

Московский физико-технический институт
(государственный университет)
Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН

Дипломная работа бакалавра
«Магнетокондуктанс $p-n$ перехода
в вейлевском полуметалле»

Выполнил:
студент 322 группы

Сайкин Давид Рустамович

Научный руководитель:
к.ф.-м.н.

Тихонов Константин Сергеевич

г. Москва, 30 июня 2017 г.

Предисловие

Прежде чем приступить к изложению основного материала, я знакомлю читателя с относительно новым классом топологических материалов — Вейлевским полуметаллом — в главе 1 я рассказываю о способах теоретического описания подобных материалов и их экспериментальном обнаружении.

Читатель, интересующийся только результатами, претендующими на научную новизну, должен сразу обратиться к главе 2, в которой я приступаю к описанию решения основной задачи данной работы — изучению кондактанса p – n перехода в T –симметричном полуметалле Вейля (типа TaAs) как функции магнитного поля.

Рассмотрение задачи отталкивается от работы [1], в которой был вычислен магнетокондактанс G в модели с Гамильтонианом

$$\hat{H} = v\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}.$$

Основные результаты статьи [1] разобраны в приложении В. Я же рассматриваю гамильтониан, описывающий пару вейлевских узлов [2],

$$\hat{H} = \frac{\sigma_x}{2m}(p_x^2 - p_0^2) + v\sigma_y p_y + v\sigma_z p_z,$$

и нахожу смену знака дифференциального кондактанса dG/dB при полях величинной порядка $B_0 \sim \Phi_0 k_0^2$, где k_0 — расстояние между вейлевскими узлами, а Φ_0 — квант магнитного потока.

Оглавление

1 Вейлевский полуметалл	2
1.1 Вейлевские электроны в твёрдом теле	3
1.2 Игрушечная модель	6
2 Магнетокондактанс	8
2.1 Кондактанс в отсутствии поля	10
2.2 Магнетокондактанс	12
А Формализм Ландауэра	15
А.1 Описание задачи	15
А.2 Вывод формулы Ландауэра	17
В Одноконусная модель	19
В.1 Магнитное поле вдоль гетероперехода	19
С Однородная квазиклассика	21
С.1 Наклонённый двухъямный потенциал	21
Список литературы и ссылок	25

Вейлевский полуметалл

В 1928 году Поль Дирак написал квантовое уравнение движения для релятивистских электронов, т. е. частиц со спином $s = \frac{1}{2}$.

$$i\partial_t\Psi = [c\boldsymbol{\alpha}\hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2]\Psi, \quad (1.1)$$

где эрмитовы матрицы $\boldsymbol{\alpha}$, β принадлежат алгебре Клиффорда, т. е. определяются соотношениями

$$\{\alpha^i, \alpha^j\} = 2\delta^{ij}, \quad \{\alpha^i, \beta\} = 0, \quad \beta^2 = 1. \quad (1.2)$$

Вскоре после, в 1929 году, Герман Вейль, рассмотрел случай $m = 0$, и заметил, что в представлении $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\sigma} \otimes \sigma^z$ матрица $\hat{\mathbf{1}} \otimes \sigma^z$ коммутирует¹ с гамильтонианом. Он предложил искать решения (1.1) в её собственных подпространствах. Данное квантовое число принято называть киральностью $\chi = \pm$, а его собственные функций — правым и левым спинором.

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi &= +c\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}\psi \\ i\partial_t\phi &= -c\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}\phi \end{aligned} \quad \Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

В. Паули раскритиковал использование каждого из уравнений по отдельности по причине того, что они не обладают симметрией чётности [3, §13]. Так про уравнения Вейля забыли вплоть до 1957 года, когда в экспериментах по слабому ядерному взаимодействию обнаружилось, что P симметрия не является фундаментальным свойством нашего мира, и стали считать, что должна сохраняться CP -симметрия. Этому требованию уравнению Вейля удовлетворяют, если считать, что C -преобразование меняет киральность [3, §30]. Тогда Ландау, Ли, Янг и Салам предложили использовать уравнения (1.3) для описания нейтрино, которое предполагалось безмассовым (на сегодняшний день известно, что это неверно, а масса нейтрино $m_n c^2 < .28$ eV).

В 2005 году был открыт графен (двумерный монослой графита), в котором электроны описываются эффективным гамильтонианом вейлевского вида

$$\hat{H}(\mathbf{p}) = v\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}, \quad \varepsilon(\mathbf{p}) = \pm v|\mathbf{p}|. \quad (1.4)$$

Однако их принято называть Дираковскими, поскольку их спектр двухкратно вырожден по спину. Оказывается, что в природе существуют вещества с дисперсией, описываемой лишь одним из уравнений (1.3) — они были открыты в 2015 году. Хотя для каждой вейлевской точки в зоне Бриллюэна всегда найдётся пара с противоположной киральностью [4], они не обязаны находится на одном уровне энергии, поэтому такие вещества обладают замечательными транспортными свойствами.

¹Такую матрицу можно соорудить в любом пространстве нечётной размерности как $\gamma^5 = -i\alpha^1\alpha^2\alpha^3$.

1.1 Вейлевские электроны в твёрдом теле

Рассмотрю электроны в периодическом потенциале кристаллической решётки, не учитывая межэлектронного взаимодействия.²

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i - \mathbf{a}), \quad U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{a}} U_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \quad (1.5)$$

Как известно [5, §55], его диагонализуют блоховские волновые функции $\psi_{\mathbf{k},n} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$, где $u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$ периодична на решётке. Поэтому гамильтониан диагонален по индексу \mathbf{k} , но может быть недиагонален по номеру зоны n .

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n,n'} \hat{c}_{\mathbf{k},n}^+ \langle \psi_{\mathbf{k},n} | \hat{H} | \psi_{\mathbf{k},n'} \rangle \hat{c}_{\mathbf{k},n'}. \quad (1.6)$$

Физика электронов в твёрдых телах определяется зонами, лежащими вблизи химического потенциала μ , и бывает достаточно ограничиться только двумя зонами — валентной и зоной проводимости. Эффективно такой электрон описывается гамильтонианом 2×2 , который удобно разложить по базису матриц Паули.

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \sum_{\mu=0}^3 f_{\mu}(\mathbf{k}) \sigma^{\mu}. \quad (1.7)$$

Каждая из функций f_{μ} предполагается аналитичной и может быть разложена вблизи некоторой точки k -пространства согласно $f_{\mu}(\mathbf{k}) = f_{\mu}(\mathbf{k}_0) + \hbar \mathbf{v}_{\mu} \cdot \delta \mathbf{k}$. Если случится, что при некотором \mathbf{k}_0 три функции f_i , $i = 1..3$ обнулятся, то это будет как раз вейлевская точка. Можно ожидать, что в трёхмерном случае такое случайное вырождений произойдёт без каких-либо дополнительных симметричных условий, поскольку имеется три параметра \mathbf{k} , которые можно варировать [6]. В этом случае, если опустить член $f_0(\mathbf{k}_0)$, указывающий расстояние до химического потенциала, поворотом можно диагонализировать v_{μ}^{ν} и привести гамильтониан к виду

$$\hat{H} = \hbar \mathbf{w} \mathbf{k} + \sum_i \hbar v_i k_i \sigma^i. \quad (1.8)$$

Первый член приводит к наклону дираковского конуса, что не приводит к изменением результатов данной работы, поэтому далее он будет опущен.³ Для простоты также буду предполагать, что узельные скорости изотропны, тогда

$$\hat{H} = \chi \hbar v \boldsymbol{\sigma} \mathbf{k}, \quad (1.9)$$

где $\chi = \text{sgn} \det(v_{\beta}^{\alpha}) = \pm 1$ — киральность узла, и я полагаю $v > 0$.

²Приведённые здесь рассуждения, вообще говоря, нельзя обобщить на гамильтониан с взаимодействием, и вопрос, как определить сохранится ли структура зон при включении взаимодействия является открытым.

³Данный член играет роль при вычислении фотогальванических эффектов в присутствии магнитного поля, при его учёте говорят о вейлевских полуметаллах II типа [7].

Магнитные монополи

Инструментом обнаружения вейлевских точек является связность Берри [8], которая, при выборе квазиимпульса \mathbf{k} в качестве параметра, определяется согласно

$$\mathbf{A}_n = i \langle n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | n(\mathbf{k}) \rangle, \quad A_n = \mathbf{A}_n \cdot d\mathbf{k}, \quad (1.10)$$

где $|n\rangle$ — одно из собственных состояний гамильтониана (1.8). Определим также индукцию поля \mathbf{B} и плотность источников поля ρ согласно

$$\mathbf{B}_n = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}, \quad \rho_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{B}, \quad (1.11)$$

Оказывается, для вейлевского гамильтониана вектор кривизны Берри \mathbf{B} , отвечающий основному состоянию, представляет напряжённость точечного заряда величины $\frac{\chi}{2}$. Пусть $\hat{H} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}})$, а состояния $|\pm\rangle$ обозначают верхний и нижний уровни.

$$\begin{aligned} B_\mu^\pm &= -\epsilon_{\mu\nu\rho} \text{Im} \langle \partial_\nu \pm | \partial_\rho \pm \rangle = -\epsilon_{\mu\nu\rho} \text{Im} \frac{\langle \pm | (\partial_\nu \hat{H}) | \mp \rangle \langle \mp | (\partial_\rho \hat{H}) | \pm \rangle}{|E_+ - E_-|^2} = \\ &= -\frac{1}{2} \text{Im} \frac{\langle \pm | \epsilon_{\mu\nu\rho} [\hat{\sigma}_\nu, \hat{\sigma}_\rho] | \pm \rangle}{|E_+ - E_-|^2} = -\text{Im} \frac{2i \langle \pm | \hat{\sigma}_\mu | \pm \rangle}{|E_+ - E_-|^2} = \mp \frac{k_\mu}{2|\mathbf{k}|^3}. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Поскольку $\chi = -1$ меняет уровни местами, $\rho = \chi \delta(\mathbf{k})$. Поэтому на жаргоне вейлевские точки называют «магнитными монополями».

Отсюда можно сделать выводы о положении вейлевских точек в зоне Бриллюэна. Согласно определениям (1.10), (1.11), плотность монополей является чётной функцией \mathbf{k} , если имеется T -симметрия и нечётной при наличии P -симметрии.

$$T: \quad \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = \mathbf{A}_{\bar{n}}(-\mathbf{k}) \quad \mathbf{B}_n(\mathbf{k}) = -\mathbf{B}_{\bar{n}}(-\mathbf{k}) \quad \rho_n(\mathbf{k}) = \rho_{\bar{n}}(-\mathbf{k}) \quad (1.13)$$

$$P: \quad \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = -\mathbf{A}_{\bar{n}}(-\mathbf{k}) \quad \mathbf{B}_n(\mathbf{k}) = \mathbf{B}_{\bar{n}}(-\mathbf{k}) \quad \rho_n(\mathbf{k}) = -\rho_{\bar{n}}(-\mathbf{k}), \quad (1.14)$$

где \bar{n} означает сопряжённое состояние: $|\bar{n}\rangle = T |n\rangle$, либо $|\bar{n}\rangle = P |n\rangle$. Таким образом, в TP -инвариантной системе вейлевских точек быть не может, а искать физическую реализацию вейлевского полуметалла следует среди материалов без симметрии чётности.

Эксперимент

Поиски вейлевских полуметаллов в природе увенчались успехом в 2015 году, когда было обнаружено, что таким свойством обладают вещества типа TaAs, TaP, NbAs, NbP. В работе [9] рассмотрен арсенид тантала TaAs, и из первых принципов найдено 12 пар вейлевских точек в зоне Бриллюэна, как точек сингулярности поля Берри.

Спустя примерно год, был опубликован эксперимент [10], в котором методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением, были измерены поверхности Ферми в TaP и обнаружена пара вейлевских узлов.

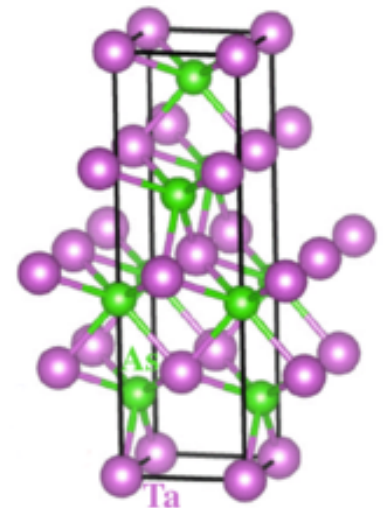


Рис. 1.1: Решётка TaAs.

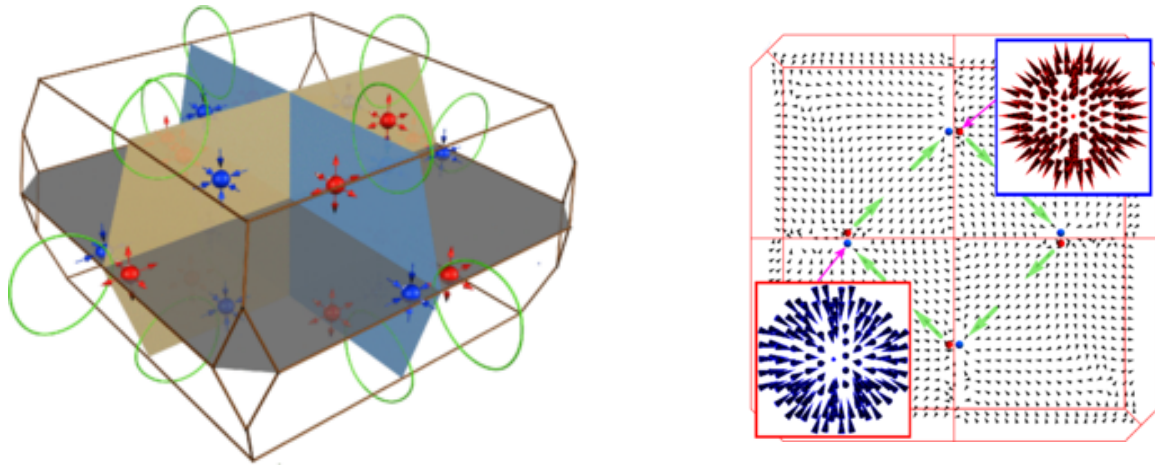


Рис. 1.2: Зона Бриллюэна TaAs и 12 пар вейлевских монополей. [9]
Справа изображен векторный поток поля Берри \mathbf{V} в сечении $k_z = \text{const}$.

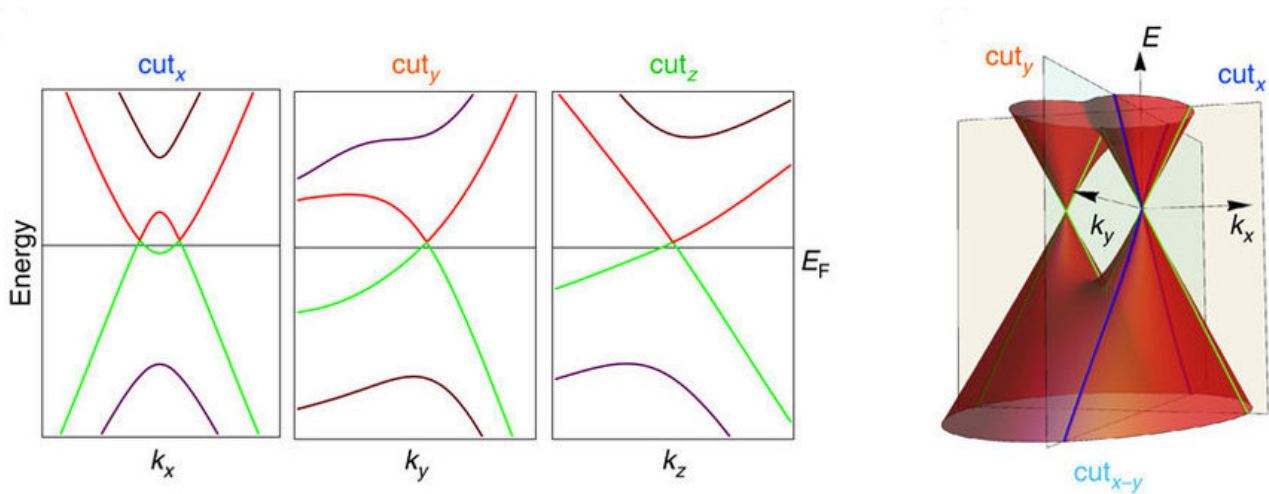


Рис. 1.3: Численный расчёт зонной структуры TaP в окрестности вейлевской пары, подтверждённый экспериментальным исследованием. [10]

Топологическая защита

Согласно теореме Нильсона–Ниномии [4], вне зависимости от наличия симметрий, в любой прыжковой модели с невзаимодействующими электронами суммарная киральность, всех вейлевских точек равна нулю. Другими словами, для каждого «монополя», где-то в зоне Бриллюэна найдётся «антимоноль». Это означает, что вейлевские точки рождаются и аннигилируют парами противоположной киральности. Поскольку они могут находиться произвольно далеко друг от друга, отсюда следует, что слабые изменения гамильтониана не приводят к исчезновению или появлению вейлевских монополей.

Другим следствием теоремы является то, что в T -симметричном полуметалле Вейля минимально возможное количество монополей равно четырём, когда в P -симметричном случае их может быть только два, поскольку пара может родиться в точке $\mathbf{k} = 0$, в присутствии T это запрещено свойством (1.13). Минимальные модели, где данные случаи реализованы рассмотрены ниже.

1.2 Игрушечная модель

Модель Delplace

Самая простая микроскопическая модель, описывающая вейлевские полуметаллы, известная мне, описана в работе [11].

Рассмотрю прыжковую модель на кубической решётке (сторона куба $a = 1$) с центрированными основаниями — две кубические подрешётки (состоящие из атомов типа A и типа B), одна смщённая относительно другой на вектор $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$. Учёт прыжков на ближайших (NN) соседей, следующих ближайших (NNN) соседей, а также разных внутриатомных энергий $\varepsilon_{A,B} = \pm\Delta$ приводит к гамильтониану

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\mathbf{r}} \Delta (c_A^+(\mathbf{r})c_A(\mathbf{r}) - c_B^+(\mathbf{r})c_B(\mathbf{r})) + h.c. \\
 & + \sum_{\mathbf{r}} \sum_{n=0}^3 t_n c_A^+(\mathbf{r})c_B(\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_n) + h.c. \\
 & + \sum_{\mathbf{r}} \sum_{n=0}^3 t'_n c_A^+(\mathbf{r})c_A(\mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon}_n) + h.c. \\
 & + \sum_{\mathbf{r}} \sum_{n=0}^3 t_{\perp} (c_A^+(\mathbf{r})c_A(\mathbf{r} + \mathbf{e}_z) - c_B^+(\mathbf{r})c_B(\mathbf{r} + \mathbf{e}_z)) + h.c.,
 \end{aligned} \tag{1.15}$$

где $t_n = e^{in\pi/2}t$, $t'_n = e^{in\pi/2}t'$, $n = 0\dots3$, а t , t' , t_{\perp} , Δ предполагаются вещественными. Такие фазы можно получить, если вообразить себе магнитное поле, которое обладает симметрией решётки (и поэтому магнитная зона Бриллюэна совпадает с обычной) и пронизывает ячейку образом, показанным на 1.4.

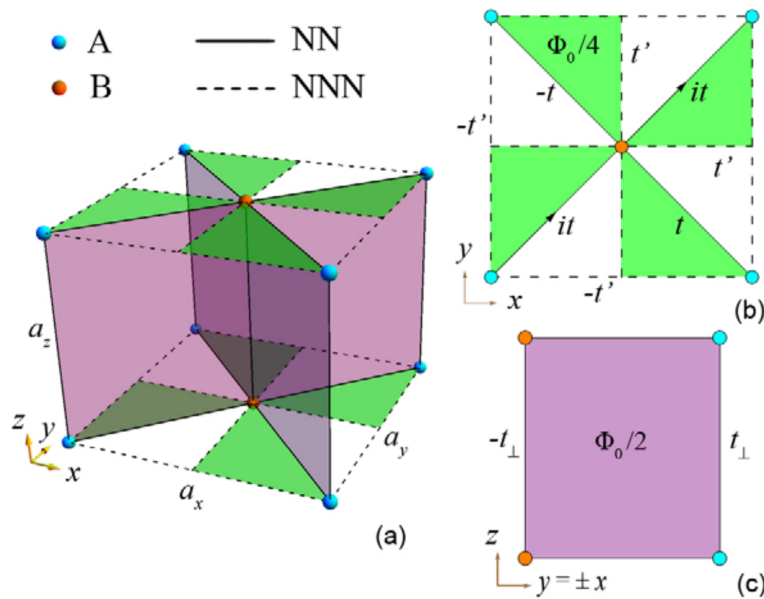


Рис. 1.4: Кристаллическая структура и определение прыжковых коэффициентов.

Вектора δ_n направлены из центра в вершины квадрата, лежащего в плоскости xy , а смотрят ϵ_n по его сторонам.

$$\delta_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \delta_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \delta_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \delta_3 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

$$\epsilon_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \epsilon_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \epsilon_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \epsilon_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

Фурье-преобразование $c_{A,B}(\mathbf{r})$ диагонализует гамильтониан $H = \sum_{\mathbf{k}} c_a^+(\mathbf{k}) H_{ab}(\mathbf{k}) c_b(\mathbf{k})$.

$$H(\mathbf{k}) = 2t \sin k_+ \sigma_x + 2t \sin k_- \sigma_y + [\Delta - 2t'(\cos k_x + \cos k_y) + 2t_{\perp} \cos k_z] \sigma_z, \quad (1.18)$$

где обозначено $k_{\pm} \equiv \frac{1}{2}(k_x \pm k_y)$. Введу также параметры $m_1 = \Delta/2t_{\perp}$, $m_2 = 2t'/t_{\perp}$. Спектр имеет точки касания в координатах $(k_x, k_y) = (0, 0)$ или (π, π) и $\cos k_z = -(m_1 - m_2 \cos k_+ \cos k_-)$. Вблизи данных точек гамильтониан имеет длинноволновое разложение

$$H(\mathbf{k}) = 2tk_+ \sigma_x + 2tk_- \sigma_y + 2t_{\perp}[m_1 - m_2 + 1 - k_z^2], \quad (1.19)$$

которое я буду использовать в дальнейшем с своей работе.

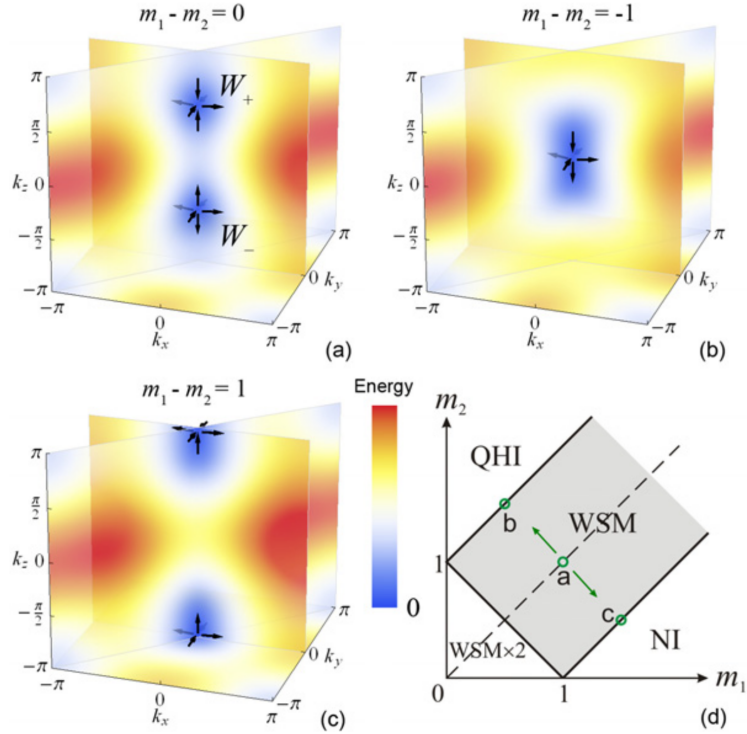


Рис. 1.5: Положение вейлевских точек при значениях $m_1 - m_2 = 0, \pm 1$ и фазовая диаграмма в координатах (m_1, m_2) .

Магнетокондактанс

Постановка задачи

Задача заключается в определении кондактанса $G = dI/dV|_{V \rightarrow 0}$ в баллистическом $p-n$ переходе на основе вейлевского полуметалла при наличии магнитного поля.

Гетеропереход

Гетеропереход представляет из себя соединение полуметаллов легированных примесями донорного n и акцепторного p типа. Влияние примесей заключается в повышении/понижении химического потенциала, за счёт увеличения/уменьшения концентрации электронов. При соединении полуметаллов разного типа происходит перераспределение заряда — электроны бегут из n в p зону, что создаёт электропотенциал $\varphi(z)$, который может быть самосогласованно найден из уравнения Пуассона

$$\frac{d^2}{dz^2} e\varphi(z) = 4\pi e^2 [N(e\varphi(z)) + n_d(z)], \quad (2.1)$$

где $n_d(z) = \text{sgn}(z)$ — концентрация допантов, аппроксимированная ступенчатой функцией, а $N(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon \nu(\epsilon) d\epsilon$ — количество электронов в недопированном вейлевском полуметалле с энергией меньше ε (распределение заряда рассчитывается на фоне нелигированного полуметалла). Данная задача решена в [1] и найдено, что потенциал $\varphi(z)$ меняется на масштабе $\kappa^{-1} = \sqrt{\pi/4} (\hbar v)^{3/2} / |e| \Delta$, где Δ — смещение узла относительно химического потенциала. На этом масштабе можно приблизить функцию $e\varphi(z) = -eEz$ линейной с коэффициентом $E \sim \Delta \kappa / |e| \sim \Delta^2 / (\hbar v)^{3/2}$.

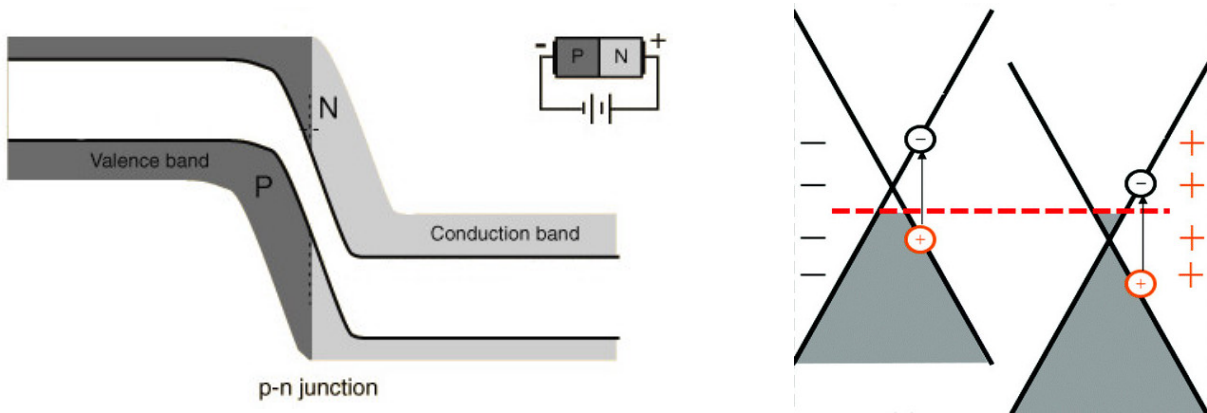


Рис. 2.1: Гетеропереход в полупроводнике и дираковском металле. По вертикальной оси отложена «полная» энергия $\varepsilon_{\mathbf{k}} + e\varphi$ — электрохимический потенциал постоянен в пространстве.

Баллистический режим

При решении я буду полагать, что транспорт электрона на размере потенциала p – n –перехода κ^{-1} происходит без столкновений с примесями, т. е. $\kappa^{-1} \ll l_{imp}$ — для выполнения данного условия концентрация примесей должна быть достаточно мала. Также концентрация примесей предполагается достаточно малой, чтобы не учитывать появление примесных зон проводимости.

В процессе решения предполагается, что температура $T = 0$. Фактически это означает, что должны быть выполнены условия применимости формулы Ландауэра: длина сбой фазы $L_\varphi \propto 1/\sqrt{T}$ должна быть больше масштаба на котором происходит рассеяние κ^{-1} . Также следует потребовать, чтобы неупругие процессы рассеяния вносили пренебрежимо малый вклад в проводимость, электрон–электронное и электрон–фононое взаимодействие должны быть малы $l_{e-e}, l_{e-ph} \ll \kappa^{-1}$.

Чтобы учесть конечную температуру следует также модифицировать формулу Ландауэра (A.14)

$$\frac{e^2}{h} \sum_n T_n(\varepsilon = \mu) \quad \mapsto \quad \frac{e^2}{h} \sum_n \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial n_F(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) T_n(\varepsilon). \quad (2.2)$$

и рассмотреть p – n переход конечной ширины, поскольку в приближении линейного потенциала коэффициенты прохождения не зависят от энергии $T \neq T(\varepsilon)$.

План решения

Ниже я буду вычислять кондактанс p – n перехода для разных гамильтонианов. Согласно формализму Ландауэра, описание которого приведено в приложении A, я буду следовать стандартному плану.

0. Разделить переменные в уравнении Шрёдингера $\psi(\mathbf{r}) = \chi(x, y)\phi(z)$.

1. Решить стационарную задачу Шрёдингера $\hat{H}_\perp \chi_n = \varepsilon_n^\perp \chi_n$.

2. Решить задачу рассеяния $\hat{H}_\parallel(\varepsilon_n^\perp)\phi(z) = \varepsilon\phi(z)$.

3. Просуммировать коэффициенты прохождения T_n по поперечным каналам.

Задача рассеяния всегда будет решаться на нулевой энергии $\varepsilon = 0$, поскольку в линейном потенциале $V(z) = -eEz$, добавка энергии отвечает сдвигу начала координат $V(z) - \varepsilon = -eE(z - z_0)$ и не влияет на ответ.

На протяжении этой главы будут интенсивно использованы обозначения электрической и магнитной длины (заряд электрона $e < 0$).

$$l_E \equiv \sqrt{\frac{\hbar v}{|e|E}}, \quad l_B \equiv \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|B}}. \quad (2.3)$$

2.1 Кондактанс в отсутствии поля

Эффективный гамильтониан, описывающий пару вейлевских узлов, находящихся в точках $k_x = \pm k_0$ вместе с наведённым электрическим полем p - n перехода, выглядит следующим образом.

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\hat{k}_x^2 - k_0^2 \right) \sigma_x + \hbar v \left(\hat{k}_y \sigma_y + \hat{k}_z \sigma_z \right) - eEz, \quad (2.4)$$

Удобно ввести безразмерный параметр $\zeta \equiv \frac{\hbar k_0}{mv}$, характеризующий анизотропию скоростей в вейлевском узле. Тогда при $k_0 \rightarrow \infty$, $\zeta \rightarrow 1$ гамильтониан факторизуется на два одноконусных.

$$(\hbar v)^{-1} \hat{H} = \frac{\zeta}{2k_0} \left(\hat{k}_x^2 - k_0^2 \right) \sigma_x + \hat{k}_y \sigma_y + \hat{k}_z \sigma_z + \frac{z}{l_E^2}, \quad l_E^2 \equiv \frac{\hbar v}{|e|E}. \quad (2.5)$$

Задача рассеяния

Чтобы вычислить кондактанс при помощи формулы Ландауэра (A.14), необходимо решить задачу рассеяния, т. е. найти решение $\psi = e^{ik_x x + ik_y y} \phi(z l_E^{-1})$ уравнения

$$\left[\frac{\hbar l_E}{2mv} (k_x^2 - k_0^2) \sigma_x + k_y l_E \sigma_y + (-i\partial_z) \sigma_z + z \right] \phi(z) = \frac{\varepsilon}{\hbar v / l_E} \phi(z), \quad (2.6)$$

имеющее при $z \rightarrow +\infty$ только распространяющуюся вперёд волну. От члена с энергией ε можно избавиться сдвигом z -координаты, тогда уравнение примет вид

$$\begin{pmatrix} -i\partial_z + z & \Delta^* \\ \Delta & i\partial_z + z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1(z) \\ \phi_2(z) \end{pmatrix} = 0, \quad (2.7)$$

где $\Delta \equiv \frac{\hbar l_E}{2mv} (k_x^2 - k_0^2) + ik_y l_E$. Для определения коэффициента прохождения найду квазиклассическую волновую функцию. Подстановка

$$\phi_{\pm}^{1,2}(z) = \exp \left[\pm i \int k(z) dz \right] \varphi_{\pm}^{1,2}(z), \quad k(z) \equiv \pm \sqrt{z^2 - |\Delta|^2} \quad (2.8)$$

и разложение по коэффициенту при производной ($\frac{d}{dz} \frac{1}{k(z)} \ll 1$) приводит к

$$\varphi_{\pm}^{1,2}(z) = \frac{1}{\sqrt{k(z)}} \begin{pmatrix} c_{\pm}^1 \exp \mp \int \frac{dz}{2k(z)} \\ c_{\pm}^2 \exp \pm \int \frac{dz}{2k(z)} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Следует оставить при $z \rightarrow +\infty$ только решение с положительным током вероятности $j_{\pm} = \phi_{\pm}^{\dagger} \hat{\sigma}_z \phi_{\pm}$, или, эквивалентно, групповой скоростью $v_{\pm}(z) = \pm \partial k(z) / \partial z > 0$. Подходящее решение имеет следующие асимптотики при $|z| \gg |\Delta|$.

$$\phi(z) = t \cdot \phi_{-}(z) \sim t \cdot \exp \left[-\frac{iz^2}{2} + \frac{i}{2} |\Delta|^2 \ln \frac{2\sqrt{e}z}{|\Delta|} \right] \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\Delta}{2z} \end{pmatrix}, \quad z \rightarrow +\infty, \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \phi(z) = \phi_+(z) + r \cdot \phi_-(z) \sim \exp \left[-\frac{iz^2}{2} + \frac{i}{2} |\Delta|^2 \ln \frac{2\sqrt{e}|z|}{|\Delta|} \right] \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\Delta}{2z} \end{pmatrix} + \\ + r \cdot \exp \left[\frac{iz^2}{2} - \frac{i}{2} |\Delta|^2 \ln \frac{2\sqrt{e}|z|}{|\Delta|} \right] \begin{pmatrix} -\frac{\Delta^*}{2z} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad z \rightarrow -\infty. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Сравнивая асимптотические разложения (2.10) с (2.11), и используя, что $\phi(z)$ — целая функция [12, §50], нахожу $t = \exp[-\frac{\pi}{2} |\Delta|^2]$. Поскольку ток вероятности даётся выражением $j^z = v\phi^+ \hat{\sigma}_z \phi$, коэффициент прохождения, ожидаемо, $T = |t|^2$.

Формула Ландауэра

Подстановка в формулу Ландауэра даёт

$$G(0) = \frac{e^2}{h} \int \frac{S d^2 k}{(2\pi)^2} \exp \left[-\pi \left(\frac{\hbar l_E}{2mv} \right)^2 (k_x^2 - k_0^2)^2 - \pi (k_y l_E)^2 \right] \quad (2.12)$$

$$= \frac{2e^2}{\zeta h} \frac{S}{(2\pi l_E)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[-\pi \frac{(x^2 - x_0^2)^2}{x_0^2} \right] \quad (2.13)$$

где обозначено $x_0 \equiv \frac{\zeta}{2} k_0 l_E = \frac{\hbar k_0^2 l_E}{2mv}$, и использован параметр $\zeta \equiv \frac{\hbar k_0}{mv}$.

$$G \simeq \frac{e^2}{h} \frac{S}{(2\pi l_E)^2} \cdot \begin{cases} \frac{\Gamma(\frac{1}{4})}{\sqrt{2}\pi^{\frac{1}{4}}} \left[\frac{mv}{\hbar/l_E} \right]^{\frac{1}{2}}, & \zeta k_0 l_E \ll 1 \\ 2\zeta^{-1}, & \zeta k_0 l_E \gg 1 \end{cases} \quad (2.14)$$

Численные оценки ниже показывают, что всегда выполняется $\zeta k_0 l_E \gg 1$, однако интересно отметить найденное влияние зацепления конусов на зависимость кондуктанса от встроенного электрического поля p – n перехода — $G \propto E^{\frac{3}{4}}$, при $\zeta k_0 l_E \ll 1$.

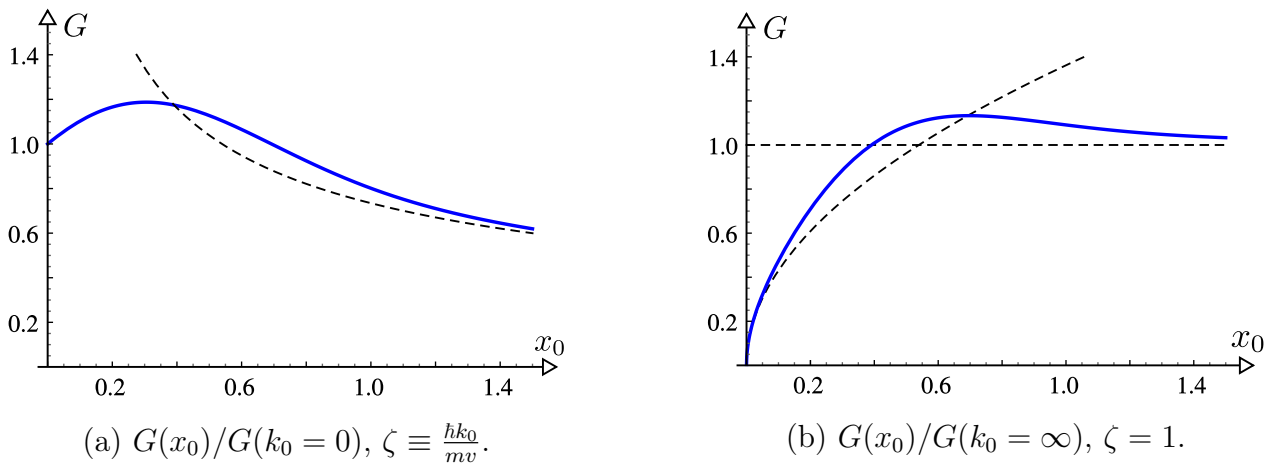


Рис. 2.2: Зависимость $G(x_0)$, $x_0 = \frac{\zeta}{2} k_0 l_E$ в сравнении с асимптотиками.

На графике (а) отображена фактическая зависимость $G(k_0^2)$ при постоянных прочих параметрах. На графике (b) положено $\zeta = 1$, для сравнения с одноконусной меоделью, в действительности $G \rightarrow \text{const} \neq 0$ при $k_0 \rightarrow 0$.

2.2 Магнетокондактанс

Теперь найду кондактанс в присутствии магнитного поля \mathbf{B} , $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$, направленного вдоль p - n перехода $B > 0$.

$$(\hbar v)^{-1} \hat{H} = \frac{\zeta}{2k_0} \left(\left(k_x - \frac{y}{l_B^2} \right)^2 - k_0^2 \right) \sigma_x + \sigma_y \hat{k}_y + \sigma_z \hat{k}_z + \frac{z}{l_E^2}. \quad (2.15)$$

Здесь $l_E^2 \equiv \frac{\hbar v}{eE}$, $l_B^2 \equiv \frac{\hbar c}{eB}$ — электрическая и магнитная длины. Перемасштабирую переменные $y \mapsto l_B y$, $z \mapsto l_E z$, сдвину аргумент $y \mapsto y + k_x l_B$, и разделю переменные, другими словами, подставлю анзац $\psi^{1,2}(x, y, z) = e^{ik_x x} \chi^{1,2}(y l_B^{-1} - k_x l_B) \phi^{1,2}(z l_E^{-1})$.

$$\left[\frac{\zeta}{2k_0 l_B} (y^2 - k_0^2 l_B^2) \sigma_x + \sigma_y \hat{k}_y + \frac{l_B}{l_E} \sigma_z \hat{k}_z + \frac{l_B}{l_E} z \right] \begin{pmatrix} \chi^1(y) \phi^1(z) \\ \chi^2(y) \phi^2(z) \end{pmatrix} = 0. \quad (2.16)$$

Обозначу $y_0 \equiv k_0 l_B$, тогда трансверсальные уравнения гласят

$$\left[\frac{\zeta}{2y_0} (y^2 - y_0^2) \sigma_x + (-i\partial_y) \sigma_y \right] \chi_n(y) = \varepsilon_n \chi_n(y). \quad (2.17)$$

а продольные уравнения имеют такой же вид как и прежде

$$[(-i\partial_z) \sigma_z + (l_E/l_B) \varepsilon_n \sigma_x + z] \phi(z) = 0, \quad (2.18)$$

поэтому коэффициент прохождения равен $|t|^2 = \exp \left[-\pi \frac{l_E^2}{l_B^2} \varepsilon_n^2 \right]$.

Трансверсальное движение

Итак, основной проблемой является нахождение собственных значений ε_n^2 .

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{\zeta}{2y_0} (y^2 - y_0^2) - \partial_y \\ \frac{\zeta}{2y_0} (y^2 - y_0^2) + \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

На первый взгляд, данный гамильтониан является суперсимметричным [13], а значит задача решается точно. Увы, решение при $\varepsilon = 0$, которое так легко интегрируется, $\chi_{\varepsilon=0}^{1,2} = \exp \mp \frac{\zeta}{6y_0} (y^3 - 3y_0^2 y)$ является ненормируемым, и потому нельзя построить решение с помощью лесничных операторов $a^\pm = \frac{\zeta}{2y_0} (y^2 - y_0^2) \mp \partial_y$. Придётся ограничиться нахождением поправок. Перемасштабирую $y \mapsto y/\sqrt{\zeta}$ и введу $g \equiv (4\zeta y_0^2)^{-1}$, чтобы оставить в задаче один параметр. Потенциал примет вид

$$\left[-\partial_y^2 + g \left(y^2 - \frac{1}{4g} \right)^2 - 2\sqrt{gy} \right] \chi = \frac{\varepsilon^2}{\zeta} \chi. \quad (2.20)$$

Ясно, что следует строить теорию возмущений по $\sqrt{g} \ll 1$, при $g = 0$ потенциал распадается на два гармонических осциллятора. По опыту изучения одноточечной

модели В, мне известно, что основной вклад в кондактанс даёт нулевой уровень Ландау. Однако, из существования квазирешения $\chi_{\varepsilon=0}^{1,2}$ следует, что основное состояние $\varepsilon_0 > 0$, а также следует, что все поправки к нему равны отсутствуют в любом порядке по \sqrt{g} . Продемонстрирую это.

Перемещу начало координат в глубокий минимум $y_+ = y - \frac{1}{2\sqrt{g}}$, $\chi = \chi^1$.

$$[-\partial^2 + y_+^2(1 + \sqrt{g}y_+)^2 - 1 - 2\sqrt{g}y_+] \chi = (\varepsilon^2/\zeta)\chi. \quad (2.21)$$

С одной стороны, при $\varepsilon = 0$ уравнению формально удовлетворяет

$$\chi_{\varepsilon=0}(y) = e^{-\frac{y^2}{2} - \sqrt{g}\frac{y^3}{3}} = e^{-\frac{y^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n y^{3n}}{2^n n!} \sqrt{g}^n = \sum_{n=0}^{\infty} \chi_{\varepsilon=0}^{(n)}(y) \sqrt{g}^n. \quad (2.22)$$

С другой стороны, по теории возмущений, первая поправка находится из уравнения

$$\hat{H}^{(0)}\chi^{(1)} + \hat{H}^{(1)}\chi^{(0)} = \varepsilon^{(0)}\chi^{(1)} + \varepsilon^{(1)}\chi^{(0)}, \quad \varepsilon^{(0)} = 0, \quad \chi^{(0)} = e^{-\frac{y^2}{2}}. \quad (2.23)$$

Очевидно его решают (нормируемые) функции $\chi_{\varepsilon=0}^{(n)}$, поскольку $\hat{H}\chi_{\varepsilon=0} = 0$ верно во всех порядках по константе взаимодействия \sqrt{g}^n .

Оказывается, поправка к ε_0 экспоненциально мала по g и может быть найдена с помощью инстантонной техники [14, (17)] или квазиклассики, последний способ подробно описан в приложении С. Ответ суть

$$\varepsilon_0^2 = \frac{\zeta}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{3g}\right), \quad \frac{1}{g} = 4\zeta k_0^2 l_B^2. \quad (2.24)$$

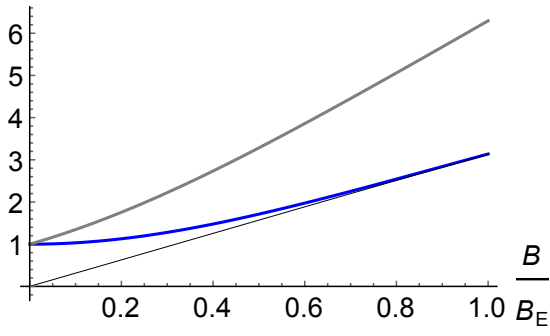
Зависимость кондактанс от поля

Используя (2.24) и пренебрегая смещениями остальных уровней, просуммирую коэффициенты прохождения в пределе $\zeta k_0^2 l_B^2 \gg 1$. Обозначу $B_0 \equiv \zeta \frac{\hbar c}{e} k_0^2$, $B_E \equiv \frac{cE}{v\zeta}$.

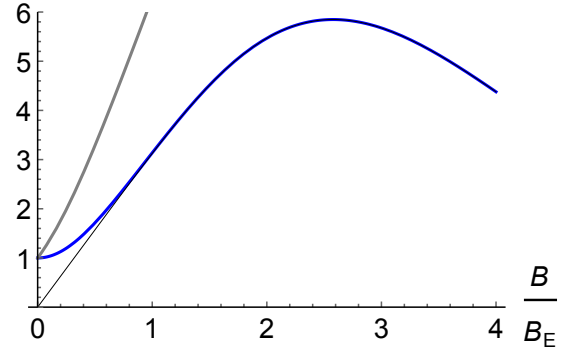
$$\begin{aligned} G(B) &= \frac{e^2}{h} \frac{S}{2\pi l_B^2} \sum_{\varepsilon_n} \exp\left[-\pi \frac{l_E^2}{l_B^2} \varepsilon_n^2\right] \\ &\approx \frac{e^2}{h} \frac{S}{2\pi l_B^2} \left\{ \exp\left[-\zeta \frac{l_E^2}{l_B^2} \exp\left(-\frac{4}{3}\zeta k_0^2 l_B^2\right)\right] + 2 \sum_{n=1}^{n_{max}} \exp\left[-2\pi\zeta \frac{l_E^2}{l_B^2} (n + \delta n^\pm)\right] \right\} \\ &\approx \pi G(0) \frac{B}{B_E} \left\{ \exp\left[-\frac{B}{B_E} \exp\left(-\frac{4}{3}\frac{B_0}{B}\right)\right] - 2 + \frac{2}{1 - \exp\left(-2\pi\frac{B}{B_E}\right)} \right\}. \end{aligned}$$

Функция $G(B)$ имеет максимум при $B = B_c$ который полностью определяется первым членом, и поэтому может быть оценён как

$$B_c \approx \frac{4}{3} \frac{B_0}{\ln \frac{4}{3} \frac{B_0}{B_E}}, \quad \frac{B_0}{B_E} = (\zeta k_0 l_E)^2. \quad (2.25)$$



(a) $G(B)$ up to values $B < B_E \approx 4$ Т.



(b) $G(B)$ up to values $B < B_0 \approx 16$ Т.

Рис. 2.3: Магнетокондуктанс в двухконусной модели в сравнении с одноконусной моделью (серый) и первым членом суммы (чёрный). При $B > B_0$ изложенные результаты неприменимы.

Численные оценки

Для понимания области применимости полученных результатов, нужно оценить численные значения следующих параметров

$$\zeta \equiv \frac{\hbar k_0}{mv}, \quad l_E^2 \equiv \frac{\hbar v}{eE}, \quad l_B^2 \equiv \frac{\hbar c}{eB}, \quad B_0 \equiv \zeta \frac{\hbar c}{e} k_0^2, \quad B_E \equiv \frac{c}{\zeta v} E. \quad (2.26)$$

Величина $k_0 \simeq .02 \text{ \AA}^{-1}$ для форсфориды тантала (TaP) согласно эксперименту [10], что также по порядку согласуется с численными расчётами [9]. В терминах магнитного поля это $B_0 = \frac{\zeta}{\pi} \Phi_0 k_0^2 \simeq 26$ Т.

По данным [10] можно оценить $\zeta \simeq 1$, $v \simeq \alpha c$. Согласно расчётам [1] честной оценкой поля p – n перехода будет $E \simeq \Delta^2 / (\hbar v)^{3/2}$, где Δ — расстояние от химического потенциала до Вейлевского узла. Согласно [15] у TaP $\Delta \simeq 40$ meV, что соответствует «встроенному» электрическому полю $E \simeq 40$ В/м и электрической длине $l_E \simeq 12$ Å, а значит параметр $(\zeta k_0 l_E)^2 \simeq 4$.

Данные оценки показывают, что $B_c < B_0$ и предсказанный экстремум действительно может наблюдаться в TaAs, TaP в полях порядка нескольких гаусс.

Заключение

В данной работе мной была обобщена и частично решена задача о магнетокондуктансе в p – n –перехода в вейлевском полуметалле, разобранный в статье [1]. Я показал актуальность описания данных полуметаллов в физически естественной модели [2], описывающей спаренный вейлевский узел, определив качественно новое поведение зависимости кондуктанса $G(B)$ от магнитного поля. А именно, я нашёл, что в отличие от результатов одноконусной модели [1], в которой дифференциальный кондуктанс имеет аномальный положительный знак при любых полях, двухконусная модель указывает на смену знака дифференциального кондуктанса при полях величиной порядка $\Phi_0 k_0^2$, что для известных полуметаллов типа TaAs, TaP означает единицы Тесла.

Формализм Ландауэра

Что такое кондактанс?

Формула Ландауэра позволяет вычислить кондактанс $G = dI/dV|_{V \rightarrow 0}$ систем, в которых электрический транспорт определяется квантовыми эффектами [16].

Так, согласно формуле Ландауэра, в самом простом случае, кондактанс идеально прозрачного металла $T_n = 1$, при нулевой температуре $T = 0$, равен¹

$$G = \frac{e^2}{h} N_{\perp}, \quad N_{\perp} = \left\lfloor \frac{S k_F^2}{4\pi} \right\rfloor. \quad (\text{A.1})$$

Здесь N_{\perp} — число открытых, т. е. участвующих в транспорте, каналов (уровней) поперечного движения. Получается, что зависимость $G(S)$ при малых S имеет ступенчатый характер, а при больших выходит на знакомый режим $G \propto S$. Действительно, привычно считать, что $G = \sigma \frac{S}{L}$, где σ — удельная проводимость. Но согласно формуле Ландауэра, кондактанс от длины не зависит. Причина такого поведения, заключается в предположении о том, что электроны движутся в металле не взаимодействуя друг с другом или с дефектами в металле. Отсюда проистекает ограничение применимости формулы Ландауэра — считать движение электронов «баллистическим», т. е. бесстолкновительным, можно только для образцов длиной $L < L_{\phi}$, где так называемая длина сбоя фазы $L_{\phi} \rightarrow \infty$, при $T \rightarrow 0$ [17, §5.5].

А.1 Описание задачи

Пусть к образцу подведены металлические провода с разностью напряжений V . С точки зрения электрона, это означает слева и справа от образца имеются «резервуары» с заданными химическими потенциалами $\mu_1, \mu_2 = \mu_1 - eV$. Важно заметить, что речь идёт не о химических потенциалах на левом и правом краях образца, а именно о потенциалах подведённых проводов, поскольку сам контакт «провод-образец» также имеет сопротивление. Подробнее — смотри в книге [18, §5.2].

Коэффициенты прохождения и отражения

В образце, электрон живёт согласно законам квантовой механики, его движение характеризуется вероятностями прохождения T и отражения R волновых пакетов через «рассеиватель», которые определяются через отношение плотностей потока

¹Здесь и далее формулы приведены в расчёте на одну проекцию спина.

вероятности. Для гамильтониана свободной частицы, вейлевского гамильтониана и двухузельного гамильтониана ток выражается согласно

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{-i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*), \quad (\text{A.2})$$

$$\hat{H} = v(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = v\psi^+ \boldsymbol{\sigma} \psi, \quad (\text{A.3})$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} (\hat{k}_z^2 - k_0^2) \sigma^z \quad \Rightarrow \quad j^z(\mathbf{r}) = \frac{-i\hbar}{2m} (\psi^+ \sigma^z \partial_z \psi - (\partial_z \psi^+) \sigma^z \psi), \quad (\text{A.4})$$

что следует непосредственно из эволюционного уравнения Шрёдингера в координатном представлении. Однако, удобнее находить плотность потока как плотность среднего значения скорости

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \text{Re} \psi^+(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{v}} \psi(\mathbf{r}) = \text{Re} \psi^+ \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mathbf{r}] \psi = \text{Re} \psi^+ \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{p}} \psi. \quad (\text{A.5})$$

Вообще говоря, коэффициенты прохождения $T_{mn}(\varepsilon)$ зависят от начального n и конечного m канала и энергии электрона ε .

В случае когда продольная переменная z и поперечные переменные x, y разделяются, волновая функция электрона факторизуется $\psi(\mathbf{r}) = \chi(x, y) \phi(z)$. Поскольку трансверсальное движение финитно, волновой пакет проходит через барьер, находясь на некотором уровне квантования поперечного квантования ε_n — канале распространения. При этом коэффициент прохождения из канала n в канал m диагонален $T_{mn} \propto \delta_{mn}$. Когда переменные не разделяются, понятие канала сохраняется, поскольку на краях образца, где потенциал барьера меняется слабо, уместно адиабатическое приближение.

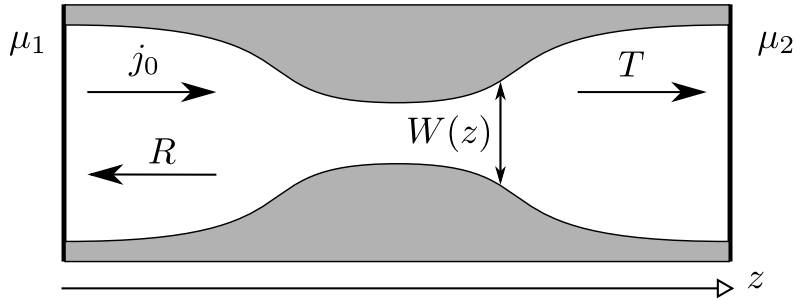


Рис. А.1: Пример квантового точечного контакта.

Пример

Пусть, например, я имею дело со свободной частицей массы m , а барьер представляет из себя сужающееся цилиндрически-симметричное горлышко радиуса $W(z)$, на рис. А.1 изображено продольное сечение контакта. Пусть скраю $W(\mp\infty) = W_{1,2}$. Тогда поперечная волновая функция и энергии слева и справа суть

$$\chi(\boldsymbol{\rho}) = J_m \left(z_n^{(m)} \frac{\boldsymbol{\rho}}{W_{1,2}} \right) e^{im\varphi}, \quad \varepsilon_{m,n}^\perp = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{z_n^{(m)}}{W_{1,2}} \right)^2. \quad (\text{A.6})$$

Индексы m, n , нумерующие n -ый нуль m -ой функции Бесселя, и определяют каналы поперечного квантования. Если радиус сужения меняется плавно по сравнению с масштабом продольного движения $W'(z)/W(z) \ll k_z$, т. е. для низко энергетических каналов $\varepsilon^\perp \ll \varepsilon^\parallel$, можно приближённо разделить переменные, и свести задачу рассеяния к одномерной в эффективном потенциале

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 + \varepsilon - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{z_n^{(m)}}{W(z)} \right)^2 \right] \phi(z) = 0. \quad (\text{A.7})$$

Однако, в данном приближении отсутствуют недиагональные коэффициенты T_{nm} .

Свойства коэффициентов рассеяния

Итого, с точки зрения транспорта, рассеиватель S полностью характеризуется коэффициентами прохождения и отражения T_{mn}, R_{mn} при падении слева, и при падении справа T'_{mn}, R'_{mn} .

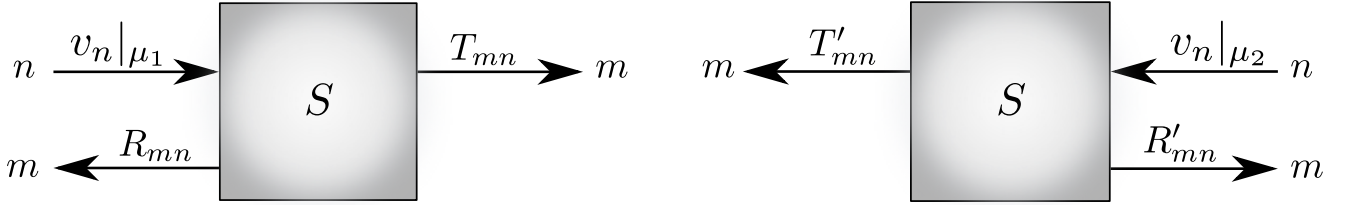


Рис. А.2: Схематическое представление транспортных свойств образца.

Причём выполнено соотношение

$$T_m + R'_m = T'_m + R_m = 1, \quad \text{где} \quad T_n \equiv \sum_n T_{mn} \quad (\text{A.8})$$

которое означает, что весь поток, который приходит в канал m либо протуннелировал через рассеиватель, либо пришёл с той же стороны, отразившись от барьера. В рассматриваемых случаях потенциал симметричен и $T = T', R = R'$.

А.2 Вывод формулы Ландауэра

Энергия и скорость электронов

Рассмотрю электрон, имеющий заданную энергию $\varepsilon = \varepsilon_F + \xi$. Данная энергия распределяется между поперечным и продольным движением. Так, например,

$$\xi_{\mathbf{k}_\perp, k_z} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_\perp^2 + k_z^2 - k_F^2), \quad \xi_{\mathbf{k}_\perp, k_z} = \pm \hbar v \sqrt{\mathbf{k}_\perp^2 + k_z^2} \quad (\text{A.9})$$

в случае свободной массивной и вейлевской частицы соответственно (энергия отсчитывается от уровня Ферми). Получается, что значение волнового вектора k_z

определяется номером канала n , и открыты только те каналы, для которых $\varepsilon_{n,k} < \varepsilon$. Таковых существует $N_{\perp} = \lfloor Sk_F^2/4\pi \rfloor$ штук, причём для каждого существует два значения волнового вектора $k_z > 0$ и $k_z < 0$, отвечающего заданной энергии, — при вычислении тока нужно выбирать те состояния, которые имеют правильный знак групповой скорости $v_{n,k} = \partial\xi_{n,k}/\partial k$.

В рассматриваемых случаях количество электронов, движущихся вправо и влево одинаково, но это не так, например, для одного вейлевского узла в присутствии магнитного поля, благодаря существованию хирального (нулевого) уровня Ландау. Поскольку узлы существуют парами противоположной хиральности, ток будет ненулевой, только если узлы будут сдвинуты по энергии на $\Delta\mu$. Плотность хирального тока, в таком случае согласно формуле Ландауэра (B.8).

$$\Delta j = \frac{\Delta I}{S} = \frac{e^2}{h} \frac{\Delta\mu}{2\pi l_B^2} = \frac{e^3 B}{h^2 c} \Delta\mu. \quad (\text{A.10})$$

Подробнее — читай статью [19] или смотри лекцию [20].

Вычисление тока

При вычислении тока, буду также предполагать, что электрон, прошедший через барьер, скажем, из левого резервуара всегда найдёт место в правом резервуаре, т. е. не буду учитывать принцип запрета Паули при определении конечного состояния. Подробнее — смотри в книге [18, §5.2].

Ток через поперечное сечение, скажем, слева (справа — такой же) от рассеивателя состоит из трёх вкладов (см. рис. A.2)

$$I = \int_0^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} \sum_{mn} e v_m(\varepsilon) [f_1(\varepsilon)\delta_{mn} - f_1(\varepsilon)R_{mn}(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)T'_{mn}(\varepsilon)] \quad (\text{A.11})$$

$$= /\varepsilon = \mu_1 + \xi/ = e \sum_{mn} \int \frac{d\xi}{h v_m(\xi)} v_m(\xi) T'_{mn}(\xi) [f_1(\xi) - f_2(\xi)] \quad (\text{A.12})$$

$$= (\mu_1 - \mu_2) \cdot \frac{e^2}{h} \int d\xi \left(-\frac{\partial f}{\partial \xi} \right) \sum_{mn} T'_{mn}(\xi). \quad (\text{A.13})$$

Отмечу, что результат не зависит от размерности, т. к. суммирование по k_z эффективно одномерное и плотность состояний $\nu(\xi) = (2\pi\hbar(\partial\xi_{n,k}/\partial k))^{-1}$ сокращается со скоростью $v_{n,k}$. Окончательно, кондактанс

$$G = \frac{e^2}{h} \int \frac{d\xi}{4T \operatorname{ch}^2 \frac{\xi}{T}} \sum_{mn} T_{mn}(\xi) \sim \frac{e^2}{h} \sum_{mn} T_{mn}(\varepsilon = \mu), \quad T \rightarrow 0. \quad (\text{A.14})$$

Последнюю формулу можно переписать как $G = \frac{e^2}{h} \operatorname{tr}(t^+ t)$, если вспомнить, что $T_{mn} = |t_{mn}|^2$ и считать t_{mn} симметричной, что верно не всегда — в общем случае, согласно соотношениям Онсагера $t_{mn}(\mathbf{B}) = t_{nm}(-\mathbf{B})$.

Приложение В

Одноконусная модель

В данной секции я кратко воспроизведу основные результаты статьи [1], при этом я также буду следовать плану решения, описанном в Главе 2.

В.1 Магнитное поле вдоль гетероперехода

Рассмотрю p – n переход в вейлевском полуметалле в присутствии магнитного поля \mathbf{B} , сонаправленного с «встроенным» электрическим полем p – n перехода \mathbf{E} .

$$\hat{H} = \hbar v \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) - eEz, \quad (\text{B.1})$$

В калибровке $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ импульс k_x коммутирует с Гамильтонианом.

$$(\hbar v)^{-1} \hat{H} = \sigma_x \left(k_x - \frac{y}{l_B^2} \right) + \sigma_y \hat{k}_y + \sigma_z \hat{k}_z + \frac{z}{l_E^2}, \quad l_B^2 \equiv \frac{\hbar c}{|e|B}, \quad l_E^2 \equiv \frac{\hbar v}{|e|E}. \quad (\text{B.2})$$

Подстановка $\psi^{1,2}(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} \chi^{1,2}(yl_B^{-1} - k_x l_B) \phi^{1,2}(zl_E^{-1})$ разделяет переменные.

$$[y\sigma_x + i\partial_y \sigma_y] \chi_n(y) = \varepsilon_n \chi_n(y), \quad (\text{B.3})$$

$$[(l_E/l_B)\varepsilon_n \sigma_x + i\partial_z \sigma_z - z] \phi(z) = 0, \quad (\text{B.4})$$

причём в последнем уравнении я положил энергию равной нулю, поскольку коэффициент прохождения в линейном потенциале от нее не зависит.

Трансверсальное движение

Поперечные уравнения (B.3) легко решаются и дают уровни Ландау [12, §112].

$$(y \mp \partial_y) \chi^{1,2}(y) = \varepsilon \chi^{2,1}(y) \quad \Rightarrow \quad (-\partial_y^2 + y^2 - \varepsilon^2 \pm 1) \chi^{1,2}(y) = 0. \quad (\text{B.5})$$

$$\chi_n = \begin{pmatrix} \psi_n^{\text{osc}} \\ \psi_{n+1}^{\text{osc}} \end{pmatrix} \quad \chi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0^{\text{osc}} \end{pmatrix} \quad \varepsilon_n = \sqrt{2n}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{B.6})$$

Здесь $\psi_n^{\text{osc}}(y) \propto e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y)$ — собственные функции гармонического осциллятора.

Задача рассеяния

Продольные уравнения в импульсном представлении имеют вид

$$i\partial_k \begin{pmatrix} \phi^1 \\ \phi^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k & \Delta_n \\ \Delta_n & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^1 \\ \phi^2 \end{pmatrix} \quad \Delta_n \equiv \frac{l_E}{l_B} \varepsilon_n, \quad (\text{B.7})$$

что совпадает с уравнениями Ландау–Зенера, с импульсом k роли времени. Вероятность перехода на другой уровень в задаче Ландау–Зенера хорошо известна и равна $P = \phi^+ \phi|_{k \rightarrow +\infty} = \exp(-\pi|\Delta_n|^2)$. Формально эта вероятность совпадает с коэффициентом прохождения в задаче рассеяния $T = \phi^+ \hat{\sigma}_z \phi$ — в обоих случаях начальные волновые функции равнялись $\phi^1 = 1, \phi^2 = 0$.

Формула Ландауэра

Суммирование коэффициентов прохождения $T_n = \exp(-2\pi \frac{l_E^2}{l_B^2} n)$ по осцилляторным модам $n \in \mathbb{N}_0$ с учётом того, что каждая мода вырождена $BS/2\Phi_0 = S/2\pi l_B^2$ даёт выражение для кондактанса

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{S}{2\pi l_B^2} \sum_{n=0}^{\infty} T_n = \frac{e^3 BS/h^2 c}{1 - \exp(2\pi \frac{vB}{cE})}. \quad (\text{B.8})$$

В пределе $B \rightarrow 0$, нахожу

$$G(0) = \frac{e^2}{h} \frac{S}{2\pi l_E^2} = \frac{e^3 ES}{h^2 v}. \quad (\text{B.9})$$

Здесь важно отметить, что основной вклад в кондактанс вносит нулевой уровень Ландау, для которого $T_0 = 1$, вклады высших уровней экспоненциально меньше.

Однородная квазиклассика

С.1 Наклонённый двухъямный потенциал

Решу стационарную задачу Шрёдингера (потенциал изображён на рис. С.1)

$$\left[-\partial^2 + g \left(y^2 - \frac{1}{4g} \right)^2 - 2\sqrt{g}y \right] \chi(y) = 2\nu\chi(y). \quad (\text{C.1})$$

в первом неисчезающем порядке по параметру $g \ll 1$ с помощью метода однородной квазиклассики. В терминах переменных $y_{\pm} = y \mp \frac{1}{2\sqrt{g}}$ потенциал имеет вид

$$\left[-\partial^2 + y_{\pm}^2 (1 \pm \sqrt{g}y_{\pm})^2 \mp 1 - 2\sqrt{g}y_{\pm} \right] \chi(y_{\pm}) = 2\nu\chi(y_{\pm}). \quad (\text{C.2})$$

При $g = 0$ задача факторизуется на два независимых осциллятора.

$$\left[-\partial^2 + y_{\pm}^2 - (2\nu_{\pm} + 1) \right] \chi(y_{\pm}) \approx 0, \quad |y_{\pm}| \ll 1/\sqrt{g}, \quad (\text{C.3})$$

где обозначено $\nu_+ = \nu$, $\nu_- = \nu - 1$. Каждое из уравнений имеет собственные значения $\nu_{\pm} = 0, 1, 2, \dots$, а исходное уравнение тогда имеет спектр $\nu = 0, 1^{(2)}, 2^{(2)}, \dots$. Взаимодействие $g \neq 0$, как известно [12, §50], приводит к экспоненциально малым

$$\delta\nu_n \sim \text{const} \cdot \exp(-S_{\text{tunnel}}) = \text{const} \cdot g^{-n} \exp(-1/6g) \quad (\text{C.4})$$

расщеплениям вырожденных уровней, за счёт туннельного перекрытия невозмущённых волновых функций, вычисление которых на фоне одинаковых степенных смещений обычно и представляет интерес (в рассматриваемом потенциале степенные поправки отсутствуют, как следствие нарушенной суперсимметрии).

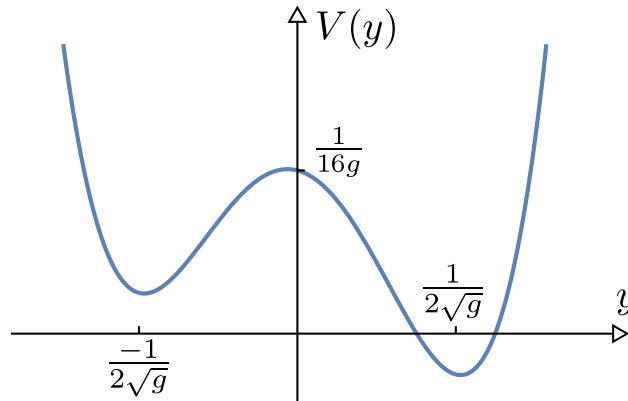


Рис. С.1: Наклонённый суперсимметричный двухъямный потенциал ($g = 2^{-6}$).

Однако, метод [12, §50] даёт неверный предэкспоненциальный множитель и, самое главное, неспособен определить смещение основного уровня ν_0 , который играет основную роль в определении кондактанса. Оказывается, правильный первый член асимптотического разложения можно получить, если вблизи минимумов точно решить (C.3) и сшить решения с глобальным квазиклассическим решением

$$\chi(y) = C_+ \frac{\exp \int_0^y |k(z)| dz}{\sqrt{|k(y)|}} + C_- \frac{\exp - \int_0^y |k(z)| dz}{\sqrt{|k(y)|}}. \quad (\text{C.5})$$

под барьером $|y| < \frac{\text{const}}{\sqrt{g}}$, где квазиклассический импульс равен

$$|k(y)| = \sqrt{g \left(y^2 - \frac{1}{4g} \right)^2 - 2\sqrt{g}y - 2\nu}. \quad (\text{C.6})$$

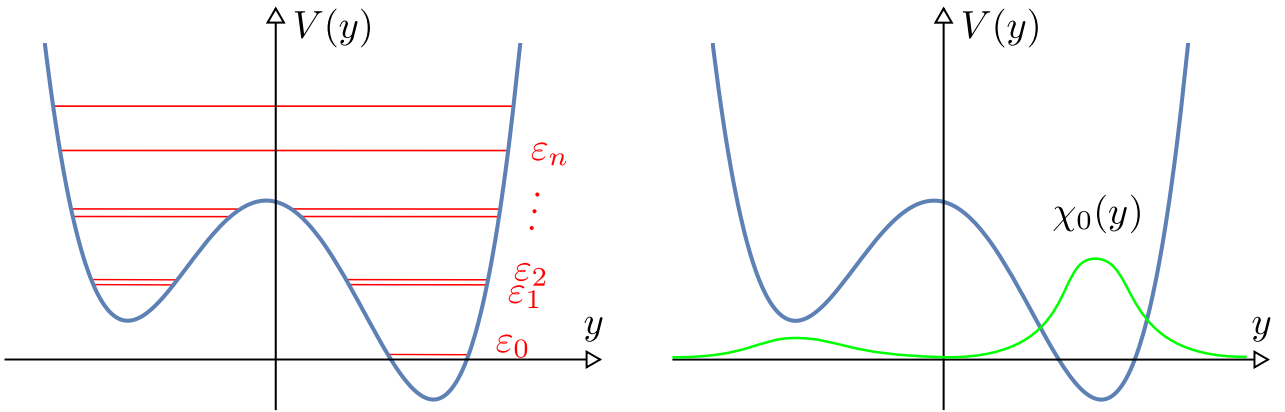


Рис. C.2: Уровни энергии $\varepsilon_n = 2\nu_n$ и волновая функция основного состояния $\chi_0(y)$.

Сшивка квазиклассических решений

Решение, затухающее на $y \rightarrow +\infty$, называется функцией Эрмита $\psi_\nu^{\text{osc}}(y)$ и имеет асимптотическое поведение

$$\psi_\nu^{\text{osc}}(y) \sim \begin{cases} (2y)^\nu e^{-\frac{y^2}{2}}, & y \rightarrow +\infty \\ \cos \pi\nu (-2y)^\nu e^{-\frac{y^2}{2}} + \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(-\nu)} (-y)^{-\nu-1} e^{\frac{y^2}{2}}, & y \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

Казалось бы, сохранение сублидирующего члена асимптотики незаконно на фоне ошибки лидирующего вклада, но это не так по следующим причинам. Во-первых, меня интересуют значения аргумента $|y_\pm| \ll \frac{1}{\sqrt{g}}$, поскольку сшивка должна происходить в области, где ещё верно (C.3). Во-вторых, я сшиваю не значения в точке, а функциональные зависимости — выражение (C.5) содержит две экспоненты с разными знаками, значит такой же вид должна иметь асимптотика. В-третьих, лидирующий член содержит множитель $1/\Gamma(-\nu) \rightarrow 0$, при $g \rightarrow 0$.

Квазиклассическое действие вблизи точек поворота $|y| \sim \frac{\text{const}}{\sqrt{g}}$, т. е. при $|y_{\pm}| \ll \frac{1}{\sqrt{g}}$

$$S(y) = \frac{1}{8g} \int_0^{2\sqrt{gy}} \sqrt{(1-z^2)^2 - 16g(z+2\nu)} dz = \quad (\text{C.8})$$

$$= \left[\frac{1}{8g} \left(z - \frac{z^3}{3} \right) + \frac{1}{2} \ln |1-z^2| + \nu \ln \left| \frac{1-z}{1+z} \right| + \mathcal{O}(g) \right] \Big|_0^{2gx} \quad (\text{C.9})$$

$$= \frac{1}{12g} - \frac{y_+^2}{2} + \frac{1}{2} \ln [-4\sqrt{gy_+}] + \nu \ln [-\sqrt{gy_+}] + \mathcal{O}(y_+^3), \quad (\text{C.10})$$

$$= -\frac{1}{12g} + \frac{y_-^2}{2} + \frac{1}{2} \ln [4\sqrt{gy_+}] - \nu \ln [\sqrt{gy_-}] + \mathcal{O}(y_-^3). \quad (\text{C.11})$$

Сравнение (C.10) и (C.11) с выражением (C.7) определяет условие квантования.

$$\frac{C_+}{C_-} = \frac{2^{\nu_+} e^{-i\pi\nu_+}}{\sqrt{\pi}/\Gamma(-\nu_+)} \frac{e^{-\frac{1}{12g} - \nu \ln[\sqrt{g}]}}{e^{\frac{1}{12g} + \nu \ln[\sqrt{g}]}} = \frac{\sqrt{\pi}/\Gamma(-\nu_-)}{2^{\nu_-} e^{i\pi\nu_-}} \frac{e^{\frac{1}{12g} + \nu \ln[\sqrt{g}]}}{e^{-\frac{1}{12g} - \nu \ln[\sqrt{g}]}}. \quad (\text{C.12})$$

Прихожу к уравнению на энергию на энергию ($\varepsilon = 2\nu$).

$$\left(\frac{g}{2}\right)^{2\nu} \Gamma(\nu)\Gamma(1+\nu) \text{tg}^2 \pi\nu = \frac{\pi}{2} e^{-\frac{1}{3g}}. \quad (\text{C.13})$$

В пределе $g \ll 1$ когда ν близко к целому, так что $\nu_n = \left[\frac{n}{2}\right] + (-)^n \delta\nu_n$,

$$\delta\nu_0 = \frac{e^{-\frac{1}{3g}}}{2\pi}, \quad \delta\nu_n = \sqrt{\frac{n}{2\pi}} \left(\frac{2}{g}\right)^n \frac{e^{-\frac{1}{6g}}}{n!}. \quad (\text{C.14})$$

Так описываются низколежащие уровни в суперсимметричном наклонённом двухъямном потенциале, причём для $n > 0$ указанная формула даёт расщепления, а не сдвиги уровней. Формула имеет смысл для $\left[\frac{n}{2}\right] < n_{\text{max}} \approx \lfloor 1/32g \rfloor$. Численное решение уравнения Шрёдингера показывает, что результат $\delta\nu_0$ даёт ответ с ошибкой меньше 3% вплоть до $g < \frac{1}{4}$, что эквивалентно $B < B_0$.

Список литературы и ссылок

- [1] S. Li, A.V. Andreev, and B.Z. Spivak. Klein tunneling and magnetoresistance of p - n junctions in weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 94:081408, Aug 2016. [arXiv:1605.02799](#).
- [2] R. Okugawa and S. Murakami. Dispersion of fermi arcs in weyl semimetals and their evolutions to dirac cones. *Phys. Rev. B*, 89:235315.
- [3] В.Б. Берестецкий и Е.М. Лифшиц и Л.П. Питаевский. *Теоретическая физика. Том 4. Квантовая электродинамика*. ФИЗМАТЛИТ, Москва, 2006.
- [4] Н.В. Nielsen and M. Ninomiya. The adler-bell-jackiw anomaly and weyl fermions in a crystal. *Physics Letters B*, 130(6):389 – 396, 1983.
- [5] Е.М. Лифшиц и Л.П. Питаевский. *Теоретическая физика. Том 9. Статистическая физика. Часть 2*. ФИЗМАТЛИТ, Москва, 2006.
- [6] O. Vafek and A. Vishwanath. Dirac fermions in solids: From high- t_c cuprates and graphene to topological insulators and weyl semimetals. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 5(83-112), 2014. [arXiv:306.2272](#).
- [7] S. Tchoumakov, M. Civelli, and M. Goerbig. Magnetic-field-induced relativistic properties in type-i and type-ii weyl semimetals. *Phys. Rev. Lett.*, 117:086402, Aug 2016. [arXiv:1605.00994](#).
- [8] Berry M.V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 392(1802), 1984. [Michael's webpage](#).
- [9] Hongming Weng, Chen Fang, Zhong Fang, B. Andrei Bernevig, and Xi Dai. Weyl semimetal phase in noncentrosymmetric transition-metal monophosphides. *Phys. Rev. X*, 5:011029, Mar 2015. [arXiv:1501.00060](#).
- [10] N. Xu et.al. Observation of weyl nodes and fermi arcs in tantalum phosphide. *Nature Communications*, 2016. [arXiv:1507.03983](#).
- [11] D. Delplace, J. Li, and D. Carpentier. Topological weyl semi-metal from a lattice model. *ALJEPF*, 2012.
- [12] Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Том 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. ФИЗМАТЛИТ, Москва, 2008.
- [13] И.В. Криве и Л.Э. Генденштейн. Суперсимметрия в квантовой механике. *УФН*, 146(8):553–590, 8 1985.
- [14] Zinn-Justin J. Jentschura, U.D. Instantons in quantum mechanics and resurgent expansions. *Physics Letters B*, 596(1):138 – 144, 2004. [arXiv:hep-ph/0405279](#).

- [15] Su-Yang et.al. Xu. Experimental discovery of a topological weyl semimetal state in tap. *Science Advances*.
- [16] Г.Б. Лесовик и И.А. Садовский. Описание квантового электронного транспорта с помощью матриц рассеяния. *УФН*, 181(10):1041–1096, 2011. [arXiv:1408.1966](#).
- [17] В.Ф. Гантмахер. *Электронны в неупорядоченных средах*. ФИЗМАТЛИТ, 2013.
- [18] Y. Imry. *Introduction to mesoscopic physics*. Oxford University Press, 1997.
- [19] P. Baireuther, J.A. Hutasoit, J. Tworzydło, and C.W.J. Beenakker. Scattering theory of the chiral magnetic effect in a weyl semimetal: interplay of bulk weyl cones and surface fermi arcs. *New Journal of Physics*, 18(4):045009, 2016. [arXiv:1512.02144](#).
- [20] C.W.J. Beenakker. Topological surface fermi arcs in a weyl semimetal and the chiral magnetic effect without landau levels. *Tel Aviv University*.