

KÖZEGBELI ELEKTRONOK SPIN- ÉS IDŐFÜGGŐ  
DINAMIKÁJA KÜLSŐ ELEKTROMÁGNESES TEREKBE

MTA Doktori Értekezés

Földi Péter

Szegedi Tudományegyetem  
Elméleti Fizikai Tanszék  
2020.



# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés, előzmények és célkitűzések</b>	<b>1</b>
1.1. Kvantumos transzportfolyamatok . . . . .	3
1.2. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás . . . . .	13
1.3. Molekuláris mágnesek . . . . .	18
1.4. Rövid, erős lézerimpulzusok kölcsönhatása szilárdtestekkel . . . . .	23
1.5. Célkitűzések . . . . .	27
<b>2. Vezetési elektronok spinjének befolyásolása kvantumgyűrűkben: kvantum logikai kapuk</b>	<b>29</b>
2.1. Bevezetés . . . . .	29
2.2. A zárt gyűrű sajátértékproblémája . . . . .	30
2.3. Transzport a gyűrűn keresztül . . . . .	32
2.4. Spintranszformációk, kvantum logikai kapuk . . . . .	35
2.5. Spinpolarizáció, Stern-Gerlach-szerű viselkedés . . . . .	39
2.6. A szórásprobléma megoldása két kimenet esetén . . . . .	39
2.7. A spinpolarizált állapotok jellemzése . . . . .	42
2.8. Összefoglalás . . . . .	44
<b>3. Kvantumgyűrűk együttese, mint többcélú spintronikai eszköz</b>	<b>45</b>
3.1. Bevezetés . . . . .	45
3.2. Kvantumgyűrűk hálózata – a transzportprobléma megoldása . . . . .	46
3.3. Kvantumgyűrűk rendszerének lehetséges spin-transzformációs tulajdonságai	47
3.4. Kvantumgyűrűkön alapuló eszközök robusztussága . . . . .	50
3.5. Szórási folyamatok és termikus fluktuációk hatásának leírása . . . . .	50
3.6. A spintranszformációk robusztusságának a vizsgálata . . . . .	52
3.7. Összefoglalás . . . . .	58
3.8. Kvantumos hálózatokkal kapcsolatos további eredmények . . . . .	59
<b>4. Lokalizált spinek kölcsönhatása időfüggő mágneses térrel: molekuláris mágnesek</b>	<b>61</b>
4.1. Kétnívós rendszer és periodikus gerjesztés . . . . .	62
4.2. Időfejlődés a környezet hatása nélkül . . . . .	65
4.3. Kvázistacionárius megoldások dekoherencia jelenlétében . . . . .	66
4.4. Konvergencia a kvázistacionárius állapotok felé . . . . .	68
4.5. Soknívós rendszer monoton növekvő külső térben . . . . .	72

*BEVEZETÉS*


---

4.6. Koherens időfejlődés . . . . .	75
4.7. A fázisrelaxáció szerepe . . . . .	79
4.8. Összefoglalás . . . . .	80
4.9. Molekuláris mágnesekkel kapcsolatos további eredmények . . . . .	81
<b>5. Erős lézerimpulzusok kölcsönhatása dielektrikumokkal</b>	<b>83</b>
5.1. A sűrűségoperátor időfejlődését meghatározó folyamatok . . . . .	85
5.2. A lézertér hatása . . . . .	88
5.3. Optikai gerjesztés . . . . .	90
5.4. A teljes dinamika . . . . .	91
5.5. Magasfelharmonikus-keltés szilárdtestekben: az elektromágneses mérték szerepe . . . . .	95
5.6. Modell és analitikus eredmények . . . . .	96
5.7. A magasrendű harmonikusok létrejötte . . . . .	98
5.8. Numerikus eredmények egydimenzióban . . . . .	100
5.9. Összefoglalás . . . . .	103
5.10. Lézerrel keltett áramokkal kapcsolatos eredmények hatása . . . . .	104
<b>Összefoglalás, kitekintés</b>	<b>105</b>
<b>Tézisek</b>	<b>109</b>

# Ábrák jegyzéke

1.	Diszperziós reláció több keresztirányú módus esetén . . . . .	4
2.	Ballisztikus vezető áramkörbe kapcsolása . . . . .	6
3.	A vezeték szélességének hatása . . . . .	12
4.	A Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás következményei . . . . .	15
5.	A sajátspinorok irányai kétdimenziós kvantumgyűrűben . . . . .	16
6.	Mágnesek különböző méreteken . . . . .	18
7.	Molekuláris mágnesek nívi külső mágneses térben . . . . .	20
8.	Elkerült nívokereszteződés vázlata . . . . .	21
9.	A vivó-burkoló fázis szemléltetése . . . . .	23
10.	Kísérleti magasfelharmonikus spektrum . . . . .	24
11.	Erős lézerfény és szilárdtest kölcsönhatásának szemléltetése . . . . .	25
12.	Zárt, egy és két kimenettel rendelkező kvantumgyűrű . . . . .	29
13.	Zárt kvantumgyűrű sajátspinorjainak iránya . . . . .	31
14.	Zárt kvantumgyűrű sajátenergiái . . . . .	32
15.	Egy kimenettel rendelkező kvantumgyűrű sajátállapotai . . . . .	34
16.	Az $y$ tengely körül forgató logikai kapu hatékonysága . . . . .	35
17.	A fáziskapunak megfelelő paraméterek . . . . .	37
18.	A $\pi/2$ szöghöz tartozó fáziskapu hatékonysága . . . . .	38
19.	A Stern-Gerlach berendezés analogonja . . . . .	39
20.	A tökéletes spinpolarizáció feltételei . . . . .	41
21.	Polarizáló gyűrű transzmissziós valószínűsége . . . . .	42
22.	Kvantumgyűrűk négyzetes hálózatának vázlata . . . . .	46
23.	Az áram irányítása egy adott kimenő vezetékhez . . . . .	48
24.	A Stern-Gerlach berendezés spintronikai megfelelője . . . . .	49
25.	Véletlen szórási folyamatok hatása egyetlen kvantumgyűrűben . . . . .	52
26.	$N \times N$ -es hálózatok transzmissziója . . . . .	53
27.	$3 \times 3$ -as hálózatok funkcionalitásának az eltűnése . . . . .	54
28.	$5 \times 5$ -ös hálózatok funkcionalitásának az eltűnése . . . . .	55
29.	Egyetlen kvantumgyűrű transzmissziójának hőmérsékletfüggése . . . . .	57
30.	A hőmérséklet befolyása kvantumgyűrűk rendszerének a funkcionalitására . . . . .	58
31.	A kvázistacionárius mágnesezettség . . . . .	67
32.	A mágnesezettség dinamikája különböző paraméterek esetén . . . . .	68
33.	A dekoherencia sebessége . . . . .	69

## ÁBRÁK JEGYZÉKE

---

34.	Kvázistacionárius mágnesezettségi görbék . . . . .	70
35.	Konvergencia a kvázistacionárius mágnesezettségi görbékhez . . . . .	71
36.	A $Mn_{12}$ -Ac molekula energiaszintjei a külső mágneses indukció függvényében . . . . .	74
37.	Mágnesezettségi görbék a 21 nívóval rendelkező rendszerben . . . . .	75
38.	Különböző impulzusalakok hatása a mágnesezettség dinamikájára . . . . .	76
39.	A nívók populációi egy elkerült nívókereszteződés környékén . . . . .	77
40.	A nívók populációi egy elkerült nívókereszteződés után . . . . .	78
41.	Fázisrelaxáció hatása a mágnesezettség időfüggésére . . . . .	80
42.	Dielektrikumokban áramot keltő kísérlet elvi elrendezése . . . . .	84
43.	Hullámcsomag mozgása lézertérben . . . . .	88
44.	Fononszórás hatása hullámcsomag mozgására . . . . .	89
45.	Optikailag gerjesztett vezetési elektronok populációjának időfüggése . . . . .	90
46.	Többfotonos gerjesztés és fononszórás hatása . . . . .	91
47.	Dinamikai Bloch-oszcillációk megjelenése . . . . .	93
48.	Lézerimpulzus által elmozdított összes töltés CEP függése . . . . .	94
49.	A HHG jel forrásának a mértékfüggése . . . . .	101
50.	Egydimenziós szilárdtest céltárgy esetén számolt HHG spektrum . . . . .	102

# 1. fejezet

## Bevezetés, előzmények és célkitűzések

Töltött részecskék és elektromágneses terek kölcsönhatásának a vizsgálata nagyon messzire nyúlik vissza az emberiség történelmében. A megdörzsölt borostyánkő (*ήλεκτρον*) tanulmányozása óta mind a jelenségkör kísérleti vizsgálata, mind pedig az elméleti leírás sokat fejlődött. Ez utóbbi igaz egyrészt magára az elektromágneses térre, másrészt pedig arra az anyagi rendszerre is, amellyel kölcsönhatásba kerül. Mindkét részrendszer esetén jól ismert a klasszikus leírás (Newton-, illetve Maxwell-egyenletek), ahonnan – attól függően, hogy milyen problémát vizsgálunk – másik végletként eljuthatunk a kvantumosan leírt sokrészecske rendszerek kvantált térrel (fotonokkal) való kölcsönhatásáig. Ezen a skálán a jelen dolgozat olyan eredményeket foglal össze, amelyek esetén megfelelő a félklasszikus modell, melyben az elektromágneses teret egy klasszikus (Maxwell-egyenletekkel leírható) időfüggő mezőnek tekintjük, miközben az anyagbeli elektronokra kvantummechanikai leírást alkalmazunk.

Az anyagi rendszereket tekintve ebben a dolgozatban a nanométeres mérettartományba eső félvezető vezetékek („kvantumdrótok”) hálózatairól, mágneses tulajdonságokkal rendelkező komplex molekulákról („molekulamágnesek”) és tömbi dielektrikumokról (illetve széles tiltott sávú félvezetőkről) lesz szó. Kvantumdrótok esetén arra keressük a választ, hogy a vezetési tulajdonságok hogyan változtathatók meg külső elektromos terekkel, miként lehet a vezetésben résztvevő elektronok spinjét befolyásolni ezekkel a terekkel. Molekulamágnesek esetén a mágnesezettség dinamikájáért molekulányi méretre lokalizált, több elektron impulzusmomentumának eredőjeként létrejövő „óriás” spinek a felelősek. Ebben az esetben a fő kérdés az, hogy az időfüggő külső mágneses mező hogyan befolyásolja ezt az eredő spint. Tömbi szilárdtestekkel kapcsolatban pedig az erős lézerterek által kiváltott jelenségekre, a lézertér által keltett áramokra és a létrejövő magasrendű felharmonikusokra koncentrálnak.

A vizsgált „cél tárgyak” esetén a közös pont az, hogy a külső elektromágneses tér alkalmazásának elsődleges célja valamilyen előre eltervezett effektus kiváltása. Ez a kvantumdrótok esetén a leginkább szembeötlő, pl. egy adott céllal összeállított, adott geometriájú hálózat esetén használatos a „nanoeszköz” (nano-device) elnevezés. Mágneses molekulák adattárolóként való esetleges felhasználása a mágnesezettség irányának a befolyásolhatóságát feltételezi. A dielektrikumokkal kapcsolatban vizsgált problémák esetén az anyagban létrejövő változások közül a legmarkánsabb talán az, hogy időlegesen megnő a vezetőképesség, „vezetővé válik” az anyag, ami kellően rövid gerjesztő impulzusok felhasználásával

az elektronikai úton megvalósíthatóknál nagyságrendekkel gyorsabb fényvel vezérelt kapcsolókat eredményezhet.

Az anyagi rendszer helyett a tér szempontjából vizsgálva a kérdést, a fény-anyag kölcsönhatás eredményeképpen létrejövő másodlagos elektromágneses sugárzás egyik legizgalmasabb tulajdonsága erős gerjesztés esetén a gerjesztő frekvencia többszöröseinek a megjelenése a spektrumban. Elegendő számú, megfelelő fázisú magas felharmonikus szuperpozíciója pedig nagyon rövid, az attoszekundumos időtartományba eső elektromágneses impulzust adhat [1]. Ugyanakkor meg kell jegyezni, hogy gázokhoz képest szilárdtest céltárgyak esetén a jelenségeket előidéző fizikai mechanizmusok kevésbé tisztázottak, így a kísérletileg tapasztalt folyamatok alapos megértéséhez is sok nyitott kérdést kell még megválaszolni.

Az eredmények a dolgozatban keletkezésük időrendjében követik egymást. A Szegedi Tudományegyetemen (SZTE), Benedict Mihály témavezetésével végzett, kvantumoptikai tárgyú PhD munkámmal kapcsolatos eredményeim értelemszerűen nem szerepelnek ebben a dolgozatban. A PhD után posztdoktori ösztöndíjasként az Antwerpeni Egyetem (Universiteit Antwerpen) Francois Peeters vezette elméleti szilárdtestfizikai csoportjában dolgoztam, ebből az időből valók a 2. és 3. fejezetekben részletezett, kvantumgyűrűkkel kapcsolatos eredmények. Ezután újra Szegeden, az Elméleti Fizikai Tanszék munkatársaként vizsgáltam meg ezeknek az eredményeknek a stabilitását a korábbiaknál realisztikusabb körülmények között, ennek az összefoglalása található a 3. fejezet második részében. A molekuláris mágnesekkel kapcsolatos számításokat Antwerpenben kezdtem el, de már Szegeden fejeztem be, ezeket az eredményeket a 4. fejezet foglalja össze. Szilárdtest rendszerek és erős lézerterek kölcsönhatásának a problémakörével a garchingi MPQ-ban, Krausz Ferenc csoportjában dolgozva kerültem kapcsolatba. Az itt született eredmények az 5. fejezet első felében találhatóak. E fejezet második feléhez részben a szegedi ELI lézerközpont tervezett és folyó kutatásai szolgáltatták a motivációt. Ennek a témának a kidolgozása idején az SZTE mellett már az ELI-ALPS Varró Sándor vezette elméleti csoportjának részmunkaidős munkatársa voltam. Az egyes anyagi rendszerekkel kapcsolatos eredmények mai szemmel vizsgált relevanciájának, hatásának vizsgálatát a 3.8., a 4.9. és az 5.10. alfejezetekben találjuk, a témához kapcsolódó esetleges további kutatási lehetőségek diszkussziójával együtt.

A bemutatandó eredményekben közös, hogy egyrészt a kvantum dinamikáért főként az anyagbeli elektronok a felelősek, másrészt az első bekezdésben említett félklasszikus leírás (klasszikus mező – kvantumosan leírt töltéshordozók) elegendően pontos képet ad a folyamatokról független részecske közelítésben is.



## 1.1. Kvantumos transzportfolyamatok

A transzportfolyamatok klasszikus elmélete, ami például diffúziós egyenleteken alapulhat, mikroszkopikus szinten a newtoni mechanika szabályaira épül, azaz a részecskék a makrovilágból jól ismert mozgásegyenleteknek engedelmessé válnak. Ez a megközelítés a legtöbb esetben igen jó, a kísérleti tapasztalatokkal egyező eredményeket ad, de időnként komoly eltérések jelentkezhetnek, amelyeket csak úgy lehet kielégítően megmagyarázni, ha abból indulunk ki, hogy a mikrorészecskék viselkedését a kvantummechanika írja le.

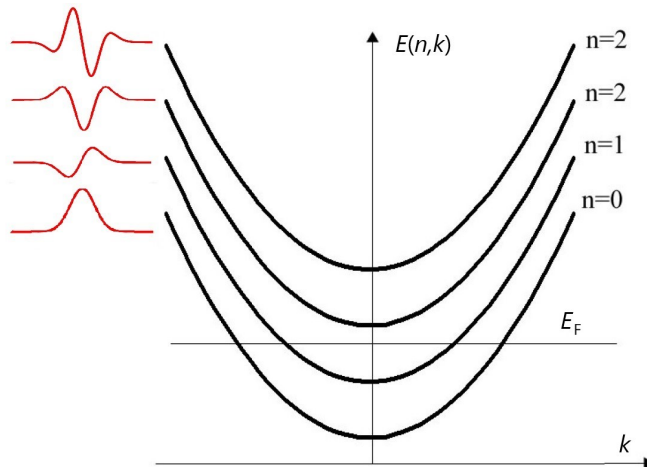
Az elektromos áram példáját tekintve, a klasszikus leírás nagy vonalakban azt jelenti, hogy elektronok sokasága halad a vezetőben átlagosan abba az irányba, amit az ott jelenlévő elektromos tér határoz meg. Ha emellett még valamilyen módon figyelembe vesszük azt is, hogy az elektronok nem gyorsulhatnak korlátlan mértékben, fékezőerő hat rájuk (aminek természetét ezen a ponton még nem szükséges részletesen meghatároznunk), arra jutunk, hogy a klasszikus elektronok lényegében állandó sebességgel haladnak át mondjuk egy vezetőn, nagyjából úgy, ahogyan piciny töltött biliárdgolyóktól várnánk. Ez a kép még szemléletesebbé tehető, ha a fékezőerőt gyakori ütközések következményének tekintjük, és bevezethetők olyan paraméterek is, amelyek a mérési eredményekkel kapcsolatba hozhatók, kísérletileg meghatározhatók. Ez a Drude-modell már alkalmas arra, hogy kísérletekkel összevethető jóslatokat tegyünk a segítségével. Figyelembe véve egyszerű voltát, a modell teljesítőképesége meglepően jó (pl. az Ohm törvény is származtatható ilyen módon).

Egy fontos ellenpélda már a 80-as évek vége óta ismeretes [2]. Képzeljük el, hogy valamilyen módon (a hivatkozott kísérletben statikus elektromos tér alkalmazásával) egyre inkább csökkentjük egy (rövid) vezető keresztmetszetét. Ekkor – egy bizonyos mérettartomány alatt – az Ohm törvénytől jelentősen eltérő módon az tapasztalható, hogy a minta vezetőképessége lényegében diszkrét értékeket vesz fel. A jelenség magyarázata hasonló ahhoz, mintha egyre csökkenő átmérőjű optikai szálak sorozatát tekintenénk. Ha adott frekvenciájú fény halad az üvegszálakban, akkor kezdetben, amikor az átmérő elég nagy, sok keresztirányú módust látunk, de végül eljutunk ahhoz a mérethez, amikor már csak egyetlen módushoz tartozik a szál mentén haladó hullámot leíró megoldás (egymódusú optikai szál). A kvantumos értelemben „hullámtermészerű” elektronokkal hasonló történik keskeny vezetőkben, a vezetőképesség ugrásai azoknál a keresztmetszeteknél figyelhetők meg, ahol a haladó (nem lecsengő) módusok száma megváltozik (ennek a részleteit később tekintjük át).

Fontos megjegyezni, hogy a fenti jelenség értelmezéséhez nem szükséges a kvantumtulajdonságok összessége, az egyik legfontosabb, az interferenciaképesség (más néven koherencia) nem játszik szerepet itt. Ha azonban egy Young-interferométerhez hasonló elrendezést tekintünk, amelyben a beérkező elektron két útvonalat követve is eljuthat a kimenetre, akkor már nem mindegy, hogy az elektront leíró hullámfüggvény két „fele” képes-e interferálni a kimeneten. (Ilyen jellegű, egy bemenettel és egy kimenettel rendelkező, kísérletileg is létező [3, 4] geometriát mutat a 3. ábra.) A legfontosabb mennyiség itt a (fázis)koherenciahossz, ami lényegében azt mutatja meg, hogy mekkora az a távolság, amely esetén még jól észrevehető különbség tapasztalható a között a két eset között, amikor hullámhegy hullámhegygel vagy hullámvölgygel találkozik a kimenetnél. A koherenciahossz függ az anyagi minőségtől és a hőmérséklettől; ma már nem ritkák olyan minták,

amelyekben (igaz, rendkívül alacsony hőmérsékleten) a tizedmilliméteres nagyságrendbe esik. (Érdeemes megjegyezni, hogy a Dude modellbeli, szemléletes „átlagos szabad úthossz” helyett pontosabb leírás esetén még adott anyag esetén is több úthosszról kell beszélni, mivel pl. az energiare relaxációhoz tartozó karakterisztikus hossz más lehet, mint a koherenciahossz.) Az elektronok szilárdtestbeli mozgásának teljesen kvantumos tartományát ballisztikus transzportnak szokás nevezni, a 2. és 3. fejezetekben ezzel a tartománnyal fogunk foglalkozni. (A másik – jelen dolgozatban a továbbiakban kisebb mértékben érintett – végtel a diffúzív transzport, amikor a Drude modell jól működik, és érvényes az Ohm törvény.)

A másik irányból közelítve, a félvezető technológia hagyományos anyagai esetén a miniatürizálás lassacskán arra a fokra jut, amikor a kvantumos effektusok elkerülhetetlenné válnak. A kommerciális processzorokban jelenleg működő MOSFET technológia (megfelelő óvatossággal kezelendő) tervezett fejlődésének (International Roadmap for Devices and Systems) jelenlegi utolsó bejegyzése 5 nm csíkszélességet említ, ahol már mindenképpen jelentősek a kvantumos effektusok. Ez persze bizonyos szempontból pozitív, hiszen úgy is olvasható, hogy az emberi technológia azon a határon van, hogy kvantummechanikai alapokon működő szilárdtest eszközök tűnnek fel a láthatáron. (Ez még akkor is igaz, ha a mérőldkőnek is tekinthető/kikiáltott Sycamore nevű kvantumprocesszor más technológián alapul, szupravezető áramkörökből áll [5].)



**1. ábra:** Az energia függése a  $k$  vektor áramirányú komponensétől különböző transzverzális módusokra, parabolikus  $V(y)$  potenciál esetén. Ennek a potenciálnak a sajátfüggvényeit (illetve azok valós részét) a bal oldalon pirossal felrajzolva láthatjuk. Egy adott anyagban, konkrét  $V(y)$  potenciál esetén, csak véges sok transzverzális módushoz tartozik síkhullám megoldás: ha  $E(n, k) > E_F$  minden  $k$ -ra (mint az ábrán  $n > 1$  esetén), akkor az adott módus betöltetlen lesz a végtelennek gondolt vezetőben alacsony hőmérsékleten.

## Kvantumos vezetékek alapvető tulajdonságai

A korábbiak alapján az elektromos áram vezetésének kvantumos elmélete egyrészt szükségsszerűvé válhat már a hagyományos elektronikai eszközök tervezése során is, másrészt a technológia módját adhat teljesen új alapokon nyugvó információtechnológiai eszközök kifejlesztésére is. Ennek a felismerése motiválta a 2. és 3. fejezetekben ismertetett eredményeket, amelyek lényegében a Landauer és Büttiker nevéhez fűződő elmélet speciális esetekre történő alkalmazásai. A teljesség kedvéért ezért a következő alfejezetben egy rövid összefoglalása következik ennek az elméletnek, amely kapcsolatot teremt egy kvantumosan viselkedő minta vezetőképessége és szóráselméleti fogalmak, mint pl. a transzmissziós és reflexiós együttható között. Most pedig az ott szereplő alapvető fogalmakat vezetjük be röviden. A legfontosabb jelenségek leírhatóságát szem előtt tartva, egyelektron képet alkalmazunk (amely a modell valóságúsága miatt lehet átlagtér-közelítésen alapuló is). A tapasztalatok azt mutatják, hogy nem túl nagy elektronkoncentráció (amikor az elektronkorreláció jelentősen nem befolyásolja az eredményeket), és nem túl kis méretek (amikor még nem számít túlságosan egyetlen elektron belépése a rendszerbe) esetén ez a modell jó kvalitatív leírást ad; többek között az Aharonov-Bohm [6], Aharonov-Casher [7–9], vagy az egész indexű kvantum Hall-effektus [10], illetve a széli állapotok (edge states) jelentősége is megérthető ezen a módon [11].

Kiindulásként tekintsünk egy kvantumozott vezetékkel, ahol az áram az  $x$  irányban folyik, erre merőlegesen pedig potenciálfalak korlátozzák a mozgást. A szemléltetés kedvéért vegyük a kétdimenziós esetet, és tegyük fel, hogy olyan elektronenergiákon és olyan sávon belül oldjuk meg a problémát, ahol az effektív tömeg közelítés érvényes (ez igaz pl. félvezetők vezetési sávjának a minimuma közelében), illetve legyen az effektív tömeg tenzor arányos az egységgel (a diagonális elemeket pedig jelölje  $m^*$ ). Ekkor az egyelektron képből felírt Hamilton-operátor egy olyan  $m^*$  tömegű részecskét ír le, amely szabadon elmozdulhat az  $x$  irányban, a merőleges irányban pedig egy  $V(y)$  potenciál hatását érzi:  $H = (p_x^2 + p_y^2)/2m^* + V(y)$ . Ha a potenciál valóban nem függ a terjedési iránytól egybeeső  $x$  koordinátától, akkor ennek a Hamilton-operátornak a sajátfüggvényei szorzat alakban kereshetők, és könnyen látható módon a következő alakba írhatók:

$$\Psi_n(k, x, y) = e^{ikx} \chi_n(y), \quad (1.1)$$

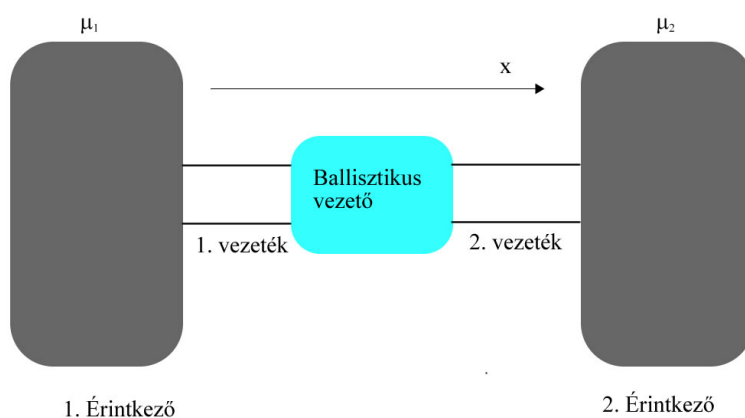
ahol  $\chi_n(y)$  a  $H_y = p_y^2/2m^* + V(y)$  sajátfüggvénye:  $H_y \chi_n(y) = \epsilon_n \chi_n(y)$ . Az (1.1) sajátfüggvényhez tartozó teljes energia  $E(n, k) = \hbar^2 k^2/2m^* + \epsilon_n$ , ahol az  $n$  egész szám tehát a terjedési irányra merőleges (azaz transzverzális) módusokat indexeli. A példa kedvéért harmonikus  $V(y)$  potenciált tekintve a sajátenergiák  $k$  függését az 1. ábrán láthatjuk. A különböző  $n$  értékekhez tartozó parabolák a bal szélén pirossal felvázolt  $\chi_n(y)$  függvényekhez tartoznak (amelyek ebben az esetben választhatók valósnak, a jól ismert Gauss függvényvel szorzott Hermite polinomokról van szó). A transzverzális módusokra gyakran használatos az elektromos „alsáv” (subband, miniband) vagy alnívó elnevezés is, arra utalva, hogy az elektromos eredetű erő, ami a vezetékbe kényszeríti az elektronokat, olyan nívóstruktúrát hoz létre, amely az egymás fölött lévő sávokra hasonlít. Fontos azonban megjegyezni, hogy – ahogyan az elnevezés is mutatja – ezek az alsávok egy adott, a kristályszerkezet által meghatározott sávon (pl. a vezetési sávon) belül helyezkednek el, a közöttük lévő energiakülönbség általában nagyságrendekkel kisebb, mint amit pl. a veze-

## BEVEZETÉS

tési és a vegyértéksáv között találunk egy félvezető esetében.

Az egyes keresztirányú módusok betöltöttsége attól függ, hogy az adott anyag Fermi-energiája mekkora a módusra jellemző  $E(n, k)$  görbe minimumához képest. Ha a Fermi-energia alacsonyabb, mint ez a minimum, akkor a módus alacsony hőmérsékleten lényegében betöltetlen lesz.

Érdeemes megjegyezni, hogy valós  $k$ -t feltételezve, a síkhullám helyett az  $e^{\pm kx}$  függvényeket véve az (1.1) egyenletben, formálisan szintén sajátfüggvényeket nyerünk, csak ezek nem haladó hullámot írnak le. Végtelen vezetőben ezek a hullámfüggvények végtelenné válnak, így nem kapcsolható hozzájuk fizikailag értelmes állapot, de egy véges tartományon már ezek az – optikai analógiával – „evaneszcens” megoldások is fontos szerepet játszhatnak.



**2. ábra:** Ballisztikus vezető áramkörbe kapcsolása. A két oldalon található érintkezőkben különbözik a kémiai potenciál, ennek hatására folyik az áram a vezetőben.

## A Landauer-Büttiker elmélet<sup>1</sup>

Ebben az alfejezetben azt a kérdést járjuk körül, hogy véges méretű ballisztikus eszközök vezetőképessége (conductance) hogyan határozható meg. Ahhoz, hogy a probléma jóldefiniált legyen, a vizsgálni kívánt vezetőt össze kell kötnünk egy feszültségforrással, zárni kell az áramkört. Nyilván az is fontos, hogy a kört alkotó egyéb elemek vezessék az áramot, így a 2. ábrán vázolt elrendezés a célszerű, illetve a gyakorlat szempontjából ez bír a legnagyobb jelentőséggel.

Itt tehát a „méréndő” minta vezetékeken keresztül kapcsolódik az érintkezőknek (contact) nevezett, általában nagyobb méretű tartományokhoz, amelyekben a kémiai potenciál külső feszültség (és esetleg a különböző anyagi minőség) miatt nem azonos. Úgy is tekinthetjük, hogy a vezetőlől kiáramló töltéseket ezek az érintkezők pótolják, miközben belső állapotuk lényegében nem változik meg. Termodinamikai analógiával: az érintkezők

<sup>1</sup>Ez az alfejezet lényegében a [11, 12] könyveken alapul, és szövegszerű részeket használ a [E11] saját jegyzetből.

olyanok, mint a hőtartályok, a vizsgálni kívánt „kis” rendszer szempontjából praktikusán végtelen sok szabadsági fokkal rendelkeznek, befolyásolják a kis rendszer állapotát, az azonban nem hat vissza rájuk. Klasszikus áramkörökre utalva, ahhoz, hogy a vezetőképesség mérésének legyen értelme, az szükséges, hogy az érintkezők „végtelenül” jobb vezetők legyenek, mint az a rendszer, amit mérni szeretnénk.

Elsőként tekintsük azt az esetet, amikor pusztán egy  $L$  hosszúságú,  $d$  szélességű, az egyszerűség kedvéért kétdimenziós ballisztikus vezeték helyezünk az érintkezők közé. (Mintha a 2. ábrán nem volna középen vezető, és a két, ballisztikusnak gondolt vezeték összeérne.) Ha klasszikus, ohmos ellenállás esetével állnánk szemben, akkor a vezetőképességet a geometria és a  $\sigma$  (kétdimenziós) fajlagos vezetőképesség határozná meg:  $G = \sigma d/L$ . Ez azt jelenti, hogy  $L$  csökkenésével  $G$  minden határon túl növelhető. Ma már kísérletileg is igazolt tény [2], hogy ez nem így van, a vezető hosszának csökkentésével a vezetőképesség egy véges  $G_c$  értékhez tart. Ahogyan majd látni fogjuk, ez alapvetően annak a következménye, hogy a transzverzális módusok száma lényegesen nagyobb az érintkezőkben, mint a mintában (ahol az előzőeknek megfelelően az is elképzelhető, hogy csak egyetlen olyan módus van, ami haladó hullámú megoldáshoz kapcsolódik), a minta nem feltétlenül tud tetszőleges transzverzális eloszlással rendelkező áramot „felvenni”. Emiatt  $G_c$  reciprokát,  $R_c$ -t kontakt ellenállásnak (contact resistance) szokás hívni. Ennek egyszerű kiszámításához hasznos egy közelítés, a „visszaverődésmentes” érintkező (reflectionless contact) bevezetése. Ez azt jelenti, hogy a vezetőből az érintkezőbe veszteség (visszaverődés) nélkül tudnak átjutni az elektronok. Az idézőjel a „visszaverődésmentes” szó körül arra utal, hogy a fordított irányban ez korántsem feltétlenül igaz (ballisztikus esetben valószínűleg ebből a visszaverődésből származik az ellenállás). Az a feltevés, hogy egy keskeny vezetőből az elektronok elhanyagolható reflexióval jutnak egy széles érintkezőbe, amellet, hogy fizikailag hihető, numerikus számításokkal is igazolható.

Kvantummechanikai értelemben vett ortogonalitásuk miatt az egyes transzverzális módusok függetlennek tekinthetők. Egyetlen módot tekintve, a fenti feltevésekkel arra jutunk, hogy ahhoz

$$I = \frac{2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \quad (1.2)$$

áram tartozik. (Ennek az elemi levezetése megtalálható a [E11] jegyzetben, vagy a [11] könyvben). Innen a kontakt ellenállás:

$$R_c = G_c^{-1} = \left( \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e} \right)^{-1} = \frac{h}{2e^2}. \quad (1.3)$$

Ha  $M$  számú módus szállítja az áramot, akkor a fentiekkel megegyező feltételek mellett azt kapjuk, hogy,

$$G_c = \frac{2e^2}{h} M, \quad R_c = \frac{h}{2e^2 M}, \quad (1.4)$$

ami azt jelenti, hogy egy ballisztikus minta vezetőképessége kvantált,  $\frac{2e^2}{h}$  („conductance quantum”) egész számú többszöröse. Számszerűen,  $R_c = 12.9 \text{ k}\Omega/M$ , a kontakt ellenállás tehát egy viszonylag nagy értékről indul egyetlen módus esetén, de  $M$  reciprokával csökken, ahogyan a módusok száma növekszik. (A kvantumos Hall-effektus leírásában [10] is jelentős, az  $M = 1$  értékhez tartozó kontakt ellenállás kétszeresét,  $25.8 \text{ k}\Omega$ -ot von Klitzing

## BEVEZETÉS

állandónak is nevezik.) Makroszkopikus esetben, amikor  $M$  igen nagy,  $R_c$  hozzájárulása az eredő ellenálláshoz rendszerint elhanyagolható. Ha azonban  $M$  elegendően kicsi, akkor, ahogyan kísérleti eredmények is mutatják [2], egy-egy újabb módus megjelenése az ellenállás mérhető csökkenéséhez vezet.

Tekintsük most azt az esetet, amikor magában a ballisztikus vezetőben (annak geometriája, vagy enyhe szennyezettsége miatt) is jelen vannak szórócentrumok. Ekkor azok az elektronok, amelyek egyszer már beléptek a vezetőbe, nem feltétlenül haladnak át rajta, ami ahhoz vezet, hogy az ellenállást sem csupán  $R_c$  határozza meg. A fentiek alapján ekkor

$$I_{be} = \frac{M2e}{h} (\mu_1 - \mu_2) \quad (1.5)$$

áram lép be a vezetőbe. Ha annak a  $T$  valószínűségét, hogy az elektronok átjutnak a vezetőről, az egyszerűség kedvéért minden módusra azonosnak vesszük, akkor a kifolyó áram

$$I_{ki} = T \frac{M2e}{h} (\mu_1 - \mu_2). \quad (1.6)$$

A fenti két áram különbsége „visszaverődik”,

$$I_{vissza} = (1 - T) \frac{M2e}{h} (\mu_1 - \mu_2), \quad (1.7)$$

ezt az áramkomponenst tehát azok az elektronok alkotják, amelyek nem jutnak át a vizsgált vezetőről. A teljes áram ezek alapján  $I = I_{ki} = I_{be} - I_{vissza}$ , ahonnan a vezetőképesség:

$$G = \frac{2e^2}{h} MT. \quad (1.8)$$

Ez a Landauer-formula [13]. Alaposabban megvizsgálva az egyenletet, látszik, hogy a  $T = 1$  esetben visszakapjuk a kontakt ellenállás reciprokát, azaz viszonylag szemléletesen látható, hogy a megnövekedett ellenállás a vezető belső struktúrájának a következménye. Formálisan, ha a Landauer-formula alapján adott ellenállást az

$$R = \frac{h}{2e^2 M T} = \frac{h}{2e^2 M} + \frac{h}{2e^2 M} \frac{1 - T}{T} \quad (1.9)$$

alakba írjuk, akkor azt látjuk, hogy az eredő ellenállás  $R_c$  és egy, a transzmissziós valószínűség által meghatározott tag összege, úgy, hogy ez utóbbi eltűnik, ha  $T = 1$ . Az (1.8) egyenlet reciproka tehát a teljes  $R$ -et adja meg, *beleértve* a kontakt ellenállást is. Fontos, és eddig nem részletezett kérdés azonban: pontosan mit is értünk a  $T$  transzmissziós valószínűségen? Visszagondolva a 2. ábrára, arról van szó, hogy mely pontok (síkok) között értelmes  $T$ , „honnan” és „hová” jut el az elektron ezzel a valószínűséggel? Ez (számolás)technikai értelemben sem elhanyagolható kérdés, hiszen ha a két referencia pontot mélyen az érintkezők belsejében választjuk (ami első gondolatként természetesnek tűnik), akkor lényegesen nehezebb  $T$  meghatározása, mintha mondjuk a valószínűséggel azonosítanánk, hogy az elektron a bal oldali vezetékből átjut a jobb oldaliba. Az első lehetőség, szerencsére – amellet, hogy nehezebb problémát definiálna – nem is helyes, hiszen a kontakt ellenállás valamilyen értelemben már számot ad arról, hogy az érintkezők

határfelületén átjutottak az elektronok. „Visszaverődésmentes” érintkezőket feltételezve megmutatható [11], hogy fizikailag a második lehetőség értelmes, azaz  $T$  annak a valószínűségét adja meg, hogy magán a ballisztikus vezetőkön átjusson egy elektron. Tegyük hozzá, hogy ehhez erősen szükséges, hogy a 2. ábrán látható vezetékek „tökéletesek” legyenek, más szóval a rájuk vonatkozó (a fenti értelemben vett) transzmissziós valószínűség egységnyi legyen.

A fenti modell viszonylag kis változtatásokkal átvihető arra az esetre is, amikor a ballisztikus vezető kettő helyett három vagy több érintkezőhöz kapcsolódik. A legfontosabb példa talán a Hall-feszültség mérése, amikor két érintkezőn át áram folyik, a másik kettőt pedig feszültségmérésre használjuk.

A legáltalánosabb esetben az összes érintkező különböző kémiai potenciállal rendelkezik. Praktikus szempontokból ilyenkor inkább a  $V$  feszültségeket szokás a probléma jellemzésére használni, amik persze azonos anyagú érintkezők esetén könnyen átválthatók kémiai potenciálokká. A fentiekben vázolt Landauer-féle elmélet Büttiker [14] nevéhez kötődő általánosítása szerint a  $p$ -edik érintkezőn átfolyó áram kifejezése

$$I_p = \frac{2e^2}{h} \sum_{q \neq p} \bar{T}_{qp} V_p - \bar{T}_{pq} V_q, \quad (1.10)$$

ahol a két érintkező esetétől felülvonással megkülönböztetett  $\bar{T}_{qp}$  annak a valószínűségét adja, hogy a  $p$ -edik vezetéken belépő elektron átjut a  $q$ -edik vezetékbe. Az észrevétel tehát lényegében az, hogy egy konkrét vezetéken átfolyó áramot az összes lehetséges módon idejutó elektronok együttes hatása hozza létre. A fenti egyenlet a vezetőképességi tenzor bevezetésével az

$$I_p = \sum_{q \neq p} G_{qp} V_p - G_{pq} V_q \quad (1.11)$$

alakot ölti, ahol tehát

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}. \quad (1.12)$$

Fontos észrevenni, hogy ez a leírás a feszültséget és az áramerősséget bizonyos értelemben azonos módon kezeli. Ha pl. két érintkező között a feszültséget mérjük, akkor a „mérőkörben” nem folyhat áram, a mért feszültség pedig kifejezhető a vezetőképesség tenzor, valamint a többi feszültség ismeretében. Ha két érintkező között a feszültséget ismerjük, akkor pedig az átfolyó áram számítható ki  $G$  ismeretében.

Érdeemes megvizsgálni, hogy a fentiekben összefoglalt Landauer-Büttiker formalizmus milyen esetekben használható valódi fizikai rendszerek realiztikus leírására. Koncentráljunk most ennek a kérdésnek a hőmérséklettel összefüggő vonatkozásaira, illetve arra, hogy a modell linearitása milyen feltételek mellett teljesül.

Eddig lényegében „nulla” hőmérsékletéről beszéltünk, azt láttuk, hogy egyenleteink helyesek az alacsony hőmérsékletű határesetben. Kézenfekvő (és helyes is [11]) az az általánosítás, hogy véges hőmérsékleten az áramot az

$$I_p = \int i_p(E) dE \quad (1.13)$$

## BEVEZETÉS

energiára átlagolt kifejezés adja, ahol

$$i_p(E) = \frac{2e}{h} \sum_q \bar{T}_{pq}(E) (f_p(E) - f_q(E)). \quad (1.14)$$

Itt  $f_p(E)$  jelöli a  $p$ -edik érintkezőre vonatkozó Fermi-függvényt:

$$f_p(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_p}{kT}\right) + 1}, \quad (1.15)$$

$\bar{T}_{pq}(E)$  pedig annak a valószínűsége, hogy egy  $E$  energiával rendelkező elektron, ami a  $q$ -adik vezetéken át lép be a ballisztikus eszközbe, átjut a  $p$ -edik vezetékbe. Ezután, ha az (1.14) egyenletben szereplő integrál argumentuma elegendően lassan változik, akkor sorbafejthetjük, és megállhatunk az első rendnél. Így lineáris választ nyerünk ( $V_p = \mu_p/e$ ):

$$I_p = \sum_{q \neq p} G_{qp} (V_p - V_q), \quad (1.16)$$

csak most már vezetőképesség tenzor elemei tartalmazzák az energiára történő átlagolást:

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \int \bar{T}_{pq}(E) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \quad (1.17)$$

Ebben az egyenletben az egyensúlyi Fermi-függvény szerepel,  $f_0(E)$  tehát azt a szituációt írja le, amikor a  $p$  és  $q$  érintkező azonos kémiai potenciálon van, és így áram sem folyik. Az ettől az egyensúlytól való kicsiny eltérést vettük a sorfejtéssel figyelembe. Így tehát a közelítés, ami a lineáris válaszhoz vezetett, akkor érvényes, ha maga a sorfejtés jó közelítésnek tekinthető. Ez igaz, ha  $|\mu_p - \mu_q|$  sokkal kisebb, mint az tartomány, ahol a transzmissziós valószínűség lényegében függetlennek tekinthető az energiától. Ennek a tartománynak az  $\epsilon_c$ -vel jelölt, energiában mért szélességét korrelációs energiának nevezik. Ha a fentiek felül még  $kT \ll \epsilon_c$  is teljesül, akkor

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{pq}(E_F), \quad (1.18)$$

azaz visszakaptuk a korábban kiszámított eredményt. Összefoglalva tehát, azt, hogy a rendszer válasza lineáris lesz-e, az határozza meg, hogy a korrelációs energia hogyan viszonyul a két érintkező kémiai potenciáljának a különbségéhez. Szintén az  $\epsilon_c$  energiát kell  $kT$ -vel összehasonlítani ahhoz, hogy meghatározzuk, tekinthető-e a hőmérséklet alacsonynak a vizsgált probléma szempontjából.

## Alacsony dimenziós esetek

Az előzőekben az egyszerűség kedvéért többször használtunk olyan modellt, amelynél csak egyetlen transzverzális irányt vettünk figyelembe. Ez a kétdimenziós kép nem csupán a szemléltetés miatt érdekes, bizonyos esetekben a vezetés valóban egy felület mentén valósul meg, elegendő pl. a grafénre gondolnunk. Természetesen itt nem szigorúan kétdimenziós



rendszerekről van szó, de igaz, hogy létezik egy irány (legyen az a  $z$ ), melyben a minta kiterjedése lényegesen kisebb, mint a másik kettőben. Ez természetesen azt is jelenti, hogy az elektronok hullámfüggvénye is sokkal jobban lokalizált a  $z$  irányban. Ha egyszerű, harmonikus potenciálokkal akarjuk leírni a jelenséget, akkor egy kétdimenziós kvantumdrót esetén írhatjuk, hogy a Hamilton-operátor

$$H_{3D} = \frac{p^2}{2m^*} + V(y, z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m^*} - \frac{1}{2m^*}(\omega_x x^2 + \omega_z z^2), \quad (1.19)$$

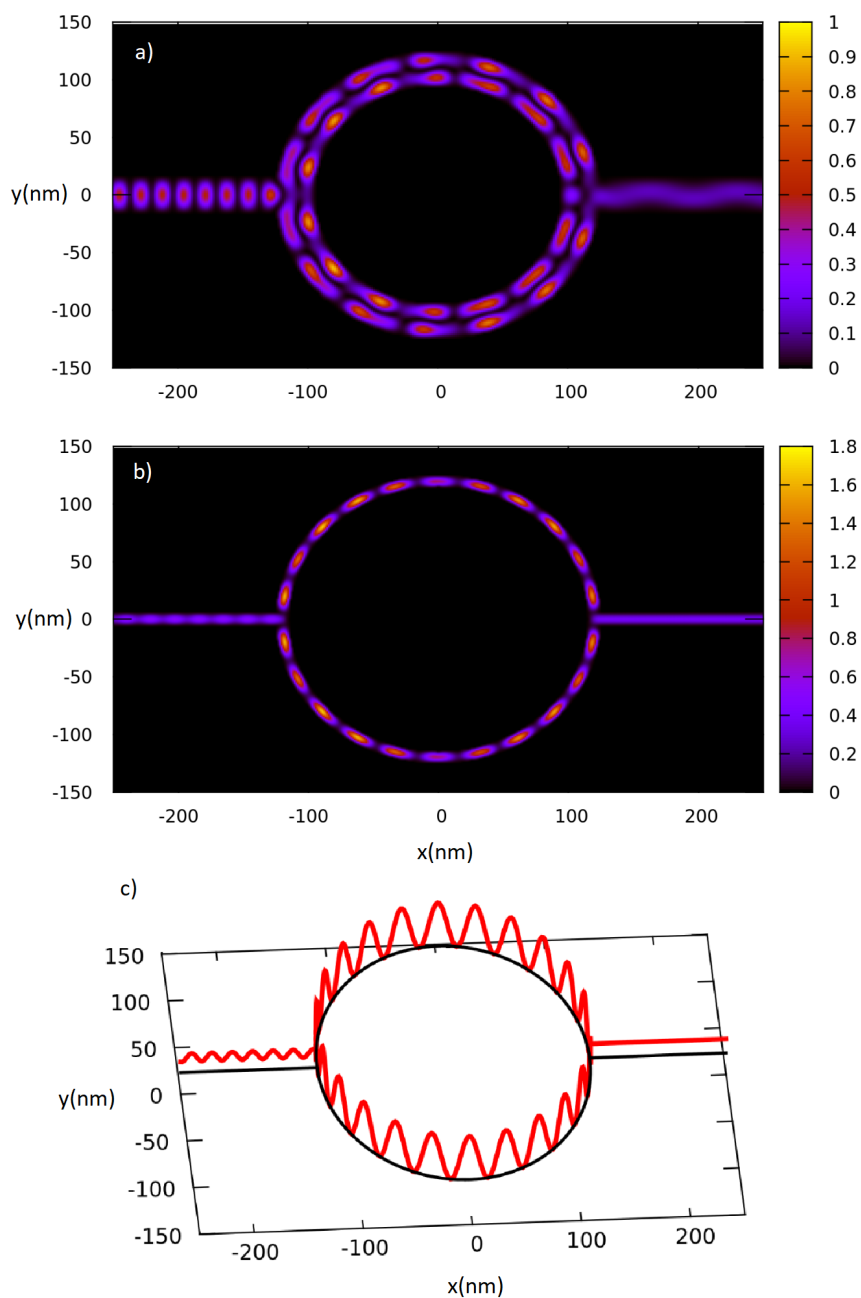
ahol  $\omega_z \gg \omega_y$  jelenti azt, hogy sokkal erősebb az az erő, ami  $z$  irányban a mintába szorítja az elektronokat annál, mint ami  $y$  irányban a vezetékben tartja őket (az áram terjedésének irányától ( $x$ ) pedig nem is függ a potenciál). A modellhez tartozó sajátenergiák  $E(n, m, k) = \hbar^2 k^2 / 2m^* + \hbar\omega_z(n + 1/2) + \hbar\omega_y(m + 1/2)$  alakú módon különülnek alsávok sokaságára (lásd az 1. ábrát), de geometriából következően  $E(n+1, m, k) - E(n, m, k) \gg \gg E(n, m+1, k) - E(n, m, k)$ . Ez azt jelenti, hogy ha nem tekintünk túl nagy energiákat, akkor  $z$  irányban a rendszer az alapmódban marad, miközben  $y$  irányban több módus is populált lehet. Ez annak a lehetőségét is felveti, hogy ezeken az energiákon olyan effektív Hamilton-operátort vezessünk be, amely pusztán  $x$ -től és  $y$ -től függ. Ez naivan azt jelenti, hogy egyszerűen elhagyjuk az (1.19) egyenletből a  $z$  irányú mozgáshoz tartozó kinetikus energiát,  $p_z^2/2m^*$ -ot. Ennél konzekvensebb módszer az, ha a fenti  $H_{3D}$ -nek a  $z$  irányú alapállapotban vett várható értékét tekintjük a kétdimenziós Hamilton-operátornak. Egyenlettel kifejezve: ha  $(p_z^2/2m^* - 1/2m^*\omega_z z^2)\chi_n(z) = \hbar\omega_z(n + 1/2)\chi_n(z)$ , akkor

$$H_{2D} = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_0^*(z) H_{3D} \chi_0(z) dz. \quad (1.20)$$

Ez az eljárás és a naiv módszer ( $p_z^2/2m^*$  elhanyagolása) egyenes vezeték esetén egymástól csak konstansban különböző kétdimenziós Hamilton-operátorokat ad, de általános esetben az (1.20) egyenleten alapuló eljárás a megbízható [15].

Ez gondolatmenet továbbvihető arra az esetre is, amikor a tipikus energiák még az  $y$  irányú alap és első gerjesztett módus energiakülönbségénél is jóval kisebbek. Ekkor a rendszer lényegében egydimenziós, folyamatosan az  $y$  és  $z$  alapmódban van. Az effektív egydimenziós Hamilton-operátort pedig a fenti módon megkapott kétdimenziós  $H_{2D}$  várható értéke adja az  $y$  irányú alapmódban.

Ezidáig csak egyenes kvantumdrótokat tekintettünk, ahol a szennyezések híján a kvantum terjedésben nem tapasztalható reflexió. Kísérletileg is léteznek azonban olyan esetek, amikor a geometria ennél jóval összetettebb. Ilyenkor magának a vezetéknek az alakja, esetleges elágazásai is okai lehetnek annak, hogy egy adott irányból belépő elektron hullámfüggvénye visszaszóródik ugyanebbe az irányba. A 3. ábra mutat egy tipikus példát, amikor a balról érkező elektron egy gyűrűbe lép be, ott kvantumos interferencia lép fel, aminek eredményeként reflexió tapasztalható, és a kimenő vezetékre vonatkozó transzmissziós valószínűség sem lesz egységnyi. Ez az ábra azt is jól szemlélteti, hogy hogyan alakul ki a kvázi-egydimenziós viselkedés, ha egyre jobban szűkítjük a kvantumdrótok szélességét. Ez azért is fontos, mert az ábra c) részéhez tartozó egydimenziós sajátértékprobléma gyakran analitikusan is megoldható (ahogyan az a következő két fejezetben



**3. ábra:** A vezeték szélességének hatása a ballisztikus transzport során létrejövő állandósult valószínűségi sűrűsége kvantumgyűrűk esetén. Az elektron a bal oldali vezetékből érkezik (pozitív  $x$  irányú  $k$  hullámszámmal), részben visszaverődik a gyűrűn (ez okozza az interferenciamintázatot a bal oldali vezetékben), a hullámfüggvény interferál a gyűrűben, ami meghatározza a jobb oldali vezetékbe történő szóródás (ami lényegében a transzmisszió) mértékét. A gyűrű külső átmérője minden esetben 250 nm, a vezetékek szélessége a felső ábrán 30 nm, középen 10 nm, legalul pedig az egydimenziós modell szemléltetését látjuk. A bejövő elektronenergia minden esetben 10 meV a legalsó alsáv aljától mérve. A sűrűségeket úgy normáltuk, hogy az a) ábra maximuma az egység.

olvasható). Kicsit pontosabban az igaz, hogy pl. a kvantumgyűrű esetén mind az önmagában tekintett gyűrű, mind pedig az önmagában tekintett vezetékek Hamilton-operátora analitikusan diagonalizálható. Ha azonban a részeket összeillesztjük, akkor a megoldhatósághoz szükséges, hogy a csomópontokban fizikailag értelmes feltételt szabjunk a hullámfüggvény viselkedésére. Stacionárius áramok esetén elő kell írunk, hogy Kirchhoff csomóponti törvényének kvantumos megfelelőjeként egy csomópontba be- illetve onnan kifolyó valószínűségi áramsűrűségek előjeles összege zéró legyen. Emellett racionális megkövetelni a hullámfüggvények folytonosságát a csomópontokban. Ezeket az előírásokat Griffith-féle peremfeltételeknek [16] nevezik, a továbbiakban ezeken alapuló számításokat fogunk részletezni. (Egy másfajta, S-mátrixokon keresztül megfogalmazott peremfeltétel alkalmazását láthatjuk pl. a [17] munkában.)

## 1.2. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás

### Háromdimenziós eset

Az elektron spin szabadsági fokának manipulálására az egyik hatékony módszer az ún. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatáson alapul. Az elektronspin a relativisztikus kvantummechanikában természetes módon jelenik meg, a nemrelativisztikus elméletbe azonban bizonyos értelemben mesterséges módon kell beilleszteni. Egy lehetséges, konzisztens módszer, ha a külső elektromágneses tér figyelembevételével felírt Dirac-egyenlet nemrelativisztikus határesetét tekintjük. A fénysebesség reciproka ( $1/c$ ) szerint sorfejtést végezve, az első korrekció a Dirac-spinor „nagy komponensére” vonatkozó Pauli-egyenletet szolgáltatja [18]. Maga a spin-pálya kölcsönhatás a sorfejtés következő rendjéből adódik, ekkor megjelenik egy  $\sigma(\mathbf{E} \times \mathbf{p})$ -vel arányos tag, ahol  $\sigma$  a Pauli mátrixok alkotta vektor,  $\mathbf{E}$  a külső elektromos mező,  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  pedig a kanonikus impulzus operátora. A jelenség szokásos értelmezése az, hogy a mozgó elektron vonatkoztatási rendszeréből az  $\mathbf{E}$  tér nem tisztán elektromos, lesz egy  $\mathbf{B}$  mágneses komponense is. A Lorentz transzformáció kis sebességekre érvényes közelítő alakjának felhasználásával láthatóvá válik, hogy ez a  $\mathbf{B}$  arányos  $\mathbf{E} \times \mathbf{p}$ -vel, azaz a spin-pálya kölcsönhatás lényegében a mozgó elektron által érzékelt mágneses mező kölcsönhatása az elektron spinjéhez csatolt mágneses nyomatékkal.

Mágneses tér nélkül, centrális  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  skalárpotenciál terében mozgó  $m$  tömegű elektronra ez a tag

$$H_{SOI} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{L}\mathbf{S} \quad (1.21)$$

alakba írható, ahol  $\mathbf{L}$  a pálya-impulzuszórártómomentumot jelöli, és bevezettük az  $\mathbf{S} = \hbar\sigma/2$  spin operátort. Az  $\mathbf{L}\mathbf{S}$  szorzat indokolja a spin-pálya kölcsönhatás (spin-orbit interaction: SOI) elnevezést.

Emmanuel I. Rashba arra mutatott rá [19], hogy inverziós szimmetriát nélkülöző kristályrácsokban egy

$$H_{RSOI} = \alpha_R \sigma(\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \quad (1.22)$$

alakú tag jelentős szerepet játszhat, a sávok spinfüggő felhasadását okozhatja pl. az energiaminimumok környékén. Ahogyan az látható, ez a kifejezés szinte megegyezik azzal, ami

a Dirac-egyenletből származtatható, ugyanakkor a magok által létrehozott potenciál miatt a prefaktor (Rashba paraméter,  $\alpha_R$ ) jóval nagyobb is lehet, mint szabad térben. Mivel  $H_{RSOI}$ -ban megjelenik az elektronok által érzett  $\mathbf{E}$  elektromos tér, már ezen a ponton érdemes megjegyezni, hogy egy külső térerősség, amely hozzáadódik az anyagban egyébként is jelenlévő térerősséghez, befolyásolni tudja a Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatást. Az eddigiekben ismertetett jellegű, tömbi Rashba-effektust mutató anyagok közül jelenleg BiTeI kristályokban [20] a legnagyobb a különböző spinirányokhoz tartozó sávok felhasadása ( $\approx 0.1$  eV). BiTeI és BiTeBr kristályokkal kapcsolatos magyar vonatkozású kísérletek eredményeit pl. a [21, 22] munkákban olvashatjuk. Ezek az anyagok azonban jelenleg még nem elegendően tiszták ahhoz, hogy a kísérletekben a ballisztikus transzportot is vizsgálni lehessen.

A teljesség kedvéért érdemes megjegyezni, hogy ismeretes egy más típusú (pl. köbös) kristályokban előforduló, Dresselhaus-típusú SOI-nak nevezett kölcsönhatás is, amely az impulzusokban köbös tagokat tartalmaz és nem kontrollálható külső elektromos térrel [23].

## Rashba-effektus két dimenzióban

1984-ban Bychkov és Rashba [24] megmutatták, hogy kétdimenziós elektrongázban (two dimensional electron gas: 2DEG) zajló transzportfolyamatokra szintén jelentős hatással lehet a spin-pálya kölcsönhatás. Ilyen rendszerek jellemzően két különböző félvezető réteg határán jönnek létre, amikor a vezetés lényegében a közeghatár mentén zajlik. Természetesen általában (tetszőleges anyagpáros esetén) nem alakul ki 2DEG, a tipikus példa arra, amikor azonban kialakul, az InAlAs/InGaAs heteroátmenet [25, 26], amikor a két anyag érintkezési felületénél a vezetési sávnak lokális minimuma van, úgy, hogy ennek a minimumnak az értéke a Fermi-energiánál kisebb. Ez azzal jár, hogy a közeghatár környékén található elektronok könnyen elmozdulnak, itt az anyag lényegében vezetőként viselkedik. Ez a jelenség teszi lehetővé, hogy a kísérletekben különböző geometriájú vezetékek hálózatát hozzák létre azáltal, hogy egy szubsztrátra növesztett InAlAs rétegre pl. maszkolós molekulanyaláb-epitaxiával csak a kellő helyeken visznek fel InGaAs-et [27]. A kétdimenziós viselkedés természetesen csak közelítés, az előző alfejezet alapján ezt úgy kell érteni, hogy az elektronok a felületre merőlegesen egy nagyon keskeny potenciálgödört érzékelnek, és lényegében annak az alapállapotában vannak. Az az erő, amely az elektronok mozgását kétdimenziósra redukálja (confinement) alapvetően elektromos jellegű, ez veszi át a tömbi esetben érvényes (1.22) egyenletben a kristályrács teréből származó  $\mathbf{E}$  szerepét. Ez a tér jellemzően az elektrongáz síkjára merőleges. Ezt az irányt tekintve  $z$ -nek, a kétdimenziós elektrongázban érvényes egyelektron Hamilton-operátort Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében szokásosan a következő alakban írják:

$$H_{2DR} = \frac{1}{2m^*} (p_x^2 + p_y^2) + \alpha (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (1.23)$$

ahol  $m^*$  az effektív tömeg, a második tagban pedig  $\sigma \times \mathbf{p}$ -nek a  $z$  komponense jelenik meg. Az itt szereplő  $\alpha$  kétdimenziós Rashba paraméter, amely még dimenzióját tekintve sem egyezik meg az (1.22) egyenletben megjelenő  $\alpha_R$ -rel, lineáris a  $z$  irányúnak tekintett  $\mathbf{E}$ -ben. A továbbiakban az (1.23) Hamilton-operátort tekintjük kiindulási pontnak,

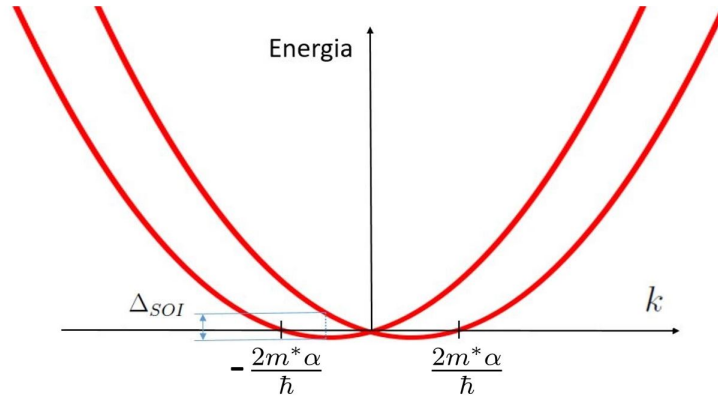
Rashba paraméter alatt pedig a fenti  $\alpha$ -t fogjuk érteni. Fontos kísérletek bizonyítják azt, hogy  $\alpha$  külső elektromos térrel hangolható [27]. Érdekes megjegyezni, hogy (talán a két-dimenziós effektus jelentősége miatt) elterjedt az a beszédmód is, amely azonosítja a Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatást a most tárgyalt esettel, amikor a felülethátáron létrehozott struktúra okoz olyan aszimmetrikus  $\mathbf{E}$  teret, ami végső soron felelős a jelenségért (structural inversion asymmetry). (Szemben a tömbi rendszerekben megjelenő „bulk inversion asymmetry”-vel, amit a Dresselhaus-féle spin-pálya kölcsönhatás kiváltójának tekintenek.)

Az (1.23) Hamilton-operátor az eddigiek alapján (kétkomponensű) spinorértékű hullámfüggvények terén hat. A szemléltetés céljából érdemes felírunk a sajátértékeket és a sajátspinorokat. A peremfeltételek nélküli esetet (szabad tér) vizsgálva, célravezető, ha a sajátspinorokat síkhullám alakban keressük:  $|\varphi(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \exp[i(k_x x + k_y y)]$ .

Ahogy könnyen ellenőrizhető, ezek valóban sajátspinorok, ha  $a_1(\mathbf{k}) = -1/\sqrt{2}$ ,  $b_1(\mathbf{k}) = 1/\sqrt{2} \exp(-i\delta)$ , vagy  $a_2(\mathbf{k}) = 1/\sqrt{2} \exp i\delta$ ,  $b_2(\mathbf{k}) = 1/\sqrt{2}$ , ahol  $\tan(\delta) = k_y/k_x$ . Ezeknek a spinoroknak az iránya a tér minden pontjában azonos (de egymástól különböző), és mindeütt ortogonálisak a komplex test feletti kétdimenziós vektorok szokásos belső szorzatára nézve:

$$\langle \varphi_1(\mathbf{k}) | \varphi_2(\mathbf{k}) \rangle = a_1^*(\mathbf{k})a_2(\mathbf{k}) + b_1^*(\mathbf{k})b_2(\mathbf{k}) = 0. \quad (1.24)$$

Ez – ahogyan a későbbiekben látni fogjuk – nem lesz igaz véges szélességű vezetékekre. A sajátspinorokhoz tartozó sajátenergiák  $\epsilon_1(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \hbar\alpha k$  illetve  $\epsilon_2(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \hbar\alpha k$ , ahol  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ . Azt kaptuk hát, hogy a sajátenergiák továbbra is  $k$  másodfokú függvényei, de a spin-pálya kölcsönhatás nélküli parabolák most a spinirány szerint két részre hasadnak, úgy, hogy a minimumukat is más  $k$  értéknél veszik fel. A 4. ábra szemlélteti ezt a jelenséget, ahol a  $\Delta_{SOI}$  felhasadás definíciója is látható.



**4. ábra:** A Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás következtében spinirány szerint felhasadt sávok, ahol a felhasadás mértékét általában az ábrán jelölt  $\Delta_{SOI}$  energiadimenziójú mennyiséggel szokás jellemezni.

Érdekes még észrevenni, hogy a valószínűségi áram kifejezése SOI jelenlétében más, mint a szokásos, spinfüggetlen esetben. Konkrétan, tekintve egy  $|\varphi(\mathbf{r}, t)\rangle = \begin{pmatrix} a(\mathbf{r}, t) \\ b(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$

spinort, ha a valószínűségi sűrűséget a spinfüggetlen esettel egybecsengően a

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \langle \varphi(\mathbf{r}, t) | \varphi(\mathbf{r}, t) \rangle = |a(\mathbf{r}, t)|^2 + |b(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (1.25)$$

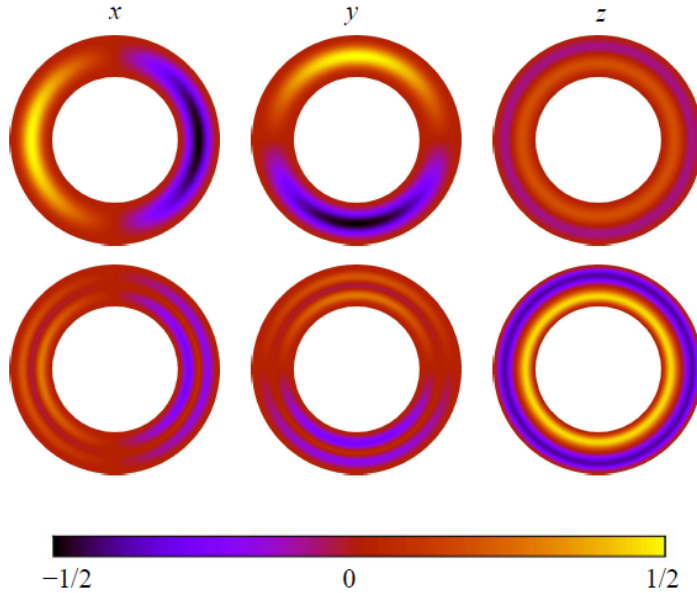
módon definiáljuk, akkor ahhoz, hogy a

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (1.26)$$

forrásmentes kontinuitási egyenlet teljesüljön, az szükséges, hogy az áramsűrűség kifejezése

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m^*} \text{Im} \langle \varphi(\mathbf{r}, t) | \nabla \varphi(\mathbf{r}, t) \rangle - \alpha \langle \varphi(\mathbf{r}, t) | \tilde{\sigma} | \varphi(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (1.27)$$

legyen [28], ahol a kétdimenziós (spinfüggetlen) gradiens szerepel. Maga  $\tilde{\sigma}$  szintén kétdimenziós a valós térben is,  $x$  komponense  $-\sigma_y$ ,  $y$  komponense pedig  $\sigma_x$ . A fenti egyenletben szereplő belső szorzat az (1.25) egyenletnek megfelelően csak a spin szabadsági fokot érinti, nem tartalmaz térbeli integrálást. Mivel az első tag a spinben diagonális, az  $\alpha = 0$  esetben  $\mathbf{j}$  fenti kifejezése visszaadja a szokásos, spinfüggetlen valószínűségi áramsűrűséget. (Magát az (1.27) egyenletet a spinfüggetlen esethez teljesen hasonlóan úgy lehet megkapni, hogy  $\rho$  időderiváltjának számításához használjuk az időfüggő Schrödinger-egyenletet és annak adjungáltját, majd megnézzük, hogy minek a divergenciája az eredmény.) Az (1.27) kifejezés azért fontos, mert ennek egydimenziós verzióját kell használnunk a spinorértékű hullámfüggvények csomópontokbeli illesztésénél egyenes vezetékekből álló hálózat esetén [E7, E9, E14].



**5. ábra:** Az első két radiális módushoz tartozó egy-egy sajátspinor esetén  $S_x$ ,  $S_y$  és  $S_z$  ( $\hbar$  egységekben mért) várható értéke kétdimenziós kvantumgyűrűkben, Rashba-típusú spinpálya kölcsönhatás jelenlétében [E8].

A teljesség kedvéért térjünk vissza az (1.23) Hamilton-operátor sajátértékproblémájára abban az esetben, ha peremfeltételt is szabunk. Ekkor a megoldás sokkal összetettebb lesz, lásd pl. a [E8, 29–32] munkákat. Általánosságban elmondható, hogy az 1. ábrán látható „alsávok” mindegyike két részre esik szét, és a részek egymástól különböző – ebben az esetben már helyfüggő – spinirányokhoz fognak tartozni. A sajátspinorok irányának helyfüggésére mutat egy példát az 5. ábra. Ennek az ábrának az egydimenziós megfelelőjét – amikor a radiális irányú integrálás miatt  $\langle S_z \rangle$  konstans lesz – a következő fejezetben mutatjuk be.

A 2. és 3. fejezetekben olyan energiaskálával jellemzett problémákat fogunk vizsgálni, amelyek esetén az előző alfejezetben vázolt egydimenziós közelítés biztonságosan alkalmazható.

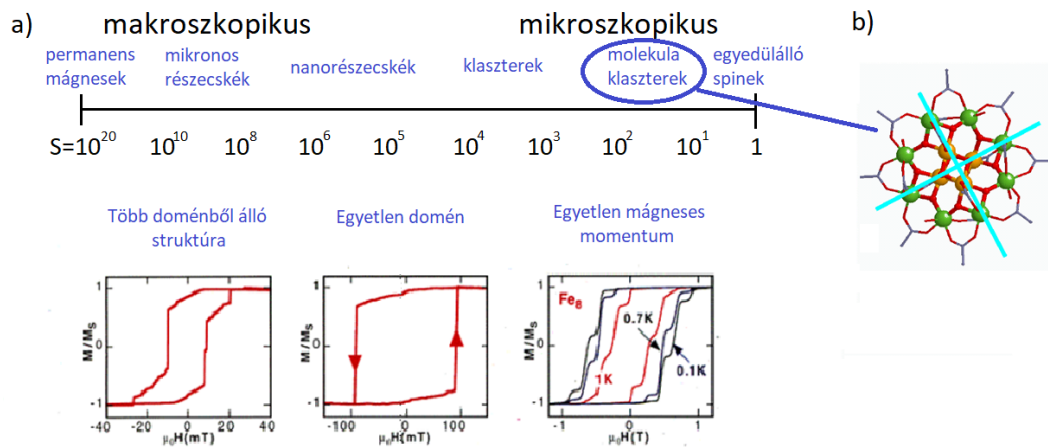
## Spintronika

A spin szabadsági fok információfeldolgozásra való használata az utóbbi időkben fontos és gyorsan fejlődő területté vált [33–35]. A spin alapú elektronika, azaz spintronika fő területe spinpolarizált áramok létrehozása, manipulálása és alkalmazása. Bár maga az elnevezés 1996-ban született [33], az elképzelés jóval régebbi, és természetesen a klasszikus mágnesség elméletétől a félvezetők fizikáján át a mezoszkopikus és szupravezető rendszerek leírásáig nagyon sok területtel kapcsolódik szorosan össze. Az alkalmazások közül a leginkább elterjedtek esetén a spin klasszikus erőforrás, a kvantum szuperpozíciók nem játszanak szerepet. Ezzel kapcsolatban mindenképpen meg kell említeni az óriás mágneses ellenállás („giant magnetic resistance”, GMR [36, 37]) jelenségét, ami talán az akkoriban még leginkább magnetoelektronikának nevezett terület legtöbb gyakorlati alkalmazással bíró effektusa. (Pl. a mai számítógépek merevlemezeinek olvasófeje is ezen az elven működik.)

Másrészt az elektronok spinje egy természetes kétállapotú rendszer, és mint ilyen, mindenképpen komoly jelölt a kvantum információfeldolgozás alapvető egységének, a kvantum bitnek (qubitnek) a realizálására [38]. Ehhez természetesen az szükséges, hogy a spinpolarizált áramok létrehozása és detektálása mellett a spinre ható kvantum logikai kapukat tudjunk létrehozni.

### 1.3. Molekuláris mágnesek

Az előzőekben olyan esetekről volt szó, amikor a spint hordozó elektronok bizonyos irányokban szabadon elmozdulhattak, azaz (spinfüggő) vezetési jelenségeken volt a hangsúly. Ha a fotonokkal megvalósítani tervezett kvantum információfeldolgozás analógiáját használjuk, a spinek mozgó, „repülő” kvantum biteknek („flying qubit”) feleltek meg. Emellett természetesen a helyhez kötött, lokalizált elektronok spinje is ígéretes információtechnológiai szempontból, és nem csak a kvantum értelemben. Ebben az alfejezetben olyan összetett molekulákról lesz szó, amelyek az elektronok kicserélődési kölcsönhatása miatt nagy (nagyságrendileg 20 elektronnak megfelelő,  $S = 10$ ,  $\hbar = 1$  egységekben) eredő spinnel rendelkeznek, külső térrel mágnesezhetőek, és alacsony hőmérsékleten (néhány kelvin) képesek akár órákig megtartani ezt a mágneszettséget [39, 40]. Bár itt viszonylag nagy és összetett molekulákról van szó, ezek még mindig jóval kisebbek a hagyományos mágneses információhordozókban használt elemi egységeknél, mert a lineáris méretet tekintve a nanométeres tartományról van szó. Ez igen koncentrált információtárolás lehetőségét veti fel, összehasonlítva pl. azzal, hogy a jelenlegi merevlemezek információsűrűsége a Tbit/in<sup>2</sup> nagyságrendbe esik. A mágneses jelenségek lehetséges alkalmazásaihoz természetesen az szükséges, hogy a létrejöttükért felelős fizikai folyamatokat alaposan megértsük. Ehhez a tisztán numerikus számítások mellett a továbbiakban ismertetendőhöz hasonló, leegyszerűsített, de a lényegét megragadó modelleken keresztül visz az út.



**6. ábra:** Mágneses rendszerek különböző méretskálákon. Az a) panel alsó részén a jellemző hiszterézisgörbéket látjuk, míg a jobb oldali b) rész egy tipikus molekulamágnes, a Mn<sub>12</sub>-Ac szerkezetét mutatja. A kétféle kis gömb a különböző pozíciókban lévő Mn atomokat szemlélteti. (Forrás: [39].)

A molekuláris mágnesek (single molecular magnets: SMM, vagy molekuláris nanomágnesek) jelentőségét talán úgy értékelhetjük a legjobban, ha elhelyezzük őket a sok atomot tartalmazó tömbi ferromágnesektől az egyetlen elektronspinig terjedő skálán [39]. Ahogy a 6. ábra is mutatja, a tömbi ferromágnesekben (de az antiferromágnesekben vagy a ferrimágnesekben szintén) lényegében Avogadro-számnyi elektron spinje játszik szerepet. Ilyenkor a mágneszettséget a külső mágneses tér függvényében felrajzolva tankönyvi hisz-



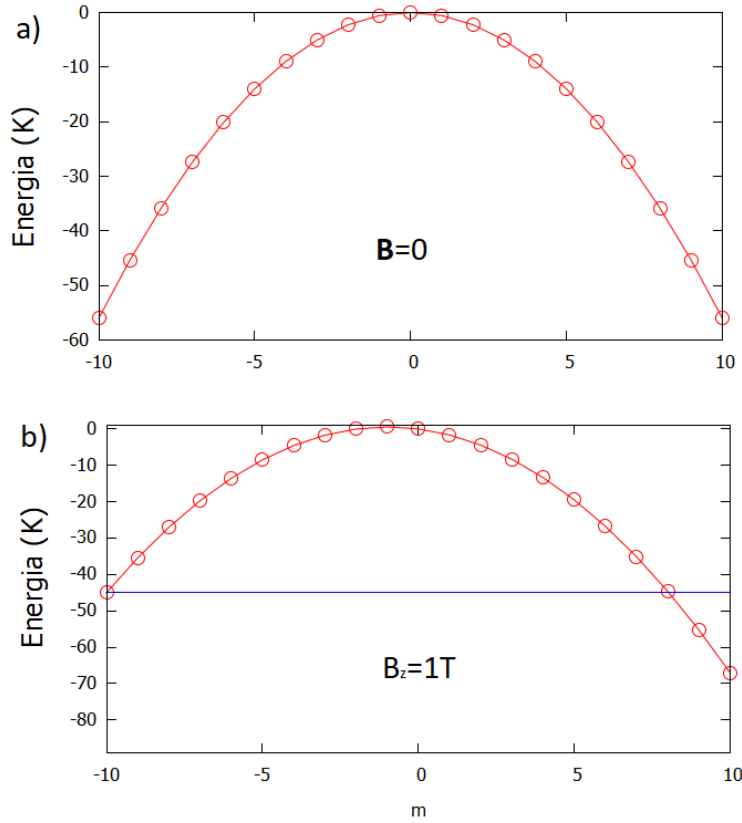
terézisgörbékét kapunk, beleértve a Barkhausen-ugrásokat is. Mindez a szokásos módon interpretálható úgy, hogy a nagy mintában számos mágneses domén van jelen, amelyek mágnesezettségének az elfordulása, illetve az őket határoló falaknak az elmozdulása felelős pl. a hiszterézisgörbék jellegéért. Ha egyre kisebb mintákat tekintünk, akkor elérjük azt a tartományt, amikor a minta lineáris mérete kisebb lesz, mint a doménfalak karakterisztikus távolsága, és ekkor energetikailag az lesz a kedvező, ha már pusztán egyetlen domén alakul ki. Ennek megfelelően a hiszterézisgörbe is simább, hiányoznak a doménfalak mozgásához kapcsolódó Barkhausen-ugrások. Ahogyan a 6. ábra a) részén láthatjuk, még kisebb méretek esetén, egyetlen „óriási” spinnel ( $S = 10$ ) jellemezhető molekuláknál, újfent megjelennek a lépcsőszerű ugrások a hiszterézisgörbéken. Ezeknek a kialakulásáért azonban – ahogyan látni fogjuk – más (a doménektől teljesen független) effektusok felelősek.

A molekulamágnesek közös jellemzője, hogy a komplex molekula tartalmaz olyan fém (jellemzően mangán vagy vas) atomokat, amelyek elektronjai lényegében felelősek a molekula spinjéért. A leggyakrabban vizsgált ilyen eset a röviden  $Mn_{12}$ -Ac alakban írt komplex, a mangán acetát, amelynek összegképlete  $[Mn_{12}(CH_3COO)_{16}(H_2O)_4O_{12}].2CH_3COOH.4H_2O$ , szerkezete pedig a 6. ábra b) részén látható. (A rövid jelölésben megjelenő Ac tehát nem az aktíniumra, hanem az acetátgyökre utal.) Ahogyan a 6. ábra b) része mutatja, a molekulában lévő mangán atomok két, egymással nem ekvivalens pozícióban helyezkednek el (zöld, illetve narancs gömbök az ábrán). E két pozíció annyira nem azonos, hogy különböző töltésű pozitív mangán ionokról beszélhetünk, amelyek spinje a különböző elektronszám miatt nem azonos. A kémia kötéseknek és Pauli-elvnek köszönhetően ezek a spinek kölcsönhatásba lépnek, ennek következményeként alakul ki az eredő spin ( $S = 10$ ). (Ha a hagyományosabb anyagokkal keresünk analógiát, akkor a nemzéro eredő spin, illetve a hozzá kapcsolódó mágneses momentum miatt a viselkedés paramágneses. A viszonylag nagy elemi mágneses momentumok miatt esetenként használatos a „superparamágnes” kifejezés is. Másrészt, mivel a kétféle pozícióban lévő, különböző eredő spinű mangán atomok spinje a külső térben elmentéses irányba igyekszik beállni, a ferrimágneses anyagokkal is vonhatunk párhuzamot.) Az eredő spin természetesen kölcsönhatásban van az anizotróp molekuláris környezettel is, amit közelítésként egy – a térbeli szabadsági fokokat elhanyagoló, csak a spinre koncentráló – effektív Hamilton-operátorral vehetünk figyelembe [40]. Ha a 6. ábra b) részén bejelölt négyfogású forgástengelyre merőleges irányt vesszük  $z$ -nek (könnyű tengely, easy axis) akkor ez az effektív Hamilton-operátor első közelítésben a

$$H_{S0} = -DS_z^2 \quad (1.28)$$

alakba írható, ahol  $S_z$  a az eredő spin  $z$  komponense ( $\hbar$  egységekben mérve), a  $D$  együtt-hatót pedig kelvinben szokták megadni ( $1K = k_B \times 1K \approx 1,38 \times 10^{-23} J$ ),  $Mn_{12}$ -Ac esetén értéke  $D = 0,56 K$  [41]. (A pontosabb modellt majd a 4. fejezetben ismertetjük.) A fenti effektív Hamilton-operátor sajátértékeit az  $m = -10, -9, \dots, 10$  számokkal indexelve a 7. ábra a) látható „fordított” parabolához jutunk, amelynek alapállapota kétszeresen degenerált ( $m = \pm 10$ ). A nagyságrendekből már most látszik, hogy valóban érdemes a kísérleteket alacsony hőmérsékleten végrehajtani, ugyanis ha a termikus energia meghaladja a  $D \times 10^2 = 56 K$  értéket (azaz maga a hőmérséklet magasabb 56 K-nél) akkor a

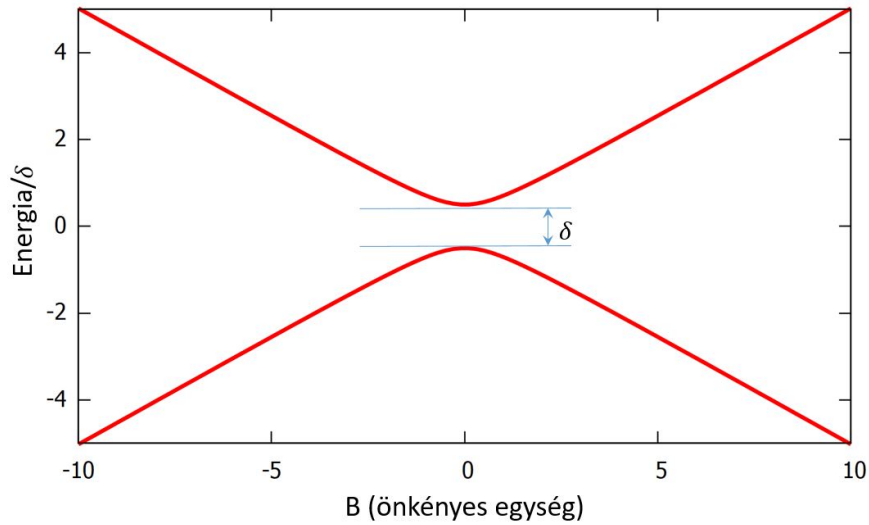
termikus folyamatok az esetlegesen nemzéró mágnesezettséget nullává változtatják oly módon, hogy végül minden  $m$ -hez és ellentettjéhez is megegyező populációk fognak tartozni. Külső  $\mathbf{B}$  mágneses indukció jelenlétében az (1.28) egyenlethez hozzá kell adnunk a



**7. ábra:** Az (1.28) Hamilton-operátor energiaszintjei az  $S_z$  operátor sajátértékeivel indexelve. A felső ábrán nincs külső tér, míg az alsón a  $B = 1$  T nagyságú,  $z$  irányú külső mágneses indukció rezonanciát hoz létre az  $m = -10$  és  $m = 8$  indexű nívók között. A pontokat összekötő parabolák csak a jobb áttekinthetőséget segítik.

$H_B = -g\mu_B \mathbf{B} \mathbf{S}$  tagot, ahol  $\mu_B$  a Bohr-magneton. (Azaz a lokalizált spinek „természetes módon”, a mágneses momentumukon keresztül hatnak kölcsön  $\mathbf{B}$ -vel.) Ez a csatolás az általános esetben feloldja az egyes nívók kétszeres degenerációját. A  $z$  tengellyel megegyező irányú mágneses tér esetén  $H_{S_0} + H_B$  még mindig diagonális  $S_z$  sajátállapotaiban, csak most az  $m$  függvényében felrajzolt parabola eltolódik, ahogyan a 7. ábra b) része mutatja. Azonban ebben az esetben sem indukálódnak átmenetek a különböző  $m$ -mel indexelt állapotok között, ehhez az szükséges, hogy legyenek a Hamilton-operátorban olyan mátrixelemek, amelyek összekötik ezeket az állapotokat. Ez legegyszerűbben úgy valósítható meg, hogy a külső mágneses tér nem pontosan  $z$  irányú, de ahogyan később látni fogjuk, a tér nélküli Hamilton-operátor pontosabb alakja sem diagonális  $S_z$  sajátállapotaiban. Ezek a korrekciók azonban jellemzően sokkal gyengébbek, mint  $H_{S_0} + H_B$ , így perturbációként vehetők figyelembe. Ebből levonhatjuk azt a következtetést, hogy számottevő valószínűsége egy  $m \rightarrow m'$  átmenetnek akkor van, ha  $H_{S_0} + H_B$  várható értéke az  $m$  és

$m'$ -vel indexelt állapotokban közel esik egymáshoz (mivel a perturbálatlan energiakülönbségek a sajátállapotokhoz tartozó korrekciók nevezőjében szerepelnek). Ilyen rezonanciák a  $-Dm^2 - g\mu_b B_z m = -Dm'^2 - g\mu_b B_z m'$  egyenlet megoldásából látható módon közel 0,5 T lépésként következnek be (a  $D = 0,56$  K esetben). Tehát pl. az  $m = -10$  indexű nívó rezonáns a  $m' = 10$  indexűvel külső tér nélkül, az  $m' = 9$  indexűvel 0,5 T  $z$  irányú külső tér esetén, az  $m' = 8$  indexűvel 1 T esetén, és így tovább. (Valójában a fent leírt Hamilton-operátorok esetén ezeknél a külső tereknél egyszerre több nívópár lesz rezonáns. A 4. fejezetben részletezendő esetekben ezek a rezonanciák valamelyest eltávolodnak egymástól.)



**8. ábra:** Elkerült nívókereszteződés szemléltetése. Külső mágneses térrel kölcsönhatásban lévő molekulamágnesek különböző nívópárjai esetén a minimális távolság,  $\delta$ , széles tartományban változik.

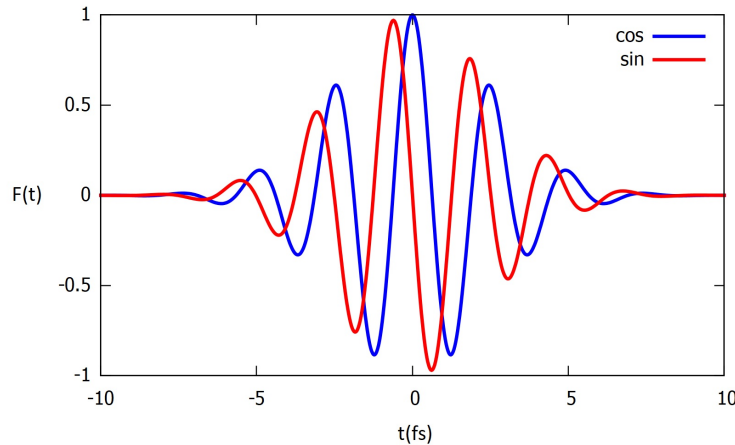
Az  $S_z$  operátor különböző sajátállapotai közötti átmenetek azért fontosak, mert a mérhető mágneszettség  $z$  komponense  $S_z$  várható értékével arányos. (Magukat a méréseket jellemzően nagyon érzékeny, pl. SQUID alapú magnetométerekkel lehet kivitelezni [39].) A kísérletek alapján a molekuláris mágnesek alacsony hőmérsékleten felvett hiszterézisgörbéin látható ugrások az előző bekezdésben említett rezonancia-átmenetekkel magyarázhatók: ezek az ugrások azoknál a külső mágneses tereknél jelennek meg, amikor a térerősség éppen akkora, hogy a rezonanciafeltétel teljesüljön. Ez minőségileg más mechanizmus, mint ami a tömbi mágnesek hiszterézisgörbéin megjelenő ugrásokat magyarázza. Gyakran használatos a „mágneszettség alagutazása” (tunneling of magnetization) kifejezés, ami arra utal, hogy ha a 7. ábra a) részére tekintünk, akkor beláthatunk egy két minimummal ( $m = \pm 10$ ) rendelkező potenciálgödört is. A rezonáns esetben az átmenetek (mint a 7. ábra b) részén kék vízszintes vonallal összekötött két állapot közötti) pedig a két „potenciálgödör” közötti „potenciálfalon keresztül” történnek. Ugyanakkor fontos hangsúlyozni, hogy a hagyományos értelemben – amikor egy részecske térbeli pozíciója változik meg az alagúteffektus következtében – a jelenség csak fenntartásokkal tekinthető alagutazásnak, mivel a térbeli szabadsági fokok egyáltalán nem szerepelnek a modellben. (Bár

nyilvánvaló módon történik bizonyos mértékű töltésátrendeződés egy átmenet folyamán.)

Érdemes már itt a bevezetőben hangsúlyozni, hogy a 7. ábra b) részén szemléltetett rezonanciák általában nem jelentenek egzakt degenerációt. Másszóval, a fentebb említett, gyenge, de  $S_z$ -vel nem felcserélhető tagok miatt a teljes Hamilton-operátor sajátértékeit  $B$  függvényében fölrajzolva elkerült nívókereszteződéseket láthatunk, amelyekből egyet a 8. ábra mutat sematikusán. A nívók minimális távolságát megadó  $\delta$  mennyiség a különböző elkerült nívókereszteződések esetén nagyságrendileg a  $10^{-12}$  K és 1 K közötti tartományban változik. Ez akkor válik kimondottan fontossá, amikor a külső mágneses tér időfüggését is figyelembe vesszük. A dinamika vizsgálata azt mutatja, hogy  $\delta$  nagysága mellett ilyenkor egyáltalán nem mindegy pl., hogy milyen gyorsan változik a mágneses tér egy hiszterézisgörbe felvételénél. Ha  $B$  az idő lineáris függvénye, akkor a 8. ábrán látható eset közvetlen kapcsolatba hozható a Landau, Zener és Stückelberg [42–44] nevéhez köthető ismert modellel. Ezekkel a kérdésekkel fogunk foglalkozni a 4. fejezetben.

## 1.4. Rövid, erős lézerimpulzusok kölcsönhatása szilárdtestekkel

A lézertechnika fejlődésének egy jöideig nagyon fontos iránya volt a jól meghatározott frekvenciájú (frekvenciastabilizált) folytonos vagy nagy impulzushosszúságú források fejlesztése, ami a pl. a kvantummechanikai energiaszintek nagyon precíz ( $10^{-9}$  relatív hiba alatti) meghatározását tette lehetővé. Ehhez képest egy komplementer hozzáállást jelentett a rövid (így nagy sávzélességű) impulzusok megjelenése. Ezek az impulzusok természetesen nem alkalmasak arra, hogy pl. alapállapotból egy jól meghatározott gerjesztett állapotba juttassanak egy kvantumrendszert, cserébe viszont olyan folyamatokat befolyásolhatnak vagy tehetnek láthatóvá [45], amelyek nagyon gyorsan (femtosekundumos időskálán) játszódnak le. Ez sok alkalmazás lehetőségét is felveti, mint pl. a fényimpulzussal kontrollált szilárdtestbeli elektrondinamikáét („lightwave electronics” [46]). Néhány optikai ciklust tartalmazó impulzusok esetén fontos szerepet játszik a vivő-burkoló fázis (carrier-envelope (difference) phase: CEP). Ezt legkönnyebben egy lineárisan poláros impulzus elektromos a terével szemléltethetjük, amelynek a modellekben gyakran használt egyszerűsített alakja

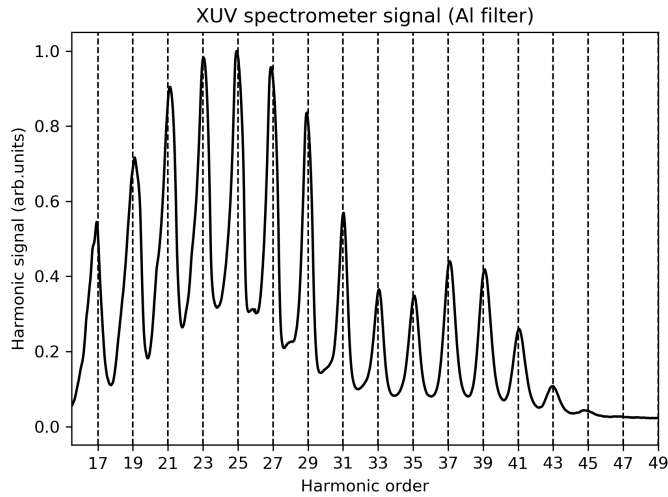


**9. ábra:** Gauss burkolóval rendelkező, különböző vivő-burkoló fázisokhoz tartozó impulzusok „hullámformája”  $F(t) = \exp(-t^2/2\tau^2) \cos(\omega_0 t + \varphi_{\text{CEP}})$ , ahol  $\omega_0 = 2.51$  1/fs, és  $\tau = 2.5$  fs. A kék görbe a koszinusz- ( $\varphi_{\text{CEP}} = 0$ ) a piros pedig a szinuszipulzust ( $\varphi_{\text{CEP}} = \pi/2$ ) szemlélteti.

$$F(t) = F_0(t) \cos(\omega_0 t + \varphi_{\text{CEP}}). \quad (1.29)$$

Itt tehát  $F$  jelöli az elektromos térerősség egyetlen nemzéró komponensét,  $\omega_0$  a vivőfrekvencia,  $F_0(t)$  a lassan változó burkoló függvény ( $\partial F_0/\partial t \ll \omega_0 F_0(t)$ ),  $\varphi_{\text{CEP}}$  pedig a vivő-burkoló fázis. Szokás  $\varphi_{\text{CEP}} = 0$  esetén koszinusz-,  $\varphi_{\text{CEP}} = \pi/2$  esetén pedig szinuszipulzusról beszélni. Gauss függvény alakú burkoló esetén a 9. ábra mutatja a kettő közötti különbséget. Kísérletileg természetesen a térerősség időfüggése – a „hullámforma” (waveform) – sokkal összetettebb, ugyanakkor már a fenti egyszerűsített alakból is látszik, hogy ilyen kevés optikai ciklus esetén sokat számíthat a fény-anyag kölcsönhatás során

a CEP. (Hogy csak a legszembeötlőbb különbségeket említsük: koszinuszimpulzus esetén nagyobb a maximális térerősség abszolút értéke, és egyetlen csúcs tartozik ehhez a maximális értékhez, míg szinuszipulzus esetén kettő, amelyek ellentétes előjelű térerősséghez tartoznak.) Ha ezt a jelenséget olyan kísérletben szeretnénk vizsgálni, amely több, egymást követő impulzust használ, akkor fontos, hogy az egymás utáni „lövések” során  $\varphi_{\text{CEP}}$  ne változzon, azaz a forrás CEP-stabilizált legyen.

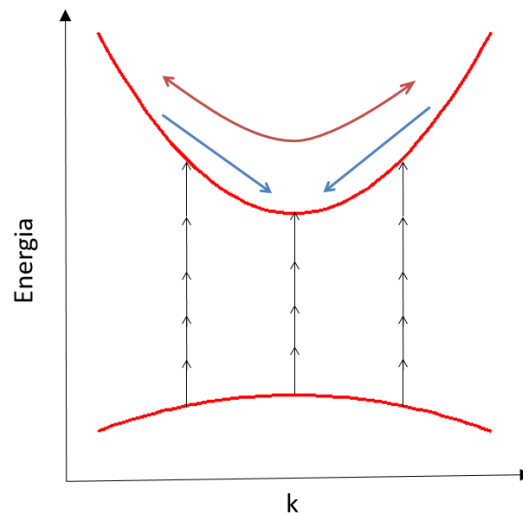


**10. ábra:** A szegedi ELI központban argon gázban mért HHG spektrum magasfrekvenciás része. A vízszintes tengelyen a harmonikus rend azt jelenti, hogy az adott frekvencia a közeli infravörösbe eső központi frekvenciájú gerjesztés ( $\lambda = 1030$  nm) hányszorosa. (Varjú Katalin engedélyével.)

A rövid impulzushossz gyakran együtt jár a nagy intenzitással, ami összességében azt jelenti, hogy a fény-anyag kölcsönhatás leírására szolgáló szokásos módszerek és eredmények érvényessége korlátozott. Félvezető céltárgyak esetén pl. alacsony intenzitás és kvázi monokromatikus gerjesztés esetén tudjuk, hogy a sávátmenethez kapcsolódó abszorpció csak a tiltott sáv szélességénél nagyobb fotonenergiák esetén jöhet létre. Nagy intenzitás esetén azonban pl. a többfotonos folyamatok jelentősebb szerepe miatt ez nem igaz. A nagy intenzitások másik következménye, hogy a dinamika sokkal kevésbé lineáris, és így periodikus gerjesztés esetén az anyagban létrejövő polarizáció időfejlődésében a gerjesztő frekvenciák mellett megjelennek azok egész számú többszörösei, a felharmonikusok is. Ez természetesen érzékelhető a kisugárzott elektromágneses spektrumban is, ahogyan azt a 10. ábrán látható, a szegedi ELI lézerközpontban mért görbe is mutatja. Gáznemű minták [47–49] mellett a magasfelharmonikus-keltés (high (-order) harmonic generation: HHG) szilárdtestekben is megvalósul [50–52], de amíg gázokban széles körben elfogadott, szemléletes elméleti modellek állnak rendelkezésre [53, 54], addig szilárdtestek esetén sokkal több a nyitott kérdés, amelyek vizsgálatában helye van a kvalitatív képet megragadni szándékozó, egyszerűbb modelleknek is.

Az 5. fejezetben a fenti két témával fogunk foglalkozni, azaz rövid, erős lézerimpulzussal kiváltott szilárdtestbeli elektrondinamika és az ezzel szorosan összefüggő

magasfelharmonikus-keltés lesz a középpontban. Az első témához a motivációt egy Gar-chingban született kísérleti eredmény szolgáltatta, amely szerint elegendően erős, a közeli infravörös tartományba eső impulzus kvarcüvegben mérhető áramot képes létrehozni [55]. Az effektus fizikai hátterét nyújtó folyamatokat szemlélteti vázlatosan a 11. ábra, az egyszerűség kedvéért kristályos anyagra. Ezek közül az áram létrejötte szempontjából talán a legfontosabb a függőleges fekete nyilakkal szemléltetett, a vegyérték sávból a vezetési sávba történő átmenet, amit a kísérletben a közeli infravörös tartományba eső elektromágneses sugárzás vált ki. (Első közelítésként tekinthetünk két sávot, bár elegendően magas gerjesztő intenzitás esetén a kvantitatív leíráshoz több vezetési sáv figyelembevételre szükséges [56].) A nagyságrendeket jól érzékelteti, hogy a kristályos  $\text{SiO}_2$  tiltott sávja hozzávetőlegesen 9 eV széles, ami több mint ötszöröse a fotonenergiának. (Ezt szemléltetik a több részből álló fekete nyilak.) Ezen a sávok közötti (interband) dinamikán kívül szokás még említeni a sávokon belüli (intraband) elektronmozgást (vörös, dupla végű nyíl). Ezen túl az derült ki, hogy a  $\text{SiO}_2$  mintában annyira erős az elektron-fonon szórás, hogy az még a femtoszekundumos időskálán sem hanyagolható el. Ezt szemléltetik az ábrán a sávminimum felé mutató kék nyilak. Fontos megjegyezni, hogy ennek az effektusnak az erős jelenléte pontosan azt jelenti, hogy távolról sem az eddigi alfejezetekben említett ballisztikus transzportról van szó. (És természetesen az elektronok dinamikáját befolyásoló külső tér is sokkal erősebb ebben az esetben.)



**11. ábra:** Erős lézertér jelenlétében létrejövő alapvető folyamatok széles tiltott sávú félvezetőkben és dielektrikumokban. A vastag piros parabolák a vegyérték (alul) és vezetési sávot (felül) szemléltetik, a vékony fekete nyilak pedig a lézerindukált sávátmeneteket jelölik (ezek a nyilak azért állnak több részből, hogy azt hangsúlyozzák, hogy az átmenethez általában több foton által szállított energia szükséges). A vörös, dupla végű nyíl a vezetési sávon belüli elektrondinamikára utal, míg a kék, a sávminimum irányába mutató nyilak a sávon belüli relaxációs folyamatokat jelzik. Femtoszekundumos időskálán a sávok közötti relaxációs effektusok rendszerint elhanyagolhatók.

Az erős, oszcilláló külső tér a szilárdtestben időfüggő polarizációt és áramokat kelt,

amik természetesen maguk is forrásai az elektromágneses mezőnek. Az így létrejövő sugárzás magasfrekvenciás részét alkotják a magas felharmonikusok, amelyek spektrumának tipikus tartományai vannak. Az intenzitás spektrum maximuma egyértelműen a gerjesztő frekvencia környékén található, ezután a felharmonikusok erőssége csökken, majd közel azonos magasságú csúcsok sorozata következik („plató”), végül a felharmonikus csúcsok eltűnnek („levágás” vagy „letörés”: cutoff). A kísérletekben mért HHG spektrumok hasonló jellegű szakaszokra bonthatók nemcsak szilárdtest, hanem gázminták esetén is. (A 10. ábra ennek a spektrumnak csak legmagasabb frekvenciákat tartalmazó részét mutatja.) A levágáshoz tartozó frekvencia analitikusan is becsülhető [57], és fizikailag azzal az energiával arányos, amit a HHG egy elemi folyamata során egyetlen elektron maximálisan nyerhet.

Az optikai magasfelharmonikus-keltés folyamata a fény-anyag kölcsönhatás nagyintenzitású tartományának elvi fontosságú vizsgálata mellett azért is lényeges, mert a gerjesztés hatására az anyagból kilépő másodlagos sugárzás (ami tulajdonképpen a felharmonikusok szuperpozíciója) különleges tulajdonságokkal rendelkezik. Ha az egyes frekvenciákhoz tartozó oszcillációk fázisa nem véletlenszerű, akkor a másodlagos sugárzás tartalmaz a gerjesztés rezgésidejénél lényegesen rövidebb impulzusokat is [1, 58], amelyek infravörös bejövő lézernyaláb esetén az attoszekundumos tartományba esnek. Ilyen rövid elektromágneses impulzusok alkalmasak pl. atomi rendszerek dinamikájának korábban elérhetetlen pontosságú feltérképezésére. Az 5. fejezet második felében azt a kérdést fogjuk megvizsgálni, hogy a 11. ábrán vázolt folyamatok szerepe a HHG spektrumok létrejöttében mennyire választható szét.



## 1.5. Célkitűzések

A vizsgálni kívánt fizikai rendszerek, a velük kapcsolatos előzmények és az alkalmazandó módszerek áttekintése után most már megfogalmazhatjuk azokat a célokat, amelyeket a jelen dolgozat alapját képező munka során tűztünk ki.

Az első vizsgált terület elektronok kvantumos transzportja Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében. Ezen belül kvantumgyűrűk spintranszformációs tulajdonságainak a meghatározása volt a célunk. A probléma linearitása miatt az várható, hogy ez a transzformáció a bemenő spinekre, mint kétdimenziós vektorokra, qubitekre ható mátrixként írható le, másszóval egyqubites kvantumos logikai kapukról van szó. Fontos kérdés annak a feltérképezése, hogy milyen jellegűek lehetnek ezek a logikai kapuk. Ennek a problémának az általánosításaként az is célunk volt, hogy megvizsgáljuk több gyűrűből álló, összetett hálózatok spintranszformációs tulajdonságait. Emellett praktikus szempontból lényeges, hogy realiztikusabb körülmények között, szórási folyamatok és termikus fluktuáció jelenlétében hogyan módosulnak ezek az eredmények. Kísérleti szempontból főként a [4, 27] munkák jelentettek motivációt ennek a témakörnek a tanulmányozásához.

Molekuláris mágnesek külső mágneses térben mutatott viselkedését is tanulmányoztuk. A korábbiakban említett rezonanciák a pontosabb leírás szerint elkerült nívókereszteződéseknek felelnek meg. Célunk volt egy ilyen nívókereszteződés esetén a dinamika vizsgálata abban az esetben, amikor a külső tér periodikus, így az elkerült nívókereszteződésen újra és újra áthalad a rendszer. Ilyenkor a kvantummechanikai koherencia kulcsszerepet játszik, így nagyon fontos a dekoherencia-mechanizmusok szerepének tisztázása. Emellett terveztük azt a kérdést is körüljárni, hogy a mágneses molekula effektív Hamilton-operátorának összes energiaszintjét figyelembe véve milyen új jelenségek lépnek fel. A téma vizsgálatát motiváló korai kísérleti eredmények a [41, 59] közleményekben találhatóak.

Intenzív lézerterek és szilárdtestek kölcsönhatásának elméleti leírásában jelenleg még sok a nyitott kérdés. Ezzel kapcsolatban terveztük megvizsgálni az előző fejezetben említett, a 11. ábrán szemléltetett folyamatok szerepét. Itt különösen a relaxáció jelentősége érdekes, mivel annak realiztikus erőssége esetlegesen jellegében változtathatja meg a dinamikát. Ennek a kérdésnek a tanulmányozását egy konkrét kísérlet [55] értelmezésének a szándéka indította el. Egy másik fontos kísérleti eredmény a tömbi szilárdtestekben keltett magasrendű felharmonikusok detektálása [50]. Célunk volt a 11. ábrán látható, többek között magasfelharmonikus-keltéshez is vezető folyamatok kritikai felülvizsgálata abból a szempontból, hogy milyen értelemben is pontos az ezekről az effektusokról alkotott hagyományos fizikai kép.

*BEVEZETÉS*

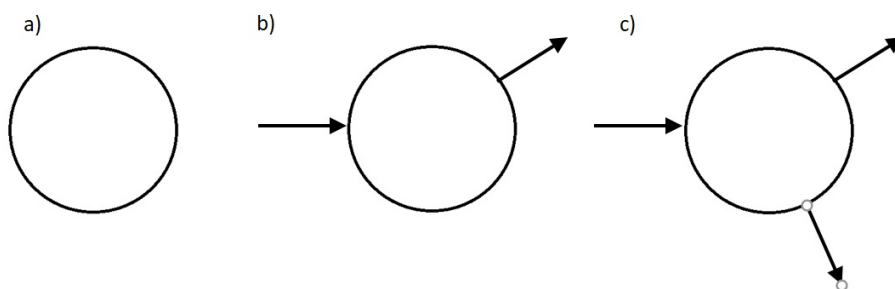
---

## 2. fejezet

# Vezetési elektronok spinjének befolyásolása kvantumgyűrűkben: kvantumos logikai kapuk

### 2.1. Bevezetés

A kvantumgyűrűk olyan kör vagy gyűrű alakú alakzatok, amelyekben az elektronok szabadon, kvantumos tulajdonságaikat megtartva mozoghatnak. A zárt gyűrűk kvantummechanikai tárgyalása egyelektron képben nem rejt különösebb nehézséget, egydimenzióban pl. különösebb számítások nélkül látható, hogy spinfüggetlen esetben az elektronok pályaimpulzusmomentumának a gyűrű síkjára merőleges komponense megmaradó mennyiség. Spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében a sajátértékprobléma (és a megmaradó mennyiségek meghatározása) már összetettebb feladat, de még mindig megoldható analitikusan.



**12. ábra:** Zárt, egyetlen kimenettel rendelkező és két kimenetű kvantumgyűrűk geometriája.

Ettől eltérő, szórásjellegű problémával állunk szemben, ha a gyűrű vezetékekkel kapcsolódik a környezetéhez, rajta áram folyik át (ahogyan a fenti ábra b) és c) részén látszik). Ebben az esetben a vezetőképesség mérésével kísérletileg is meghatározható, hogy a gyűrűbeli interferencia hogyan befolyásolja a vezetési tulajdonságokat. Célszerűen ilyenkor a vezetőképesség megváltozását mérik valamely külső paraméter függvényében. Tipikus

példa az Aharonov-Bohm effektus [6] kísérleti vizsgálata, amikor a szóban forgó paraméter az alkalmazott mágneses tér nagysága [60, 61]. (Innen származik az angol irodalomban gyakran használt „Aharonov-Bohm ring” kifejezés.) Érdekes, hogy ezeket a kísérleteket korántsem ballisztikus mintákkal végezték, a fáziskohérensia – legalábbis részben – ennek ellenére mégis kimutatható. A későbbiekben a mágneses tér mellett a Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás erősségének a változtatása mellett is megmérték a vezetőképességet (egyetlen gyűrűre pl. a [4] cikkben, gyűrűk hálózatára pedig a [62] munkában), és voltaképpen a kapott oszcillációk szolgáltatottak kísérleti bizonyítékot arra, hogy külső elektrodákkal valóban hangolható az (1.23) egyenletben szereplő  $\alpha$  paraméter. (Bár egyenes vezeték esetére ez már korábban ismert volt [27].) Spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében tehát spinfüggő interferenciajelenségek játszódnak le a gyűrűben („spin interference device” [3]), amelyekhez elméleti szempontból a ballisztikus transzport leírására kidolgozott, az előző fejezetben vázolt módszerek szolgáltatják a megfelelő fizikai hátteret. A továbbiakban azzal az esettel foglalkozunk, amikor mind a gyűrűt, mind pedig a vezetékeket jó közelítéssel egydimenziósoknak lehet tekinteni [63]. Ebben a fejezetben 12. ábra b) és c) részén látható, egy bemenettel és egy, illetve két kimenettel rendelkező esetet vizsgáljuk a [T1, T2] cikkek alapján. (Az angol terminológia szerint – a bejövő vezetéket is számolva – „two (three) terminal quantum rings”.)

A gyűrű vezetőképességének a geometriai és anyagi paramétereiktől való függésének meghatározása mellett [3, 27, 28] érdekes kérdés, hogy a kimeneten megjelenő elektronok milyen spinnel rendelkeznek. A fent említett spinfüggő interferencia miatt a bejövő és kimenő vezetékben általában spinirány nem azonos, a gyűrű felfogható olyan eszközként, amely a spin szabadsági fokra hatva hajt végre transzformációkat. Az elektronspin, mint természetes kétállapotú rendszer, az egyik fontos jelölt a kvantummos információfeldolgozás alapegységének, a qubitnek a szerepére [64, 65]. Ebben az értelemben a gyűrűt kvantummos logikai kapunak [66] tekinthetjük. A továbbiakban megmutatjuk, hogy az egydimenziós kvantumgyűrű méretének, a vezetékek egymáshoz viszonyított helyzetének, illetve a spin-pálya kölcsönhatás erősségének megfelelő megválasztásával a legfontosabb egy-qubitese kapuk (Z, X, Hadamard) realizálhatók. Emellett ezeknek a logikai kapuknak megfelelő működés úgy is előáll, hogy a reflexió lényegében nulla, ami felveti a kapuk egymás után kapcsolásának a lehetőségét is.

## 2.2. A zárt gyűrű sajátértékproblémája

Tekintsünk tehát egy origó középpontú körgyűrűt az  $x-y$  síkban, és használjunk síkbeli polárkoordinátákat! Az 1.1. szakaszban említett módszerrel (lényegében radiális integrálással) keskeny gyűrű esetén a probléma egydimenzióssá redukálható, ekkor a Hamiltonoperátor csak a  $\varphi$  polárszögtől függ:

$$H_{ring} = -\hbar\Omega \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\hbar\omega\sigma_r \frac{\partial}{\partial \varphi} - i\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_\varphi, \quad (2.1)$$

ahol  $m^*$  az effektív tömeg,  $a$  jelöli a kör sugarát,  $\hbar\Omega = \hbar^2/2m^*a^2$  a karakterisztikus kinetikus energia, az  $\omega = \alpha/\hbar a$  frekvencia pedig a spin-pálya kölcsönhatás erősségét méri. (Ez az a mennyiség, amely az  $\alpha$  paraméteren keresztül külső elektromos térrel befolyásolható [27].)

A sugárirányú és arra merőleges spinirányhoz tartozó Pauli mátrixok a következők:

$$\sigma_r = \cos \varphi \sigma_x + \sin \varphi \sigma_y \quad \sigma_\varphi = \frac{\partial}{\partial \varphi} \sigma_r = -\sin \varphi \sigma_x + \cos \varphi \sigma_y. \quad (2.2)$$

Ahogy akár a mátrixelemek kiírásával is ellenőrizhető, ez a Hamilton-operátor önadjungált, ami annak köszönhető, hogy a kétdimenziós esetből kellő körültekintéssel került származtatásra [15, 63].

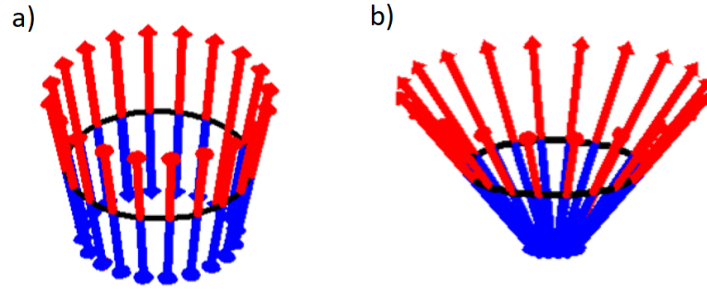
Egy konstanstól eltekintve a (2.1) Hamilton-operátor felírható, mint két impulzusmomentum operátor összegének a négyzete:

$$H_{ring} = \hbar \Omega \left[ \left( -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\omega}{2\Omega} (\sigma_x \cos \varphi + \sigma_y \sin \varphi) \right)^2 - \frac{\omega^2}{4\Omega^2} \right], \quad (2.3)$$

ahol tehát a pálya-impulzusmomentum  $z$  komponense ( $L_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$ ) és  $\frac{\omega}{\Omega} S_r = \frac{\omega}{\Omega} \sigma_r / 2$  szerepel (mindkét impulzusmomentumot  $\hbar$  egységekben értve).  $L_z + \frac{\omega}{\Omega} S_r$  mellett könnyen ellenőrizhető módon  $H_{ring}$  felcserélhető a teljes impulzusmomentum  $z$  komponensével,  $K = L_z + S_z$ -vel is, még hozzá úgy, hogy külön-külön sem  $[H_{ring}, L_z]$ , sem pedig  $[H_{ring}, S_z]$  nem tűnik el. Emellett létezik egy helyfüggő spin operátor, ami szintén kommutál  $H_{ring}$ -gel:  $S_{\theta\varphi} = S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta$ , ahol a  $\theta$  szöveget  $\varphi$ -től függetlenül az alábbi egyenlet határozza meg:

$$\tan \theta = -\omega / \Omega. \quad (2.4)$$

Ez azt jelenti, hogy  $\theta$  pusztán a spin-pálya kölcsönhatás nagyságának és a kinetikus energiának az arányától függ.  $S_{\theta\varphi}$  sajátspinorjainak az irányát (ami tekinthető  $H_{ring}$  sajátspi-



**13. ábra:** Az egydimenziós, zárt kvantumgyűrű sajátspinorjainak iránya a) gyenge és b) erősebb spin-pálya kölcsönhatás esetén.

norjai, vagy röviden a gyűrű sajátspinorjai irányának is) a 13. ábra szemlélteti a gyűrű mentén. (Ez lényegében az 5. ábra egydimenziós változata, ahol a  $z$  komponens nem függ a helytől.)

Az is könnyen belátható, hogy  $[K, S_{\theta\varphi}] = 0$ , így kereshetjük  $H_{ring}$ ,  $K$  és  $S_{\theta\varphi}$  közös sajátállapotait. A meghatározottság kedvéért használjuk  $S_z$  sajátbázisát, amiben kifejtve  $S_{\theta\varphi}$  sajátspinorjai ismertek:

$$|\uparrow_{\theta\varphi}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\downarrow_{\theta\varphi}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Érdekes módon ezek egyben  $K$ -nak a (degenerált) zéró sajátértékéhez tartozó sajátállapotai is. Ha megszorozzuk őket  $e^{i\kappa\varphi}$ -vel, akkor  $S_{\theta\varphi}$  sajátértékei ( $\pm 1/2$ ) azonosak maradnak,  $K$ -é pedig 0-ról  $\kappa$ -ra változnak. Azaz

$$S_{\theta\varphi} e^{i\kappa\varphi} |\uparrow_{\theta\varphi}\rangle = \frac{1}{2} e^{i\kappa\varphi} |\uparrow_{\theta\varphi}\rangle, \quad S_{\theta\varphi} e^{i\kappa\varphi} |\downarrow_{\theta\varphi}\rangle = -\frac{1}{2} e^{i\kappa\varphi} |\downarrow_{\theta\varphi}\rangle, \quad (2.6)$$

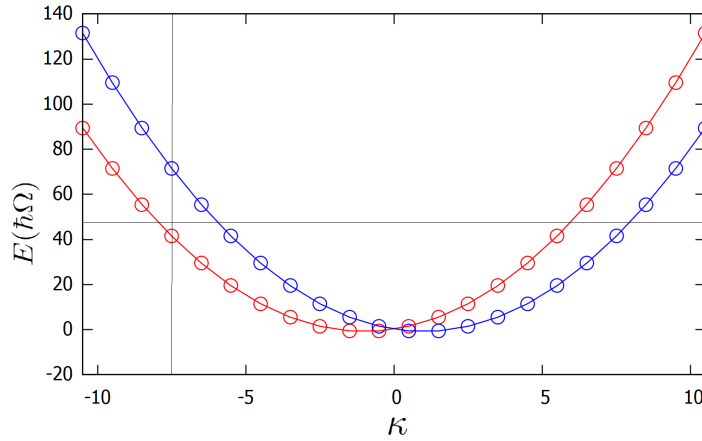
illetve

$$K e^{i\kappa\varphi} |\uparrow_{\theta\varphi}\rangle = \kappa e^{i\kappa\varphi} |\uparrow_{\theta\varphi}\rangle, \quad K e^{i\kappa\varphi} |\downarrow_{\theta\varphi}\rangle = \kappa e^{i\kappa\varphi} |\downarrow_{\theta\varphi}\rangle. \quad (2.7)$$

Könnyen látható, hogy ezek a spinorok a  $H_{ring}$  operátornak is sajátállapotai, a két energia sajátérték pedig

$$E = \hbar\Omega [\kappa^2 - \mu\kappa w + 1/4], \quad \mu = \pm 1, \quad (2.8)$$

ahol  $w = \sqrt{1 + (\omega^2/\Omega^2)}$ . Szemléletesen ez a 14. ábra egy függőleges metszetét jelenti, ahol tehát  $\kappa$  fix. Zárt gyűrű esetén  $\kappa \pm 1/2$  egész kell, hogy legyen, azaz maga  $\kappa$  félegész.



**14. ábra:** Az egydimenziós, zárt kvantumgyűrű sajátenergiái  $\hbar\Omega$  egységekben mérve, az  $\omega/\Omega = 2$  esetben. A kék és piros folytonos vonalak csak a szemet segítik, zárt gyűrű esetén csak félegész  $\kappa$  értékek fordulhatnak elő. (A  $\kappa = 15/2$ -hez tartozó két energia sajátértéket emeli ki a függőleges vonal.) Amennyiben transzportot számolunk (azaz vezetékeket kapcsolunk a gyűrűhöz), akkor az energia folytonos paraméter, és minden energiaérték négyszeresen degenerált (ahogyan a vékony fekete vízszintes vonal mutatja).

### 2.3. Transzport a gyűrűn keresztül

A bevezető fejezet alapján az elektrontranszport leírásához (azaz amikor vezetékek kapcsolódnak a gyűrűhöz) egy adott energián kell megoldanunk a problémát, azaz az előző alfejezet gondolatmenetét folytatva, most a 14. ábra egy vízszintes metszetére kell gondolnunk, de esetünkben a körvezetőhöz csatlakozó vezetékek jelenléte miatt  $\kappa$  tetszőleges (valós) értéket felvehet. Ekkor érdemes egy kompaktabb jelölést használnunk,  $S_{\theta\varphi}$ ,  $K$  és

$H_{ring}$  közös sajátállapotait jelölje most

$$|\psi(\kappa, \varphi)\rangle = e^{i\kappa\varphi} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}u(\kappa) \\ e^{i\varphi/2}v(\kappa) \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

ahol tehát

$$K |\psi(\kappa, \varphi)\rangle = \kappa |\psi(\kappa, \varphi)\rangle \quad (2.10a)$$

$$S_{\theta\varphi} |\psi(\kappa, \varphi)\rangle = s(\kappa) |\psi(\kappa, \varphi)\rangle, \quad s(\kappa) = \pm 1/2. \quad (2.10b)$$

Ha azonban az  $E$  energiát ( $H_{ring}$  sajátértékét) rögzítjük, akkor  $\kappa$  csak olyan lehet, amely megoldja a (2.8) egyenletet ezzel az  $E$  energiával.  $E_0 = -\frac{\hbar\omega^2}{4\Omega}$ -nél nagyobb energiák esetén négy ilyen  $\kappa$ -t találunk. ( $E_0$  alatt pedig egyet sem, ez algebrailag is látható, de érdemes rápillantani a 14. ábrára is.) A megoldások konkrét alakja:

$$\kappa_j^\mu = \mu(\omega/2 + (-1)^j q), \quad j = 1, 2, \quad \mu = \pm 1, \quad (2.11)$$

ahol  $q = \sqrt{(\omega/2\Omega)^2 + E/\hbar\Omega}$ . A mostani jelölésekkel a (2.9) egyenletbeli együtthatók arányát

$$\frac{v(\kappa_j^\mu)}{u(\kappa_j^\mu)} = (\tan \theta/2)_\mu = \frac{\Omega}{\omega} (1 - \mu\omega) \quad (2.12)$$

adja meg, ami természetesen a  $\mu$  megfelelő értékeire visszaadja a (2.5) egyenletbeli arányokat.

A teljes transzportprobléma (gyűrű és vezeték együttesen) egy adott  $E$  energiához tartozó stacionárius állapotait az egyes tartományokon kapott megoldások illesztése adja. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a vezetékben nincs spin-pálya kölcsönhatás, így ott a stacionárius állapotok síkhullámok. A 15. ábrán szereplő lokális koordinátákat használva, a bal oldali „bejövő” vezetékben a megoldást a következő alakba írhatjuk:

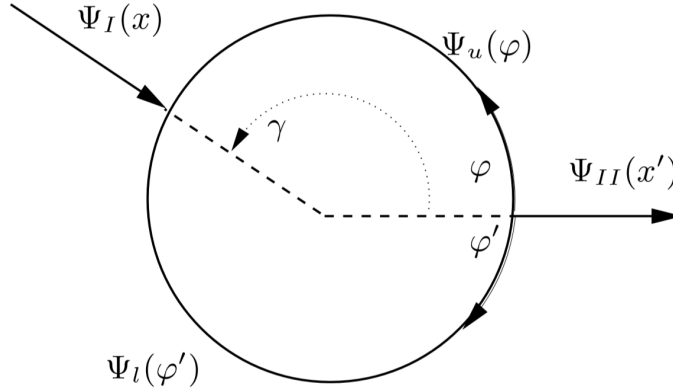
$$|\Psi_I(x)\rangle = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} e^{ikx} + \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \end{pmatrix} e^{-ikx}, \quad (2.13)$$

ahol  $k = \sqrt{2m^*E}/\hbar$ , és (ahogyan az a koordinátatengely irányításából és  $k$  előjeléből is látszik)  $f_1$  és  $f_2$  jelöli a bejövő,  $r_1$  és  $r_2$  pedig reflektált spinor komponenseit. Amint látni fogjuk,  $f_1$  és  $f_2$  tetszőlegesen megválasztható, egy adott geometria és spin-pálya kölcsönhatás erősség mellett ezek aránya szabja meg a teljes megoldást. A kimenő vezetékben csak a gyűrűtől távolodó síkhullámokat engedünk meg:

$$|\Psi_{II}(x')\rangle = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} e^{ikx'}. \quad (2.14)$$

Magában a gyűrűben külön kezeljük az alsó (lower: l) és a felső (upper: u) kart. Mindkét térrészhez négy együttható tartozik, annak megfelelően, hogy  $E$  a fentiek alapján négyszeresen degenerált:

$$|\Psi_u(\varphi)\rangle = \sum_{\substack{j=1,2 \\ \mu=\pm}} a_j^\mu |\psi(\kappa_j^\mu, \varphi)\rangle; \quad |\Psi_l(\varphi')\rangle = \sum_{\substack{j=1,2 \\ \mu=\pm}} b_j^\mu |\psi(\kappa_j^\mu, -\varphi')\rangle. \quad (2.15)$$



**15. ábra:** Egy kimenettel rendelkező kvantumgyűrű sematikus rajza a különböző tartományokhoz tartozó sajátállapotok jelölésével.

A 15. ábra alapján a bejövő vezeték spinorértékű hullámfüggvényét  $x = 0$ -ban kell illesztenünk  $\Psi_u$ -val a  $\varphi = \gamma$  és  $\Psi_l$ -lel a  $\varphi' = 2\pi - \gamma$  helyen. Ugyanígy, a kimenő vezeték esetén  $\Psi_{II}(x')$  kapcsán az  $x' = 0$  pontot, míg a  $\Psi_u$  és  $\Psi_l$  spinoroknál a  $\varphi = \varphi' = 0$  szögeket kell tekintenünk az illesztéshez. Mivel a rendszerben nincs sem forrás, sem nyelő, az illesztési pontokban (is) teljesülnie kell a forrásmentes kontinuitási egyenletnek, ami stacionárius állapotokban  $\partial\rho/\partial t = 0$  miatt ( $\rho$  definícióját (1.25) adja) azt jelenti, hogy a csomóponti Kirchhoff-egyenletek kvantumos megfelelőjének teljesülnie kell az illesztési pontokban. (Illetve mindenhol, de a többi helyen ez triviális.) A vezetékekben feltevésünk szerint nincs spin-pálya kölcsönhatás, így a valószínűségi áramsűrűség szokásos egydimenziós alakja érvényes:

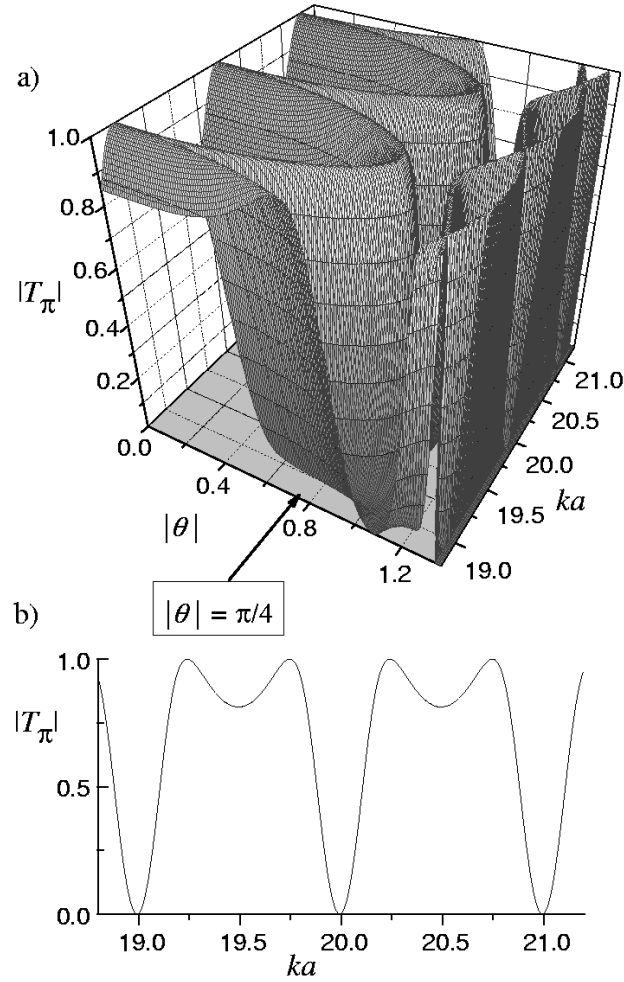
$$j(x) = \frac{\hbar}{m^*} \text{Im} \left\langle \Psi(x) \left| \frac{d}{dx} \Psi(x) \right. \right\rangle, \quad (2.16)$$

ahol a belső szorzatot az (1.24) egyenlet adja meg. A gyűrűben viszont a spin-pálya kölcsönhatás jelenléte miatt (az (1.27) egyenlethez hasonlóan) megjelenik egy  $\alpha$ -val arányos tag is [28]:

$$j(\varphi) = 2\hbar\Omega \text{Im} \left\langle \Psi(\varphi) \left| \frac{d}{d\varphi} \Psi(\varphi) \right. \right\rangle + \hbar\omega \langle \Psi(\varphi) | \sigma_r | \Psi(\varphi) \rangle. \quad (2.17)$$

A valószínűségi áramok megfelelő előjeles összegének az eltűnése mellett a Griffith-féle peremfeltételeknek [16, 67] megfelelően előírjuk a megoldás (spinorkomponensenkénti) folytonosságát is az illesztési pontokban. Praktikusan azzal érdemes kezdeni, hogy a folytonosságot előírjuk, mert – amint az viszonylag könnyen belátható – ezután az áramsűrűsége vonatkozó egyenletek egyszerűen az argumentum szerinti deriváltakra vonatkozó lineáris egyenletekké válnak. Így az illesztési egyenletek együttese pusztán egy 12 egyenletből álló lineáris egyenletrendszer jelent, ahol a 12 ismeretlen  $r_1, r_2, t_1, t_2, \{a_j^\mu\}$  és  $\{b_j^\mu\}$  ( $j = 1, 2, \mu = \pm$ ). Az egyenletrendszer analitikus megoldása, és annak segítségével a transzmissziós valószínűségeket illetve a vezetőképesség kiszámítása a  $\gamma = \pi$  esetben megtalálható Molnár Balázs és munkatársai [28] munkájában. A továbbiakban a megoldások ismeretében a gyűrű spintranszformációs tulajdonságaira koncentrálnunk.





**16. ábra:** A  $|T_\pi|$  hatékonyság a  $\gamma = \pi$  geometriában  $\theta = -\arctan \omega/\Omega$  és  $ka$  függvényében (az a) panelen). A  $|\theta|$  szög maximumához  $\omega/\Omega = 3.5$  tartozik. b) panel: A fenti felület keresztmetszete  $|\theta| = \pi/4$ -nél, amikor a transzformáció lényegében egy Hadamard kapu.

## 2.4. Spintranszformációk, kvantumos logikai kapuk

A probléma linearitása miatt a gyűrűhöz csatlakozó kimenő vezetéken megjelenő „kimenő spinor” egy adott geometria és spin-pálya kölcsönhatási erősség esetén a „bemenő spinor” lineáris transzformáltja:

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

A  $T$  mátrix az előző alfejezetben leírt lineáris egyenletrendszer segítségével analitikusan kiszámítható. Az eredményt érdemes az

$$T = |T_\gamma| e^{i\delta_0/2} e^{-i\gamma/2} U, \quad (2.19)$$

alakba írni, ahol  $\gamma$  a 15. ábrán látható szög, az  $U$  mátrix elemei pedig  $u_{11} = u_{22}^* = (e^{i\delta/2} \sin^2 \frac{\theta}{2} + e^{-i\delta/2} \cos^2 \frac{\theta}{2}) e^{i\gamma/2}$ ,  $u_{12} = -u_{21}^* = i \sin \frac{\delta}{2} \sin \theta e^{-i\gamma/2}$ . A nemnegatív  $|T_\gamma|$  a

$$|T_\gamma| e^{i\delta_\pm} = \frac{4ikaq(\sin q(2\pi - \gamma) + e^{i\Phi_\pm} \sin q\gamma) e^{-i\gamma\Phi_\pm/2\pi}}{k^2 a^2 \{\cos 2q(\pi - \gamma) - \cos 2q\pi\} + 4q^2 \{\cos \Phi - \cos 2q\pi\} + 4ikaq \sin 2q\pi}, \quad (2.20)$$

kifejezés abszolút értéke, míg a valós  $\delta$  és  $\delta_0$  fázisok a fenti egyenletben szereplő  $\delta_+$  és  $\delta_-$  segítségével adhatók meg:

$$\delta_0 = \delta_+ + \delta_-, \quad \delta = \delta_+ - \delta_-. \quad (2.21)$$

A (2.20) egyenletben szereplő  $\Phi_\pm = \pi(-1 \pm w)$  mennyiségeket a megfelelő spinirányhoz tartozó Aharonov-Casher fázisoknak [9] nevezik.

Ahogy mátrixelemei is mutatják,  $U$  egy unitér  $2 \times 2$ -es mátrix. A transzmissziót leíró  $T$  mátrixnak ez az unitér része az, ami spin qubitek terén nemtriviális forgatásokat ír le. A (2.19) egyenletben  $0 \leq |T_\gamma| \leq 1$  azzal kapcsolatos, hogy a reflexió miatt a kimenő spinorok normája általában kisebb, mint a bemenőké. Ha  $|T_\gamma| = 0$ , akkor egyáltalán nincs transzmisszió, az adott energián a gyűrűn 0 valószínűséggel haladnak át az elektronok, míg a  $|T_\gamma| = 1$  esetben a transzmissziós valószínűség egységnyi, és a teljes  $T$  unitér. Ezért  $|T_\gamma|$  nevezhető a spinekre ható egyqubites logikai kapu hatékonyságának is.

A lehetséges speciális esetek vizsgálatát a  $\gamma = \pi$  paraméterrel (azaz az egymással párhuzamos be- és kimenő vezetékek esetével) kezdjük. Ekkor, ahogyan a (2.21) egyenlet is mutatja,  $\delta = \pi$  szintén fennáll, energiától függetlenül. Ebben az esetben a transzmissziós mátrix alakja:

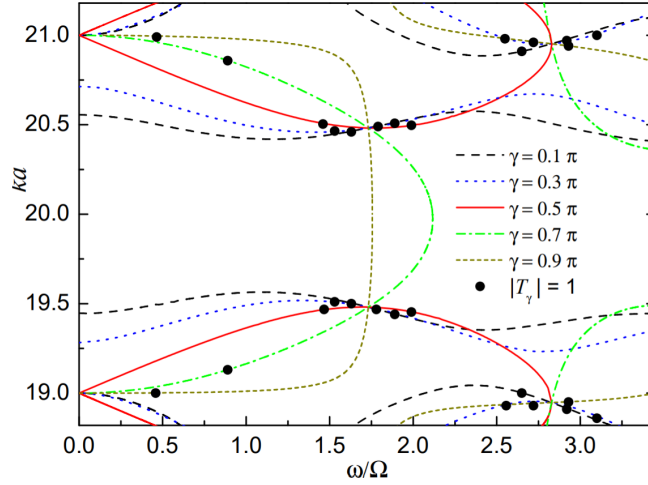
$$T = |T_\pi| e^{i(\delta_0 + \pi)/2} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = |T_\pi| e^{i(\delta_0 + \pi)/2} U, \quad (2.22)$$

ahol

$$|T_\pi| e^{i\delta_0/2} = \frac{8ikaq \sin(\pi q) \cos(\Phi/2)}{k^2 a^2 (1 - \cos 2q\pi) + 4q^2 (\cos \Phi - \cos 2q\pi) + 4ikaq \sin 2q\pi}. \quad (2.23)$$

A (2.22) egyenlettel adott transzformációs mátrix unitér  $U$  része  $k$ -tól függetlenül elforgatja a spint az  $y$  tengely körül [66]  $2\theta$  szöggel. A [27] kísérlet adatait átszámítva esetünkre, azt kapjuk, hogy a spin-pálya kölcsönhatás  $\omega = \alpha/\hbar a$  paraméteren keresztül történő manipulálásával  $|\theta|$  a 0 és  $0.4 \pi$  értékek között változtatható. A 16. ábra az ilyen típusú kvantumos logikai kapu  $|T_\pi|$  hatékonyságát mutatja  $|\theta|$  és  $ka$  függvényében a  $k_F a = 20.4$  érték körül. Ezek a paraméterek egy  $a = 0.25 \mu\text{m}$  sugarú gyűrűhöz tartoznak InGaAs-ben, ahol a Fermi energia 11.13 meV. Ahogyan látható, vannak olyan  $ka$  és  $\theta$  értékpárok, ahol a transzformáció unitér, azaz  $|T_\pi| = 1$ . Ez azt jelenti, hogy ilyen paramétereket használva, az egymás után kapcsolt gyűrűk még mindig uniterek lesznek, még hozzá úgy, hogy a teljes rendszer  $T$  mátrixa az egyes gyűrűk  $T$  mátrixainak a szorzataként áll elő. (Ezt persze csak addig folytathatjuk, amíg a teljes rendszer mérete kisebb a koherenciahossznál.)

A kvantumos információfeldolgozás terminológiáját [66] használva, a (2.22) egyenlettel adott transzformációk meglehetősen általános egyqubites kapukat jelentenek, és az eddigi



**17. ábra:** Azok a vonalak, amelyek mentén a gyűrű  $\gamma$  fáziskapuként működik. A pontok azokat az eseteket jelölik, amikor ezek a kapuk veszteségmentesek, azaz  $|T_\gamma| = 1$ .

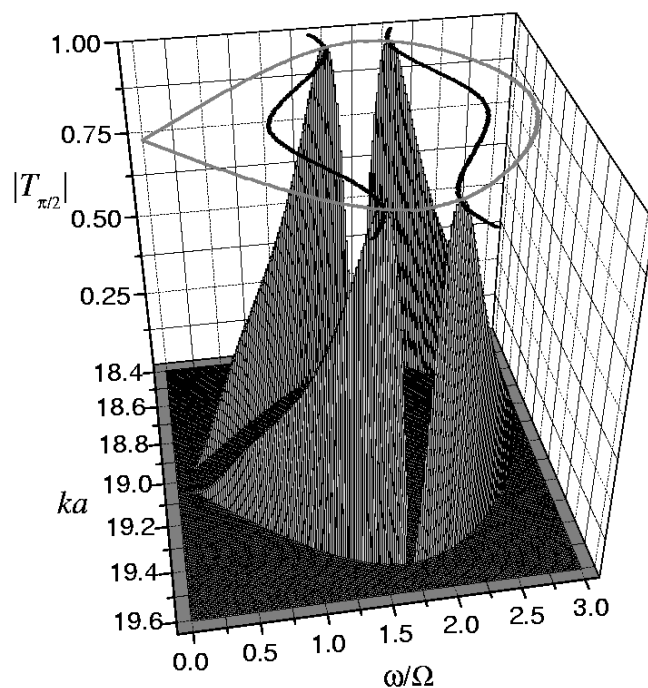
eredmények azt mutatják, hogy elvben tetszőleges szögű,  $y$  tengely körüli forgatás elérhető olyan gyűrűvel, ahol a be- és kimenő vezetékek párhuzamosak. Speciális esetként érdemes megemlíteni, hogy ha  $\theta = \pi/4$ , akkor a transzformáció lényegében a kvantum algoritmusokban fontos szerepet játszó Hadamard-kapu [66]. Két ilyen kapu egymásutánja pedig az  $X$ , vagy más néven kvantum NOT kapu. Szigorúan véve mindkét esetben szükség lenne még arra, hogy a spinorkomponensek relatív fázisát megfelelően megváltoztassuk, és így elérjük, hogy  $T$  determinánsa  $(-1)$  legyen. Amint nemsokára látni fogjuk, ez lehetséges is a  $\gamma \neq \pi$  esetben.

Tetszőleges  $\gamma$  esetén, ahogyan várható is, az elérhető transzformációk osztálya sokkal tágabb lesz. Egy kiemelkedő fontosságú speciális eset az, amikor a spin-pálya kölcsönhatás erősségének hangolásával elérjük, hogy  $\delta = 0$  legyen. Ekkor:

$$T_\gamma(\delta = 0) = |T_\gamma| e^{i\delta_0/2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma} \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

és a transzformáció unitér része egy olyan fáziskaput [66] ír le, amely a két spinorkomponens relatív fázisát pontosan a geometria által adott (15. ábra)  $\gamma$  szöggel változtatja meg. A 17. ábra azokat a görbéket mutatja a  $ka - \omega/\Omega$  síkon, amelyek mentén ilyen kapukat létre lehet hozni (formálisan, amikor  $\delta = 0$  a (2.21) egyenletben). A görbékre rajzolt pontok jelölik a  $|T_\gamma| = 1$  eseteket, amikor is a transzformáció unitér. A 18. ábra a fáziskapu hatékonyságát mutatja a  $\gamma = \pi/2$  esetben  $\alpha$  és  $ka$  függvényeként. Amint ebben a speciális esetben is látható, vannak olyan paraméterek, amelyeknél a fáziskapu unitér.

Ahogy említettük, a reflexiómentes viselkedés elvben azt is jelenti, hogy több gyűrűt „kapcsolhatunk” egymás után, és az eredmény még így is unitér transzformáció lesz. Természetesen a gyakorlatban nem folytathatjuk ezt bármeddig, de érdemes végiggondolni, milyen lehetőségek adódnak néhány gyűrű felhasználásával. Két azonos gyűrű  $\gamma = \pi/2$  szöggel a (2.24) egyenlet alapján pl.  $Z$  kaput ad [66]. Ez a kapu egy, a (2.22) egyenlet



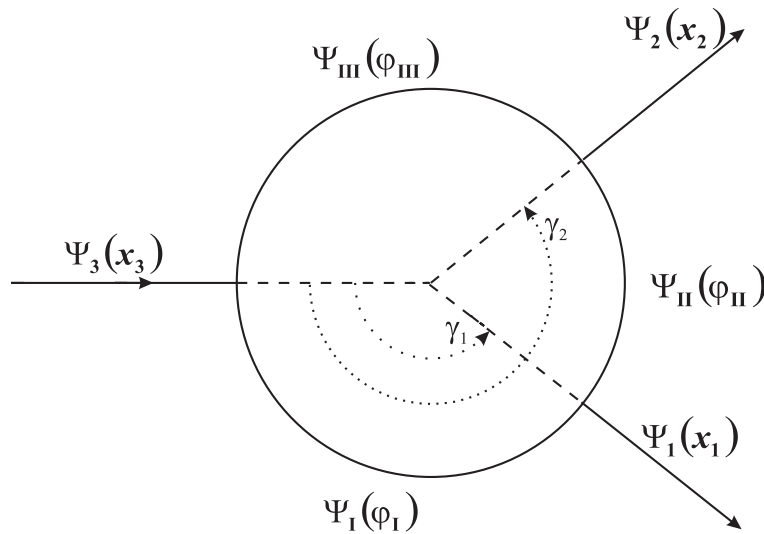
**18. ábra:** A  $\pi/2$  szöghöz tartozó fáziskapu hatékonysága. A hasáb fedőlapján futó szürke görbe mentén a gyűrű  $\pi/2$  fáziskapuként működik, míg a fekete görbék mentén igaz az, hogy  $|T_{\pi/2}| = 1$ . Ennek megfelelően a görbék metszéspontjában a  $\pi/2$  fáziskapu unitér.

szerinti transzformációt végrehajtó gyűrűvel kombinálva a  $\theta = \pi/4$  esetben Hadamard kapuhoz vezet. Hasonlóan, két gyűrű  $\gamma = \pi/2$  szöggel és kettő a (2.22) egyenlet által leírt típusból ( $\theta = \pi/4$ ) NOT kaput szolgáltat a szokásos fázissal. Mindez azt jelenti, hogy néhány gyűrű felhasználásával realizálható az összes nevezetes egyqubites kvantum logikai kapu.

## 2.5. Spinpolarizáció, Stern-Gerlach-szerű viselkedés

A Stern-Gerlach kísérletben a spin és térbeli szabadsági fokok összekapcsolódnak, a spin iránya szabja meg, hogy milyen térbeli pályát kövessen az inhomogén mágneses térben mozgó atom. Nem sokkal az effektus felfedezése után Bohr és Mott [68] is rámutatott, hogy az atomokkal ellentétben elektronok esetén nem működik ez a módszer, inhomogén mágneses tér felhasználásával nem lehet spinpolarizált elektronokat preparálni. Ha azonban nem szabad térben, hanem szilárdtestben, esetlegesen alacsony dimenziós mintákban („kötött pályán”) mozgó elektronokat tekintünk, van rá esély, hogy elérjük a spinpolarizációt. A Rashba-féle [19] spin-pálya kölcsönhatásnak köszönhetően az eddigiekben megismert, többféle spin-transzformációs jelenség számára is alapul szolgáló [T1, 3, 27, 28, 69–71] kvantumgyűrűk jó lehetőséget nyújtanak erre.

A következőkben felvázolunk egy kvantumgyűrűn alapuló interferometrikus eszközt, amely a *Stern-Gerlach berendezés spintronikai megfelelője*, mivel a bejövő elektronok a gyűrű geometriája miatt két különböző utat követhetnek, és megfelelő paraméterek esetén a két kimeneten egymástól eltérő polarizációs irányokkal hagyhatják el a gyűrűt, ahogyan a 19. ábra mutatja. A jelenség alapja a spinfüggő kvantumos interferencia, amely, ahogyan látni fogjuk, akár oda is vezethet, hogy a két kimenettel rendelkező gyűrű spinpolarizációs hatása mellett reflexiómentes is lesz.



**19. ábra:** A két kimenettel rendelkező kvantumgyűrű geometriája és a hullámfüggvények a különböző tartományokban.

## 2.6. A szórásprobléma megoldása két kimenet esetén

A fejezet első részéhez hasonlóan most is egy  $a$  sugarú körvezetőt tekintünk az  $x-y$  síkban, és feltesszük, hogy az  $\alpha$  paraméterrel jellemezhető Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás külső térrel hangolható [27]. A teljesség kedvéért idézzük fel gyűrűbeli elektronmozgást

leíró Hamilton-operátort:

$$H_{ring} = \hbar\Omega \left[ \left( -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\omega}{2\Omega} \sigma_r \right)^2 - \frac{\omega^2}{4\Omega^2} \right], \quad (2.25)$$

ahol tehát  $\varphi$  a polárszög, és  $\sigma_r = \cos \varphi \sigma_x + \sin \varphi \sigma_y$ .  $\hbar\Omega = \hbar^2/2m^*a^2$  a karakterisztikus kinetikus energia, továbbá  $\omega = \alpha/\hbar a$  spin-pálya kölcsönhatást jellemző frekvencia. A  $H_{ring}$  operátor sajátérték-problémájának a 2.2 alfejezetben leírt megoldását most nem ismételjük meg, és a transzportfolyamat tulajdonságainak kiszámítása kapcsán is elegendő megemlíteni, hogy a két kimenet miatt most három részre kell osztanunk a gyűrűt, és három pontban kell alkalmaznunk a Griffith-féle peremfeltételeket [16]. (A kimenő karokban csak kifutó síkhullámokat teszünk fel, míg a bejövőben a reflexió miatt mindkét irányba haladó megoldások megjelenhetnek.) Az egyes tartományok és az illesztési pontok a 19. ábrán láthatók. Eszerint a  $\Psi_3$  a bejövő spinor értékű hullámfüggvény, amelynek  $\sigma_z$  sajátbázisában adott komponenseit  $f_\uparrow, f_\downarrow$ -vel jelöljük. A kimenő spinorok:

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} t_\uparrow^1 \\ t_\downarrow^1 \end{pmatrix}, \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} t_\uparrow^2 \\ t_\downarrow^2 \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Az illesztési egyenletek ebben az esetben is lineáris egyenletrendszerre vezetnek, amit megoldva az eredményt transzmissziós mátrixok segítségével is összefoglalhatjuk:

$$T^{(n)} \begin{pmatrix} f_\uparrow \\ f_\downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_\uparrow^n \\ t_\downarrow^n \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

ahol  $n = 1, 2$ . Ezek a mátrixok tiszta kvantummechanikai spinállapotok között létesítenek kapcsolatot, ami azt is jelenti, hogy létezik olyan spinirány, amelyben a bejövő állapot 100%-ban spinpolarizált. Ha azonban – mint pl. termikus esetben – maga a bejövő állapot nem spinpolarizált, akkor azt egy  $2 \times 2$ -es sűrűségmátrixszal kell leírnunk, és a transzmissziós mátrixok szerepe a következő:

$$\rho^n = T^{(n)} \rho_{in} (T^{(n)})^\dagger. \quad (2.28)$$

Itt tehát  $\rho^1$  és  $\rho^2$  a kimenő spin sűrűségmátrixok az indexekkel jelzett karokban.

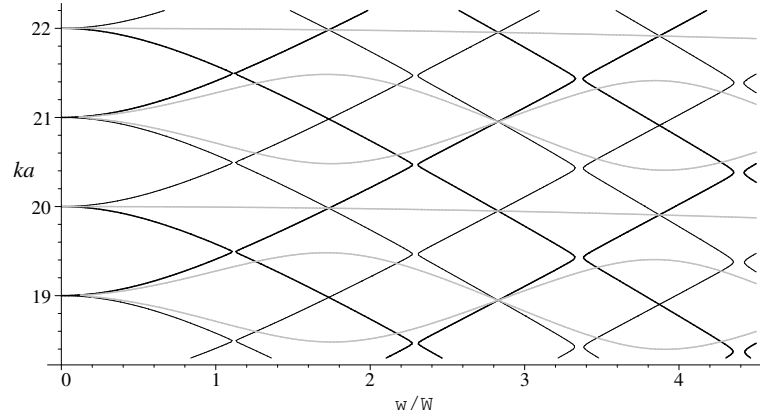
$T^{(1)}$  és  $T^{(2)}$  mátrixelemei a lineáris egyenletrendszer megoldásával analitikusan számíthatók tetszőleges geometria esetére, de azt találtuk, hogy a spinpolarizációs tulajdonság akkor látszik a legtisztábban, ha a gyűrű tükörszimmetrikus, azaz  $\gamma_1 = 2\pi - \gamma_2$ . A továbbiakban csak ezzel az esettel foglalkozunk, amikor az adódik, hogy

$$\begin{aligned} T_{\uparrow\uparrow}^{(1)} &= \frac{8qak}{h} e^{i\frac{\gamma_2}{2}} \left[ \cos^2 \frac{\theta}{2} (h_1 + h_2) + \sin^2 \frac{\theta}{2} (h_1^* - h_2^*) \right], \\ T_{\uparrow\downarrow}^{(1)} &= \frac{8qak}{y} e^{i\frac{\gamma_2}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} [(h_1 + h_2) - (h_1^* - h_2^*)], \\ T_{\downarrow\downarrow}^{(1)} &= \frac{8qak}{y} e^{-i\frac{\gamma_2}{2}} \left[ \sin^2 \frac{\theta}{2} (h_1 + h_2) + \cos^2 \frac{\theta}{2} (h_1^* - h_2^*) \right], \\ T_{\downarrow\uparrow}^{(1)} &= e^{-i\gamma_2} T_{\uparrow\downarrow}^{(1)}, \end{aligned}$$

ahol

$$\begin{aligned}
h_1 &= -ake^{-i\frac{w}{2}\gamma_2}e^{iw\pi}\sin(q(2\pi-\gamma_2))\sin(2q(\pi-\gamma_2)), \\
h_2 &= iqe^{-i\frac{w}{2}\gamma_2}[e^{iw\pi}\sin(q\gamma_2)-\sin(q(2\pi-\gamma_2))], \\
y &= ia^3k^3[\sin(2q(3\pi-2\gamma_2))-2\sin(2q(\pi-\gamma_2)) \\
&\quad -\sin(2q\pi)]-2qa^2k^2[\cos(2q(3\pi-2\gamma_2)) \\
&\quad +2\cos(2q(\pi-\gamma_2))] + 6qa^2k^2\cos(2q\pi) \\
&\quad -12iq^2ak\sin(2q\pi)+8q^3[\cos(w\pi)+\cos(2q\pi)].
\end{aligned} \tag{2.29}$$

A másik kimenetre teljesen hasonlóan azt kapjuk, hogy  $T_{\uparrow\uparrow}^{(2)}=T_{\downarrow\downarrow}^{(1)}$ ,  $T_{\downarrow\downarrow}^{(2)}=T_{\uparrow\uparrow}^{(1)}$ ,  $T_{\uparrow\downarrow}^{(2)}=-T_{\downarrow\uparrow}^{(1)}$ , és  $T_{\downarrow\uparrow}^{(2)}=-T_{\uparrow\downarrow}^{(1)}$ . (Ez a szimmetria természetesen a geometriával, azaz a szögek  $\gamma_1=2\pi-\gamma_2$  megválasztásával függ össze.) Érdeemes megjegyezni, hogy a reflexiós mátrix szintén kiszámítható,  $\sigma_z$  sajátbázisában diagonálisnak adódik. A továbbiakban a transzmissziós tulajdonságokra fogunk fókuszálni, és ebből a szempontból a reflexiót veszteségnek fogjuk tekinteni.



**20. ábra:** A tökéletes spinpolarizáció feltételei. A (2.31a) egyenlet a szürke, a (2.31b) egyenlet pedig a plusz (mínusz) előjellel a vékony (vastag) fekete vonalak mentén teljesül. Így a gyűrű a szürke és fekete vonalak minden kereszteződésénél tökéletes spinpolarizáló eszközként működik. Az ábrához tartozó geometria:  $\gamma_1 = \pi/2$ ,  $\gamma_2 = 3\pi/2$ .

A két kimenettel rendelkező kvantumgyűrűk legmeglepőbb tulajdonsága valóban az, hogy teljesen polarizálatlan bemenetet (az egységgel arányos  $\rho_{in}$  mátrixot) feltételezve a kimenetek általában részben polarizáltak lesznek. Ez jelenség optikai úton, a Faraday forgatás jelenségét felhasználva mérhető is [72]. Ezen túl, azt találtuk, hogy megfelelően választott paraméterek esetén a kimenetek lényegében 100%-ban spinpolarizáltakká is tehetőek. Ez matematikailag azt jelenti, hogy a transzmissziós mátrixok a veszteségektől eltekintve projektorok:

$$\frac{1}{2}T^{(n)}(T^{(n)})^\dagger = \eta_n|\phi^n\rangle\langle\phi^n|. \tag{2.30}$$

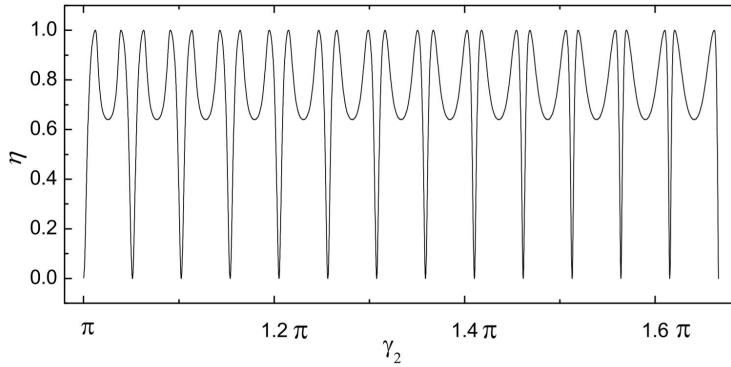
Itt a nem-negatív  $\eta_1$  és  $\eta_2$  számok a polarizáció hatékonyságát mérik,  $\eta_1 + \eta_2 = 1$  jelenti a reflexiómentes esetet. Közvetlen számolással megmutatható, hogy ha a (2.30) egyenlet teljesül, akkor a két kimenet normája azonos, azaz  $\eta_1 = \eta_2 \equiv \eta/2$ . A (2.30) egyenlettel

kifejezett feltétel nyilvánvalóan teljesül, ha  $T^{(n)} (T^{(n)})^\dagger$  determinánása eltűnik. Azt találtuk, hogy a szorzatban szereplő két mátrix determinánása azonos, és akkor lesz nulla, ha  $h_1 + h_2 = 0$  vagy  $h_1 - h_2 = 0$ . A (2.29) egyenletek felhasználásával a  $h_1 \pm h_2 = 0$  feltétel azt jelenti, hogy

$$\cos(w\pi) = \frac{\sin(q\gamma_2)}{\sin(q(2\pi - \gamma_2))}, \quad (2.31a)$$

$$\sin(w\pi) = \mp \frac{ak}{q} \sin(2q(\pi - \gamma_2)). \quad (2.31b)$$

Ezeknek a relációknak mindegyike görbékét határoz meg a  $k-\omega$  síkon, ahogyan a 20. ábra is mutatja a  $\gamma_2=3\pi/2$  esetben. A szürke ((2.31a) megoldásai) és a fekete ((2.31b) megoldásai) vonalak metszéspontjai adják azokat a paramétereket, amikor a gyűrű spinpolarizált kimeneteket szolgáltat. Bármilyen (tükörszimmetrikus) geometria esetén felrajzolhatjuk a 20. ábrához hasonló görbéket. Ez szemléletesen azt jelenti, hogy a háromdimenziós  $\{\gamma_2, \omega/\Omega, ka\}$  síkon is görbéket kapunk, amelyek mentén a tökéletes spinpolarizáció fellép.



**21. ábra:** A tökéletesen polarizáló kvantumgyűrű transzmissziós valószínűsége  $\gamma_2 = 2\pi - \gamma_1$  függvényében. A  $ka$  paraméter a  $[19.0, 21.0]$  intervallumba esik, és  $0 < \omega/\Omega < 5$ . A görbe a  $h_1 + h_2 = 0$  feltételhez tartozik.

Ezek után meg kell kérdeznünk, hogy mik a transzmissziós valószínűségek abban az esetben, ha a fentiekben tárgyalt spinpolarizáció fellép. (Nyilván elhanyagolható praktikus haszna lenne a jelenségnek, ha a válasz az lenne, hogy ilyenkor nullához nagyon közeliek ezek a valószínűségek.) A 21. ábra mutatja, hogy a  $h_1 + h_2 = 0$  egyenlet által definiált vonal mentén a polarizáció  $\eta$  által adott hatékonysága a  $\gamma_2$  szög kváziperiodikus függvénye. (Nagyon hasonló ábra rajzolható a  $h_1 - h_2 = 0$  feltétel esetére is.) Ahogyan a 21. ábrán láthatjuk, vannak olyan pontok (azaz paraméter kombinációk) amikor a transzmissziós valószínűség egységnyi. Ez azt jelenti, hogy polarizálatlan bemenetből kiindulva lehetséges 100% spinpolarizációt elérni reflexiós veszteségek nélkül is.

## 2.7. A spinpolarizált állapotok jellemzése

Ebben a szakaszban a gyűrű polarizáló tulajdonságának eredményét, azaz a kimenő spinorokat vizsgáljuk meg részletesebben. Mivel tökéletes polarizáció esetén a kimenő sűrűségmátrixok maguk is egy egydimenziós altérre vetítő projektorok számszorosai, azokat



a  $|\phi^n\rangle$  állapotokat keressük, amelyek a  $\rho^n$  mátrixok nemnulla sajátértékéhez ( $\eta_1 = \eta_2 = = 128q^2a^2k^2|h_1|^2/|y|^2$ ) tartozó sajátspinorok. A meghatározottság kedvéért most a  $h_1 + h_2 = 0$  feltételre koncentrálna ezek a sajátspinorok a következők:

$$|\phi^1\rangle_+ = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{-i\gamma_2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\phi^2\rangle_+ = \begin{pmatrix} e^{-i\gamma_2} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Ez az eredmény kapcsolatot teremt a gyűrű geometriája, a spin-pálya kölcsönhatás erőssége (ami a  $\theta$  szögön keresztül jelenik meg) és a polarizációs irányok között. Ez a két spinor a gyűrű különböző kimenetén jelenik meg, azaz itt egyazon részecske két különböző (térbeli és a spin) szabadsági foka fonódik össze, hasonlóan pl. a neutron interferenciával kapcsolatos kísérletekhez [73]. Ugyanakkor fontos hangsúlyozni, hogy esetünkben a két kimenő spinor általában nem ortogonális, a belső szorzatuk  $+\langle\phi^2|\phi^1\rangle_+ = i \sin \theta \sin \gamma_2$ . (Nem ortogonális állapotok megkülönböztethetőségével kapcsolatban lásd pl. a [74] munkát.) A teljesség kedvéért megjegyezzük, hogy a  $h_1 - h_2 = 0$  esetben azt kapjuk, hogy:

$$|\phi^1\rangle_- = \begin{pmatrix} e^{i\gamma_2} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\phi^2\rangle_- = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\gamma_2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

$T^{(n)} (T^{(n)})^\dagger$  szorzat helyett magukat a transzmissziós mátrixokat tekintve, látható, hogy a (2.31a -b) egyenletekkel adott feltételek mellett ezek determinánsa is eltűnik. Mászóval, mindkét  $T^{(n)}$  mátrixnak van egy zéró sajátértéke is, ugyanakkor az ehhez tartozó sajátspinor nem ortogonális a megfelelő  $|\phi^n\rangle$ -re. (Erre abból a szempontból nincs is ok, hogy a  $T^{(n)}$  mátrixok nem hermitikusak.) Közvetlen számítással ellenőrizhető, hogy a  $T^{(n)}$  mátrixok nemnulla sajátspinorjai megegyeznek  $|\phi^n\rangle_+$ -nel illetve  $|\phi^n\rangle_-$ -nel (attól függően, hogy a (2.31b) egyenlet melyik előjellel teljesül), azok az állapotok pedig, amelyekre  $T^{(n)}|\phi_0^n\rangle = 0$  teljesül a következő alakúak:

$$|\phi_0^1\rangle_+ = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\phi_0^2\rangle_+ = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

abban az esetben, ha  $h_1 + h_2 = 0$ , továbbá  $|\phi_0^1\rangle_- = |\phi_0^2\rangle_+$ ,  $|\phi_0^2\rangle_- = |\phi_0^1\rangle_+$ .

A fentiek ismeretében összefoglalhatjuk, hogy a két kimenettel rendelkező, polarizáló kvantumgyűrű milyen szempontból is viselkedik a Stern-Gerlach berendezéshez hasonlóan:

1. Polarizálatlan bemenő spin állapot esetén két különböző irányban polarizált spinállapotot (2.32) kapunk a kimeneteken.
2. Ha a (2.32) egyenlettel adott állapotok egyike a bemenet, akkor az változatlanul hagyja el a gyűrűt a megfelelő kimeneten.
3. Léteznek olyan spinállapotok (a (2.34) egyenlet adja meg őket), amelyek esetén a transzmissziós valószínűség egy adott irányban nulla.

Mindezek ellenére azért az analógia a Stern-Gerlach kísérlettel nem teljes, mert a (2.32) polarizált állapotok nem ortogonálisak, és az a spinor, amely nulla valószínűséggel hagyja

el a gyűrűt az egyik kimeneten, nem egyezik meg a másik kimenethez tartozó polarizált spinorral:  $|\phi^n\rangle \neq |\phi_0^{n'}\rangle$ , ha  $n \neq n'$ . Ebből a szempontból talán az optikában használt polarizáló nyalábosztó [75, 76] (nem merőleges polarizációs irányokkal) a legközelebbi analógia. Ahogyan a következő fejezetben látni fogjuk, egy több gyűrűből álló rendszer elvben képes a Stern-Gerlach berendezéssel teljes mértékben megegyező módon működni.

## 2.8. Összefoglalás

Egy olyan kvantumgyűrű, amelynek egyetlen kimenete van, Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében a spinre vonatkozó egyqubites kvantum logikai kapuként működhet. A gyűrű méretét, a spin-pálya kölcsönhatás erősségét illetve a gyűrűhöz kapcsolódó vezetékek helyzetét változtatva többféle kvantum logikai kapunak megfelelő viselkedés érhető el. A kísérletileg bizonyítottan elérhető paramétertartományban [3, 27, 77] maradva, egy  $a = 0.25\mu\text{m}$  átmérőjű InGaAs ( $m^* = 0.023m$ ) gyűrű esetén  $\alpha$  egészen a  $2.0 \times 10^{-11}$  eVm értékig növelhető, ami  $\theta \approx 0.4 \pi$  szöget jelent. A spintranszformációs lehetőségek lényegében minden ismert egyqubites kapura kiterjeszthetők néhány megfelelő paraméterekkel rendelkező gyűrű összekapcsolásával.

Egy két kimenettel rendelkező kvantumgyűrű alkalmas erősségű Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás esetén a Stern-Gerlach berendezéshez nagyon hasonló módon hat a rajta áthaladó elektronokra. Léteznek olyan spinirányok, amelyekkel jellemzett elektronok spinjük irányának megváltozása nélkül lépnek ki a gyűrű valamely kimenetén, de olyan bemenő spinirány is van, amellyel jellemzett elektronok az egyik kimeneten keresztül egyáltalán nem tudnak kijutni. A spin szabadsági fok szerinti keverék bemenő állapot esetében pedig teljes mértékben spinpolarizált állapot is jelentkezhethet mindkét kimeneten.

## 3. fejezet

# Kvantumgyűrűk együttese, mint többcélú spintronikai eszköz

Ebben a fejezetben a [T3] munka alapján először azt vizsgáljuk meg, hogy milyen további lehetőségek nyílnak az irányított spinmanipulációra, ha egyetlen gyűrű helyett több ilyen gyűrű hálózatát szeretnénk erre a célra felhasználni. A 2. fejezetben említettük, hogy ha az egyes gyűrűk esetén a reflexió elhanyagolható, akkor az egyik kimenetét a következő bemenetére kötve tervezhető funkcionális eszközt kapunk, amely a spintranszformációk lényegesen gazdagabb osztályát teszi lehetővé, mint egyetlen gyűrű. Ez természetesen még a korábbiaknál is élesebben veti fel a koherencia kérdését: azt mindenképpen feltételül kell szabnunk, hogy a rendszer mérete a koherenciahossznál kisebb legyen. Az ezzel kapcsolatos részletesebb vizsgálat [T4] eredményeit a fejezet második felében találjuk.

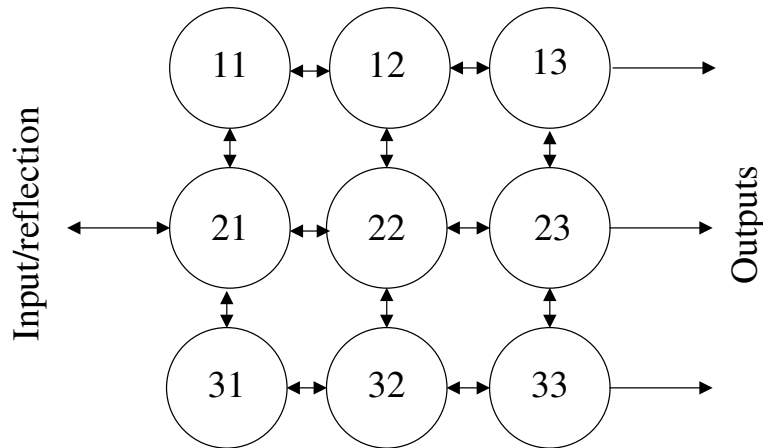
A most ismertető eredmények annyiban különböznek a korábbiaktól, hogy míg egyedülálló gyűrűk esetén ismertek a ballisztikus elektronokat feltételező számításokkal jól egyező transzmissziós eredményeket szolgáltató kísérletek, addig a 22. ábrán vázolt elrendezésnek nem minden részletét valósították meg kísérletileg. Maga a geometria, azaz a négyzetrácsba rendezett gyűrűk sokasága létezik [62], a kísérletben minden gyűrűben azonos volt a Rashba-típusú spin-pálya csatolás erőssége. Ennek ellenére, hogy megmutassuk a rendszerben rejlő lehetőségeket, a továbbiakban feltesszük, hogy ez kölcsönhatás gyűrűként hangolható. Ezzel a feltevéssel, amint látni fogjuk, már viszonylag kicsi, ( $3 \times 3$ -as és  $5 \times 5$ -ös) hálózatok esetén is meglepően sokoldalú eszközt nyerünk, méghozzá úgy, hogy változatlan geometria mellett pusztán a spin-pálya kölcsönhatás erősségét kell átállítani, ha más célra szeretnénk használni a hálózatot.

### 3.1. Bevezetés

A továbbiakban a spinfüggő ballisztikus elektrontranszport tulajdonságait négyzetrácson elrendezett kvantumgyűrűkön számítjuk ki, amelyek pl. InAlAs/InGaAs heterostrukturákban hozhatók létre [25, 26], ahol a korábbiakkal egyezésben a Rashba-típusú [19] spin-pálya kölcsönhatás is jelen van.

A 22. ábra szemlélteti azt a gyűrűelrendezést, amelyre a számításainkat végezzük. Hasonló geometria jelent meg először a [78] kísérleti munkában, 100 nm gyűrűátmérővel.

(Ezt az elrendezést elméleti szempontból pl. a [E3, 79] munkákban vizsgálták.) Érdeemes megjegyezni, hogy a [78] kísérlethez hasonlóan a gyűrűk számításainkban is érintik egymást, a 22. sematikus ábrán az összekötő vonalak csak a szemléltetés kedvéért vannak jelen. (Ugyanakkor technikai szempontból semmilyen nehézséget nem jelent ilyen jellegű – a spin-pálya kölcsönhatás gyűrűnkénti modulációját esetlegesen megvalósító elrendezésben hasznosnak tűnő – vezetékek figyelembe vétele.)



**22. ábra:** Kvantumgyűrűk négyzetes hálózatának vázlatja ( $3 \times 3$  gyűrű). A nyilak a lehetséges áramirányokat mutatják. A jobb oldalon csak kifutó jellegű megoldásokat engedünk meg, míg a bal (bejövő) oldalon a reflexió miatt mindkét irányba folyhat áram. A számozott gyűrűkben feltevésünk szerint különbözhet a spin-pálya kölcsönhatás erőssége.

## 3.2. Kvantumgyűrűk hálózata – a transzportprobléma megoldása

Az eddigi eredmények alapján célravezetőnek tűnik kisebb elemekből felépíteni a hálózatot. Ez annyiban mindenképpen igaz, hogy most is egyetlen gyűrűből indulunk ki, ugyanakkor a teljes hálózat bizonyos értelemben több lesz, mint az elemek összessége, még akkor is ha egyedülálló gyűrűk spintranszformációs tulajdonságairól valóban sokat lehet tudni [T1–3, 28, 72, 80–85], sőt, gyűrűk lineáris láncán is ismertek érdekes eredmények [86]. Ennek a fő oka az, hogy esetünkben a hálózat egészére kiterjedő komplex kvantummechanika interferenciamintázat határozza meg a transzport tulajdonságait. Másképpen fogalmazva, ha minden egyes gyűrű esetén biztosítani tudnánk a reflexió hiányát, akkor lenne esély a részek elemzéséből az egészre vonatkozó releváns következtetések levonására, de a továbbiakban nem ezt az utat követjük.

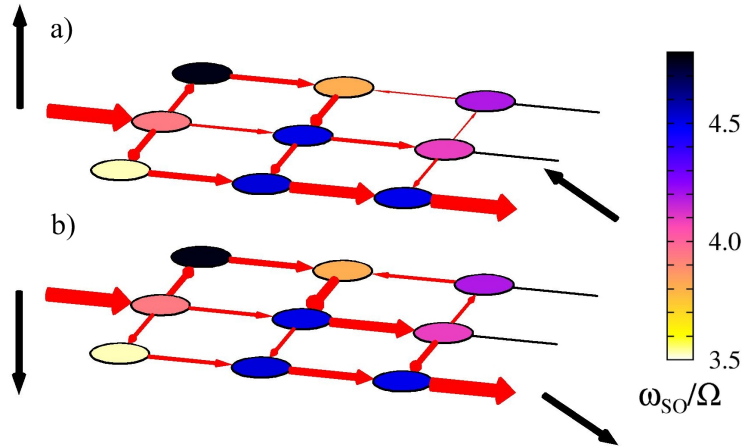
A 22. ábrán látható hálózat spintranszformációs tulajdonságainak meghatározásához lényegében ugyanúgy járunk el, ahogyan az előző fejezetekben láttuk, ezért most csak a megoldás vázolására szorítkozunk. Egyetlen, zárt gyűrű Hamilton-operátorából indulunk ki (ezt a (2.1) vagy a (2.25) egyenletek adják meg) amelynek a sajátértékproblémája analitikusan megoldható. Ezt használva, meghatározzuk, hogy egy adott energiával rendelkező

bemenethez milyen megoldások tartoznak az egyes gyűrűkben. Ezek különbözőek lesznek, mivel feltevésünk szerint a spin-pálya kölcsönhatás erőssége sem azonos minden gyűrűben. A bejövő/kimenő vezetékek csatlakozási pontjai, valamint a gyűrűk érintkezési pontjai természetes módon osztják tartományokra a hálózatot. Minden egyes tartományban ismerjük a megoldások alakját, pusztán az ezekben szereplő együtthatókat kell meghatározni. Ha minden pontban, ahol két (vagy több) tartomány érintkezik, alkalmazzuk a Griffith-féle peremfeltételeket [16], azt fogjuk tapasztalni, hogy pontosan annyi lineáris egyenletet kapunk, mint az ismeretlen együtthatók száma. Ezt az egyenletrendszert megoldva, egy adott bemenő energia és spinirány (továbbá spin-pálya csatolási erősségek) esetén megkapjuk a probléma megoldását [E3]. Érdekes megjegyezni, hogy bár az illesztésekből adódó inhomogén lineáris egyenletrendszert (a jobb oldalt lényegében a bemenő spinor értékű hullámfüggvény adja) elvben analitikusan is meg lehet oldani, a gyakorlatban az egyenletek nagy száma miatt – az előző fejezetben ismertetett eredményekkel szemben – már csak numerikus módszerek használhatók.

A következőkben probléma megoldását a lehetséges alkalmazások felől kiindulva fogjuk megközelíteni, azaz azt vizsgáljuk meg, hogy egy hálózat valamilyen kívánt viselkedését annak milyen paramétereivel lehet megvalósítani. Két ilyen cél megvalósításának lehetőségét vizsgáltuk. Az egyik az áram egy adott kimenetre történő irányítása, a másik pedig a Stern-Gerlach berendezés teljes analógiájának megvalósítása, amelyeket részletesen a következő szakaszban mutatunk be. Itt előbb azonban még annak a technikájáról ejtünk szót, ahogyan a kívánt funkciókhoz tartozó paramétereket meg tudtuk határozni. Ezeket – a hálózaton belüli interferencia összetettsége miatt – nem analitikus sejtésekből, hanem numerikus módszerek alkalmazásával kaptuk meg. Az eljárás konkrétan az volt, hogy felírtunk egy, a kívánt viselkedéshez tartozó célfüggvényt, majd a spin-pálya kölcsönhatás gyűrűként különböző erősségét (a kísérletileg megvalósítható intervallumon belül) változónak tekintve, kerestük a célfüggvény minimumát ezen a sokdimenziós téren. Ez azt is jelenti, hogy a most bemutatandó eredmények nem egzakta abban az értelemben, mint az előző fejezetbeliek, ugyanakkor numerikusan nagyon közel lehetett jutni az előre elképzelt funkciót leíró megoldáshoz.

### 3.3. Kvantumgyűrűk rendszerének lehetséges spin-transzformációs tulajdonságai

A lehetséges funkciók bemutatását a 23. ábra által mutatott viselkedéssel kezdjük, amikor a SOI gyűrűkénti modulációja oda vezet, hogy a bejövő áram lényegében egyetlen, előre kiválasztott vezetéken át hagyja el a hálózatot. Az előző alfejezet végén említetteknek megfelelően, ez a viselkedés nem tökéletes, de elérhető, hogy annak a valószínűsége, hogy a kiválasztottól különböző kimeneten távozzon az elektron, 1% alatt maradjon. (Most a reflexió valószínűsége is beleértendő ebbe az 1%-ba.) A legérdekesebb ezzel az eredménnyel kapcsolatban, hogy független a bejövő spin irányától, annak ellenére, hogy a spin-pálya kölcsönhatás erősségét hangoltuk, és a hálózaton belüli interferencia is spinfüggő. Ez leginkább abból látszik, hogy a  $z$  irány szerinti „spin-fel” és „spin-le” bemenő állapotok esetén az áram teljesen más utakat jár be, míg végül ugyanazon a kimeneten távozik. A kimene-

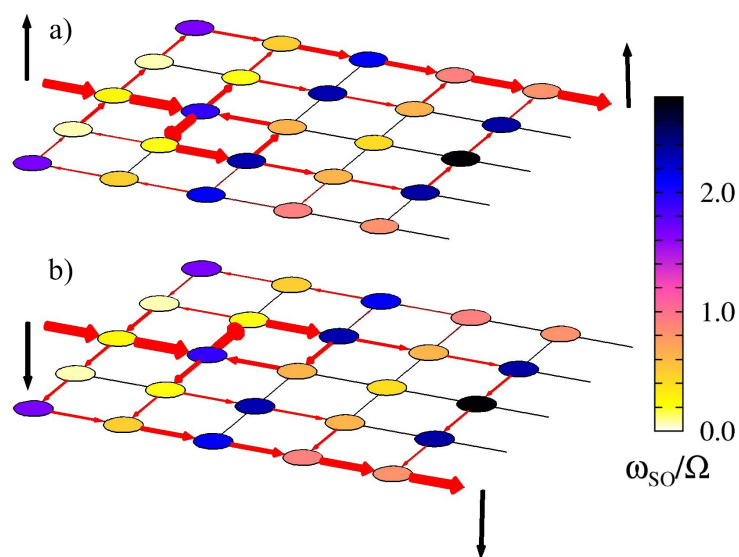


**23. ábra:** Az áram irányítása egy adott kimenő vezetékhez. A felső (alsó) panel a spin-fel (spin-le) input esetét mutatja (ezt szemléltetik a fekete nyilak). A gyűrűk között folyó áram irányát a piros nyilak, erősségét pedig azok vastagsága mutatja. Az egyes gyűrűkben a spin-pálya kölcsönhatás erősségét a színkód jelöli,  $ka = 20.67$ .

tek ilyen értelemben vett spinfüggetlensége azonban csak az áramok szintjén jelentkezik, ha a kimenő elektronok spinjének az irányát tekintjük, azt kapjuk, hogy ellentétes spinű (azaz spinor értelemben ortogonális) bemenetek esetén azok is ellentétesek. (Egy kicsit nagyobb, pl.  $5 \times 5$  gyűrűt tartalmazó hálózatok esetén még a kimenő spinek irányát is kontrollálni tudjuk.)

A 23. ábra azt a kérdést is felveti, hogy lehetséges-e azt elérni, hogy az interferencia eredményeképpen az ellentétes spinirányokkal rendelkező bemenetek térben elkülönüljenek, hozzájuk más-más kimenet tartozzon. A válasz pozitív, ez már a a 23. ábrán látható geometria esetén is elérhető (természetesen az ábrán mutatottól eltérő SOI erősségekkel), ugyanakkor ilyen kicsi hálózat esetén a kimenő spinek iránya még nehezen kontrollálható, azaz lényegében az előző fejezetben, egyetlen gyűrű esetén kapott viselkedést kapjuk vissza. Ha azonban a 24. ábrán látható  $5 \times 5$  gyűrűből álló hálózatot tekintjük, akkor az egyes kimenetekhez tartozó spinirányok a bemenetekkel azonosnak választhatók. Más szóval, ha a bemenet pl.  $\sigma_z$  egy adott sajátállapota, akkor megfelelő paraméterek alkalmazásával elérhető, hogy egy adott kimeneten ugyanez a sajátállapot távozzon (99%-nál nagyobb valószínűséggel). Ha pedig a bemenet  $\sigma_z$  másik sajátállapota, akkor az áram egy másik kimeneten keresztül folyik, még hozzá úgy, hogy az ehhez a kimenethez tartozó spinirány most is megegyezik a bemenettel. A szuperpozíció elve miatt ezekkel a paraméterekkel az  $5 \times 5$  gyűrűből álló hálózat mindig az ortogonális  $\sigma_z$  sajátállapotokat fogja előállítani a két kiemelt kimeneten. Az ezekhez a kimenetekhez tartozó valószínűségi amplitúdók természetesen megegyeznek a bemenő állapot  $\sigma_z$  sajátállapotai szerinti kifejtésében szereplő megfelelő együtthatókkal.

Másrészt, ha a bemenet polarizálatlan, azaz a „spin-fel” és „spin-le” állapotok inkoherens összege, akkor mindkét kitüntetett kimeneten teljesen spinpolarizált elektronok lépnek ki a hálózatból, és a kimenetek továbbra is  $\sigma_z$  különböző sajátspinorjai lesznek. Ahogyan az előző fejezetben láttuk, az a jelenség, hogy a különböző spinirányok térben



**24. ábra:**  $5 \times 5$  gyűrűből álló hálózat ( $ka=24.9$ ), ami a Stern-Gerlach berendezéssel analóg módon működik. A nyilak ugyanazt jelentik, mint a 23. ábrán.

szeparálódnak, már egy két kimenetű gyűrű esetében [T2] is előfordulhat; az itt ismertett eredmények érdekességét az adja, hogy most a Stern-Gerlach berendezés teljes, a spinirányokat is magába foglaló megfelelőjével állunk szemben. Másszóval nemcsak két spinpolarizált részre osztódik a bemenő polarizálatlan állapot, hanem a két kimenet ellentétes spinirányokhoz is tartozik. Ez azzal is együttjár, hogy az a spinirány, amelyikkel jellemzett elektronok elhanyagolható valószínűséggel hagyják el a rendszert az egyik kitüntetett vezetéken, megegyezik azzal a spiniránnyal, amelyikkel jellemzett elektronok közel egységnyi valószínűséggel a másik kimeneten át távoznak.

### 3.4. Kvantumgyűrűkön alapuló eszközök robusztussága

Az eddigiekben megmutattuk, hogy ballisztikus mintákból kialakított gyűrűkben a kvantuminterferencia több érdekes alkalmazás lehetőségét is felveti. A számítások során azonban egy több szempontból idealizált modellt használtunk: nem vettünk figyelembe sem hőmérsékleti effektusokat, sem pedig azt, hogy valódi mintákban szükségszerűen jelen vannak olyan szórócentrumok, amelyek a csökkentik a koherenciahosszt. (Emellett – ahogyan az előzőekben részleteztük – egyelektron képből számoltunk, és egydimenziósnak, azaz körvezetőnek tekintettük a gyűrűket.) Természetes módon adódik a kérdés, hogy mik a gyűrűk transzformációs tulajdonságai realiztikusabb körülmények között. A következőkben ezt a problémakört járjuk körül, főként arra koncentrálva, hogy a rendszer funkcionalitása, azaz egy adott célra való alkalmazhatósága hogyan változik szórócentrumok és termikus fluktuációk hatására. A borítékolható válasz természetesen az, hogy ezek az effektusok rontják az interferencián alapuló eszközök hatékonyságát, ugyanakkor messze nem mindegy, hogy milyen mértékben. Mivel a nagyobb, strukturáltabb hálózatok érzékenyebbek a koherenciát csökkentő hatásokra nézve, a továbbiakban reprezentatív példaként a fejezet első részében ismertetett négyzetes hálózatokra vonatkozó eredményeket ismertetjük.

### 3.5. Szórási folyamatok és termikus fluktuációk hatásának leírása

A kimeneteken megjelenő állapotok szempontjából több gyűrűből álló, több kimenettel rendelkező hálózatok (mint pl. a 22 ábrán látható) működése formálisan az

$$|\psi_{in}\rangle \rightarrow \begin{cases} |\psi_{out}^1\rangle = \mathcal{T}_1|\psi_{in}\rangle, \\ |\psi_{out}^2\rangle = \mathcal{T}_2|\psi_{in}\rangle, \\ \vdots \\ |\psi_{out}^N\rangle = \mathcal{T}_N|\psi_{in}\rangle, \end{cases} \quad (3.1)$$

alakba írható, azaz a bemenő állapot  $N$  kimenő spinorrá transzformálódik (a reflexiót most nem jelöltük). A  $\mathcal{T}_i$  transzmissziós mátrixok – ahogyan korábban láttuk – függenek a bejövő állapot energiájától, a spin-pálya kölcsönhatás erősségétől és természetesen a hálózat geometriájától. (A korábbiaktól eltérő kalligrafikus  $\mathcal{T}$  a  $T$  hőmérséklettől való megkülönböztetőséget szolgálja.) Ezeket a mátrixokat a szórási probléma megoldásával kapjuk, ami röviden azt jelenti, hogy a (2.25) egyenlettel adott Hamilton-operátor adott energiához tartozó sajátspinorjait a hálózat minden elágazásmentes tartományában megoldjuk, majd megfelelően illesztjük őket a csomópontokban. A megoldást módosító szórócentrumokat pontszerű potenciálokkal vesszük figyelembe. Ez azt jelenti, hogy a gyűrűket leíró Hamilton-operátort kiegészítjük az

$$U_{scatt}^{(1)}(\varphi) = \sum_n U_n(D)\delta(\varphi - \varphi_n) \quad (3.2)$$



taggal, ahol a véletlenszerű pozíciókhoz tartozó  $\varphi_n$  szögek eloszlása egyenletes. Az egyszerűség kedvéért a Dirac-delta csúcsok sűrűségét úgy választottuk meg, hogy egy gyűrűbe átlagosan négy csúcs essen, azaz a jellemzően négy kimenettel rendelkező gyűrűkből álló, a 22. ábrán látható hálózat esetén két szomszédos csomópont közé általában egy szórócentrum jut. A Dirac-delta csúcsok „magassága”,  $U_n(D)$  szintén véletlenszerű, nulla várható értékű normális eloszlást követ, amelynek a szórása minden  $n$  esetén azonos  $D$ . Másszóval, annak a valószínűsége, hogy  $U_n(D)$  értéke egy  $u$  körüli kicsiny  $du$  szélességű intervallumba essen  $p(u)du$ , ahol

$$p(u) = \exp(-u^2/2D^2)/D\sqrt{2\pi}. \quad (3.3)$$

Ezzel a módszerrel, ha  $D$  értékét változtatjuk, modellezni tudjuk mind azt az esetet, amikor a szórócentrumok alig befolyásolják a folyamatot (kicsi  $D$ ), mind pedig azt, amikor a szórási folyamatok teljesen megváltoztatják a transzport karakterét (ez történik nagy  $D$  értékek esetén).

A spin szabadsági fok központi szerepét figyelembe véve érdemes spinfüggő szórócentrumokat is bevezetni:

$$U_{scatt}^{(2)}(\varphi) = \sum_n \mathbf{U}_n(D)\delta(\varphi - \varphi_n), \quad (3.4)$$

ahol minden  $\mathbf{U}_n(D)$  egy-egy  $2 \times 2$ -es diagonális mátrix, független  $U_{n1}(D)$  és  $U_{n2}(D)$  főátlóbeli elemekkel.

Egy szórócentrum, ami két csomópont között jelenik meg, két részre osztja a csomópontok közötti tartományt. A potenciálcúcs két oldalán kapott megoldások illesztésekor ugyanazokat a peremfeltételeket használjuk, mint a csomópontok esetén [16]. Ez egyrészt azt jelenti, hogy a bal és jobb oldali  $\Psi_L(\varphi)$  illetve  $\Psi_R(\varphi)$  spinorértékű hullámfüggvényeknek meg kell egyezniük a szórócentrumhoz tartozó  $\varphi_n$  pozícióban. Ezt figyelembe véve, az áramsűrűségekre vonatkozó csomóponti egyenlet a következő teljesítendő feltételekhez vezet:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_L(\varphi) \right|_{\varphi=\varphi_n} - \left. \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_R(\varphi) \right|_{\varphi=\varphi_n} = \frac{\mathbf{U}_n(D)}{\hbar\Omega} \Psi_R(\varphi) \Big|_{\varphi=\varphi_n}. \quad (3.5)$$

Ezek az egyenletek még mindig lineárisak, így könnyen megtalálhatjuk a megoldást, bármi is a  $\{\mathbf{U}_n(D)\}$ ,  $\{\varphi_n\}$  halmazok véletlen elemei. Ez azt jelenti, hogy tetszőleges bemenő állapothoz kiszámíthatjuk a  $|\Psi_{out}^i\{\mathbf{U}_n(D), \varphi_n\}\rangle$  kimenő spinorokat (az  $i$  index itt a különböző kimeneteket jelöli). A számításokat addig végezzük, amíg nem konvergál a megoldás, amit a

$$\rho_{out}^i(D) = \frac{1}{M} \sum |\Psi_{out}^i\{\mathbf{U}_n(D), \varphi_n\}\rangle \langle \Psi_{out}^i\{\mathbf{U}_n(D), \varphi_n\}| \quad (3.6)$$

közelítő sűrűségoperátorokon keresztül fogalmazhatunk meg legkönnyebben. A fenti szumma a  $\{\mathbf{U}_n(D)\}$ ,  $\{\varphi_n\}$  halmazok  $M$  darab különböző realizációján fut végig. Numerikus értelemben a konvergencia azt jelenti, hogy elértünk egy olyan  $M_c$  számot, hogy  $M > M_c$  esetén a fenti  $\rho_{out}^i(D)$  már nem változik lényegesen.

Eddig monoenergetikus bejövő elektronokat feltételeztünk, de ez jellemzően csak nagyon alacsony hőmérsékleten jelent jó közelítést. Ha a bejövő elektronok energia szerinti eloszlását is számításba szeretnénk venni, akkor átlagolnunk kell a lehetséges input energiákra. Termikus egyensúlyban,  $T$  hőmérsékleten az  $i$ -edik kimenő vezetékhez tartozó

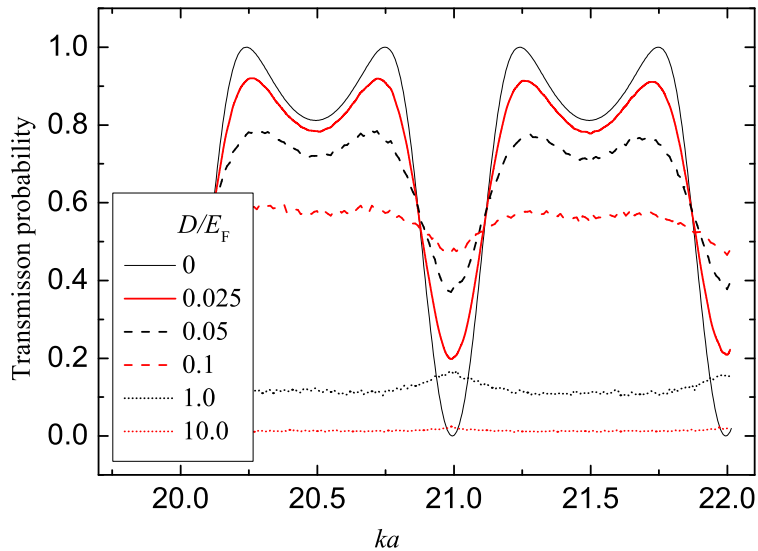
sűrűségoperátor

$$\rho_{out}^i(T) = \int p(E, T) |\Psi_{out}^i(E)\rangle \langle \Psi_{out}^i(E)| dE, \quad (3.7)$$

alakú, ahol  $p(E, T) = -\frac{\partial}{\partial E} [1 + \exp(E - E_F)/k_B T]^{-1}$ . (Ez a kifejezés összhangban van a véges hőmérsékleten érvényes Landauer-Büttiker formalizmussal [11].) A numerikus számítások során a (3.7) egyenletben szereplő integrál összegzést jelent, azaz  $\rho_{out}^i(T)$  kifejezése nagyon hasonló a (3.6) egyenlethez, csak most a projektorokhoz tartozó súlyokat a Fermi eloszlás határozza meg.

### 3.6. A spintranszformációk robusztusságának a vizsgálata

Ahogy ezen fejezet korábbi részében láttuk, négyzetrácsba rendezett gyűrűk viszonylag kis ( $3 \times 3$ ,  $5 \times 5$ ) hálózatai – idealizált körülmények között – nagyon érdekes spintranszformációs tulajdonságokkal rendelkeznek. A spin-pálya kölcsönhatás megfelelő gyűrűnkénti modulációjával a bemenő áram spintől függetlenül egy adott kimenetre irányítható, de a Stern-Gerlach berendezéshez hasonló viselkedés is elérhető [T3]. Másszóval, a gyűrűk rendszere funkcióval rendelkező spintronikai eszköznek tekinthető. Most ennek a két eszköznek a stabilitását fogjuk vizsgálni, azaz azt, hogy funkcionalitásuk milyen mértékben veszik el az előző alfejezetben leírt effektusok következtében.

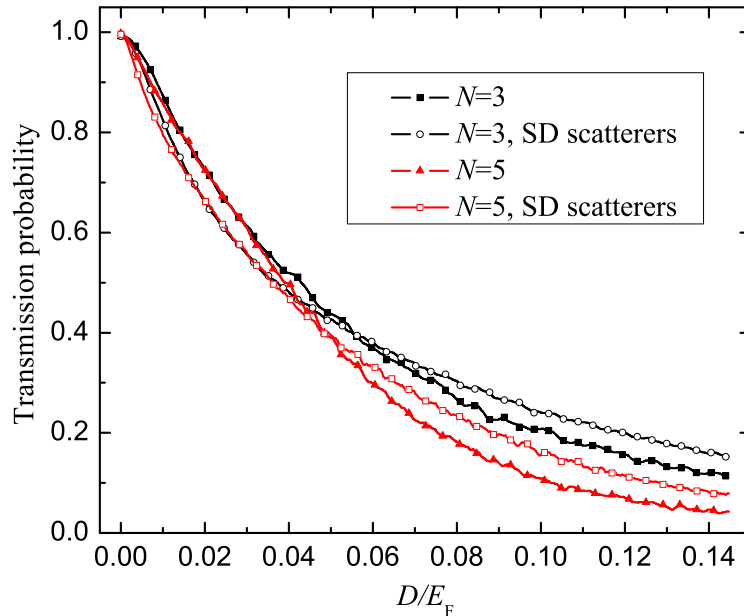


**25. ábra:** Egyetlen (tükörszimmetrikus) kvantumgyűrű transzmissziós valószínűsége különböző erősségű szórás folyamatok jelenlétében. A spin-pálya kölcsönhatás erősségét  $\omega/\Omega = 1.0$  határozza meg. (Lásd a (2.25) egyenletet).

## Szórócentrumok hatása

Fizikai szempontból a szórócentrumok szerepe kettős, egyrészt csökkentik a transzmissziós valószínűséget, másrészt pedig a kvantummechanikai fázisviszonyokat is fokozatosan eltüntetik, azaz a koherenciahosszat is csökkentik. Pontosabban ez utóbbi tulajdonság statikus szórócentrumokra nem igaz (azok könnyen látható módon pusztán eltolják egymáshoz képest a fázisokat), ha azonban időben fluktuál a szórócentrumok helye, vagy a szórási folyamatok erőssége, akkor már jelentkezik ez az effektus is. (Természetesen abban az esetben is, ha a (3.6) egyenletnek megfelelően átlagolunk.)

A véletlenszerűen fluktuáló szórási folyamatok két szerepe persze nem független egymástól, a rövidebb koherenciahossz előidézése megnövekedett reflexiós valószínűséggel jár együtt. Az általunk vizsgálandó hálózatokban van még egy, kevésbé közvetlen kapcsolat is: mivel a hálózatok funkciója a többszörös kvantuminterferencián, nem csak jól meghatározott, de konkrétan adott fázisviszonyokon múlik, már statikus szórócentrumok is képesek észrevehetően csökkenteni a funkcionalitást.

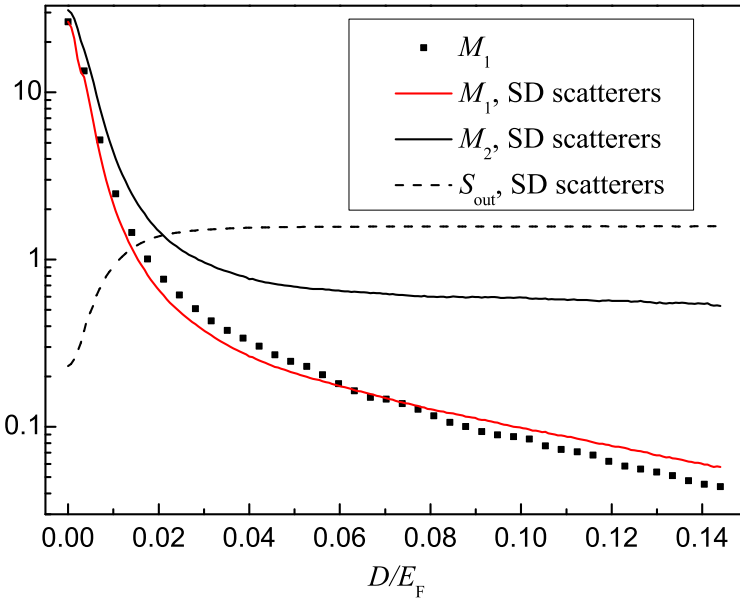


**26. ábra:**  $N \times N$  gyűrűből álló hálózatok transzmissziós valószínűsége a szórási folyamatok erősségének a függvényében. A gyűrűk mérete és a SOI erőssége a főszevegben leírt ideális működésnek felel meg.

A 25. ábra referenciaként szolgál, itt egyetlen gyűrű transzmissziós valószínűségét látjuk a gyűrűsugárral ( $a$ ) szorzott bejövő hullámszám függvényében a szórás erősséget meghatározó  $D$  különböző értékeire. Itt jól látszik a szórócentrumok kettős szerepe, maga a transzmissziós valószínűség is csökken  $D$  növelésével, ugyanakkor az interferenciának köszönhető oszcillációk is eltűnnek, ahogyan a véletlen szórások szerepe növekszik. (Ez az ábra egymással szemben lévő be- és kimenő vezetékek esetére készült, nem túl erős spin-pálya kölcsönhatás esetére:  $\omega/\Omega = 1.0$ , lásd a (2.25) egyenletet.)

A nagyságrendek (mekkora  $D$  érték milyen transzmissziócsökkenést idéz elő egyetlen

gyűrűben) ismeretében térjünk most rá az összetettebb hálózatok vizsgálatára. A 26. ábra mutatja egy  $3 \times 3$ -as és egy  $5 \times 5$ -ös hálózat transzmissziós valószínűségének a változását  $D$  függvényében. A paramétereket úgy választottuk, hogy szórócentrumok nélkül a kisebb hálózat a bemenő áramot egyik kimenetére irányítja, míg az  $5 \times 5$ -ös hálózat a Stern-Gerlach berendezésnek megfelelő módon működik. Nem túl nagy  $D$  értékekre (ami a leginkább érdekes a funkcionalitás megőrzése szempontjából) láthatjuk, hogy a spinfüggő és spinfüggetlen szórócentrumok közül az előbbiek csökkentik gyorsabban a transzmissziós valószínűséget. A méretet figyelembe véve, a nagyobbik hálózat kissé érzékenyebbnek látszik a szórócentrumok hatására, de ez az effektus nem túlságosan erős, sőt még az egyetlen gyűrű esetével (25. ábra) összevetve sem látunk nagyságrendi különbségeket. Ez biztató abból a szempontból, hogy esetlegesen a hálózatok funkcionalitása sem tűnik el a szórócentrumok megjelenésével azonnal.



**27. ábra:** A (3.8) egyenletekkel megadott mértékek  $3 \times 3$  gyűrűből álló hálózat esetére a szórási folyamatok erősségének a függvényében. A gyűrűk mérete és a SOI erőssége a főszoegben leírt ideális működésnek felel meg.

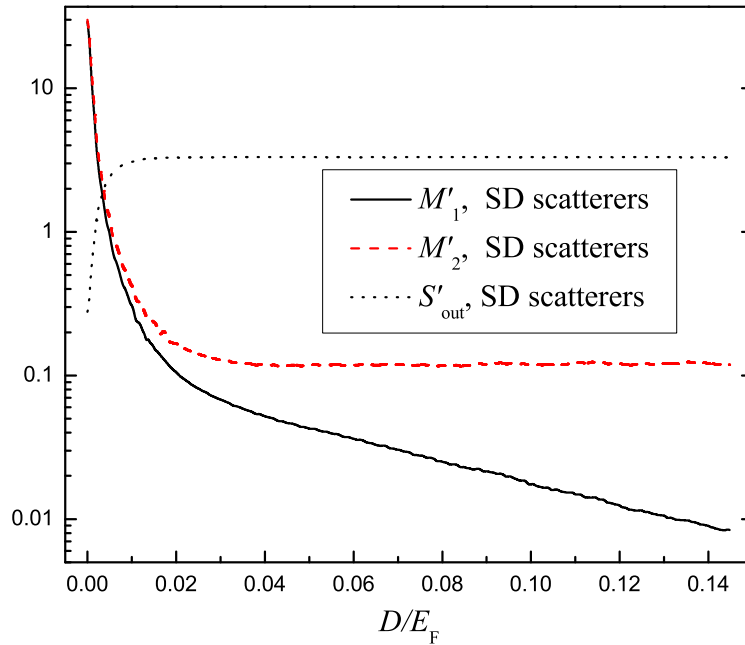
Tekintsünk először egy olyan  $3 \times 3$ -as hálózatot, amely az 1 indexű kimenetére irányítja az áramot. Az ettől az ideális viselkedéstől való eltérést több módon is számszerűsíthetjük:

$$\begin{aligned}
 M_1 &= \frac{P_1}{\mathcal{R} + P_2 + P_3} = \frac{P_1}{1 - P_1}, \\
 M_2 &= \frac{P_1}{P_2 + P_3} = \frac{P_1}{\mathcal{T} - P_1}, \\
 S_{out} &= - \sum_k \frac{P_k}{\mathcal{T}} \log_2 \frac{P_k}{\mathcal{T}}.
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Itt  $\mathcal{R}$  és  $\mathcal{T}$  a reflexiós és transzmissziós valószínűségeket jelenti,  $P_k$  pedig annak a valószínűsége, hogy az elektron a  $k$ -adik kimeneten át távozik. Természetesen  $\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$ ,

továbbá  $\mathcal{T} = P_1 + P_2 + P_3$ , a cél pedig  $P_1 = 1$  minél jobb megközelítése. Az  $M_1$  és  $M_2$  mértékek lényegében jel/zaj viszonyt fejeznek ki, és  $M_1$  a „szigorúbb” abban az értelemben, hogy  $M_2$  a reflexiós veszteséget nem veszi figyelembe, pusztán a megcélzott kimenet valószínűségét hasonlítja össze a nemkívántakéval. (A rend kedvéért: a „mérték” szó itt lényegében „a célzott funkció megközelítését mérő függvény” értelemben szerepel, semmi köze az 5. fejezetben is vizsgált elektromágneses mértékekhez.)  $S_{out}$  a kimenet Shannon entrópiája, ami az ideális esetben nulla, és maximális, ha minden  $P_k$  valószínűség azonos.

Ezeknek a mértékeknek a szórási jelenségek erősségét meghatározó  $D$ -től való függését mutatja a 27. ábra. Ahogyan látható, bár  $D$  növelésével mindhárom értelemben gyorsan távolodunk a kívánt funkciótól, még 80% alá eső transzmissziós valószínűségek esetén is használható jel/zaj viszonyokat láthatunk. Érdekes módon spinfüggő és spinfüggetlen szórási mechanizmusok esetén nagyon hasonló eredményeket kapunk, ezért a továbbiakban az első eset vizsgálatára szorítkozunk.



**28. ábra:** A (3.9) egyenletekkel megadott mértékek  $5 \times 5$  gyűrűből álló hálózat esetére a szórási folyamatok erősségének a függvényében. A gyűrűk mérete és a SOI erőssége a főszevegben leírt ideális működésnek felel meg.

Ezek után térjünk át egy  $5 \times 5$  gyűrűből álló hálózatra, amely ideális esetben a Stern-Gerlach berendezésnek megfelelő funkciót lát el. Ebben az esetben a célzott funkciótól

való eltérést mérő függvények szükségképpen spinfüggők:

$$\begin{aligned} M'_1 &= \frac{P_{\uparrow\uparrow 1}}{1 - P_{\uparrow\uparrow 1}}, \\ M'_2 &= \frac{P_{\uparrow\uparrow 1}}{\mathcal{T} - P_{\uparrow\uparrow 1}}, \\ S'_{out} &= - \sum_k \frac{P_{\uparrow\uparrow k}}{\mathcal{T}} \log_2 \frac{P_{\uparrow\uparrow k}}{\mathcal{T}} + \frac{P_{\uparrow\downarrow k}}{\mathcal{T}} \log_2 \frac{P_{\uparrow\downarrow k}}{\mathcal{T}}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

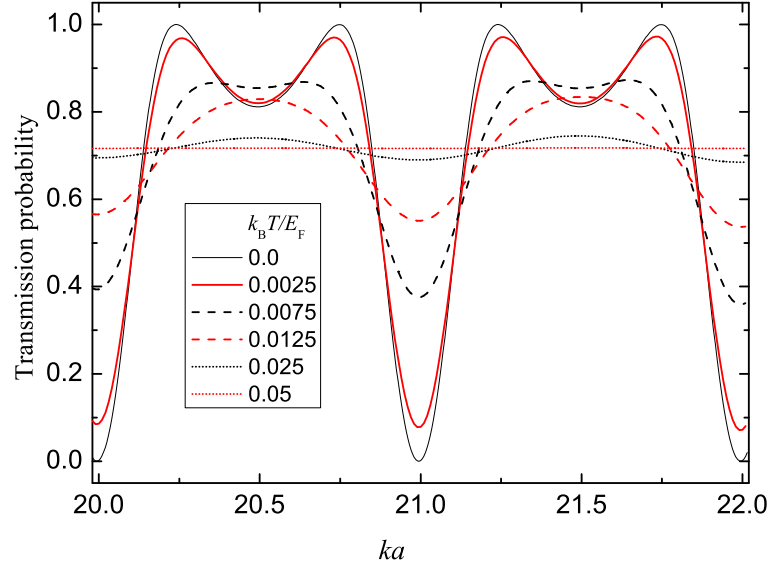
ahol spin-fel inputot feltételezünk, és  $P_{\uparrow\uparrow 1} = P_1$  (be :  $\uparrow$ , ki :  $\uparrow$ ) az a valószínűség, ami ideális esetben egységnyi. A  $P_{\uparrow\downarrow k} = P_k$  (be :  $\uparrow$ , ki :  $\downarrow$ ) valószínűség a spin szerint felbontott Shannon entrópia kifejezésében spin-le kimenetet jelöl a  $k$ -adik vezetéken. Ellentétes spin orientációjú bemenettel hasonló mértékek definiálhatók, de a tapasztalat azt mutatja, hogy azok nem szolgáltatnak új információt.

A 28. ábrán láthatjuk a (3.9) egyenletekkel adott mértékek  $D$ -től való függését. Érdeemes megjegyezni, hogy erős szórások esetén  $S'_{out}$  lényegében a Shannon entrópia maximumához tart, azaz ilyenkor (az egyébként is gyenge) kimenő áram egyenletesen oszlik el a kimenetekeken. (Hasonló igaz a 27. ábrán látható  $S_{out}$  függvényre.) A 28. és a 27. ábrát összehasonlítva látszik, hogy  $D$  ugyanakkora értékéhez észrevehetően erősebb effektus tartozik a nagyobb hálózat esetében, ugyanakkor még az  $5 \times 5$ -ös hálózat esetén is található olyan tartomány, ahol funkcionalitás nem veszik el teljesen a szórási folyamatok következtében.

## Véges hőmérséklet

A hőmérséklet szerepe a vizsgált modellben lényegében az, hogy kiszélesíti a bejövő elektronok energia szerinti eloszlását. (Ahogyan a lent, (3.10) számon az egyszerűség kedvéért lényegében megismételt (1.17) egyenlet is mutatja, kis feszültségek és lineáris válasz esetén itt lényegében a Fermi függvény energia szerinti deriváltja a meghatározó.) Ebből az is látszik, hogy van egy természetes határa a hőmérsékletnek, amely fölött nem várhatunk interferencián alapuló viselkedést. Arról van szó, hogy ha az elektronok karakterisztikus hullámszáma  $k$ , és az eszköz meghatározó lineáris mérete  $a$ , akkor az interferencián alapuló mérhető mennyiségek  $ka$  közel periodikus függvényei lesznek. (Egyetlen gyűrű esetén, ha spin-pálya kölcsönhatás nem túl erős, ez a  $k$  a bejövő elektronokhoz rendelhető hullámszám,  $a$  pedig a gyűrű sugara. A létrejövő kváziperiodikus vezetőképesség a 25. ábrán látható.) Természetesen ha a bejövő hullámszámok egy  $\Delta k$  tartományba esnek, akkor egy interferencián alapuló eszközben  $a\Delta k$  nem lehet tetszőlegesen nagy (nem eshet az egység nagyságrendjébe), mert különben az interferencia elmosódásával az eszköz sem fogja tudni ellátni a funkcióját. Ez természetesen a mérettel szorosan összefügg, hiszen egy adott hőmérsékleten az egyensúlyi energiaeloszlás és így a diszperziós reláción keresztül  $\Delta k$  is fix, ugyanakkor  $a\Delta k$  kisebb eszközök esetén kisebb. A miniatürizáció tehát ebből a szempontból is hasznos lehet.

Az összetettebb rendszerek vizsgálata előtt most is érdemes egyetlen gyűrű esetén tanulmányozni az emelkedő hőmérséklet hatását. A fentiekkel teljesen összhangban a 29. ábra azt mutatja, hogy a transzmissziós valószínűség ebben az esetben is észrevehetően



**29. ábra:** Egyetlen (tükrörszimmetrikus) kvantumgyűrű transzmissziós valószínűsége különböző hőmérsékleteken. A spin-pálya kölcsönhatás erősségét  $\omega/\Omega = 1.0$  határozza meg. (Lásd a (2.25) egyenletet.)

megváltozik már akkor is, amikor  $k_B T$  még csak kis százaléka a Fermi energiának. (Érdeemes megjegyezni, hogy ha  $E_F$  nagyságrendileg 10 meV, a 29. ábrán a vízszintes vonalhoz tartozó, legmagasabb hőmérséklet még mindig a kriogenikus tartományba esik.)

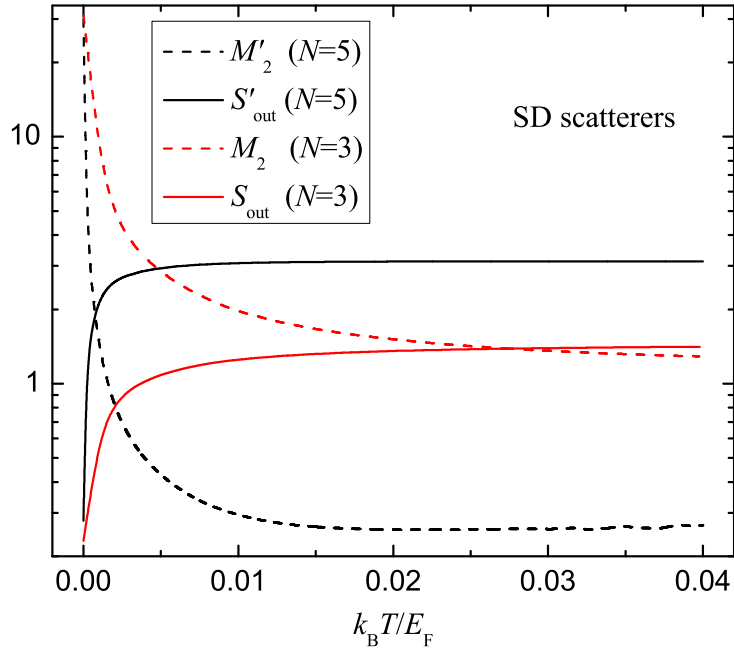
Ha összehasonlítjuk azt a két esetet, amikor a bemenet nem monoenergetikus mivolta illetve a szórócentrumok hatása az, ami teljesen megváltoztatja a transzmissziós tulajdonságokat (a 29. és a 25. ábra), egy fontos különbséget vehetünk észre: az intenzív szórási folyamatok gyakorlatilag nullává változtatják a vezetőképességet, azonban a magas hőmérséklet véges vezetőképességet eredményez. Az első eredmény intuitívan érthető, a második azonban utánagondolást igényel. A vezetőképesség kiszámításakor (az (1.17) egyenlet két vezetékre érvényes átiratát használva) lényegében a bemenő energiákra átlagolunk:

$$G = \frac{2e^2}{h} \int \mathcal{T}(E) \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE, \quad (3.10)$$

ahol  $\mathcal{T}(E)$  a transzmissziós valószínűség és  $f(E) = 1/(\exp(\frac{E-E_F}{kT}) + 1)$ . A hőmérséklet növelésével  $\partial f/\partial E$  egyre szélesedik, és ahogyan ennek az alfejezetnek az elején is említettük, a transzmissziós valószínűség kváziperiodikus függvénye  $ka$ -nak. Emiatt  $\mathcal{T}(E)$  is oszcillál, és elegendően magas hőmérsékleten a sok oszcilláció átlaga már lényegében energia és hőmérsékletfüggetlen vezetőképességet ad. Periodikus hálózatok magashőmérsékletű vezetőképességének a spin-pálya kölcsönhatás erősségétől való függésének részleteit a [E9] munkában vizsgáltuk.

Visszatérve a több gyűrűből álló hálózatok stabilitására, a 30. ábra azt mutatja, a kvantumgyűrűk  $3 \times 3$ -as hálózata  $M_2 = 2$  jel/zaj viszonytal képes egy adott kimenetére irányítani az elektronokat még olyan hőmérsékleten is, ahol egyetlen gyűrű transzmissziós valószínűsége az eredeti érték 80 százalékára esik vissza (ahogyan a 29. ábrával való

összevetésből leolvasható). A Stern-Gerlach berendezés analogonját megvalósító  $5 \times 5$  gyűrűből álló hálózat érzékenyebb a termikus fluktuációkra, ami részben a nagyobb méretnek, részben pedig a más jellegű funkciónak köszönhető.



**30. ábra:** A (3.8) és (3.9) egyenletekkel adott mértékek  $3 \times 3$  illetve  $5 \times 5$  gyűrűből álló hálózatok esetén a hőmérséklet függvényében. A gyűrűk mérete és a SOI erőssége mindkét rendszer esetén a főszevben leírt ideális működésnek felel meg.

Ezek az eredmények azt mutatják, hogy a kvantum interferencián alakuló eszközök annál jobban működnek, minél inkább monoenergetikus a bemenet. Ez kisebb eszközök építésével, vagy a bemenet energiájának a szűrésével oldható meg.

### 3.7. Összefoglalás

Gyűrűkből álló hálózatok, amennyiben bennük az elektronok mozgása koherens, és a Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás erőssége gyűrűnként kontrollálható, nagyon flexibilis spin transzformációs tulajdonságokkal rendelkeznek. Viszonylag kis ( $3 \times 3$  és  $5 \times 5$  gyűrűt tartalmazó) hálózatok esetén megmutattuk, hogy lehetséges az elektronokat spintől függetlenül egy előre kiválasztott kimenetre irányítani, illetve a Stern-Gerlach berendezésével tökéletesen analóg viselkedés is megvalósítható. Fontos hangsúlyozni, hogy ebben az esetben a hálózat egésze részt vesz annak a globális, spinfüggő interferenciamintázatnak a kialakulásában, ami végül a kívánt működést hozza létre.

Felmerül a kérdés, hogy ezek a kvantum interferencián alapuló eszközök milyen mértékben robusztusak, azaz egy meghatározott spintranszformációs funkcióval rendelkező hálózat hogyan veszíti el ezt a funkcióját pl. szórócentrumok és termikus fluktuációk



jelenlétében. Ezeknek a funkcióknak az elvesztését megfelelő függvények, mértékek bevezetésével számszerűsítettük. Eredményeink azt mutatják, hogy a vizsgált hálózatok bizonyos fokú stabilitást mutatnak a külső zavaró tényezőkkel szemben. Egyetlen gyűrű transzmissziós valószínűségéhez viszonyítva azt mondhatjuk, hogy olyan erősségű szórás jelenségek, illetve olyan hőmérsékletek esetén, amikor egy gyűrű transzmissziója észrevehetően lecsökken, a hálózatok funkcionalitása legalább részben megmarad.

### 3.8. Kvantumos hálózatokkal kapcsolatos további eredmények

Kvantumosan viselkedő elektronok különböző geometriájú hálózatokban való mozgását az előző két fejezetben leírt eredményeken kívül még számos további szempontból is megvizsgáltuk [E2–E5, E7–E9, E14]. Többek között megmutattuk, hogy kvantumgyűrűk segítségével a kvantumos bolyongás is realizálható [E5], illetve hogy négyzetes hálózatok magashőmérsékletű vezetőképessége a spin-pálya kölcsönhatás erősségének a változtatásával kontrollálható [E9]. Ehhez a területhez kapcsolódóan témavezetésemmel két summa cum laude minősítéssel megvédett PhD dolgozat született (Kálmán Orsolya 2009., a társ-témavezető Benedict Mihály, és Szaszko-Bogár Viktor, 2015.) Jelenleg doktoranduszként Magashegyi István és Mike Péter dolgozik ehhez nagyon hasonló, de időfüggő kérdéseken, amikor az áramokat létrehozó külső gerjesztést lézerpulzus hozza létre [E18, E19]. Ez még viszonylag új területnek tekinthető, ugyanakkor a statikus terekkel befolyásolt, spinfüggő vezetési jelenségek vizsgálata nemzetközi szinten még mindig intenzíven kutatott témának számít [87].



## 4. fejezet

# Lokalizált spinek kölcsönhatása időfüggő mágneses térrel: molekuláris mágnesek

Vezetési elektronok spinjének a lehetséges transzformációi után ebben a fejezetben helyhez kötött, lokalizált elektronok időfüggő mágneses térrel való kölcsönhatását vizsgáljuk. A bevezetőben bemutatott effektív modell alapján a molekuláris mágnesek dinamikáját egyetlen spin időfejlődésével közelíthetjük. Ha ez a spin nagy, akkor a mágneses indukció nulláról néhány tesla nagyságig való növelése közben több olyan energianívó-párt is találunk, amelyek bizonyos térerősség értékeknél közel kerülnek egymáshoz. Ezeknek a bevezetőben is említett rezonanciáknak a pontosabb leírás szerint elkerült nívókereszteződések (avoided crossing) sorozata felel meg, ami a minta mágnesezettségének a dinamikáját is számottevően befolyásolja.

A következőkben először egyetlen ilyen elkerült nívókereszteződés esetén tekintjük az időfejlődést. A kérdéskör vizsgálata egészen 1932-ig nyúlik vissza, amikor Landau, Zener és Stückelberg [42–44] megoldották azt a problémát, amikor egy  $2 \times 2$ -es Hamilton-operátor (mátrix) diagonális mátrixelemei lineárisan nőnek illetve csökkennek az idő múlásával, úgy, hogy (megfelelő választással) a  $t=0$  időpillanatban egyeznek meg. A konstans offdiagonális mátrixelemek jelenléte miatt a Hamilton-operátor pillanatnyi sajátértékei ekkor sem azonosak, de közel kerülhetnek egymáshoz. (Hasonlóan a 8. ábrán látható esethez, csak most a vízszintes tengelyen az idő szerepel.) Maga a dinamika ebben az esetben is összetett, de vannak fontos, a Hamilton-operátor paramétereiből analitikusan kiszámítható eredmények. Mivel erre a Landau-Zener-Stückelberg (LZS) modellre gyakran fogunk hivatkozni a továbbiakban, érdemes a konkrétan is megfogalmazni az eredményeit. A Pauli mátrixok segítségével írjuk fel a

$$H_{LZS}(t) = vt\sigma_z + \frac{\delta}{2}\sigma_x \quad (4.1)$$

Hamilton-operátort, ahol a lineáris változáshoz tartozó „sebességet” leíró  $v$  paraméter, illetve az egymáshoz közel kerülő nívók minimális távolságát meghatározó  $\delta$  valós. Az eredeti Zener-féle megfogalmazásban pl. egy kétatomos, rezgő molekula két – mai szóhasználatnál élve – Born-Oppenheimer energiafelületéről van szó. Hasonló jelenség több

dimenzióban is tapasztalható, bár kettőnél több atomból álló molekulák esetén az elkerültek mellett kónikus nívókereszteződések (conical intersections [88]) is megjelenhetnek. Külső tér hatására már kétatomos molekulák esetén is megjelenik mindkét típusú nívókereszteződés [89].

Ebben a problémakörben két bázisról szokás beszélni, az egyik  $\sigma_z$  statikus sajátbázisa, a másik pedig a  $H_{LZS}$  pillanatnyi sajátértékeihez tartozó, azaz időfüggő bázis, az adiabatikus állapotok bázisa. A fenti Hamilton-operátorban az elkerült nívókereszteződés a  $t = 0$  időpillanatban következik be. Ha a rendszer sokkal ezelőtt ( $t \rightarrow -\infty$ ) az egyik adiabatikus állapotban volt, annak a valószínűsége, hogy a  $t \rightarrow \infty$  limeszben ugyanebben az adiabatikus sajátállapotban lesz,  $P_{LZS} = 1 - \exp(-\pi\delta^2/2\hbar v)$ .

Az LZS modellt a molekulavibrációk [90, 91] leírása mellett nagyon sok területen használják, többek között Rydberg atomok külső térbeli dinamikájának [92–95] vagy szupravezető qubitek [96, 97] viselkedésének a vizsgálatára. Természetesen molekulamágnesek [40, 98–100] mágneszettségi görbéinek az interpretálására is gyakran alkalmazzák ezt a módszert.

Az LZS modell segítségével tehát mind az adiabatikus határeset (amikor a rendszer követi a Hamilton-operátor pillanatnyi sajátállapotait), mind pedig a nagyon gyors átmenetek létrejötte leírható. E két határeset között általában az történik, hogy a rendszer állapota az elkerült nívókereszteződés után az adiabatikus állapotok valamilyen nemtriviális szuperpozíciója lesz. Ebből a szempontból érdekes a modellnek a periodikus általánosítása, amikor a paraméterek félciklusonként visszatérnek az elkerült nívókereszteződéshez tartozókhöz: ebben az esetben alapvető („welcher Weg”, „which way”) interferenciajelenségek lépnek fel [101]. Maga az interferencia természetesen nagyon érzékeny a különféle dekoherencia folyamatokra [102]. Ennek a fejezetnek az első részében a [T5] munka alapján a dekoherencia hatását fogjuk vizsgálni a „Landau-Zener-Stückelberg interferencia” [103] esetében.

A fejezet második részében szorosabban a molekulamágnesekre koncentrálna magának az LZS modellnek az alkalmazhatóságát járjuk körül [T6]. A meghatározottság kedvéért a  $\hbar$  egységekben  $S = 10$  értékű spinnel leírható  $\text{Mn}_{12}\text{-Ac}$  molekula paramétereit fogjuk használni, és a dinamikát az effektív Hamilton-operátor mind a 21 nívóját figyelembe véve fogjuk kiszámítani lineárisan változó külső mágneses térben. Meghatározzuk a mágneszettségi görbét, majd rámutatunk, hogy az LZS modell ebben az esetben csak a nagyságrendek becslésére alkalmas, mivel az egyes elkerült nívókereszteződések esetén az adiabatikus állapotok függése a külső tértől összetettebb az LZS modell feltételezéseinél. Ezt a következtetést a problémához jól illeszkedő numerikus módszer kidolgozásával tudtuk levonni.

## 4.1. Kétnívós rendszer és periodikus gerjesztés

A Landau-Zener-Stückelberg modell fentiekben említett „periodikus általánosítása” a következő Hamilton-operátorral adható meg:

$$H_s(t) = a \cos(\Omega t) \sigma_z + \frac{\delta}{2} \sigma_x = \begin{pmatrix} a \cos(\Omega t) & \delta/2 \\ \delta/2 & -a \cos(\Omega t) \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

ahol  $\Omega$  az  $a$  amplitúdójú külső mező körfrekvenciája, és a második egyenlőség a  $\sigma_z$  Pauli mátrix  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  sajátállapotaiban érvényes. Bár ez a modell több fizikai rendszer esetén is releváns lehet, a konkrét példa kedvéért gondoljunk egy feles spinű rendszerre, amely Zeeman kölcsönhatásban van egy oszcilláló mágneses térrel.

A spin emellett még kölcsönhatásban áll egy bozonokkal leírható környezettel (kristályrácsához csatolt spinek esetén ezek a fononok):

$$H_r = \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k, \quad (4.3)$$

ahol  $a_k$  illetve  $a_k^\dagger$  jelöli a  $k$ -adik módus eltüntető illetve keltő operátorát, és természetesen  $[a_{k'}, a_k^\dagger] = \delta_{kk'}$  ( $\hbar = 1$  egységeket használva). A rendszer és a környezet közötti kölcsönhatást

$$V = \mathcal{S} \otimes \sum_k g_k (a_k^\dagger + a_k) \quad (4.4)$$

írja le, ahol  $\mathcal{S}$  egy (ezen a ponton még tetszőleges) spin operátor, a  $g_k$  csatolási állandókat pedig valósnak tekintjük. (A spin-fonon csatolás [104] mellett hasonló tag írja le egy kétállapotú atom elektromágneses mezővel való kölcsönhatását is [105].)

Mielőtt rátérnénk a környezet hatásainak a leírására, érdemes alaposabban megvizsgálni azt az esetet, amikor az időfejlődés generátora pusztán a periodikus  $H_s$  operátor. Ilyenkor a Floquet-elmélet [106] alapján tudható, hogy az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásai

$$\begin{aligned} |\phi_r(t)\rangle &= |u_r(t)\rangle e^{-i\epsilon_r t}, & |u_r(t+T)\rangle &= |u_r(t)\rangle, \\ \langle u_1(t)|u_2(t)\rangle &= 0, & \langle u_r(t)|u_r(t)\rangle &= 1 \end{aligned} \quad (4.5)$$

alakba írhatók, ahol az  $|u_r(t)\rangle$  Floquet állapotok periodikusak, az  $\epsilon_r$  Floquet kvázienergiák pedig valósak. A fenti egyenletben az  $r$  index lehetséges értékei – a kétnívós modellnek megfelelően – 1 és 2. A (4.5) egyenletek második sora miatt  $|\phi_1(t)\rangle$  és  $|\phi_2(t)\rangle$  időfüggő ortogonális bázist alkotnak. Jobban megnézve az is látszik, hogy ha  $\epsilon_r$  Floquet kvázienergia, a hozzá tartozó állapot pedig  $|\phi_r(t)\rangle$ , akkor ugyanez igaz az  $\epsilon_r + n\Omega$ ,  $|\phi_r(t)\rangle \times \exp(in\Omega t)$  párosra is, bármilyen egész  $n$  esetén. Dinamikai szempontból ezek az állapotok ekvivalensek, ezért elegendő a két legkisebb abszolút értékű kvázienergiát tekintenünk (amelyek általában nem  $\Omega$  egész számú többszörösével különböznek egymástól.) A jelölések egyértelműsége miatt legyen  $\epsilon_1 \leq \epsilon_2$ . (Érdemes megjegyezni, hogy a (4.2) Hamilton-operátort tartalmazó időfüggő Schrödinger-egyenlet átírható Mathieu-típusú inhomogén differenciálegyenletté, amelynek az elmélete több módszert is ismer  $\epsilon_1$  és  $\epsilon_2$  meghatározására, lásd pl. [107].)

A Floquet kvázienergiák és a hozzájuk tartozó, a (4.5) egyenlettel adott állapotok ismeretében megalkothatjuk az  $U(t) = \sum_r |\phi_r(t)\rangle \langle \phi_r(0)|$  evolúciós operátort is. Ennek segítségével – visszatérve a teljes, környezettel is kölcsönható rendszer leírására – a  $V$  operátort egy olyan kölcsönhatási képbe tudjuk transzformálni, ahol a nem csatolt rendszert  $H_r$  és  $H_s$  összege írja le. Ebben a képben a kölcsönhatásban szereplő spinoperátor időfüggésére az adódik, hogy

$$\mathcal{S}_I(t) = \sum_{\omega>0} S(\omega) e^{-i\omega t} + h.c. \quad (4.6)$$

Az itt szereplő Fourier komponensek alakja

$$S(\omega) = \sum_{r,r',n} |u_r(0)\rangle \langle u_{r'}(0)| \langle \langle r'|S|r\rangle \rangle_n, \quad (4.7)$$

ahol bevezettük a

$$\langle \langle r'|S|r\rangle \rangle_n = \frac{1}{T} \int_0^T e^{in\Omega t} \langle u_{r'}(t)|\mathcal{S}|u_r(t)\rangle dt \quad (4.8)$$

jelölést ( $T = 2\pi/\Omega$ ). A (4.7) egyenletben  $n$  egész, és az összegzésben azok a frekvenciák szerepelnek, amelyekre  $\epsilon_{r'} - \epsilon_r - \Omega n = \omega$  [108]. (Ez adja (4.7) bal oldalának az  $\omega$ -függését.) Másszóval, három típusú pozitív frekvencia jelenik meg:

$$\omega_n^0 = n\Omega, \quad \omega_n^\pm = \pm|\epsilon_1 - \epsilon_2| + n\Omega. \quad (4.9)$$

A fenti kölcsönhatási kép lehetőséget nyújt arra, hogy jól ismert módszerek felhasználásával megadjuk a Born-Markov közelítésben érvényes, a feles spinű rendszer időfejlődését meghatározó master-egyenletet. A dinamikai mennyiség itt a feles spin redukált sűrűségoperátora:

$$\rho_s(t) = \text{Tr}_r[\rho(t)], \quad (4.10)$$

ahol  $\text{Tr}_r$  a környezet szabadsági fokaira vonatkozó trace műveletet (nyom- vagy spurképzést) jelent,  $\rho(t)$  a teljes rendszer sűrűségoperátora, a kölcsönhatási kép explicit jelölését pedig elhagytuk. Ha a környezettel való kölcsönhatás nem túl erős, és a környezetben létrejövő korrelációk gyorsan lecsengenek [108, 109], akkor szorzat alakú  $\rho(0) = \rho_s(0) \otimes \rho_r(0)$  kezdőállapot esetén azt kapjuk, hogy:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_s}{dt} = \sum_{\omega>0} \gamma(\omega) & \left( S^\dagger(\omega)\rho_s S(\omega) - \frac{1}{2}S(\omega)S^\dagger(\omega)\rho_s - \frac{1}{2}\rho_s S(\omega)S^\dagger(\omega) \right) \\ & + \gamma'(\omega) \left( S(\omega)\rho_s S^\dagger(\omega) - \frac{1}{2}S^\dagger(\omega)S(\omega)\rho_s - \frac{1}{2}\rho_s S^\dagger(\omega)S(\omega) \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

A részletes levezetés során a  $k$  szerinti összegzéseket a  $\mathcal{D}(\omega)$  módussűrűség felhasználásával  $\omega$  szerinti integrállá írtuk át. Ezekkel:

$$\begin{aligned} \gamma(\omega) &= \mathcal{D}(\omega)g^2(\omega) (\langle n(\omega) \rangle + 1), \\ \gamma'(\omega) &= \mathcal{D}(\omega)g^2(\omega) \langle n(\omega) \rangle, \end{aligned} \quad (4.12)$$

ahol  $\langle n(\omega) \rangle = \text{Tr}_r (a^\dagger(\omega)a(\omega)\rho_r)$  a gerjesztések átlagos számát adja meg az  $\omega$  frekvenciájú környezeti módusban. Ha visszatérünk a Schrödinger-képbe, azt látjuk, hogy a (4.11) egyenlet Lindblad-típusú [110], de az erős külső gerjesztés miatt a Lindblad operátorok most időfüggőek. A részletes számításokból az is látható, hogy a (4.6) és a (4.11) egyenletekben pontosan ugyanazok a frekvenciák szerepelnek. Ez alapján a fenti egyenlet úgy is olvasható, mint a spinből és a gerjesztő térből álló csatolt rendszer kölcsönhatása azokkal a környezeti módusokkal, amelyek frekvenciája rezonáns a csatolt rendszer valamely átmenetével. Itt voltaképpen azt az analógiát használtuk, hogy a periodikusan gerjesztett feles spin spektruma – bár a gerjesztés teljesen klasszikus – nagyon hasonló ahhoz az esethez, amikor a spin egyetlen kvantált módussal hat kölcsön: a Floquet spektrum egymástól  $(\hbar)\Omega$  energiával különböző szintjei mintha az oszcilláló térben megjelenő egy-egy gerjesztéssel különböznének egymástól [108].

## 4.2. Időfejlődés a környezet hatása nélkül

A dekoherenciával kapcsolatos jelenségek vizsgálata előtt érdemes röviden áttekinteni a periodikusan gerjesztett rendszer időfejlődését a környezet hatása nélkül. Ebben sokat segít az az észrevétel, hogy ha a (4.2) Hamilton-operátorban felcseréljük  $\sigma_x$ -et és  $\sigma_z$ -t, akkor az eredményül kapott  $\widetilde{H}_s$  unitér ekvivalens lesz az eredeti Hamilton-operátorral:  $H_s = 1/2(\sigma_z + \sigma_x)\widetilde{H}_s(\sigma_z + \sigma_x)$ . Maga  $\widetilde{H}_s$  pedig formálisan megegyezik a forgóhullámú közelítés nélküli Rabi-probléma Hamilton-operátorával, ami klasszikus, monokromatikus elektromágneses sugárzással kölcsönható kétállapotú atomot ír le [105]. Ez a probléma már széleskörű vizsgálat tárgyát képezte, és az analógia észrevétele intuitív képet ad a kvantumoptikai modellek ismerőinek. A jelenlegi tárgyaláshoz kapcsolódóan érdemes megemlíteni, hogy kvantumrendszerek dinamikájának Floquet módszerrel történő vizsgálata komoly múltra tekint vissza [111], míg a frissebb eredmények (lásd pl. [112, 113]) a kvantuminformatikai aspektusokra fókuszálnak. A Rabi-probléma kísérleti vonatkozásai kapcsán mindenképpen meg kell említeni a 2012-es Nobel díjhoz szorosan kapcsolódó eredményeket, még akkor is, ha azok jelentőségét részben az adta, hogy a gerjesztő tér nem-klasszikus, kvantált mivolta játszotta a főszerepet a mért effektusokban [114, 115]. Az atomok és a kvantum pöttyök (dot) közötti analógiát húzza alá az exciton Rabi oszcillációk detektálása [116, 117].

A paraméterek nagyban befolyásolják, hogy milyen is lesz a  $H_s$  által generált dinamika. Ennek a vizsgálatát megkönnyíti, ha bevezetjük a  $\tau = \Omega t$  dimenziótlan idő paramétert. A  $\hbar = 1$  egységekben felírt időfüggő Schrödinger-egyenletet  $\Omega$ -val osztva kapjuk:

$$i \frac{d}{d\tau} |\Psi\rangle = \left( A \cos(\tau) \sigma_z + \frac{\Delta}{2} \sigma_x \right) |\Psi\rangle, \quad (4.13)$$

ahol  $A = a/\Omega$  és  $\Delta = \delta/\Omega$ . Az LZS modellel való összehasonlítást megkönnyíti a  $P_{LZS} = 1 - \exp(-\pi\Delta^2/2A)$  valószínűség használata, amely az elkerült nívókereszteződés után sok idővel érvényes, abban az esetben, amikor a külső tér időben lineárisan változik, méghozzá a periodikus gerjesztéshez tartozó maximális sebességgel. (Ez a kifejezés a (4.1) egyenlet után adott  $P_{LZS} = 1 - \exp(-\pi\delta^2/2\hbar v)$  valószínűségből a  $v = a\Omega = A\Omega^2$ ,  $\delta = \Delta\Omega$ ,  $\hbar = 1$  helyettesítésekkel kapható meg.) Ha  $\Delta^2/A \gg 1$ , akkor  $P_{LZS}$  közel egységnyi, azaz ha a rendszer kezdetben  $H_s$  egy pillanatnyi sajátállapotában volt, akkor adiabatikusan azt is fogja követni a későbbiekben. Ezzel ellentétben, a  $\Delta^2/A \rightarrow 0$  esetben  $P_{LZS} \rightarrow 0$ , azaz a nem-adiabatikus átmenet valószínűsége közelít ekkor.

A periodicitás miatt természetesen csak alacsony frekvenciák esetén biztos, hogy az LZS modell feltételezései realiztikusak, azaz hogy a hosszúidejű határeset alapján számított eredmény közelítőleg igaz lesz, mire a következő elkerült nívókereszteződés bekövetkezik. Emiatt a dinamika nem mindig tekinthető egymást követő LZS átmenetek sorozatának. A (4.13) alakból az is látható, hogy a gerjesztés gyenge vagy erős mivoltát szintén  $\Delta^2/A$  határozza meg: amikor  $A$  kicsi  $\Delta^2$ -hez képest, akkor a  $\sigma_x$  sajátbázisában a populációk Rabi oszcillációkat mutatnak (a dimenziótlan Rabi frekvencia  $\Omega_R = \sqrt{A^2 + (1 - \Delta)^2}$ ), míg az  $A \gg \Delta^2$  esetben a dinamika közel periodikus lesz  $2\pi$  szerint.

### 4.3. Kvázistacionárius megoldások dekoherencia jelenlétében

Ezután tekintsük a (4.11) egyenlet stacionárius megoldásait, azaz azt az esetet, amikor sűrűségoperátor kölcsönhatási képbeli időderiváltja eltűnik. Valójában persze ezek a megoldások Schrödinger-képben nem konstansok, ugyanakkor ez az időfejlődés jól ismert. (Emellett időfüggő Hamilton-operátor esetén általában nem is várhatók valódi stacionárius megoldások.) Ezért érdemes a (4.11) egyenlet kvázistacionárius megoldásairól beszélni, amelyek – ahogyan látni fogjuk – periodikusak [118], ami az  $|u_r(t)\rangle$  Floquet állapotok időfejlődéséből adódik.

Mielőtt az eredményekre rátérnénk, specifikálnunk kell a  $\mathcal{D}(\omega)$ ,  $g(\omega)$  tagokat a (4.12) egyenletekkel adott  $\gamma$  és  $\gamma'$  kifejezésekben. Termikus környezetet feltételezve, a gerjesztések  $\langle n(\omega) \rangle$  átlagos számát a Bose-Einstein statisztika adja meg. Fononfürdőbe helyezett molekulamágnesek [104] esetén (ugyanúgy, ahogyan termikus elektromágneses mezővel kölcsönható kétállapotú atomok esetén [105]) megindokolható a

$$\gamma(\omega) = \kappa \frac{\omega^3 e^{\frac{\omega}{k_B T_r}}}{e^{\frac{\omega}{k_B T_r}} - 1}, \quad (4.14)$$

$$\gamma'(\omega) = \kappa \frac{\omega^3}{e^{\frac{\omega}{k_B T_r}} - 1}, \quad (4.15)$$

választás (idézzük fel, hogy  $\hbar=1$ ). Fent  $\kappa$  nem függ  $\omega$ -tól, ez adja meg a csatolás erősségét,  $T_r$  pedig a környezet hőmérséklete. A (4.11) master egyenlet diagonális komponensei a következő alakúak:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{11} &= \kappa [\rho_{22} (\Gamma_{21} + \Gamma'_{12}) - \rho_{11} (\Gamma_{12} + \Gamma'_{21})], \\ \dot{\rho}_{22} &= -\dot{\rho}_{11}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

az offdiagonálisak pedig:

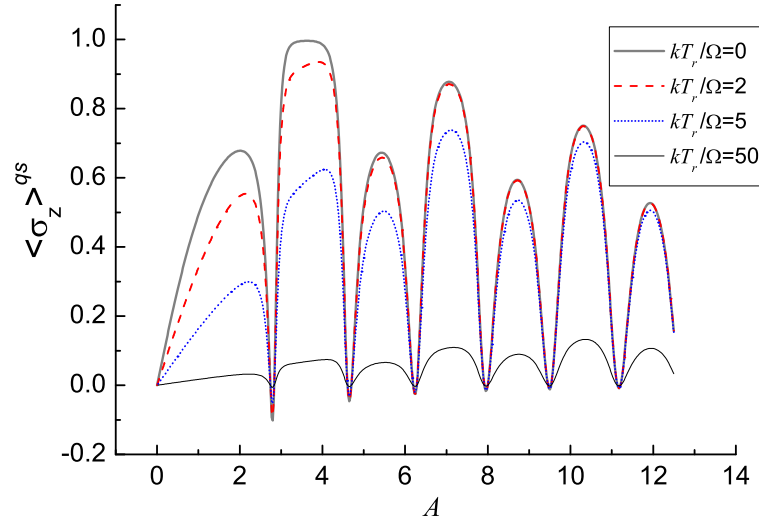
$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{12} = \dot{\rho}_{21}^* &= -\frac{\kappa}{2} (\Gamma_{11} + \Gamma_{22} + \Gamma_{12} + \Gamma_{21} - 2\Gamma_3 \\ &\quad + \Gamma'_{11} + \Gamma'_{22} + \Gamma'_{12} + \Gamma'_{21} - 2\Gamma'_3) \rho_{12}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Az együtthatók a fenti egyenletekben (4.15) felhasználásával kaphatók meg,

$$\begin{aligned} \Gamma_{ii} &= \sum_{n>0} \gamma(\omega_n^0) |\langle\langle i|S|i \rangle\rangle_n|^2, \\ \Gamma_{12} &= \sum_{n\geq 0} \gamma(\omega^+_n) |\langle\langle 2|S|1 \rangle\rangle_n|^2, \\ \Gamma_{21} &= \sum_{n>0} \gamma(\omega^-_n) |\langle\langle 1|S|2 \rangle\rangle_n|^2, \\ \Gamma_3 &= \sum_{n>0} \gamma(\omega_n^0) \langle\langle 2|S|2 \rangle\rangle_n \langle\langle 1|S|1 \rangle\rangle_{-n}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

a vesszős mennyiségek (amelyek eltűnnek nulla hőmérsékleten) pedig a  $\gamma \rightarrow \gamma'$  cserével adódnak.





**31. ábra:** A kvázistacionárius  $\langle \sigma_z \rangle^{qs} = \text{Tr}_s(\rho^{qs} \sigma_z)$  várható érték a  $\tau = 2n\pi$  időpillanatokban  $A$  függvényeként különböző hőmérsékleteken ( $\Delta = 1.5$ ).

Ha a (4.16, 4.17) egyenletek bal oldala nulla, akkor sűrűségoperátor diagonális, és a főátlóbeli elemeinek hányadosa kiszámítható:

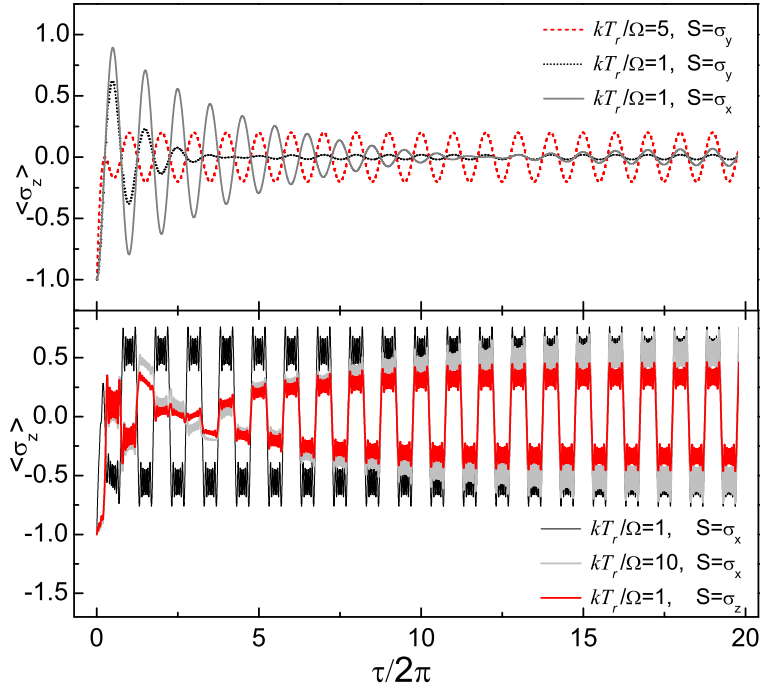
$$\frac{\rho_{11}^{qs}}{\rho_{22}^{qs}} = \frac{\Gamma_{21} + \Gamma'_{12}}{\Gamma_{12} + \Gamma'_{21}}. \quad (4.19)$$

Mivel  $\rho_{11}^{qs} + \rho_{22}^{qs} = 1$ , nemcsak a fenti arány, hanem az egyes diagonális mátrixelemek is megkaphatók.

Érdeemes megfigyelni, hogy (4.19) alapján a kvázisztatikus megoldás nem szükségszerűen az alacsonyabb Floquet kvázienergiához tartozó állapot, azaz nem  $|u_1\rangle$ , még nulla hőmérsékleten sem. Ez intuitíven úgy érthető meg, ha ismételten a kvantált módussal kölcsönható spin analógiáját használjuk. A  $\Gamma_{12} + \Gamma'_{21}$  (illetve a  $\Gamma_{21} + \Gamma'_{12}$ ) kifejezés interpretálható úgy, mint a környezet által előidézett  $|u_1\rangle \rightarrow |u_2\rangle$  ( $|u_2\rangle \rightarrow |u_1\rangle$ ) átmenetek különböző fononszámokra összegzett rátája. Erős gerjesztés esetén előfordulhat, hogy a gerjesztő tér és a spin együttes rendszerének az energiája akkor csökken, ha pusztán a spint figyelembe véve az  $|u_1\rangle \rightarrow |u_2\rangle$  átmenet következik be.

Ha feltesszük, hogy hosszú idő múlva a dinamika kvázistacionáriussá válik, akkor az eddig kapott megoldások adják meg azokat az állapotokat is, amelyekhez a rendszer konvergál. Azaz  $\rho_{ii}(\infty) = \rho_{ii}^{qs}$  és  $\rho_{ij}(\infty) = 0$ , ha  $i \neq j$ . (A későbbiekben bemutatandó numerikus eredmények is egybecsengenek ezzel a feltevessel.)

Ezt felhasználva a fenti eredmények úgy is olvashatók, hogy a dekoherencia jelenléte állapotpreparálásra ad lehetőséget. A 31. ábra mutat erre egy példát. Itt a  $\langle \sigma_z \rangle^{qs} = \text{Tr}_s(\rho^{qs} \sigma_z)$  kvázistacionárius várható értéket látjuk különböző környezeti hőmérsékletek esetére. Ahogyan leolvasható, található több olyan pont is, amikor a hosszú idejű limeszt tekintve a rendszer közel kerül  $\sigma_z$  valamely sajátállapotához a  $\tau = 2n\pi$  időpillanatokban. (Periodikus gerjesztés esetén a populációtranszfer létrehozására mutat egy másik módszert a [119] munka.)



**32. ábra:** A  $\langle \sigma_z \rangle$  várható érték időfejlődése különböző paraméterek esetén ( $A = 0.1, \Delta = 0.5, \kappa = 1.0$  a felső, míg  $A = 10, \Delta = 0.4, \kappa = 10^{-4}$  az alsó grafikonon). A kezdőállapot  $\sigma_z$  kisebb sajátértékéhez tartozó sajátállapota,  $\rho_s(0) = |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$ .

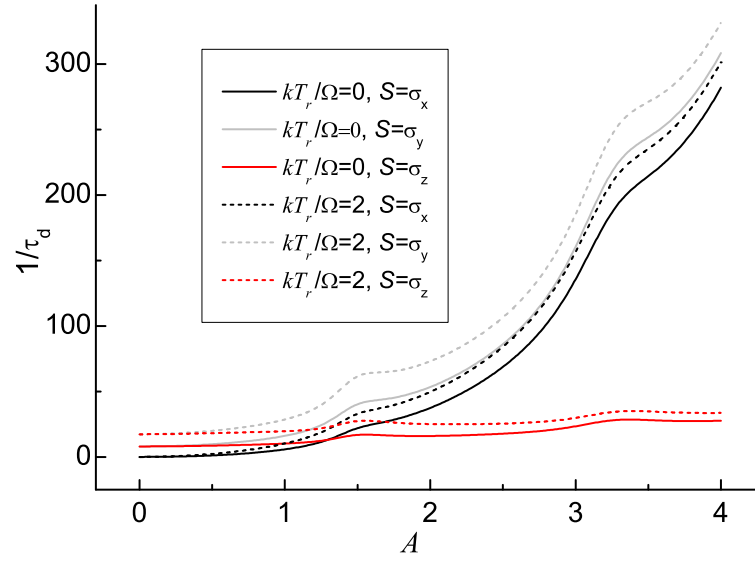
Ha a gerjesztés gyenge, akkor csak az  $|u_1\rangle$  „alapállapot” lesz populálva a  $t \rightarrow \infty$  határesetben. Ilyenkor az egzakt rezonancia ( $\Delta = 1/2$ ) esetét kivéve jó közelítéssel igaz, hogy  $|u_1\rangle(0) \approx (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ , azaz a kvázistacionárius esetben  $\langle \sigma_z \rangle \approx 0$ .

Magas hőmérsékleten  $\Gamma_{12} \approx \Gamma_{21}$ , és így – ahogyan várható is – a spin redukált sűrűségoperátora az egységmátrix  $1/2$  szerezéséhez fog konvergálni. Érdeemes megjegyezni, hogy már a mK nagyságrendjébe eső hőmérsékletek is lehetnek „magasnak” tekinthetők ebből a szempontból: ha  $\Omega$  a MHz nagyságrendjébe esik, akkor  $k_B T_r$  a  $\hbar\Omega$  százszorosa már a  $T_r \approx 1$  mK esetben is.

#### 4.4. Konvergencia a kvázistacionárius állapotok felé

Az előző alfejezet eredményei nem függtek attól, hogy pontosan milyen alakú is a spint a környezethez csatoló  $\mathcal{S}$  operátor. A dinamika kiszámításához azonban már meg kell adnunk ennek az operátornak a konkrét alakját. A továbbiakban az  $\mathcal{S} = \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  eseteket fogjuk vizsgálni.

A 32. ábrán a  $\langle \sigma_z \rangle$  várható értéket láthatjuk az idő függvényében különböző  $\mathcal{S}$  operátorok és paraméterek esetére. A görbékben közös, hogy egy tranziens szakasz után fokozatosan periodikussá válnak, annak megfelelően, hogy a megoldás konvergál a megfelelő kvázistacionárius (és így periodikus) állapothoz. Ahogyan a felső panel mutatja, gyenge gerjesztés esetén a periodikus oszcilláció majdnem szinuszos, míg ha a gerjesztés erős,



**33. ábra:** A dekoherencia  $\tau_d^{-1}$  rátája a gerjesztő tér amplitúdójának a függvényében különböző, a spint a környezethez csatoló operátorok esetén, néhány tipikus hőmérsékleten.

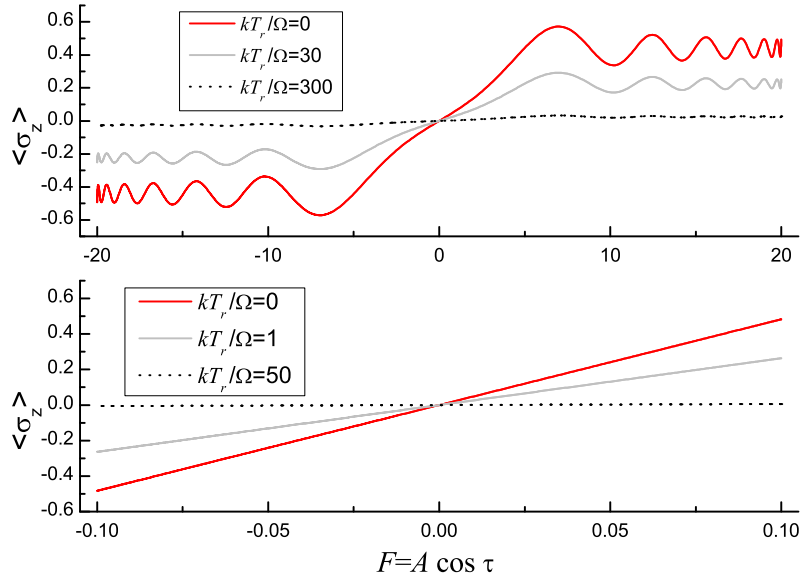
akkor sokkal összetettebb a periodikus viselkedés. Ez összhangban van azzal, hogy  $A/\Delta^2$  növelésével a Floquet állapotok Fourier kifejtésében egyre több komponens súlya válik jelentőssé. A hőmérséklet szerepe is tisztán látszik a 32. ábrán:  $T_r$  növelésével az oszcillációk amplitúdója csökken. A hőmérséklet a (4.19) egyenleten keresztül befolyásolja a kvázistacionárius állapotokat, és mivel a magas hőmérsékletű határesetben  $\rho_{11} = \rho_{22} = 1/2$ , így  $\langle \sigma_z \rangle \rightarrow 0$  ebben a limeszben.

Az eddigiek alapján látható, hogy a környezet hatása egy, az  $|u_1\rangle, |u_2\rangle$  bázisban felírt sűrűségoperátorra az, hogy az offdiagonális mátrixelemek a (4.17) egyenlet alapján eltűnnek, míg a diagonálisok aránya fokozatosan a (4.19) egyenlet által megadott értékhez konvergál. Ez a két folyamat nagyobb rendszerek esetében különböző időállandóval rendelkezik [120] (jellemzően az offdiagonális elemek eltűnése, azaz fázisrelaxáció a gyorsabb), de feles spin esetén összemérhetők a karakterisztikus idők. A dinamika kvalitatív elemzése alapján a folyamatot másképpen úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a Floquet állapotok a probléma „mutató állapotai” (pointer states [121]). A szokásos modellektől eltérően azonban ezek az állapotok esetünkben időfüggetlenek.

A mutató állapotok inkoherens összegéhez történő konvergencia karakterisztikus idejét, a  $\tau_d$  dekoherenciaidőt legkönnyebben a (4.17) egyenlet alapján definiálhatjuk:

$$\tau_d = \text{Re} \frac{2}{\kappa} (\Gamma_{11} + \Gamma_{22} + \Gamma_{12} + \Gamma_{21} - 2\Gamma_3 + \Gamma'_{11} + \Gamma'_{22} + \Gamma'_{12} + \Gamma'_{21} - 2\Gamma'_3)^{-1}. \quad (4.20)$$

Érdeemes észrevenni, hogy ez a definíció független a kezdőállapottól, ugyanakkor mind a környezet hőmérséklete, mind pedig a spin-környezet csatolást leíró operátor megválasztása erős hatással van  $\tau_d$  értékére. A 33. ábra a  $\tau_d^{-1}$  rátákat mutatja a gerjesztő tér  $A$  amplitúdójának a függvényében különböző  $\mathcal{S}$  operátorok esetére. Ahogyan látható, az



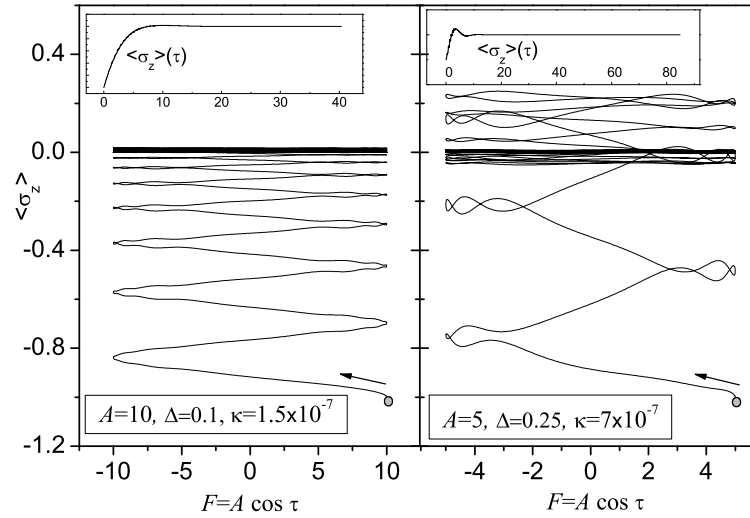
**34. ábra:** Kvázistacionárius mágnesezettségi görbék különböző hőmérsékleteken. (A felső panel paramétereit:  $\Delta = 1.5, A = 20$ , az alsóé:  $\Delta = 0.6, A = 0.1$ .)

alapvető tendencia a dekoherencia felgyorsulása, ha  $A$  növekszik, ami kapcsolatba hozható a  $\langle \langle r' | S | r \rangle \rangle_n$  eloszlás szélességével, azaz azzal, hogy  $A$  növekedésével egyre több tag lesz nem-elhanyagolhatóan kicsiny. A görbék részleteit a Floquet kvázienergiák és állapotok  $A$ -függése határozza meg, a lokális maximumok pl. az  $\epsilon_1 \approx \epsilon_2$  esetekhez tartoznak. Amint látjuk, különböző spin-környezet csatolási operátorokhoz más és más dekoherenciaidők tartoznak (ami már a 32. ábrán is látható volt). Különösen érdekes, hogy amikor  $A$  a nullához tart, akkor  $\sigma_y$  és  $\sigma_z$  véges dekoherenciaidőt ad, míg  $\sigma_x$  esetén a dekoherencia hatása elhanyagolható ebben a határesetben. Ez a jelenség  $|u_1\rangle$  és  $|u_2\rangle$  közelítő meghatározásával megmagyarázható, mert ekkor a  $\Gamma$  együtthatók eltűnnek  $\sigma_x$  esetén, ugyanakkor végesek maradnak, ha a csatolás  $\sigma_y$ -on vagy  $\sigma_z$ -n keresztül történik.

## Hiszterézisgörbék

A feles spinű rendszer mágneses momentumának  $z$  komponense arányos a  $\langle \sigma_z \rangle$  várható értékkel. Az  $F = A \cos \tau$  gerjesztő teret mágneses mezőnek tekintve, nagyobb (több független spinből álló) minta esetén a  $\langle \sigma_z \rangle(F)$  függvény mágnesezettségi vagy hiszterézisgörbe: a mágnesezettség külső mágneses tértől való függését ábrázolja, és – ahogyan majd látni fogjuk – általában nem is egyértékű függvény.

Kvázistacionárius esetben sűrűségoperátor diagonális a Floquet (mutató) állapotok bázisában, amelyeknek a periodicitása azt jelenti, hogy a hiszterézisgörbék zártak. Emellett az is megmutatható, hogy ebben az esetben  $\langle \sigma_z \rangle(F)$  egyértékű. Erre mutat példát a 34. ábra. A görbék „összettségét” az határozza meg, hogy a Floquet állapotok időfejlődésében



**35. ábra:** Konvergencia a kvázistacionárius mágneszettségi görbékhez magas hőmérsékleten ( $kT_r/\Omega=600$ ). A szürke pont tartozik  $t=0$ -hoz (amikor  $\rho_s(0)=|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$ ). A kis beszűrt ábrákon a  $\langle \sigma_z \rangle$  várható értéket látjuk  $\tau/2\pi$  függvényeként.

hány Fourier komponens van jelen észrevehető súllyal.

Ahogy már láttuk, magas hőmérsékleten  $\langle \sigma_z \rangle$  konstans 0, ezért azt várjuk, hogy a hőmérséklet emelkedésével a  $\langle \sigma_z \rangle(F)$  görbék egyre laposabbak lesznek. Ez az effektus tisztán látható a 34. ábrán, ahogyan az is, hogy elegendően magas hőmérséklet esetén a görbék közelítenek a vízszintes vonalhoz, paramétereiktől függetlenül.

A teljes dinamikát tekintve, általában  $\langle \sigma_z \rangle(F(\tau))$  többértékű függvény, és tükrözi a konvergenciát a kvázistacionárius megoldáshoz. Másképpen fogalmazva, a kvázisztatikus megoldáshoz tartozó mágneszettségi görbe attraktorként működik, a kezdeti tranziensek után a kezdőállapottól függetlenül minden görbe fokozatosan ehhez simul, ahogyan a 35. ábrán is látszik. (Maga az ábra a magas hőmérsékletű esetet – amikor kvázistacionárius mágneszettségi görbe egy vízszintes egyenes – mutatja, az attraktor tulajdonság azonban hőmérséklettől függetlenül fennáll.) Ekkor egy érdekes speciális eset az, amikor a hiszterézisgörbe lépcsőszerű módon tart a végső vízszintes vonalhoz. Hasonló görbét mágneses molekulákkal végzett kísérletekben is tapasztaltak [122]. Ahogyan a 35. ábra bal oldalának paraméterei mutatják, ilyen jellegű hiszterézisgörbék erős gerjesztés, moderált erősségű dekoherencia és magas hőmérséklet esetén fordulnak elő.

## 4.5. Soknívós rendszer monoton növekvő külső térben

Ezek után térjünk rá egy valódi „óriás spinnel” rendelkező molekula, a  $\text{Mn}_{12}\text{-Ac}$  vizsgálatára. Ebben az esetben a spin nagysága  $S = 10$ , azaz a dinamika egy 21 dimenziós térben zajlik. A spinre vonatkozó effektív Hamilton-operátort használva numerikusan fogjuk megoldani az időfüggő Schrödinger-egyenletet. A külső mágneses tér ebben az esetben nem oszcillál, hanem monoton növekszik. Ez elkerült nívókereszteződések sorozatát jelenti. Arra a kérdésre keressük a választ, hogy a Landau-Zener-Stückelberg modell milyen mértékben alkalmazható ennek a dinamikának a leírására.

### Mágneses nívók és dinamikai egyenletek

A  $\text{Mn}_{12}\text{-Ac}$  molekula a kísérletekben egyik leggyakrabban szereplő molekulamágnes. A spinjének dinamikáját leíró effektív Hamilton-operátor alakját, illetve a benne szereplő paramétereket mérésekkel is meghatározták [41, 123–126]:

$$H_S(t) = H_0(t) + H_1(t), \quad (4.21)$$

ahol  $H_0$  diagonális a  $z$  irányú spin operátor  $\{|m\rangle\}$  sajátállapotaiban:

$$H_0(t) = -DS_z^2 - FS_z^4 - g\mu_B B(t)S_z. \quad (4.22)$$

Az utolsó tag a jobb oldalon egy külső,  $z$  irányú mágneses mezőhöz való csatolást írja le. Ez a mező a kísérletekben általában időfüggő, változási sebessége („sweep rate”) a  $\text{kT/s}$  tartományba esik [127]. A  $H_1$  kifejezés a (4.21) egyenletben azokat a tagokat jelöli [123, 124], amelyek nem cserélhetők fel  $S_z$ -vel:

$$H_1 = C(S_+^4 + S_-^4) + E(S_+^2 + S_-^2)/2 + L(t)(S_+ + S_-)/2. \quad (4.23)$$

Itt  $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ . A  $\text{Mn}_{12}\text{-Ac}$  molekula esetén a  $H_0$ -ban szereplő paraméterek értéke:  $D/k_B = 0.56K$  és  $F/k_B = 1.1 \cdot 10^{-3}K$ . (Ezen a területen az energiát praktikus kelvinben mérni, illetve szokás a spin operátorokat dimenziótlannak tekinteni.) A  $H_1$  részben szereplő tagok együtthatóival kapcsolatban az irodalom kevésbé egyértelmű, a továbbiakban az  $L = 0.025g\mu_B B(t)$  (ami a külső tér  $z$  iránytól való gyenge eltérését írja le),  $E/k_B = -4.48 \cdot 10^{-3} K$ ,  $C/k_B = 1.7 \cdot 10^{-5} K$  paramétereket használjuk. Ezeknek a számoknak a megválasztása a bemutatandó eredményeket kvalitatívan nem befolyásolja.

A dinamikát – környezet befolyása hiányában – az időfüggő Schrödinger-egyenlet írja le, ugyanakkor a későbbi általánosíthatóság céljából inkább a sűrűségoperátorra vonatkozó

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i[H_S, \rho] \quad (4.24)$$

egyenletet fogjuk használni. Amíg  $\rho$  tiszta kvantummechanikai állapotot ír le (azaz egy projektor), addig ez a von Neumann-egyenlet ekvivalens az időfüggő Schrödinger-egyenlettel, de a sűrűségoperátor használata megengedi, hogy általánosabb kezdőállapotokat tekintsünk, illetve hogy relaxációs folyamatokat is figyelembe vegyünk az egyenlet jobb oldalának megváltoztatásával.

Kézenfekvőnek tűnik a (4.24) egyenletet a dimenziótlan  $S_z$  operátor sajátbázisán  $\{|m\rangle, S_z|m\rangle = m|m\rangle\}$  kifejtteni, de ekkor könnyen látható, hogy nehézségekbe ütközünk. Ha a külső tér kT/s sebességgel változik, akkor a mágnesezettség szaturációja a mérések szerint néhány milliszekundum alatt következik be. Ez alatt az idő alatt  $H_0$  paramétereit figyelembe véve nagyságrendileg  $10^9$  Bohr-oszcilláció zajlik le, ami komoly numerikus kihívást jelent. Alternatívaként érdemes a  $H_S(t)$  pillanatnyi sajátbázisát

$$H_S(t) |E_n(t)\rangle = E_n(t) |E_n(t)\rangle, \quad (4.25)$$

azaz az adiabatikus állapotokat használni. Az egyszerűség kedvéért címkézzük ezeket az állapotokat a pillanatnyi energia szerint növekvő sorrendben:  $E_0(t) < E_1(t) < \dots < E_{20}(t)$ . Ezzel a jelöléssel az  $E_n(t)$  görbék folytonosak lesznek. Fontos hangsúlyozni, hogy ezeknek az energia értékeknek (és a hozzájuk tartozó állapotoknak) az időfüggése parametrikus, azaz valójában nem az idővel, hanem külső mágneses tér aktuális értékével vannak kölcsönösen egyértelmű kapcsolatban. Ha a sűrűségoperátort a (4.25) egyenlet által adott bázisban fejtjük ki, akkor írhatjuk, hogy

$$\varrho(t) = \sum_{nm} e^{i \int_{t_0}^t (E_m - E_n) dt'} \rho_{nm}(t) |E_n(t)\rangle \langle E_m(t)|. \quad (4.26)$$

A (4.24) egyenlet alapján számítva a dinamikát, ebben a bázisban a

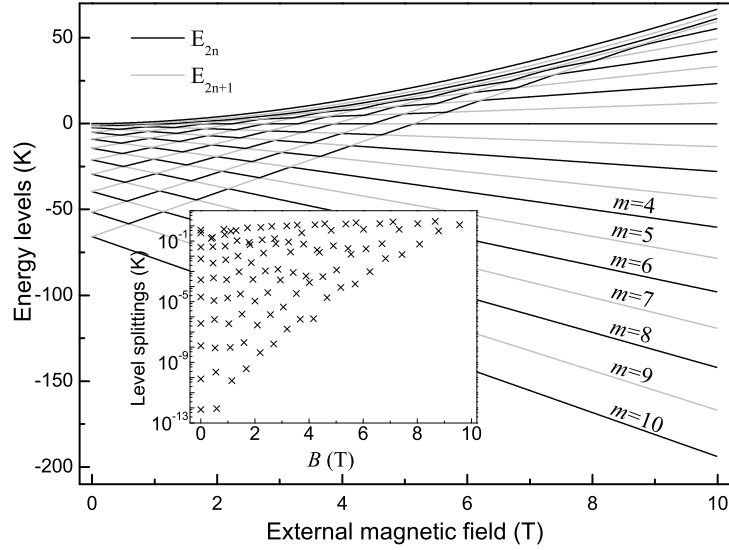
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i [\tilde{H}, \rho] \quad (4.27)$$

egyenlet adódik, ahol a  $\tilde{H}$  Hamilton-operátor mátrixelemei:

$$\tilde{H}_{nm}(t) = i \langle E_n | \frac{\partial H_S}{\partial t} | E_m \rangle \frac{e^{i \int_{t_0}^t (E_n - E_m) dt'}}{E_n(t) - E_m(t)}, \quad (4.28)$$

ha  $n \neq m$ , míg  $\tilde{H}_{nn} = 0$ . Ez a kifejezés nagyon szemléletesen mutatja, hogy a  $\rho_{nm}$  és  $\rho_{mm}$  populációk akkor változnak meg észrevehetően, amikor a jobb oldal nevezője kicsiny, azaz az  $E_n$  és  $E_m$  energiákhoz tartozó elkerült nívókereszteződések környezetében. (Jellegében hasonló eredményt ad a perturbációs számítás is [E1, 104, 128–132], ugyanakkor a (4.28) egyenlet még nem tartalmaz közelítéseket.)

Az  $E_n(t) = E_n(B(t))$  energiák  $B$  függését mutatja a 36. ábra. A szemléletesség kedvéért érdemes minden görbéhez egy  $m$  indexet rendelni. Ez korántsem jelenti azt, hogy az adiabatikus állapotok mindig  $S_z$  sajátállapotai, hiszen a (4.21) Hamilton-operátor  $H_1$  része nem kommutál  $S_z$ -vel. Ugyanakkor a paraméterek vizsgálatával könnyen belátható, hogy  $H_1$  gyenge perturbáció  $H_0$ -hoz képest, így a dinamika jelentős részében (az elkerült nívókereszteződésektől távol) az adiabatikus állapotok jó közelítéssel  $S_z$  sajátállapotai is. Az  $m$  index egy adott görbéhez történő hozzárendelése praktikusán úgy történik, hogy tekintjük az  $|\langle m | E_n \rangle|$  átfedést, és ennek maximumát keressük  $m$  szerint. (Így kapjuk meg, hogy melyik  $|m\rangle$  állapot esik legközelebb  $|E_n\rangle$ -hez.) Ez azt is jelenti, hogy a (4.25) egyenlet után megadott címkézési konvenciókkal egy adott  $|E_n\rangle$  adiabatikus sajátállapot az  $E_n$  és  $E_{n\pm 1}$  nívók elkerült kereszteződése előtt és után nem ugyanahhoz az  $m$  indexhez tartozik.



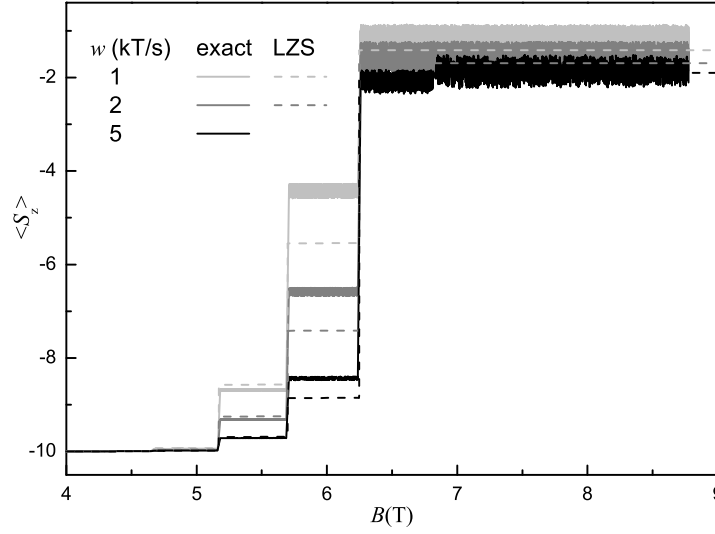
**36. ábra:** A (4.21) egyenlettel adott  $H_S$  Hamilton-operátor sajátenergiái a  $B$  külső mágneses indukció függvényeként. Az egzakt  $|E_n\rangle$  állapotokhoz „cikkcakkos” energiagörbék, míg  $S_z$  sajátállapotaihoz (amelyek  $H_S$  közelítő sajátállapotai) lényegében egyenes vonalak tartoznak (váltakozó fekete és szürke szakaszokkal). A beszúrt kis ábra a nívók közötti minimális távolságot mutatja  $B$  függvényében. Az egyes pontok a nagy ábra elkerült nívókereszteződéseinek felelnek meg.

Másképpen, ha egy elkerült nívókereszteződésnél az adiabatikus állapotok populációja nem változik, akkor  $S_z$  várható értéke (és így a mágnesezettség) viszont igen.

Ahogy a 36. ábrán látszik, az egyes nívók közötti minimális távolság 12 nagyságrendnyi tartományt ölel fel, ami újabb numerikus nehézségeket jelent. Azt találtuk, hogy a (4.24) és (4.27) egyenletek kombinációjának használata jelenti az ideális módszert a dinamika számítására: Amikor két nívó közel kerül egymáshoz, a (4.27) egyenlet már nem elegendően pontos, ezért ilyenkor érdemes báziscserét végrehajtani, és a (4.24) egyenletet használni amíg újra elegendően távol kerülünk az elkerült nívókereszteződéstől, mert ekkor újra biztonságossá válik a (4.27) egyenlet alkalmazása. Ez azt jelenti, hogy a hatékony numerikus módszerben a két bázis közötti váltást meghatározó kontroll-paraméter a nívók közötti távolság.

A (4.27) von Neumann-egyenlet jól hangsúlyozza azoknak az intervallumoknak a szerepét, amikor két adiabatikus nívó közel kerül egymáshoz. Ez alapján a kísérleti eredmények interpretálásakor gyakran elkerült nívókereszteződések egymásutánjaként kezelik a dinamikát [98–100], és az átmeneti valószínűségeket az LZS modell alapján számítják. Ez lényegében úgy történik, hogy az elkerült nívókereszteződések környezetében  $2 \times 2$ -es Hamilton-operátornak tekintik a  $H_S$ -t, majd (megfelelő egységekben) meghatározzák a (4.1) operátorban szereplő  $\delta$  és  $v$  mennyiségeket. Ezek ismeretében a  $P_{LZS} = 1 - \exp(-\pi\delta^2/2\hbar v)$  valószínűség és a mágnesezettség megváltozása kiszámítható. A módszer szükségképpen azt feltételezi, hogy a redukált  $2 \times 2$ -es Hamilton-operátor diagonális mátrixelemei az idő lineáris függvényei. Ekkor, ahogyan látható is, a valószínűségek meghatározásá-





**37. ábra:** Az  $\langle S_z \rangle$  várható érték a külső  $B$  mágneses indukció függvényében,  $dB/dt$  különböző  $w$  maximális értékeire. A numerikusan pontos megoldást a folytonos vonal jelöli, az LZS modell alapján kapott eredményt pedig a szaggatott. A külső mágneses indukció időbeli lefutását a (4.29b) egyenlet adja meg.

ban lényegében egyetlen paraméter, a  $\delta^2$  és  $v$  aránya játszik szerepet. Az előző szakaszban vázolt numerikus módszer felhasználásával ezután azt vizsgáljuk meg, hogy ez a módszer mennyire szolgáltat pontos eredményt.

## 4.6. Koherens időfejlődés

Tekintsük most a (4.24) egyenlet által meghatározott dinamikát! Kezdetben a külső mágneses indukció legyen nulla, majd emelkedjen egy  $f(t)$  függvény szerint a maximális  $B_{\max}$  értékre, azaz  $B(t) = f(t)B_{\max}$ . Három típusú  $f(t)$  időfüggést fogunk vizsgálni, méghozzá úgy, hogy  $w = \max(dB/dt) = B_{\max} \max(df/dt)$  azonos mindhárom esetben, és a kT/s tartományba esik. A három függvény:

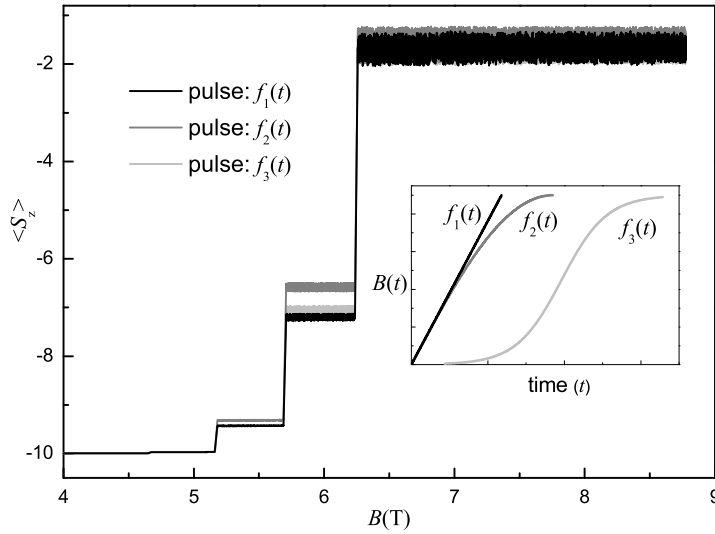
$$f_1(t) = \frac{wt}{B_{\max}}, \quad (4.29a)$$

$$f_2(t) = \sin\left(\frac{wt}{B_{\max}}\right), \quad (4.29b)$$

$$f_3(t) = \frac{1}{2} \left[ \tanh\left(\frac{2wt - \phi}{B_{\max}}\right) + 1 \right], \quad (4.29c)$$

ahol a  $\phi$  mennyiséget  $f_3(t)$ -ban úgy választottuk meg, hogy a  $t = 0$  időpillanatban  $B$  elhanyagolhatóan kicsiny legyen.

A kezdőállapot a  $t=0$  időpillanatban a két degenerált alapállapot közül az, amelyiknek az energiája a későbbiekben közel kerül majd más adiabatikus energiaszintekhez, azaz

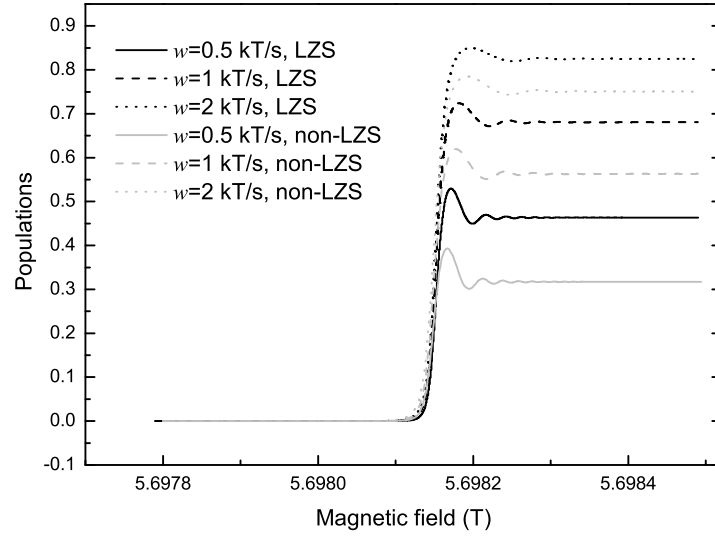


**38. ábra:** Az  $\langle S_z \rangle$  várható érték a  $B(t)$  külső, időfüggő mágneses indukció függvényében.  $B(t)$  időfüggését a beszúrt kis ábrák mutatják,  $w = 2$  kT/s minden esetben.

$|\Psi\rangle(0) = |E_1\rangle \approx |m = -10\rangle$ . A 36. ábra alapján ez azt jelenti, hogy a legalsó,  $B$  függvényében növekvő görbét követjük.

A spin  $z$  irányú komponensének az  $\langle S_z \rangle$  várható értéke  $B$  függvényében a 37. ábrán látható. Ebben ez esetben a (4.29b) egyenlettel adott időfüggést tekintettük, különböző  $w$  változási sebességek esetére. Az ábrán látható ugrások nagyon hasonlítanak a kísérleti mágneszettségi görbékhez [40], azok az átmenetek hozzák létre őket, amelyek az elkerült nívókereszteződéseknél lépnek fel. Az időfejlődés elején a nívók minimális távolsága nagyon kicsi, ekkor a rendszer majdnem nulla valószínűséggel marad a kezdeti adiabatikus sajátállapotban, cserébe a mágneszettség alig változik. Később változik a helyzet, ekkor a  $w = 1$  kT/s tartományban az adiabatikus állapotok közötti átmenetek valószínűsége észrevehetően kisebb lesz mint 1, ami a mágneszettség időfejlődésében is tükröződő  $|m\rangle \rightarrow |m'\rangle$  átmeneteket jelent.

Ezek az eredmények jellegükben jól megmagyarázhatók az LZS elmélet alapján, ugyanakkor kvantitatívan egyezést nem tapasztalunk. (Az LZS modell jóslatait egyszerűen úgy kaphatjuk meg, hogy minden egyes elkerült nívókereszteződés esetén – a nívók  $B$  függését és a  $w$  paramétert használva – meghatározzuk a  $P_{LZS}$  valószínűséget, ami megadja az adott ugrás nagyságát. Ez tehát valójában nem dinamikai számolás, de a numerikusan egzakt görbéken látható hirtelen ugrásokat figyelembe véve jó közelítés is lehetne. Az ily módon kapott eredmények is láthatók a 37. ábrán.) Kvalitatív szempontból az látszik a 37. ábrán, hogy a külső mező változási sebességét leíró  $w$  növekedtével az  $S_z$  sajátállapotai közötti átmenetek valószínűsége csökken. Emellett – annak ellenére, hogy a pontos dinamika eltér az LZS modell jóslataitól – a vizsgált tartományban azt találtuk, hogy  $\langle S_z \rangle$  lényegében a  $P_{LZS}$  felhasználásával kiszámítható módon skálázódik  $w$ -vel. A 37. ábrán az is látható, hogy gyors oszcillációk jelennek meg a  $\langle S_z \rangle$  mágneszettségi görbén nagyobb  $B$  értékeknél. Ez annak a következménye, hogy a  $|m\rangle$  állapotok nem egzakt sajátállapotai



**39. ábra:** Az  $E_{11}$  energiaszint populációja az  $|E_{11}\rangle \rightarrow |E_{12}\rangle$  elkerült nívókereszteződés környékén, mind a numerikusan egzakt, mind pedig az LZS modell feltevéseit használó számítások alapján. Az ábrához tartozó  $B(t)$  függvényt (4.29a) adja meg.

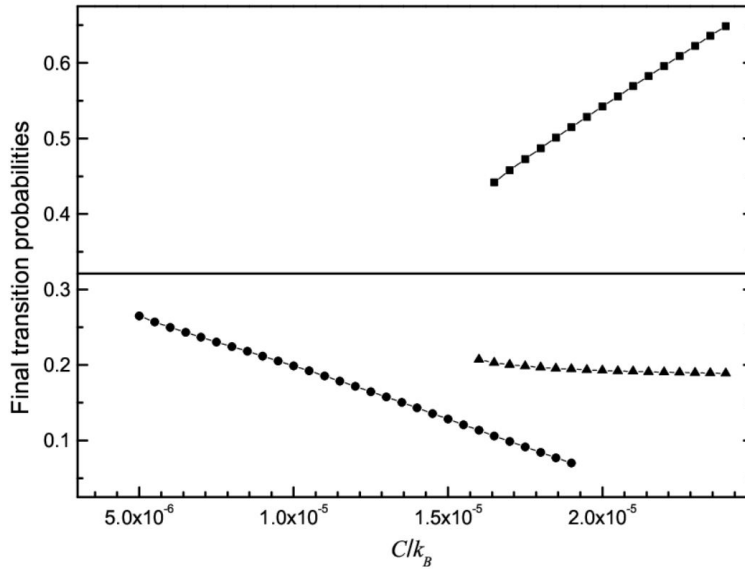
$H_S$ -nek, azaz különböző sajátállapotok közötti Bohr-oszcillációkat látunk. (Dekoherencia jelenlétében ezek az oszcillációk gyorsan elhalnak.)

A külső  $B$  mező felfutásának (4.29a-4.29c) egyenletekkel adott különböző alakjai esetén az  $\langle S_z \rangle(B(t))$  függvényt a 38. ábra mutatja a tipikusnak tekinthető  $w = 2$  kT/s esetben. Ahogyan látható,  $B(t)$  funkcionális alakja befolyásolja ugyan a mágnesezettségi görbét, ugyanakkor az eltérések nem túl nagyok. Ez azt is jelenti, hogy a kvalitatív elemzésnél elegendő a legegyszerűbb időfüggésű, lineárisan felfutó  $B$  esetét tekinteni.

Az eddigiek alapján látható, hogy az LZS módszer jó kvalitatív modellt ad (azon  $B$  értékek környékén történnek átmenetek, amikor két nívó távolsága minimális, és az átmenetek valószínűségének paraméterfüggése szintén jól becsülhető ezzel a módszerrel), ugyanakkor kvantitatív jóslatai nem egyeznek meg a pontos, 21 nívót figyelembe vevő megoldással (a mágnesezettség ugrásainak a nagyságát tekintve pl. 30% is lehet az eltérés).

Ennek a jelenségnek a megértéséhez érdemes azzal kezdeni, hogy az egyes átmenetek kT/s sebességgel változó külső tér esetén nem befolyásolják egymást. (Ez legegyszerűbben abból látszik, hogy az átmenetek karakterisztikus ideje [133, 134] sokkal rövidebb, mint az az idő, ami két elkerült nívókereszteződés között telik el.) Így elegendő egyetlen átmenetre koncentrálnunk, a meghatározottság kedvéért tekintsük  $B = 5.7$  T környékét (idézzük fel a 36. ábrát). A két egymást elkerülő nívó itt  $E_{11}$  és  $E_{12}$ , a hozzájuk tartozó állapotok pedig  $|E_{11}\rangle \approx |m = -10\rangle$  ( $|m = -1\rangle$ ) és  $|E_{12}\rangle \approx |m = -1\rangle$  ( $|m = -10\rangle$ ) az elkerült nívókereszteződés előtt (után).

Az időfejlődést az LZS modell feltételezései szerint is kiszámíthatjuk: ilyenkor az elkerült kereszteződés környékén egyeneseket illesztünk a nívók időfüggésére, illetve numerikusan meghatározzuk a nívók minimális távolságát, majd ezeket a paramétereket írjuk be a (4.1) egyenlet által adott Hamilton-operátorba. Az előzőek alapján a kezdőállapot



**40. ábra:** Az  $E_{11}$  nívó populációja sok idővel a  $B = 5.7$  T környékén bekövetkező  $|E_{11}\rangle \rightarrow |E_{12}\rangle$  elkerült nívókereszteződés elérése után, a (4.23) egyenletbeli  $C$  paraméter függvényében. A nívók ( $E_{12} - E_{11}$ ) távolságának minimuma fix, ami a vízszintes vonallal jelölt konstans populációt adja az LZS modell alapján.  $B$  időfüggését a (4.29a) egyenlet adja meg,  $w = 1$  kT/s.

(az elkerült kereszteződéstől távol) az alacsonyabb sajátenergiához tartozó sajátállapot. Ezeket tudva, a dinamika az időfüggő Schrödinger-egyenlet alapján numerikusan számítható. (Itt tehát a kétdimenziós altéren a valódi időfejlődést határoztuk meg, nem pusztán a mágneszettségi ugrás nagyságát számítottuk ki az LZS modell segítségével.) Az eredmény a 39. ábrán látható, összehasonlítva a pontos megoldással. Ez utóbbi esetünkben – a könnyebb összehasonlíthatóság céljából – szintén egy kétdimenziós téren számolt dinamika, csak hogy ekkor a Hamilton-operátort reprezentáló  $2 \times 2$ -es mátrixot a 21 dimenziós probléma megfelelő redukciójával [128, 129] kaptuk. Ez lényegében azt jelenti, hogy az összes állapot jelenléte hozzájárul ennek a  $2 \times 2$ -es mátrixnak a konkrét alakjához, amely emiatt nem pontosan fog megfelelni az LZS modell feltételeinek (azaz a főátlóbeli elemek nem lineárisan függenek az időtől, illetve az offdiagonálisak sem konstansok).

Ez a különbség indokolja a 39. ábrán a két modell eredményei közötti eltéréseket. Másképpen ezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy az LZS modell egyetlen paramétere,  $\delta/\sqrt{v}$  nem elegendő a dinamika pontos leírására, még akkor sem, ha a modell kétdimenzióssá redukálható.

Ezt még élesebben láthatóvá tehetjük, ha a 39. ábrán látható átmenet esetére meghatározzuk az egyes nívók populációját sokkal az átmenet után (azaz amikor – ahogyan a 39. ábra mutatja – már stacionáriussá válnak ezek a populációk). A 40. ábrához tartozó számításokban úgy választottuk meg a (4.23) Hamilton-operátor paramétereit, hogy közben az LZS paraméterek változatlanok legyenek. Konkrétan, a  $\delta$  minimális nívótávolság fixen tartható, miközben csak a  $C$  és  $L$  paraméterek változnak ( $D$ ,  $F$  és  $E$  állandó). Az adódik, hogy a  $C-L$  síkon több különböző olyan vonal található, amelyek mentén  $\delta(C, L)$

konstans (és így – adott  $v$  esetén –  $P_{LZS}$  is állandó). Ahogyan a 40. ábrán látható, a dinamikai számítások azt mutatják, hogy az átmenet után az  $E_{11}$  nívó populációja erősen függ a  $C$  paramétertől. Így tehát nagyon jól látható, hogy az LZS modell nem írja le teljesen pontosan az átmeneti valószínűségeket a soknívós dinamika elkerült nívókereszteződéseinél.

## 4.7. A fázisrelaxáció szerepe

Eddig azt az idealizált esetet vizsgáltuk, amikor az időfejlődés unitér volt, a rendszer mindvégig kvantummechanikai tiszta állapotban volt. Ezzel szemben, egy molekulakristályban többféle effektus (pl. fononok hatása [135, 136] vagy hiperfinom kölcsönhatás [137, 138]) hat a kvantummechanikai interferencia eltüntetésének irányába [E1, 104, 139, 140]. Ez az egyes elkerült nívókereszteződések közelében is észrevehető jelenség, de legjobban ott látszik, hogy az egymást követő elkerült nívókereszteződések mennyire tekinthetők függetleneknek, azaz milyen mértékben beszélhetünk LZS interferenciáról [103] vagy esetlegesen inkoherens dinamikáról [104, 141] ebben az esetben.

Ennek az effektusnak a kvalitatív elemzéséhez a fejezet első részében látott módszerrel kicsit egyszerűbb módon a következő fenomenologikus, Lindblad-típusú [110] master egyenletet tekintjük:

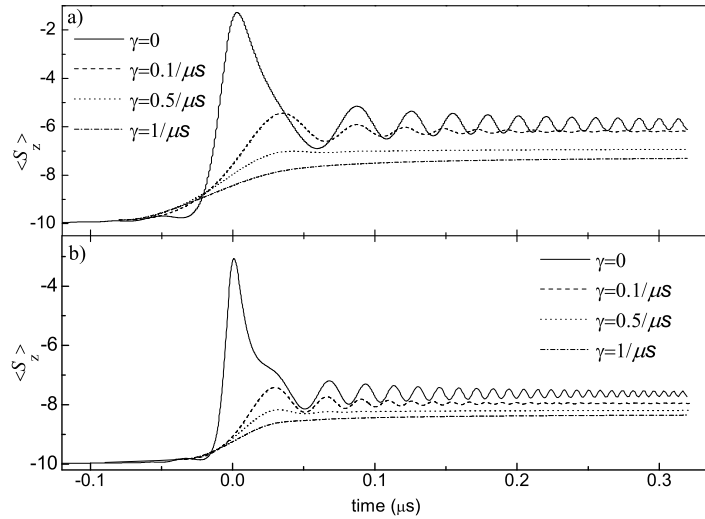
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -i [H_S, \rho] + \frac{\gamma}{2} (2S_z \rho S_z - S_z^2 \rho - \rho S_z^2). \quad (4.30)$$

Ennek az egyenletnek a második tagja fázisrelaxációt ír le  $S_z$  sajátbázisában. Másszóval nem változtatja meg a mágnesezettség  $z$  komponensét, szerepe csupán az, hogy fokozatosan eltünteti  $\rho$  offdiagonális komponenseit ebben a bázisban. A számokat tekintve, molekulamágnesek esetén az egyes átmenetek karakterisztikus ideje  $10^{-6}$ – $10^{-7}$  s, miközben két elkerült nívókereszteződés között a tipikus kísérletekben nagyságrendileg  $10^{-3}$  s telik el. Ezekhez képest alacsony hőmérsékleten ( $\approx 2K$ )  $\gamma^{-1}$  a  $10^{-5}$ – $10^{-7}$  s tartományba esik, azaz két elkerült nívókereszteződés között a relaxációs effektusok hatása a domináns, a fáziskoherencia lényegében eltűnik. Ez azt jelenti, hogy ha közvetlenül egy elkerült nívókereszteződés után a rendszer egy  $|\phi\rangle$  tiszta kvantummechanikai állapotban van, akkor a kezdőfeltételt a következő elkerült nívókereszteződésnél a következő egyenlet jobb oldala adja:

$$|\phi\rangle \langle\phi| = \sum_{nm} |n\rangle \langle m| \rho_{nm} \rightarrow \sum_m |m\rangle \langle m| \rho_{mm}. \quad (4.31)$$

Másszóval, az eddig tekintett kT/s sebességgel változó külső mágneses terek esetén a kvantumos koherencia nem játszik fontos szerepet az egymást követő elkerült nívókereszteződéseknél. Akkor várható az LZS interferencia megjelenése, ha ez a sebesség a MT/s nagyságrendjébe esik.

Az elkerült nívókereszteződések környezetében létrejövő kvantummechanikai átmenetek karakterisztikus ideje összemérhető a fázisrelaxáció időállandójával. A fázisviszonyok eltűnésének legfontosabb jele az, hogy  $S_s$  sajátbázisában  $\{|m\rangle\}$  az átmenetek valószínűsége csökken, azaz a mérhető mennyiségeket tekintve a mágnesezettségi görbéken látható ugrások nagysága egyre kisebb lesz. Ahogyan a 41. ábra mutatja, ez a jelenség annál



**41. ábra:** A fázisrelaxáció hatása az  $\langle S_z \rangle$  várható érték időfüggésére a  $|E_{11}\rangle \rightarrow |E_{12}\rangle$  elkerült nívókereszteződés környékén, a (4.29a) egyenlettel adott lineárisan változó  $B$  esetén,  $w = 1 \text{ kT/s}$  az a) panelen és  $2 \text{ kT/s}$  a b) panelen. (Az időtengelyt az egyszerűség kedvéért eltoltuk,  $t = 0$  jelenti azt az időpillanatot, amikor  $E_{12} - E_{11}$  minimális.)

észrevehetőbb, minél nagyobb  $\gamma$  értéke. A koherens esettel szemben az átmenetek utáni populációk most nem úgy skálázódnak a mágneses indukció változási sebességével, ahogyan azt az LZS modell jósolja, Ennek az az oka, hogy nagyobb  $dB/dt$  esetén a rendszer kevesebb időt tölt az elkerült nívókereszteződések környezetében, így a fázisrelaxációs folyamatok kevésbé jelentősek. Érdeemes még megjegyezni, hogy a 37. ábrán látható, Bohr-oscillációkhoz köthető gyors változások fázisrelaxáció esetében gyorsan eltűnnek.

Ezzel együtt az előző alfejezet fő következtetései dekoherencia jelenlétében is igazak, a dinamikát most sem lehet teljes pontossággal leírni az LZS modell segítségével, még akkor sem, ha abban figyelembe vesszük a fázisrelaxáció folyamatát is.

## 4.8. Összefoglalás

Ebben a fejezetben a [T5, T6] munkák alapján olyan elkerült nívókereszteződések kapcsán foglaltuk össze eredményeinket, amelyek közvetlen kapcsolatba hozhatók időfüggő külső mágneses térrel kölcsönható mágneses molekulákkal.

Először egyetlen ilyen elkerült nívókereszteződésre koncentrálna meghatároztuk a dekoherencia hatását periodikus külső tér esetén. Felírtuk, majd megoldottuk a dinamikai egyenleteket, és megmutattuk, hogy nagyon általánosan (mind a kezdőállapottól, mind a dekoherencia erősségétől, de még a környezethez való csatolás jellegétől is függetlenül) igaz az, hogy a dekoherencia megfelelő Floquet állapotok inkohérens összege felé irányítja a rendszert. A kvázistacionárius hiszterézisgörbéket emiatt teljesen meghatározzák a Floquet állapotok, míg a dekoherencia folyamat jellemzői az ezekhez a görbékhez történő konvergencia részleteire vannak hatással.

Több nívó és monoton növekvő külső tér esetén kidolgoztunk egy numerikusan hatékony módszert a többszörös elkerült nívókereszteződésekkel tarkított dinamika pontos kiszámítása. Ez alapján rámutattunk, hogy az ilyen jellegű problémák kvalitatív elemzésénél nagyon hasznos Landau-Zener-Stückelberg modell esetünkben nem ad elegendően pontos eredményt. Számításaink alapján ennek lényegében az az oka, hogy bár nagyon jó közelítéssel kétnívóssá redukálható a rendszer egy adott elkerült nívókereszteződés közelében, az egyes nívók időfüggése nem pontosan követi az LZS modell feltevéseit. Realisztikus időállandójú fázisrelaxációt figyelembe véve azt kaptuk, hogy  $kT/s$  nagyságrendbe eső sebességgel változó külső mágneses indukció esetén az egymás utáni elkerült nívókereszteződések már függetlennek tekinthetők, abban az értelemben, hogy ilyen időskálán a kvantummechanikai koherencia már nem játszik szerepet.

## 4.9. Molekuláris mágnesekkel kapcsolatos további eredmények

Az eddig ismertetett eredmények mellett megvizsgáltuk azt a kérdést is, hogy a mágneses átmeneteket kísérő, mikrohullámú tartományba eső sugárzást [142, 143] milyen mechanizmus kelti. A kísérleti paraméterek figyelembe vételével arra jutottunk, hogy itt leginkább egy mézerszerű effektusról van szó [E1], nem pedig a Dicke-féle [144] szupersugárzásról [145].

Nanomágnesekkel kapcsolatban az utóbbi évek egyik legérdekesebb kísérleti eredménye a „nitrogén plafon áttörése” [146], azaz olyan kvantummos mágneszettségi jelenségek kimérése, amelyek már a nitrogén forráspontja fölötti hőmérsékleten is megjelennek. (A [146] kísérletben diszprózium ötvözetet volt a mágneses anyag, és 80 K a hőmérséklet.) A dekoherencia fő okozója ezekben a rendszerekben a fononokkal való kölcsönhatás. Ennek, az általunk fenomenologikusan kezelt jelenségnek a pontosabb megértését célozzák pl. azok a neutronszóráson alapuló kísérletek, amelyek alkalmasak a fononok diszperziós relációjának a meghatározására [147]. Az elméleti leírást illetően az általunk használt effektív spin Hamilton-operátoron alapuló módszert még mindig alkalmazzák, főként kísérletek értelmezésénél [146]. Az elméleti jellegű számításoknál ezt a modellt ma már gyakran egészíti ki valamilyen szofisztikáltabb módszer, a [148] munkában pl. transzportfolyamatok számításánál renormalizációs csoporton alapuló numerikus megoldást választottak a szerzők. Az effektív Hamilton-operátor alkalmazásán túlmutató módszerek közül a sűrűségfunkcionál elméleten alapuló számítások is gyakoriak (lásd pl. [147]).





## 5. fejezet

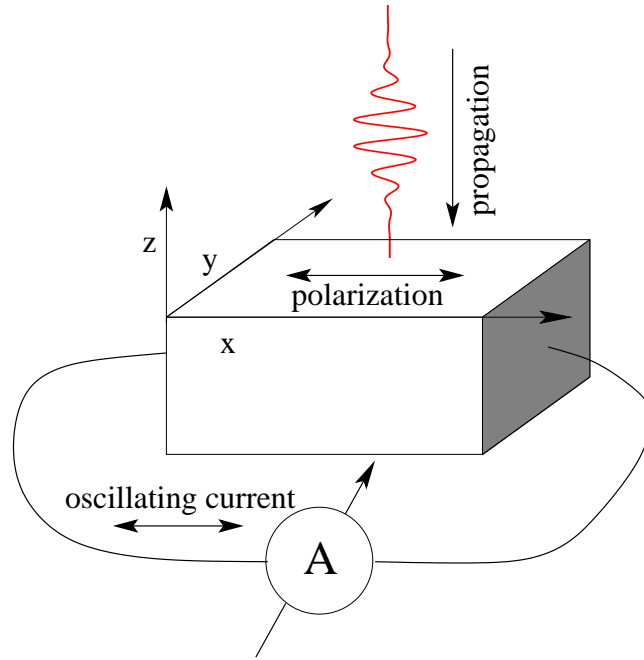
# Erős lézerimpulzusok kölcsönhatása dielektrikumokkal

A dielektrikumok tiltott sávjának szélessége az UV tartományba eső elektromágneses sugárzásnak felel meg, így a tipikusan infravörös központi frekvenciájú rövid lézerimpulzusok esetén nagy intenzitásra van szükség ahhoz, hogy sávátmenetek jöjjenek létre. A tapasztalatok szerint néhány ciklusú infravörös impulzusok esetén, ha a maximális elektromos térerősség a GV/m nagyságrendbe esik, akkor a tér már indukál ilyen átmeneteket, ugyanakkor a dielektrikum céltárgy még nem szenved roncsolódást. Ebben az intenzitás-tartományban így olyan reverzibilis folyamatok játszódhatnak le a femtoszekundumos időskálán, amelyek azzal járnak, hogy a dielektrikumban átmenetileg könnyen elmozduló töltéshordozók jelennek meg, és így nagyságrendekkel megváltozik a vezetőképesség. Jelenleg még nem kristályosodott ki teljesen a részletes fizikai háttere ennek „metallizáció”-nak (metallization [149]), azonban ha az időálló valóban a femtoszekundumos időskálán mozog, akkor a fényimpulzusokkal kontrollált, ultragyors kapcsolók, illetve még távolabbra tekintve teljes elektronika [46] lehetősége is joggal vetődik fel.

Az első, ezzel a témával kapcsolatos kísérleti eredmény 2013-ból származik [55]. Ebben a kísérletben a céltárgy anyaga kvarcüveg volt, a mérési elrendezés vázlata pedig a 42. ábrán látható. Az áramkörbe sematikusan berajzolt ampermérőt itt kicsit pontosabban ballisztikus galvanométernek hívhatnánk, mivel a gyors oszcillációk miatt az áramok időbeli felbontása lehetetlen, egyedül az időintegráljuk – azaz a lézertér által elmozdított töltés – mérhető.

Ahogy a 42. ábra is mutatja, az [55] kísérletben nem volt feszültségforrás, így a mérhető töltés teljes egészében abból adódott, hogy – szemléletesen szólva – a gerjesztő impulzus elektromos tere irányától függően „tolja” avagy „húzza” az elektronokat. Ebből sejthető, hogy ennek a térnek az időbeli lefolyása komolyan befolyásolhatja az eredményt, azaz a vivő-burkoló fázis szerepe itt lényeges. Pontosan ez látszott a kísérletben is, amikor a gerjesztő tér polarizációja az érintkezők által meghatározott egyenesbe esett (míg az erre merőleges irány esetén nincs ilyen effektus, ami megegyezik a szemléletes képből leszűrhető következtetéssel.)

A következőkben a fent leírt kísérletileg tapasztalt jelenségek fizikai hátterét vizsgáljuk [T7]. Az értelmezésben egy, a szilárdtestfizikában ismert effektus, a Bloch-oszcilláció [150]



**42. ábra:** Dielektrikumokban áramot keltő kísérlet elvi elrendezése. A mérésben [55] a lézerimpulzus által elmozdított összes töltést határozták meg.

fontos szerepet fog játszani. Itt lényegében arról van szó, hogy amennyiben egy periodikus potenciálban mozgó elektron kvázi-impulzusa ( $\mathbf{k}$ ) külső elektromos tér hatására annyira megnő, hogy az túllépi az első Brillouin-zóna határát, akkor kissé formálisan, redukált zónaképben gondolkodva, az történik, hogy  $\mathbf{k}$  előjelet vált, ami a zónahatár átellenes oldalát jelenti. Minden zónaképben igaz, hogy a zónahatáron egy adott sávon belül egy Bloch-elektronhoz rendelhető sebesség előjelet vált. Mindez szemléletesen azt jelenti, hogy – az intuícióval ellentétben – a statikus külső tér jelentette állandó erő a kristályrácsbeli elektronokat nem gyorsítja egy adott irányba „a végtelenségig” (nemrelativisztikus esetben sem), hanem az elektron a valós térben is oszcillálni fog (ez a Wannier–Stark lokalizáció [151]).

Statikus térben és valódi szilárdtestben a Bloch-oszcillációk megfigyelés igen nehéz, amit a különböző szórásjelenségeknek szokás tulajdonítani. Konstans,  $F$  nagyságú elektromos térben a Bloch-oszcillációk periódusa  $T_B = h(eFa)^{-1}$ , ahol  $a$  jelöli a rácsállandót,  $e$  pedig az elemi töltést (azaz  $e > 0$ ). A Bloch-oszcillációk akkor figyelhetők meg, ha  $T_B$  kisebb, mint a különböző szórásfolyamatokra jellemző karakterisztikus idők, amelyek jellemzően a  $T_s \sim 10^{-13}$  s nagyságrendbe esnek. Ez az  $F > h(eaT_s)^{-1} \sim 10^8$  V m $^{-1}$  feltételt jelenti, ami azonban túl erős statikus teret jelent, ezt még a nagyon széles tiltott sávval rendelkező dielektrikumok sem viselik el roncsolódás nélkül. Ennek megfelelően a legutóbbi időkig Bloch-oszcillációkat főként mesterséges létrehozott szuperrácsokban [152, 153] figyeltek meg. A jelenség optikai megfelelője periodikus hullámvezetőkben [154, 155] és periodikus, dielektrikum struktúrákban [156] is megjelenik. Állóhullámok alkotta rácsban ultrahideg atomok szintén mutatnak analóg viselkedést [157, 158].

A Bloch-oszcillációk valódi szilárdtestekben való megfigyelhetősége szempontjából je-

lentős változást hozott az erős, impulzusszerű elektromágneses terek alkalmazása. Ghimire és munkatársai [50, 159] ZnO mintát megvilágítva magasrendű harmonikusok [160] megjelenését tapasztalták. Az ő kísérleteikre jellemző elektromos térerősségek már alkalmasak *dinamikai* Bloch-oszcillációk előidézésére, azaz olyan folyamatok indukálására, amikor a gerjesztő tér egy-egy optikai félciklusa alatt a kezdetben nullaközeli kvázi-impulzussal rendelkező elektronokhoz rendelhető  $\mathbf{k}$  átlépi az első Brillouin zóna határát. A paraméter-tartományt illetően ugyanez igaz ennek a fejezetnek a fő motivációját jelentő [55] munkára. Jelenleg még nyitott kérdés, hogy a Bloch-oszcillációknak mekkora jelentősége van pl. a tömbi anyagokból kiváltott magas felharmonikusok keletkezésénél, ugyanakkor tény, hogy ez az effektus lezajlik a néhányszor 10 GV/m csúcs elektromos térerősséggel jellemzett infravörös impulzusok terében, még erős szórásfolyamatok jelenlétében is.

Az 5.1-5.4 alfejezeteknek az a célja, hogy a [T7] munka alapján összefoglalja azt, hogy milyen folyamatok zajlanak le ebben a paramétertartományban, ha az elektromágneses impulzus mellett a legerősebb relaxációs folyamatot is figyelembe vesszük. Ez kristályos SiO<sub>2</sub>-ban (amit a meghatározottság kedvéért modellként választunk) a longitudinális optikai fononokkal való kölcsönhatást jelenti [161, 162].

## 5.1. A sűrűségoperátor időfejlődését meghatározó folyamatok

Legyen az  $x - y$  ( $z = 0$ ) sík a dielektrikum felülete, amire a  $z$  tengely mentén terjedő, CEP-stabilizált rövid elektromágneses impulzus esik be. A számításaink során lineárisan polarizált elektromos térrel rendelkező impulzust tekintünk:  $\mathcal{E}_x(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t + \varphi_{\text{CEP}}) \times \exp(-\frac{t^2}{2\tau^2})$ ,  $\mathcal{E}_y = \mathcal{E}_z = 0$ . Ennek az impulzusnak a térfüggését a továbbiakban elhanyagoljuk, ami azért jó közelítés, mert a vizsgálni kívánt hullámhossz-tartományban a gerjesztés térbeli kiterjedése (a fókuszolt) több nagyságrenddel nagyobb a tipikus rácsállandóknál.

A továbbiakban feltételezzük, hogy a jelenségek kvalitatív leírásához elegendő pusztán a vegyérték és a vezetési sávot figyelembe venni. (A többi vezetési sáv szerepének elemzését megtalálhatjuk pl. a [56] munkában.) Ennek megfelelően  $2 \times 2$ -es sűrűségmátrixokkal írjuk le a rendszert:

$$\rho(\mathbf{k}, t) = \begin{pmatrix} n_c(\mathbf{k}, t) & P(\mathbf{k}, t) \\ P^*(\mathbf{k}, t) & n_v(\mathbf{k}, t) \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

ahol  $n_c$  és  $n_v$  a vezetési illetve vegyértéksávbéli populációkat jelöli,  $P(\mathbf{k}, t)$  pedig a sávok közötti koherenciáról ad számot. Az egyszerűség kedvéért kétdimenziós modellt tekintünk, azaz a  $\mathbf{k}$  kváziimpulzus kétkomponensű:  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ .

A bevezetőben a 11. ábrán bemutatott folyamatokat fogjuk a következőkben leírni: a gerjesztő impulzus által generált sávátmeneteket, sávon belüli, a külső tér által előidézett mozgást, illetve szórási jelenségeket. Az első folyamat alapvető jelentőségű, a tiltott sáv szélességénél sokkal kisebb fotonenergiák ellenére ez hoz létre töltéshordozókat. A második – ahogyan a fejezet második részében látni fogjuk – függ attól, hogy milyen elektromágneses mértéket választunk a probléma leírásához, de hossz mértékben jelentős effektust jelent. A szórás figyelembevétele első ránézésre nem tűnik fundamentális jelentőségűnek, de a [T7] munkában a cél a [55] kísérlet értelmezése volt, és abban az esetben ez a jelenség is fontos szerepet játszott. Ezek alapján a sűrűségmátrix dinamikáját meghatározó

egyenletet formálisan a következő alakba írhatjuk:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{k}, t) = \left(\frac{\partial\rho}{\partial t}\right)_{\text{exc}} + \left(\frac{\partial\rho}{\partial t}\right)_{\text{force}} + \left(\frac{\partial\rho}{\partial t}\right)_{\text{scatt}}. \quad (5.2)$$

Itt az első tag az optikai gerjesztést jelenti, a két utolsó pedig lényegében a sávokra külön-külön felírt, külső térben érvényes Boltzmann-egyenlettel ekvivalens [163]. Egyetlen sávra ezt a modellt két különböző frekvenciájú gerjesztés esetén a [164] munka tárgyalja.

A gerjesztési folyamat, azaz (5.2) jobb oldalán az első tag, jól leírható Bloch-egyenletek segítségével [165, 166]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial P(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{exc}} &= -\frac{i}{\hbar}[E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - i\hbar\kappa]P(\mathbf{k}) \\ &\quad - i[n_c(\mathbf{k}) - n_v(\mathbf{k})]d_{cv}(\mathbf{k})\mathcal{E}(t), \\ \left(\frac{\partial n_c(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{exc}} &= -2\Im[d_{cv}(\mathbf{k})\mathcal{E}(t)P^*(\mathbf{k})], \\ \left(\frac{\partial n_v(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{exc}} &= -\frac{\partial n_c(\mathbf{k})}{\partial t}, \end{aligned} \quad (5.3)$$

ahol  $E_v(\mathbf{k})$  és  $E_c(\mathbf{k})$  a valencia és a vezetési sávhoz tartozó, a diszperziós reláció szerinti energiát jelenti. A  $\kappa$  egy fenomenologikus mennyiség, azt a rátát fejezi ki, amellyel a  $P(\mathbf{k})$  koherenciák lecsengenek. (A sávok közötti spontán relaxáció, ami jellemzően egy lassabb folyamat, elhanyagolható a femtoszekundumos időskálán.) A dipólmomentum mátrixelemek meghatározása kvantitatív igényű modell esetén anyagszerkezeti számításokat igényel, de a dinamika lényegének megértéséhez elegendő, ha  $d_{cv}$   $\mathbf{k}$ -tól való függését a következő kifejezéssel közelítjük [166]:

$$d_{cv}(\mathbf{k}) = d_{cv}(0) \frac{E_c(0) - E_v(0)}{E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k})}.$$

A referenciaként szolgáló  $d_{cv}(0)$  konkrét értékének megválasztása kis hatással van a továbbiakban bemutatandó eredményekre, legalábbis addig, amíg telítési jelenségek nem lépnek fel, azaz a vezetési sávbeli populációk lényegesen 1 alatt maradnak. A meghatározottság kedvéért a továbbiakban a  $d_{cv}(0) = 0.1$  (atomi egység) választással élünk, ami a tárgyalt intenzitástartományban teljesíti ezt a feltételt. Érdekes hangsúlyozni, hogy mivel a gerjesztő tér frekvenciája nagyon távol van a sávok közötti rezonanciától, az (5.3) egyenletben nem használtuk a forgóhullámú közelítést. (Az ezzel kapcsolatos jelenségek elemzése megtalálható a [167] munkában.)

Sávátmenetek indukálása mellett a külső tér másik szerepe az, hogy egy adott sávon belül gyorsítja illetve (a relatív irányoktól függően) lassítja a töltéshordozókat. A Boltzmann-egyenletnek megfelelően ezt írja le a második tag az (5.2) egyenlet jobb oldalán:

$$\left(\frac{\partial n_{v,c}(\mathbf{k})}{\partial t}\right)_{\text{force}} = -\frac{e}{\hbar}\mathcal{E}(t)\nabla_{\mathbf{k}}n_{v,c}(\mathbf{k}), \quad (5.4)$$

ahol az  $\mathcal{E}(t)$  tér elvben azt a mezőt írja le, amely az elektronokkal kölcsönhatásba lép [168], ugyanakkor a jelenségek értelmezésére koncentrálva a továbbiakban ezt azonosnak fogjuk tekinteni a bejövő térrel.

A harmadik tag az (5.2) egyenlet jobb oldalán a sávon belüli relaxációs folyamatokról ad számot. SiO<sub>2</sub> kristályban a legfontosabb effektus a longitudinális optikai (LO) fononokkal való kölcsönhatás. Az elektron-fonon kölcsönhatás leírására használatos Fröhlich-féle Hamilton-operátorból kiindulva, arra juthatunk [166], hogy :

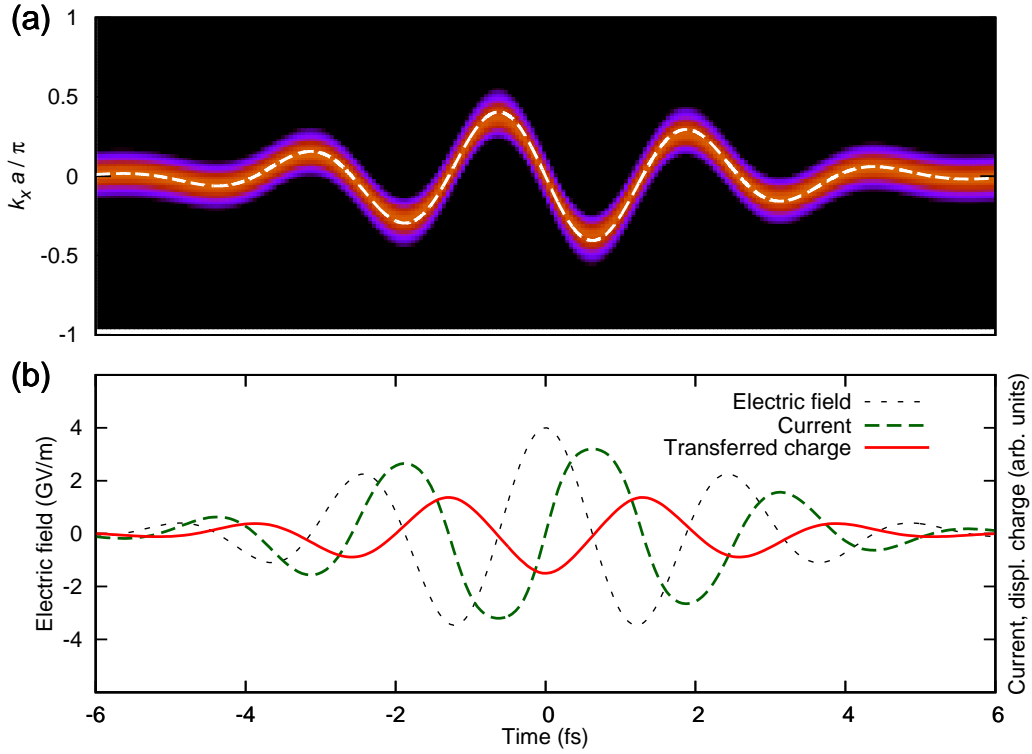
$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial n_c(\mathbf{k})}{\partial t} \right)_{\text{scatt}} &= \gamma_0 \sum_{\mathbf{q}} \delta(E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_c(\mathbf{k}) - \hbar\omega_{\text{LO}}) \\ &\times q^{-2} \left\{ -N_{\mathbf{q}} n_c(\mathbf{k}) [1 - n_c(\mathbf{k} + \mathbf{q})] + (N_{\mathbf{q}} + 1) n_c(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [1 - n_c(\mathbf{k})] \right\} \\ &\quad + \gamma_0 \sum_{\mathbf{q}} \delta(E(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - E_c(\mathbf{k}) + \hbar\omega_{\text{LO}}) \\ &\times q^{-2} \left\{ -(N_{\mathbf{q}} + 1) n_c(\mathbf{k}) [1 - n_c(\mathbf{k} - \mathbf{q})] + N_{\mathbf{q}} n_c(\mathbf{k} - \mathbf{q}) [1 - n_c(\mathbf{k})] \right\}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

ahol  $\hbar\omega_{\text{LO}}$  a LO fononok energiáját jelöli, amit az egyszerűség kedvéért (és a meglehetősen „lapos” diszperziós reláció miatt)  $\mathbf{q}$ -tól függetlennek tekintünk. Az ezekhez a fononokhoz tartozó sűrűséget  $N_{\mathbf{q}}$  jelöli,  $\gamma_0$  pedig az elektron–fonon csatolás erősségét meghatározó állandó. Modellünkben szoros kötésű (tight-binding) diszperziós relációt használunk, azaz  $E_c(\mathbf{k})$  arányos  $2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)$ -val, ahol  $a$  jelöli a rácsállandót.

Szobahőmérsékleten (és alatta) az átlagos fononszám a SiO<sub>2</sub> tipikus fononenergiáin praktikusán nulla, így  $N_{\mathbf{q}}$  is kicsiny, azaz a fonon abszorpcióval járó folyamatok valószínűsége szintén csekély. Tehát a fonon-elektron kölcsönhatás lényegében fonon emissziót jelent, ami természetesen az elektron energiájának a csökkenésével jár. Érdeemes megjegyezni, hogy ez a fajta szórási folyamat jellegében más egy- illetve többdimenziós modellek esetén, mivel egyetlen dimenzióban egy adott  $k$ -hoz tartozó kezdőállapot esetén a szórás  $k'$ -vel indexelt lehetséges végállapotai a reciproktérben a kiindulási  $k$ -val nem összefüggő halmazt alkotnak, ami nem igaz sem kettő, sem három dimenzióban. Lényegében ez az oka annak, hogy a numerikus számítások időigényét is figyelembe véve kétdimenziós modellt választottunk.

Az (5.5) egyenletet úgy is olvashatjuk, hogy az LO fononokhoz kapcsolható szórási ráták függenek a  $\mathbf{k}$  indextől, ezek a  $\gamma(\mathbf{k})$ -k arányosak  $\gamma_0$ -lal. Numerikusan is az adódik, ami pl. a [162] munkában is olvasható, hogy  $\gamma(\mathbf{k})$  minimuma  $|k| = 0$ -nál van, és lényegében konstans ( $\gamma(\mathbf{k}) \approx \gamma$ ) a 0.5 eV és 2 eV elektronenergiák között. A következőkben ezt a konstans  $\gamma$  értéket fogjuk használni az elektron-fonon kölcsönhatás erősségének a szám-szerű jellemzésére, ugyanakkor a számítások során természetesen  $\mathbf{k}$ -függő szórási rátákat használunk.

Ahogy említettük, a továbbiakban a kristályos SiO<sub>2</sub> paramétereit használjuk, ami 9 eV tiltott sávot,  $a = 0.5$  nm rácsállandót, és két LO fonon módust jelent  $\hbar\omega_{\text{LO}} = 0.153$  és 0.063 eV energiákon, amelyek együttesen  $\gamma = 0.3$  fs<sup>-1</sup> rátát adnak. A lézerimpulzus paramétereit a [55] kísérletben használtakkal azonosak:  $\omega_0 = 2.51$  fs<sup>-1</sup> és  $\tau = 2.3$  fs. Ez azt is jelenti, hogy a tipikus fotonenergia ötszöröse a tiltott sáv szélessége, azaz ebben az értelemben többfotonos effektusról lehet beszélni.

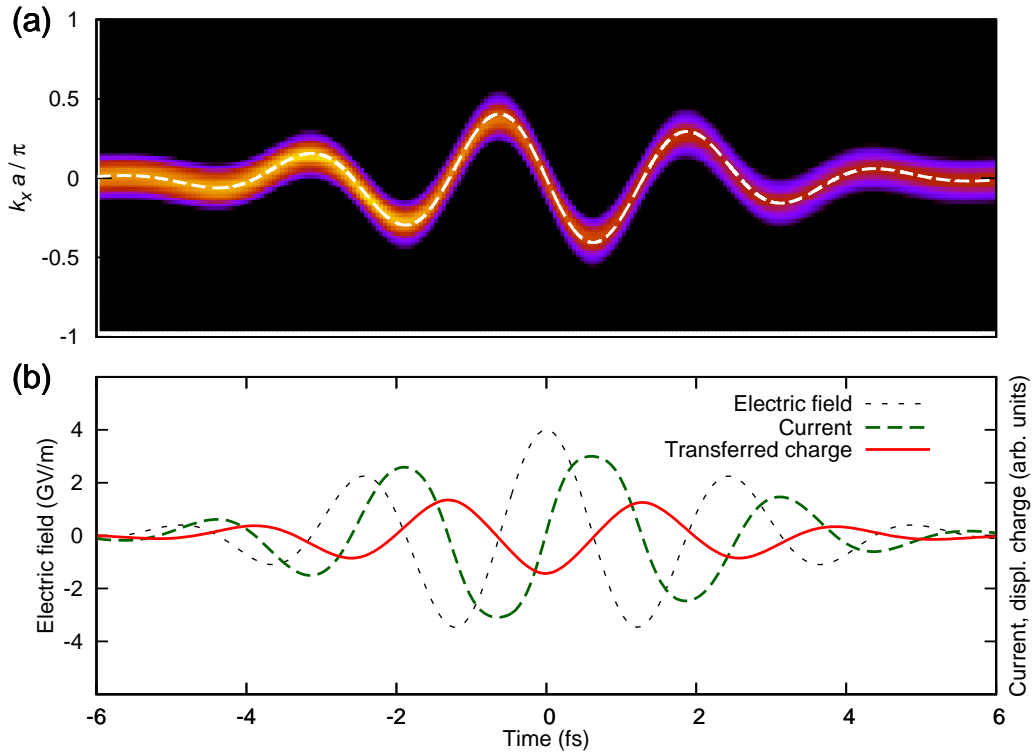


**43. ábra:** Lézertér hatásának kitett, kezdetben a  $\mathbf{k} = 0$  pontra centrált hullámcsomag mozgása gerjesztési és szórási folyamatok nélkül. a): a vezetési elektronok  $n_c(\mathbf{k}, t)$  eloszlása a  $k_y = 0$  vonal mentén. A szaggatott fehér vonal azt a „klasszikus trajektóriát” jelenti, amelyet az (5.6) egyenlet megoldásával kaphatunk. b): E hullámcsomagot mozgató  $\mathcal{E}_x(t)$  elektromos tér, a  $j_x(t)$  áramsűrűség és annak időintegrálja,  $Q(t)$ . A paraméterek:  $\mathcal{E}_0 = 4 \text{ GV m}^{-1}$ ,  $\varphi_{\text{CEP}} = 0$ ,  $\tau = 2.3 \text{ fs}$ .

## 5.2. A lézertér hatása

A teljes dinamika vizsgálata előtt érdemes az (5.2) egyenlet egyes részleteinek hatását elkülönítve vizsgálni. Elsőként a sávon belüli mozgást leíró tagot tekintjük. (Hasonló számításokat, egyetlen sávot feltételezve, a [164] munkában találhatunk.) Kezdeti állapotnak egy, a vezetési sávban lévő,  $k=0$  centrumú Gauss eloszlású populációt veszünk, és eltekin-tünk  $(\frac{\partial \rho}{\partial t})_{\text{exc}}$  és  $(\frac{\partial \rho}{\partial t})_{\text{scatt}}$  hatásától az (5.2) egyenletben. Ez azt jelenti, hogy a dinamikát az (5.4) kifejezés adja meg. A 43. ábra felső része mutatja ennek a kezdeti eloszlásnak a mozgását a  $k_y = 0$  síkban. (Mivel a gerjesztő tér  $x$  irányban polarizált, a  $k_x$  irányban történő elmozdulások a jelentősek.) Itt és a további kétdimenziós ábrákon a fekete szín jelenti az  $n_c(\mathbf{k}, t) = 0$  értéket, a növekvő értékeknek pedig rendre ibolya, vörös és sárga felel meg. A 43. ábrán látható dinamikát jól közelíti a „gyorsulási tétel” [163], amely szerint:

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = -\frac{e}{\hbar} \mathcal{E}(t). \quad (5.6)$$



**44. ábra:** Fononszórás hatása hullámcsomag mozgására. Az egyes paneleken ugyanaz látható, mint a 43. ábrán, csak most  $\gamma = 0.3 \text{ fs}^{-1}$  paraméterrel figyelembe vettük a fononok okozta szórási folyamatokat is. (Minden más paraméter megegyezik a 43. ábrához tartozókkal.)

A fenti egyenlet megoldását (azzal a kezdeti feltétellel, hogy a lézerimpulzus érkezése előtt  $k = 0$ ) a fehér szaggatott vonal szemlélteti az ábrán. Ezen a ponton érdemes megemlíteni, hogy szórási folyamatok hiányában a modell rendelkezik egy fontos skálázási tulajdonsággal: ha mind az  $\omega_0$  vivőfrekvenciát, mind pedig a lézertér amplitúdóját ugyanannyival szorozzuk meg, az lényegében azt jelenti, hogy új egységekben mérjük az időt. A fenti skálázás nem változtatja meg pl. azt, hogy mi az a maximális  $k_x$ , amelyet az (esetünkben inkoherens) hullámcsomag elérhet az időfejlődés során. Bár ezt a képet a szórási folyamatok árnyalják, azt azért leszűrhetjük, hogy alacsonyabb frekvenciájú gerjesztés esetén kisebb téramplitúdó is elegendő ugyanannak a maximális  $k_x$ -nek az eléréséhez. (Bizonyos határokon belül: ahogyan a bevezetőben szó volt róla, a statikus határesetben a szórás megakadályozza a „tetszőlegesen nagy” kvázimomentumok elérését.)

A sűrűségmátrixok ismeretében a kísérletileg meghatározható mennyiségeket is kiszámíthatjuk. SiO<sub>2</sub> esetén az adódik, hogy a makroszkopikusan mérhető áramhoz a meghatározó járulékot a vezetési sávbeli elektronok adják, azaz a

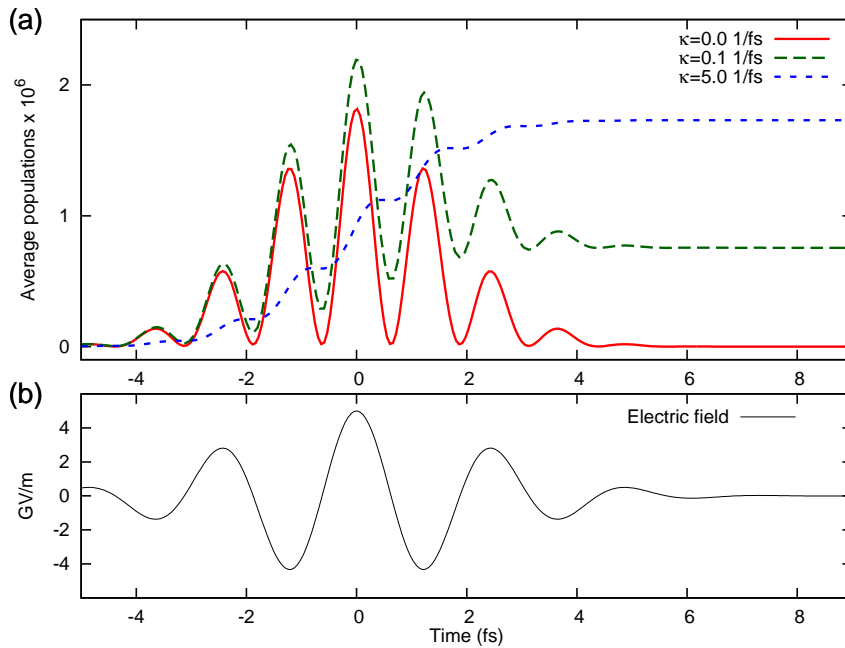
$$\mathbf{j}_c(t) = \int_{\text{BZ}} e v_c(\mathbf{k}) n_c(\mathbf{k}, t) d^2\mathbf{k} \quad (5.7)$$

kétdimenziós áramsűrűséget kell meghatároznunk, ahol az integrál az első Brillouin zó-

nán (BZ) fut végig, ez egyes sávokhoz kapcsolódó elektronsebességeket pedig  $\mathbf{v}_{v,c}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{v,c}(\mathbf{k})$  adja.

Az áramsűrűség  $x$  komponensének az időintegrálja szolgáltatja az egységnyi  $y$  irányú szakaszon átáramló töltést:  $Q(t) = \int_{-\infty}^t j_x(t') dt'$ . Az összes, a lézerimpulzus által elmozdított töltés ( $Q = Q(\infty)$ ) az, ami kísérletileg meghatározható [55]. A 43. ábra (b) részén szereplő „current” és „transferred charge” a fenti  $j_x$ -re és  $Q$ -ra utal.

A 43. ábra párjaként az elektron-fonon szórás szerepét a 44. ábra szemlélteti. Jól látható, hogy az elektromágneses impulzus jelentette időskálán  $j_x$  és  $Q$  alig érzik a realisztikusan erős szórásfolyamatok hatását. Ugyanakkor, ahogyan az ábra felső része mutatja,  $j_x(t)$  maximuma csökken az idő múlásával. Ennek a fő oka az, hogy az elektronok kiszóródnak az ábra által szemléltetett  $k_y = 0$  síkból.



**45. ábra:** Átlagos vezetési sávbeli  $\langle n_c \rangle = (\int d^2\mathbf{k})^{-1} \int n_c(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k}$  populációk különböző  $\kappa$  relaxációs ráták esetén. A  $\kappa = 5.0 \text{ fs}^{-1}$  esetben (szaggatott kék vonal),  $0.05 \langle n_c \rangle$  került ábrázolásra. Paraméterek:  $\mathcal{E}_0 = 5 \text{ GV m}^{-1}$ ,  $\varphi_{\text{CEP}} = 0$ ,  $\tau = 2.3 \text{ fs}$ ,  $\gamma = 0.3 \text{ fs}^{-1}$ .

### 5.3. Optikai gerjesztés

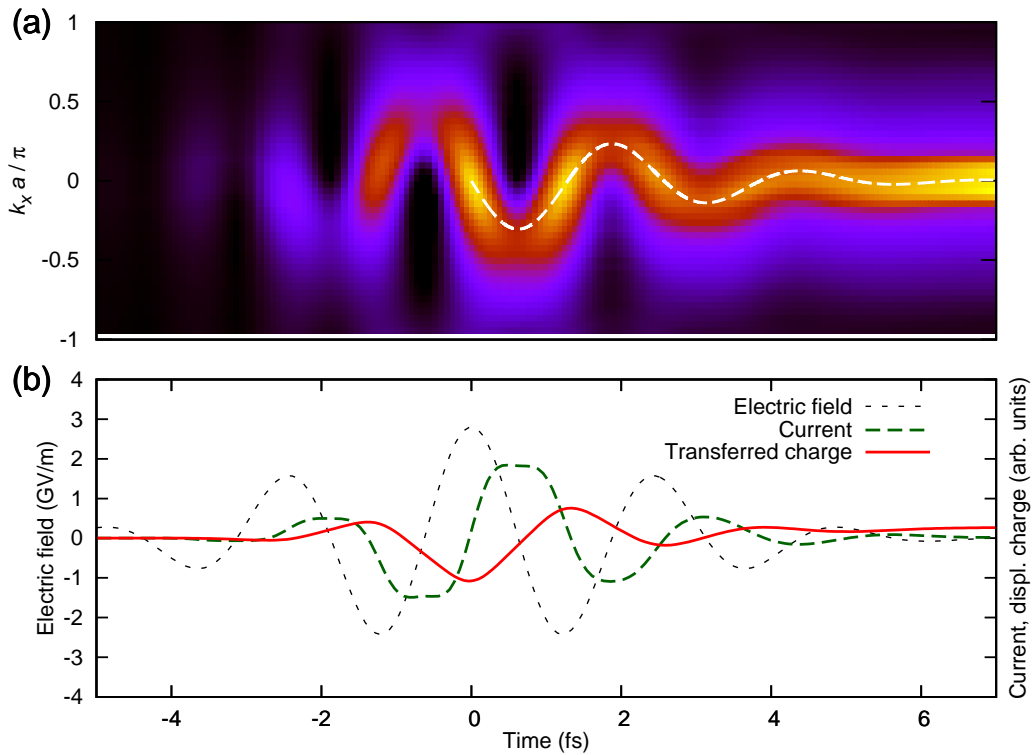
A korábbiaknak megfelelően a  $\text{SiO}_2$  tiltott sávja több mint ötször olyan széles, mint gerjesztő tér központi frekvenciájából számítható  $\hbar\omega_0$  fotonenergia. Ez a nagy különbség nem csupán a folyamatok leírása, megértése szempontjából fontos, hanem praktikus oka is van: Ha nem szeretnénk, hogy az intenzív lézertér károsítsa a mintát, hasznos, ha a térben tárolt energiának csak kis része adódik át a mintának, azaz kicsi az abszorpció. Az erős elhangolás miatt ez fennáll  $\text{SiO}_2$  esetére, ami a közeli infravörösben praktikusán átlátszó.



A modellünkben számított sávok közötti gerjesztést a 45. ábra szemlélteti. Ha  $\kappa = 0$ , az (5.3) egyenlet teljesen koherens viselkedést ír le, és a vezetési sáv populációja közel arányos a lézertér intenzitásával [169]. A másik véglet az, ha a fizikailag realiztikusnak tűnőnél jóval gyorsabb dekoherenciát teszünk fel, pl. a  $\kappa = 5 \text{ fs}^{-1}$  értéket írjuk be az (5.3) egyenletbe. Ekkor a vezetési sáv populációja monoton növekszik, fél optikai ciklusonként egy-egy lépcsőszerű, intenzív növekedéssel. SiO<sub>2</sub>-ben sajnos eléggé keveset lehet tudni a dekoherencia folyamatokról ezen az időskálán, ezért számításainkban a két véglet közötti  $\kappa = 0.1 \text{ fs}^{-1}$  értéket fogjuk használni.

## 5.4. A teljes dinamika

Ezek után megvizsgáljuk, hogy mi történik, ha az összes tagot figyelembe vesszük az (5.2) egyenlet jobb oldalán. A legizgalmasabb újdonság a korábbi esetekhez képest az, hogy ekkor a lézerimpulzus által elmozdított összes  $Q$  töltés nem lesz elhanyagolhatóan kicsiny. Itt a sávok közötti átmeneteknek jelentős a szerepe, mert azok nélkül – ahogyan a 43 és 44. ábrák is mutatják – ez a  $Q$  lényegében nulla.



**46. ábra:** A felső panelen a gerjesztés hatására létrejövő vezetési sávbeli elektronpopuláció dinamikája látható. Paraméterek:  $\mathcal{E}_0 = 3 \text{ GV m}^{-1}$ ,  $\varphi_{\text{CEP}} = 0$ ,  $\tau = 2.3 \text{ fs}$ ,  $\kappa = 0.1 \text{ fs}^{-1}$ ,  $\gamma = 0.3 \text{ fs}^{-1}$ . b) panel: A gerjesztő  $\mathcal{E}_x(t)$  elektromos tér, a  $j_x(t)$  áramsűrűség és annak időintegrálja,  $Q(t)$ .

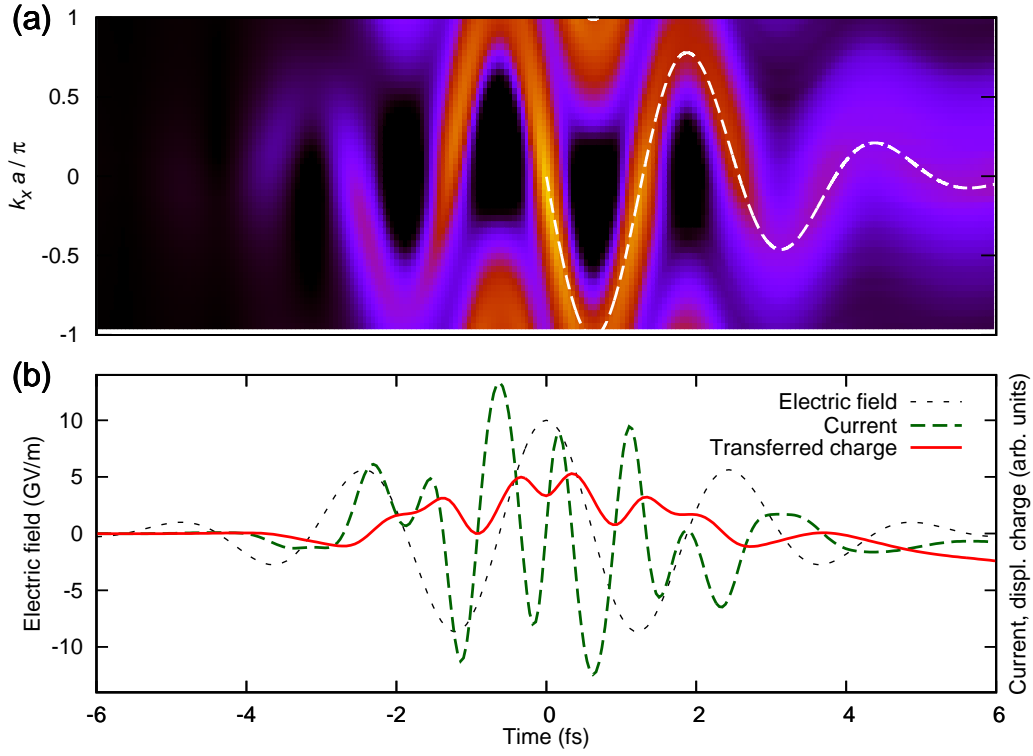
A 46. ábra a) panelje  $n_c(k_x, t)$  időfüggését mutatja a  $k_y = 0$  síkban, míg az  $x$  irányú

áramsűrűség és annak időintegrálja látható a b) panelen. Ez alapján maga az áram a gerjesztés elmúltával gyorsan nullához tart, ami a szórási folyamatok eredménye és azzal is jár, hogy  $Q$  egy idő után konstanssá válik, ami ebben az esetben egy véges érték (nem zéró). Az ábrán látható eredmények a „koszinuszimpulzus” esetét mutatják, azaz itt  $\varphi_{\text{CEP}} = 0$ . Hasonló eredményt kaphatunk a  $\varphi_{\text{CEP}} = \pi/2$  esetben is, azzal a nem elhanyagolható különbséggel, hogy abban az esetben  $Q$  hosszú távon sokkal kisebb abszolút értékhez konvergál.

Másszóval, azt kaptuk, hogy a lézerimpulzus által elmozdított, kísérletileg is mérhető összes töltés CEP függést mutat, hasonlóan a [55] eredményhez. Ennek az effektusnak a bizonyos szintű megértésében sokat segít, ha a kétdimenziós ábrákon szaggatott fehér vonallal jelölt „klasszikus trajektóriákat”, azaz az (5.6) egyenlet megoldásait tekintjük. Rövid impulzusok esetén, ha  $\varphi_{\text{CEP}} = 0$ , akkor az impulzus centrális csúcsa lényegesen nagyobb térerősséget jelent, mint bármely más csúcs. Ha feltételezzük, hogy a „domináns trajektóriák” azoktól az elektronoktól származnak, amelyek ennek a csúcshoz a környezetében kerültek a vezetési sávba, akkor a koszinuszimpulzus által elmozdított töltés előjelét helyesen tudjuk megjósolni. (A 43 és 44. ábrákkal összevetve azt mondhatjuk, hogy az a jelenség, hogy a 46. ábrán az impulzus elhaladta után a töltés nem nulla, szemléletesen azzal magyarázható, hogy a „domináns trajektóriákhoz” tartozó elektronok nincsenek kezdetből jelen vezetési sávban, és ez a „születésükből adódó” aszimmetria az oka annak, hogy oszcillációik nem átlagolódnak úgy ki, hogy  $Q$  eltűnjön.) Ha azonban  $\varphi_{\text{CEP}} = \pi/2$ , akkor két, azonos abszolút értékű, de ellentétes előjelű térerősséghez tartozó csúcs is megjelenik, így legalább két „domináns trajektóriát” figyelembe kell vennünk. Ugyanakkor ezen két trajektóriához tartozó áramok destruktív módon adódnak össze, ezzel magyarázható, hogy szinuszipulzus esetén  $Q \approx 0$ . A lézerimpulzus által elmozdított összes töltés CEP függésére a következőkben még visszatérünk a 48. ábra kapcsán.

Ha a gerjesztő tér amplitúdóját növeljük, akkor a szóban forgó hullámhossz esetén  $7 \text{ GV m}^{-1}$  csúcs térerősség környékén kapjuk azt, hogy a kezdetben a Brillouin zóna közepéhez ( $k=0$ ) tartozó elektron az impulzus hatására elérje, illetve át is lépje a zóna határát, hogy aztán – szemléletesen szólva – megjelenjen az átellenes oldalon. (Ezt úgy is szokás megfogalmazni, hogy az elektron Bragg-reflexiót szenved a zónahatáron, de bárhogy is tekintjük, lényegében arról van szó, hogy az egymástól reciproknak különböző (Bloch) elektronállapotok fizikailag nem különböztethetők meg egymástól.) Ezt a lézer időben változó erősségű és irányú elektromos tere által előidézett effektust – a statikus esettől való megkülönböztetés céljából – dinamikai Bloch-oszcillációnak (dynamical Bloch oscillation: DBO) nevezhetjük.

A 47. ábra azt mutatja, hogy  $10 \text{ GV m}^{-1}$  csúcstérerősség esetén a lézertér által a vezetési sávba gerjesztett elektronok még a realisztikusan erős ( $\gamma = 0.3 \text{ fs}^{-1}$ ) fonon-elektron szórás jelenlétében is akkora kváziimpulzust nyernek, ami túllépi az első Brillouin zóna határát, azaz dinamikai Bloch-oszcillációk jelennek meg. Érdekes módon, a gyengébb gerjesztő térhez tartozó  $\varphi_{\text{CEP}} = 0$  esettel ellentétben, a lézertér által elmozdított összes töltés most negatív (természetesen azonos CEP mellett). Ezt közelítőleg ismét a domináns „klasszikus trajektória” segítségével érhetjük meg: az ehhez a trajektóriához tartozó elektronok – bár sok időt töltenek abban tartományban, ahol  $k_x$  negatív – amikor a zónahatárhoz „közel tartózkodnak” a kis sebesség miatt nem szállítanak számottevő áramot.



**47. ábra:** Dinamikai Bloch-oszcillációk megjelenése nagyobb térerősségek esetén. Az egyes paneleken ugyanaz látható, mint a 46. ábrán, csak esetünkben  $\mathcal{E}_0 = 10 \text{ GV m}^{-1}$ . (Minden más paraméter megegyezik a 46. ábrához tartozókkal.)

Így az áramintegrál szempontjából legjelentősebb járulékot a trajektóriának az a része adja, amikor  $k_x > 0$ , ami az elektron töltését figyelembe véve negatív  $Q$ -t jelent.

Érdeemes még megjegyezni, hogy az áram időfejlődésében a 47. ábra b) részében olyan frekvenciakomponenseket is felfedezhetünk, amelyek lényegesen magasabbak, mint a gerjesztő mező középponti frekvenciája. Más paramétertartományban, de hasonló effektus az, ami a [50] munka szerzői szerint a tömbi szilárdtestekben megfigyelhető magasfelharmonikus-keltési folyamatokért felelős.

Végezetül térjünk vissza a lézertér által elmozdított összes töltés CEP függésére. A 48. ábra ezt mutatja a gerjesztő tér különböző csúcstérerősségeinek az esetére. Az ábrán a  $Q$  normált alakja látható, amit

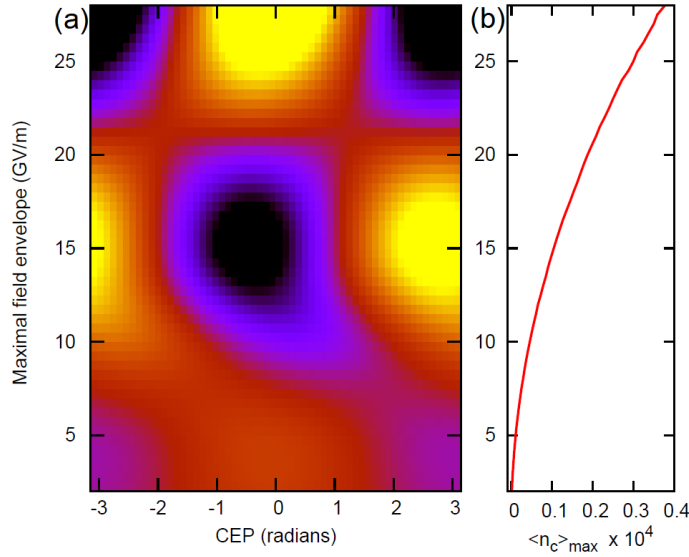
$$\tilde{Q}(\varphi_{\text{CEP}}, \mathcal{E}_0) = \frac{Q(\varphi_{\text{CEP}}, \mathcal{E}_0)}{\langle n_c \rangle_{\text{max}}(\mathcal{E}_0)} \quad (5.8)$$

definiál. Itt az  $\mathcal{E}_0$ -tól függő normálási faktor

$$\langle n_c \rangle_{\text{max}}(\mathcal{E}_0) = \max_t \left( \frac{\int_{\text{BZ}} n_c(\mathbf{k}, \mathcal{E}_0, t, \varphi_{\text{CEP}} = 0) d^2\mathbf{k}}{\int_{\text{BZ}} d^2\mathbf{k}} \right), \quad (5.9)$$

nem más, mint a maximális átlagos populáció a vezetési sávban, amit szintén ábrázolunk a 48. ábra b) részén.

Amit elsőként észrevehetünk ezen az ábrán, az az, hogy  $Q(\varphi_{\text{CEP}})$  szélsőértékei elmozdulnak ahogyan a gerjesztő lézerintenzitás változik. Az eredményeket analizálva megfigyelhetjük, hogy a dinamikai Bloch-oszcillációk először a  $7 \text{ GV m}^{-1}$  csúcstérerősségnél jelennek meg. Ennél gyengébb gerjesztő terek esetén  $Q(\varphi_{\text{CEP}})$  közel arányos  $\cos(\varphi_{\text{CEP}})$ -vel, és nagysága – ahogyan az várható is – növekszik a csúcstérerősséggel. Azonban ha a gerjesztés elegendően erős ahhoz, hogy dinamikai Bloch-oszcillációkat hozzon léte, akkor  $Q(\varphi_{\text{CEP}})$  maximuma elvándorol. Konkrétan,  $\mathcal{E}_0 = 15 \text{ GV m}^{-1}$  esetén a korábbi maximumok minimumokká válnak. Ez jól mutatja annak jelentőségét, amikor a domináns  $\mathbf{k}$  kváziimpulzus egyszer, illetve kétszer lépi át az első Brillouin zóna határát.



**48. ábra:** Az (5.8) egyenlettel adott normált összöltés a gerjesztő tér amplitúdójának és vivő-burkoló fázisának (CEP) függvényében (bal oldali ábra). A számítások során pusztán a gerjesztés amplitúdóját változtattuk, minden más állandó volt:  $\tau = 2.3 \text{ fs}$ ,  $\omega_0 = 2.51 \text{ fs}^{-1}$ ,  $\kappa = 0.1 \text{ fs}^{-1}$  és  $\gamma = 0.3 \text{ fs}^{-1}$ . b) panel: A  $\varphi_{\text{CEP}} = 0$  esethez tartozó maximális átlagos populáció a vezetési sávban:  $\langle n_c \rangle_{\text{max}}(\mathcal{E}_0)$  ((5.9) egyenlet).

Mindez azt jelenti, hogy az (5.2) egyenletben szereplő tagok fizikai jelentőségét is meg tudjuk határozni: ahhoz, hogy a lézerimpulzus által elmozdított összes töltés ne legyen nagyon kicsi, mind a többfotonos gerjesztés, mind pedig a lézertér által meghatározott sávon belüli dinamika szükséges, ami bizonyos térerősségek esetén dinamikai Bloch-oszcillációkhoz vezet. Az elektronoknak a LO fononokkal való kölcsönhatása bizonyos értelemben egy ezzel versengő folyamat, ami hosszú idő alatt ellehetetlenítheti a DBO-k észlelését. Számításaink szerint azonban karakterisztikusan néhány fs hosszúságú, a közeli infravörös tartományba eső lézerimpulzusok és kristályos  $\text{SiO}_2$  esetén nem ez a helyzet.

## 5.5. Magasfelharmonikus-keltés szilárdtestekben: az elektromágneses mérték szerepe

Az intenzív lézertér és szilárdtestek nemlineáris kölcsönhatásának egyik következménye a felharmonikusok megjelenése az emissziós spektrumban. A szilárdtest-felharmonikusok az attoszekundumos impulzusok generálásának egyik fontos lehetőségét jelentik, ami jórészt a szilárdtestek tipikus gázokhoz viszonyított sokkal nagyobb sűrűségének köszönhető. Érdekes megemlíteni, hogy az az ötlet, miszerint a közeli infravörös tartományba eső rövid, erős elektromágneses impulzusok koherens röntgen sugárzást [170] vagy esetleg attoszekundumos tartományba eső rövid impulzusokat generálhatnak [171], megelőzte az első kísérleteket [50], ahol felharmonikusokat detektáltak egészen a 25. rendig. Az [50] munkában széles tiltott sávú (3.2 eV) ZnO céltárgyat világítottak meg 3.25  $\mu\text{m}$  hullámhosszú impulzussal. (További részletek az [51] cikkben találhatóak.) Egy újabb érdekes kísérletben gáz és szilárd fázisú argon és kripton felharmonikusait hasonlították össze [52]. Ezekben a kísérletekben a gerjesztő intenzitás a roncsolási küszöb alatt volt, azaz a felharmonikusok keletkezéséért valóban a szilárdtest struktúra volt a felelős, ellentétben pl. azzal az esettel, amikor a gerjesztő tér hatására plazma jön létre a szilárdtest felület közelében, és ennek a plazmának a dinamikája hozza létre a felharmonikusokat [172].

A jelenségkör elméleti leírását tekintve a félvezető Bloch-egyenletek alkalmazása igen elterjedt, a [173] a cikkben pl. zárt formulát találtak ezzel a módszerrel a szerzők a sávok közötti átmenetek optikai cikluson belül [174] is időfüggő rátájára, illetve attoszekundumos impulzusok megjelenését is megjósolták ilyen módon [175]. A hagyományos félklasszikus modell mellett [176] a nyeregpontri közelítés szerepét is vizsgálták [177], ahogyan az indirekt tiltott sáv [178] fizikai jelentőségét is.

A külső tér a szilárdtestekben polarizációt és áramokat kelt, amelyek a Maxwell-egyenletek alapján forrásul szolgálnak a felharmonikusokat is tartalmazó másodlagos sugárzás számára. Az interpretáció során sokszor a két típusú (áram- és polarizációszerű) járulékot egymástól függetlenül vizsgálják, illetve úgy tekintik, hogy ez a két komponens fizikailag különválasztható.

A továbbiakban azt mutatjuk meg, hogy ez a különbségtétel nem független attól, hogy milyen elektromágneses mértéket használunk. A sávok közötti (polarizációszerű) és sávon belüli (áramszerű) komponensek összege által keltett másodlagos terek mértékfüggetlenek, ugyanakkor az, hogy melyik komponens milyen súllyal szerepel a folyamatban, az függ a mértékválasztástól. Ennek fényében fontos megjegyezni, hogy a fejezet első felében ismertetett eredmények az ún. hossz mértékben kerültek leírásra, azaz ott a fény-anyag kölcsönhatást leíró operátort  $-D\mathcal{E}$  alakúnak választottuk, ahol  $D$  a dipólmomentum  $x$  irányú komponense,  $\mathcal{E}$  pedig az  $x$  irányban polarizált elektromos térerősség.

Ahogyan a fejezet első felében is láttuk, még a kimondottan erős (0.3 1/fs rátával jellemezhető) szórás folyamatok sem befolyásolják számottevően a szilárdtest-fény kölcsönhatás dinamikáját a femtoszekundumos időtartományban. Ha a szórás folyamatok mellett a többrészecske korrelációkat is elhanyagoljuk (ahogyan jelenleg a legtöbb model teszi ezen az időskálán), akkor a legfontosabb, szorosan összefüggő [175], de logikailag azért szétválasztható fizikai folyamatoknak a következőket tekinthetjük:

1. Sávok közötti átmenetek (optikai gerjesztés),
2. Lézertér által meghatározott sávon belüli mozgás,
3. Dinamikai Bloch-oszcillációk.

(Ez azt jelenti, hogy a lényeg megragadása érdekében a 11. ábrán a szórási folyamatokat elhanyagoljuk.) A fenti 2. és 3. pont természetesen összefügg, lényegében a gerjesztő tér amplitúdója határozza meg, hogy dinamikai Bloch-oszcillációk megjelennek-e vagy sem. A klasszikus képpel analóg módon a külső tér az elektronok kváziimpulzusát változtatja meg. Kicsit pontosabban, a gyorsulási tétel alapján [163, 179] írhatjuk, hogy

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}(t)}{dt} = e_0 \mathbf{F}(t), \quad (5.10)$$

ahol  $\mathbf{F}(t)$  jelenti a külső elektromos teret. A továbbiakban hasznos, ha az elektron  $e_0$  töltését használjuk ( $e_0 = -e$ ). Dinamikai Bloch-oszcillációk akkor jönnek létre, amikor a külső tér által indukált mozgás amplitúdója elegendően nagy ahhoz, hogy az oszcillációk átlépjék az első Brillouin zóna határát [T7, 164].

A következőkben a [T8] munka alapján azt mutatjuk meg, hogy sávon belüli (intra-band) és sávok közötti (interband) dinamika kettéválasztása – bár nagyon intuitív – de nem független az elektromágneses mérték megválasztásától. Másszóval, a mértéktranszformációk (amelyek a természetesen a fizikailag releváns eredményeket nem változtathatják meg) összekeverik az inter- és intraband folyamatokat.

## 5.6. Modell és analitikus eredmények

Egy  $m$  tömegű elektron mozgását a szilárdtest környezetet reprezentáló periodikus potenciálban a

$$\begin{aligned} H(t) &= H_0 + H_{ext}(t) = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e_0 \mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) + e_0 \Phi \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + H_{ext}(t) \end{aligned} \quad (5.11)$$

Hamilton-operátor határozza meg, ahol tehát  $V(\mathbf{r})$  rácsperiodikus,  $H_{ext}(t)$  pedig a  $\Phi$  és  $\mathbf{A}$  potenciálokkal adott külső elektromágneses térrel való kölcsönhatást írja le. Fontos, hogy itt megjelenik a kinetikus impulzus  $\mathbf{p}_{kin} = m\mathbf{v} = \mathbf{p} - e_0 \mathbf{A}$ , ami nemnulla vektorpotenciál esetén különbözik a  $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$  kanonikus impulzustól.

Külső tér nélkül a rendszer sajátállapotaira igaz, hogy  $H_0 |n, \mathbf{k}\rangle = E_n(\mathbf{k}) |n, \mathbf{k}\rangle$ . Koordinátareprezentációban egy  $|n, \mathbf{k}\rangle$  energia sajátállapot  $\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) / \sqrt{\mathcal{V}}$  alakú, ahol  $n$  ezeknek a Bloch-állapotoknak a sávindexét jelenti, az  $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  függvények rácsperiodikusak, a normálás miatt megjelenő  $\mathcal{V}$  pedig a kristály térfogata. Ha a szokásoknak megfelelően periodikus határfeltételt szabunk, akkor a  $\mathbf{k}$ -tér nem lesz folytonos; diszkrét, ugyanakkor egymáshoz közel elhelyezkedő  $\mathbf{k}$  vektorok sorozatát nyerjük. A  $\mathbf{k}$ -függő  $E_n(\mathbf{k})$  sajátenergiák adják az egyes sávok diszperziós relációit.

A fénynek az elektronnal való kölcsönhatását megadó  $H_{ext}(t)$  operátor konkrét alakjának felírásához elektromágneses mértéket kell választanunk. A dinamika egzakt megoldása esetén természetesen a fizikai eredmények függetlenek ettől a választástól, ugyanannak kell adódnia minden korrektül felírt mértékben. A továbbiakban feltesszük, hogy a külső  $\mathbf{F}(t)$  mező térbeli változása rácsállandónyi távolságokon elhanyagolható, ami az infravörös tartományba eső gerjesztő impulzusok esetén nagyon jó közelítéssel fenn is áll. Ebben a dipólközelítésben gyakran használatos a sebességmérték ( $v$ ), amikor az  $\mathbf{F}(t)$  mező vektorpotenciálja  $\mathbf{A}^v(t) = -\int_{-\infty}^t \mathbf{F}(t')dt'$ , míg  $\Phi^v = 0$ . Ezzel a választással

$$H_{ext}^v(t) = \frac{1}{2m} [-2e_0\mathbf{p}\mathbf{A}^v(t) + e_0^2 A^{v2}(t)]. \quad (5.12)$$

Egy másik, szintén gyakori mérték a hossz mérték ( $l$ ), amelyben  $\mathbf{A}^l = 0$ ,  $\Phi^l = -\mathbf{r}\mathbf{F}(t)$ . E két választás között a  $\Lambda = -\mathbf{r}\mathbf{A}^v(t)$  mértékfüggvény teremt kapcsolatot. Hosszmértékben ebből a

$$H_{ext}^l(t) = -e_0\mathbf{F}(t)\mathbf{r} \quad (5.13)$$

kölcsönhatási operátor adódik.

(Érdeemes hangsúlyozni, hogy mindkét említett mérték esetén  $\nabla\mathbf{A} = 0$ , azaz ezek a Coulomb mértékek családjába tartoznak, ami a dipólközelítés következménye.) A továbbiakban a  $\mathbf{A}(t) \equiv \mathbf{A}^v(t)$  jelöléssel élünk. Fontos fejben tartani azt is, hogy a két mértékben érvényes elektron hullámfüggvények között egy tértől és időtől is függő unitér transzformáció teremt kapcsolatot:

$$\Psi^l(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t)\Psi^v(\mathbf{r}, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}e_0\mathbf{A}(t)\mathbf{r}\right]\Psi^v(\mathbf{r}, t). \quad (5.14)$$

A következőkben  $T_{imp}$  ideig tartó, impulzusszerű gerjesztés esetére fogunk koncentrálni, és feltesszük, hogy mind  $\mathbf{F}(t)$ , mind pedig  $\mathbf{A}(t)$  eltűnik a  $[0, T_{imp}]$  időintervallumon kívül. Ez azt is jelenti, hogy a két mérték egybeesik a  $t < 0$  és a  $t > T_{imp}$  esetben (amikor  $U(\mathbf{r}, t)$  az egység). Ezzel a választással a  $t > T_{imp}$  tartományon esetlegesen fellépő, a mértékváltással kapcsolatos nehézségek elkerülhetők [180–182].

A  $H_{ext}^g$  operátor (ahol a  $g$  index  $v$  illetve  $l$  lehetséges választására utal) jelenlétében már  $H_0$  sajátállapotainak az időfejlődése sem lesz triviális, ugyanakkor tetszőleges állapot kifejthető  $H_0$  sajátállapotainak bázisán, általában időfüggő együtthatókkal. Mivel  $H_{ext}^g$  mértékfüggő, a  $|\Psi^g(t)\rangle$  állapot kifejtési együtthatói szintén azok lesznek:

$$|\Psi^v(t)\rangle = \sum_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}(t)|n, \mathbf{k}\rangle, \quad |\Psi^l(t)\rangle = \sum_{n\mathbf{k}} b_{n\mathbf{k}}(t)|n, \mathbf{k}\rangle. \quad (5.15)$$

A két mértékhez tartozó kifejtési együtthatók között a következő kapcsolat áll fenn:

$$b_{n'\mathbf{k}'}(t) = \sum_{n\mathbf{k}} \langle n'\mathbf{k}' | \exp[-ie_0\mathbf{A}(t)\mathbf{r}/\hbar] |n, \mathbf{k}\rangle c_{n\mathbf{k}}(t). \quad (5.16)$$

A gerjesztő impulzus megérkezése előtt ( $t < 0$ ) feltehetjük, hogy a szilárdtest termikus egyensúlyban van. Ez a kezdőfeltétel általában nem írható le egyetlen tiszta kvantummechanikai állapottal, (egyrészecske) sűrűségoperátorokat kell alkalmaznunk, amelyek diagonálisak a perturbálatlan  $H_0$  sajátállapotaiban:

$$\rho(t=0) = \sum_{n\mathbf{k}} |n, \mathbf{k}\rangle \langle n, \mathbf{k}| f[E_n(\mathbf{k})], \quad (5.17)$$

ahol az egyes állapotok (projektorok) egymáshoz viszonyított statisztikai súlyát az  $f$  Fermi-függvény adja meg. Széles tiltott sávú félvezetők vagy szigetelők esetén szobahőmérsékleten  $f[E_n(\mathbf{k})]$  lényegében egységnyi a valenciasávban, illetve nulla a vezetési sávban. Ez azt jelenti, hogy jó közelítéssel írhatjuk, hogy  $\rho(t=0) = \sum_{\mathbf{k}} |n_0, \mathbf{k}\rangle \langle n_0, \mathbf{k}|$ , ahol  $n_0$  a valenciasávhoz tartozó index. A tiszta állapotokhoz hasonlóan, természetesen a sűrűségoperátor sem mértékfüggetlen, az (5.14) egyenlet megfelelője most  $\rho^l(t) = U(t)\rho^v(t)U^\dagger(t)$ , a sűrűségoperátor időfejlődését pedig a von Neumann-egyenlet adja meg:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho^g(t) = [H^g(t), \rho^g(t)]$ . Sebességmértékben, a dipólközelítés keretein belül, az  $A^2$ -tel arányos tag a Hamilton-operátorban felcserélhető  $\rho^v$ -vel, és a többi tag sem keveri össze azokat az állapotokat, amelyeknek különbözik a  $\mathbf{k}$  indexe. Ennek megfelelően:

$$\rho^v(t) = \sum_{nn'\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}(t) c_{n'\mathbf{k}}^*(t) |n, \mathbf{k}\rangle \langle n', \mathbf{k}|, \quad (5.18)$$

ahol  $\sum_n |c_{n\mathbf{k}}(t)|^2 = 1$ , és az együtthatók időfejlődése a von Neumann-egyenlet segítségével számítható. (A kezdeti feltétel  $c_{n\mathbf{k}}(0) = \delta_{n,n_0}$ .) Mivel a sűrűségoperátor nyoma ( $\text{Tr}$ ) megmarad, ez a választás annak normálásnak felel meg, hogy  $\text{Tr}\rho$  egyenlő az első Brillouin zónába eső valencia állapotok  $\mathcal{N}$  számával. Érdeemes megjegyezni, hogy ez a módszer nem ad abszolút térerősségeket a magasrendű harmonikusokra, az [E15] munkával ellentétben nem kapunk pontos „fotonszámot” ezekben a módusokban, csak az egyes harmonikusok relatív súlyát tudjuk kiszámítani. Ezért választhatjuk meg a normálási feltételt szabadon.

## 5.7. A magasrendű harmonikusok létrejötte

A magasrendű harmonikus sugárzás forrásai a mozgó töltések, más szóval az időfüggő áramsűrűség várható értékét kell kiszámítanunk:

$$\mathbf{J} := \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \text{Tr} [\rho^g \mathbf{p}_{kin}] = \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \text{Tr} [\rho^g (\mathbf{p} - e_0 \mathbf{A}^g)]. \quad (5.19)$$

Itt érdemes hangsúlyozni, hogy bármilyen másodlagos sugárzás esetén a  $\mathbf{p}_{kin}$  impulzus jelenik meg forrásként, ami annak köszönhető, hogy a kanonikus impulzussal ellentétben  $\mathbf{p}_{kin}$  közvetlen kapcsolatban áll a gyorsulással [183].

Tekintsük most a fenti várható értéket az eddig tárgyalt két elektromágneses mértékben. Sebességmértékben azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \sum_{n\mathbf{k}} |c_{n\mathbf{k}}(t)|^2 \{ \hbar \mathbf{k} - e_0 \mathbf{A}(t) \} \\ &\quad - i\hbar \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}}^*(t) c_{n'\mathbf{k}}(t) \int_{\Omega} u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla u_{n',\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

ahol  $\Omega$  az elemi cella térfogatát jelöli. Hosszmértékben  $\mathbf{A}^l=0$ , azaz:

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \text{Tr} [\rho^g \mathbf{p}_{kin}] = \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \sum_{n\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} |b_{n\mathbf{k}}(t)|^2 \\ &\quad - i\hbar \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \sum_{n,n',\mathbf{k}} b_{n\mathbf{k}}^*(t) b_{n'\mathbf{k}}(t) \int_{\Omega} u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla u_{n',\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (5.21)$$



Természetesen az eredménynek minden mértékben azonosnak kell lennie, ugyanakkor ez csak a teljes kifejezésre áll fenn az (5.20) és (5.21) egyenletekben, és semmiképpen sem a jobb oldalakon álló tagokra külön-külön.

Az (5.17) egyenlettel adott kezdeti feltételt felidézve, látható, hogy minden valencia-sávbeli állapot (amelyek különböző  $\mathbf{k}$  indexekhez tartoznak) ad járulékot  $\mathbf{J}$ -hez. Ugyanakkor ezen állapotok között nincs kvantummechanikai interferencia az időfejlődés során, azaz a termikus egyensúlyt leíró (5.17) kezdeti feltételt úgy is felfoghatjuk, hogy a kezdeti Bloch-állapotok relatív fázisa véletlenszerű.

Az eddigiek fényében vonzóznak, intuitívnak tűnik, hogy az (5.20) és (5.21) egyenletekben átcsoportosítsuk a tagokat, és a makroszkopikus áramot jelentő

$$\mathbf{j}^g = \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \sum_{n\mathbf{k}} |c_{n\mathbf{k}}^g(t)|^2 \langle n, \mathbf{k} | \mathbf{p}_{kin} | n, \mathbf{k} \rangle \quad (5.22)$$

részt sávon belüli (intraband) járuléknak, míg a polarizációszerű

$$\dot{\mathbf{P}}^g = \frac{e_0}{\mathcal{V}m} \sum_{n \neq n'\mathbf{k}} [c_{n\mathbf{k}}^g(t)]^* c_{n'\mathbf{k}}^g(t) \langle n, \mathbf{k} | \mathbf{p}_{kin} | n', \mathbf{k} \rangle \quad (5.23)$$

részt sávok közötti járuléknak tekintjük. Valóban,  $\langle n, \mathbf{k} | \mathbf{p}_{kin} | n, \mathbf{k} \rangle / m$  a szokásos módja annak, hogy kiszámítsuk az  $n$ -edik sávban a  $\mathbf{k}$  pont környékén a Bloch-elektronok sebességét. (Itt és a továbbiakban – a 2. fejezet jelöléseivel szemben – a belső szorzatokat a hagyományos módon, valós térbeli integrálként értjük.) Az (5.22) egyenletben  $\mathbf{j}^{(g)}$  tehát lényegében ezeknek a sebességeknek a megfelelő súlyokkal vett összege. Az is ismeretes [166], hogy  $\langle n, \mathbf{k} | \mathbf{p} | n, \mathbf{k} \rangle$  kiszámítható úgy is, mint  $\nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) m / \hbar$ , azonban az (5.20), (5.21) egyenletek a sávok közötti és sávon belüli áramokat azonos módon kezelik. Természetesen  $\mathbf{J} = \mathbf{j}^g + \dot{\mathbf{P}}^g$  mértékfüggetlen, de ez nem feltétlenül áll  $\mathbf{j}^g$ -re és  $\dot{\mathbf{P}}^g$ -ra külön-külön.

Tekintsük a (5.16) relációt, amely a  $c_{n\mathbf{k}}(t)$  és  $b_{n\mathbf{k}}(t)$  kifejtési együtthatókat kapcsolja össze. Tegyük fel, hogy a megoldottuk a dinamikát sebességmértékben (azaz ismertek a  $c_{n\mathbf{k}}(t)$  időfüggő együtthatók), és transzformáljuk át az eredményt hossz mértékbe. Az adódik, hogy

$$\begin{aligned} b_{n'\mathbf{k}'}(t) &= \sum_{n\mathbf{k}} \langle n'\mathbf{k}' | \exp[-ie_0\mathbf{A}(t)\mathbf{r}/\hbar] | n, \mathbf{k} \rangle c_{n\mathbf{k}}(t) \\ &= \sum_{n\mathbf{k}} \int_{\mathcal{V}} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}-e_0\mathbf{A}(t)/\hbar+\mathbf{k}')} u_{n',\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} c_{n\mathbf{k}}(t) \\ &= \sum_n \int_{\Omega} u_{n',\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} c_{n\mathbf{k}(t)}(t), \end{aligned} \quad (5.24)$$

ahol  $\mathbf{k}(t) = e_0\mathbf{A}(t)/\hbar - \mathbf{k}'$ . Ennek az eredménynek az első következménye az, hogy amennyiben a sebességmértékbeli sűrűségoperátor diagonális a  $\mathbf{k}$  indexben (ami az (5.17) egyenlet által adott kezdeti feltételek esetén a teljes időfejlődés alatt fennáll), akkor ugyanez igaz lesz hossz mértékben is, csak itt a  $\mathbf{k}$  értékek  $e_0\mathbf{A}(t)/\hbar$ -vel eltolódnak. (Ez teljesen összhangban van az (5.10) egyenlettel.) Ezzel szemben, mivel az  $u_{n,\mathbf{k}}$  függvények csak azonos  $\mathbf{k}$  indexek esetén ortogonálisak, az (5.24) egyenlet utolsó sorában szereplő integrál nem lesz arányos  $\delta_{nn'}$ -vel.

Ez a legutóbbi észrevétel szorosan kötődik ahhoz, a  $\mathbf{J}$  áram  $\mathbf{j}$  és  $\dot{\mathbf{P}}$  komponensekre bontása nem egyértelmű. A sávon belüli áramot leíró  $\mathbf{j}$  esetén egyrészt

$$\mathbf{j}^v = \frac{e_0}{\mathcal{V}_m} \sum_{n\mathbf{k}} |c_{n\mathbf{k}}(t)|^2 \langle n, \mathbf{k} | \mathbf{p} | n, \mathbf{k} \rangle - \frac{\mathcal{N}e_0^2}{\mathcal{V}_m} \mathbf{A}, \quad (5.25)$$

ahol  $\mathcal{N} = \text{Tr}\rho$ . Másrészt

$$\mathbf{j}^l = \frac{e_0}{\mathcal{V}_m} \sum_{n\mathbf{k}} |b_{n\mathbf{k}}(t)|^2 \langle n, \mathbf{k} | \mathbf{p} | n, \mathbf{k} \rangle. \quad (5.26)$$

Az (5.25) egyenlet utolsó tagját egyedül a vektorpotenciál időfüggése határozza meg, míg a  $c_{n\mathbf{k}}$  és  $b_{n\mathbf{k}}$  kifejtési együtthatók közötti viszony részben az anyagszerkezettől is függ. Ez azt jelenti, hogy ha egy adott anyag és időfüggő vektorpotenciál esetén  $\mathbf{j}^l(t)$  és  $\mathbf{j}^v(t)$  azonos lenne, akkor sem lenne fizikai oka annak, hogy ugyanez fennálljon pl. egy másik anyag esetében is. Más szavakkal, a sávon belüli és sávok közötti komponensek, amelyek összege a mértékfüggetlen  $\mathbf{J}$  forrástagot adja, csak úgy határozhatók meg, ha egy konkrét elektromágneses mértékre hivatkozunk.

## 5.8. Numerikus eredmények egydimenzióban

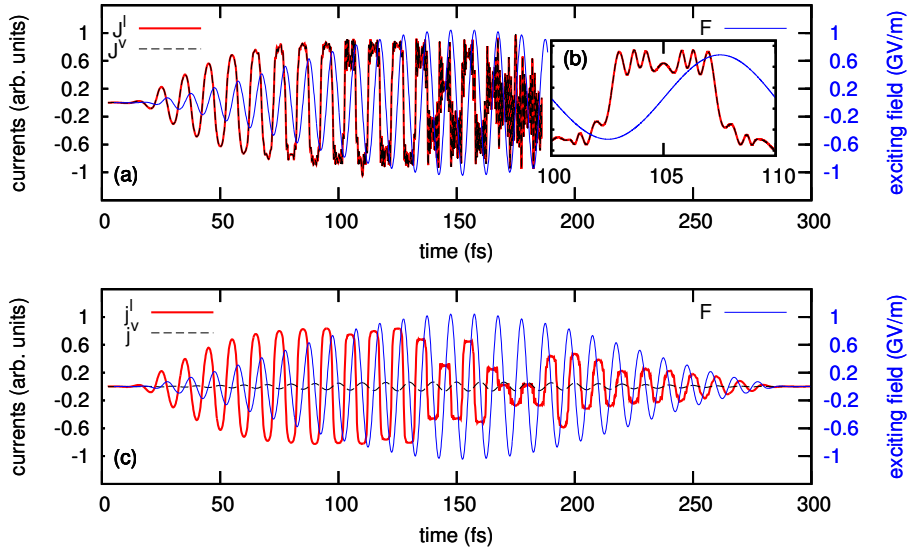
A teljesség kedvéért tekintsünk egy numerikus, egydimenziós modellt is, ahol a periodikus láncsal párhuzamosan polarizált elektromágneses impulzus kelt felharmonikusokat. Az impulzushoz tartozó vektorpotenciál egyetlen nemeltűnő komponense legyen

$$A(t) = A_0 \sin^2 \left( \frac{\pi t}{T_{imp}} \right) \cos(\omega t), \quad (5.27)$$

ha  $t$  a  $[0, T_{imp}]$  intervallumba esik, és nulla egyébként. Ehhez a dipólközelítésben felírt  $A(t)$ -hoz tartozó elektromos teret jelölje  $F(t)$ . (Ezt természetesen úgy kell érteni, hogy a fenti  $A$  sebességmértékben érvényes, és  $F(t) = -dA/dt$ , de az így számolt és mértékfüggetlen  $F(t)$ -t használjuk majd a hossz mértékben kivitelezett számításokban is.) Az [50] kísérlethez hasonlóan sokciklusú, közép infravörös tartományba eső gerjesztést tekintünk. Azaz a 49. ábrán szemléltetett eredmények esetén  $\lambda = 3\mu\text{m}$  ( $\omega = 0.2\pi$  1/fs) és  $T_{imp} = 300$  fs. A gerjesztő tér maximális térerőssége  $F_0 = 1.0$  GV/m.

A számításokhoz egy olyan modellpotenciált használunk, amely esetén a külső tér nélküli probléma megoldásakor a (direkt) tiltott sáv szélessége 3.2 eV, hasonlóan a kísérletekben is használt [50] ZnO mintához. A Bloch-állapotok meghatározása után a dinamika számítható,  $j^g$  és  $P^g$  (amelyek az (5.22) és (5.23) egyenletekkel adott mennyiségek egydimenziós megfelelői) időfüggése is megkapható, és ugyanez igaz az összegükre,  $J^g$ -re is. Ez utóbbi esetben a felső index arra emlékeztet minket, hogy a különféle, részben numerikus közelítések eredményeként elképzelhető, hogy – fizikailag helytelenül –  $J$  is mértékfüggőnek adódik.

Ahogy a 49. ábra alsó panelje mutatja,  $j^v$  és  $j^l$  időfüggése észrevehetően különböző. A teljes  $J^v$  és  $J^l$  sokkal kevésbé különböznek egymástól, sőt, azt mondhatjuk, hogy a 49. ábrán bemutatott, 8 sáv figyelembe vételével számolt görbék a numerikus eljárásból



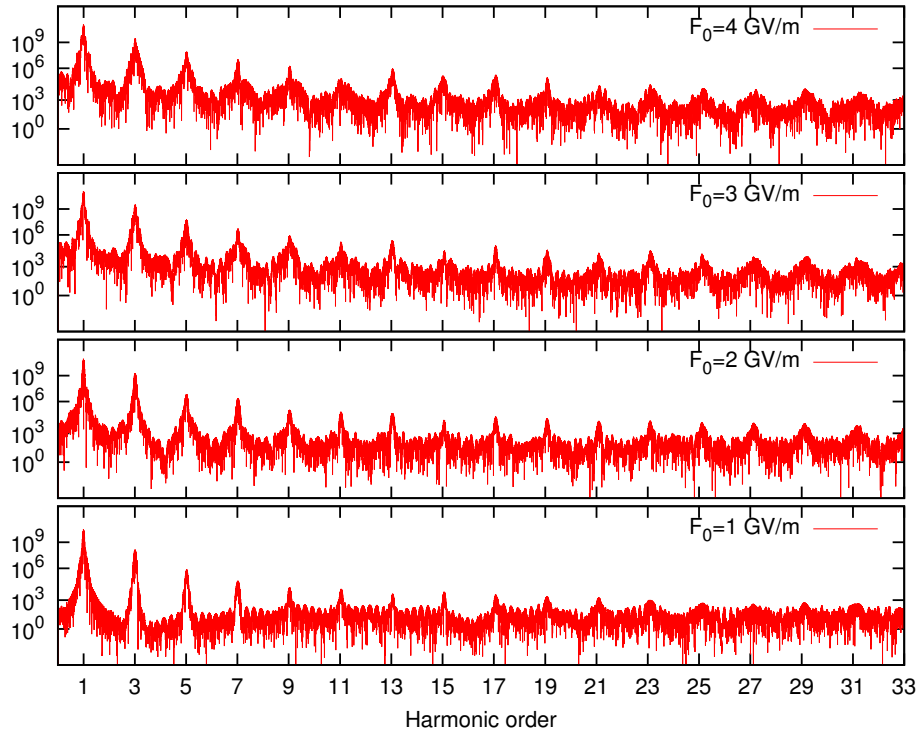
**49. ábra:** A teljes  $J$  áram (mindkét vizsgált mértékben) és a gerjesztő impulzus elektromos tere az idő függvényében (fölül). b) panel: egyetlen csúcson közelről. c) panel: A sávon belüli  $j$  áramok. Az egyszerűség kedvéért a kezdeti állapot  $\rho_0 = |n_0, 0\rangle\langle n_0, 0|$ . A gerjesztő impulzus központi hullámhossza  $\lambda = 3\mu\text{m}$ .

elvárható pontosságon belül alátámasztják a korábbiakban kapott eredményeket. (Érdeemes hangsúlyozni, hogy mindez nem függ attól, hogy konkrétan milyen modellpotenciált is választottunk.)

A magasrendű felharmonikusok spektrumát úgy kaphatjuk meg, hogy a másodlagos sugárzás forrásának,  $J(t)$ -nek kiszámítjuk a  $J(\omega)$  Fourier transzformáltját, és  $|J(\omega)|^2$ -et ábrázoljuk  $\omega$  függvényében, a sok nagyságrendnyi változás miatt jellemzően logaritmikus skálán. Érdeemes felidézni, hogy az (5.17) egyenlettel adott kezdeti feltétel esetén a különböző  $k$  indexekhez tartozó állapotok kvantummechanikai értelemben nem interferálnak az időfejlődés során, de természetesen a teljes HHG jel minden ilyen állapot hozzájárulását tartalmazza. A magasrendű felharmonikus sugárzás ezen elemi alkotóelemei – mint klasszikus elektromos terek – természetesen már interferálnak, még akkor is, ha – ahogyan az várható is – a spektrumot lényegében a sávszélhez ( $k = 0$ ) közeli állapotok dinamikája határozza meg.

A spektrumok számításánál a realiztikus eredmény érdekében a szilárdtestekben elkerülhetetlenül jelenlévő szórásfolyamatokat is érdemes figyelembe venni (erre mutat például ezen fejezet előző részében tárgyalt fononszórás). Ebben nagy segítségünkre van, hogy a modellben szereplő dinamikai mennyiségek nem tiszta kvantummechanikai állapotok, hanem sűrűségmátrixok: amellyel, hogy segítségükkel kényelmesen megfogalmazhatjuk a kezdeti állapotot (ezt adja meg az (5.17) egyenlet), a von Neumann-egyenlet kibővítésével fenomenologikus szinten a különféle dekoherencia mechanizmusokat is figyelembe tudjuk venni. A spektrumokat szolgáltatató számításainkban ezek közül a Bloch-bázisban diagonális folyamatok azt a jelenséget írták le, hogy az elektronrendszert környezete az alacsonyabb energiájú állapotok felé hajtja, míg az offdiagonálisak a kvantummechanikai

koherencia fokozatos eltűnéséért felelősek. Az 50. ábrán bemutatott eredmények esetén diagonális ráta  $\gamma_d=0.1$  1/fs, míg a jellemzően nagyobb offdiagonális ráta  $\gamma_{od}=0.3$  1/fs. Ezen az ábrán a magasrendű felharmonikusok spektrumát láthatjuk különböző  $F_0$  csúcstérerős-ségek esetén. Technikai szempontból érdemes megjegyezni, hogy ha konvergens eredményt szeretnénk elérni, akkor a figyelembe veendő sávok száma erősen függ  $F_0$ -tól: tapasztalataink szerint  $F_0 = 1$  GV/m környékén 8 sáv figyelembevétele elegendő, míg erősebb terek esetén (az 50. ábrán mutatott esetekben) tíznél is többre van szükség. Érdemes a [184] munkát tanulmányozni ennek a jelenségnek a részletes analíziséért.



**50. ábra:** HHG spektrumok (önkéntes egységekben) különböző  $F_0$  csúcstérerős-ségek esetén. A gerjesztő impulzus központi hullámhossza  $\lambda = 3\mu\text{m}$ , az impulzushossz  $T = 250$  fs. (A részleteket az (5.27) egyenlet tartalmazza.) A kezdőállapotot (5.17) adja meg. A frekvenciát  $\omega = 2\pi c/\lambda$  egységekben mérjük.

Az 50. ábrán tisztán látható a magasrendű felharmonikusok megjelenése, és a kísérleti tapasztalatokkal [50] egyezően az is észrevehető, hogy páros rendű (azaz a gerjesztő frekvencia 2,4,6 stb.-szorosához tartozó) felharmonikusok hiányoznak a spektrumból. Nagyon magas frekvenciákon a felharmonikusok eltűnnek, esetünkben beleolvadnak a kontinuumba. Ennek a „levágásnak” (letörésnek, cutoff) a frekvenciája  $F_0$  növelésével szintén növekszik. Egy adott kiindulási állapotra a levágási frekvencia becsülhető [57], de esetünkben különböző kezdőállapotokra (ami különböző  $k$ -függő tiltott sávokat jelent) más és más eredményt kapunk, ami pl. a gázok esetéhez képest kevésbé éles levágási frekvenciát jelent. Az egyes harmonikus csúcsok magasságának  $F_0$  függése szintén a mérésekkel kvalitatív egyezést mutató eredményt ad.

Visszatekintve az ebben a fejezetben megfogalmazott eredményekre, az látszik, hogy az alapvető ok, amiért nem lehet mértékfüggetlenül beszélni a sávok közötti illetve az egyes sávokon belüli dinamikáról az az, hogy az egyes mértékekhez tartozó állapotok nem azonosak. Érdekes felidézni azt az esetet, amikor egyetlen atom hat kölcsön az elektromágneses térrel. Ekkor, még a dipólközelítés keretein belül is, a mértékválasztástól függően az állapotok „magukban foglalhatják a kölcsönhatás bizonyos részét” („may incorporate some interaction with the field” [185]). Ugyanakkor optikai frekvenciákon és az 1 GV/m nagyságrendjébe eső térerősségek esetén, a  $\exp(-ie\mathbf{A}\mathbf{r}/\hbar)$  kifejezésben megjelenő fázisfaktor majdnem konstans az atomi hosszúságskálán, változása nagyságrendileg  $\pi/100$ , azaz ez az effektus elég gyenge. Ezzel ellentétben szilárdtestek esetén a kölcsönhatási tartomány jóval nagyobb, és a magasfelharmonikus-keltés intenzitástartományában a jelenség nem hanyagolható el. Másrészt, gyengébb terek esetén, a „mértékáram” (gauge current, azaz a második tag az (5.25) egyenletben) elhanyagolhatóvá válik, így a különböző mértékekben kapott eredmények kevésbé különböznek.

Hangsúlyozni kell, hogy a fenti eredmények *a kölcsönhatás időtartama alatt* érvényesek. A gerjesztő impulzus elhaladtával (azaz amikor  $\mathbf{A}$  ismételen nullává válik), a  $\mathbf{J} = \mathbf{j} + \dot{\mathbf{P}}$  felbontás egyértelmű lesz újra, és pl.  $\mathbf{j}$ , mint makroszkopikus áram, mérhető.

## 5.9. Összefoglalás

Elsőként a jelenségek kvalitatív leírására koncentrálna rövid lézerimpulzus és tömbi dielektrikum céltárgy kölcsönhatását vizsgáltuk. Az egyszerűség kedvéért pusztán két sávot vettünk figyelembe, amelyek közötti tiltott sáv szélessége ötszöröse volt a karakterisztikus fotonenergiának. Kétdimenziós modellünk az ilyen értelemben vett többfotonos gerjesztés mellett a sávokon belüli dinamikát és a longitudinális fononok hatását vette számításba. Azt tapasztaltuk, hogy ebben a paramétertartományban a néhány optikai ciklussal rendelkező gerjesztés hullámformája erős hatással van a külső tér által elmozdított összes töltés nagyságára és előjelére. E töltés CEP függése szinuszos jellegű, és a szélsőértékek helyét a maximális gerjesztő térerősség határozza meg. A jelenség háttérben dinamikai Bloch-oszcillációk állnak, amelyek még realisztikusan erős relaxációs folyamatok esetében is fellépnek.

Emellett a tömbi szilárdtestekben létrehozott magasfelharmonikus-keltés kapcsán megvizsgáltuk, hogy hogyan is kell értelmezni a háttérben zajló folyamatokról alkotott fizikai képet. Egyelektron közelítést használva, a fény-anyag kölcsönhatás leírására szolgáló két, gyakran használt elektromágneses mértéket tanulmányoztunk. A sávok közötti és a sávokon belüli áramokat azonos módon kezeltük. Mind analitikus, mind pedig numerikus úton azt kaptuk, hogy bármennyire intuitív is a teljes áram szétbontása a fenti két komponensre, ezzel a szétbontással óvatosan kell bánni, mert felhasználásával különböző mértékeket választva különböző eredményeket kapunk.

## 5.10. Lézerrel keltett áramokkal kapcsolatos eredmények hatása

Szilárdtestek és rövid, intenzív lézerimpulzusok kölcsönhatása kapcsán még korai lenne azt mondani, hogy létezik egy olyan kiforrott modell, amely kvantitatívan is pontosan írná le pl. a magasfelharmonikus-keltés folyamatát. Sőt, ahogyan ebben a fejezetben láttuk, még koncepcionális félreértések is előfordulnak ezen a területen. Sokáig a kvantumkémiai programcsomagok fejlesztésének az iránya is elkerülte ezt a területet, bár talán ez a helyzet változóban van. Sokat mond, hogy 2017. novemberében a *Phys. Rev. A*-ban jelent meg az a cikk [186], amely rámutatott arra, hogy a sávok közötti átmeneti dipólmomentum mátrixelemek fázisa (amit több kvantumkémiai program ki sem számol) nem hanyagolható el, fontos szerepe van a HHG spektrumok létrejöttében. (Egyetlen atom egyetlen átmenete esetén ez a fázis valóban nem lényeges, a mátrixelem választható valósnak, de sok átmenet esetén a relatív fázisok természetesen fontosak.)

Konkrétan az ebben a fejezetben ismertetett eredményekkel kapcsolatban túlzás lenne azt állítani, hogy gyökeresen és azonnal megváltoztatták a lézerfizikus közösség gondolkodásmódját a inter- és intraband áramokkal kapcsolatban, ugyanakkor mindenképpen elindítottak egyfajta diszkussziót. A hivatkozások között van pl. egy P. Corkum csoportjából érkező javaslat [187], amelynek az a lényege, hogy ha ragaszkodunk a kétféle áram szétválasztásához, akkor válasszunk egy meghatározott mértéket (konkrétan a hossz mértéket a vektorpotenciál hiánya miatt), és az abban kapott eredményeket használjuk más mértékekben is, a megfelelő mértéktranszformáció felhasználásával. Fontos független eredmény továbbá, hogy a sávon belüli és sávok közötti áram szétválasztásának mértékfüggő mivolta nem csupán egyrészecske képben igaz [188].

Emellett az ebben a fejezetben bemutatott analitikus számítások alátámasztására kidolgozott numerikus modell önmagában is hasznosnak bizonyult, kisebb változtatásokkal alkalmas volt arra, hogy kvalitatív értelmezést nyújtson a szegedi ELI-ALPS intézetben mért első kísérleti eredmények egyikéhez [E21].

## Összefoglalás, kitekintés

Ebben a dolgozatban a 2005. és 2017. között elért jelentősebb eredményeimet foglaltam össze. Az időszak első felében főleg külső térrel kontrollált transzportfolyamatok leírásával foglalkoztam, majd érdeklődésem az erős lézerterekkel előidézett jelenségek felé fordult.

A nanométeres mérettartományba eső, szilárdtest rendszerekben konstruált áramkörök tanulmányozása során arra a tartományra koncentráltam, amikor az elektronok mozgása koherens, a transzport nem diffúzív jellegű. Ilyenkor a kvantummechanikai interferencia fontos szerepet játszik a vezetési jelenségek létrejöttében. Megfelelő anyagok esetén erre az interferenciára az elektronok spinje is hatással van, és ez a hatás külső elektromos térrel befolyásolható. Ezt a kísérletileg is tapasztalt jelenséget használva, kvantumgyűrűk illetve azok hálózatának a használatával több olyan elrendezést is javasoltunk, amely érdekes spintranszformációkat hajt végre. Ezek a javaslatok részben a kvantummos információfeldolgozással voltak kapcsolatosak (kvantummos logikai kapuk), de fundamentális effektusok lehetséges realizációjáról is beszélhetünk (a Stern-Gerlach berendezés analogonja).

Emellett olyan anyagok vizsgálatával is foglalkoztam, amelyek esetén a mágneses viselkedésért felelős építőelem molekulaméretű. Ezeknek a molekuláris mágneseknek fontos tulajdonsága, hogy mágnesezettségük külső térrel történő befolyásolása során kvantummechanikai effektusok lépnek fel. Pontosabban a spin szabadsági fokra ható dekoherencia mechanizmusok és a kvantummos viselkedés érdekes keverékéről van szó, ahogyan azt az általunk elért eredmények is mutatják.

Nagyintenzitású lézerterekkel kapcsolatban főként azt vizsgáltam, hogy a lézer által az anyagban keltett áramok hogyan írhatók le, és mi módon hozzák létre a magas rendű felharmonikusokat. Első ilyen jellegű munkánkban a dinamikai Bloch-oszcillációk szerepére világítottunk rá. Kissé hátralépve, a szokásos interpretációt bizonyos mértékig kritikusan szemlélve, ezután megmutattam, hogy a lézertér által keltett áramok sávon belüli és sávok közötti részre való felbontása függ attól, hogy milyen elektromágneses mértékben írjuk le a folyamatot.

Ezekből a témákból jelenleg is foglalkozom az elektrontranszport leírásával, de most már főként a dinamikus esetre koncentrálna. Ennek tipikus példája az, amikor egy lézerimpulzus kelt nemegyensúlyi töltéeloszlást, ami aztán – mint egy lokális zavar – tovaterjed az anyagban, mérhető áramot okozva. Ennek az áramnak magának az időfüggése jellemzően nem detektálható, de időintegrálja, azaz a lézerimpulzus által elmozdított összes töltés, már mérhető. Jelenleg folyó kutatásaink [E18] arra irányulnak, hogy ez a töltés milyen kapcsolatban van a gerjesztő lézerimpulzus paramétereivel, felhasználható-e esetlegesen azok meghatározására.

Ennek a dolgozatnak a központi koncepciója a félklasszikus közelítés volt, azaz amikor

*ÖSSZEFOGLALÁS, KITEKINTÉS*

---

a kvantumosan kezelt anyagi rendszert befolyásoló külső tereket klasszikusan írtuk le. Vannak azonban olyan esetek, amikor csak a teljesen kvantált modell ad megfelelő leírást. Nagyintenzitású elektromágneses terek esetén a magas fotonszám miatt nem szokás a mező kvantált leírását alkalmazni, ugyanakkor kísérleti eredmények utalnak arra, hogy még a magasfelharmonikus-keltés intenzitástartományában is vannak csak ilyen módon értelmezhető effektusok [E21, 189]. Ilyen erős terekkel kapcsolatban – néhány fontos korai eredménytől [190, 191] eltekintve – az elméleti leírás eléggé hiányos, és jelenleg is folyó kutatásaink ezt a hiányt igyekeznek betölteni [E15, E22, E23].



## Köszönetnyilvánítás

Eddigi életem során szakmai szempontból nagyon szerencsés voltam, mert a kezdetek óta csupa olyan fizika és matematika tanárral hozott össze a sors, akitől sokat lehetett (és kellett) tanulni. Ezt mindenképpen szeretném megköszönni főként Balázsné Runyai Máriának, Rozgonyi Istvánnak és Herold Lászlónének.

A szegedi egyetemen szintén sok, a szakmát jól ismerő, jó fizikustól és matematikustól tanultam. Elsősorban a Fizikai Intézet, azon belül – szakmai érdeklődésem okán – az Elméleti Fizikai Tanszék munkatársainak szeretnék köszönetet mondani. Sokkal tartozom Gyémánt Ivánnak, Varga Zsuzsannának, Bartha Ferencnek, Bogár Ferencnek, Papp Györgynek, Iglói Ferencnek és Fehér Lászlónak. A matematikát illetően a legtöbbet Kérchy Lászlótól és Stachó Lászlótól tanultam.

Benedict Mihálynak egyrészt a kvantummechanika előadásaiért vagyok hálás, másrészt mert türelmes és bölcs témavezetőm volt a PhD során. Tőle nemcsak szakmát, hanem a tudósra jellemző magatartást is meg lehetett tanulni, beleértve a hallgatók kezének elengedését, önálló munkájuk elősegítését. Máig emlékszem az első dicsérő mondatára, és nagyon örülök, hogy ma is bármikor nyitva áll az ajtaja, ha diszkusszióról van szó.

Ami a mindennapjaimban megjelenő oktatási tevékenységet illeti, a legtöbbet – ideértve az akaratlanul eltanult gesztusokat is – édesapámtól, Földi Pétertől, Rozgonyi Istvántól, Gyémánt Ivántól, Papp Györgytől, Papp Katalintól és Benedict Mihálytól tanultam.

Szeretném megköszönni Czirják Attilának azt, hogy immár 20 éve barátként megosztjuk a dolgozószobánkat, megbeszéljük a fizikai problémákat és az élet dolgait. Molnár Balázs volt az, aki a Szegeden kötött barátság után Antwerpenben is munkatársam volt, és nagyban hozzájárult a közös eredmények eléréséhez. Emellett hálás vagyok a nálam szakdolgozatot vagy diplomamunkát író hallgatóknak a kérdéseikért, amelyekkel nekem is segítettek átláthatóbban megfogalmazni egy-egy problémát. Volt és jelenlegi PhD hallgatóimnak (Kálmán Orsolya, Szaszko-Bogár Viktor, Szabó Lóránt Zsolt, Magashegyi István, Gombkötő Ákos, Mike Péter) köszönöm az önálló, kritikus viszonyulást a közösen kidolgozandó kérdésekhez, azt hogy valódi munkatársakként együtt dolgozhattunk/dolgozhatunk. Kálmán Orsolyának külön köszönet az ebben a dolgozatban is megjelenő eredményeink elérése során mutatott odafigyelő alaposságáért.

Külföldi kollégáim közül Francois Peetersnek köszönöm, hogy Antwerpenben olyan témákat ajánlott, amelyek igen gyümölcsözőnek bizonyultak, illetve azt is, hogy betekintést nyerhettem egy nagy kutatócsoport működésébe. Vladislav Yakovlevvel Garchingban dolgozva ismerkedtem meg a kísérleti eredményekhez közeli elméleti munka részleteivel.

Köszönöm az ELI-ALPS munkatársainak az inspiráló légkört, az érdekes szemináriumokat, megbeszéléseket. Külön hálás vagyok csoportvezetőmnek, Varró Sándornak, akivel hosszú évek ismeretsége után nagy öröm együtt is dolgozni.

Végezetül köszönöm szüleimnek, hogy felneveltek, és öcsémhez hasonlóan nagy szeretettel támogattak mindenben. Köszönöm feleségemnek, Anikónak a szerető türelmet, és lányainkat, Zsófit és Julcsit, akiknek a szeretete, kedvessége mindig nagy örömmel tölt el.

*KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS*

---

## Tézisek

1. Egy bemenettel és egyetlen kimenettel rendelkező kvantumgyűrűk esetében, amikor a vezetési tulajdonságokat a Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás befolyásolja, megoldottam a spinfüggő transzportproblémát, meghatároztam a be- és kimenetet összekötő transzmissziós mátrix függését a geometriai paramétereiktől és a spin-pálya kölcsönhatás erősségétől. Ezt az analitikus megoldást felhasználva megmutattam, hogy alkalmasan választott paraméterek esetén a reflexiók valószínűsége nulla, és a gyűrű a spinre ható egyqubites kvantumos kapuként működik. A koherenciahosszon belüli mérettartományban reflexiómentes gyűrűk egymás után kapcsolásával lényegében minden tradicionális egyqubites kvantumos kapu realizálható [T1].
2. Kvantumgyűrűk egy újabb alkalmazásaként megfogalmaztam azt az ötletet, hogy két kimenet esetén a megvalósítható spintranszformációk osztálya tovább bővül, mivel a kimenetekhez tartozó spinirányok különbözőek lesznek. A konkrét számításokat elemezve arra jutottunk, hogy egy ilyen gyűrűt – eltekintve a kimenetek ortogonalitásától – a Stern-Gerlach berendezés elektronspinre vonatkozó megfelelőjének is tekinthetünk. Az ötlet továbbfejlesztéseként kidolgoztam több gyűrűből álló, több kimenettel rendelkező hálózatokban a spinfüggő transzportprobléma numerikus megoldását. Megmutattam, hogy ha a spin-pálya kölcsönhatás erősségét az egyes gyűrűkben megfelelően választjuk, akkor a Stern-Gerlach berendezés pontos analogonját kapjuk. Emellett rámutattam, hogy ez a hálózat – attól függően, hogyan választjuk meg a spin-pálya kölcsönhatás erősségét a gyűrűkben – nagyon változatos spintranszformációs tulajdonságokkal rendelkezik [T2, T3].
3. Több gyűrűből álló, összetett rendszerek esetén különösen élesen merül föl az elektronok interferenciaképességének a kérdése. Ezt vizsgálándó, a modell továbbfejlesztéseként mesterségesen szórócentrumokat helyeztem a különböző funkciókat megvalósító hálózatokba. A szórási folyamatok szerepének a növekedése a koherencia fokozatos eltűnését eredményezte. A hálózatok eredeti funkciójának ezzel párhuzamos gyengülését célszerűen megválasztott mérőszámok segítségével vizsgáltam. Eredményeim azt mutatják, hogy a 2. tézispontban leírt rendszerek funkcionalitása egészen addig megmarad, amíg a hálózat vezetőképessége számottevően nem csökken. A hőmérséklet emelkedésével hasonló eredményt kaptam [T4].
4. Lokalizált spinek és külső mágneses tér kölcsönhatása kapcsán a dekoherencia szerepét vizsgáltam egy olyan periodikusan gerjesztett kétnívós rendszerben, ami megfelel a molekuláris mágnesek egy rezonanciájának. Azt az általános eredményt kaptam, hogy ekkor a rendszer periodikus Floquet állapotok inkoherens összege felé tart.

Elegendően hosszú idő után a hiszterézisgörbéket már pusztán ezek az állapotok határozzák meg, ugyanakkor az irányukba tartó konvergencia időállandója függ a dekoherencia folyamatának a sebességétől.

Kidolgoztam egy hatékony numerikus módszert a mágneses szempontból fontos spinnek dinamikájának a kiszámítására a teljes 21 dimenziós téren ( $S=10$ ) is, relaxációs folyamatok és időfüggő külső mágneses tér jelenlétében. A  $Mn_{12}$ -Ac molekula paramétereit használva megmutattam, hogy ha a mágneses tér változási sebessége a kísérletekben is alkalmazott  $kT/s$  tartományba esik, akkor a mágneszettségi görbéken látható ugrások kétnívós rezonanciáknak felelnek meg, de ezek az átmenetek csak korlátozott pontossággal írhatók le a hagyományos Landau-Zener-Stückelberg modellel. A numerikusan egzakt számítások segítségével azt is megmutattam, hogy a vizsgált paramétertartományban a dekoherencia fontos szerepet játszik, annak erőssége a mágneszettség mérhető ugrásainak a magasságát befolyásolja [T5, T6].

5. Széles tiltott sávval rendelkező félvezetők és nagy intenzitású lézerimpulzusok kölcsönhatásnak a leírására olyan modellt fejlesztettem ki, amely figyelembe veszi az elektronok fononokon való szóródását is, amely gyakran a domináns relaxációs folyamat. A fény-anyag kölcsönhatást hossz mértékben felírva, eredményeim szerint az erős lézertér képes az elektronokat a reciproktérben az első Brillouin zóna határán túlra elmozdítani. Ezek az akár többszörös dinamikai Bloch-oszcillációk realiztikusan erős elektron-fonon kölcsönhatás esetén is fellépnek. A kísérleti eredményekkel összhangban azt kaptam, hogy a lézerimpulzus által elmozdított összes előjeles töltésmennyiség függ a gerjesztő impulzus térerősségének a pontos időbeli lefutásától, a vivő-burkoló fázis függvényében oszcilláló viselkedést mutat. Számításaim szerint ezeknek az oszcillációknak a maximumai eltolódnak a gerjesztő impulzus intenzitásának a növelése esetén, ami a dinamikai Bloch-oszcillációk mérhető következménye [T7].
6. A magasrendű felharmonikusok tömbi szilárdtestekben való keltésével kapcsolatban a folyamat elvi hátterét érintő interpretációs kérdéseket vizsgáltam. Két, gyakran használt elektromágneses mérték felhasználásával meghatároztam az anyagi válasz sávokon belüli („áramszerű”) és sávok közötti („polarizációszerű”) komponensét. Ezek a komponensek fizikailag egy tőről fakadnak, ugyanannak az áramsűrűség operátornak különböző mátrixelemeiről van szó, így összegük mértékinvariáns. Ezzel szemben analitikus úton megmutattam, hogy bármennyire intuitív is a teljes áram szétbontása, a fenti két komponens külön-külön nem mértékinvariáns. Ezt az eredményt numerikusan is igazoltam, továbbá megmutattam, hogy a teljes áramsűrűség figyelembevételével kiszámított magasfelharmonikus spektrumok a kísérleti eredményekkel kvalitatív egyezést mutatnak [T8].

## A tézispontokhoz felhasznált publikációk

- [T1] P. Földi, B. Molnár, M. G. Benedict és F. M. Peeters: „Spintronic single-qubit gate based on a quantum ring with spin-orbit interaction”, *Phys. Rev. B* **71** (2005.), 033309.
- [T2] P. Földi, O. Kálmán, M. G. Benedict és F. M. Peeters: „Quantum rings as electron spin beam splitters”, *Phys. Rev. B* **73** (2006.), 155325.
- [T3] P. Földi, O. Kálmán, M. G. Benedict és F. M. Peeters: „Networks of quantum nanorings: Programmable spintronic devices”, *Nano. Lett.* **8** (2008.), 2556.
- [T4] P. Földi, O. Kálmán és F. M. Peeters: „Stability of spintronic devices based on quantum ring networks”, *Phys. Rev. B* **80** (2009.), 125324.
- [T5] P. Földi, M. G. Benedict és F. M. Peeters: „Dynamics of periodic anticrossings: Decoherence, pointer states, and hysteresis curves”, *Phys. Rev. A* **77** (2008.), 013406.
- [T6] P. Földi, M. G. Benedict, J. M. Pereira és F. M. Peeters: „Dynamics of molecular nanomagnets in time-dependent external magnetic fields: Beyond the Landau-Zener-Stückelberg model”, *Phys. Rev. B* **75** (2007.), 104430.
- [T7] P. Földi, M. G. Benedict és V. S. Yakovlev: „The effect of dynamical Bloch oscillations on optical-field-induced current in a wide-gap dielectric”, *New J. Phys.* **15** (2013.), 063019.
- [T8] P. Földi: „Gauge invariance and interpretation of interband and intraband processes in high-order harmonic generation from bulk solids”, *Phys. Rev. B* **96** (2017.), 035112.

*A TÉZISPONTOKHOZ FELHASZNÁLT PUBLIKÁCIÓK*

---

## A PhD fokozat megszerzése után született, a tézispontokhoz nem használt egyéb közlemények

- [E1] M. G. Benedict, P. Földi és F. M. Peeters: „Microwave emission from a crystal of molecular magnets: The role of a resonant cavity”, *Phys. Rev. B* **72** (2005.), 214430.
- [E2] O. Kálmán, P. Földi, M. G. Benedict és F. M. Peeters: „Spatial interference induced spin polarization in a three-terminal quantum ring”, *Physica E* **40** (2008.), 567.
- [E3] O. Kálmán, P. Földi, M. G. Benedict és F. M. Peeters: „Magnetoelectric properties of rectangular arrays of spintronic quantum rings”, *Phys. Rev. B* **78** (2008.), 125306.
- [E4] P. Földi, M. Benedict, O. Kálmán és F. Peeters: „Quantum rings with time-dependent spin-orbit coupling: Spintronic Rabi oscillations and conductance properties”, *Phys. Rev. B* **80** (2009.), 165303.
- [E5] O. Kálmán, T. Kiss és P. Földi: „Quantum walk on the line with quantum rings”, *Phys. Rev. B* **80** (2009.), 035327.
- [E6] P. Földi: „Kvantumos interferenciajelenségek nanoméretű gyűrűkben”, *Fizikai Szemle* **59** (2009.), 378.
- [E7] P. Földi, V. Szaszko-Bogár és F. M. Peeters: „Spin-orbit interaction controlled properties of two-dimensional superlattices”, *Phys. Rev. B* **82** (2010.), 115302.
- [E8] P. Földi, O. Kálmán és M. Benedict: „Two-dimensional quantum rings with oscillating spin-orbit interaction strength: A wave function picture”, *Phys. Rev. B* **82** (2010.), 165322.
- [E9] P. Földi, V. Szaszko-Bogár és F. Peeters: „High-temperature conductance of a two-dimensional superlattice controlled by spin-orbit interaction”, *Phys. Rev. B* **83** (2011.), 115313.
- [E10] L. Szabó, M. Benedict, A. Czirják és P. Földi: „Relativistic electron transport through an oscillating barrier: Wave-packet generation and Fano-type resonances”, *Phys. Rev. B* **88** (2013.), 075438.
- [E11] P. Földi: „Kvantumos transzportfolyamatok nanoeszközökben”. *PhD Doktorikus kurzusok fizikából*. Szerk. I. Hevesi. Szeged, JATEPress, 2014, 303–358. old.

- [E12] P. Földi, I. Márton, N. Német, V. Ayadi és P. Dombi: „Few-cycle plasmon oscillations controlling photoemission from metal nanoparticles”, *Appl. Phys. Lett* **106** (2015.), 013111.
- [E13] P. Dömötör, P. Földi, M. Benedict, B. Shore és W. Schleich: „Scattering of a particle with internal structure from a single slit: exact numerical solutions”, *New J. Phys.* **17** (2015.), 023044.
- [E14] V. Szasztkó-Bogár, F. Peeters és P. Földi: „Oscillating spin-orbit interaction in two-dimensional superlattices: Sharp transmission resonances and time-dependent spin-polarized currents”, *Phys. Rev. B* **91** (2015.), 235311.
- [E15] Á. Gombkötő, A. Czirják, S. Varró és P. Földi: „Quantum-optical model for the dynamics of high-order-harmonic generation”, *Phys. Rev. A* **94** (2016.), 013853.
- [E16] L. Szabó, M. Benedict és P. Földi: „Scattering of charged particles on two spatially separated time-periodic optical fields”, *Phys. Rev. A* **96** (2017.), 063419.
- [E17] P. Földi: „A magas felharmonikusok keltésének kvantumoptikai leírása”, *Fizikai Szemle* **67** (2017.), 345.
- [E18] I. Magashegyi, L. Szabó és P. Földi: „Ultrashort laser-pulse-driven currents in conductors: one-dimensional model for local excitation in the single-electron picture with quadratic dispersion”, *J. Opt. Soc. Am. B* **35** (2018.), A116.
- [E19] P. Mike, L. Szabó és P. Földi: „Interaction of Twisted Light with Electrons in Two-Dimensional Quantum Rings”, *J. Russ. Las. Res.* **39** (2018.), 465.
- [E20] A. Nayak, M. Dumergue, S. Kühn, S. Mondal és tsai.: „Saddle point approaches in strong field physics and generation of attosecond pulses”, *Phys.Rep.* **833** (2019.), 1.
- [E21] N. Tsatrafyllis, S. Kühn, M. Dumergue, P. Földi és tsai.: „Quantum Optical Signatures in a Strong Laser Pulse after Interaction with Semiconductors”, *Phys. Rev. Lett.* **122** (2019.), 193602.
- [E22] Á. Gombkötő, S. Varró, P. Mati és P. Földi: „Kvantált elektromágneses térrel keltett felharmonikusok”, *Fizikai Szemle* **70** (2020.), 163.
- [E23] Á. Gombkötő, S. Varró, P. Mati és P. Földi: „High-order harmonic generation as induced by a quantized field: Phase-space picture”, *Phys. Rev. A* **101** (2020.), 013418.



# Irodalom

- [1] G. Farkas és C. Tóth: „Proposal for attosecond light pulse generation using laser induced multiple-harmonic conversion processes in rare gases”, *Physics Letters A* **168** (1992.), 447.
- [2] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel és C. T. Foxon: „Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas”, *Phys. Rev. Lett.* **60** (1988.), 848.
- [3] J. Nitta, F. E. Meijer és H. Takayanagi: „Spin-interference device”, *Appl. Phys. Lett.* **75** (1999.), 695.
- [4] J. Nitta, T. Koga és H. Takayanagi: „Interference of Aharonov-Bohm ring structures affected by spin-orbit interaction”, *Physica E* **12** (2002.), 753.
- [5] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon és tsai.: „Quantum supremacy using a programmable superconducting processor”, *Nature* **574** (2019.), 505.
- [6] Y. Aharonov és D. Bohm: „Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory”, *Phys. Rev.* **115** (1959.), 485.
- [7] P. Hraskó: „Quantum-mechanical effect without force for spinning particles”, *Lett. Nuovo Cimento* **2** (1971.), 832.
- [8] P. S. Faragó: „Quantum-mechanical effect without force for spinning particles”, *Lett. Nuovo Cimento* **5** (1972.), 305.
- [9] Y. Aharonov és A. Casher: „Topological Quantum Effects for Neutral Particles”, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984.), 319.
- [10] K. von Klitzing, G. Dorda és M. Pepper: „New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance”, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980.), 494.
- [11] S. Datta: *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [12] C. Durkan: *Current at the nanoscale: an introduction to nanoelectronics*. World Scientific, 2014.
- [13] R. Landauer: „Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction”, *IBM J. Res. Dev.* **32** (1988.), 306.
- [14] M. Büttiker: „Symmetry of electrical conduction”, *IBM J. Res. Dev.* **32** (1988.), 317.

- [15] F. E. Meijer, A. F. Morpurgo és T. M. Klapwijk: „One-dimensional ring in the presence of Rashba spin-orbit interaction: Derivation of the correct Hamiltonian”, *Phys. Rev. B* **66** (2002.), 033107.
- [16] S. Griffith: „A free-electron theory of conjugated molecules. Part 1: Polycyclic hydrocarbons”, *Trans. Faraday Soc.* **49** (1953.), 345.
- [17] P. Vasilopoulos, O. Kálmán, F. M. Peeters és M. G. Benedict: „Aharonov-Bohm oscillations in a mesoscopic ring with asymmetric arm-dependent injection”, *Phys. Rev. B* **75** (2007.), 035304.
- [18] L. D. Landau és E. M. Lifshitz: *Elméleti fizika IV: Relativisztikus kvantumelmélet*. Tankönyvkiadó, Budapest, 1979.
- [19] E. I. Rashba: „Properties of semiconductors with a loop of extrema”, *Sov. Phys. Solid State* **2** (1960.), 1109.
- [20] M. S. Bahramy, R. Arita és N. Nagaosa: „Origin of giant bulk Rashba splitting: Application to BiTeI”, *Phys. Rev. B* **84** (2011.), 041202.
- [21] B. Fülöp, Z. Tajkov, J. Pető, P. Kun és tsai.: „Exfoliation of single layer BiTeI flakes”, *2D Materials* **5** (2018.).
- [22] Z. Kovács-Krausz, A. M. Hoque, P. Makk, B. Szentpéteri és tsai.: „Electrically Controlled Spin Injection from Giant Rashba Spin-Orbit Conductor BiTeBr”, *Nano Lett.* **20** (2020.), 4782.
- [23] G. Dresselhaus: „Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures”, *Phys. Rev.* **100** (1955.), 580.
- [24] Y. A. Bychkov és E. I. Rashba: „Properties of a 2D electron gas with a lifted spectrum degeneracy”, *Sov. Phys. - JETP Lett.* **39** (1984.), 78.
- [25] T. Koga, J. Nitta, T. Akazaki és H. Takayanagi: „Rashba Spin-Orbit Coupling Probed by the Weak Antilocalization Analysis in InAlAs/InGaAs/InAlAs Quantum Wells as a Function of Quantum Well Asymmetry”, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002.), 046801.
- [26] M. König, A. Tschetschetkin, E. M. Hankiewicz, J. Sinova és tsai.: „Direct Observation of the Aharonov-Casher Phase”, *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006.), 076804.
- [27] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi és T. Enoki: „Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted In GaAsInAlAs Heterostructure”, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997.), 1335.
- [28] B. Molnár, F. M. Peeters és P. Vasilopoulos: „Spin-dependent magnetotransport through a ring due to spin-orbit interaction”, *Phys. Rev. B* **69** (2004.), 155335.
- [29] J. Cserti, A. Csordás és U. Zülicke: „Electronic and spin properties of Rashba billiards”, *Phys. Rev. B* **70** (2004.), 233307.
- [30] A. Csordás, J. Cserti, A. Pályi és U. Zülicke: „Rashba billiards”, *Eur. Phys B* **54** (2006.), 189.
- [31] A. Pályi, C. Péterfalvi és J. Cserti: „Two-dimensional electron scattering in regions of nonuniform spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **74** (2006.), 073305.

- [32] P. Rakyta, L. Oroszlány, A. Kormányos és J. Cserti: „Finite-size effects on the minimal conductivity in graphene with Rashba spin-orbit coupling”, *Physica E* **75** (2016.), 1.
- [33] I. Žutić, J. Fabian és S. D. Sarma: „Spintronics: Fundamentals and applications”, *Rev. Mod. Phys.* **76** (2004.), 323.
- [34] J. Cserti: „Spintronika. Egy sokat ígérő szójáték”, *Természet Világa* (2005.), szeptember, 386.
- [35] A. Aysar, H. Ochoa, F. Guinea, B. Özyilmaz, B. J. van Wees és I. J. Vera-Marun: „Colloquium: Spintronics in graphene and other two-dimensional materials”, *Rev. Mod. Phys.* **92** (2020.), 021003.
- [36] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau és tsai.: „Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices”, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988.), 2472.
- [37] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach és W. Zinn: „Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange”, *Phys. Rev. B* **39** (1989.), 4828.
- [38] D. D. Awschalom, D. Loss és N. Samarth, szerk.: *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*. Springer, Berlin, 2008.
- [39] W. Wernsdorfer: „Classical and quantum magnetization reversal studied in nanometer-sized particles and clusters”, *Adv. Chem. Phys.* **118** (2001.), 99.
- [40] D. Gatteschi, R. Sessoli és J. Villain: *Molecular Nanomagnets*. Oxford University Press, 2006.
- [41] J. R. Friedman, M. P. Sarachik, J. Tejada és R. Ziolo: „Macroscopic measurement of resonant magnetization tunneling in high-spin molecules”, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996.), 3830.
- [42] L. D. Landau: „Zur Theorie der Energieübertragung II”, *Phys. Z. Sowjetunion* **2** (1932.), 46.
- [43] C. Zener: „Non-adiabatic crossing of energy levels”, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A* **137** (1932.), 696.
- [44] E. C. G. Stückelberg: „Theorie der unelastischen Stöße zwischen Atome”, *Helv. Phys. Acta* **5** (1932.), 369.
- [45] M. Uiberacker, T. Uphues, M. Schultze, A. J. Verhoef és tsai.: „Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms”, *Nature* **446** (2007.), 627.
- [46] F. Krausz és M. I. Stockman: „Attosecond metrology: from electron capture to future signal processing”, *Nature Photonics* **8** (2014.), 205.
- [47] M. Ferray, A. L’Huillier, X. F. Li, L. A. Lompre, G. Mainfray és C. Manus: „Multiple-harmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases”, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **21** (1988.), L31.
- [48] A. L’Huillier és P. Balcou: „High-order harmonic generation in rare gases with a 1-ps 1053-nm laser”, *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993.), 774.

- [49] C.-G. Wahlström, J. Larsson, A. Persson, T. Starczewski és tsai.: „High-order harmonic generation in rare gases with an intense short-pulse laser”, *Phys. Rev. A* **48** (1993.), 4709.
- [50] S. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk, P. Agostini, L. F. DiMauro és D. A. Reis: „Observation of high-order harmonic generation in a bulk crystal”, *Nat. Physics* **7** (2011.), 138.
- [51] S. Ghimire, G. Ndabashimiye, A. D. DiChiara, E. Sistrunk és tsai.: „Strong-field and attosecond physics in solids”, *J. Phys. B* **47** (2014.), 204030.
- [52] G. Ndabashimiye, S. Ghimire, M. Wu, D. A. Browne, K. J. Schafer, M. B. Gaarde és D. A. Reis: „Solid-state harmonics beyond the atomic limit”, *Nature* **534** (2016.). Letter, 520.
- [53] P. B. Corkum: „Plasma perspective on strong field multiphoton ionization”, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993.), 1994.
- [54] M. Lewenstein, P. Balcou, M. Y. Ivanov, A. L’Huillier és P. B. Corkum: „Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields”, *Phys. Rev. A* **49** (1994.), 2117.
- [55] A. Schiffrin, T. Paasch-Colberg, N. Karpowicz, V. Apalkov és tsai.: „Optical-field-induced current in dielectrics”, *Nature* **493** (2013.), 70.
- [56] P. G. Hawkins, M. Y. Ivanov és V. S. Yakovlev: „Effect of multiple conduction bands on high-harmonic emission from dielectrics”, *Phys. Rev. A* **91** (2015.), 013405.
- [57] F. I. Gauthey, B. M. Garraway és P. L. Knight: „High harmonic generation and periodic level crossings”, *Phys. Rev. A* **56** (1997.), 3093.
- [58] F. Krausz és M. Ivanov: „Attosecond physics”, *Rev. Mod. Phys.* **81** (2009.), 163.
- [59] L. Thomas, F. Lioni, R. Ballou, D. Gatteschi, R. Sessoli és B. Barbara: „Macroscopic quantum tunnelling of magnetization in a single crystal of nanomagnets”, *Nature (London)* **383** (1996.), 145.
- [60] R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach és R. B. Laibowitz: „Observation of  $\frac{h}{e}$  Aharonov-Bohm Oscillations in Normal-Metal Rings”, *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985.), 2696.
- [61] V. Chandrasekhar, M. J. Rooks, S. Wind és D. E. Prober: „Observation of Aharonov-Bohm Electron Interference Effects with Periods  $\frac{h}{e}$  and  $\frac{h}{2e}$  in Individual Micron-Size, Normal-Metal Rings”, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985.), 1610.
- [62] F. Nagasawa, D. Frustaglia, H. Saarikoski, K. Richter és J. Nitta: „Control of the spin geometric phase in semiconductor quantum rings”, *Nat. Comm* **4** (2013.), 2526.
- [63] A. G. Aronov és Y. B. Lyanda-Geller: „Spin-orbit Berry phase in conducting rings”, *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993.), 343.
- [64] D. D. Awschalom, M. E. Flatté és N. Samarth: „Spintronics”, *Scientific American* **286** (2002.), 66.

- 
- [65] S. Datta és B. Das: „Electronic analog of the electrooptic modulator”, *Appl. Phys. Lett.* **56** (1990.), 665.
- [66] M. A. Nielsen és I. L. Chuang: *Quantum computation and quantum information*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000.
- [67] J. B. Xia: „Quantum waveguide theory for mesoscopic structures”, *Phys. Rev. B* **45** (1992.), 3593.
- [68] N. F. Mott és H. S. W. Massey: *The theory of atomic collisions*. 2. kiad. Clarendon Press, Oxford, 1949.
- [69] D. Frustaglia és K. Richter: „Spin interference effects in ring conductors subject to Rashba coupling”, *Phys. Rev. B* **69** (2004.), 235310.
- [70] F. Zhai és H. Q. Xu: „Symmetry of Spin Transport in Two-Terminal Waveguides with a Spin-Orbital Interaction and Magnetic Field Modulations”, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005.), 246601.
- [71] T. Koga, J. Nitta és M. van Veenhuizen: „Ballistic spin interferometer using the Rashba effect”, *Phys. Rev. B* **70** (2004.), 161302(R).
- [72] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard és D. D. Awschalom: „Electron spin interferometry using a semiconductor ring structure”, *Appl. Phys. Lett.* **86** (2005.), 162107.
- [73] Y. Hasegawa, R. Loidl, G. Badurek, M. Baron és H. Rauch: „Violation of a Bell-like inequality in single-neutron interferometry”, *Nature* **425** (2003.), 45.
- [74] J. A. Bergou, U. Herzog és M. Hillery: „Quantum Filtering and Discrimination between Sets of Boolean Functions”, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003.), 257901.
- [75] R. Loudon: *The quantum theory of light*. 3. kiad. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000.
- [76] J. K. Asbóth, P. Ádám, M. Koniorczyk és J. Janszky: „Coherent-state qubits: entanglement and decoherence”, *Eur. Phys. J. D* **30** (2004.), 403.
- [77] Y. Sato, S. G. T. Kita és S. Yamada: „Large spontaneous spin splitting in gate-controlled two-dimensional electron gases at normal InGaAs/InAlAs/InGaAs/InAlAs heterojunctions”, *J. Appl. Phys.* **89** (2001.), 8017.
- [78] T. Bergsten, T. Kobayashi, Y. Sekine és J. Nitta: „Experimental Demonstration of the Time Reversal Aharonov Casher Effect”, *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006.), 196803.
- [79] Z. Zhu, Y. Wang, K. Xia, X. Xie és Z. Ma: „Time-reversal Aharonov-Casher effect in mesoscopic rings with spin-orbit interaction”, *Phys. Rev. B* **76** (2007.), 125311.
- [80] D. Frustaglia, M. Hentschel és K. Richter: „Quantum Transport in nonuniform magnetic fields: Aharonov-Bohm ring as a spin switch”, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001.), 256602.
- [81] J. B. Yau, E. P. DePoortere és M. Shayegan: „Aharonov-Bohm oscillations with spin: Evidence for Berry’s phase”, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2003.), 146801.
- [82] S. Souma és B. Nikolić: „Spin Hall Current Driven by Quantum Interferences in Mesoscopic Rashba Rings”, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005.), 106602.

- [83] B. Szafran és F. M. Peeters: „Time-dependent simulations of electron transport through a quantum ring: Effect of the Lorentz force”, *Phys. Rev. B* **72** (2005.), 165301.
- [84] G. Cohen, O. Hod és E. Rabani: „Constructing spin interference devices from nanometric rings”, *Phys. Rev. B* **76** (2007.), 235120.
- [85] S. Bellucci és P. Onorato: „Filtering of spin currents based on a ballistic ring”, *J. Phys.: Condens. Matter* **19** (2007.), 395020.
- [86] B. Molnár, P. Vasilopoulos és F. M. Peeters: „Magnetoconductance through a chain of rings with or without periodically modulated spin-orbit interaction strength and magnetic field”, *Phys. Rev. B* **72**, 075330 (2005.), 075330.
- [87] D. Frustaglia és J. Nitta: „Geometric spin phases in Aharonov-Casher interference”, *Solid State Comm.* **311** (2020.), 113864.
- [88] D. R. Yarkony: „Diabolical conical intersections”, *Rev. Mod. Phys.* **68** (1996.), 985.
- [89] G. J. Halász, Á. Vibók és L. S. Cederbaum: „Direct signature of light-induced conical intersections in diatomics”, *J. Phys. Chem. Lett.* **6** (2015.), 348.
- [90] V. S. Malinovsky és J. L. Krause: „Efficiency and robustness of coherent population transfer with intense, chirped laser pulses”, *Phys. Rev. A* **63** (2001.), 043415.
- [91] W. K. Lai, K.-A. Suominen, B. M. Garraway és S. Stenholm: „Dissipation effects on wave packets in level crossings: A comparison between two numerical approaches”, *Phys. Rev. A* **47** (1993.), 4779.
- [92] H. B. van Linden van den Heuvell, R. Kachru, N. H. Tran és T. F. Gallagher: „Excitation Spectrum of Na Rydberg States in a Strong Microwave Field: A Connection Between Two Points of View”, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984.), 1901.
- [93] P. Pillet, H. B. van Linden van den Heuvell, W. W. Smith, R. Kachru, N. H. Tran és T. F. Gallagher: „Microwave ionization of Na Rydberg atoms”, *Phys. Rev. A* **30** (1984.), 280.
- [94] J. G. Story, D. I. Duncan és T. F. Gallagher: „Landau-Zener treatment of intensity-tuned multiphoton resonances of potassium”, *Phys. Rev. A* **50** (1994.), 1607.
- [95] M. Gatzke, R. B. Watkins és T. F. Gallagher: „Quantum interference in microwave multiphoton transitions”, *Phys. Rev. A* **51** (1995.), 4835.
- [96] M. Sillanpää, T. Lehtinen, A. Paila, Y. Makhlin és P. Hakonen: „Continuous-Time Monitoring of Landau-Zener Interference in a Cooper-Pair Box”, *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006.), 187002.
- [97] D. M. Berns, W. D. Oliver, S. O. Valenzuela, A. V. Shytov, K. K. Berggren, L. S. Levitov és T. P. Orlando: „Coherent Quasiclassical Dynamics of a Persistent Current Qubit”, *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006.), 150502.
- [98] W. Wernsdorfer, R. Sessoli, A. Caneschi, D. Gatteschi és A. Cornia: „Nonadiabatic Landau-Zener tunneling in Fe<sub>8</sub> molecular nanomagnets”, *Europhys. Lett.* **50** (2000.), 552.

- 
- [99] I. Chiorescu, W. Wernsdorfer, A. Müller, S. Miyashita és B. Barbara: „Adiabatic Landau-Zener-Stückelberg transition with or without dissipation in the low-spin molecular system  $V_{15}$ ”, *Phys. Rev. B* **67** (2003.), 020402.
- [100] W. Wernsdorfer, S. Bhaduri, A. Vinslava és G. Christou: „Landau-Zener Tunneling in the presence of weak intermolecular interactions in a crystal of  $Mn_4$  single molecular magnets”, *Phys. Rev. B* **72** (2005.), 214429.
- [101] L. D. Landau és E. M. Lifshitz: *Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory*. Pergamon Press, Oxford, 1965.
- [102] D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I.-O. Stamatescu és H. D. Zeh: *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1996.
- [103] S. Shevchenko, S. Ashhab és F. Nori: „Landau-Zener-Stückelberg interferometry”, *Physics Reports* **492** (2010.), 1.
- [104] M. N. Leuenberger és D. Loss: „Spin tunneling and phonon-assisted relaxation in  $Mn_{12}$ -acetate”, *Phys. Rev. B* **61** (2000.), 1286.
- [105] D. F. Walls és G. J. Milburn: *Quantum Optics*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [106] G. Floquet: „Sur les équations différentielles linéaires a coefficients périodiques”, *Ann. École Norm. Sup.* **12** (1883.), 46.
- [107] M. Abramowitz és I. Stegun, szerk.: *Handbook of mathematical functions*. Dover Publications, New York, 1965.
- [108] H.-P. Breuer és F. Petruccione: *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press, New York, 2002.
- [109] H.-P. Breuer és F. Petruccione: „Dissipative quantum systems in strong laser fields: Stochastic wave-function method and Floquet theory”, *Phys. Rev. A* **55** (1997.), 3101.
- [110] G. Lindblad: „On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups”, *Commun. math. Phys.* **48** (1976.), 119.
- [111] J. H. Shirley: „Solution of the Schrödinger equation with a Hamiltonian periodic in time”, *Phys. Rev.* **138** (1965.), B979.
- [112] S. Ashhab, J. R. Johansson, A. M. Zagoskin és F. Nori: „Two-level systems driven by large-amplitude fields”, *Phys. Rev. A* **75** (2007.), 063414.
- [113] J. Koski V, A. J. Landig, A. Pályi, P. Scarlino és tsai.: „Floquet Spectroscopy of a Strongly Driven Quantum Dot Charge Qubit with a Microwave Resonator”, *Phys. Rev. Lett.* **121** (2018.), 043603.
- [114] S. Haroche: „Nobel Lecture: Controlling photons in a box and exploring the quantum to classical boundary”, *Rev. Mod. Phys.* **85** (2013.), 1083.
- [115] D. J. Wineland: „Nobel Lecture: Superposion, entanglement, and raising SchrÅsding’s cat”, *Rev. Mod. Phys.* **85** (2013.), 1103.
- [116] T. H. Stievater, X. Li, D. G. Steel, D. Gammon és tsai.: „Rabi Oscillations of Excitons in Single Quantum Dots”, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001.), 133603.

- [117] T. Unold, K. Mueller, C. Lienau, T. Elsaesser és A. D. Wieck: „Optical Control of Excitons in a Pair of Quantum Dots Coupled by the Dipole-Dipole Interaction”, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 137404 (2005.), 137404.
- [118] H.-P. Breuer, W. Huber és F. Petruccione: „Quasistationary distributions of dissipative nonlinear quantum oscillators in strong periodic driving fields”, *Phys. Rev. E* **61** (2000.), 4883.
- [119] B. M. Garraway és S. Stenholm: „Population transfer at periodically repeated level crossings”, *Phys. Rev. A* **45** (1992.), 364.
- [120] P. Földi, A. Czirják és M. G. Benedict: „Rapid and slow decoherence in conjunction with dissipation in a system of two-level atoms”, *Phys. Rev. A* **63** (2001.), 033807.
- [121] W. H. Zurek: „Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave function collapse?”, *Phys. Rev. D* **24** (1981.), 1516.
- [122] K. M. Mertes, Y. Suzuki, M. P. Sarachik, Y. Myasoedov és tsai.: „More evidence for a distribution of tunnel splittings in Mn<sub>12</sub> acetate”, *J. Appl. Phys.* **93** (2003.), 7095.
- [123] K. M. Mertes, Y. Suzuki, M. P. Sarachik, Y. Paltiel és tsai.: „Distribution of tunnel splittings in Mn<sub>12</sub> acetate”, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001.), 227205.
- [124] A. L. Barra, D. Gatteschi és R. Sessoli: „High-frequency EPR spectra of a molecular nanomagnet: Understanding quantum tunneling of the magnetization”, *Phys. Rev. B* **56** (1997.), 8192.
- [125] S. Hill, J. A. A. J. Perenboom, N. S. Dalal, T. Hathaway, T. Stalcup és J. S. Brooks: „Coherence in spontaneous radiation processes”, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998.), 2453.
- [126] S. Hill, R. S. Edwards, S. I. Jones, N. S. Dalal és J. M. North: „Definitive spectroscopic determination of the transverse interactions responsible for the magnetic quantum tunneling in Mn<sub>12</sub>-acetate”, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003.), 217204.
- [127] J. Vanacken, S. Stroobants, M. Malfait, V. V. Moshchalkov és tsai.: „Pulsed-field studies of the magnetization reversal in molecular nanomagnets”, *Phys. Rev. B* **70** (2004.), 220401.
- [128] J. H. van Vleck: „On  $\sigma$ -type doubling and electron spin in the spectra of diatomic molecules”, *Phys. Rev.* **33** (1929.), 467.
- [129] J. des Cloizeaux: „Extension d’une formule de Lagrange à des problèmes de valeurs propres”, *Nucl. Phys.* **20** (1960.), 321.
- [130] D. J. Klein: „Degenerate perturbation theory”, *J. Chem. Phys.* **61** (1974.), 786.
- [131] D. A. Garanin: „Spin tunneling: a perturbative approach”, *J. Phys. A* **24** (1991.), L61.
- [132] S.-K. Yoo és C.-S. Park: „Perturbative calculation of resonant tunneling in single molecule Mn<sub>12</sub> with transverse anisotropy”, *Phys. Rev. B* **71** (2005.), 012409.
- [133] K. Mullen, E. Ben-Jacob, Y. Gefen és Z. Schuss: „Time of Zener Tunneling”, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989.), 2543.



- 
- [134] N. V. Vitanov: „Transition times in the Landau-Zener model”, *Phys. Rev. A* **59** (1999.), 988.
- [135] M. Evangelisti, F. Luis, F. L. Mettes, R. Sessoli és L. J. de Jongh: „Giant isotope effect in the incoherent tunneling specific heat of molecular nanomagnet  $\text{Fe}_8$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005.), 227206.
- [136] A. Morello, F. L. Mettes, O. N. Bakharev, H. B. Brom és tsai.: „Magnetic dipolar ordering and relaxation in high-spin molecular cluster compound  $\text{Mn}_6$ ”, *Phys. Rev. B* **73** (2006.), 134406.
- [137] N. V. Prokof'ev és P. C. E. Stamp: „Low-temperature quantum relaxation in a system of magnetic molecules”, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998.), 5794.
- [138] N. A. Sinitsyn és N. V. Prokof'ev: „Nuclear spin bath effects on Landau-Zener transitions in nanomagnets”, *Phys. Rev. B* **67** (2003.), 134403.
- [139] I. Rousochatzakis és M. Luban: „Master equations for pulsed magnetic fields: Application to magnetic molecules”, *Phys. Rev. B* **72** (2005.), 134424.
- [140] J. F. Fernández. 661. köt. AIP Conference Proceedings. Melville, American Institute of Physics, 2003, 242. old.
- [141] M. N. Leuenberger és D. Loss: „Spin relaxation in  $\text{Mn}_{12}$ -acetate”, *Europhys. Lett.* **45** (1999.), 692.
- [142] J. Tejada, E. M. Chudnovsky, J. M. Hernandez és R. Amigó: „Electromagnetic radiation produced by avalanches in the magnetization reversal of  $\text{Mn}_{12}$  acetate”, *Appl. Phys. Lett.* **84** (2004.), 2373.
- [143] A. Hernandez-Minguez, M. Jordi, R. Amigo, A. Garcia-Santiago, J. M. Hernandez és J. Tejada: „Low-temperature microwave emission from molecular clusters”, *Europhys. Lett.* **69** (2005.), 270.
- [144] R. M. Dicke: „Coherence in spontaneous radiation processes”, *Phys. Rev.* **93** (1954.), 439.
- [145] M. G. Benedict, A. M. Ermolaev, V. A. Malyshev, I. V. Sokolov és E. D. Trifonov: *Superradiance*. IOP, Bristol, 1996.
- [146] F.-S. Guo, B. M. Day, Y.-C. Chen, M.-L. Tong, A. Mansikkamäki és R. A. Layfield: „Magnetic hysteresis up to 80 kelvin in a dysprosium metallocene single-molecule magnet”, *Science* **362** (2018.), 1400.
- [147] E. Garlatti, L. Tesi, A. Lunghi, M. Atzori és tsai.: „Unveiling phonons in a molecular qubit with four-dimensional inelastic neutron scattering and density functional theory”, *Nature Comm.* **11** (2020.), 1751.
- [148] K. Wrześniewski és I. Weymann: „Time-dependent spintronic anisotropy in magnetic molecules”, *Phys. Rev. B* **101** (2020.), 245434.
- [149] M. Durach, A. Rusina, M. F. Kling és M. I. Stockman: „Metallization of nanofilms in strong adiabatic electric fields”, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010.), 086803.
- [150] F. Bloch: „Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern”, *Zeitschrift für Physik* **52** (1929.), 555.

- [151] G. H. Wannier: „Wave functions and effective Hamiltonian for Bloch electrons in an electric field”, *Phys. Rev.* **117** (1960.), 432.
- [152] E. E. Mendez, F. Agulló-Rueda és J. M. Hong: „Stark localization in GaAs-GaAlAs superlattices under an electric field”, *Phys. Rev. Lett.* **60** (1988.), 2426.
- [153] J. Feldmann, K. Leo, J. Shah, D. A. B. Miller és Tsai.: „Optical investigation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice”, *Phys. Rev. B* **46** (1992.), 7252.
- [154] T. Pertsch, P. Dannberg, W. Elflein, A. Bräuer és F. Lederer: „Optical Bloch oscillations in temperature tuned waveguide Ar rays”, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999.), 4752.
- [155] R. Morandotti, U. Peschel, J. S. Aitchison, H. S. Eisenberg és Y. Silberberg: „Experimental observation of linear and nonlinear optical Bloch oscillations”, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999.), 4756.
- [156] R. Sapienza, P. Costantino, D. Wiersma, M. Ghulinyan, C. J. Oton és L. Pavesi: „Optical analogue of electronic Bloch oscillations”, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003.), 263902.
- [157] M. Ben Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin és C. Salomon: „Bloch oscillations of atoms in an optical potential”, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996.), 4508.
- [158] M. Holthaus: „Bloch oscillations and Zener breakdown in an optical lattice”, *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **2** (2000.), 589.
- [159] S. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk, U. B. Szafruga, P. Agostini, L. F. DiMauro és D. A. Reis: „Redshift in the optical absorption of ZnO single crystals in the presence of an intense midinfrared laser field”, *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011.), 167407.
- [160] D. Golde, T. Meier és S. W. Koch: „High harmonics generated in semiconductor nanostructures by the coupled dynamics of optical inter- and intraband excitations”, *Phys. Rev. B* **77** (2008.), 075330.
- [161] R. C. Hughes: „Charge-carrier transport phenomena in amorphous SiO<sub>2</sub>: direct measurement of the drift mobility and lifetime”, *Phys. Rev. Lett.* **30** (1973.), 1333.
- [162] M. V. Fischetti, D. J. DiMaria, S. D. Brorson, T. N. Theis és J. R. Kirtley: „Theory of high-field electron transport in silicon dioxide”, *Phys. Rev. B* **31** (1985.), 8124.
- [163] C. Kittel: *Introduction to solid state physics*. 8. kiad. Wiley, New York, 2005.
- [164] O. D. Mücke: „Isolated high-order harmonics pulse from two-color-driven Bloch oscillations in bulk semiconductors”, *Phys. Rev. B* **84** (2011.), 081202.
- [165] L. W. Casperson: „Few-cycle pulses in two-level media”, *Phys. Rev. A* **57** (1998.), 609.
- [166] H. Haug és S. W. Koch: *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. 4. kiad. World Scientific, New Jersey, London, Singapore, 2004.
- [167] M. Wegener: *Extreme Nonlinear Optics: An Introduction*. Advanced Texts in Physics. Springer, 2004.

- 
- [168] T. Otobe, M. Yamagiwa, J.-I. Iwata, K. Yabana, T. Nakatsukasa és G. F. Bertsch: „First-principles electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under an intense laser field”, *Phys. Rev. B* **77** (2008.), 165104.
- [169] E. Yablonovitch, J. P. Heritage, D. E. Aspnes és Y. Yafet: „Virtual photoconductivity”, *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989.), 976.
- [170] P. Kálmán és T. Brabec: „Generation of coherent hard-x-ray radiation in crystalline solids by high-intensity femtosecond laser pulses”, *Phys. Rev. A* **52** (1995.), R21.
- [171] F. H. M. Faisal és J. Z. Kaminski: „Generation and control of high harmonics by laser interaction with transmission electrons in a thin crystal”, *Phys. Rev. A* **54** (1996.), R1769.
- [172] U. Teubner és P. Gibbon: „High-order harmonics from laser-irradiated plasma surfaces”, *Rev. Mod. Phys.* **81** (2009.), 445.
- [173] D. Golde, T. Meier és S. W. Koch: „High harmonics generated in semiconductor nanostructures by the coupled dynamics of optical inter- and intraband excitations”, *Phys. Rev. B* **77** (2008.), 075330.
- [174] P. G. Hawkins és M. Y. Ivanov: „Role of subcycle transition dynamics in high-order-harmonic generation in periodic structures”, *Phys. Rev. A* **87** (2013.), 063842.
- [175] T. Higuchi, M. I. Stockman és P. Hommelhoff: „Strong-field perspective on high-harmonic radiation from bulk solids”, *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014.), 213901.
- [176] G. Vampa, C. R. McDonald, G. Orlando, D. D. Klug, P. B. Corkum és T. Brabec: „Theoretical analysis of high-harmonic generation in solids”, *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014.), 073901.
- [177] G. Vampa, C. R. McDonald, G. Orlando, P. B. Corkum és T. Brabec: „Semiclassical analysis of high harmonic generation in bulk crystals”, *Phys. Rev. B* **91** (2015.), 064302.
- [178] M. Yamaguchi és K. Nobusada: „Indirect interband transition induced by optical near fields with large wave numbers”, *Phys. Rev. B* **93** (2016.), 195111.
- [179] S. Arlinghaus és M. Holthaus: „Generalized acceleration theorem for spatiotemporal Bloch waves”, *Phys. Rev. B* **84** (2011.), 054301.
- [180] D. A. Meyer: „Global entanglement in multiparticle systems”, *J. Math. Phys.* **43** (2002.), 4273.
- [181] K. Rzazewski és R. Boyd: „Equivalence of interaction Hamiltonians in the electric dipole approximation”, *J. Mod. Opt.* **51** (2004.), 1137.
- [182] Y.-C. Han és L. B. Madsen: „Comparison between length and velocity gauges in quantum simulations of high-order harmonic generation”, *Phys. Rev. A* **81** (2010.), 063430.
- [183] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc és G. Grynberg: *Photons and atoms*. Wiley, Weinheim, 2004.

- [184] M. Wu, S. Ghimire, D. A. Reis, K. J. Schafer és M. B. Gaarde: „High-harmonic generation from Bloch electrons in solids”, *Phys. Rev. A* **91** (2015.), 043839.
- [185] D. Bauer, D. B. Milosevic és W. Becker: „Strong-field approximation for intense-laser atom processes: The choice of gauge”, *Phys. Rev. A* **72** (2005.), 023415.
- [186] S. Jiang, H. Wei, J. Chen, C. Yu, R. Lu és C. D. Lin: „Effect of transition dipole phase on high-order-harmonic generation in solid materials”, *Phys. Rev. A* **96** (2017.), 053850.
- [187] G. Ernotte, T. J. Hammond és M. Taucer: „A gauge-invariant formulation of interband and intraband currents in solids”, *Phys. Rev. B* **98** (2018.), 235202.
- [188] L. Yue és M. B. Gaarde: „Structure gauges and laser gauges for the semiconductor Bloch equations in high-order harmonic generation in solids”, *Phys. Rev. A* **101** (2020.), 053411.
- [189] N. Tsatrafyllis, I. K. Kominis, I. A. Gonoskov és P. Tzallas: „High-order harmonics measured by the photon statistics of the infrared driving-field exiting the atomic medium”, *Nat. Comm.* **8** (2017.).
- [190] J. Bergou és S. Varró: „Nonlinear scattering processes in the presence of a quantised radiation field. I. Non-relativistic treatment”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **14** (1981.), 1469.
- [191] J. Bergou és S. Varró: „Nonlinear scattering processes in the presence of a quantised radiation field. II. Relativistic treatment”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **14** (1981.), 2281.