

**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI
“FEDERICO II”**



Scuola Politecnica e delle Scienze di Base

Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Dipartimento di Fisica “Ettore Pancini”

Laurea Triennale in Fisica

Fermioni di Dirac nei Solidi

Relatori:

Prof. Carmine Antonio Perroni

Candidato:

Roberto Gargiulo

Matr. N85001252

Anno Accademico 2019/2020

Indice

Introduzione	2
1 Grafene	5
1.1 Proprietà Fisiche	5
1.1.1 Struttura a Bande	5
1.1.2 Coni di Dirac	8
1.2 Klein Tunneling nel Grafene	10
1.2.1 Generalità del Fenomeno	10
1.2.2 Calcolo della Trasmittanza	11
1.2.3 Verifiche Sperimentali	15
2 Isolanti Topologici	17
2.1 Effetto Hall Quantistico e Idea degli Isolanti Topologici	17
2.2 Grafene come Isolante Topologico	19
2.2.1 Formazione del Gap	19
2.2.2 Stati di Edge	20
3 Semimetalli di Weyl	24
3.1 Fermioni di Weyl	24
3.2 Proprietà Topologiche	26
3.2.1 Archi di Fermi	26
3.2.2 Anomalia Chirale	28
3.2.3 Verifiche Sperimentali	30
3.3 Klein Tunneling nei Semimetalli di Weyl	31
3.3.1 Calcolo della Trasmittanza	31
3.3.2 Analogie con l’Ottica	33
Conclusioni	36

Introduzione

Negli ultimi venti anni la scoperta e studio dei materiali bidimensionali, quali grafene, silicene e germanene, hanno mostrato particolari proprietà elettroniche ed ottiche, con promettenti applicazioni. La scoperta del grafene nel 2004 ha in particolare rivoluzionato lo studio di questi materiali e suggerito l'esistenza di classi generali di materiali 2D e 3D che manifestano simili proprietà.

La struttura di molti di questi materiali 2D è quella a nido di ape, che la rende instabile a causa dell'alto rapporto superficie-bulk. Questa è in generale solo un'approssimazione della struttura reale a causa di fluttuazioni termiche che spostano trasversalmente gli atomi, come previsto dal teorema di Mermin-Wagner nel caso di simmetria traslazionale. Per le tipiche dimensioni dei campioni considerati questi effetti sono tuttavia poco significativi. Tutti questi materiali hanno notevoli proprietà, sono infatti *più resistenti del diamante, più conduttivi del rame, più flessibili della gomma* e trasparenti dal punto di vista ottico. Inoltre anche a temperatura ambiente presentano effetti quantistici, tra cui i più notevoli: il Klein Tunneling, ossia il tunneling attraverso barriere con probabilità di trasmissione che non decade esponenzialmente con lo spessore e trasmissione perfetta in certi casi; l'Effetto Hall Quantistico, ossia quantizzazione della resistenza trasversa e formazioni di stati di edge immuni al backscattering. Questi sono responsabili di anomale proprietà di trasporto nel bulk e all'edge che rendono i materiali particolarmente interessanti anche da un punto di vista sperimentale e applicativo.

Tra le maggiori tecniche di fabbricazione del grafene ne ricordiamo tre: esfoliazione meccanica della grafite; crescita epitassiale su substrati di carburo di silicio; deposizione di vapore chimico (*Chemical Vapor Deposition - CVD*). Ognuna di queste produce uno strato di grafene con diverse proprietà e diversi usi.

Il caso della CVD è particolarmente interessante. Questa consiste nella reazione di un gas contenente carbonio ad alta temperatura con un sottostrato di metallo di transizione, quali Cu, Pt o Ir. Il gas rilascia carbonio sul sottostrato, formando uno strato di grafene nel raffreddamento. Una delle proprietà più notevoli del grafene prodotto in questa modalità è la presenza di un **minimo di conduttività** nel punto di Dirac anche a temperatura ambiente (dove la densità di portatori va a

zero), che ha natura del tutto quantistica:

$$\sigma_0 = \frac{4e^2}{\pi h} \quad (1)$$

Questo può essere spiegato da un trasporto balistico della corrente, che risulta in una conduttività finita anche in assenza di interazioni elettrone-elettrone o elettrone-fonone. Analogamente si trova che il calore è trasportato da fononi balistici nel grafene.

Queste notevoli proprietà del grafene hanno suggerito diverse applicazioni. Ad esempio si pensa che il grafene o simili materiali possano essere alla base della nuova generazione di Transistor a Effetto di Campo (*Field-Effect Transistor* - FET). Il funzionamento di questi transistor è permesso dall'uso di opportune differenze di potenziale (da cui "a effetto di campo", sottinteso *elettrico*) tra i suoi terminali, che determina quanta corrente può scorrere nel *channel*, tipicamente un semiconduttore. Il grafene viene usato nel channel sotto forma di *graphene nanoribbon*, ossia uno strip di grafene molto stretto con bordo a zigzag, che risulta nell'apertura del gap e proprietà semiconduttive. Si pensa che questi nuovi materiali possano risolvere il limite di mobilità dei portatori di carica e conduttività termica dei materiali attualmente utilizzati, il cui sviluppo si è rallentato significativamente, contro la nota Legge di Moore. Ancora, la sensibilità della conduttività del grafene ad impurità lo rende un ottimo candidato per sensori molecolari o biosensori.

A seguito della scoperta del grafene fu proposto che alcuni materiali 2D potessero esibire proprietà topologiche in assenza di campi magnetici esterni, generalizzando l'Effetto Hall Quantistico. Quest'ultimo era stato già studiato negli anni '80, ad esempio nella giunzione tra semiconduttori con struttura a bande invertita, ma era limitato a casi specifici. Nel 2005 in particolare fu proposta l'esistenza di una classe di materiali, gli **isolanti topologici** (*Topological Insulators* - TIs). Tali materiali si distinguono dalle semplici classi di isolanti e conduttori in quanto, pur presentando un gap finito, ammettono degli stati di conduzione al bordo (o *edge*). Questi stati sono protetti da perturbazioni locali che non violano la simmetria di time-reversal e sono dei fermioni di Dirac senza massa, che si propagano senza backscattering dovuto al *disordine* (vacanze, dislocazioni, impurità). All'interfaccia tra isolanti topologici e superconduttori è stato poi ipotizzata l'esistenza di fermioni di Majorana nel 2008, con le prime osservazioni sperimentali nel 2012. Queste particelle permetterebbero di fare calcoli di natura quantistica particolarmente stabili rispetto al modo tipico in cui avviene la decoerenza quantistica.

Negli ultimi anni (dal 2014) anche in materiali 3D come TaAs, Ag₂Te e Na₃Bi si è osservata la formazione di uno spettro lineare senza gap, con coni di Dirac, anche non simmetrici, vicini al centro della Brillouin Zone. Questo ha suggerito l'esistenza di una nuova classe di materiali con proprietà analoghe a quelle del grafene, i **semimetalli di Weyl**. Lo spettro lineare implica anche numerose analogie delle proprietà elettroniche con l'ottica classica in termini di trasmittanza, con conseguente analogia dell'indice di rifrazione e lunghezza d'onda dei fermioni. Le proprietà di scattering risultano come nel grafene anche in conduzione balistica della corrente, che ancora una volta rendono questi materiali candidati a dispositivi come FET e diodi Zener.

Tutte queste classe di materiali sono caratterizzate da particolari proprietà di trasporto, legate all'esistenza di **Fermioni di Dirac** nel bulk o all'edge (superficie), tipicamente protette rispetto ad opportune perturbazioni locali.

In questo lavoro presentiamo una visione generale e semplici modelli per queste classi di materiali, con particolare attenzione alle proprietà di trasporto legate alla presenza dello spettro di Dirac.

Nel primo capitolo studiamo le proprietà fisiche del grafene. In particolare, usando l'approssimazione tight-binding arriviamo alla struttura a bande e alla formazione di uno spettro lineare nei vertici della Brillouin Zone. Studiamo dunque il fenomeno di Klein Tunneling nel grafene da un punto di vista qualitativo, e calcoliamo la trasmittanza nel caso di una barriera rettangolare. Nel secondo capitolo introduciamo qualitativamente l'Effetto Hall Quantistico e gli isolanti topologici come sua generalizzazione. Consideriamo poi un semplice modello del grafene come isolante topologico, a partire da quello elaborato nel primo capitolo, verificando la formazione di stati all'edge con spettro di Dirac e le loro proprietà. Nel terzo capitolo infine discutiamo dei semimetalli di Weyl. Studiamo un modello a due bande generico e come si possono formare una coppia di coni di Dirac tridimensionali a partire dalla sola simmetria traslazionale. Da questi seguono notevoli proprietà topologiche, di cui consideriamo due in particolare: gli archi di Fermi e l'anomalia chirale. Consideriamo infine il Klein Tunneling come generalizzazione di quanto visto nel grafene e poniamo analogie alla trasmissione di onde elettromagnetiche.

Capitolo 1

Grafene

In questo capitolo ricordiamo la struttura cristallina del grafene ed otteniamo la relazione di dispersione per le bande di valenza e di conduzione usando l'approssimazione di tight-binding. Nota questa, vediamo che nello spazio dei momenti, in corrispondenza dei vertici della Brillouin Zone esagonale del grafene, si formano dei coni di Dirac corrispondenti a fermioni di bulk senza massa. Questo ci permette di studiare qualitativamente il fenomeno del Klein Tunneling. Calcoliamo l'espressione esatta della trasmittanza nel caso semplice di una barriera di potenziale rettangolare, che esibisce le proprietà attese soprattutto nel limite di alta barriera. Citiamo infine evidenza sperimentale di questo fenomeno caratteristico.

1.1 Proprietà Fisiche

1.1.1 Struttura a Bande

Il grafene è un solido bidimensionale costituito da soli atomi di carbonio e avente struttura a nido di api. Nel nostro studio siamo interessati al caso di condizioni al contorno periodiche a zigzag. In questo modo il reticolo cristallino è dato da una sovrapposizione di due reticoli di Bravais esagonali di vettori primitivi \vec{t}_1, \vec{t}_2 , identificati da due vettori di base \vec{d}_1, \vec{d}_2 .

$$\vec{t}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}) \quad \vec{t}_2 = \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3}) \quad \vec{d}_1 = (0, 0) \quad \vec{d}_2 = \frac{a}{\sqrt{3}}(0, 1). \quad (1.1)$$

Questo significa che anche la zona di Brillouin è un esagono di lato $b = 4\pi/3a$ (distanza atomica), in cui solo due dei sei vertici K, K' sono non-equivalenti per la periodicità del reticolo reciproco.

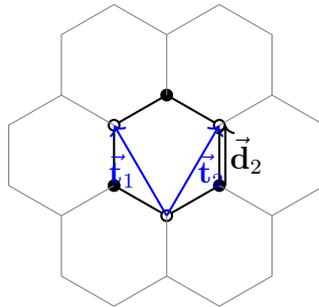
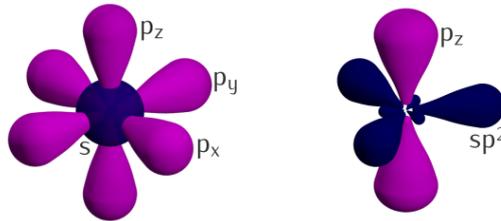


Figura 1.1: Reticolo Cristallino del Grafene

Siccome gli atomi di carbonio hanno configurazione elettronica di stato fondamentale $(1s^2)(2s^2)2p^2$, per rispettare le simmetrie del solido gli orbitali di carbonio si combinano per formare orbitali ibridi. In particolare gli orbitali $2s, 2p_x, 2p_y$ si combinano per formare tre orbitali ibridi σ che giacciono nello stesso piano e formano angoli di 120° . Il rimanente orbitale $2p_z$ è poi un orbitale di tipo π , perpendicolare al piano del grafene.

Figura 1.2: Plot Polare degli Orbitali Atomici s, p e Orbitali Ibridi sp^2, p_z del Carbonio (da Wikipedia)

Nella base degli orbitali atomici possiamo supporre assenza di interazione elettrone-elettrone e applicare l'approssimazione di tight-binding a causa del basso valore di a . Trascuriamo dunque anche effetti di interazione elettrone-elettrone ed elettrone-fonone. Per la simmetria traslazionale del modello vale il Teorema di Bloch e dunque l'hamiltoniana degli elettroni del grafene ammette una struttura a bande. Siccome gli orbitali π hanno diverso momento angolare da quelli σ , possiamo diagonalizzare l'hamiltoniana a blocchi, con un blocco relativo alle bande σ e un blocco relativo alle bande π . Le bande σ e π possono essere quindi considerate separatamente. In particolare, siccome gli orbitali π sono più energetici e ve ne sono due per cella, si formano due bande π , che sono la banda di valenza e di conduzione. Siccome le proprietà di trasporto dipendono solo da queste, allora ci limitiamo a ricavare la relazione di dispersione per le bande π .

All'ordine più basso nell'approssimazione tight-binding teniamo conto di un solo termine di hopping tra i primi vicini, così che in questa base gli elementi di matrice dell'hamiltoniana sono:

$$\langle \psi_{i;\vec{t}} | \hat{\mathcal{H}} | \psi_{j;\vec{t}'} \rangle = \begin{cases} E_p & i = j; \vec{t} = \vec{t}', \\ V(pp\pi) & i \neq j, \vec{t} - \vec{t}' = 0, -\vec{t}_1, -\vec{t}_2, \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (1.2)$$

dove:

1. $|\psi_{i;\vec{t}}\rangle$ è l'orbitale atomico del reticolo i -esimo in posizione \vec{t} ;
2. E_p è l'energia dell'orbitale $2p_z$;
3. $V(pp\pi)$ è il termine di hopping tra un dato orbitale $2p_z$ e il primo vicino.

Grazie al Teorema di Bloch, per ogni \vec{k} appartenente alla Brillouin Zone possiamo passare alla base delle somme di Bloch degli orbitali. In particolare siccome vi sono due atomi (uno per sottoreticolo) per cella, ciascuno con tre orbitali σ e uno π , allora vi sono in totale 8 somme di Bloch, di cui 2 sono di tipo π e 6 di tipo σ . Sempre per simmetria la matrice $\hat{\mathcal{H}}(\vec{k})$, che è una matrice 8×8 , si scrive a blocchi e dunque possiamo limitarci a considerare il blocco 2×2 di tipo π . Calcolando gli autovalori di queste matrici a blocchi al variare di \vec{k} , si trova che le relazioni di dispersione delle due bande sono date dalla seguente espressione:

$$E(\vec{k}) = E_p \pm |V(pp\pi)| \sqrt{1 + 4 \cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right)}. \quad (1.3)$$

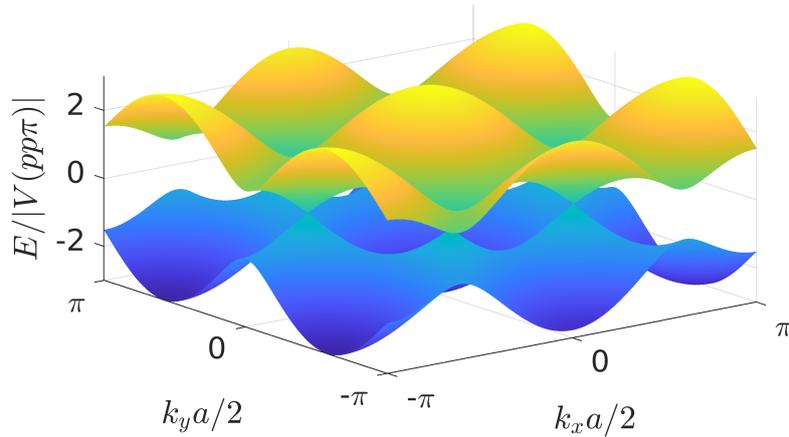


Figura 1.3: Grafico della Relazione di Dispersione $E(k_x, k_y)$ del Grafene in Approssimazione Tight-Binding

1.1.2 Coni di Dirac

Le particolari proprietà del grafene sono dovute al fatto che le bande si toccano in un numero finito di punti, che coincidono nel nostro modello con i vertici della Brillouin Zone. Ricordando che i vertici non equivalenti sono solo due, notiamo che la relazione di dispersione in questi punti è la stessa, e in particolare in entrambi i casi questa è isotropa e ammette stessa velocità di Fermi. In corrispondenza di questi punti la relazione di dispersione è lineare e dunque diciamo che diventa un **cono di Dirac**.

Per comodità porremo $E_p = 0$, ossia ridefiniamo lo zero dell'energia. In questo modo identifichiamo le eccitazioni di bassa energia con i fermioni che hanno relazione di dispersione lineare, ossia si comportano come fermioni di Dirac senza massa. Notiamo come in questo caso i fermioni di Dirac sono stati di bulk.

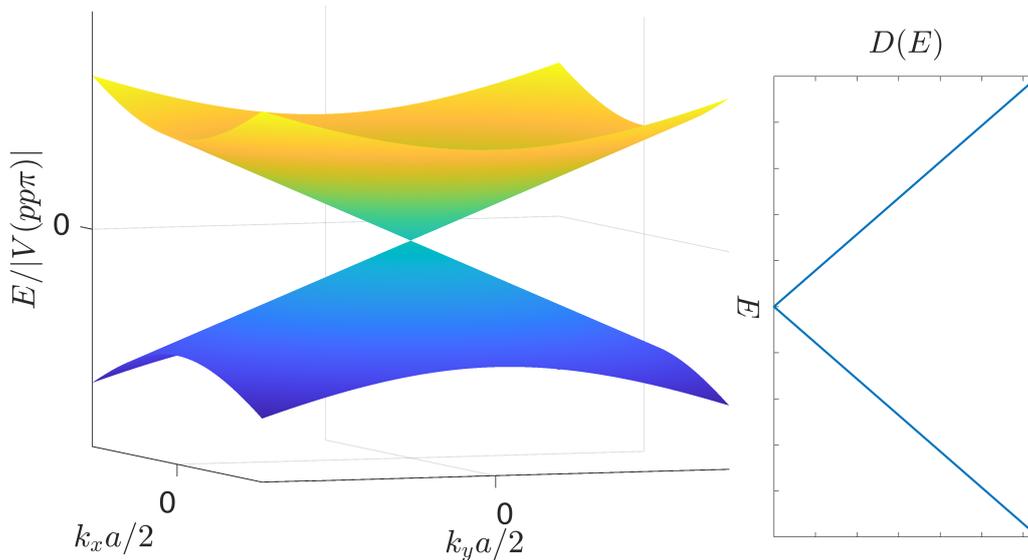


Figura 1.4: (sx) Grafico di un Cono di Dirac centrato in uno dei due vertici K, K' . (dx) Densità di Stati per energie vicine al punto di neutralità.

Questa è la caratteristica che permette la presenza di fermioni di Dirac nel grafene, ed è l'oggetto di interesse di questa tesi. Rispetto al vettore d'onda la relazione di dispersione assume dunque la seguente forma:

$$E(\vec{\mathbf{k}}) = \pm \hbar v_F |\vec{\mathbf{k}}|, \quad (1.4)$$

dove abbiamo traslato l'origine dei momenti ($\vec{\mathbf{k}} = 0$ corrisponde a K o K').

Possiamo poi caratterizzare il cono di Dirac tramite la densità di stati (*density of states* - DOS), ossia il numero di stati per unità di energia:

$$D(E) = \sum_{\vec{k} \in \text{BZ}} \delta(E - E(\vec{k})), \quad (1.5)$$

dove la somma è fatta per \vec{k} che appartiene alla Brillouin Zone (BZ). Notiamo che anche se \vec{k} varia su tutta la BZ in realtà gli unici valori di \vec{k} per cui E è prossima a 0 sono quelli vicini ai due nodi di Dirac, così che l'approssimazione della relazione di dispersione risulta valida anche per questo calcolo. Se la cella macroscopica (di area L^2 per semplicità) è sufficientemente grande, allora la somma è ben approssimata da un integrale. Usando le proprietà della funzione δ di Dirac troviamo che la DOS è lineare in $|E|$:

$$D(E) = \frac{2L^2}{\pi} \frac{1}{(\hbar v_F)^2} |E|. \quad (1.6)$$

Questo significa che (in 2D) la DOS di un cono di Dirac si annulla nel livello di Fermi, ossia non ci sono stati corrispondenti a questa energia. Per questo motivo questo valore dell'energia è anche detto punto di neutralità di carica. Un variazione del livello di Fermi dal punto di neutralità risulterebbe in effetti non desiderati, come un'interazione coulombiana elettrone-elettrone non trascurabile. Per mantenere le proprietà desiderate è dunque necessario ottenere un potenziale chimico nel grafene che sia quanto più vicino al punto di neutralità.

Per $b = a/\sqrt{3} \approx 1.4 \cdot 10^{-10} \text{m}$ distanza dei primi vicini e $|V(pp\pi)| \approx 3 \text{eV}$ energia di hopping, si trova che il tipico ordine di grandezza della velocità di Fermi è dato da:

$$\frac{v_F}{c} = \frac{3}{2} b \frac{|V(pp\pi)|}{\hbar c} \approx \frac{1}{320}. \quad (1.7)$$

Questo conferma l'alta mobilità dei portatori di carica nel grafene, come accennato nell'introduzione.

Sebbene gli stati disponibili siano finiti, per i nostri scopi è più comodo usare l'approssimazione continua. In questo modo l'hamiltoniana relativa agli stati di bassa energia diventa l'hamiltoniana relativistica di Dirac isotropa nel caso 2D per un fermione senza massa, con velocità di Fermi invece che velocità della luce:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar v_F (\sigma_x \hat{k}_x + \sigma_y \hat{k}_y), \quad \hat{k}_i = -i \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad (1.8)$$

con σ_x, σ_y matrici di Pauli agenti sulle onde di Bloch dei due sottoreticoli e \hat{k}_x, \hat{k}_y operatori vettore d'onda per le rispettive direzioni (trascuriamo ancora l'azione sullo spin, dove agisce come l'identità). Formalmente questo significa che il grado di libertà dovuto ai due reticoli può essere associato ad uno *pseudospin*.

Nello spazio dei momenti l'hamiltoniana è a blocchi 2×2 , con ogni blocco avente la forma:

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{\mathbf{k}}) = \hbar v_F (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - i k_y \\ k_x + i k_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Se vogliamo tenere conto dello spin e della simmetria tra i due vertici dobbiamo aggiungere altri due gradi di libertà, ciascuno corrispondente a due possibili valori. Per ogni $\vec{\mathbf{k}}$ l'hamiltoniana è una matrice 8×8 , che possiamo esplicitare come segue:

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{\mathbf{k}}) = \hbar v_F (\sigma_x \tau_z k_x + \sigma_y k_y), \quad (1.10)$$

con $\tau_z = \pm 1$ sui due vertici K, K' rispettivamente.

1.2 Klein Tunneling nel Grafene

1.2.1 Generalità del Fenomeno

I fermioni di Dirac senza massa presentano particolari proprietà di trasmissione all'interno di un materiale. Al livello più basso, queste possono essere interpretate a partire dall'effetto di **Klein Tunneling**.

Consideriamo adesso un fermione di Dirac 2D senza massa, con energia E , che incide su una barriera di potenziale rettangolare di altezza V_0 e un certo spessore D . Questo si verifica ad esempio quando il grafene presenta due regioni tra le quali il drogaggio di portatori di carica è fortemente diverso, oppure quando viene applicato un campo elettrico tramite un isolante sottile.

Il fenomeno può essere spiegato intuitivamente come segue. Se il fermione incidente è un elettrone, allora si osserva che attraversando la barriera questo diventa una lacuna nel lato sinistro e poi questa (che viaggia nella direzione opposta) viene nuovamente trasformata in un elettrone nel lato destro della barriera, conservando lo pseudospin. L'effetto è quello di assenza di riflessione o *pura trasmissione* che non dipende dall'altezza o spessore della barriera, ossia l'elettrone non interagisce con la barriera.

In realtà questo ragionamento funziona correttamente solo quando il fermione incide perpendicolarmente sul potenziale (e il problema diventa unidimensionale), e infatti in generale ci sarà anche una componente riflessa.

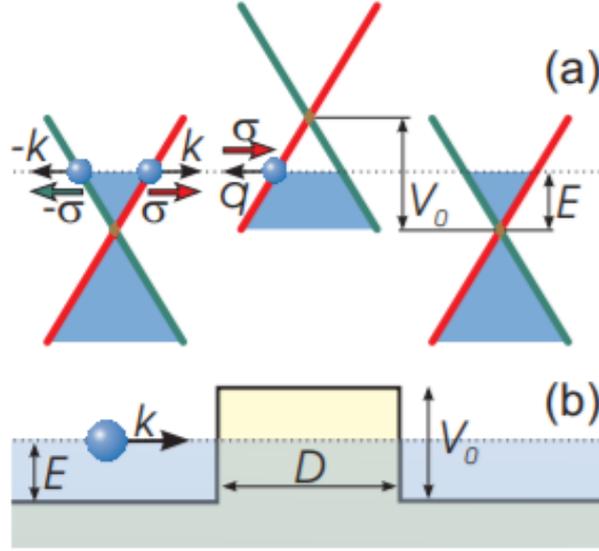


Figura 1.5: Schema del tunneling attraverso una barriera rettangolare nel grafene in termini di relazione di dispersione (a) e di potenziale (b) (da [3]).

1.2.2 Calcolo della Trasmittanza

Ricaviamo adesso questo risultato rigorosamente facendo uso del modello precedente e di alcuni risultati intermedi.

Teniamo dunque conto per ora solo del grado di libertà di pseudospin dovuto ai due sottoreticoli, ed ignoriamo eventuali differenze tra lo spin e i due vertici, che non influenzano il valore della trasmittanza. In questo modo l'hamiltoniana è semplicemente quella di Dirac in 2D:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}}, \quad (1.11)$$

con $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ il vettore delle prime due matrici di Pauli e con $\hat{\mathbf{k}} = (\hat{k}_x, \hat{k}_y)$ l'operatore vettore d'onda bidimensionale. Per studiare il tunneling dobbiamo prima ricavare l'espressione dello stato incidente con $\vec{\mathbf{k}}$ generico, che è un autostato dell'hamiltoniana.

Siccome $\hat{\mathcal{H}}$ commuta con $\hat{\mathbf{k}}$, allora la parte spaziale è quella di un'onda piana:

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}) = e^{i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad E(\vec{\mathbf{k}}) = \pm \hbar v_F |\vec{\mathbf{k}}|. \quad (1.12)$$

Inserendo questo ansatz nell'equazione agli autovalori troviamo l'espressione per u/v :

$$i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \hbar v_F |\vec{\mathbf{k}}| \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

$$\frac{u}{v} = \pm \frac{k_x + ik_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} = \pm (\cos \phi + i \sin \phi) = \pm e^{i\phi},$$
(1.13)

con ϕ l'angolo tra k_x e k_y , ossia $\tan \phi = k_y/k_x$. A meno di normalizzazione gli autovettori sono dunque:

$$\psi(\vec{\mathbf{k}}; \vec{\mathbf{r}}) = e^{i\vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{r}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \alpha = \text{sign}(E). \quad (1.14)$$

Per risolvere il problema di tunneling di uno stato stazionario (non legato) attraverso una barriera di potenziale di spessore D e altezza V_0 , dovremmo risolvere il problema più generale:

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{H}}\psi(\vec{\mathbf{k}}; \vec{\mathbf{r}}) = E(\vec{\mathbf{k}})\psi(\vec{\mathbf{k}}; \vec{\mathbf{r}}) & x < 0 \\ (\hat{\mathcal{H}} + V_0)\psi(\vec{\mathbf{k}}; \vec{\mathbf{r}}) = E(\vec{\mathbf{k}})\psi(\vec{\mathbf{k}}; \vec{\mathbf{r}}) & 0 < x < D \\ \hat{\mathcal{H}}\psi(\vec{\mathbf{k}}; \vec{\mathbf{r}}) = E(\vec{\mathbf{k}})\psi(\vec{\mathbf{k}}; \vec{\mathbf{r}}) & x > D \end{cases} \quad (1.15)$$

Si trova [3] che se l'onda incidente è come quella trovata in 1.14, allora l'onda risultante dall'interazione con la barriera ha la forma seguente:

$$\begin{aligned} \psi_a(\vec{\mathbf{r}}) &= \begin{pmatrix} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y} \\ \alpha_a (e^{ik_x x + i\phi} + r e^{-ik_x x - i\phi}) e^{ik_y y} \end{pmatrix} \\ \psi_b(\vec{\mathbf{r}}) &= \begin{pmatrix} (a e^{iqx} + b e^{-iqx}) e^{ik_y y} \\ \alpha_b (a e^{iqx + i\theta} - b e^{-iqx - i\theta}) e^{ik_y y} \end{pmatrix} \\ \psi_c(\vec{\mathbf{r}}) &= \begin{pmatrix} t e^{i(k_x x + k_y y)} \\ \alpha_a t e^{i(k_x x + k_y y + \phi)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.16)$$

dove:

1. ψ_a, ψ_b, ψ_c sono le restrizioni di ψ alle regioni $x < 0, 0 < x < D, x > D$ rispettivamente;
2. k_x, k_y sono le componenti del vettore d'onda incidente, con angolo di incidenza ϕ ;
3. $q = \sqrt{\frac{(E - V_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2}$ è la componente x del vettore d'onda del fermione nella barriera;

4. $\tan \theta = \frac{k_y}{q}$ è l'angolo di rifrazione nella barriera;
5. a, b, r, t sono coefficienti complessi;
6. $\alpha_a = \text{sign}(E), \alpha_b = \text{sign}(E - V_0)$.

Imponendo le condizioni di continuità sulle due componenti ψ_1, ψ_2 troviamo che il coefficiente di riflessione r ha la forma:

$$r = 2ie^{i\phi} \sin(qD) \frac{\sin \phi - \alpha_a \alpha_b \sin \theta}{\alpha_a \alpha_b [e^{-iqD} \cos(\phi + \theta) + e^{iqD} \cos(\phi - \theta)] - 2i \sin(qD)}. \quad (1.17)$$

Nel limite di barriera alta, d'altra parte $q \rightarrow \frac{V_0}{\hbar v_F}, \theta \rightarrow 0$, e dunque si perde la dipendenza da E e da k_y . In questo limite la trasmittanza (probabilità di trasmissione attraverso la barriera) assume dunque la seguente espressione:

$$\begin{aligned} T = |t|^2 &= 1 - |r|^2 = 1 - \frac{\sin^2(qD) \sin^2 \phi}{\cos^2(qD) \cos^2 \phi + \sin^2(qD)} = \\ &= \frac{\cos^2 \phi}{1 - \cos^2(qD) \sin^2 \phi}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Notiamo che vi sono condizioni di risonanza per $qD = k\pi$ con $k \in \mathbb{Z}$, in cui la trasmittanza vale 1 per ogni angolo di incidenza. Dopo qualche passaggio ricaviamo che la condizione generale affinché il fermione sia permesso senza perdita è invece:

$$\phi = m\pi \vee qD = k\pi \quad k, m \in \mathbb{Z}. \quad (1.19)$$

Notiamo in particolare che per incidenza perfettamente normale ($\phi = 0$) la barriera è *sempre* trasparente, indipendentemente dall'altezza V_0 e dallo spessore D . In generale poi troviamo gli "angoli magici" $\phi = m\pi$ e regime di risonanza per qD intorno a $k\pi$, nel qual caso $T \approx 1$ per ogni angolo di incidenza.

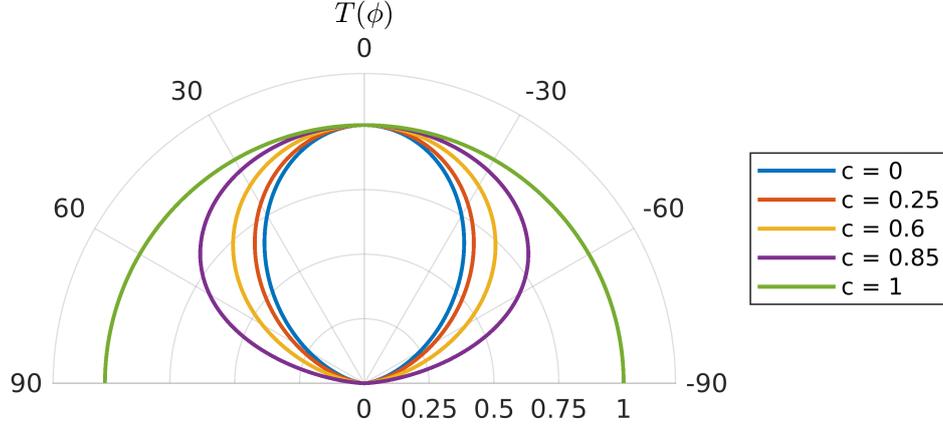


Figura 1.6: Trasmittanza di un elettrone da una barriera rettangolare nel limite di alta barriera come funzione dell'angolo incidente, variando il valore di $c = \cos^2(qD)$ tra 0 ed 1.

Questo risultato è in netto contrasto con il risultato semi-classico del tunneling attraverso una barriera. In questo approccio si trova infatti che la probabilità di attraversare la barriera decade esponenzialmente con lo spessore, e in particolare la trasmittanza vale:

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right), \quad (1.20)$$

con $x_{1,2}$ punti in cui la particella entra ed esce dalla barriera, $V(x_{1,2}) = E$. Chiaramente nel nostro infatti la trasmittanza oscilla con lo spessore D ma non decade. Per questo motivo il tunneling di Klein, ossia il tunneling di un fermione di Dirac senza massa, è anche detto **paradosso di Klein**.

Come si vede in figura 1.5, questo fenomeno può essere spiegato in termini di pseudospin. Infatti lo pseudospin può cambiare solo in processi che coinvolgono potenziali a corto raggio (supponiamo dunque $D \ll \frac{1}{k}$), che distinguono tra i siti dei due sottoreticoli. Nel nostro caso, dunque, un elettrone che si muove verso destra ed incide perpendicolarmente alla barriera può diventare solo un elettrone che si muove verso destra o una lacuna che si muove verso sinistra (lo stato deve appartenere allo stesso ramo del cono).

Tuttavia si trova che vi è una differenza qualitativa tra barriere rettangolari e *liscie* (di forma non rettangolare). Si perdono infatti le chiare caratteristiche del Klein tunneling nel caso generale, in quanto il comportamento del tunneling (riflessione e trasmissione) dipende più fortemente dalla differenza tra l'energia della particella e l'altezza della barriera e dall'angolo di incidenza.

1.2.3 Verifiche Sperimentali

Il fenomeno del Klein Tunneling è uno tra i più caratteristici di fermioni di Dirac senza massa e dunque l'evidenza per questo è una forte conferma delle nostre predizioni.

Consideriamo come esempio un esperimento del 2009 su dispositivi con giunzioni $p-n$ di grafene [4]. Se la concentrazione di portatori tra una regione e l'altra è sufficientemente alta e varia spazialmente con un'inclinazione grande, allora la giunzione corrisponde ad uno step di potenziale (barriera infinita) e il disordine è trascurabile. I dispositivi utilizzati sono analoghi ai FET, come si vede in figura 1.7, in cui compaiono due giunzioni $p-n$.

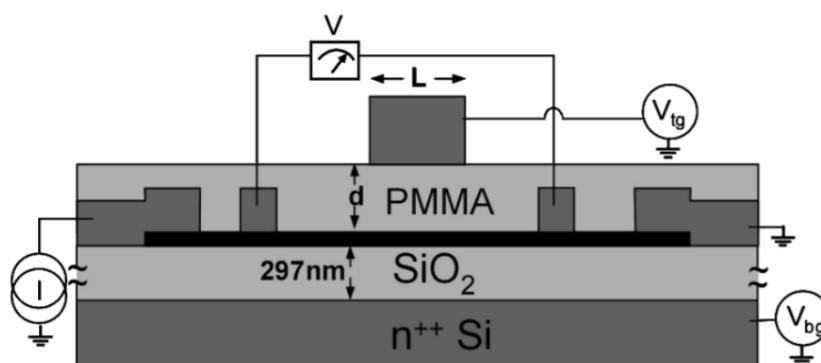


Figura 1.7: Schema qualitativo dei dispositivi usati per trovare evidenza del Klein Tunneling del grafene (da [4]).

Se vi è perfetta trasmissione, allora ci aspettiamo che la resistenza totale coincida con la somma delle resistenze delle due interfacce $p-n$, ossia considerate in serie. Detto η il rapporto adimensionale tra tali quantità, i valori misurati di η per i sei dispositivi considerati sono riportati nel grafico 1.8 come funzione della lunghezza del top gate L . Notiamo dunque che vi è un buon accordo con la teoria per cinque dei dispositivi, mentre per il sesto il rapporto è molto distante ed ha una grande incertezza. Modelli più generali prevedono che questa discrepanza sia in realtà dovuta al fatto che questo dispositivo si trova nel regime intermedio tra trasporto balistico e diffusivo della corrente.

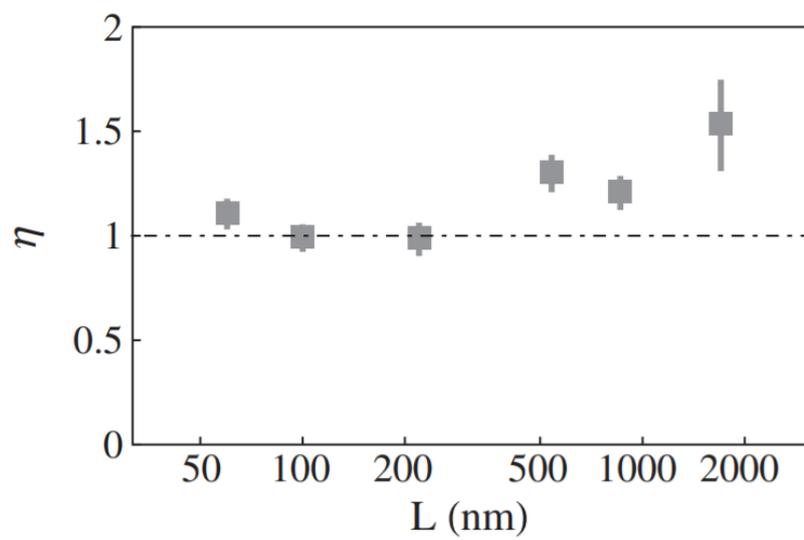


Figura 1.8: Valori di η misurati (e relative incertezze) in funzione dei valori di L dei dispositivi considerati.

Capitolo 2

Isolanti Topologici

In questo capitolo descriviamo qualitativamente l'Effetto Hall Quantistico per materiali 2D e come questo ha suggerito l'esistenza di materiali che manifestano proprietà caratteristiche in assenza di campo magnetico esterno. Seguendo il lavoro di Kane e Mele, elaboriamo un semplice modello per il grafene introducendo l'interazione di spin-orbita e il termine di Rashba di violazione della parità, che inducono un gap nel bulk. Applicando l'argomento di Laughlin troviamo che questo sistema deve ammettere stati di conduzione di edge, i quali sono protetti da backscattering dovuto al disordine, grazie alla simmetria di time-reversal. Accenniamo infine alla distinzione tra isolanti topologici e ordinari tramite un indice \mathbb{Z}_2 e all'esistenza di isolanti topologici tridimensionali.

2.1 Effetto Hall Quantistico e Idea degli Isolanti Topologici

Sebbene già negli anni '80 fossero stati introdotti alcuni esempi di isolanti topologici, la classe degli isolanti topologici è un concetto che invece risale ad un articolo di Kane e Mele del 2005, a seguito della prima vera realizzazione sperimentale del grafene.

Un noto esempio di isolante topologico risale ad un articolo del 1985 [5]. In questo gli autori studiarono la giunzione tra due semiconduttori con struttura di banda invertita (la simmetria della banda di conduzione di uno corrisponde a quella della banda di valenza dell'altro e viceversa). All'interfaccia gli autori dimostrarono poi che si può formare uno spettro di Dirac senza gap, protetto da una simmetria di time-reversal.

Possiamo prevedere qualitativamente alcune fondamentali proprietà di un tale sistema con un semplice ragionamento semi-classico. Se applichiamo un campo

magnetico esterno perpendicolare al piano, allora, sotto effetto della forza di Lorentz, gli elettroni di bulk si muovono in orbite *circolari* (che corrispondono ad orbitali di Landau), risultando nella formazione di bande e gap grazie al tunneling tra gli orbitali. Avvicinandosi al bordo gli elettroni non riescono a completare le traiettorie e vengono riflessi dalla superficie, così che queste orbite diventano invece di forma semi-circolare come in figura 2.1. In questo modo gli elettroni vengono riflessi dalla superficie e viaggiano in una sola direzione a seconda del verso del campo magnetico. Si formano dunque stati di edge di conduzione, nonostante gli stati di bulk siano isolanti.

Sotto opportune condizioni questi stati hanno spettro di Dirac e gli elettroni hanno massa efficace nulla. Questi stati sono protetti dal backscattering e dunque immuni al disordine, risultando in una corrente elettrica di edge balistica.

Contemporaneamente alla formazione degli stati di edge si osserva poi la formazione di livelli di Landau (le orbite di ciclotrone) nel bulk, e una conseguente quantizzazione della conduttanza trasversa (conduttanza di Hall).

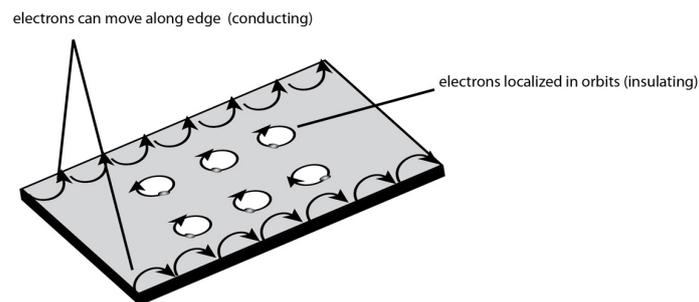


Figura 2.1: Schematizzazione delle Orbite Elettroniche nel QHE

Questo effetto si manifesta in generale nei materiali 2D applicando un forte campo magnetico e portando il sistema a basse temperature. Per analogia al caso classico prende il nome di **Effetto Hall Quantistico** (*Quantum Hall Effect* - QHE). Un tipico esempio di sistema in cui si manifesta il QHE è l'interfaccia tra due semiconduttori come GaAs/AlGaAs, tipicamente con un forte drogaggio a δ , dove gli elettroni hanno alta mobilità.

Basandosi sul QHE in materiali 2D, fu proposto che l'esistenza di stati di edge e le proprietà topologiche potessero essere spiegate anche in assenza di campo magnetico esterno. Si ipotizzò infatti che, attraverso l'introduzione di un termine di interazione spin-orbita, un campo magnetico *interno* (dovuto a effetti relativistici) potesse risultare in un simile fenomeno. La conseguente classe di materiali

(bidimensionali) proposta prese poi il nome di **isolanti topologici**. Come previsto questi materiali presentano all'edge fermioni di Dirac senza massa, invece che nel bulk come nel caso del grafene in approssimazione tight-binding.

La quantizzazione della conduttanza e la formazione di stati di edge protetti dal backscattering senza massa nell'QHE sono due proprietà strettamente legate e infatti non si possono osservare separatamente. La proprietà per cui stati di edge e di bulk sono legati prende il nome di **corrispondenza bulk-edge**, ed ha validità per diverse classe di materiali, tra cui quella degli isolanti topologici.

2.2 Grafene come Isolante Topologico

Per capire le caratteristiche e proprietà degli isolanti topologici è conveniente elaborare un *toy model* basato sul grafene, come quello di Kane e Mele.

2.2.1 Formazione del Gap

In questo caso intervengono anche gli altri gradi di libertà e dunque dobbiamo considerare l'hamiltoniana come blocchi 8×8 al variare di \vec{k} in intorno di 0. Siccome gli elettroni sono confinati ad un piano, allora il momento angolare è diretto lungo z e in particolare la perturbazione assume la forma:

$$\hat{\mathcal{H}}_{SO} = \Delta_{SO} \sigma_z \tau_z s_z, \quad (2.1)$$

dove σ_z, τ_z, s_z coincidono con la matrice di Pauli σ_3 ma agiscono su gradi di libertà diversi: σ_z sui sottoreticoli A, B ; τ_z ai due vertici in K, K' ; s_z sullo spin degli elettroni.

Tipicamente si assume Δ_{SO} costante, che nel caso del grafene si stima avere valore dell'ordine di 2.5meV. Questo significa che in realtà l'interazione spin-orbita è molto piccola, come ci potevamo aspettare dal fatto che il carbonio è un elemento leggero. Per il germanene invece ($Z = 32$) l'interazione spin-orbita è molto più significativa e si stima $\Delta_{SO} = 20\text{meV}$.

Questa interazione conserva sia la parità che il time-reversal, ma introduce un gap tra la banda di valenza e di conduzione. L'hamiltoniana completa prende infatti la forma:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}(\vec{k}) &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{SO} = \hbar v_F (\sigma_x \tau_z k_x + \sigma_y k_y) + \Delta_{SO} \sigma_z \tau_z s_z = \\ &= (\hbar v_F \tau_z k_x) \sigma_x + (\hbar v_F k_y) \sigma_y + (\Delta_{SO} \tau_z s_z) \sigma_y, \end{aligned} \quad (2.2)$$

dove è sottinteso che $\hat{\mathcal{H}}_0$ agisce come l'identità sullo stato di spin. Siccome $s_z = \pm 1$ e $\tau_z = \pm 1$, allora su ciascuno degli autostati l'hamiltoniana si riduce ad una matrice 2×2 i cui coefficienti cambiano di segno. Per le proprietà delle matrici

di Pauli gli autovalori di una matrice data dalla combinazione lineare delle matrici di Pauli sono dati da:

$$\begin{aligned} E(\vec{\mathbf{k}}) &= \pm \sqrt{(\hbar v_F k_x)^2 + (\hbar v_F k_y)^2 + \Delta_{SO}^2} = \\ &= \pm \sqrt{(\hbar v_F)^2 (k_x^2 + k_y^2) + \Delta_{SO}^2}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

e dunque non dipendono dallo spin e dal vertice K, K' , come già ci aspettavamo. Come accennato si forma un gap di $2\Delta_{SO}$.

Si trova poi che se la simmetria rispetto al piano del grafene è rotta, ad esempio da un campo elettrico esterno perpendicolare al piano o tramite interazione con il sottostrato (il materiale 3D su cui si trova il TI), è necessario tenere conto anche del cosiddetto termine di Rashba:

$$\hat{\mathcal{H}}_R = \lambda_R (\sigma_x \tau_z s_y - \sigma_y s_z). \quad (2.4)$$

Con questo contributo il gap diventa invece $E_g = 2(\Delta_{SO} - \lambda_R)$ e in particolare si annulla per $\lambda_R \geq \Delta_{SO}$, ma è tipicamente piccolo e dunque risulta solo in una riduzione del gap.

Siccome il termine di interazione spin-orbita è del tipo $\hat{\mathcal{H}}_{SO} \propto \tau_z$, allora il gap ha segno diverso tra i due vertici K, K' . Questo significa che per connettere in maniera continua i due stati si deve attraversare un punto in cui non vi è gap, ossia un punto critico in cui vi è una transizione di fase *topologica*.

2.2.2 Stati di Edge

Possiamo ora usare l'argomento di Laughlin [7] per ricavare l'esistenza di stati di edge senza gap con spettro di Dirac, fintanto che il bulk ammette un gap (caso $\lambda_R = 0$, in cui s_z è conservato). Ci poniamo nell'ipotesi che la geometria del grafene sia quella di uno strip con estremi collegati, ossia un cilindro di altezza finita e raggio molto maggiore di $\hbar v_F / \Delta_{SO}$. La scelta della geometria a strip non limita la validità dell'argomento in quanto se il cilindro è sufficientemente grande, allora l'unico effetto è quello di stabilire condizioni al bordo periodiche, che già assumiamo ordinariamente per i reticoli cristallini di un materiale 2D.

Inseriamo adiabaticamente un quanto di flusso magnetico $\phi = h/e$ attraverso il cilindro, ossia la quantità di flusso magnetico trasportata da un singolo elettrone. Grazie alla legge di Faraday questo risulta in un campo elettrico azimutale, tangente al cilindro, che causa una corrente di spin in cui è stato trasportato un quanto di spin \hbar da un punto all'altro del cilindro. A causa del gap di $2\Delta_{SO}$ un elettrone di bulk non può essere eccitato dal cambiamento adiabatico di un quanto di flusso magnetico, e dunque non permette conduzione. L'unica possibilità è che

esistano stati di edge senza gap con spettro lineare, ossia l'edge ammette come stati di conduzione dei fermioni di Dirac senza massa, come ci aspettavamo.

Il pieno argomento di Laughlin è in realtà più generale e permette di dedurre anche la quantizzazione della conduttanza trasversa nel QHE.

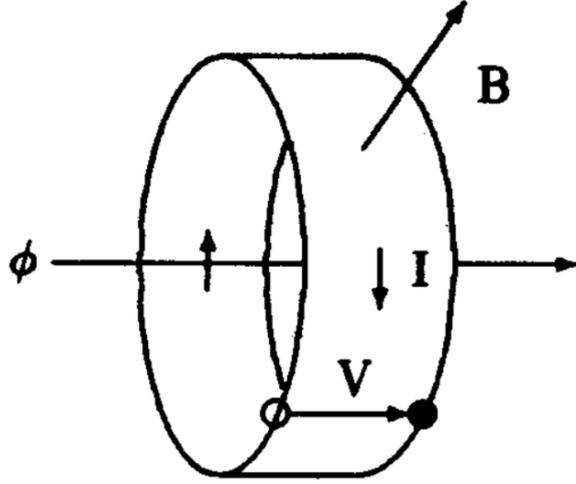


Figura 2.2: Illustrazione dell'Esperimento Mentale di Laughlin per l'esistenza di stati di edge (dalla Nobel Lecture di Laughlin [6])

Siccome l'interazione spin-orbita è invariante rispetto a time-reversal, allora gli elettroni che si muovono verso sinistra devono avere spin down, mentre quelli che si muovono verso destra devono avere spin up. Questi stati sono infatti un doppietto di Kramer, e la degenerazione esiste in presenza di ogni perturbazione che non rompe la simmetria di time-reversal.

Sempre per la simmetria di TR poi gli stati sono immuni al disordine e non possono subire backscattering in questo processo. Siccome spin e direzione del moto sono legati, allora ogni stato avrà due componenti $\phi_{L\uparrow}, \phi_{R\downarrow}$. Detto Φ_{in} lo stato incidente su una regione di disordine e Φ_{out} lo stato uscente, allora in generale questi sono legati da una matrice unitaria di scattering 2×2 S :

$$\Phi_{out} = S\Phi_{in}. \quad (2.5)$$

Si può dimostrare [7] che per un sistema a spin 1/2 come quello considerato, la trasformazione di time-reversal in questo caso prende la forma $\Theta = i\sigma_2 K$, con K operatore di coniugazione. Pertanto applicando la trasformazione di time-reversal al processo di scattering troviamo:

$$\Phi_{in,out} \rightarrow s_y \Phi_{out,in}^*. \quad (2.6)$$

La condizione che la simmetria di time-reversal sia rispettata anche nello scattering coincide con la condizione che la matrice S non abbia elementi fuori diagonale:

$$[S, \Theta] = 0 \Rightarrow S = s_y S^T s_y. \quad (2.7)$$

Questo significa che la matrice S non può mischiare le componenti $L \uparrow, D \downarrow$, ossia il disordine non causa backscattering di questi stati di edge, e conferma che i fermioni di Dirac all'edge degli isolanti topologici sono responsabili di un trasporto balistico della corrente.

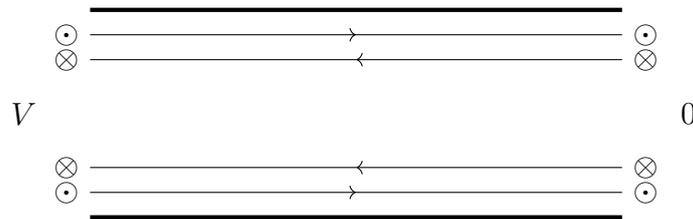


Figura 2.3: Schema delle Correnti di Edge dovute ad una differenza di potenziale applicata ad un TI con geometria a strip

Una conseguenza importante del fatto che gli stati di edge non sono influenzati dal disordine è che continuano ad esistere anche in assenza di simmetria traslazionale, ossia sono permessi grazie alla simmetria di time-reversal.

Notiamo adesso come l'argomento di Laughlin continui a valere anche per isolanti di banda ordinari, implicando anche in tal caso stati di conduzione di edge se anche questi hanno simmetria di time-reversal. Per trovare la differenza dobbiamo studiare il numero totale di stati di edge, che formano coppie di Kramer per l'invarianza sotto TR. Se il numero totale di coppie di Kramer è pari, allora è possibile anche backscattering elastico per questi stati, che risulta in una localizzazione degli stati come conseguenza del disordine e dunque non permette la conduzione alla superficie. La distinzione sostanziale tra isolanti topologici e isolanti ordinari è dunque il numero di coppie di Kramer all'edge.

In realtà, siccome siamo interessati alla parità di questo numero possiamo caratterizzare isolanti topologici e ordinari tramite un intero modulo-2, ossia 0, 1. Questo numero, cosiddetto indice \mathbb{Z}_2 , è dunque un **invariante topologico**, in quanto non può variare a meno di cambiare la topologia di un isolante (ossia chiudere il gap). Inoltre può essere calcolato esplicitamente attraverso un integrale di linea sulla Brillouin Zone, come fatto da Kane e Mele in [8]. Questo ci permette di prevedere se un isolante 2D è topologico o meno attraverso dei calcoli numerici che fanno uso dell'espressione esplicita degli autovettori corrispondenti a bande occupate.

Sebbene l'argomento di Laughlin non valga più per materiali 3D, sono stati predetti e trovati sperimentalmente anche isolanti topologici tridimensionali nel 2007, in maniera analoga a quanto descritto in [5]. In questo caso il bulk 3D ammette un gap ma presenta degli stati di superficie protetti da time-reversal e immuni al backscattering da disordine con spettro lineare di Dirac. Questo è analogo al grafene, che ammette stati di conduzione con spettro lineare ma giace sulla superficie di un materiale 3D isolante. Inoltre gli isolanti tridimensionali non sono più caratterizzati da un singolo indice \mathbb{Z}_2 , ma bensì da quattro indici \mathbb{Z}_2 che distinguono tra un isolante ordinario, un isolante topologico "debole" e un isolante topologico "forte" [9].

Capitolo 3

Semimetalli di Weyl

Consideriamo in questo terzo capitolo come alcune proprietà del grafene si estendono naturalmente al caso di materiali tridimensionali. Nella prima sezione vediamo come la sola simmetria traslazionale è responsabile dei fermioni di Weyl nel bulk. Descriviamo poi le proprietà topologiche conseguenti, e in particolare la formazione di archi di Fermi alla superficie e l'anomalia chirale in risposta a campi elettrici e magnetici paralleli. Proponiamo evidenza sperimentale per l'anomalia chirale e dunque l'esistenza di fermioni di Weyl nei solidi. Studiamo infine il tunneling attraverso una barriera di potenziale, verificando che il risultato si riduce a quello del grafene, e facciamo alcune analogie con l'ottica, accennando alle possibili applicazioni.

3.1 Fermioni di Weyl

Consideriamo adesso la più generale hamiltoniana per una struttura a due bande non degeneri, senza tenere conto dello spin. Questa corrisponde nello spazio dei momenti ad una matrice 2×2 , e può essere scritta come combinazione lineare delle matrici di Pauli (inclusa l'identità):

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{\mathbf{k}}) = f(\vec{\mathbf{k}})\mathbb{1}_2 + \sum_{j=1}^3 g_j(\vec{\mathbf{k}})\sigma_j, \quad (3.1)$$

da cui la relazione di dispersione delle due bande:

$$E_{\pm} = f(\vec{\mathbf{k}}) \pm \sqrt{\sum_{j=1}^3 g_j^2(\vec{\mathbf{k}})}. \quad (3.2)$$

I punti di contatto delle due bande coincidono dunque con i punti per cui le funzioni $g_j(\vec{\mathbf{k}})$ si annullano contemporaneamente per qualche $\vec{\mathbf{k}}_0$:

$$g_j(\vec{\mathbf{k}}_0) = 0, \quad j = 1, 2, 3. \quad (3.3)$$

Questo equivale a richiedere che le superfici che descrivono i grafici di due g_j si intersechino lungo delle linee, e a loro volta queste linee intersechino la rimanente superficie in qualche punto. In generale ci aspettiamo che questo sia possibile anche tramite la sola simmetria di traslazione.

L'hamiltoniana linearizzata rispetto a $\vec{\mathbf{k}}$ intorno a questi punti assume la forma generale:

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{\mathbf{k}}) = E_{\vec{\mathbf{k}}_0} + \hbar\vec{v}_0 \cdot (\vec{\mathbf{k}} - \vec{\mathbf{k}}_0)\mathbb{1}_2 + \sum_{j=1}^3 \hbar\vec{v}_j \cdot (\vec{\mathbf{k}} - \vec{\mathbf{k}}_0)\sigma_j. \quad (3.4)$$

Nel caso di interesse, $E_{\vec{\mathbf{k}}_0}$ coincide con l'energia di Fermi e i punti in cui si intersecano le bande sono in coppie. Per comodità poi ci limitiamo ai casi con $\vec{v}_0 = 0$ e le velocità \vec{v}_j sono dirette lungo gli assi con uguale modulo v_F . Pertanto intorno ad una coppia di punti $\vec{\mathbf{k}}_{\pm}$, traslando l'origine degli assi del momento e dell'energia troviamo la seguente coppia di hamiltoniane con spettro lineare (il simbolo \pm nello spettro non è legato a quale nodo consideriamo):

$$\hat{\mathcal{H}}_{\pm} = \pm\hbar v_F \vec{\mathbf{k}} \cdot \vec{\sigma}, \quad E(\vec{\mathbf{k}}) = \pm\hbar v_F |\vec{\mathbf{k}}|. \quad (3.5)$$

Questa è l'hamiltoniana per un fermione di Dirac 3D senza massa, nella rappresentazione di Weyl. Una tale particella è anche detta **fermione di Weyl** e i materiali in cui si presenta sono detti **semimetalli di Weyl**. Un punto $\vec{\mathbf{k}}_{\pm}$ è poi anche detto nodo di Weyl.

Inizialmente l'equazione di Weyl era stata pensata per descrivere particelle fondamentali senza massa, con particolare attenzione ai neutrini. La scoperta della massa dei neutrini ha eliminato questa possibilità, indicando che non esistono fermioni di Weyl nel modello standard. Grazie ai semimetalli di Weyl l'equazione ha trovato nuova applicazione nella descrizione di quasi-particelle nei materiali e rinnovato interesse teorico.

L'esistenza dei fermioni di Weyl nel bulk è legata alla sola simmetria traslazionale. Questo significa anche che le proprietà topologiche dei semimetalli di Weyl sono più sensibili al disordine, che tendono a rompere la simmetria traslazionale, a differenza degli isolanti topologici dove questa ipotesi non è in realtà necessaria. Nonostante ciò il disordine è raramente sufficientemente forte da *distruggere*

i nodi e la loro separazione, così che in generale le proprietà topologiche dei semimetalli di Weyl sono più stabili degli isolanti topologici, che richiedono invece simmetrie aggiuntive come time-reversal e parità.

3.2 Proprietà Topologiche

Notiamo adesso come le hamiltoniane $\hat{\mathcal{H}}_{\pm}$ descrivano fermioni a chiralità opposta \pm . Questo significa che la chiralità totale del sistema è nulla, una proprietà che ha validità generale e implica che il numero totale di nodi di Weyl deve essere pari. Questo risultato viene formalizzato nel **teorema di Nielsen-Ninomiya**. Tale teorema afferma che nell'ipotesi di simmetria traslazionale (e altre restrizioni più deboli) è impossibile costruire un modello per un cristallo in cui il numero di fermioni di Dirac senza massa con chiralità positiva è diverso da quelli con chiralità negativa.

Equivalentemente, detta *carica chirale* la chiralità di una particella, il teorema di Nielsen-Ninomiya afferma che la carica chirale totale è nulla $N_+ - N_- = 0$.

Il teorema ha come conseguenza che un nodo di Weyl può scomparire solo nell'annichilazione con un altro nodo di Weyl di chiralità opposta. Pertanto non possono scomparire introducendo un gap di massa (come quello dell'interazione spin-orbita), come visto invece nel modello di Kane e Mele per il grafene come isolante topologico. Questo significa che effettivamente questi nodi sono alla base delle proprietà topologiche dei semimetalli di Weyl e implica una certa stabilità nell'esistenza dei fermioni di Weyl al loro interno.

3.2.1 Archi di Fermi

Una delle conseguenze dei nodi di Weyl si ha negli stati di superficie dei semimetalli. Se vi è una sola coppia di nodi di Weyl allora la superficie di Fermi del materiale si riduce a due punti. Gli stati di superficie sono ben definiti ad energia uguale a quella di Fermi e per momento distinto dal momento corrispondente ai due nodi. Possiamo dunque considerare nella Brillouin Zone della superficie una curva chiusa $\vec{k}(\lambda)$ (con λ un certo parametro) che circonda la proiezione di un solo nodo di Weyl. Si può dimostrare che esiste ed è unico un λ_0 tale che lo stato corrispondente a $\vec{k}(\lambda_0)$ ha energia pari all'energia di Fermi. Siccome questo è valido per ogni curva, allora i punti ad energia pari a quella di Fermi formano una curva che ha per estremi i due nodi di Weyl. Siccome tale curva non è chiusa, allora è detta **Arco di Fermi** (*Fermi Arc*) ed è la *superficie* (curva) di Fermi della superficie del semimetallo. Un arco di Fermi si manifesta solo alla superficie di sistemi 3D, in quanto per un sistema effettivamente 2D sarà necessariamente una curva chiusa. Questa proprietà è dovuta esclusivamente alla topologia delle bande

e ci aspettiamo essere conseguenza della corrispondenza bulk-edge estesa al caso dei semimetalli di Weyl.

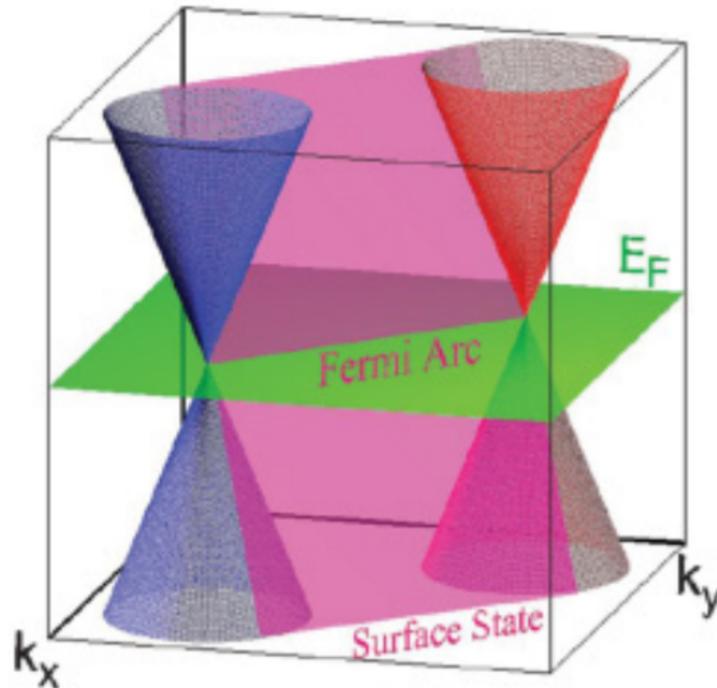


Figura 3.1: Schema dell'Arco di Fermi nella Brillouin Zone della Superficie (da [10]), nel caso particolare di un segmento

Sia ad esempio una lastra di semimetallo di Weyl parallela al piano xy , così che possiamo parlare degli stati con momento definito in questo piano. Se proiettiamo sulle due superfici della lastra troviamo due archi di Fermi con gli stessi estremi, così che il sistema si comporta effettivamente come un sistema 2D con una superficie (curva) di Fermi chiusa. Aumentando lo spessore della lastra questi archi si allontanano, permettendo di verificare quali materiali sono candidati ad essere semimetalli di Weyl tramite tecniche di *probing* degli stati di superficie. Una delle tecniche più comuni è ARPES (*Angle Resolved PhotoEmission Spectroscopy*). Questa è basata sull'effetto fotoelettrico, per il quale un fotone sufficientemente energetico incidente sulla superficie del materiale può risultare nell'emissione di un elettrone. La misura del momento e dell'energia di emissione al variare dell'angolo di incidenza permette di conoscere la struttura a bande e in particolare la superficie di Fermi (nel nostro caso un arco).

3.2.2 Anomalia Chirale

Un'altra conseguenza della topologia dei nodi di Weyl sta nella risposta del materiale all'applicazione di un campo elettrico e magnetico. Si trova infatti che per opportuni campi elettromagnetici la carica chirale può variare nel tempo. Parliamo dunque di **Anomalia Chirale** in presenza di campi elettromagnetici, in quanto la presenza dei campi rompe la simmetria chirale ordinariamente presente. In fisica delle particelle l'anomalia nella carica chirale totale prende il nome di anomalia di Adler-Bell-Jackiw.

Per ricavare come varia la carica chirale consideriamo l'esempio di un campo magnetico e un campo elettrico uniformi, paralleli e diretti lungo l'asse z . Usiamo le unità gaussiane, particolarmente semplici per trattare i campi elettromagnetici. Possiamo metterci nella gauge seguente:

$$\begin{cases} \phi = 0 \\ \vec{\mathbf{A}} = (-By, 0, A_z(t)) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \vec{\mathbf{B}} = \nabla \times \vec{\mathbf{A}} = (0, 0, B) \\ \vec{\mathbf{E}} = (0, 0, -\frac{1}{c} \frac{dA_z}{dt}). \end{cases} \quad (3.6)$$

Tramite sostituzione minimale l'hamiltoniana nei due nodi diventa:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\pm} = \pm v_F \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}}_{\pm} = \pm v_F \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \vec{\mathbf{A}} \right) \propto \pm \vec{\sigma} \cdot (\vec{\mathbf{p}}c - e\vec{\mathbf{A}}). \quad (3.7)$$

Se $A_z(t)$ varia lentamente, allora per il Teorema Adiabatico autovalori ed autostati coincidono con quelli ottenuti usando il valore istantaneo di $A_z(t)$. Lo spettro si trova essere lo stesso di quello di fermioni di Dirac massivi in 2D immersi in un campo magnetico perpendicolare al piano con massa $\hbar k_z c - eA_z(t)$:

$$E_{n,\pm}(k_z) = \pm \sqrt{(\hbar k_z c - eA_z(t))^2 + n\Omega_c^2}, \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, \quad (3.8)$$

con $l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$, $\Omega_c = \sqrt{2} \frac{\hbar c}{l_B} = \sqrt{2\hbar c e B}$. Assumendo che la cella macroscopica del semimetallo sia cubica con lato L per semplicità, allora la degenerazione è pari a $g = L^2 / (2\pi l_B)^2$. Inoltre k_z è un multiplo intero di $2\pi/L$ per le condizioni al bordo periodiche.

Se $A_z(0) = 0$, allora aumentando adiabaticamente A_z fino a $\hbar c/eL$ gli stati di singola particella non variano, anche se aumenta la loro energia. All'istante in cui A_z raggiunge il valore $\delta A_z = \hbar c/eL$ possiamo fare una trasformazione di gauge ad una che soddisfa ancora le condizioni al bordo e rimuove A_z dall'hamiltoniana, lasciando un fattore di fase negli autovettori. L'unico effetto è dunque quello di aver cambiato l'energia dei due nodi. In particolare l'energia nel nodo a chiralità positiva è aumentata e quella del nodo a chiralità negativa è diminuita di $\hbar c/L$, così che l'occupazione del primo diminuisce di uno e l'occupazione del secondo

aumenta di uno. Siccome i livelli di Landau hanno tutti una certa degenerazione g , allora le variazioni nei numeri di fermioni ai due nodi sono $\delta N_+ = -g, \delta N_- = g$. Questo è possibile in generale assumendo il modello continuo, in cui vi sono infiniti stati ad energia negativa (il "mare di Fermi").

La differenza tra il numero di stati a chiralità positiva e negativa (carica chirale totale, inizialmente nulla) è stata dunque variata di due volte il numero di occupazione del singolo livello di Landau. Questa quantità è proporzionale alla variazione della componente z del potenziale vettore:

$$\delta N_+ - \delta N_- = -2g = -2 \frac{L^2}{2\pi l_B^2} = -2 \frac{L^2}{2\pi l_B^2} \frac{eL}{\hbar c} \delta A_z. \quad (3.9)$$

Esplicitando rispetto al campo elettrico e magnetico troviamo:

$$\begin{aligned} \delta N_+ - \delta N_- &= -2 \frac{L^2}{2\pi \hbar c} eB \frac{eL}{\hbar c} \delta A_z = \frac{1}{2\pi^2} \frac{e^2}{\hbar^2 c} L(EB) dt = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{e^2}{\hbar^2 c} dt \int d\vec{r}(EB). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Se siamo interessati ad una variazione non infinitesima e di direzione generica, troviamo la seguente espressione per la variazione della carica chirale totale sotto effetto del campo elettromagnetico:

$$\Delta N_+ - \Delta N_- = \frac{1}{2\pi^2} \frac{e^2}{\hbar^2 c} \int dt \int d\vec{r} \vec{E} \cdot \vec{B}. \quad (3.11)$$

Possiamo anche riscrivere questa in forma locale usando come variabili le densità di carica chirale n_{\pm} :

$$\frac{d(n_+ - n_-)}{dt} = \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar^2 c} \vec{E} \cdot \vec{B}. \quad (3.12)$$

A questo punto è naturale scrivere la coppia di equazioni di continuità "modificate" per le densità di carica e correnti elettriche relative ai fermioni con chiralità \pm (ossia vicine ai nodi di Weyl), notando che $\rho_{\pm} = -en_{\pm}$:

$$\frac{\partial \rho_{\pm}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_{\pm} = \mp \frac{1}{2\pi} \frac{e^3}{\hbar^2 c} \vec{E} \cdot \vec{B}. \quad (3.13)$$

Questo significa che l'applicazione di campi elettrici e magnetici paralleli permette di variare il numero di stati ad una certa chiralità, ossia l'eccitazione di stati vicino ai due nodi, e dunque indurre una corrente chirale. Questa forma di "polarizzazione" dei semimetalli di Weyl sembra essere alla base di nuovi fenomeni di trasporto e conseguenti applicazioni in dispositivi. Un fenomeno atteso di tale tipo è quello di una grande conduttanza di Hall anomala, proporzionale alla distanza tra i nodi di Weyl nello spazio dei momenti $\sigma_H \propto k_+ - k_-$.

3.2.3 Verifiche Sperimentali

Consideriamo adesso l'effetto anomalo di un campo magnetico sulla conduttività di un semimetallo di Weyl come conseguenza dell'anomalia chirale. Chiamiamo magnetoresistenza (MR) la tendenza di una materiale a variare la resistenza sotto effetto di un campo magnetico. Questa è quantificata dalla grandezza:

$$\text{MR} = \frac{R(B) - R(0)}{R(0)}, \quad (3.14)$$

dove $R(B)$ è la resistenza lungo una data direzione (relativa al campo elettrico applicato) quando il campo magnetico applicato vale B (in realtà dipende dall'intero vettore).

Ordinariamente la magnetoresistenza è positiva, ossia l'applicazione di un campo magnetico aumenta la resistenza (abbassa la conduttività). Tuttavia si trova che a causa dell'anomalia chirale la conduttività longitudinale aumenta (quella trasversale è invariata in quanto la corrente aggiuntiva dipende dal termine $\vec{E} \cdot \vec{B}$), risultando in un contributo di **magnetoresistenza negativa**.

Un esperimento del 2013 [11] conferma queste predizioni, osservando un abbassamento di MR all'interno di $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ (con $x \approx 3\%$, vicino al punto critico tra isolante ordinario e topologico) e addirittura valori negativi per la conduttività longitudinale per piccoli campi magnetici. Questo risultato non può essere giustificato da altri effetti quali disordine e l'intersezione di altre bande con il livello di Fermi, confermando la presenza dell'anomalia chirale e fermioni di Weyl nei materiali considerati.

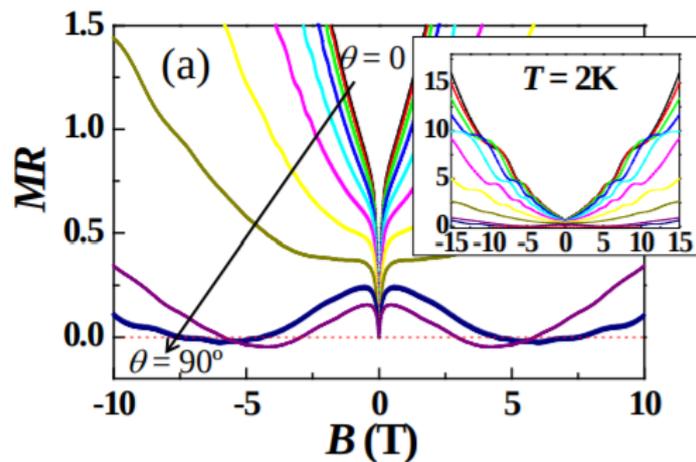


Figura 3.2: Dipendenza di MR dall'angolo θ al variare del campo magnetico applicato. La conduttività longitudinale corrisponde a $\theta = 90^\circ$ e quella trasversale a $\theta = 0^\circ$.

3.3 Klein Tunneling nei Semimetalli di Weyl

Consideriamo adesso il tunneling di un fermione di Weyl attraverso un potenziale a gradino, che possiamo immaginare essere ottenuto applicando un potenziale elettrico V_0 nella regione $0 < x < D$, oppure con regioni a diverso drogaggio, analogamente a quanto visto per il grafene. Una possibile realizzazione è ad esempio con tre strati alternati di NbAs, NbP, NbAs. Riducendo il risultato al piano ci aspettiamo di ritrovare la stessa espressione per la trasmittanza e dunque il fenomeno del Klein Tunneling (paradosso di Klein) con probabilità di trasmissioni che non diminuiscono esponenzialmente con la profondità della barriera.

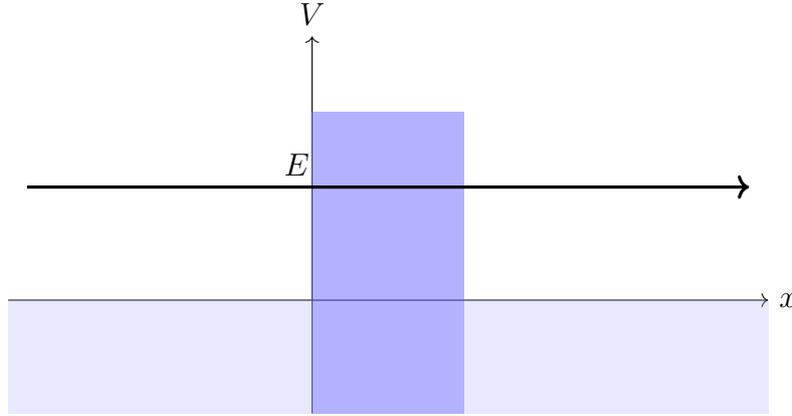


Figura 3.3: Schema dello scattering attraverso una barriera rettangolare in un Semimetallo di Weyl rispetto al potenziale.

3.3.1 Calcolo della Trasmittanza

Per trovare la trasmittanza dobbiamo prima trovare gli autovettori dell'hamiltoniana. Consideriamo il caso di un fermione di Weyl a chiralità positiva in una regione a potenziale costante V_0 :

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\mathbf{k}} + V_0 \mathbb{1}_2 \Rightarrow E(\vec{\mathbf{k}}) = V_0 \pm \hbar v_F |\vec{\mathbf{k}}|. \quad (3.15)$$

Da questo poi ponendo $V_0 = 0$ troviamo anche gli autovettori per la regione esterna alla barriera.

In maniera analoga al grafene (con la differenza che stavolta $\vec{\mathbf{k}}$ è un vettore tridimensionale) troviamo che gli autovettori sono della forma:

$$\psi = e^{i(qx+k_y y+k_z z)} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(qx+k_y y+k_z z)} \\ \alpha e^{i(qx+\theta+k_y y+k_z z)} \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

dove:

1. $q = \sqrt{\frac{(E-V_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2 - k_z^2}$ componente effettiva x del vettore d'onda del fermione nella regione considerata;
2. $\alpha = \frac{|E-V_0| \sin \phi}{(E-V_0) + |E-V_0| \cos \phi}$;
3. $\tan \theta = \frac{k_y}{q}$, $\tan \phi = \frac{k_z}{\sqrt{k_y^2 + q^2}}$.

Se incide un elettrone con chiralità positiva e vettore d'onda $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$, nelle tre regioni troviamo le seguenti autofunzioni:

$$\begin{aligned}
\psi_a &= e^{i(k_y y + k_z z)} \begin{pmatrix} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) \\ \alpha_a (e^{i(k_x x + \theta_a)} - r e^{-i(k_x x + \theta_a)}) \end{pmatrix}, \\
\psi_b &= e^{i(k_y y + k_z z)} \begin{pmatrix} a e^{iqx} + b e^{-iqx} \\ \alpha_b (a e^{i(qx + \theta_b)} + b e^{-i(qx + \theta_b)}) \end{pmatrix}, \\
\psi_c &= e^{i(k_y y + k_z z)} \begin{pmatrix} t e^{ik_x x} \\ \alpha_b t e^{i(k_x x + \theta_b)} \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{3.17}$$

con ψ_a, ψ_b, ψ_c le restrizioni della funzione d'onda alle regioni $x < 0, 0 < x < D, x > D$ rispettivamente, ed a, b, r, t certi coefficienti.

Imponendo le condizioni di raccordo $\psi_a = \psi_b, \psi_b = \psi_c$ alle due interfacce $x = 0, x = D$ troviamo le espressioni dei coefficienti di trasmissione e riflessione t, r e per i coefficienti a, b . Senza entrare nei dettagli del calcolo, l'espressione generale per la trasmittanza $T = |t|^2$ è data da:

$$\begin{aligned}
T &= \frac{4\alpha_a^2 \alpha_b^2 \cos^2(\theta_a) \cos^2(\theta_b)}{\beta_1 + \beta_2}, \\
\beta_1 &= 4\alpha_a^2 \alpha_b^2 \cos^2(qD) \cos^2(\theta_a) \cos^2(\theta_b), \\
\beta_2 &= \sin^2(qD) (\alpha_b^2 + \alpha_a^2 - 2\alpha_a \alpha_b \sin(\theta_a) \sin(\theta_b))^2.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Lungo un piano vale $k_z = 0 \Rightarrow \phi_a = \phi_b = \pi/2$, da cui per $0 < E < V_0$ risulta $\alpha_a = 1, \alpha_b = -1$. Inoltre nel limite di alta barriera recuperiamo $q \rightarrow \frac{V_0}{\hbar v_F}, \theta_b \rightarrow 0$ e dunque la trasmittanza si riduce a:

$$\begin{aligned}
T &= \frac{\cos^2(\theta_a) \cos^2(\theta_b)}{\cos^2(qD) \cos^2(\theta_a) \cos^2(\theta_b) + \sin^2(qD)} = \\
&= \frac{\cos^2(\theta_a)}{1 - \cos^2(qD) \sin^2(\theta_a)}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Ritroviamo dunque esattamente lo stesso risultato del tunneling di un elettrone attraverso una barriera rettangolare nel grafene (con $\phi \iff \theta_a$ angolo di incidenza). Questo, in particolare, implica nuovamente l'esistenza di "angoli magici" e la risonanza quando qD è vicino ad un multiplo intero di π .

3.3.2 Analogie con l'Optica

I fermioni di Weyl hanno una relazione di dispersione identica a quella dei fotoni e dunque risulta naturale fare dei paragoni (sia qualitativi che quantitativi) tra la trasmittanza di una particella e la trasmittanza di un'onda elettromagnetica.

Nel caso di un'onda elettromagnetica che si propaga con numero d'onda k incidente su una barriera con indice di rifrazione n (relativo tra i mezzi) e spessore D , la trasmittanza si trova essere:

$$\begin{aligned} T_{\text{ottica}} &= \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 \cos^2(qD) + (k^2 + q^2)^2 \sin^2(qD)} = m \\ &= \frac{4n^2}{(1 + n^2)^2 - (1 - n^2)^2 \cos^2(qD)}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

con $q = nk$ numero d'onda nel mezzo. Sebbene questa non dipenda dagli angoli di incidenza possiamo ancora parlare della condizione di risonanza:

$$qD = m\pi \Rightarrow T = 1. \quad (3.21)$$

che coincide con quella del Klein Tunneling.

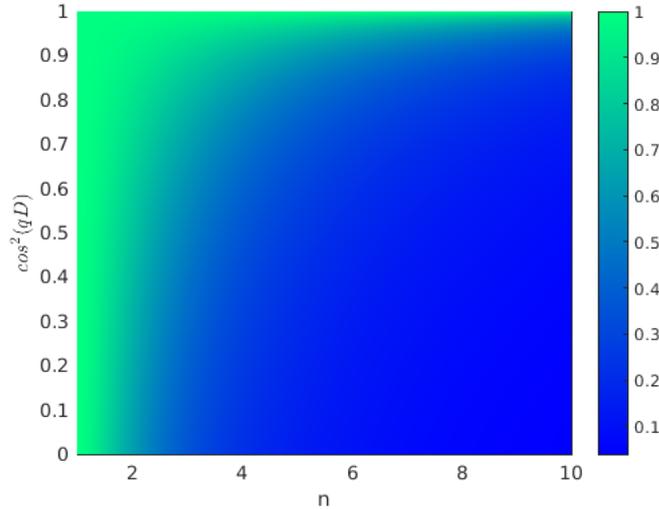


Figura 3.4: Density Plot della Trasmittanza di un'Onda Elettromagnetica come funzione dell'indice di rifrazione della barriera (che varia tra 1 e 10) e di $\cos^2(qD)$

In termini di energia la condizione di risonanza si scrive invece:

$$\begin{aligned} E_{\text{ottica}} &= \hbar kc = \frac{m\pi\hbar c}{nD}, \\ E_{\text{weyl}} &= V \pm \hbar v_F \sqrt{\frac{m^2\pi^2}{D^2} + k_y^2 + k_z^2}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Usando la relazione $n = q/k$ possiamo anche generalizzare la definizione di indice di rifrazione per un'onda elettromagnetica in un mezzo ai fermioni di Weyl attraverso un potenziale:

$$n_{\text{weyl}} = \frac{q}{k_x} = \sqrt{\frac{(E - V)^2 - \hbar^2 v_F^2 (k_y^2 + k_z^2)}{E^2 - \hbar^2 v_F^2 (k_y^2 + k_z^2)}}. \quad (3.23)$$

In realtà, siccome un elettrone incidente con $E < V$ corrisponde ad una lacuna che si propaga nella direzione opposta, l'indice di rifrazione va posto negativo:

$$n_{\text{weyl}} = -\sqrt{\frac{(E - V)^2 - \hbar^2 v_F^2 (k_y^2 + k_z^2)}{E^2 - \hbar^2 v_F^2 (k_y^2 + k_z^2)}}. \quad (3.24)$$

Ad esempio per $V = 0$ vale $n = -1$.

Analogamente possiamo definire la lunghezza d'onda del fermione come segue:

$$\lambda_{\text{weyl}} = \frac{2\pi}{q} = \frac{2\pi \hbar v_F}{\sqrt{(E - V)^2 - \hbar^2 v_F^2 (k_y^2 + k_z^2)}}. \quad (3.25)$$

Queste definizioni ci permettono di estendere risultati di ottica alla propagazione di portatori di carica nei semimetalli di Weyl - quali la legge di Snell, l'effetto Doppler, e altri. In particolare l'indice di rifrazione negativo rende alcuni di questi fenomeni "anomali" e permette la realizzazione di dispositivi peculiari. Un esempio è il Microscopio a effetto tunnel, con risoluzione teoricamente capace di identificare le nuvole elettroniche e perfino gli orbitali atomici [12].

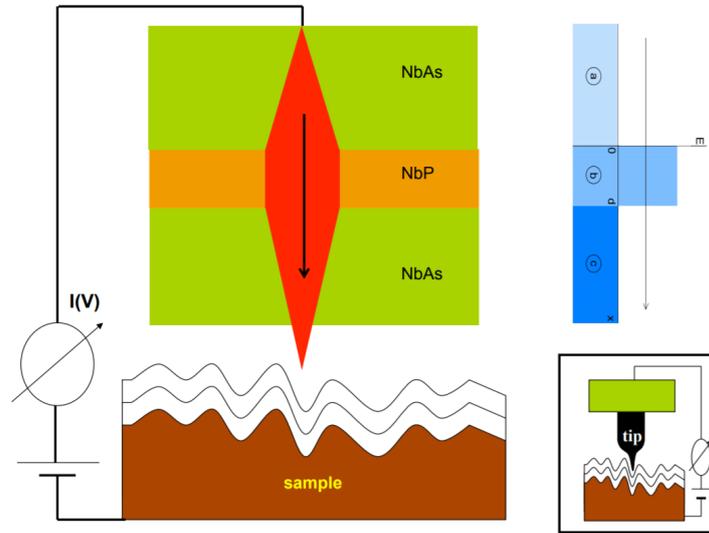


Figura 3.5: Schema di un Microscopio a effetto tunnel con *probing tip* formata da semimetalli di Weyl (da [12]). In rosso viene indicato il flusso di elettroni da una sorgente esterna attraverso il semimetallo; il flusso viene focalizzato dalla barriera in un punto del *sample* considerato.

Conclusioni

Lo scopo di questo lavoro è stato quello di descrivere alcuni dei fenomeni notevoli causati dalla presenza di fermioni di Dirac nei solidi, e i sistemi in cui questi si manifestano.

Nel primo capitolo abbiamo studiato un semplice modello del grafene e riassunto i risultati del modello di tight-binding con un solo termine di hopping al primo vicino. In particolare abbiamo verificato la presenza di coni di Dirac ai vertici della zona di Brillouin. Questo ci ha permesso di calcolare gli autovettori dell'hamiltoniana di Dirac effettiva nei vertici e applicato questo risultato per calcolare la trasmittanza attraverso una barriera di potenziale rettangolare. In questo caso abbiamo verificato la presenza del Klein Tunneling, che era stato predetto, per fermioni di Dirac senza massa, da Klein nel 1929, e in generale come effetto di meccanica quantistica relativistica. Questo fenomeno è caratterizzato da una probabilità di trasmissione che non decade esponenzialmente con la larghezza della barriera, ma ha valore non nullo anche per larghezza infinita e addirittura manifesta regimi di risonanza e "angoli magici" in cui vale 1.

Nel secondo capitolo abbiamo descritto qualitativamente l'Effetto Hall Quantistico quando si applicano forti campi magnetici a materiali 2D. In questo caso si formano stati all'edge protetti dal backscattering e che viaggiano in una sola direzione, e vi è quantizzazione della resistenza di Hall. Abbiamo usato il modello di Kane e Mele per il grafene come esempio per la classe degli isolanti topologici per studiare più in dettaglio le loro proprietà. Se aggiungiamo all'hamiltoniana il termine di interazione spin-orbita (e il termine di Rashba) osserviamo infatti la formazione di un gap. L'argomento di Laughlin ci permette di prevedere l'esistenza di stati di edge protetti da time-reversal, in cui la direzione del moto e dello spin sono legati tra loro. Questi stati di edge sono senza massa e grazie alla simmetria di time-reversal vi è assenza di backscattering come nel QHE, che permette conduzione balistica della corrente all'edge. Gli isolanti topologici e ordinari si distinguono per la parità del numero di coppie di Kramer all'edge, che definisce un invariante topologico che può essere calcolato per verificare se un materiale è un candidato ad isolante topologico.

Nel terzo capitolo abbiamo visto come si possono formare in un solido 3D

coppie di coni di Dirac con chiralità opposta, che ci permettono di definire la classe dei semimetalli di Weyl, come generalizzazione del grafene. Questa proprietà è legata alla sola simmetria traslazionale. Pertanto da un lato garantisce una maggiore stabilità delle proprietà topologiche rispetto ai TI, e dall'altro è più sensibile al disordine. La chiralità opposta dei nodi risulta ordinariamente in una carica chirale totale nulla nel semimetallo, come affermato dal teorema di Nielsen-Ninomiya. La formazione di questi nodi risulta in diverse proprietà topologiche, delle quali abbiamo discusse due. La prima è la presenza di Archi di Fermi sulla superficie, ossia la superficie di Fermi della superficie del solido è una curva aperta invece che chiusa, come accade ordinariamente per un sistema 2D. La seconda proprietà discussa è l'anomalia chirale in presenza di campi magnetici ed elettrici tra loro paralleli; in un semplice caso abbiamo ricavato l'equazione di evoluzione della carica chirale totale, che ha validità generale. L'analogia dei semimetalli di Weyl al grafene diventa apparente nel calcolo della trasmittanza di un fermione di Weyl attraverso una barriera di potenziale rettangolare, che in un piano si riduce proprio a quella del grafene. Il calcolo della trasmittanza ci ha permesso anche di porre analogie con l'ottica, dove la trasmittanza di un'onda elettromagnetica attraverso un materiale presenta lo stesso regime di risonanza. In questo modo abbiamo trovato che l'indice di rifrazione di un fermione di Weyl è negativo, risultando in fenomeni "anomali" con interessanti applicazioni.

I fermioni di Dirac nei solidi sono responsabili di una serie particolarmente ricca di fenomeni di trasporto con caratteristiche dissimili da quelle classiche, e quelli descritti sono solo alcuni tra i più importanti ed esotici. I materiali considerati sono poi soltanto una parte dei numerosi esempi e classi scoperti negli ultimi anni i cui stati di conduzione sono fermioni di Dirac (isolanti topologici 3D, semimetalli di Dirac, superconduttori, isolanti topologici di Anderson). I modelli usati per studiare questi materiali possono risultare insufficienti a descrivere la realizzazione sperimentale. Ad esempio un potenziale chimico distante dal punto di neutralità di carica risulta in effetti quali interazione elettrone-elettrone ed elettrone-fonone. I primi implicano l'esistenza di stati non coerenti, e dunque non è sufficiente il calcolo della trasmittanza di un'onda coerente attraverso una barriera di potenziale. I secondi risultano in un abbassamento della lunghezza di decadimento dei portatori di carica, così che il trasporto non è più balistico per campioni sufficientemente lunghi.

Queste considerazioni mostrano il limite dei modelli teorici considerati e suggeriscono punti di partenza per continuare lo studio di Fermioni di Dirac nei solidi.

Bibliografia

- [1] Kusmartsev Hills Brada. «From graphene and topological insulators to Weyl semimetals». In: *World Scientific Publishing* (2015). DOI: http://dx.doi.org/10.1142/9789814740371_0012.
- [2] Ashvin Vishwanath Oskar Vafek. «Dirac Fermions in Solids- from High Tc cuprates and Graphene to Topological Insulators and Weyl Semimetals.» In: *Annual Review of Condensed Matter Physics* 5 (2014), pp. 83–112. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031113-133841>.
- [3] Geim Katsnelson Novoselov. «Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene». In: *Nature Phys* 2 (2006), pp. 620–625. DOI: <https://doi.org/10.1038/nphys384>.
- [4] N. Stander, B. Huard e D. Goldhaber-Gordon. «Evidence for Klein Tunneling in Graphene $p-n$ Junctions». In: *Phys. Rev. Lett.* 102 (2 gen. 2009), p. 026807. DOI: [10.1103/PhysRevLett.102.026807](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.026807). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.026807>.
- [5] F. Kusmartsev e A. M. Tsvelik. «Semimetallic properties of a heterojunction». In: *Jetp Letters* 42 (1985).
- [6] R. B. Laughlin. «Nobel Lecture: Fractional quantization». In: *Rev. Mod. Phys.* 71 (4 lug. 1999), pp. 863–874. DOI: [10.1103/RevModPhys.71.863](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.71.863). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.71.863>.
- [7] C. L. Kane e E. J. Mele. «Quantum Spin Hall Effect in Graphene». In: *Phys. Rev. Lett.* 95 (22 2005), p. 226801. DOI: [10.1103/PhysRevLett.95.226801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.226801). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.226801>.
- [8] C. L. Kane e E. J. Mele. « Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect». In: *Phys. Rev. Lett.* 95 (14 set. 2005), p. 146802. DOI: [10.1103/PhysRevLett.95.146802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.146802). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.146802>.

- [9] Liang Fu e C. L. Kane. «Topological insulators with inversion symmetry». In: *Phys. Rev. B* 76 (4 lug. 2007), p. 045302. DOI: [10.1103/PhysRevB.76.045302](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.045302). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.045302>.
- [10] Xiangang Wan et al. «Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates». In: *Phys. Rev. B* 83 (20 mag. 2011), p. 205101. DOI: [10.1103/PhysRevB.83.205101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.205101). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.205101>.
- [11] Heon-Jung Kim et al. «Dirac versus Weyl Fermions in Topological Insulators: Adler-Bell-Jackiw Anomaly in Transport Phenomena». In: *Phys. Rev. Lett.* 111 (24 dic. 2013), p. 246603. DOI: [10.1103/PhysRevLett.111.246603](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.246603). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.246603>.
- [12] Kusmartsev1 Hills Kusmartseva. «Current-Voltage Characteristics of Weyl Semimetal Semiconducting Devices, Veselago Lenses and Hyperbolic Dirac Phase». In: *Phys. Rev. B* 95 (2017). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.214103>.