

**Fotoemissziós és pásztázó  
alagútmikroszkópos mérések modellezése  
Dirac-féle elektronok vizsgálatánál**

Doktori értekezés

**Rakya Péter**

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar  
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Témavezető: Dr. Cserti József

*ELTE TTK, Fizika Doktori Iskola*

*Statisztikus és Biológiai Fizika Program*

*Iskolavezető: Dr. Csikor Ferenc*

*Programvezető: Dr. Kürti Jenő*

*Budapest*

*2012.*



## Előszó

Az elmúlt években a nanotechnológia központi témájává vált a Dirac-féle dinamikát követő elektronrendszerek tanulmányozása. Különálló Dirac-kúppal írhatjuk le többek között az egyrétegű grafén illetve az ún. második generációs háromdimenziós topológikus szigetelők (2GTI) elemi gerjesztéseinek spektrumát. Az említett rendszerek közös tulajdonsága, hogy az érdekesnek vélt elektronállapotok a minták közvetlen felületére lokalizálódnak. Vizsgálatukra ezért kiváltképp alkalmasak az olyan felületérzékeny kísérleti eljárások, mint például a fotoemissziós spektroszkópia, vagy pásztázó alagútmikroszkópos technika. Segítségükkel egymást megerősítő és kiegészítő mérések végezhetőek a minták vizsgálata során. A grafén és a topológikus szigetelők családjainak megjelenése szinte robbanásszerű érdeklődést váltott ki a kutatók körében. A téma területén végzett megnövekedett intenzitású kutatómunkát az is jelzi, hogy az egyrétegű grafén 2004-ben történt előállításáért már 2010-ben Nobel-díjat ítéltek Andrej Geim és Konstantin Novoselov orosz származású fizikusoknak.

A grafén vezetési elektronjainak nagy mobilitása (szobahőmérsékleten is  $\sim 15000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ ) technológiai alkalmazások lehetőségével kecsegtet. Ipari felhasználás szempontjából ugyancsak fontos megjegyezni, hogy az egyrétegű grafén, átlátszó optikai tulajdonsága folytán, alkalmas például érintőképernyők felületén elhelyezett elektródák kialakítására is. A topológikus szigetelők ezzel szemben a vezetési elektronok spin-manipulációjához tűnnek alkalmas alpanyagnak. Az erős spin-pálya kölcsönhatás az elektronállapotok spinjét rögzíti a momentumukhoz képest. A felületi állapotok – a nem triviális topológiájú tömbi sávszerkezetből kifolyólag – topológikusan védettek a mintákban jelen lévő szennyezők hatásától, és az ellentétes spin irányból adódóan a nemmágneses szennyezők az egymáshoz képest időtükrözött állapotok között sem tudnak visszaszórást létrehozni.

Jelen értekezés célja, hogy a graféne és topológikus szigetelőkön végzett fotoemissziós és pásztázó alagútmikroszkópos méréseket áttekintsük, és az eredményeket egyszerű modellek keretein belül megmagyarázzuk, vagy új mérési eredményekre tegyünk jóslatot. Ennek érdekében az értekezés az alábbi felépítésben íródott: (i) az első fejezetben áttekintem a fotoemissziós és pásztázó tűszondás mérési módszerek alkalmazott technikáit, valamint a mérési eredmények értelmezésére elterjedt elméleti modelleket. (ii) A második fejezetben ismertetem az egyrétegű és kétrétegű grafén, valamint a háromdimenziós topológikus szigetelők leírására alkalmas effektív modelleket. Emellett bemutatom az egyszerűsített számolási módszert, melyet a spin-pálya kölcsönhatás hosszúhullámú Hamilton-operátorának levezetésénél alkalmaztam a harmadik fejezetben. (iii) A harmadik fejezetben először az irodalomban fellelhető, előzőekben bemutatott fizikai rendszereken végzett fotoemissziós mérések eredményeit tekintem át. Grafén esetében

bemutatom a fotoelektronok anizotróp intenzitás-eloszlását leíró elméleti modellt, melyet általánosítottam a fotoelektronok spin-polarizált áramainak számolására is. Az általánosított összefüggés könnyedén alkalmazható tetszőleges (transzláció invariáns) kölcsönhatással kiegészített Hamilton-operátor esetében. A spinfelbontásos fotoemissziós mérési technikák lehetőséget kínálnak a grafénben jelen lévő spin-pálya kölcsönhatás vizsgálatára. A fejezetben az általam kidolgozott, anizotróp Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás effektív Hamilton-operátorát ismertetem, és összevetem az elméleti jóságotokat a mérési eredményekkel. A fotoelektronok spin-polarizált áramainak vizsgálata további információkkal szolgálhat különböző kölcsönhatások tanulmányozásánál. Megmutattam, hogy grafénben a spin-pálya kölcsönhatáshoz csatolt alrác-szimmetria is jellegzetes mintázathoz vezet a fotoelektronok spin-polarizációjában. A  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  topológikus szigetelő felületi állapotainak tárgyalására alkalmazott, irodalomban elterjedt két paramétert tartalmazó effektív modell nem elegendő a diszperzió pontos leírásához. Ha a felületi állapotok diszperziójának alakjától függő effektusok (mint például a negyedik fejezetben tárgyalt állapotsűrűség-hullámok) pontos leírására törekszünk, fontos számításba vennünk magasabb rendű korrekciókat is a leírásban, melyek további két szabad paraméterhez vezetnek az effektív modellben. A modell négy szabad paraméterét a Brillouin-zóna magas szimmetriájú metszeteiben felvett diszperziók és a teljes állapotsűrűség mérési adataira vett illesztéssel határoztam meg. (iv) Az értekezés negyedik fejezetében az irodalomban fellelhető pásztázó alagútmikroszkópos mérések főbb eredményeit tekintem át, melyek a pont- és vonalhibák körül kialakuló állapotsűrűség-hullámok problémaköre köré csoportosulnak. Az állóhullámok főbb tulajdonságaira (mint például az oszcilláció hullámhossza, vagy a lecsengése) az elemi gerjesztések spektrumának tulajdonságaiból következtethetünk. A fejezetben a vonalhibák körül kialakuló állapotsűrűség-hullámok aszimptotikus viselkedésének leírására alkotott, irodalomban elterjedt modellen kívül részletesen ismertetem az általam kidolgozott elméleti modellt is, mely a vonalhibához közelebbi tartományban is alkalmazható. Az aszimptotikus viselkedést leíró, hatványszerű lecsengésre vezető modellekkel szemben megmutattam, hogy a szennyezőhöz közelebbi tartományban (ahol a méréseket is végezték) meghatározó szerepet játszanak az aszimptotikus viselkedésben már eltűnő komponensek. Elméleti eredményeim kiváló egyezést mutatnak a mérési eredményekkel. (v) Végül, a függelékben a főszövegből kiszorult, számolástechnikai részleteket ismertetem.

---

## Köszönetnyilvánítás

Nem fejezhetem be az előszót anélkül, hogy köszönetet ne mondanék témavezetőmnek, *Cserti Józsefnek* az érdekes téma felvetésért és a kutatás közben nyújtott sokoldalú segítségért, tanácsokért. A kutatást ugyancsak előrelendítették *Kormányos Andorral*, *Pályi Andrással* és *Oroszlány Lászlóval* való együttműködésünk. Értékes hozzászólásaikért, és az értekezés megírása közben nyújtott tanácsaikért ezúton is szeretnék köszönetet mondani. Köszönetemet szeretném kifejezni szüleimnek, *Rakya Gabriellának* és *Rakya Vladimírnak*, nővéremnek, *Rakya Annamáriának*, valamint páromnak, *Simon Csillának* is, akik az értekezés megírása közben emberi és erkölcsi támogatást nyújtottak. Végül, de nem utolsó sorban köszönöm az *ELTE TTK, Komplex Rendszerek Fizikája Tanszéknek* és a *Lancaster University* fizika tanszékének a rendelkezésemre bocsátott számítástechnikai lehetőségeket, amelyek segítségével munkámat színvonalasabban végezhettem.



# Tartalomjegyzék

Előszó és köszönetnyilvánítás . . . . .	iii
<b>1. Bevezetés a mérési eljárásokba</b>	<b>1</b>
1.1. Fotoemissziós spektroszkópia . . . . .	1
1.1.1. Impulzusfelbontású fotoemissziós spektroszkópia (ARPES) . . . . .	2
1.1.2. A fotoemisszió mikroszkopikus elmélete . . . . .	4
1.1.3. Egyéb kísérleti effektusok . . . . .	9
1.1.4. Spin és impulzus felbontású fotoemissziós spektroszkópia (SARPES) . . . . .	10
1.1.5. Spinpolarizáció mérése SARPES technikával . . . . .	12
1.2. Páztázó tűszondás mikroszkópok . . . . .	13
1.2.1. Az STM mérések elméleti leírása . . . . .	15
1.2.2. A Tersoff-Hamann modell . . . . .	15
1.2.3. Felületi állapotsűrűség mérése . . . . .	18
1.2.4. Egyéb kísérleti effektusok . . . . .	19
1.3. A fejezet összefoglalása . . . . .	20
<b>2. Bevezetés az értekezésben vizsgált kétdimenziós rendszerekbe</b>	<b>21</b>
2.1. A grafén . . . . .	21
2.1.1. A grafén szoros kötésű elektron modellje . . . . .	22
2.1.2. A grafén kontinuum modellje . . . . .	25
2.1.3. Burkoló függvény közelítés: Dirac-féle Hamilton-operátor . . . . .	26
2.2. Kétrétegű grafén . . . . .	30
2.3. Topológikus szigetelők . . . . .	32
2.3.1. A $\mathbb{Z}_2$ topológikus invariáns. Sávszerkezet inverzió . . . . .	32
2.3.2. Háromdimenziós topológikus szigetelők . . . . .	35
2.3.3. Második generációs topológikus szigetelők . . . . .	37
2.4. A fejezet összefoglalása . . . . .	43

<b>3. Fotoemissziós mérések modellezése</b>	<b>45</b>
3.1. Mérései eredmények áttekintése grafén esetében . . . . .	45
3.1.1. Megfigyelések fotoemissziós mérések során . . . . .	45
3.1.2. Alrács-interferencia . . . . .	47
3.1.3. Spin-pálya kölcsönhatás grafénben . . . . .	52
3.1.4. A grafén belső spin-pálya (ISO) kölcsönhatása . . . . .	54
3.1.5. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás grafénben . . . . .	54
3.1.6. Alrács-aszimmetria detektálása SARPES technikával . . . . .	62
3.2. Mérési eredmények háromdimenziós topologikus szigetelőkön . . . . .	68
3.2.1. A $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ kristály felületi állapotai . . . . .	70
3.2.2. Magasabb rendű korrekciók a modellben . . . . .	71
3.3. A fejezet összefoglalása . . . . .	73
<b>4. Páztázó alagútmikroszkópos mérések modellezése</b>	<b>75</b>
4.1. Állapotsűrűség-hullámok elméleteinek áttekintése . . . . .	77
4.1.1. Pontszennyezők által indukált állóhullámok a lokális állapotsűrűségben . . . . .	77
4.1.2. Állapotsűrűség-hullámok aszimptotikus viselkedése vonalhibák mentén . . . . .	79
4.2. Vonalhibák mentén létrejött állapotsűrűség-hullámok leírása $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ felületén . . . . .	82
4.3. A fejezet összefoglalása . . . . .	91
<b>Függelék</b>	<b>93</b>
F.1. A Pfaff-polinom . . . . .	93
F.2. Vonalhibára merőleges hullámszámok meghatározása . . . . .	93
F.3. A transzmittált és reflektált járulékok kioltása az állapotsűrűség-hullámokban . . . . .	94
F.4. Fourier-transzformáció az állóhullámok adatsorain . . . . .	95
<b>Irodalomjegyzék</b>	<b>97</b>



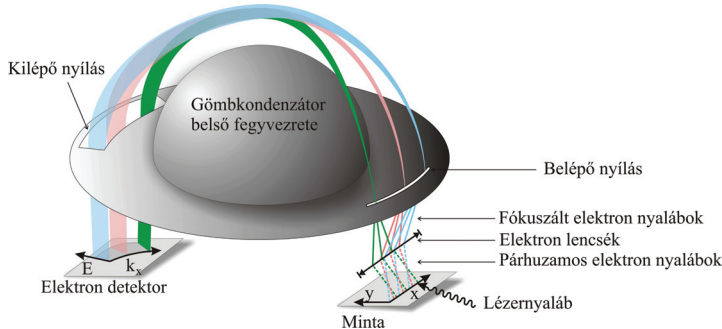
# 1. fejezet

## Bevezetés a mérési eljárásokba

Jelen fejezetben áttekintem a napjainkban alkalmazott fotoemissziós spektroszkópia és pásztázó alagútmikroszkópos mérési technikákat, valamint ismertetem, hogy mely fizikai mennyiségek határozhatóak meg a mérések során. Célom egy átfogó kép kialakítása annak érdekében, hogy átlássuk az egyes mérési technikák alkalmazhatóságának korlátait, és felismerjük a bennük rejlő potenciális hibaforrásokat, valamint az általam kapott elméleti eredményeket értelmezhessek.

### 1.1. Fotoemissziós spektroszkópia

A fotoemissziós spektroszkópia nagy múlttal rendelkező, különböző halmazállapotú anyagok elektronszerkezetének vizsgálatára alkalmas kísérleti eljárás. Először 1887-ben Hertz-nek sikerült egy olyan jelenséget észlelnie, ami később a fotoemissziós spektroszkópia alapja lett. A kísérletek során két induktív gyűrű egymásra való hatását vizsgálta különböző, szisztematikusan megválasztott árnyékoló anyagot helyezve közéjük [1]. Az észlelt jelenség magyarázata, mely során a gyűrűk egymásra anyagtól függő (akkori elméletekkel nem magyarázható) hatást gyakoroltak, egészen 1905-ig várattott magára. Ekkor Einstein felhasználva a fény leírására akkoriban alkotott kvantumos elméletet, az ún. *fotoemissziós effektus* megalkotásával adott magyarázatot a megfigyelt jelenségekre. Az elmélet szerint, ha egy mintára a rá jellemző *kilépési munkánál* nagyobb energiájú foton esik, akkor a foton és elektron kölcsönhatásának következtében a mintából az elektron ki tud lökődni. A kilökött elektront *fotoelektronnak* nevezzük. Az elméletre vezetőkísérletek során egy mintát monokromatikus fénnyalábbal világítottak meg vákuumsőben. A kilépő elektronok kinetikus energiáját azzal a küszöb feszültséggel jellemezték, mely a kilépő elektronok vákuumsőben folyó áramának kioltásához kellett. A kísérletek a kilökött elektronok maximális kinetikus energiája ( $E_{kin}^{max}$ ), a kilépési munka ( $\Phi$ ) és a foton energiája ( $\hbar\omega$ ) között az



1.1. ábra. Hemiszférikus analízátor vázlatos rajza. A vizsgált mintából kilökött elektronokat az elektron-lencsék a gömbkondenzátor bemeneti nyílásába fókuszálják. Így a különböző impulzusú elektronok a bemeneti nyílás különböző pontjaiba kerülnek (kék, piros, zöld elektronpályák). A gömbkondenzátor elektrosztatikus tere körpályákra kényszeríti az elektronok mozgását (az ábra csupán a belső fegyverzetet mutatja). A kimeneti nyíláson csak a gömbkondenzátorra kapcsolt feszültséggel kiválasztott energiájú elektronok jutnak ki a kilépő nyíláson keresztül a detektorba.

alábbi egyszerű összefüggést támasztották alá:

$$E_{kin}^{max} = \hbar\omega - \Phi . \quad (1.1)$$

Lényegét tekintve napjainkban is azonos alapokon nyugvó kísérleti elrendezésekkel tanulmányozzák különböző anyagok elektronszerkezetét.

### 1.1.1. Impulzusbontású fotoemissziós spektroszkópia (ARPES)

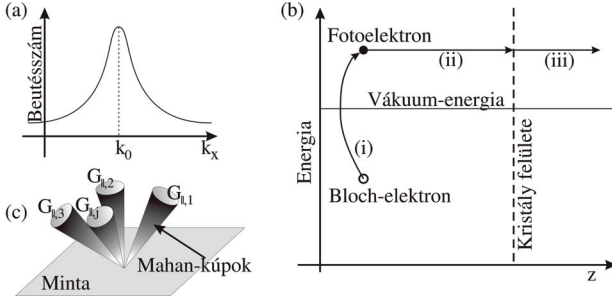
A napjainkban használt módszerek az Einstein által végzett kísérletektől lényegét tekintve annyiban térnek el, hogy az elektronok detektálására használt berendezés képes az elektronok maximális kinetikus energiája helyett azok energiájának és impulzusának teljes eloszlását mérni. A méréshez szükséges fotonokat szinkrotron sugárázókkal, gázkisüléses lámpákkal, vagy röntgensövevekkel állítják elő. A fotonok tipikus energiája (20 – 100) eV közé esik, de nem kizárt magasabb energiájú fotonok használata sem. A kilökött elektronokat ezek után energia és impulzus szelektáló elektrosztatikai berendezéseken vezetik át. Kezdetben a fotoelektronokat impulzusuk iránya szerint kis térszögű szűrőkkel szűrték, majd tervezett röppálya szelektációs módszert alkalmazva állítottak elő energiájában közel monokromatikus nyalábot. Ezzel a módszerrel adott  $k$

impulzus irányú elektronok energia-eloszlását detektálták. A helyzet megváltozott az első ún. *Scienta*<sup>1</sup> hemiszférikus analizátor [2, 3] megjelenésével, mely lehetőséget nyújt arra, hogy ne csak adott  $k$  impulzusú elektronokról szerezzünk mérési adatokat, hanem az impulzus tér egy egész metszetét értékeljük ki egyetlen mérésel.

Az *elektron szelektáló eszköz* elvi működését az 1.1. ábra segítségével érthetjük meg. Az eszköz magja egy gömbkondenzátor (az 1.1. ábra csak a belső köpenyt szemlélteti) nagy minőségű vákuumba helyezve. A fotoelektronokat egy vékony résbé (belépő rés) fókuszálják megfelelő elektronscső segítségével. Ennek során a fotoelektronok rés keresztmetszetébe eső ( $y$  irány) impulzusa erősen szelektálódik, míg a réssel párhuzamos ( $x$  irány) impulzus-komponens eloszlása lényegében változatlan marad. A gömbkondenzátorba jutott fotoelektronok pályáit a kondenzátor felületek között létrejött elektrosztatikus tér meggömbíti. A különböző impulzusú fotoelektronok különböző pályákon jutnak el a gömbkondenzátor másik oldalán lévő nyíláshoz (kilépési nyílás). A kilépési nyíláson túljutva az elektronok, párhuzamos impulzuskomponensüknek megfelelően, a detektor különböző pontjaiba csapódnak be (lásd a különböző színű pályákat az 1.1. ábrában). Azonban a kilépési nyíláshoz csupán azok az elektronok jutnak el, melyeket a gömbkondenzátor elektrosztatikus tere éppen a megfelelő sugarú körpályán képes mozgatni. A gömbkondenzátorra kapcsolt feszültséggel így szelektálni lehet az elektronokat azok energiája ( $E_{kin}$ ) szerint is egy geometriától függő  $\Delta E$  széles tartomány erejéig. Az ( $E_{kin}, E_{kin} + \Delta E$ ) energiatartomány így a párhuzamos impulzuskomponens  $k$  metszetére merőleges tengelyre képződik. A mérés energiafelbontása tehát függ a szelektált energiatartomány  $\Delta E$  szélességétől, mely arányos a kilépési nyílás szélességével. Elmondható azonban, hogy a kilépési nyílás szélességét csökkentve csökken a detektorba jutó elektronok száma is, azaz a mérendő jel erőssége is. Valódi mérésben ezért meg kell találni az egyensúlyt a mérési felbontás és az elfogadható statisztikai mennyiséget szolgáltató elektronintenzitás között. A vázolt impulzusfelbontású mérési eljárásra az irodalomban gyakran csupán az *ARPES* (angle-resolved photoemission spectroscopy) rövidítéssel hivatkoznak. A mérések során jellemzően adott fotoelektron-energia mellett felvett impulzus-eloszlás görbéket (MDC – momentum distribution curve), vagy állandó impulzushoz tartozó energia-eloszlás görbéket (EDC – energy distribution curve) mérnek ki. Az 1.2.(a) ábra egy tipikus MDC görbét ábrázol olyan esetben, amikor egy adott  $E$  energiás metszetben a  $k_0$  hullámszámhoz egy elektronállapot rendelhető. Az ábrán látható csúcs kiszélesedését, ahogy majd látni fogjuk az 1.1.2 szakaszban, a mérési berendezésekkel együtt járó mérési hiba, illetve a mintában jelen lévő elemi gerjesztések közti kölcsönhatás okozza.

---

<sup>1</sup>Scienta Instrument AB, 1983-ban alakult, majd *SIEKO Instruments Inc.*, végül 1997-től Gammadata Mätteknik AB tulajdonban lévő társaság.



1.2. ábra. (a) Adott  $E$  energiához tartozó MDC görbe, melyben a csúcş  $k_0$  impulzusú és  $E$  energiájú elektronállapotra utal. (b) A fotoemissziós folyamat három lépés modelljének vázlatos rajza. 1: Bloch-elektron gerjesztése a vákuum-energia fölé. 2: A gerjesztett fotoelektron transzportja a minta felületéig. 3: A kilépési potenciálon való szórás a minta felületén. (c) Az egyes  $G_{\perp}$  reciprok rácsvektorokkal jellemzett Brillouin-zónákhoz tartozó Mahan-kúpok.

### 1.1.2. A fotoemisszió mikroszkopikus elmélete

A fotoemisszió-effektus során a bejövő fénynyaláb a mintát elhagyó elektronokat a vákuum-energiaszint fölé gerjeszti. A fotoelektronokat a minta felületével párhuzamos  $\mathbf{p}_{\parallel}$  impulzusvetületükkel és  $E_{kin}$  kinetikus energiájukkal jellemezhetjük. A folyamat leírásához feltesszük, hogy a mintát megvilágító fénynyaláb keresztmetszete elég nagy ahhoz, hogy a megvilágított rendszert a minta felületével párhuzamosan eltolás-invariánsnak tekinthessük. Ekkor, elhanyagolva a foton impulzusát a fotoelektron impulzusához képest, a fotoelektron  $\mathbf{p}_{\parallel}$  impulzusa az impulzus megmaradás következtében megegyezik a kilökött Bloch-elektron kváziimpulzusával. Másrészt az energiamegmaradás következtében a fotoelektron kinetikus energiája:  $E_{kin} = h\nu - E_{kt} - \Phi$ , ahol  $\nu$  a fény frekvenciája,  $E_{kt}$  az elektron kötési energiája a Fermi-energiához képest és  $\Phi$  a kilépési munka (Fermi-energia és a vákuum-energia közti különbség). Az elektron kötési energiájának impulzusfüggése a vizsgált minta diszperziós relációjába kínál betekintést. A fotoemissziós spektroszkópia azonban nem ad lehetőséget a teljes háromdimenziós sávszerkezet meghatározására (hiszen a fotoelektron minta felületére merőleges impulzus komponense nem köthető össze közvetlenül a Bloch-elektron kváziimpulzusával), de a vizsgált kristálytani felületre tett projekciója közvetlenül feltérképezhető.

A fotoemisszió mikroszkopikus leírását az elektron és foton közti kölcsönhatás tárgyalásával kezdjük meg. Az elektronokat leíró Hamilton-operátort az  $\mathbf{A}$  vektorpotenciállal jellemzett

elektromágneses tér jelenlétében az alábbi általános alakban adhatjuk meg:

$$\hat{H}_e = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2}{2m_e} + V_{eff}(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

ahol  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  az elektron impulzus-operátora,  $e$  az elektron töltése,  $m_e$  az elektron tömege és  $V_{eff}(\mathbf{r})$  az effektív egy-elektron potenciál a kristályban, mely tartalmazza a vákuumhoz képesti energia-eltolódást is. Az (1.2) Hamilton-operátorból elhagyva a vektorpotenciálban magasabb rendű tagokat, az alábbi kölcsönhatási Hamilton-operátorhoz jutunk az elektronok és elektromágneses tér között:

$$\hat{H}_{kh} = \frac{i\hbar e}{2m_e} (\mathbf{A}\nabla + \nabla\mathbf{A}) = \frac{i\hbar e}{m_e} \left( \mathbf{A}\nabla + \frac{\text{div}\mathbf{A}}{2} \right). \quad (1.3)$$

Amennyiben a vektorpotenciál állandónak tekinthető atomi távolságokon belül (például UV tartományban), a kölcsönhatási operátorban a  $\text{div}\mathbf{A} \approx 0$  dipól-közelítéssel<sup>2</sup> élhetünk. Az elhanyagolt  $\text{div}\mathbf{A}$  tagnak azonban lényeges szerepe lehet közvetlenül a minta felületén, ahol a közeg dielektromos állandója atomi távolságokon belül változik [2, 4, 5]. A felületi korrekciók többnyire a beütés csúcsok félértékszélességéhez képest a csúcs kicsi elmozdulásához, illetve szimmetrikusságának elvesztéséhez vezetnek [4]. Másodkvantált formalizmusban ekkor a kölcsönhatási operátor az alábbi alakban írható:

$$\mathbf{H}_{kh} = \sum_{\mu,\eta} \mathcal{H}_{kh}^{\mu,\eta} a_{\mu}^{\dagger} a_{\eta}, \quad \mathcal{H}_{kh}^{\mu,\eta} = \frac{i\hbar e}{m_e} \langle \phi_{\mu} | \mathbf{A}\nabla | \phi_{\eta} \rangle, \quad (1.4)$$

ahol  $\phi_i$  az  $a_i^{\dagger}$  ( $a_i$ ) operátorral keltett (eltüntetett) egyrészecskes állapot hullámfüggvényét jelenti. Az időfüggő perturbációs számítás gondolatmenetét követve felírhatjuk a fotoemisszió előtti kezdeti (*kezd*) és fotoemisszió utáni végállapot (*v*) közti átmeneti valószínűséget:

$$w_{kezd \rightarrow v} = \frac{2\pi}{\hbar} n_F(-E_{kt}) \left| \langle \Psi_v^N | \mathbf{H}_{kh} | \Psi_{kezd}^N \rangle \right|^2 \delta(E_v^N - E_{kezd}^N - h\nu), \quad (1.5)$$

ahol  $\Psi_{kezd}^N$  és  $\Psi_v^N$  rendre a kezdeti és végső  $N$ -részecskes állapotot,  $n_F(-E_{kt})$  pedig az  $E_{kt}$  kötési energiájú állapotok betöltési számát jelentik. Ezen felül  $E_{kezd}^N$  és  $E_v^N$  a kezdeti és végállapot energiáit jelölik. Bár a minta belsejében az elektronok Bloch-függvényekkel, a mintától távol pedig a detektorba tartó síkhullámmal való leírása jó közelítésnek minősül, a vákuum-minta felület kezelése nagy mértékben nehezíti a folyamat tárgyalását. Az irodalomban két módszer terjedt el a felület problémájának kezelésére. Az ún. *három lépés modell* [2, 3, 6, 7] (three-step model) az (i) elektron gerjesztését, (ii) utazását a minta-vákuum felületre és a (iii) felületről való szóródását a

<sup>2</sup>A mintában az elektromágneses tér anyaggal való kölcsönhatása miatt  $\text{div}\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \sim \rho$ , ami szigorúan véve nem nulla.

vákuumba három független folyamatként kezeli. Ezzel szemben az ún. *egy lépés modell* [8, 9] (one-step model) a foton elnyelését, a gerjesztett elektron utazását a felület felé és végül a vákuumba történő kilépését egy koherens folyamatként kezeli. Ebben a modellben a kristályt leíró Hamilton-operátor tartalmazza a tömbi kristály részt, a felületet és a vákuumot is. A leírás összetettségéből kifolyólag az egy lépés modell inherensen tartalmaz minden felületi effektust (a dipólközelítésben elhanyagolt  $\text{div}\mathbf{A}$  tagot is tartalmazza). Ha szükségszerű a fotoemissziós mérésekkel való kvantitatív egyezés, az egy lépés modell használata ajánlott a három lépés modellel szemben. A leírási pontosság növelése azonban a modell szemléletességét csökkenti. Jelen értekezésben ezért a mérési effektusok megértésére és kvalitatív leírására használt három lépés modellt mutatom be. A három lépés modell egyes részeit az 1.2.(b) ábra szemlélteti. A végső fotoelektron-intenzitást ezen három lépéshez tartozó valószínűségek szorzata adja [6].

(i) Az (1.5) egyenlettel meghatározott átmeneti valószínűség meghatározásához célszerű az  $N$ -részcskés hullámfüggvényt faktorizálni egy fotoelektron és egy  $(N - 1)$ -részcskés „maradék rendszer” hullámfüggvényének szorzatára. A feladat azonban korántsem triviális, hiszen a fotoemisszió során a rendszer maga is relaxálódik. A helyzetet lényegesen egyszerűsít az ún. *pillanatszerű közelítés* (sudden approximation) [2, 4, 5, 6, 7]. A közelítésben a fotoemissziós folyamatot pillanatszerűnek tekintjük, elhanyagolunk minden további kölcsönhatást a fotoelektron és a visszamaradt  $(N - 1)$ -részcskés rendszer között. Más megfogalmazással élve, a fotoelektronra úgy tekintünk mintha azt pillanatszerűen elvonnánk a rendszerből és a rendszer effektív potenciálja ebben a pillanatban ugrásszerűen megváltozna. Az  $N$ -részcskés állapotot ennek következtében a  $\Psi_v^N = a_v^\dagger \Psi_v^{N-1}$  alakban adjuk meg, ahol  $a_v^\dagger$  egy  $\phi_v(\mathbf{r})$  hullámfüggvénnyel leírható ún. *fotoelektron-állapotot* kelt a vákuum-energia felett. A visszamaradt  $\Psi_v^{N-1}$  állapot az  $(N - 1)$ -részcskés rendszer  $\Psi_m^{N-1}$  sajátállapotainak egyikével azonosítható<sup>3</sup>, melynek energiája  $E_m^{N-1}$ . A továbbiakban  $v \rightarrow v_m$  indexszel jelöljük a lehetséges végállapotokat. A pillanatszerű közelítés nem alkalmazható alacsony kinetikus energiájú fotoelektronok esetében, melyekre a vákuumba történő kilépéshez szükséges idő nagyobb a rendszer relaxációs idejénél. Ebben az esetben a hullámfüggvény nem faktorizálható a fentiekben leírt módon, a fotoemissziós folyamatot körültekintőbben kell kezelni [10]. A kezdeti  $\Psi_{kezd}^N$  állapotról feltesszük, hogy ismerjük az egzakt egyrészcskés hullámfüggvényeket, melyekkel egy Slater-determinánssal írhatjuk fel az  $N$ -részcskés sajátállapotot. Ezzel a hullámfüggvény a  $\Psi_{kezd}^N = a_k^\dagger \Psi_k^{N-1}$  alakban írható, ahol  $a_k^\dagger$  a fotoemisszió során kilökött,  $\phi_k(\mathbf{r})$  hullámfüggvénnyel leírható,  $\hbar\mathbf{k}$  impulzusú Bloch-állapot keltő operátora. (Az egyszerűség kedvéért csupán egy sávval foglalkozunk.) A pillanatszerű közelítés

<sup>3</sup>A rendszert az  $(N - 1)$ -részcskés sajátállapotok egyikébe a fotoelektron mérése ugraszítja. A mérésig a rendszer az  $(N - 1)$ -részcskés sajátállapotok kevert állapotával írható le.

maga után vonja a sokrészcskés rendszer effektív potenciáljának ugrásszerű változását, emiatt a  $\Psi_{\mathbf{k}}^{N-1}$  állapot nem egzakt sajátállapota az  $(N-1)$ -részcskés rendszernek, az valamelyik  $\Psi_m^{N-1}$  sajátállapotba relaxálódik a mérés során. Az (1.5) egyenletben szereplő kölcsönhatási mátrixelem, feltéve, hogy az  $a_{v_m}^\dagger$  operátorral keltett  $(\Psi_{v_m}^N = a_{v_m}^\dagger \Psi_m^{N-1})$  fotoelektron állapot merőleges minden betöltött Bloch-állapotra, az alábbi alakban írható:

$$\langle \Psi_{v_m}^N | \mathcal{H}_{kh} | \Psi_{k_{ezd}}^N \rangle = \sum_{\mu, \eta} \mathcal{H}_{kh}^{\mu, \eta} \langle \Psi_m^{N-1} | a_{v_m} a_\mu^\dagger a_\eta a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Psi_{\mathbf{k}}^{N-1} \rangle = \mathcal{H}_{kh}^{v_m, \mathbf{k}} \langle \Psi_m^{N-1} | \Psi_{\mathbf{k}}^{N-1} \rangle. \quad (1.6)$$

Behelyettesítve a kölcsönhatási mátrixelemet az (1.5) egyenletbe, felösszegezve a lehetséges sokrészcskés *kezd* kezdeti és  $v_m$  végállapotokra, valamint bevezetve az

$$A_{\mu\eta}^0(\hbar\omega) = 2\pi \sum_{m, k_{ezd}} \langle \Psi_m^{N-1} | a_\mu | \Psi_{k_{ezd}}^N \rangle \langle \Psi_{k_{ezd}}^N | a_\eta^\dagger | \Psi_m^{N-1} \rangle \delta(\hbar\omega + E_m^{N-1} - E_{k_{ezd}}^N) \quad (1.7)$$

spektrális függvényt, a fotoelektronok intenzitása az első lépés után az alábbi alakban írható:

$$w_{\nu\mathbf{k}}^0(\hbar\omega, \mathbf{k}_\parallel + \mathbf{G}_\parallel) \sim n_F(\hbar\omega) \left| \mathcal{H}_{kh}^{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}_\parallel) \right|^2 A_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^0(\hbar\omega). \quad (1.8)$$

Az összefüggésben  $\hbar\omega = -E_{k\ell} = E_{k_{in}} + \Phi - h\nu$ , valamint  $\mathcal{H}_{kh}^{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}_\parallel)$  (és ezzel együtt a  $\tilde{\nu}$  index) az egymástól kicsit eltérő  $v_m$  végállapotú fotoelektronokra vonatkoztatott átmeneti mátrixelemek átlagát jelöli. A fotoelektron végállapotok a  $\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{G}_\parallel$  felülettel párhuzamos impulzuskomponensben, valamint az  $E_m^{N-1}$  sokrészcskés sajátenergia-csozlásából adódóan az  $E_{k_{in}}$  kinetikus energiájukban térnek el egymástól. Az optikai gerjesztési folyamat közben a Bloch-elektron kváziimpulzusa egy  $\mathbf{G}_\parallel$  reciprok rácsvektor erejéig marad csak meg, ezért a kölcsönhatási mátrixelemek különböző  $\mathbf{G}_\parallel$ -k mellett lényegesen eltérhetnek egymástól (erre konkrét példát a 3.1.2. szakaszban látunk majd). Az  $E_m^{N-1}$  sokrészcskés sajátenergiáról azonban feltehetjük, hogy csupán kissé térnek el egymástól, ezért a  $\mathcal{H}_{kh}^{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}_\parallel)$  mátrixelem eloszlása adott  $\mathbf{G}_\parallel$  mellett a  $\mathcal{H}_{kh}^{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}_\parallel)$  átlagos mátrixelem köré lokalizálódik.

Megjegyezzük, hogy a számolás véges hőmérsékleten is elvégezhető. Ekkor az (1.8) egyenletben  $A_{\mu\eta}(\hbar\omega)^0$  helyett a véges hőmérsékletű

$$A_{\mu\eta}^T(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{Z n_F(\hbar\omega)} \sum_{m, k_{ezd}} e^{-E_{k_{ezd}}^N / (k_B T)} \langle \Psi_m^{N-1} | a_\mu | \Psi_{k_{ezd}}^N \rangle \langle \Psi_{k_{ezd}}^N | a_\eta^\dagger | \Psi_m^{N-1} \rangle \delta(\hbar\omega + E_m^{N-1} - E_{k_{ezd}}^N) \quad (1.9)$$

spektrális függvény Lehmann alakját használjuk, ahol  $Z = \sum_{k_{ezd}} e^{-E_{k_{ezd}}^N / (k_B T)}$  az állapotösszeget jelöli. A fotoelektronok intenzitása az első lépés után, véges hőmérsékleten az alábbi egyenlettel adható meg:

$$w_{\nu\mathbf{k}}^T(\hbar\omega, \mathbf{k}_\parallel + \mathbf{G}_\parallel) \sim n_F(\hbar\omega) \left| \mathcal{H}_{kh}^{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}_\parallel) \right|^2 A_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^T(\hbar\omega). \quad (1.10)$$

Az egyenletben a spektrális függvény diagonális eleme, azaz a lokális állapotsűrűség szerepel. A fotoemissziós mérések ezért – gyengén változó kölcsönhatási mátrixelemek esetében – alkalmasak az impulzustérbeli lokális állapotsűrűség feltérképezésére.

(ii) A három lépés modell második lépésében az elektronok átlagos szabad úthosszáról feltesszük, hogy az független a hullámszámtól, ezért a három lépés modellben az elektronok terjedése a felületig nem ad strukturális járulékot a fotoelektronok energia-impulzus eloszlásában, csupán a jel intenzitását csökkenti. Megjegyezzük azonban, hogy a véges szabad úthossz miatt többszörösen szóródó elektronok a mért MDC, vagy EDC görbékben a jel háttéréhez adnak (jó közelítéssel homogén) járulékot.

(iii) A harmadik lépés tárgyalásához írjuk fel a fotoelektron  $\phi_{\mathbf{v}}$  hullámfüggvényét! A  $\tilde{\nu} = \mathbf{k}_{\parallel}$  kvantumszám a továbbiakban a felülettel párhuzamos impulzust jelenti adott  $E_{kin}$  kinetikus energia mellett. A  $\phi_{\mathbf{k}_{\parallel}}$  hullámfüggvény a minta belsejében teljesíti a Bloch-feltételt a felülettel párhuzamos  $\mathbf{r}_{\parallel}$  koordinátákban, ezért kifejezhető a  $\mathbf{G}_{\parallel}$  reciprok rácsvektorokban:

$$\phi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \sum_{\mathbf{G}_{\parallel}} \left[ u_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{G}_{\parallel}}(z) \text{Exp}(i\mathbf{k}_{z, \mathbf{G}_{\parallel}} z + i(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{G}_{\parallel})\mathbf{r}_{\parallel}) \right]. \quad (1.11)$$

Az (1.11) egyenletben bevezettük a  $k_{z, \mathbf{G}_{\parallel}}$  merőleges hullámszámot, melyet a vákuumban terjedő szabad elektron diszperziójából származtatunk:

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (k_{z, \mathbf{G}_{\parallel}}^2 + (\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{G}_{\parallel})^2). \quad (1.12)$$

Az (1.11) egyenlet szerint tehát a vákuumban propagáló fotoelektronok különböző síkhullámok összegével írhatóak le. Ezek a síkhullámok, különböző  $\hbar(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{G}_{\parallel})$  és  $\hbar k_{z, \mathbf{G}_{\parallel}}$  impulzusuk révén, különböző irányokba terjednek, így az adott irányban elhelyezett detektor ezek egyikét detektálja (lásd az 1.2.(c) ábrát). Megjegyezzük, hogy a különböző,  $\mathbf{G}_{\parallel}$ -vel jellemezhető, irányokban a különböző  $\hbar\mathbf{k}_{\parallel}$  impulzusú állapotok egy-egy kúpot formálnak (lásd az 1.2.(c) ábrát). A kúpot a fotoemisszió kúpjainak, vagy *Mahan kúpoknak* nevezik. Az  $u_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{G}_{\parallel}}(z)$  együttthatók  $z \rightarrow -\infty$  határesetben az (1.10) átmeneti valószínűségekkal arányosak,  $z \rightarrow \infty$  határesetben pedig véges értéket vesznek fel. További közelítés az elméletben, hogy eltekintünk a határfelületen történő szóráshoz rendelhető transzmissziós tényező  $\mathbf{k}_{\parallel}$  függésétől. Ezt a közelítést azzal magyarázhatjuk, hogy a fotoelektronok különböző  $\mathbf{k}_{\parallel}$  hullámszámai sokkal kisebb határok között változtatják a kinetikus energiát, mint amennyi a szórási folyamat másik energiaskálája, a kilépési munka, ami tipikusan  $\sim 10$  eV nagyságrendbe esik. A detektorba tartó fotoelektronok végső intenzitása ezért arányos az (1.10) átmeneti valószínűséggel:

$$I(\hbar\omega, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{G}_{\parallel}) \sim w_{\mathbf{v}, \mathbf{k}}^T(\hbar\omega, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{G}_{\parallel}). \quad (1.13)$$



A fotoelektronok intenzitás-eloszlását tehát két tényező befolyásolja leginkább: (a) a  $|\mathcal{H}_{kh}^{\text{nk}}(\mathbf{G}_{\parallel})|^2$  kölcsönhatási mátrixelem a kristályrács szimmetriáinak megfelelő kiválasztási szabályokkal gazdagíthatja a mérési eredményeket. Ez a helyzet például grafénben is, ahol bizonyos irányokban, az alacsony energiás elektronok izotróp diszperziójának ellenére, a fotoelektronok intenzitása kioltódik. Ezzel a kérdéssel részletesen majd a 3.1.2. szakaszban foglalkozunk. (b) Nemkölcsonható esetben az  $A_{ii}$  spektrális függvény egyszerű Dirac-deltára egyszerűsödik. Ideális mérési eszközök esetében ekkor az MDC vagy EDC görbékben is a véges félérték-szélességű csúcsok helyett egyedülálló Dirac-deltákat várunk. Az elemi gerjesztések közötti kölcsönhatás azonban a csúcsok véges kiszélesedéséhez, illetve azokon ülő ún. *szatellit csúcsok* kialakulásához vezet ideális mérőberendezés esetében is, hiszen a spektrum egy Dirac-delta helyett sok Dirac-deltából áll össze. Olyan rendszerekben pedig, ahol az  $E_m^{N-1}$  energiák a mérési felbontásnál jobban felvannak hasadva (például egy molekula esetében) egy csúcs helyett több csúcsot mutatnak a mért MDC vagy EDC görbék [11].

### 1.1.3. Egyéb kísérleti effektusok

Mérési szempontból fontos megjegyezni, hogy az ARPES mérési technikával csupán betöltött elektronállapotokról lehet információt szerezni. Bár véges hőmérséklet esetében a Fermi-energia feletti állapotok is részlegesen betöltődnek a Fermi-féle eloszlásfüggvénynek megfelelően, a Fermi-energia feletti állapotok vizsgálatára az ARPES technológia nem alkalmas. A probléma egy lehetséges áthidalása a vizsgált minta Fermi-energiájának hangolásával érhető el kapuelektrodák, vagy elektron-donor szennyezőatomok adagolásával. Egy másik lehetőség az ún. *inverz-fotoemissziós* folyamat létrehozása, mely során a minta felületére elektron-nyalábot irányítva a befogott elektronok által kibocsátott fotonokat mérik. Megjegyezzük azonban, hogy az inverz-fotoemissziós technika összehangolása az ARPES technikával nagyon összetett feladat, hiszen két teljesen különböző mérőberendezésről van szó.

A hőmérséklet a elektronállapotok betöltésén kívül a mért intenzitás-csúcsok kiszélesedését is növeli a spektrálfüggvény hőmérsékletfüggésén keresztül, az eszköz energiafelbontását csökkentve ezzel. A mérési módszer impulzus felbontása ezzel szemben csak az eszközökön múlik (például véges pontosságú szögfelbontás, maradék mágneses tér, az elektronok fókuszáló optikájának hibái). Mindkét effektus figyelembe vehető az (1.13) egyenletben szereplő  $I(\hbar\omega, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{G}_{\parallel})$  fotoelektron-intenzitás megfelelően választott Gauss-, vagy Lorentz-görbékkel történő konvolúciójával mind az energia-, mind az impulzustérben.

Egy valódi ARPES mérésben a mért intenzitás-görbék a tanulmányozni kívánt jelen felül háttér jelet is tartalmaznak. A háttér jelenléte többek között a megvilágításra alkalmazott foton-

nyaláb magasabb rendű harmonikusaiival, a többszörösen szóródó fotoelektronokkal és a diszperziómentes mély atomi pályákat betöltő elektronok kilökésével magyarázható.

#### 1.1.4. Spin és impulzus felbontású fotoemissziós spektroszkópia (SARPES)

Az utóbbi évek fejlődése a spintronika területén serkentette az ARPES mérési technika kiterjesztését az elektronok spinjének tanulmányozására is. Az új spinfelbontású ARPES technikára az irodalomban a SARPES (spin and angle-resolved photoemission spectroscopy) rövidítéssel hivatkoznak. Ebben a mérési módszerben az ARPES technikához képest az 1.1. ábrán látható elektron detektort két spinérzékeny ún. *Mott-detektorra* cserélték [12]. Az elektronok a hemiszférikus analizátort elhagyva két elektronnyalábra osztódva érkeznek meg a Mott-detektorokba. Mindkét detektor az elektronnyaláb detektor síkjába eső spin-polarizáltságát tudja megmérni. A két síkvetületből az elektronnyaláb háromdimenziós spin-polarizációja meghatározható.

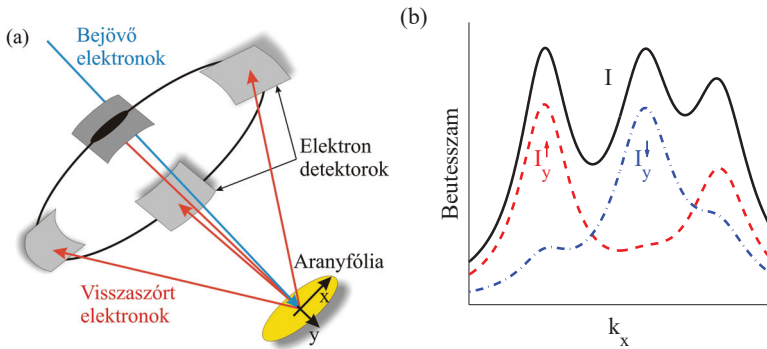
A Mott-detektor működése az alábbi egyszerű gondolatmenettel érthető meg (a detektor vázlatos rajzát az 1.3.(a) ábra szemlélteti): a detektorba érkező elektronnyaláb egy aranyfólián szóródik, mely elég vékony ahhoz, hogy az elektronok többszörös szóródását a detektorban elhanyagoljuk. Az elektronok szóródását rögzített ionokon első közelítésben a *Rutherford-féle* szórás hatáskeresztmetszet írja le. Az elektronszórás ezen modellje elhanyagolja az atomok visszalökődését, valamint az elektronok mágneses momentumának kölcsönhatását az atommaggal. Az arany atomok magas rendszáma miatt azonban a szórásban lényeges szerepet játszik a spin-pálya kölcsönhatás. A szórási folyamat *Mott-féle* tárgyalása figyelembe veszi az említett spin-pálya kölcsönhatás és atommag-visszalökődés korrekcióit is. Az arany atomokon az elektronok irányfüggő spin-polarizációval szóródnak. Egy teljesen polarizált beeső elektronnyaláb már nem lesz teljesen polarizált az egyes irányokba szóródva. Az aranyfólián szóródott elektronokat ezért a beeső elektronnyalábhöz képest szimmetrikusan elhelyezkedő két-két elektrondetektorral mérik. A szimmetrikusan elhelyezkedő detektorok beütésszámaiból ( $N_L$ ,  $N_R$ ) definiálhatjuk az  $A$  ún. *spin-aszimmetriát*, mely az alábbi összefüggéssel adott:

$$A = \frac{N_L - N_R}{N_L + N_R} . \quad (1.14)$$

A spin-aszimmetria arányos a beeső elektronnyaláb  $P$  spin-polarizáltságával:

$$P = A/S , \quad (1.15)$$

ahol  $S$  az ún. *Sherman-függvényt* jelöli [13]. Az  $S$  koefficiens több tényezőtől is függhet (szóródási szög, beeső nyaláb energiája, stb.), azonban a mérés során állandónak tartható, hiszen az



1.3. ábra. (a) Mott-detektor vázlatos rajza. A bejövő elektronok az aranyfólián spin-polarizációjukat tekintve anizotróp módon szóródnak. Az egymással szembe állított detektorok beütésszámainak különbségéből az elektronok  $x$  és  $y$  irányú spin-polarizációjára lehet következtetni. (b) Mesterséges adatsoron létrehozott  $y$  irányú spin-vetület áramok ( $I_y^\uparrow$  és  $I_y^\downarrow$ ) és a teljes spin-integrált áram ( $I = I_y^\uparrow + I_y^\downarrow$ ).

elektron-detektorok helyzete az aranyfóliához képest nem változik, ahogy a beeső elektronnyaláb iránya és energiája is állandónak tartható. Ekkor a Sherman-függvény a mérés során csupán egy számnak tekinthető, értékét a teljesen polarizált beeső elektronnyaláb esetén a mért spin-aszimetriából származtatják az (1.15) egyenlettel. Az egymásra merőlegesen elhelyezett két detektorpárral így mérhetővé válik az elektronnyaláb spin-polarizációjának az aranyfólia síkjába eső vetülete. Végül pedig, ahogy arra már utaltunk, két Mott-detektor segítségével, melyek mindegyike meghatározza az aranyfólia síkjába eső spin-polarizáció vetületet, meghatározható a beeső elektronnyaláb teljes háromdimenziós spin-polarizáltsága. Megjegyezzük azt is, hogy a SARPES mérés tipikusan  $10^3$ - $10^4$ -szer több időt vesz igénybe, mint az ARPES technika [14]. A meglehetősen nagy időkülönbség oka az, hogy SARPES technika esetében az elektron-detektorok az aranyfóliáról visszaszóródó elektronokat mérik. Mivel a visszaszórásnak nagyon kicsi a hatáskeresztmetszete, lényegesen több időbe telik a statisztikailag megfelelő mennyiségű adat begyűjtése.

### 1.1.5. Spinpolarizáció mérése SARPES technikával

Az előző szakaszban felvázolt egyszerű gondolatmenettel ellentétben egy valódi SARPES mérés adatainak kiértékelése ennél összetettebb feladat. Az összetettség oka, hogy többnyire a mért MDC (vagy EDC) görbék több beütéscsúcsot tartalmaznak, melyek gyakran átfednek egymással (lásd az 1.3.(b) ábrán bemutatott fekete folytonos görbét). Ennek következtében a mért spinpolarizáció görbék bonyolulttá válnak és nem szolgáltatnak közvetlen információt a vizsgált minta elektronjairól. Ebben a szakaszban röviden áttekintjük az adatok kiértékelésének leginkább elterjedt módszerét, az ún. *két lépéses illesztés* (two-step fitting routine) módszert[14]. Ehhez bevezetjük az  $\alpha = x, y, z$  irányra vett  $I_\alpha^\uparrow$  és  $I_\alpha^\downarrow$  spin-vetület áramokat, ahol  $I_\alpha^\uparrow$  ( $I_\alpha^\downarrow$ ) az  $\alpha$  spin kvantálási irányban vett  $+1/2$  ( $-1/2$ ) spinű elektronok áramát jelöli. Az általánosság elvesztése nélkül tegyük fel, hogy a mérést a Brillouin-zóna  $k_x$  irányában végezzük. Az  $\alpha$  irányban vett polarizáció kifejezhető a bevezetett áramokkal:

$$P_\alpha(k_x) = \frac{I_\alpha^\uparrow(k_x) - I_\alpha^\downarrow(k_x)}{I_\alpha^\uparrow(k_x) + I_\alpha^\downarrow(k_x)}. \quad (1.16)$$

Ezen felül  $I = I_\alpha^\uparrow + I_\alpha^\downarrow$  jelölje az elektronnyaláb teljes, ún. *spin-integrált* intenzitását. A módszer első lépésében a spin-integrált adatokra illesztnek annyi Gauss, Lorentz vagy még összetettebb görbealakot, amennyi csúcsból ( $N$ ) a spin-integrált adatsor áll. A spin-integrált intenzitás ekkor az egyes csúcsok spin-integrált járulékeinak ( $I^{(i)}(k_x)$ ) és a háttér ( $B(k_x)$ ) összegeként írható fel:

$$I(k_x) = \sum_i^N I^{(i)}(k_x) + B(k_x). \quad (1.17)$$

A háttér gyakran közelíthető egy konstans értékkel, vagy lineáris függvénnyel. Az összes csúcs illesztési paraméterei a csúcsok pozíciója, félértékszélessége és magassága.

A módszer második lépésében mindegyik csúcshoz egy ( $k_x$  független) polarizációt definiálunk:

$$\mathbf{P}^{(i)} = (P_x^{(i)}, P_y^{(i)}, P_z^{(i)}) = c_i(\cos \theta_i \cos \varphi_i, \cos \theta_i \sin \varphi_i, \sin \theta_i), \quad (1.18)$$

ahol a második lépés illesztési paraméterei a  $0 \leq c_i \leq 1$  polarizáció mértéke,  $\theta$  és  $\varphi$  pedig a megszokott gömbi koordináták lesznek. Az (1.16) egyenlettel vont analógia alapján az egyes csúcsok spin-vetület áramai:

$$I_{\alpha}^{\uparrow, (i)}(k_x) = \frac{1 + P_{\alpha}^{(i)}}{2} I^{(i)}(k_x), \quad I_{\alpha}^{\downarrow, (i)}(k_x) = \frac{1 - P_{\alpha}^{(i)}}{2} I^{(i)}(k_x), \quad \alpha = x, y, z. \quad (1.19)$$

Nemmágneses rendszerek esetében feltesszük azt is, hogy a háttér polarizálatlan. A teljes spin-vetület áramok ( $I_\alpha^\uparrow(k_x)$  és  $I_\alpha^\downarrow(k_x)$ ) ekkor az alábbi alakban írhatóak:

$$I_\alpha^\uparrow(k_x) = \sum_i^N \left[ \frac{1 + P_\alpha^{(i)}}{2} I^{(i)}(k_x) \right] + \frac{B(k_x)}{2}, \quad I_\alpha^\downarrow(k_x) = \sum_i^N \left[ \frac{1 - P_\alpha^{(i)}}{2} I^{(i)}(k_x) \right] + \frac{B(k_x)}{2}, \quad (1.20)$$

ahol  $\alpha = x, y, z$ . A teljes spin-vetület áramokat a mérési adatokból az (1.16) képlettel számolhatjuk ki a teljes polarizáció és a teljes spin-integrált intenzitás ismeretében. A teljes polarizáció pedig a két Mott detektor által meghatározott kétdimenziós vetületből származtatható, melyeket a beütésszámokból az (1.15) és (1.14) egyenleteket alkalmazva határozhatunk meg. Az (1.20) egyenletben szereplő teljes spin-vetület áramok függvényeit illesztve a mérési adatokból meghatározott teljes spin-vetület áramok adatsorára, az egyes csúcsokhoz rendelt  $\mathbf{P}^i$  polarizációvektorok meghatározhatóak. Egy mesterségesen előállított adatsorhoz tartozó  $I_y^i(k_x)$  és  $I_x^i(k_x)$  áramokat szemléltet az 1.3.(b) ábra, melyen  $N = 3$  csúcs azonosítható. Az (1.20) összefüggések illesztése az egyes csúcsokhoz rendre  $P_y = \{0.7, -0.8, 0.3\}$  polarizáció komponens eredményez. A bemutatott módszer hiányossága, hogy az illesztésekkel nyert  $\mathbf{P}^i$  polarizáció vektorok az impulzustól független számok. Abban az esetben, amikor a spin-polarizáció az egyes csúcsok keresztmetszetében gyorsan változik, a polarizáció pontos meghatározása további megfontolásokat igényel.

A két lépéses illesztés módszerének fő előnye, hogy a mért eloszlás görbékben szétválaszthatóak az egyes elektronállapotok járulékai, ezért a sávszerkezet egyes sávjai külön vizsgálhatóak.

## 1.2. Pásztázó tűszondás mikroszkópok

A pásztázó tűszondás mikroszkópos (SPM: scanning probe microscope) mérési módszerek a fotoemissziós technikákhoz hasonlóan, kiválóan alkalmasak felületi tulajdonságok vizsgálatára, mint például a felület topográfiája, kémiai kötések, dielektromos és mágneses tulajdonságok, stb. Az egyes tulajdonságok mérései azonban teljesen különböző szempontok szerint megépített mérési berendezéseket igényelnek. A két legelterjedtebb módszer a *pásztázó alagútmikroszkóp* (STM: scanning tunneling microscope) és *pásztázó erőmérési mikroszkóp* (SFM: scanning force microscope) technikák. Mindkét esetben éles, vezető anyagból készült tű és a vizsgált felület kölcsönhatását vizsgálják. Az STM mérés során a tű és a minta között átfolyó alagútáram és feszültség, míg az SFM mérés során a tű és felület közti erő a központi mennyiség. Általában a mérési berendezést alacsony nyomású kamrában helyezik el, ahol a nyomás kisebb  $\sim 10^{-9}$  Torr-nál. A kamra egy masszív keretre van erősítve, mely rezgéscsillapító elemekkel (pl.: gumilábak) van ellátva. A belső elemek relatív rezgéseit is hasonló módszerekkel csillapítják. A tűszondát egy piezoelektromos mozgató-mechanikához erősítik. A mozgató-mechanikára kapcsolt feszültség segítségével a tűszonda hegyének távolságát a minta felületétől  $\sim 0.1 \text{ \AA}$  pontossággal lehet szabályozni. Mivel a tényleges távolság megállapítása nehéz feladat, a mérésekben a távolsá-

got (illetve változását) általában a piezoelektromos mozgató-mechanika feszültségével szokták jellemezni[15]. A felület pásztázása során gyakran alkalmaznak áramstabilizáló visszacsatoló áramkört, mellyel az alagútáramot állandónak tartják. Az áramot a piezoelektromos mozgató-mechanikára kapcsolt feszültséggel lehet szabályozni, mely során a tűszonda és a felület közti távolság változik. A módszer nagy felbontása a felületre merőleges irányban, az alagútáram érzékenysége van kapcsolatban a felülettől mért távolság függvényében. (Az alagútáram tipikusan exponenciális függést mutat a tűszonda és felület közti távolságtól.) A felület morfológiai tulajdonságai ekkor a piezoelektromos mozgató-mechanikára kapcsolt feszültség helyfüggésére vezethetőek vissza.

A mérési eljárás egy másik meghatározó mennyisége a tűszondára kapcsolt feszültség a felülethez képest. A továbbiakban ezt a feszültséget a kontaktusra kapcsolt feszültségnek nevezzük. Az alagútáram(I) -feszültség(V) görbét (az áramszabályzó áramkör kikapcsolása mellett) minden pontban könnyű kimérni. Ahogy majd látni fogjuk az 1.2.1. szakaszban, az I-V függvényből a felületi elektronállapotok tulajdonságaira következtethetünk. Mivel  $V_{bias}$  feszültség mellett (0 K hőmérsékleten) az alagútáramban az  $E_F$  és  $E_F + eV_{bias}$  energiatartományba eső elektronállapotok vesznek részt (ahol  $E_F$  a minta Fermi-energiája,  $e$  pedig az elektrontöltés), az elektronállapotok tulajdonságaira az energia függvényében a  $\frac{dI}{dV}$  differenciális vezetőképességből lehet következtetni.

Az STM mérések egy fontos megszorítása, hogy az alagútáramból kifolyólag vezető minta tanulmányozására alkalmasak. Szigetelő felületeket ezért többnyire vezető mintákra növesztve szokás vizsgálni. (Az SFM mérési módszerek általában mentesek ettől a megszorítástól.) Bár a mérések többsége szobahőmérsékleten is végezhető, nagyfelbontású mérésekhez alacsony hőmérséklet (4 – 16 K) szükséges. Az impulzus felbontásos módszerekhez képest az SPM módszerek valós térbeli felbontást tesznek lehetővé. Segítségükkel akár egy atomból álló szennyezések is felbonthatóak. A mérés minősége és felbontása nagyban függ a tűszonda tulajdonságaitól. A tűszondát általában tiszta fémből készítik[16], azonban nem ritka, hogy 10-20 rétegnyi más anyagból készült köpennyel is bevonják[17]. A célnak legjobban megfelelő tűszondák alakjai az STM és SFM mérésekben lényegesen eltérnek egymástól. SFM mérésekben gúla alakú ( $\sim \mu\text{m}$  skálán) tűszondát készítenek, míg STM mérésekben előnyösebb, ha a tűszonda hegyét a lehető legvékonyabb, egy „atom vastag csúcs” alkotja. Ekkor az alagútáram a felület  $\text{\AA}^2$  területén folyik keresztül. Az egyre jobb felbontású eredmények megkövetelik a tűszonda alakjának egyre pontosabb ismeretét. A tűszonda és a felület atomjai között fellépő számos kölcsönhatás mellett (Van der Waals-kölcsönhatás, az inhomogén töltéeloszlás által indukált elektrosztatikus kölcsönhatás, egyéb kémiai kölcsönhatások, stb.) gyakori, hogy a tűszondára a vizsgált felületről

atomok kerülnek át. A mérési adatok kiértékelése ezért nagyon igényes feladat, az eredmények kvantitatív leírásához bonyolult, első elvekből származtatott elméletek szükségesek.

### 1.2.1. Az STM mérések elméleti leírása

Az első elvekre alapozott bonyolult, lényeges számítástechnikai erőforrásokat igénylő modellek mellett, egyszerűbb és szemléletesebb modelleket is alkalmaznak az STM mérések főbb vonásainak megértésére. Napjainkban négy modellt alkalmaznak attól függően, hogy mennyire részletes numerikus egyezés szükséges az adott vizsgálat során. A legegyszerűbb modellt az ún. *Tersoff-Hamann modell* [18], mely szerint az alagútáramot a vizsgált minta lokális elektronállapotsűrűsége határozza meg. Az ún. *Bardeen-féle átmeneti mátrixelemes módszer* [19] figyelembe veszi a tűszonda hegyét jellemző elektronállapotokat is. Az első elvekre támaszkodó (többnyire tight-binding modellre épülő) *Landauer-Büttiker megközelítés* figyelembe vesz több kezdeti és végállapot közti transzmissziót és ezek interferenciáit is [20]. A legösszetettebb és legtöbb fizikai effektust (pl.: rugalmatlan elektron-szórás elektronokon és fononokon) figyelembe vevő elmélet a *nemegyensúlyi Green-függvény formalizmusra* épül [21].

A továbbiakban a legegyszerűbb modellt ismertetjük részletesebben, hiszen az értekezés további fejezeteinek megértése szempontjából ez a modell elegendő.

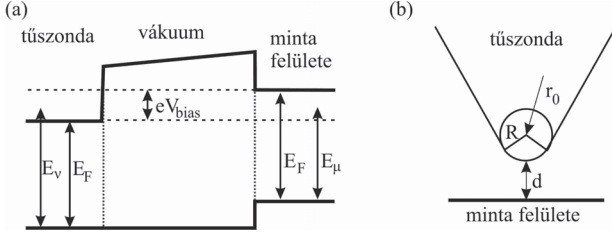
### 1.2.2. A Tersoff-Hamann modell

A Tersoff-Hamann modell a Bardeen-modellből származtatja az  $I_{STM}$  alagútáramot további egyszerűsítések figyelembe vétele mellett. Az elsőrendű perturbáció számítás gondolatmenetéhez hasonlóan [19]:

$$I_{STM}^T \sim \int_0^{V_{bias}} dV \sum_{\mu, \nu} n(E_\mu) [1 - n(E_\nu + eV)] |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu - eV), \quad (1.21)$$

ahol  $n(E)$  a Fermi-függvény,  $V$  a kontaktusra kapcsolt feszültség,  $e$  az elektron töltése ( $eV > 0$ ),  $M_{\mu\nu}$  az átmeneti mátrixelem a  $\Psi_\mu$  és  $\Psi_\nu$  állapotok között [az egyik a minta felületére lokalizálódott állapot ( $\mu$ ), míg a másik a tűszonda hegyén lévő elektronállapot ( $\nu$ )], és  $E_\mu$  a  $\Psi_\mu$  állapot energiája az alagútáram nélküli  $V = 0$  esetben (lásd az 1.4.(a) ábrát). Mivel a fémeken végzett mérések többsége szobahőmérsékleten, vagy ennél alacsonyabb hőmérsékleten kerül kivitelezésre, tekinthetjük az előző egyenlet zérushőmérsékletű határesetét:

$$I_{STM} \sim \int_0^{V_{bias}} dV \sum_{E_F < E_\nu}^{E_F + eV > E_\nu} \sum_{E_F > E_\mu}^{E_F - eV < E_\mu} |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu - eV), \quad (1.22)$$



1.4. ábra. (a) Az alagutazást leíró modell energetikai sémája. A tűszonda és a minta energiaszintjei  $eV$  energiával el vannak tolvva egymáshoz képest az egyensúlyi állapothoz viszonyítva. (b) A tűszonda és mintafelület geometriája. A tűszonda hegyét gömbfelülettel modellezzük, melynek görbületi sugara  $R$  és középpontjának helyvektora  $\mathbf{r}_0$ .

ahol  $E_F$  az egyensúlyi Fermi-energiát jelöli (gyenge alagútáram esetében). Megmutatható, hogy az átmeneti mátrixelemet az alábbi összefüggés határozza meg [19]:

$$M_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \int d\mathbf{S} (\Psi_\nu^* \nabla \Psi_\mu - \Psi_\mu \nabla \Psi_\nu^*). \quad (1.23)$$

A felületi integrál a minta és a tűszonda között húzódó tetszőleges keresztmetszetre van értelmezve. A továbbiakban feltételezzük, hogy a hullámfüggvények a felülettől és tűszondától távolodva egyaránt  $e^{-\kappa\Delta r}$  mértékben csökkennek, ahol  $\kappa = \frac{\sqrt{2m_e\Phi}}{\hbar}$  és  $\Phi$  a kilépési munka, valamint  $\Delta r$  a felülettől mért távolság. (Ebben a közelítésben az egyszerűség kedvéért egyenlőnek tételjük fel a minta és a tűszonda kilépési munkáját.) Amennyiben modellünk keretein belül a tűszonda hegyét gömbi felülettel jellemezzük  $R$  görbületi sugárral és  $\mathbf{r}_0$  középponti vektorral (1.4.(b) ábra), valamint egyetlen  $E_\nu = E_F$  energiájú állapotot tekintünk a tűszondán, [18] publikációban bemutatott számolások az

$$M_{\mu\nu} \sim e^{\kappa R} |\Psi_\mu(\mathbf{r}_0)| \quad (1.24)$$

átmeneti mátrixelemhez vezetnek. Az alagútáram ekkor az alábbi alakban írható:

$$I_{STM} \sim \int_0^{V_{bias}} dV \sum_{\mu}^{E_\mu > E_F} e^{2\kappa R} |\Psi_\mu(\mathbf{r}_0)|^2 \delta(E_\mu - E_F - eV), \quad (1.25)$$

ahol  $\Psi_\mu(\mathbf{r}_0)$  a felületi állapot hullámfüggvénye a tűszonda hegyének görbületi középpontjában. Ezen a helyen az exponenciális lecsengés következtében a hullámfüggvény értéke

$$\Psi_\mu(\mathbf{r}_0 = (\mathbf{r}_\parallel, d)) \sim \Psi_\mu(\mathbf{r}_\parallel) e^{-\kappa(d+R)},$$



ahol  $d$  a felület és tűszonda hegye közti minimális távolság,  $\Psi_\mu(\mathbf{r}_\parallel)$  pedig a hullámfüggvény értéke a felület  $\mathbf{r}_\parallel$  pontjának helyén. Az alagútáram kifejezése ekkor a mérésekben megszokott exponenciális távolságfüggésre vezet:

$$I_{STM} \sim \int_0^{V_{bias}} dV \sum_{\mu}^{E_\mu > E_F} e^{-2\kappa d} |\Psi_\mu(\mathbf{r}_\parallel)|^2 \delta(E_\mu - E_F - eV). \quad (1.26)$$

A differenciális vezetőképesség pedig:

$$\frac{dI_{STM}}{dV} \sim \sum_{\mu}^{E_\mu > E_F} e^{-2\kappa d} |\Psi_\mu(\mathbf{r}_\parallel)|^2 \delta(E_\mu - E_F - eV). \quad (1.27)$$

Az egyenlet jobb oldalán az  $E_\mu$  energiához tartozó felületi lokális állapotsűrűség szerepel:

$$\rho_0(E_F + eV, \mathbf{r}_\parallel) = \sum_{\mu}^{E_\mu > E_F} |\Psi_\mu(\mathbf{r}_\parallel)|^2 \delta(E_\mu - E_F - eV). \quad (1.28)$$

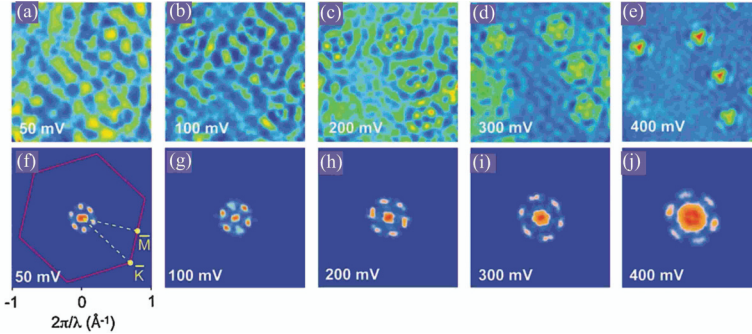
A differenciális vezetőképesség tehát arányos a lokális felületi állapotsűrűséggel:

$$\frac{dI_{STM}}{dV} \sim e^{-2\kappa d} \rho_0(E_F + eV, \mathbf{r}_\parallel). \quad (1.29)$$

A teljes alagútáram pedig az állapotsűrűség integráljával arányos a  $V_{bias}$  feszültség által meghatározott ablakban:

$$I_{STM} \sim e^{-2\kappa d} \int_0^{V_{bias}} \rho_0(E_F + eV, \mathbf{r}_\parallel) dV. \quad (1.30)$$

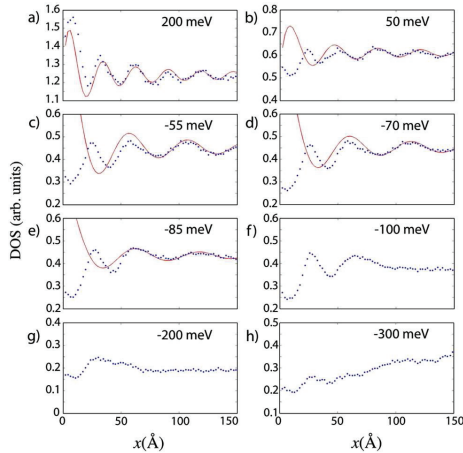
A modell számos durva egyszerűsítésének ellenére az STM technika kiválóan alkalmas az elektronok sűrűségének feltérképezésére. A felületi állapotsűrűség helyfüggése  $E_F + eV$  energia mellett a differenciális vezetőképesség helyfüggésére vezethető vissza  $V$  kontaktusra kapcsolt feszültség mellett. A mérés egyik hibája a tűszonda magasságának változásából származik a felület pásztázása során. Ez a hiba azonban elhanyagolható, ha a  $\kappa$  lecsengési konstans változása is elhanyagolható a pásztázás közben [22]. Megjegyezzük, hogy a bemutatott modell abban az esetben vezet jó eredményre, ha az alagútáram döntő többségében a felületi állapotoktól származik. Amennyiben az alagútáramban a tömbi elektronállapotok szórása is szerepet játszik, ez az eredmény már nem érvényes. A felület alatt meghúzódo (mágneses/nemmágneses) szennyezők vizsgálata ezért kiváltképp nehéz feladat. A folyamat elméleti leírására a nemegyensúlyi Green-függvények formalizmusát alkalmazhatjuk [24].



1.5. ábra. (a)–(e) Ag trimerek (lásd a szöveget) körül kialakult valós térbeli oszcillációk  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály felületén. (f)–(j) A valós térbeli oszcillációk kétdimenziós Fourier-transzformáltjai. Az oszcillációkra jellemző karakterisztikus hullámszámok a Fourier-spektrumokban a magas amplitúdójú Fourier-komponenseknek felelnek meg. Az ábrák [25]-ből származnak.

### 1.2.3. Felületi állapotsűrűség mérése

Az STM technika előnye az előzőekben ismertetett fotoemissziós módszerrel szemben, hogy a Fermi-energia alatt és felett egyaránt alkalmas a minta elektronállapotainak vizsgálatára. Elegendően tiszta felületrész esetén meghatározható a felületi (és a kisebb mértékben járulékot adó tömbi) elektronállapotok  $\rho_0(E)$  állapotsűrűsége (DOS: density of states). Felületi szennyeződések körül (pont- és vonalhibák) a felületi állapotsűrűség lényegesen eltér  $\rho_0(E)$ -től, az elektronok dinamikájától függő oszcillációk figyelhetők meg a  $\rho(E, \mathbf{r}_{||})$  ún. *lokális állapotsűrűségben* (LDOS: local density of states) [22]. Az STM technika tehát lehetőséget kínál az elméletileg hosszú ideje megjósolt Friedel-oszcilláció [23] kimutatására pontszennyező körül. A felületi pontszennyezők körül létrejött oszcillációk kétdimenziós problémára (lásd az 1.5. ábrát), míg a vonalhibák oldalain kialakult oszcillációk kvázi-egydimenziós problémára (az egyensúlyi  $\rho_0(E)$ -től való eltérés a vonalhibától mért távolság függvényében) egyszerűsíthetők (lásd az 1.6. ábrát). A pontszennyezőhöz tartozó oszcillációkat meghatározó karakterisztikus hullámszámokat a mért kétdimenziós oszcillációk kétdimenziós Fourier-transzformálásával lehet megállapítani. Ezt az eljárást az irodalomban az FT-STM rövidítéssel jelölik. A kétdimenziós Fourier-spektrumban a meghatározó hullámszámok helyén nagy amplitúdójú Fourier-komponensek találhatók, ahogy ezt az 1.5.(h)–(j) ábrán látható. A mérés során  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály felületén, Ag pontszennyezők körül kialakult anizotróp oszcillációkat vizsgálták [25]. Az ezüst atomok hármassával helyezkednek el a



1.6. ábra. (a)-(h)  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristályon azonosított vonalhíba oldalán létrejött állapotsűrűség hullámok különböző energiák esetében (kék pontozott vonal) és a [26] publikációban ismertetett lecsengő oszcilláció illesztése (piros vonal) az adatsorokra. Az ábra [26]-ös publikációból származik.

$\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály felületén, egy-egy szabályos háromszöget alkotva (trimerek). A differenciális vezetőképességből származtatott valós térbeli oszcillációkat az energia függvényében az 1.5.(a)-(e) ábrák szemléltetik. Az oszcillációk jellemző jegyei (oszcillációs hullámhossz, lecsengési ráta) az elektronállapotok spektrumának tulajdonságaival magyarázhatóak. A jelenségek általunk kidolgozott részletesebb elméleti leírásával a 4. fejezetben foglalkozunk.

#### 1.2.4. Egyéb kísérleti effektusok

A kontaktuson alkalmazott feszültség mellett, hogy egymáshoz képest eltolja a mintában és tűszondában lévő energiaszinteket, töltés-inhomogenitást is létrehoz a kontaktusban, mely általában dipólkölesönthatással modellezhető a tűszonda és a felület között. További elektrosztatikus kölesönthatást okoz a polarizált elektródák (vezető tűszonda és a minta alatt húzódó vezető hordozófelület) és a minta töltött atomjai között fellépő erőhatás is. A kémiai kölesönthatások, bár nem a legerősebbek, fontos szerepet játszanak az SPM mérésekben. A tűszonda és minta között kialakuló kémiai kötések tanulmányozásával azonosíthatóak a mintát alkotó elemek, amivel az atomi felbontás is elérhető. (A kialakuló kötések energiaszintjei nagy mértékben befolyásolják az alagútáramot.)

Ferromágneses tűszonda használatával a felület mágneses tulajdonságai is tanulmányozhatóak, melyek az ellentétes mágnesezettségű tűszonda állásokhoz tartozó alagútáram-különbségekben nyilvánulnak meg [15].

### 1.3. A fejezet összefoglalása

A fejezetben áttekintettem a fotoemissziós és pásztázó tűszondás mikroszkópos mérési eljárások főbb tulajdonságait. Mindkét mérési technika kiválóan alkalmazható felületi fizikai folyamatok tanulmányozására. Míg az ARPES/SARPES technikák impulzustérbeli felbontásban képesek feltérképezni a felületi (és hozzá közeli) elektronállapotok dinamikájának tulajdonságait, az SPM mérések valós térbeli felbontásban teszik lehetővé a vizsgálatokat. Az STM technikával lehetővé vált az elméletileg megjósolt Friedel-oszcillációk kimutatása is. Az alagútáramhoz tartozó differenciális vezetőképességgel pedig a töltéssűrűség hullámok energiafüggése is feltérképezhető.

A fotoemissziós mérésekben megszorítást jelent, hogy a Fermi-energia alatti és feletti vizsgálatokhoz teljesen különböző mérési berendezések építése szükséges (fotoelektronok emissziója és abszorpciója), ezek összehangolása további nehézségekhez vezet. A pásztázó alagútmikroszkóp ezzel szemben mindkét tartományban alkalmazható.

A közelmúltban kifejlesztett spinfelbontású fotoemissziós technikával az elektronok spinpolarizációjának impulzustól való függése is meghatározható a Brillouin-zóna metszeteiben. A módszer kiválóan alkalmas alacsony energiájú spin felhasadások vizsgálatára, melyeket például a spin-pálya kölcsönhatás is eredményez egyes rendszerekben.

## 2. fejezet

# Bevezetés az értekezésben vizsgált kétdimenziós rendszerekbe

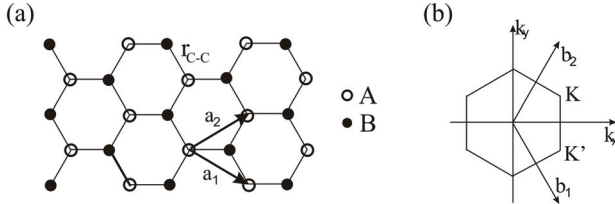
A grafént és háromdimenziós topológikus szigetelő rendszereket egyaránt széleskörű fotoemissziós és pásztázó alagútmikroszkópos vizsgálatoknak vetették alá, hiszen mindkét esetben az érdekesnek tekintett elektronállapotok a minták közvetlen felületén találhatóak meg. A továbbiakban ezért áttekintjük az említett rendszerek fizikai tulajdonságait.

### 2.1. A grafén

A modern nanotechnológia fejlődésével a szén alapú kristályszerkezetek hamar a figyelem középpontjába kerültek széleskörű alkalmazhatóságuk révén. A háromdimenziós kristályszerkezetek (grafit és gyémánt) már a régmúltban is ismertek voltak. A nemrégiben felfedezett *nulladimenziós* fullerén [27] és *egydimenziós* szénnanocsövek [28] manapság is tárgyat képezik sok kutatómunkának különleges mechanikai és elektromos tulajdonságaiknak köszönhetően [29, 30]. Ugyanakkor egészen a közelmúltig nem sikerült *kétdimenziós* szénmódosulatot megfigyelni. Ennek ellenére az elméleti fizika már bő irodalommal rendelkezik erről a módosulatról is. A *grafén* [31, 32, 33, 34, 35] (szénatomok síkbeli, hatszöges elrendezése) hosszú ideje kiindulási pontnak számít minden a grafittal, szénnanocsövekkel és fullerénnel kapcsolatos számításokban már a 40-es évektől kezdve [36]. A kísérleti eredmények azonban egészen 2004-ig vártak magukra, mikor is már megfelelő technológiai eljárások váltak hozzáférhetővé a felmerülő problémák leküzdéséhez [31]. A töltéshordozók különleges spektruma és az anomális kvantum Hall-effektus grafénben [32] nagy figyelmet keltett a kutatási területen.

A grafén felfedezése új lehetőségeket nyitott néhány alapvető jelenség vizsgálatára a rela-

tivisztikus kvantumelmélettel való hasonlósága miatt. Valószínűleg az egyik legfontosabb ilyen



2.1. ábra. (a) A grafén kristályszerkezete, mely két független (A és B atomokból álló) alrác együtteseként fogható fel. Az  $\mathbf{a}_1$  és  $\mathbf{a}_2$  rácsvektorok az elemi cellát feszítik ki. (b) A direkt rács hatos szimmetriáját tükröző Brillouin-zóna a  $\mathbf{b}_1$  és  $\mathbf{b}_2$  reciprokrács-vektorokkal.

példa az ún. *Klein-paradoxon* [37], ami a relativisztikus kvantumrészecskék nagy áthatolóképességét jósolja meg nagyon magas és széles potenciálgátakon. Az effektust eddig csak kísérletileg megvalósíthatatlan (vagy nagy nehézségek árán megvalósítható) elrendezésekben vizsgálták. Ilyen volt pl. a részecske-antirészecske párkeltés a fekete lyukak határán [38]. Ugyanakkor az effektus lényeges szerepet játszik a grafénnel kapcsolatos elektronikában [39].

A technológiai eljárások fejlődésével lehetőség nyílt tervezett geometriájú grafén minták előállítására is. Különböző minták készítése már napjainkban is lehetséges például pásztázó alagútmikroszkóp-litográfia segítségével [40].

### 2.1.1. A grafén szoros kötésű elektron modellje

Grafénnek definíció szerint a szénatomok hatszögrácsban elrendezett rendszerét nevezzük (lásd a 2.1.(a) ábrát). A kristályrács Bravais-cellája háromfajú szimmetriát mutat, minden cellában két bázisatommal (A és B atomok). A kristályrács elemi rácsvektorait választhatjuk az alábbi alakban:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{r_{C-C}}{2}(3, -\sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{r_{C-C}}{2}(3, \sqrt{3}), \quad (2.1)$$

ahol  $r_{C-C} \approx 1.42 \text{ \AA}$  a szénatomok közötti távolságot jelöli. A szénatomok a külső  $s$ ,  $p_x$  és  $p_y$  elektron pályák kombinációiból ( $sp^2$  hibridizáció) kialakított kötésekkel kötődnek egymáshoz. A kötésekben résztvevő elektronok lokalizáltak maradnak a szénatomok körül, azonban a grafén síkjára merőleges  $p_z$  pályák elektronjai delokalizálttá válnak. A vezetési és valenciasáv gerjesztései ezen delokalizált elektronok kiterjedt állapotainak felelnek meg. A kristályrács reciprokrácsa

ugyanolyan szimmetriával rendelkezik mint a direkt rács. A reciprok rács elemi rácsvektorai az alábbi összefüggésekkel adottak:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3r_{C-C}}(1, -\sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{r_{C-C}}(1, \sqrt{3}). \quad (2.2)$$

A grafén fizikájában különösen fontos szerepet játszanak az ún.  $K$  és  $K'$  pontok a Brillouin-zóna (BZ) sarkaiban (lásd a 2.1.(b) ábrát). Ezeket a pontokat nevezzük *Dirac-pontoknak*. Az elnevezést a későbbiek során megmagyarázzuk. A Dirac-pontok a reciprok rácsban a

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3r_{C-C}}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3r_{C-C}}\left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad (2.3)$$

pontokban helyezkednek el. Szoros kötésű elektron modellben (*tight binding* - TB) [41] a három legközelebbi szomszéd figyelembevételével a grafén Hamilton-operátora betöltési szám reprezentációban az alábbi alakot ölti [35, 34]:

$$\mathbf{H}^G = -\gamma_0 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( a_{i,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma} + \text{h.c.} \right), \quad (2.4)$$

ahol  $a_{i,\sigma}$  ( $a_{i,\sigma}^\dagger$ ) az eltüntető (keltő) operátor, mely egy  $\sigma$  spinű elektronra hat az  $\mathbf{R}_i$  helyen lévő elemi cella  $A$  alrácsán. Analóg módon értelmezhető a  $b_{j,\sigma}$  ( $b_{j,\sigma}^\dagger$ ) operátor is, mely a  $B$  alrácson hat. A képletben továbbá  $\gamma_0 > 0$  az ún. *hopping-integrál*t jelöli a szomszédos szénatomok  $p_z$  pályái között, és h.c. a hermitikus konjugáltat. A grafén sávszerkezetének számolásához térjünk át reciprok tér reprezentációba.  $N$  elemi cellát tartalmazó mintában a keltő és eltüntető operátorok:

$$a_{i,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \alpha_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger, \quad a_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \alpha_{\mathbf{q},\sigma}, \quad (2.5)$$

valamint:

$$b_{j,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \beta_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger, \quad b_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \beta_{\mathbf{q},\sigma}, \quad (2.6)$$

Az  $\alpha_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger$  ( $\alpha_{\mathbf{q},\sigma}$ ) keltő (eltüntető) operátor egy  $\hbar\mathbf{q}$  impulzusú és  $\sigma$  spinű állapotot kelt (tüntet el). Hasonlóan értelmezhetőek a  $\beta_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger, \beta_{\mathbf{q},\sigma}$  operátorok. Impulzustérben a Hamilton-operátor az alábbi alakot ölti:

$$\mathbf{H}^G = -\gamma_0 \sum_{\mathbf{q}, \sigma} \left[ f(\mathbf{q}) \alpha_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{q},\sigma} + \text{h.c.} \right], \quad (2.7)$$

ahol:

$$f(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^3 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_j} = 1 + e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_2}, \quad (2.8)$$

és  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  a (2.1) egyenlettel adott rácsvektorok, valamint  $\mathbf{a}_3 = 0$ . A (2.7) Hamilton-operátor az alábbi kanonikus transzformációval diagonalizálható:

$$\begin{aligned} e_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( C_A(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger + C_B(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger \right), \\ h_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( C_A(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger - C_B(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Az  $[e_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger, e_{\mathbf{q},\sigma}]_+ = 1$ ,  $[h_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger, h_{\mathbf{q},\sigma}]_+ = 1$  és  $[e_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger, h_{\mathbf{q},\sigma}]_+ = 0$  antikommutációs relációk teljesüléséhez előírjuk a  $C_A(\mathbf{q})$  és  $C_B(\mathbf{q})$  skalárfüggvényekre a  $|C_A(\mathbf{q})| = 1$  és  $|C_B(\mathbf{q})| = 1$  feltételeket. Ezen felül a skalárfüggvények az alábbi mátrixegyenletet elégítik ki minden  $\mathbf{q}$  értékre:

$$-\gamma_0 \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{q}) \\ f(\mathbf{q})^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{q}) \\ C_B(\mathbf{q}) \end{pmatrix} = E_{\mathbf{q}}^G \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{q}) \\ C_B(\mathbf{q}) \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

ahol a spindegenerált energia-sajátértékek:

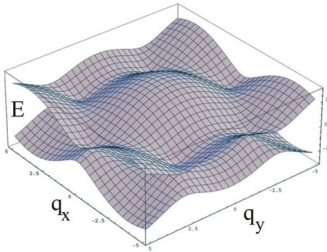
$$E_{\mathbf{q}}^G = \gamma_0 |f(\mathbf{q})| = \gamma_0 \sqrt{3 + 2 \cos \mathbf{q}\mathbf{a}_1 + 2 \cos \mathbf{q}\mathbf{a}_2 + 2 \cos \mathbf{q}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}. \quad (2.11)$$

A diagonalizált Hamilton-operátor:

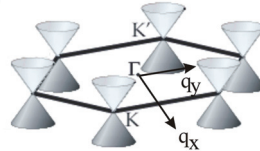
$$\mathbf{H}^G = \sum_{\mathbf{q},\sigma} \left( E_{\mathbf{q}}^{G,+} e_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger e_{\mathbf{q},\sigma} + E_{\mathbf{q}}^{G,-} h_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger h_{\mathbf{q},\sigma} \right), \quad \text{ahol: } E_{\mathbf{q}}^{G,\pm} = \pm E_{\mathbf{q}}^G. \quad (2.12)$$

Az  $E_{\mathbf{q}}^{G,\pm}$  spektrumot a 2.2. ábra szemlélteti. A spektrum szimmetrikus az  $E = 0$  síkmetszetre. A

(a)



(b)



2.2. ábra. A grafén spektruma szoros kötésű elektron modellből számolva első szomszéd kölcsönhatásokkal. (a) A felső felület a vezetési sávot, az alsó felület pedig a valenciasávot ábrázolja. (b) A *Dirac-kúpok* a Fermi-energia környékén. A vezetési és valenciasáv a két jellegzetes  $K$  és  $K'$  pontokban érintik egymást.

Hamilton-operátor (2.12) alakjából leolvasható, hogy az  $e_{\mathbf{q},\sigma}^\dagger$  operátor a vezetési sávban kelt egy



$E_q^G$  energiájú állapotot, a  $h_{q,\sigma}^\dagger$  operátor pedig a valenciasávban kelt egy  $-E_q^G$  energiájú állapotot. Ha figyelembe vennénk másodsomszéd kölcsönhatásokat is a modellben, ez a szimmetria elromlana, azonban a soron következő állítások nem vesztenék érvényüket [34]. A spektrum a Dirac-pontok környékén kúpszerű geometriát mutat. Sorbafejtve a (2.11) diszperziós relációt a  $K$  pont környékén:

$$E_q^{G,\pm} \approx \pm v_F \hbar |\mathbf{k}| + O\left(\left(\frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{K}|}\right)^2\right), \quad (2.13)$$

ahol  $\mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{K}$ ,  $v_F$  pedig a Fermi-sebesség [42]:

$$v_F = \frac{3\gamma_0 r_{C-C}}{2\hbar}, \quad v_F \sim 10^6 \text{ ms}^{-1}. \quad (2.14)$$

A  $K'$  pont környékén sorfejtvé a diszperziós relációt, ugyanilyen képletet kapunk a kis energiájú gerjesztések spektrumára. A Fermi-energia, elektronadagolás és kapufeszültségek alkalmazása nélkül, a Dirac-pontok által kifeszített síkba esik. Ezért a grafén elektronszerkezetének tulajdonságait figyelembe véve, a grafén egy nulla tiltott sáv szélességű félvezetőnek tekinthető.

### 2.1.2. A grafén kontinuum modellje

Megmutatható hogy a  $K$  pont környékén a lineáris diszperziójú kvázirészecskéket formálisan egy Dirac-féle Hamilton-operátorral lehet leírni [35, 34]:

$$\hat{H}_K^G = v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}, \quad (2.15)$$

ahol  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  a Pauli-mátrixokat jelöli. A  $K'$  pont elemi gerjesztéseit ún. *valley isotrop* reprezentációban ugyanez a Hamilton-operátor írja le. A fenti állítást a 2.1.3. szakaszban bizonyítom pontosítva a valley isotrop reprezentáció fogalmát is ((2.19) egyenlet alatt). Az elméleti megfontolásokat mérési eredmények is alátámasztották [32]. Ezek a mérések többnyire az energiafüggő ciklotron-tömeget vizsgálták [34]. Végtelen kiterjedésű grafén mintában, amennyiben nincs átszórás a Dirac-kúpok között, a két független Dirac-pont kétszeres degenerációt okoz az elemi gerjesztések spektrumában. Véges minta esetében a peremek átszórásokat okoznak a Dirac-pontok között [43, 44], ezért a független Dirac-pontok modellje nem alkalmazható.

A grafén elektronszerű és lyukszerű gerjesztései hasonló töltéskonjugációs szimmetriatulajdonságokat mutatnak, mint ahogy azt megszoktuk a kvantum-elektrodinamikában [45]. A grafén esetében ez a szimmetria a két alrácából álló rács szimmetriatulajdonságainak következménye, mivel a grafén elektronjainak hullámfüggvényét kétkomponensű vektorok segítségével lehet megadni. Az egyes komponensek az egyes alrácok járulékait jelentik a hullámfüggvényben. A

grafén kétkomponensű vektorral történő leírása nagyban hasonlít a feles spinű részecskék leírásához (hasonlóan  $SU(2)$  algebrát követ), azonban a megkülönböztetés céljából ezt mégis *pszeudospinnek* nevezik. Egy  $E$  energiájú elektron ugyanabban az irányban terjed (propagál), mint egy  $-E$  energiájú, ellentétes momentumú elektronállapot a valenciasávban. Az ugyanolyan irányban terjedő vezetési és lyukszerű elektronok ugyanolyan irányba mutat a pszeudospin-vektora, mely irány egybeesik vezetési elektron esetében az impulzus irányával, valencia elektron esetében pedig vele épp ellentétes irányú. A pszeudospin-vektor irányát az elemi gerjesztések *kiralitásának* nevezzük. Az analógia a térelméletekkel váratlan fordulatot vesz, amikor figyelembe vesszük, hogy a grafén síkja valójában nem teljesen lapos. A szénatomok mindig véges görbületű felületrészekben helyezkednek el. Ez az effektus többek között a *Mermin-Wagner-tétel* [46] következményeként értelmezhető: köztudott, hogy harmonikus közelítésben a kétdimenziós rendszerekben nem alakulhat ki hosszútávú rend [47]. A felület görbületi torzulása a helyzetet nagy mértékben befolyásolja és megakadályozza a kristályrács felbomlását. Jelen doktori értekezésben azonban a csekély mértékű görbületi torzulásuktól az egyszerűség kedvéért eltekintünk.

### 2.1.3. Burkoló függvény közelítés: Dirac-féle Hamilton-operátor

Az előző szakaszban említettük, hogy kontinuum modellben az elemi gerjesztéseket a  $K$  és  $K'$  Dirac-kúpokban egy Dirac-féle Hamilton-operátorral lehet leírni ((2.15) egyenlet). A továbbiakban a burkoló függvény közelítéssel kapott effektív Hamilton-operátor levezetését ismertetem. Módosított levezetés megtalálható DiVincenzo és Mele [48], Ando és munkatársainak [49], Neto és munkatársainak cikkeiben [34], illetve Cserti József MTA doktori értekezésében [42]. Az alábbiakban ismertetett levezetéssel ennek ellenére azért foglalkozom részletesen, mivel az értekezés 3.1.5 szakaszában analóg gondolatmenetet követve jutok el a spin-pálya kölcsönhatás is figyelembe vevő alacsonyenergiás gerjesztéseket leíró Hamilton-operátor alakjához.

Tekintsünk egy az impulzustérben  $\hbar\mathbf{q}_0$ -ra lokalizált gerjesztést, azaz legyen  $C_A(\mathbf{q}) = C_A\delta(\mathbf{q}_0)$  és  $C_B(\mathbf{q}) = C_B\delta(\mathbf{q}_0)$  a (2.10) egyenletben. Jelöljük továbbá  $\Psi_A(\mathbf{r})$  és  $\Psi_B(\mathbf{r})$  a gerjesztéshez tartozó skalár hullámfüggvényeket hely reprezentációban az  $A$  és  $B$  atomokon, melyekre:

$$\Psi_{A/B}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} C_{A/B}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = C_{A/B} e^{i\mathbf{q}_0\mathbf{r}}, \quad (2.16)$$

valamint  $E = E(\mathbf{q}_0)$  a gerjesztés energiáját. A fenti definíciókat felhasználva és Fourier-transzformálva a (2.10) egyenletet az alábbi összefüggésre jutunk a  $\Psi_A(\mathbf{r})$  és  $\Psi_B(\mathbf{r})$  hullámfügg-

vényeket illetően:

$$\begin{aligned} E\Psi_A(\mathbf{r}) &= -\gamma_0 \sum_{\mathbf{a}_i} \Psi_B(\mathbf{r} - \mathbf{a}_i) = -\gamma_0 \left( \Psi_B(\mathbf{r}) + \Psi_B(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) + \Psi_B(\mathbf{r} - \mathbf{a}_2) \right), \\ E\Psi_B(\mathbf{r}) &= -\gamma_0 \sum_{\mathbf{a}_i} \Psi_A(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = -\gamma_0 \left( \Psi_A(\mathbf{r}) + \Psi_A(\mathbf{r} + \mathbf{a}_1) + \Psi_A(\mathbf{r} + \mathbf{a}_2) \right). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Legyenek a  $\mathbf{q} = \mathbf{K}$  és  $\mathbf{q} = \mathbf{K}'$  hullámszámokhoz tartozó Bloch-függvények rendre  $\Psi_K(\mathbf{r})$  és  $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$ , melyekre teljesül:

$$\begin{aligned} \Psi_K(\mathbf{r} \pm \mathbf{a}_i) &= e^{\pm i\mathbf{K}\mathbf{a}_i} \Psi_K(\mathbf{r}), \\ \Psi_{K'}(\mathbf{r} \pm \mathbf{a}_i) &= e^{\pm i\mathbf{K}'\mathbf{a}_i} \Psi_{K'}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Az  $E = 0$  Fermi-energia közelében a (2.17) egyenletben adott  $\Psi_A(\mathbf{r})$  és  $\Psi_B(\mathbf{r})$  hullámfüggvények kifejezhetőek  $\Psi_K(\mathbf{r})$  és  $\Psi_{K'}(\mathbf{r})$  bázisában:

$$\begin{aligned} \Psi_A(\mathbf{r}) &= \Psi_1(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - \Psi_4(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r}), \\ \Psi_B(\mathbf{r}) &= i\Psi_2(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - i\Psi_3(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.19)$$

ahol a  $\Psi_1(\mathbf{r})$ ,  $\Psi_2(\mathbf{r})$ ,  $\Psi_3(\mathbf{r})$  és  $\Psi_4(\mathbf{r})$  amplitúdókról feltesszük, hogy lassan változnak a grafén rácsállandójához képest. Az együtthatók fenti megválasztását *valley isotrop* reprezentációnak, az amplitúdókat pedig burkoló függvényeknek (*envelope functions*) nevezzük. Mivel feltevéseünk szerint az amplitúdók a helynek lassan változó függvényei (a rácsállandóhoz képest), sorbafejtjük őket:

$$\Psi_J(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}) = \Psi_J(\mathbf{r}) + \Delta\mathbf{r} \frac{\partial \Psi_J(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}. \quad (2.20)$$

Beírva ezt a sorfejtést a (2.17) egyenletbe a következőt kapjuk:

$$E \left( \Psi_1(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - \Psi_4(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r}) \right) = -\gamma_0 \left( \mathbf{g}(\mathbf{K})i \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Psi_K(\mathbf{r}) - \mathbf{g}(\mathbf{K}')i \frac{\partial \Psi_3(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Psi_{K'}(\mathbf{r}) \right), \quad (2.21)$$

$$E \left( i\Psi_2(\mathbf{r})\Psi_K(\mathbf{r}) - i\Psi_3(\mathbf{r})\Psi_{K'}(\mathbf{r}) \right) = \gamma_0 \left( \mathbf{g}(-\mathbf{K}) \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Psi_K(\mathbf{r}) - \mathbf{g}(-\mathbf{K}') \frac{\partial \Psi_4(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \Psi_{K'}(\mathbf{r}) \right), \quad (2.22)$$

ahol:

$$\mathbf{g}(\mathbf{q}) = \sum_{i=1}^3 \mathbf{a}_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_i}, \quad (2.23)$$

Az egyenletek felírásánál felhasználtuk az

$$\sum_{i=1}^3 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{a}_i} = 0, \quad \sum_{i=1}^3 e^{-i\mathbf{K}'\mathbf{a}_i} = 0 \quad (2.24)$$

egyenlőségeket is. A (2.21) és (2.22) egyenletekben összehasonlítva a  $\Psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$  és  $\Psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})$  bázis-függvények együtthatóit, a  $\Psi_i(\mathbf{r})$  amplitúdókra az alábbi megkötéseket kapjuk:

$$E\Psi_1(\mathbf{r}) = -i\gamma_0\mathbf{g}(\mathbf{K})\frac{\partial\Psi_2(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}, \quad (2.25)$$

$$E\Psi_2(\mathbf{r}) = -i\gamma_0\mathbf{g}(-\mathbf{K})\frac{\partial\Psi_1(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}, \quad (2.26)$$

$$E\Psi_3(\mathbf{r}) = -i\gamma_0\mathbf{g}(-\mathbf{K}')\frac{\partial\Psi_4(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}, \quad (2.27)$$

$$E\Psi_4(\mathbf{r}) = -i\gamma_0\mathbf{g}(\mathbf{K}')\frac{\partial\Psi_3(\mathbf{r})}{\partial\mathbf{r}}. \quad (2.28)$$

Könnyű megmutatni, hogy a (2.1) egyenlettel definiált  $\mathbf{a}_1$  és  $\mathbf{a}_2$  rácsvektorokkal:

$$\mathbf{g}(\pm\mathbf{K}) = \frac{3}{2}r_{C-C}\begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}(\pm\mathbf{K}') = \frac{3}{2}r_{C-C}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Bevezetve a  $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$  és  $\hat{p}_y = -i\hbar\partial_y$  impulzus-operátorokat, és felhasználva a Fermi-sebesség (2.14) definícióját a fenti négy egyenlet mátrix alakban írható:

$$E\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \\ \Psi_3(\mathbf{r}) \\ \Psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = v_F\begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y & 0 & 0 \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ 0 & 0 & \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \\ \Psi_3(\mathbf{r}) \\ \Psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

A jobb oldalon a mátrix blokk-diagonális szerkezetű, a  $\Psi_1(\mathbf{r})$  és  $\Psi_2(\mathbf{r})$  amplitúdók a  $\mathbf{K}$  pontnak, míg a  $\Psi_3(\mathbf{r})$  és  $\Psi_4(\mathbf{r})$  amplitúdók a  $\mathbf{K}'$  pontnak felelnek meg. A két Dirac-ponthoz rendelt amplitúdók egymástól független blokkokat alkotnak. Ezt a szabadsági fokot nevezzük *izospinnek*, a szabadsági fokhoz tartozó teret pedig *izospin-térnek*. A (2.30) sajátértékegyenlet tömörebben írható a pszeudospin-téren ható (lásd a pszeudospin (2.15) egyenlet alatti definícióját)  $\sigma_0$ ,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  és az izospin-téren ható  $\tau_0$ ,  $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$  egység- és Pauli-mátrixok segítségével:

$$\hat{H}^G\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (2.31)$$

ahol:

$$\hat{H}^G = \tau_0 \otimes \hat{H}_K^G, \quad \hat{H}_K^G = v_F\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}} \quad (2.32)$$

a Hamilton-operátor, és

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \\ \Psi_3(\mathbf{r}) \\ \Psi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

az ún. *Dirac-spinor*. A  $\hat{H}_K^G$  Hamilton-operátor hasonlít a kétdimenziós elektron relativisztikus Dirac-féle Hamilton-operátorához. Ezért hívják a Brillouin-zóna csúcsait Dirac-pontoknak, és a diszperziós relációt a Dirac-pontok közelében Dirac-kúpoknak. Megmutatható, hogy mágneses térben alkalmazva az ún. *Peierls-transzformációt* [50] a (2.17) TB egyenletek hopping tagján, a fentiekben bevezetett Dirac-féle Hamilton-operátor a szokásos módon transzformálódik:

$$\hat{H}^G = \tau_0 \otimes \hat{H}_K^G, \quad \hat{H}_K^G = v_F \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}), \quad (2.34)$$

ahol  $e < 0$  az elektron töltését,  $\mathbf{A}$  pedig a vektorpotenciált jelöli.

Gyakorlati alkalmazás szempontjából fontos megjegyezni, hogy a (2.32) egyenletben szereplő  $\hat{H}_K^G$  Hamilton-operátort lényegesen egyszerűbb módon is megkaphatjuk. A fenti eljárásban először Fourier-transzformációt végeztünk a (2.10) egyenleten, majd pedig sorfejtést alkalmaztunk a lassan változó hullámfüggvény amplitúdókon. Ugyanarra az eredményre vezet azonban, ha a két lépést felcseréljük. Először sorfejtést alkalmazunk a (2.10) egyenleten  $\mathbf{k} = \mathbf{K} - \mathbf{q}$ -ban elsőrendig. Ezután, ha a sorfejtett egyenletet formálisan Fourier-transzformáljuk a sorfejtésben megmaradt  $\mathbf{k}$  változóban (azaz disztribúció értelemben véve a  $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$  helyettesítéssel élünk), akkor a  $\hat{H}_K^G$  Hamilton-operátorral ekvivalens eredményre jutunk, a sajátvektor-komponensek pedig éppen a  $\Psi_1(\mathbf{r})$  és  $\Psi_2(\mathbf{r})$  burkoló függvények lesznek. Pontosabban fogalmazva, a hullámfüggvények egyenlőségéhez még transzformálni kell az így kapott modellt a (2.19) egyenletben szereplő  $i$  szorzóknak megfelelő

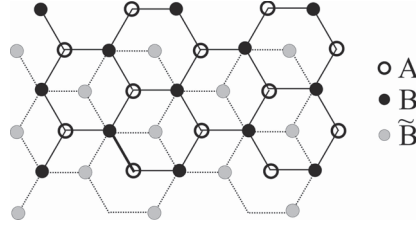
$$O_E = \frac{i+1}{2}\sigma_0 + \frac{i-1}{2}\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

unitér operátorral, ahol  $\sigma_0$  és  $\sigma_z$  a pszeudospin téren ható egységmátrix és  $z$  Pauli-mátrix. Az állítás megértésének céljából tekintsük a (2.17) TB egyenletben szereplő tagokat, melyek az általános  $\gamma_i \Psi_j(\mathbf{r} \pm \mathbf{a}_i)$  alakban írhatóak. A tagokon alkalmazva a (2.20) sorfejtést, azok az alábbi alakban írhatóak (az egyszerűség kedvéért az  $A$  atomok hullámfüggvényén demonstrálva és csak a  $K$  Dirac-kúp járulékát tartva meg):

$$\Psi_A(\mathbf{r} \pm \mathbf{a}_i) = e^{\pm i\mathbf{K}\mathbf{a}_i} \Psi_K(\mathbf{r}) (I \pm \nabla \mathbf{a}_i) \Psi_1(\mathbf{r}). \quad (2.36)$$

Amennyiben előbb végzünk sorfejtést a (2.10) egyenleten és ezt követően Fourier-transzformálunk, fizikailag ekvivalens eredményre jutunk. A sorfejtés csupán az  $e^{\pm i\mathbf{q}\mathbf{a}_i}$  tagokat érinti az egyenletben:

$$e^{\pm i\mathbf{q}\mathbf{a}_i} = e^{\pm i\mathbf{K}\mathbf{a}_i} e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{a}_i} \approx e^{\pm i\mathbf{K}\mathbf{a}_i} (1 \pm i\mathbf{k}\mathbf{a}_i). \quad (2.37)$$



2.3. ábra. A kétrétegű grafén kristályszerkezete, mely két, egymáshoz képest eltolt grafénrétegből áll. Az ábrán a felső rétegben elhelyezkedő  $A$  (üres körök) és  $B$  (teli körök), valamint az alsó rétegben elhelyezkedő  $\tilde{B}$  (szürke körök) atomok láthatóak, míg az  $\tilde{A}$  atomok közvetlenül a  $B$  atomok alatt helyezkednek el. A folytonos és szaggatott vonalak rendre a felső és alsó rétegekben elhelyezkedő szénatomok közötti kötések jelölik.

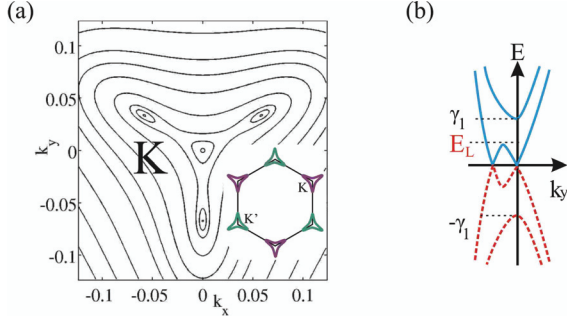
A sorfejtést követően egy  $\hbar\mathbf{k}_0$  impulzusú gerjesztést tekintve (azaz  $C_J(\mathbf{k}) = C_J\delta(\mathbf{k}_0)$ ), és Fourier-transzformálva a sorfejtett egyenletet, a benne szereplő tagok az alábbi alakban írhatóak:

$$\int d\mathbf{k} C_J(\mathbf{k}) e^{\pm i\mathbf{K}a_i} (1 \pm \mathbf{k}a_i) e^{i\mathbf{k}r} = e^{\pm i\mathbf{K}a_i} (1 \mp \nabla a_i) \int d\mathbf{k} C_J(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}r} = e^{\pm i\mathbf{K}a_i} (1 \mp \nabla a_i) \tilde{\Psi}_1(r). \quad (2.38)$$

A (2.38) egyenlet jobb oldala a (2.36) egyenlet jobb oldalától csupán a  $\Psi_K(r)$  szorzóban különbözik. Ezek a Bloch-függvények azonban kiesnek a  $K$  és  $K'$  pontokhoz tartozó szeparált egyenletekből, így a két módszer ugyanarra a hosszúhullámú  $\hat{H}_K^G$  Hamilton-operátorra vezet. Ezen felül a  $\Psi_1(r)$  és  $\tilde{\Psi}_1(r)$  amplitúdók is azonosíthatók egymással, hiszen ugyanannak a Hamilton-operátornak a sajátvektorairól van szó. Bár a szakaszban ismertetett burkoló függvény módszer matematikailag lényegesen tisztább megfogalmazása az effektív hosszúhullámú Hamilton-operátor levezetésének, a második módszer egyszerűbben és sokkal gyorsabban vezet ugyanarra eredményre.

## 2.2. Kétrétegű grafén

A kétrétegű grafént, mint két, egymással csatolt egyrétegű grafén réteggént modellezhetjük [51]. A két grafén réteg azonban nincs egymással fedésben, a felső réteg  $A$  és  $B$  valamint az alsó réteg  $\tilde{A}$  és  $\tilde{B}$  atomjainak elhelyezkedését a 2.3. ábra szemlélteti. Mivel az egyrétegű grafén elemi cellájában két bázisatom helyezkedik el, a kétrétegű grafén elemi cellájában ennek következtében négy bázisatom található. A 2.1.3. szakaszban vázoltakhoz hasonlóan a kétrétegű grafén esetében is megadható egy effektív hosszúhullámú Hamilton-operátor, mely a  $K$  pont környéki elemi



2.4. ábra. (a) Az alsó vezetési sáv állandó energiájú kontúrvonalai. A spektrum háromfogatús szimmetriát mutat, egy izotrop Dirac-kúpot tartalmaz középen és három anizotrop Dirac-kúpot egy szabályos háromszög csúsaiban. Az alsó vezetési és felső valenciasáv a négy Dirac-kúp csúcaiban érintkeznek. A  $k_x$  és  $k_y$  hullámszámok  $1/r_{C-C}$  egységekben vannak ábrázolva. A betétábra a háromfogatús spektrum  $K$  és  $K'$  pontok körüli orientációját szemlélteti. (b) A Brillouin-zóna  $k_x = 0$  metszetében sematikusán ábrázolt négy sáv. Az alacsonyenergiás gerjesztések spektrumának nem triviális topológiájától eltérően a felső vezetési és alsó valenciasáv parabolyszerű diszperziót mutat. Az alacsonyenergiás spektrum a nyeregpontok energiájával, az ún. *Lifšitz-energiával* jellemezhető.

gerjesztések dinamikáját írja le. A két rétegben elhelyezkedő  $A$ ,  $B$ ,  $\tilde{A}$  és  $\tilde{B}$  bázisatomoknak megfelelően, a  $(\Psi_A(\mathbf{r}), \Psi_B(\mathbf{r}), \Psi_{\tilde{A}}(\mathbf{r}), \Psi_{\tilde{B}}(\mathbf{r}))^T$  bázisban a  $K$  pont környéki hosszúhullámú Hamilton-operátor (amennyiben a rétegek között nincs elektron-sűrűség asszimmetria) az alábbi alakban írható:

$$\hat{H}_K^{BG} = \begin{pmatrix} 0 & v_F \hat{p}_- & 0 & v_3 \hat{p}_+ \\ v_F \hat{p}_+ & 0 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_1 & 0 & v_F \hat{p}_- \\ v_3 \hat{p}_- & 0 & v_F \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

ahol  $\gamma_1 \sim 0.4$  meV,  $v_F \sim 10^6$  m/s és  $v_3 \sim 10^5$  m/s [42]. A (2.39) Hamilton-operátorban a két réteg csatolását az  $\tilde{A} - B$  bázisatomok közötti  $\gamma_1$  (domináns) és  $A - \tilde{B}$  bázisatomok közötti  $v_3 \hat{p}_\pm$  (gyengébb) kölcsönhatásokkal vettük figyelembe. Mivel a kristályrácsban a  $B$  és  $\tilde{A}$  atomok egymás felett helyezkednek el, az őket csatoló kölcsönhatási mátrixelemnek nincs impulzustól való függése. A  $K'$  pont környékén a (2.39)-ral unitér ekvivalens Hamilton-operátor írja le az elemi gerjesztések dinamikáját. A (2.39) Hamilton-operátorhoz tartozó energia-sajátértékek a

$\mathbf{k} = k(\cos \alpha, \sin \alpha)^T$  hullámszám függvényében:

$$E_{\kappa, BG}^{(n),+}(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F \sqrt{\frac{1}{2} \left[ k_B^2 + k^2 (2 + \beta_B^2) + (-1)^n \sqrt{\Upsilon_B} \right]}, \quad (2.40)$$

ahol  $\beta_B = v_3/v_F$ ,  $k_B = \gamma_1/(\hbar v_F)$ ,  $n = 1, 2$ , valamint

$$\Upsilon_B = k_B^4 + 2k^2 k_B^2 (2 - \beta_B^2) + k^4 \beta_B^2 (4 + \beta_B^2) - 8k^3 k_B \beta \cos(3\alpha). \quad (2.41)$$

A vezetési és valenciasávok szimmetrikusan helyezkednek el az  $E = 0$  síkra. Az  $A - \tilde{B}$  bázisatomok közti csatolás, bár gyengébb a többinél, lényegi változást okoz a spektrumban. Hatására az elemi gerjesztések spektrumát háromfogatú szimmetria jellemzi. Az  $E_{\kappa, BG}^{(1),+}(\mathbf{k})$  alsó vezetési sáv állandó energia-kontúrvonalait a 2.4.(a) ábra szemlélteti. Egy Dirac-kúp helyett négy Dirac-kúp együttese írja le az  $E_L$  ún. *Lifszit-energia* alatti gerjesztéseket, azonban a Lifszit-energia feletti gerjesztések olyanok, mintha egy központi Dirac-kúphoz tartoznának. A realisztikus paraméterek és a (2.40) egyenlet felhasználásával a Lifszit-energia  $E_L \sim 1$  meV-nek adódik [42]. Az elemi gerjesztések spektrumának topológiai átmenetét az alacsony ( $E < E_L$ ) és magasenergiás ( $E > E_L$ ) tartomány között az irodalomban *Lifszit-átmenetnek* nevezik.

## 2.3. Topológikus szigetelők

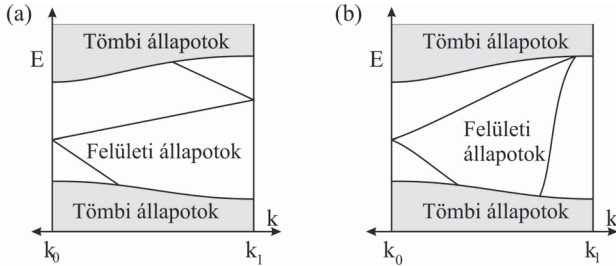
A spintronika utóbbi évtizedben mutatott fejlődése során a spin-pálya kölcsönhatás szilárd anyagok felületén történő megnyilvánulása széleskörű kutatómunka tárgyává vált. A spin-pálya kölcsönhatás egyik következményeként *GaAs* heteroszerkezetekben *kvantum spin-Hall-effektust* [53] (KSH) figyeltek meg [54]. Kane és Mele számolásai alapján grafénban is megjósolták a KSH-t ugyancsak a spin-pálya kölcsönhatás következményeként [55]. Kétdimenziós rendszerek KSH fázisában a tömbi sávszerkezet tiltott sávjában megjelennek a felületre lokalizálódott spin-polarizált felületi állapotok, melyek nem rendelkeznek tiltott sávszélességgel. Az ellentétes spinű és ellenkező irányba propagáló élállapotok egymásba csupán időtükrözési szimmetriát sértő szórási folyamattal szóródhatnak (például mágneses szennyező hatására). Ennek következtében a mintában lévő nemmágneses szennyezők nem befolyásolják a peremek mentén kiterjedt állapotok vezetési tulajdonságait. Az irodalomban elterjedt szóhasználattal élve, a felületi állapotok topológikusan védettek.

### 2.3.1. A $\mathbb{Z}_2$ topológikus invariáns. Sávszerkezet inverzió

A KSH fázist a hagyományos, tiltott sávszélességgel jellemezhető szigetelőtől az ún.  $\mathbb{Z}_2$  topológikus invariánssal [56, 57] különböztetjük meg. Az említett topológikus invariáns lényegét



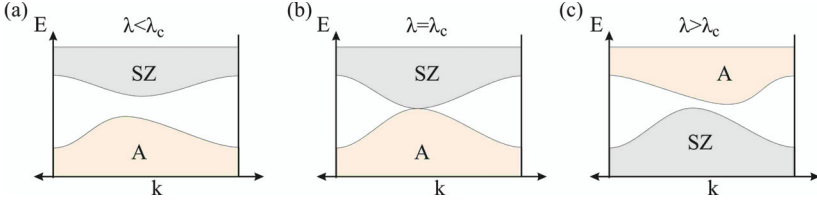
legkönnyebben kvázi-egydimenziós rendszereken érthetjük meg, például ahol egy kétdimenziós elektrongáz egy véges vastagságú, de végtelen hosszú (vagy periodikus peremfeltétellel rendelkező) területre van korlátozva. Tekintsünk olyan sávszerkezetet, melyben a (véges vastagságú



2.5. ábra. (a) Topológikusan nem triviális és (b) topológikusan triviális sávszerkezet. A  $k_0 = 0$  és  $k_1 = \pi/a$  időtükrözésre invariáns pontokban a felületi állapotok spektruma a Kramers-degenerációból kifolyólag legalább kétszeresen degenerált (lásd a szöveget). A topológikusan nem triviális sávszerkezet esetében a tiltott tömbi sávzélességben húzódo energiametszet minden alkalommal páratlan számú felületi állapotot metsz el a  $[k_0, k_1]$  intervallumban, míg a topológikusan triviális sávszerkezet esetében páros számút. A nem triviális sávszerkezet esetében a felületi állapotok nem szüntethetők meg a tiltott sávzélesség bezárása nélkül, míg a triviális sávszerkezet esetében ez folytonos transzformációval megtehető.

keresztmetszetet kitöltő) tömbi állapotokhoz tartozó sávszerkezetben tiltott sávzélesség van, valamint a (peremekre lokalizálódott) felületi állapotokat leíró disperziós ágak a tömbi tiltott sávzélességet szelik át (lásd a 2.5. ábrákat). Időtükrözésre invariáns rendszerekben a *Kramers-degeneráció* következményeként a sávszerkezet azon pontjaiban, melyekben az impulzus invariáns az időtükrözésre ( $k_1 = 0$  és a Brillouin-zóna széléit megadó ekvivalens  $k_2 = \pm\pi/a$  pontok, ahol  $a$  a rácsállandó), az állapotok kétszeresen degeneráltak. Az általánosság kedvéért feltesszük, hogy a spektrumban minden más degenerációt a spin-pálya kölcsönhatás, vagy egyéb perturbációk feloldják. A sávszerkezethez tartozó Hamilton-operátor folytonos variációi a sávszerkezetet folytonosan deformálják, de a Kramers-párok degenerációja nem oldódhat fel. A 2.5. ábra jobb és bal ábrái ezen kritériumokon belül abban különböznek egymástól, hogy folytonos deformációval a jobb oldali ábra felületi állapotokhoz tartozó disperziós ágai megszüntethetők (a vezetési, vagy a valenciasávba tolhatóak), míg a baloldali ábrán ez nem tehető meg. Bármilyen is a folytonos deformáció (a tömbi tiltott sávszerkezet bezárása nélkül), a baloldali ábrán a felületi állapotoknak mindig lesz legalább egy disperziós ága, mely átszeli a tömbi állapotok tiltott

sávszélességét. A 2.5. ábra jobb és bal ábrái ebből adódóan két különböző topológiai osztályba tartoznak: a baloldali osztályba tartozó sávstruktúráknál a tömbi tiltott sávszélességben fekvő Fermi-energia páratlan számú felületi diszperziós ágat szel át (KSH fázis), míg a jobboldali osztályba tartozóknál minden esetben páros számút (szigetelő fázis). A két topológikus fázis között



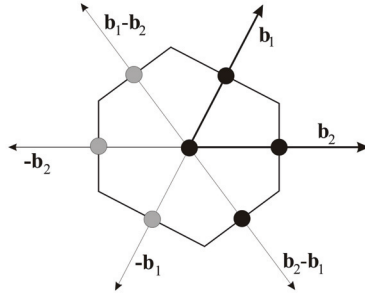
2.6. ábra. A sávstruktúra inverzió sématis vázlata. A (a)  $\lambda$  paraméter (például spin-pálya kölcsönhatás erőssége) értékét  $\lambda < \lambda_c$ -ről növelve a tiltott sávszélesség csökken, majd (b)  $\lambda = \lambda_c$  értéknél a két sáv összeér. (c) A paraméter értékét tovább növelve újra tiltott sávszélesség képződik a spektrumban, azonban a különböző szimmetriatulajdonságokkal (például szimmetrikus (SZ) és antiszimmetrikus (A)) rendelkező sávok felcserélődnek. Az (a) és (c) sávstruktúrák topológiai tulajdonságai eltérnek egymástól.

csupán a tömbi tiltott sávstruktúra bezárásával lehet átjutni. A Hamilton-operátor egy paraméterét (például spin-pálya kölcsönhatás erősségét) folytonosan változtatva, a tömbi tiltott sávszélesség bezárásával és újranyílásával együtt járó fázisátalakulás tipikus mechanizmusát *sávstruktúra inverzió*nak hívják. Ennek során a különböző szimmetriatulajdonságokkal rendelkező valencia és vezetési sáv egymást keresztezve szerepet cserélnek (lásd a 2.6. ábrát).

Az elmúlt években számos matematikai modellt alkottak a  $\mathbb{Z}_2$  invariáns meghatározására [56, 58, 59, 60, 61, 62] két- és háromdimenziós rendszerekben. Az egyenértékű megfogalmazások közül Fu és Kane gondolatmenetét követve, bevezetünk egy  $w_{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_n(\mathbf{k}) | \Theta | u_m(\mathbf{k}) \rangle$  unitér mátrixot [58], ahol  $\Theta$  az időtükrözési operátor, és  $|u_n(\mathbf{k})\rangle$  a *betöltött állapotok Bloch-függvényeit* jelöli. Mivel  $\Theta$  antiunitér és  $\Theta^2 = -1$ , ezért  $w^T(\mathbf{k}) = -w(-\mathbf{k})$ . Az időtükrözésre invariáns  $\mathbf{k}_i$  hullámszámvektorok esetében (melyekre  $\mathbf{k}$  és  $-\mathbf{k}$  csak egy reciprok rácsvektorban térnek el egymástól) az előző összefüggés következményeként a  $w(\mathbf{k}_i)$  mátrixok antiszimmetrikusak lesznek. Az antiszimmetrikus mátrixokra jellemző, hogy determinánsumuk a mátrix elemein értelmezett ún. *Pfaff-polinom* teljes négyzetével egyenlő (bővebben lásd a függelék F.1 szakaszát). Ebből adódóan definiálható az alábbi mennyiség:

$$\delta_i = \frac{\text{Pf}[w(\mathbf{k}_i)]}{\sqrt{\text{Det}[w(\mathbf{k}_i)]}} = \pm 1. \quad (2.42)$$

Kétdimenzióban a Brillouin-zónában 4 olyan hullámszámvektor létezik, melyeket az időtükrö-



2.7. ábra. Kétdimenziós Brillouin-zóna a  $\mathbf{b}_1$  és  $\mathbf{b}_2$  reciprok rácsvektorokkal. A fekete pontok az időtükrözésre invariáns pontokat jelölik a Brillouin-zóna középpontjában és a független oldalfelvezőkben. A szürke pontok a fekete pontoktól reciprok rácsvektorban különböző, azaz a feketékkel ekvivalens pontokat jelölik a Brillouin-zónában.

zési transzformáció helyben hagy, vagy egy reciprok rácsvektorban különböző hullámszámvektorba transzformál: a Brillouin-zóna középpontjába és a független oldalfelvező pontjaiba mutató hullámszámvektorok (lásd a 2.7. ábrát). Míg a (2.42) egyenletben definiált  $\delta_i$  mennyiség előjele változhat egy impulzus függő mérték-transzformáció során, az alábbi módon definiált  $\nu = \pm$  mennyiség invariáns marad:

$$(-1)^\nu = \prod_{i=1}^4 \delta_i. \quad (2.43)$$

Az összefüggésben szereplő  $\nu$  számot  $\mathbb{Z}_2$  topológikus invariánsnak nevezzük. Megjegyezzük, hogy  $\nu$  számolása jelentősen egyszerűbbé válik, ha a kristályrác rendelkezik további szimmetriatulajdonságokkal [59, 63].

### 2.3.2. Háromdimenziós topológikus szigetelők

A háromdimenziós topológikus szigetelőket (3DTI) először 2006-ban jósolták meg elméleti kutatócsoportok. Ennek során a kétdimenziós KSH fázist jellemző  $\mathbb{Z}_2$  topológikus invariáns általánosítását fogalmazták meg háromdimenziós esetre [57, 62]. Különböző szigetelő anyagok

sávszerkezetét vizsgálva lehetségesnek tűnt a 3DTI magvalósítása például  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ,  $\text{HgTe}$  vagy  $\alpha\text{-Sn}$  felhasználásával [59]. Az első 3DTI kísérleti megvalósítása ezek után nem váratott sokáig magára: 2008-ban  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  egykristállyal létrehozták az első 3DTI-t [64]. 2009-ben ún. második generációs topológikus szigetelőket hoztak létre kísérletileg, mint például  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [65] vagy  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  [66].

Háromdimenzióban összetettebb a sávszerkezet  $\mathbb{Z}_2$  topológikus invariánssal történő osztályozása. A háromdimenziós Brillouin-zónában összesen 8 időtükrözésre invariáns  $\mathbf{k}_i$  hullámszámvektor azonosítható, melyekre  $\mathbf{k}_{i=(n_1n_2n_3)} = (n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3)/2$ , ahol  $n_j = 0, 1$  ( $j = 1, 2, 3$ ) és  $\mathbf{b}_j$ -k a megfelelő reciprok rácsvektorok. A  $\mathbf{k}_{n_1n_2n_3}$  hullámszámvektorok a Brillouin-zóna középpontjába és azon oldalközéppontokba (illetve magasszmmetriás esetben a csúcokba) mutató vektoroknak felelnek meg, melyek nem köthetőek össze reciprok rácsvektorral. Tekintsük azon négy pontot ezek közül, melyek egy síkban vannak. (A négy pont és közös síkjuk többféleképpen kiválasztható, azonban nem tetszőlegesen.) Ezen négy hullámszámvektor (2.42) egyenlettel adott  $\delta_{n_1n_2n_3}$  jellemzőinek előjele változhat impulzusfüggő mérték-transzformáció hatására. Ilyen módon minden síkban 16-féle  $\delta_{n_1n_2n_3}$  konfiguráció fordulhat elő (mind a 4 hullámszámvektorhoz a  $\delta_{n_1n_2n_3}$ -k felvehetnek  $\pm 1$  értéket). A topológikus szigetelőké e 16 különböző osztályát négy ( $\nu_0; \nu_1\nu_2\nu_3$ ) független  $\mathbb{Z}_2$  invariánssal jellemezhetjük az alábbi definíció szerint:

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{n_j=0,1} \delta_{n_1n_2n_3}, \quad (-1)^{\nu_{i=1,2,3}} = \prod_{n_{j \neq i}=0,1; n_i=1} \delta_{n_1n_2n_3}. \quad (2.44)$$

Megmutatható, hogy  $\nu_0$  független a reciprok rácsvektorok választásától, azonban a  $(\nu_1\nu_2\nu_3)$  hármas függ  $\mathbf{b}_j$ -k megválasztásától [57]. Tekintsük most a  $\mathbf{G} = \sum_i m_i \mathbf{b}_i$  reciprok rácsvektorral, mint normál vektorral definiált felületet, ahol  $m_1$ ,  $m_2$  és  $m_3$  legnagyobb közös osztója 1. A felülethez tartozó „felületi Brillouin-zónában” négy  $\Lambda_i$ -vel jelölt időtükrözésre invariáns impulzus van, melyek a 8  $\mathbf{k}_{n_1n_2n_3}$  (vagy velük ekvivalens reciprok rácsvektorban különböző) hullámszámvektor egymást fedő  $\mathbf{k}_{n_1n_2n_3}$  páriainak projekciója a felületre. Belátható ugyanis, hogy minden  $\mathbf{k}_{n_1n_2n_3}$  hullámszámvektorhoz tartozik pontosan egy  $\mathbf{k}_{\tilde{n}_1\tilde{n}_2\tilde{n}_3}$  hullámszámvektor és egy  $(\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \tilde{m}_3)$  hármas, hogy teljesüljön:  $\mathbf{G}/2 = \mathbf{k}_{n_1n_2n_3} - \mathbf{k}_{\tilde{n}_1\tilde{n}_2\tilde{n}_3} + (\tilde{m}_1\mathbf{b}_1 + \tilde{m}_2\mathbf{b}_2 + \tilde{m}_3\mathbf{b}_3)$ . A Kramers-degeneráció következményeként, amennyiben létezik felületi állapot, mind a négy  $\Lambda_i$  ponthoz egy-egy kétdimenziós Dirac-pont rendelhető. A négy Dirac-ponton kívül tekintsük a háromdimenziós Fermi-felület és a vizsgált kétdimenziós felületi Brillouin-zóna metszévonalát, melyet nevezünk *Fermi-vonalnak* [57]. Kombinatorikai érvelésekkel megmutatható, hogy  $\nu_0 = 0$  esetben a Fermi-vonal páros,  $\nu_0 = 1$  esetben pedig páratlan számú Dirac-pontot zár körbe [52, 57].  $\nu_0 = 0$  esetben a további  $(\nu_1\nu_2\nu_3)$  hármasoknak megfelelően a Fermi-vonal által bezárt Dirac-pontok száma  $0(4)$

vagy  $2$ )<sup>1</sup> változhat az elemi cella megválasztásának függvényében. Egy gyenge periodikus potenciál, mely például megkettőzi az elemi cellát, eltüntetheti a két Dirac-pontot. Ilyen anyagokban a felületi állapotok könnyen lokalizálódnak szennyezők köré (Anderson-lokalizáció) és „triviális” szigetelővé válnak. Ugyanakkor a  $\nu_0 = 0$  topológikus szigetelőknél nagy jelentősége van tiszta minták esetében, hiszen ekkor a felületi állapotok topológikusan védettek. Ezért a  $\nu_0 = 0$  topológikus szigetelőket *gyenge topológikus szigetelőknél* nevezzük [52, 57].

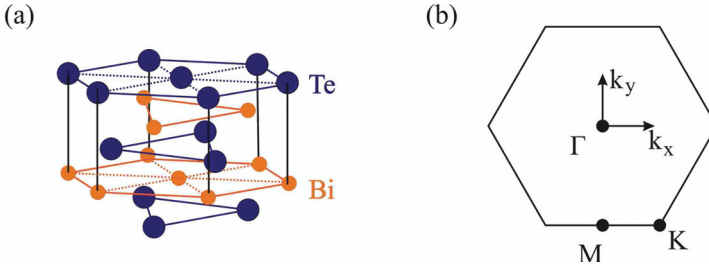
$\nu_0 = 1$  esetben a Fermi-vonal  $1(3)^2$  Dirac-pontot vesz körbe. Ebben az esetben a felületi állapotok nem lokalizálódnak, hiszen a  $(\nu_1\nu_2\nu_3)$  hármastól függetlenül minden topológikus osztályban a Fermi-vonal  $1(3)$  Dirac-pontot zár körbe.  $\nu_0 = 1$  topológikus szigetelőknél ezért a felületi állapotok topológikusan védettek maradnak szennyezők jelenlétében is. Az ilyen anyagokat *erős topológikus szigetelőknél* nevezzük. Erős topológikus szigetelőknél a Fermi-energia változtatható elektront leadó (vagy felvevő) szennyező atomok adagolásával anélkül, hogy a felületi állapotok tulajdonságai lényegesen megváltoznának [73, 74]. Fontos megjegyezni, hogy erős topológikus szigetelőknél a felületi állapotok diszperziója nem degenerált (az időtükrözésre invariáns pontokat leszámítva), minden  $\mathbf{k}$  impulzushoz jól meghatározott spinállapot tartozik. Az időtükrözési szimmetria következménye, hogy a  $\mathbf{k}$  és  $-\mathbf{k}$  impulzusú állapotok spinje ellentétes irányba mutasson. Ezért a Fermi-vonalon haladva a spin irányának az impulzussal együtt kell elfordulnia. Időtükrözési szimmetriával rendelkező rendszerekben a Berry-fázis  $0$  vagy  $\pi$  értéket vehet fel (mod  $2\pi$  erejéig). Mivel a Fermi-vonalon az elektron spinje  $2\pi$ -vel fordul el, a Berry-fázis  $\pi$ -nek adódik. Ennek következtében megváltozik a szennyezők okozta gyenge lokalizációs korrekció előjele a vezetőképességben, ami gyenge lokalizáció helyett gyenge antilokalizációhoz vezet [67]. Erős topológikus szigetelőknél tehát a felületi állapotok nem lokalizálódnak még erős szennyezés hatására sem mindaddig, amíg a tömbi sávszerkezet tiltott sávszélessége nem záródik össze.

### 2.3.3. Második generációs topológikus szigetelők

A  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  kristály segítségével létrehozott 3DTI bonyolult, több diszperziós ágból álló felületi állapotokkal rendelkezik [64]. Az ún. *második generációs topológikus szigetelőknél* (2GTI) ezzel szemben a felületi állapotok egy Dirac-kúp alakú diszperzióval írhatóak le. Több elméleti jóslat után [68, 69] az első 2GTI-t  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  kristályokkal valósították meg [65]. Nem sokkal később  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  [66, 70, 71] és  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  [72] kristályok felületén is megfigyelték a topológikusan

<sup>1</sup>A Brillouin zóna átdarabolása szabja meg, hogy adott esetben  $0$  vagy  $4$  Dirac-pontot vesz-e körül a Fermi-vonal.

<sup>2</sup>A Brillouin zóna átdarabolása szabja meg, hogy adott esetben  $1$  vagy  $3$  Dirac-pontot vesz-e körül a Fermi-vonal.



2.8. ábra. (a) A  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristályrácsát alkotó ötrétegű elemi építőegység. Az egymás alatt lévő egységek gyenge Van der Waals típusú kötéssel kapcsolódnak egymáshoz. (b) A hatszöges szimmetriát mutató felületi Brillouin zóna, és a benne megjelölt nevezetes pontok a hatszög középpontjában ( $\Gamma$ ), oldalfelezőjében ( $M$ ) és csúcsában ( $K$ ).

védett felületi állapotokat. A  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  véletlenszerű elrendezéséhez képest<sup>3</sup> a 2GTI-k olvasztótégelyben létrehozott egykristályok voltak. Miután tartalmának olvadáspontja fölé hevítették az olvasztótégelyt, az egyik pontjában alkalmazott hűtés hatására egykristály kezdett el nőni a hűtött pontból. Az eljárás *Bridgman-eljárás* néven vált közzismertté az irodalomban. A keletkezett kristályokból letörve a kialakult [111] törésfelületen figyelhetőek meg a felületi állapotok. A 2GTI-k előállításukból adódóan sokkal kevesebb szennyezést és inhomogenitást tartalmaznak mint az előzőleg vizsgált  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ . Elterjedt azonban a 2GTI minták egy precízebb készítési eljárása, mely során az egykristályokat egy hordozófelületen (például  $\text{Si}(111)$ ) epitaxiálisan növesztik [25].

A 2GTI-k elég nagy tiltott sáv szélességgel (0.15 – 0.3 eV) rendelkeznek ahhoz, hogy rajtuk a topológikus tulajdonságok szobahőmérsékleten is megfigyelhetőek legyenek. A Fermi-energia finomhangolását ezekben az anyagokban alacsony rendszámú (például Mg, Sn, Ca) adalék atomokkal érik el [70, 73, 74]. Magasabb rendszámú adalék atomokra jelentős spin-pálya kölcsönhatás jellemző, így alkalmazásuk nagy mértékben befolyásolná a felületi állapotok közti szórási folyamatokat [75].

A 2GTI-k kristályszerkezete rombohedralis szerkezetű, szimmetriacsoportját az  $R\bar{3}m$  pontcsoport írja le. A kristályrácsra többek között jellemző az inverziószimmetria. A 2.8.(a) ábra  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  esetében mutatja a kristályszerkezetet. Az atomok rétegesen helyezkednek el háromszög-rácsot formálva az egyes rétegekben. A kristályrácsban öt rétegből álló rész formál egy egységet, az ún. *quintuple layer*-t (QL). Egy QL-en belül az atomok erősen kötődnek egymáshoz, azonban

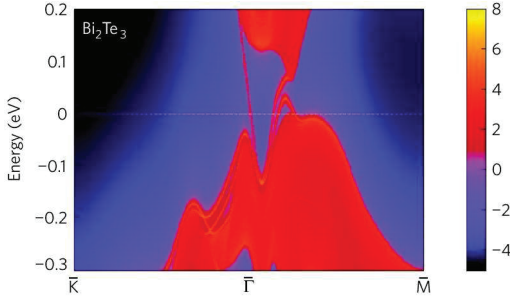
<sup>3</sup>A csekélyebb mértékben jelenlévő Sb atomok a Bi atomok helyét foglalják el véletlenszerűen.

a QL-ek között gyenge Van der Waals típusú kötések alakulnak ki. Ezért egy olvasztótégelyben készített mintát széttörve, a törésfelület mindig Te atomokkal fog záródni. A kémiai kötések a Bi és Te atomok között nagyrészt mindkét atom külső héján lévő  $p$  pályákból alakulnak ki. A spin-szabadsági fokokat (és ezzel együtt a spin-pálya kölcsönhatást is) figyelmen kívül hagyva, a Fermi-energia közelében lévő tömbi elektron állapotok a  $p_z$  pályák hibridizációjából alakulnak ki, melyek a kristályrács inverzió-szimmetriájának megfelelő, ugyancsak szimmetrikus és antiszimmetrikus hullámfüggvényekkel adhatóak meg. Ezek az állapotok a kristályrács szimmetriacsoportjának egydimenziós irreducibilis ábrázolásaihoz tartoznak, ezért a spin szabadsági fokoktól eltekintve nem degeneráltak [76]. A magasabb energiájú  $+1$  paritású hullámfüggvény a Bi atomok elektronpályáinak feleltethető meg, míg az alacsonyabban fekvő  $-1$  paritású állapot a Te atomok elektronpályáinak. A spin-pálya kölcsönhatást bekapcsolva és erősségét folytonosan növelve, a szimmetrikus és antiszimmetrikus állapotokban sávszerkezet inverzió jön létre, teret adva a topológikusan nem triviális fázis létrejöttének [69]. A spin-pálya kölcsönhatás a  $p_z$  pályához  $p_{x,y}$  pályákat is kever ugyanazon típusú atomok elektronpályáiból (Bi-hez Bi és Te-hez Te pályákat), ezért a spin ( $S$ ) és az impulzusmomentum ( $L$ ) egyenként már nem lesznek jó kvantumszámok, azonban a teljes impulzusmomentum az marad. A Fermi-energia közelében fekvő tömbi elektron állapotok a Bi vagy Te atomok  $p_z$  pályáihoz tartozó ( $L_z = 0, S_z = \pm 1/2$ ) és a  $p_{x,y}$  pályáihoz tartozó ( $L_z = \mp 1, S_z = \pm 1/2$ ) állapotokból kikevert  $J_z = \pm \frac{1}{2}$  teljes impulzusmomentumú állapotok lesznek. A Bi atomokhoz továbbra is a  $+1$  paritású, a Te atomokhoz pedig a  $-1$  paritású állapot tartozik. Ezeket a  $\pm 1$  paritású állapotokat a  $J = 1/2$  teljes impulzusmomentum jellemzi,  $J_z = \pm 1/2$ -ben degenerált energiaszintekkel. A tömbi kristály alacsony energiás (azaz a Fermi-energiához közeli) kiterjedt állapotai az impulzus függvényében első közelítésben ezen 4 állapot lineáris kombinációiként írhatóak fel. Az alacsonyenergiás állapotok dinamikáját ezért egy  $4 \times 4$  Hamilton-operátor írja le [69, 76, 77]:

$$\hat{H}_4^{TI} = \varepsilon(\mathbf{k})I_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\mathbf{k}) & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & \mathcal{M}(\mathbf{k}) & -A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & -A_1 k_z & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} + \mathcal{O}(k^2), \quad (2.45)$$

ahol  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ,  $\varepsilon(\mathbf{k}) = C + D_1 k_z^2 + D_2(k_x^2 + k_y^2)$  és  $\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M - B_1 k_z^2 - B_2(k_x^2 + k_y^2)$ . A Hamilton-operátorban szereplő paraméterek az egyes 2GTI-kben különböznek egymástól, azonban a (2.45) Hamilton-operátor az összes 2GTI-ben leírja az alacsonyenergiás elektron dinamikát. A kristályrácsban kialakult elektronállapotok részletes leírását, valamint azok szimmetriatulajdonságait [76] foglalja össze.

Az [111] felület mentén a kristályrács  $R\bar{3}m$  szimmetriacsoportja a  $C_{3v}$  csoportra redukáló-



2.9. ábra.  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály állapotsűrűségének energiától és impulzustól való függése első elvekből származtatva. A piros szín a magas állapotsűrűségű tartományokat jelöli. A  $\Gamma$  pont környékén tisztán megfigyelhetők a felületi állapotok diszperziós ágai a tömbi tiltott sávzélességben. A fehér szaggatott vonal a Fermi-szintet jelöli. Az ábra a [69] publikációból származik.

dik, melynek elemei a  $z$  tengely körüli háromfogású forgatást leíró  $\hat{C}_3$  operátor és hatványai, valamint a  $z$  tengely és a Brillouin-zóna  $\Gamma M$  iránya (2.8.b) ábra) által meghatározott síkra való tükrözés  $\hat{T}$  operátora. A tömbi alacsonyenergiás elektronokat leíró  $4 \times 4$ -es modellben megfelelő peremfeltételekkel figyelembe véve a kristályrács  $z$  tengelyre merőleges felületeit (egy felül és egy alul), mindkét felületen két, a kristály belseje felé  $z$ -ben lecsengő „felületi megoldást” kapunk [76, 77]. A 2.9. ábra a  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály első elvekből származtatott állapotsűrűségének energiától és impulzustól való függését ábrázolja a Brillouin-zóna  $K\Gamma M$  metszetében [69]. A magas állapotsűrűségű pontok a kristály sávszerkezetével hozhatóak kapcsolatba. A (2.45) Hamilton-operátor sajátértékei jól leírják a tömbi sávszerkezet Fermi-energia környéki részét (fehér szaggatott vonal a 2.9. ábrán). Ezen felül a  $\Gamma$  pont környékén megfigyelhetők a tömbi tiltott sávzélességet átszelő felületi állapotok diszperziós ágai is. Mint látjuk, a sávszerkezetet kisebb tiltott sávzélesség jellemzi, mint amekkora tiltott sávzélesség a  $\Gamma$  pontban látható. A  $\Gamma$  pontbeli tiltott sávzélességnél kisebb indirekt tiltott sávzélesség a többi 2GTI-t is jellemzi [68], amit a mérések is alátámasztottak [78].

A  $\Gamma$  pontban ( $\mathbf{k} = 0$ ) a Kramers-degeneráció következtében a felületi állapotokat – az egyik felületre korlátozódva – egy kétdimenziós Dirac-pont írja le. A felület szimmetria operátorait a két felületi állapot által kifeszített Hilbert-térre vetítve a  $J_z = \pm \frac{1}{2}$  teljes impulzusmomentum természetes bázisában reprezentáljuk, felhasználva, hogy  $\hat{T}\hat{C}_3\hat{T}^{-1} = \hat{C}_3^{-1}$  és az  $1/2$  spinű részecskék esetében  $\hat{T}^2 = -I_2$ . Ekkor a szimmetria operátorok az alábbi alakban írhatóak:

$$\hat{C}_3 = e^{i\sigma_x \pi/3}, \quad \hat{T} = i\sigma_x. \quad (2.46)$$



Az antiunitér időtükrözési operátort, mely kommutál a szimmetria műveletek operátoraival, a  $\Theta = i\sigma_y K$  ( $K$  a komplex konjugálás műveletét jelöli) mátrixoperátorral reprezentálhatjuk. Megmutatható, hogy az összefüggésekben  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  arányos a felületi állapotok által kifeszített Hilbert-térre vetített spin operátorral [76].

A szimmetria operátorok hatására a  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$  számok, valamint a  $\sigma_z$  és  $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$  mátrixok az alábbi módon transzformálódnak:

$$\hat{C}_3 : k_{\pm} \rightarrow e^{i2\pi/3} k_{\pm}, \quad \sigma_{\pm} \rightarrow e^{i2\pi/3} \sigma_{\pm}, \quad \sigma_z \rightarrow \sigma_z \quad (2.47)$$

$$\hat{T} : k_x \leftrightarrow -k_x, \quad \sigma_x \rightarrow \sigma_x, \quad \sigma_{yz} \rightarrow -\sigma_{yz}. \quad (2.48)$$

A felületi állapotokat leíró Hamilton-operátor invariáns a fenti transzformációkra nézve, valamint az időtükrözési invariancia miatt teljesül:

$$\hat{H}^{TI}(\mathbf{k}) = \Theta \hat{H}^{TI}(-\mathbf{k}) \Theta^{-1} = \sigma_y (\hat{H}^{TI})^*(-\mathbf{k}) \sigma_y. \quad (2.49)$$

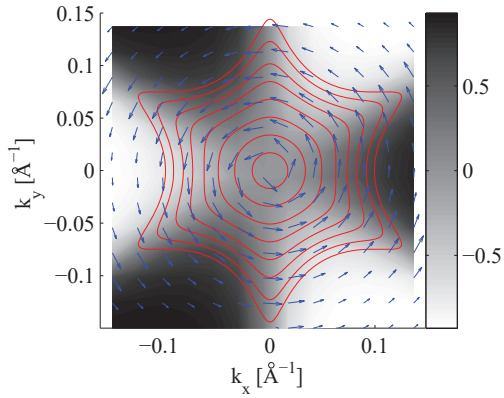
Ezek alapján megmutatható, hogy a  $H^{TI}(\mathbf{k})$  Hamilton-operátor az alábbi alakban írható  $k$ -ban harmadrendig [79]:

$$\hat{H}^{TI}(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m^*} + v_k(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x) + \frac{\lambda}{2}(k_+^3 + k_-^3)\sigma_z, \quad (2.50)$$

ahol  $v_k = v_0 + \alpha k^2$ . A (2.50) Hamilton-operátorhoz tartozó felületi állapotok energiaspektruma:

$$E_{\pm}^{TI}(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m^*} \pm \sqrt{v_k^2 k^2 + \lambda^2 k_x^2 (k_x^2 - 3k_y^2)^2}, \quad (2.51)$$

ahol  $E_{\pm}^{TI}(\mathbf{k})$  a felső (+) és alsó (-) energiasávot jelöli. A konstans energiakontúrok tipikus alakját a 2.10. ábra szemlélteti. A  $\Gamma$  pont közelében a konstans energiakontúrok izotróp kör alakúak, míg távolabb a  $\Gamma$  ponttól a spektrumot a kristályrácznak megfelelő szimmetria-tulajdonságok jellemzik. Az energiaspektrum hatszöges torzulását a második generációs topológikus szigetelőkön a fotoemissziós [66, 80, 26] és pásztázó alagútmikroszkópos [70] mérések egyaránt igazolták. A (2.50) Hamilton-operátorban szereplő paramétereket a (2.51) diszperzió illesztésével lehet meghatározni a mért fotoemissziós spektrumokra. Az alacsonyenergiás kör alakú energiakontúrokat és azok elhatszögesedését már a  $v_0$  és  $\lambda$  paraméterekkel is le lehet írni a többi paraméter elhanyagolásával. Az irodalomban  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  esetében  $v_0 = 3.55$  eVÅ és  $\lambda = 128$  eVÅ<sup>3</sup> [80],  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  esetében pedig  $v_0 = 2.55$  eVÅ és  $\lambda = 250$  eVÅ<sup>3</sup> [79] értékek terjedtek el. A kísérletek pontos numerikus leírásához azonban a magasabb rendű korrekciók is szükségesek. A [81] publikációban például fotoemissziós mérésekkel rámutattak, hogy a  $\mathbf{k}$  impulzusú elektronok spinje általában nem merőleges a  $\mathbf{k}$  hullámszámvektorra. A (2.50) Hamilton-operátorból származtatott állapotok spin iránya azonban merőleges a hullámszámvektorra minden  $\mathbf{k}$  mellett (lásd a 2.10 ábrán szemléltetett spin-polarizációt). A mérési eredményeket ezért csupán még magasabb rendű tagok figyelembevételével lehet megmagyarázni [82].



2.10. ábra. A második generációs topológikus szigetelők felületi állapotainak jellegzetes energia-kontúrjai (folytonos piros görbék). A  $\mathbf{k} = 0$  pont körül az energianívok izotróp kör alakúak, míg távolodva a  $\Gamma$  ponttól hatszögesen torzulnak. A kék vektorok a spin-polarizáció  $x - y$  síkba eső vetületét, a szürkés árnyalatok pedig a spin-polarizáció  $z$  komponensének eloszlását szemléltetik. A spin várható értéke merőleges a mindenkor  $\mathbf{k}$  momentumra.

## 2.4. A fejezet összefoglalása

A fejezetben áttekintettem azokat a fizikai rendszereket, melyekkel majd az értekezés további fejezeteiben foglalkozom. A grafén szoros kötésű elektron-modelljének, valamint az alacsonyenergiás elektronok kontinuum leírásának ismertetése után bemutattam a két modell közti kapcsolatot. A kontinuum-modellhez vezető burkolófüggvény közelítés gondolatmenetét a spin-pálya kölcsönhatás Hamilton-operátorának levezetése során alkalmazom majd a 3.1.5. szakaszban. Az egyrétegű grafén mellett röviden ismertettem a kétrétegű grafén hosszuhullámú leírására alkalmas modellt is. Kétrétegű grafénben a háromszöges torzulás négy független Dirac-kúpot eredményez az elemi gerjesztések alacsonyenergiás spektrumában, lényegesen befolyásolva ezzel azok dinamikáját.

Ezt követően a topológikus szigetelőkre jellemző főbb tulajdonságok áttekintése során ismertettem a sáv szerkezetek osztályozására alkalmas  $\mathbb{Z}_2$  topológikus invariáns és a triviális/nem triviális topológiájú sáv szerkezetek fázisátalakulását kísérő sáv szerkezet inverzió elvét. Végül egy konkrét háromdimenziós topológikus szigetelőt, a  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály felületi állapotainak modelljét ismertettem.



## 3. fejezet

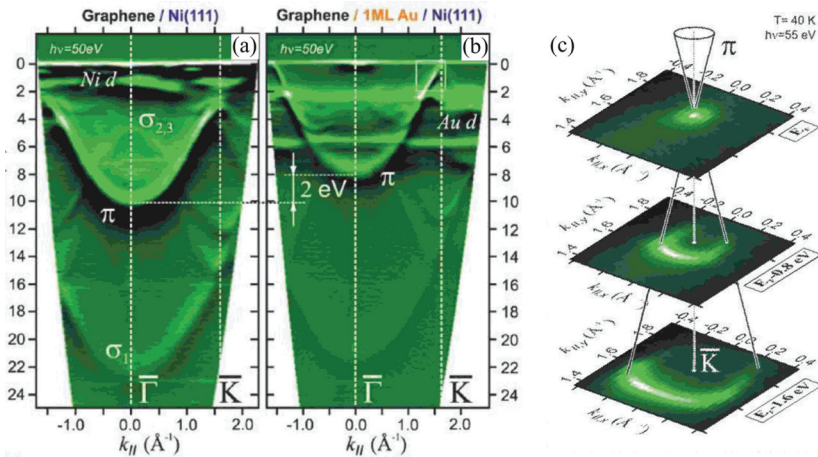
# Fotoemissziós mérések modellezése

### 3.1. Mérései eredmények áttekintése grafén esetében

A grafén minták egy tipikus előállítási módszere során Ni(111) hordozófelületeken magas hőmérsékletű ( $\sim 800$  K) és alacsony nyomású ( $\sim 10^{-6}$  mbar)  $C_3H_6$  környezetben egyrétegű grafén réteg képződik. A folyamat előnye, hogy egy réteg képződésével a folyamat automatikusan telítődik, a grafén rétegen nem képződik újabb réteg [83, 84]. Egyéb hordozófelületű (pl.: SiC [85, 86], Co [87], Ir [88], stb.) grafén minták előállításához hasonlóan magashőmérsékletű eljárásokat alkalmaznak, az egyes hordozófelületekhez idomított technikai feltételek mellett. Elterjedt azonban egy kevésbé kontrollálható módszere is a grafén minták készítésének, mely során a grafit síkjainak lehasításával hoznak létre egy rétegnyi grafént tipikusan  $SiO_2$  hordozófelületen. A minták ezen úton történő készítése azonban sokkal több szerkezeti hibát okoz a grafénben, mint az előzőekben ismertetett módszer. A hordozófelületek többnyire dópolják a grafént, akár néhány száz meV-tal is eltolva a Fermi-energiát a Dirac-ponthoz képest. A fotoemissziós mérések során a grafén sáv szerkezetével együtt a hordozófelület sáv szerkezete is láthatóvá válik. Gyakran a hordozófelület és grafén energiában közel álló elektronállapotainak hibridizációja is a vizsgálat tárgyát képezi. A hordozófelület, grafénnel kialakított kötési folytán, befolyásolni tudja a grafén  $\pi$  elektronjainak dinamikáját is. Nem ritka, hogy ennek hatására például tiltott sáv szélesség nyílik [85, 86, 89, 90] a spektrumban, de olyan hordozófelületű mintát is létre lehet hozni, melyben a grafén úgy viselkedik, mintha ideális lenne [91].

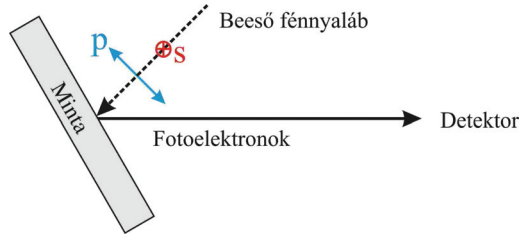
#### 3.1.1. Megfigyelések fotoemissziós mérések során

Impulzusfelbontású fotoemissziós mérések során (ARPES technika) a Brillouin-zóna kitüntetett magas szimmetriájú metszeteiben vizsgálják a grafén/hordozófelület heteroszerkezet elekt-



3.1. ábra. (a) grafén/Ni(111) és (b) grafén/Au/Ni(111) heteroszerkezetek ARPES technikával mért sávszerkezetei a Brillouin-zóna  $\Gamma K$  metszetében. A grafénra jellemző  $\pi$  és  $\sigma$  sávok mellett a Ni hordozófelület és arany réteg  $d$  sávjai is láthatóak. Az arany réteg  $5d$  sávjának és a grafén  $\pi$  elektronjainak hibridizációja folytán helyreáll a lineáris, tiltott sávzélesség mentes disperzió a  $K$  pont környékén. (c) A fotoelektronok kétfogású szimmetriával rendelkező intenzitás-eloszlása a  $K$  pont környékén a Dirac-kúp különböző energiametszeteiben. Az ábra a [91] publikációból származik.

ronállapotainak disperzióját. A 3.1.(a) és (b) ábrák ARPES technikával mért sávszerkezetek szemléltetnek Ni(111) hordozófelület esetében. A grafén  $\pi$  elektronjainak sávjait tipikus alakjukról és a  $K$  pont környéki Dirac-kúpot formáló metszetükről ismerjük meg. A  $\pi$  sávok azonosítása után az állandó energiájú felületek alakját térképezték fel kétdimenziós momentum metszetekben az energia függvényében. A  $K$  pont körül az állandó energia-kontúrok mentén mért fotoelektron intenzitásra a 3.1.(c) ábrán látható kétfogású szimmetriával rendelkező anizotrópia jellemző [85, 86, 89, 91, 92]. A jelenség már a grafiton végzett mérések időszakából is ismert, magyarázatát a grafén rétegek két alácsáról kilökött koherens elektronok interferenciájának tulajdonították [93]. A meglepő anizotrópia minden  $p$  polarizációs irányú lézertel végzett kísérlet során tapasztalható volt, azonban  $s$  irányban polarizált fény esetében a konstans energiájú metszetekben izotróp intenzitás-eloszlást tapasztaltak [94]. (A  $p$  és  $s$  polarizációs irányokat a 3.2. ábra szemlélteti.) A jelenséget a  $p$  polarizáció mellett domináns, ám  $s$  polarizációnál eltűnő



3.2. ábra. A fotoemissziót kiváltó fénnyaláb polarizációs irányainak jelölése. Az  $s$  polarizációs irány merőleges a beeső fénnyaláb és a fotoelektronok detektálási iránya által meghatározott síkra, míg a  $p$  polarizációs irány ebben a síkban fekszik.

kölcsönhatási mátrixelemekkel magyarázták. A kétfogású szimmetriával rendelkező intenzitás-eloszlás, illetve az ezt kiváltó ún. *alrács-interferencia* egyszerű modelljét a következő szakaszban ismertetem tetszőleges transláció invariáns Hamilton-operátor esetére.

A hordozófelülettel való kölcsönhatás egy tiltott sávzélesség kialakulásán túl egyéb egzotikus jelenségekhez is vezethet. SiC hordozófelületen például a  $K$  pontok körül a centrális Dirac-kúpon kívül további hat *szatellit csúcsot* azonosítottak a  $\pi$  elektronok sávszerkezetében [85, 86]. A fotoemissziós mérések további jellegzetes tulajdonsága, hogy a Dirac-kúpok egyszerű modelljéhez képest a mérések töréseket mutatnak a lineáris diszperzióban [86]. A törések eredetét az elektron-fonon kölcsönhatásokra vezetik vissza.

### 3.1.2. Alrács-interferencia

A fotoelektronok intenzitás-eloszlását az (1.10) egyenlet segítségével számolhatjuk ki. A soron következő számolások során az előző szakaszban említett kétfogású szimmetriát kiváltó interferencia effektusok leírására törekszem. Az elméleti modellt, a [95] publikációban bemutatott eredménnyel szemben, tetszőleges transláció invariáns Hamilton-operátor esetére fogalmazom meg. Eredményül egy könnyen kiértékelhető, a Hamilton-operátorból közvetlenül számolható összefüggést adok meg. A vázolt modell általánosítását a 3.1.6. szakaszban a spin-polarizált fotoelektron-áramok tanulmányozásánál alkalmazom a grafén alrács-aszimmetriájának vizsgálata céljából.

Az egyszerűség kedvéért eltekintek az elemi gerjesztések közti kölcsönhatástól és számolásaimat zérus hőmérsékleten végzem el. Az (1.10) egyenletben szereplő spektrál függvény, a  $\mu$

sávra korlátozódva, ekkor az alábbi egyszerű alakban írható:

$$A_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^{\mu}(\hbar\omega) = 2\pi \delta(\hbar\omega - E_{\mathbf{q}}^{\mu}), \quad (3.1)$$

ahol  $E_{\mathbf{q}}^{\mu}$  a grafén  $\mu$ -dik sávjának elemi gerjesztéseit leíró disperziós reláció. Spinfelhasadást okozó kölcsönhatásoktól eltekintve, a 2.1.1. bevezető szakaszban vázolt modell esetében például  $E_{\mathbf{q}}^{\mu} = E_{\mathbf{q}}^{G,\pm}$ , a (2.12) egyenlettel adott spindegenerált spektrummal egyenlő. Az alábbi számolások során azonban az általánosság kedvéért megőrizzzük a spin szabadsági fokokat. A fotoelektronok intenzitás-eloszlásának számolásához szükséges kölcsönhatási mátrixelemek:

$$\mathcal{H}_{kh}^{(\mathbf{p},\sigma)(\mathbf{q},\mu)} = \langle \mathbf{p}, \sigma | \mathbf{H}_{kh} | \mathbf{q}, \mu \rangle. \quad (3.2)$$

Esetünkben  $|\mathbf{q}, \mu\rangle$  a kristályban az elektront leíró Bloch-állapot, míg  $|\mathbf{p}, \sigma\rangle$  a fotoelektron  $\mathbf{p}$  impulzusú és  $\sigma$  spinű síkhulláma, és  $\mathbf{H}_{kh}$  az elektron és elektromágneses hullám kölcsönhatását leíró (1.3) Hamilton-operátor. Az átmeneti mátrixelemek számolásához felírjuk azon állapotokat is, melyek között az átmenet létrejön. A  $\mathbf{p}$  impulzusú és  $\sigma$  spinű síkhullámot az alábbi alakban írjuk fel:

$$|\mathbf{p}, \sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} |\sigma\rangle. \quad (3.3)$$

A spin kvantálási tengelyét a grafén síkjára merőleges  $z$  tengely irányában választjuk. A kristályban a  $\hbar\mathbf{q}$  impulzusú, legegyszerűbb esetben a (2.12) egyenlet (spin indexekkel kiegészített) keltő operátoraihoz tartozó, Bloch-állapot hullámfüggvénye:

$$\Psi_{\mathbf{q},\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(\mathbf{q})}} \sum_{j=\{A,B\},\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \Psi_{j\sigma}^{\mu}(\mathbf{q}) |\sigma\rangle \left[ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n^j} \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^j) \right], \quad (3.4)$$

ahol  $\mathcal{N}(\mathbf{q})$  egy megfelelő normálási faktor,  $j = \{A, B\}$  az  $A, B$  atomokat jelölő index,  $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$  a spin,  $\mu$  az energiasávok kvantumszáma ( $\mu = 1 \dots 4$ ),  $N$  a mintát alkotó elemi cellák száma,  $\mathbf{R}_n^j$  a  $j$  atomokra mutató vektorok ( $n = 1 \dots N$ ),  $\Phi(\mathbf{r})$  az atomi  $p_z$  pálya hullámfüggvénye,  $\Psi_{j\sigma}^{\mu}(\mathbf{q})$  pedig a  $\hbar\mathbf{q}$  impulzusú állapot bispinor amplitúdói [lényegében a (2.16) egyenletben szereplő  $C_{A/B}$  együtthatók spin indexekkel kiegészítve]. Az  $\mathcal{N}(\mathbf{q})$  normálási faktorról feltesszük, hogy csak gyengén függ  $\mathbf{q}$ -tól, ezért a további számolások során eltekintünk tőle. Ezzel az átmeneti mátrixelem:

$$\mathcal{H}_{kh}^{(\mathbf{p},\sigma)(\mathbf{q},\mu)} \sim -\frac{e\hbar}{mi} \sum_{j=\{A,B\}} \Psi_{j\sigma}^{\mu}(\mathbf{q}) \left[ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n^j} \int_V d\mathbf{r}'^2 e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}'/\hbar} \mathcal{A}\nabla\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^j) \right]. \quad (3.5)$$

Az integrálásban  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{R}_n^j$  változócsere és parciális integrálást alkalmazva:

$$\int_V d\mathbf{r}'^2 e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}'/\hbar} \mathcal{A}\nabla\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^j) = -\mathbf{A}\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_n^j/\hbar} \int_V d\mathbf{r}'^2 e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}'/\hbar} \Phi(\mathbf{r}) = -\mathbf{A}\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_n^j/\hbar} \Phi_{\mathbf{p}}. \quad (3.6)$$



Ekkor az átmeneti mátrixelem:

$$\mathcal{H}_{kh}^{(p,\sigma)(q,\mu)} \sim \mathbf{A}\mathbf{p} \frac{e}{m} \frac{\Phi_p}{\sqrt{N}} \left[ \sum_{n=1}^N e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{p}/\hbar)\mathbf{R}_n^A} \right] \left( \Psi_{A\sigma}^\mu(\mathbf{q}) + e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{p}/\hbar)\boldsymbol{\tau}} \Psi_{B\sigma}^\mu(\mathbf{q}) \right), \quad (3.7)$$

ahol  $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{R}_n^B - \mathbf{R}_n^A$ , az  $A - B$  atomokat összekötő vektor egy elemi cellán belül. Az összegzés elvégzésével:

$$\sum_{n=1}^N e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{p}/\hbar)\mathbf{R}_n^A} = N\delta_{\mathbf{p}_{\parallel}/\hbar-\mathbf{q}-\mathbf{G},0} \quad (3.8)$$

adódik, ahol  $\mathbf{G} = \mathbf{m}_1\mathbf{b}_1 + \mathbf{m}_2\mathbf{b}_2$  egy reciprok rácsvektor, és  $\mathbf{p}_{\parallel}$  a kilökött elektron impulzusának grafén síkjába eső komponense. Ebből adódóan az átmeneti mátrixelem:

$$\mathcal{H}_{kh}^{(p,\sigma)(q,\mu)} \sim \mathbf{A}\mathbf{p} \frac{e}{m} \sqrt{N}\Phi_p \left( \Psi_{A\sigma}^\mu(\mathbf{q}) + e^{i\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}} \Psi_{B\sigma}^\mu(\mathbf{q}) \right) \delta_{\mathbf{p}_{\parallel}/\hbar-\mathbf{q}-\mathbf{G},0}, \quad (3.9)$$

ahol:  $\mathbf{G}\boldsymbol{\tau} = 2\pi\frac{m_1+m_2}{3}$ . Az átmeneti mátrixelemben a Kronecker-delta az impulzusmegmaradást fejezi ki, amennyiben a bejövő foton impulzusát elhanyagoljuk:  $\mathbf{p}_{\parallel} = \hbar(\mathbf{q} + \mathbf{G})$ . A 3.2. ábrán szemléltetett polarizációs irányok kapcsán elmondhatjuk, hogy  $s$  polarizált lézernyaláb esetén a (3.9) átmeneti mátrixelem nullának adódik. Az ismertetett modell tehát nem írja le az  $s$  polarizált esetben a mérési eredményeket, a [94] publikációban mért intenzitás-eloszlást az átmeneti mátrixelem (3.9) vezető rendjén túlmutató, magasabb rendű mátrixelemek határozzák meg meg.

A detektorral mért,  $\hbar\mathbf{q}$  impulzusú,  $\mu$ -dik sávból kilökött fotoelektronok spin integrált intenzitása:

$$I^\mu(\hbar\omega, \mathbf{q}) \sim n_F(E_q^\mu) \sum_{\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \left| \mathcal{H}_{kh}^{(p,\sigma)(q,\mu)} \right|^2 A_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^\mu(\hbar\omega). \quad (3.10)$$

Behelyettesítve ebbe az átmeneti mátrixelem (3.9) alakját, a fotoelektronok intenzitása:

$$I^\mu(\hbar\omega, \mathbf{q}) \sim n_F(E_q^\mu) \left[ \left| \Psi_{A\uparrow}^\mu(\mathbf{q}) + e^{-i\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}} \Psi_{B\uparrow}^\mu(\mathbf{q}) \right|^2 + \left| \Psi_{A\downarrow}^\mu(\mathbf{q}) + e^{-i\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}} \Psi_{B\downarrow}^\mu(\mathbf{q}) \right|^2 \right] \delta_{\mathbf{p}_{\parallel}/\hbar-\mathbf{q}-\mathbf{G},0} A_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^\mu(\hbar\omega). \quad (3.11)$$

Az intenzitást leíró összefüggést egyszerűbb alakra hozhatjuk, ha bevezetjük az alábbi (unitér transzformációt leíró) mátrixot:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

valamint a grafén  $\mu$ -dik energiasáv alterére vetítő  $\mathcal{Q}^\mu(\mathbf{q}) = |\Psi^\mu(\mathbf{q})\rangle\langle\Psi^\mu(\mathbf{q})|$  projektort, ahol:

$$|\Psi^\mu(\mathbf{q})\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow}^\mu(\mathbf{q}) \\ \Psi_{B\uparrow}^\mu(\mathbf{q}) \\ \Psi_{A\downarrow}^\mu(\mathbf{q}) \\ \Psi_{B\downarrow}^\mu(\mathbf{q}) \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

a grafén (3.4)  $\mu$ -dik energia-sajátállapotában szereplő amplitúdókból alkotott vektor. A  $\Psi_{j\sigma}^\mu(\mathbf{q})$  amplitúdók lényegében megegyeznek a (2.16) egyenletben szereplő  $C_{A/B}$  együtthatókkal spin indexekkel kiegészítve. Megjegyezzük, hogy egy általános  $M$  mátrix  $\mu$ -dik alterére vetítő projektorát nem elfajult sajátértékek esetében az alábbi összefüggéssel számolhatjuk ki:

$$Q^\mu = \frac{\prod_{\mu \neq j} (M - E_j I)}{\prod_{\mu \neq j} (E_\mu - E_j)}. \quad (3.14)$$

Ezzel a számolási módszerrel nem szükséges a sajátvektorok meghatározása, az alterre vetítő projektorok a vizsgált mátrix hatványainak és sajátértékeinek segítségével határozható meg. Az irodalomban a  $Q^\mu$  projektort Frobenius kovariánsoknak nevezik, a megadott képlet általánosítható elfajult esetekre is [96]. A módszer előnye, hogy a sajátvektor (hullámfüggvény) folytonos paraméter függvényében történő (numerikus) számolása során nem kell tartani annak fázisában történő szakadásoktól. Ezzel a (3.11) egyenlet az alábbi egyszerűbb alakra hozható:

$$I^\mu(\hbar\omega, \mathbf{q}) \sim n_F(E_q^{G,\pm}) \left[ \text{Tr } \widetilde{Q}^\mu(\mathbf{q}) \right] \delta_{\mathbf{p}_i/\hbar - \mathbf{q}, \mathbf{0}} A_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^\mu(\hbar\omega), \quad (3.15)$$

ahol a fotoelektron alterére vetítő  $2 \times 2$  projektor:

$$\widetilde{Q}_{ij}^\mu(\mathbf{q}) = \sum_{k=2i-1}^{2i} \sum_{l=2j-1}^{2j} \left( U Q^\mu(\mathbf{q}) U^\dagger \right)_{kl}. \quad (3.16)$$

A fotoelektron intenzitást célszerű lehet kifejezni a kontinuum modell spinor amplitúdóinak segítségével is. Mivel a fotoemissziós spektroszkópia impulzus felbontású, lehetőség nyílik a  $K$  és  $K'$  pontok szeparálására az alacsonyenergiás elektron dinamika tanulmányozása során. Ennek során a (2.17) hullámfüggvényeinek kifejtésében elég figyelembe venni csupán a  $K$  ponthoz tartozó bázisfüggvényt. A TB és kontinuum modell spinoramplitúdói a (2.19) egyenlet mintájára az alábbi viszonyban állnak egymással:

$$\begin{aligned} \Psi_{A1}^\mu(\mathbf{K} + \mathbf{k}) &= \Psi_1(\mathbf{k}), \\ \Psi_{B1}^\mu(\mathbf{K} + \mathbf{k}) &= i\Psi_2(\mathbf{k}), \\ \Psi_{A4}^\mu(\mathbf{K} + \mathbf{k}) &= \Psi_3(\mathbf{k}), \\ \Psi_{B4}^\mu(\mathbf{K} + \mathbf{k}) &= i\Psi_4(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Tehát a kontinuum modell  $\Psi_K^\mu(\mathbf{k}) = (\Psi_1(\mathbf{k}), \Psi_2(\mathbf{k}), \Psi_3(\mathbf{k}), \Psi_4(\mathbf{k}))^T$  hullámfüggvényét a (3.13) TB amplitúdókat tartalmazó (3.13) vektorral az

$$O_E = \left( \frac{i+1}{2} \sigma_0 + \frac{i-1}{2} \sigma_z \right) \otimes s_0 \quad (3.18)$$

unitér transzformáció köti össze, ahol  $\sigma_0$  és  $\sigma_z$  az pseudospin téren ható egységmátrix és  $z$  Pauli-mátrix, valamint  $s_0$  a spin téren ható egységmátrix. Ha definiáljuk a kontinuum modell  $\mu$ -dik sávjára vetítő  $\mathcal{Q}_K^\mu(\mathbf{k}) = |\Psi_K^\mu(\mathbf{k})\rangle\langle\Psi_K^\mu(\mathbf{k})|$  projektort, a fotoelektron-intenzitás számolásához szükséges  $\mathcal{Q}^\mu(\mathbf{q} = \mathbf{K} + \mathbf{k})$  projektort meghatározó egyenlet:

$$\mathcal{Q}^\mu(\mathbf{q} = \mathbf{K} + \mathbf{k}) = O_E \mathcal{Q}_K^\mu(\mathbf{k}) O_E^\dagger. \quad (3.19)$$

A  $\mathcal{Q}_K^\mu(\mathbf{k})$  projektort a kontinuum modell Hamilton-operátorából határozhatjuk meg a (3.14) összefüggés segítségével. A valóságban a mérőberendezés pontatlansága mind az energiában és impulzusban, valamint az alkalmazott modellek egyszerűségén túlmutató effektusok (mint például az elektron-elektron kölcsönhatás, az elektromágneses tér magasabb harmonikusaival való kölcsönhatás, vagy egyéb végeshőmérséklet-effektusok) a (3.1) spektrálfüggvény Dirac- $\delta$  szerű eloszlását kiszélesítik. Jelen munkában nem foglalkozunk az említett effektusok dinamikájával, a vonalak kiszélesedését egy empirikus  $\Gamma$  paraméterrel vesszük figyelembe, és a Dirac- $\delta$  függvényeket Lorentz-típusú haranggörbével helyettesítjük:

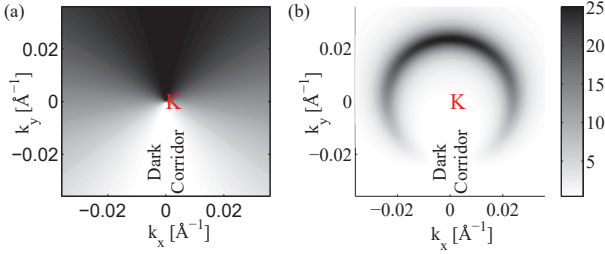
$$\delta(\varepsilon) \rightarrow \frac{\Gamma}{\varepsilon^2 + \Gamma^2}. \quad (3.20)$$

A továbbiakban csupán egy Mahan-kúpra<sup>1</sup> korlátozódunk, azaz  $\mathbf{G} = \mathbf{0}$ -t tekintjük, valamint a fotoelektronok intenzitásának leírásában az impulzus és energiabeli kiszélesedést egy Lorentz-görbével adjuk meg. Elvégezve az analitikus számolásokat a grafén legegyszerűbb, a (2.32) Hamilton-operátorral adott modelljére, a vezetési- (+) és valenciasávból (–) kilökött fotoelektronok intenzitása a  $K$  pont körül:

$$I^\pm(\hbar\omega, \mathbf{k} = \mathbf{q} - \mathbf{K}) \sim \left(1 \mp \frac{k_y}{k}\right) \frac{\Gamma}{(\hbar\omega \mp v_F \hbar k)^2 + \Gamma^2}. \quad (3.21)$$

A 3.3. ábra szemlélteti a (3.21) egyenlettel meghatározott intenzitás-eloszlást. Az ábrán megfigyelhető az előző szakasz kísérleti eredményei között tárgyalt kétfogású szimmetria. Az anizotrópiát okozó interferencia effektus a (3.11) egyenletre vezethető vissza: a kölcsönhatási mátrixelem az  $A$  és  $B$  alrács hullámfüggvény amplitúdóinak kombinációját tartalmazza. Az irodalomban szokás ezt az interferencia jelenséget alrács-interferenciának nevezni [95]. Az intenzitás egy vonal mentén minimális, ezt a területet nevezik *sötét folyosónak* (Dark Corridor) [116]. A patkó alakú intenzitás-eloszlás orientációja függ a megválasztott Mahan-kúptól, azaz a  $\mathbf{G}$  reciprok rácsvektortól. A (3.21) egyenletben szereplő  $e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}}$  tag a teljes intenzitás-eloszlás  $2\pi/3$  nagyságú elfordulásait eredményezi [95]. A  $K'$  pont környékén a vázoltakhoz képest analóg eredményt kapunk.

<sup>1</sup>Lásd az 1.1.2. szakaszt.



3.3. ábra. A (3.21) egyenlettel meghatározott intenzitás-eloszlás a  $K$  pont környékén (a) a (3.21) egyenletben szereplő  $\Gamma$  szélességű Lorentz-görbével meghatározott energia-szelekció nélkül, valamint (b)  $\hbar\omega = -150$  meV energiával és  $\Gamma = 25$  meV félértékszélességgel meghatározott energiametszetben.

### 3.1.3. Spin-pálya kölcsönhatás grafénben

Miután Kane és Mele munkájuk során rávilágítottak [55], hogy grafénben a spin-pálya kölcsönhatás a peremekre lokalizált kvantum spin-Hall állapotokat indukál (azaz a 2.3. szakasz értelmében egy kétdimenziós topologikus szigetelőként viselkedik), a spin felbontású mérések is motiváltabbá váltak. Az utóbbi évek során kifinomult spin és impulzus felbontású fotoemissziós spektroszkópia (SARPES technika) kiváló módszernek bizonyult a spin-pálya kölcsönhatás vizsgálatára.

Az általánosságot tekintve a spin-pálya kölcsönhatásnak grafénben, lehet külső és belső eredete. Belső spin-pálya kölcsönhatásról (ISO) beszélünk, ha a spin felhasadást kiváltó mechanizmus a grafén szénatomjaitól származtatható. Hasonló módon, külső spin-pálya kölcsönhatásról pedig akkor beszélünk, ha a spin-pálya kölcsönhatás eredete a grafén környezetéhez köthető (például: külső elektromos tér hatása, grafén felület hullámmozgása, hordozófelülettel való egyéb kölcsönhatások). Egy tipikus megjelenési formája a külső spin-pálya kölcsönhatásnak kétdimenziós elektronrendszerekben a síkra való tükrözési szimmetria sérülése folytán megjelenő Rashba-féle spin-pálya (RSO) kölcsönhatás [97].

Az RSO kölcsönhatás első meggyőző bizonyítékait grafén mintákban a [91] publikációban közölték. A mintakészítés során grafén/Ni(111) heteroszerkezetben a grafén és a Ni hordozófelület közé magas hőmérsékleten egy atomnyi aranyréteget párologtattak. Az arany közbeekelődése a grafén és a Ni hordozófelület közti kötések fellazulását eredményezte. A 3.1.(a) és (b) ábrákon az arany mentes és arannyal módosított mintákon végzett ARPES mérések eredményei látha-

toák. Az arany atomok hatására visszaáll a grafén (mérési pontosságon belüli) tiltott sávszerkezet mentes diszperziója a  $K$  pontban. A szerzők szóhasználatával élve az aranyréteg közbeiktatásával *kváziszabad grafént* hoztak létre. A Fermi-energia mérési pontosságon belül a Dirac-pontba kerül, a fotoemissziós méréseket ezért a teljesen betöltött valenciásávokon végezték. Megmérve az 1.1.5. szakaszban definiált  $I_{\uparrow}^{\alpha}$  és  $I_{\downarrow}^{\alpha}$  ( $\alpha = x, y, z$ ) spin-áramokat, az ellentétes spin-polarizációjú intenzitás csúcsok felbonthatóvá váltak. A mérés során a szerzők  $13 \pm 3$  meV Rashba-típusú spinfelhasadást azonosítottak.

Sűrűségfüggvényelemzések rávilágítottak [98], hogy a grafén  $\pi$  és az arany külső héján fekvő  $d$  pályák hibridizációja során, a grafén síkjára való tükrözési szimmetriát sértő, nagy sűrűségű elektrontöltés inhomogenitás alakul ki. A grafén alatt lévő aranyréteg vastagságának függvényében ezért változó erősségű effektív RSO kölcsönhatás indukálódik a grafénben. A DFT számolások ezüst alkalmazásával is hasonló nagyságú spin-pálya kölcsönhatást jósolnak, mint arany esetén. Az arany/ezüst rétegek számának függvényében a spin felhasadás nagysága 1 – 88 meV között mozgott.

A spin-pálya kölcsönhatás vizsgálatának bő irodalmával szembesülhetünk, ha a spin-transzporttal és spin-relaxációval foglalkozó mérési és elméleti kutatásokat tekintjük. Grafit hasításával készített,  $\text{SiO}_2$  hordozófelületű mintákon végzett mérések [99, 100, 101, 102] meglepően rövid spin-relaxációs időt mutattak ( $\sim 10^{-10}$ s). Hasonló mérési eredmények születtek Cu hordozófelületen a fent említett magashőmérsékletű eljárás során létrehozott grafén mintákban is [103], ezért elmondható, hogy a spin-transzport tulajdonságok nincsenek megszorítva a mintakészítéssel járó hibákkal. A mérési eredmények tárgyalására nagy számban születtek elméleti számolások. Ezekben a munkákban nagy jelentőséget nyilváníttak a hordozófelület hatásának: (i) a mintákban jelenlévő szennyező atomok, elektron-fonon kölcsönhatás egyaránt hatással vannak a spin-transzport jelenségekre, hiszen az RSO kölcsönhatás jelenlétében a szórási folyamatok során a spin irány is megváltozik [104, 105]. (ii) A spin-pálya kölcsönhatás véletlenszerű ingadozása – melynek egyik lehetséges forrása a grafén felület hullámmozgása – szintén csökkenti a spin-relaxációs időt [106]. Azonban a [107] publikációban rámutattak a szerzők, hogy a szórócentrumok által generált spin-relaxáció nincs összhangban a kísérleti megfigyeléssel [99, 101], mely szerint a spin-relaxációs idő és a spin-diffúziós állandó arányos egymással a kémiai potenciál függvényében. A spin-relaxáció tulajdonságainak vizsgálatára (például a különböző irányban preparált spinállapotok relaxációjának anizotropiája) további lehetséges módszer lehet az elektronspin rezonancia (ESR) [108].

A következő két szakaszban áttekintjük az ISO és RSO kölcsönhatás leírására alkalmazott modelleket.

### 3.1.4. A grafén belső spin-pálya (ISO) kölcsönhatása

A spin-pálya kölcsönhatás relativisztikus effektus, Coulomb-szerű elektromos terek esetén az  $\hat{L}\hat{S}$  Hamilton-operátorral vehetjük figyelembe. Egyedülálló szénatomok esetében szimmetria okok miatt csupán a  $2p$  pályák között alakul ki spin-pálya kölcsönhatás. (A  $2s$  és  $2p$  pályákkal vett átfedési integrálok nullának adódnak.) A grafén hatszöggrácsában ezen felül további megszorítások érvényesülnek: csupán a síkra merőleges  $\hat{L}_z\hat{S}_z$  kombináció adhat nullától különböző járulékot. A  $\pi$  elektronokra azonban – a síkra való tükrözési szimmetria miatt – ez a kombináció is nullának adódik a legközelebbi szomszédok atompályái között. (A  $2p_z$  pályák invariánsak a síkra való tükrözés hatására, az  $L_z$  impulzusmomentum azonban előjelet vált.)

Véges spin-pálya kölcsönhatás a  $\pi$  elektronokon ezért csupán a  $\sigma$  sáv figyelembevételével, másodrendű folyamat során érvényesülhet [109, 110]. A spin-pálya kölcsönhatás összecsatolja a  $\pi$  és  $\sigma$  sávokat. A  $\sigma$  sáv által közvetített spin-pálya kölcsönhatást a  $\pi$  elektronok alacsony energiás dinamikájában egy effektív kölcsönhatási operátorral vehetjük figyelembe. A [110] publikációban felállított érvelések a

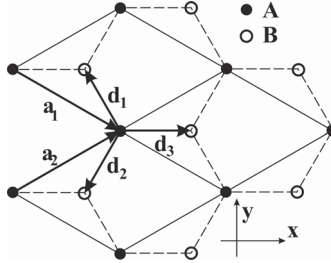
$$\hat{H}_{ISO,K}^G = \Delta_{SO}\sigma_z s_z \quad (3.22)$$

effektív kölcsönhatási operátorhoz vezetnek, ahol  $\Delta_{SO}$  az ISO kölcsönhatás erőssége,  $\sigma_z$  a pszeudospin téren ható,  $s_z$  pedig a valódi spin téren ható  $z$  Pauli-mátrix. A kölcsönhatási Hamilton-operátor (3.22) alakját független, pusztán szimmetria megfontolásokra alapozott érvelések is megerősítették [55].

Az ISO kölcsönhatás erősségét illetően több numerikus becslés is született. Ezek egy része első elvekre alapozott számolások eredménye [111, 112], azonban más becslések is nagyjából azonos nagyságrendre vezettek [55, 109, 110]. Ezen számolások alapján az ISO kölcsönhatás erőssége  $1-50 \mu\text{eV}$  nagyságrendbe esik. Simon Ferenc, Murányi Ferenc és Dóra Balázs munkája alapján azonban szükséges megjegyeznünk, hogy a 3.1.3. szakaszban említett spin-relaxációs folyamatok egy része jól leírható, ha kivételesen nagy,  $\Delta_{SO} \approx 3.7 \text{ meV}$  erősségű ISO kölcsönhatást feltételezünk [108]. A nagy ISO kölcsönhatást azonban ezidáig nem támasztotta alá fizikai elemélet.

### 3.1.5. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás grafénben

Spin-pálya kölcsönhatást külső források is indukálhatnak grafénben. Ilyen források lehetnek például szennyező atomok [113], külső elektromos tér alkalmazása, vagy a grafén és hordozó felület közti elektrosztatikus kölcsönhatás [91]. Az utóbbi két mechanizmus Rashba típusú spin-pálya (RSO) kölcsönhatáshoz vezethet. A [91] publikációban rámutattak a szerzők, hogy  $Ni(111)$  felü-



3.4. ábra. A (3.23) spin-pálya kölcsönhatási operátorban szereplő vektorok a grafén hatszöges rácsában. Az  $\mathbf{a}_i$  ( $i = 1, 2$ ) rács-vektorok a szomszédos elemi cellába mutatnak, míg a  $\mathbf{d}_j$  ( $i = 1, 2, 3$ ) vektorok a szomszédos szénatomokat kötik össze. A teli/üres körök az A/B alrácstól szemléltetik.

leten létrehozott grafén réteg kváziszabad grafénként viselkedik, ha a grafén réteg és  $Ni$  hordozó felület közé egy atomrétegnyi arany kerül. SARPES mérési technikával közelítőleg 13 meV RSO felhasadást mutattak ki, ami két-három nagyságrenddel nagyobb effektust jelent, mint az ISO erősségének elméleti jóslata [109, 110, 111, 112]. A szerzők a nagy felhasadást a szénatomok külső  $p$  és az arany  $d$  pályáinak hibridizációja során létrejött töltés átrendeződésnek tulajdonították. Az RSO kölcsönhatás tanulmányozására Kane és Mele a [114] publikációban az alábbi mikroszkopikus Hamilton-operátort alkalmazták:

$$\mathbf{H}_R = i \lambda_R \sum_{(i,j),\sigma,\sigma'} \left[ a_{i\sigma}^\dagger \left( \mathbf{s}_{\mu\nu} \times \frac{\mathbf{d}_{(i,j)}}{r_{C-C}} \right)_z b_{j\sigma'} - h.c. \right], \quad (3.23)$$

ahol  $\lambda_R$  a kölcsönhatás erősségét,  $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$  a Pauli-mátrixokkal reprezentált elektron spin operátorokat,  $\mathbf{d}_{(i,j)}$  pedig a  $j$  atomról a legközelebbi  $i$  szomszédjába mutató vektort jelenti (lásd a 3.4. ábrát). [Ezen felül a 2.1.1 szakasszal összhangban  $a_{i,\sigma}$  ( $b_{i,\sigma}$ ) egy  $\sigma$  spinű elektronállapotot eltüntető operátor az  $A$  ( $B$ ) alrácstól,  $\mathbf{R}_i$  rácspontjáról, és  $h.c.$  hermitikus konjugáltat jelöli.] Az RSO kölcsönhatás tulajdonságait széleskörűen tanulmányozta a miénken kívül több kutatócsoport is [115, 116, 117, 118, 119]. A témában nyújtott tudományos eredményünk részeként megmutattam, hogy a kétrétegű grafént leíró (2.39) modell alkalmas az RSO kölcsönhatást tartalmazó egyrétegű grafén leírására is ugyancsak a Brillouin-zóna  $K$  pontjának környékén. Ez az állítás azért is meglepő, mivel a két fizikai rendszer nagyon különböző. Az állítás bizonyításához induljunk ki a grafén RSO nélküli TB (2.4) egyenlettel adott  $\mathbf{H}^G$  modelljéből, valamint az RSO kölcsönhatást leíró  $\mathbf{H}_R$  Hamilton-operátorból. A grafén teljes Hamilton-operátora ekkor:  $\mathbf{H}_R^G = \mathbf{H}^G + \mathbf{H}_R$ . Behelyettesítve a (3.23) kölcsönhatási Hamilton-operátorba a keltő és eltüntető

operátorok (2.5) és (2.6) Fourier-transzformált alakjait:

$$\mathbf{H}_R = i\lambda_R \sum_{\mathbf{q},\mu\nu} \left[ \alpha_{\mathbf{q}\mu}^\dagger (\mathbf{s}_{\mu\nu} \times \mathbf{D}(\mathbf{q}))_z \beta_{\mathbf{q}\nu} - \text{h.c.} \right], \quad (3.24)$$

ahol:

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}) = - \sum_{j=1}^3 \frac{\mathbf{d}_j}{r_{C-C}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a}_j}. \quad (3.25)$$

Az összefüggésben  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  a (2.1) egyenlettel adott rácsvektorok, valamint  $\mathbf{a}_3 = 0$ . A grafén spin-pálya kölcsönhatás mentes Hamilton-operátora a (2.7) egyenlettel adott. A 2.1.1 szakaszban megfogalmazott módszerrel analóg módon, a  $\mathbf{H}_R^G$  Hamilton-operátor az alábbi kanonikus transzformációval diagonalizálható:

$$\begin{aligned} e_{\mathbf{q},1}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( C_{A\uparrow}^{(1)}(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger + C_{B\uparrow}^{(1)}(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger + C_{A\downarrow}^{(1)}(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger + C_{B\downarrow}^{(1)}(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger \right), \\ h_{\mathbf{q},1}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( C_{A\uparrow}^{(1)}(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger - C_{B\uparrow}^{(1)}(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger + C_{A\downarrow}^{(1)}(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger - C_{B\downarrow}^{(1)}(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger \right), \\ e_{\mathbf{q},2}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( C_{A\uparrow}^{(2)}(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger + C_{B\uparrow}^{(2)}(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger + C_{A\downarrow}^{(2)}(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger + C_{B\downarrow}^{(2)}(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger \right), \\ h_{\mathbf{q},2}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( C_{A\uparrow}^{(2)}(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger - C_{B\uparrow}^{(2)}(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\uparrow}^\dagger + C_{A\downarrow}^{(2)}(\mathbf{q})\alpha_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger - C_{B\downarrow}^{(2)}(\mathbf{q})\beta_{\mathbf{q},\downarrow}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Az  $[e_{\mathbf{q},i}^\dagger, e_{\mathbf{q},j}]_+ = \delta_{ij}$ ,  $[h_{\mathbf{q},i}^\dagger, h_{\mathbf{q},j}]_+ = \delta_{ij}$  és  $[e_{\mathbf{q},i}^\dagger, h_{\mathbf{q},j}]_+ = 0$  antikommutációs relációk teljesüléséhez előírjuk a  $C_{J\uparrow/\downarrow}^{(n)}(\mathbf{q})$  skalárfüggvényekre a  $|C_{J\uparrow}^{(n)}(\mathbf{q})|^2 + |C_{J\downarrow}^{(n)}(\mathbf{q})|^2 = 1$  és a

$$C_{J\uparrow}^{(1)}(\mathbf{q}) \left( C_{J\uparrow}^{(2)}(\mathbf{q}) \right)^* = -C_{J\downarrow}^{(1)}(\mathbf{q}) \left( C_{J\downarrow}^{(2)}(\mathbf{q}) \right)^*$$

feltételeket ( $J = \{A, B\}$ ). A skalárfüggvények az alábbi mátrixegyenletet elégítik ki minden  $\mathbf{q}$  értékre:

$$\begin{pmatrix} 0 & -\gamma_0 f(\mathbf{q}) & 0 & -\lambda_R D_+(\mathbf{q}) \\ -\gamma_0 f^*(\mathbf{q}) & 0 & -\lambda_R D_-^*(\mathbf{q}) & 0 \\ 0 & -\lambda_R D_-(\mathbf{q}) & 0 & -\gamma_0 f(\mathbf{q}) \\ -\lambda_R D_+^*(\mathbf{q}) & 0 & -\gamma_0 f^*(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{A\uparrow}^{(n)}(\mathbf{q}) \\ C_{B\uparrow}^{(n)}(\mathbf{q}) \\ C_{A\downarrow}^{(n)}(\mathbf{q}) \\ C_{B\downarrow}^{(n)}(\mathbf{q}) \end{pmatrix} = E_{\mathbf{q}}^{RSO(n)} \begin{pmatrix} C_{A\uparrow}^{(n)}(\mathbf{q}) \\ C_{B\uparrow}^{(n)}(\mathbf{q}) \\ C_{A\downarrow}^{(n)}(\mathbf{q}) \\ C_{B\downarrow}^{(n)}(\mathbf{q}) \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

ahol a (3.25) egyenletből  $D_{\pm}(\mathbf{q}) = \pm D_{\pm}(\mathbf{q}) - iD_j(\mathbf{q})$ , az energia-sajátértékek pedig:

$$E_{\mathbf{q}}^{(n)\pm} = \pm \sqrt{\frac{1}{2} \left[ \lambda_R^2 \left( |D_+(\mathbf{q})|^2 + |D_-(\mathbf{q})|^2 \right) + (-1)^n \sqrt{\Upsilon_{TB}} \right]}, \quad (3.28)$$

ahol:

$$\Upsilon_{TB} = \lambda^4 \left( |D_+(\mathbf{q})|^2 - |D_-(\mathbf{q})|^2 \right)^2 + 4\gamma^4 |f(\mathbf{q})|^4 - 8\gamma^2 \lambda_R^2 \operatorname{Re} \left( D_+(\mathbf{q}) D_-(\mathbf{q}) f(\mathbf{q})^* \right). \quad (3.29)$$



A mátrixegyenlet megoldásai teljesítik a Hamilton-operátor diagonalizáláshoz szükséges feltételeket. A diagonalizált Hamilton-operátor:

$$\mathbf{H}_R^G = \sum_{q,n} \left( E_q^{(n,\pm)} e_{q,n}^\dagger e_{q,n} + E_q^{(n,\pm)} h_{q,n}^\dagger h_{q,n} \right), \quad \text{ahol: } E_q^{(n,\pm)} = \pm E_q^{(n)}. \quad (3.30)$$

A Hamilton-operátor (3.30) alakjából leolvasható, hogy az  $e_{q,n}^\dagger$  operátor a vezetési sávban kelt egy  $E_q^{(n)}$  energiájú állapotot, a  $h_{q,n}^\dagger$  operátor pedig a valenciasávban kelt egy  $-E_q^{(n)}$  energiájú állapotot ( $n = 1, 2$ ). Az  $E_q^{(n,\pm)}$  spektrum tehát szimmetrikus  $E = 0$ -ra, ezért a továbbiakban a vezetési sávra korlátozódunk.

A továbbiakban a  $K$  pont környékén érvényes hosszűhullámú Hamilton-operátor levezetését ismertetem. A 2.1.1. szakaszban megmutattam, hogy a burkolófüggvény közelítés és a (3.27) egyenlet direkt sorfejtése  $\mathbf{q} = \mathbf{K}$  körül, valamint Fourier-transzformálása ugyanarra az eredményre vezet. A (3.27) egyenlet mátrixelemeinek elsőrendű sorfejtése az alábbi összefüggésekkel adott:

$$f(\mathbf{K} + \mathbf{k}) \approx \frac{3}{2} r_{C-C}(k_y + ik_x) + \mathcal{O}(|\mathbf{k}|r_{C-C}^2), \quad (3.31)$$

$$D_+(\mathbf{K} + \mathbf{k}) \approx -\frac{3}{2} r_{C-C}(k_y - ik_x) + \mathcal{O}(|\mathbf{k}|r_{C-C}^2), \quad (3.32)$$

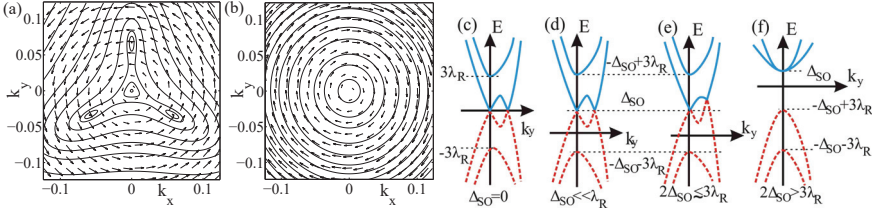
$$D_-(\mathbf{K} + \mathbf{k}) \approx 3(1 - ik_x r_{C-C}) + \mathcal{O}(|\mathbf{k}|r_{C-C}^2). \quad (3.33)$$

Megtartva minden mátrixelem vezető rendjét, majd Fourier-transzformálva a (3.27) egyenlet sorfejtett alakját (ez disztribúció értelemben a  $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla = \hat{\mathbf{p}}/\hbar$  helyettesítést jelenti), végül a (3.18) unitér transzformációval transzformálva a mátrixot, az alábbi hosszűhullámú Hamilton-operátorhoz jutunk:

$$\hat{H}_{R,K}^G = \begin{pmatrix} 0 & v_F \hat{p}_- & 0 & v_\lambda \hat{p}_+ \\ v_F \hat{p}_+ & 0 & 3i\lambda_R & 0 \\ 0 & -3i\lambda_R & 0 & v_F \hat{p}_- \\ v_\lambda \hat{p}_- & 0 & v_F \hat{p}_+ & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

A Hamilton-operátorban  $v_F = 3\gamma d/(2\hbar)$ ,  $v_\lambda = 3\lambda_R d/(2\hbar)$  és  $\hat{p}_\pm = \hat{p}_x \pm i\hat{p}_y$ . A (3.34) Hamilton-operátor a  $\Psi(\mathbf{r}) = (\Psi_{A\uparrow}(\mathbf{r}), \Psi_{B\uparrow}(\mathbf{r}), \Psi_{A\downarrow}(\mathbf{r}), \Psi_{B\downarrow}(\mathbf{r}))^T$  hullámfüggvényen hat. Összehasonlítva a (3.34) Hamilton-operátort a kétrétegű grafén (2.39) hosszűhullámú Hamilton-operátorával, levonható a következtetés, miszerint az egyrétegű grafén elemi gerjesztéseit RSO kölcsönhatással, valamint a kétrétegű grafén elemi gerjesztéseit a  $K$  pont környékén – unitér ekvivalencia erejéig – ugyanolyan Hamilton-operátor írja le.

A  $v_\lambda$  és  $v_F$  sebességek a gyenge spin-pálya kölcsönhatásból kifolyólag nagyságrendekben különbözhetnek egymástól:  $v_\lambda \ll v_F$  ( $\lambda \ll \gamma$ ). Ezért a  $(\hat{H}_{R,K}^G)_{14}$  és  $(\hat{H}_{R,K}^G)_{41}$  elemek, melyekben a spin-pálya kölcsönhatás és impulzus szorzata szerepel, lényegesen kisebbek, mint a többi



3.5. ábra. Állandó energiájú kontúrok és spin-polarizáció  $\mathbf{k}$  függése a  $K$  pont körül az (a)  $E_K^{(1),+}(\mathbf{k})$  alsó és (b)  $E_K^{(2),+}(\mathbf{k})$  felső vezetési sáv esetében  $\beta = 0.034$  paraméter mellett. A vektorok a spin-polarizáció irányát és nagyságát szemléltetik, az energiakontúrok háromfogsú szimmetriájával ellentétben, körszimmetrikus elrendezésben. A hullámszám  $k_x$  és  $k_y$  komponensei  $3\lambda_R/(2\hbar v_F)$  egységben vannak ábrázolva. (c)-(f): a diszperzió  $k_x = 0$  metszetei (c)  $\Delta_{SO} = 0$ , (d)  $\Delta_{SO} \ll \lambda_R$ , (e)  $2\Delta_{SO} \leq 3\lambda_R$  és (f)  $2\Delta_{SO} > 3\lambda_R$  esetekben. A kék folytonos vonalak a vezetési, míg a szaggatott piros görbék a valenciasávokat ábrázolják.

mátrixelem. Felmerül a kérdés, vajon szükséges-e megtartani a modellben ezeket a kicsi mátrixelemeket. Az irodalomban az RSO kölcsönhatás elméleti tárgyalásai során olyan (szimmetria megfontolások alapján felírt) Hamilton-operátort használtak [112, 115, 116, 120], melyben  $(\hat{H}_{R,K}^G)_{14} = (\hat{H}_{R,K}^G)_{41} = 0$ . A kétrétegű grafén irodalmából azonban megtanultuk, hogy éppen ezek az elhanyagolt mátrixelemek felelősek a  $K$  pont környéki elemi gerjesztések spektrumának topologikus értelemben vett változásaiért. A kétrétegű grafén esetéhez hasonlóan az RSO kölcsönhatás is háromszöges torzulást okoz az elemi gerjesztések alacsonyenergiás spektrumában, melyben (a  $K$  pont környékén) egy Dirac kúp helyett szabályos háromszög csúcaiban és középpontjában elhelyezkedő négy Dirac kúp található. Homogén rendszerben az állapotokat  $\mathbf{k} = k(\cos \alpha, \sin \alpha)^T$  impulzusukkal jellemezhetjük. Az elemi gerjesztéseket leíró diszperziós reláció:

$$E_K^{(n),\pm}(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F \sqrt{\frac{1}{2} [k_1^2 + k^2 (2 + \beta^2) + (-1)^n \sqrt{\Upsilon}]}, \quad (3.35)$$

ahol  $\beta = v_A/v_F = \lambda/\gamma$  az RSO kölcsönhatás erősségét jellemző dimenziótlan paraméter,  $k_1 = 2\beta/rc_C$ ,  $n = 1, 2$ , valamint

$$\Upsilon = k_1^4 + 2k^2 k_1^2 (2 - \beta^2) + k^4 \beta^2 (4 + \beta^2) - 8k^3 k_1 \beta \sin(3\alpha). \quad (3.36)$$

A 3.5.(a) és (b) ábrák rendre az  $E_K^{(1),+}(\mathbf{k})$  és  $E_K^{(2),+}(\mathbf{k})$  sávok kontúrrajzát szemléltetik. A  $K$  pontban (azaz a  $\mathbf{k} = 0$  helyen) a két sáv felhasadása  $3\lambda_R$  [lásd a 3.5.(c) ábrát]. Az  $E_L^R = 3\lambda_R \beta^2 / (4 + \beta^2)$  Lifszitz-energia<sup>2</sup> alatt a kontúrvonalak négy különálló Dirac-pont körül rajzolódnak ki. Ezek köz-

<sup>2</sup>Lásd a Lifszitz-energia definícióját a 2.2. szakaszban.

zül az egyik a  $K$  pontban helyezkedik el, míg a többi három egy szabályos háromszög csúcsában  $k_{SO} = \beta^2 \frac{2}{r_{C-C}}$  távolságra a  $K$  ponttól, az  $\alpha = -\pi/6; \pi/2; 7\pi/6$  polárszögek irányában. Az energia-sajátértékek mind a négy Dirac-pontban nullával egyenlőek. A hosszuhullámú modellből származtatott  $k_{SO}$  távolság az amúgy is realiztikus  $\lambda_R \ll \gamma$  esetben egyezik meg a (3.28) TB spektrumból származtatott  $k_{SO}^{TB} = \frac{2}{\sqrt{3}r_{C-C}} \left( \frac{2\pi}{3} - \arccos \left( \frac{2\beta^2-1}{2(1+\beta^2)} \right) \right)$  távolsággal [117].

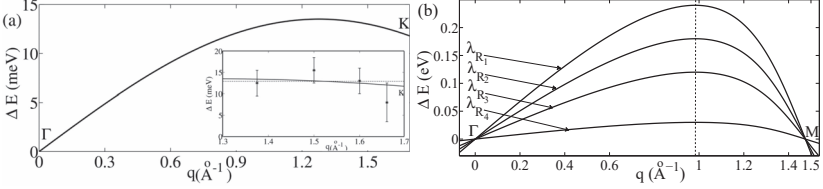
Fontos különbség azonban a kétrétegű grafénhez képest, hogy benne a vezetési sávok felhasadása  $\gamma_1 \sim 0.4$  eV, ami több mint egy nagyságrenddel nagyobb, mint az egyrétegű, RSO kölcsönhatást is tartalmazó grafén esetében. (A 3.1.3. szakaszban említettük, hogy [91] szerzői  $3\lambda_R \approx 13$  meV spinfelhasadást mértek.) Ennek következtében, míg kétrétegű grafén esetében alacsony elektrosűrűségek mellett csupán az alsó vezetési sáv állapotai lesznek betöltve, jelen esetben mindkét vezetési sáv tartalmaz betöltött állapotokat.

Az eddigiek során a modellben eltekintettünk a grafén belső spin-pálya kölcsönhatásától, mivel annak erőssége becslések szerint  $\mu\text{eV}$  nagyságrendbe esik. A Lifszitz-energia által megszabott energiaskála azonban (mely éppen a spektrum háromszögtorzulását leíró finomszerkezet energiaskálája) szintén ebbe az energiaskálába esik, így fontos lehet a belső spin-pálya kölcsönhatás spektrumra vett hatásának elemzése. Ennek érdekében numerikus számolásokkal vizsgáltam a  $\hat{H} = \hat{H}_{R,K}^G + \hat{H}_{IS,O,K}^G$  Hamilton-operátor spektrumát.

A számolások eredményét szematikusan a 3.5.(c)-(f) ábrák szemléltetik:  $\lambda_R \gg \Delta_{SO}$  esetben [3.5.(d) ábra] a spektrum topologikus tulajdonságai az alsó vezetési és felső valenciasáv érintkezési pontjai körül nem változnak, csupán mindkét sáv  $\Delta_{SO}$  értékkel eltolódik és sérül a spektrum  $E = 0$ -ra vett szimmetrikussága. Ahogy a belső spin-pálya kölcsönhatás erőssége növekszik a spektrum topologikus jellemzői megőrződnek, azonban a vezetési- és valenciasáv érintkezési pontjai kimozdulnak az eredetileg közös síkból (lásd a  $2\Delta_{SO} \leq 3\lambda_R$  esetet ábrázoló 3.5.(e) ábrát). Végül ha a belső spin-pálya kölcsönhatás erőssége meghaladja az RSO kölcsönhatás erősségét ( $2\Delta_{SO} > 3\lambda_R$ ), a spektrum tulajdonságai teljesen megváltoznak (lásd a 3.5.(f) ábrát): (i) a sáv-szerkezetben tiltott sávzélesség nyílik a vezetési- és valenciasávok között, (ii) eltűnnek az alacsonyenergiás gerjesztésekre jellemző Dirac-kúpok, (iii)  $\Delta_{SO}$  előjelétől függően a vezetési- vagy valenciasávok  $\mathbf{k} = 0$ -ban összeérnek. A [91] publikációban ismertetett mérési eredmények (melyek meglepően erős Rashba-típusú felhasadásra utalnak) a  $\lambda_R \gg \Delta_{SO}$  esethez köthetők. Ebben az esetben tehát van értelme az alacsonyenergiás spektrum előzőekben ismertetett háromszöges torzulásáról beszélni még véges belső spin-pálya kölcsönhatás mellett is.

SARPES technikával az RSO kölcsönhatás vizsgálata során a sávok spinfelhasadását vizsgálták a Brillouin-zóna magas szimmetriájú irányába vett metszeteiben. A spinfelhasadás nem más mint a spin-pálya kölcsönhatás okozta energiakülönbség a vezetési- vagy valenciasávok

között. A 3.1.3. szakaszban vázolt fotoemissziós mérésben a spinfelhasadást két valenciasáv különbségeként állapították meg ( $\Delta E(\mathbf{k}) = E_2^-(\mathbf{k}) - E_1^-(\mathbf{k})$ ) tekintettel arra, hogy ezek az állapotok voltak betöltve. A 3.5.(a) és (b) sávszerkezet-kontúrok alapján elmondható, hogy a spin-



3.6. ábra. (a) Spin-felhasadás a Brillouin-zóna  $\overline{\Gamma K}$  metszetében a (3.35) diszperzióval számolva  $3\lambda_R = 11.7$  meV erősségű RSO kölcsönhatással (folytonos görbe). A vízszintes szaggatott vonal a betétábrában a háromszöges torzulást figyelmen kívül hagyva ábrázolja a spin-felhasadást a  $K$  pont környékén; A betétábrában lévő függőleges szakaszok ezen felül [91] mérési adatait jelölik. (b) Spin-felhasadás a Brillouin-zóna  $\overline{\Gamma M}$  metszetében különböző  $\lambda_R$  paraméterértékek mellett ( $\lambda_1 = 80$ meV,  $\lambda_2 = 60$ meV,  $\lambda_3 = 40$ meV és  $\lambda_4 = 10$ meV) a (3.35) diszperzióval számolva. A spin-felhasadás maximuma ( $3\lambda_R$ ) az RSO kölcsönhatás erősségétől függetlenül mindig ugyanabban a pontban van.

felhasadás anizotróp lesz, még a  $K$  pont környékén is. Ez az irodalomban használt izotróp modellhez [112, 115, 116, 120] képest (melyben elhanyagolják a háromszöges torzuláshoz vezető  $(\hat{H}_{R,K}^G)_{14}$  és  $(\hat{H}_{R,K}^G)_{41}$  mátrixelemeket) lényegi különbséget jelent, hiszen az izotróp modellben a spinfelhasadás teljesen impulzusfüggetlen. Mivel a (3.34) Hamilton-operátor csupán a  $K$  pont körül érvényes, a Brillouin-zóna teljes metszeteinek leírására a (3.30) TB Hamilton-operátor és a hozzá tartozó (3.28) spektrum felhasználásával lehetséges. A valenciasávok számolt spinfelhasadást a  $\overline{\Gamma K}$  irányban a 3.6.(a) ábra szemlélteti. A spinfelhasadás a  $K$  pont környékén, ellentétben azzal a modellel, melyben elhanyagolják a háromszöges torzulást, nem állandó. A 3.6.(a) ábra  $K$  pont környékét felnagyító része a [91] mérési adatait is szemlélteti azok hibahatáraival együtt. A folytonos vonal a mérési adatokra legjobban illeszkedő  $3\lambda_R = 11.7$ meV paraméter mellett ábrázolja a háromszöges torzulást is tartalmazó spinfelhasadást. A nagy hibahatárokból adódóan nem lehet egyértelmű megkülönböztetést tenni a két modell jóslata között a mérési adatokra való illeszkedésük alapján. A spinfelhasadás impulzusfüggésének elemzésére ezért célszerű az egész Brillouin-zóna metszetét vizsgálni, esetlegesen más magasszimmetriájú irányokban is. A 3.6.(b) ábra a  $\overline{\Gamma M}$  irányban számolt spinfelhasadást ábrázolja különböző  $\lambda_R$  spin-pálya kölcsönhatás erősség mellett. A spinfelhasadás maximuma  $3\lambda_R$ -mal egyenlő és mindig ugyanannál a hullám-

számnál jelentkeznek. A 3.6.(b) ábrán szereplő spinfelhasadás-görbék nagy hasonlóságot mutatnak a csupasz Ni hordozófelületen létrehozott grafén rétegen mért energiafelhasadással [83]. A mérés során a Ni hordozófelület mágnesezésével tettek kísérletet a  $\overline{\Gamma M}$  spin-irányú állapotok betöltésének változtatására. Az ellentétes mágnesezési irányok mellett mért meglehetősen nagy ( $\sim 200$  meV) diszperzió különbség magyarázatát a Rashba-típusú spin-pálya kölcsönhatás okozta spinfelhasadásnak tulajdonították. Mindamellett szükséges megjegyezni, hogy [83] eredményeit más kutatócsoportoknak nem sikerült reprodukálniuk [84, 87].

Az utóbbi évek során kifejlesztett SARPES technika nemcsak a sávszerkezet vizsgálatára alkalmas, hanem a spin-polarizáció tanulmányozására is. [91] mérési eredményei alapján a spin-polarizáció forgásszimmetrikus a  $K$  pont körül, az egyes sávokban az órajárással megegyező vagy vele ellentétes irányban merőlegesen a  $\mathbf{k}$  hullámszámmra. Fontos megjegyezni azt is, hogy a mérések szerint a spin-polarizációnak nincs a grafén síkjára merőleges komponense. A modellünk segítségével számolt spin-polarizáció összhangban van a mérési eredményekkel. A 3.5.(a) és (b) ábrák az energiakontúrok mellett a spinpolarizáció eloszlását is szemléltetik. Az alacsony-energiás spektrum háromfágású szimmetriájának ellenére, a spin-polarizáció meglepő módon forgásszimmetrikus marad. Az alábbiakban megmutatom, hogy a háromszöges torzulás a spin-polarizációt csupán magasabb rendben befolyásolja. A  $\hat{H}_{R,K}^G \Psi(\mathbf{k}) = E \Psi(\mathbf{k})$  Schrödinger-egyenlet síkhullám megoldásait keresve, a 4 egyenletből álló egyenletrendszerből kiküszöböljük a  $\Psi_{B\uparrow}$  és  $\Psi_{B\downarrow}$  amplitúdókat:

$$\hat{M}(\mathbf{k})^\dagger \hat{M}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow} \\ \Psi_{A\downarrow} \end{pmatrix} = E(\mathbf{k})^2 \begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow} \\ \Psi_{A\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

ahol:

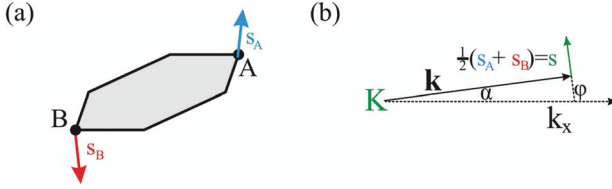
$$\hat{M}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} v_F \hbar k_x & 3\lambda i \\ v_x \hbar k_- & v_F \hbar k_x \end{pmatrix}, \text{ és } k_\pm = k_x \pm i k_y. \quad (3.38)$$

A  $\Psi_{A\uparrow}$  és  $\Psi_{A\downarrow}$  amplitúdók a  $\uparrow$  és  $\downarrow$  spinű elektronokat írják le az  $A$  atomokon. A kétismeretlenes egyenletrendszer megoldását variációs hullámfüggvénnyel keressük:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{A\uparrow} \\ \Psi_{A\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta^A}{2}\right) e^{i\varphi^A/2} \\ \sin\left(\frac{\theta^A}{2}\right) e^{-i\varphi^A/2} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (3.39)$$

A variációs hullámfüggvényben szereplő variációs paraméterek:  $\theta^A$  és  $\varphi^A$ . A spin operátor várható értéke az  $A$  alrácson  $\mathbf{s}^a = \hbar/2(\sin\theta_s^a \cos\varphi_s^a, \sin\theta_s^a \sin\varphi_s^a, \cos\theta_s^a)^T$ . A variációs paramétereket az energia szélsőértékeinek keresése során állapítjuk meg. A számolás során két energia szélsőértéket találunk. A hozzájuk tartozó paraméterekben a háromszöges torzulás a  $k = |\mathbf{k}|$  hullámszám magasabb rendjében mutatkozik csupán meg:

$$\tan\theta_n^A(\mathbf{k}) = (-1)^{n+1} \left( \frac{k}{\kappa} - \frac{\sin 3\alpha k^2 r_{C-C}}{\kappa} \right), \quad (3.40)$$



3.7. ábra. (a) Az A és B atomok  $s_A$  és  $s_B$  elektron spin várható értékek egymásnak tükörképei a grafén síkjára vonatkoztatva. (b) Az elemi cella  $\mathbf{s} = (\mathbf{s}_A + \mathbf{s}_B)/2$  átlagos spin-várható értéke merőleges az állapothoz tartozó  $\mathbf{k}$  hullámszámvektorra.

$$\varphi_n^A(\mathbf{k}) = \alpha + (-1)^{n+1} \frac{\pi}{2} - \frac{\cos 3\alpha}{2} \kappa r_{C-C}. \quad (3.41)$$

Az  $n = 1, 2$  index az  $E_K^{(1),+}(\mathbf{k})$  [vagy  $E_K^{(2),-}(\mathbf{k})$ ] és  $E_K^{(1),-}(\mathbf{k})$  [vagy  $E_K^{(2),+}(\mathbf{k})$ ] sávokra vonatkozik, valamint  $\kappa = \beta/r_{C-C}$ . A B alrácra hasonló számolással a  $\theta_n^B(\mathbf{k}) = \pi - \theta_n^A(\mathbf{k})$  és  $\varphi_n^B(\mathbf{k}) = \varphi_n^A(\mathbf{k})$  eredményre jutunk. A (3.40) és (3.41) egyenletek rámutattak, hogy a háromszöges torzulás csupán magasabb rendben befolyásolja a spin-polarizáció eloszlást, ezért a spin-polarizáció forgásszimmetrikusnak tűnik a 3.5.(a) és (b) ábrákon. Ezen felül megállapítottuk, hogy az A és B atomokon az elektronok spinjének grafén-síkjára merőleges vetülete ellentétes előjelű. Ezért, a [91] mérési eredményeihez hasonlóan, az elektronállapotok  $\mathbf{s} = (\mathbf{s}^A + \mathbf{s}^B)/2$  spinje a grafén síkjába esik és vezető rendben merőleges a  $\mathbf{k}$  hullámszámra (lásd a 3.7. ábrát). A spin várható értéke a K pontban  $\mathbf{s} = 0$ , míg nagysága a K ponttól távolodva egyre nő, míg eléri a  $\hbar/2$  nagyságot (lásd a 3.5.(a) és (b) ábrákat).

A  $K'$  pont környékén analóg eredményeket kaphatunk. Az időtükrözési szimmetriának megfelelően a  $K'$  pont körül minden elektronspin ellentétes előjelű, a K ponthoz képest.

### 3.1.6. Alrács-aszimmetria detektálása SARPES technikával

Az előző szakaszban bevezetett modell az RSO kölcsönhatás leírására a grafén síkjába eső spin-polarizációt eredményez. Ez a tulajdonság nem változik akkor sem, ha figyelembe vesszük a grafén (3.22) egyenlettel adott belső spin-pálya kölcsönhatását is. A grafén síkjára merőleges spin-polarizáció mérési kimutatása ezért a felvázolt modelleken túlmutató kölcsönhatásokra utalna. Jelen szakaszban megmutatjuk, hogy az említett effektust kiválthatja a grafén kristályrácsában esetlegesen jelen lévő aszimmetria is az A és B alrácok között. Az alrács-aszimmetria tanulmányozását tovább motiválja, hogy 2010-ben STM mérésekkel kimutatták Ag felületen az ugyan-csak síkbeli, hatszöges elrendezésben kristályosodó Si atomok rendszerét, az ún. *szilicént* (Sili-

cene) [121]. Az egy atomrétegni szilícénben az  $A$  és  $B$  alrácok – a grafénnel ellentétben – két egymással párhuzamos síkban helyezkednek el. Így az alrácok közti aszimmetriát bármelyik hordozófelület automatikusan generálhatja, hiszen az egyik alrác közelebb kerül a hordozófelülethez, mint a másik. Az alrác-aszimmetriát leíró Hamilton-operátor az egyszerű

$$\hat{H}_{AB,K}^G = \frac{\Delta_{AB}}{2} \sigma_z \otimes s_0 = \begin{pmatrix} \frac{\Delta_{AB}}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\Delta_{AB}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta_{AB}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\Delta_{AB}}{2} \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

alakban írható, mellyel az  $A$  és  $B$  alrácok on-site energiái között teszünk különbséget.

Az előző szakasz tanulságai alapján a spin-polarizáció főbb tulajdonságai a háromszög torzulást okozó  $(\hat{H}_{R,K}^G)_{14}$  és  $(\hat{H}_{R,K}^G)_{41}$  mátrixelemek nélkül is megérthetőek. Ezen felül, mivel a fotoemissziós mérések energiafelbontása nagyobb a Lifszitz-energiánál, a következő analitikus számolásokban az egyszerűség kedvéért elhanyagoljuk ezeket a mátrixelemeket. (A numerikus számolásokban viszont figyelembe vesszük a háromszögtorzulást is.) A továbbiakban tehát a  $\hat{H} = \hat{H}_{R,K}^G + \hat{H}_{AB,K}^G$  Hamilton-operátor dinamikáját vizsgáljuk, melyben eltekintünk a grafénre jellemző kis energiaskálájú belső spin-pálya kölcsönhatástól. A Hamilton-operátor energiasajátértékei:

$$E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k}) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{4v_F^2 \hbar^2 k^2 + \Delta_{AB}^2 + 18\lambda_R^2 + (-1)^n 18\Upsilon_{AB}(k)}, \quad (3.43)$$

ahol  $k = |\mathbf{k}|$  és:

$$\Upsilon_{AB}(k) = |\lambda_R| \sqrt{\frac{4}{9} v_F^2 \hbar^2 k^2 + \lambda_R^2}. \quad (3.44)$$

Az egyenletben szereplő kvantumindexek a (3.35) képlethez képest analóg jelentéssel bírnak. Háromszöges torzulás nélkül az elemi gerjesztéseket leíró spektrum izotrop, véges alrác-aszimmetria mellett  $\Delta_{AB}$  nagyságú tiltott sávszélességgel a  $\mathbf{k} = 0$  pontban. A sávszerkezet rajzát a 3.8.(a) ábra szemlélteti.

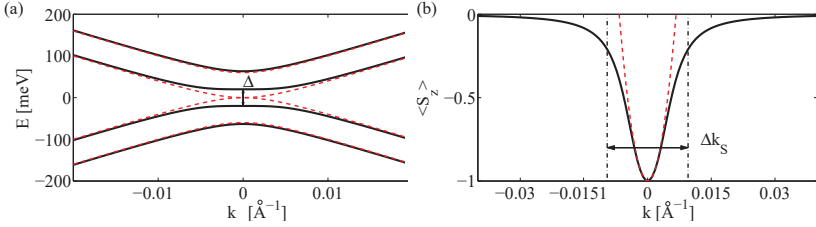
Az RSO kölcsönhatás okozta spin-polarizáció három komponensét az  $((n), \pm)$  sávban a spin-operátorok várható értékeként határozzuk meg:

$$\langle S_{x,y,z} \rangle^{(n),\pm} = \text{Tr} \left( \hat{Q}^{(n),\pm} \hat{S}_{x,y,z} \right), \quad (3.45)$$

ahol  $\hat{Q}^{(n),\pm}$  a  $((n), \pm)$  sávra vetítő projektor, melyet a (3.14) egyenlettel határozhatunk meg az előzőekben definiált  $\hat{H}$  Hamilton-operátorból, és  $\hat{S}_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} (I_2 \otimes S_{x,y,z})$  a spin-operátorok.

A spin komponensek várható értékei egyszerű algebrai számolásokkal meghatározhatóak:

$$\langle S_x \rangle^{(n),\pm} = (-1)^{n+1} \frac{-2\hbar v_F k_y \lambda_R}{3\Upsilon_{AB} N(k)}, \quad \langle S_y \rangle^{(n),\pm} = (-1)^{n+1} \frac{2\hbar v_F k_x \lambda_R}{3\Upsilon_{AB}(k)}, \quad (3.46)$$



3.8. ábra. (a): a (3.43) diszperziós reláció  $\Delta_{AB} = 40$  meV (folytonos fekete görbe) és  $\Delta_{AB} = 0$  (szaggatott piros görbe) esetben. Végés alrács-aszimmetria esetében a  $k = 0$  pontban  $\Delta_{AB}$  nagyságú tiltott sáv szélesség nyílik. (b): a Bloch-állapotok  $z$  spin-komponensének várható értéke a felső valenciasáv esetében. Az alrács-aszimmetria végés  $z$  irányú spin-polarizációt indukál. A csúcs  $\Delta k_S$  félérték-szélessége független az alrács-aszimmetria  $\Delta_{AB}$  paraméterétől (lásd (3.48) egyenletet). Az RSO kölcsönhatás erőssége  $\lambda_R = 20$  meV.

és

$${}^{(n),\pm}\langle S_z \rangle = (-1)^{n+1} \frac{\Delta_{AB} \lambda_R^2}{2\Gamma_{AB}(k) E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k})}. \quad (3.47)$$

A (3.47) összefüggésből láthatjuk, hogy ekvivalens alrács esetben ( $\Delta_{AB} = 0$ ) a síkra merőleges spin-polarizáció nulla, csupán síkbeli komponensei vannak. Végés alrács-aszimmetria azonban  $z$  irányú spin-polarizációt indukál. Az  $n = 1$  indexszű sávok esetében a  $K$  pontban az elektronspin teljesen polarizált  $z$  irányban:  ${}^{(1),\pm}\langle S_z \rangle = \pm 1$ . Az  $n = 2$  sávok esetében az elektronspinek polarizáltsága nem éri el a  $\pm 1$  értéket még közvetlenül a  $K$  pontban sem:  ${}^{(2),\pm}\langle S_z \rangle = -\Delta_{AB} / \sqrt{\Delta_{AB}^2 + 36\lambda_R^2}$ . A spin-polarizáció síkbeli ( $x, y$ ) komponensei forgásszimmetrikus rajzolatot mutatnak hasonló módon, ahogy alrács-aszimmetria hiányában [55, 115, 116, 119] az előző szakaszban tárgyaltuk.

Érdekes következtetésre jutunk, ha a (3.47) egyenletet sorba fejtsük  $k = 0$  körül:

$${}^{(1),\pm}\langle S_z \rangle \approx \pm \left( 1 - \frac{2\hbar^2 v_F^2 k^2}{9\lambda_R^2} \right). \quad (3.48)$$

A sorfejtés segítségével becslést tudunk adni arra a  $k$ -térbeli tartományra, ahol a  $z$  irányú spin-polarizáció különbözik nullától. A (3.48) parabolikus profil félérték-szélessége  $\Delta k_S = 3\sqrt{2}\lambda_R/\hbar v_F$ . Feltűnő, hogy a csúcs félérték-szélessége (és a spin-polarizáció sorfejtése) független az alrács-aszimmetria paraméterétől,  $\Delta_{AB}$ -tól. A 3.8.(b) ábra a  $z$  irány spin-polarizációját és annak (3.48) közelítését szemlélteti a  $((1), +)$  sáv esetében. A csúcs félérték-szélessége  $\lambda_R \approx 20$  meV mellett  $\Delta k_S \approx 0.01 \text{ \AA}^{-1}$ -nek adódik.



A fotoelektron intenzitást meghatározó (3.15) képlet általánosítható a fotoelektronon mért tetszőleges fizikai mennyiség mérésének leírására. Az  $\hat{O}$  operátorhoz tartozó fizikai mennyiség várható értéke az  $((n), \pm)$  sávból kilökött elektronokra vonatkozólag:

$$\begin{aligned} {}^{(n),\pm}\langle O \rangle(\hbar\omega, \mathbf{k}) &= \text{Tr} \left( \hat{O} \tilde{Q}^{(n),\pm}(\mathbf{k}) \right) / \text{Tr} \left( \tilde{Q}^{(n),\pm}(\mathbf{k}) \right) \\ &\delta_{\mathbf{p}_{\parallel}/\hbar - (\mathbf{K} + \mathbf{k} + \mathbf{G}), \mathbf{0}} \delta(\hbar\omega + E^{(n),\pm}(\mathbf{k}) - E_{\mathbf{p}} - \Phi), \end{aligned} \quad (3.49)$$

ahol  $E_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2m_e}(\mathbf{p}_{\parallel}^2 + p_z^2)$  a  $\mathbf{p}_{\parallel}$  síkbeli és  $p_z$  síkra merőleges impulzusú fotoelektron energiája,  $\Phi$  a kilépési munka,  $\tilde{Q}^{(n),\pm}(\mathbf{k})$  pedig a (3.16) és (3.19) egyenletekkel meghatározott projektor.

A továbbiakban csupán egy Mahan-kúpra<sup>3</sup> korlátozódunk, azaz  $\mathbf{G} = \mathbf{0}$ -t tekintjük. A 3.1.2. szakaszhoz hasonlóan a mérési pontatlanságok és egyéb elhanyagolt effektusok empirikus figyelembevételéhez az impulzus és energiamegmaradást kifejező  $\delta(x)$  függvényeket Lorentz-típusú görbével helyettesítjük (lásd a (3.20) egyenletet). A Lorentz-görbét a  $\Gamma$  félérték-szélessége jellemzi.

Először a (3.15) egyenlet segítségével meghatározom a fotoelektronok intenzitás-eloszlását:

$${}^{(n),\pm}I(\hbar\omega, \mathbf{k}) \sim \left( 1 - \frac{v_F \hbar k_y (\Upsilon_{AB}(k) + (-1)^n \lambda_R^2)}{\Upsilon_{AB}(k) E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k})} \right) \frac{\Gamma}{(\hbar\omega - E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k}))^2 + \Gamma^2}. \quad (3.50)$$

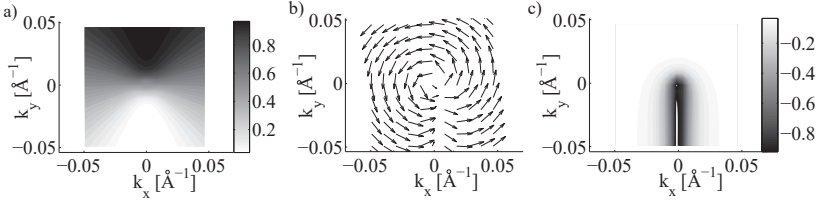
Kicsit távolabb a  $K$  ponttól, ahol a  $v_F \hbar k$  energiaskála sokkal nagyobb a spinfelhasadás  $\lambda_R$  és az alrács-aszimmetria  $\Delta_{AB}$  energiaskálájánál, az intenzitás-eloszlás az alábbi összefüggéssel közelíthető:

$${}^{(n),\pm}I(\hbar\omega, \mathbf{k}) \sim \left( 1 - \frac{v_F \hbar k_y}{E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k})} \right) \frac{\Gamma}{(\hbar\omega - E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k}))^2 + \Gamma^2}. \quad (3.51)$$

Ez az összefüggés nagy hasonlóságot mutat a (3.21) egyenlettel. Alrács-aszimmetria és RSO kölcsönhatás esetében tehát hasonló intenzitás-eloszlás rajzolatot kapunk, mint a 3.1.2. szakaszban. Az intenzitás-eloszlást a 3.9.(a) ábra szemlélteti a felső valenciasáv esetében. Az ábrázolásban eltekintettem az egyenletben szereplő Lorentz-görbétől. (Azaz a 3.9. ábrák nem konstans energiamezseteket ábrázolnak.) Az alrács-interferencia hatására kialakul a sötét folyosó, ám a  $K$  pont közelében az egyre nagyobb alrács-aszimmetria gátolja a teljes kioltás létrejöttének feltételét. Ennek következtében a  $K$  pont környékén izotróp lesz az intenzitás-eloszlás.

Az intenzitás-eloszláshoz hasonlóan a spin-polarizációt is meghatároztam analitikusan. Ennek során a (3.49) egyenletbe az  $\hat{O}$  operátor helyébe az  $\hat{S}_{x,y,z}$  spin operátorokat helyettesítettem. A polarizáció pedig a fotoelektronok spinjének várható értékéből a  $(\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y, \mathcal{P}_z) = \frac{2}{\hbar} \langle (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z) \rangle$  összefüggéssel származtattam. Az egyenletek jobb áttekinthetősége kedvéért a

<sup>3</sup>Lásd az 1.1.2. szakaszt.



3.9. ábra. (a) A fotoelektronok intenzitás-eloszlása; (b) a spin-polarizáció  $x - y$  komponenseinek eloszlása; (c) a spin-polarizáció  $z$  komponensének eloszlása a felső valenciasáv esetében a Dirac-pont környékén. Az ábra fizikai paraméterei:  $\lambda_R = 20$  meV,  $\Delta_{AB} = 60$  meV.

továbbiakban nem írom ki az energia kiszélesedést jellemző Lorentz-görbékét, azonban minden konstans energiás metszet esetén az egyenletekhez gondoljuk. Egyszerű számolásokkal adódik:

$${}^{(n),\pm}\mathcal{P}_x = \frac{(-1)^{n+1}\lambda_R\left(\frac{3}{2}\lambda_R^2 + \frac{2}{3}v_F\hbar k_y(v_F\hbar k_y - E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k}))\right) - \frac{3}{2}\lambda_R\Upsilon_{AB}(k)}{\Upsilon_{AB}(k)E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k}) - v_F\hbar k_y(\Upsilon_{AB}(k) + (-1)^n\lambda_R^2)}, \quad (3.52)$$

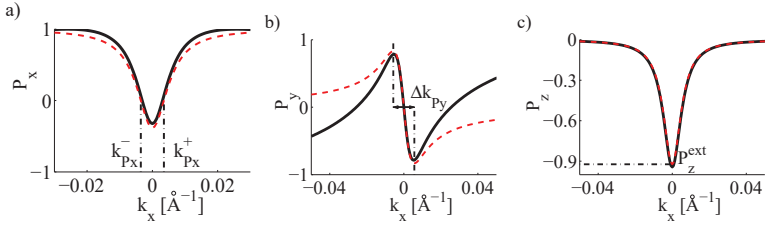
$${}^{(n),\pm}\mathcal{P}_y = (-1)^{n+1} \frac{\frac{2}{3}v_F\hbar k_x \lambda_R (E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k}) - v_F\hbar k_y)}{\Upsilon_{AB}(k)E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k}) - v_F\hbar k_y(\Upsilon_{AB}(k) + (-1)^n\lambda_R^2)}, \quad (3.53)$$

és

$${}^{(n),\pm}\mathcal{P}_z = (-1)^{n+1} \frac{\frac{1}{2}\Delta_{AB}\lambda_R^2}{\Upsilon_{AB}(k)E_{AB,K}^{(n),\pm}(\mathbf{k}) - v_F\hbar k_y(\Upsilon_{AB}(k) + (-1)^n\lambda_R^2)}. \quad (3.54)$$

A (3.54) egyenletből azonnal látható, hogy a Bloch-elektronokhoz hasonlóan, az alrács-aszimmetria és az RSO kölcsönhatás összjátéka a fotoelektronok spin-polarizációjában is indukál  $z$  irányú komponenst. A  $(1),\pm\mathcal{P}_z$  spin-polarizáció nagysága a Dirac-pontban a legnagyobb, itt az  $((1), \pm)$  sávok esetében eléri a  $\pm 1$  értéket. A  $((2), \pm)$  sávok esetében a  ${}^{\mu,\nu}\mathcal{P}_z$  spin-polarizáció ennél kisebb,  $(2),\pm\mathcal{P}_z(k=0) = \mp\Delta_{AB}/\sqrt{\Delta_{AB}^2 + 36\lambda_R^2}$  értéket vesz fel. A felső vezetési sáv esetére a 3.9.(c) ábra szemlélteti a  $(1),-\mathcal{P}_z(\mathbf{k})$  spin-polarizáció értékét a  $k$ -térben. A sötét folyosó területén véges értéket vesz fel, rajta kívül pedig lényegében nulla. (A többi sávra hasonló eredmények adódnak.) Ezek alapján az állandó energiás metszetekben a  $z$  irányú spin-polarizációt a Dirac-ponthoz közel lehet legegyszerűbben kimutatni SARPES technikával. Ellenkező esetben a sötét folyosóból kellene a mérés során adatokat gyűjteni, ami az alacsony intenzitás miatt igencsak nehézkes feladat.

A fotoelektronok síkbeli spin-polarizációja az alrács-interferenciának köszönhetően lényegesen eltérő viselkedést mutat a Bloch-elektronokhoz képest. A [116] publikációban a szerzők rámutattak, hogy ekvivalens alrácsok esetében a sötét folyosóban a fotoelektronok spin-



3.10. ábra. (a)-(c): a spin-polarizáció  $x$ ,  $y$  és  $z$  komponensei a felső valenciasávban a sötét folyosóra merőleges  $k_y = -0.28\text{\AA}^{-1}$  metszeten. A folytonos fekete vonalak a (3.52)-(3.54) egyenletek, a piros szaggatott vonalak pedig a közelítő (3.55)-(3.57) egyenletek eredményeit ábrázolják. Az ábra egyéb fizikai paramétereit:  $\lambda_R = 20$  meV és  $\Delta_{AB} = 40$  meV.

polarizációja gyorsan változik, elfordul a Bloch-elektronok spinirányához képest. Ezen felül a fotoelektronok spin-polarizációja a  $K$  pontban sem nulla. A (3.52) és (3.53) egyenletek alapján az alrács-aszimmetria nem változtatja meg lényegesen ezeket a tulajdonságokat. A síkbeli spin-polarizáció eloszlását a 3.9.(b) ábra szemlélteti a  $k$ -térben (ugyancsak eltekintve a konstans energiamegszorító Lorentz-görbétől) a felső valenciasáv esetében. A spin-polarizáció gyors változását a sötét folyosóban a (3.53) és (3.54) egyenletek nagy  $|k_y|$  hullámszám mellett érvényes közelítésével vizsgáltam:

$${}^{(n),\pm}\mathcal{P}_x(\mathbf{p}) \approx \pm(-1)^{n+1} \frac{9\lambda_R^3 - 4\lambda_R v_F^2 \hbar^2 k_x^2 - \Delta_{AB}^2 \lambda_R}{4\lambda_R v_F^2 \hbar^2 k_x^2 + 9\lambda_R^3 + \Delta_{AB}^2 \lambda_R}, \quad (3.55)$$

$${}^{(n),\pm}\mathcal{P}_y(\mathbf{p}) \approx -\frac{v_F \hbar k_x \lambda_R^2}{\frac{1}{3}\lambda_R v_F^2 \hbar^2 k_x^2 + \frac{3}{4}\lambda_R^3 + \frac{1}{12}\Delta_{AB}^2 \lambda_R}, \quad (3.56)$$

$${}^{(n),\pm}\mathcal{P}_z(\mathbf{p}) \approx \pm(-1)^{n+1} \frac{\frac{1}{2}\Delta_{AB} \lambda_R^2}{\frac{1}{3}\lambda_R v_F^2 \hbar^2 k_x^2 + \frac{3}{4}\lambda_R^3 + \frac{1}{12}\Delta_{AB}^2 \lambda_R}, \quad (3.57)$$

A (3.55)-(3.57) egyenletek függetlenek a  $k_y$  hullámszámtól, ezért a spin-polarizáció komponensei a sötét folyosó  $k_x = konst$  metszeteiben állandók. A spin-polarizáció  $x$  komponense  $k_x$  függvényében kétszer vált előjelet a sötét folyosóban (lásd a 3.10.(a) ábrát). Az előjelváltások a

$$k_{P_x}^{\pm} \approx \pm \frac{\sqrt{9\lambda_R^2 - \Delta_{AB}^2}}{2v_F \hbar} \quad (3.58)$$

pontokban vannak. A spin-polarizáció  $y$  komponense csupán a  $k_x = 0$  pontban vesz fel nulla értéket. Azonban e pont körül  $\Delta k_{P_y} \sim \frac{1}{v_F \hbar} \sqrt{9\lambda_R^2 + \Delta_{AB}^2}$  szélességű tartományban gyors változás jellemzi  $\pm 1$  értékek között (lásd a 3.10.(b) ábrát). A spin-polarizáció  $z$  komponensének sehol

sincs zérushelye, jellegét tekintve egyszerű csúccsal jellemezhető, melynek szélsőértéke a  $k_x = 0$  helyen (lásd a 3.10.(c) ábrát):

$$P_z^{ext} \approx \pm(-1)^{n+1} \frac{2}{\frac{\Delta_{AB}}{\Lambda_{AB}} + \frac{\Delta_{AB}}{\Lambda_{AB}}} \quad (3.59)$$

A spin-polarizáció és alrács-aszimmetria kapcsolatának további eredményeiről a [122] publikációkban számolunk be, melyben állandó energiametszetekre vonatkoztatott (MDC<sup>4</sup>) spin-polarizáció görbéket vizsgáltunk. Az effektus kísérleti detektálhatóságának szempontjából megemlítjük, hogy a 3.1.3. szakaszban említett grafén/Ni(111) rendszeren kívül [91] Ru(0001) hordozófelületen is alkalmaztak arany atomok közbeiktatását a grafén és hordozófelület közé, ami a grafén felület szétcsatolódására vezetett a hordozófelületről [90]. Ehhez a rendszerhez hasonlóan, az arany atomok SiC hordozófelületen is fellazítják a grafén és a hordozófelület között kialakult erős kovalens kötések [123]. Bár ezekben a publikációkban nem számoltak be SARPES mérési eredményekről, elképzelhető, hogy az RSO kölcsönhatás ezekre a rendszerekre is jellemző lehet hasonló módon, mint ahogy a 3.1.5. szakaszban vázoltuk. A grafén/arany/Ru(0001) heteroszerkezet kiváltképp érdekes lehet eredményeink szemszögéből nézve, hiszen ARPES mérések 100 meV nagyságrendű tiltott sáv szélességet mutattak a sáv szerkezetben. Amennyiben a rendszerben véges RSO kölcsönhatás van, a  $z$  irányú spin-polarizáció mérése rávilágíthat a tiltott sáv szélesség eredetére. Megjegyezzük azonban, hogy az alrács-aszimmetria mellett vékony rétegekben a síkban fekvő potenciálgradiens is eredményezhet síkra merőleges spin-polarizációt [124, 125].

## 3.2. Mérési eredmények háromdimenziós topologikus szigetelőkön

A fotoemissziós mérési technikák a háromdimenziós topologikus szigetelők vizsgálata során is sikeresnek bizonyultak. Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> „felületi” Brillouin-zónájának magas szimmetriájú metszeteiben ARPES mérésekkel azonosították a felületi állapotok spektrumának öt ágát: kettőt a  $\Gamma$  pont, és hármat az  $M$  pont körül [64]. SARPES technikával ezen felül megvizsgálták a felületi állapotok spin-eloszlását is [126]. Az eredmények alapján a szerzők úgy találták, hogy (i) az egyes spin-felhasadt diszperziós ágak egymáshoz képest ellentétes spinűek; (ii) a spinek jó közelítéssel a felület síkjában fekszenek és merőlegesek a mindenkor impulzusra; (iii) az öt felületi diszperziós ág közül 2 egymásba fut a Fermi-energia felett a tömbi tiltott sáv szélesség tartományában, a többi három viszont a tömbi sáv szerkezetbe fut (lásd az 1. (F) és (H) ábrát a [126] publikáció-

<sup>4</sup>a definíciót lásd az 1.1.2. szakaszban

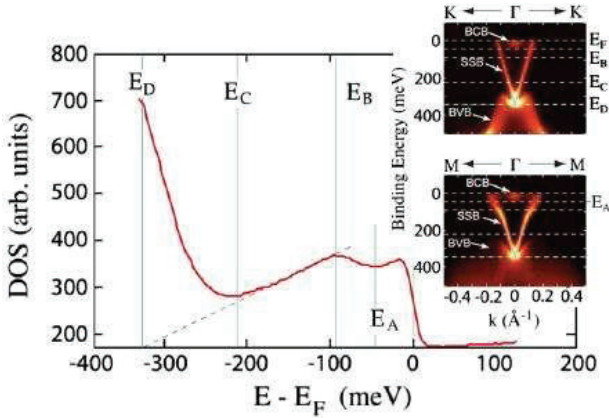
ban). A spin-polarizáció helikális tulajdonsága az elektronállapotok  $\pi$  nagyságú Berry-fázisának hipotézisét is megerősíti, hiszen körbeérve egy állandó energiájú kontúrón a spin  $2\pi$  szöggel fordul el.

Az ARPES mérési eljárást a második generációs topologikus szigetelők egy Dirac-kúppal leírható elektronállapotainak tanulmányozására is felhasználták. Mivel alapértelmezett esetben a mintákban a Fermi-energia a tömbi sáv szerkezetet is metszi, a felületi állapotok transzport-tulajdonságainak kiaknázásához hangolni próbálták a Fermi-szintet. Alacsony rendszámú adalék atomok alkalmazásától várták a probléma megoldását. Az adalékatomokat már a minta készítése során az olvasztótégelybe helyezték annak érdekében, hogy a minta egészében a tömbi tiltott sáv szélességbe kerüljön a Fermi-energia. A mérések során azonban felfigyeltek arra, hogy az ARPES spektrumok az idő függvényében változnak. Néhány perccel a minta elkészítése után a mérések az elvárt eredményt hozták a Fermi-energia hangolását illetően, azonban megközelítőleg 18 óras időskálán belül a spektrum olyanná változott, mintha nem is alkalmaztak volna adalékatomokat a rendszerben: bár donor és akceptor atomok adalékolásával szabályozni tudták a Fermi-energia szintjét a tömbi sáv szerkezetben, a felületi állapotok sáv szerkezetéhez képest a Fermi-energia végezetül nem mozdult el [70, 72].

Az effektus általánosan elfogadott magyarázata, hogy a minták felületén a hasítást követően felületi rekonstrukció megy végbe. A lassú felületi rekonstrukció csatlóódik egy töltésátrendeződési folyamattal, mely során a felületen felhalmozódott töltéssűrűség hatására kialakult elektrosztatikus tér megdőrbíti a legfelső QL rétegben<sup>5</sup> a tömbi sáv szerkezetet a minta belsejében lévő sáv szerkezethez képest (lásd a 3. ábrát a [72] publikációban). Az ARPES mérés nagyrészt (a felületi állapotok mellett) a legfelső QL réteg deformált tömbi sáv szerkezetéről gyűjt mérési adatokat. A felületi állapotok Fermi-szintjének ibőben állandó finomhangolását a [70, 71] publikációkban NO<sub>2</sub> molekulák felületen való megkötésével érték el. Hasonló időbeli stabilitást értek el Si(111) felületen növesztett Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> film esetében is [127]. Ebben az esetben a Fermi-energia elektron adagolás nélkül is csupán a felületi állapotokat metszette el. További lehetséges módszert a Fermi-szint problémájának megoldására a [128] publikációban ismertettek. A készített (Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> kristályban  $x$  változtatásával a Fermi-energiát széles tartományban tudták hangolni. A jelenség magyarázata abban rejlik, hogy az Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> topologikus szigetelőben a Fermi-szint a tömbi valenciásávba esik, míg Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> esetében a tömbi vezetési sávba. A két topologikus szigetelőnek ugyanaz a kristályszerkezete, így kombinálásukkal elérhető a Fermi-szint szabályozása.

---

<sup>5</sup>A definícióért lásd a 2.3.3. szakaszt.



3.11. ábra. ARPES technikával mért állapotsűrűség az energia függvényében. A betéttábrák az energia-diszperziót ábrázolják a Brillouin-zóna  $\Gamma K$  és  $\Gamma M$  metszeteiben. az  $E_A$  és  $E_C$  energiák rendre a tömbi vezetési és valenciasáv határait jelölik. Ezen felül  $E_D$  a Dirac-pont helyét,  $E_B$  pedig azt az energiát jelöli, ahol az állandó energiás kontúrgörbék konkvából konkávba váltanak (2.10. ábra). Az ábra a [26] publikációból származik.

### 3.2.1. A $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ kristály felületi állapotai

Az 1.1.2. szakaszban tárgyalt (1.10) egyenlet szerint az ARPES technika alkalmas lehet az állapotsűrűség tanulmányozására. Ennek feltétele, hogy a kölcsönhatási mátrixelemek csupán gyenge impulzusfüggést mutassanak. Grafénben pont a kölcsönhatási mátrixelem hordozta az intenzitás-eloszlás kétfogású szimmetriáját meghatározó szerkezeti járulékot, ezért ebben az esetben nem is nyílt közvetlen lehetőség az állapotsűrűség tanulmányozására. A kölcsönhatási mátrixelem által kódolt interferencia-jelenség a kristályrács által meghatározott, energiafüggetlen szimmetriatulajdonságokkal rendelkezett. A  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristályok felületi állapotainak vizsgálata során azonban nem tapasztaltak a grafénhez hasonló energiafüggetlen struktúrát az energiametszetek feltérképezése során (lásd az 1. b) ábrát a [26] publikációban), ezért az állandó energiájú metszetekben észlelt intenzitás ingadozást az impulzus térbeli lokális állapotsűrűség megnyilvánulásának tulajdonították. Ennek következtében az intenzitás-eloszlás  $\mathbf{k}$  szerinti felösszegzése adott energiájú metszet esetében az állapotsűrűséggel lesz arányos. Az állapotsűrűség és a  $\Gamma K$ ,  $\Gamma M$  metszetekben felvett energia-diszperzió mérési eredményeit a 3.11. ábra szemlélteti. Az ábra mérési adataihoz a felületi állapotok mellett a tömbi sáv szerkezet is hozzájárult. A tömbi

sávszerkezet ezért meghatározza az állapotsűrűség viselkedését az  $E \lesssim E_C$  és  $E \gtrsim E_A$  energiatartományban.

A felületi állapotok energiakontúrjainak 2.3.3. szakaszban felvázolt hatszöges torzulása a kísérleti eredményekben is megfigyelhető volt. A 3.11. ábrán szemléltetett  $E_B$  energiaérték az állapotsűrűség szélsőértékének helyét határozza meg. A szélsőérték az energiakontúrok konvexből konkáv alakba történő átváltásával magyarázhatjuk. A 3.11. ábra főbb kvalitatív tulajdonságai ezért leírhatóak a 2.3.3. szakaszban ismertett (2.50) Hamilton-operátorral és (2.51) diszperzióval akkor is, ha  $\frac{1}{2m^*} \rightarrow 0$  és  $\alpha \rightarrow 0$  közelítésekkel élünk. A következő és a 4.2. szakaszban azonban megmutatjuk, hogy a kísérleti mérések meggyőző magyarázatához szükséges figyelembe venni a  $\mathbf{k}$ -ban magasabb rendű, az irodalomban többnyire elhanyagolt tagokat is.

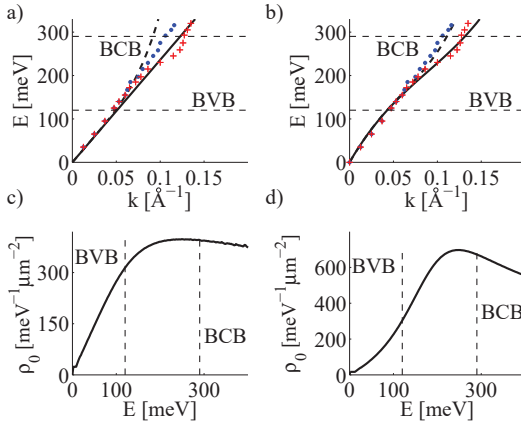
### 3.2.2. Magasabb rendű korrekciók a modellben

A 3.12.(a) és (c) ábrák rendre a  $\Gamma K$  és  $\Gamma M$  irányokban vett spektrum metszeteket és állapotsűrűséget mutatják az irodalomban elterjedt  $v_0 = 2.55 \text{ eV\AA}$ ,  $\lambda = 250 \text{ eV\AA}^3$ ,  $\frac{1}{2m^*} = 0$  és  $\alpha = 0$  paraméterek mellett. Az állapotsűrűséget a vezetési sávban a közismert

$$\rho_0(E) = \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \delta(E - E_+^{Tl}(\mathbf{k})) = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \oint_{\Gamma_E} dk \frac{1}{|\vec{v}_k|}. \quad (3.60)$$

egyenlettel határoztam meg, ahol  $E_+^{Tl}(\mathbf{k})$  a (2.51) egyenlettel adott diszperzió és  $\vec{v}_k = \nabla_{\mathbf{k}} E_+^{Tl}(\mathbf{k})/\hbar$  a csoportsebességet jelöli. Az állapotsűrűség tehát a csoportsebesség inverzének állandó energiakontúron vett körintegráljával határozható meg numerikus módon. Ha összehasonlítjuk a mérési és elméleti eredményeket, azt tapasztaljuk, hogy (i) a mérési adatokban a  $\Gamma K$  spektrum metszet lineáris diszperziót mutat, míg a 3.12.(a) ábrán a diszperzió íve befelé görbül; (ii) a mérési adatokat tekintve, a  $\Gamma M$  metszetben a Fermi-energia és a Dirac-pont közötti tartomány közepén a diszperzió látványosan kihajlik, míg az elméleti számolásokra szigorúan lineáris momentumfüggés jellemző. ( $\Gamma M$  irányban a hatszöges torzulást okozó tag kiesik.) (iii) a 3.12.(c) ábrán az állapotsűrűség a maximuma körül sokkal szélesebb csúcsot mutat, mint a 3.11. ábrán szemléltetett mérési eredmények. A mérési és elméleti eredmények közti eltérések az  $m^*$  és  $\alpha$  paraméterek nélkül nem korrigálhatóak. Az állapotsűrűség görbéjében a csúcs pozíciója ( $\sim 240 \text{ meV}$ ) a  $\gamma$  és  $v_0$  paraméterekkel változtatható, a csúcs szélessége pedig az  $\alpha$  paraméter értékére érzékeny.

Lényegesen jobb egyezést kapunk az elméleti és mérési eredmények között, ha a  $v_0 = 3.5 \text{ eV\AA}$ ,  $\lambda = 150 \text{ eV\AA}^3$ ,  $\alpha = 21 \text{ \AA}^2$  és  $\gamma = -19.5 \text{ eV\AA}^2$  paramétereket használjuk. A számolt spektrum metszeteket és állapotsűrűséget a 3.12.(b) és (d) ábrák szemléltetik. A paramétereket a mért spektrum metszetek és állapotsűrűség görbéire történő egyidejű illesztéssel határoztam meg. Az állapotsűrűség görbéjén az  $E_C < E < E_A$  tartományra szorítkoztam az illesztés során.



3.12. ábra. (a) és (b) Diszperzió metszetek a  $\Gamma M$  (folytonos) és  $\Gamma K$  (szaggatott) irányokban. BVB és BCB rendre a tömbi valencia és vezetési sáv határát jelölik. (c) és (d) az állapotsűrűség az energia függvényében. (a) és (c) az irodalomban elterjedt  $v_0 = 2.55 \text{ eV}\text{\AA}$ ,  $\lambda = 250 \text{ eV}\text{\AA}^3$ ,  $\frac{1}{2m^*} = 0$  és  $\alpha = 0$  paraméterekkel számolva; (b) és (d) saját illesztésünkkel nyert  $v_0 = 3.5 \text{ eV}\text{\AA}$ ,  $\lambda = 150 \text{ eV}\text{\AA}^3$ ,  $\alpha = 21 \text{ \AA}^2$  és  $\gamma = -19.5 \text{ eV}\text{\AA}^2$  paraméterekkel számolva. A kék pontok és a piros keresztok a [26] publikációból kiolvasott mérési eredményeket reprezentálják.



(Sajnos a mérési adatokat nem sikerült megszereznünk, ezért az illesztéseket a számítógép képernyőjén áttetszővé tett, [26]-ben szereplő 1. c) és 4. b) ábrák felhasználásával végeztük el.) A nagyszámú illesztési paraméter ellenére a három görbére történő egyidejű illesztés a paramétereket a feljebb ismertetett értékek köré korlátozza.

### 3.3. A fejezet összefoglalása

A fejezet elején áttekintettem a grafénon végzett fotoemissziós mérések eredményeit. A fotoelektronok  $K$  pont környéki intenzitás-eloszlására kétfogású szimmetria jellemző, ami a grafén  $A$  és  $B$  alrácsainak interferenciájával magyarázható. Az intenzitás-eloszlás számolására a (3.15) egyenlettel egy általánosan alkalmazható összefüggést adtam meg, mely a grafén Hamilton-operátorában figyelembe vett kölcsönhatásoktól függetlenül nagyon könnyen kiértékelhető.

A fotoemissziós mérési módszer spinfelbontású változatát a spin-pálya kölcsönhatás vizsgálatára is alkalmazták grafénben. Ezért áttekintettem az irodalomban fellelhető, grafénre jellemző belső és külső spin-pálya kölcsönhatások fizikai modelljeit. A Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás anizotróp jellegének tanulmányozásához a TB modellből egy hosszúhullámú,  $K$  pont környékén érvényes effektív Hamilton-operátort vezettem le, és a Brillouin-zóna magas szimmetriájú metszeteiben a spektrum spin-felhasadását vizsgáltam. Megmutattam, hogy a spin-polarizációban csupán magasabb rendekben érvényesül a diszperzióra jellemző háromfogású szimmetria. Eredményeinkről [119] publikációmban számoltunk be.

Grafén/hordozófelület heteroszerkezetekre jellemző, hogy a grafén  $\pi$  elektronjainak spektrumában az ideális esettel ellentétben tiltott sávzélesség mérhető a Dirac-pontokban. A tiltott sávzélesség eredetét ezekben a rendszerekben nehéz megállapítani. Munkám során megmutattam, hogy az  $A$  és  $B$  alrácsok közti aszimmetria nemcsak a kvázirészecskék spektrumának tiltott sávzélességben nyilvánul meg, hanem a spin-pálya kölcsönhatás közvetítésével a grafén síkjára merőleges irányú spin-polarizációt is létrehoz. Az effektus kiváltképp érdekes lehet olyan nagy alrács-aszimmetriával és spin-pálya kölcsönhatással rendelkező rendszerekben, mint például a szilícén. A fotoelektronok spin-polarizációja azonban – az alrács-interferencia következtében – lényegesen különbözik a Bloch-elektronok spin-polarizációjától, gyors változását a sötét folyosó merőleges metszeteiben sorfejtésekkel vizsgáltam. Az alrács-aszimmetria okozta merőleges spin-polarizáció a sötét folyosóra és környékére jellemző. A spin-polarizáció merőleges komponensének mérése tehát segítséget nyújthat a tiltott sávzélesség eredetének felderítésében. A témához kapcsolódó eredményeinkről részletesebben [122] publikációmban számoltunk be.

A fejezet végén a háromdimenziós topologikus szigetelőkön végzett fotoemissziós méréseket

tekintetem át, és részletesen bemutattam a  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály felületi állapotaira vonatkozó eredményeket. Megmutattam, hogy a mérési eredményekkel való jobb egyezés céljából olyan tagok is szükségesek a Hamilton-operátorban, melyeket az irodalomban többnyire elhanyagolnak. A saját illesztéséből származó paraméterekkel lényegesen jobb egyezést találtunk a felületi állapotok spektrumának  $\Gamma K$  és  $\Gamma M$  irányában mért metszeteivel és az állapotsűrűséggel.

## 4. fejezet

# Pásztázó alagútmikroszkópos mérések modellezése

A fotoemisszió mellett az STM mérési technikákkal is sok információt gyűjthetünk az elemi gerjesztések tulajdonságairól. Az ARPES/SARPES technikával szemben az STM módszerrel a minta extra töltéshordozók adalékolása nélkül is vizsgálhatjuk a Fermi-energia feletti spektrumtartományt is. A felületi pont- vagy vonalhibák körül kialakult állapotssűrűség-hullámok lecsengése és hullámhossza a Dirac-elektronok spektrumának egyéni tulajdonságaival magyarázhatóak. Az 1.2. szakaszban ismertetett módon a differenciális vezetőképesség mérésével a valós térbeli lokális állapotssűrűséget lehet feltérképezni az energia függvényében.

$\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  ( $x = 0.08$ ) kristály felületén az Sb atomok rendezetlen eloszlásának tulajdonították az állapotssűrűség-hullámokat [129]. Az Sb atomok, mint pontszennyezők körül kialakult állóhullámokat az atomok szórási állapotainak interferenciájával magyarázták. A valós térbeli állapotssűrűség-hullámok kétdimenziós Fourier-transzformáltja alkalmas az oszcillációkban szereplő domináns hullámszámok meghatározására. A domináns szerepet a  $k$ -térbeli legmagasabb lokális állapotssűrűségű pontok közötti szórásoknak tulajdonították egy adott energiájú metszetben. Állapotssűrűség-hullámokat a lényegesen kevesebb szerkezeti hibát tartalmazó második generációs topologikus szigetelőkön (2GTI) is észleltek. Az epitaxiálisan növesztett  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  kristály felületén Co atomok körül [130], míg  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály felületén Ag atomok körül [25] figyeltek meg anizotróp állapotssűrűség-hullámokat. A növesztett kristályokra ezen felül jellemző, hogy felületükön háromszög alakú rácshibák keletkeznek (például Se vakanciák helyén).  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  kristály felületén a háromszög-hibák közelében rezonanciákat figyeltek meg a lokális állapotssűrűségben [131]. A rezonanciákat a háromszög-hibák alacsony energiás kötött állapotaival magyarázták [132]. Az anizotrópia mindkét esetben a kristályrács hatszöges szimmetriájára emlékeztette

a szerzőket, az állapotsűrűség-hullámok jellemzőit a felületi állapotok anizotróp diszperziójával magyarázták.

Egyrétegű és kétrétegű grafén felületeken szintén észleltek pontszennyezők körül kialakuló állapotsűrűség-hullámokat [133, 134, 135, 136]. A mérések kétrétegű grafén esetében két eltérő skálájú oszcilláció szuperpozícióját mutatták ki [133, 134]. A rövid hullámhosszú komponensek a  $K-K'$  kúpok közötti szórási folyamatokkal magyarázhatóak, míg a hosszú hullámúak az egy Dirac-kúpon belüli állapotok interferenciájának tudhatóak be. Kétrétegű grafénben az elméleti számolások mindkét típusú oszcillációnak  $1/r$  lecsengést tulajdonítottak [137], ahol  $r$  a pontszennyezőtől mért távolság. Markánsan különböző a helyzet egyrétegű grafén esetében, ahol a Dirac-kúpon belüli  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$  szórási folyamat nem megengedett olyan szórócentrumok esetében, melyek a pszeudospint nem billentik át<sup>1</sup>. Ennek köszönhetően egyrétegű grafénben a Dirac-kúpon belüli szórások okozta állapotsűrűség-hullámok gyorsabb,  $1/r^2$  lecsengésű, míg a  $K-K'$  kúpok közötti átszórások továbbra is rövidhullámú,  $1/r$ -es járulékhöz vezetnek az oszcillációban [137, 138, 139]. A mérésekben azonban a hosszúhullámú komponens nem sikerült kimutatni [134], hiányát a gyors lecsengésnek tulajdonították. Fontos azonban megemlíteni, hogy Bácsi Ádám és Virostek Attila munkája alapján az  $A$  és  $B$  alrácsok mindegyikén a Dirac-kúpon belüli szórások ellentétes fázisú,  $1/r$ -es lecsengésű állapotsűrűség-hullámokat eredményeznek [139]. A két alrács oszcillációja, az ellenkező előjel miatt, vezető rendben kioltja egymást, azonban az elemi cella méreténél finomabb STM felbontás mellett a Dirac-kúpon belüli szórások járuléka is detektálható lenne az állapotsűrűség-hullámokban.

Pontszennyezők mellett egydimenziós vonalhibák mentén is felfedeztek állapotsűrűség-hullámokat mind grafén, mind topologikus szigetelők felületén. Többretegű grafén esetében a vonalhiba egy természetes megvalósulása, hogy a felső grafén réteg véget ér, miközben az alatta húzódó grafén réteg tovább folytatódik. A fentiekben említett hosszúhullámú járulékot az állapotsűrűség-hullámokban  $\text{SiO}_2$  hordozófelületen létrehozott, egyrétegű-kétrétegű grafén átmenet STM vizsgálata során fedeztek fel [140]. Az egyrétegű grafén tartományában a hosszú hullámú oszcillációk  $y^{-3/2}$  lecsengést mutattak, ahol  $y$  a vonalhibától mért távolság.

A 2GTI-k esetében a vonalhiba a felület olyan morfológiai hibáját jelenti, ahol egy vagy több QL réteggel ugrásszerűen emelkedik a felszín [26, 143]. Epitaxiális növesztés során jellemzően mintha építőkockákból (QL „kockákból”) épülne fel fokozatosan a kristály, azaz nem alakul ki olyan felület mely az öt atomréteg kialakulásának szempontjából „befejezetlen” lenne. (A QL kocka a  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristályrácsát alkotó ötrétegű elemi építőegységet jelenti, ahogy a 2.8.(a) ábra is szemlélteti.) Az olvasztótégelyekben készített mintákra hasonlóan jellemző, hogy a QL rétegek

<sup>1</sup>A  $\mathbf{k}$  és  $-\mathbf{k}$  impulzusú állapotok pszeudospinjeinek átfedése zérus.

gyengébb Van der Waals típusú kötése miatt szintén két QL réteg között alakul ki a törésfelület. Ennek alapján egy lépcső nagysága a 2GTI-k felületén a QL rétegek egész számú többszörösével egyezik meg. Legelterjedtebb az egy QL rétegni lépcsőugrás a Brillouin-zóna  $\Gamma K$  irányával párhuzamos orientációval. Az állapotsűrűség-hullámok hullámhosszának vizsgálata mellett a lecsengési exponensekben átmenetet fedeztek fel az alacsonyenergiás  $y^{-3/2}$  és a nagyenergiás  $y^{-1/2}$  lecsengések között, ahol  $y$  a vonalhibától mért távolság [143]. Az állapotsűrűség-hullámok mellett a mérésekben a vonalhibára lokalizált kötött állapotokat is azonosítottak [144]. A vonalhibák oldalain létrejövő állapotsűrűség-hullámokkal részletesebben a soron következő 4.1.2. és 4.2. szakaszokban foglalkozunk.

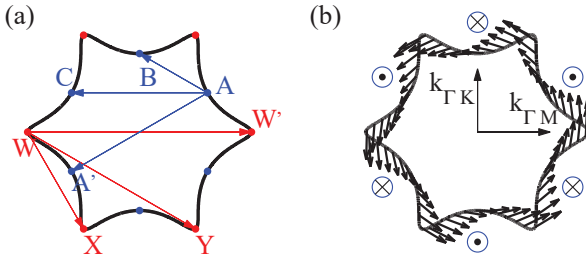
## 4.1. Állapotsűrűség-hullámok elméleteinek áttekintése

A következő két szakaszban a pont- és vonalhibák által indukált állapotsűrűség-hullámok vizsgálatának főbb elméleti vonatkozásait tekintem át. Bár az ismertetett elvek grafénra is alkalmazhatóak, a hangsúlyt a topologikus szigetelőkön végzett vizsgálatokra helyezem. Ennek oka, hogy a 4.2. szakaszban a területen elért saját eredményeink bemutatásához célszerű a topologikus szigetelőkön elért főbb eredmények áttekintése.

### 4.1.1. Pontszennyezők által indukált állóhullámok a lokális állapotsűrűségben

A topologikus szigetelők esetében alapvető jelentőséggel bír, hogy az állapotsűrűség-hullámokat kiváltó pontszennyező mágneses, vagy nemmágneses jellegű. Nemmágneses szennyezők az elektronállapotok spinjét nem billentik át, ezért ilyen esetben az ellentétes spinű,  $\mathbf{k}$  és  $-\mathbf{k}$  hullámszámokkal jellemzett állapotok között nem jöhet létre szórás. Az elektronállapotok csakis mágneses szórócentrumok hatására szóródhatnak át időtükrözött párjukba.

A mágneses és nemmágneses pontszerű szennyezők lokális állapotsűrűsége gyakorolt hatását függetlenül két kutatócsoport is vizsgálta T-mátrix formalizmussal [145, 146]. Az izotróp Dirac-kúphoz képest a magasabb energiájú, hatszögösen torzult spektrum energiatarományában az állapotsűrűség-hullámokra lényegesen sokszínűbb viselkedés jellemző. Az anizotróp energiakontúrok pontjai között több szórási pár is adhat meghatározó járulékot az oszcillációkban. A numerikus számolások egybehangzóan az energiakontúr minimális és maximális görbületű pontjai közötti szórási folyamatok szerepét emelték ki (lásd a 4.1.(a) ábrát). Az egyes szórási folyamatok közötti arányokra nemmágneses szennyező esetében első közelítésben az állapotok



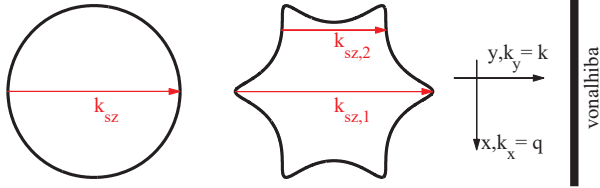
4.1. ábra. (a) A domináns szórási hullámhosszak a pontszennyező körül megvalósuló állapotsűrűség-hullámokban. A piros/kék pontok a maximális/minimális görbületű pontokat jelölik az energiaköntúrón. (b) Spineloszlás egy energiaköntúrón. A vektorok a spin-polarizáció  $x - y$  síkbeli vetületét, míg a  $\otimes$  és  $\odot$  jelek a spin-polarizáció befele és kifelé álló  $z$  komponensét jelölik.

spin-átfedéséből következtethetünk. Az időtükrözött pontok közötti szórási folyamatoktól ( $AA'$ ,  $WW'$  a 4.1.(a) ábrán) nemmágneses pontszennyező esetében eltekinthetünk. A legnagyobb szórási valószínűségeket a 4.1.(a) ábrán szemléltetett  $WX$  és  $AC$  pontok közötti szórásoknál várjuk [145]. (Az elektronállapotok spineloszlását a 4.1.(b) ábra szemlélteti.) Ezek a szórások  $\Gamma M$  irányú szórási vektorhoz tartoznak, ami megfelel a  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  és  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  kristályokon végzett FT-STM<sup>2</sup> mérési eredményeknek [25, 130]. Az 1.2.3 szakasz 1.5. ábrája  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristályon végzett FT-STM mérési eredményét szemlélteti. Az állóhullámokat ebben az esetben a hármassával csoportosuló, egy-egy háromszög csúcsiban elhelyezkedő ezüst atomok, ún. *trimerek* indukálták. Az állapotsűrűség-hullámok Fourier-transzformáltja a kristályrácsnak megfelelő hatszöges szimmetriát mutatja [25].

A numerikus eredmények alaposabb vizsgálata rámutat, hogy a  $\Gamma M$  és  $\Gamma K$  irányú (ez utóbbi az  $AB$ , vagy  $WY$  pontok közötti szórásoknak felel meg) szórások relatív járuléka az állóhullámokban erősen függ a rendszer fizikai paramétereitől. Alacsonyabb energián a  $\Gamma K$  irányú szórási vektorokkal jellemzett folyamatok válhatnak dominánssá [146]. A  $\Gamma K$  irányú szórási vektorok hiányára a mérési eredményekben részben magyarázat lehet, hogy a mérések olyan energiatartományban történtek, ahol a felületi állapotok spektruma hibridizálódik a tömbi állapotokkal a  $\Gamma M$  irányban, és ennek hatására nem valósulnak meg a  $\Gamma K$  irányú domináns szórások [146].

Mágneses szennyezők esetében fontossá válnak az időtükrözött párok közötti szórások is. A

<sup>2</sup>Az FT-STM leírását lásd az 1.2.3 szakaszban.



4.2. ábra. Energiakontúrok az alacsonyenergiás izotróp (bal) és a magasenergiás hatszögesen torzult energiatartományban (jobb). A függőleges fekete vonal a vonalhiba orientációját szemlélteti az energiakontúrokhoz képest. A  $k_{sz}$ ,  $k_{sz,1}$  és  $k_{sz,2}$  szórási hullámszámok az aszimptotikus viselkedést meghatározó hullámszámokat jelölik. A  $k_x = q$  hullámszám a  $\Gamma K$  irányba, a  $k_y = k$  hullámszám a  $\Gamma M$  irányba mutat.

szennyező mágneses momentuma ezen felül további nem triviális anizotrópiát indukál az állóhullámokban [146].

#### 4.1.2. Állapotsűrűség-hullámok aszimptotikus viselkedése vonalhibák mentén

A vonalhibák mentén létrejött állapotsűrűség-hullámok aszimptotikus leírására a [141] és [142] publikációkban ismertetett általános elméletet tekintem át. A 4.2. ábra két energiakontúrt és a vonalhiba elhelyezkedését szemlélteti. A vonalhibáról csupán annyit teszünk fel, hogy nem sérti a rendszer időtükrözési és eltolási invarianciáját. Az eltolási invariancia következménye, hogy a vonalhibával párhuzamos  $q$  hullámszám-komponens állandó marad a szórási folyamatban. A lokális állapotsűrűséget a vonalhiba (bal és jobb) oldalain a  $\psi_{B/J}(\mathbf{k}, y)e^{iqx}$  szórási állapotok felösszegzésével kaphatjuk meg adott  $E$  energia mellett:

$$\rho(E, y) = \sum_{L=\{B,J\}} \frac{1}{(2\pi)^2} \left[ \int d\mathbf{k} |\psi^{(L)}(\mathbf{k}, y)|^2 \delta(E - \varepsilon^{(L)}(\mathbf{k})) \right], \quad (4.1)$$

ahol  $\varepsilon^{(B/J)}(\mathbf{k})$  a kvázirészecskék spektruma a vonalhiba bal/jobbról,  $\mathbf{k} = (k, q)$  pedig a vonalhibán szóródó, bejövő állapot hullámszámát jelöli. A  $\psi^{(B/J)}(\mathbf{k}, y)$  hullámfüggvények között különbséget teszünk aszerint hogy balról (B) vagy jobbról (J) bejövő állapot szórásához tartozik-e az adott hullámfüggvény. A balról bejövő állapotok szórási hullámfüggvényét egy beeső és egy reflektált elektronállapot szuperpozíciójával közelíthetjük a vonalhiba bal oldalán, a jobb oldalon pedig egy transzmittált elektronállapottal adhatjuk meg (általános esetben figyelembe kellene venni a lecsengő evaneszcens állapotokat is, azonban feltesszük, hogy az aszimptotikus

tartományban ezek már lecsengenek):

$$\psi^{(B)}(\mathbf{k}, y) = \begin{cases} \chi^{(B)}(k, q)e^{iky} + r(k, q)\chi^{(B)}(k_r, q)e^{ik_r y} & , \text{ ha } y < 0, \\ t(k, q)\chi^{(J)}(k_r, q)e^{ik_r y} & , \text{ ha } y > 0, \end{cases} \quad (4.2)$$

ahol  $k$  a bejövő,  $k_r$  a reflektált és  $k_r$  a transzmittált állapotok vonalhibára merőleges hullámszám-komponensét jelöli, melyek kielégítik az  $\varepsilon^{(B)}(k, q) = \varepsilon^{(B)}(k_r, q) = \varepsilon^{(J)}(k_r, q)$  összefüggést;  $r(k, q)$  és  $t(k, q)$  a reflexiós és transzmissziós együtthatók,  $\chi^{(B)}(k, q)$  és  $\chi^{(J)}(k, q)$  pedig a Schrödinger-egyenletet kielégítő spinor amplitúdók a vonalhiba bal és jobb oldalán (legegyszerűbb esetben skalárok). A vonalhiba jobb oldalán bejövő elektronállapot szórási hullámfüggvénye analóg módon felírható. A lokális állapotsűrűséget ezzel a vonalhiba bal oldalán a

$$\rho(E, y < 0) = \rho_0(E) + 2 \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \operatorname{Re} \left( r(k, q) \chi^{(B)}(k, q)^\dagger \chi^{(B)}(k_r, q) e^{ik_{sz}y} \right) \delta(E - \varepsilon^{(B)}(\mathbf{k})) \quad (4.3)$$

alakban írhatjuk, ahol  $\rho_0(E)$  a helyfüggetlen része az állapotsűrűségnek, mely tartalmazza a jobb-oldalról transzmittált elektronok járulékat is,  $k_{sz} = k_r - k$  pedig a szórási hullámszám. A (4.3) egyenletben szereplő integrál nagyszámú különböző hullámszámú oszcilláció keverékét állítja elő, melyek nagyrészt kiátlagolják egymást. Dominánssá válhatnak azonban azok a  $k_{sz}$  szórási hullámszámok, melyek az energiakontúr párhuzamosan futó részeit kötik össze<sup>3</sup> (lásd a 4.2. ábrán berajzolt szórási vektorokat). Átírva ugyanis a  $\mathbf{k}$  szerinti kétdimenziós térfogati integrált a vonalhibával párhuzamos  $q$  hullámszám-komponens szerinti integrálra:

$$\delta\rho \sim \int dq \frac{\operatorname{Re} \left( r(k, q) \chi^{(B)}(k, q)^\dagger \chi^{(B)}(k_r, q) e^{ik_{sz}y} \right)}{|v_\perp^{(B)}(q)|}, \quad (4.4)$$

ahol:

$$v_\perp^{(B)}(q) = \frac{\partial \varepsilon^{(B)}(k, q)}{\partial q} \Big|_{\varepsilon^{(B)}(k, q) = E} \quad (4.5)$$

a csoportsebesség vonalhibára merőleges komponense, és a  $k = k(q)$ ,  $k_r = k_r(q)$  vonalhibára merőleges hullámszámokra teljesül az  $E = \varepsilon^{(B)}(k, q) = \varepsilon^{(B)}(k_r, q)$  összefüggés. Az integrálban azok a  $k_{sz}$  hullámszámok dominálnak melyek a párhuzamos hullámszám  $\delta q$  elsőrendű variációira nézve stacionáriusok, azaz  $\frac{dk_{sz}}{dq} = 0$ . Ezek közül az extrémális pontok körül fejtsük sorba vezető rendig a (4.4) egyenletben szereplő tagokat:

$$\frac{1}{|v_\perp^{(B)}(q)|} \approx \frac{\delta q^\alpha}{|v_{\perp,0}^{(B)}|}, \quad (4.6)$$

$$r(k, q) \approx r_0 \delta q^\beta, \quad (4.7)$$

$$\chi^{(B)}(k, q)^\dagger \chi^{(B)}(k_r, q) \approx \Omega_0 \delta q^\gamma, \quad (4.8)$$

<sup>3</sup>Az irodalomban ezeket *nesting vector*-nak nevezik.



ahol  $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{Z}$  kitevők a hozzájuk tartozó mennyiségek Taylor-sorainak legkisebb nem eltűnő rendjét jelölik. Az előzőekhez képest a vezető rendű tagon túlmenve a  $k_{sz}$  hullámszámot is sorba fejtjük az extrémális pont körül:

$$k_{sz} \approx \Delta_0 + \Delta_1 \delta q^\eta. \quad (4.9)$$

Az állapotsűrűség-hullámok fő járuléka az extrémális pontok körüli kis  $\Delta q$  tartományból adódik, ezért ebben a tartományban tekinthetjük integrálási változónak a  $q$  párhuzamos hullámszám  $\delta q$  variációját. Az integrálási változót ezután  $\delta q$ -ról  $\mu = \delta q^\eta y$ -re cserélve a (4.4) egyenletben:

$$\delta \rho \sim \sum_{\text{pontok}}^{\text{szélsőérték}} y^{-\frac{\alpha+\beta+\gamma+1}{\eta}} \int \frac{d\mu}{\mu} \mu^{\frac{\alpha+\beta+\gamma+1}{\eta}} \operatorname{Re} \left( \frac{r_0 \Omega_0}{|y_{\perp,0}^{(\beta)}|} e^{i\Delta_0 y + \Delta_1 \mu} \right) \sim \sum_{\text{pontok}}^{\text{szélsőérték}} \frac{\operatorname{abs}(r_0 \Omega_0)}{|y_{\perp,0}^{(\beta)}|} \sin(\Delta_0 y + \varphi) y^{-\frac{\alpha+\beta+\gamma+1}{\eta}}, \quad (4.10)$$

ahol  $\varphi$  a  $r_0 \Omega_0$  komplex szám fázisa. Ez az aszimptotikus viselkedés nagy  $y \gg (\Delta q)^{-1}$ -ra érvényes, ahol  $\Delta q$  a (4.8) és (4.9) sorfejtések érvényességi tartománya. Az oszcilláció lecsengése az  $n = \frac{\alpha+\beta+\gamma+1}{\eta}$  kitevővel jellemezhető, mely feltételezve néhány fizikai tulajdonságot, egyszerűen meghatározható különböző esetekben.

**Izotróp Dirac-kúp** esetében a szórási vektorok egyedüli szélsőértéke a kör alakú energia-kontúr átmérőjébe esik (lásd a 4.2. ábrán bejelölt  $k_{sz}$  szórási vektort). Ekkor a (4.9) egyenletben szereplő  $\Delta_0$  a kör átmérőjével egyenlő, az első nem eltűnő rend pedig  $\eta = 2$ . Ennek a pontnak a közelében a csoportsebesség merőleges komponense egy véges érték körül folytonosan változik, ezért a (4.8) sorfejtésekben  $\alpha = 0$ . A  $k_{sz}$  szórási vektor időtükrözött állapotokat köt össze, melyeknek skalárszorzata nulla. A (4.8) sorfejtésekben ezért a spinor amplitúdók skalárszorzatának vezető rendjének kitevője  $\gamma = 1$ . A reflexiók együtthatóról hasonlóan elmondható, hogy a Klein-paradoxon<sup>4</sup> következtében a szórási hullámszám extrémális pontjában folytonosan előjelet vált. Vezető rendje tehát szintén az  $\beta = 1$  kitevőhöz tartozik. Az állapotsűrűség-hullám ekkor az

$$\delta \rho \sim \sin(\Delta_0 y + \varphi) y^{-\frac{3}{2}} \quad (4.11)$$

alakban írható. A lecsengés kitevője ebben az esetben tehát  $n = 3/2$ . Ez lényeges különbséget jelent a fémek felületén mért  $1/2$  kitevőjű lecsengéshez képest [22]. A különbség oka, hogy hagyományos fémek felületén az elektronok nem királisak, ezért az időtükrözött párok közti szórás is megengedett folyamat. Ekkor  $\gamma = \beta = 0$ , ami az  $n = 1/2$  lecsengési kitevőhöz vezet.

**Hatszögesen torzult energiakontúrok** esetében több stacionárius szórási hullámszám is megjelenik. A 4.2. ábrán szemléltetett esetben  $k_{sz,1}$  és  $k_{sz,2}$  jelöli a szórási hullámszámok szélsőértékeit. A  $k_{sz,1}$  hullámszámú oszcilláció esetében az előzőekhez képest azonos gondolatmenetet követve,  $n = 3/2$  lecsengési exponenshez jutunk. A másik,  $k_{sz,2}$  szórási hullámszám esetében azonban mind a reflexió, mind a spinor hullámfüggvények skalárszorzata véges, ezért

<sup>4</sup>Az állapot nem tud reflektálódni az időtükrözött párjába, ezért ebben a pontban a reflexiók együttható is nulla.

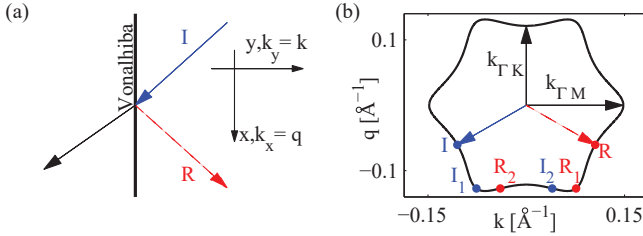
$\gamma = \beta = 0$  adódik. Ennek következtében a  $k_{sz,2}$  hullámszámú oszcilláció lecsengése  $n = 1/2$  exponenssel írható le. Fontos azonban kihangsúlyozni, hogy erősen torzult energiakontúr mellett a (4.8) és (4.9) sorfejtések sokkal kisebb  $\Delta q_1$  tartományban érvényesek  $k_{sz,1}$  körül, mint amekkora  $\Delta q_2$  tartományban a  $k_{sz,2}$  hullámszám körül. Mivel az aszimptotikus viselkedés nagyságrendileg  $y \gg (\Delta q)^{-1}$  tartományban érvényesül, arra a következtetésre jutunk, hogy a  $k_{sz,2}$  hullámszámú oszcilláció már a vonalhibától mért kisebb távolságban is megfigyelhető, mint a  $k_{sz,1}$  hullámszámú oszcilláció. Ezen felül a  $k_{sz,1}$  hullámszámú oszcilláció gyorsabban is cseng le párjánál, ezért feltehető, hogy a mérésekben vizsgált térrészben csupán a  $k_{sz,2}$  hullámszámú oszcilláció figyelhető meg. A nagy energián végzett mérésekben valóban egy komponensből álló,  $n = 1/2$  lecsengésű oszcillációt figyeltek meg [143].

Az alacsony és nagyenergiás oszcillációk lecsengési exponenseiben tehát egy átmenet valósul meg  $n = 3/2$  és  $n = 1/2$  között, amit  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály felületén sikerült is méréssel igazolni [143].

## 4.2. Vonalhíák mentén létrejött állapotssűrűség-hullámok leírása $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ felületén

Az alábbi számolások során a mérésekben azonosított  $\Gamma\text{K}$  irányban húzóó vonalhiba mentén kialakuló állapotssűrűség-hullámok alternatív leírását adom meg. Munkám motivációja, hogy bár a 4.1.2. szakaszban ismertetet elmélet megjósolja az állóhullámok lecsengési tulajdonságainak mérésekben is megfigyelt [143] átmenetét az alacsony és nagy energiához tartozó oszcillációk között, az elmélet mégsem illeszkedik a mérésekben megfigyelt eredményekhez. Az elmélet az oszcillációk aszimptotikus viselkedését a reciprok térbeli energiakontúr párhuzamosan futó részei között létrejövő szórási folyamatokhoz köti, azonban az STM technikával megmért hullámszámok mégsem ezt a magyarázatot erősítik meg [26]. Az elméleti jóslat és mérés közti különbségek lehetséges magyarázata, hogy a kísérletek során a vonalhibához képest feltehetőleg nem elég távol végezték a méréseket ahhoz, hogy az aszimptotikus viselkedés érvényesüljön. A vonalhibához közelebb ugyanis a szórt elektronállapotok interferenciaképében még a gyorsabb lecsengésű komponensek dominálhatnak, melyek az aszimptotikus viselkedésből már eltűnnek.

[147] gondolatmenetét követve a vonalhiba hatását egy lépcsőpotenciállal modelleztem. Ez az egyszerű potenciálprofil, hasonlóan a leírni kívánt fizikai rendszerhez, eltolás-invariáns a potenciállépcső mentén. A vonalhiba eltolási invarianciáját sértő egyenetlenségektől a modell felállítása során eltekintünk, a későbbiek során azonban megmutatjuk, hogy ezek eredményeinket nem befolyásolják. A modellünkben alkalmazott Hamilton-operátor tehát a  $\hat{H}^{Tl,V}(\mathbf{k}) = \hat{H}^{Tl}(\mathbf{k}) + V(y)$  alakban írható, ahol  $\hat{H}^{Tl}(\mathbf{k})$  a (2.50) egyenlettel adott Hamilton-operátor és



4.3. ábra. (a) A vonalhiba  $y > 0$  oldalán bejövő állapot (folytonos kék vektor) részlegesen reflektálódik (szaggatott piros vektor) és transzmittálódik (folytonos fekete vektor). Az ábra szemlélteti az  $x, y$  koordináták és  $q, k$  hullámszámok irányát meghatározó koordináta rendszert is. (b) Hatszögösen torzult energiakontúr  $E = 330$  meV energiával a Dirac-pont felett. A kék és piros pontok a vonalhibára bejövő (I) és reflektált (R) állapotokat jelölik az (a) ábrának megfelelő geometriában. Az ábra fizikai paraméterei:  $v_0 = 3.5$  eVÅ,  $\lambda = 150$  eVÅ<sup>3</sup>,  $\alpha = 21$  Å<sup>2</sup> és  $\gamma = -19.5$  eVÅ<sup>2</sup>.

$V(y) = -V_0\Theta(-y)$  a lépcsőpotenciál ( $V_0 > 0$  és  $\Theta(\dots)$  a Heaviside-függvény), valamint az  $x$  és  $y$  koordináták irányát a (4.3). ábra szemlélteti. A lokális állapotsűrűség leírásához megoldom a  $V(y)$  potenciál szórásproblémáját. A lépcsőpotenciál mindkét oldalán síkhullámokkal adhatjuk meg az elektronállapotokat. Például a vonalhiba  $y > 0$  oldalán a  $k \equiv -k_y$  és  $q \equiv k_x$  hullámszámokkal jellemzett (lásd a 4.3. ábrát),  $E$  energiájú és a  $\hat{H}^{TI,V}(k, q)$  Hamilton-operátor sajátvektoraként meghatározott  $\chi_{k,q}$  spinor hullámfüggvényű állapot:  $\Phi_{k,q}(y)e^{iqx} = e^{iqx}e^{iky}\chi_{k,q}$ . Rugalmas szórás feltételezve, az  $E$  energia megmarad a szórási folyamat során. Hasonlóan a  $q$  hullámszám is a szórási folyamat megmaradó mennyisége, mivel a potenciál eltolás-invariáns  $x$  mentén. A  $q$  hullámszám értéke meghatározza a propagáló elektronállapotok számát adott energia mellett. A 4.3. ábrán például két (I és R) vagy négy ( $I_1, I_2, R_1, R_2$ ) propagáló állapotról beszélhetünk  $q$  értékének függvényében. Az I jelölés a vonalhiba  $y > 0$  oldalán a beeső, az R jelölés pedig ugyanezen az oldalon a reflektált állapotokra vonatkozik. Összességében azonban, tekintettel arra, hogy az  $E = E_+^{TI}(k_r, q)$  hatodfokú egyenletnek (az  $E_+^{TI}(k_r, q)$  spektrum az  $y > 0$  oldalon a (2.51) egyenlettel adott, az  $y < 0$  oldalon pedig ehhez képest el van tolvá  $-V_0$  értékkel) hat komplex  $k_{r,1}, \dots, k_{r,6}$  megoldása létezik adott  $E$  és  $q$  mellett, egy bejövő állapot – energiától függetlenül – három reflektált állapot szuperpozíciójába szóródik. Három  $k_{r,p}$  megoldás a hat közül ugyanis az  $y \rightarrow \infty$  irányban propagáló és lecsengő állapotokat adja meg. Ezeket a  $\Phi_{k_{r,p},q}(y) = e^{ik_{r,p}y}\chi(k_{r,p}, q)$  ( $p = 1, 2, 3$ ) hullámfüggvényeket figyelembe kell venni a

szórásprobléma megoldása során. (A maradék három megoldás a vonalhiba irányába propagáló vagy lecsengő állapotokhoz tartozik.) Az evanescens állapotok fontos szerepet játszanak minden szórásprobléma unitér szórás mátrixszal való megoldásában. Példaként említhetjük a [148] publikációban bemutatott  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  és  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  rendszereken végzett transzportszámolásokat is, ahol a szerző egy propagáló elektronállapot mellett egy evanescens állapot figyelembe vételével kapott unitér szórás mátrixot, a  $\Gamma K$  irányban eltolás-invariáns potenciálprofil esetében. Megjegyezzük azonban, hogy az eltolási invariancia irányának tetszőleges megválasztása, vagy a (2.50) Hamilton-operátorban szereplő  $\alpha$  és  $m^*$  paraméterek figyelembe vétele mellett a szórás mátrix csupán két további evanescens állapot figyelembe vételével lenne unitér. A  $k_{r,p}$  hullámszámok és a  $\chi(k_{r,p}, q)$  hullámfüggvények meghatározásának numerikus módszerét az F.2. függelékben ismertetem.

Hasonló megfontolások a lépcsőpotenciál  $y < 0$  oldalán a  $q$  és  $k_{r,p}$  ( $p = 1, 2, 3$ ) hullámszámokkal jellemzett transzmittált elektronállapotokra vezetnek. Ezek alapján a jobb oldalon ( $J$ ) bejövő  $\Phi_{k,q}(y)$  állapot az alábbi alakú szórási hullámfüggvényre vezet:

$$\psi_{k,q}^{(J)}(y) = \begin{cases} \Phi_{k,q}(y) + \sum_{p=1}^3 r_{kq,p} \alpha_{kq,p} \Phi_{k_{r,p},q}(y) & , \text{ ha } y > 0 , \\ \sum_{p=1}^3 t_{kq,p} \beta_{kq,p} \Phi_{k_{t,p},q}(y) & , \text{ ha } y < 0 , \end{cases} \quad (4.12)$$

ahol

$$\alpha_{kq,p} = \begin{cases} \sqrt{\frac{v_{\perp}(k,q)}{v_{\perp}(k_{r,p},q)}} & , \text{ ha } k_{r,p} \in \mathbb{R}, \\ 1 & \text{egyébként,} \end{cases} \quad (4.13)$$

$$\beta_{kq,p} = \begin{cases} \sqrt{\frac{v_{\perp}(k,q)}{v_{\perp}(k_{t,p},q)}} & , \text{ ha } k_{t,p} \in \mathbb{R}, \\ 1 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (4.14)$$

Az egyenletekben az  $r$ -ek és  $t$ -k a reflexiós és transzmissziós amplitúdókat jelölik,  $v_{\perp}(k, q) = \frac{\partial E^{\Gamma}(k,q)}{\partial \hbar k}$  a csoportsebesség  $y$  komponense, az  $\alpha$  és  $\beta$  együtthatók pedig a szórás mátrix unitaritását garantálják. Mivel a komplex  $k_{r,p}$  és  $k_{t,p}$  hullámszámokhoz tartozó evanescens állapotok reflexiós és transzmissziós együtthatói nem szerepelnek a szórási mátrixban, a rájuk vonatkozó  $\alpha$  és  $\beta$  tényezőket tetszés szerint (esetünkben  $\alpha = \beta = 1$  módon) megválaszthatjuk.

A (2.50) egyenlettel adott  $\hat{H}^{\Gamma}(\mathbf{k})$  Hamilton-operátor valós térben harmadrendű differenciál-operátorként hat a Hilbert-téren, ezért az  $y = 0$  határfelületen megköveteljük a (4.12) hullámfüggvény folytonossága mellett az első és második deriváltjainak folytonosságát is. A határfelületre a Schrödinger-egyenlet  $y = 0^-$  és  $y = 0^+$  határok közti integrálása vezetett, ami három egyenletet jelent a hullámfüggvény mindkét komponensére nézve és meghatározza az  $r$  és  $t$  amplitúdók mindegyikét.

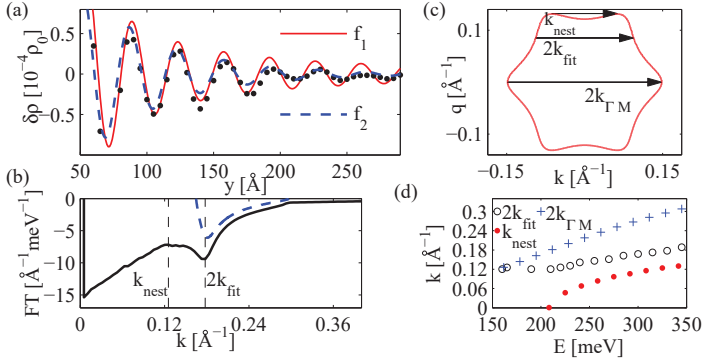
A vonalhiba bal ( $B$ ) oldalán ( $y < 0$ ) bejövő állapothoz tartozó  $\psi_{k,q}^{(B)}(y)$  szórási állapot analóg módon meghatározható. Ezek után az  $E$  energiához tartozó lokális állapotsűrűség az  $y$  pontban az alábbi összefüggéssel határozható meg:

$$\rho(E, y) = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{d=L,B} \int_{\Gamma_E^{(d)}} dk \frac{|\psi_{k,q}^{(d)}(y)|^2}{v(k, q)}, \quad (4.15)$$

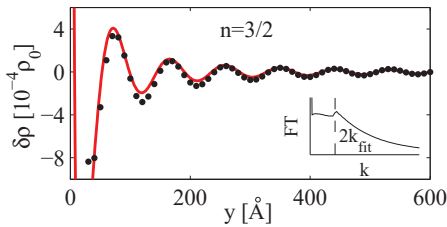
ahol  $\Gamma_E^{(J)}$  ( $\Gamma_E^{(B)}$ ) az  $E$  energiához tartozó kontúrok azon részeit jelölik, melyeken a vonalhiba jobb (bal) oldalán a szennyező felé propagáló állapotok vannak. Megjegyezzük, hogy konkáv energia-kontúrok esetében a  $\Gamma_E^{(L,B)}$  kontúrok nem lesznek összefüggők. (A 4.3.(b) ábrán  $I_1$  és  $I_2$  egy görbeszakaszhoz tartoznak, azonban  $I_2$  már egy külön görbeszakaszon fekszik.) Az energiakontúrok infinitezimális szegmensét  $dk$  jelöli az egyenletben, végül  $v(k, q)$  a  $(k, q)$  állapot csoportsebességének nagysága, ami a (3.60) egyenlethez hasonlóan a Dirac-delta kikutöböléséből adódik. A lokális állapotsűrűséget a szórásprobléma egzakt megoldásainak ismeretében a (4.15) egyenlet segítségével numerikus integrálással határoztam meg.

A vonalhiba egyenetlenségeinek hatását ezen a ponton veszem figyelembe. A fejezet bevezető szakaszában említettem, hogy az STM mérést a vonalhibára merőleges irányban több helyen is elvégzik, majd az eredményeket átlagolják. Nagyon egyszerű szemlélettel fogalmazva a vonalhiba egyenetlensége olyan módon jelenik meg a mérésben, mintha az egyes mérési vonalakhoz különböző orientáltságú vonalhiba tartozna. (Ez természetesen akkor ad jó közelítést, ha az egyenetlenségek karakterisztikus mérete lényegesen nagyobb mint az STM tú átmérője.) A vonalhiba egyenetlenségeit ezért a (4.15) lokális állapotsűrűség  $\Gamma K$  irány körüli  $[-5^\circ, 5^\circ]$  tartományon vett kiátlagolásával vettem figyelembe.

A 4.4.(a) ábra a kiátlagolt lokális állapotsűrűsége vonatkozó eredményt szemlélteti  $E = 330$  meV energia és  $V_0 = 150$  meV potenciálérték mellett. Az állapotsűrűségbeli oszcillációk a  $\delta\rho(x) \equiv \rho(x) - \rho_0$  összefüggéssel adottak (fekete pontok), ahol  $\rho_0$  a vonalhiba nélküli homogén rendszer állapotsűrűsége. A 4.1.2. szakasz mintájára az állapotsűrűség-hullámokra az  $f_1(x, n) = A_1 \sin(2k_{\text{fit}}x + \varphi_1)x^{-n}$  függvényt illesztettem  $n = 3/2$  hatványkitevővel (folytonos piros vonal). A  $3/2$ -es kitevőjű oszcilláció csupán ez első csúcsok erejéig illeszkedik a numerikus adatsorra, miközben az lényegesen gyorsabban cseng le. Az oszcillációk lecsengését Fourier-spektrumuk segítségével tudjuk tanulmányozni. A hatványszerűen csillapodó  $f_1(x, n)$  függvény Fourier-transzformáltja  $F(k, n) \sim \text{sign}(k - 2k_{\text{fit}})(k - 2k_{\text{fit}})^{n-1}$ , ha  $k > 0$ . Az  $n > 1$  kitevővel leírható oszcilláció Fourier-transzformáltja egy csúszda alakú görbére hasonlít (4.5. ábra betét ábrája). Az  $n < 1$  lecsengésű oszcilláció Fourier-transzformáltja pedig egy keskeny (folytonos esetben divergens) csúcs jellemző a  $k = 2k_{\text{fit}}$  helyen (4.7.(a) ábra betét ábrája). A 4.4.(b) ábra folytonos fekete görbéje a 4.4.(a) ábrán szemléltetett állapotsűrűség-hullám szimmetrizált



4.4. ábra. (a) A  $\delta\rho(E, x)$  állapotsűrűség-hullám helyfüggése (fekete pontok)  $E = 330$  meV energián számolva ( $\rho_0 = 628 \text{ meV}^{-1}\mu\text{m}^{-2}$ ), és az adathalmazra illesztett  $f_1$  és  $f_2$  függvények. (b) A  $\delta\rho(E, x)$  oszcilláció Fourier-transzformáltja (folytonos fekete görbe) és a (4.17) egyenlettel adott  $\mathcal{F}_{2k}^\infty$  járuléka a Fourier-spektrumhoz (szaggatott kék görbe). (c) Energiakontúr ugyanennél az energia értéknél, és a fontosabb szórási folyamatokhoz tartozó hullámszámvektorok. (d) Az állapotsűrűség-hullámra illesztett  $2k_{\text{fit}}$  hullámszám az energia függvényében és az energiakontúrok karakterisztikus  $k_{\text{nest}}$  és  $2k_{\Gamma\text{M}}$  hullámszámjai. Az ábra fizikai paraméterei:  $v_0 = 3.5 \text{ eV}\text{Å}$ ,  $\lambda = 150 \text{ eV}\text{Å}^3$ ,  $\alpha = 21 \text{ Å}^2$  és  $\gamma = -19.5 \text{ eV}\text{Å}^2$ .



4.5. ábra. A  $\delta\rho(E, x)$  állapotsűrűség-hullám helyfüggése (fekete pontok)  $E = 100$  meV energián számolva,  $v_0 = 3.5 \text{ eV}\text{Å}$ ,  $\lambda = 150 \text{ eV}\text{Å}^3$ ,  $\alpha = 21 \text{ Å}^2$  és  $\gamma = -19.5 \text{ eV}\text{Å}^2$  fizikai paraméterek mellett. A folytonos piros vonal az adathalmazra illesztett  $n = 3/2$  lecsengési kitevőjű  $f_1$  függvényt ábrázolja. A betétábra a szimmetrizált adatsor Fourier-transzformáltját szemlélteti.

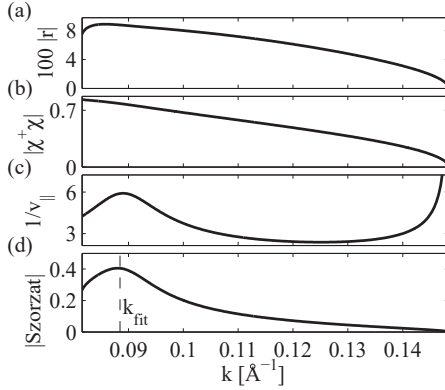
adatsorának Fourier-transzformáltját mutatja,  $k_{fit}$  a numerikus adatokra illesztett oszcilláció hullámszámát jelöli. (A szimmetrizálás eljárását és a numerikus Fourier-transzformáció részleteit az F.4. szakaszban ismertetem.) A Fourier-spektrum a fent említett tulajdonságok egyikével sem rendelkezik, ezért hatványszerűen lecsengő oszcilláció mellett az exponenciális lecsengésű  $f_2(x, L) = A_2 \sin(2k_{fit}x + \varphi_2)e^{-x/L}$  függvényt is illesztettem a 4.4.(a) ábrán szemléltetett numerikus adatokra (szaggatott kék vonal). (Az exponenciálisan lecsengő oszcilláció sima, véges szélességű csúcsra vezet a Fourier-spektrumban).

A  $\delta\rho(x)$  lokális állapotsűrűség-hullámokra vonatkozó numerikus eredményeim az alábbi következtetésekre vezetnek: (i) a 4.4.(a) ábra három görbéje alapján elmondható, hogy az oszcilláció jobban írható le exponenciális, mint hatványszerű lecsengéssel. (ii) Az illesztések az  $E = 330$  meV energiás állapotsűrűség-hullám esetében a  $2k_{fit} \approx 0.178 \text{ \AA}^{-1}$  oszcillációs hullámszámra vezettek. A 4.1.2. szakaszban ismertetett elmélet alapján az állóhullámok aszimptotikus viselkedését az  $E$  energiás kontúr párhuzamosan futó szakaszait összekötő hullámszám határozza meg. Esetünkben a 4.4.(c) ábrán szemléltetett  $k_{nest} = 0.126 \text{ \AA}^{-1}$  és  $2k_{TM} = 0.297 \text{ \AA}^{-1}$  hullámszámvektorok felelnek meg ennek a tulajdonságnak. Miután numerikus eredményeinkhez legjobban illeszkedő  $2k_{fit}$  hullámszám és a lecsengésre jellemző exponenciális ütem lényeges eltérést mutat az aszimptotikus viselkedésekre jellemző paramétereiktől, arra a következtetésre juthatunk, hogy az általunk vizsgált térrészben nem az aszimptotikus viselkedést meghatározó összetevők dominálnak.

Egyszerű számolással megmutatom, hogy (i) a  $2k_{fit}$  oszcillációs hullámszám a csoportsebesség vonalhibával párhuzamos komponensének nem monoton viselkedésével hozható kapcsolatba az energiakontúr mentén. Ezen felül a (ii) kialakuló állapotsűrűség-hullámokat a vonalhiba adott oldalán bejövő és reflektált elektronállapotok interferenciája okozza, az exponenciálisan lecsengő evanescens állapotok hatása az állapotsűrűség-hullámokra nem jelentős. Állításaim bizonyításához tekintsük a bejövő és reflektált propagáló állapotok interferenciájának  $\rho_r(E, y)$  járulékát a lokális állapotsűrűséghez a vonalhiba jobb oldalán ( $y > 0$ ), valamint a (4.15) egyenletbeli  $dk$  mértéket transzformáljuk át a vonalhibára merőleges  $k$  hullámszám szerinti integrálra. Az egyszerűség kedvéért a  $k$  hullámszámok csupán azon tartományát vizsgáljuk, ahol egy propagáló megoldás létezik, azaz  $|k| < k_c$ . Ekkor:

$$\rho_r(E, y) = \frac{1}{2\pi^2\hbar} \int_{-k_M}^{-k_c} dk \frac{(r_{k,q'}\chi_{k,q'}^\dagger\chi_{-k,q'}e^{-i2ky} + c.c.)}{|v_{||}(E, k)|}. \quad (4.16)$$

Az egyenletben  $q' \equiv q'(k, E) > 0$  az  $E = E_+^{TJ}(k, q)$  egyenlet egyedüli valós megoldását jelöli adott  $k$  és  $E$  mellett. Az integrandus az exponenciális faktortól eltekintve a  $\rho_r(x)$  függvény Fourier-transzformáltjával hozható kapcsolatba. A 4.4.(b) ábrán a szaggatott kék vonal



4.6. ábra. (a) A reflexiós amplitúdó abszolút értéke ( $|r| \equiv |r_{k,q'}|$ ), (b) a  $|\chi^\dagger \chi| \equiv |\chi_{k,q'}^\dagger \chi_{-k,q'}|$  skalár szorzat abszolút értéke, (c) a csoportsebesség vonalhibával párhuzamos komponensének inverze ( $10^{-6}$  s/m egységekben), (d) az előző három mennyiség szorzatának abszolút értéke (szintén  $10^{-6}$  s/m) egységekben ábrázolva).

ábrázolja az integrandusból meghatározható Fourier-spektrumot, ami nagyon jól illeszkedik az állapotsűrűség-hullám adatsorából nyert Fourier-spektrumhoz. Az F.4. szakaszban vázolt, (F-16) egyenltre vezető, szimmetrizált numerikus módszer, valamint az (F-9) egyenlettel megadott Fourier-spektrum definíció alapján, a 4.4.(b) ábrán szemléltetett kék szaggatott görbe egyenlete:

$$\mathcal{F}_{2k}^\infty = \frac{1}{2\pi\hbar} \operatorname{Re} \left( \frac{r_{k,q'} \chi_{k,q'}^\dagger \chi_{-k,q'}}{|v_{\parallel}(E, k)|} \right). \quad (4.17)$$

Az állapotsűrűség-hullám meghatározó járuléka tehát valóban a bejövő és reflektált állapotok interferenciájából adódik abban a hullámszám tartományban, ahol csupán egy valós megoldás létezik  $q'$ -re. A  $\rho_r(v)$ -ban szereplő három mennyiség (az  $r_{k,q'}$  reflexió,  $\chi_{k,q'}^\dagger \chi_{-k,q'}$  spinor skalárszorzat és a csoportsebesség vonalhibával párhuzamos  $|v_{\parallel}(k, E)|$  komponensének inverze) abszolút értékét és szorzatukat a 4.6.(a)-(d) ábrák szemléltetik. Míg a 4.6.(a) és (b) ábrák görbéi nem rendelkeznek különösebben jellegzetes tulajdonsággal, a csoportsebesség inverzét ábrázoló görbe jól meghatározott szélsőértéket mutat éppen  $k_{\text{fit}}$  környékén. Következésképpen a három mennyiség szorzatában is szerepelni fog a csoportsebesség  $k$ -függéséből adódó csúcs.

A fenti analízist több energiaérték mellett megismételtem az  $E \in [145 \text{ meV}, 475 \text{ meV}]$  tartományban, hogy összehasonlíthassuk a számolásokból kinyert  $2k_{\text{fit}}$  oszcillációs hullámszámokat a

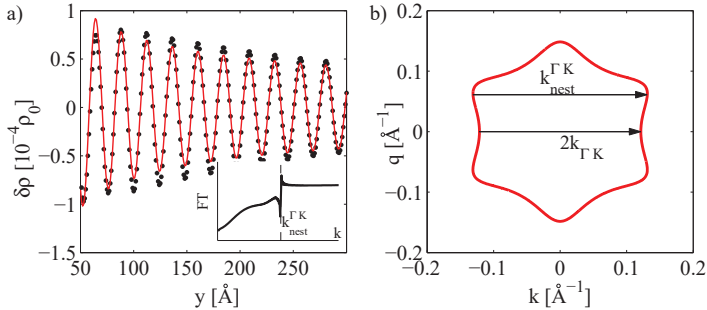


mérési eredményekkel [26]. A 4.4.(d) ábra az illesztéssel meghatározott  $2k_{\text{fit}}$  értékeket ábrázolja az energia függvényében. Alacsony  $E \lesssim 170$  meV energiák esetében – amikor elhanyagolható a spektrum hatszöges torzulása – az oszcillációs hullámszám a  $k_{\text{fit}} \approx k_{\Gamma M}(E)$  görbébe simul, az oszcilláció lecsengését pedig az aszimptotikus viselkedésre is jellemző [143, 141]  $n = 3/2$ -es hatvány írja le (lásd a 4.5 ábrát  $E = 100$  meV energia esetén).

A Dirac-ponthoz képest a 190 meV és 345 meV értékekkel meghatározott tartományban a  $k_{\text{fit}}$  értékek lényegesen különböznek a  $k_{\Gamma M}$  hullámszámtól és nagyszerű egyezést mutatnak a mérési eredményekkel (lásd a 4.b ábrát a [26] publikációban). Meglepő, hogy a  $2k_{\text{fit}}$  hullámszám a spektrum nem triviális párhuzamosan futó részeit összekötő  $k_{\text{nest}}$  hullámszámtól is lényegesen különbözik. A 4.1.2. szakaszban ismertetett, aszimptotikus viselkedést leíró modell jóslatának ellenére megmutatható, hogy (az alkalmazott potenciálprofiltól függetlenül) a  $k_{\text{nest}}$  hullámszámhoz tartozó oszcilláció eltűnik a reflektált és a vonalhiba másik oldaláról transzmittált járulékok egzakot kioltásának folytán. A bizonyítást az F.3. függelékben ismertettem.

A [26] publikáció 4.b ábráján szemléltetett mérési adatok a Dirac-ponttól mérve 345 meV energia körül – modellünk keretein belül megmagyarázhatatlan – éles törést mutatnak a  $k_{\text{fit}}(E)$  görbében. A törés potenciális magyarázata, hogy a Fermi-energia felett a felületi állapotok erősen hibridizálódnak a tömbi vezetési sáv állapotaival, ezért dinamikájuk is nagy mértékben megváltozik. Mivel ebben a tartományban nem rendelkezünk mérési adatokkal a spektrumra és az állapotsűrűsége vonatkozóan, és az általunk meghatározott paraméterek szemlátomást nem alkalmasak ennek az energiatartománynak a leírására, a lokális állapotsűrűsége vonatkozó eredményeink is csak a Fermi-energiáig érvényesek. A Fermi-energia feletti mérési eredmények alapján [143] az állapotsűrűség-hullámok lecsengése az energia növelésével átmenetet mutat az alacsonyabb energiára jellemző  $n = 3/2$  és a nagyenergiás oszcillációk  $n = 1/2$ -es hatványa között. A nagyenergiás energiakontúrok esetében a 4.2 ábrán szemléltetett  $k_{s_{z,2}}$  hullámszámnak tulajdonították a meghatározó szerepet.

Bár a  $\Gamma M$  irányban húzódó vonalhiba mentén mért állapotsűrűség-hullámokról ezidáig még nem számoltak be, az eddigi eredményeinkkel való összevetés szempontjából mégis tanulságos lehet ezzel a lehetőséggel is foglalkozni. A  $\Gamma K$  irányban húzódó vonalhiba esetétől eltérően, a  $\Gamma M$  irányú vonalhibához tartozó konfigurációban találunk a triviálistól ( $k_{\Gamma K}$ ) különböző hullámszámvektort is, mely párhuzamosan futó kontúrvonalon elhelyezkedő bejövő és reflektált állapotokat köt össze  $E = 330$  meV energián (lásd a 4.7.(b) ábrán a  $k_{\text{nest}}^{\Gamma K}$  hullámszámvektort). Megjegyezzük, hogy a  $\Gamma K$  irányban húzódó vonalhiba esetében a stacionárius  $k_{\text{nest}}$  hullámszámvektor két reflektált propagáló állapotot kötött össze. A 4.7.(a) ábra szemlélteti a vonalhiba egyik oldalán létrejött állapotsűrűség-hullámot az előzőekben ismertetett módszerrel számolva. Ha-



4.7. ábra. (a) Állapotsűrűség-hullám a vonalhiba  $\Gamma M$  irányú orientációja esetében (fekete pontok). A piros vonal az adatsorra illesztett  $f_1(x, n = 0.5)$  függvényt szemlélteti. A betétábra a szimmetrizált adatsor Fourier-transzformáltját ábrázolja szingularitással a  $k = k_{nest}^{\Gamma K}$  helyen. (b) A vonalhiba aktuális orientációjához tartozó állandó energiás kontúrvonal  $E = 330$  meV energián. A vonalhiba a  $\Gamma M$  irányban húzódik.

sonlóan a  $\Gamma K$  irányban húzódó vonalhiba esetéhez, ebben az esetben is kiátlagoltam a lokális állapotsűrűséget a  $\Gamma M$  irányhoz képesti  $\pm 5^\circ$ -os szögtartományba eső vonalhiba orientációkra. A számolások során a sáv szerkezet 3.2.2. szakaszban meghatározott paramétereit használtam. Az előző esethez hasonlóan, az időtükrözött párokat összekötő  $k_{\Gamma K}$  hullámszámvektorhoz tartozó oszcilláció komponens elhanyagolható a  $2k_{fit} = k_{nest}^{\Gamma K}$  hullámszámvektorhoz tartozó oszcilláció komponenshez képest. Ebben az esetben viszont az illesztett  $2k_{fit} = k_{nest}^{\Gamma K}$  hullámszámvektor párhuzamosan futó részeket köt össze az állandó energiás kontúr, ezért az állapotsűrűség-hullám szimmetrizált adatsorának Fourier-transzformáltja is szingularitást mutat a  $k = k_{nest}^{\Gamma K}$  helyen (lásd a 4.7.(a) ábra betétábráját). Az állapotsűrűség-hullámok aszimptotikus viselkedését leíró hatványserű viselkedés (lásd az előzőekben definiált  $f_1(x, n = 0.5)$  függvényt) nagyon jól leírja az oszcillációk lecsengését. A különböző orientáltságú vonalhibák közti különbségeket részletebben a [150] publikációban vizsgálták. A szerzők úgy találták, hogy a  $\Gamma K$  irányú vonalhiba körül kialakuló állapotsűrűség-hullámok tulajdonságai megváltoznak, ha figyelembe vesszük a (2.50) Hamilton-operátorban az elektron-lyuk szimmetriát sértő,  $1/m^*$ -gal arányos tagot. Ezzel szemben a  $\Gamma M$  irányú vonalhiba körül kialakuló állapotsűrűség-hullámok nem érzékenyek az elektron-lyuk szimmetria hiányára.

Megjegyezzük, hogy az irodalomban a lépcsőszerű potenciál mellett [147] egyéb potenciálprofilokkal is végeztek számolásokat [142, 149, 150]. A számolásokban (a [150] publikáció

kivételével) eltekintettek a szórásmatrix unitaritásában meghatározó szerepet játszó evaneszcens elektronállapotoktól. A szórásmatrix unitaritása azonban elengedhetetlen feltétele az esetünkben bemutatott  $k_{\text{nest}}$  hullámszámú oszcilláció komponens eltűnésének (lásd az F.3. szakaszt). Ezen felül a szerzők eltekintettek az energiakontúrok alakját nagy mértékben befolyásoló  $\alpha$  és  $1/m^*$  paramétereiktől is. Az energiakontúrok alakjának minél pontosabb ismerete azonban fontos szerepet játszik az állapotsűrűség-hullámok tulajdonságainak leírásában. Esetünkben az  $\alpha$  és  $1/m^*$  paraméterek mérsékelik az energiakontúrok hatszöges torzulását, ami szükséges a Fermi-energia alatti energiatartományban végzett fotoemissziós mérésekkel való egyezéshez (lásd a 3.2.2. szakaszt). Az „extra” paraméterek nélkül alacsonyabb energián is megjelenének az energiakontúrokban a  $2k_{\Gamma M}$ -tól és  $k_{\text{nest}}$ -tól különböző, párhuzamos részeket összekötő szórási vektorok is (lásd a 4.4.(c) ábrát), és a csoportsebesség vonalhibával párhuzamos komponensének nem monoton viselkedése nem érvényesülne az oszcillációkban.

### 4.3. A fejezet összefoglalása

Értekezésem jelen fejezetében először áttekintettem a pont- és vonalhibák körül kialakult állapotsűrűség-hullámok tanulmányozása során feltárt mérési eredményeket grafén és háromdimenziós topologikus szigetelők felületén. Grafénben az ekvivalens  $K$  és  $K'$  kúpok jelenléte a második generációs topologikus szigetelőkhöz<sup>5</sup> képest további struktúrát eredményez az álló-hullámok szerkezetében, ami a  $K$  és  $K'$  kúpok közötti szórási folyamatokkal magyarázható.

Röviden ismertettem két kutatócsoport elméleti eredményeit, melyek szerint a pontszennyezők körül kialakult állapotsűrűség-hullámokat az energiakontúr maximális és minimális görbületű pontjai között létrejött szórási folyamatok határozzák meg. A vonalhibák mentén létrejött állapotsűrűség-hullámok aszimptotikus viselkedésének leírására alkalmas elméletet is áttekintettem, mely azonban nem magyarázza a mérésekben az 150 – 345 meV energiatartományban megfigyelt oszcillációk hullámhosszát.

Érvelésem szerint a  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (és egyéb háromdimenziós topologikus szigetelők) felületén észlelt állóhullámokat túl közel vizsgálták a vonalhibához, ezért nem az aszimptotikus viselkedésükre jellemző tulajdonságokat tapasztalták. A kísérletekben megfigyelt távolságtartományban létrejött állóhullámok leírását ezért a szórásprobléma numerikusan egzakt megoldásainak segítségével kíséreltem meg. Az aszimptotikus viselkedéshez képest lényegesen eltérő oszcillációs hullámszámot és a hatványszerű lecsengés helyett az állóhullámok exponenciális lecsengését tapasztaltam. Az általam vizsgált energiatartományban nagyon jó egyezést találtam eredményeim

<sup>5</sup>Itt a felületi állapotok diszperzióját egy Dirac-kúppal írhatjuk le. Részletes ismertetőért lásd a 2.3.3. szakaszt.

és a mérésekben [26] meghatározott oszcillációs hullámszámok között. Eredményeimet a vonalhibával párhuzamos csoportsebesség-komponens nem monoton viselkedésével magyaráztam, ezért különböző potenciálprofilok esetében is hasonló eredményeket várhatunk. A területen elért eredményeinket [151] publikációnkban ismertettük.

# Függelék

## F.1. A Pfaff-polinom

Egy  $A$  antiszimmetrikus mátrix ( $A_{ij} = -A_{ji}$ ) determinánsa mindig felírható egy a mátrix elemeiből képzett polinom függvényértékének négyzeteként [152]. Ezt a polinomot nevezzük Pfaff-polinomnak.

$$\text{pf}(A)^2 = \det(A). \quad (\text{F-1})$$

Megjegyezzük, hogy  $2n + 1 \times 2n + 1$  (páratlan dimenziójú) antiszimmetrikus mátrixok determinánsa nulla, ezért a Pfaff-polinom is csupán  $2n \times 2n$  (páros dimenziójú) antiszimmetrikus mátrixok esetén különbözik nullától. A Pfaff-polinom egy  $2n \times 2n$  dimenziós mátrix esetében formálisan az alábbi alakban írható:

$$\text{Pf}(A) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{\sigma \in S_{2n}} \text{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n a_{\sigma(2i-1), \sigma(2i)}, \quad (\text{F-2})$$

ahol  $S_{2n}$  a  $2n$  elemű szimmetrikus csoport,  $\text{sgn}(\sigma)$  pedig a  $\sigma$  permutáció paritása. Az

$$A = \begin{pmatrix} 0 & a & b & c \\ -a & 0 & d & e \\ -b & -d & 0 & f \\ -c & -e & -f & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{F-3})$$

mátrix esetében például ez az összefüggés a  $\text{Pf}(A) = af - be + dc$  polinomra vezet.

## F.2. Vonalhibára merőleges hullámszámok meghatározása

Az elektronállapotokat  $E$  energiájukkal és a vonalhibával párhuzamos  $q$  momentum-komponensükkel jellemezhetjük. Ezek megmaradó mennyiségek a szórási folyamat során (lásd a 4.2. szakaszt a részletekért). Az alábbiakban a szórásprobléma megoldásához szükséges elektronállapotok hullámfüggvényeinek numerikus meghatározását tekintem át. Adott  $E$  és  $q$  mellett hat

különböző vonalhibára merőleges  $k_{r,p}$  ( $p = 1 \dots 6$ ) hullámszám-komponens létezik, mely kielégíti a  $\det[\hat{H}^{TI}(k_r, q) - \hat{I}E] = 0$  karakterisztikus egyenletet, ahol  $\hat{I}$  a  $2 \times 2$  egységmátrix és  $\hat{H}^{TI}$  a 2.3.3. szakaszban, (2.50) egyenlettel definiált Hamilton-operátor. A karakterisztikus polinom az alábbi alakban írható:

$$\det[\hat{H}^{TI}(k_r, q) - \hat{I}E] = \sum_{k=0}^6 a_k(E, q)k_r^k. \quad (\text{F-4})$$

Az (F-4) polinom  $k_{r,p}$  ( $p = 1, \dots, 6$ ) zérushelyei a polinomhoz rendelt

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a_0/a_6 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a_1/a_6 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -a_2/a_6 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -a_3/a_6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -a_4/a_6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -a_5/a_6 \end{pmatrix} \quad (\text{F-5})$$

mátrix sajátértékeivel egyenlők[153], melyek numerikusan könnyen meghatározhatóak. A  $\Phi_{k_r,p,q}(x, y) = e^{iqx} e^{ik_r p y} \chi(k_{r,p}, q)$  elektronállapotok  $\chi$  spinor hullámfüggvénye numerikusan meghatározható a

$$\hat{H}^{TI}(k_{r,p})\chi(k_{r,p}, q) = E\chi(k_{r,p}, q) \quad (\text{F-6})$$

sajátérték-feladat megoldásával minden  $p = 1, \dots, 6$  mellett.

### F.3. A transzmittált és reflektált járulékok kioltása az állapotsűrűség-hullámokban

Ebben a szakaszban megmutatom, hogy a 4.2. szakaszban ismertetett állapotsűrűség-hullámok modelljében a 4.3. ábrán berajzolt  $k_{\text{nest}}$  stacionárius hullámszámhoz tartozó oszcilláció egzaktul eltűnik a reflektált és a vonalhiba áttelens oldaláról transzmittált szórásállapotok oszcillációinak kioltása során. A vonalhiba bal oldaláról ( $y < 0$ ) transzmittált állapotok abban az esetben vezetnek oszcillációkhoz a vonalhiba jobb oldalán ( $y > 0$ ), ha egynél több propagáló állapot létezik a vonalhiba jobb oldalán. Az állítás bizonyításához ezért feltesszük, hogy az érintett  $q$  hullámszám tartományban két bejövő állapot létezik az  $y > 0$  és egy bejövő állapot az  $y < 0$  oldalon. Jelölje az  $y > 0$  oldalon a két bejövő elektronállapot vonalhibára merőleges hullámszámát  $k_1$  és  $k_2$ , míg az  $y < 0$  oldalon  $\tilde{k}$ . Az  $y > 0$  oldalon mindkét bejövő állapot két propagáló (és egy lecsengő evaneszcens) állapotba reflektálódik  $r_{k_1 q, p}$  és  $r_{k_2 q, p}$  ( $p = 1, 2$ ) amplitúdókkal. Az  $y < 0$  oldalról

transzmittált állapot hasonlóan az  $y > 0$  oldal két propagáló állapotába szóródik  $t_{kq,p}$  ( $p = 1, 2$ ) amplitúdókkal. A  $p = 1$  és  $p = 2$  indexeknek megfelelő reflektált állapotokat az energiakontúrón a  $k_{\text{nest}}$  stacionárius hullámszámvektor köti össze (lásd a 4.4.(c) ábrát). A szórási állapotok (4.12) alakjából következik, hogy a (4.15) egyenletben szereplő integrandus oszcilláló része, miután közös integrálási mértékre hoztuk a reflektált és transzmittált járulékokat, arányos a

$$\sqrt{\frac{1}{|v_{\perp,k_{r,1},q} v_{\perp,k_{r,2},q}|}} \operatorname{Re} \left[ 2 \left( r_{k_1q,1}^* r_{k_1q,2} + r_{k_2q,1}^* r_{k_2q,2} + t_{kq,1}^* t_{kq,2} \right) e^{ik_{\text{nest}}x} \right]. \quad (\text{F-7})$$

kifejezéssel. Azonban a szórásmátrix unitaritásából adódóan a szögletes zárójelben szereplő kifejezés azonosan nulla. Ennek következtében az LDOS oszcillációk  $k_{\text{nest}}$  hullámszámú komponense eltűnik a transzmittált és reflektált járulékok egzakt kioltásának következményeként. Megjegyezzük, hogy a bemutatott érvelés általánosítható több propagáló csatorna esetére is. Ennek következtében a vonalhiba áttelens oldaláról transzmittált állapotok nem adnak oszcillációs járulékot az állapotsűrűség-hullámokban.

## F.4. Fourier-transzformáció az állóhullámok adatsorain

Folytonos esetben az  $x_{\text{max}} - x_{\text{min}}$  periódusú  $f(x)$  függvény  $\mathcal{F}(k_j)$  Fourier-komponenseit az alábbi összefüggésekkel definiáljuk:

$$\mathcal{F}(k_j) = \int_{x_{\text{min}}}^{x_{\text{max}}} f(x) e^{-ik_j x} dx, \quad f(x) = \frac{1}{x_{\text{max}} - x_{\text{min}}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(k_j) e^{ik_j x}, \quad (\text{F-8})$$

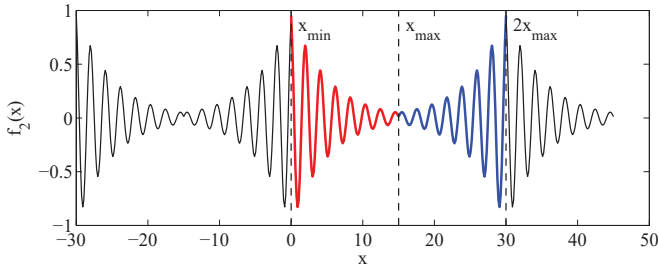
ahol  $k_j = 2\pi j / (x_{\text{max}} - x_{\text{min}})$ . Az összefüggések általánosíthatóak végtelen periódusú függvényekre is:

$$\mathcal{F}^{\infty}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx, \quad f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}^{\infty}(k) e^{ikx} dk. \quad (\text{F-9})$$

Valós  $f(x)$  függvényen vett Fourier-transzformáció szimmetrikus Fourier-spektrumra vezet, ezért elég csupán a spektrum  $k > 0$  részével foglalkoznunk. Diszkrét  $f(x_n)$  ( $n = 0, \dots, N-1$ ) adatsorokon ezzel szemben diszkrét Fourier-transzformálást tudunk végezni, melyet az alábbi összefüggésekkel definiálunk:

$$\mathcal{F}^D(k_j) = \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n) e^{-ik_j n}, \quad f(x_n) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \mathcal{F}^D(k) e^{ik_j n}, \quad (\text{F-10})$$

ahol  $k_j = 2\pi \frac{j}{N}$  ( $j = 0, \dots, N-1$ ). A hullámszámok közül a  $j = 0 \dots N/2 - 1$  indexűek feleltethetők meg a folytonos Fourier-spektrum  $k > 0$  oldalának, míg a  $j = N/2 \dots N-1$  indexűek



F-1. ábra. Az  $x_{\min}$  és  $x_{\max}$  határok közti adatsort (piros görbe) FFT transzformációja előtt tükrözzük az adatsort az  $x = x_{\max}$  tengelyre (kék görbe). A Fourier-transzformációt a két görbe összekapcsolásával nyert adatsoron végezzük. Az FFT algoritmus ekkor periodikusnak tekinti a vizsgált függvényt  $\Delta x = 2x_{\max}$  periódussal. A periódusonkénti ismétlődést a fekete görbék szemléltetik. A példa adatsorok a 4.2. szakaszban megadott  $f_2(x)$  függvénnyel lettek generálva  $L = 5$ ,  $k_{f\ddot{u}} = 1.5$ ,  $A = 1$  és  $\varphi = 0.6\pi$  dimenziótlan paraméterekkel.

a  $k < 0$  oldalának. Bár szigorúan véve a diszkrét Fourier-spektrumot csupán a  $k_j$  pontokban értelmezzük, a spektrumot definiáló összefüggés kiértékelhető tetszőleges  $k$  érték esetében is. A diszkrét és folytonos Fourier-spektrumokat az alábbi összefüggéssel feleltethetjük meg egymásnak:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \Delta x \mathcal{F}^D(k_j) = \mathcal{F}(k_j), \quad (\text{F-11})$$

ahol  $\Delta x$  az  $x_n$  sorozat szomszédos elemeinek különbsége, melyet állandónak tételezünk fel az egész sorozaton.

A lecsengő oszcillációk Fourier-analízise során a numerikus adatsort tükrözzük az F-1. ábrán szemléltetett módon. Az eredeti és a tükrözött adatsort egyesítve végezzük el a Fourier-transzformációt. A módszer előnye, hogy páros függvény lévén a Fourier-spektrum tisztán valós lesz, nem kell foglalkoznunk a Fourier-komponensek fázisával. A szimmetrizált adatsort az alábbi összefüggéssel adhatjuk meg:

$$\tilde{f}(x_n) = \begin{cases} f(x_n) & 0 \leq n \leq N-1 \\ f(x_{N-1-n}) & N \leq n \leq 2N-1 \end{cases} \quad (\text{F-12})$$



A szimmetrizált adatsor diszkrét Fourier-spektruma:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{F}}^D(k_j) &= \sum_{n=0}^{2N-1} \tilde{f}(x_n) e^{-ik_j n} = \\
 &= \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n) e^{-ik_j x_n} + \sum_{n=N}^{2N-1} \tilde{f}(x_n) e^{-ik_j n} = \\
 &= \mathcal{F}^D(k_j) + e^{-ik_j N} \sum_{p=0}^{N-1} f(x_{N-1-p}) e^{-ik_j p} = \\
 &= \mathcal{F}^D(k_j) + e^{-ik_j(2N-1)} \sum_q^{N-1} f(x_q) e^{ik_j q} = \\
 &= \mathcal{F}^D(k_j) + e^{-ik_j(2N-1)} \mathcal{F}^D(-k_j),
 \end{aligned} \tag{F-13}$$

ahol  $k_j = 2\pi \frac{j}{N}$  ( $j = 0, \dots, 2N-1$ ), és  $\mathcal{F}^D(k_j)$  az  $f(x_n)$  sorozat Fourier-együtthatóit leíró összefüggéssel határozható meg tetszőleges  $k$  érték mellett. Az eredményben szereplő exponenciális faktorról elmondható, hogy:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} e^{-ik_j(2N-1)} = 1. \tag{F-14}$$

Ebben a határesetben:

$$\tilde{\mathcal{F}}^D(k_j) = \mathcal{F}^D(k_j) + \mathcal{F}^D(-k_j). \tag{F-15}$$

Az összefüggés folytonos határesetben is értelmezhető. Ennek következtében a szimmetrizált oszcilláció Fourier-spektruma könnyen származtatható az eredeti oszcilláció Fourier-spektrumának ismeretében:

$$\tilde{\mathcal{F}}(k_j) = \mathcal{F}(k_j) + \mathcal{F}(-k_j). \tag{F-16}$$

Szimmetrikus  $f(x)$  függvény esetében a  $\mathcal{F}(k_j)$  és  $\mathcal{F}(-k_j)$  amplitúdók egymásnak konjugáltjai, ezért a szimmetrizált függvény Fourier-spektruma valós lesz. Az összefüggésekből elhanyagolt exponenciális faktor az  $\tilde{f}(x_n)$  adatsor aszimmetriáját jellemzi, hiszen az (F-12) adatsor szigorúan véve nem szimmetrikus. A diszkrét Fourier-transzformáció FFT algoritmusában megköveteli az adatsor elemeinek  $N$  számától, hogy 2-nek valamelyik hatványával legyen egyenlő, azaz páros legyen, így az F-1. ábra szerint ismétlődő adatsor nem is lehet egzaktul szimmetrikus.



# Irodalomjegyzék

- [1] H. Hertz, *On an effect of UV light upon the electric discharge*, (Sitzungsber d. Berl. Akad. d. Wiss., 1887).
- [2] A. Damascelli, Z. Hussian, Zhi-Xun Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473-541 (2003).
- [3] J. Hugo Dil, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 403001 (2009); J. Braun, *Rep. Prog. Phys.* **59**, 1267-1338 (1996).
- [4] E. D. Hansen, T. Miller and T. -C. Chiang, *Phys. Rev.* **78**, 2807 (1997).
- [5] V. B. Zabolotnyy et al., *Phys. Rev. B* **76**, 024502 (2007).
- [6] Robert L. Park, Max G. Lagally, *Solid state physics: surfaces*, (Academic Press INC, London, 1985).
- [7] Professor Dr. Stefan Hüfner, *Photoelectron Spectroscopy*, (Springer-Verlag, Berlin, 2003).
- [8] G. D. Hasan, *Phys. Rev. B* **2**, 4334 (1970);
- [9] J. Braun, *Rep. Prog. Phys.* **59**, 1267-1338 (1996).
- [10] J. W. Gadzuk and M. Šunjić, *Phys. Rev. B* **12**, 524 (1975).
- [11] K. Siegbahn, K. Nordling, G. Johansson, J. Hedman, P. F. Heden, K. Hamrin, U. I. Gelius, T. Bergmark, L. O. Werme, R. Manne and Y. Baer, *ESCA Applied to Free Molecules*, Amsterdam (1969).
- [12] J. Hugo Dil, *J. Phys: Condens Matter* **21**, 403001 (2009).
- [13] N. Sherman, *Phys. Rev.* **103**, 1601 (1956).
- [14] F. Meier, J. H. Dil and J. Osterwalder, *New J. Phys.* **11**, 125008 (2009).
- [15] W. A. Hoffer, A. S. Foster, A. L. Shluger, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 4 (2003).

- [16] C. J. Chen, *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*, (Oxford University, Oxford, 1993).
- [17] K. F. Braun, K. H. Riedner, Phys. Rev. Lett. **88**, 096801 (2002).
- [18] J. Tersoff, D. R. Hamann, Phys. Rev. Lett. **50**, 1998 (1985); J. Tersoff, D. R. Hamann, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985).
- [19] J. Bardeen, Phys. Rev. Lett. **6**, 57 (1961).
- [20] M. Bütticker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).
- [21] Y. Meir, N. S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
- [22] M. F. Crommie, C. P. Lutz, D. M. Elgler, Nature **363**, 524 (1993).
- [23] Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai II.: Elektronok szilárd testekben*, 16.4. fejezet (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest 2003).
- [24] Ye. S. Avotina, Yu. A. Kolesnichenko, J. M. van Ruitenbeek, Low Temp. Phys. **36**, 849 (2010).
- [25] T. Zhang, P. Cheng, X. Chen, J. -F. Jia, X. Ma, K. He, Lili. Wang, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang, X. Xie, and Q. -K. Xue, Phys. Rev. Lett. **103**, 266803 (2009).
- [26] Z. Alpichshev, J. G. Analytis, J. -H. Chu, I. R. Fisher, Y. L. Chen, Z. X. Shen, A. Fang and A. Kapitulnik, Phys. Rev. Lett. **104**, 016401 (2010).
- [27] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley, Nature **318**, 162 (1985).
- [28] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991).
- [29] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*, (Imperial College Press, London, 1998).
- [30] S. Reich, C. Thomsen, J. Maultzsch, *Carbon Nanotubes, Basic Concepts and Physical Properties*, (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Berlin, 2004).
- [31] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. M. Morozov, and A. K. Geim, PNAS **102**, 10452, (2005); K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. M. Morozov, D. Jiang, Y. Yhang, S. V. Dobunos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).

- 
- [32] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. M. Morozov, D. Jiang, M. I. Katnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dobunos, and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197, (2005); Y. Zhang, Y. -W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [33] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1337 (2008).
- [34] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [35] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, *Solid State Commun.* **143**, 3-13 (2007).
- [36] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1942).
- [37] O. Klein, *Z. Phys.* **53**, 157, (1929); N. Dombey and A. Calogheracos, *Phys. Rep.* **315**, 41 (1999); F. Constantinescu, E. Magyari: *Kvantummechanikai feladatok*, 354. old. 17. és 18. feladat (Tankönyv Kiadó, Budapest 1972).
- [38] D. N. Page, *New J. Phys.* **7**, 203 (2005).
- [39] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nature Phys.* **2**, 620 (2006).
- [40] Gergely Dobrik, Philippe Lambin, László P. Biró, Levente Tapasztó, *Nature Nanotechnology* **3**, 397-401 (2008).
- [41] Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai II.: Elektronok szilárd testekben*, 18.2. fejezet (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest 2003).
- [42] Cserti József: *Kétdimenziós kvantumrendszerek nanoszerkezetekben*, 3. fejezet, (MTA doktori értekezés, 2009).
- [43] E. McCann and V. I. Fal'ko, *J. Phys. Condens. Matter* **16**, 2371 (2004).
- [44] A. R. Akhmerov, C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **77**, 085423 (2008).
- [45] G. W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449, (1984); F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- [46] N. D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [47] R. E. Peierls, *Helv. Phys. Acta* **7**, 81 (1934); R. E. Peierls, *Ann. Inst. H. Poincaré* **5**, 177 (1935); L. D. Landau, *Phys. Z. Sowjet Union* **11**, 26 (1937); L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Elméleti Fizika V. kötet Statisztikus Fizika I.*, (Tankönyvkiadó, Budapest 1981).

- [48] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, Phys. Rev. B **29**, 1685 (1984).
- [49] T. Ando, T. Nakanishi and R. Saito, J. Phys. Soc. Japan, **67**, 2857 (1998).
- [50] R. Peierls, Z. Phys. **80**, 763 (1933); A. S. Alexandrov and H. Cappelmann, Phys. Rev. Lett. **66**, 365 (1991); Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai II.: Elektronok szilárd testekben*, 22.3 fejezet (ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 2003).
- [51] E. McCann, V. I. Fal'ko, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805 (2006).
- [52] M. Z. Hasan, C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
- [53] S. Murakami, N. Nagaosa and S. c. Zhang, Science **301**, 1348 (2003); J. Sinova et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 126603 (2004).
- [54] Y. K. Kato et al., Science **306**, 1910 (2004), J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, T. Jungwirth, Phys. Rev. Lett. **94**, 047204 (2005).
- [55] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
- [56] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).
- [57] Liang Fu, C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2007).
- [58] Liang Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **74**, 195312 (2006).
- [59] Liang Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).
- [60] T. Fukui and Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 053702 (2007); T. Fukui, T. Fujiwarw and Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 123705 (2008).
- [61] X. L. Qi, T. L. Hughes and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
- [62] J. E. Moore and L. Balents, Phys. Rev. B **75**, 121306(R) (2007).
- [63] D. N. Sheng, Z. Y. Weng, L. Sheng and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **97**, 036808 (2006).
- [64] D. Hseih, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, Nature **452**, 970 (2008).
- [65] Y. Xia, D. Qian, D. Hseih, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, Nat. Phys. **5**, 398 (2009).

- 
- [66] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J. H. Chu, Z. K. Liu, S. K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, Z. X. Shen, *Science* **325**, 178 (2009).
- [67] H. Suzura and T. Ando, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 266603 (2002).
- [68] J. E. Moore, *Nature Phys.* **5**, 378 (2009).
- [69] H. Zhang, C. X. Liu, X. L. Qi, X. Dai, Z. Fang and S. C. Zhang, *Nature Phys.* **5**, 438 (2009).
- [70] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, J. H. Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, J. G. Checkelsky, N. P. Ong, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, *Nature* **460**, 1101 (2009).
- [71] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, R. Shankar, H. Lin, A. Bansil, A. V. Fedorov, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, arXiv:0907.3089 (2009).
- [72] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 146401 (2009).
- [73] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J. H. Chu, Z. K. Liu, S. K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z. X. Shen, arXiv:0904.1829v1 (2009).
- [74] K. Kuroda M. Arita, K. Miyamoto, M. Ye, J. Jiang, A. Kimura, E. E. Krasovskii, E. V. Chulkov, H. Iwasawa, T. Okuda, K. Shimada, Y. Ueda, H. Namatame and M. Taniguchi, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 076802 (2010).
- [75] W. -C. Lee, C. Wu, D. P. Arovas and S. -C. Zhang, *Phys. Rev. B* **80**, 245439 (2009).
- [76] C. -X. Liu, X. -L. Qi, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang and S. -C. Zhang, *Phys. Rev. B* **82**, 045122 (2010).
- [77] W. -Y. Shan, H. -Z. Lu and S. -Q. Shen, *New J. Phys.* **12**, 043048 (2010).
- [78] S. Urazhdin, D. Bilc, S. D. Mahanti and S. H. Tessmer, *Phys. Rev. B* **69**, 085313 (2004); G. A. Thomas, D. H. Rapkine, R. B. Van Dover, L. F. Mattheiss, W. A. Sunder, L. F. Schneemeyer and J. V. Waszczak, *Phys. Rev. B* **46**, 1553 (1992).
- [79] L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 266801 (2009).

- [80] K. Kuroda, M. Arita, K. Miyamoto, M. Ye, J. Jiang, A. Kimura, E. E. Krasovskii, E. V. Chulkov, H. Iwasawa, T. Okuda, K. Shimada, Y. Ueda, H. Namatame, and M. Taniguchi, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 076802 (2010).
- [81] Y. H. Wang, D. Hsieh, D. Pilon, L. Fu, D. R. Gardner, Y. S. Lee and N. Gedik, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 207602 (2011).
- [82] S. Basak, H. Lin, L. A. Wray, S. -Y. Xu, L. Fu, M. Z. Hasan and A. Bansil, *Phys. Rev. B* **84**, 121401(R) (2011).
- [83] Yu. S. Dedkov, M. Fonin, U. Rüdiger, and C. Laubschat, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 107602 (2008).
- [84] O. Rader, A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko, A. Rybkin, A. M. Shikin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 057602 (2009).
- [85] A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, *Nat. Phys.* **3**, 36 (2007).
- [86] A. Bostwick, T. Ohta, J. L. McChesney, K. V. Emtsev, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, *New J. Phys.* **9**, 385 (2007).
- [87] A. Varykhalov, O. Rader, *Phys. Rev. B* **80**, 035437 (2009).
- [88] M. Kralj, I. Pletikosić, M. Petrović, P. Pervan, M. Milun, A. T. N'Diaye, C. Busse, T. Michely, J. Fujii, and I. Vobornik, *Phys. Rev. B* **84**, 075427 (2011).
- [89] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto and A. Lanzara, *Nature Materials* **6**, 770 (2007).
- [90] C. Enderlein, Y. S. Kim, A. Bostwick, E. Rotenberg, and K. Horn, *New Journal of Physics* **12**, 033014 (2010).
- [91] A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, A. M. Shikin, C. Biswas, E. Vescovo, A. Rybkin, D. Marchenko, O. Rader, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 157601 (2008).
- [92] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, J. Graf, A. V. Fedorov, C. D. Spataru, R. D. Diehl, Y. Kopelevich, D.-H. Lee, S. G. Louie, and A. Lanzara, *Nat. Phys.* **2**, 595 (2006).
- [93] E. L. Shirley, L. J. Terminello, A. Santoni, F. J. Himpsel, *Phys. Rev. B* **51**, 13614 (1995).
- [94] I. Gierz, J. Henk, H. Hoehst, Ch. R. Ast, and K. Kern, *Phys. Rev. B* **83**, 121408 (2011).



- 
- [95] M. Mucha-Kruczyński, O. Tsypliyatyev, A. Grishin, E. McCann, V. I. Fal'ko, A. Bostwick, and E. Rotenberg, *Phys. Rev. B* **77**, 195403 (2008).
- [96] R. A. Horn *et al.*, *Topics in Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1991.
- [97] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, (Springer-Verlag, 2003).
- [98] Z. Y. Li, S. Qiao, Z. Q. Yang, R. Q. Wu, arXiv:1008.0696 (2010).
- [99] N. Tombros, C. Józsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Nature* **448**, 571 (2007).
- [100] N. Tombros, S. Tanabe, A. Veligura, C. Józsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 046601 (2008).
- [101] C. Józsa, T. Maassen, M. Popinciuc, P. J. Zomer, A. Veligura, H. T. Jonkman, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **80**, 241403(R) (2009).
- [102] W. Han and R. K. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 047207 (2011).
- [103] A. Avsar, T. -Y. Yang, S. -K. Bae, J. Balakrishnan, F. Volmer, M. Jaiswal, Z. Yi, S. R. Ali, G. Güntherodt, B. -H. Hong, B. Beschoten, B. Özyilmaz, *Nano Letters* **2011**, 2363 (2011).
- [104] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 146801 (2009).
- [105] C. Ertler, S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **80**, 041405(R) (2009).
- [106] V. K. Dugaev, E. Ya. Sherman, and J. Barnaś, *Phys. Rev. B* **83**, 085306 (2011).
- [107] H. Ochoa, A. H. Castro Neto, F. Guinea, arXiv:1107.3386 (2011).
- [108] F. Simon, F. Muranyi, B. Dora, *EPL* **92**, 17002 (2010).
- [109] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, *Phys. Rev. B* **74**, 155426 (2006).
- [110] H. Min *et al.*, *Phys. Rev. B* **74**, 165310 (2006); Y. Yao *et al.*, *Phys. Rev. B* **75**, 041401 (2007);
- [111] J. C. Boettger, and S. B. Trickey, *Phys. Rev. B* **75**, 121402 (2007).

- [112] M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler, C. Ambrosch-Draxl, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **80**, 235431 (2009).
- [113] A. H. Castro Neto and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 026804 (2009).
- [114] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- [115] Emmanuel I. Rashba, *Phys. Rev. B* **79**, 161409(R) (2008).
- [116] F. Kuemmeth and E. I. Rashba, *Phys. Rev. B* **80**, 241409(R) (2009).
- [117] M. Zarea and N. Sandler, *Phys. Rev. B* **79**, 165442 (2009).
- [118] Z. Wang, N. Hao, and P. Zhang, *Phys. Rev. B* **80**, 115420 (2009).
- [119] P. Rakyta, A. Kormányos, and J. Cserti, *Phys. Rev. B* **82**, 113405 (2010).
- [120] P. Ingenhoven, J. Z. Bernád, U. Zülicke, and R. Egger, *Phys. Rev. B* **81**, 035421 (2010).
- [121] B. Aufray, A. Kara, S. Vizzini, H. Oughaddou, C. Léandri, B. Ealet, and G. L. Lay, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 183102 (2010).
- [122] P. Rakyta, A. Kormányos, J. Cserti, *Phys. Rev. B* **83**, 155439 (2011).
- [123] I. Gierz, T. Suzuki, R. Th. Weitz, D. S. Lee, B. Krauss, Ch. Riedl, U. Starke, H. H $\ddot{a}$ schst, J. H. Smet, Ch. R. Ast, and K. Kern, *Phys. Rev. B* **81**, 235408 (2010).
- [124] Ch. R. Ast, J. Henk, A. Ernst, L. Moreschini, M. C. Falub, D. Pacil $\acute{e}$ , P. Bruno, K. Kern, and M. Grioni, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 186807 (2007).
- [125] F. Meier, H. Dill, J. Lobo-Checa, L. Patthey, and J. Osterwalder, *Phys. Rev. B* **77**, 165431 (2008).
- [126] D. Hsieh<sup>1</sup>, Y. Xia, L. Wray, D. Qian, A. Pal, J. H. Dil, J. Osterwalder, F. Meier, G. Bihl-mayer, C. L. Kane, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Science* **323**, 919 (2009).
- [127] Y. -Y. Li, G. Wang, X. -G. Zhu, M. -H. Liu, C. Ye, X. Chen, Y. -Y. Wang, K. He, L. L. Wang, X. C. Ma, H. -J. Zhang, X. Dai, Z. Fang, X. -C. Xie, Y. Liu, X. -L. Qi, J. -F. Jia, S. -C. Zhang, Q. -K. Xue, arXiv:0912.5054 (2009).
- [128] J. Zhang, C. -Z. Chang, Z. Zhang, J. Wen, X. Feng, K. Li, M. Liu, K. He, L. Wang, X. Chen, Q. -K. Xue, X. Ma and Y. Wang, *Nature Communications* **2**, 574 (2011).

- 
- [129] P. Roushan, J. Seo, C. V. Parker, Y. S. Hor, D. Hsieh, D. Qian, A. Richardella, M. Z. Hasan, R. J. Cava, and A. Yazdani, *Nature* **460**, 1106 (2009).
- [130] M. Ye, S. V. Ereameev, K. Kuroda, E. E. Krasovskii, E. V. Chulkov, Y. Takeda, Y. Saitoh, K. Okamoto, S. Y. Zhu, K. Miyamoto, M. Arita, M. Nakatake, T. Okuda, Y. Ueda, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, A. Kimura, arXiv:1112.3206 (2011).
- [131] Z. Alpichshev, R. R. Biswas, A. V. Balatsky, J. G. Analytis, J.-H. Chu, I. R. Fisher, A. Kapitulnik, arXiv:1108.0022 (2011).
- [132] R. R. Biswas, and A. V. Balatsky, *Phys. Rev. B* **81**, 233405 (2010).
- [133] G. M. Rutter, J. N. Crain, N. P. Guisinger, T. Li, P. N. First, and J. A. Stroscio, *Science* **317**, 219 (2007).
- [134] I. Brihuega, P. Mallet, C. Bena, S. Bose, C. Michaelis, L. Vitali, F. Varchon, L. Magaud, K. Kern, and J. Y. Veuillen, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 206802 (2008).
- [135] M. M. Ugeda, D. Fernández-Torre, I. Brihuega, P. Pou, A. J. Martínez-Galera, Rubén Pérez, and J. M. Gómez-Rodríguez, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 116803 (2011).
- [136] A. Deshpande, W. Bao, F. Miao, C. N. Lau, and B. J. LeRoy, *Phys. Rev. B* **79**, 205411 (2009).
- [137] C. Bena, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 076601 (2008).
- [138] E. Mariani, L. I. Glazman, A. Kamenev, and F. von Oppen, *Phys. Rev. B* **76**, 165402 (2007).
- [139] Á. Bácsil and A. Virosztek, *Phys. Rev. B* **82**, 193405 (2010).
- [140] J. Xue, J. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, and B. J. LeRoy, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 016801 (2012).
- [141] R. R. Biswas and A. V. Balatsky, arXiv:1005.4780 (2011).
- [142] R. R. Biswas and A. V. Balatsky, *Phys. Rev. B* **83**, 075439 (2011).
- [143] J. Wang, W. Li, P. Cheng, C. Song, T. Zhang, P. Deng, X. Chen, X. Ma, K. He, J.-F. Jia, Q.-K. Xue, B.-F. Zhu, *Phys. Rev. B* **84**, 235447 (2011).

- [144] Z. Alpichshev, J. G. Analytis, J.-H. Chu, I. R. Fisher, A. Kapitulnik, Phys. Rev. B **84**, 041104(R) (2011).
- [145] W.-C. Lee, C. Wu, D. P. Arovas, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **80**, 245439 (2009).
- [146] X. Zhou, C. Fang, W.-F. Tsai, and J. Hu, Phys. Rev. B **80**, 245317 (2009).
- [147] X. Zhou, C. Fang, W.-F. Tsai, and J. Hu, Phys. Rev. B **80**, 245317 (2009).
- [148] K. Kobayashi, Phys. Rev. B **84**, 205424 (2011).
- [149] D. Zhang and C. S. Ting, arXiv:1110.3722 (2011).
- [150] Jin An, C. S. Ting, arXiv:1204.6363 (2012).
- [151] P. Rakyta, A. Palyi, J. Cserti, arXiv:1111.6184 (2011).
- [152] Sir Thomas Muir, *A Treatise on the Theory of Determinants*, (New York: Dover Publications, 1960).
- [153] R. A. Horn and C. R. Johnson, *Matrix Analysis* (Cambridge University Press, 1985).

Summary of PhD thesis:

## **Theoretical description of photoemission and scanning tunneling microscope measurements on Dirac-like electrons**

Péter Rakya

To study Dirac-like electronic states in single layer graphene and three-dimensional topological insulators I have applied theoretical models of photoemission spectroscopy and scanning tunneling microscopy (STM). I have calculated the intensity distribution of photoelectrons and the local density of states, which is proportional to the differential conductivity of the STM point contact.

For single layer graphene I have developed a general formula to determine the intensity distribution of photoelectrons, which can be used to study arbitrary translational invariant one-electron interaction in graphene. I worked out an anisotropic effective Hamiltonian to describe Rashba-type spin-orbit coupling in graphene. I showed that the low energy Hamiltonian of single layer graphene with Rashba-type spin-orbit coupling is unitary equivalent to the Hamiltonian of bilayer graphene with trigonal warping. Despite of the three folded symmetry of the low energy dispersion, the spin polarization of the Bloch states is isotropic in the momentum space with vanishing out-of-plane component. My theoretical predictions are consistent with experimental results.

Generalizing the expression developed for the intensity distribution of photoelectrons, one can determine the expectation value of arbitrary physical operator. Thus the spin polarization can be calculated from the expectation value of spin operators. I showed that sublattice asymmetry in graphene coupled to the electron spin via spin-orbit coupling, induces finite out-of-plane spin polarization in the distribution of both Bloch electrons and photoelectrons.

Finally I have studied surface states of second-generation topological insulators by modeling electronic standing waves induced by line defects on the surface. According to my results, standing waves at line defects oriented along  $\Gamma K$  direction on the surface of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  crystal, are characterized by different properties as predicted by the theory describing asymptotic tendency: (i) the wavelength of standing waves close to the line defect is determined by the point on the constant energy contour where the group velocity parallel to the line defect is minimal. This finding is in contrast with the asymptotic behavior of standing waves, where the characteristic wavelength is determined by nesting segments on the constant energy contour in the momentum space. (ii) The decaying characteristics of standing waves, in the spatial range studied in experiments, is rather exponential than polynomial. My results agrees very well with recent experiments.

Doktori értekezés összefoglalása:

## Fotoemissziós és pásztázó alagútmikroszkópos mérések modellezése Dirac-féle elektronok vizsgálatánál

Rakya Péter

Doktori értekezésemben fotoemissziós és pásztázó alagútmikroszkópos (STM) mérési módszerek elméleti modellezésével foglalkoztam. A grafén és háromdimenziós topologikus szigetelők felületi állapotait a fotoelektronok intenzitás-eloszlásának és spin-polarizációjának kiszámolásával, valamint az STM pontkontaktus differenciális vezetőképességével arányos lokális állapotsűrűség meghatározásával tanulmányoztam.

Grafén esetében általános összefüggést adtam meg a fotoelektronok intenzitás-eloszlására, mely tetszőleges homogén (egy elektron) kölcsönhatás esetében alkalmas a kétfogású szimmetriával rendelkező fotoelektron-eloszlás meghatározására. A Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás elméleti vizsgálatára egy anizotróp, hosszúhullámú effektív Hamilton-operátort vezettem le. A két fizikai rendszer eltérő modelljeinek ellenére megmutattam, hogy a kétrétegű grafén és a Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatást is tartalmazó egyrétegű grafén alacsonyenergiás elektron-dinamikáját unitér ekvivalens Hamilton-operátor írja le. Számolásaim szerint a Bloch-elektronok spin-polarizációja, az alacsonyenergiás spektrum háromszöges torzulása ellenére, vezető rendben forgásszimmetrikus és a grafén síkjában fekszik. Elméleti eredményeim kiváló egyezést mutattak a mérési eredményekkel.

A fotoelektronok intenzitás-eloszlását leíró összefüggést tovább általánosítva, tetszőleges fizikai operátor várható értékének eloszlását meghatározó összefüggést adtam meg. Az összefüggés segítségével kiszámoltam a fotoelektronok spin-polarizációjának eloszlását. Megmutattam, hogy az elektronok spinjéhez a spin-pálya kölcsönhatáson keresztül csatlakozó alrácászimmetria a grafén síkjára merőleges spin-polarizációt indukál a Bloch-elektronok és fotoelektronok eloszlásában egyaránt.

A második generációs topologikus szigetelők felületi állapotait a felületi vonalhibák mentén kialakuló állapotsűrűség-hullámok modellezésével tanulmányoztam. Megmutattam, hogy  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  kristály felületén a  $\Gamma K$  irányú vonalhiba mentén kialakuló, STM technikával megmért állapotsűrűség-hullámok az aszimptotikus tendenciától eltérő tulajdonságokkal jellemezhetők: (i) az állóhullámok hullámhosszát a vonalhibához közelebbi tartományban a reciproktérbeli energiakontúrok párhuzamosan futó részei helyett a csoportsebesség vonalhibával párhuzamos komponensének minimuma határozza meg. (ii) Az állóhullámok lecsengése pedig hatványeszerű helyett exponenciális lecsengéssel jellemezhető. Elméleti eredményeim kiváló egyezést mutattak a mérési eredményekkel.