

Istraživanje kvantnih oscilacija u monokristalu topološkog Weylovog semimetala TaP

Marković, Toni

Master's thesis / Diplomski rad

2016

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:201182>

Rights / Prava: [In copyright](#) / [Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-10-12**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

Toni Marković

ISTRAŽIVANJE KVANTNIH OSCILACIJA U
MONOKRISTALU TOPOLOŠKOG WEYLOVOG
SEMIMETALA TaP

Diplomski rad

Zagreb, 2016.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

SMJER: Istraživački

Toni Marković

Diplomski rad

**Istraživanje kvantnih oscilacija u
monokristalu topološkog Weylovog
semimetala TaP**

Voditelj diplomskog rada: Mario Novak

Ocjena diplomskog rada: _____

Povjerenstvo: 1. _____

2. _____

3. _____

Datum polaganja: _____

Zagreb, 2016.

Zahvalio bih se ljudima iz laboratorija za sintezu i mjerenja transportnih, magnetskih i termodinamičkih svojstava sa Fizičkog odsjeka PMF-a u Zagrebu u čijem je laboratoriju izrađen ovaj rad. Posebice bih se zahvalio mentoru doc. dr. sc. Mariju Novaku na prenesenom znanju i korisnim savjetima.

Sažetak

Weylovi semimetali su nova klasa kvantnih materijala koji posjeduju Weylove fermione kao niskoenergijska pobuđenja. Oni su 3D analogoni grafenu i imaju Weylove točke koje su magnetski monopoli sa zadanom kiralnosti u impulsnom prostoru. Zbog toga što ovi materijali imaju razna egzotična svojstva kao npr. kiralna anomalija koja inducira negativni magnetootpor zanimljivi su i u primjeni, npr. u spintronici. Uspješno su sintetizirani veliki monokristali TaP CVT (eng *Chemical Vapour Transport*) metodom. Raspršenjem x-zraka na prahu potvrđena je struktura TaP u sintetiziranim kristalima. Oblikovani uzorci su zatim proučavani magnetotransportnim tehnikama u rasponu temperatura od 1.6 do 300 K i magnetskih polja od -15 do 15 T.

U slučaju kada je vanjsko magnetsko polje okomito na smjer struje u uzorku opažen je velik pozitivan magnetootpor. Opaženo je i smanjivanje relativnog magnetootpora u slučaju kad je smjer vanjskog magnetskog polja paralelan sa smjerom struje što potvrđuje postojanje kiralne anomalije. Uočene su kvantne oscilacije čijom su se analizom ustanovile dominantne frekvencije, efektivna masa elektrona i vrijeme raspršenja u kristalu. Analizom faze oscilacija potvrđeno je postojanje Berryeve faze π što potvrđuje postojanje Weylovih točaka u sistemu. Iz relativno visoke Dingleove temperature reda veličine 10-ak K ustanovljeno je i da su Weylove točke otporne na perturbacije koje dolaze od nečistoća što je i bilo očekivano s obzirom na njihovu topološku zaštićenost. Eksperimentalni rezultati ovog rada su u vrlo dobrom poklapanju s drugim eksperimentalnim i teorijskim radovima iz literature.

Study of quantum oscillations in monocrystals of topological Weyl semimetal TaP

Abstract

Weyl semimetals are a new class of quantum materials that have Weyl fermions as low energy excitations. They are a 3D analogue to graphene and possess Weyl points which are magnetic monopoles with distinct chirality in momentum space. Because these materials have a number of different exotic properties such as the chiral anomaly which induces negative magnetoresistance they are extremely interesting for application purposes for example in spintronics. Big monocrystals of TaP were successfully synthesized with the CVT (Chemical Vapour Transport) method. Powder x-ray diffraction experiment confirmed the TaP structure in the synthesized monocrystals. Samples shaped by grinding were studied with magnetotransport techniques in the temperature range from 1.6 to 300 K and in the magnetic field range from -15 to 15 T.

When the magnetic field was perpendicular to the direction of current a large positive magnetoresistance was observed. A decrease in relative magnetoresistance was observed when the magnetic field was parallel to the direction of current which confirmed the existence of the chiral anomaly effect. Quantum oscillations were isolated and their dominant frequencies as well as the effective mass and scattering time were determined. Phase analysis of the oscillations showed an existence of a π Berry phase consistent with the existence of Weyl cones in the system. A relatively high Dingle temperature around 10 K was determined showing the robustness of Weyl points to perturbation which was expected due to their topological protection. The experimental results in this work are in good correspondence with other experimental as well as theoretical work on this material.

Sadržaj

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Uvod | 1 |
| 2 | Sustavi s Diracovom disperzijom | 3 |
| 2.0.1 | Diracova i Weylova jednađba | 3 |
| 2.0.2 | Pojava Diracovih i Weylovih točaka | 4 |
| 2.0.3 | Nielsen - Nynomiya teorem o fermionskom udvostručenju . . . | 6 |
| 2.1 | Grafen | 6 |
| 2.2 | Topološki izolatori (TI) | 7 |
| 2.3 | Diracovi i Weylovi semimetali (DSM i WSM) | 10 |
| 2.3.1 | Topologija Weylove točke | 10 |
| 2.3.2 | Fermijevi lukovi | 11 |
| 2.3.3 | Jednostavan primjer sistema s Weylovim točkama | 13 |
| 2.3.4 | Kiralna anomalija | 13 |
| 2.3.5 | Anomalni Hallov efekt | 14 |
| 2.3.6 | Simetrijska zaštićenost Diracovih i Weylovih točaka | 15 |
| 2.3.7 | Stvaranje mase | 16 |
| 2.3.8 | Najpoznatiji Diracovi i Weylovi semimetali | 17 |
| 2.4 | Ostali sustavi | 17 |
| 2.4.1 | Visokotemperaturni supravodiči | 17 |
| 2.4.2 | Organski vodiči | 18 |
| 3 | Električni transport naboja u metalima | 19 |
| 3.1 | Modeli električne otpornosti | 19 |
| 3.1.1 | Drudeov model | 19 |
| 3.1.2 | Sommerfeldov model | 21 |
| 3.1.3 | Boltzmannov model | 21 |
| 3.2 | Transport naboja u magnetskom polju | 23 |
| 3.2.1 | Hallov efekt | 23 |
| 3.2.2 | Magnetootpor | 26 |
| 3.2.3 | Model dvije vrpce | 27 |
| 3.3 | Kvantne oscilacije | 27 |
| 3.3.1 | De Haas - van Alphen (dHvA) oscilacije | 29 |
| 3.3.2 | Shubnikov - de Haas oscilacije | 33 |
| 4 | Sinteza i karakterizacija TaP | 36 |
| 4.1 | Postupak sinteze | 36 |
| 4.2 | Strukturna karakterizacija | 38 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 5 | Mjerni rezultati i diskusija | 39 |
| 5.1 | Priprema uzoraka za transportna mjerenja | 39 |
| 5.2 | Opis mjernog postava i metoda mjerenja | 41 |
| 5.3 | Rezultati transportnih mjerenja | 43 |
| 6 | Zaključak | 52 |

1 Uvod

Diracovi materijali su nova klasa kvantnih materijala koji posjeduju Diracove fermione kao niskoenergetska pobuđenja. Oni imaju poseban oblik energijskih vrpca gdje se valentna i vodljiva vrpca dotiču u jednoj točki u impulsnom prostoru. Oko te točke se disperzija može linearizirati i nazivamo je Diracovom točkom. Najpoznatiji takav materijal je grafen (jedan sloj grafita) u kojem su ugljikovi atomi poslagani u 2D mrežu oblika pčelinjih saća. S otkrićem grafena je i započelo intenzivno istraživanje Diracovih materijala u fizici kondenzirane materije. Drugi primjeri takvih materijala su topološki izolatori (TI), Diracovi (DSM) i Weylovi semimetali (WSM), neki tipovi visokotemperaturnih supravodiča i još neki.

Iako su mehanizmi koji dovode do pojave Diracovih kvazičestica u gore navedenim klasama materijala različiti, njihovo nisko energetska ponašanje je određeno istim pravilima koja slijede iz toga što su im niskoenergetska pobuđenja jednaka. Detaljnije će o ovim materijalima biti riječi u nastavku. Ukoliko su pobuđenja efektivno bezmasena, umjesto o Diracovoj govorimo o Weylovoj točki i Weylovim fermionima. Weylovi polumetali su 3D analogoni grafenu u kojima se pojavljuju upravo Weylove kvazičestice kao niskoenergetska pobuđenja [1]- [5]. Weylovi fermioni dolaze iz fizike elementarnih čestica i nikad do sad nisu opaženi u vakuumu u visokoenergijskim eksperimentima te njihova pojava u fizici čvrstog stanja otvara nova vrata za njihovo proučavanje. Tako su onda Diracovi i Weylovi materijali iznimno zanimljivi ne samo u okviru fizike čvrstog stanja već i za fiziku elementarnih čestica.

Još jedna zanimljivost Diracovih i Weylovih kvazičestica je to što su ta stanja topološki zaštićena nekom simetrijom sustava [1]. To znači da su ta stanja najčešće neosjetljiva na male perturbacije u sustavu, a time i na nečistoće i male defekte u sistemu [3]- [4]. To je onda vrlo zanimljivo za primjenu, te tako površinska vodljiva stanja u 2D topološkim izolatorima pokazuju svojstva transporta bez disipacije, što bi bilo iznimno zanimljivo za primjenu u računalima i spintronici [6]- [9]. Weylovi semimetali posjeduju klasična (semimetalna) svojstva i topološka (Weylove točke), te se interakcija tih dvaju svojstava smatra vrlo zanimljivom kako za istraživanje, tako i za potencijalnu primjenu.

WSM su teorijski predviđeni u klasi materijala AB, gdje su $A = \text{Ta, Nb}$, a $B = \text{As, P}$, a prvi put i eksperimentalno opaženi u TaAs [10]- [13]. Weylovi semimetali obično imaju vrlo visoku mobilnost i snažan pozitivan i negativan magnetootpor u ovisnosti o smjeru električnog i magnetskog polja [14]- [19]. Isto tako u čistim monokristalima se opažaju kvantne oscilacije Shubnikov - de Haas tipa i de Haas - van Alphen tipa [14], [16], [18]. Opažaju se i tzv. Fermijevi lukovi (eng. *Fermi arcs*), topološki netrivialna površinska stanja [17], [20].

U ovom radu prvo donosimo pregled Diracovih materijala, gdje ističemo njihova najvažnija svojstva, neke univerzalne karakteristike koje posjeduju i ističemo razlike među njima. Fokus će uglavnom biti na Weylovim semimetalima. Zatim donosimo

teorijski uvod u transport naboja u metalima s naglaskom na Boltzmannovu teoriju transporta. Nakon toga slijedi teorijski uvod u kvantne oscilacije s osvrtom na čistoću kristala potrebnu za njihovo opažanje. Detaljno će zatim biti opisan postupak sinteze i karakterizacije monokristala TaP, a zatim objašnjen postupak pripreme uzorka za transportna mjerenja. Na kraju će biti opisan mjerni postav i metoda mjerenja, te dani rezultati i usporedba sa trenutnim rezultatima za ovaj materijal.

2 Sustavi s Diracovom disperzijom

Diracovim materijalima nazivamo materijale koji imaju linearne disperzijske relacije oko točaka u kojima se dotiču valentna i vodljiva vrpca (Slika 2.1a). U takvim sustavima imamo Diracove fermione kao niskoenergijska pobuđenja. Njihovo ponašanje opisano je efektivnom Diracovom jednadžbom iz fizike elementarnih čestica. Zanimljivo pitanje je kako dolazi do takvih svojstava u sustavu iz fizike čvrstog stanja i kakva su daljnja svojstva takvih materijala te koliko su stabilne točke dodira valentne i vodljive vrpce. Odgovori na ta pitanja će biti dani detaljnije u daljnjem tekstu. Za sad spomenimo da ukoliko se radi o bezmasenim Diracovim fermionima kao pobuđenjima, onda je relevantna jednadžba Weylova diferencijalna jednadžba i nazivamo ih Weylovim fermionima.

Važne su uloge topologije i simetrije u ovakvim sustavima, gdje su nova i zanimljiva svojstva ovih sistema topološki zaštićena. Topološka protekcija znači da se nikakvim perturbativnim putem ne može uništiti Diracova disperzija u sustavu. Detaljnije će o ovome biti riječi u nastavku. Upravo su topološki zaštićena svojstva ovih materijala iznimno zanimljiva za primjenu jer ne mogu biti uništena s malim perturbacijama koje recimo mogu doći od nečistoća u materijalu.

Simetrija u fizici je povijesno poslužila za definiranje faza materije, a njen spontan lom za definiciju faznih prijelaza. Slično tome danas koristimo termin topologije kako bismo definirali topološke faze. Termin topologije posuđen je iz geometrije i načelno govori o univerzalnim svojstvima geometrijskih površina. Tako je npr. moguće definirati genus g preko Gauss - Bonnet teorema, što je broj koji govori koliko rupa ima u nekoj površini. Dakle genus sfere $g = 0$, a američke krafne $g = 1$. Slične veličine (topološke invarijante) se mogu definirati u topološkim materijalima kako bi se razlikovale topološke faze.

2.0.1 Diracova i Weylova jednadžba

Kako smo već spomenuli u ovim sistemima se na niskim temperaturama javljaju Diracovi fermioni kao kvazičestična pobuđenja. Njihovo ponašanje je opisano Diracovom jednadžbom (DJ). Ona je jedan od ključnih postignuća za fiziku elementarnih čestica. Dirac je izveo tu jednadžbu kako bi opisao ponašanje čestice spina $1/2$ i mase m u vakuumu [1]. Jednadžba uvažava kvantnu mehaniku i Einsteinovu specijalnu relativnost uvodeći time novo područje fizike relativističku kvantnu mehaniku. Najvažnija posljedica jednadžbe je da je po prvi put predvidjela antimateriju koja je nedugo zatim i eksperimentalno potvrđena. Jednadžba je u samom središtu Standardnog modela kakvog danas poznajemo. Za slobodnu česticu mase m i spina $1/2$ jednadžba glasi:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2) \psi \quad (2.1)$$

gdje je operator momenta količine gibanja $\vec{p} = -i\hbar\nabla = (p_x, p_y, p_z)$, c brzina svjetlosti, m masa čestice, a ψ je četverokomponentni spinor. Postoji više reprezentacija matrica α_i preko kojih se može zapisati Diracovu jednadžbu, ona standardna je $\vec{\alpha} = (\tau_3 \otimes \sigma_1, \tau_3 \otimes \sigma_2, \tau_3 \otimes \sigma_3)$ i $\beta = -\tau_1 \otimes \mathbb{1}$, gdje su σ i τ Paulijeve matrice. Jednadžba se može pojednostaviti ukoliko se radi o bezmasenim česticama. Sve α_i su dijagonalne, dok je β blok ofdijagonalna.

Ukoliko je $m = 0$ gornje dvije komponente ψ nazovimo ih χ_+ i donje dvije komponente χ_- više nisu vezane, te Diracovu jednadžbu možemo rastaviti na dvije jednadžbe:

$$i\hbar \frac{\partial \chi_{\pm}}{\partial t} = \pm c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \chi_{\pm} \quad (2.2)$$

Gornju jednadžbu nazivamo Weylovom jednadžbom, a njena rješenja Weylovim fermionima. Prije se smatralo da ona opisuje neutrine, no ipak se pokazalo da neutrini imaju masu, čime ova jednadžba ne vrijedi za njih. Tako su Weylovi semimetali prva realna primjena ove jednadžbe u fizici. Za elementarne čestice koje posjeduju spin možemo definirati helicitet na sljedeći način:

$$h = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|} \quad (2.3)$$

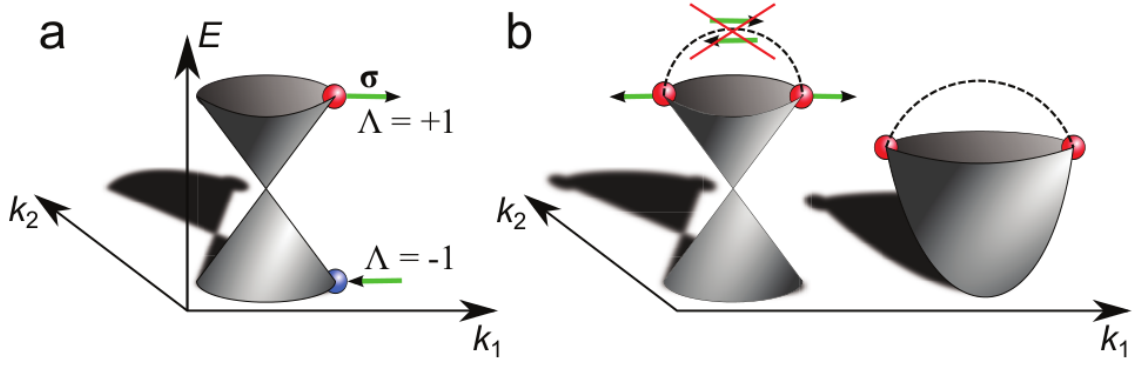
gdje je $\vec{\sigma}$ spin čestice, a \vec{p} količina gibanja. Kažemo da je čestica desna ukoliko je spin u istom smjeru kao i količina gibanja, dok česticu nazivamo lijevom ukoliko su u suprotnim smjerovima (Slika 2.1). Helicitet dakle poprima samo vrijednosti $h = \pm 1$. Za bezmasene čestice je kiralnost isto što i helicitet tj. $\Lambda = \pm 1$. Kiralnost snažno utječe na dinamiku raspršenja elektrona. Raspršenje unatrag ($\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ mora biti praćeno i promjenom predznaka (pseudo)spina ($\vec{\sigma} \rightarrow -\vec{\sigma}$) kad je kiralnost očuvana (magnetske nečistoće ne čuvaju kiralnost). Ako to nije moguće raspršenje unatrag je zabranjeno (Slika 2.1b lijevo). U običnim metalima sa kvazičesticama Schrödingero-va tipa nema takvih ograničenja (Slika 2.1b desno).

2.0.2 Pojava Diracovih i Weylovih točaka

Nameće se pitanje kako se u fizici čvrstog stanja javljaju Diracove točke. Najjednostavnije rečeno za to će biti potrebno pogledati energijsku disperziju nekog sustava i pronaći točke u kojima se diraju vodljiva i valentna vrpca. Ako takve točke postoje u njihovoj blizini se disperzija može linearizirati i dobije se Diracova točka. Ukoliko je još Fermijeva energija blizu Diracove točke imamo Diracove fermione u sustavu. Sad je zanimljivo pogledati neke uvjete koji moraju biti zadovoljeni kako bi takve točke mogle postojati. U nerelativističkoj fizici čvrstog stanja vremenska evolucija višestručnog stanja dana je nerelativističkom Schrödingеровom jednadžbom

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \mathcal{H} |\Psi\rangle \quad (2.4)$$

gdje je \mathcal{H} Hamiltonijan sustava. On sadrži kinetičke doprinose od iona i elektrona kao i interakciju među njima. Ideja je sad pokazati kako se javlja Diracova disperzija



Slika 2.1: Disperzija Diracovih čestica i potisnuće raspršenja unatrag u 2D. a) Ener-gija E kao funkcija valnog broja \vec{k} prati linearnu disperziju. U Diracovim materijalima je količina gibanja povezana sa (pseudo)spinom σ (zelene strelice). Kiralnost je do-bro definirana i očuvana. b) Raspršenje unatrag Diracovih fermiona $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$. Ukoliko nečistoće čuvaju kiralnost (magnetske nečistoće npr. ne čuvaju kiralnost) raspršenje unatrag je zabranjeno. U običnim metalima to nije slučaj, već je raspršenje unatrag dozvoljeno. Preuzeto iz [1].

u čvrstostanjskom sustavu na niskim temperaturama. Zbog toga što je sustav po pret-postavci na niskoj temperaturi zanemarujemo kinetički član iona i pretpostavljamo da oni stvaraju samo periodični vanjski potencijal u kojem se gibaju elektroni. Tada Hamiltonijan možemo malo drukčije zapisati kao $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int}$, gdje \mathcal{H}_0 sadrži sve jednočestične efekte, a \mathcal{H}_{int} sve elektron - elektron interakcije. Rješenja jednadžbe za \mathcal{H}_0 su Blochove vrpce.

Pogledajmo dvije različite nedegenerirane vrpce $E_+(\vec{k})$ i $E_-(\vec{k})$ i pretpostavimo da se približavaju za neki raspon vrijednost \vec{k} tako da je $|E_+(\vec{k}) - E_-(\vec{k})|$ puno manje od procjeka između vrpce izvan raspona. U praksi to da su vrpce nedegenerirane zahtijeva lom ili simetrije na inverziju vremena ili simetrije inverzije kristala. Uko-liko je neka od vrpce degenerirana moguća je hibridizacija vrpce u degeneriranom podprostoru koja bi rezultirala otvaranjem procjeka i uništenjem Diracovih točaka. Za modeliranje takvog Hamiltonijana uzmimo $|u_{\vec{k}}\rangle$ i $|v_{\vec{k}}\rangle$ koji su ortonormalna Bloc-hova eigenstanja takva da su konzistentna sa svim simetrijama \mathcal{H}_0 . Možemo napisati dvovrpčani Hamiltonijan za jednu vrijednost \vec{k} kao:

$$H(\vec{k}) = \begin{bmatrix} \langle u_{\vec{k}} | \mathcal{H}_0 | u_{\vec{k}} \rangle & \langle u_{\vec{k}} | \mathcal{H}_0 | v_{\vec{k}} \rangle \\ \langle v_{\vec{k}} | \mathcal{H}_0 | u_{\vec{k}} \rangle & \langle v_{\vec{k}} | \mathcal{H}_0 | v_{\vec{k}} \rangle \end{bmatrix} = f(\vec{k})\mathbb{1}_2 + \sum_{j=1}^3 g_j(\vec{k})\sigma_j \quad (2.5)$$

Hamiltonijan je moguće rastaviti na sumu jedinične matrice $\mathbb{1}_2$ i Paulijevih matrica σ_j . Važno je uočiti da funkcije f i g ovise o valnom broju \vec{k} . Jednočestični spektar Hamiltonijana $H(\vec{k})$ je:

$$E_{\pm} = f(\vec{k}) \pm \sqrt{\sum_{j=1}^3 g_j^2 \vec{k}} \quad (2.6)$$

Iz gornjeg izraza je jasno da će se vrpce dodirivati samo ukoliko je za neki \vec{k}_0 $g_j(\vec{k}_0) = 0$ za svaki j . U 3D je općenito moguće pronaći točke u \vec{k} - prostoru koje zadovoljavaju takav uvjet. $g_j(\vec{k}_0) = 0$ za neki j definira površinu u \vec{k} - prostoru. Dvije površine se općenito sijeku u liniji, a ako dodamo i treću ona može sjeći tu liniju čime smo pronašli točku \vec{k}_0 . Ako takve točke postoje one uglavnom dolaze u parovima i možemo linearizirati disperzijsku relaciju za svaku od njih razvojem funkcija f i g do linearnog člana:

$$H(\vec{k}) = E_{\vec{k}_0} + \hbar\vec{v}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)\mathbb{1}_2 + \sum_{j=1}^3 \hbar\vec{v}_j \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)\sigma_j \quad (2.7)$$

Ako je $\vec{v}_0 = 0$ onda su preostale v_j ortogonalne i $H(\vec{k})$ poprima oblik Weylovog Hamiltonijana.

$$H_{\text{Weyl}} = c\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \quad (2.8)$$

gdje je c brzina svjetlosti, \vec{p} impuls čestice, a $\vec{\sigma}$ Paulijeve matrice. U realnim materijalima umjesto c u Hamiltonijanu stoji Fermijeva brzina v_F . Općenito naravno ove dvije vrpce dalje od \vec{k}_0 mogu zavijati u općenitom smjeru, pa sve i ako je Fermijeva energija na $E_{\vec{k}_0}$ moguće su dodatne Fermijeve površine.

2.0.3 Nielsen - Nynomiya teorem o fermionskom udvostručenju

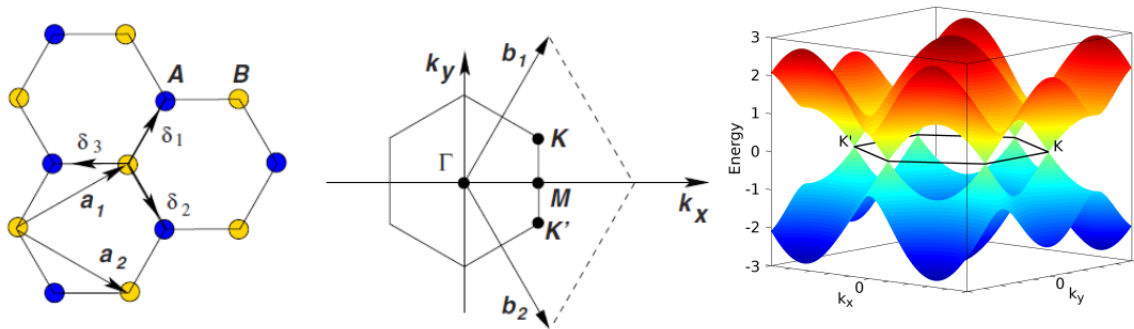
Nielsen i Nynomiya su u svom radu pokazali tzv. fenomen fermionskog udvostručavanja [22]. On kaže da broj stanja s kiralnosti +1 mora biti jednak broju stanja s kiralnosti -1. Dokaz ovog teorema je iznad razine ovog rada. U sljedećim poglavljima će se nekoliko puta pokazati zašto je fermionsko udvostručenje nužno u Weylovim semimetalima.

2.1 Grafen

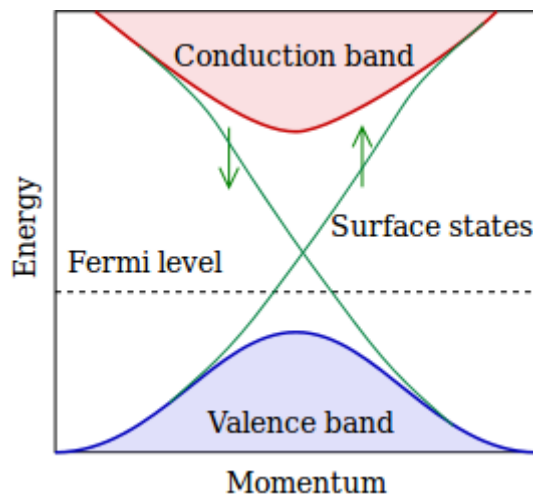
Grafen je sigurno najpoznatiji Diracov materijal. On se sastoji od jednog sloja grafita gdje su atomi ugljika poslagani u rešetku oblika pčelinjeg saća (Slika 2.2). U modelu čvrste veze koji u obzir uzima samo najbliže susjede s konstantom preskoka t za grafen se dobiva sljedeći 2×2 Hamiltonijan:

$$H(\vec{k}) = \begin{bmatrix} 0 & \xi(\vec{k}) \\ \xi^*(\vec{k}) & 0 \end{bmatrix}; \quad \xi(\vec{k}) = -t(e^{i\vec{\delta}_1 \cdot \vec{k}} + e^{i\vec{\delta}_2 \cdot \vec{k}} + e^{i\vec{\delta}_3 \cdot \vec{k}}) \quad (2.9)$$

Disperzijska relacija koja se dobije za ovaj Hamiltonijan je $\epsilon(\vec{k}) = \pm|\xi(\vec{k})|$, a prikazana je i na slici (Slika 2.2). Vidimo da je u nekim točkama $\xi(\vec{k}) = 0$, te se tu vrpce dotiču. Lineariziranjem oko tih točaka dobivamo 2D Diracov Hamiltonijan. Grafen je iznimno zanimljiv za primjenu zbog svojih posebnih vodljivih svojstava, velike čvrstoće i zanimljivih optičkih svojstava.



Slika 2.2: Rešetka grafena, Brillouinova zona i energijske vrpce. (lijevo) Rešetka grafena sa podrešetkama A (plavo) i B (žuto). Vektori rešetke \vec{a}_i i vektori prema najbližim susjedima $\vec{\delta}_i$ su također prikazani. (sredina) Brillouinova zona u grafenu s recipročnim vektorima \vec{b}_i . (desno) Disperzija grafenskih π orbitala u modelu čvrste veze. Preuzeto iz [1].



Slika 2.3: Prikazana je idealizirana struktura vrpce topološkog izolatora. Vidimo da je Fermijeva energija E_F unutar procjepa i vidimo prikazanu i disperziju površinskih stanja.

2.2 Topološki izolatori (TI)

Topološki izolatori su kvantni materijali koji imaju izolatorsku ili poluvodičku unutrašnjost, a vodljivi rub (2D) ili površinu (3D). To nije dovoljan uvjet za karakterizaciju jer i neki drugi materijali mogu imati vodljivu površinu. U principu se energijske vrpce u unutrašnjosti ne razlikuju od vrpce u običnom izolatoru (Slika 2.3). Fermijeva energija se nalazi unutar procjepa između valentne i vodljive vrpce. Važna karakteristika TI je pojava zatvaranja energijskog procjepa na površini. Pokazuje se da se to nužno mora dogoditi na granici različitih topologija.

Postavlja se pitanje kako odrediti topologiju nekog sustava. Načelno treba odrediti topološku invarijantu, što je veličina koja je ista za sve sustave iste topologije. Pokazuje se da je to moguće definirati u Blochovoj teoriji vrpce. Schrödingerova jed-

nadžba u periodičnom (kristalnom) potencijalu glasi:

$$\mathcal{H}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.10)$$

gdje je potencijal $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_m)$ periodičan s periodom rešetke. Za rješavanje gornje jednadžbe primijenimo Blochov ansatz:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.11)$$

gdje je funkcija $u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_n)$ periodična s periodom rešetke, a n označava vrpcu. Uvrštavanjem (2.11) u (2.10) dobiva se parcijalna diferencijalna jednadžba za periodični dio:

$$\mathcal{H}_{\vec{k}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left[\frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar\nabla + \hbar\vec{k} \right)^2 + V(\vec{r}) \right] u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.12)$$

Zbog proizvoljnosti faze u kvantnoj mehanici možemo baždarno transformirati $u_{n,\vec{k}} \rightarrow e^{i\phi(\vec{k})} u_{n,\vec{k}}$. Sad možemo definirati Berryjevu povezanost na sličan način kako se definira vektorski potencijal u elektrodinamici:

$$\vec{A} = -i \left\langle u_{n,\vec{k}} \left| \nabla_{\vec{k}} \right| u_{n,\vec{k}} \right\rangle; \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}} \quad (2.13)$$

Fazu koju valna funkcija akumulira obilaskom zatvorene petlje C u prostoru valnih brojeva nazivamo Berryeva faza β_C , a definiramo na način:

$$\beta_C = \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{k} \quad (2.14)$$

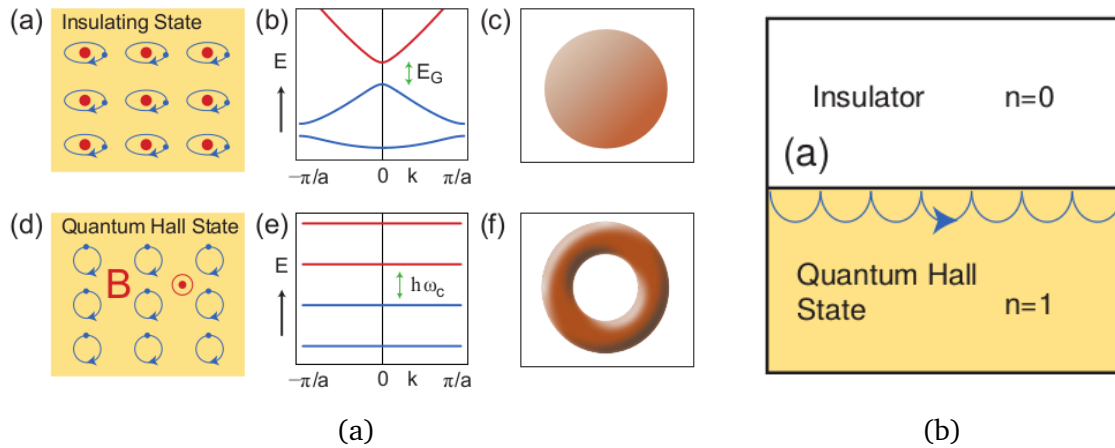
Nju možemo izraziti i na malo drukčiji način koristeći Stokesov teorem i time definirajući Berryjevu zakrivljenost \vec{B} :

$$\beta_c = \int_S \vec{B} \cdot d^2\vec{k}; \quad \vec{B} = \nabla_{\vec{k}} \times \vec{A} \quad (2.15)$$

gdje je S površina obuhvaćena krivuljom C . Zanimljivo svojstvo Berryjeve faze je da se ona ne mijenja s glatkom adijabatskom promjenom Hamiltonijana. Onda možemo iskoristiti definiciju Berryjeve faze za definiciju Chernovog broja n :

$$n_m = \int_{B.Z.S.} B_m d^2k; \quad n = \sum_{m=1}^N n_m \quad (2.16)$$

gdje je n_m parcijalni Chernov broj, Chernov broj za m -tu vrpcu, a Chernov broj n je suma svih parcijalnih Chernovih brojeva po svim vrpcama. Pokazuje se da je Chernov broj isti za materijale iste topologije. Prepoznavamo ga dakle kao topološku invarijantu. Po definiciji su dva materijala su topološki ekvivalentna ukoliko je moguće glatko (adijabatski) deformirati Hamiltonijan jednog materijala u Hamiltonijan drugog bez zatvaranja energijskog procjepa [1], [6], [7]. Tada kažemo da su ti materijali



Slika 2.4: Usporedba svojstava običnog izolatora i materijala koji ima cjelobrojni kvantni Hallov efekt. a) u prvom stupcu: elektronske putanje u običnom izolatoru i materijalu koji ima cjelobrojni kvantni Hallov efekt, u drugom stupcu: vrpce u običnom izolatoru i Landauovi nivoi u IQHE materijalu, a u trećem stupcu: analogija s topologijom u geometriji b) Elektroni se gibaju po kružnim orbitama ciklotronskom frekvencijom. Elektroni na rubu ne mogu prijeći u izolatorsko stanje već se odbijaju od površine efektivno tvoreći rubno vodljivo stanje.

topološki ekvivalentni. Chernov broj je neosjetljiv na glatke adijabatske varijacije Hamiltonijana, pa je upravo zato on topološka invarijanta.

Najjednostavniji primjer topološkog efekta je cjelobrojni kvantni Hallov efekt (eng. *Integer quantum Hall effect*, IQHE), što možemo shvatiti kao 2D slobodni elektronski plin na koji je nametnuto vanjsko magnetsko polje. Ako pogledamo običan izolator i IQHE materijal paralelno (Slika 2.4a) vidimo da su u običnom izolatoru valentna i vodljiva vrpca razdvojene energijskim procjepom, slično tome procjep postoji i između Landauovih nivoa u IQHE materijalu. Krucijalna razlika između prvih sustava je to što elektroni u IQHE materijalu vrše kružno gibanje ciklotronskom frekvencijom u magnetskom polju. Elektroni koji izvode kružno gibanje blizu ruba materijala (Slika 2.4b) ne mogu prijeći u izolator pa se odbijaju od površine efektivno se propagirajući u desno. Na taj način nastaje vodljivo površinsko stanje. Pokazuje se da ne postoje stanja u koja bi se ovako propagirajući elektron mogao raspršiti, prema tome ova površinska stanja nemaju disipaciju. Isto tako topološki su zaštićena što znači da defekti pri sintezi ne uništavaju efekt [6]. Cjelobrojni kvantni Hallov efekt se eksperimentalno opaža samo na visokim magnetskim poljima i na vrlo niskim temperaturama.

Sljedeće pitanje koje se nameće je postoje li materijali koji mogu imati površinska topološki zaštićena stanja bez vrlo visokog vanjskog magnetskog polja i niske temperature. Upravo takvi materijali su topološki izolatori. U njima spin orbit interakcija zamjenjuje utjecaj vanjskog polja. Još jedno iznimno svojstvo TI je zaključanost spina i momenta količine gibanja u površinskim vodljivim stanjima (Slika 2.3). To znači da

je spin elektrona u površinskom vodljivom stanju okomit na smjer njegove propagacije. Tako se elektroni na površini spina gore mogu npr. propagirati samo udesno, dok oni suprotnog spina ulijevo. To znači da nije moguće da se elektronu u površinskom vodljivom stanju dogodi raspršenje unatrag bez promjene spina tj. bez raspršenja na magnetskoj nečistoći. Kako topološki izolatori ne sadrže magnetske atome, jasno nam je da je površina vodljiva bez disipacije. To je iznimno zanimljivo svojstvo za primjenu u spintronici, jer je danas zagrijavanje računala jedan od primarnih problema u tom području. Spinski polarizirani materijali bez disipacije bi bili idealni za tu primjenu. Istraživanje TI je jedan od putova prema tome.

Najproučavaniji topološki izolatori pripadaju skupini tetradimitnih materijala kemijske formule oblika M_2X_3 gdje je $M = \text{Bi, Sb}$, a $X = \text{Se, Te, S}$. Cilj je pronaći topološki izolator sa jako izolatorskom unutrašnjosti kako bi se površinska vodljiva stanja mogla lako proučavati, sa što manjim doprinosom unutrašnjosti. Jedan od pristupa je supstituiranje atoma u osnovnu matricu tetradimitnih materijala tj. zamjenjivanje nekih Bi s Sb i nekih Te sa Se ili S. Potraga za sve boljim topološkim izolatorima i proučavanje površinskih stanja je jako aktivno i zanimljivo područje u fizici trenutno.

2.3 Diracovi i Weylovi semimetali (DSM i WSM)

Kako smo pokazali gore, u 3D je općenito moguće imati stabilne Diracove točke. Ako je također moguće podesiti Fermijevu energiju tako da prolazi kroz točku ili da se nalazi blizu nje, a da nema drugih vrpca u blizini imamo trodimenzionalni semimetal sa Diracovom disperzijom. Ako se radi o presjeku dvije vrpce bez degeneracija, onda niskoenergijska pobuđenja takvog sustava opisuje Weylova jednačba (2.2) iz čestične fizike. Kako je pokazano Nielsen - Nynomiya teoremom fermionskog udvostručenja imat ćemo paran broj Weylovih točaka unutar Brillouinove zone. Napišimo onda jednostavan Hamiltonijan za dvije takve točke preko kojeg ćemo pokazati najvažnija svojstva Weylovih semimetala. Weylov Hamiltonijan u izotropnom obliku je:

$$H_{\pm} = \pm \hbar v_F (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + k_z \sigma_z) \quad (2.17)$$

gdje subskripti $+$ i $-$ označavaju dvije Weylove točke suprotne kiralnosti (Slika 2.5b) i σ_j su Paulijeve matrice, a k_j su relativne koordinate u odnosu na Weylove točke koje su na k_{\pm} respektivno. Energijski spektar gornjeg Hamiltonijana oko Weylovih točaka je $E(k) = \hbar v_F |\vec{k}|$. Gornji izotropni Weylov Hamiltonijan je pojednostavljena verzija anizotropnog Weylovog Hamiltonijana (2.7) i zapravo nešto drukčije zapisan (2.8). Čak se i s ovim pojednostavljenjem mogu pokazati najvažnija svojstva WSM.

2.3.1 Topologija Weylove točke

Prvo važno svojstvo je da su Weylove točke topološki objekti u impulsnom prostoru. Ona izgleda poput ježa ili (pseudo)magnetskog monopola u impulsnom prostoru s

vektorima (pseudo)spina okrenutim prema ili od Weylove točke u ovisnosti o kiralnosti. Kiralnost Hamiltonijana H_{\pm} je ± 1 . To se može izraziti preko efektivnog vektorskog potencijala $A(\vec{k})$ i odgovarajućeg magnetskog polja $B(\vec{k})$ za Blochova eigenstanja $|u_{n,\vec{k}}\rangle$.

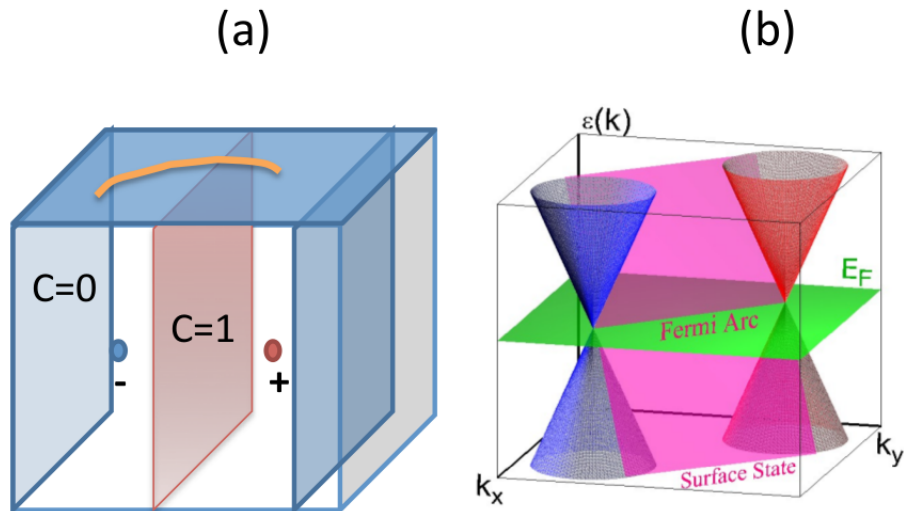
$$\vec{A}(\vec{k}) = -i \sum_{n \text{ (popunjene)}} \langle u_{n,\vec{k}} | \nabla_{\vec{k}} | u_{n,\vec{k}} \rangle; \quad B(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} \times A(\vec{k}) \quad (2.18)$$

gdje se sumacija po n zapravo odnosi samo na popunjene vrpce. U gornjem izrazu možemo prepoznati definicije Berryeve povezanosti (2.13) i Berryeve zakrivljenosti (2.15). Integrirajući Berryevu zakrivljenost kroz malu površinu koja sadrži Weylovu točku dobivamo Berryevu fazu (2.15) $\pm\pi$ za kiralnosti ± 1 . Prema Gaussovom zakonu je to onda tok kroz bilo koju površinu koja sadrži Weylovu točku, pa sad shvaćamo zašto smo Weylove točke nazvali (pseudo)magnetskim monopolima. Prefiks pseudo koristimo kako bismo naglasili da one ipak nisu pravi magnetski monopoli, već magnetski monopoli u impulsnom prostoru. Naravno ako primjenimo Gaussov zakon na cijelu Brillouinovu zonu moramo dobiti rezultat nula zato jer ne možemo imati izvor ili ponor magnetskog polja. To znači da Weylove točke uvijek dolaze u parovima suprotnih kiralnosti što zapravo pokazuje točnost Nielsen - Nynomiya teorema o fermionskom udvostručenju.

Gaussov zakon isto tako pokazuje stabilnost Weylovih točaka jer nam je jasno da one ne mogu samo tako nestati, već je jedini način da nestanu taj da se dvije Weylove točke suprotnih kiralnosti anihiliraju. Drugi način na koji se to da izreći je da je Weylov Hamiltonijan stabilan na dodavanje malih hermitskih perturbacijskih članova što će biti pokazano na primjeru u daljnjem tekstu. Stabilnost Weylovih točaka još se može vidjeti ako primjetimo da Hamiltonijan (2.17) koristi sve tri Paulijeve matrice. Prema tome ne preostaje ni jedna 2×2 matrica koja antikomutira s Hamiltonijanom i koja tako može otvoriti energijski procjep. Čime opet jedini način za uništenje Weylove točke koji preostaje je anihilacija s drugom Weylovom točkom suprotne kiralnosti. To se u principu može napraviti njihovim pomicanjem u impulsnom prostoru dok se ne preklope ili dopuštanjem jakih raspršenja među Weylovim parovima za što bi se morala slomiti translacijska simetrija. Očito je dakle postojanje Weylovih točaka usko vezano uz mogućnost definiranja kristalne rešetke, vektora translacije i recipročne rešetke. U većini slučajeva u realnom materijalu nered nije dovoljan da bi uništio dovoljno udaljene točke. Prijelaz materijala u supravodljivo stanje isto uništava Weylove parove u materijalu zbog otvaranja supravodljivog procjeka.

2.3.2 Fermijevi lukovi

Drugo važno svojstvo WSM je da imaju neobična površinska stanja jedinstvena za WSM koja nazivamo Fermijevim lukovima. Razmotrimo 3D komad Weylovog semimetala s površinom u $x - y$ ravnini. Invarijantnost WSM na translaciju osigurava da



Slika 2.5: Površinska stanja u Weylovom semimetalu. a) Površinska stanja u WSM tvore luk koji spaja projekcije Weylovih točaka. Točke na Fermijevom luku mogu se shvatiti kao rubna stanja 2D izolatora koji ima rubna stanja. Povezivanjem tih rubnih stanja dobivamo Fermijev luk (narančasto). b) Disperzija Weylovih točaka suprotne kiralnosti (crveno i plavo) i disperzija površinskih stanja (rozo) koja ih povezuje čineći Fermijev luk između njih.

možemo definirati energijska stanja elektrona preko momenata u recipročnoj rešetci na plohi u $x - y$ ravnini tj. da površinska stanja imaju dobro definiranu energiju za zadani valni vektor. Pretpostavimo isto tako da u unutrašnjosti materijala imamo dvije Weylove točke opisane Hamiltonijanom (2.17), gdje je Fermijeva energija podešena da se poklapa s energijom Weylovih točaka. Na Fermijevom nivou dakle imamo površinska stanja i stanja vezana uz Weylove točke u unutrašnjosti. Površinska stanja su dobro definirana na toj energiji dalje od Weylovih točaka, jer ne postoje druga stanja sa istom energijom i momentom u unutrašnjosti u koja bi bila moguća raspršenja. S druge strane površinska stanja završavaju na Weylovim točkama i što se zapravo događa je da površinska stanja čine luk između dvije Weylove točke suprotne kiralnosti kako je i prikazano na slici (Slika 2.5 b)).

Fermijeve lukove možemo objasniti isto ako uzmemo u obzir da su Weylove točke (pseudo)magnetski monopoli u impulsnom prostoru. Berryev tok onda izvire iz točke pozitivne kiralnosti i ponire u onoj negativne kiralnosti. Kako po Nielsen - Ninomiya teoremu točke dolaze u parovima tako će onda postojati Berryev tok kroz zamisljenu plohu u ravnini okomitoj na spojnicu Weylovih točaka (Slika 2.5a). Chernov broj C za proizvoljnu plohu u toj ravnini između Weylovih točaka je $C = 1$. Dakle ta je ploha ekvivalentna 2D kvantnom Hallovom stanju, za koji znamo da ima rubna stanja. Kako to vrijedi za proizvoljnu plohu između točaka, tako sve plohe paralelne s njom između točaka imaju rubna stanja. Kad zapravo povežemo sva ta rubna stanja dobivamo Fermijev luk koji spaja dvije Weylove točke suprotne kiralnosti (Slika

2.5a). Opažanje Fermijevih lukova u realnim materijalima pomoću površinski osjetljivih tehnika kao što su ARPES ili STM trebalo bi poslužiti kao čvrsta eksperimentalna potvrda nekog materijala kao Weylovog semimetala.

2.3.3 Jednostavan primjer sistema s Weylovim točkama

Primjera radi promotrit ćemo još jedan tzv. igračka model (eng. *toy model*) kako bismo demonstrirali da se Weylove točke mogu javiti i u naizgled jednostavnim sistemima. Hamiltonijan sistema s dvije vrpce na kubičnoj rešetci:

$$H = [2t_x(\cos k_x - \cos k_0) + m(2 - \cos k_y - \cos k_z)] \sigma_x + 2t_y \sin k_y \sigma_y + 2t_z \sin k_z \sigma_z \quad (2.19)$$

Hamiltonijan je invarijantan na inverziju, ali ne i na promjenu smjera vremena, što se provjeri ako znamo da se $\vec{\sigma}$ transformira kao angularni moment na te transformacije. Lako se pokaže da se vrpce dotiču za $\vec{k} = \pm k_0 \hat{x}$. Razvojem oko ovih točaka se lako opet dobije Weylov Hamiltonijan (2.17). Proizvoljan hermitski član se može dodati ovom Hamiltonijanu bez da uništi Weylove točke, već ih samo pomiče u impulsnom prostoru. Pokažimo to na primjeru Zeemanovog cijepanja $\Delta H = -2t_x h_Z \sigma_x$, koje pomiče Weylove točke na $\vec{k} = \pm \cos^{-1}(h_Z + \cos k_0) \hat{x}$. Jedino kada je h_Z jako velik je moguće da dovede do toga da se Weylove točke preklope i anihiliraju.

2.3.4 Kiralna anomalija

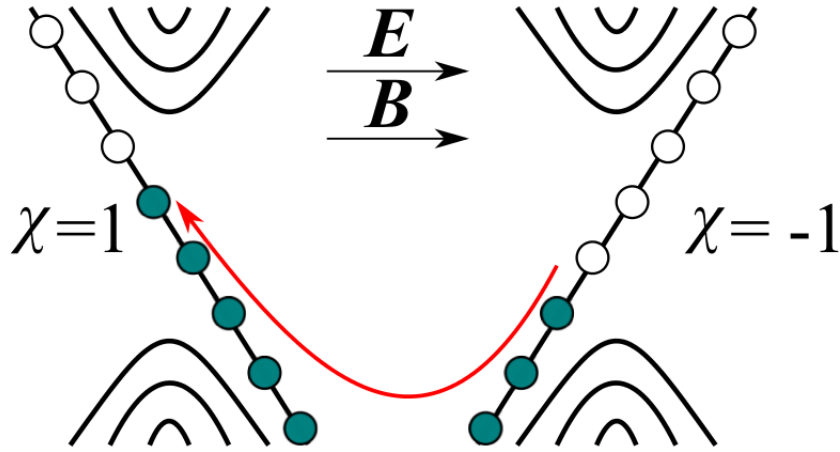
Još jedna posljedica posebne topološke strukture WSM je njihovo ponašanje u paralelnom vanjskom magnetskom \vec{B} i električnom polju \vec{E} . One pokazuju nešto što je poznato pod nazivom kiralna anomalija. U teoriji polja ta pojava je poznata i pod nazivom Adler - Bell - Jackiw anomalija. Kiralna anomalija govori da ukupan broj nabijenih čestica ne bi bio očuvan ukoliko bi postojala samo jedna Weylova točka. U tom slučaju se jednadžba kontinuiteta modificira na način (izvod [4]):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = \pm \frac{1}{4\pi^2} \frac{e^2}{\hbar^2 c} \vec{E} \cdot \vec{B} \quad (2.20)$$

gdje \pm odgovara kiralnosti Weylove točke. Sad je očito da je naboj očuvan za dvije Weylove točke suprotnih kiralnosti. Konkretno za slučaj dan Hamiltonijanom (2.17), tada je razlika između koncentracije elektrona u jednoj i drugoj dana s:

$$\frac{d(n_+ - n_-)}{dt} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{e^2}{\hbar^2 c} \vec{E} \cdot \vec{B} \quad (2.21)$$

što znači da se primjenom paralelnog električnog i magnetskog polja mogu kontrolirati naseljenosti u pojedinim Weylovim točkama. Neposredna posljedica ovoga je da su potrebni snažni procesi relaksacije u impulsnom prostoru kako bi se izjednačile koncentracije. U relativno čistom materijalu, ti su procesi slabi, pa je vrijeme relaksacije dugo. Longitudinalna vodljivost u smjeru magnetskog polja, koja je proporcionalna relaksacijskom vremenu je tada jako velika. Isto tako u WSM na visokom



Slika 2.6: Pumpanje naboja između Weylovih točaka u paralelnom električnom i magnetskom polju u kvantnom limitu. Svaka točka je jedna Landauov nivo. Popunjeni krugovi označavaju popunjena stanja, a prazni prazna. Prikazana je samo popunjenost nultog Landauovog nivoa zato jer je on jedini koji sudjeluje u procesu pumpanja naboja. Preuzeto iz [5].

magnetskom polju vrpce se reduciraju u Landauove nivoe. Mehanizam kojim se u paralelnom električnom i magnetskom polju oni popunjavaju je prikazan na slici (Slika 2.6). Dakle, otpornost materijala je obrnuto proporcionalna s magnetskim poljem tj. smanjuje se sa povećanjem polja. Imamo dakle pojavu negativnog magnetootpora.

2.3.5 Anomalni Hallov efekt

Još jedna posljedica kiralne anomalije je anomalni Hallov efekt. 2D regije Brillouinove zone između dvaju Weylovih točaka možemo gledati kao 2D kvantne Hallove izolatore. Prema tome će ukupni Hallov efekt u ovom materijalu biti proporcionalan razmaku između tih točaka. Ukoliko postoje dvije Weylove točke u centru Brillouinove zone, kako se one razmiču u impulsnom prostoru tako se Hallova vodljivost povećava sve dok točke ne dođu do ruba Brillouinove zone gdje se anihiliraju s točkama suprotne kiralnosti iz susjednih Brillouinovih zona. U tom trenutku sistem možemo smatrati slojevitim Chernovim izolatorom (2D materijal koji ima cjelobrojni kvantni Hallov efekt) gdje su slojevi u smjeru vektora \vec{G} recipročne rešetke koji se nalazi na spojnici Weylovih točaka. Razlog za to je dan u podpoglavlju: Fermijevi lukovi. Dakle WSM je međustanje između običnog izolatora i slojevitog Chernovog izolatora. Hallova vodljivost je dana s vektorom \vec{G}_H :

$$\vec{G}_H = \frac{e^2}{2\pi h} \sum_i \chi_i \vec{k}_i \quad (2.22)$$

gdje je \vec{k}_i položaj Weylove točke, a χ_i njena kiralnost. Zbog simetrične raspodjele Weylovih točaka u odnosu na centar Brillouinove zone nema doprinosa Anomalnog Hallovog efekta. Kombinacijom Hallovih mjerenja i ARPES mjerenja može se odrediti razmak između Weylovih točaka u impulsnom prostoru.

2.3.6 Simetrijska zaštićenost Diracovih i Weylovih točaka

Kako smo već spomenuli da bismo imali WSM moramo imati slomljenu ili simetriju na obrat smjer vremena ili simetriju na inverziju. Ukoliko su obje ove simetrije očuvane, pokazuje se da Weylove točke moraju biti degenerirane. Da bismo to pokazali pretpostavimo da se Weylova točka pojavi u Brillouinovoj zoni na mjestu \vec{k} . Weylovu točku možemo karakterizirati Chernovim brojem koji je ± 1 . Simetrija na obrat vremena nameće da mora postojati još jedna Weylova točka s istim Chernovim brojem odnosno kiralnošću na $-\vec{k}$. No ukupan Chernov broj u cijelom sistemu mora biti 0. Prema tome mora postojati još jedna Weylova točka suprotne kiralnosti tj. Chernovog broja na \vec{k}' i zbog simetrije na inverziju vremena još jedna na $-\vec{k}'$. Sada ukoliko postoji i simetrija na prostornu inverziju ona zahtijeva da Weylove točke na \vec{k} i $-\vec{k}$ imaju suprotnu kiralnost.

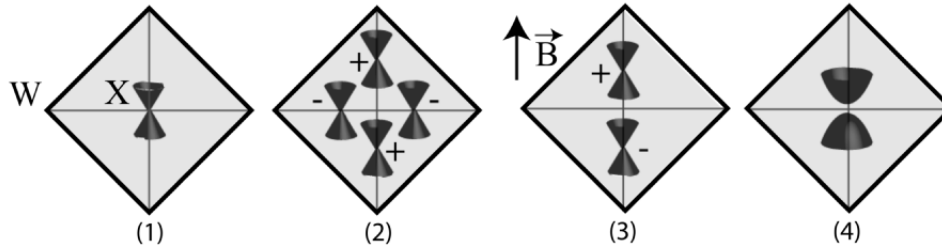
Svi ovi zahtjevi jedino mogu biti ispunjeni ukoliko vrijedi $\vec{k} = \vec{k}'$ i sistem ima najmanje dvije točke u kojima se diraju vodljiva i valentna vrpca. Prema tome na kraju imamo četiri Weylove točke od kojih se dvije i dvije preklapaju. Sistem je dakle onda opisan s 4×4 Diracovim Hamiltonijanom.

$$H(\vec{k}) = \begin{bmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{k} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \cdot \vec{k} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

koji se može gledati kao dvije kopije 2×2 Weylovog Hamiltonijana sa suprotnim kiralnostima (2.17).

Materijal koji posjeduje ovakav niskoenergijski Hamiltonijan nazivamo 3D Diracovim semimetalom. Oni imaju mnoge slične karakteristike Weylovim semimetallima jer posjeduju istu 3D disperzijsku relaciju. Na površini Diracovih semimetala imamo također Fermijeve lukove koji spajaju projekcije Diracovih točaka na ravninu površine. Dok je pojedina Weylova točka topološki zaštićena jer ne postoji četvrta Paulijeva 2×2 matrica koja bi mogla stvoriti procjep u spektru, Diracova točka nije toliko robusna na perturbacije jer postoje još neke 4×4 Paulijeve matrice koje mogu otvoriti procjep. Još jedan način na koji se može vidjeti da je Diracova točka općenito nestabilnija od Weylove je ako primijetimo da se ona u principu sastoji od dvije Weylove točke suprotnih kiralnosti koje se aniliraju ukoliko ne postoji neka viša simetrija koja čuva degeneriranost Diracove točke.

Weylove točke se mogu direktno stvoriti u Diracovom semimetalu tako da se slomi ili simetrija na inverziju vremena ili ona na inverziju prostora. Konkretno eksperimentalno se simetrija na inverziju vremena može slomiti magnetskim poljem, a ona na inverziju u prostoru nekom vrstom naprezanja kristala koje je nesimetrično, ili električnim poljem ukoliko se može izazvati asimetričan pomak atoma u ćeliji. Tako na neki način možemo Diracove semimetale smatrati prethodnicima Weylovih, na način da iz DSM možemo dobiti WSM lomom simetrije. Prelazak između 3D Diracovog u Weylov semimetal je prikazan shematski na slici (Slika 2.7) u Kane - Fu - Mele modelu [8]. Prelezak se može napraviti lomom simetrije na inverziju u prostoru gdje



Slika 2.7: Dirac, Weyl i izolatorske faze u tzv. Fu - Kane - Mele modelu na rombskoj rešetci [8]. (1) Diracova točka na poziciji X, četverostruko degenerirana. (2) Četiri Weylove točke separirane u impulsnom prostoru dobivene lomom simetrije na prostornu inverziju. Kiralnost Weylovih točaka isto tako i njihov Chernov broj označena je s \pm . (3) Dvije Weylove točke dobivene lomom simetrije na promjenu smjera vremena vanjskim poljem \vec{B} u smjeru X prema W. (4) Stanje s procjepom koje se dobije s bilo kojim drugim smjerom magnetskog polja \vec{B} , jer to lomi rotacijsku simetriju. Preuzeto iz [1].

se onda dobiju četiri Weylove točke ili lomom simetrije na promjenu smjera vremena gdje se mogu postići dvije Weylove točke. Isto tako je moguće sustav dovesti u stanje koje ima procjep primjenom magnetskog polja u nekom smjeru tako da se slomi rotacijska simetrija.

2.3.7 Stvaranje mase

Gore prikazani postupak otvaranja procjepa se naziva stvaranjem mase Diracovog fermiona i usko je vezan uz simetrijsku protekciju Diracovih kvazičestica. One su nužno protektirane nekom simetrijom sustava (jako ovisi o samom sustavu). Identificirati simetriju odgovornu za tu protekciju znači dobro razumjeti nastanak Diracovog Hamiltonijana u sistemu. Eksperimentalno je iznimno zanimljivo onda pokušati slomiti tu simetriju i tako generirati masu u Diracovom Hamiltonijanu. Generirati masu u 3D Weylovim semimetalima nije moguće perturbativnim metodama jer Weylove točke nisu simetrijski već topološki zaštićene. Jedino ih je moguće preklopiti u impulsnom prostoru čime se one anihiliraju otvarajući procjep u spektru.

Za razliku od toga u 3D Diracovim semimetalima koji se sastoje od para preklopljenih Weylovih točaka suprotnih kiralnosti, čim se slomi simetrija koja ih štiti se one anihiliraju rezultirajući energijskim procjepom. U nedavno otkrivenom 3D Diracovom semimetalu Cd_3As_2 se lomom rotacijske simetrije dobivaju masivni Diracovi fermioni [23], za razliku od toga A_3Bi , gdje je $\text{A} = \text{Na}, \text{K}$, lomom rotacijske simetrije postaje izolatorski [25].

2.3.8 Najpoznatiji Diracovi i Weylovi semimetali

Najstariji poznati Diracov semimetal je bizmut. Poznato je već neko vrijeme da se u njemu pojavljuju masivni Diracovi fermioni kao pobuđenja. Bezmaseni Diracovi semimetali su doduše tek nedavno predviđeni. Jedan od tih materijala je recimo Cd_3As_2 koji je nešto kasnije eksperimentalno potvrđen ARPES i transportnim mjerenjima. Prvi teorijski predviđeni WSM su iz skupine oblika $\text{R}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$, gdje je R iz skupine rijetkih zemnih metala. Eksperimentalno se još nije uspjelo nedvojbeno pokazati da su oni zaista WSM. Nakon teorijskog predviđanja materijala iz skupine AB, gdje je A = Ta, Nb i B = As, P kao potencijalnih WSM prvi eksperimentalno potvrđeni WSM bio je TaAs [10]- [11]. To je potaknulo cijeli niz istraživanja na ovim materijalima. Kasnije su potvrđeni i ostali članovi ove skupine kao WSM [12]- [20] ARPES i magnetotransportnim mjerenjima.

2.4 Ostali sustavi

2.4.1 Visokotemperaturni supravodiči

Dok su Diracovi fermioni kod grafena, topoloških izolatora, Diracovih i Weylovih semimetala uglavnom posljedica strukture vrpce kod d-valnih supravodiča su kvazičestična Diracova pobuđenja nastaju potpuno drugim mehanizmom. Svejedno, isti niskoenergijski Hamiltonijan se na krjau pojavi (2.17). Visokotemperaturni kupratni supravodiči su najznačajniji d-valni supravodiči. Prvi otkriveni teško fermionski supravodič je CeCu_2Si_2 . U sljedećem potpoglavlju ćemo vidjeti da i neki organski vodiči imaju supravodljivost ovog tipa. U svim visokotemperaturnim supravodičima kao npr. $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) ili $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ se pojavljuje CuO_2 ravnina sa kvadratnom ili pravokutnom rešetkom. Upravo je ta ravnina ustanovljena kao ključna za nastanak supravodljivosti. Zbog visoke anizotropije i toga što je pojava supravodljivosti vezana za CuO_2 slojeve, možemo ove materijale opisati 2D Hamiltonijanom. Pokazuje se da se Bogoliubovljeve kvazičestice u impulsnom prostoru u ovim materijalima daju opisati sa sljedećim Bogoliubov - de Gennes Hamiltonijanom i disperzijskom relacijom:

$$H_{BdG} = \epsilon_{\vec{k}}\tau_z + \Delta_{\vec{k}}\tau_x; \quad E_{\vec{k}} = \sqrt{\epsilon_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} \quad (2.24)$$

Za d-valne supravodiče parametar procjepa u spektru odgovara $\Delta_{\vec{k}} = \Delta_0 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$. Procjep u supravodljivom spektru dakle nestaje u smjeru $|k_x| = |k_y|$, dajući točku dodira vrpce koja se može linearizirati čime se dobije Diracovo raspršenje. Zbog čestično-šupljinske simetrije simetrije Bogoliubovog spektra Fermijev nivo je uvijek na razini Diracove točke. Iako bi se očekivalo da se Diracova kvazičestična pobuđenja u d-valnim supravodičima ponašaju isto kao i takva pobuđenja u grafenu ili topološkim izolatorima, pokazuje se da ipak postoje neke razlike među njima. Bogoliubova kvazičestica nema dobro definiran naboj što dovodi do nekih drugačijih

fenomena koji su iznad razine ovog rada gdje radi potpunosti samo spominjemo postojanje Diracove disperzije u visokotemperaturnim supravodičima.

2.4.2 Organski vodiči

Zbog jako puno mogućnosti slaganja organskih radikala u organskim materijalima moguće je stvoriti raznorazne rešetke, pa tako i kvazidvodimenzionalne heksagonalne strukture nalik grafenu koje mogu imati Diracove točke. Jedan od primjera je organski vodič α -(BEDT-TTF)₂I₃ pod visokim tlakom [21]. Van der Waalsova priroda slaganja u ovoj klasi materijala čini to da je relativno lako kontrolirati parametre tlakom, pa su ovi materijali perspektivni za proučavanja efekata frustracije u niskim dimenzijama. Još jedan razlog zašto su ovi materijali zanimljivi je to što imaju neobičan mehanizam supravodljivosti kakav je opisan u prethodnom potpoglavlju. Primjer za to je κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂. Organski vodiči kao klasa Diracovih materijala nisu predmet ovog istraživanja i kratko su spomenuti potpunosti radi.

3 Električni transport naboja u metalima

Razumijevanje transportnih svojstava materijala je ključno u proučavanju mnogih fenomena, jer su upravo transportne tehnike jedne od najčešće korištenih eksperimentalnih tehnika. Transportni koeficijenti poput otpornosti, Hallovo koeficijenta, magnetootpora i sl. ovise o mikroskopskim svojstvima elektronskog podsustava npr. o disperziji elektrona u vodljivoj vrpici, o mehanizmima raspršenja elektrona i o različitim međudjelovanjima elektrona. Vodljivost metala tu naravno zauzima posebno mjesto jer je razumijevanje ovog fenomena povijesno bio jedan od najvažnijih problema.

U ovom poglavlju ćemo uvodno proučiti električni transport naboja u jednostavnom Drudeovom modelu, zatim se okrenuti konkretnijem Boltzmannovom modelu i njega malo detaljnije izučiti. Nakon toga ćemo pogledati što se događa kad je u igri i magnetsko polje, a poglavlje završavamo sa razmatranjem kvantnih oscilacija u kristalima.

3.1 Modeli električne otpornosti

Otpornost nekog materijala se definira kao konstanta proporcionalnosti između nametnutog vanjskog električnog polja i gustoće struje koja nastane.

$$\vec{E} = \rho \vec{j}; \quad \vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (3.1)$$

Otpornost ρ je obrnuto proporcionalna vodljivosti σ u sustavima bez magnetskog polja. Inače je relacija tenzorska. Gornju relaciju nazivamo mikroskopskim Ohmovim zakonom, dok je makroskopski Ohmov zakon

$$U = R \cdot I \quad (3.2)$$

gdje je V nametnuti napon, I struja, a R otpor. Gustoća struje j je vezana kao $j = I/A$ sa strujom I .

3.1.1 Drudeov model

Drudeov model je prvi opis vodljivosti metala, vrlo je jednostavan model i ne daje u potpunosti točan opis, već samo kvalitativno opisuje neka svojstva metala. Pretpostavke ovog modela su da postoje pozitivni ioni raspoređeni u materijalu koji su puno teži od elektrona pa su gotovo nepomični te se elektroni od njih mogu odbijati bez da ih pomaknu. Putanje elektrona bez vanjskog magnetskog polja su ravne linije, a pod utjecajem vanjskog električnog polja koristimo drugi Newtonov zakon za opis gibanja elektrona. Polja koja dolaze od iona i ostalih elektrona zanemarujemo. Vrijeme svakog sudara je pretpostavljeno kao zanemarivo i sila među njima postoji samo tog trenutka sudara i kasnije je zanemariva. Drude je napravio još jednu pretpostavku u svom modelu tako da je pretpostavio da su elektroni u metalu slobodni, tj. nisu vezani uz ione. On je primijenio kinetičku teoriju plinova na ovakav slobodni

plin elektrona. Za početak izraz za gustoću slobodnih elektrona se lako dobije ukoliko znamo gustoću metala ρ_m , broj slobodnih elektrona po atomu Z , atomsku masu metala A i Avogadrov broj N_A .

$$n = \frac{N}{V} = N_A \frac{Z\rho_m}{A} \quad (3.3)$$

Pretpostavlja se da u prosjeku elektron putuje vrijeme τ prije nego se rasprši i nazivamo ga vremenom raspršenja. U Drudeovom modelu pretpostavljeno je da ono ne ovisi o položaju i brzini što je najčešće i ispunjeno u metalima. Pretpostavljeno je i da se elektroni termaliziraju isključivo sudarima, tako što se pretpostavlja da nakon svakog sudara elektron koji izlazi iz sudara ima nasumičan smjer i brzinu koja odgovara temperaturi regije u kojoj se raspršio.

Ako imamo gustoću elektrona n koja se miče brzinom \vec{v} možemo izraziti gustoću struje takvog sustava kao:

$$\vec{j} = -ne\vec{v} \quad (3.4)$$

gdje $-$ predznak dolazi jer su elektroni negativno nabijeni. Očito \vec{v} u gornjem izrazu mora biti prosječna brzina gibanja elektrona u metalu. Sljedeći cilj je izračunati je uvažavajući Drudeove pretpostavke. Razmotrimo tako elektron u trenutku $t = 0$ koji ima brzinu \vec{v}_0 neposredno nakon prethodnog raspršenja. Na njega djeluje i električno polje \vec{E} te on ubrzava. U infinitezimalnom vremenu brzina elektrona postaje $\vec{v}_0 - (e\vec{E}/m_e)dt$. Do sljedećeg raspršenja elektron putuje u vremenu τ . Prema tome srednja brzina elektrona dana je izrazom:

$$\vec{v}_{avg} = -\frac{e\vec{E}\tau}{m_e} \implies \vec{j} = \left(\frac{ne^2\tau}{m_e}\right)\vec{E} \implies \sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} \quad (3.5)$$

čime smo odredili izraz za vodljivost u Drudeovom modelu.

Sada možemo odrediti i jednadžbu gibanja elektrona. Neka je $\vec{p}(t)$ količina gibanja po elektronu u trenutku t nakon sudara, a zanima nas kolika je $\vec{p}(t+dt)$. Vjerojatnost da će se elektron sudariti u trenutku $t+dt$ je dt/τ , pa je vjerojatnost da neće doživjeti sudar jednaka $1-dt/\tau$. Ukoliko se ne raspršuje onda vremenski evoluira po drugom Newtonovom zakonu, tj. pod utjecajem sile $\vec{f}(t)$. Iz toga slijedi:

$$\vec{p}(t+dt) = \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) \left[\vec{p}(t) + \vec{f}(t)dt + o(dt)^2\right] \quad (3.6)$$

gdje ostatak o reda $(dt)^2$ dolazi od elektrona koji se rasprše u vremenu τ , ali je višeg reda pa ga zanemarujemo. Preslagivanjem izraza (3.6) i uzimenjem da vrijedi $dt \rightarrow 0$ dobivamo jednadžbu gibanja u Drudeovom modelu:

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} + \vec{f}(t) \quad (3.7)$$

U gornjem izrazu vidimo da sve što raspršenja u sistemu naprave je da uvedu član gušenja u jednadžbu gibanja za količinu gibanja po elektronu.

Kasnije su se pokazali glavni nedostaci Drudeovog modela, naime elektroni se ne raspršuju na nepomičnim ionima nego isključivo na nečistoćama, defektima i pobuđenjima kristalne rešetke (fononima). Drudeov model isto tako predviđa nepomične elektrone na temperaturi $T = 0$, što isto nije točno jer su elektroni fermioni.

3.1.2 Sommerfeldov model

Drude se u svom modelu koristio kinetičkom teorijom plinova koja podrazumijeva da se elektroni ponašaju kao neutralni plin kuglica pri čemu je onda funkcija njihove distribucije Maxwell - Boltzmannova raspodjela. Elektroni su zapravo fermioni pa za njih vrijedi Fermi - Diracova distribucija. Za slučaj slobodnog elektronskog plina je ona:

$$f(\vec{v}) = \frac{(m/\hbar)^3}{4\pi^3} \frac{1}{\exp[(\frac{1}{2}m\vec{v}^2 - k_B T_0)/k_B T] + 1} \quad (3.8)$$

gdje se T_0 određuje iz uvjeta normalizacije $n = \int d^3\vec{v} f(\vec{v})$, što obično ispadne reda veličine $10^4 - 10^5$ K. Dakle Sommerfeldov model je u potpunosti isti kao Drudeov samo umjesto Maxwell - Boltzmannove distribucije koristi Fermi - Diracovu.

3.1.3 Boltzmannov model

Općenita kvaziklasična teorija transporta je dana s tzv. Boltzmannovom transportnom jednadžbom (BTJ). Razlog zašto je nazivamo kvaziklasičnom je zato što govorimo da kvantne čestice imaju položaj i impuls što je karakteristika klasičnih čestica, no uvažavamo kvantnomehaničke efekte poput Fermi - Diracove distribucije i sl. Na jako niskim temperaturama gdje dominiraju kvantni efekti kvaziklasična aproksimacija nije opravdana i ne mogu se koristiti njeni rezultati. Najdirektniji način za izvesti BTJ je preko Liouvilleovog teorema. On govori o tome da je broj članova statističkog ansambla konstantan i zapravo je Liouvilleov teorem jednadžba očuvanja tog broja. Funkcija raspodjele ansambla $f(\vec{r}, \vec{p})$ zadovoljava Liouvilleovu jednadžbu koja opisuje gibanje članova ansambla u konfiguracijskom prostoru. To je prostor od $6N$ parametara (položaja i impulsa čestica u 3D), gdje je N broj čestica. Primjenom teorema za sustav u kojem nemamo raspršenja i međudjelovanja među česticama dobivamo BTJ u obliku:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = 0 \quad (3.9)$$

gdje je \vec{v} brzina čestica i \vec{F} vanjska sila. Ukoliko postoje sudari u sistemu desna strana gornje jednadžbe više nije jednaka 0 već $(\partial f / \partial t)_{sud}$ gdje je pretpostavka onda da sudari traju jako kratko i da su lokalni, te da među njima nema korelacija pa se mogu tretirati statistički.

Ako je sustav u ravnoteži, funkcija distribucije se ne mijenja. U tom slučaju je sudari ne mogu promijeniti iako se oni neprestano događaju zato jer broj prijelaza iz nekog stanja $|a\rangle$ u stanje $|b\rangle$ u prosjeku je u potpunosti kompenziran s prijelazom iz $|b\rangle$ u $|a\rangle$. Do neravnoteže dolazi isključivo ako je sustav izložen vanjskom polju.

Prvo pogledajmo kako možemo modelirati izraz za promjenu funkcije raspodjele zbog sudara u sistemu $(\partial f / \partial t)_{sud}$. Fermijevo zlatno pravilo daje vjerojatnost prijelaza za česticu koja prelazi iz stanja $|i\rangle$ u $|f\rangle$.

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{int} | i \rangle|^2 \delta(e_f - e_i \pm \hbar\omega); \quad w_{i \rightarrow f} = w_{f \rightarrow i} \quad (3.10)$$

Ako je čestica doživjela raspršenje iz početnog stanja $|i\rangle = (\vec{r}, \vec{p})$ u konačno stanje $(\vec{r}', \vec{p}') = |f\rangle$ prirast funkcije raspodjele zbog toga će biti suma svih mogućih vjerojatnosti raspršenja

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sud}(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_{\vec{p}'} w_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}'} [f(\vec{r}, \vec{p}') - f(\vec{r}, \vec{p})] \quad (3.11)$$

Gornji izraz se modificira za fermione i bozone:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sud}(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_{\vec{p}'} w_{\vec{p} \rightarrow \vec{p}'} [f(\vec{r}, \vec{p}') (1 \pm f(\vec{r}, \vec{p})) - f(\vec{r}, \vec{p}) (1 \pm f(\vec{r}, \vec{p}'))] \quad (3.12)$$

gdje se gornji predznak u \pm odnosi na bozone, a donji na fermione.

Općenito ako se gornji izraz iskoristi u BTJ dobiti rješenje za distribucijsku funkciju je vrlo zahtijevno. Zato se najčešće koristi tzv. aproksimacija relaksacijskog vremena za sudarni član.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{sud} = -\frac{f(\vec{r}, \vec{p}) - f_0}{\tau} \quad (3.13)$$

gdje je f_0 ravnotežna raspodjela, za slobodni elektronski plin npr. Fermi - Diracova raspodjela. Neka je raspodjela u trenutku $t = 0$ pomaknuta iz ravnotežne i neka nema vanjske sile. Tada je rješenje za funkciju raspodjele u aproksimaciji relaksacijskog vremena:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f_0 + [f(\vec{r}, \vec{p}, t = 0) - f_0] e^{-t/\tau} \quad (3.14)$$

dakle funkcija raspodjele se relaksira prema ravnotežnoj eksponencijalno s vremenom relaksacije τ .

Iz Boltzmannove jednadžbe možemo izračunati izraz za vodljivost u aproksimaciji relaksacijskog vremena za homogeni sustav u električnom polju \vec{E} .

$$e\vec{E} \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (3.15)$$

Definiramo odstupanje od ravnoteže kao $\delta f = f - f_0$, pa imamo:

$$\delta f \approx -e \left(\vec{E} \cdot \vec{v} \right) \quad (3.16)$$

Gustoću struje možemo zapisati onda kao:

$$\begin{aligned} \vec{j} &= \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \vec{v} f(\vec{p}) = -\frac{2e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{E}) \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \\ &= e^2 \int dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \mathcal{D}(E) \int \frac{d\Omega}{4\pi} \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{E}) \tau \end{aligned} \quad (3.17)$$

gdje je $\mathcal{D}(E)$ gustoća stanja, a derivacija Fermi - Diracove raspodjele približno je jednaka delta funkciji ($-\partial f_0/\partial E = \delta(E - E_F)$). Ako usporedimo zadnji dio izraza (3.17) s izrazom:

$$j_i = \sum_j \sigma_{ij} E_j \quad (3.18)$$

vidimo da je izraz za vodljivost onda zapravo:

$$\sigma = e^2 \langle v_i v_j \rangle_F \mathcal{D}(E_F) \tau \quad (3.19)$$

Prema tome vodljivost je proporcionalna s gustoćom stanja na Fermijevoj energiji i s vremenom raspršenja τ . Za izotropan slobodan elektronski plin se izraz (3.19) svodi na zadnji izraz u (3.5) iz Drudeovog modela.

Zanima nas izraz za vrijeme raspršenja u ovoj aproksimaciji. Općenito će on jako ovisiti o vrsti raspršenja (na fononima, na nečistoćama itd.). Izračun samog vremena raspršenja je netrivialan, te se gotovo uvijek računa aproksimativno ili numerički iz prvih principa. No jednom kad je izračunato vrijeme raspršenja za dani sustav na danoj temperaturi moguće je uvrstiti ga u izraz (3.19) i dobiti izraz za vodljivost. Kada je u sustavu prisutno više procesa koji raspršuju čestice inverzi vremena relaksacije se zbrajaju kako bi se dobio rezultat za vrijeme raspršenja u sustavu (3.20). To zovemo Matthiesenovim pravilom. Ono vrijedi u aproksimaciji relaksacijskog vremena, a u općenitom slučaju ne nužno.

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots \quad (3.20)$$

Što se procesa raspršenja tiče, raspršenje na nečistoćama je temperaturno neovisno i dominira na niskim temperaturama, dok je raspršenje na fononima temperaturno ovisno i dominira na visokim temperaturama.

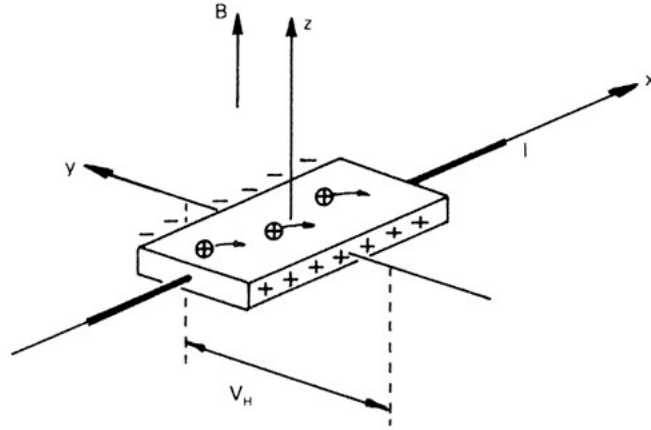
3.2 Transport naboja u magnetskom polju

Mjerenje transportnih svojstava uz vanjsko nametnuto magnetsko polje je jedan od ključnih načina za dobivanje informacija o materijalu. Tako se npr. mjernjem Hallovog napona može saznati nešto o većinskim nosiocima naboja u materijalu. Osim transporta naboja u današnje vrijeme zanimljivo je poručavati transport spina radi primjene u spintronici.

3.2.1 Hallov efekt

Hallov efekt u klasičnoj fizici je jednostavno shvatiti. Lorentzova sila zakreće putanju nabijene čestice oko magnetskog polja. Ukoliko postavimo uzorak materijala kako je prikazano na slici (Slika 3.1), nosioci pozitivnog naboja zakreću prema desno i nakupljajući se na desnoj strani stvaraju razliku potencijala koju nazivamo Hallovim naponom. Sila na nabijenu česticu u vanjskom električnom i magnetskom polju je:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (3.21)$$



Slika 3.1: Pozitivni nosioci naboja u uzorku zbog vanjskog nametnutog magnetskog polja B u smjeru z osi zakreću u desno. Nakupljajući se na desnoj strani uzorka oni stvaraju razliku potencijala koju nazivamo Hallovim naponom V_H .

Najjednostavnije gledano naboj će se nakupljati na desnoj strani dok elektrostatska sila od nakupljenih naboja ne izjednači Lorentzovu silu $F_e = qvB$. Elektrostatska sila je onda zapravo $F_e = qE_e = qvB$, pa imamo $E_e = V_H/w$, gdje je w širina uzorka. Iz toga dobivamo izraz za Hallov napon $V_H = vBw$. Koristeći izraz za struju $I = Avqn$ gdje je $A = t \cdot w$ površina uzorka, t debljina uzorka, v prosječna brzina nosioca naboja u uzorku, q naboj nosioca i n koncentracija nosioca možemo napisati izraz za Hallov napon:

$$V_H = \frac{IB}{ntq} \quad (3.22)$$

Sada možemo definirati Hallovu konstantu:

$$R_H = \frac{E_e}{jB} = \frac{V_H t}{IB} = \frac{1}{nq} \quad (3.23)$$

Dakle ukoliko znamo Hallovu konstantu možemo odrediti koncentraciju nosioca naboja n i iz predznaka konstante odredimo predznak nosioca naboja.

Hallov efekt se može odrediti i iz Boltzmannove transportne jednadžbe (3.9). Ako brzinu \vec{v} u izrazu (3.21) shvatimo kao $\vec{v} = \partial e / \partial \vec{p} \equiv \vec{v}_{\vec{p}}$ gdje su e i \vec{p} energija i moment čestice. Član BTJ koji uključuje silu \vec{F} možemo napisati ako pretpostavimo da je funkcija raspodjele $f = f_0(e) + \delta f$, gdje je f_0 ravnotežna funkcija raspodjele, a δf mala perturbacija.

$$\begin{aligned} \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} &= q(\vec{E} + \vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} [f_0(e) + \delta f] = q(\vec{E} + \vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \left[\frac{\partial e}{\partial \vec{p}} \frac{\partial f_0}{\partial e} + \frac{\partial \delta f}{\partial \vec{p}} \right] \\ &\approx q\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}} \left(\frac{\partial f_0}{\partial e} \right) + q(\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \vec{p}} \end{aligned} \quad (3.24)$$

gdje član $q\vec{E} \cdot (\frac{\partial \delta f}{\partial \vec{p}})$ doprinosi u višem redu pa se zanemaruje, a član $q\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B} \cdot (\frac{\partial e}{\partial \vec{p}} \frac{\partial f_0}{\partial e})$ je isto zanemariv. Onda u aproksimaciji relaksacijskog vremena dobivamo izraz:

$$q(\vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{p}}) \left(\frac{\partial f_0}{\partial e} \right) \approx \frac{\delta f}{\tau} + q(\vec{v}_{\vec{p}} \times \vec{B}) \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial \vec{p}} \quad (3.25)$$

Gornji izraz vrijedio bi i za izračun DC vodljivosti, uz zanemarivanje posljednjeg člana tj. $\vec{B} = 0$. Rješenje tražimo u obliku:

$$\delta f = q(\vec{A} \cdot \vec{v}_{vecp}) \cdot \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e} \right) \tau \quad (3.26)$$

gdje je \vec{A} vektor koji u slučaju DC vodljivosti odgovara \vec{E} . Možemo iskoristiti i aproksimaciju efektivne mase $\vec{v}_{\vec{p}} = \vec{p}/m^*$. Tada se dobije izraz za vektor \vec{A} :

$$\vec{E} = \vec{A} + \frac{q\tau}{m^*}(\vec{B} \times \vec{A}) \implies \vec{A}_{\parallel} = \vec{E}_{\parallel}; \quad \vec{A}_{\perp} = \frac{\vec{E}_{\perp} - \frac{q\tau}{m^*}\vec{B} \times \vec{E}_{\perp}}{1 + \left(\frac{q\tau}{m^*}\vec{B}^2\right)} \quad (3.27)$$

gdje oznake \parallel i \perp označavaju komponentu vektora paralelno i okomito na magnetsko polje \vec{B} . Uvrstimo li gornji izraz u izraz za struju (3.1) dobivamo:

$$\vec{j}_{\parallel} = \sigma_0 \vec{E}_{\parallel}; \quad \vec{j}_{\perp} = \sigma_0 \frac{\vec{E}_{\perp} - \frac{q\tau}{m^*}\vec{B} \times \vec{E}_{\perp}}{1 + \left(\frac{q\tau}{m^*}\vec{B}^2\right)} \implies \sigma_0 \vec{E} = \vec{j} + \frac{q\tau}{m^*}\vec{B} \times \vec{j} \quad (3.28)$$

Iz gornjeg izraza se lako vidi da je inducirano električno polje:

$$E_e = \frac{q\tau}{m^*} \frac{1}{\sigma_0} B j = \frac{1}{qn} B j \implies R_H = \frac{1}{qn} \quad (3.29)$$

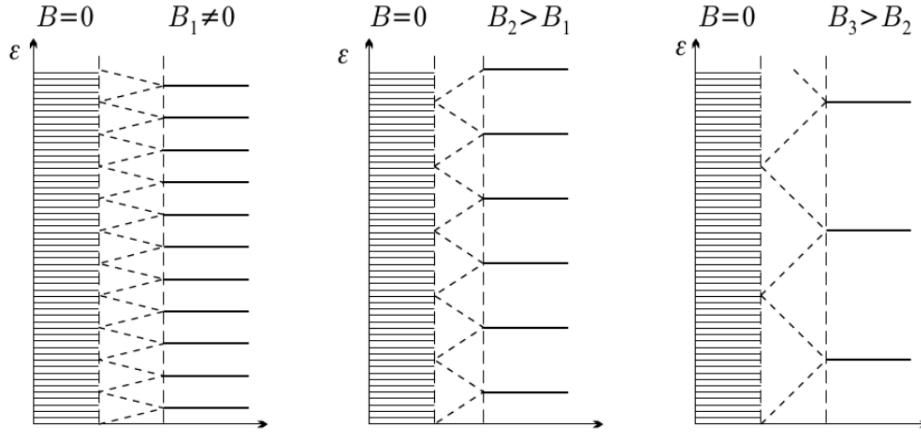
Dakle opet smo za Hallovu konstantu dobili isti izraz kao u (3.23). Iz izraza (3.28) je očito da struja više nije kolinearna s električnim poljem kada imamo i magnetsko polje u sistemu. Prema tome općenito je odnos gustoće struje i električnog polja tenzorski:

$$\vec{j}_i = \sum_j \sigma_{ij}(B) E_j; \quad E_i = \sum_j \rho_{ij}(B) j_j \quad (3.30)$$

gdje su sad σ i ρ tenzori. Tenzori otpornosti i vodljivosti su onda u slučaju prisutstva magnetskog polja:

$$\begin{aligned} \rho &= \begin{bmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} & \rho_{xz} = 0 \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} & \rho_{yz} = 0 \\ \rho_{zx} = 0 & \rho_{zy} = 0 & \rho_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_0 & -R_H B & 0 \\ R_H B & \rho_0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_0 \end{bmatrix} \\ \sigma &= \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} = 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} = 0 \\ \sigma_{zx} = 0 & \sigma_{zy} = 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} & -\frac{\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} & 0 \\ -\frac{\rho_{yx}}{\rho_{yy}^2 + \rho_{yx}^2} & \frac{\rho_{yy}}{\rho_{yy}^2 + \rho_{yx}^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho_{zz}} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\rho_0}{\rho_0^2 + (R_H B)^2} & \frac{R_H B}{\rho_0^2 + (R_H B)^2} & 0 \\ \frac{-R_H B}{\rho_0^2 + (R_H B)^2} & \frac{\rho_0}{\rho_0^2 + (R_H B)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho_0} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.31)$$

U 2D sustavu slobodnog elektronskog plina u magnetskom polju opažamo kvantni Hallov efekt što je kvantna verzija klasičnog Hallovog efekta o kojem je bilo riječi do sad. Schrödingerova jednačnja za 2D slobodni elektronski plin u magnetskom



Slika 3.2: Shematski prikaz promjene spektra iz kontinuiranog u diskretni u 2D slobodnom elektronskom plinu sa primjenom magnetskog polja različite jakosti. Vidimo da se kontinuirani spektar pretvara u Landauove nivoe. Pojedini nivo je to više degeneriran što je veće magnetsko polje.

polju se svodi na jednadžbu za 1D kvantni harmonički oscilator. Kvantizirane nivoe (disperziju) u rješenju nazivamo Landauovim nivoima (Slika 3.2). Razmak među njima je $\hbar\omega_c$, gdje je $\omega_c = eB/m$, e je naboj nosioca, B magnetsko polje i m masa nosioca naboja. Za svaku energiju postoji velik broj stanja, i ona su to degeneriranija što je magnetsko polje više. U otpornosti se javljaju platoi koji odgovaraju izrazu $\rho_{xy} = -\frac{1}{n} \frac{h}{e^2}$, gdje je n cijeli broj, h Planckova konstanta i e naboj elektrona.

3.2.2 Magnetooppor

Magnetooppor je svojstvo materijala da mijenja otpor s primijenjenim magnetskim poljem. Postoje različiti mehanizmi koji dovode do pojave magnetootpora. U nemagnetičnim materijalima pod ovim pojmom se mogu naći Shubnikov - de Haas oscilacije, geometrijski magnetooppor itd, dok se u magnetičnim materijalima pojavljuje anomalni magnetooppor, te u slojevitim magnetskim materijalima pronalazimo gigantski magnetooppor, tunelirajući magnetooppor itd. Gigantski magnetooppor se danas koristi na mnogo mjesta u primjeni u čitačima hard diskova, sensorima magnetskog polja itd. Za ovaj rad najvažniji efekti u magnetoopporu su Shubnikov - de Haas oscilacije o kojima će biti riječi u nastavku i negativan magnetooppor induciran kiralnom anomalijom o kojem je bilo riječi ranije kod poglavlja o Weylovim semimetalima. Relativni magnetooppor definiramo kao:

$$MR = \frac{R(B) - R(0)}{R(0)} \quad (3.32)$$

gdje je $R(B)$ magnetooppor.

3.2.3 Model dvije vrpce

Kada se mjeri Hallov napon u uzorku poluvodiča izraz za Hallovu konstantu postaje puno kompliciraniji nego u gornjim slučajevima kad smo gledali slučaj kada imamo samo jednu vrpcu i jednu vrstu nosioca. Razlog tome je što poluvodič općenito ima obje vrste nosioca naboja (elektrone i šupljine). Oni mogu biti prisutni u materijalu s različitim koncentracijama p za šupljine i n za elektrone i različitim mobilnostima μ_e za elektrone i μ_h za šupljine. Za umjerene vrijednosti magnetskog polja pokazuje se da je izraz za Hallovu konstantu:

$$R_H = \frac{p\mu_h^2 - n\mu_e^2}{e(p\mu_h + n\mu_e)^2} \quad (3.33)$$

Gornja formula vrijedi za polumetale ukoliko Fermijeva energija siječe dvije vrpce.

3.3 Kvantne oscilacije

U eksperimentalnoj fizici čvrstog stanja kvantne oscilacije služe za kako bi se dobile informacije o Fermijevoj površini metala. Za to je potrebno snažno magnetsko polje. Kako smo vidjeli u prethodnom odjeljku u snažnom magnetskom polju se energijske vrpce mijenjaju u Landauove nivoe (Slika 3.2). Za slobodni elektronski plin u magnetskom polju je razmak između Landauovih nivoa obrnuto proporcionalan snazi magnetskog polja. U eksperimentu se magnetsko polje postupno povećava što uzrokuje prolazak Landauovih nivoa preko Fermijeve energije, posljedica čega je oscilacija elektronske gustoće stanja. To posljedično stvara oscilacije u raznim svojstvima kao npr. otporu (Shubnikov - de Haas oscilacije) i magnetizaciji (de Haas - van Alphen oscilacije). Frekvencija oscilacija je usko povezana s ekstremalnim vrijednostima presjeka Fermijeve površine te se zato koristi za istraživanje oblika iste.

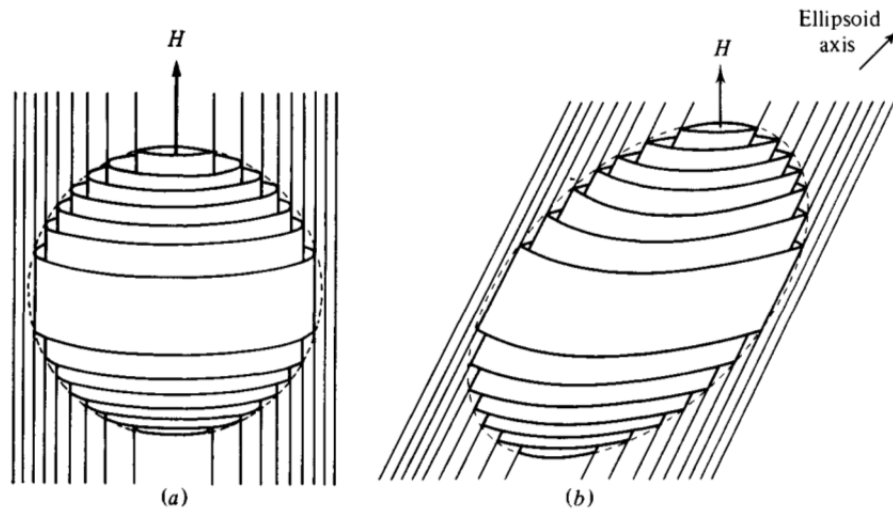
Započnimo s jednostavnim kvalitativnim prikazom kvantnih oscilacija prije nego napravimo detaljniji izvod. Onsager je pokazao [28] da se u magnetskom polju H jedina dopuštena stanja nalaze u prstenovima u k - prostoru koje nazivamo Landauovim prstenovima. Uvjet njihove kvantizacije je:

$$a(\epsilon, \kappa) = \left(r + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi e H}{\hbar c} \quad (3.34)$$

gdje je a površina presjeka Landauovog prstena s površinom okomitom na polje \vec{H} i r cijeli broj. Za slobodni elektronski plin u kojem je površina konstante energije sferična Landauovi prstenovi su cilindri u smjeru polja \vec{H} (Slika 3.3). Gornji izraz zapravo slijedi direktno iz rješenja Schrödingerove jednadžbe za slobodni elektronski plin u magnetskom polju. Rješenje za Landauove nivoe je:

$$\epsilon = \left(r + \frac{1}{2}\right) \frac{e\hbar H}{m_0 c} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_0} \quad (3.35)$$

gdje je m_0 masa slobodnog elektrona, a κ komponenta \vec{k} paralelna s \vec{H}



Slika 3.3: Shematski prikaz Landauovih prstenova za (a) sferičnu površinu konstantne energije i $T = 0$ (b) elipsoidnu površinu konstantne energije u vanjskom magnetskom polju \vec{H} . Fermijeva površina bez polja je prikazana iscrtkanom linijom. Preuzeto iz [28].

Na temperaturi $T = 0$ popunjena su samo stanja striktno unutar Fermijeve površine (Slika 3.3). Sada je lako vidjeti zašto gustoća stanja, unutarnja energija, a posljedično i veličine poput vodljivosti i magnetizacije osciliraju. Pogledajmo najširi od Landauovih prstenova na slici (Slika 3.3), ukoliko povećavamo H iz izraza (3.34) vidimo da se površina prstena povećava sve dok se ne poveća do maksimalne površine nazovimo je A nakon čega prsten nestaje. Ovakva nestajanja popunjenih Landauovih nivoa događaju se periodički kako prstenovi sve manjih brojeva r prolaze kroz Fermijevu plohu. Jasno je da se događaju s periodom $\Delta(1/H) = 2\pi e/\hbar c A$. Frekvencija će onda naravno biti $F = 1/\Delta$:

$$F = \frac{c\hbar}{2\pi e} A \quad (3.36)$$

Na svakom prolasku Landauovog nivoa kroz Fermijevu površinu očekivali bismo neku anomaliju u ukupnoj energiji, a samim time i u drugim pojavama vezanima uz derivacije energije kao npr. magnetizaciji.

Posljedica konačne temperature T je da razmaže granicu između popunjenih i praznih nivoa koja je za $T = 0$ oštra granica (Fermijeva površina). Raspon razmazivanja je reda veličine $k_B T$. On zapravo smanjuje oštrinu prijelaza između Landauovog prstena i Fermijeve površine, time i naglost skokova u energiji, a na taj način i amplitudu oscilacija. Očito će ta redukcija ovisiti o omjeru $k_B T/\beta H$, $\beta = e\hbar/mc$, gdje je m ciklotronska masa.

Konačno vrijeme raspršenja τ u sistemu razmazuje oštre energijske nivoe tj. razmazuje rubove Landauovih prstenova. Posljedica je opet redukcija amplitude, i to eksponencijalno trnućim predfaktorom, a taj faktor nazivamo Dingleovim faktorom.

Efekt elektronskog spina isto nismo razmatrali do sad. Najlakše je to gledati na način da uočimo da će elektroni spina gore i oni spina dolje imati zasebne Landau-

uove prstenove. To dovodi do razlike u fazi između prolaska Landauovih nivoa kroz Fermijevu plohu za spinove gore i dolje, što dovodi do interferencije između njih.

Sljedeći korak je ilustrirati izvod tzv. Lifshitz - Kosevich (LK) formule za oscilatorni dio slobodne energije sistema nezavisnih kvazičestica i zatim primijeniti to na izračun oscilacija u magnetizaciji i gustoći stanja. Gustoća stanja je proporcionalna sa vodljivosti pa će tako biti određene i oscilacije u toj fizikalnoj veličini. Pregled izvoda koji će biti dan prati detaljnji izvod u knjizi [28].

3.3.1 De Haas - van Alphen (dHvA) oscilacije

Najpoznatiji primjer kvantnih oscilacija su de Haas - van Alphen oscilacije magnetizacije materijala. Prvo je potrebno proučiti gibanje elektrona iz vrpce u vanjskom magnetskom polju \vec{H} . U ovom izvodu nije bitno pišemo li \vec{H} ili \vec{B} jer su po pretpostavci jednaki zato jer se zanemaruje magnetizacija materijala i demagnetizirajuće polje unutar materijala. Za početak je potrebno u semiklasičnom pristupu odrediti poveznicu između klasičnih orbita elektrona u realnom prostoru i ploha konstantne energije u k -prostoru. Za rezultat energije se dobije tzv. Onsagerovo rješenje koje smo već spomenuli (3.34). Bitno je napomenuti da su nivoi degenerirani, što će jasnije biti pokazano poslije. Kvantizacija klasične orbite prema Bohr - Sommerfeldovom pravilu kvantizacije daje rezultat za površinu Landauovih prstenova u obliku:

$$a(\epsilon, \kappa) = (r + \gamma) \frac{2\pi eH}{c\hbar} \quad (3.37)$$

gdje se gornji izraz identičan kao (3.34) kada je $\gamma = 1/2$, a to je rezultat koji vrijedi egzaktno za paraboličnu vrpcu. U općenitom slučaju γ se više razlikuje od $1/2$ za više energije i polja. Pokazuje se da to i nije tako bitno za kvantne oscilacije. Kako je i prikazano na slici (3.3) Onsagerova relacija jako ograničava dostupne energijske nivoa. Landauovi prstenovi za sfernu i elipsoidnu Fermijevu površinu su nacrtani cilindričnog oblika i okomiti na polje, što i je slučaj za npr. slobodan elektronski plin, no općenito ne postoji razlog da bi to bilo tako. Za fiksni κ Landauove prstenove možemo gledati kao poznatije Landauove nivoa.

Energijski nivoi u magnetskom polju su degenerirani. Bez magnetskog polja broj stanja po jediničnom volumenu k - prostora je $N = V/4\pi^3$ (uzeto je u obzir da postoje dva spinska stanja za svaki k). Kada postoji magnetsko polje, razlika u površini između dva susjedna Landauova nivoa je:

$$\Delta a = \frac{2\pi eH}{c\hbar} \quad (3.38)$$

Prema tome broj stanja u jednom Landauovom nivou između κ i $\kappa + \Delta\kappa$ je:

$$D = \Delta a N d\kappa = \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} d\kappa \quad (3.39)$$

Iako je ovo samo intuitivan izvod degeneracije nivoa pokazuje se detaljnijim računom da je točan.

Sljedeći korak u izvodu oscilacija je odrediti velekanonski termodinamički potencijal Ω , zato jer je u realnom sustavu konstanta Fermijeva energija (tj. kemijski potencijal ζ).

$$\Omega = F - N\zeta; \quad F = E - TS \quad (3.40)$$

gdje je E unutarnja energija, T temperatura, S entropija i N broj čestica. Magnetizacija sustava je onda dana derivacijom velekanonskog potencijala

$$\vec{M} = -(\nabla_{\vec{H}}\Omega)_{\zeta} \quad (3.41)$$

Druge važne veličine kao npr. entropija, broj elektrona se isto mogu dobiti prikladnim deriviranjem velekanonskog potencijala.

Za sistem u kojem vrijedi Fermi - Diracova statistika i koji ima stanja energije ϵ velekanonski potencijal je dan izrazom:

$$\Omega = -k_B T \sum \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/k_B T}) \quad (3.42)$$

gdje suma ide po svim dostupnim stanjima i u obzir uzima i degeneracije pojedinih stanja. Za sistem energijskih stanja danih Onsagerovom relacijom (3.35) i degeneracije (3.39) velekanonski potencijal je:

$$\Omega = -k_B T \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \sum_r \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon_r)/k_B T}) \quad (3.43)$$

gdje ϵ_r promatramo kao implicitno rješenje Onsagerove relacije (3.35) za kvantni broj r . Jedino što je sad preostalo za napraviti je riješiti integral i sumu u gornjem izrazu, te se onda iz njega mogu računati sve druge relevantne termodinamičke veličine kao npr. magnetizacija. Kako bi se olakšao račun i kako bi fizikalno značenje postalo jasnije najčešće se račun izvodi u koracima, prvo za $T = 0$, a zatim se uvode efekti konačne temperature, spina elektrona, raspršenja i homogenosti uzorka.

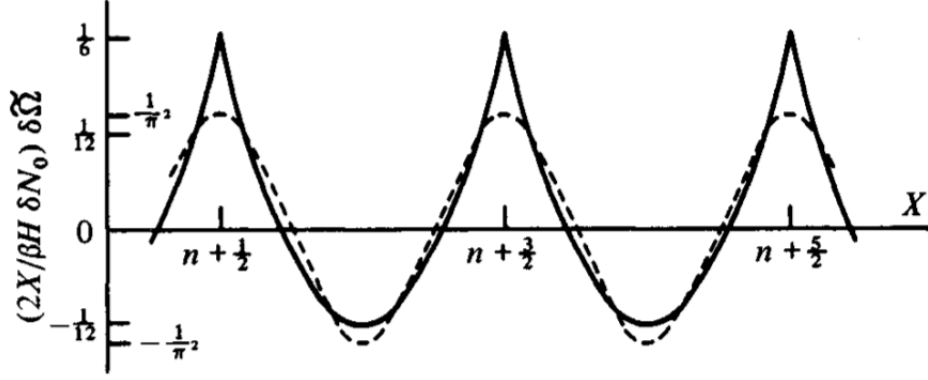
Na temperaturi $T = 0$, $\Omega = E - N\zeta$. I doprinos $\delta\Omega$ postaje:

$$\delta\Omega = \delta\kappa \left(\frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \right) \sum_{r=0}^n (\epsilon_r - \zeta) = D \sum_{r=0}^n (\epsilon_r - \zeta) \quad (3.44)$$

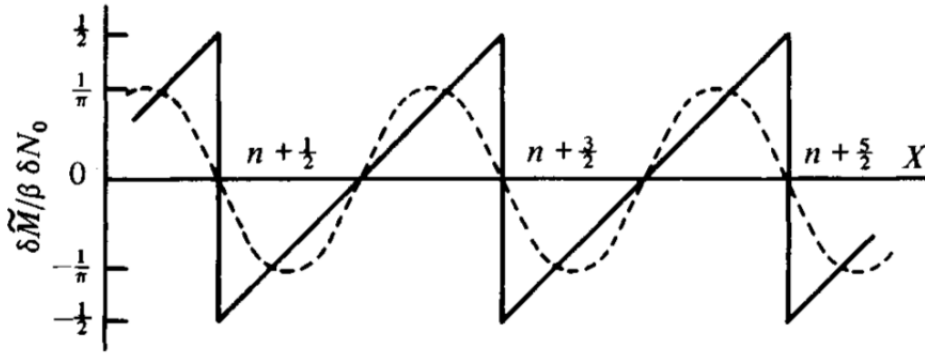
gdje je D degeneracija nivoa (3.39), sumira se po r koji odgovaraju uvjetu $\epsilon_r < \zeta$. U izračunu gornjeg izraza se dalje koristi Euler - Maclaurinova formula. Nakon računa se dobiva rješenje za oscilatorni dio velekanonskog potencijala (Slika 3.4) raspisan po Fourierovim komponentama:

$$\delta\tilde{\Omega} = \delta\kappa \frac{e\beta H^2 V}{4\pi^2 c\hbar} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} \cos(2\pi p(X - \gamma)) \quad (3.45)$$

gdje oznaka \sim predstavlja samo oscilatorni doprinos, X je kontinuirana varijabla uvedena umjesto diskretne r implicitno kao $\epsilon(X, \kappa) = \zeta$, a p je broj harmonika. Za



Slika 3.4: Periodična ovisnost oscilatornog dijela diferencijalnog velekanonskog potencijala s $X \propto 1/H$. Puna linija predstavlja puni izraz (3.45), dok je s crtkanom linijom prikazan osnovni harmonik u Fourierovom razvoju. Preuzeto iz [28].



Slika 3.5: Periodična ovisnost oscilatornog dijela diferencijalne magnetizacije s $X \propto 1/H$. Puna linija predstavlja puni izraz (3.47), dok je s crtkanom linijom prikazan osnovni harmonik u Fourierovom razvoju. Preuzeto iz [28].

izračun magnetizacije iz gornjeg izraza koristimo (3.41):

$$\delta \tilde{M} = - \left(\frac{\partial \delta \tilde{\Omega}}{\partial H} \right)_{\zeta} \quad (3.46)$$

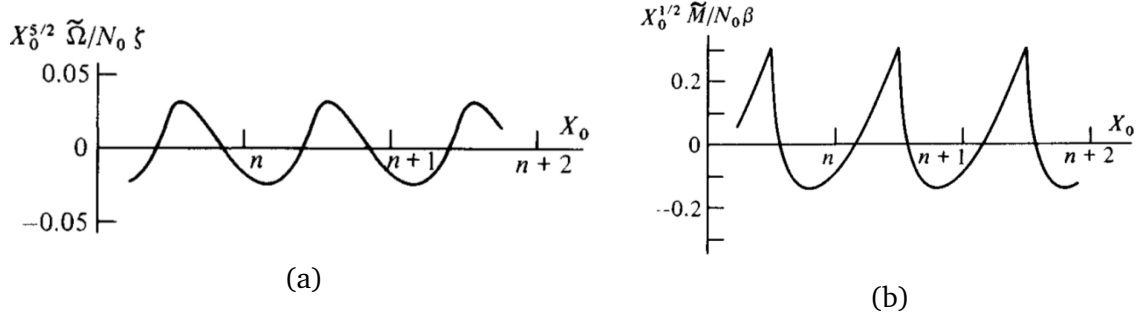
pa za diferencijalnu magnetizaciju dobivamo:

$$\delta \tilde{M} = -\beta \delta N_0 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi p(X - \gamma))}{\pi p} \quad (3.47)$$

gdje je δN_0 broj elektrona u 2D plohi k prostora za $H = 0$. Gornji izraz s vodećom komponentom Fourierovog razvoja je prikazan na slici (Slika 3.5)

Nakon izračuna za 2D plohu u k -prostoru, možemo izračunati izraz za 3D velekanonski potencijal integriranjem izraza (3.45) po κ . Nakon računa se dobiva izraz:

$$\tilde{\Omega} = \left(\frac{e}{2\pi c \hbar} \right)^{3/2} \frac{\beta H^{5/2}}{\pi^2 (A'')^{1/2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^{5/2}} \cos \left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \gamma \right) \pm \frac{\pi}{4} \right] \quad (3.48)$$



Slika 3.6: Oscilatorno ponašanje a) velekanskog potencijala (3.48) i b) magnetizacije (3.49) u ovisnosti o $X_0 = F/H$.

gdje je $F = c\hbar A/2\pi e = X_0 H$ frekvencija oscilacija kako je i definirano u izrazu (3.36), a A je ekstremalna vrijednost Fermijeve površine, tj. $A'' = |\partial^2 \mathcal{A} / \partial \kappa^2|_{\kappa=0}$, gdje je $\mathcal{A} = a(\zeta, \kappa)$ površina presjeka Fermijeve plohe i Landauovog prstena za neki κ . Iz gornjeg izraza se prikladnim derivacijama izračuna oscilirajući dio magnetizacije:

$$\tilde{M}_{\parallel} = - \left(\frac{e}{c\hbar} \right)^{3/2} \frac{\beta F H^{1/2} V}{2^{1/2} \pi^{5/2} (A'')^{1/2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^{5/2}} \sin \left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \gamma \right) \pm \frac{\pi}{4} \right]; \quad \tilde{M}_{\perp} = - \frac{1}{F} \frac{\partial F}{\partial \theta} \tilde{M}_{\parallel} \quad (3.49)$$

Oscilacije u (3.48) i (3.49) su rezultati dobiveni u idealiziranoj situaciji, no sad treba uvesti još neke važne čimbenike kao npr. efekte konačne temperature T , konačnog vremena raspršenja elektrona τ , spina elektrona te utjecaja homogenosti uzorka i polja. Pokazuje se da se svi ovi efekti mogu uvesti kroz tzv. fazno razmazivanje. To znači da se gore navedeni efekti mogu prikazati kao superpozicija oscilacija u kojima frekvencija tj. faza se malo razlikuje od idealne situacije. Pokazuje se da fazno razmazivanje periodično smanjuje amplitudu oscilacija. Tako npr. efekt konačne temperature doprinosi predfaktorom:

$$R_T = \frac{2\pi^2 p k_B T / \beta H}{\sinh(2\pi^2 p k_B T / \beta H)} \quad (3.50)$$

koji je približno jednak 1 ukoliko je temperatura niska tj. $2\pi^2 p k_B T / \beta H \ll 1$, a može se pojednostavniti ukoliko je $2\pi^2 p k_B T / \beta H \gtrsim 1$ na

$$R_T = \frac{4\pi^2 p k_B T}{\beta H} \exp(-2\pi^2 p k_B T / \beta H) \quad (3.51)$$

što je u eksperimentalnim uvjetima temperature i magnetskog polja najčešće dobra aproksimacija.

U slučaju konačnog vremena raspršenja elektrona τ pokazuje se da uzrokuje tzv. Dingleov predfaktor

$$R_D = \exp(-2\pi^2 p k_B x / \beta H) \quad (3.52)$$

gdje je x Dingleova temperatura. Ona je tipično reda veličine 10-100 K po atomskom % nečistoća. Amplituda oscilacija najčešće postaje preniska za mjerenje ukoliko je

Dingleova temperatura značajno iznad 10 K. Iz čega je očito da je potrebno imati vrlo čist kristal s malo nečistoća i defekata.

Često puta važnu ulogu igraju nehomogenost uzorka i nehomogenost polja. Pokazuje se da nehomogenost uzorka pridonosi faktorom istog oblika kao Dingleov faktor (3.52) samo s $x = \beta(\Delta F)_0/\pi k$, gdje je $(\Delta F)_0$ širina razmazanosti frekvencije od nehomogenosti. Pretpostavljeno je da je razmazanost Lorentzijanskog oblika, što nije nužno potpuno opravdano, no posljedično se pokazuje da u principu eksponencijalno trnuće amplitude odgovara eksperimentalnom rezultatu. Što se tiče nehomogenosti polja, pokazuje se da je reducirajući prefaktor:

$$R_{\Delta H} = \frac{\sin(\pi p F \Delta H / H^2)}{\pi p F \Delta H / H^2} \quad (3.53)$$

gdje je ΔH promjena polja duž uzorka.

Zadnji od bitnih efekata je onaj elektronskog spina. Degeneracija nivoa za \pm orijentacije spinova je $\epsilon_{\pm} = \epsilon \pm \Delta\epsilon$ gdje je $\Delta\epsilon = g\beta_0 H/2$, a za žiromagnetski faktor je najčešće dovoljno uzeti $g = 2$. Redukcijski faktor za spinsko cijepanje je:

$$R_s = \cos\left(\frac{1}{2} p p g \frac{m}{m_0}\right) \quad (3.54)$$

Na kraju možemo sve skupa objediniti u Lifshitz - Kosevich formulu za velekanonski potencijal

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega} &= \left(\frac{e}{2\pi c\hbar}\right)^{3/2} \frac{2k_B T H^{3/2} V}{(A'')^{1/2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\exp(-2\pi^2 p k_B x / \beta H) \cos(p\pi g m / 2m_0)}{p^{3/2} \sinh(2\pi^2 p k_B T / \beta H)} \\ &\times \cos\left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \gamma\right) \pm \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned} \quad (3.55)$$

i za magnetizaciju

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{\parallel} &= -\left(\frac{e}{c\hbar}\right)^{3/2} \frac{2F k_B T V}{(2\pi H A'')^{1/2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\exp(-2\pi^2 p k_B x / \beta H) \cos(p\pi g m / 2m_0)}{p^{1/2} \sinh(2\pi^2 p k_B T / \beta H)} \\ &\times \sin\left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \gamma\right) \pm \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned} \quad (3.56)$$

gdje je \tilde{M}_{\perp} je kao i prije dano s (3.49). Naravno Fermijeva površina u nekom materijalu ne mora biti jednostavna, te može imati više ekstremalnih presjeka kojima će onda naravno odgovarati različiti F , β ili m , g i x . Prema tome ukupni oscilatorni dio će općenito imati više doprinosa. Formula je izračunata pretpostavljajući konstantnu Fermijevu energiju ζ , no pokazuje se da se ona jako slabo mijenja čak ukoliko je Fermijeva energija slabo oscilatorna, pa su gornje formule u praksi dobre.

3.3.2 Shubnikov - de Haas oscilacije

Oscilacije u otpornosti su usko vezane uz oscilacije gustoće stanja. Gustoća stanja se računa na sličan način kako smo pokazali za velekanonski potencijal u gornjem

poglavlju ili možemo iskoristiti formulu:

$$\tilde{\mathcal{D}}(\zeta) = \frac{1}{\beta^2 X^2} \frac{d\tilde{M}}{dH} \quad (3.57)$$

Efekti raspršenja i spinskog cijepanja imaju isti efekt kao i prije, no ne smijemo u gustoću stanja uračunati i efekt od konačne temperature, zato jer se gustoća stanja odnosi na vjerojatnost popunjenosti stanja, a ne i na stanje samo.

$$\tilde{\mathcal{D}}(\zeta) = \left(\frac{2eH}{c\hbar} \right)^{1/2} \frac{mV}{\pi^{3/2} \hbar^2 (A'')^{1/2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{R_D R_s}{p^{1/2}} \cos \left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \gamma \right) \pm \frac{\pi}{4} \right] \quad (3.58)$$

Jasno je dakle da će onda i gustoća čestica oscilirati s magnetskim poljem, te da će na kraju izraz za oscilatorni dio vodljivost imati oblik

$$\tilde{\sigma}_{xx} \propto \frac{1}{\sqrt{H}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{R_D R_s R_T}{p^{1/2}} \cos \left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \gamma \right) \pm \frac{\pi}{4} \right] \quad (3.59)$$

Ukupna vodljivost je zapravo $\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^0 + \tilde{\sigma}_{xx}$. Naravno i za vodljivost vrijedi $\rho_{xx} = \rho_{xx}^0 + \tilde{\rho}_{xx}$. Veza među σ_{xx} i ρ_{xx} dana je u matricama (3.31). Iskoristimo sljedeći izraz:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^0 + \tilde{\sigma}_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \quad (3.60)$$

Ukoliko je sad ρ_{xy} značajno manji od ρ_{xx} možemo napisati da je

$$\sigma_{xx} \approx \frac{1}{\rho_{xx}} = \frac{1}{\rho_{xx}^0 + \tilde{\rho}_{xx}} = \frac{1}{\rho_{xx}^0} \left(\frac{1}{1 + \tilde{\rho}_{xx}/\rho_{xx}^0} \right) \approx \frac{1}{\rho_{xx}} - \frac{\tilde{\rho}_{xx}}{\rho_{xx}^2} \quad (3.61)$$

Gdje je zadnji dio gornjeg izraza dobiven razvojem u red do vodećeg člana. Usporedbom zadnjeg dijela izraza (3.61) i srednjeg dijela izraza (3.60) možemo iščitati:

$$\tilde{\rho}_{xx} \propto -\tilde{\sigma}_{xx} \quad (3.62)$$

Prema tome u vodećem redu oscilatorni dio otpornosti je:

$$\tilde{\rho}_{xx} \propto -\frac{1}{\sqrt{H}} \frac{2\pi^2 k_B T / \beta H}{\sinh(2\pi^2 k_B T / \beta H)} \exp[-2\pi^2 k_B x / \beta H] \times \cos \left[2\pi \left(\frac{F}{B} - \gamma \right) \right] \quad (3.63)$$

Ukoliko se mjeri u konfiguraciji s paralelnim magnetskim poljem i strujom vrijedi:

$$\sigma_{zz} = \sigma_{zz}^0 + \tilde{\sigma}_{zz} = \frac{1}{\rho_{zz}} = \frac{1}{\rho_{zz}^0 + \tilde{\rho}_{zz}} \quad (3.64)$$

Razvojem u red na isti način kao u prethodnom izvodu dobivamo:

$$\tilde{\rho}_{zz} \approx -\tilde{\sigma}_{zz} \quad (3.65)$$

Izrazi (3.59) i (3.63) vrijede za materijale s trivijalnim topologijama. Weylovi semimetali imaju netrivialnu topologiju, što se vidi i u oscilacijama tako što se kod njih u izrazu (3.63) pojavljuje dodatni član β_C unutar $\cos[2\pi(F/B + \gamma + \phi_\beta)]$ koji

odgovara Berryjevoj fazi. Konkretno za Weylov semimetal je $\phi_\beta = 1/2$ tj. Berryjeva faza je $\beta_C = 2\pi\phi_\beta = \pi$. Isto tako sad Onsagerovo pravilo kvantizacije glasi:

$$\frac{2\pi F}{B} = 2\pi(r + \gamma + \phi_\beta + \delta) \quad (3.66)$$

gdje vidimo da je indeks Landauovog nivoa r linearno ovisan o $1/B$. Dodatna faza $2\pi\delta$ dolazi od zakrivljenosti Fermijeve plohe u trećoj dimenziji [24]. Za 2D Fermijevu plohu je $\delta = 0$, a može poprimiti vrijednost u rasponu $\pm 1/8$ za općenitu 3D Fermijevu plohu.



Slika 4.1: Glovebox poput onog korištenog u sintezi. Vidimo glavnu kutiju koja je pod atmosferom argona i gumene rukavice kojima se radi unutar gloveboxa. S desne strane je komora za unos koju se više puta ispumpa, napuni argonom i zatim ponovno ispumpa nakon što su se iz zraka unutra unijeli materijali za sintezu. Koncentracija vode i kisika je niska unutar gloveboxa tipično < 0.1 ppm.

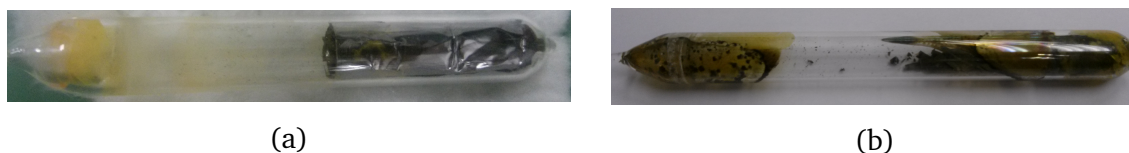
4 Sinteza i karakterizacija TaP

Kako smo pokazali u gornjem poglavlju za opažanje kvantnih oscilacija iznimno je važno imati homogene uzorke s malo nečistoća. Dobivanje takvih uzoraka zahtijeva jako kontrolirane uvjete sinteze sa što stabilnijim parametrima i što kemijski čistijim materijalima. U ovom poglavlju bit će predstavljen postupak sinteze korišten za dobivanje monokristala TaP. Raspravljani će biti i rezultati dobivene sinteze, te tehnike utvrđivanja kristalne strukture.

4.1 Postupak sinteze

U sintezi su korišteni folija tantala (Ta) kemijske čistoće 99.9%, gdje je većina nečistoća zapravo niobij (Nb) i prag crvenog fosfora (P) kemijske čistoće 99.99%. Prije početka same sinteze potrebno je bilo pripremiti kvarcnu ampulu u kojoj će se sinteza odvijati. Prvo se jedan kraj kvarcne cijevi $\phi = 1.6$ cm i debljine stijenke 1 mm zatali kako bi se dobila poluotvorena cijev. Tu cijev se zatim ispere u razrijeđenoj 1% fosfornoj kiselini koja izgrize unutarnji površinski sloj kvarcne cijevi uklanjajući nečistoće s njega, nakon čega se cijev ispere acetonom. Za miješanje materijala za sintezu se koristio glovebox, zabrtvljena s jedne strane prozirna kutija unutar koje je atmosfera argona na tlaku nešto malo višem od atmosferskog (Slika 4.1). Za rad unutar gloveboxa imamo gumene rukavice koje se navlače s vanjske strane i s kojima se radi unutar gloveboxa. To je važno kako bi se osiguralo niske koncentracije vode i kisika u ampuli da se izbjegne nastajanje oksida materijala.

Tantalna folija se smota u čahuru, unutar koje je stavljen fosfor u stehiometri-

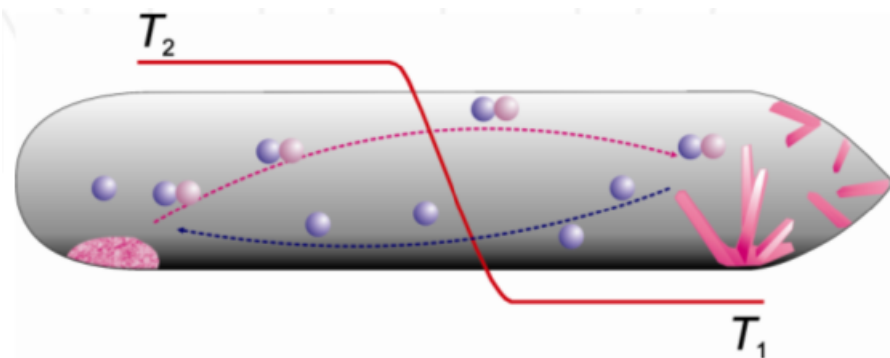


Slika 4.2: Ampula, sa čahurom od tantalne folije unutar koje se nalazi prah fosfora.
a) prije sinteze b) poslije sinteze

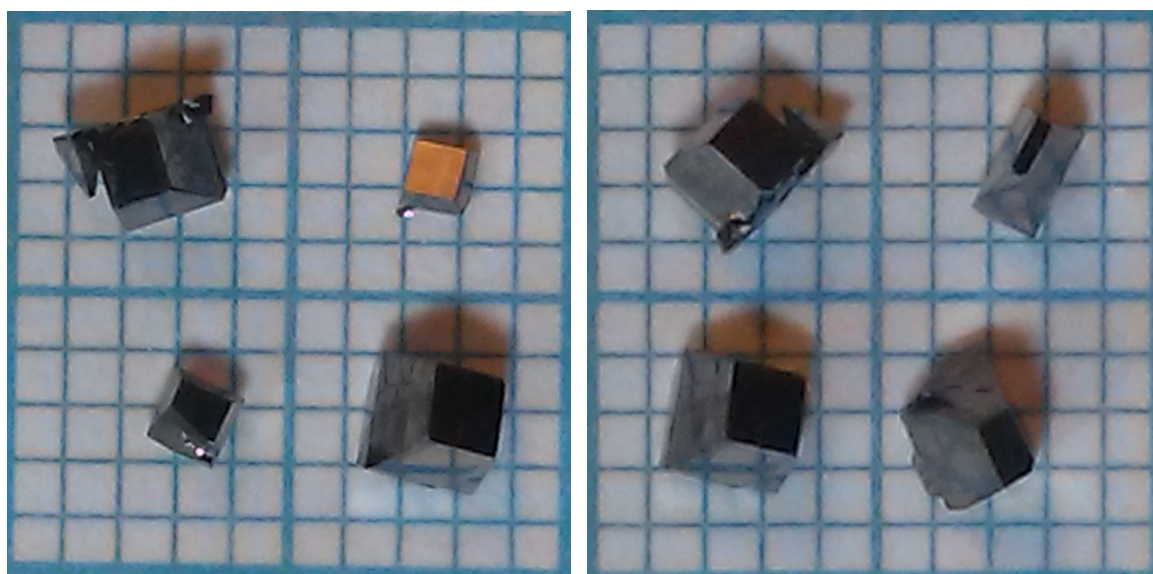
skom omjeru za dobivanje TaP i jod u količini 10 mg po mL ampule (Slika 4.2a). Zatim se argon u ampuli zamijeni s helijem nakon čega se ampula ispumpa do 10^{-5} bara uz hlađenje ampule tekućim dušikom kako bi se smanjila sublimacija joda. To nije moguće u potpunosti izbjeći, te kako se vidi na slici (Slika 4.2a) žuto obojeni gornji dio ampule je jod koji je malo sublimirao tokom zataljivanja ampule. No to nije bitno jer jod služi kao transportni agent u reakciji tako da nije potrebno da bude u stehiometrijskom omjeru, već samo da ga bude dovoljno što se uračuna ranije tako da se stavi malo više joda.

Često puta je neku krutinu teško rastaliti ili sublimirati kako bi se postigla ponovna kristalizacija ili se načinila legura u kontroliranim uvjetima. To je upravo slučaj ovdje, gdje tantal ima vrlo visoko talište. Jedna od tehnika koja se koristi u ovakvom slučaju naziva se CVT (eng. *Chemical Vapour Transport*). U njoj se koristi transportni agent tipično plin koji reagira s površinom krutine gdje nastaje kemijski spoj tih elemenata koji je također plin. Takav plin zatim konvekcijom prelazi na drugi dio ampule gdje se događa povratna reakcija te se deponira materijal i nastaje kristal (Slika 4.3). Iako ovako najčešće teku CVT reakcije, u konkretnom slučaju CVT sinteze TaP s transportnima agentom jodom I_2 kristali se deponiraju na toplijem dijelu ampule, dok se reakcija odvija na hladnijem. Topliji kraj ampule nalazio se na $1030\text{ }^{\circ}\text{C}$, a hladniji na $50\text{-}80\text{ }^{\circ}\text{C}$ nižoj temperaturi. Kako bi se postigla bolja konvekcija unutar ampule peč je nagnuta za 30° tako da je hladni kraj na nižem položaju. Za uspješnu sintezu potrebno je bilo držati temperaturu iznimno stabilnom što se postiglo kontrolerima temperature, koji su temperaturu određivali putem K - tip termočlanka. Isto tako prije početka sinteze se K - tip termočlankom izmjeri temperatura duž peći kako bi se znao profil temperature, te se tako odredio položaj na koji se postavlja ampula. Zagrijavanje ampule je trajalo 4 dana do temperature sinteze, a zatim je bila na stabilnom gradijentu 14 dana, te se potom hladila prirodnim putem natrag do sobne temperature.

Nakon sinteze kristali su uzeti iz ampule, oprani u acetonu i ostavljeni da se osuše. Kao rezultat sinteze dobili smo monokristale TaP raznih dimenzija (Slika 4.4b) među kojima je većina kristala više nego dovoljno velika za transportna mjerenja. Naravno očekuje se da je u budućnosti moguće optimizirati parametre sinteze (trajanje, temperaturu, količinu joda, gradijent temperature) kako bi se uspjeli izrasti još veći monokristali, no za sad su rezultati i više nego dovoljni za potrebe ovog rada.



Slika 4.3: Krutina (rozo) reagira sa transportnim agentom (ljubičasto), njihov plinoviti produkt difundira u hladniji dio ampule gdje se događa depozicija prvotne krutine u kristal.



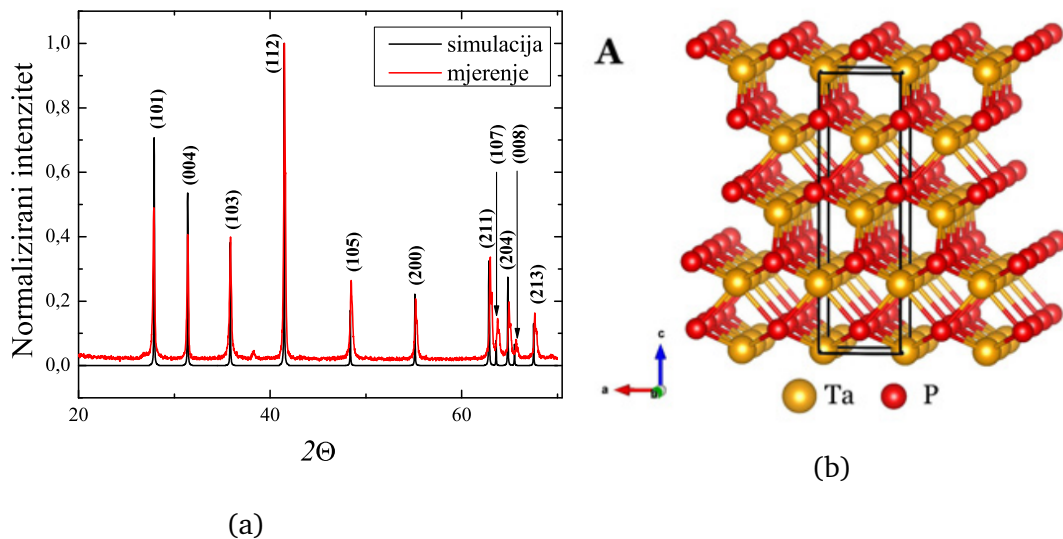
(a)

(b)

Slika 4.4: a) i b) Monokristali TaP dobiveni CVT sintezom. Mali kvadrati na slici su dimenzija $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$.

4.2 Strukturna karakterizacija

Da bi se utvrdila struktura kristala izmjerena je difrakcija x - zraka na prahu dobivenom mehaničkim drobljenjem kristala u što sitniji prah. Rezultat mjerenja i usporedba s teorijskim računom za prah TaP (Slika 4.5a). Struktura TaP prikazana je na slici (Slika 4.5b).



Slika 4.5: a) Usporedba mjenenog intenziteta raspršenja rendgenskih zraka na prahu TaP (crno) i rezultata simulacije (crveno). Vidimo izvrsno poklapanje vrhova što pokazuje da je kristalna struktura kao u TaP, te razumno poklapanje intenziteta što ukazuje na to da su i atomi Ta i P na pravim lokacijama u strukturi. b) Struktura TaP, s kristalografskim osima prikazanim u donjem lijevom kutu. Preuzeto iz [13]

5 Mjerni rezultati i diskusija

Osim velike čistoće i homogenosti uzoraka potrebno je imati i postav koji ima vrlo homogeno magnetsko polje. Također je važno imati osjetljive mjerne instrumente koji mogu mjeriti s vrlo velikom preciznošću jer će oscilacije uvijek biti superponirane na druge doprinose čiji će ih šum zasjenjivati. Kvaliteta mjerenja u visokim magnetskim poljima često ovisi i o obliku uzorka. Zato je potrebno uzorak oblikovati u duguljasti pločasti oblik prikladan za transportna mjerenja. U ovom poglavlju bit će pokazan način pripreme uzoraka za magnetotransportna mjerenja. Isto tako pokazan će biti i eksperimentalni postav, te će na kraju biti dani rezultati eksperimenata uz njihovu diskusiju.

5.1 Priprema uzoraka za transportna mjerenja

Kako se uzorak nije mogao karakterizirati Laue uređajem da bi se odredile kristalne osi pazilo se na simetriju izrastanja kristala koji rastu u visinu u smjeru c osi (Slika 4.5b). Kristali su vrlo tvrdi i gotovo ih je nemoguće kalati pa se ne mogu na takav način oblikovati. Kristal je zato pažljivim brušenjem oblikovan u pločasti oblik dimenzija: $1.2 \times 0.4 \times 0.3 \text{ mm}^3$ pogodan za magnetotransportna mjerenja. Uređaj za brušenje je čelični disk unutar kojeg se pričvrsti pomični cilindar čijim se pomicanjem podešava debljina na koju se brusi kristal (Slika 5.1). Nakon pričvršćivanja kristala ljepljivom na pomični cilindar se disk kružnim pokretima pomiče po brusnom papiru



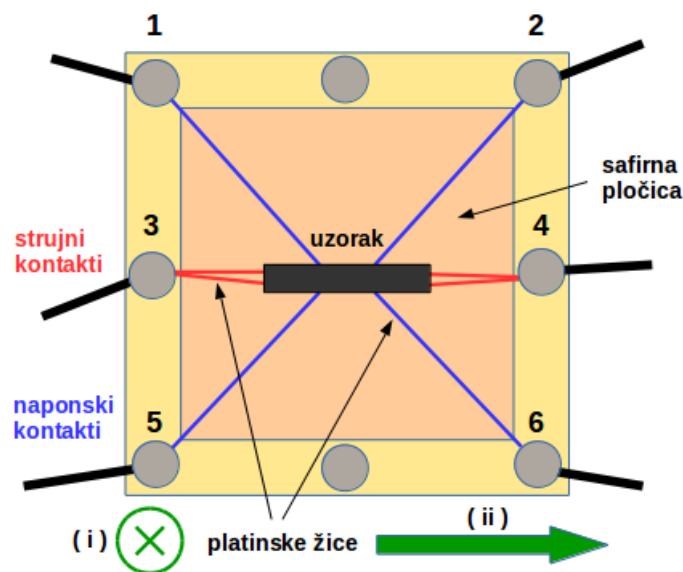
(a)

(b)

Slika 5.1: Postav za brušenje uzoraka a) s donje strane, vidi se pomični cilindar na kojem je zalijepljen uzorak, b) s gornje strane, nakon što se podesi visina, disk se kružnim pokretima pomiče po brusnom papiru koji se nalazi na podlozi ispod. Zbog zamrljanosti gornje ploče se nešto slabije vidi μm skala na slici desno.

čime se kristal lagano brusi do željene debljine. Prilikom pričvršćivanja se naravno pazi na kristalografske osi. Disk na sebi ima skalu po $10 \mu\text{m}$ s čim se otprilike pazi na to koliko se uzorak stanjuje.

Nakon oblikovanja uzorka u duguljastu tanku pločicu na njega se pričvršćuju kontakti. To se radi tako što se na vrh platinske žice promjera $25 \mu\text{m}$ stavi kapljica srebrne paste s kojom se žica pričvrsti na uzorak. Ključno je u ovakvom stavljanju kontakata kontrolirati veličinu kapljice, prevelika kapljica se može razliti i stvoriti kontakt velike dimenzije. Velika dimenzija naponskih kontakata nije dobra jer je kontakt nedefiniran, pa se prilikom preračunavanja u otpornost unosi greška u rezultatu. Za strujne kontakte dimenzija kontakata nije toliko bitna. Kontakt srebrnom pastom je osjetljiv na mehaničke vibracije, te ukoliko se puno miče može otpasti ili mu se može jako povećati kontaktni otpor. Zato nakon postavljanja kontakata srebrnom pastom se kontakti premažu sa slabo vodljivim srebrnim epoksijem koji učvrsti kontakt. Zatim se kroz kontakte pusti struja koja izazove stvaranje perkolativnih kanala kroz srebrnu pastu znatno smanjujući kontaktni otpor (eng. *pinhole effect*). Potom se uzorak montira na nosač, zalijepi se vrlo razrijeđenim GE-Varnish ljepilom kako bi ga se fiksiralo (Slika 5.2). Fiksiranje uzroka je potrebno kako se u magnetskom polju ne bi stvorila Lorentzova sila na njega koja bi ga zakrenula i tako oštetila kontakte.



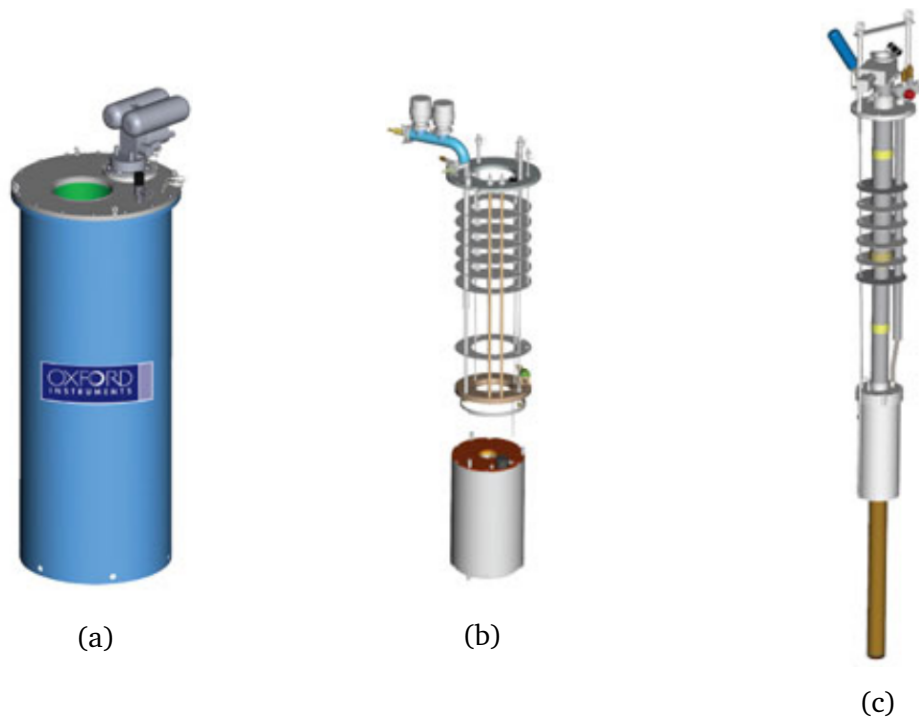
Slika 5.2: Uzorak sa platinskim kontaktima zalemljen za nosač i zalijepljen za safirnu pločicu. Zelene strelice prikazuju smjer magnetskog polja u dva slučaja.

5.2 Opis mjernog postava i metoda mjerenja

Mjerni postav sastoji se od komercijalnog Oxford Instruments kriostata temperaturnog raspona od 1.5 - 300 K s Variable Temperature Insert (VTI) ventilom za hlađenje uzorka (Slika 5.3). Unutar kriostata nalazi se supravodljivi magnet jačine polja do 18 T. Supravodljivi magnet je hlađen helijem, to je zato što magnet ohlađen na nižu temperaturu može podnijeti veću struju prije prelaska u normalno stanje. Shema cijelog kriostata s nosačem uzorka i supravodljivim magnetom je prikazana na slici (Slika 5.4). Helij se nalazi u termalno izoliranoj posudi (dewar) koja je vakuumski izolirana od vanjske posude koja je hlađena tekućim dušikom i koja je vakuumski izolirana od vanjske atmosfere. Takvom izolacijom se smanjuje isparavanje helija.

Nosač uzorka unosi se u kriostat s gornje strane i u principu je dugačka šipka kroz koju idu žice koje povezuju kontakte na držaču uzorka koji se nalazi na dnu nosača s izlaznim kontaktima na vrhu nosača. Nosač se nalazi u evakuiranoj posudi u sredini kriostata. Sam držač uzorka skupa s uzorkom se hlade preko VTI ventila (na slici vaporizer) kroz koji kontrolirano prolaze pare helija hladeći nosač i uzorak. Otvaranjem i zatvaranjem ventila se regulira brzina hlađenja. Za stabilizaciju temperature imamo dva grijača, jedan koji grije područje oko držača uzorka i jedan grijač na samom držaču uzorka. Temperatura se kontrolira preko LakeShore temperaturnog kontrolera, a mjeri se na uzorku CERNOX senzorom.

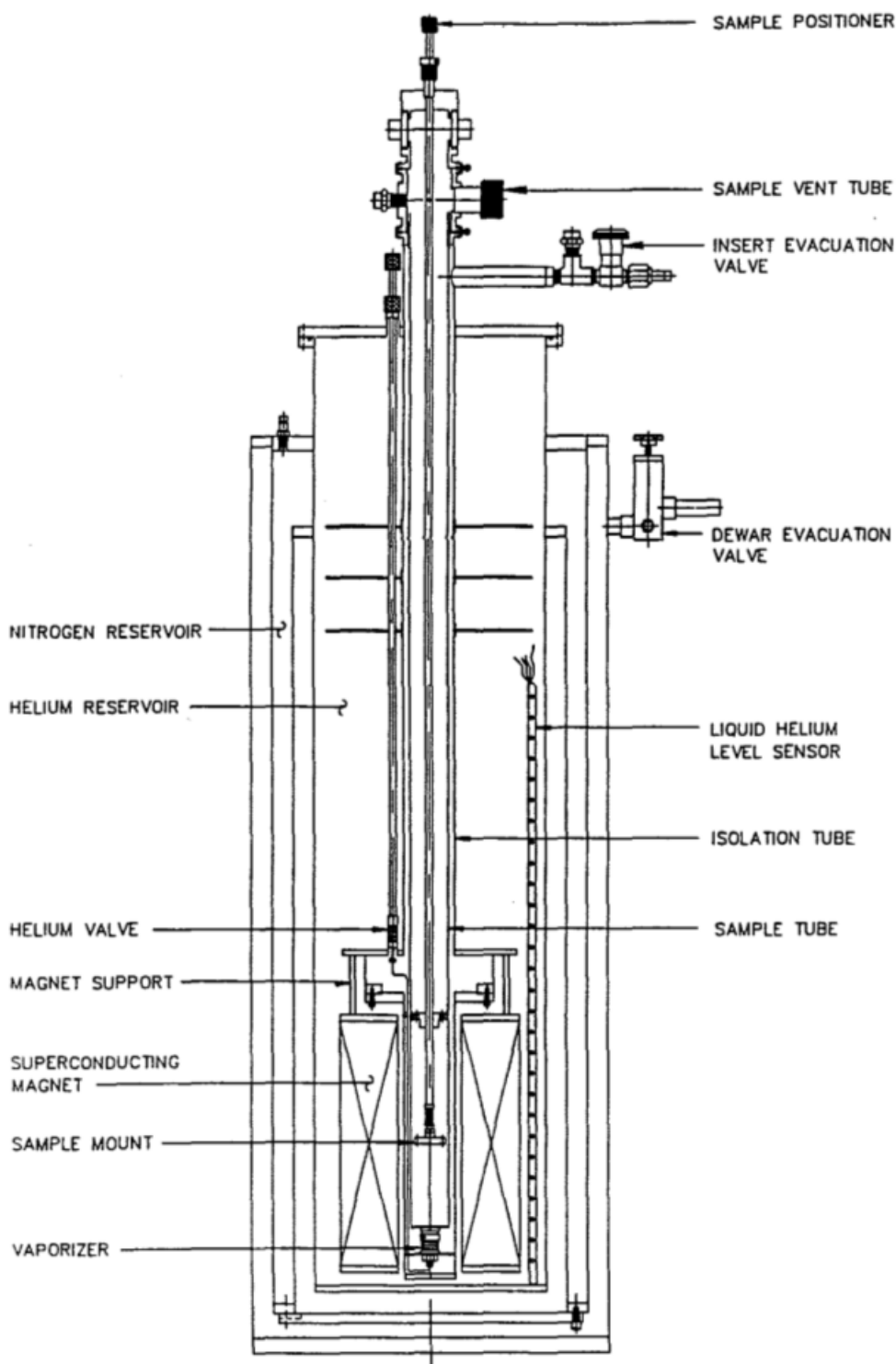
Uzorak je montiran na safirni nosač, zalijepljen za držač na nosaču uzorka GE Varnish ljepilom, a kontakti s uzorka su zalemljeni na kontakte na držaču. Izlazni kontakti na nosaču su koaksijalnim kablovima povezani s mjernim uređajima. Za puštanje struje kroz uzorak korišten je Yokogawa 7651 izvor istosmjerne struje, dok su za mjerenje napona korištena dva identična Agilent 34420a dvokanalna nanovol-



Slika 5.3: Dijelovi Oxford Instruments komercijalnog kriostatata korištenog u eksperimentu. a) kriostat b) supravodljivi magnet c) VTI umetak

tmetra.

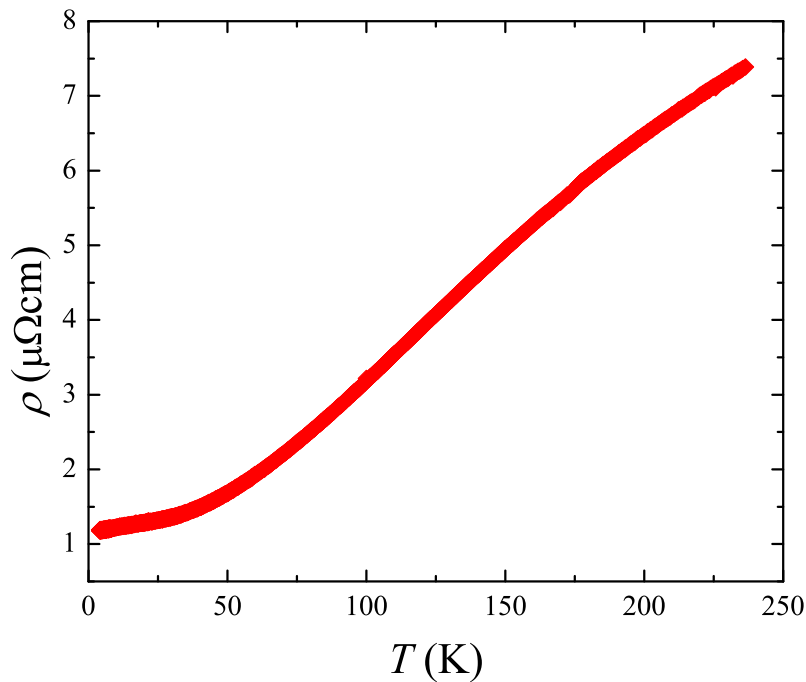
Nakon montiranja uzorka na nosač, on se unosi u kriostat i nakon toga se ispumpava komora oko nosača. Potom se polako otvara VTI ventil te se uzorak kontrolirano hladi brzinom od 3 K/min do željene temperature. Uzorak se hladi polako kako se zbog termalne ekspanzije ne bi oštetili kontakti. Tokom hlađenja se struja pušta kroz uzorak preko kontakata 3-4 i mjere se padovi napona na 1-2 i 5-6 kako bi se izmjerila ovisnost otpornosti uzorka o temperaturi. Nakon što se temperatura stabilizira pokreće se kontinuirano povećanje polja do 15 T tokom kojeg se mjere magnetootpor uzorka na kontaktima 1-2 i 5-6, te Hallovi naponi na 1-5 i 2-6. Otpor se mjeri s promjenom polariteta struje i u oba smjera magnetskog polja tj od -15 do 15 T.



Slika 5.4: Shematski prikaz kriostata sa supravodljivim magnetom.

5.3 Rezultati transportnih mjerenja

Rezultat mjerenja otpornosti ρ u ovisnosti o temperaturi T prikazan je na grafu (Slika 5.5). Vidimo da se otpor smanjuje s temperaturom pokazujući metalni karakter materijala. Temperaturna ovisnost metala bila bi linearna, no ovdje vidimo da to nije u potpunosti tako, već je malo zakrivljena. Linearna ovisnost je posljedica fononskog

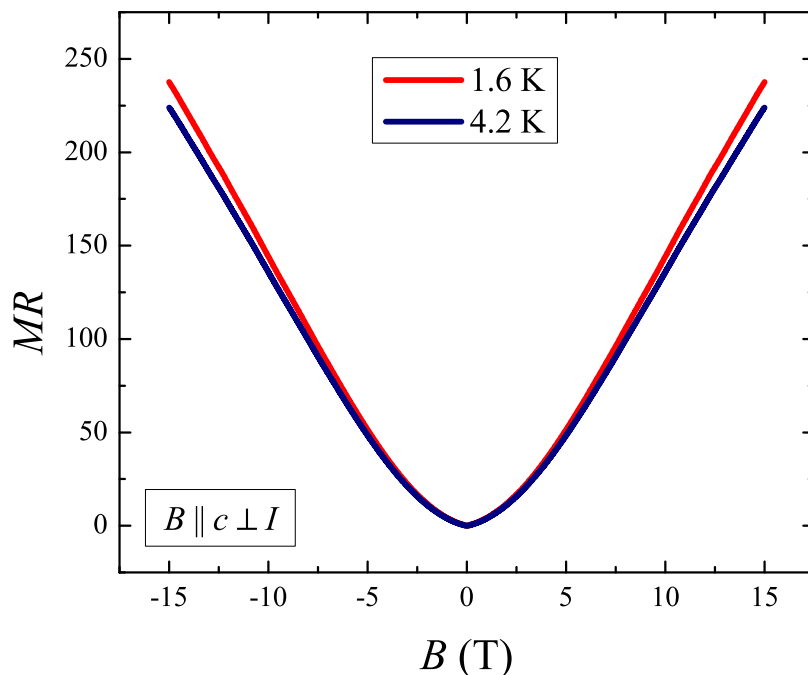


Slika 5.5: Mjerenje ovisnosti otpornosti ρ monokristala TaP o temperaturi T . Ovisnost nije linearna kako bi se očekivalo za običan metal, već varira što nam govori da imamo više nosioca naboja čije koncentracije malo variraju s temperaturom. Na najnižim temperaturama otpornost saturira što je posljedica raspršenja na nečistoćama koje imaju konstantan temperaturno neovisan doprinos.

doprinosu, a odstupanje od toga dolazi od promjena koncentracije nosioca naboja u materijalu. To je i očekivano s obzirom da je proučavani materijal polumetal, pa tako očekujemo da imamo doprinos više nosioca naboja. Još je važno primijetiti da na najnižim temperaturama otpornost počinje saturirati, što je doprinos koji dolazi od raspršenja na nečistoćama i defektima. Što je više nečistoća u uzorku to saturacija započinje na višoj temperaturi.

Mjerenje magnetootpora u konfiguraciji gdje je magnetsko polje u smjeru c kristalografske osi, a okomito na smjer struje I prikazano je na slici (Slika 5.6). To je konfiguracija (i) sa slike (Slika 5.2) gdje oznaka pokazuje pozitivan smjer magnetskog polja. Vidimo pozitivno povećanje magnetootpora za faktor 220 na polju od 15 T. To je često puta slučaj kod sustava koji imaju više nosioca naboja i naziva se Lorentzovim ili geometrijskim doprinosom magnetootporu. U ovom slučaju je on visok zbog vrlo visoke mobilnosti u ovom materijalu. Kako se i vidi na slici (Slika 5.6), oscilacije nisu uočene u ovim mjerenjima, a to je zato što je povećanje magnetootpora veliko pa zasjenjuje oscilatorni doprinos.

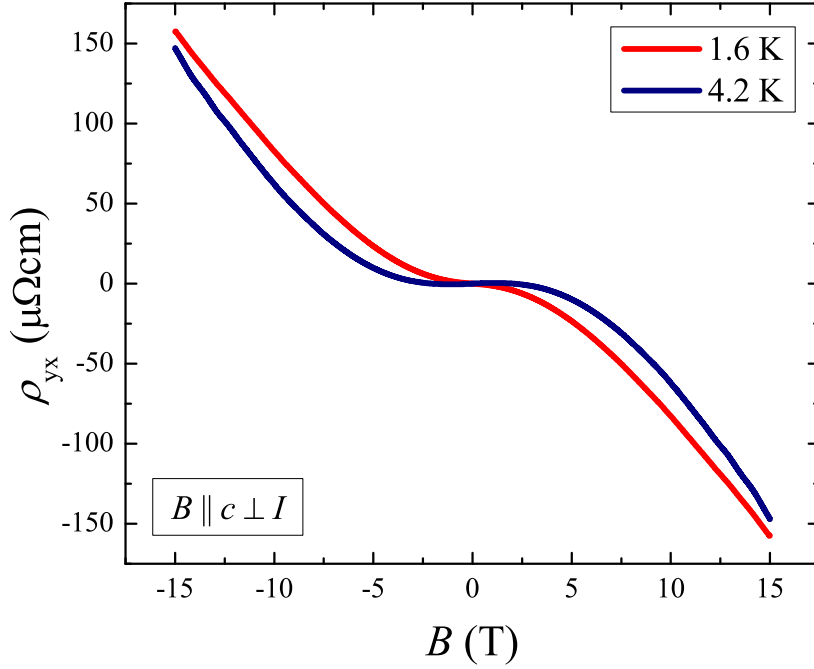
Ovisnost transverzale otpornosti ρ_{xy} o magnetskom polju u slučaju kada je vanjsko magnetsko polje okomito na struju je prikazano na slici (Slika 5.7). Transverzalna



Slika 5.6: Ovisnost relativne magnetootpornosti $MR = (\rho(B) - \rho(0))/\rho(0)$ monokristala TaP o magnetskom polju B u konfiguraciji kad je magnetsko polje u smjeru c kristalografske osi i okomito na smjer struje kroz uzorak ($B \parallel c \perp I$). Dominantni doprinos magnetootporu dolazi od geometrijskog magnetootpora, a ovako je velik zbog velike mobilnosti elektrona u ovom materijalu.

otpornost proporcionalna je s Hallovom konstantom koja je očito negativna. To znači da su većinski nosioci elektroni, iako iz oblika krivulje vidimo da imamo prisutne i druge tipove nosioca. Ovakav oblik najčešće odgovara dvama nosiocima. Oscilacije isto tako nisu vidljive u ovim mjerenjima, ponovno je razlog to što je pozadina prevelika, pa oscilacije upadnu unutar šuma te ih je nemoguće razlučiti.

Mjerenje magnetootpora u konfiguraciji gdje je magnetsko polje u smjeru struje kroz uzorak, a okomito na c kristalografsku os prikazano je na slici (Slika 5.8). To je konfiguracija (ii) sa slike (Slika 5.2) gdje oznaka pokazuje pozitivan smjer magnetskog polja. Vidimo prvotni porast magnetootpora, a zatim pad. Pad magnetootpora je očekivan s obzirom na kiralnu anomaliju u Weylovim semimetalima koja predviđa negativan magnetootpor u slučaju kada su vanjsko električno i magnetsko polje paralelni. U sličnim eksperimentima [14], [15] isto je opažen pad magnetootpor, no prelazak u negativno jedino u slučaju kada su magnetsko polje i struja paralelni unutar odstupanja od 2° . Takvo odstupanje smo lako mogli unijeti u eksperiment prilikom postavljanja uzorka na nosač. Da bi se eksperiment izveo preciznije potreban bi bio nosač koji se može rotirati u svim smjerovima kako bi se mogla raditi precizna kutno ovisna mjerenja. Sa fiksnim nosačem jednostavno nije moguće savršeno precizno

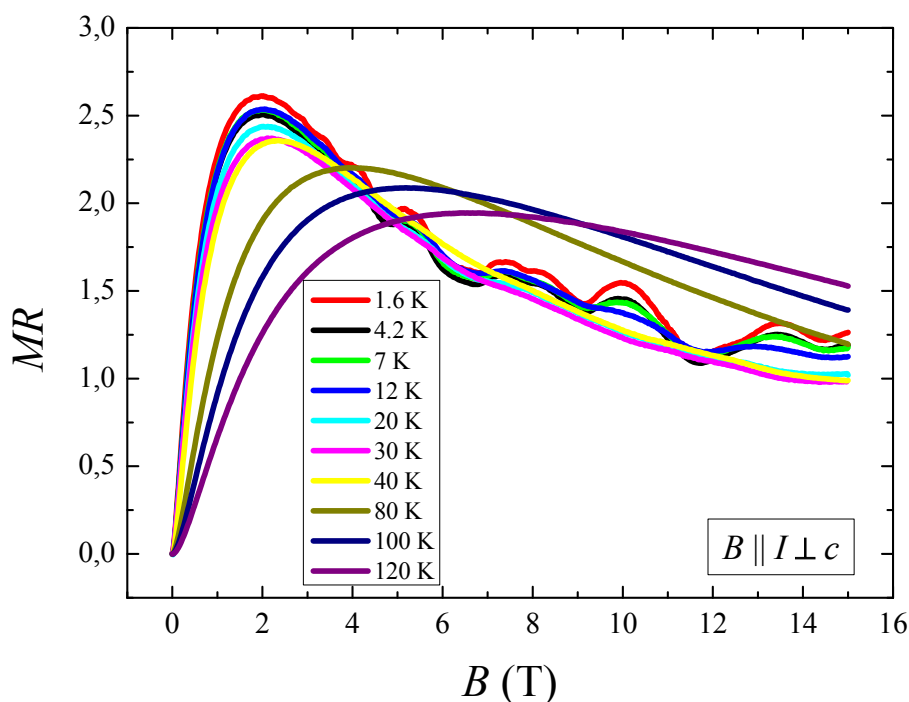


Slika 5.7: Mjerenje transverzalne otpornosti ρ_{yx} TaP na temperaturama 1.6 K i 4.2 K u konfiguraciji kad je magnetsko polje u smjeru c kristalografske osi i okomito na smjer struje kroz uzorak ($B \parallel c \perp I$). Transverzalna otpornost proporcionalna je s Hallovom konstantom koja je očitno negativna. To znači da su većinski nosioci elektroni, iako iz oblika krivulje vidimo da imamo prisutne i druge tipove nosioca.

poravnati smjer struje u uzorku sa smjerom vanjskog magnetskog polja.

Iako ne postoji doprinos od Lorentzove sile magnetootporu jer je $B \parallel I$, još uvijek može postojati pozitivan magnetootpor oblika $MR \propto 1/(1 + B^2)$ koji dolazi od anizotropije Fermijeve površine, i to je upravo dominantni član za niska polja. Na višim poljima dominira doprinos od kiralne anomalije koji je proporcionalan s B^2 . Vidi se i da je maksimalna promjena relativnog magnetootpora reda 2, 5 što je sto puta manje nego u prijašnjoj konfiguraciji. Zato se Shubnikov - de Haas oscilacije lijepo vide na višim poljima i nižim temperaturama.

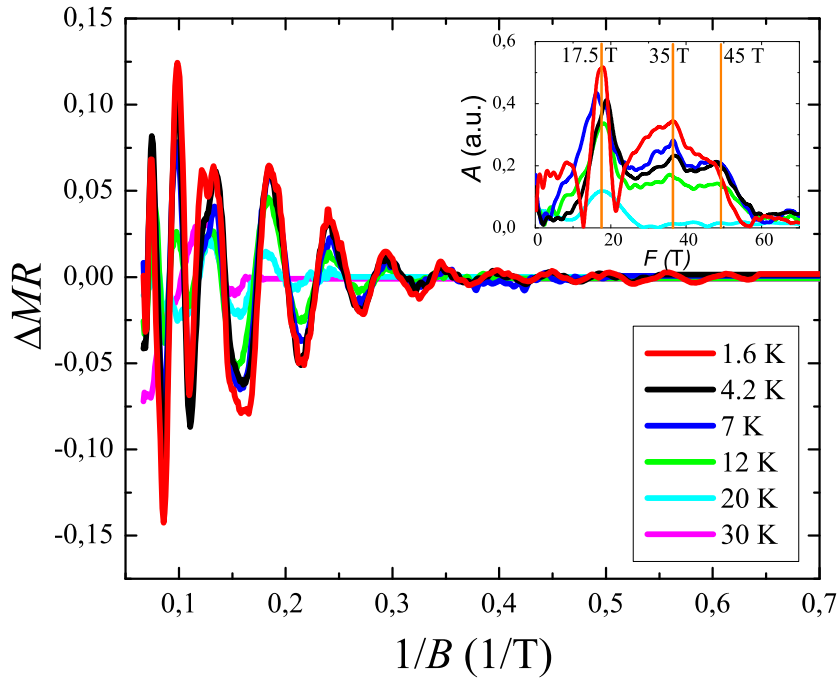
Oduzimanjem glatke pozadine u mjerenjima (Slika 5.8) su izolirane Shubnikov - de Haas oscilacije magnetootpora. Oscilatorni dio magnetootpora u ovisnosti o inverzu magnetskog polja prikazan je na slici (Slika 5.9). Očitno oscilacije nemaju samo doprinos od jedne Fermijeve površine tj. nemaju jednu frekvenciju. Njihov spektar prikazan je u gornjem desnom kutu grafa (Slika 5.9). Jasno je vidljiv doprinos triju frekvencija ($F_\gamma = 17.5$ T, $F_{2\gamma} = 35$ T, $F_\delta = 45$ T), odnosno dvaju ekstremalnih ploha ($A_\gamma = 0.17$ (nm) $^{-2}$ i $A_\delta = 0.43$ (nm) $^{-2}$). Obje površine su vrlo male u usporedbi sa površinom presjeka Brillouinove zone [19], pa zaključujemo da se radi o tzv. Fermijevim džepovima (eng. *Fermi pockets*). To su zatvorene plohe Fer-



Slika 5.8: Ovisnost relativne magnetootpornosti $MR = (\rho(B) - \rho(0))/\rho(0)$ monokristala TaP o magnetskom polju B u konfiguraciji kad je magnetsko polje u smjeru struje kroz uzorak ($B \parallel I \perp c$) za različite temperature. Shubnikov - de Haas oscilacije se vide na temperaturama ispod 30 K. Vidi se i pad magnetootpornosti s povećanjem magnetskog polja što je i očekivano zbog kiralne anomalije.

mijeve energije unutar Brillouinove zone. Mogu biti elektronske i šupljinske ovisno o efektivnoj masi nosioca unutar njih. Za $m > 0$ su elektronske, a za $m < 0$ su šupljinske. Na nižim poljima oscilacije izgledaju kao da imaju doprinos samo jedne frekvencije (Slika 5.10), što je i pokazano Fourierovim transformatom (Slika 5.10). To pokazuje da se frekvencija $F_\delta = 45$ T uključuje u oscilacije tek na višim poljima. To indicira da je efektivna masa tih oscilacija značajno viša od efektivne mase oscilacija frekvencije $F_\gamma = 17.5$ T. Nažalost ova mjerenja nisu dovoljna za detaljnu analizu te više frekvencije, pa je tako cijela daljnja analiza vezana uz $F_\gamma = 17.5$ T. To očekivanje kao i eksperimentalno utvrđene frekvencije su u dobrom poklapanju sa teorijskim i prijašnjim eksperimentalnim rezultatima za ovaj materijal [14]- [16].

Teorijsko predviđanje daje dvije bliske frekvencije 15 T i 18 T umjesto frekvencije 17.5 T, dok su eksperimentalno u drugim radovima [14], [15] utvrdili frekvencije 17,6 i 17,8 T. Te dvije frekvencije nisu razlučive iz naših eksperimentalnih rezultata, no nazire se ta mogućnost ako pogledamo oblik vrhova Fourierovog transformata na grafu (Slika 5.10). Nazire se da se vrh možda sastoji od dva superponirana maksimuma. Kako bi se ovo razlučilo potrebna su preciznija mjerenja ili kvalitetniji uzorak. Jedan način kako bi se mogla dobiti preciznija mjerenja bi bio koristeći AC



Slika 5.9: Shubnikov - de Haas oscilacije u monokristalu TaP na različitim temperaturama. Fourierovi transformati Shubnikov - de Haas oscilacije u desnom gornjem kutu. U Fourierovom transformatu možemo prepoznati doprinos triju frekvencija ($F_\gamma = 17.5 \text{ T}$, $F_{2\gamma} = 35 \text{ T}$, $F_\delta = 45 \text{ T}$), odnosno dvaju ekstremalnih ploha ($A_\gamma = 0.17 \text{ (nm)}^{-2}$ i $A_\delta = 0.43 \text{ (nm)}^{-2}$), gdje smo za određivanje ekstremalnih površina koristili izraz (3.36). Te površine su vrlo male u usporedbi sa površinom presjeka Brillouinove zone ?? iz čega zaključujemo da se radi zapravo o tzv. Fermijevim džepovima (eng. *Fermi pockets*).

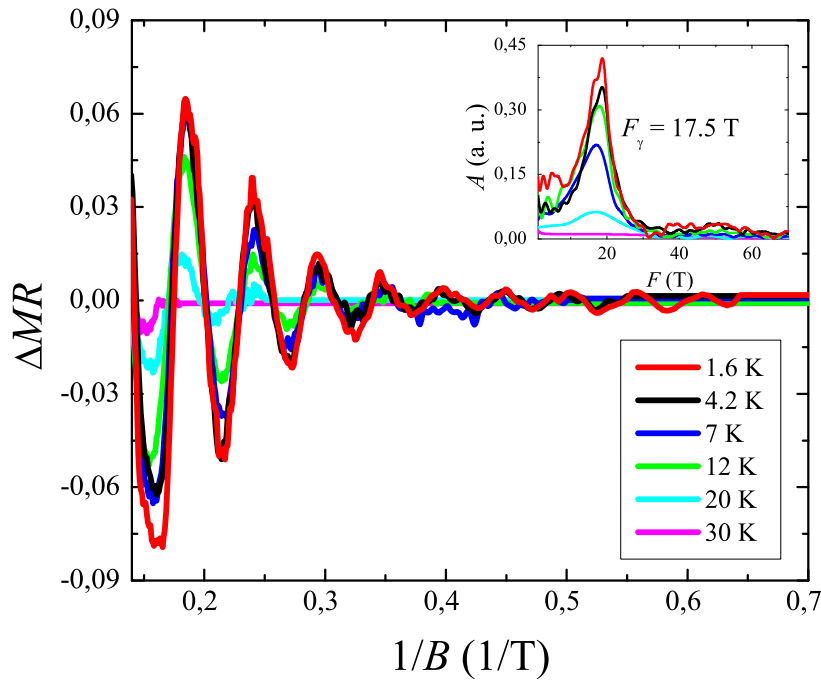
metodu mjerenja s Lock-in uređajem, a kvalitetniji uzorci se mogu dobiti korištenjem kemijski čistijih materijala za sintezu.

Za prilagodbu temperaturne ovisnosti amplitude pri fiksnom polju možemo koristiti temperaturno ovisni dio Lifshitz - Kosevich formule (3.50). Iz toga možemo saznati efektivnu masu nosioca koja je $m = (0.062 \pm 0.003)m_0$ (Slika 5.11), što je relativno mala efektivna masa. Rezultat je u odličnom poklapanju s teorijskim i eksperimentalnim rezultatima [15].

Ovisnost amplituda maksimuma i minimuma nam omogućuje određivanje Dingle-ove temperature. Možemo modificirati amplitudu iz izraza (3.63), pa je amplituda maksimuma i minimuma A :

$$A \propto \frac{1}{\sqrt{B}} \frac{\alpha T/B}{\sinh(\alpha T/B)} e^{-\alpha x/B} \quad (5.1)$$

gdje je $\alpha = 2\pi^2 k_B/\beta$. Logaritmiranjem gornjeg izraza i linearnom prilagodbom se odredi x (Slika 5.12). Dingleova temperatura je $x = (10.6 \pm 0.3) \text{ K}$, što govori o



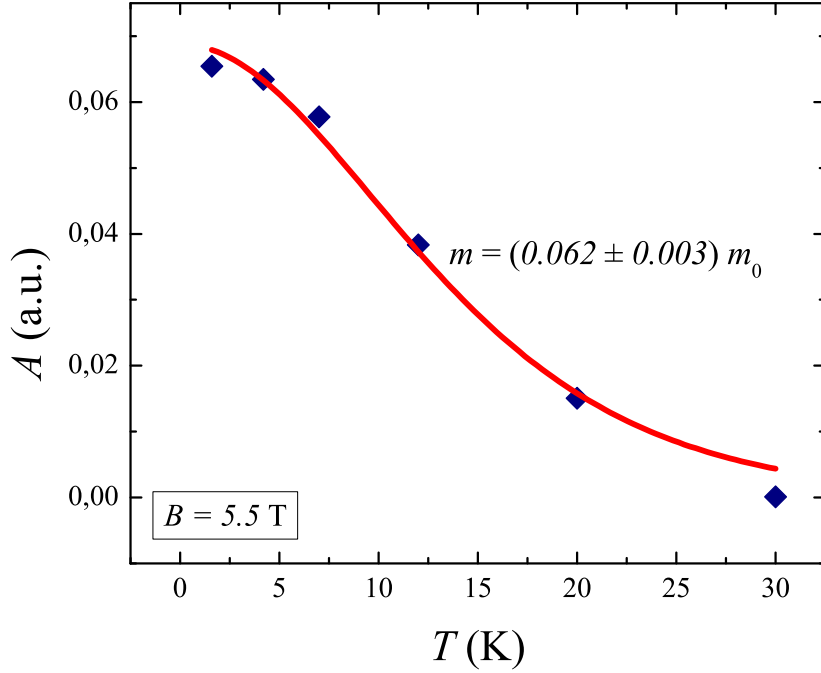
Slika 5.10: Shubnikov - de Haas oscilacije u monokristalu TaP na različitim temperaturama na nižim poljima. Fourierovi transformati Shubnikov - de Haas oscilacija u monokristalu TaP na različitim temperaturama u području polja koje odgovara prisutstvu jedne frekvencije $F_\gamma = 17.5$ T.

tome da postoji udio nečistoća negdje od oko 0.1 do 1 %, ali isto tako potvrđuje da nečistoće ne utječu na topološka svojstva materijala kao što su Weylove točke. To znamo zato jer smo vidjeli smanjivanje magnetootpora porijeklom od kiralne anomalije što služi kao eksperimentalna potvrda Weylovog semimetala. Iz Dingleove temperature moguće je odrediti vrijeme raspršenja τ i srednji slobodni put l ciklotronskog gibanja elektrona.

$$\tau = \frac{\hbar}{4\pi^2 k_B x}; \quad v_F = \sqrt{\frac{2e\hbar}{m^2} F}; \quad l = v_F \cdot \tau \quad (5.2)$$

Rezultati dobiveni računom iz gornjih izraza su $\tau = (1.15 \pm 0.03) \cdot 10^7$ s i $l = (7.7 \pm 0.2)$ nm. Za izračun srednjeg slobodnog puta pretpostavili smo da se radi o linearnoj disperziji, te da je ekstremalni presjek Fermijeve plohe krug u impulsnom prostoru. Tvrdimo da je to opravdano jer smo opazili Berryjevu fazu π u oscilacijama koja odgovara Weylovim točkama.

Prema Onsagerovoj relaciji (3.66) Landauov indeks r je proporcionalan $1/B$, što je jasno vidljivo i na grafu (5.13). Položaji maksimuma i minimuma na skali $1/B$ imaju definirane položaje za određene r . To se lako vidi ako primijetimo da vrijedi (3.65) i to da oscilacije u zz konfiguraciji moraju imati istu oscilatornu ovisnost kao



Slika 5.11: Amplituda oscilacija na fiksnoj vrijednosti polja u ovisnosti o temperaturi. Linija prilagodbe je amplitudni dio Lifshitz - Kosevich formule. Iz prilagodbe se može odrediti efektivna masa elektrona. U ovom slučaju je to $m = (0.062 \pm 0.003)m_0$.

oscilacije u xx konfiguraciji (3.63):

$$\tilde{\rho}_{zz} \propto -\cos \left[2\pi \left(\frac{F}{B} + \phi \right) \right] \quad (5.3)$$

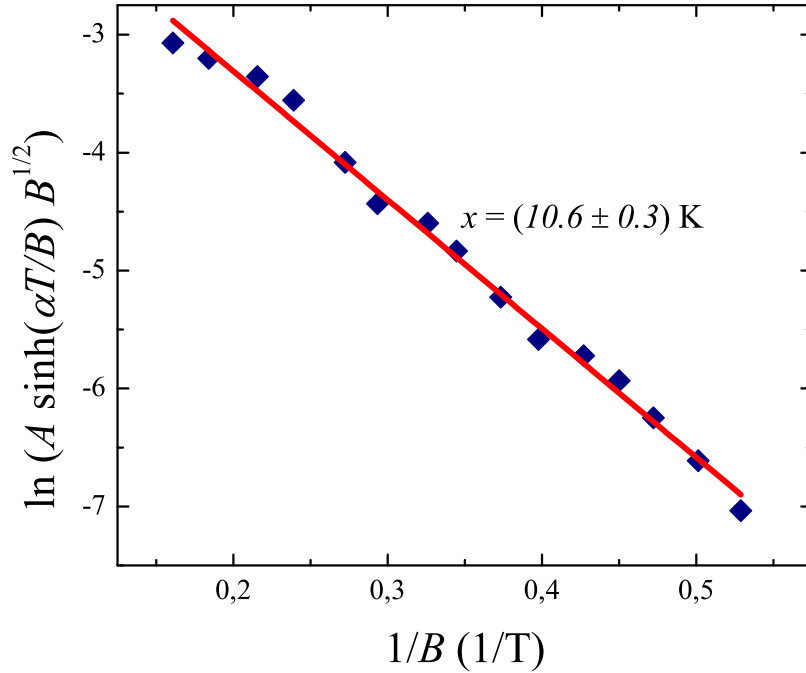
gdje je ϕ ukupna faza oscilacija. Prema tome su maksimumi i minimumi oscilacija definirani uvjetom:

$$\begin{aligned} \frac{F}{B} + \phi &= N + \frac{1}{2} \rightarrow \text{maksimum} \\ \frac{F}{B} + \phi &= N \rightarrow \text{minimum} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Sada možemo minimume oscilacija povezati s cijelim brojevima r , a maksimume sa polucjelobrojnim $r + 1/2$. Variramo vrijednost r dok ne dobijemo presjek na y osi između $-1/8$ i $1/2 + 1/8$. Iz linearne prilagodbe se može dobiti taj odsječak koji predstavlja ukupnu fazu iz Onsagerove relacije. Rezultat za ukupnu fazu je $\phi = (-0.08 \pm 0.03)$. Znamo da je

$$\phi = \gamma \pm \delta - \phi_\beta; \quad \beta_C = 2\pi\phi_\beta \quad (5.5)$$

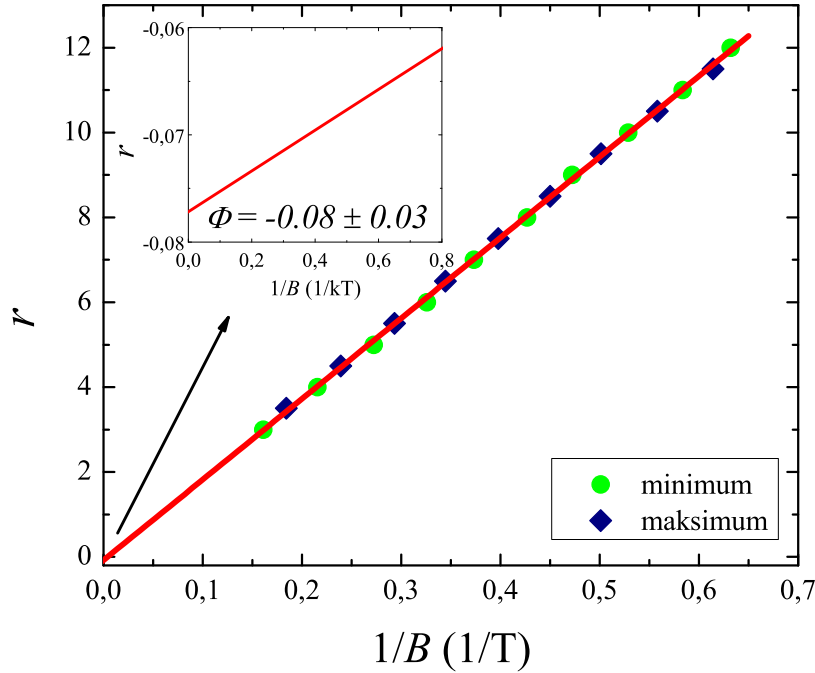
Znamo da je $\gamma = 1/2$ i da δ mora biti unutar $\pm 1/8$. Kako vrijedi (5.5) slijedi da ϕ_β mora biti jednako $1/2$. Berryjeva faza je onda $\beta_C = 2\pi\phi_\beta = \pi$. π Berryjeva faza je



Slika 5.12: Graf lineariziranog izraza (5.1), gdje je A amplituda oscilacija, a $\alpha = 2\pi^2 k_B/\beta$. Iz linearne prilagodbe može se odrediti Dingeva temperatura (3.63). U ovom slučaju je $x = (10.6 \pm 0.3)$ K.

karakteristika materijala s Diracovom disperzijom. Elektron obilazeći putanju u impulsnom prostoru oko Weylove točke dobiva Berryjevu fazu π . Prema tome u sustavu postoje diracovi fermioni, a $\delta \approx -0.08$, što govori da je Fermijeva ploha 3D, a ne 2D. Oko ovog rezultata se literatura još nije usuglasila [16], najvjerojatnije zbog nekonzistentnog načina pridavanja Landauovih indeksa maksimumima i minimumima koji se često puta propagira kroz literaturu. Za definitivnu potvrdu ovog rezultata potrebna su dodatna mjerenja.

Zeemansko cijepanje Landauovih nivoa nije opaženo u eksperimentu. To znači da je efektivna masa elektrona relativno mala, što smo i potvrdili mjerenjima (Slika 5.11).



Slika 5.13: Landauov indeks r u ovisnosti o $1/B$ maksimuma i minimuma s grafa (Slika 5.10). Linearna prilagodba odgovara transformiranom izrazu (3.66). Dakle, odsječak na y osi odgovara fazi oscilacija. Za odsječak se dobilo $\phi = (-0.08 \pm 0.03)$. Kako vrijedi (5.5), a znamo da je $\gamma = 1/2$ i $\delta \leq 1/8$, mora i ϕ_β biti jednako $1/2$. Berryjeva faza u materijalu je dakle jednaka π (5.5).

6 Zaključak

Weylovi semimetali su 3D analogoni grafena koji su u posljednjih par godina pobudili veliko zanimanje znanstvene zajednice. Zanimljivi su zato jer posjeduju Diracove tj. Weylove fermione kao niskoenergetska pobuđenja. Fizikalno su ovi materijali prva realizacija Weylovih fermiona, pa su osim za fizici čvrstog stanja zanimljivi i fizici elementarnih čestica. Postojanje Weylovih točaka u materijalu daje im zanimljiva svojstva poput kiralne anomalije čija je posljedica negativni magnetootpor. Ovakvi posebni efekti ih čine iznimno zanimljivima za primjenu u npr. spintronici. Weylove točke u ovoj klasi materijala su topološki zaštićene što znači da je materijal neosjetljiv na male perturbacije kao npr. od nečistoća, što znači da će i nesavršen kristal i dalje imati svojstva Weylovog semimetala. To svojstvo olakšava tehnološku uporabu ovakvih materijala.

Jedan od ciljeva ovog rad bio je sintetizirati velike monokristale Weylovog semimetala TaP. Za to je korištena CVT (eng. *Chemical Vapour Transport*) metoda s transportnim agentom jodom. Dobiveni su monokristali TaP dimenzija više nego dovoljno velikih za magnetotransportna mjerenja otprilike $3 \times 3 \times 3 \text{ mm}^3$. Monokristali su karakterizirani raspršenjem x-zraka na prahu čime je potvrđena kristalna struktura

TaP. Uzorak je oblikovan brušenjem u pločasti oblik povoljan za magnetotransportna mjerenja. Kontakti su pričvršćeni srebrnom pastom i učvršćeni srebrnim epoksijem, te je uzorak učvršćen na držač kako zakretni moment na uzorak radi mjerenja u magnetskom polju ne bi oštetio kontakte.

Mjereni su magnetootpor uzorka u dvije konfiguracije, od kojih je u prvoj vanjsko magnetsko polje okomito na smjer struje kroz uzorak. U toj konfiguraciji smo opazili jako velik pozitivan relativni magnetootpor, te zbog tako velike pozadine nismo uspjeli opaziti kvantne oscilacije. U drugoj konfiguraciji, kada je vanjsko magnetsko polje paralelno sa smjerom struje opazili smo smanjivanje relativnog magnetootpora koje je posljedica kiralne anomalije. Izolirane su oscilacije Shubnikov - de Haas tipa iz mjerenja u ovoj konfiguraciji i određene su dominantne frekvencije $F_\gamma = 17.5$ T, $F_{2\gamma} = 35$ T, $F_\delta = 45$ T. Primijećeno je da se frekvencija $F_\gamma = 17.5$ T pojavljuje već na niskim poljima, dok se frekvencija $F_\delta = 45$ T uključuje tek na visokim poljima. Ta razlika dolazi od toga što je efektivna masa oscilacija frekvencije F_γ $m = 0.062m_0$ značajno manja od efektivne mase oscilacija frekvencije F_δ koju nismo mogli odrediti jer nismo uspjeli izolirati te oscilacije.

Za nižu frekvenciju je određena Dingleova temperatura $x = 10.6$ K koja govori o tome da monokristali imaju ipak nezanemarivu razinu nečistoća negdje od 0.1 do 1%. S jedne strane to otežava opažanje oscilacija, dok s druge strane potvrđuje da su Weylove točke otporne na perturbacije koje dolaze od nečistoća. To je potvrđeno s opažanjem smanjivanjem relativnog magnetootpora koji dolazi od kiralne anomalije.

Analizom faze kvantnih oscilacija pokazalo se da postoji doprinos od Berryeve faze, što bi potvrdilo prisutnost Diracovih točaka u materijalu. Oko ovog rezultata još nije postignut konsenzus u literaturi, najvjerojatnije zbog nekonzistentnog označavanja minimuma i maksimuma, te je za definitivnu potvrdu ili opovrgavanje ovog rezultat potrebno provesti još mjerenja.

Literatura

- [1] Wehling, T. O.; Black - Schaffer, A. M.; Balatsky, A. V. Dirac Materials // *Advances in Physics* Vol. 00, 00(2014), str. 1-77.
- [2] Cayssol, J. Introduction to Dirac materials and topological insulators // *Comptes Rendus Physique* Vol. 14, 9-10(2013), str. 760-778.
- [3] Vafek, O.; Vishwanath, A. Dirac Fermions in Solids // *Annual Review of Condensed Matter Physics* Vol. 5, (2014), str. 83-112.
- [4] Turner, A. M.; Vishwanath, A. Beyond Band Insulators: Topology of Semi-metals and Interacting Phases // *Contemporary Concepts of Condensed Matter Science* Vol. 6, (2013), str. 293-324.
- [5] Hosur, P.; Qi, X. Recent developments in transport phenomena in Weyl semi-metals // *Comptes Rendus Physique* Vol. 14, 9-10(2014), str. 857-870.
- [6] Hasan, M. Z.; Kane, C. L. Topological Insulators // *Rev. Mod. Phys.* Vol. 82, 3045(2010).
- [7] Ando, Y. Topological Insulator Materials // *Journal of the Physical Society of Japan* Vol. 82, 102001(2013).
- [8] Fu, L.; Kane, C. L.; Mele, E. J. Topological Insulators in Three Dimensions // *Phys. Rev. Lett.* Vol. 98, 106803(2007).
- [9] Fruchart, M.; Carpentier, D. An introduction to topological insulators // *Comptes Rendus Physique* Vol. 14, 9-10(2013), str. 779-815.
- [10] Huang, S.; Xu, S. et al. A Weyl Fermion semimetal with surface Fermi arcs in the transition metal monpnictide TaAs class // *Nature Communications* Vol. 6, 7373(2015).
- [11] Xu, S.; Belopolski, I. et al. Discovery of a Weyl Fermion semimetal and topological Fermi arcs // *Science* Vol. 7, 7373(2015).
- [12] Weng, H.; Fang, Z. et al. Weyl Semimetal Phase in Noncentrosymmetric Transition-Metal Monophosphides // *Phys. Rev. X* Vol. 5, 011029(2015).
- [13] Xu, S.; Belopolski, I. et al. Experimental discovery of a topological Weyl semi-metal state in TaP // *Science Advances* Vol. 1, 10(2015), e1501092.
- [14] Arnold, F.; Shekar, C. et al. Negative magnetoresistance without well-defined chirality in the Weyl semimetal TaP // *Nature Commun.* Vol. 7, 1615(2016)

- [15] Shekar, C.; Arnold, F. et al. Large and unsaturated negative magnetoresistance induced by the chiral anomaly in the Weyl semimetal TaP // Nature Commun. Vol. 7, 11615(2016)
- [16] Hu, J.; Liu, J. Y. et al. π Berry phase and Zeeman splitting of TaP probed by high field magnetotransport measurements // Scientific Reports Vol. 6, 18674(2016)
- [17] Xu, N.; Weng, H. M. et al. Observation of Weyl nodes and Fermi arcs in TaP // Nature Communications Vol. 7, 11006(2016)
- [18] Shekar, C.; Nayak, A. K. et al. Extremely large magnetoresistance and ultra-high mobility in the topological Weyl semimetal NbP // Nature Physics Vol. 11, (2015) str. 645-649
- [19] Du, J.; Wang, H. et al. Unsaturated both large positive and negative magnetoresistance in Weyl Semimetal TaP // Science China Physics Vol. 59, 657406(2016)
- [20] Lee, C.; Xu, S. et al. Fermi surface interconnectivity and topology in Weyl fermion semimetals TaAs, TaP, NbAs, and NbP // Phys. Rev. B Vol. 92, 235104(2015)
- [21] Tajima, N. B.; Tamura, M. et al. Transport Property of an Organic Conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃ under High Pressure - Discovery of a Novel Type of Conductor // Journal of the Physical Society of Japan Vol. 69, 2(2000)
- [22] Nielsen, H. B.; Ninomiya, M. A no-go theorem for regularizing chiral fermions // Phys. Lett. B Vol. 105, 2-3(1981), str. 219-223
- [23] Wang, Z.; Weng, H. et al. Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in Cd₃As₂ // Phys. Lett. B Vol. 88, 125427(2013)
- [24] He, L. P.; Hong, X. C. et al. Quantum transport evidence for a three-dimensional Dirac semimetal phase in Cd₃As₂ // Phys. Rev. Lett. Vol. 113, 246402(2014)
- [25] Wang, Z.; Sun, Y. et al. Dirac semimetal and topological phase transitions in A₃Bi (A = Na, K, Rb) // Phys. Lett. B Vol. 85, 195320(2012)
- [26] Kittel, C. Introduction to Solid State Physics. 8th ed. John Wiley and Sons. 2005.
- [27] Ashcroft N. W., Mermin, D. Solid State Physics. 1st ed. Saunders College Publishers. 1976.
- [28] Shoenberg, D. Magnetic Oscillations in Metals. 1st ed. Cambridge University Press. 1984.
- [29] Abrikosov, A. A. Fundamentals of the Theory of Metals 1st ed. North - Holland. 1988.

- [30] Ashby, P. E. C.; Carbotte, J. P. Theory of magnetic oscillations in Weyl semimetals // Eur. Phys. J. B Vol. 87, 92(2014)