer un champ électrique qui va se coupler avec la densité électronique (voir section 2.2.2). Ce couplage (appelé couplage de Fröhlich) peut être pris en compte en remplaçant la densité électronique dans l'interaction de Coulomb (4.4) par la densité totale $\rho_{\text{tot}}(q) = \rho(\mathbf{q}) + \rho_{\text{ph}}(q)$, [85] où

$$\rho_{\text{ph}}(q) = \sum_{\lambda} \frac{e^{-1}}{\sqrt{N} \mathcal{V}_{\text{cell}}} \left(\mathbf{Q}_{\mathbf{q}\lambda}^{(0)} \cdot i\mathbf{q} \right) v_{\mathbf{q}\lambda} \quad (4.5)$$

est la densité de charge effective engendrée par les phonons actifs infrarouge. On a ajouté un facteur e^{-1} afin que $\rho_{\text{ph}}(q)$ soit sans unité, comme $\rho(\mathbf{q})$.

4.2.2 Obtention de l'action effective pour les phonons

4.2.2.1 Transformation de Hubbard-Stratonovitch

La première étape consiste à obtenir un hamiltonien électronique quadratique. La transformation de Hubbard-Stratonovitch consiste à transformer l'action électron-électron statique en ajoutant un champ auxiliaire φ dans la fonction de partition, à l'aide de la formule [100, 117]

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\frac{1}{2} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} V(\mathbf{q}) \rho_{\text{tot}}(q) \rho_{\text{tot}}(-q) \right] \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int D\varphi \exp \left\{ -\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \left[\frac{\epsilon_{\infty} \mathbf{q}^2}{2} \varphi(q) \varphi(-q) + ie\varphi(q) \rho_{\text{tot}}(-q) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

où \mathcal{N} est une constante que nous pourrions oublier par la suite. Le champ φ peut être interprété comme le potentiel électrique produit par les fluctuations de la densité de charge. Bien que la relation (4.6) soit exacte, il sera nécessaire de supposer que les fluctuations

de charge sont suffisamment faibles pour être traitées en perturbation. Cela est justifié si le système ne présente pas d'états électroniques ordonnés, ce qui est vérifié dans les semimétaux de Weyl connus.

Le champ φ se couple de façon scalaire aux électrons, exactement comme le champ ϕ_0 défini comme le couplage scalaire électron-phonon (voir équation (4.3)).

4.2.2.2 Intégration sur les degrés de liberté électronique

Maintenant qu'on a obtenu un hamiltonien électronique quadratique couplé avec un champ scalaire $\phi_0 + ie\varphi$ et un champ pseudoscalaire ϕ_z , on procède à l'intégration sur les électrons exactement de la même façon que dans la section 3.2.2 du chapitre précédent. Rappelons tout de même que dans le cas présent, la fonction de Green n'est plus invariante par translation. Cependant, grâce, à la propriété (4.1), le calcul de l'action effective au second ordre est très similaire :

$$\begin{aligned} \delta S &= \frac{1}{2} \text{Tr} [G(\phi_0 + ie\varphi + \tau_z \phi_z) G(\phi_0 + ie\varphi + \tau_z \phi_z)] \quad (4.7) \\ &= \frac{1}{2} \int d^4x d^4x' \text{tr} [\mathcal{G}(x - x') (\phi_0(x') + ie\varphi(x') + \tau_z \phi_z(x')) \mathcal{G}(x' - x) (\phi_0(x) + ie\varphi(x) + \tau_z \phi_z(x))] \\ &= \frac{T}{\mathcal{V}} \sum_q \Pi_{VV}(q) [(\phi_0(q) + ie\varphi(q))(\phi_0(-q) + ie\varphi(-q)) + \phi_z(q)\phi_z(-q)] \\ &\quad + \frac{T}{\mathcal{V}} \sum_q \Pi_{VA}(q) [(\phi_0(q) + ie\varphi(q))\phi_z(-q) + (\phi_0(-q) + ie\varphi(-q))\phi_z(q)] \end{aligned}$$

avec

$$\Pi_{VV}(q) = \frac{T}{\mathcal{V}} \sum_k \text{tr} [\mathcal{G}(k) \mathcal{G}(k + q)] \quad (4.8)$$

$$\Pi_{VA}(q) = \frac{T}{\mathcal{V}} \sum_k \text{tr} [\mathcal{G}(k) \mathcal{G}(k + q) \tau_z]. \quad (4.9)$$

Dans le cas des électrons sans champ magnétique, on avait justifié que le diagramme VA (qui n'est rien d'autre que la fonction (4.9)) était nul. Ce n'est plus le cas. En effet, le développement au premier ordre de Π_{VA} en champ magnétique est donné par le diagramme VVA responsable de l'anomalie chirale (voir figure 4.1). Notons cependant que lors du calcul de ce dernier, on avait considéré un potentiel chimique nul. De plus, la transition entre le régime à champ fort sous niveaux de Landau et le calcul perturbatif en champ magnétique n'est pas triviale.

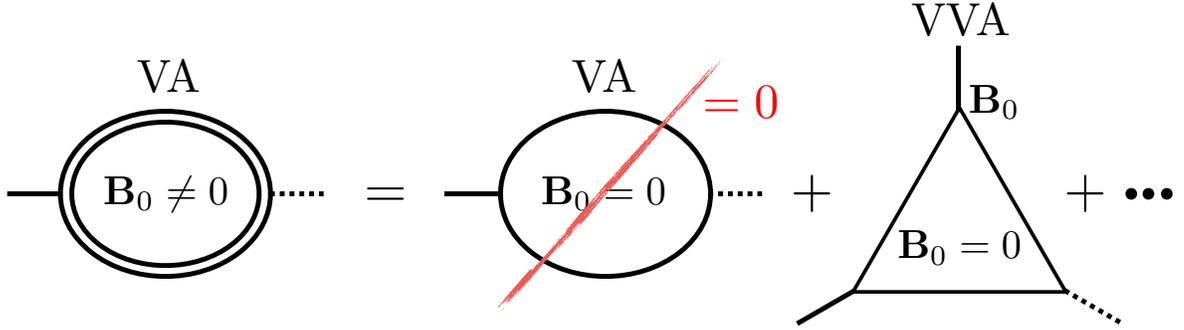


FIGURE 4.1 Schématisation du développement du diagramme VA au premier ordre au champ magnétique. Les lignes doubles (simples) dénotent des propagateurs d'électrons en présence (absence) du champ magnétique. Le diagramme VA à l'ordre 0 en champ magnétique est toujours nul.

Finalement, il ne reste qu'à se débarrasser du champ φ présent dans les actions (4.7) et (4.6). Pour cela, il suffit de regrouper ensemble tous les termes contenant φ en faisant le changement de variable

$$\varphi(q) \rightarrow \tilde{\varphi}(q) = \varphi(q) + ie \frac{\rho^{ph}(q) + \Pi_{VV}(q)\phi_0(q) + \Pi_{VA}(q)\phi_z(q)}{\varepsilon_{\infty}\varepsilon(q)\mathbf{q}^2}. \quad (4.10)$$

De cette façon, on termine avec d'un côté l'action pour le champ $\tilde{\varphi}$: $\int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \left[\frac{\varepsilon_{\infty}\mathbf{q}^2}{2} \tilde{\varphi}(q)\tilde{\varphi}(-q) \right]$, qui donne une constante des phonons après intégration sur $\tilde{\varphi}$. De l'autre côté se trouve l'action effective des phonons

$$\begin{aligned} S_{\text{ph}}^{\text{eff}} &= \frac{1}{2} T \sum_q M \left((i\omega)^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 \right) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{T}{\mathcal{V}} \sum_q \left\{ \Pi_{VV}(q) [\phi_0(q)\phi_0(-q) + \phi_z(q)\phi_z(-q)] + \Pi_{VA}(q) [\phi_0(q)\phi_z(-q) + \phi_0(-q)\phi_z(q)] \right. \\ &\left. + e^2 \frac{(\rho^{ph}(q) + \Pi_{VV}(q)\phi_0(q) + \Pi_{VA}(q)\phi_z(q)) (\rho^{ph}(-q) + \Pi_{VV}(q)\phi_0(-q) + \Pi_{VA}(q)\phi_z(-q))}{\varepsilon_{\infty}\varepsilon(q)\mathbf{q}^2} \right\}. \end{aligned}$$

Après quelques réarrangements et en considérant un seul mode de phonon couplé avec les électrons, on obtient l'action effective

$$S_{\text{ph}}^{\text{eff}} = \frac{1}{2} T \sum_{\omega} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \left\{ M \left((i\omega)^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 \right) \right. \quad (4.11)$$

$$- \frac{\mathcal{V}}{\varepsilon(q)} \left[\left(|g_{00}(\mathbf{q})|^2 + |g_{0z}(\mathbf{q})|^2 \right) \Pi_{VV}(q) \right. \\ \left. + 2\text{Re} [g_{00}(\mathbf{q}) g_{0z}^*(\mathbf{q})] \Pi_{VA}(q) - V(\mathbf{q}) [\Pi_{VV}(q)^2 - \Pi_{VA}(q)^2] |g_{0z}(\mathbf{q})|^2 \right] \quad (4.12)$$

$$- \frac{V(\mathbf{q})}{\varepsilon(q)} \left[\frac{1}{\mathcal{V}_{\text{cell}}} \left| \frac{\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}^{(0)} \cdot \mathbf{q}}{e} \right|^2 \right. \\ \left. - \frac{2\sqrt{N}}{e} \left(\Pi_{VV}(q) \text{Im} \left[\left(\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}^{(0)} \cdot \mathbf{q} \right) g_0^*(\mathbf{q}) \right] + \Pi_{VA}(q) \text{Im} \left[\left(\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}^{(0)} \cdot \mathbf{q} \right) g_z^*(\mathbf{q}) \right] \right) \right\} v_{-\mathbf{q}}. \quad (4.13)$$

On remarquera que l'action effective que nous venons de dériver correspond terme par terme à celle dérivée dans le chapitre précédent (voir équation (3.48)). Rappelons qu'on y montrait que le diagramme VVA engendre une charge de Born effective $\delta\mathbf{Q}$ possédant un pôle à $\omega^2 = v_F^2 \mathbf{q}^2$. La correspondance se fait en posant $\mathbf{q} \cdot \delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}} = ie\Pi_{VA}(q) g_{0z}(\mathbf{q})$. La différence la plus importante réside dans les définitions de la fonction de polarisation Π_{VV} et de la fonction diélectrique. Dans le chapitre précédent, on avait négligé leur rôle dans la dispersion du phonon du fait qu'elles ne contribuait qu'à un décalage de la fréquence de vibration, alors que le terme lié à l'anomalie chirale, $\delta\mathbf{Q} (\propto \Pi_{VA})$, comportait une résonance. Désormais, à fort champ magnétique, toutes les fonctions de polarisation (Π_{VV} et Π_{VA}) contiennent une résonance qui provient des niveaux de Landau chiraux.

4.2.2.3 Expressions générales des fonctions de polarisation, à $b_0 = 0$

La dérivation des fonctions Π_{VV} et Π_{VA} à $b_0 = 0$ se trouve dans l'annexe B. Ici, on se limitera à écrire les résultats finaux que nous avons utilisés par la suite dans nos calculs numériques :

$$\Pi_{VV}(q) = - e^{-\frac{\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2}{2}} \frac{\ell_B^{-2}}{2\pi^2} \sum_{nm} \left[C_{nm}^1(\mathbf{q}_{\perp}^2) I_{nm}(q_z, i\omega) + C_{nm}^2(\mathbf{q}_{\perp}^2) J_{nm}(q_z, i\omega) \right] \quad (4.14)$$

$$\Pi_{VA}(q) = - e^{-\frac{\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2}{2}} \frac{\ell_B^{-2}}{2\pi^2 \hbar v_F} i\omega \left\{ \frac{v_F q_z}{v_F^2 q_z^2 - (i\omega)^2} \right. \\ \left. + \hbar^2 v_F^2 \sum_{n>0} \left(\frac{\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2}{2} \right)^n \frac{1}{n!} \sum_{\lambda\lambda'} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{f(\lambda \hbar v_F k_z) - f(\lambda' E_{nk'_z})}{(\lambda \hbar v_F k_z - \lambda' E_{nk'_z})^2 - (i\hbar\omega)^2} \frac{\lambda + \lambda' \frac{\hbar v_F k'_z}{E_{nk'_z}}}{2} \right\}, \quad (4.15)$$

où $\lambda, \lambda' = \pm 1$ et

$$I_{nm}(q_z, i\omega) = \sum_{\lambda\lambda'} \int dk_z \frac{f(\lambda E_{nk_z}) - f(\lambda' E_{mk'_z})}{\lambda E_{nk_z} - \lambda' E_{mk'_z} + i\omega} \frac{1 + \lambda\lambda' \frac{\hbar^2 v_F^2 k_z k'_z}{E_{nk_z} E_{mk'_z}}}{2} \quad (4.16)$$

$$J_{nm}(q_z, i\omega) = \sum_{\lambda\lambda'} \int dk_z \frac{f(\lambda E_{nk_z}) - f(\lambda' E_{mk'_z})}{\lambda E_{nk_z} - \lambda' E_{mk'_z} + i\omega} \frac{\lambda\lambda' 2\hbar^2 v_F^2 \ell_B^{-2}}{2 E_{nk_z} E_{mk'_z}}$$

$$C_{nm}^1(\mathbf{q}_\perp^2) = \left(\frac{\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2}{2} \right)^{n-m} \frac{m!}{n!} \frac{L_m^{n-m} \left(\frac{\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2}{2} \right)^2 + \frac{n}{m} L_{m-1}^{n-m} \left(\frac{\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2}{2} \right)^2}{2}$$

$$C_{nm}^2(\mathbf{q}_\perp^2) = \left(\frac{\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2}{2} \right)^{n-m} \frac{m!}{(n-1)!} L_m^{n-m} \left(\frac{\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2}{2} \right) L_{m-1}^{n-m} \left(\frac{\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2}{2} \right).$$

Ces expressions bien compliquées peuvent être simplifiées dans certains cas particuliers. Notamment, si l'on considère un phonon qui se propage parallèlement au champ magnétique (*i.e* $\mathbf{q}_\perp = \mathbf{0}$), on trouve, à partir de (4.14) et (4.15),

$$\Pi_{VV}(q) = -\frac{\ell_B^{-2}}{2\pi^2 \hbar v_F} \left\{ \frac{v_F^2 q_z^2}{v_F^2 q_z^2 - (i\omega)^2} \right. \quad (4.17)$$

$$\left. + \hbar v_F \sum_{n>0} \sum_{\lambda\lambda'} \int dk_z \frac{f(\lambda E_{nk_z}) - f(\lambda' E_{mk'_z})}{\lambda E_{nk_z} - \lambda' E_{mk'_z} + i\omega} \left(1 + \lambda\lambda' \hbar^2 v_F^2 \frac{k_z k'_z + 2n\ell_B^{-2}}{E_{nk_z} E_{mk'_z}} \right) / 2 \right\} \quad (4.18)$$

$$\Pi_{VA}(q) = -\frac{\ell_B^{-2}}{2\pi^2 \hbar v_F} \frac{v_F q_z i\omega}{v_F^2 q_z^2 - (i\omega)^2}. \quad (4.19)$$

La simplification qui a lieu vient du fait qu'avec $\mathbf{q}_\perp = \mathbf{0}$, seul sont permises les transitions entre niveaux de Landau avec le même indice n . On ne garde donc que les contributions intrabandes $(n, \lambda) \rightarrow (n, \lambda)$ et interbandes $(n, \lambda) \rightarrow (n, -\lambda)$. Il est également important de souligner que Π_{VA} ne comporte que les contributions des niveaux chiraux ($n = 0$). La raison à cela est la symétrie entre les niveaux non chiraux de chiralités opposées; leurs contributions s'annulent alors mutuellement dans Π_{VA} . Il faut cependant être prudent si on prend en compte la séparation en énergie b_0 des noeuds de Weyl, comme on le verra plus tard dans cette sous-section.

Il est intéressant de constater que dans l'équation (4.17), Π_{VV} peut se réécrire comme

$$\frac{2\ell_B^{-2}}{\pi} \left\{ \frac{1}{2} \Pi_{VV}^{1D}(q_z, i\omega, 0) + \sum_{n>0} \Pi_{VV}^{1D}(q_z, i\omega, \sqrt{2n\hbar} v \ell_B^{-1}) \right\}, \quad (4.20)$$

où $\Pi_{VV}^{1D}(q_z, i\omega, \Delta)$ est la fonction de polarisation pour les fermions de Dirac de masse Δ

en une dimension. On en trouve les expressions explicites dans [118]. Dans cette situation, chaque niveau de Landau n contribue indépendamment à la polarisation comme un fermion de Dirac unidimensionnel de masse

$$\Delta_n = \sqrt{2n}\hbar v_F \ell_B^{-1}. \quad (4.21)$$

Enfin, il est important de préciser que les contributions des niveaux de Landau chiraux (qui donnent notamment la première ligne de (4.17), ainsi que (4.19)) sont indépendantes de la température, cela étant dû à la dispersion purement linéaire de ces états. Ainsi les intégrales sur les moments électroniques k_z qui apparaissent dans les calculs de Π_{VV} et Π_{VA} se réduisent à

$$\int dk_z [f(\hbar v_F k_z) - f(\hbar v_F k'_z)] = -q_z \quad \forall T.$$

Les résultats induits par les niveaux de Landau chiraux seront donc à considérer comme très peu dépendants de la température.

4.2.2.4 Fonctions de polarisation dans la limite quantique

L'autre simplification importante est de négliger les contributions de tous les niveaux de Landau exceptées celles des niveaux de Landau chiraux. Une telle simplification est permise lorsque le potentiel chimique croise seulement les niveaux de Landau chiraux ; on appelle cette configuration la limite quantique. Dans ce cas, les transitions électroniques intrabandes (*i.e.* une transition électronique au sein d'une même bande) sont toutes nulles, sauf celles des niveaux chiraux. Les transitions interbandes sont quant à elle négligeables si $|\mu - \hbar\omega| \ll 2\sqrt{2}\hbar v_F \ell_B^{-1}$ (dans notre cas, la fréquence ω sera de l'ordre de la fréquence du mode de phonon) et $|\mathbf{q}_\perp|^2 \ll \ell_B^{-2}$. Ces conditions sont illustrées sur la figure 4.2.

Les niveaux de Landau chiraux apportent les contributions

$$\Pi_{VV}^{LLL}(q) = -\frac{\ell_B^{-2}}{2\pi^2\hbar v_F} \frac{v_F^2 q_z^2}{v_F^2 q_z^2 - (i\omega)^2} e^{-\frac{\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2}{2}} \quad (4.22)$$

$$\Pi_{VA}^{LLL}(q) = -\frac{\ell_B^{-2}}{2\pi^2\hbar v_F} \frac{v_F q_z i\omega}{v_F^2 q_z^2 - (i\omega)^2} e^{-\frac{\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2}{2}}. \quad (4.23)$$

qui possèdent le même pôle en $v_F^2 q_z^2 = \omega^2$. Cependant la différence de la dépendance en moment de Π_{VA}^{LLL} et Π_{VV}^{LLL} est notable : le fait que $\Pi_{VV}^{LLL}/\Pi_{VA}^{LLL} = q_z/i\omega$ nous informe que seul Π_{VA} engendre une charge effective des phonons pour $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$. Cette différence sera cruciale pour différencier la dispersion des phonons se couplant de façon scalaire ou pseudoscalaire aux électrons.

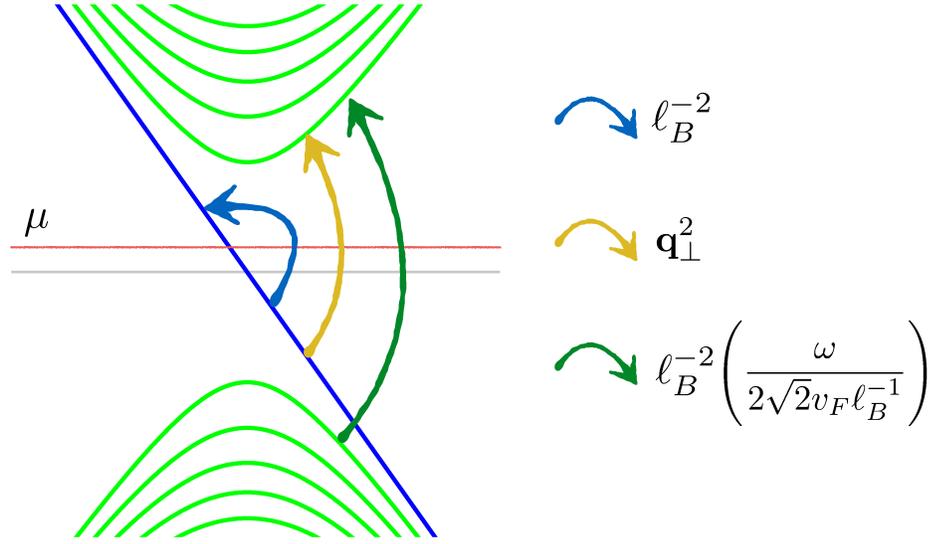


FIGURE 4.2 Comparaison des contributions à la polarisation provenant des différents types de transitions électroniques dans la limite quantique, pour les niveaux de Landau au voisinage du noeud $\tau = -1$. Les flèches bleue, jaune et verte indiquent respectivement la transition intrabande $0 \rightarrow 0$, la transition interbande $0 \rightarrow 1$, et la transition interbande $1 \rightarrow 1$. La légende indique les facteurs de comparaison entre les différents termes. Par exemple, le rapport entre la contribution $0 \rightarrow 0$ et la contribution $0 \rightarrow 1$ est de l'ordre de $\ell_B^{-2}/\mathbf{q}_\perp^2$.

4.2.2.5 Polarisations avec $b_0 \neq 0$.

Dans la sous-section 4.2.2.3, nous avons négligé la différence d'énergie b_0 entre les noeuds de Weyl. Par ailleurs, dans le modèle que nous avons considéré, la présence du couplage pseudoscalaire g_{0z} requiert l'absence de symétrie miroir dans le cristal, et est ainsi lié à un b_0 non nul (voir section 3.1.1.2). Il est donc utile de montrer comment b_0 modifie les fonctions de polarisation électroniques, et par suite l'action effective pour les phonons.

Le découplage des électrons de chiralités opposées se traduit par le fait que l'hamiltonien (et donc la fonction de Green) commute avec l'opérateur τ_z . L'ajout d'un terme τ_z dans l'hamiltonien n'y change rien. On peut donc écrire une fonction de Green G_τ pour chaque chiralité de fermion et de même une polarisation $\Pi_\tau \equiv \text{Tr}[G_\tau G_\tau]$. On peut alors écrire les polarisations Π_{VV} et Π_{VA} comme la somme et la différence des contributions Π_τ de chacun des noeud de Weyl. Le terme $b_0 \tau_z$ revient à décaler le potentiel chimique de $-\tau b_0$ autour de chaque noeud. on a ainsi

$$\Pi_\tau(q) \equiv \frac{T}{\mathcal{V}} \sum_k \text{tr} [\mathcal{G}_0^\tau(k) \mathcal{G}_0^\tau(k+q)] = \frac{1}{2} \left[\Pi_{VV}^{(0)}(\mu_\tau) + \tau \Pi_{VA}^{(0)}(\mu_\tau) \right], \quad (4.24)$$

où $\Pi_V^{(0)}(\mu_\tau)$ et $\Pi_A^{(0)}(\mu_\tau)$ sont les fonctions de polarisations calculées sans terme $b_0 \tau_z$ (qui

ont été explicitées au début de cette section), mais avec un potentiel chimique $\mu_\tau \equiv \mu - \tau b_0$ au lieu de μ (μ_τ remplace le potentiel chimique dans les fonctions \mathcal{G}_0^τ). En suivant (4.24), on obtient les fonctions de polarisation à $b_0 \neq 0$ en fonction des expressions à $b_0 = 0$:

$$\begin{aligned} \Pi_{VV}(\mu, b_0) &= \sum_{\tau} \Pi_{\tau} & (4.25) \\ &= \frac{\Pi_{VV}^{(0)}(\mu - b_0) + \Pi_{VV}^{(0)}(\mu + b_0)}{2} + \frac{\Pi_{VA}^{(0)}(\mu - b_0) - \Pi_{VA}^{(0)}(\mu + b_0)}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Pi_{VA}(\mu, b_0) &= \sum_{\tau} \tau \Pi_{\tau} & (4.26) \\ &= \frac{\Pi_{VA}^{(0)}(\mu - b_0) + \Pi_{VA}^{(0)}(\mu + b_0)}{2} + \frac{\Pi_{VV}^{(0)}(\mu - b_0) - \Pi_{VV}^{(0)}(\mu + b_0)}{2}. \end{aligned}$$

Notons que dans la limite quantique, Π_{VV} et Π_{VA} sont indépendantes du potentiel chimique. Ainsi, tant qu'on se situe dans la limite quantique, les expressions (4.22) et (4.23) restent valides. De façon générale, la limite quantique est atteinte si le champ magnétique est d'amplitude supérieure à

$$B_{QL} \equiv \max \left\{ \frac{(\mu + b_0)^2}{2v_F^2 e \hbar}, \frac{(\mu - b_0)^2}{2v_F^2 e \hbar} \right\}. \quad (4.27)$$

Dans le reste de notre étude, nous ne prendrons pas en compte la variation du potentiel chimique avec le champ magnétique. Remarquons cependant que le potentiel chimique est en général diminué par la présence du champ magnétique (voir une explication dans les section 6.1.2 et 6.1.3 de [116]) et que par conséquent, l'équation (4.27) est une légère surestimation du champ à partir duquel la limite quantique est atteinte.

4.2.2.6 Polarisation et anomalie chirale

L'anomalie chirale correspond à un transfert de charge entre les électrons de chiralités opposées. Elle est donc intrinsèquement liée à la différence de polarisation entre les deux espèces d'électrons, c'est-à-dire à la fonction Π_{VA} . Puisque Π_{VA} est toujours en facteur du couplage pseudoscalaire g_{0z} dans l'action des phonons, l'existence de ce dernier est indispensable pour détecter l'anomalie chirale via les phonons.

Ajoutons que seul les niveaux de Landau chiraux participent à l'anomalie chirale. On pourra isoler ceux-ci en se plaçant dans la limite quantique. Dans cette situation, même si la fonction Π_{VV} n'est pas directement liée à l'anomalie, sa forme analytique particulière marque la dominance des niveaux chiraux sur la physique du système.

4.3 Dispersion des phonons

Attelons nous maintenant à l'étude de la dispersion des phonons, en nous concentrant par soucis de simplicité sur le cas où la charge de Born $\mathbf{Q}^{(0)}$ est nulle. De plus on passera dans les domaine des fréquences réelles. Pour ce faire, il suffit d'effectuer un prolongement analytique $i\omega \rightarrow \omega + i\eta$ où η est un nombre positif infinitésimal. On utilise donc les fonctions de polarisation retardées $\Pi_{VV(A)}^R(\mathbf{q}, \omega) \equiv \Pi_{VV(A)}(\mathbf{q}, i\omega \rightarrow \omega + i\eta)$.

Jusque là, on a négligé le fait que le temps de vie des électrons, noté τ , n'est pas infini. Notamment, celui-ci peut diminuer lorsque l'on ajoute du désordre au matériau à cause des diffusions des électrons par des impuretés. En toute rigueur cela devrait être pris en compte en calculant les corrections aux fonctions de Green électroniques et aux vertex d'interaction induites par ces impuretés. Dans le cas des phonons optiques nous négligerons ces effets en supposant que les échelles de fréquences optiques sont bien plus grandes que le taux de diffusion, défini comme $\Gamma \equiv \tau^{-1}$. On ne prendra en compte $\Gamma \neq 0$ que dans le cas des phonons acoustiques. Cependant, on introduira Γ de manière phénoménologique, sans calculer explicitement les corrections mentionnées précédemment.

4.3.1 Phonons optiques

La dispersion en fréquence est directement extraite de l'action effective (4.11) par $\delta S_{\text{ph}}^{\text{eff}} / \delta v_{\mathbf{q}}(\omega) = 0$:

$$\omega^2 = \omega_{\mathbf{q}}^2 + \frac{\mathcal{V}}{M\varepsilon^R(q)} \left\{ \left(|g_{00}(\mathbf{q})|^2 + |g_{0z}(\mathbf{q})|^2 \right) \Pi_{VV}^R(q) + 2\text{Re} [g_{00}(\mathbf{q}) g_{0z}^*(\mathbf{q})] \Pi_{VA}^R(q) - V(\mathbf{q}) \left[\Pi_{VV}^R(q)^2 - \Pi_{VA}^R(q)^2 \right] |g_{0z}(\mathbf{q})|^2 \right\} \quad (4.28)$$

Comme nous nous intéressons aux phonons de grandes longueurs d'onde¹, on prendra $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 = C^{ste}$ dans tous les calculs de cette section. Nous ferons également l'approximation d'un potentiel de déformation constant de tel que $\mathcal{V} |g_{00(z)}|^2 / M \equiv |G_{0(z)}|^2 = D_{0(z)}^2 / (\rho_u a^2)$ où $D_{0(z)}$ a la dimension d'une énergie, ρ_u est la densité massique du cristal, et a est le pas du réseau. En ce qui concerne les fonctions de polarisations, nous simplifierons la notation en enlevant l'indice R signifiant « retardée ». Sauf mention du contraire, nous n'utiliserons plus que les fonctions de polarisations retardées.

1. On considèrera que les phonons de moments inférieurs à un dixième de la taille de la première zone de Brillouin rentrent dans cet catégorie.

En toute rigueur, des effets non électroniques sont susceptibles de diminuer le temps de vie des modes des phonons, ou autrement dit, d'augmenter leurs largeurs de bande. Cela pourrait être pris en compte de façon effective et *ad hoc* en ajoutant une partie imaginaire au terme de gauche de l'équation (4.28) : $\omega^2 \rightarrow (\omega + i\Gamma_{\text{ph}})^2$. Γ_{ph} peut provenir aussi des effets anharmoniques des vibrations du cristal que de la résolution limitée de la mesure.

On commencera par résoudre l'équation (4.28) analytiquement dans la limite quantique, en négligeant la largeur de bande Γ_{ph} et celle apportée par la partie imaginaire de la polarisation électronique². Pour un champ magnétique intermédiaire ou un potentiel chimique plus important, on sort de la limite quantique et on ne peut plus ignorer la partie imaginaire des fonctions de polarisations. Dans ce cas on tracera directement la densité spectrale du phonon définie comme

$$A(\omega, \mathbf{q}) = \text{Im} \left[\frac{2\omega_{\mathbf{q}}}{(\omega + i\Gamma_{\text{ph}})^2 - R(\mathbf{q}, \omega)} \right] \quad (4.29)$$

où $R(\mathbf{q}, \omega)$ est égale au membre de droite de l'équation (4.28). Les pics de la fonction $A(\omega, \mathbf{q})$ nous indiquent les modes propres de vibration.

4.3.1.1 Limite quantique

Dans un premier temps, nous allons nous concentrer sur la limite quantique et ne prendre en compte que les niveaux de Landau chiraux pour obtenir une solution analytique simple à l'équation de dispersion (4.28). Dans un objectif de concision, on portera l'analyse des solutions de (4.28) dans deux cas particuliers : le cas d'un couplage purement scalaire (avec $\sqrt{\mathcal{V}/M}(g_{00}, g_{0z}) \equiv (G_0, 0)$) et le cas d'un couplage purement axial (avec $\sqrt{\mathcal{V}/M}(g_{00}, g_{0z}) \equiv (0, G_z)$). L'équation (4.28) s'écrit alors

$$\omega^2 = \omega_0^2 + |G_0|^2 \frac{\Pi_{VV}(q)}{\varepsilon(q)} \quad (4.30)$$

pour le couplage purement scalaire, et

$$\omega^2 = \omega_0^2 + |G_z|^2 \left[\Pi_{VV}(q) + V_{\mathbf{q}} \frac{\Pi_{VA}(q)^2}{\varepsilon(q)} \right] \quad (4.31)$$

2. Dans la limite quantique, si on néglige le temps de vie fini des électrons, les fonctions de polarisations retardées sont proportionnelles à $\delta(v_F^2 q_z^2 - \omega^2)$ ce qui ne contribue pas à la dispersion (4.28).

dans le cas pseudoscalaire. En négligeant la partie imaginaire de la fréquence, on obtient les fréquences propres des modes scalaires et pseudoscalaires (notés respectivement ω_{sc} et ω_{ax})

$$\omega_{sc,\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ \omega_0^2 + \omega_p(\mathbf{q})^2 \pm \left[(\omega_0^2 - \omega_p(\mathbf{q})^2)^2 + \frac{2\ell_B^{-2}}{\pi^2 \hbar v_F} v_F^2 q_z^2 |G_0|^2 e^{-\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2 / 2} \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (4.32)$$

$$\omega_{ax,\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ \omega_0^2 + \omega_p(\mathbf{q})^2 \pm \left[(\omega_0^2 - \omega_p(\mathbf{q})^2)^2 + \frac{2\ell_B^{-2}}{\pi^2 \hbar v_F} \omega_p(\mathbf{q})^2 |G_z|^2 e^{-\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2 / 2} \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (4.33)$$

où

$$\omega_p(\mathbf{q}) = v_F q_z \sqrt{1 + \frac{2}{\pi} \frac{\alpha}{\mathbf{q}^2 \ell_B^2} e^{-\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2 / 2}} \quad (4.34)$$

est la fréquence plasmonique, c'est-à-dire le zéro de la fonction diélectrique $\varepsilon(q)$. Celle-ci augmente de façon monotone avec le moment et le champ magnétique, et diminue quand on augmente l'angle entre \mathbf{B} et \mathbf{q} jusqu'à devenir nul lorsque $\mathbf{B} \perp \mathbf{q}$.

Sans interaction ($G = 0$), les solutions (4.32) et (4.33) sont les fréquences de phonons et de plasmons découplés, ω_0 et ω_p . La présence du terme d'interaction crée une hybridation des deux modes qui est maximale lorsque la condition de résonance

$$\omega_0 = \omega_p(\mathbf{q}) \quad (4.35)$$

est atteinte. À cette résonance, on observe un anticroisement des fréquences (voir figure 4.3).

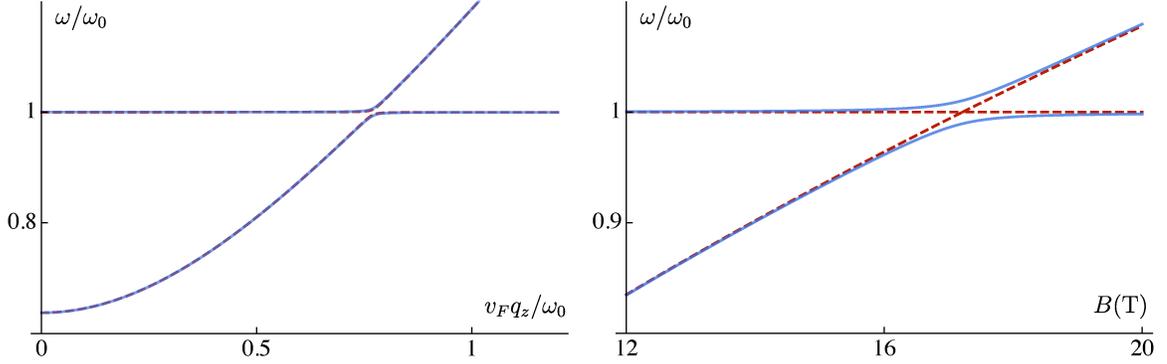


FIGURE 4.3 Dispersions $\omega_{\text{ax}\pm}$ (équation (4.32)) en lignes pleines et $\omega_{\text{sc}\pm}$ (équation (4.32)) en pointillés rouges, en fonction du moment q_z (gauche) et du champ magnétique (droite) pour un mode de phonon de fréquence $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 = 10\text{meV}$. Les autres paramètres sont $\mathbf{q}_{\perp} = 0$, $|G_{0(z)}|^2 = D_{0(z)}^2 / (\rho a^2)$ avec $D_{0(z)} = 10\text{eV}$ et $a = 4\text{\AA}$, $\varepsilon_{\infty} = 30\varepsilon_0$ et $v = 2 \times 10^5 \text{m.s}^{-1}$, ce qui correspond à $B_{\text{max}} \simeq 17.2\text{T}$ (voir équation (4.39) pour la définition de B_{max}). Dans la figure de gauche, le champ magnétique est fixé à 7T , elle est donc valide si $B_{\text{QL}} < 7\text{T}$, ce qui correspond dans ce cas à $|\mu \pm b_0| < 18.7\text{meV}$. Dans la figure de droite le moment est fixé à $10^{-2}\omega_0/v_F$.

Une fois que $\omega_p(\mathbf{q})$ s'éloigne de ω_0 , l'effet des électrons sur la dispersion des phonons redevient une petite correction au second ordre en $|G_{0(z)}|^2$.

Une telle hybridation est la marque de la présence d'une charge de Born effective $\tilde{\mathbf{Q}}_{\mathbf{q}}(\omega)$ qu'on peut identifier dans notre cas aux fonctions de polarisation et au couplage électron-phonon par

$$\mathbf{q} \cdot \tilde{\mathbf{Q}}_{\mathbf{q}}(\omega) = ie \frac{\mathcal{V}}{\sqrt{N}} \left[\Pi_{VV}^R(q) g_{00}(\mathbf{q}) + \Pi_{VA}^R(q) g_{0z}(\mathbf{q}) \right]. \quad (4.36)$$

Cette équation est formellement identique à l'expression des charges de Born induites par les électrons dérivées dans le chapitre 3, $\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}^{(1)}$ et $\delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}$, si on définit $\tilde{\mathbf{Q}}_{\mathbf{q}} = \mathbf{Q}_{\mathbf{q}}^{(1)} + \delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}$ (voir les équations (3.42) et (3.49)). Cependant l'expression des fonctions de polarisation utilisées dans (4.36) diffèrent du chapitre précédent, du fait que le champ magnétique a été inclus dans la dispersion électronique. La différence la plus notable est dans la fonction $\Pi_{VV}(q)$ (qu'on peut identifier à $-\Pi(q^2)q_z^2 / (\hbar v_F)$ du chapitre 3) qui comporte ici le même pôle que la partie liée à l'anomalie chirale (c'est-à-dire Π_{VA} dans le cas présent, et $\delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}$ dans le chapitre 3). De plus, ce pôle est ici en $\omega^2 = v_F^2 q_z^2$, alors qu'on trouvait précédemment un pôle en $\omega^2 = v_F^2 \mathbf{q}^2$ dans $\delta\mathbf{Q}_{\mathbf{q}}$. Ceci est lié au fait que le calcul perturbatif au premier ordre ne contient pas l'information sur l'anisotropie induite par le champ magnétique.

Dans le cas du phonon pseudoscalaire (4.33), l'hybridation reste finie quand $\mathbf{q} \rightarrow 0$ alors qu'elle est totalement écrantée dans le cas scalaire (4.32). Cette caractéristique qui implique

une des principales différences entre les deux dispersions est illustrée sur la figure 4.3. Plus précisément, on trouve que les séparations en fréquence dues à l'hybridation à $\omega_0 = \omega_p(\mathbf{q})$ dans les cas scalaire et pseudoscalaire sont respectivement égales à

$$\Delta\omega_{\text{sc}} \simeq \frac{G_0}{\hbar\pi} \sqrt{\frac{eB}{2v} \left(1 - \frac{B}{B_{\text{max}}}\right)} \quad (4.37)$$

$$\Delta\omega_{\text{ax}} \simeq \frac{G_z}{\hbar\pi} \sqrt{\frac{eB}{2v}}. \quad (4.38)$$

Le fait que ces décalages en fréquence sont linéaires dans le vertex électron-phonon est la marque d'une correction non perturbative.

Précisons que, dans les équations (4.37) et (4.38), B est imposé par l'égalité (4.35), et atteint sa valeur maximale

$$B_{\text{max}} \equiv \frac{\pi \hbar}{2\alpha e} \left(\frac{\omega_0^2}{v_F^2 \cos^2 \theta} \right) \quad (4.39)$$

quand $|\mathbf{q}| \rightarrow 0^3$, θ étant l'angle entre \mathbf{B} et \mathbf{q} . Le désalignement de \mathbf{B} et \mathbf{q} (*i.e.* l'augmentation de θ de 0 vers $\pi/2$) augmente la valeur de B à la résonance en $1/\cos^2 \theta$. Lorsque l'amplitude du champ magnétique dépasse B_{max} , la fréquence plasmonique dépasse la fréquence du mode de phonon et la résonance n'est plus atteignable, et ce pour n'importe quelle valeur de \mathbf{q} . De plus, ces considérations ne sont valables que dans la limite quantique, ce qui impose la condition sur le potentiel chimique : $B_{\text{QL}} < B_{\text{max}}$. Cependant, l'hybridation résonante est toujours possible hors de la limite quantique, ce que nous discuterons dans la prochaine section.

Sur la figure 4.3 gauche, le champ magnétique est bien inférieur à B_{max} . On peut alors remarquer que les séparations en fréquences $\Delta\omega_{\text{sc}}$ et $\Delta\omega_{\text{ax}}$ sont similaires. Sur la figure de droite, le moment est fixé à une petite valeur de sorte que la résonance a lieu à $B \simeq B_{\text{max}}$. Dans ce cas, $\Delta\omega_{\text{sc}}$ est nulle, à l'inverse de $\Delta\omega_{\text{ax}}$ qui est maximale. Notons que $\Delta\omega_{\text{sc}}$ est maximale pour $B = B_{\text{max}}/2$, ce qui correspond à $v_F q_z = \omega_0 \sqrt{1 - e^{-\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2/2}}/2 = \omega_0/2 + \mathcal{O}(\mathbf{q}_\perp^2 \ell_B^2)$. Ceci est illustré sur la figure 4.4.

3. On peut facilement vérifier numériquement ou analytiquement que la valeur maximale de B vérifiant (4.35) est atteinte quand $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$ à condition que

$$\frac{\pi}{\alpha} > \sin^2 \theta$$

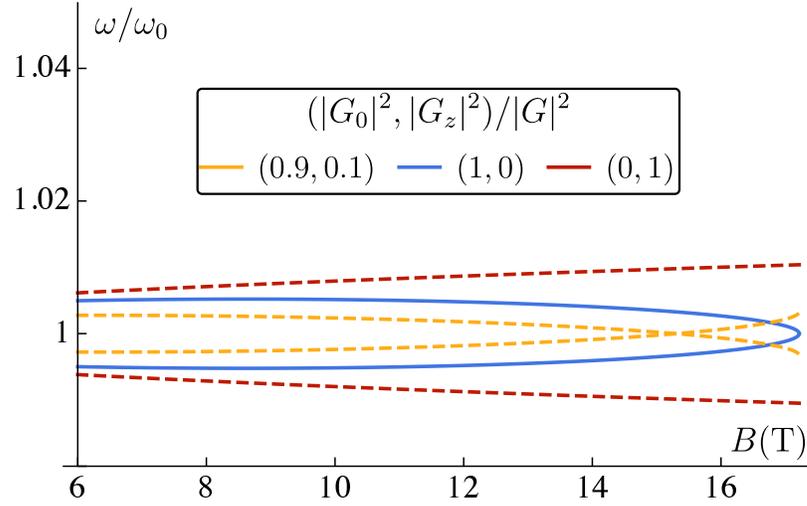


FIGURE 4.4 Solutions de la dispersion (4.28) à $\omega_0 = \omega_p$ en fonction du champ magnétique B (allant de 6T à $B_{\max} \simeq 17.2\text{T}$), à $\theta = 0$ et différentes valeurs des couplages scalaires (G_0) et pseudoscalaires (G_z). Pour chaque valeur de B , le moment vérifie $v_F^2 \mathbf{q}^2 = \omega_0^2 - \frac{2}{\pi} \frac{\alpha}{\ell_b^2}$ afin de compléter la condition $\omega_0 = \omega_p$. Les autres paramètres utilisés sont identiques à ceux de la figure 4.3. Dans le cas du couplage pseudoscalaire ($(|G_0|^2, |G_z|^2) / |G|^2 = (0, 1)$), la séparation en fréquence est maximum à $B = B_{\max}$ tandis que pour le couplage scalaire ($(|G_0|^2, |G_z|^2) / |G|^2 = (1, 0)$), elle est maximale en $B = B_{\max}/2$. Pour un couplage mixte, on observe une séparation maximale en B_{\max} à moins d'avoir $|G_0|^2 \gg |G_z|^2$.

Note sur une stratégie expérimentale

L'amplitude de champ magnétique pour laquelle l'anticroisement est maximal n'est pas toujours réalisable en laboratoire. Prenons par exemple un cas où le couplage est pseudoscalaire et le champ maximal atteignable, noté B^* , vérifie $B_{\text{QL}} < B^* < B_{\max}$. Il convient alors de choisir le moment du phonon satisfaisant (4.35) avec $B \lesssim B^*$ pour observer la séparation en fréquence la plus grande possible. Le résultat de la mesure pourrait être similaire à la figure 4.5 qui représente la fonction spectrale définie en (4.29). L'intérêt de rechercher la configuration avec un anticroisement $\Delta\omega$ maximal réside dans le fait que ce dernier doit être supérieur à la largeur de bande Γ_{ph} pour être détecté. Par exemple, pour un matériau avec des paramètres typiques ($\rho = 10^4 \text{kg.m}^{-3}$, $a = 5\text{\AA}$, $v_F = 2 \times 10^5 \text{m/s}$ et $D_z = 5\text{eV}$), on trouve $\hbar\Delta\omega_{\text{ax}} = 30\sqrt{B^*}(\text{T})\mu\text{eV}$. $\hbar\Gamma_{\text{ph}}$ pouvant difficilement être en-dessous de 0.1meV, un champ magnétique de l'ordre de 10T ou plus serait nécessaire pour obtenir $\hbar\Delta\omega_{\text{ax}} > \Gamma_{\text{ph}}$. Additionnellement, si le système comporte plusieurs paires de noeuds de Weyl à proximité de l'énergie de Fermi, les couplages électron-phonon s'additionnent et $\Delta\omega$ doit être multiplié par $\sqrt{N_W}$, rendant la situation plus favorable pour l'observation du gap

en fréquence. Notons que dans ce cas, on doit également multiplier B et B_{\max} par N_W dans les équations (4.34), (4.35) et (4.39).

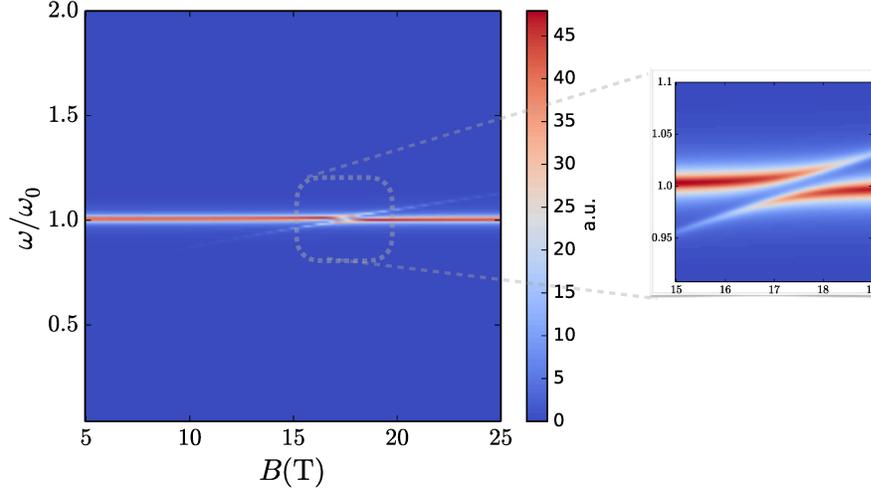


FIGURE 4.5 Fonction spectrale de phonon (définie en (4.29)) en fonction de ω/ω_0 et du champ magnétique (en Teslas), avec une largeur de bande $\hbar\Gamma_{\text{ph}} = 0.1\text{meV}$. Le moment est fixé à $|\mathbf{q}| = 0.8 \times \omega_0/v_F$, faisant un angle $\cos\theta = 0.8$ avec le champ magnétique. Le couplage est pseudoscalaire : $D_z = 10\text{eV}$. Les autres paramètres utilisés sont identiques à ceux de la figure 4.3.

Ces estimations montrent que l'hybridation plasmon-phonon induite par un champ magnétique peut être observé dans un système propre, à basse température et sous fort champ magnétique. Néanmoins, les valeurs du gap en fréquence causé par cette hybridation est fortement sensible aux paramètres du système tels le pas du réseau, la vitesse de Fermi ou le potentiel de déformation. Une étude *ab initio* pour les évaluer serait fortement souhaitable pour faire suite à cette étude.

4.3.1.2 Champ intermédiaire

Dans un semimétal de Weyl raisonnablement dopé ou dans lequel les noeuds de Weyl sont nettement séparés en énergie, il peut être difficile voir impossible d'atteindre la limite quantique avec le champ magnétique généré en laboratoire. Par exemple, pour $|\mu \pm b_0| = 50\text{meV}$, on a $B_{\text{QL}} \simeq 50\text{T}$. Dans cette section, on étudie la dispersion (4.28) quand $B \lesssim B_{\text{QL}}$, c'est-à-dire quand le niveau de Fermi croise les niveaux de Landau chiraux ainsi que quelques niveaux de Landau non chiraux. Dans ce cas, les équations (4.22) et (4.23) ne sont plus valides, de même que les dispersions dérivées analytiquement dans la sous-section précédente. D'une part les fonctions de polarisation dépendent maintenant de μ et de b_0 . D'autre part, les niveaux de Landau non chiraux contribuent à la partie imaginaire des fonctions de

polarisation, engendrant ainsi des régions de continuum électron-trou dans l'espace (\mathbf{q}, ω) . Les modes propres de vibration se situant dans ces régions voient leur fréquences amorties proportionnellement au carré du couplage électron-phonon.

Dans un premier temps, nous étudions la situation où \mathbf{q} et \mathbf{B} sont parallèles (*i.e.* $\mathbf{q}_\perp = 0$) et $b_0 \ll \mu$, de telle sorte qu'on négligera l'influence de b_0 dans la dispersion. On pourra donc utiliser les expressions (4.17) et (4.19) pour les fonctions de polarisation. De plus, les formules analytiques [118] pour calculer (4.20) nous permettront de comprendre plus aisément nos calculs numériques. La densité spectrale de phonon à $\theta = 0$ et $b_0 = 0$ est représentée dans les figures (4.6) et 4.7. Les figures (4.6) (a) et (b) montrent qu'un anticroisement est toujours possible quand $B < B_{\text{QL}}$ et la condition requise reste $\omega_p(\mathbf{q} = 0) < \omega_0$. En effet, la fréquence de plasmon $\omega_p(\mathbf{q})$ est toujours une fonction monotone et croissante du moment $|\mathbf{q}|$. Cependant elle oscille autour de sa valeur à $B = 0$ ⁴ quand B augmente, comme on peut le voir sur la figure 4.7. De ce fait la condition d'existence de l'hybridation plasmon-phonon pour $B < B_{\text{QL}}$ se traduit par une condition sur le potentiel chimique,

$$|\mu \pm b_0| \lesssim \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \hbar \omega_0.$$

4. On trouve dans la littérature [26,27,118] les expression de la polarisation $\Pi_{VV}(\omega, \mathbf{q})$ à champ magnétique nul, ainsi que la fréquence plasmonique $\omega_p(B = 0) \simeq \sqrt{\frac{4}{3\pi}} \alpha \mu (1 + \mathcal{O}(\hbar v_F^2 \mathbf{q}^2 / \mu^2))$.

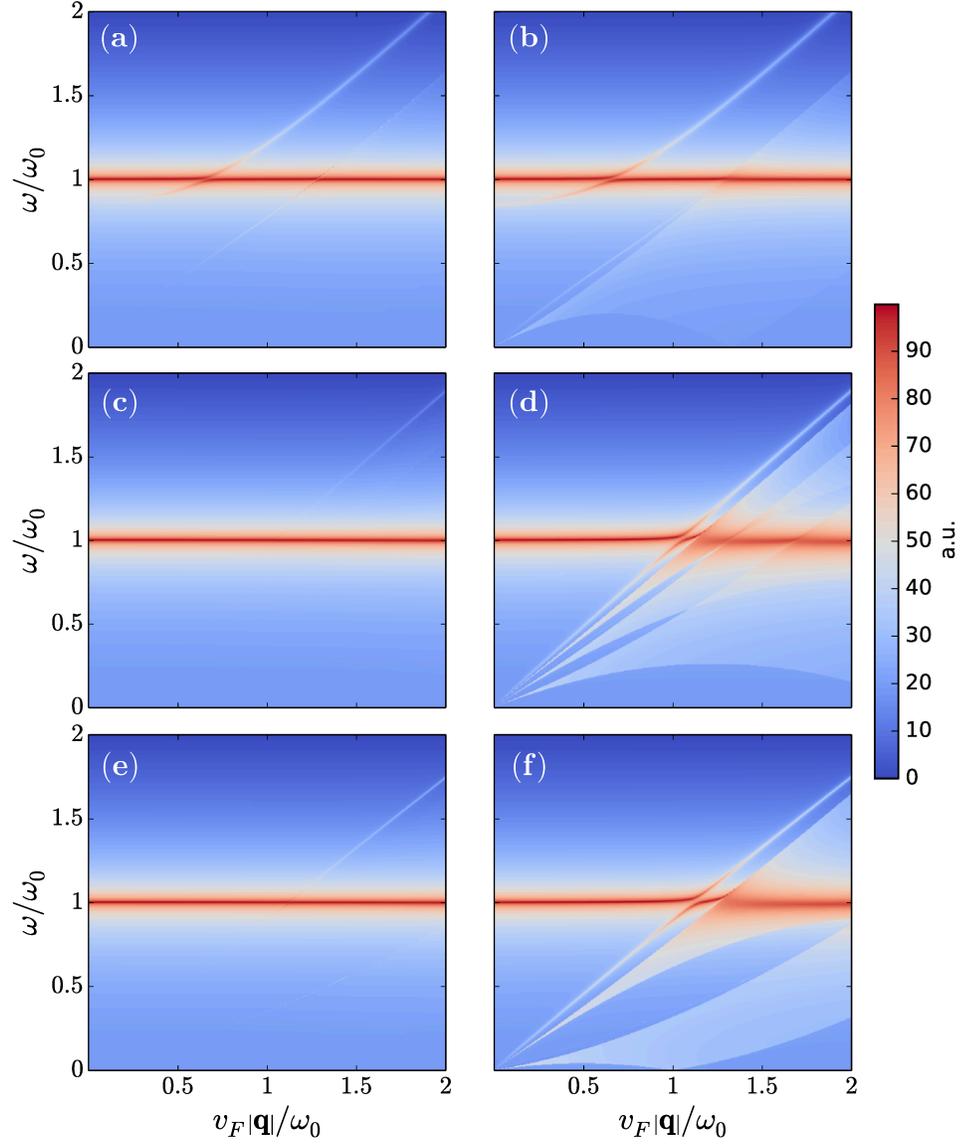


FIGURE 4.6 Densité spectrale (4.29) en fonction de ω et de $|\mathbf{q}|$ pour un couplage purement scalaire (a,c,e) ou purement pseudoscalaire (b,d,f). L'échelle des couleurs est logarithmique. La vitesse de Fermi est 10^5m.s^{-1} . Les champs magnétiques et les énergies de Fermi sont 8T et 12meV (a,b), 20T et 30meV (c,d), 35T et 30meV (e,f). Les autres paramètres sont identiques à ceux utilisés pour la figure 4.3. Le lecteur notera que les zones bleues pâles correspondent aux continums électron-trou induits par les transitions intrabandes au sein des niveaux de Landau non chiraux.

Notons également que dans le cas particulier où $|\mu \pm b_0| \sim \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \hbar \omega_0$, on peut observer des anticroisements pour plusieurs valeurs de $B < B_{QL}$ à cause des oscillations de la fréquence de plasmon en-dessous de la limite quantique. Ceci offre donc la possibilité les oscillations

quantiques dans le spectre de phonons optiques. Ce cas est illustré sur la figure 4.7 (b). Étant donné que cette condition dépend finement de paramètres non contrôlables, tels la fréquence de phonon ω_0 , la permittivité ϵ_∞ ou le potentiel chimique, la situation ci-mentionnée n'est en générale pas attendue.

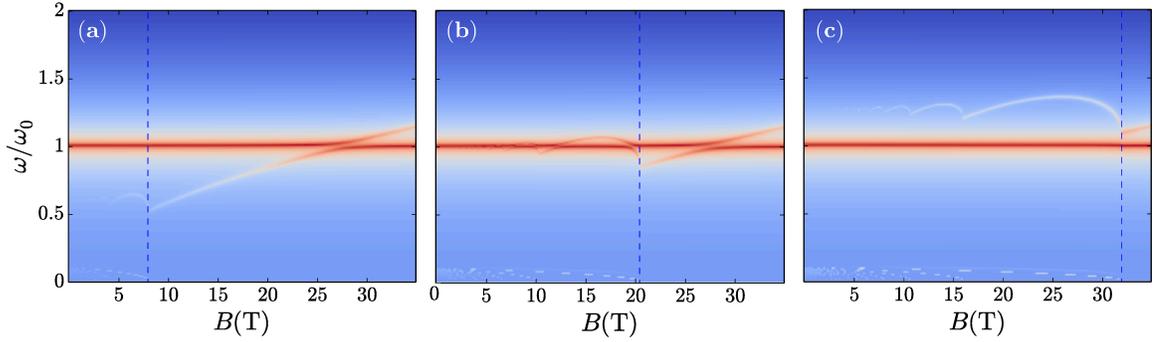


FIGURE 4.7 Densité spectrale (4.29) en fonction de ω et du champ magnétique à $\theta = 0$ et $b_0 = 0$, et $v_F |\mathbf{q}| = \omega_0/10$. L'échelle des couleurs est logarithmique. Les énergies de Fermi sont 10meV (a), 16meV (b) et 20meV (c). Les autres paramètres sont identiques à ceux de la figure 4.6. Le cutoff N_Λ sur les niveaux de Landau est choisi dépendant de B . Il correspond au dernier niveau croisant le cutoff en énergie Λ . Pour chaque valeur de B , on calcule donc la polarisation pour n allant de 0 à $N_\Lambda = \Lambda^2 / (2\hbar^2 v_F^2 \ell_B^{-2})$ avec le choix $\Lambda = 10\hbar\omega_0$. Les lignes pointillées verticales indiquent la valeur $B = B_{QL}$.

Si le potentiel chimique est important, en particulier si $|\mu| \gg \hbar\omega_0$, la fréquence du plasmon est haussée bien au-dessus de la fréquence du phonon et l'hybridation plasmon-phonon devient négligeable. Malgré cela, des signatures non triviales de la structure électronique peuvent apparaître dans la dispersion des phonons. Notamment, si le couplage électron-phonon est pseudoscalaire (ce qui n'exclut pas que la partie scalaire du couplage soit nulle), un anticroisement peut apparaître dans la densité spectrale, juste au dessus du continuum électron-trou, comme on peut le remarquer des les figures 4.6 (d) et (f). Ceci n'est pas dû à l'apparition d'un nouveau mode de plasmon (*i.e.* un zéro de la fonction diélectrique), mais à des divergences logarithmiques de $\Pi_{VV}(\mathbf{q}, \omega)$ localisées à des fréquences⁵

$$\omega_{n^*}(\mathbf{q}) = v_F q_z \sqrt{1 - \frac{\Delta_{n^*}^2}{\mu^2} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{q_z}{\mu}\right)\right)}, \quad (4.40)$$

où Δ_n est défini dans l'équation (4.21) et $n^* \geq 1$ correspond aux niveaux de Landau croi-

5. Voir les équations (14), (15) et (16) de [118] pour l'expression de la partie réelle de la polarisation $\Pi_V^{(1D)}$. En particulier, la divergence ci-mentionnée provient du terme f_3 qui diverge lorsque $a_1 = \sqrt{1 - 4\Delta^2 / (\hbar^2 \omega^2 - \hbar^2 v_F^2 q_z^2)} (\omega/v_F) + 2\sqrt{\mu^2 - \Delta^2} / (\hbar v_F) + q_z = 0$

sant le potentiel chimique. Ces divergences, qui proviennent des transitions intrabandes, disparaissent une fois la limite quantique atteinte (*i.e.* $\Delta_1 > \mu$) à cause du blocage de Pauli. Précisons également que si plusieurs niveaux de Landau non chiraux sont au niveau de Fermi, il est possible que seul l'anticroisement avec $\omega_1(\mathbf{q})$ soit visible puisque les autres sont amortis par les régions de continuum électron-trou engendré par les niveaux de Landau d'indice $n \geq 2$ (voir figure 4.6 (d)). La correction électronique à la dispersion d'un phonon avec couplage pseudoscalaire contient Π_{VV} , dont la divergence cause un nouveau pic dans la fonction spectrale et l'anticroisement remarqué précédemment. Pour un couplage purement scalaire, la correction est proportionnelle à Π_{VV}/ε (voir équation (4.30)) qui reste fini lorsque Π_{VV} diverge, ce qui explique que l'anticroisement soit supprimé dans ce cas. Cela est montré sur les figures 4.6 (c) et (e), à comparer respectivement avec (d) et (f) qui présentent les mêmes paramètres excepté un couplage pseudoscalaire. Les calculs présentés ici ont été effectués à température nulle. Cependant, les contributions des niveaux de Landau peuvent être influencées par la température. Notamment, on a observé numériquement que la visibilité des pics en ω_n^* (équation (4.40)) n'est possible que si la température est inférieure à l'espacement en énergie entre les niveaux de Landau, de l'ordre de $1\text{meV} \times \sqrt{B(\text{T})}$ pour les deux premiers niveaux non chiraux.

Jusqu'ici, nous nous sommes concentrés sur le cas où $\mathbf{B} \parallel \mathbf{q}$ et où $b_0 = 0$. Dans le cas contraire, l'équation de dispersion (4.28) est inchangée mais on doit modifier les polarisations. Si on prend $b_0 \neq 0$, on doit utiliser les formules (4.25) et (4.26) pour calculer les fonctions de polarisations. Cela n'a pas d'effet qualitatif important sur la dispersion. On notera cependant que la variation de ω_p avec $B < B_{\text{QL}}$ peut différer du cas exposé dans les figures 4.7. Il est par exemple possible d'avoir à la fois $|\mu - b_0| < \Delta_1$ mais $|\mu + b_0| > \Delta_1$, auquel cas les niveaux non chiraux gauche ($|\Psi_{n-}\rangle$) sont au-dessus du niveau de Fermi tandis que les droites ($|\Psi_{n+}\rangle$) sont en-dessous. Dans ce cas, on est d'une part dans une limite quantique effective pour les états $|\Psi_{n+}\rangle$ et la contribution intrabande du niveau chiral $|\Psi_{0+}\rangle$ fait augmenter ω_p de façon monotone avec B . D'autre part, les croisements entre les niveaux $|\Psi_{n-}\rangle$ et l'énergie de Fermi procurent les oscillations montrées sur la figure 4.8. On remarquera de plus chaque continuum qui était associé à deux niveaux de Landau symétriques (et de chiralités opposées) se dédouble en deux continus séparés en fréquence de b_0/\hbar . On peut voir ceci en comparant les figures 4.6 (d) et 4.8 (droite).

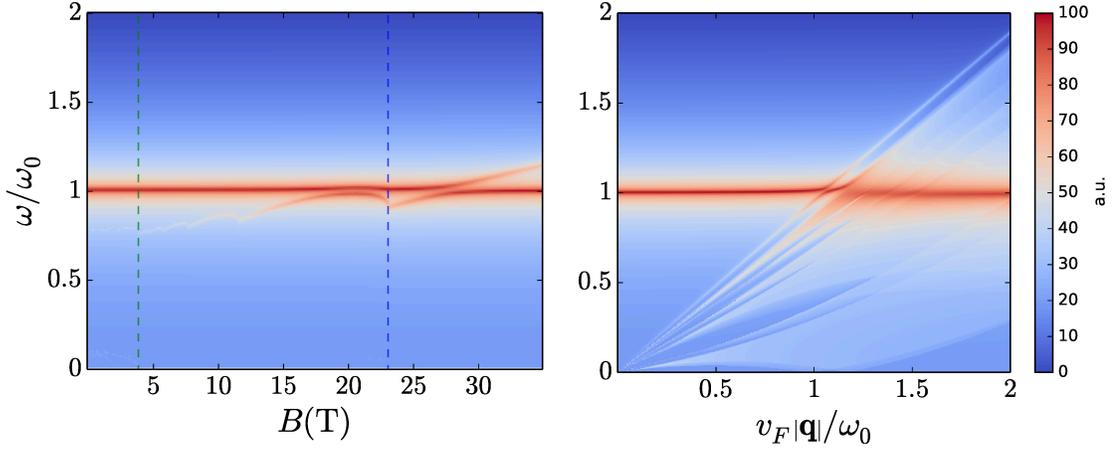


FIGURE 4.8 Gauche : densité spectrale (4.29) en fonction de ω et du champ magnétique à $\theta = 0$, $b_0 = 5\text{meV}$ et $\mu = 12\text{meV}$. Les autres paramètres sont identiques à ceux de la figure 4.7. L'échelle des couleurs est logarithmique. La ligne pointillée verte indique la valeur de B telle que $|\mu - b_0| = \Delta_1$ tandis que la bleue indique $|\mu + b_0| = \Delta_1$ (ce qui est équivalent à $B = B_{\text{QL}}$). Droite : densité spectrale $A(\omega, |\mathbf{q}|)$ avec les mêmes paramètres que pour la figure 4.6, excepté une séparation en énergie des noeuds de Weyl non nulle : $b_0 = 2\text{meV}$.

Pour $\theta \neq 0$, les formules (4.17-4.20) ne sont plus valides et (4.14-4.15) doivent être utilisées à la place (alliées avec (4.25-4.26) si $b_0 \neq 0$). Cela apporte deux changements. D'une part la fréquence de plasmon diminue de pair avec $\cos \theta$, similairement à ce qui a été observé dans la limite quantique. D'autre part, toutes les transitions interbandes $(n, \lambda) \rightarrow (m \neq n, \lambda')$ sont maintenant permises, ce qui engendre de nouvelles régions de continuum électron-trou pouvant amortir la fréquence des phonons. Cependant, il est possible de montrer à partir des équations (4.14) et (4.16) que les transitions $n \rightarrow m \neq n$ sont plus faibles que les transitions $n \rightarrow n$ d'un facteur $(\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2)^{|n-m|}$.

4.3.2 Phonons acoustiques

Dans la section précédente, on a identifié l'hybridation plasmon-phonon induite par un champ magnétique comme une signature des fermions de Weyl. Cette hybridation requiert que la fréquence du phonon sans interaction (ω_0) devienne égale à la fréquence du plasmon pour une certaine valeur de champ magnétique ou de moment du phonon. Une telle condition est très difficilement réalisable avec les phonons acoustiques à grande longueur d'onde. En effet, la vitesse du son c_s est bien inférieure à v_F . En particulier dans la limite quantique, situation où l'hybridation est potentiellement la plus forte, la condition

$c_s |\mathbf{q}| = \omega_p(\mathbf{q})$ ne peut être satisfaite que si $|\cos \theta| < c_s/v_F \sim 10^{-2}$, ce qui surpasse la précision atteignable des expériences actuelles.

Dans cette section, on présente une théorie sur la modification de la vitesse du son par l'interaction avec les fermions de Weyl, sous la motivation des travaux de [119] et de [120]. On montrera notamment que l'évolution de la vitesse du son sous l'application d'un champ magnétique reflète d'une part la présence des niveaux de Landau chiraux, et exhibe d'autre part des oscillations quantiques propres aux fermions de Weyl.

On se concentre sur un couplage électron-phonon purement scalaire et de type piézo-électrique, qui est suspecté d'être le couplage dominant dans les expériences de mesures ultrasons actuelles. Dans un isolant piezoélectrique, la vitesse du son est donnée par [121,122]

$$c_s = \sqrt{c_0^2 + \frac{1}{\rho_u} \frac{d^2}{\varepsilon_\infty}}, \quad (4.41)$$

où c_0 est la vitesse du son en absence de piézoélectricité (due seulement aux forces élastiques du réseau) et d est la constante de couplage piézoélectrique⁶. En présence d'électrons de conduction, on doit rajouter un couplage $|G_0|^2 = (ed/\varepsilon_\infty)^2/\rho$ (voir équation (4.28)) pour obtenir

$$\omega^2 = \mathbf{q}^2 \left(c_0^2 + \frac{1}{\rho_u} \frac{d^2}{\varepsilon_\infty} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right), \quad (4.42)$$

expression qui a été obtenue par une approche différente dans [121, 122]. L'expression (4.42) indique que la vitesse du son diminue d'autant plus que le système est conducteur. Du fait que les phonons acoustiques ont des fréquences petites comparées au taux de diffusion Γ des électrons par des impuretés, on doit prendre le temps de vie électronique fini dans la fonction diélectrique apparaissant dans (4.42). L'approche la plus simple, et communément employée, et de remplacer ω par $\omega + i\Gamma$, ce qui malheureusement viole la conservation du nombre de particules. À la place, nous utilisons les résultats de [123] qui se traduisent dans la fonction de polarisation retardée :

$$\Pi_{VV}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{(\omega + i\Gamma) \Pi_{VV0}(\mathbf{q}, \omega + i\Gamma) \Pi_{VV0}(\mathbf{q}, 0)}{i\Gamma \Pi_{VV0}(\mathbf{q}, \omega + i\Gamma) + \omega \Pi_{VV0}(\mathbf{q}, 0)}, \quad (4.43)$$

où $\Pi_{VV0}(\mathbf{q}, \omega + i\Gamma)$ est la fonction de polarisation calculée en absence de désordre (c'est-à-dire avec les équations (4.8) et (4.9)). Pour $\omega \gg \Gamma$, (4.43) donne le même résultat que l'approximation $\omega \rightarrow \omega + i\Gamma$. Par la suite, on considérera des phonons acoustiques pour lesquels $\Gamma \gg v_F |\mathbf{q}| \gg \omega \sim c_s |\mathbf{q}|$, et $\mathbf{q}^2 \ell_B^2 \ll 1$. Dans ce régime, l'équation (4.43) diffère drastiquement de l'approximation qui ne conserve pas le nombre de particules. On supposera

6. Généralement, c'est un tenseur appelé *tenseur électromécanique*. On supposera ici que c'est une constante.

de plus que la largeur de bandes induite par le désordre est inférieure à la séparation entre les premiers niveaux de Landau ($v_F \ell_B^{-1} \gg \Gamma$, ou $\hbar\Gamma < 5\sqrt{B(T)}\text{meV}$ pour $v_F \simeq 2 \times 10^5\text{m/s}$). Cela nous permettra de distinguer les propriétés dues à la séparations des niveaux de Landau dans la vitesse du son.

On commencera par montrer l'impact des niveaux de Landau chiraux sur la vitesse du son en se plaçant dans la limite quantique, puis on étudiera les oscillations quantiques dues aux croisements des niveaux de Landau non chiraux.

4.3.2.1 Limite quantique

Dans ce régime, $\Pi_{VV0}(\mathbf{q}, \omega)$ est donné par l'équation (4.22). Soulignons que contrairement à $\Pi_{VV0}(\mathbf{q}, \omega + i\Gamma) \simeq \Pi_{VV0}(\mathbf{q}, i\Gamma) \propto \cos^2 \theta$, $\Pi_{VV0}(\mathbf{q}, 0)$ est indépendant de l'angle θ entre le moment \mathbf{q} et le champ magnétique. Supposons $c_s/v_F \gg v_F |\mathbf{q}| / \Gamma$, ce qui est particulièrement plausible pour des phonons des très grande longueur d'onde ($|\mathbf{q}| \sim 100\text{cm}^{-1}$ [120]). Les équations (4.22) et (4.43) mènent alors à la fonction diélectrique

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) \simeq 1 + \left(1 + i\frac{\Gamma}{\omega}\right) \frac{2\alpha l^2 \cos^2 \theta}{\pi \ell_B^2},$$

où $l \equiv v_F/\Gamma$ est le libre parcours moyen électronique. Si $\sqrt{\alpha}l \cos \theta / \ell_B \gg \sqrt{\omega/\Gamma}$, la partie imaginaire de ε est bien plus grande que sa partie réelle (elle-même supérieure à 1). Dans ce cas, la partie piézoélectrique de la vitesse du son est fortement écrantée par les niveaux de Landau chiraux et $c_s \simeq c_0$. Inversement, si $\sqrt{\alpha}l \cos \theta / \ell_B \lesssim \sqrt{\omega/\Gamma}$, alors $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) \simeq 1$ et la vitesse du son tend vers c_s définie en (4.41) ($c_s > c_0$). Le fait que l'on peut supprimer la contribution des niveaux de Landau chiraux en variant θ est une marque de l'anomalie chirale. En pratique, pour $|\mathbf{q}| \sim 100\text{cm}^{-1}$, Γ/ω est de l'ordre de 10^5 . On peut alors s'attendre à trouver une vitesse du son presque égale à c_0 pour tout θ sauf dans une région très resserrée autour de $\pi/2$. Comme montré sur la figure 4.9, cette région s'élargit si le matériau est moins propre. C'est également le cas pour un moment de phonon plus grand.

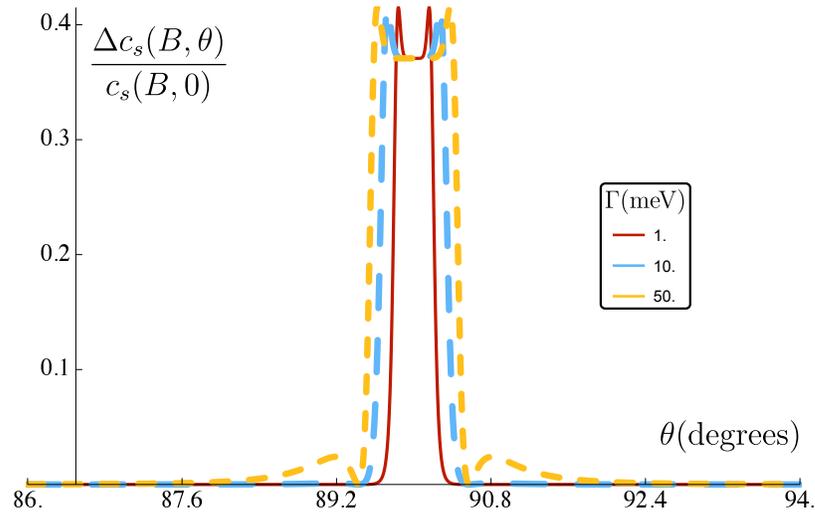


FIGURE 4.9 Dépendance de la vitesse du son $c_s(\theta) \equiv |\partial\omega/\partial\mathbf{q}|$ en fonction de l'angle entre le moment du phonon acoustique et le champ magnétique, dans la limite quantique, pour trois valeurs différentes du taux de diffusion Γ . L'axe vertical expose $\Delta c_s(\theta) = c_s(\theta) - c_s(0)$. Le pic étroit à $\theta = \pi/2$ provient des niveaux de Landau chiraux. Sur cette figure, on a choisi $B = 10\text{T}$.

4.3.2.2 Champ intermédiaire et oscillations quantiques

En dehors de la limite quantique, le nombre de niveaux de Landau interceptant le potentiel chimique varie avec le champ magnétique. Cela se traduit en oscillations quantiques mesurables dans la vitesse du son avec des mesures ultrasonores de haute précision.

Du fait que l'amplitude des oscillations dépend fortement des paramètres microscopiques, notamment d , ε_∞ et c_0 , il est difficile de faire une prédiction quantitative générale. Cependant, la figure 4.10 montre que l'enveloppe des oscillations croît en $B^{3/2}$.

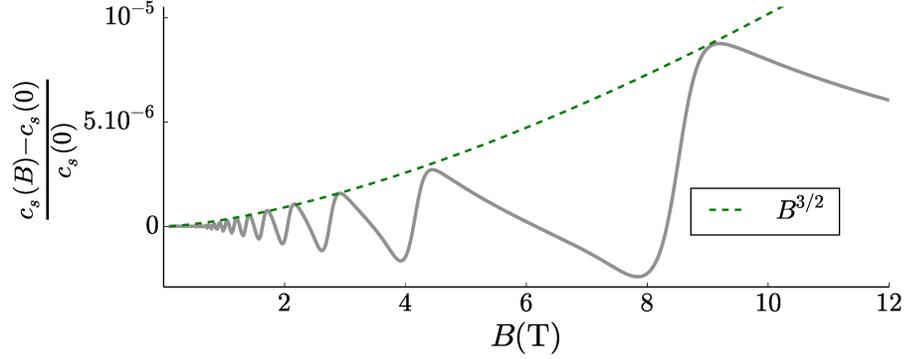


FIGURE 4.10 Oscillations quantiques dans la vitesse du son, dans le cas où le champ magnétique est parallèle à la direction de propagation de l'onde acoustique. Dans l'axe vertical, $c_s(B)$ est la vitesse du son calculée à une amplitude de champ B , et $c_s(0)$ est la vitesse du son à champ nul, extrapolée du calcul numérique quand $B \rightarrow 0$. La vitesse du son est ici définie comme $|\partial\omega/\partial\mathbf{q}|$ où ω est donnée par l'équation (4.42). L'enveloppe des oscillations (en pointillés) varie comme $B^{3/2}$. Les paramètres utilisés sont $|\mathbf{q}| = 1000\text{cm}^{-1}$, $\mu = 10\text{meV}$, $\Gamma = 1\text{meV}$, $v_F = 10^5\text{m/s}$, $c_0 = 2 \times 10^3\text{m/s}$, $\rho_u = 10^4\text{kg.m}^{-3}$, $\varepsilon_\infty = 30\varepsilon_0$, $d = 3.3\text{C.m}^{-2}$ et $k_B T = 0.1\text{meV}$.

Cette variation provient de la partie statique de la fonction de polarisation comme on va le montrer. Pour cela, on utilise en premier lieu la formule simple de $\Pi_{VV0}(\mathbf{q}, \omega)$ (équation (4.22)) dans la limite quantique, qui permet de faire les comparaisons suivantes

$$\begin{aligned}
 \left| \frac{\text{Re}\Pi_V}{\Pi_V^0} \right| &\sim \frac{v^2 q^2}{\Gamma^2} \ll 1 \\
 \left| \frac{\text{Im}\Pi_V}{\Pi_V^0} \right| &\sim 2 \frac{v^2 q^2 \omega}{\Gamma^2 \Gamma} \ll 1 \\
 \left| \left(\frac{\Gamma}{\omega} \right)^2 \frac{\text{Re}\Pi_V}{\Pi_V^0} \right| &\sim \frac{v^2}{c_s^2} \sim 2.5 \times 10^3 \\
 \left| \frac{\Gamma \text{Im}\Pi_V}{\omega \text{Re}\Pi_V} \right| &\sim 2
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

où on a utilisé les notations simplifiées $\Pi_V \equiv \Pi_{VV0}(\mathbf{q}, \omega + i\Gamma)$ et $\Pi_V^0 \equiv \Pi_{VV0}(\mathbf{q}, 0)$. Ces comparaisons restent valides hors de la limite quantique puisque les quantités Π_V et Π_V^0 gardent les mêmes ordres de grandeur. Ainsi on trouve

$$\Pi_{VV}(\mathbf{q}, \omega) \simeq \frac{\frac{\Gamma}{\omega} \text{Re}\Pi_V \left(\frac{\Gamma}{\omega} \frac{\text{Re}\Pi_V}{\Pi_V^0} + i \right)}{1 + \frac{\Gamma^2}{\omega^2} \left(\frac{\text{Re}\Pi_V}{\Pi_V^0} \right)^2}, \tag{4.45}$$

et par suite

$$\operatorname{Re} \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right] \simeq -\frac{1}{V_{\mathbf{q}} \Pi_V^0}. \quad (4.46)$$

Par ailleurs on peut montrer que pour $\mathbf{q} \parallel \mathbf{B}$,

$$\begin{aligned} \Pi_V(q_z, 0) = & -\frac{\ell_B^{-2}}{2\pi^2 \hbar v_F} \left\{ 1 + \right. & (4.47) \\ & + 2 \sum_{n \geq 1} \left[\frac{\sqrt{\mu^2 - \Delta_n^2}}{\Delta_n + \mu} + \left(\frac{1}{6} - \frac{(4\mu + 5\Delta) \sqrt{\mu^2 - \Delta_n^2}}{24(\Delta_n + \mu)^2} \right) \left(\frac{\hbar v_F q_z}{\Delta_n} \right)^2 + \mathcal{O} \left[\left(\frac{\hbar v_F q_z}{\Delta_n} \right)^4 \right] \right] \\ & \left. + 2 \sum_{n \geq 1} \frac{\Delta_n}{\hbar v_F q_z} \ln \left(\frac{q_z + 2k_n}{|q_z - 2k_n|} \right) \right\}, \end{aligned}$$

avec $\Delta_n = \sqrt{2n\hbar v_F \ell_B^{-1}}$ et $\hbar v_F k_n = \operatorname{Re} \sqrt{\mu^2 - \Delta_n^2}$. La troisième ligne de (4.47) contient des termes logarithmiques qui divergent quand $\Delta_n^2 = \mu^2 + \mathcal{O}(q_z^2)$, c'est-à-dire à chaque fois que le potentiel chimique croise un niveau de Landau supplémentaire. Ces termes dominent les autres en dehors de la limite quantique. Naturellement, la température finie empêche ces divergences et diminue l'amplitude des pics correspondant (voir figure 4.11).

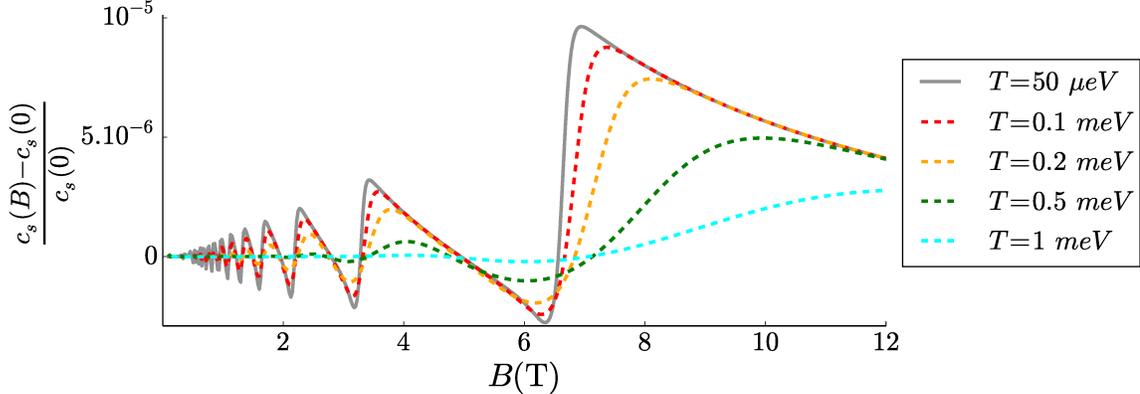


FIGURE 4.11 Oscillations dans la vitesse du son identiques à celles présentées dans la figure (4.10) mais calculées à différentes températures. On remarque que l'amplitude des pics d'oscillations diminue quand la température augmente jusqu'à ce que les oscillations deviennent difficilement visibles quand $T \sim 1 \text{ meV} \sim \hbar v_F \ell_B^{-1}$.

On a également vérifié numériquement que le terme linéaire dans le champ magnétique, qui provient des niveaux de Landau chiraux, s'annule avec des termes de la somme sur les contributions des autres niveaux de Landau. Cette annulation est due à la somme

$$2 \sum_{n \geq 1} \frac{\sqrt{\mu^2 - \Delta_n^2}}{\Delta_n + \mu} = -1 + \mathcal{O}(B).$$

Π_V^0 peut donc s'écrire $\Pi_V^0 \simeq A_0 + A_1 \times B^{3/2}$ où A_0 et A_1 sont des constantes. Ainsi, c'est bien la dépendance en $B^{3/2}$ de l'enveloppe des oscillations qui domine dans la vitesse du son. Cette propriété caractéristique marque la présence de Fermions de Weyl. Notons de plus que, dans la section suivante, on montrera analytiquement que cette dépendance en $B^{3/2}$ des pics de $\Pi_{VV}(\mathbf{q}, \omega)$ ainsi que l'annulation du terme linéaire en B sont aussi valides dans le régime où $\omega \gg v_F q_z$.

4.3.3 Polarisation à bas champ et lien avec les résultats du chapitre 3

Comme nous l'avons mentionné dans la sous-section 4.2.2.2, l'action effective des phonons et leurs équations du mouvement obtenues dans ce chapitre et le précédent sont formellement identiques. On avait cependant calculé la fonction diélectrique et la fonction de polarisation à champ magnétique nul, ce qui est valide en réponse linéaire à faible champ, puisque l'ordre le plus bas du développement de Π_{VV} en B est deux (si l'effet des oscillations quantiques est négligé). On avait ainsi négligé l'importance de Π_{VV} dans la dynamique des phonons puisque seul Π_{VA} (qui était entrainé dans l'expression de la charge de Born effective $\delta\mathbf{Q}$ du chapitre précédent) contenait un pôle. Cette approximation de réponse linéaire n'est plus valable à fort champ puisque Π_{VV} possède le même pôle que Π_{VA} dans ce cas. Il est également intéressant de noter que le calcul à fort champ présenté dans ce chapitre donne un pôle de Π_{VA} à $\omega^2 = v_F^2 q_z^2$ au lieu du pôle en $\omega^2 = v_F^2 \mathbf{q}^2$ trouvé dans $\delta\mathbf{Q}$. On peut retrouver cette différence entre les régimes à fort et faible champ magnétique en faisant le développement du propagateur électronique au premier ordre en B (donné dans [116]) ou bien en prenant la limite à faible champ de l'expression donnée par [124] (en prenant une masse des fermions nulle) de Π_{VA} .

Afin de justifier que le travail présenté au chapitre 3 est valide en réponse linéaire en B , on montre que Π_{VV} est indépendant du champ magnétique, au premier ordre. Pour cela, on simplifie le problème en choisissant le régime $\theta = 0$, $b_0 = 0$, et $|\mathbf{q}| \ll \omega \ll \mu$. Dans ce cas, l'équation (4.20) alliée aux résultats de [118] nous donne

$$\Pi_{VV} = \frac{\mu^2}{2\pi^2 (\hbar v)^3} \frac{v^2 q_z^2}{\omega^2} \delta_B \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{E(\frac{1}{\delta_B})} \sqrt{1 - n\delta_B} \right] + \mathcal{O}\left(\frac{v_F^4 q_z^4}{\omega^4}\right), \quad (4.48)$$

avec $\delta_B \equiv 2\hbar^2 v_F^2 \ell_B^{-2} / \mu^2$. Le premier terme, qui est linéaire en B , correspond aux niveaux de Landau chiraux tandis que le second inclue la somme sur tous les autres niveaux. Afin de développer le résultat (4.48) en puissance de B , on fixe $\delta_B = 1/N$, où N est un entier

strictement positif. À partir de (4.48), on obtient alors

$$\Pi_{VV} = \frac{2\mu^2}{3\pi^2 (\hbar v)^3} \left\{ \frac{v^2 q_z^2}{\omega^2} \left[1 + \frac{3\zeta(-\frac{1}{2})}{2N^{3/2}} + \frac{1}{16N^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{5/2}}\right) \right] + \mathcal{O}\left(\frac{v_F^4 q_z^4}{\omega^4}, \frac{\hbar^2 v_F^2 q_z^2}{\mu^2}\right) \right\} \quad (4.49)$$

où ζ est la fonction zeta ($\zeta(-1/2) \simeq -0.21$). La contribution non analytique provenant des niveaux de Landau chiraux a été supprimée, et l'amplitude des pics croît en $B^{3/2}$.

Dans la limite $\mu \rightarrow 0$, on ne considère que les contributions interbandes à la polarisation, ce qui donne

$$\Pi_{VV}(\mu = 0) = -\frac{1}{6\pi^2} \frac{q_z^2}{\hbar v_F} \left(\frac{5}{3} + \ln \left| \frac{\Lambda^2}{\omega^2 - q_z^2} \right| - i\pi \Theta(\omega - q_z) \right) + \mathcal{O}(B^2) \quad (4.50)$$

où Λ est le cutoff en énergie et Θ est la fonction de Heaviside.

Contrairement à Π_{VV} , Π_{VA} garde son comportement singulier à faible champ, notamment sa dépendance en B ainsi que le pôle en $\omega = v_F |\mathbf{q}|$, ce qui est attendu puisque Π_{VA} correspond au diagramme VVA à l'origine de l'anomalie chirale, dans la théorie de réponse linéaire en champ magnétique.

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons présenté une étude théorique de la dynamique du réseau dans les semimétaux de Weyl sous champ magnétique. L'objectif initial était de prédire une empreinte observable de l'anomalie chirale présente dans les semimétaux de Weyl sur la dynamique du réseau cristallin. Pour cela, nous avons étudié l'effet des fermions de Weyl sur les phonons par l'intermédiaire du couplage électron-phonon, sous l'application d'un champ magnétique statique et uniforme. Nous avons travaillé avec un modèle simplifié d'un semimétal de Weyl en ne considérant que la dispersion linéaire des électrons de basse énergie. De plus, nous n'avons considéré que deux types de couplages : d'une part un couplage scalaire qui correspond à une fluctuation du potentiel chimique, d'autre part un couplage pseudoscalaire qui correspond à la fluctuation de la différence en énergie entre deux noeuds de Weyl de chiralités opposées. Cette dernière forme de couplage ne peut être apportée que par un phonon pseudoscalaire.

Dans le chapitre 3, nous avons analysé l'influence du champ magnétique sur les phonons optiques à grande longueur d'onde par l'intermédiaire d'une interaction entre deux champs vecteurs et un champ axial ou pseudoscalaire. Ce couplage apparaît dans l'équation du mouvement des phonons pseudoscaires par l'intermédiaire du diagramme triangle VVA. En particulier, si on néglige le couplage électron-phonon de type vecteur ainsi que la partie dynamique du champ magnétique, seul la partie longitudinale du diagramme contribue. Ce diagramme, à l'origine de l'anomalie chirale en théorie des perturbations, donne lieu à une charge de Born effective induite par le couplage électron-phonon et le champ magnétique. Par conséquent, l'anomalie chirale peut être à l'origine d'une activité infrarouge induite par champ magnétique. La susceptibilité électrique correspondante a la particularité d'avoir une seule composante non nulle, et ce dans la direction du champ magnétique appliqué. Additionnellement, la charge de Born induite comporte un pôle qui est essentiel à l'anomalie chirale, mais ce pôle n'est pas atteignable avec des mesures infrarouges. Cependant, il induit un anticroisement dans la dispersion en fréquence du phonon optique, qui peut s'observer avec des mesures Raman de haute précision. L'amplitude de cet anticroisement augmente

avec le champ magnétique et est maximale lorsque celui-ci est parallèle à la direction de propagation du phonon. Enfin, la partie non longitudinale du diagramme VVA engendre un tenseur Raman dont la résonance logarithmique, bien que non liée à l'anomalie chirale, est due à la dispersion particulière des fermions de Weyl.

Dans ce chapitre, nous avons choisi un semimétal avec un potentiel chimique nul, et nous avons négligé le décalage en énergie entre les noeuds de Weyl de chiralités opposées. Dans un tel système, le mode de plasmon est inexistant et l'écrantage ne joue pas de rôle qualitatif dans la dispersion des phonons.

Dans le chapitre 4, afin d'étendre l'étude à un champ fort et un potentiel chimique fini, nous nous sommes placés dans le régime des niveaux de Landau pour les états électroniques. Cela a permis d'inclure le champ magnétique de façon non perturbative dans les fonctions de réponse qui entrent dans la dispersion des phonons. Dans ce régime, aussi bien les couplages scalaire que pseudoscalaire mènent à des fonctions de réponse résonantes. Dans ce cas, on a vu que les pôles des fonctions de réponse sont dus à la présence des niveaux de Landau chiraux. Il en résulte que l'anticroisement auparavant associé au pôle de la fonction de réponse VVA est maintenant déterminé par le mode de plasmon. Cette hybridation plasmon-phonon optique peut donc apparaître pour tout type de phonon, mais seul un couplage pseudoscalaire permet une hybridation résonante pour un phonon de moment nul ou très faible. C'est cette dernière caractéristique qui peut être associée à l'existence de l'anomalie chirale, les autres étant dues à la dispersion particulière des fermions de Weyl sous champ magnétique. Dans la limite quantique, l'hybridation est contrôlée par le champ magnétique et le moment du phonon, et le potentiel chimique n'influence pas qualitativement la dispersion des phonons. Pour un champ magnétique en-dessous de la limite quantique, des effets supplémentaires apparaissent dans la dispersion du phonon optique pseudoscalaire. Notamment à forts champ et potentiel chimique, on observe des anticroisements causés par les contributions intrabandes des niveaux de Landau non chiraux aux fonctions de réponse. Ces derniers se distinguent facilement de l'anticroisement plasmon-phonon puisqu'ils ont lieu dans la région $\omega < v_F q_z$, contrairement au premier qui se situe à $\omega > v_F q_z$.

L'hybridation entre ondes acoustiques et le plasmon est quasiment inexistante. Cependant, les fermions de Weyl peuvent laisser des traces non triviales dans la vitesse du son. Nous nous sommes concentrés sur la modification de la vitesse de groupe d'un phonon acoustique due à l'interaction piezoélectrique. On a montré qu'on peut annuler la contribution des niveaux de Landau chiraux à la vitesse du son en plaçant le champ magnétique perpendiculaire à la direction de propagation du son. Dans la limite quantique, où la fonction diélectrique est dominée par les niveaux chiraux, on peut ainsi passer de la vitesse du son

d'un système métallique où la contribution piézoélectrique à la vitesse du son est totalement écrantée par les électrons dans les niveaux de Landau chiraux, à celle d'un système isolant (c'est-à-dire sans écrantage de la piézoélectricité des électrons de conduction) en plaçant le champ magnétique perpendiculaire à la propagation de l'onde acoustique. Hors de la limite quantique, à faible champ, les niveaux de Landau non chiraux laissent des oscillations quantiques dans la variation de la vitesse du son en fonction du champ magnétique. L'amplitude de ces oscillations quantiques présente une évolution caractéristique en $B^{3/2}$.

La formulation utilisée dans le chapitre 4 est à priori valide pour n'importe quelle amplitude du champ magnétique, à condition d'avoir un matériau sans trop de désordre afin que la quantification des niveaux de Landau reste pertinente. Ces conditions ne sont en général pas applicables à trop faible champ magnétique. Il pourrait donc être intéressant dans un projet futur d'étudier l'influence du champ magnétique dans un régime semi-classique, dans une approche similaire à [62] mais appliquée à la dynamique du réseau. L'idée serait de combiner les formalismes de [62] et [125].

Pour compléter nos calculs effectués dans le cadre d'un modèle jouet, il serait très utile de calculer les différents types de couplages électron-phonon dans des semimétaux de Weyl réalistes. Notamment, nous serions intéressés de connaître les amplitudes typiques que pourrait prendre le couplage pseudoscalaire dans différents matériaux, couplage qui a pris une importance particulière dans l'influence de l'anomalie chirale sur les phonons. Également, le calcul *ab-initio* pourrait permettre d'étudier de façon plus précise le tenseur Raman et les contributions résonantes des fermions de Weyl discutées au chapitre 3.

Annexes

A. Robustesse du pôle de l'anomalie chirale avec le cutoff ultra-violet

Dans la section (3.2.3), nous avons utilisé les résultats de physique de haute énergie afin d'en extraire le pôle en $1/q^2$ directement lié à l'anomalie chirale. Cependant, il faut prendre en compte qu'en matière condensée, le cutoff est fini à l'inverse de la situation en physique des particules. Concrètement, nous devons prendre en compte un cutoff en énergie Λ qui délimite la zone de la zone de Brillouin dans laquelle la dispersion de type fermion de Weyl est valide. Nous allons donc dériver le résultat (3.32) en prenant en compte un cutoff. On va pouvoir ainsi montrer que le diagramme VVA longitudinal se décompose en deux termes : l'un contient le pôle en $1/q^2$ et l'autre tend vers 0 quand $q^2/\Lambda^2 \rightarrow 0$.

Comme nous l'avons fait dans le chapitre (3), nous considérons une température et un potentiel chimique nul. De plus, afin de présenter le calcul de la façon la plus simple, on utilisera une forme de $T_{\alpha\mu\nu}(k, k')$ légèrement différente de (3.32) mais équivalente à une translation près :

$$T_{\alpha\mu\nu}(k, k') = \int_p \text{tr} \left[\frac{1}{\not{p}-\not{l}} \gamma^5 \gamma_\alpha \frac{1}{\not{p}+\not{l}} \gamma_\mu \frac{1}{\not{p}-\not{r}} \gamma_\nu \right] \text{with} \begin{cases} l = \frac{k+k'}{2} = \frac{q}{2} \\ r = \frac{k-k'}{2} \end{cases} \quad (4.51)$$

et $\not{p} \equiv \gamma^\lambda p_\lambda$. Pour la partie longitudinale, il suffit de calculer $q^\alpha T_{\alpha\mu\nu}(k, k')$. Pour cela, on commence par utiliser l'astuce $(\not{p}-\not{l})^{-1} 2l (\not{p}+\not{l})^{-1} = (\not{p}-\not{l})^{-1} - (\not{p}+\not{l})^{-1}$ puis l'invariance de $T_{\alpha\mu\nu}$ sous l'échange des indices μ et ν : $T_{\alpha\mu\nu}(k, k') = T_{\alpha\nu\mu}(k, k') + T_{\alpha\nu\mu}(k', k)$. Ensuite, on

effectue la trace sur les matrice de Dirac pour obtenir

$$q_\alpha T^{\alpha\mu\nu}(k, k') = 4i \int_{p < \Lambda} [f_1(p) - f_1(p+k)] + [f_2(p) - f_2(p+k')] \quad (4.52)$$

$$f_1(p) = \epsilon^{\sigma\rho\mu\nu} \frac{k_\sigma k'_\rho - 2p_\sigma k'_\rho}{(p-k-k')^2 (p-k+k')^2} \quad (4.53)$$

$$f_2(p) = \epsilon^{\sigma\rho\mu\nu} \frac{k'_\sigma k_\rho - 2p_\sigma k_\rho}{(p-k-k')^2 (p+k-k')^2} \quad (4.54)$$

On utilise ensuite l'hypothèse $k^2, k'^2 \ll \Lambda^2$ pour faire le développement

$$\begin{aligned} \int_{p < \Lambda} f_1(p+k) - f_1(p) &= \int_{p < \Lambda} \left[k^\beta \partial_{p_\beta} f_1(p) + \frac{1}{2} k^\beta k'^\eta \partial_{p_\eta} \partial_{p_\beta} f_1(p) + \frac{1}{6} k^\beta k'^\eta k'^\gamma \partial_{p_\gamma} \partial_{p_\eta} \partial_{p_\beta} f_1(p) \right] + \mathcal{O}\left(\frac{k^4}{\Lambda^4}\right) \\ &= \frac{\Lambda^2}{8\pi^2} \left[k^\beta \langle \Lambda_\beta f_1(\Lambda) \rangle + \frac{1}{2} k^\beta k'^\eta \langle \Lambda_\beta \partial_\eta f_1(\Lambda) \rangle + \frac{1}{6} k^\beta k'^\eta k'^\gamma \langle \Lambda_\beta \partial_\gamma \partial_\eta f_1(\Lambda) \rangle \right] \\ &\quad + \mathcal{O}\left(\frac{k^4}{\Lambda^4}\right), \end{aligned} \quad (4.55)$$

où $\langle \rangle$ est la moyenne sur l'hypersphère (en 3D) défini par $p^2 = \Lambda^2$. On procède identiquement pour le terme contenant f_2 . $f_1(\Lambda)$ et $f_2(\Lambda)$ décroissent comme et chaque dérivée apporte un facteur en $1/\Lambda$ supplémentaire. On utilise finalement les identités

$$\begin{aligned} \langle \Lambda_i \rangle &= \langle \Lambda_i \Lambda_j \Lambda_k \rangle = 0 \\ \langle \Lambda_i \Lambda_j \rangle &= \frac{1}{2\pi^2} \int d^3\Omega \Lambda_i \Lambda_j = \frac{1}{4} g_{ij} \Lambda^2 \\ \langle \Lambda_i \Lambda_j \Lambda_k \Lambda_l \rangle &= \frac{1}{2\pi^2} \int d^3\Omega \Lambda_i \Lambda_j \Lambda_k \Lambda_l = \frac{1}{24} (g_{ij} g_{kl} + g_{ik} g_{jl} + g_{il} g_{jk}) \Lambda^4, \end{aligned}$$

pour obtenir

$$q_\alpha T^{\alpha\mu\nu}(k, k') = \frac{i\epsilon^{\sigma\rho\mu\nu}}{2\pi^2} \left[1 - \frac{9}{4} \frac{k^2 + k'^2}{\Lambda^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda^3}\right) \right] k_\sigma k'_\rho. \quad (4.56)$$

ce qui implique $T_{\alpha\mu\nu}^{(l)} \propto q_\alpha / q^2$, que le cutoff Λ soit infini ou non. De plus le terme dominant est indépendant de Λ .

B. Dérivation des fonctions Π_{VV} et Π_{VA}

Le but de cet annexe est de détailler l'origine des expressions (4.14) et (4.15) pour les fonctions de polarisation apparaissant dans la dispersion de phonon. On s'attardera seulement sur le cas où $b_0 = 0$ puisqu'il est expliqué dans la sous-section 4.2.2.3 comment utiliser les expressions valides à $b_0 = 0$ pour faire les calculs à $b_0 \neq 0$.

On commence par utiliser la fonction de Green (4.2) et calculer les traces matricielles dans les expressions

$$\Pi_{VV}(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{T}{V} \sum_{iv, \mathbf{k}} \text{tr} [\mathcal{G}(\mathbf{k}, iv) \mathcal{G}(\mathbf{k}', iv + i\omega)] \quad (4.57)$$

$$\Pi_{VA}(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{T}{V} \sum_{iv, \mathbf{k}} \text{tr} [\mathcal{G}(\mathbf{k}, iv) \mathcal{G}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, iv + i\omega) \tau_z], \quad (4.58)$$

où on utilise la notation $\mathbf{k}' \equiv \mathbf{k} + \mathbf{q}$. On fait ensuite la somme sur les fréquences de Matsubara de la façon suivante :

$$\begin{aligned} & T \sum_{iv} \frac{1}{(\hbar iv + \mu)^2 - E_{nk_z}^2} \frac{1}{(\hbar (iv + i\omega) + \mu)^2 - E_{mk'_z}^2} \\ &= \frac{T}{4E_{nk_z} E_{mk'_z}} \sum_{iv} \sum_{\lambda\lambda'} \frac{\lambda}{\hbar iv + \mu - \lambda E_{nk_z}} \frac{\lambda'}{\hbar iv + \hbar i\omega + \mu - \lambda' E_{mk'_z}} \\ &= \frac{1}{4E_{nk_z} E_{mk'_z}} \sum_{\lambda\lambda'} \lambda\lambda' \frac{f(\lambda E_{nk_z}) - f(\lambda' E_{mk'_z})}{\lambda E_{nk_z} - \lambda' E_{mk'_z} + \hbar i\omega} \\ & T \sum_{iv} \frac{\hbar iv + \mu}{(\hbar iv + \mu)^2 - E_{nk_z}^2} \frac{\hbar iv + \hbar i\omega + \mu}{(\hbar (iv + i\omega) + \mu)^2 - E_{mk'_z}^2} \\ &= \frac{T}{4} \sum_{iv} \sum_{\lambda\lambda'} \frac{1}{\hbar iv + \mu - \lambda E_{nk_z}} \frac{1}{\hbar iv + \hbar i\omega + \mu - \lambda' E_{mk'_z}} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\lambda\lambda'} \frac{f(\lambda E_{nk_z}) - f(\lambda' E_{mk'_z})}{\lambda E_{nk_z} - \lambda' E_{mk'_z} + \hbar i\omega} \end{aligned}$$

Avec $\lambda, \lambda' = \pm 1$. Après un peu d'algèbre, on trouve

$$\begin{aligned} \Pi_{VV}(q) = & -e^{-\frac{q_{\perp}^2 \ell_B^2}{2}} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{nm\lambda\lambda'\mathbf{k}} e^{-2(\mathbf{k}_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2})^2 \ell_B^2} (-1)^{n+m} \frac{f(\lambda E_{nk_z}) - f(\lambda' E_{mk'_z})}{\lambda E_{nk_z} - \lambda' E_{mk'_z} + i\omega} \\ & \times \left\{ [L_n(t)L_m(t') + L_{n-1}(t)L_{m-1}(t')] \right. \\ & \left. + \frac{\lambda\lambda'\hbar^2 v_F^2 k_z k'_z [L_n(t)L_m(t') + L_{n-1}(t)L_{m-1}(t')] + 8\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{k}'_{\perp} L_{n-1}^1(t)L_{m-1}^1(t')}{E_{nk_z} E_{mk'_z}} \right\} \end{aligned} \quad (4.59)$$

et

$$\begin{aligned} \Pi_{VA}(q) = & e^{-\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2 / 2} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{nm\lambda\lambda'\mathbf{k}} e^{-2(\mathbf{k}_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2})^2 \ell_B^2} (-1)^{n+m} \frac{f(\lambda E_{nk_z}) - f(\lambda' E_{mk'_z})}{\lambda E_{nk_z} - \lambda' E_{mk'_z} + i\omega} \\ & \times \hbar v \left(\lambda \frac{k_z}{E_{nk_z}} + \lambda' \frac{k'_z}{E_{mk'_z}} \right) (L_n(t)L_m(t') - L_{n-1}(t)L_{m-1}(t')) \end{aligned} \quad (4.60)$$

avec $t \equiv 2\mathbf{k}_{\perp}^2 \ell_B^2$ et $t' = 2(\mathbf{k}_{\perp} + \mathbf{q}_{\perp})^2 \ell_B^2$. Pour arriver aux résultats (4.14) et (4.15), il manque la somme sur les quasi-moments \mathbf{k}_{\perp}^2 . Celle-ci se fait avec l'aide des formules intégrales sur les polynômes de Laguerre :

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{k}_{\perp} e^{-2(\mathbf{k}_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2})^2 \ell_B^2} L_n(2\mathbf{k}_{\perp}^2 \ell_B^2) L_m(2(\mathbf{k}'_{\perp})^2 \ell_B^2) \quad (4.61)$$

$$= \frac{\ell_B^{-2}}{8\pi} (-1)^{n+m} \frac{m!}{n!} \left(\frac{\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2}{2} \right)^{n-m} L_m^{n-m} \left(\frac{\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2}{2} \right)^2 \quad (4.62)$$

et

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{k}_{\perp} e^{-2(\mathbf{k}_{\perp} + \frac{\mathbf{q}_{\perp}}{2})^2 \ell_B^2} 8\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{k}'_{\perp} L_{n-1}^1(2\mathbf{k}_{\perp}^2 \ell_B^2) L_{m-1}^1(2(\mathbf{k}'_{\perp})^2 \ell_B^2) \\ & = \frac{(\ell_B^{-2})^2}{2\pi} (-1)^{n+m} \frac{m!}{(n-1)!} \left(\frac{\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2}{2} \right)^{n-m} L_{m-1}^{n-m} \left(\frac{\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2}{2} \right) L_m^{n-m} \left(\frac{\mathbf{q}_{\perp}^2 \ell_B^2}{2} \right). \end{aligned}$$

Ces formules d'apparence non triviale ont été vérifiées numériquement. Elles ont été supposées afin que les expressions (4.14) et (4.15) finales correspondent avec les expressions de

polarisation qu'on trouverait avec les formules de Kubo

$$\Pi_{VV}(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{1}{2\pi^2 l_B^2} \sum_{nn'} \sum_{\lambda\lambda'} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \sum_{\tau} \left| \langle n\lambda k_z \tau | e^{i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} | n'\lambda' k'_z \tau \rangle \right|^2 \frac{f(E_{nk_z\tau}^{\lambda}) - f(E_{n'k'_z\tau}^{\lambda'})}{E_{nk_z\tau}^{\lambda} - E_{n'k'_z\tau}^{\lambda'} + i\omega} \quad (4.63)$$

$$\Pi_{VA}(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{1}{2\pi^2 l_B^2} \sum_{nn'} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \sum_{\tau} \tau \left| \langle n\lambda k_z \tau | e^{i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \mathbf{r}} | n'\lambda' k'_z \tau \rangle \right|^2 \frac{f(E_{nk_z\tau}^{\lambda}) - f(E_{n'k'_z+q_z\tau}^{\lambda'})}{E_{nk_z\tau}^{\lambda} - E_{n'k'_z+q_z\tau}^{\lambda'} + i\omega} \quad (4.64)$$

et les spineurs des niveaux de Landau définis dans la section 1.2.1.2 (voir équation (1.25)). Cependant, les formules (4.63) et (4.64) ne sont pas faciles à démontrer à cause de la présence du champ magnétique qui ne conserve pas les moments. À l'inverse, l'astuce de Schwinger, qui consiste à séparer la fonction de Green en une phase multipliant une la fonction \mathcal{G} invariante par translation (voir équation (4.1)), permet d'arriver immédiatement aux formules (4.57) et (4.58).

Il peut être utile de faire quelques remarques concernant l'évaluation numérique des expressions (4.14) et (4.15) du texte principal. Premièrement on peut noter les égalités $C_{nm}^{(1)}(\mathbf{q}_{\perp}^2) = C_{mn}^{(1)}(\mathbf{q}_{\perp}^2)$ et $C_{nm}^{(2)}(\mathbf{q}_{\perp}^2) = C_{mn}^{(2)}(\mathbf{q}_{\perp}^2)$, ainsi que

$$I_{nm}(q_z, i\omega) = I_{mn}(-q_z, -i\omega) \quad (4.65)$$

$$J_{nm}(q_z, i\omega) = J_{mn}(-q_z, -i\omega) \quad (4.66)$$

$$I_{nm}(q_z, i\omega) = I_{nm}(-q_z, i\omega) \quad (4.67)$$

$$J_{nm}(q_z, i\omega) = J_{nm}(-q_z, i\omega), \quad (4.68)$$

ces dernières pouvant être prouvées en faisant une translation du moment interne, $k_z \rightarrow k_z - q_z$ (pour les deux premières) et $k_z \rightarrow -k_z$ (pour les deux dernières). Cela permet de rassembler les termes de fréquences opposés de type $I_{nm}(q_z, i\omega) + I_{nm}(q_z, -i\omega)$ dans la somme sur les indices n et m de (4.14) et (4.15). Les dénominateurs des intégrandes résultantes contiennent des termes quadratiques en fréquences et énergies au lieu de termes linéaires comme il apparaît dans (4.14) et (4.15). La somme numérique sur k_z converge mieux dans ce cas.

Deuxièmement, on doit fixer un cutoff dans la somme sur les indices de niveaux de Landau. Ce dernier, noté N_{Λ} , dépend du champ magnétique comme $N_{\Lambda} \sim \Lambda / \left(\hbar v_F \ell_B^{-1} \right)^2$, où Λ est un cutoff en énergie, indépendant du champ. Les résultats pour les fonctions de réponse sont plus sensibles au cutoff à faible champ. À fort champ, quand les niveaux de Landau sont bien séparés et que le potentiel chimique en croise seulement quelques uns, on

peut choisir pour N_Δ l'indice du plus haut niveau qui croise le potentiel chimique. Dans ce cas, ajouter quelques niveaux à la somme ne change pas qualitativement les résultats.

Bibliographie

Note additionnelle : Les pages dans lesquelles les références sont citées sont indiquées à la fin de chaque entrée.

Bibliographie

- [1] P. Hosur et X. Qi. Recent developments in transport phenomena in Weyl semimetals. *Comptes Rendus Physique* **14**(9), 857 – 870 (2013). doi :<https://doi.org/10.1016/j.crhy.2013.10.010>. Topological insulators / Isolants topologiques. **1, 4, 18**
- [2] A. A. Burkov. Chiral anomaly and transport in Weyl metals. *Journal of Physics: Condensed Matter* **27**(11), 113201 (2015). doi :<https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/11/113201>. **1, 4**
- [3] P. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **117**(778), 610–624 (1928). doi :[10.1098/rspa.1928.0023](https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0023). **1, 3**
- [4] H. Weyl. Electron and gravitation. *Z. Phys.* **56**, 330–352 (1929). doi :[10.1007/BF01339504](https://doi.org/10.1007/BF01339504). **1, 3**
- [5] C. Herring. Accidental degeneracy in the energy bands of crystals. *Phys. Rev.* **52**, 365–373 (1937). doi :[10.1103/PhysRev.52.365](https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.365). **1**
- [6] X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath et S. Y. Savrasov. Topological semimetal and fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011). doi :[10.1103/PhysRevB.83.205101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.205101). **1, 3**
- [7] S. Huang, S. Xu, I. Belopolski, C. Lee, G. Chang, B. Wang, N. Alidoust, G. Bian, M. Neupane, C. Zhang, S. Jia, A. Bansil, H. Lin et M. Z. Hasan. A Weyl fermion semimetal with surface fermi arcs in the transition metal monpnictide TaAs class. *Nature Communications* **6**, 7373 (2015). doi :[10.1038/ncomms8373](https://doi.org/10.1038/ncomms8373). **1**
- [8] H. Weng, C. Fang, Z. Fang, B. A. Bernevig et X. Dai. Weyl semimetal phase in non-centrosymmetric transition-metal monophosphides. *Phys. Rev. X* **5**, 011029 (2015). doi :[10.1103/PhysRevX.5.011029](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.011029). **1, 6**
- [9] D. Bulmash, C. Liu et X. Qi. Prediction of a Weyl semimetal in $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$. *Phys. Rev. B* **89**, 081106 (2014). doi :[10.1103/PhysRevB.89.081106](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.081106). **1**

- [10] J. Liu et D. Vanderbilt. Weyl semimetals from noncentrosymmetric topological insulators. *Phys. Rev. B* **90**, 155316 (2014). doi :[10.1103/PhysRevB.90.155316](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.155316). 1
- [11] B. Singh, A. Sharma, H. Lin, M. Z. Hasan, R. Prasad et A. Bansil. Topological electronic structure and Weyl semimetal in the TlBiSe₂ class of semiconductors. *Phys. Rev. B* **86**, 115208 (2012). doi :[10.1103/PhysRevB.86.115208](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.115208). 1
- [12] S. Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C. Lee, S. Huang, H. Zheng, J. Ma, D. S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P. P. Shibayev, H. Lin, S. Jia et M. Z. Hasan. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological fermi arcs. *Science* **349**(6248), 613–617 (2015). doi :[10.1126/science.aaa9297](https://doi.org/10.1126/science.aaa9297). 1, 13
- [13] B. Q. Lv, H. M. Weng, B. B. Fu, X. P. Wang, H. Miao, J. Ma, P. Richard, X. C. Huang, L. X., Zhao, G. F. Chen, Z. Fang, X. Dai, T. Qian et H. Ding. Experimental discovery of Weyl semimetal TaAs. *Phys. Rev. X* **5**, 031013 (2015). doi :[10.1103/PhysRevX.5.031013](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.031013). 1
- [14] J. Jiang, Z.K. Liu, H.F. Yang Y. Sun, C.R. Rajamathi, Y.P. Qi, L.X. Yang, C. Chen, H. Peng, C-C. Hwang, S.Z. Sun, S-K. Mo, I. Vobornik, J. Fujii, S.S.P. Parkin, C. Felser, B.H. Yan et Y.L. Chen. Signature of type-II Weyl semimetal phase in MoTe₂. *Nature Communications* **8**, 13973 (2017). doi :[10.1103/PhysRevB.89.081106](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.081106). 1
- [15] J. Klotz, S. Wu, C. Shekhar, Y. Sun, M. Schmidt, M. Nicklas, M. Baenitz, M. Uhlarz, J. Wosnitza, C. Felser et B. Yan. Quantum oscillations and the fermi surface topology of the Weyl semimetal nbp. *Phys. Rev. B* **93**, 121105 (2016). doi :[10.1103/PhysRevB.93.121105](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.121105). 1
- [16] I. Belopolski, P. Yu, D. S. Sanchez, Y. Ishida, T. Chang, S. S. Zhang, S. Xu, H. Zheng, G. Chang, G. Bian, H. Jeng, T. Kondo, H. Lin, Z. Liu, S. Shin et M. Z. Hasan. Signatures of a time-reversal symmetric Weyl semimetal with only four Weyl points. *Nature Com.* **8**, 942 (2017). doi :<https://doi.org/10.1038/s41467-017-00938-1>. 1
- [17] H.B. Nielsen et M. Ninomiya. A no-go theorem for regularizing chiral fermions. *Physics Letters B* **105**(2), 219 – 223 (1981). doi :[https://doi.org/10.1016/0370-2693\(81\)91026-1](https://doi.org/10.1016/0370-2693(81)91026-1). 1
- [18] Y. Chen, S. Wu et A. A. Burkov. Axion response in Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **88**, 125105 (2013). doi :[10.1103/PhysRevB.88.125105](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.125105). 1, 11
- [19] M. M. Vazifeh et M. Franz. Electromagnetic response of Weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 027201 (2013). doi :[10.1103/PhysRevLett.111.027201](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.027201). 1, 24
- [20] F. Wilczek. Problem of strong p and t invariance in the presence of instantons. *Phys. Rev. Lett.* **40**, 279–282 (1978). doi :[10.1103/PhysRevLett.40.279](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.40.279). 2

- [21] X. Huang, L. Zhao, Y. Long, P. Wang, D. Chen, Z. Yang, H. Liang, M. Xue, H. Weng, Z. Fang, X. Dai et G. Chen. Observation of the chiral-anomaly-induced negative magnetoresistance in 3d Weyl semimetal TaAs. *Phys. Rev. X* **5**, 031023 (2015). doi :[10.1103/PhysRevX.5.031023](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.031023). 2
- [22] P. Goswami et S. Tewari. Axionic field theory of $(3 + 1)$ -dimensional Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **88**, 245107 (2013). doi :[10.1103/PhysRevB.88.245107](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.245107). 2, 11
- [23] R. D. Reis, M. O. Ajeesh, N. Kumar, F. Arnold, C. Shekhar, M. Naumann, M. Schmidt, M. Nicklas et E. Hassinger. On the search for the chiral anomaly in Weyl semimetals : the negative longitudinal magnetoresistance. *New Journal of Physics* **18**(8), 085006 (2016). doi :<https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/8/085006>. 2
- [24] S. A. Parameswaran, T. Grover, D. A. Abanin, D. A. Pesin et A. Vishwanath. Probing the chiral anomaly with nonlocal transport in three-dimensional topological semimetals. *Phys. Rev. X* **4**, 031035 (2014). doi :[10.1103/PhysRevX.4.031035](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.4.031035). 2
- [25] J. A. Hutasoit, J. Zang, R. Roiban et C. Liu. Weyl fermions induced magnon electrodynamics in a Weyl semimetal. *Phys. Rev. B* **90**, 134409 (2014). doi :[10.1103/PhysRevB.90.134409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.134409). 2, 20, 28
- [26] J. Zhou, H. Chang et D. Xiao. Plasmon mode as a detection of the chiral anomaly in Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **91**, 035114 (2015). doi :[10.1103/PhysRevB.91.035114](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.035114). 2, 28, 72, 98
- [27] M. Lv et S. Zhang. Dielectric function, friedel oscillation, and plasmons in Weyl semimetals. *International Journal of Modern Physics B* **27**(25), 1350177 (2013). doi :[10.1142/S0217979213501774](https://doi.org/10.1142/S0217979213501774). 2, 72, 98
- [28] B. Z. Spivak et A. V. Andreev. Magnetotransport phenomena related to the chiral anomaly in Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **93**, 085107 (2016). doi :[10.1103/PhysRevB.93.085107](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.085107). 2, 19, 28
- [29] M. D. Redell, S. Mukherjee et W. Lee. Resonant plasmon-axion excitations induced by charge density wave order in a Weyl semimetal. *Phys. Rev. B* **93**, 241201 (2016). doi :[10.1103/PhysRevB.93.241201](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.241201). 2, 28
- [30] J. Behrends, A. G. Grushin, T. Ojanen et J. H. Bardarson. Visualizing the chiral anomaly in Dirac and Weyl semimetals with photoemission spectroscopy. *Phys. Rev. B* **93**, 075114 (2016). doi :[10.1103/PhysRevB.93.075114](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.075114). 2
- [31] I. Garate. Phonon-induced topological transitions and crossovers in Dirac materials. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 046402 (2013). doi :[10.1103/PhysRevLett.110.046402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.046402). 2
- [32] K. Saha et I. Garate. Phonon-induced topological insulation. *Phys. Rev. B* **89**, 205103 (2014). doi :[10.1103/PhysRevB.89.205103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.205103). 2

- [33] K. Saha, K. Légaré et I. Garate. Detecting band inversions by measuring the environment : Fingerprints of electronic band topology in bulk phonon linewidths. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 176405 (2015). doi :[10.1103/PhysRevLett.115.176405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.176405). 2
- [34] A. Cortijo, Y. Ferreirós, K. Landsteiner et M. A. H. Vozmediano. Visco elasticity in 2d materials. *2D Materials* **3**(1), 011002 (2016). doi :<https://doi.org/10.1088/2053-1583/3/1/011002>. 2, 47
- [35] H. Shapourian, T. L. Hughes et S. Ryu. Viscoelastic response of topological tight-binding models in two and three dimensions. *Phys. Rev. B* **92**, 165131 (2015). doi :[10.1103/PhysRevB.92.165131](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.165131). 2
- [36] D. I. Pikulin, A. Chen et M. Franz. Chiral anomaly from strain-induced gauge fields in Dirac and Weyl semimetals. *Phys. Rev. X* **6**, 041021 (2016). doi :[10.1103/PhysRevX.6.041021](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.6.041021). 2
- [37] B. Xu, Y. M. Dai, L. X. Zhao, K. Wang, R. Yang, W. Zhang, J. Y. Liu, H. Xiao, G. F. Chen, S. A. Trugman, J-X Zhu, A. J. Taylor, D. A. Yarotski, R. P. Prasankumar et X. G. Qiu. Temperature-tunable fano resonance induced by strong coupling between Weyl fermions and phonons in TaAs. *Nature Com.* **8** (2017). doi :<https://doi.org/10.1038/ncomms14933>. 2
- [38] J. Cayssol. Introduction to dirac materials and topological insulators. *Comptes Rendus Physique* **14**(9), 760 – 778 (2013). doi :<https://doi.org/10.1016/j.crhy.2013.09.012>. Topological insulators / Isolants topologiques. 3
- [39] D. N. Basov, M. M. Fogler, A. Lanzara, F. Wang et Y. Zhang. Colloquium : Graphene spectroscopy. *Rev. Mod. Phys.* **86**, 959–994 (2014). doi :[10.1103/RevModPhys.86.959](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.959). 3
- [40] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov et A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109–162 (2009). doi :[10.1103/RevModPhys.81.109](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109). 3
- [41] L. Fu, C. L. Kane et E. J. Mele. Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803 (2007). doi :[10.1103/PhysRevLett.98.106803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.106803). 3
- [42] J. E. Moore et L. Balents. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B* **75**, 121306 (2007). doi :[10.1103/PhysRevB.75.121306](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.121306). 3
- [43] X. Qi et S. Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057–1110 (2011). doi :[10.1103/RevModPhys.83.1057](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.1057). 3
- [44] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele et A. M. Rappe. Dirac semimetal in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 140405 (2012). doi :[10.1103/PhysRevLett.108.140405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.140405). 4

- [45] N. P. Armitage, E. J. Mele et A. Vishwanath. Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids. *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018). doi :10.1103/RevModPhys.90.015001. 4
- [46] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov et A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109–162 (2009). doi :10.1103/RevModPhys.81.109. 4
- [47] S. Q. Shen. *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer Singapore, (2017). <https://books.google.ca/books?id=z9IxDwAAQBAJ>. 5
- [48] B. A. Bernevig et T. L. Hughes. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, (2013). <https://books.google.ca/books?id=wOn7JHSSxrsC>. 5, 13
- [49] A. A. Burkov, M. D. Hook et L. Balents. Topological nodal semimetals. *Phys. Rev. B* **84**, 235126 (2011). doi :10.1103/PhysRevB.84.235126. 9
- [50] A. A. Zyuzin, Si Wu et A. A. Burkov. Weyl semimetal with broken time reversal and inversion symmetries. *Phys. Rev. B* **85**, 165110 (2012). doi :10.1103/PhysRevB.85.165110. 9
- [51] C. Liu, P. Ye et X. Qi. Chiral gauge field and axial anomaly in a Weyl semimetal. *Phys. Rev. B* **87**, 235306 (2013). doi :10.1103/PhysRevB.87.235306. 11, 20, 48
- [52] D. Xiao, M. Chang et Q. Niu. Berry phase effects on electronic properties. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959–2007 (2010). doi :10.1103/RevModPhys.82.1959. 12
- [53] G. E. Volovik. *The Universe in a Helium Droplet*. International Series of Monographs on Physics. OUP Oxford, (2009). <https://books.google.ca/books?id=6uj76kFJOHEC>. 12
- [54] M. Nakahara. *Geometry, Topology and Physics, Second Edition*. Graduate student series in physics. Taylor & Francis, (2003). <https://books.google.ca/books?id=cHXQB0Ex5wC>. 12, 23
- [55] H. B. Nielsen et M. Ninomiya. Absence of neutrinos on a lattice (II). Intuitive topological proof. *Nuclear Physics B* **193**, 173–194 (1981). doi :10.1016/0550-3213(81)90524-1. 12
- [56] Zh. A. Devizorova et V. A. Volkov. Fermi arcs formation in weyl semimetals: The key role of intervalley interaction. *Phys. Rev. B* **95**, 081302 (2017). doi :10.1103/PhysRevB.95.081302. 14
- [57] H.B. Nielsen et M. Ninomiya. The Adler-Bell-Jackiw anomaly and Weyl fermions in a crystal. *Physics Letters B* **130**(6), 389 – 396 (1983). doi :[https://doi.org/10.1016/0370-2693\(83\)91529-0](https://doi.org/10.1016/0370-2693(83)91529-0). 14

- [58] M.E. Peskin et D. V. Schroeder. *An Introduction To Quantum Field Theory*. CRC Press, (2018). <https://books.google.ca/books?id=9EpnDwAAQBAJ>. 15, 61, 63
- [59] L. D. Landau et E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*. Course of Theoretical Physics. Elsevier Science, (1981). <https://books.google.ca/books?id=SvdoN3k8EysC>. 16
- [60] N. Miura. *Physics of Semiconductors in High Magnetic Fields*. Oxford science publications. OUP Oxford, (2008). <https://books.google.ca/books?id=gHwSDAAAQBAJ>. 17
- [61] L. M. Roth. Semiclassical theory of magnetic energy levels and magnetic susceptibility of bloch electrons. *Phys. Rev.* **145**, 434–448 (1966). doi :10.1103/PhysRev.145.434. 17
- [62] D. T. Son et B. Z. Spivak. Chiral anomaly and classical negative magnetoresistance of Weyl metals. *Phys. Rev. B* **88**, 104412 (2013). doi :10.1103/PhysRevB.88.104412. 19, 112
- [63] K. Fujikawa. Path-integral measure for gauge-invariant fermion theories. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1195–1198 (1979). doi :10.1103/PhysRevLett.42.1195. 21, 23
- [64] A. A. Zyuzin et A. A. Burkov. Topological response in Weyl semimetals and the chiral anomaly. *Phys. Rev. B* **86**, 115133 (2012). doi :10.1103/PhysRevB.86.115133. 23
- [65] X. Qi, T. L. Hughes et S. Zhang. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008). doi :10.1103/PhysRevB.78.195424. 25
- [66] M. Chang et M. Yang. Chiral magnetic effect in a two-band lattice model of Weyl semimetal. *Phys. Rev. B* **91**, 115203 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.91.115203. 25
- [67] M. Chang et M. Yang. Chiral magnetic effect in the absence of Weyl node. *Phys. Rev. B* **92**, 205201 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.92.205201. 25
- [68] J. Ma et D. A. Pesin. Chiral magnetic effect and natural optical activity in metals with or without Weyl points. *Phys. Rev. B* **92**, 235205 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.92.235205. 25
- [69] G. S. Jenkins, C. Lane, B. Barbiellini, A. B. Sushkov, R. L. Carey, F. Liu, J. W. Krizan, S. K. Kushwaha, Q. Gibson, T. Chang, H. Jeng, H. Lin, R. J. Cava, A. Bansil et H. D. Drew. Three-dimensional Dirac cone carrier dynamics in Na₃Bi and Cd₃As₂. *Phys. Rev. B* **94**, 085121 (2016). doi :10.1103/PhysRevB.94.085121. 26
- [70] B. Rosenstein et M. Lewkowicz. Dynamics of electric transport in interacting Weyl semimetals. *Phys. Rev. B* **88**, 045108 (2013). doi :10.1103/PhysRevB.88.045108. 26
- [71] M. Kargarian, M. Randeria et N. Trivedi. Theory of Kerr and Faraday rotations and linear dichroism in Topological Weyl Semimetals. *Scientific Reports* **5**, 12683 (2015). doi :10.1038/srep12683. 26

- [72] S. H. Gross et L. B. Felsen. Propagation in nonuniform gyrotropic media. *IEEE Spectrum* **1**(10), 5–6 (1964). doi :10.1109/MSPEC.1964.6501160. 26
- [73] A. Eroglu. *Wave Propagation and Radiation in Gyrotropic and Anisotropic Media*. Springer US, (2010). <https://books.google.ca/books?id=t74EcBi8q60C>. 26
- [74] Y. Toyozawa. *Optical Processes in Solids*. Heinemann first library. Cambridge University Press, (2003). <https://books.google.ca/books?id=IGkSP2y8V7MC>. 27
- [75] S. Baroni, S. Gironcoli, A. Dal Corso et P. Giannozzi. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Rev. Mod. Phys.* **73**, 515–562 (2001). doi :10.1103/RevModPhys.73.515. 30, 32
- [76] F. Giustino. Electron-phonon interactions from first principles. *Rev. Mod. Phys.* **89**, 015003 (2017). doi :10.1103/RevModPhys.89.015003. 30, 35
- [77] R. P. Feynman. Forces in molecules. *Phys. Rev.* **56**, 340–343 (1939). doi :10.1103/PhysRev.56.340. 31
- [78] R. Heid. Density functional perturbation theory and electron-phonon coupling. Dans *Emergent Phenomena in Correlated Matter : Lecture Notes of the Autumn School Correlated Electrons, Jülich, 23.-27. September 2013 2013*. Hrsg.: E. Pavarini, volume 3 de *Schriften des Forschungszentrums Jülich / Reihe Modeling and Simulation*. Jülich, Forschungszentrum Jülich, (2013). 43.11.01 ; LK 01. 31
- [79] Y. A. Il'inskii et L. V. Keldysh. *Electromagnetic Response of Material Media*. Springer US, (1994). <https://books.google.ca/books?id=XUr4VS91W60C>. 32
- [80] H. W. Liu, P. Richard, Z. D. Song, L. X. Zhao, Z. Fang, G. Chen et H. Ding. Raman study of lattice dynamics in the Weyl semimetal TaAs. *Phys. Rev. B* **92**, 064302 (2015). doi :10.1103/PhysRevB.92.064302. 34
- [81] R.C. Powell. *Symmetry, Group Theory, and the Physical Properties of Crystals*. Lecture Notes in Physics. Springer New York, (2010). <https://books.google.ca/books?id=ojq5BQAAQBAJ>. 34, 55
- [82] X. Gonze et C. Lee. Dynamical matrices, Born effective charges, dielectric permittivity tensors, and interatomic force constants from density-functional perturbation theory. *Phys. Rev. B* **55**, 10355–10368 (1997). doi :10.1103/PhysRevB.55.10355. 38
- [83] W. Weber. Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and α – Sn. *Phys. Rev. B* **15**, 4789–4803 (1977). doi :10.1103/PhysRevB.15.4789. 41
- [84] D. Strauch et B. Dorner. Phonon dispersion in GaAs. *Journal of Physics Condensed Matter* **2**, 1457–1474 (1990). doi :10.1088/0953-8984/2/6/006. 41
- [85] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Physics of Solids and Liquids. Springer US, (1990). <https://books.google.ca/books?id=v8du6cp0vUAC>. 42, 71, 83

- [86] P. Yu et M. Cardona. *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*. Graduate Texts in Physics. Springer Berlin Heidelberg, (2010). https://books.google.ca/books?id=5aBuKYBT_hsC. 42, 43, 44
- [87] T. Holstein. Studies of polaron motion : Part II. the "small" polaron. *Annals of Physics* 8(3), 343 – 389 (1959). doi :[https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90003-X](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90003-X). 47
- [88] W. P. Su, J. R. Schrieffer et A. J. Heeger. Solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698–1701 (1979). doi :[10.1103/PhysRevLett.42.1698](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.42.1698). 47
- [89] F. Guinea and M. I. Katsnelson and A. K. Geim. Energy gaps and a zero-field quantum hall effect in graphene by strain engineering. *Nature Physics* **6**, 30 (2009). doi :<https://doi.org/10.1038/nphys1420>. 47
- [90] F. Guinea, A. K. Geim, M. I. Katsnelson et K. S. Novoselov. Generating quantizing pseudomagnetic fields by bending graphene ribbons. *Phys. Rev. B* **81**, 035408 (2010). doi :[10.1103/PhysRevB.81.035408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.035408). 47
- [91] A. Cortijo, Y. Ferreirós, K. Landsteiner et M. A. H. Vozmediano. Elastic gauge fields in Weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 177202 (2015). doi :[10.1103/PhysRevLett.115.177202](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.177202). 48
- [92] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. Castro Neto et M. F. Crommie. Strain-induced pseudo-magnetic fields greater than 300 tesla in graphene nanobubbles. *Science* **329**(5991), 544–547 (2010). doi :[10.1126/science.1191700](https://doi.org/10.1126/science.1191700). 48
- [93] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus et A. Jorio. *Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter*. SpringerLink : Springer e-Books. Springer Berlin Heidelberg, (2007). <https://books.google.ca/books?id=sKaH8vrfmnQC>. 48, 49
- [94] M. El-Batanouny et F. Wooten. *Symmetry and Condensed Matter Physics: A Computational Approach*. Cambridge University Press, (2008). <https://books.google.ca/books?id=RxLnDK8Mj5AC>. 48, 50
- [95] Bilbao crystallographic server. <http://www.cryst.ehu.es/rep/point.html>. 50
- [96] S. L. Adler. Axial-vector vertex in spinor electrodynamics. *Phys. Rev.* **177**, 2426–2438 (1969). doi :[10.1103/PhysRev.177.2426](https://doi.org/10.1103/PhysRev.177.2426). 51
- [97] J.S. Bell et R. Jackiw. A pcac puzzle : $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ in the σ -model. *Nuovo Cimento A Serie* **60**, 47–61 (1969). doi :[10.1007/BF02823296](https://doi.org/10.1007/BF02823296). 51
- [98] P. Rinkel, P. L. S. Lopes et I. Garate. Signatures of the chiral anomaly in phonon dynamics. *Phys. Rev. Lett.* **119**, 107401 (2017). doi :[10.1103/PhysRevLett.119.107401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.107401). 51

- [99] B. A. Foreman. Theory of the effective hamiltonian for degenerate bands in an electric field. *Journal of Physics: Condensed Matter* **12**(34), R435 (2000). doi :<https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/34/201>. 52
- [100] P. Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, (2015). <https://books.google.ca/books?id=PDg1HQAACAAJ>. 58, 83
- [101] N. Nagaosa et S. Heusler. *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Texts and monographs in physics. Springer, (1999). <https://books.google.ca/books?id=C9uAXYIIIFhMC>. 59
- [102] R. Armillis, C. Corianò, L. D. Rose et M. Guzzi. Anomalous u(1) models in four and five dimensions and their anomaly poles. *Journal of High Energy Physics* **2009**(12), 029 (2009). doi :<https://doi.org/10.1088/1126-6708/2009/12/029>. 62, 63, 64, 67, 77
- [103] J. S. Porto, A. R. Vieira, A. L. Cherchiglia, M. Sampaio et B. Hiller. On the bose symmetry and the left- and right-chiral anomalies. *The European Physical Journal C* **78**(2) (2018). doi :[10.1140/epjc/s10052-018-5648-9](https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-018-5648-9). 62
- [104] G. Nicola et R. F. Alvarez-Estrada. Anomalies at finite temperature and density. *International Journal of Modern Physics A* **09**(09), 1423–1442 (1994). doi :[10.1142/S0217751X94000637](https://doi.org/10.1142/S0217751X94000637). 64
- [105] H. Itoyama et A.H. Mueller. The axial anomaly at finite temperature. *Nuclear Physics B* **218**(2), 349 – 365 (1983). doi :[https://doi.org/10.1016/0550-3213\(83\)90370-X](https://doi.org/10.1016/0550-3213(83)90370-X). 64
- [106] S. D. H. Hsu, F. Sannino et M. Schwetz. Anomaly matching in gauge theories at finite matter density. *Modern Physics Letters A* **16**(29), 1871–1880 (2001). doi :[10.1142/S0217732301005217](https://doi.org/10.1142/S0217732301005217). 64
- [107] J. Vermette, S. Jandl, M. Orlita et M. M. Gospodinov. Role of the apical oxygen in the low-temperature magnetoelectric effect in rmno_3 ($r = \text{ho}$ and lu). *Phys. Rev. B* **85**, 134445 (2012). doi :[10.1103/PhysRevB.85.134445](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.134445). 68
- [108] E. Anastassakis, E. Burstein, A.A. Maradudin et R. Minnick. Morpnic effects-iv. effects of an applied magnetic field on first-order photon-optical phonon interactions in non-magnetic crystals. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **33**(5), 1091 – 1103 (1972). doi :[https://doi.org/10.1016/S0022-3697\(72\)80269-5](https://doi.org/10.1016/S0022-3697(72)80269-5). 68
- [109] F. Wooten. Reflectivity of uniaxial absorbing crystals. *Appl. Opt.* **23**(23), 4226–4227 (1984). doi :[10.1364/AO.23.004226](https://doi.org/10.1364/AO.23.004226). 75
- [110] F. Wooten. *Optical properties of solids*. Academic Press, (1972). https://books.google.ca/books?id=A_dHNRXFq28C. 75
- [111] A. Pinczuk et E. Burstein. *Light Scattering in Solids I*, volume 50 de *Topic in Applied Physics*. Springer, New York, (2010). <https://books.google.ca/books?id=SIqQDAAAQBAJ>. 76, 77

- [112] Pierre Rinkel, Pedro L. S. Lopes et Ion Garate. Influence of Landau levels in the phonon dispersion of Weyl semimetals. *arXiv e-prints*, arXiv :1811.12899 (2018). [arXiv :1811.12899](https://arxiv.org/abs/1811.12899). 79
- [113] J. Schwinger. On gauge invariance and vacuum polarization. *Phys. Rev.* **82**, 664–679 (1951). [doi :10.1103/PhysRev.82.664](https://doi.org/10.1103/PhysRev.82.664). 80
- [114] W. Tsai. Modified electron propagation function in strong magnetic fields. *Phys. Rev. D* **10**, 1342–1345 (1974). [doi :10.1103/PhysRevD.10.1342](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.10.1342). 80
- [115] I. A. Shovkovy. *Magnetic Catalysis: A Review*, 13–49. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (2013). 81
- [116] V. A. Miransky et I. A. Shovkovy. Quantum field theory in a magnetic field : From quantum chromodynamics to graphene and Dirac semimetals. *Physics Reports* **576**, 1 – 209 (2015). [doi :https://doi.org/10.1016/j.physrep.2015.02.003](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2015.02.003). 81, 90, 108
- [117] A. Altland et B. Simons. *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2e édition, (2010). 83
- [118] A. Thakur, R. Sachdeva et A. Agarwal. Vacuum polarization in homogeneous magnetic fields. *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 105701 (2017). [doi :10.1088/1361-648X/aa57bd](https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa57bd). 88, 98, 100, 108
- [119] B. Ramshaw, K. Modic, A. Shekhter, J. W. M. Philip, M. K. Chan, J. Betts, F. Balakirev, A. Migliori, N. Ghimire, E. D. Bauer, F. Ronning et R. Mcdonald. Quantum limit transport and destruction of the Weyl nodes in TaAs. *Nature Communications* **9**, 2217 (2018). [doi :10.1038/s41467-018-04542-9](https://doi.org/10.1038/s41467-018-04542-9). 103
- [120] F. Laliberté, F. Bélanger, N. L. Nair, J. G. Analytis, M.-E. Boulanger, L. Taillefer et J. Quilliam. In preparation, (2018). 103, 104
- [121] H. R. Carleton, H. Kroger et E. W. Prohofskey. Ultrasonic effects in piezoelectric semiconductors. *Proceedings of the IEEE* **53**(10), 1452–1464 (1965). [doi :10.1109/PROC.1965.4259](https://doi.org/10.1109/PROC.1965.4259). 103
- [122] A. R. Hutson et D. L. White. Elastic wave propagation in piezoelectric semiconductors. *Journal of Applied Physics* **33**(1), 40–47 (1962). [doi :10.1063/1.1728525](https://doi.org/10.1063/1.1728525). 103
- [123] N. D. Mermin. Lindhard dielectric function in the relaxation-time approximation. *Phys. Rev. B* **1**, 2362–2363 (1970). [doi :10.1103/PhysRevB.1.2362](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.1.2362). 103
- [124] L. L. DeRaad, K. A. Milton et N. D. H. Dass. Photon decay into neutrinos in a strong magnetic field. *Phys. Rev. D* **14**, 3326–3334 (1976). [doi :10.1103/PhysRevD.14.3326](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.14.3326). 108
- [125] L. A. Falkovsky et E. G. Mishchenko. Surface excitations in metals : Brillouin and Raman light scattering. *Phys. Rev. B* **51**, 7239–7249 (1995). [doi :10.1103/PhysRevB.51.7239](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.51.7239). 112