

## Válaszok Dr. Kormányos Andor kérdéseire

Először is szeretném megköszönni Dr. Kormányos Andor bírálatát, az ezzel kapcsolatos munkáját, illetve a fontos pontokra rávilágító kérdéseit, megjegyzéseit. Az ezekre adandó válaszok megtalálása érdekében a dolgozatban ismertetteken túl néhány újabb számítást is végeztem. A következőkben megtalálható ezek rövid összefoglalása a kérdésekre adott válaszaimmal együtt.

Válaszok a megjegyzésekre:

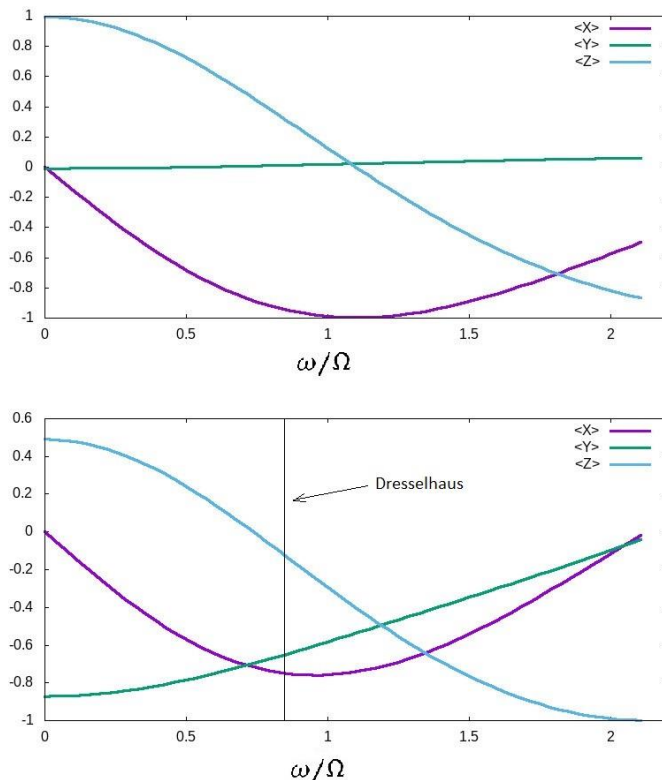
1. Egyetértek a bírálóval, pl. a gyenge lokalizáció – a destruktív interferencia miatt – mindenképpen kvantumos jelenség, ugyanakkor már nem a ballisztikus transzport tartományába esik. Ilyen értelemben a ballisztikus és a kvantumosan leírható/leírható tartomány nem fed át teljesen. Valószínűleg itt egy finomabb osztályozásra lenne szükség. (Erre egy ötlet megtalálható pl. az [1] hivatkozásban, bár pontosan ezt a kérdést az az osztályozás sem tisztázza.)
2. A Dresselhaus-féle spin-pálya kölcsönhatás a dolgozatban szereplő eredmények kiszámításánál nem játszott szerepet, emiatt szerepel csak az említés szintjén. (A kölcsönhatás befolyására még visszatérek a 1. kérdésre adott válaszban.) Ezzel együtt egyetértek a bírálóval, az effektus megérdemelt volna némileg alaposabb tárgyalást. Dresselhaus cikke [2] alapján látszik, hogy ez a típusú spin-pálya kölcsönhatás perturbációs sor alakjában írható fel, az egyes rendekben  $k$  különböző páratlan hatványai szerepelnek. És bár jelen van a köbös tag is [3], a lineáris a domináns, olyannyira, hogy a legtöbbször csak azt veszik figyelembe.

Válaszok a kisebb megjegyzésekre:

- A 40. ábrán a különböző szimbólumok jelentése valóban elmaradt, ennek meg kellett volna jelennie. Itt arról van szó, hogy a Landau-Zener-Stückelberg modellt meghatározó minimális nivótávolság fixen tartható úgy, hogy közben a molekuláris mágnes modelljében [(4.22), (4.23) egyenletek] a paraméterek változnak. Ehhez elegendő pusztán két paramétert változtatni (a 40. ábra esetén az  $L$  paraméterben szereplő arányossági tényezőt illetve a  $C$ -vel jelölt paramétert), és még ebben az esetben is több, egymást nem metsző görbe mentén teljesül a minimális nivótávolságra kirótt feltétel. A 40. ábrán a különböző szimbólumok ezekhez a különböző görbékhez tartoznak.
- A 44. ábrával kapcsolatos megjegyzést köszönöm, egyetértek vele, a főszövegben  $j_x(t)$  helyett  $n_c(\mathbf{k}, t)$  kellett volna, hogy szerepeljen.
- Igen, a 48. ábrán (a 43.-hoz hasonlóan) a növekvő függvényértékekhez egyre világosabb szín tartozik (fekete<kék<ibolya<vörös<narancs<citromsárga).

Válaszok a kérdésekre:

1. A dolgozatban részletezett számítások születése idején a Rashba és Dresselhaus típusú spin-pálya kölcsönhatások együttes jelenlétében nem voltak analitikusan ismeretesek a gyűrűbeli sajátállapotok. (Ez az általános esetre igaz, azonban azt pl. lehetett már tudni, hogy a két kölcsönhatás erősségének megfelelő arányai esetén egydimenzióban megoldható a probléma [4].) Csak 2021-ben jelent meg az a publikáció [5], amelyben ezek a sajátállapotok megtalálhatók. Ez a megoldás egészen összetett, a helyfüggő spinorokat, amelyek egy közös differenciálegyenlet megoldásaiként adódnak, Mathieu függvények szorozzák. Ezért a kérdés második felének megválaszolásához inkább egy tisztán numerikus, rácson diszkretizált módszert választottam. Erről az eljárásról nem esik szó a dolgozatban, egyedül a bevezetőben szereplő 3. ábra a) és b) része készült ilyen módon. Lényegében arról van szó, hogy standard módon differencia-operátorokkal helyettesítjük a differenciáloperátorokat, és minden rácsponthoz – a spinirányoknak megfelelően – kétkomponensű hullámfüggvényt rendelünk. A félvégtelennek tekintett vezeték hatását a fix energiához tartozó, egyrészeszecske Green-függvényeken alapuló módszerben sajátenergia jellegű tagokkal lehet figyelembe venni [1]. Így egy numerikusan egzakt eljárást kapunk, amelyben mindkét típusú spin-pálya kölcsönhatás természetes módon implementálható. Továbbá az is igaz, hogy a karokban (ahol a dolgozathoz hasonlóan feltesszük, hogy nincs spin-pálya kölcsönhatás) a spin orientáció a terjedésre merőleges irányban konstans, így gyűrű spintranszformációs tulajdonságai egyszerűen meghatározhatók.



1. ábra: Egymódusú, kétdimenziós gyűrű spintranszformációs tulajdonságai Dresselhaus-féle spin-pálya kölcsönhatás (DSOI) jelenlétében (alsó panel) illetve anélkül (felső panel). A bemenet mindkét ábrán pozitív z irányban spinpolarizált, és a kimenő spinorra számoltam ki  $\sigma_x$ ,  $\sigma_x$  és  $\sigma_z$  várható értékét a Rashba-típusú spin-pálya csatolás (RSOI) erősségének a függvényében. A dolgozat jelöléseit használom,  $ka = 21$ . Az alsó ábrán a függőleges fekete vonal azt az RSOI erősséget jelöli, amellyel megegyezett a konstansnak tekintett DSOI. (Pontosabban: a Hamilton-operátorban szereplő  $\alpha(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)$  RSOI és  $\beta(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y)$  DSOI tagok együttható egyeznek meg itt:  $\alpha = \beta$ .)

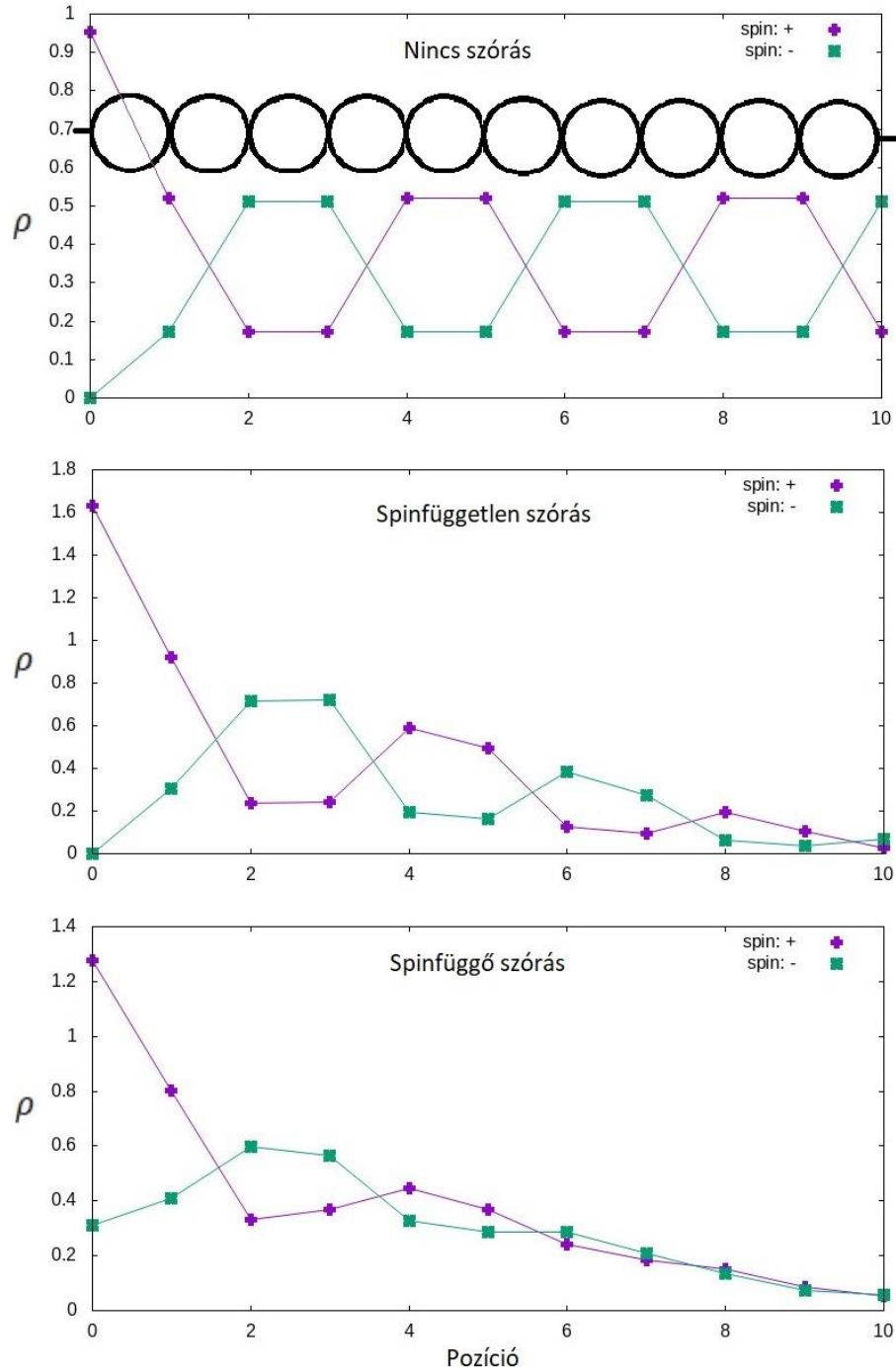
A dolgozatbeli eredményekkel való összehasonlíthatóság céljából a gyűrű vastagságát olyanra választottam, hogy egyetlen transzverzális módus vegyen részt a folyamatban. A példa kedvéért egymással szemben elhelyezkedő vezetékeket (a dolgozat 2.1 fejezetének jelölésével:  $\gamma = \pi$ ) tekintve, a fenti ábra egyrészt azt mutatja, hogy az egydimenziós modell jóslatai [(2.22) egyenlet] és a kétdimenziós rácsmodell kvalitatívan hasonló eredményt ad. Ezen túl – visszatérve a kérdés lényegére – az ábrán az is látható, hogy a gyűrű Dresselhaus csatolás jelenlétében is elforgatja a bejövő spint, méghozzá a Rashba-típusú SOI erősségétől függő mértékben. Szemléletesen azt is mondhatjuk, hogy a konstans erősségű Dresselhaus kölcsönhatás következtében a gyűrű elforgatja a bejövő elektronok spinjét, és erre az „alap” spintranszformációs tulajdonságra rakódik rá a Rashba SOI külső térrel kontrollálható hatása.

2. Ez egy kimondottan érdekes kérdés, amit nem magától értetődő teljesen egyértelműen megválaszolni. Naivan azt gondolná az ember, hogy egy hálózatban, amelynek a vezetőképességét spinfüggő interferenciajelenségek határozzák meg, a spinfüggő véletlen szórási folyamatok a spinfüggetlenekhez képest „jobban elrontják” a transzmissziót. Gyenge szórási folyamatok esetén ez is látszik. Ugyanakkor, ahogyan a rendezetlenség szerepe növekszik, nem marad ez a viszony, de még az sem történik, hogy a két típusú szórási folyamat közötti különbség eltűnik, hanem a spinfüggetlen folyamatok hatása lesz erősebb.

Fontos megjegyezni, hogy ez az effektus kimondottan általános: különböző méretű és geometriájú rendszerekben is tetten érhető. (A dolgozatban szereplőkön túl konkrét számításokat egydimenziós gyűrűk láncára és kétdimenziós lineáris vezetékre végeztem.) A 2. ábra példaként egy 10 gyűrűből álló láncban mutatja a gyűrűk érintkezési pontjaiban az egyes spinirányokhoz tartozó (nem normált) valószínűségi sűrűségeket. (Azaz ha a spinor értékű hullámfüggvény  $\sigma_z$  sajátbázisában  $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ , akkor ezek a sűrűségek  $|a|^2$  illetve  $|b|^2$ .) A Rashba SOI erősség ebben az esetben konstans, minden gyűrűben azonos. A 2. ábráról leolvasható, hogy spinfüggetlen szórási folyamatok esetén a két spinirányhoz tartozó sűrűségek még a lánc végén is különböznek (kissé még emlékeztetve a szórás nélküli folyamatra), míg a spinfüggő esetben ezek a sűrűségek gyakorlatilag megegyeznek. Mindez azonban kevés ahhoz, hogy szemléletes magyarázatot adjunk a jelenségre.

Hátrébb lépve, az eredeti Hamilton-operátorral jellemzett rendszerről könnyen belátható, hogy invariáns az időtükrözésre nézve (ez legkönnyebben az (1.23) egyenletből látszik). Spinfüggő szórási folyamatok jelenlétében sérül ez a szimmetria, így az egyébként gyenge lokalizációhoz vezető folyamatok esetén az interferencia nem lesz feltétlenül destruktív, azaz a vezetőképesség kevésbé csökken. Ezt az is alátámasztja, hogy ha egy lineáris vezetéket külső mágneses térbe helyezünk, akkor számításaim szerint a spinfüggő és spinfüggetlen szórási folyamatok hatása közötti különbség eltűnik. Ezt interpretálhatjuk úgy, hogy a külső mágneses tér miatt az időtükrözési szimmetria már mindenképpen sérült, ezért nincs szerepe annak, hogy a szórási folyamatok milyen jellegűek.

Összefoglalva, az újabb számítási eredmények azt az érvelést támasztják alá (de természetesen nem bizonyítják), hogy erősebb szórási folyamatok esetén a spinfüggő szórócentrumok az időtükrözési szimmetria sérülése miatt csökkentik kevésbé a transzmissziót.



2. ábra: A  $\sigma_z$  operátor +1 és -1 sajátértékeihez tartozó sűrűségek egy 10 gyűrűből álló lineáris lánc érintkezési pontjaiban (a geometriát a legfelső panel felső része szemlélteti). A vékony vonalak csak a szem számára jelentenek segítséget. A legfelső panel esetében nincsenek szórási folyamatok, míg a középsőn a dolgozatban részletezett módon spinfüggetlen, legalul pedig spinfüggő szórócentrumok vannak jelen. A paraméterek a dolgozat jelöléseivel:  $\frac{\omega}{\Omega} = 1$  minden panelen, a szórások erősségeit pedig  $D = E_F/10$  jellemzi. A pozíciót a legelső gyűrű és bejövő vezeték érintkezési pontjától mérjük gyűrűátmérő egységekben.

3. A két ábrán a kezdeti elektronsűrűség azonos, ugyanazzal a  $k = 0$  centrumú Gauss-függvénnyel írhatók le. Sajnos az ábrázolás során nem pontosan azonos színskálát alkalmaztam a két ábrán, amit a jobb láthatóság indokolt. Emellett a színek jelentése sem szerepel az ábra mellett (hasonlóan a bíráló 3. kisebb megjegyzésében említett ábrához). Fizikailag természetesen az igaz, hogy a  $k_y = 0$  síkban az idő múlásával folyamatosan csökken az elektronsűrűség a szórás folyamatok következtében, és (pl. a  $k_x$  szerinti integrálja) a 44. (a) ábrán mindig alacsonyabb, mint a szórás nélküli 43. (a) ábrán.

4. Inverziós szimmetriával rendelkező szilárdtest (de akár gáz-) minták esetén a páros rendű harmonikusoknak mindenképpen hiányozniuk kell. Az állítás monokromatikus gerjesztés esetén igaz pontosan, az egymást követő optikai félciklusokban a térerősség ellentétes iránya szükséges a jelenségért felelős (ilyen értelemben tér-idő) szimmetriához. Így véges hosszúságú impulzusok esetén csak közelítőleg teljesül, hogy csak páratlan rendek szerepelnek a spektrumban. Néhányszor tíz optikai ciklus esetén azonban már szépen látszik a jelenség.

Ugyanakkor egydimenziós, egyelektronképben modellpotenciált használó szilárdtest modellek esetén már az inverziós szimmetria hiányában sem jelennek meg páros felharmonikusok. Ez az ellentétes hullámszámvektorokkal címkézhető Bloch-állapotok által kibocsájtott elektromágneses sugárzás interferenciájára vezethető vissza [6].

Érdemes megjegyezni, hogy a gerjesztő térerősség nulla körüli (közelítőleg) szinuszos oszcillációja valóban fontos a jelenség szempontjából: Ha akár viszonylag gyenge, statikus vagy lassan változó teret adunk a gerjesztéshez, megjelennek a páros rendek a spektrumban. (Infravörös gerjesztés és terahertz tartományba eső, önmagában felharmonikus létre nem hozó „segéd” tér esete megtalálható pl. a [6] munkában.)

## Irodalom

[1] S. Datta: Nanoelectronic devices: a unified view. Megjelent: *Oxford Handbook of Nanoscience and Technology: Volume 1: Basic Aspects* (2010., szerkesztők: A.V. Narlikar és Y.Y. Fu. ISBN: 9780199533046)

[2] G. Dresselhaus: Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955.)

[3] J. J. Krich, B. I. Halperin: Cubic Dresselhaus Spin-Orbit Coupling in 2D Electron Quantum Dots, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 226802 (2007.)

[4] J. S. Sheng, K. Chang: Spin states and persistent currents in mesoscopic rings: Spin-orbit interactions, *Phys. Rev. B* **74**, 235315 (2006.)

[5] J. M. Lia, P. I. Tamborenea: Narrow quantum rings with general Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions, *Physica E* **126**, 114419 (2021.)

[6] V. Szaszko-Bogár, P. Földi, I. Magashegyi, K. Varjú: Interference-Induced Phenomena in High-Order Harmonic Generation from Bulk Solids, *Appl. Sci.* **9**, 1572 (2019.)

