

Raportare științifică

FAZA DE EXECUȚIE NR. 1

CU TITLU: Elaborarea teoriei cuantice a magnetotransportului în sisteme multibandă

☒ RST – raport științific și tehnic

☐ RFA – raport final de activitate

Titlu proiect: Teoria cuantică a magnetotransportului în câmpuri slabe pentru sisteme topologice multibandă

Acronim proiect: QuMag

Cod proiect: PN-IV-P8-8.3-PM-RO-FR-2024-0059

Contract: 15BMFR din 26/08/2024

Durata proiect: 26/08/2024 - 31/12/2025 (16 luni)

Partener român: Dr. Doru Sticleț

Partener francez: Dr. Frédéric Piéchon

Obiectivele generale ale proiectului

1. Dezvoltarea unei teorii perturbative, diagramatice, microscopice a magnetotransportului în sisteme multibandă, până la ordinul doi în câmpul magnetic.
2. Aplicația formalismul de magnetotransport cuantic obținut pe diferite modele de materiale topologice de interes (semimetale Weyl și Dirac, izolatori topologici etc.)

Obiectivul etapei

Elaborarea unei teorii generale a transportului cuantic pentru sisteme cu mai multe benzi.

Raport de activitate

Proiectul a demarat cu **prima vizită** a partenerului român în Franța, în perioada 6.10.2024 – 20.10.2024. În cadrul acestei vizite, cercetătorii au colaborat pentru a revizui calculul diagramatic pentru formalismul Kubo de răspuns în ordinul doi în câmpul magnetic. Doru Sticleț s-a familiarizat cu formularea invariantă la etalonare a răspunsului în câmp magnetic. Pe baza funcțiilor Green, a fost stabilită structura generală a răspunsului, și au fost descompuse contribuțiile disipative și non-disipative la tensorul de conductivitate. Am lucrat în aproximarea timpului de relaxare constant și am neglijat corecțiile de vertex.

Formulele generale obținute (care sunt aplicabile pentru un număr arbitrar de benzi electronice) au fost particularizate pentru cazul unei singure benzi electronice, cu dispersie arbitrară. Am arătat cum în acest caz contribuțiile la tensorul de conductivitate sunt disipative la ordinul zero și doi în câmp magnetic și nedisipative la ordinul unu în câmpul magnetic.

Formulele generale conțin integrale peste energie. Aici am putut efectua singura simplificare care mai poate fi efectuată în cazul general. Am considerat limita timpului de relaxare τ mare care permite o expansiune a integrandului în $1/\tau$ și apoi integrarea termenilor care rezultă. Astfel au fost obținute perturbativ contribuțiile dominante la conductivitate. Acest calcul a fost efectuat complet pentru cazul unei singure benzi, în ordinul 2 în câmpul magnetic.

Cazul multibandă a fost abordat în cadrul celei dea **doua vizite**, a partenerului francez în România, în perioada 3.11.2024 – 17.11.2024. Aici vedem cum contribuții atât disipative cât și nedisipative apar la toate ordinele în câmpul magnetic. Spre deosebire de cazul unei singure benzi, funcțiile Green au o structură matricială, iar calculul urmei prezent în corelatorul viteză-viteză din formalismul Kubo devine complicat. Pentru a rezolva această problemă am dezvoltat în *Mathematica* un pachet minimal de calcul simbolic pentru astfel de cantități. În plus am dezvoltat o nouă tehnică analitică de calcul. Am arătat cum corelatorul poate fi descompus într-un set simplu de produse matriciale care au o interpretare fizică simplă. Fiecare astfel de bloc poate fi exprimat complet în termeni de curbura Berry și tensorul de metrică cuantică. Astfel am putut efectua calculele complete la ordinul unu în câmpul magnetic.

Precum în cazul unei singure benzi electronice am putut efectua o teorie a perturbației pentru timpi de relaxare mare, care a permis rezolvarea aproximativă a integralei peste energie din formalismul Kubo. Deja în acest regim am putut arăta ca există contribuții cuantice la conductivitate care nu sunt cuprinse în formalismul semiclassical bazat pe ecuația Boltzmann de transport. În continuare vom efectua extensia la ordinul doi în câmp magnetic pentru sistemul generic cu două benzi electronice, și vom iniția calculul pentru cazul arbitrar de benzi. Aceste cercetări vor fi efectuate separat de partea română și franceză, dar vor fi coordonate și sincronizate prin întâlniri Zoom săptămânale sau bilunare între cele două părți.

Gradul de realizare al obiectivelor

- Am realizat complet obiectivele activității 1.1 din **Planul de realizare** prin calculul complet al magnetoconductivității pentru sisteme cu o singură bandă electronică.
- Am realizat parțial obiectivele activității 1.2. Aici am reușit să rezolvăm cazul sistemelor multibandă cu două benzi. Extensia teoriei la sisteme cu peste două benzi electronice este realizată doar la nivel diagramatic general, fără calcule concrete care să permită implementarea imediată pentru sisteme particulare.
- Am realizat în avans obiectivele unei activități din etapa doi, Act. 2.1. Am elaborat software-ul simbolic necesar pentru calculul corelatorului viteză-viteză.

Director de proiect

Doru Sticlet

