

OTKA témapályázat zárójelentése

# Dirac fermionok szilárdtestekben

Tudományterület: **Szilárdtestfizika**  
OTKA nyilvántartási szám: **K 72613**  
Témavezető: **Virosztek Attila**, a fizikai tudomány doktora  
Kutatóhely: **BME, Fizika Tanszék**  
A kutatás időtartama: **2008/04/01-2012/12/31**  
Az OTKA támogatás összege: **9207eFt**

## Tartalomjegyzék

<b>1. A pályázat célja</b>	<b>2</b>
<b>2. Az elért eredmények</b>	<b>2</b>
2.1. A spin-relaxáció vizsgálata különböző rendszerekben . . . . .	2
2.2. Nem-egyensúlyi dinamika szilárdtestekben és csapdázott atomi rendszerekben . . . . .	4
2.3. Egyensúlyi dinamika . . . . .	5
<b>3. Kiegészítő információk</b>	<b>7</b>

## 1. A pályázat célja

Az elmúlt bő négy és fél év kutatási tevékenysége munkatervünknek megfelelően a szilárdtestbeli elektronrendszereknek arra a családjára összpontosult, melyek a Dirac egyenlet valamely változatának engedelmeskednek. Ezek elméleti tárgyalása a grafén előállítás után vált világszerte intenzívvé, de tömeg nélküli Dirac fermionok spektrumával rendelkező kvázirészecskék már korábban is tanulmányozhatók voltak a  $d$ -típusú kondenzátumok (szupravezetők vagy sűrűség hullámok) témakörében. Néhány eredményünk ez utóbbi kondenzátumokkal kapcsolatos, de munkánk döntő része a grafén és annak különböző származékai viselkedésének leírásával foglalkozik. Ide sorolhatók a szén nanocsövek és a kétrétegű grafén, de tanulmányoztuk a szintén Dirac spektrummal rendelkező topologikus szigetelőket is. A jelen beszámoló ugyanakkor mégsem a fenti anyagcsaládok szerinti csoportosításban tárgyalja eredményeinket, mert többüket összeköti a vizsgált fizikai jelenség, illetve az annak leírására használt módszer.

## 2. Az elért eredmények

A továbbiakban a kutatási eredményeket a téma egyes részterületei szerint csoportosítva alfejezetekben ismertetjük. A szövegben megadott referenciák a publikációs lista megfelelő elemére vonatkoznak.

### 2.1. A spin-relaxáció vizsgálata különböző rendszerekben

Kutatásaink első része a spin-relaxáció vizsgálatát tűzte ki célul különböző rendszerekben: szén nanocsöveken, grafénon,  $MgB_2$ -on és alkáli fullerideken, szoros együttműködésben Simon Ferenc csoportjával. Meghatároztuk szén nanocsöveken a nukleáris mágneses rezonancia élettartamát, és azt találtuk, hogy ez jól leírható egy gappal rendelkező egy dimenziós rendszer fizikájával, az ún. Luther-Emery folyadék képpel. A kapott eredményekből megbecsültük a hiperfinom kölcsönhatás nagyságát, mely nem mutatott eltérést az atomi szénél tapasztalttól, néhány transzport méréssel ellentétben. [4,37]

Megvizsgáltuk az elektron spin rezonancia viselkedését is hasonló rendszeren, a Luttinger folyadék alapállapotot feltételezve, és azt találtuk, hogy egy ilyen rendszer esetén a rezonancia a megfigyelhetőségi határon túl kiszéles-

dik, vagyis nincs ESR válasz. A kapott eredmények összhangban látszanak lenni a kísérleti eredményekkel, melyek a fentiek alapján nem a vezetési elektronok jelét érzékelik, hanem a mintákban jelen lévő különféle szennyeződések járulékait.[3,12]

Vizsgálódásainkat kiterjesztettük grafénra is, melyben anomális csatolást találtunk a mag mágneses momentumok és a vezetési sávban élő Dirac elektronok között. Ezt felhasználva kiértékeljük az NMR élettartamot és a rezonancia helyének eltolódását, melyek alapján három, a rendszer paramétereitől függő tartományt találtunk: Fermi gáz-szerű, Dirac gáz-szerű illetve az extrém kvantum limeszre jellemző viselkedést, melyet a Landau nívók megjelenése dominál. Becslést tettünk eredményeink kísérleti megfigyelésére is. [6,16,27]

Meghatároztuk a grafén vezetési elektronjainak spin relaxációs tulajdonságait, a releváns spin-pálya csatolások figyelembe vételével. Ezek a szénre jellemző intrinsic, a véges kapufeszültségből származó, Rashba jellegű csatolás illetve a grafén felszínének hullámszáma miatt létrejövő, szintén Rashba-szerű csatolás. A kísérleti eredmények paraméter (kémiai potenciál, hőmérséklet, élettartam) függését az intrinsic csatolás figyelembe vételével tudtuk jól leírni.[26,38]

Kiterjesztettük az Elliott-Yafet spin relaxáció érvényességi tartományát arra az esetre, amikor a momentum relaxáció nagysága összemérhető a sávok közötti tiltott sáv nagyságával. Megmutattuk, hogy a hagyományos leírásból, amikor a spin relaxáció egyenesen arányos a momentum relaxációval, átléphetünk egy Dyakonov-Perel relaxációra jellemző tartományba, amikor a két relaxációs idő között fordított arányosság realizálódik. Eredményeinkkel tudtuk értelmezni a  $MgB_2$  és az alkáli fulleridek anomális spin relaxációját, valamint megmutattuk, hogy folytonos átjárás lehetséges a Dyakonov-Perel és az Elliott-Yafet folyamatok között a momentum relaxációs idő valamint a spin-pálya csatolással összekötött sávok távolságának függvényében.[8,15,39,40]

A spintronika területén végzett korábbi kutatásainkat folytatva analizáltuk a káliummal dópolt grafit (mely ARPES mérések szerint jó modellrendszere az erősen dópolt grafénnak) spin relaxációs tulajdonságait.[19,44]

## 2.2. Nem-egyensúlyi dinamika szilárdtestekben és csapdázott atomi rendszerekben

Megvizsgáltuk a grafén vezetési tulajdonságait erős elektromos tér jelenlétében. A Dirac egyenlet Landau-Zener problémára való leképezésével az időfüggő Schrödinger egyenlet egzakt megoldását kaptuk. A rendszerben folyó áram az elektromos tér  $3/2$ -dik hatványával, míg a spin-Hall áram az elektromos tér négyzetgyökével nő. Eredményeinket összekapcsoltuk a Schwinger-féle párkeltéssel, ami esetünkben elektron-lyuk párokat jelentett, illetve a Kibble-Zurek skálázással. Javaslatot tettünk eredményeink kísérleti megfigyelésére topológikus szigetelőkben és csapdázott hideg atomi rendszerekben. A grafén nem-lineáris vezetőképességére vonatkozó eredményeinket a kísérletek igazolták.[25,32,35]

Az időfüggő folyamatok vizsgálatát kiterjesztettük kétrétegű grafénre is, melyben a kapufeszültség időbeli változtatásával a Kibble-Zurek elmélet jóslatait lehetne vizsgálni egy szilárdtest-fizikai rendszerben. Megmutattuk, hogy a kapufeszültség előjelének megváltoztatásával populáció inverziót lehet létrehozni kétrétegű grafénben, melyet a negatív optikai vezetőképesség jellemez. Analizáltuk ezen rendszer lézerként való alkalmazásának lehetőségét, és megmutattuk, hogy ez a THz tartományban működhetne, ahol más, koherens fényforrások meglehetősen ritkák (THz gap).[24]

Megvizsgáltuk egydimenziós, kölcsönható Dirac fermionok tulajdonságait időfüggő kölcsönhatás esetén, mely megvalósítható csapdázott hideg atomi rendszerekben. Az így létrehozott rendszer egy időfüggő kölcsönhatással bíró Luttinger folyadéknak felel meg. A végállapot momentum eloszlása erősen függ az időbeli protokoll jellegétől és időtartamától, és elegyíti a Luttinger folyadékra illetve egy erősen kölcsönható nehéz Fermi folyadékra jellemző tulajdonságokat. Meghatároztuk a nem-egyensúlyi végállapotba jutás során végzett munka statisztikáját, mely univerzális tulajdonságokat mutat. Megadtuk az állandósult állapot teljes leírását egy általánosított Gibbs sokasággal. Eredményeinket numerikusan teszteltük az XXZ Heisenberg modellen a "time-evolving block decimation" módszer alkalmazásával. A vizsgált fizikai mennyiségek, a rendszer energiája, egy véges hosszú dobozban élő spinek fluktuációi valamint a spin-flip korrelációs függvény meggyőző egyezést mutattak az analitikus és numerikus eredmények között. Eredményeink lehetővé teszik a fenomenológikus, egyensúlyi Luttinger folyadék leírást nem-egyensúlyi körülmények esetére is, ily módon tovább szélesítve a Luttinger folyadékok univerzalitási osztályát.[33,42,45]

Az anyag topológiai tulajdonságai megváltoztathatóak időben periódikus perturbációk alkalmazásával. Ezt vizsgáltuk egy spin-Hall szigetelő él állapotán cirkulárisan polarizált elektromágneses tér jelenlétében, a Floquet elméletet használva. Az áram a disszipáció mentes, Thouless féle töltéspumpálásból az adiabatikus tartományban átalakul disszipatívvá, ami a rendszerben végbemenő topológiai fázisátalakulás jellemzője. Javasoltunk egy kísérletet ennek ellenőrzésére, ami akár spin-pálya csatolt grafénon is elvégezhető.[41,43]

### 2.3. Egyensúlyi dinamika

A grafén elektronszerkezetével kapcsolatos egyik legalapvetőbb kérdés a lokális állapotsűrűsége (LDOS) vonatkozik. Kiszámítottuk az LDOS megváltozását grafénban egy erősen lokalizált szennyező hatására, Green-függvény technikát használva Born közelítésben. Az LDOS ismeretében a szennyező körüli Friedel-oszcilláció is meghatározhatóvá vált. Egy szoros kötésű közelítésben figyelembe véve az atomi hullámfüggvények lokalizált jellegét, a lassan lecsengő, hosszú hullámhosszú oszcillációk mellett azonosítottunk egy rövid hullámhosszú mintázatot is. Ez utóbbi, lévén ellentétes előjelű a grafén két alrácán, kiolthatja a vezető rendbeli inverz négyzetes burkolóját a hosszú hullámhosszú oszcillációknak, amennyiben olyan eszközzel vizsgáljuk a jelenséget, melynek felbontása rosszabb néhány elemi cellánál [22,46].

Hidrogénnel kezelt grafénon mért szögfelbontott fotoelektron spektroszkópiával meghatározható a grafén spektrálfüggvénye. Ezt számoltuk véletlen alrácsszimmetria sértést feltételezve egzakt diagonalizációval, mely jó egyezést mutatott a szögfelbontott fotoemissziós spektroszkópiai módszerrel mért kísérleti adatokkal. A hidrogén jelenléte miatt egy nem diszperzív sáv jelent meg a Fermi energia alatt, mely erős elektron-fonon csatolással párosítva ideális feltételeket jelenthet szupravezetés kialakulására grafénben.[28,36,17]

Meghatároztuk a felületi akusztikus hullámok terjedését grafénon. A hullám hullámszámától és az alkalmazott kapufeszültségtől függően a rendszer válasza érzékeny volt a tömeg nélküli Dirac elektronok jelenlétére, melyek válasza a kapufeszültség változtatására véges tömegű, a Schrödinger egyenletnek engedelmesskedő elektronok válaszába ment át. Szinte ez az egyetlen olyan összeállítás, mellyel a hullámszám függő vezetőképesség mérhető, melyet szintén meghatároztunk.[29]

Megvizsgáltuk a Dirac egyenletet különböző szennyezők jelenlétében. Az állapotsűrűség végessé válik félig töltés esetén is, melynek skálázódását szá-

moltuk a szennyező szórás erősségének függvényében analitikus (Born közelítés) és numerikus (egzakt diagonalizáció) módszerekkel.[1,5,18,21]

Megvizsgáltuk a kétrétegű grafént elektron-elektron kölcsönhatás és Landau kvantáló mágneses tér jelenlétében. Azt találtuk, hogy a kvantum Hall nívók szekvenciája megváltozik az erős mágneses tér jelenlétében, mely sérti a  $K$  és  $K'$  völgyek közti szimmetriát. A völgy szimmetria sérülésre vonatkozó eredményeinket a nem-szemiklasszikus de Haas-van Alphen oszcillációkban is tetten lehet érni, melyben az oszcilláció periódusa feleződik a szimmetria-sértés miatt.[20]

Általánosítottuk a Dirac egyenletet tetszőleges pszeudospin esetére megfelelően tervezett rácsok segítségével. Az egész spin esete mindig tartalmaz egy disperzió nélküli sávot (flat band), melynek jelenléte erősen megváltoztatja a rendszer tulajdonságait a grafénhoz képest. Vizsgáltuk az állapotsűrűséget, az optikai vezetőképességet, a topológiai tulajdonságokat, a Klein alagutazást és a dc vezetőképességet. Bár a flat band topológialag mindig triviálisnak adódott, a magasabb sávokban tetszőlegesen nagy Chern számot lehetett létrehozni a megfelelő rétegeződés használatával.[34]

Meghatároztuk egy koegzisztáló d-típusú szupravezető és d-típusú sűrűség hullám optikai és Raman válaszfüggvényét szennyezők jelenlétében. Érdekes módon két koegzisztáló rend mindig maga után von egy harmadik, indukált rendparamétert, ami az előző két rendeződés tulajdonságait egyesíti. Esetünkben ez egy olyan szupravezető rendparaméter lett, melyben a Cooper párok összmomentuma nem zérus, hanem véges érték. A különböző irányokban mérhető válaszfüggvények erős szennyező szórás esetén alkalmazhatóak cinkkel szennyezett magas hőmérsékletű szupravezetők esetére.[7,30,31]

Megvizsgáltuk, hogy az elektron-elektron kölcsönhatás esetén milyen kritikus tulajdonságokkal rendelkezik a fém-szigetelő átalakulás grafénben. Az átlagtér elmélet keretében találtunk egy zérus hőmérsékleti quantum kritikus pontot, melynek kritikus exponensei jelentősen eltértek a hagyományos Landau-féle átlagtér elmélet eredményeitől. Mivel a grafén állapotsűrűsége lineárisan tűnik el az energiával félig töltés körül, megvizsgáltuk, mi történik, ha az állapotsűrűség tetszőleges hatvánnyal ( $r$ ) tűnik el. Az  $r > 2$  esetben visszakaptuk a hagyományos átlagtér jellemzőket, míg  $-1 < r < 2$  esetben erősen  $r$  függő kritikus exponenseket kaptunk. Ily módon eredményeink általánosították a hagyományos Landau elméletet kvantum fázisátalakulásokra hatványfüggvény állapotsűrűség esetére.[23]

Meghatároztuk erős mágneses térbe tett két- és többretegű grafén longitudinális és Hall vezetőképességének mágneses tér, szennyezőszórás és kapufe-

szültség függését, valamint a völgyszimmetria sérülésének feltételeit. Definiáltuk és kiszámoltuk ezen rendszerek rétegfelbontott vezetőképességét is.[47]

### **3. Kiegészítő információk**

A jelen beszámoló tárgyául szolgáló témák alapkutatás jellegűek, eredményeik elsősorban referált nemzetközi folyóiratokban megjelent publikációkban testesülnek meg. Ezen 47 cikk között szerepel egy Nano Lett., 9 Phys. Rev. Lett., egy New J. Phys. és 17 Phys. Rev. B, így a publikációk összimpakt faktora 154.

Budapest, 2013. január 25.

Virosztek Attila