

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  $\Phi_0$  — квант магнитного потока.

# Оглавление

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

## 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  $\boldsymbol{\alpha}$ ,  $\beta$  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  $\hat{\mathbf{1}} \otimes \sigma^z$  коммутирует<sup>1</sup> 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 двукратно 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 занимательными транспортными свойствами.

---

<sup>1</sup>Таковую 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.<sup>2</sup>

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

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  $\mu$ , и бывает достаточно ограничиться только двумя зонами — валентной и зоной проводимости. Эффективно такой электрон описывается гамильтонианом  $2 \times 2$ , 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  $f_{\mu}$  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  $v_{\mu}^{\nu}$  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.<sup>3</sup> 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  $v > 0$ .

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

<sup>3</sup>Данный 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  $\rho$  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.

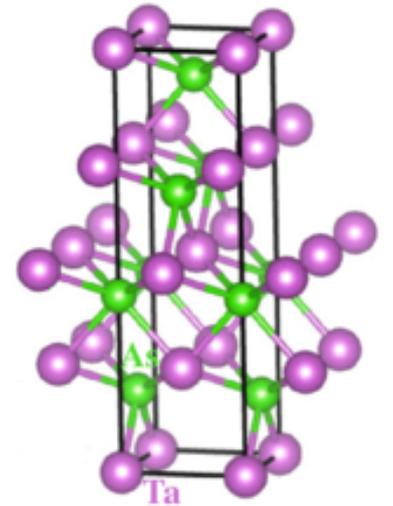


Рис. 1.1: Решётка TaAs.

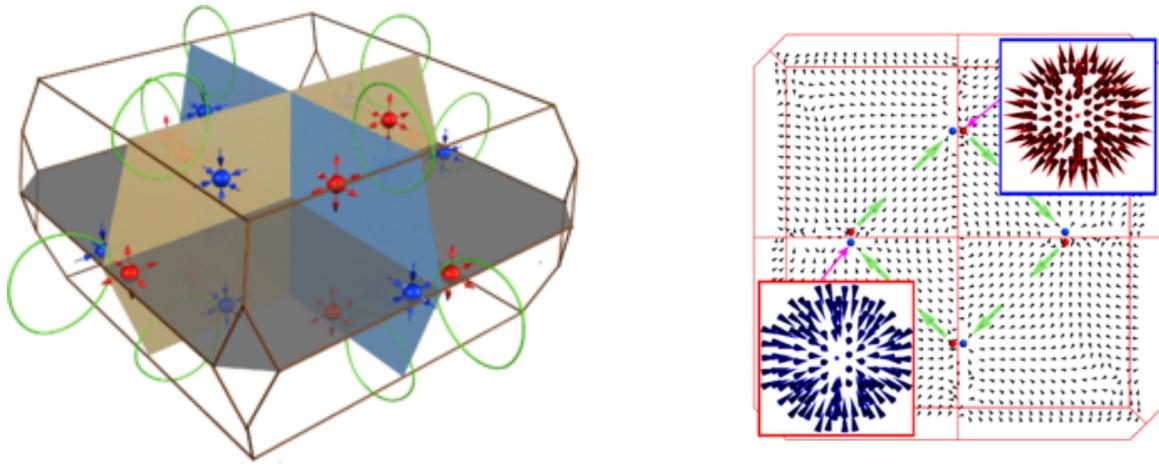


Рис. 1.2: Зона Бриллюэна TaAs и 12 пар вейлевских монополей. [9]  
Справа изображен векторный поток поля Берри  $\mathbf{V}$  в сечении  $k_z = \text{const}$ .

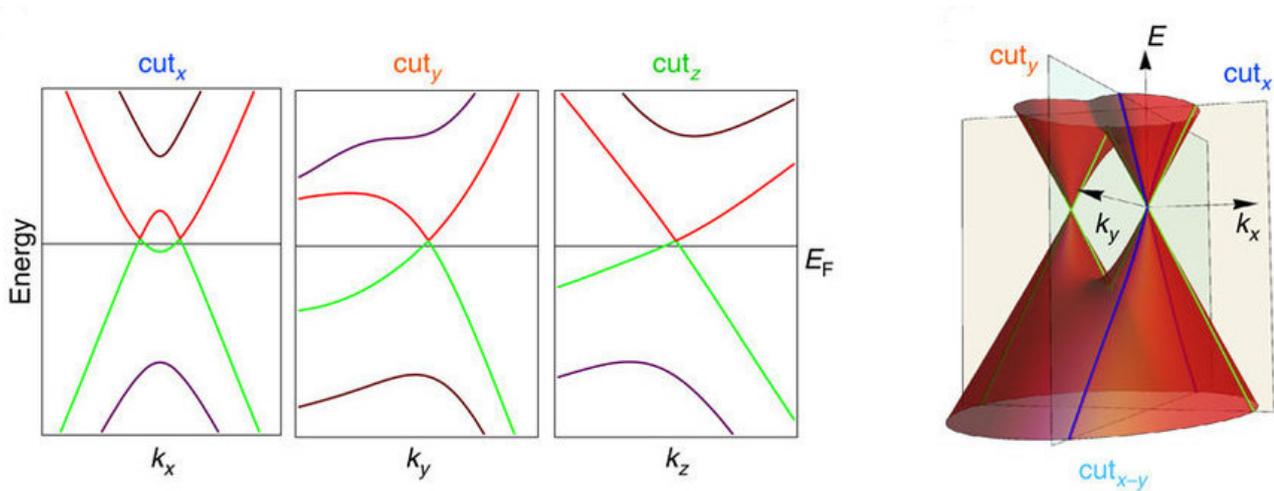


Рис. 1.3: Численный расчёт зонной структуры TaP в окрестности вейлевской пары, подтверждённый экспериментальным исследованием. [10]

## 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  $t$ ,  $t'$ ,  $t_{\perp}$ ,  $\Delta$  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.

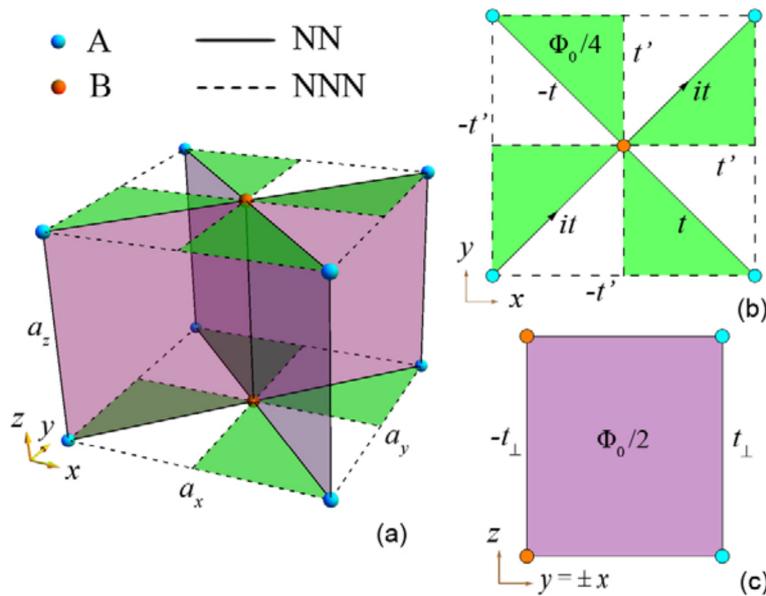


Рис. 1.4: Кристаллическая структура и определение прыжковых коэффициентов.

Вектора  $\delta_n$  направлены из центра в вершины квадрата, лежащего в плоскости  $xy$ , а смотрят  $\epsilon_n$  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  $(\pi, \pi)$  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.

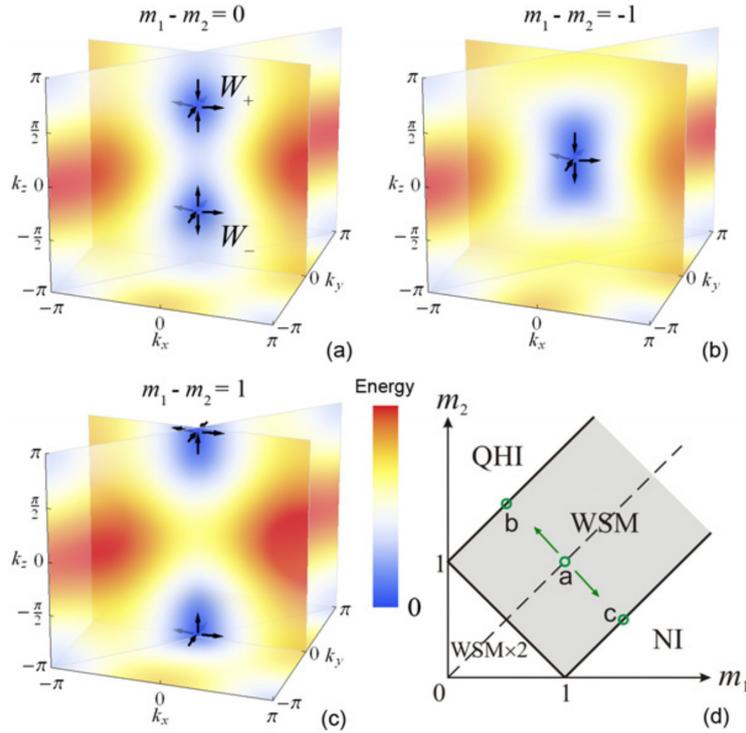


Рис. 1.5: Положение вейлевских точек при значениях  $m_1 - m_2 = 0, \pm 1$  и фазовая диаграмма в координатах  $(m_1, m_2)$ .

## 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  $\varepsilon$  (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  $\Delta$  — смещение узла относительно химического потенциала. На этом масштабе можно приблизить функцию  $e\varphi(z) = -eEz$  линейной с коэффициентом  $E \sim \Delta\kappa/|e| \sim \Delta^2/(\hbar v)^{3/2}$ .

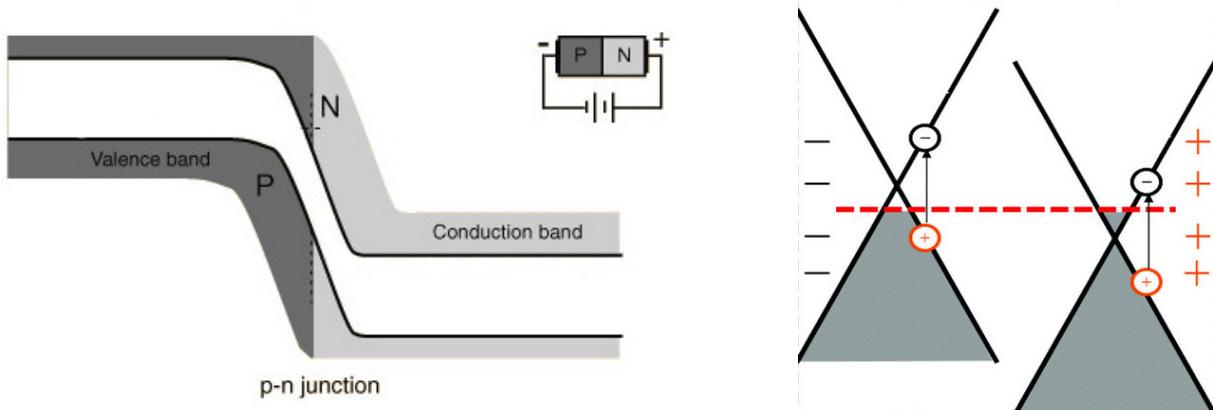


Рис. 2.1: Гетеропереход в полупроводнике и дираковском металле. По вертикальной оси отложена «полная» энергия  $\varepsilon_{\mathbf{k}} + e\varphi$  — электрохимический потенциал постоянен в пространстве.

## Баллистический режим

При решении я буду полагать, что транспорт электрона на размере потенциала  $p$ – $n$ –перехода  $\kappa^{-1}$  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 сбоя фазы  $L_\varphi \propto 1/\sqrt{T}$  должна быть больше масштаба на котором происходит рассеяние  $\kappa^{-1}$ . 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  $\varepsilon$  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  $\zeta k_0 l_E \ll 1$ .

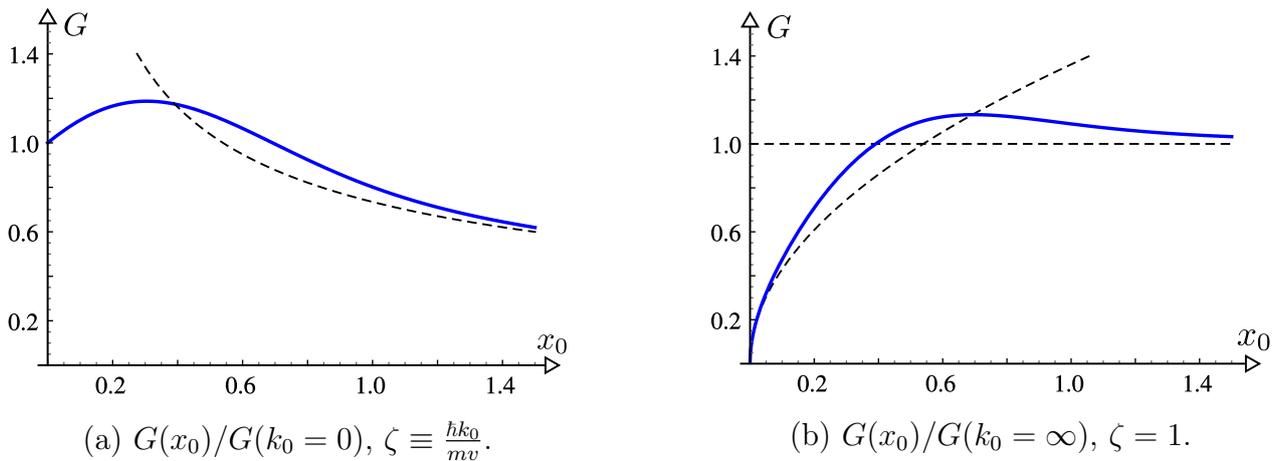


Рис. 2.2: Зависимость  $G(x_0)$ ,  $x_0 = \frac{\zeta}{2} k_0 l_E$  в сравнении с асимптотиками.

На графике (а) отображена фактическая зависимость  $G(k_0^2)$  при постоянных прочих параметрах. На графике (b) положено  $\zeta = 1$ , для сравнения с одноконусной моделью, 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  $\varepsilon_n^2$ .

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

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  $\varepsilon_0$  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

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

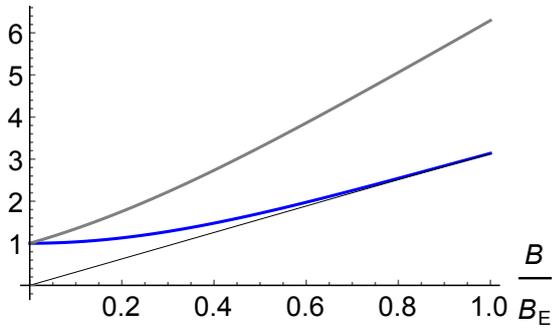
## Зависимость кондактанс от поля

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

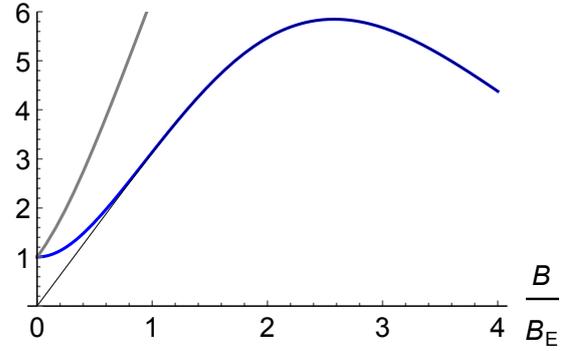
$$\begin{aligned} G(B) &= \frac{e^2}{h} \frac{S}{2\pi l_B^2} \sum_{\varepsilon_n} \exp\left[-\pi \frac{l_E^2}{l_B^2} \varepsilon_n^2\right] \\ &\approx \frac{e^2}{h} \frac{S}{2\pi l_B^2} \left\{ \exp\left[-\zeta \frac{l_E^2}{l_B^2} \exp\left(-\frac{4}{3}\zeta k_0^2 l_B^2\right)\right] + 2 \sum_{n=1}^{n_{max}}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

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 форсфорид 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  $\Delta$  — расстояние от хим 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  $T = 0$ , равен<sup>1</sup>

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

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  $\sigma$  — 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

---

<sup>1</sup>Здесь 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  $\varepsilon$ .

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  $\varepsilon_n$  — 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.

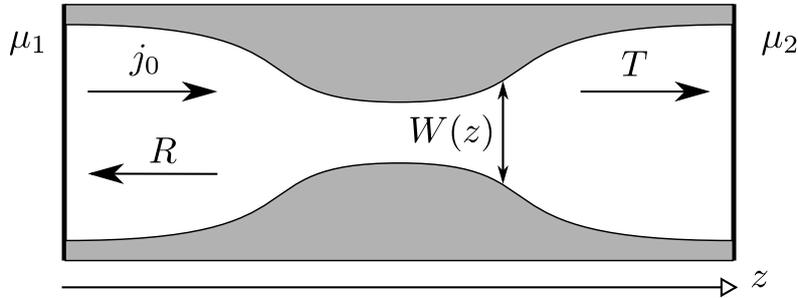


Рис. А.1: Пример квантового точечного контакта.

## Пример

Пусть, например, я имею дело со свободной частицей массы  $m$ , а барьер представляет из себя сужающиеся 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  $T'_{mn}, R'_{mn}$ .

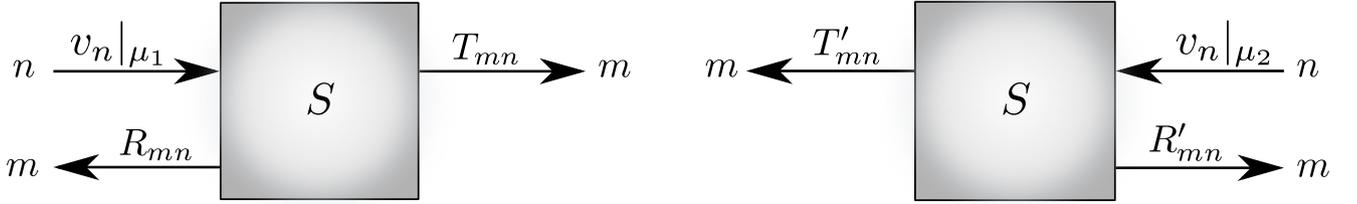


Рис. А.2: Схематическое представление транспортных свойств образца.

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  $\mathbf{E}$ .

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

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  $\psi^{1,2}(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} \chi^{1,2}(y l_B^{-1} - k_x l_B) \phi^{1,2}(z l_E^{-1})$  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).

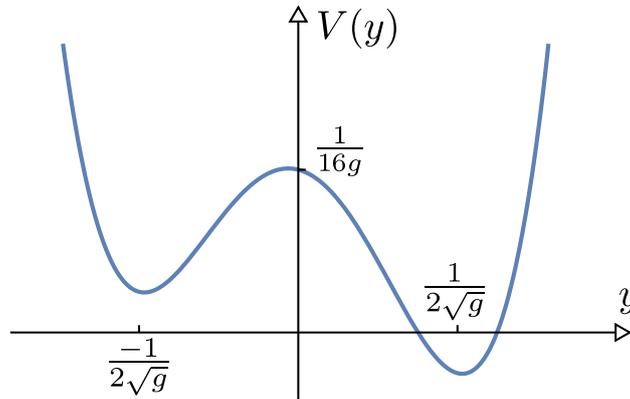


Рис. С.1: Наклонённый суперсимметричный двухъямный потенциал ( $g = 2^{-6}$ ).

Однако, метод [12, §50] даёт неверный предэкспоненциальный множитель и, самое главное, неспособен определить смещение основного уровня  $\nu_0$ , 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

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

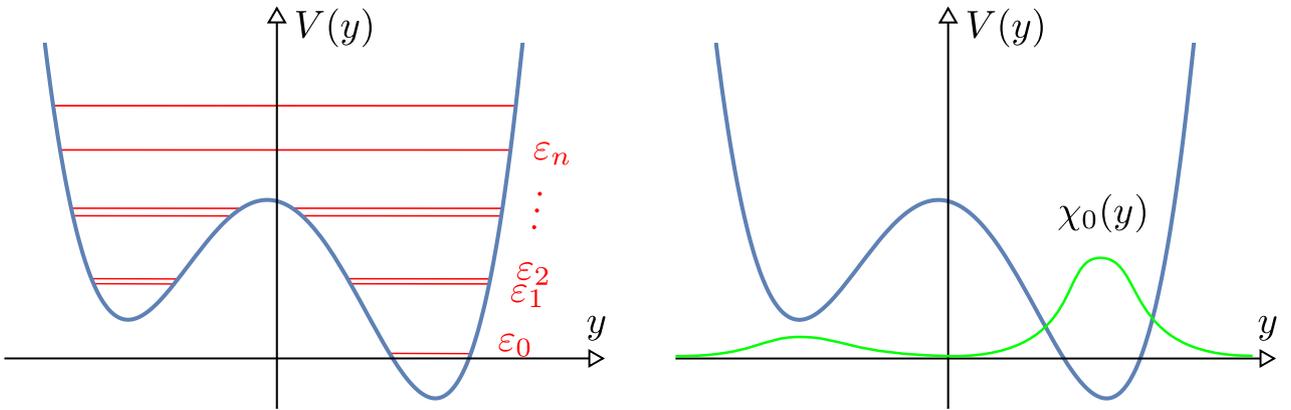


Рис. C.2: Уровни энергии  $\varepsilon_n = 2\nu_n$  и волновая функция основного состояния  $\chi_0(y)$ .

## 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  $\nu$  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. *Электроны 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*.