Письма в ЖЭТФ, том 105, вып. 12, с. 744 – 747

Фототоки в гиротропных полуметаллах Вейля

Л. Е. Голуб[+1)], Е. Л. Ивченко[+], Б. З. Спивак[*]

[+]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург

[*]Department of Physics, University of Washington, WA 98195, Seattle, USA

Поступила в редакцию 12 мая 2017 г.

Представлены результаты теоретического исследования фототоков в вейлевских полуметаллах, относящихся к гиротропным классам симметрии. Показано, что в слабогиротропных кристаллах симметрии C_{nv} ($n = 3, 4, 6$) циркулярный фототок, перпендикулярный направлению падения света, возникает лишь при учете в электронном эффективном гамильтониане линейных и квадратичных или кубических по квазиимпульсу спин-зависимых слагаемых, а также спин-независимого члена, приводящего к наклону конической дисперсии. Предсказан не зависящий от поляризации света магнитоиндуцированный фототок, который также возможен только в гиротропных системах. Для кристаллов симметрии C_{2v} рассмотрен микроскопический механизм фототока в квантующем магнитном поле, возникающего при прямых оптических переходах между основной и первой возбужденной магнитными подзонами. Показано, что фототок отличен от нуля при учете анизотропного наклона дисперсионных конусов.

DOI: 10.7868/S0370274X17120074

1. Введение. Отличительная черта симметрии гиротропного кристалла – наличие компонент полярного (**R**) и аксиального (**L**) векторов, которые преобразуются по эквивалентным представлениям точечной группы этого кристалла. Это свойство допускает эффекты, в которых физические величины R_α и L_β связаны псевдотензором второго ранга $C_{\alpha\beta}$ или инвариантная физическая величина I линейно связана с произведениями $R_\alpha L_\beta$. Наиболее известным из такого рода эффектов является естественная оптическая активность, или вращение плоскости поляризации света, распространяющегося в гиротропной среде. Этот эффект описывается линейными членами в разложении тензора диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\lambda\nu}(\omega, \mathbf{q})$ по степеням волнового вектора света $\mathbf{q}$: гиротропная поправка к вектору электрической индукции $\delta\mathbf{D}$ может быть представлена в виде векторного произведения $\mathrm{i}\,(\mathbf{E}\times\mathbf{g})$, где $\mathbf{E}$ – электрическое поле световой волны и $\mathbf{g}$ – вектор гирации, линейно связанный с вектором $\mathbf{q}$ [1]. Другой гиротропный эффект – возникновение электрического фототока $\mathbf{j}$, пропорционального векторному произведению $\mathrm{i}(\mathbf{E}\times\mathbf{E}^*)$ – получил название циркулярного фотогальванического эффекта (ЦФГЭ), был предсказан независимо в работах [2, 3] и обнаружен впервые на объемном кристалле теллура в [4] и на структуре с квантовой ямой GaAs/AlGaAs в [5, 6].

В теоретических работах [7–9] исследован ЦФГЭ в полуметаллах Вейля. Установлено, что вклад каждого узла Вейля в циркулярный фототок принимает универсальный вид [7]:

$$\mathbf{j} = \mathcal{C}\Gamma_0\tau_p\mathrm{i}(\mathbf{E}\times\mathbf{E}^*), \tag{1}$$

где $\Gamma_0 = \pi e^3/3h^2$, e – заряд электрона, h – постоянная Планка, $\mathcal{C} = \pm 1$ – киральность (или топологический заряд) этого узла, τ_p – время релаксации электрона по импульсу.

Универсальность формулы (1) означает, что, за исключением множителя τ_p, в нее входят численный множитель $\pi/3$ и мировые постоянные e и h. В работе [8] рассмотрена пара узлов Вейля с противоположными киральностями. Показано, что их вклады в циркулярный фототок не компенсируют друг друга, если в эффективном электронном гамильтониане учесть, помимо слагаемых $A_{\alpha\beta}\sigma_\alpha k_\beta$, наклонный член $\mathbf{a}\cdot\mathbf{k}$ с вектором $\mathbf{a}$, разным в разных узлах (σ_α – спиновые матрицы Паули, $\mathbf{k}$ – волновой вектор электрона, отсчитанный от узла $\mathbf{k}_W$). При этом выражение для фототока теряет универсальность. В работе [10] циркулярный фототок обнаружен в кристалле TaAs при возбуждении излучением CO_2-лазера.

В настоящей работе проанализировано, как наличие плоскости отражения в группе симметрии гиротропного кристалла сказывается на ЦФГЭ, и обсуждается влияние магнитного поля на фототоки в гиротропных полуметаллах Вейля. Особое внимание уделяется кристаллам симметрии C_{4v} и C_{2v}, так как

1)e-mail: golub@coherent.ioffe.ru

недавно было установлено, что среди полуметаллов Вейля такой симметрией обладают, соответственно, монопниктиды TaAs, NbP, NbAs [11–13] и теллурид вольфрама WTe_2 [14, 15]. Мы покажем, что микроскопически ЦФГЭ в вейлевском полуметалле типа TaAs возникает при учете в электронном эффективном гамильтониане не только линейных, но и кубических по волновому вектору электрона слагаемых.

2. Гиротропные кристаллы в отсутствие магнитного поля. Рассмотрим кристалл с эффективным электронным гамильтонианом вблизи точки $\mathbf{k}_W$:

$$\mathcal{H} = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + d_0(\mathbf{k})\sigma_0, \tag{2}$$

где σ_0 – единичная матрица размерности $2{\times}2$, $d_l(\mathbf{k})$ $(l = 0, x, y, z)$ – функции, в разложении которых по степеням $\mathbf{k}$ отсутствуют члены нулевого порядка. Собственные энергии этого гамильтониана принимают значения $E_{\pm,\mathbf{k}} = d_0(\mathbf{k}) \pm d(\mathbf{k})$, где $d(\mathbf{k}) = |\mathbf{d}(\mathbf{k})|$. Здесь и в дальнейшем энергия отсчитывается от энергии электрона в точке Вейля. Обычно для простоты в $d_0(\mathbf{k})$ учитываются только линейные члены: $d_0(\mathbf{k}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{k}$, где $\mathbf{a}$ – некоторый вектор. Это слагаемое описывает наклон (tilt) конуса Вейля.

При прямых оптических переходах в окрестности точки $\mathbf{k}_W$ генерируется фототок

$$\mathbf{j} = e \sum_{\mathbf{k}} \tau_p \frac{2}{\hbar} \frac{\partial d(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} W_{+-}(\mathbf{k}), \tag{3}$$

где введена скорость оптических переходов в единице объема в единицу времени

$$W_{+-} = \frac{2\pi}{\hbar} \left|M_{+-}\right|^2 F(\mathbf{k}) \delta(2d - \hbar\omega), \tag{4}$$

M_{+-} – матричный элемент оптического перехода, не зависящий от $d_0(\mathbf{k})$,

$$F(\mathbf{k}) = f\left(E_{-,\mathbf{k}}\right) - f(E_{+,\mathbf{k}}), \tag{5}$$

$f\left(E\right)$ – равновесная функция распределения Ферми–Дирака. Множитель 2 в формуле (3) учитывает вклады в ток фотоэлектронов и фотодырок. Аналогично [7], можно показать, что при циркулярно поляризованном возбуждении зависящий от поляризации вклад в квадрат модуля матричного элемента пропорционален кривизне Берри

$$|M_{+-}|^2_{\mathrm{circ}} = \frac{2e^2 d^2}{(\hbar\omega)^2} |\mathbf{E}|^2 \boldsymbol{\varkappa} \cdot \boldsymbol{\Omega}, \tag{6}$$

где $\boldsymbol{\varkappa} = \mathrm{i}(\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*)$ и $\mathbf{e}$ – вектор поляризации света, а $\boldsymbol{\Omega}$ – кривизна Берри, связанная с вектором $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ соотношением

$$\Omega_j = \frac{\mathbf{d}}{4d^3} \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_{j+1}} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_{j+2}} - \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_{j+2}} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_{j+1}} \right), \tag{7}$$

и предполагается циклическая перестановка индексов j. Заметим, что с учетом закона сохранения энергии аргумент функции распределения $E_{\pm,\mathbf{k}}$ можно заменить на $d_0(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega/2$. Следовательно, при фиксированной частоте ω разность чисел заполнения (5) есть функция скаляра $d_0(\mathbf{k})$.

Введем псевдотензор $\hat{\gamma}$, описывающий ЦФГЭ согласно

$$j_\alpha = \gamma_{\alpha\beta} \varkappa_\beta |\mathbf{E}|^2. \tag{8}$$

Структура псевдотензора второго ранга $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$ для всех 18-ти гиротропных классов известна, см., например, [16]. Цель нашего анализа – выяснить простейший вид гамильтониана (2), удовлетворяющего двум условиям: первое – он приводит к отличному от нуля вкладу узла $\mathbf{k}_W$ в компоненту $\gamma_{\alpha\beta}$, допускаемую точечной группой симметрии кристалла, и второе – этот вклад не исчезает после суммирования по звезде вектора $\mathbf{k}_W$.

Вначале рассмотрим *гиротропные классы, не содержащие плоскостей отражения*, и учтем только линейные по $\mathbf{k}$ члены в гамильтониане (2): $d_\alpha = A_{\alpha\beta} k_\beta$, при этом киральность узла $\mathbf{k}_W$ равна $\mathrm{sgn}\{\mathrm{Det}(\hat{\mathbf{A}})\}$. В этом случае все узлы Вейля, получаемые преобразованиями симметрии, характеризуются одной и той же киральностью. При отсутствии наклона, $d_0(\mathbf{k}) = 0$, тензор $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$ изотропен: недиагональные компоненты отсутствуют, а диагональные совпадают и равны вкладу отдельного узла (1), умноженному на число векторов n в звезде вектора $\mathbf{k}_W$, если в эту звезду входит вектор $-\mathbf{k}_W$, и $2n$, если $\mathbf{k}_W$ и $-\mathbf{k}_W$ входят в разные звезды. Удвоение обусловлено симметрией к инверсии времени, которая переводит точку $\mathbf{k}_W$ в $-\mathbf{k}_W$, при этом киральность сохраняется. Допускаемое симметрией различие диагональных компонент получается с учетом наклона.

Для расчета недиагональных компонент $\gamma_{\alpha\beta}$ в кристаллах симметрии C_1 и C_2, необходимо учесть наклон с отличными от нуля коэффициентами a_α и a_β. В гамильтониане с линейными по $\mathbf{k}$ членами недиагональные компоненты $\gamma_{xy} = -\gamma_{yx}$ в классах C_3, C_4 и C_6 не возникают даже с учетом наклона. Как будет показано далее, в этом случае необходимо включать в гамильтониан более высокие степени $\mathbf{k}$.

Гиротропные классы содержат плоскости отражения, учитываются только линейные по $\mathbf{k}$ члены в гамильтониане. Недиагональные компоненты $\gamma_{\alpha\beta}$ в группах C_s, C_{2v}, S_4 и диагональные компоненты $\gamma_{xx} = -\gamma_{yy}$ в группах S_4, D_{2d} возникают в расчете при учете наклона. Отличные от нуля недиагональные компоненты в группах C_{3v}, C_{4v} и C_{6v} в модели линейного гамильтониана не возникают.

Таким образом, особняком стоят шесть гиротропных классов C_n, C_{nv} ($n = 3$, 4, 6), для которых компоненты $\gamma_{xy} = -\gamma_{yx}$ могут быть получены добавлением в спин-зависимую часть $\mathcal{H}$ членов более высокого порядка по $\mathbf{k}$, второго или третьего. В простейшем случае этому условию удовлетворяет гамильтониан смешанного вида

$$d_x = \beta k_x + D k_y k_\perp^2, \quad d_y = \beta k_y + D k_x k_\perp^2, \qquad d_z = \beta k_z, \quad d_0 = a_x k_x + a_y k_y, \tag{9}$$

где $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$. В этом случае для кривизны Берри получаем

$$\Omega_x = \frac{\beta}{2d^3}\left[\left(\beta^2 - D^2 k_\perp^4\right) k_x + 2\beta D(k_x^2 - k_y^2)k_y\right],$$
$$\Omega_y = \frac{\beta}{2d^3}\left[\left(\beta^2 - D^2 k_\perp^4\right) k_y - 2\beta D(k_x^2 - k_y^2)k_x\right],$$
$$\Omega_z = \frac{\beta k_z}{2d^3}\left(\beta^2 - 3D^2 k_\perp^4 + 4\beta D k_x k_y\right).$$

В $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ методе кубические слагаемые в (9) возникают за счет вклада удаленных зон в третьем порядке теории возмущений, поэтому можно считать эти слагаемые малыми по сравнению с линейными членами. Компоненты $\gamma_{xy} = -\gamma_{yx}$ становятся отличными от нуля в первом порядке по D с учетом наклона при $a_x^2 \neq a_y^2$.

2.1. Циркулярный фототок в кристаллах симметрии C_{4v}. Присвоим номер 1 одному из узлов Вейля $\mathbf{k}_{W1}$, лежащему в области зоны Бриллюэна с положительными компонентами $k_{W1,\alpha} > 0$. С учетом восьми элементов пространственной симметрии и симметрии к инверсии времени имеется 16 эквивалентных узлов. Для анализа суммарного электрического фототока достаточно рассмотреть еще два узла $\mathbf{k}_{W2}$ и $\mathbf{k}_{W3}$, получающихся из узла $\mathbf{k}_{W1}$ соответственно отражением σ_y в плоскости, перпендикулярной оси y, и поворотом C_4 вокруг оси четвертого порядка. При переходе от узла 1 к узлу 2 в эффективном гамильтониане (2), (9) коэффициент β меняет знак, коэффициент D не меняется, а функция $F(k_x, k_y, k_z)$, определенная в (5), преобразуется в $F(k_x, -k_y, k_z)$. При переходе к узлу 3 коэффициент β не меняется, коэффициент D меняет знак, а функция $F(k_x, k_y, k_z)$ преобразуется в $F(k_y, -k_x, k_z)$. При наличии наклона, но при $D = 0$ вклады узлов 1 и 3 компенсируют друг друга, и электрического фототока не возникает. Учета кубических слагаемых достаточно, чтобы сумма по 16-ти узлам не обращалась в нуль. Так, учет этого слагаемого в Ω_x приводит к току

$$j_y \propto \varkappa_x \frac{e^3|\mathbf{E}|^2}{(\hbar\omega)^2}\beta^2 D \sum_{\mathbf{k}} k_y^2(k_x^2 - k_y^2)\tilde{F}(\mathbf{k})\delta(2d - \hbar\omega), \tag{10}$$

где $\tilde{F}(\mathbf{k}) = F(k_x, k_y, k_z) - F(k_y, -k_x, k_z)$.

Сопоставимый по порядку величины вклад вносит учет кубических членов в аргумент δ-функции и групповую скорость $\partial d(\mathbf{k})/\partial(\hbar k_\alpha)$. Согласно (10) измерение циркулярного фототока позволяет определять знак коэффициента D, а не знак коэффициента β, задающего киральность узла Вейля при $D = 0$.

3. Фототоки в магнитном поле. Еще один эффект, специфический для гиротропных сред, – магнитоиндуцированный фототок, не зависящий от поляризации света. В этом эффекте *в линейном по магнитному полю порядке* полярный вектор – плотность фотока – связан с аксиальным вектором – магнитным полем. Например, в гиротропных кристаллах симметрии C_{2v} могут генерироваться токи

$$j_x = \left(S_{xx}B_x + S_{xy}B_y\right)|\mathbf{E}|^2, \qquad j_y = -\left(S_{xx}B_y + S_{xy}B_x\right)|\mathbf{E}|^2, \tag{11}$$

где выбрана декартова система координат с осью $z \parallel C_2$ и осью x, составляющей 45° с плоскостями отражения σ_v.

В квантующем магнитном поле ток течет только в направлении поля. Поэтому поперечный эффект генерации тока j_x в поле $\mathbf{B} \parallel y$ или тока j_y в поле $\mathbf{B} \parallel x$ будет подавлен. С учетом фототока, зависящего от циркулярной поляризации света, получим следующие макроскопические уравнения:

$$j_x = \left[S_{xx}(|B_x|)B_x + \gamma_{xx}(|B_x|)\varkappa_x\right]|\mathbf{E}|^2, \qquad j_y = -\left[S_{xx}(|B_y|)B_y + \gamma_{xx}(|B_y|)\varkappa_y\right]|\mathbf{E}|^2, \tag{12}$$

где коэффициенты S_{xx}, γ_{xx} являются четными функциями магнитного поля. Детальному расчету этих коэффициентов и частотной зависимости магнитоиндуцированного фототока будет посвящена отдельная работа. Здесь мы кратко рассмотрим фототок, генерируемый при прямых оптических переходах между основной (киральной) и первой возбужденной магнитными подзонами при неполяризованном возбуждении.

В квантующем магнитном поле $\mathbf{B} \parallel y$ дисперсия в этих подзонах имеет вид [17, 18]:

$$E_0 = [a_y - \mathrm{sgn}(\mathcal{C}B_y)\hbar\tilde{v}_0]k_y, \tag{13}$$

$$E_1 = a_y k_y + \hbar\sqrt{(\tilde{v}_0 k_y)^2 + \tilde{\omega}_c^2}, \tag{14}$$

где $\tilde{v}_0 = v_0/\gamma$, $v_0 = \beta/\hbar$ – вейлевская скорость в отсутствие магнитного поля,

$$\tilde{\omega}_c = \tilde{v}_0\sqrt{\frac{2|eB_y|}{\hbar c}}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (a_x/v_0)^2}}, \tag{15}$$

a_x, a_y – коэффициенты в линейном по $\mathbf{k}$ разложении наклонного слагаемого в (2), для простоты коэффициент a_z положен равным нулю ($|a_{x,y}| < v_0$). Мы рассматриваем здесь один из возможных механизмов магнитоиндуцированного фототока в полуметалле Вейля симметрии C_{2v}, в котором точки $\mathbf{k}_W$ лежат в плоскости $k_z = 0$, две характеризуются киральностью $\mathcal{C}$ и парами коэффициентов (a_x, a_y), $(-a_x, -a_y)$, а две другие – киральностью $-\mathcal{C}$ и парами коэффициентов (a_y, a_x), $(-a_y, -a_x)$. В этом механизме оптические переходы $E_0 \to E_1$ происходят в зависимости от знака поля B_y, преимущественно в узлах Вейля с киральностью 1 либо -1. Фотоэлектроны с временем энергетической релаксации τ_ε возвращаются в подзону E_0, при этом их малая часть может испытать рассеяние в окрестность узла Вейля с противоположной киральностью. При нулевой температуре, химическом потенциале $\mu > 0$, находящемся ниже дна возбужденной подзоны ($\mu < \hbar\tilde{\omega}_c$), и при частотах $\omega_- < \omega < \omega_+$, где $\omega_\pm = \sqrt{(\mu/\hbar)^2 + \tilde{\omega}_c^2} \pm \mu/\hbar$, плотность фототока дается выражением (12), в котором $|\mathbf{E}|^2 = |E_x|^2 + |E_z|^2$,

$$S_{xx} = \mathcal{C}\frac{e^3}{8\pi\hbar^2}\frac{\tau_\varepsilon\tau}{\tau_1}[\Phi(a_x^2) - \Phi(a_y^2)], \qquad (16)$$

функция Φ определена в виде

$$\Phi(a_x^2) = \frac{\eta}{|B_y|}\left(\frac{\tilde{\omega}_c}{\omega}\right)^2 \exp\left[-\left(\frac{a_x\omega}{\hbar v_0\tilde{\omega}_c}\right)^2\right], \qquad (17)$$

$\eta = 1 + \gamma + \gamma^2 - \gamma^3$, τ и τ_1 – времена упругого рассеяния между монополями для носителей соответственно в основной и возбужденной подзонах ($\tau_\varepsilon \ll \tau, \tau_1$). Фототок остается ненулевым после суммирования по монополям при условии $a_x^2 \neq a_y^2$.

Л.Е.Г. и Е.Л.И. благодарят за поддержку Российский научный фонд (проект # 17-12-01265).

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, М. (1982).
2. Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, Письма в ЖЭТФ **27**, 640 (1978).
3. V. I. Belinicher, Phys. Lett. A **66**, 213 (1978).
4. В. М. Аснин, А. А. Бакун, А. М. Данишевский, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, А. А. Рогачев, Письма в ЖЭТФ **28**, 80 (1978).
5. S. D. Ganichev, H. Ketterl, W. Prettl, E. L. Ivchenko, and L. E. Vorobjev, Appl. Phys. Lett. **77**, 3146 (2000).
6. S. D. Ganichev, E. L. Ivchenko, S. N. Danilov, J. Eroms, W. Wegscheider, D. Weiss, and W. Prettl, Phys. Rev. Lett. **86**, 4358 (2001).
7. F. de Juan, A. G. Grushin, T. Morimoto, and J. E. Moore, Nat. Commun. **8**, 15995 (2017).
8. C.-K. Chan, N. H. Lindner, G. Refael, and P. A. Lee, Phys. Rev. B **95**, 041104 (2017).
9. E. J. König, H.-Y. Xie, D. A. Pesin, A. Levchenko, arXiv:1705.03903v1.
10. Q. Ma, S.-Y. Xu, C.-K. Chan, C.-L. Zhang, G. Chang, Y. Lin, W. Xie, T. Palacios, H. Lin, S. Jia, P. A. Lee, P. Jarillo-Herrero, and N. Gedik, Nat. Phys. (in press), arXiv:1705.00590v1.
11. S.-M. Huang, S.-Y. Xu, I. Belopolski, C.-C. Lee, G. Chang, B. Wang, N. Alidoust, G. Bian, M. Neupane, C. Zhang, S. Jia, A. Bansil, H. Lin, and M. Z. Hasan, Nat. Commun. **6**, 7373 (2015).
12. C. Shekhar, A. K. Nayak, Y. Sun, M. Schmidt, M. Nicklas, I. Leermakers, U. Zeitler, Yu. Skourski, J. Wosnitza, Z. Liu, Y. Chen, W. Schnelle, H. Borrmann, Yu. Grin, C. Felser, and B. Yan, Nat. Phys. **11**, 645 (2015).
13. S.-Y. Xu, N. Alidoust, I. Belopolski, et al. (Collaboration), Nat. Phys. **11**, 748 (2015).
14. A. A. Soluyanov, D. Gresch, Z. Wang, Q. S. Wu, M. Troyer, X. Dai, and B. A. Bernevig, Nature **527**, 495 (2015).
15. Y. Wu, D. Mou, N. H. Jo, K. Sun, L. Huang, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, and A. Kaminski, Phys. Rev. B **94**, 121113 (2016).
16. Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская, *Основы кристаллооптики*, Наука, М. (1975).
17. Z.-M. Yu, Y. Yao, and S. A. Yang, Phys. Rev. Lett. **117**, 077202 (2016).
18. S. Tchoumakov, M. Civelli, and M. O. Goerbig, Phys. Rev. Lett. **117**, 086402 (2016).