

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛУМЕТАЛЛОВ ВЕЙЛЯ И ДИРАКА

Рышкевич А.А.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Данилюк А.Л. – канд. физ.-мат. наук,

В данной работе представлены результаты моделирования плотности электронных состояний в вейлевском полуметалле в сравнении с полуметаллом с энергетическим зазором и дираковским полуметаллом. Установлено наличие излома в плотности состояний полуметалла Вейля.

Исследование новых топологических материалов является популярнейшей областью в современной физике конденсированного состояния. Обширный интерес проявляется к новым системам, представляющим топологические полуметаллы. Их общая особенность заключается в том, что в зонной структуре присутствуют точки (дираковские или вейлевские), в которых валентная зона касается зоны проводимости, и реализуется линейный закон дисперсии. Такая ситуация напоминает электронный спектр графена или поверхностного (краевого) состояния топологического изолятора, однако, благодаря трехмерности топологических полуметаллов, они отличаются большей устойчивостью к возмущениям. Необычная зонная структура порождает множество новых физических явлений, касающихся объемных свойств топологических полуметаллов. Среди них большая подвижность носителей, киральная аномалия магнетосопротивления, аномальный и нелинейный эффекты Холла, а также необычные оптические свойства [1].

Полуметаллы Вейля – особый класс топологических материалов, в которых зона проводимости и валентная зона пересекаются в точках в зоне Бриллюэна (вейлевских точках). Наличие этих точек обусловлено нарушением пространственной или временной инвариантности (или обеих одновременно). В результате зонная структура материала приобретает топологически нетривиальные свойства, что приводит к появлению поверхностных состояний, известных как Ферми-арки [2].

Энергетический спектр вблизи точек Вейля имеет линейную дисперсию, что делает их аналогом дираковских точек в графене, но с важным отличием: точки Вейля всегда появляются парами с противоположными топологическими зарядами (киральностью). Это свойство делает вейлевские полуметаллы уникальными с точки зрения топологии и приводит к ряду интересных физических явлений, таких как аномальный эффект Холла и отрицательное магнитосопротивление [3].

Энергетический спектр электрона в зоне проводимости (с индексом c) и в валентной зоне (с индексом v) носителей заряда в полуметалле Вейля и полуметалле с энергетическим зазором имеет вид [3]

$$\varepsilon_v^{c,v}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{(\hbar v_x k_x)^2 + (\hbar v_y k_y)^2 + \left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + v\Delta\right)^2}, \quad (1)$$

где $v = \pm 1$. m^* – эффективная масса электрона; Δ – энергетический зазор, $k_{x,y,z}$ – проекции волнового вектора \mathbf{k} на оси координат, $v_{x,y}$ – скорости электрона в направлениях x, y , \hbar – постоянная Планка, индекс v различает полуметалл с зазором (GSM) для значения $v = +1$ и полуметалл Вейля (WSM) для значения $v = -1$.

По определению плотность электронных состояний с учетом спина можно записать следующим образом:

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_v^{c,v}(\mathbf{k})), \quad (2)$$

где V – объем, ε – энергия электрона. Обозначая

$$q^2 = (\hbar v_x k_x)^2 + (\hbar v_y k_y)^2, \quad (3)$$

$$z = \sqrt{\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}}, \quad (4)$$

и переходя к цилиндрическим координатам с учетом уравнения (1), получим [4]

$$g(\varepsilon) = \frac{2\sqrt{m^*}}{(2\pi)^3 \hbar^3 v_x v_y} \int \varrho d\varrho \int_0^{2\pi} d\phi \int \delta(\varepsilon - \sqrt{\varrho^2 + (z^2 + v\Delta)^2}) dz. \quad (5)$$

Упрощая (5), для GSM полуметалла получим

$$g_G(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi^2 \hbar^3 v_x v_y} \varepsilon \sqrt{\varepsilon - \Delta} \theta(\varepsilon - \Delta), \quad (6)$$

для вейлевского полуметалла WSM

$$g_W(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi^2 \hbar^3 v_x v_y} \varepsilon (\sqrt{\varepsilon + \Delta} - \sqrt{\Delta - \varepsilon} \theta(\Delta - \varepsilon)), \quad (7)$$

Из (7) следует, что для полуметалла Дирака при условии $\varepsilon \ll \Delta$ плотность состояний

$$g_D(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi^2 \hbar^3 v_x v_y} \frac{\varepsilon^2}{\sqrt{\Delta}}. \quad (8)$$

В соответствии с моделью (6)-(8) рассчитаны плотности электронных состояний для вейлевского полуметалла, полуметалла с зазором и дираковского полуметалла (рис. 1). Исходные данные модели - $v_x = 7 \cdot 10^5 \text{ м/с}$, $v_y = 5 \cdot 10^5 \text{ м/с}$, $m^* = 2m_0$, $\Delta = 3 \text{ мэВ}$, $\varepsilon_F = 14 \text{ эВ}$, $g_0 = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi^2 \hbar^3 v_x v_y}$ [4].

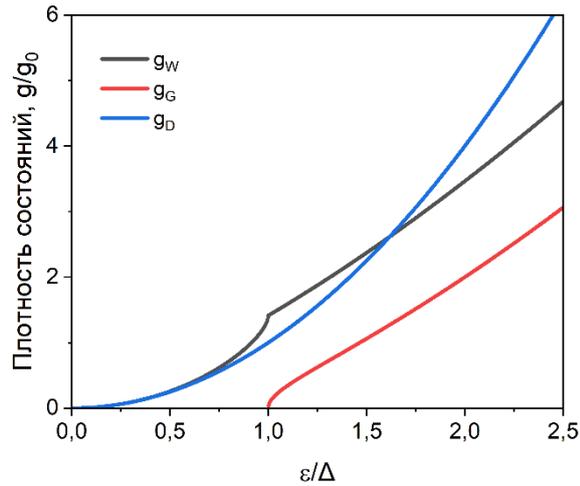


Рисунок 1 – Плотность электронных состояний для полуметалла Вейля g_W , полуметалла с зазором g_G , и дираковского полуметалла g_D .

Из рис. 1 виден изгиб, именуемый как особенность ван Хоува. При энергиях значительно меньших, чем ширина запрещенной зоны, плотность состояний для вейлевского полуметалла совпадает с плотностью состояний для объемного дираковского полуметалла. Это связано с тем, что вблизи вейлевских точек спектр электронов становится линейным, как в случае дираковского полуметалла.

Список использованных источников

1. Armitage, N. P. *Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids* / N. P. Armitage, E. J. Mele, A. Vishwanath // *Rev. Mod. Phys.* — 2018. — Vol. 90, Iss. 1. — P. 015001.
2. P. E. C. Ashby and J. P. Carbotte, *Chiral anomaly and optical absorption in Weyl semimetals* *Phys. Rev. B* 89, 245121 (2014).
3. E. Martino, I. Crassee, G. Eguchi, D. Santos-Cottin, R. D. Zhong, G. D. Gu, H. Berger, Z. Rukelj, M. Orlita, C. C. Homes, and A. Akrap, *Phys. Rev. Lett.* 122, 217402 (2019).
4. Z Rukelj, C C Homes, M Orlita, Ana Akrap. *Distinguishing the gapped and Weyl semimetal scenario in ZrTe 5 : Insights from an effective two-band model.* *Physical Review B*, 2020, 102, 125201