

Válaszok Dr. Dóra Balázs kérdéseire

Először is szeretném megköszönni Dr. Dóra Balázs bírálatát, a dolgozatom tágabb kontextusát tisztázó kérdéseit, megjegyzéseit. Az ezekre adandó válaszok megtalálása érdekében a dolgozatban ismertetetteken túl néhány újabb számítást is végeztem. A következőkben megtalálható ezek rövid összefoglalása a kérdésekre adott válaszaimmal együtt.

Válaszok a kérdésekre:

1. Az anyagi minőségtől, mérettől, illetve más paraméterektől függően kvantumgyűrűkben is jelentős lehet az elektron-elektron kölcsönhatás szerepe, pl. elméleti modellek zárt kvantumgyűrűk esetében is jószólnak Wigner-kristály szerű viselkedést (az elektronok kis száma miatt a Wigner-molekula elnevezést is használják, lásd pl. [1,2]). Excitonokból álló Wigner-molekulára utaló jeleket kísérletileg, mágneses tér jelenlétében felvett spektrumokban is találtak [3]. Egydimenziós esetben a Luttinger-folyadék viselkedését [4] és a Mott-átalakulást is [5] tanulmányozták gyűrűben.

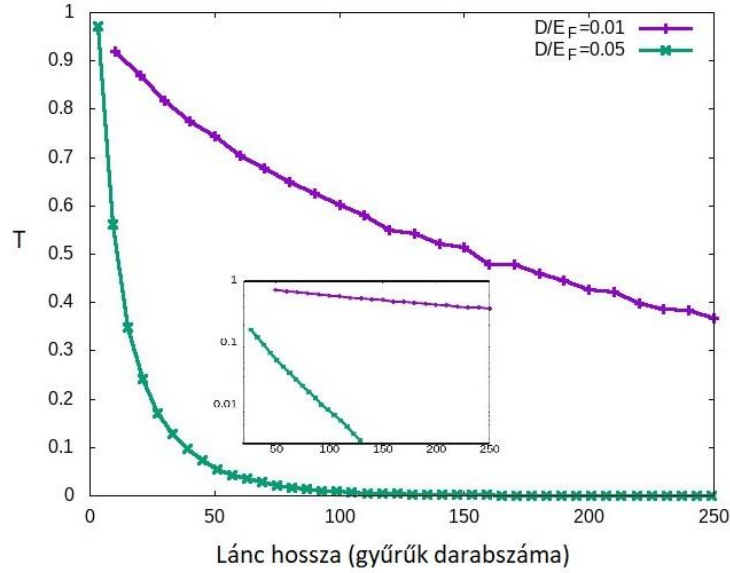
A fenti rendszerek jellemzően zárt gyűrűk, és elméleti szempontból az elektron-elektron kölcsönhatás figyelembe vétele még ebben az esetben is modellszinten történik. A leírás szempontjából a vezetési jelenségek még összetettebbek, valami módon kezelni kell a gyűrűket áramkörbe kötő vezetékeket is. Így bár az ideális eset a teljes, elektron-elektron kölcsönhatást is figyelembe vevő, anyagfüggő modell lenne, az numerikusan még ma is kimondottan nehéz feladat. Emiatt azt sem könnyű megítélni, hogy ezeknek a kölcsönhatásoknak a figyelembe vétele milyen változást jelentene a dolgozatban ismertetett eredményekhez képest. Természetesen a vezetőképességet drasztikusan megváltoztató effektusok (pl. a Mott-átalakulás) jól megfigyelhetők lennének.

Ugyanakkor érdemes hangsúlyozni, hogy valóban léteznek olyan rendszerek, amelyek leírásához – legalábbis az alapvető effektusok (pl. az Aharonov-Bohm oszcillációk [6] vagy a spin-pálya kölcsönhatás hangolhatósága [7]) szintjén – elegendő az egyelektron kép.

2. A dolgozatban részletezett számítások a célja alapvetően mindig adott energián a transzmisszió kiszámítása volt, ezért a klasszikus Anderson-modellben [8] szereplő lokalizált hullámcsomag diffúziója nehezen vizsgálható ezekkel a módszerekkel. (Nagyszámú energia sajátállapot szuperpozíciója lenne szükséges akár csak a kezdőállapot közelítő előállításához is.)

Ezért a lokalizációs hossz becslésére más megoldás tűnik célravezetőnek. Véletlenszerű szórócentrumok jelenlétében a transzmisszió méretfüggése szolgálhat egy ilyen becslés alapjául. Sajnos négyzetes hálózatok esetén a probléma numerikus nehézsége túl gyorsan növekszik a mérettel ahhoz, hogy a rendelkezésre álló időn belül megbízható eredményeket kapjunk. Ugyanakkor gyűrűk lineáris lánc esetén a dolgozatban szereplő, a négyzetes hálózatok funkcionális viselkedését még csak korlátozott mértékben rongáló erősségű szórócentrumok esetén is vizsgálható a skálázódás. Ebben az esetben, megfelelően hosszú láncok esetén, azt várhatjuk, hogy a vezetőképesség exponenciálisan cseng le a lánc hosszának növekedésével [9,10], és a lokalizációs hossz az exponens reciprokéval becsülhető. Az egyszerűség kedvéért gyűrűnként azonos erősségű Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatást tekintve (a dolgozat jelöléseivel: $\frac{\omega}{\Omega} = 1$), az 1. ábra mutatja a vezetőképesség függését a láncot alkotó gyűrűk számától. A szórási folyamat ugyanaz, mint a dolgozatban, az 1. ábrán a

szórócentrumok spinfüggetlenek. A transzmissziós valószínűség lánc hosszától való függése rövidebb láncok esetén észrevehetően eltér az exponenciális függvénytől, de a későbbiekben nagyon jó közelítéssel exponenciálissá válik. Ez alapján a $\frac{D}{E_F} = 0.01$ (0.05) esetre a gyűrűk számában megadott, becsülhető lokalizációs hossz 280 (18). Így – bár a lineáris („egydimenziós”) láncok sokban különböznek a „kétdimenziós” négyzetes hálózatoktól -- a transzformációs tulajdonságok egy részét még megtartó a $\frac{D}{E_F} = 0.01$ esetben az sejtethető, hogy pl. egy 5x5 gyűrűből álló hálózat esetén még nem a lokalizációs jelenségek a dominánsak.



1. ábra: Lineáris, gyűrűkből álló láncok esetén a transzmissziós valószínűség a hossz függvényében a szórási folyamatok két különböző erősségére. A beszúrt kis ábrán a közelítőleg exponenciális szakaszok láthatók logaritmikus skálán, $\frac{\omega}{\Omega} = 1, ka=21$.

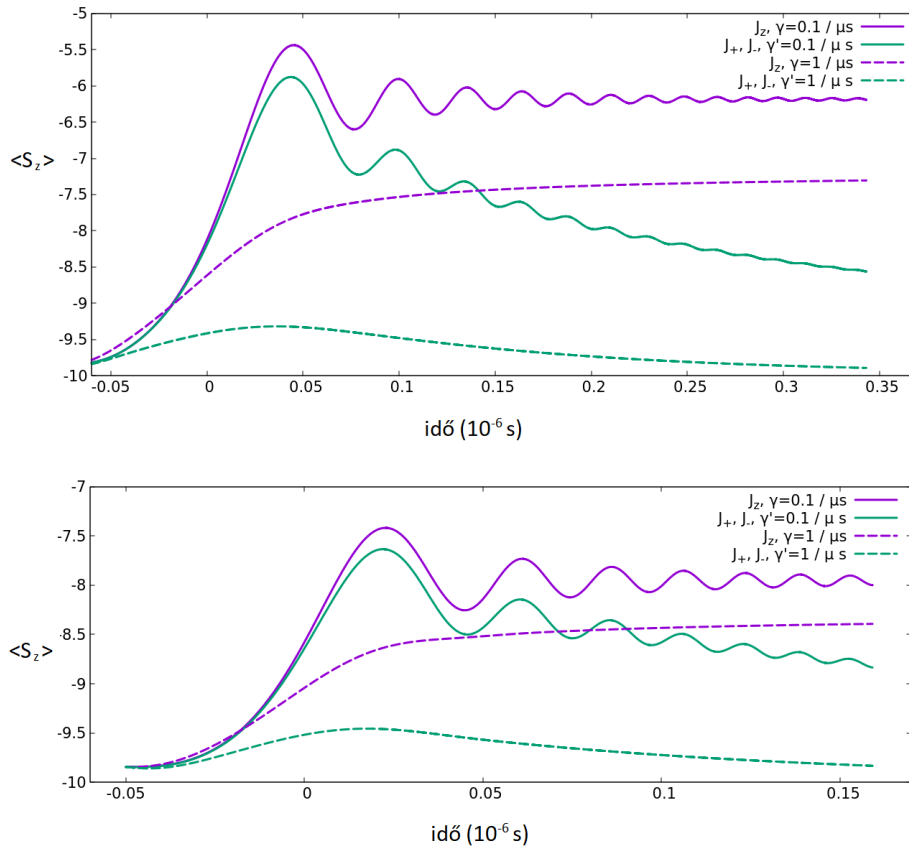
Ami a lokalizáció mérhető következményeit illeti, a fent ismertetett, gyűrűkből álló lánc modellje szerint, az alapvető effektus abban az esetben, ha a lokalizációs hossz összemérhető a rendszermérettel, az a transzmisszió erős csökkenése. De emellett az is igaz, hogy ekkor a transzmittált elektronok spinjének az iránya gyakorlatilag függetlenné válik a spin-pálya kölcsönhatás erősségétől.

3. Az S_z operátor segítségével leírt fázisrelaxáció természetesen nem tekinthető általános leírásnak, a modell célja a domináns folyamat leírása volt. A környezethez való csatolás ezen kívül más (akár az S_z, S^+, S^- halmazba nem tartozó) operátorok segítségével is megvalósulhat.

Spin-flip esetén a Lindblad-alakú master egyenletek az unitér evolúciót leíró kommutátoron túl kétféle tagot tartalmazhatnak: $\frac{1}{2}\gamma'(S^-\rho S^+ - S^+S^-\rho - \rho S^+S^-)$, illetve $\frac{1}{2}\gamma''(S^+\rho S^- - S^-S^+\rho - \rho S^-S^+)$. Az első önmagában az $|m = -m_{max} >$ állapot, a második pedig az $|m = m_{max} >$ állapot felé tereli a rendszert (Mn₁₂-Ac esetében $m_{max} = 10$). Ha a zárt rendszer energiái az S_z operátor m indexében lineárisak, természetes a γ' és γ'' paraméterek arányát úgy megválasztani, hogy a dinamika végállapota a termikus egyensúly legyen. Esetünkben azonban az energia közelítőleg m^2 -tel arányos, így az S^+, S^- által generált spin-flip folyamatok nehezebben interpretálhatók. (Nem konstans külső mágneses mező tovább bonyolítja a képet.) Ugyanakkor természetesen beírhatjuk a master egyenletbe az ezeket az operátorokat tartalmazó Lindblad-tagokat, és vizsgálhatjuk a dinamikát. A példa kedvéért a

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \frac{1}{2}\gamma'(S^-\rho S^+ - S^+S^-\rho - \rho S^+S^-)$$

egyenletet tekintve (ahol H a (4.21)-(4.23) egyenletekkel adott, és a külső mágneses tér lineárisan változik), a mágnesezettség z komponensének várható értékére egy konkrét átmenet esetén az alábbi eredményt kapjuk:



2. ábra: A spin z komponensének várható értéke a dolgozat 41. ábráján látható átmenet esetére. A külső tér lineárisan változik, a sebessége a felső panelen 1 kT/s, az alsón 2 kT/s. A jelmagyarázat megmutatja, hogy a mely operátorok szerepelnek a master-egyenlet Lindblad tagjában, illetve, hogy mekkorák a releváns γ és γ' ráták.

Az ábrán a teljesség kedvéért a dolgozatbeli (4.30) egyenlet eredményét is feltüntettem (ez lényegében a 41. ábra görbéinek a megismétlése.) Ahogyan látható, a fázisrelaxáció $\gamma = 1/T_2$ rátájával azonos γ' esetén már egyetlen átmenet karakterisztikus ideje alatt is észrevehetően megváltozik a mágnesezettség, amit a kísérleti görbék [11-13] nem mutatnak. Ez azt sugallja, hogy a rendszerben, alacsony hőmérsékleten, a fázisrelaxáció az erősebb folyamat, azaz ebben az értelemben ez írja le jobban a valóságot. Kísérletileg γ pl. spin echo segítségével mérhető meg [14], míg γ' egyszerűen a mágnesezettség relaxációjának az időfüggéséből adódik. Bár mindkét ráta függ a hőmérséklettől (és a külső mágneses tértől, valamint a kezdőállapottól), a kísérlet eredmények is alátámasztják, hogy általában $\gamma \gg \gamma'$.

- Dinamikai Bloch-oszcillációk esetén a zónahatáron átjutó rész hullámcsomaghoz tartozó sebesség előjelet vált, ami csökkenti a teljes áram nagyságát. Kis amplitúdójú (gyengébb terekkel létrehozott) oszcillációk esetén ez a jelenség nehezebben vehető észre, de a gerjesztés erősségét növelve jól látható a különbség (A [15] konferenciacikk 3. ábráján – bár a dinamika a gerjesztést nem tartalmazza – jól látható a különbség a Bloch-oszcillációval járó, és az anélküli folyamatok között.) Általánosságban elmondható, hogy Bloch oszcillációk

jelenlétében az áram időbeli lefutása strukturáltabb („cirkalmasabb”), szignifikánsan megjelennek benne a gerjesztésnél nagyobb frekvenciájú komponensek.

Mivel az áram is forrása az anyag által a gerjesztés hatására kibocsájtott másodlagos sugárzásnak, ez azt jelenti, hogy a spektrumban megjelennek ezek a frekvenciák. Ugyanakkor pl. a szilárdtestekben keltett felharmonikusok egyik lehetséges elméleti értelmezéséből [16] is látszik, hogy a gerjesztéstől jelentősen eltérő frekvenciák más okból (a [16] cikk szerint a sávok összetettebb struktúrája miatt) is megjelenhetnek a spektrumban. Így az áram időbeli lefutásának a vizsgálatából nem lehet egyértelmű következtetést levonni a Bloch-oszcillációk megjelenésére vonatkozóan.

Érdemes azonban hozzátenni, hogy az áram időbeli lefutása – éppen a gyors oszcillációk miatt – jelenleg kísérletileg nem határozható meg. Ezzel szemben az áram időintegrálja, azaz a gerjesztő lézerpulzus által elmozdított töltésmennyiség, mérhető. A dolgozat 48. ábrája alapján a Bloch-oszcillációk következtében ez a töltés fix vivő-burkoló fázis mellett a gerjesztés intenzitásának a növelésével (akár többször is) előjelet vált. Ez egy elég robusztus effektus, és nem várható, hogy a sávok struktúrája ugyanilyen következménnyel járna. Ezért azt mondhatjuk, hogy kísérleti szempontból a Bloch-oszcillációk megjelenése a lézerpulzus által elmozdított összes töltés intenzitásfüggésének a vizsgálatával mutatható ki.

Irodalom

- [1] L. Wendler, V.M. Fomin, A.V. Chaplik: Energy band structure and persistent currents in a finite-width mesoscopic two-electron ring, *Superlattices and Microstructures* **16**, 311 (1994.)
- [2] L. Wendler, V. M. Fomin, A. V. Chaplik, and A. O. Govorov: Optical properties of two interacting electrons in quantum rings: Optical absorption and inelastic light scattering, *Phys. Rev. B* **54**, 4794 (1996.)
- [3] H. Dae Kim et al.: Observation of a Biexciton Wigner Molecule by Fractional Optical Aharonov-Bohm Oscillations in a Single Quantum Ring, *Nano Lett.* **16**, 27 (2016.)
- [4] M. D. Kim, S. Y. Cho, C. K. Kim, K. Nahm: Mesoscopic Luttinger liquid theory in an Aharonov-Bohm ring, *Phys. Rev. B* **66**, 193308 (2002.)
- [5] P. Schmitteckert, R. A. Jalabert, D. Weinmann, J-L. Pichard: From the Fermi Glass towards the Mott Insulator in One Dimension: Delocalization and Strongly Enhanced Persistent Currents, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2308 (1998.)
- [6] R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, R. B. Laibowitz: Observation of h/e Aharonov-Bohm Oscillations in Normal-Metal Rings, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2696 (1985.)
- [7] F. Nagasawa, D. Frustaglia, H. Saarikoski, K. Richter, J. Nitta: Control of the spin geometric phase in semiconductor quantum rings, *Nat. Comm.* **4**, 2526 (2013.)
- [8] P. W. Anderson: Absence of Diffusion in Certain Random Lattices, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958.)
- [9] N. F. Mott, W. D. Twose: The Theory of Impurity Conduction, *Adv. Phys.* **10**, 137 (1961.)
- [10] R. E. Borland: The nature of the electronic states in disordered one-dimensional systems, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **274** No. 1359, 529-545 (1963.)

- [11] J. R. Friedman, M. P. Sarachik, J. Tejada, R. Ziolo: Macroscopic Measurement of Resonant Magnetization Tunneling in High-Spin Molecules, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3830 (1996.)
- [12] K. M. Mertes et al.: Distribution of Tunnel Splittings in Mn_{12} Acetate, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 227205 (2001).
- [13] W. Wernsdorfer, M. Murugesu, and G. Christou: Resonant Tunneling in Truly Axial Symmetry Mn_{12} Single-Molecule Magnets: Sharp Crossover between Thermally Assisted and Pure Quantum Tunneling, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 057208 (2006.)
- [14] S. Takahashi, I. S. Tupitsyn, J. van Tol, C. C. Beedle, D. N. Hendrickson, P. C. E. Stamp: Decoherence in crystals of quantum molecular magnets, *Nature* **476**, 76 (2011.)
- [15] M. G. Benedict, P. Földi: Laser driven currents in solids: dynamical Bloch oscillations and phonon scattering, *Phys. Scr.* **T153**, 014005 (2013.)
- [16] S. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk, P. Agostini, L. F. DiMauro, D. A. Reis: Observation of high-order harmonic generation in a bulk crystal, *Nat. Physics* **7**, 138 (2011).



Szeged, 2022. június 22.

Földi Péter.