УДК 537.311.33

СПЕКТР ТОКА В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ ПОЛУМЕТАЛЛА ВЕЙЛЯ

Рышкевич А.А., Данилюк А.Л.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь, ryshcevich01@gmail.com

Аннотация: в линейном приближении в рамках формализма Кубо с привлечением мацубаровских пропагаторов получены частотные зависимости для проводимости и средней плотности тока. Показано, что ток формируется как внутризонными переходами, так и межзонными переходами. На графиках представлен спектр продольного тока в тонкой пленке вейлевского полуметалла с барьерами на границах. В низкочастотной области возникает наиболее сильный отклик, особенно выраженный в мнимой части. При дальнейшем увеличении частоты наблюдается осцилляция и резонансные пики, связанные с межзонными переходами.

Ключевые слова: полуметалл Вейля, спектр, тонкая пленка, проводимость Кубо, мацубаровский пропагатор, размерное квантование, электронный ток.

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время исследование полуметаллов Вейля является актуальным вопросом в физике конденсированных сред. В данной работе рассмотрено влияние электрического поля на спектр тока вейлевского полуметалла. Используя микроскопический подход получены частотные зависимости для проводимости и средней плотности тока. Рассмотрен Гамильтониан носителей заряда вблизи вейлевской точки [1].

II. ИСХОДНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН И ФОРМУЛА ДЛЯ ТОКА

Рассматривается ультратонкая плёнка вейлевского полуметалла. Низкоэнергетический гамильтониан в базисе четырёхкомпонентных спиноров, объединяющих две киральности и два спиновых состояния, имеет вид [2]:

$$\widehat{H}(\boldsymbol{k}_{\parallel}, -i\partial_z) = v_F\left(\tau_z\sigma_x k_x + \tau_0\sigma_y k_y\right) + \tau_z\sigma_z\,\Delta(-i\partial_z) + V(z), \tag{1}$$

где v_F – фермиевская скорость, $\tau_{0,x,y,z}$ – матрицы Паули в киральном пространстве (два вейлевских узла), $\tau_0 = \mathbb{1}$, $\sigma_{x,y,z}$ – матрицы Паули в спиновом пространстве, $\Delta(k_z) = M_0 - M_1 k_z^2$ – «массовый» член, обращающийся в нуль в объёмных вейлевских точках $k_z = \pm Q$ (где $Q = \sqrt{M_0/M_1}$), $V(z)$ – профиль потенциала гетероструктуры, включающий интерфейсные барьеры, смещения зон и т. п. В данном случае $V(z)$ - бесконечно высокий прямоугольный потенциал, приводящий к нулевым граничным условиям $\psi(z=0) = \psi(z=d) = 0$, d – толщина пленки.

Задача сводится к нахождению собственных состояний, характеризуемых двумерным волновым вектором в плоскости $\boldsymbol{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$ и зонным индексом n. Собственные состояния гамильтониана:

$$\psi_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}}\,\varphi_{n,\mathbf{k}_{\parallel}}(z), \tag{2}$$

Четырёхкомпонентный спинор, удовлетворяющий стационарному уравнению

$$\widehat{H}(\mathbf{k}_{\parallel}, -i\partial_z)\,\varphi_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel}}(z) = E_n(\mathbf{k}_{\parallel})\,\varphi_{n,\mathbf{k}_{\parallel}}(z), \tag{3}$$

с граничными условиями $\varphi_{n,\mathbf{k}_{\parallel}}(0) = \varphi_{n,\mathbf{k}_{\parallel}}(d) = 0$.

Ортонормировка спиноров:

$$\int_0^d \varphi^{\dagger}_{n,k_{\parallel}}(z)\varphi_{m,k_{\parallel}}(z)dz = \delta_{nm},\ \int \psi^{\dagger}_{n,k_{\parallel}}(\mathbf{r})\psi_{m,k'_{\parallel}}(\mathbf{r})d^2\mathbf{r}_{\parallel}dz = \delta_{nm}\delta_{\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{k}'_{\parallel}}. \tag{4}$$

Индекс n нумерует все подзоны, включая объёмные и поверхностные состояния.

Полевые операторы в представлении операторов рождения и уничтожения:

$$\widehat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}_{\parallel}} \psi_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel}}(\mathbf{r})\,c_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel}},\ \widehat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel}} \psi^{\dagger}_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel}}(\mathbf{r})\,c^{\dagger}_{n,\boldsymbol{k}_{\parallel}}, \tag{5}$$

где $c_{n,\mathbf{k}_\parallel}, c^\dagger_{n,\mathbf{k}_\parallel}$ – фермиевские операторы уничтожения и рождения.

Электрический ток в направлении α (в единицах заряда -e) определяется через оператор скорости:

$$\hat{J}_\alpha = -e \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\, \hat{v}_\alpha\, \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d^2\mathbf{r}_\parallel . \tag{6}$$

Оператор скорости получается дифференцированием гамильтониана по импульсу ($\hbar = 1$).

III. ПЛОТНОСТЬ ТОКА И ПРОВОДИМОСТЬ

В Фурье-представлении по $\mathbf{k}_\parallel$ полный оператор тока принимает вид [3

$$\hat{J}_\alpha = -e \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \sum_{n,m} \langle \psi_{n,k_\parallel} \mid \hat{v}_\alpha \mid \psi_{m,k_\parallel} \rangle\, c^\dagger_{n,\mathbf{k}_\parallel} c_{m,\mathbf{k}_\parallel}, \tag{7}$$

где матричный элемент $\hat{v}^\alpha_{nm}(\mathbf{k}_\parallel) \equiv \langle \psi_{n,\mathbf{k}_\parallel} \mid \hat{v}_\alpha \mid \psi_{m,\mathbf{k}_\parallel} \rangle = \int_0^d \varphi^\dagger_{n,\mathbf{k}_\parallel}(z)\, \hat{v}_\alpha\, \varphi_{m,\mathbf{k}_\parallel}(z) dz$.

Средний ток в линейном приближении в представлении запаздывающего коррелятора Кубо [3]:

$$\langle J_\alpha(\omega) \rangle = \sigma_{\alpha\beta}(\omega) E_\beta(\omega),\ \sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{i\omega}\left[\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) - \Pi^R_{\alpha\beta}(0)\right], \tag{8}$$

где $\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega) = -i \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle \left[J_\alpha{}'(t) J_\beta(0) \right] \rangle dt$.

Для вычисления Π^R переходим к мнимым временам и мацубаровским функциям Грина. В формализме мнимого времени τ ($0 \le \tau \le \beta$, $\beta = 1/(k_B T)$) определяется одночастичный пропагатор и его

Фурье-образ по мнимым фермионным частотам $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ и координатам. Далее определится температурный коррелятор токов на единицу площади в мнимом времени и его преобразование по бозонным частотам $\nu_m = 2\pi m/\beta$. Используя вид операторов тока, получаем:

$$\Pi_{\alpha\beta}(i\nu_m) = -\frac{e^2}{S} \sum_{\mathbf{k}_\parallel, \mathbf{k}'_\parallel} \sum_{n,m,p,q} \hat{v}^\alpha_{nm} \hat{v}^\beta_{pq} \int_0^\beta e^{i\nu_m \tau} \left\langle \hat{T}_\tau c^\dagger_{n,\mathbf{k}_\parallel}(\tau) c_{m,\mathbf{k}_\parallel}(\tau) c^\dagger_{p,\mathbf{k}'_\parallel}(0) c_{q,\mathbf{k}'_\parallel}(0) \right\rangle d\tau . \tag{9}$$

Вводя одночастичные пропагаторы $G_{ab}(\tau)$, $G^\dagger_{ab}(\tau)$, получаем [4]

$$\Pi_{\alpha\beta}(i\nu_m) = -\frac{e^2}{S} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \sum_{n,m} \hat{v}^\alpha_{nm} \hat{v}^\beta_{mn} \int_0^\beta e^{i\nu_m \tau} G_n(-\tau) G_m(\tau) d\tau . \tag{10}$$

Выражая мацубаровские пропагаторы в частотном представлении получим коррелятор в виде

$$\Pi_{\alpha\beta}(i\nu_m) = \frac{e^2}{S} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \sum_{n,m} \hat{v}^\alpha_{nm} \hat{v}^\beta_{mn} \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - E_n} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_m - E_m}. \tag{11}$$

Преобразуя (11) и вводя функции Ферми-Дирака $f(E) = \frac{1}{(e^{\beta E}+1)'}$ получим коррелятор в виде

$$\Pi_{\alpha\beta}(i\nu_m) = -\frac{e^2}{S} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \sum_{n,m} \hat{v}^\alpha_{nm} \hat{v}^\beta_{mn} \frac{f(E_m) - f(E_n)}{i\nu_m + E_m - E_n}. \tag{12}$$

Чтобы получить запаздывающий коррелятор $\Pi^R_{\alpha\beta}(\omega)$, делаем аналитическое продолжение с дискретных мнимых частот на вещественную ось $i\nu_m \to \omega + i\delta$, $\delta \to 0^+$. В итоге получим

$$\Pi_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{e^2}{S} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \sum_{n,m} \hat{v}^\alpha_{nm} \hat{v}^\beta_{mn} \frac{f(E_m) - f(E_n)}{\omega + E_m - E_n + i\delta}. \tag{13}$$

И соответственно явный вид выражения для проводимости

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{ie^2}{S} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \sum_{n,m} \frac{f(E_n) - f(E_m)}{E_n - E_m} \frac{\hat{v}^\alpha_{nm} \hat{v}^\beta_{mn}}{\omega + E_m - E_n + i\delta}. \tag{14}$$

Это выражение объединяет внутризонные ($n = m$) и межзонные ($n \neq m$) переходы. Средняя плотность тока (ток на единицу площади) в направлении α под действием поля $E_\beta(\omega)$ есть

$$\langle j_\alpha(\omega)\rangle = \sigma_{\alpha\beta}(\omega)E_\beta(\omega). \quad (15)$$

Подставляя $\sigma_{\alpha\beta}$, приходим к окончательной формуле для тока

$$\langle j_\alpha(\omega)\rangle = -\frac{ie^2}{S}\sum_{\mathbf{k}_\parallel}\sum_{n,m}\frac{f(E_n)-f(E_m)}{E_n-E_m}\frac{\langle\psi_{n,\mathbf{k}_\parallel}|\hat{v}_\alpha|\psi_{m,\mathbf{k}_\parallel}\rangle\langle\psi_{m,\mathbf{k}_\parallel}|\hat{v}_\beta|\psi_{n,\mathbf{k}_\parallel}\rangle}{\omega+E_m-E_n+i\delta}. \quad (16)$$

Результаты расчета спектра тока в произвольных единицах приведены на рис.1.

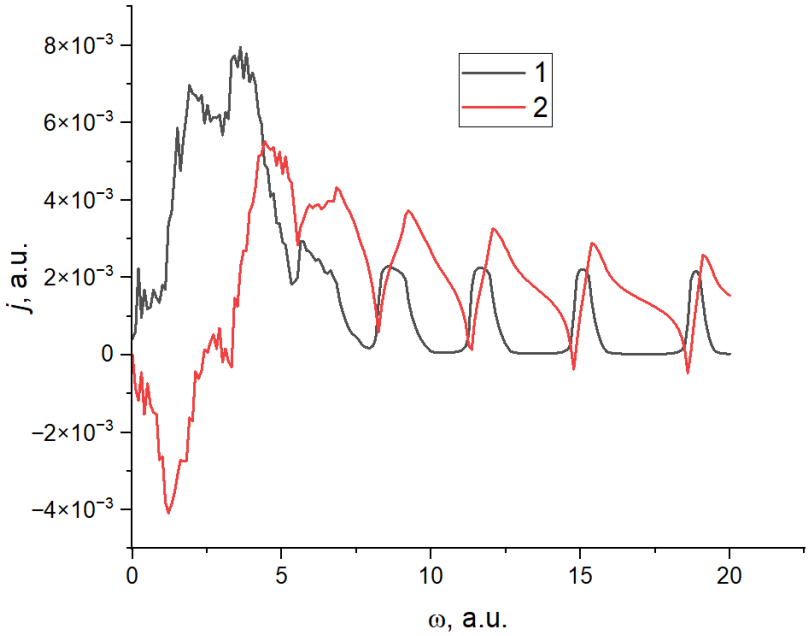


Рисунок 1. Спектр тока в тонкой пленке полуметалла Вейля с барьерами на границах (параметр δ = 0,05): действительная часть (кривая 1), мнимая часть (кривая 2)

В низкочастотной области ($\omega \lesssim 6$) формируется наиболее сильный отклик во всём спектре. Мнимая часть тока уходит в отрицательную область, достигая минимума $\approx -4\cdot10^{-3}$ при $\omega \approx 2$, тогда как действительная часть мала вплоть до $\omega \approx 3$, после чего резко возрастает до положительного максимума $\approx 8\cdot10^{-3}$ при $\omega \approx 4{,}5$. Такое соотношение компонент – сначала экстремум мнимой части, затем максимум действительной – характерно для резонансного отклика осциллятора вблизи собственной частоты перехода.

Природа низкочастотного резонанса связана с переходами между нижними подзонами, среди которых ключевую роль играют состояния, локализованные у границ плёнки. В отличие от объёмных подзон, размазанных по толщине и образующих эквидистантный набор уровней, поверхностные состояния прижаты к $z = 0$ или $z = d$ и отщеплены от основной серии. Зазор между нижним поверхностным уровнем и ближайшей объёмной подзоной оказывается меньше типичного межподзонного расщепления, что и даёт низкочастотный пик, отделённый от гребёнки резонансов при $\omega \gtrsim 6$. Большие матричные элементы оператора скорости между поверхностным и объёмным состояниями (за счёт сильного перекрытия вблизи границы) делают амплитуду этого перехода наибольшей в спектре; дополнительный вклад даёт внутризонное движение носителей у поверхности.

Область $6 \lesssim \omega \lesssim 15$ занята квазипериодической осцилляцией, отражающей вклад размерно-квантованных объёмных подзон: резонансы соответствуют переходам с примерно равными разностями энергий, что типично для квантовой ямы с барьерами. Осцилляции Im(j) связаны с межподзонными переходами с разными правилами отбора, осцилляции Re(j) – с диссипативным поглощением. Чередование знаков мнимой части обусловлено знаками матричных элементов оператора скорости между соответствующими состояниями. С ростом частоты амплитуда осцилляций падает, поскольку система не успевает перестраиваться.

Получены более точные результаты моделирования (параметр δ = 0,01). Они повторяют общие характерные особенности результатов при δ = 0,05 (рис. 1), но отличаются более богатой и изрезанной структурой спектра, что говорит о большем числе размерно-квантованных подзон и, соответственно, межподзонных переходов.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе использована модель ультратонкой плёнки вейлевского полуметалла, описываемая четырёхкомпонентным низкоэнергетическим гамильтонианом для двух киральностей и двух спиновых состояний. Массовый член обращается в нуль в объёмных вейлевских точках. Границы плёнки моделируются бесконечно высокими барьерами, что даёт нулевые граничные условия для волновой функции. Найдены собственные состояния с двумерным волновым вектором $\mathbf{k}_{\parallel}$ и индексом подзоны n, включающим объёмные и поверхностные состояния. Введены полевые операторы и оператор тока через оператор скорости, полученный дифференцированием гамильтониана по импульсу.

Для линейного отклика применён формализм Кубо. Использованы мацубаровские функции Грина, теорема Вика и аналитическое продолжение с мнимых частот на вещественную ось. Выведены выражения для коррелятора токов, проводимости $\sigma_{\alpha\beta}$ и средней плотности тока $\langle j_{\alpha} \rangle$. Показано, что токовый отклик включает как внутризонные переходы ($n = m$), так и межзонные переходы ($n \neq m$). Окончательная формула для тока содержит сумму по подзонам и волновым векторам, разность функций Ферми – Дирака и матричные элементы оператора скорости.

В тонкой плёнке вейлевского полуметалла спектр тока сильно перестраивается из-за размерного квантования. Вместо непрерывного спектра объёмного кристалла появляется набор подзон, а токовый отклик становится резонансным. Пики соответствуют переходам между этими подзонами. Низкочастотный отклик может быть связан с переходами между нижними подзонами или с поверхностными состояниями. Спектр чувствителен к толщине плёнки, профилю потенциала, высоте. Уточненный расчет показал, что при определённых параметрах спектр может становиться особенно богатым и изрезанным. Это отражает вклад большого числа межподзонных переходов и делает такие системы перспективными для управления электронным транспортом и оптическим откликом с помощью геометрии и граничных условий.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Gorbar, E. V., Miransky, V. A., Shovkovy, I. A., Sukhachov, P. O. Electronic Properties of Dirac and Weyl Semimetals. – World Scientific Publishing Co., 2021.

[2] Хомицкий, Д. В. Элементы теории топологических изоляторов : учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский гос. ун-т им. Н. И. Лобачевского, 2025. – 142 с.

[3] Nazarov, Y. V., Blanter, Y. M. Quantum Transport: Introduction to Nanoscience. – Cambridge University Press, 2009.

[4] Datta, S. Quantum Transport: Atom to Transistor. — Cambridge University Press, 2005.

CURRENT SPECTRUM IN A THIN FILM OF A WEYL SEMIMETAL

A.A. Ryshkevich, A.L. Danilyuk

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,
ryshcevich01@gmail.com

Abstract: in the linear approximation within the Kubo formalism using Matsubara propagators, frequency dependences are obtained for the conductivity and average current density. It is shown that the current is formed by both intraband and interband transitions. The graphs present the spectrum of longitudinal current in a thin film of a Weyl semimetal with barriers at the boundaries. In the low-frequency region, the strongest response arises, especially pronounced in the imaginary part. With a further increase in frequency, oscillations and resonant peaks associated with interband transitions are observed.

Keywords: Weyl semimetal, spectrum, thin film, Kubo conductivity, Matsubara propagator, size quantization, electronic current.