

Szemiklasszikus elektronoptika grafén rendszerekben

Doktori értekezés

Péterfalvi Csaba Géza

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Témavezető: Dr. Cserti József, egyetemi docens

ELTE TTK, Fizika Doktori Iskola

Anyagtudomány és Szilárdtestfizika Program

Iskolavezető: Prof. Csikor Ferenc, egyetemi tanár

Programvezető: Dr. Lendvai János, egyetemi tanár

Budapest

2012

Nagyszüleim emlékére

Tartalomjegyzék

Bevezetés	7
1. Elektronok szóródása egy- és kétrétegű grafénban	23
1.1. Szórási folyamatok egyrétegű grafénban	24
1.2. Szórási folyamatok kétrétegű grafénban	27
1.3. Az eredmények numerikus kiértékelése	29
1.4. Klasszikus megközelítés – geometriai optika	34
1.4.1. Kausztikák	39
2. A kausztikák szemiklasszikus leírása	43
2.1. Rövid bevezetés a katasztrófaoptikába	44
2.1.1. Ekvivalenciaosztályok a katasztrófaelméletben	48
2.1.2. Diffrakciós katasztrófák	52
2.1.3. Diffrakciós skálatörvények	56
2.2. Számszerű összevetés az egzakt számolással	58
3. Anizotrop diszperzió kétrétegű grafénban	69
3.1. Alacsony energiájú sajátállapotok KRG-ben	70
3.2. Átmeneti valószínűség potenciállépcsőn azonos sávba és sávváltással	77
3.3. Az elektronsugarak szemiklasszikus felösszegzése	84
3.3.1. Az eredmények diszkussziója	88
Függelék	95
A. A hullámfüggvény szimmetriái KRG-ben	96
B. A nyírt csúcskausztikák egyenlete	99
Köszönetnyilvánítás	101
Irodalomjegyzék	103

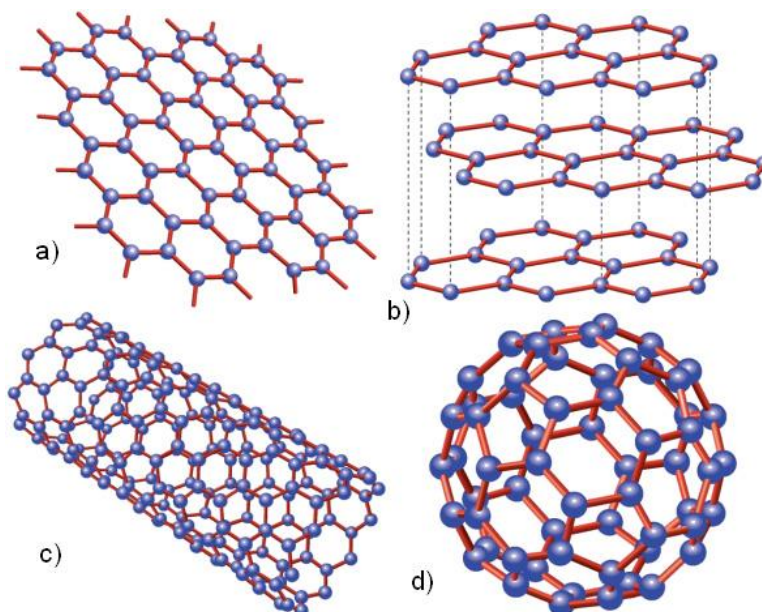
Bevezetés

Nanofizika, nanoelektronika, elektronoptika, szén nanocsövek és grafén. Manapság gyakran elhangzó, divatos kifejezések, melyek fogalmilag is közel állnak egymáshoz. Mind a modern kor legfontosabb tudományos eredményei és ugyanakkor még kihívásai közé tartoznak. Részben már alkalmazott technológiát képviselnek, részben ennek csak az ígérését hordozzák magukban. Közös bennük, hogy külön-külön is hatalmas az irodalmuk, bár sokszor egymással összefüggésben tárgyalják őket. Dolgozatommal, ezt az egyébként is roppant irodalmat szeretném tovább bővíteni, reményeim szerint gazdagítani. A teljesség igénye nélkül szeretném egy rövid bevezetését adni a témának, kiemelve azokat az aspektusokat, amelyek súlyponti szerepet kaptak munkám során.

Nanoelektronika és grafén – történeti áttekintés

A grafén kifejezés 1987-ben jelent meg először nyomtatásban [1], tehát két és fél évtizeddel ezelőtt. Azóta a nanofizika és ezen belül is a nanoelektronika hatalmas fejlődésen ment keresztül, amit a publikációk nagy száma is jelez, köztük sok összefoglaló jellegű művel [2–4]. Az utóbbi néhány évben a grafén vált a nanoelektronikai kutatások egyik alapvető kísérleti anyagává [5–15]. Ezt a méhsejtszerűen elhelyezkedő, egymástól mintegy 1.42 \AA távolságra lévő szénatomok alkotta kétdimenziós szerkezetet úgy lehet elképzelni, mint egy kihajtogatott szén nanocsövet, vagy mint egyetlen réteg grafitot [16]. Érdekes módon, a térbeli grafitkristály fizikai tulajdonságait nagyban a síkbeli graféntől örökli, ami annak köszönhető, hogy a grafitban, a grafénsíkok távolsága 3.34 \AA , és ezért a síkokat összetartó kötés egy nagyságrenddel gyengébb, mint az atomok közti kötés az egyes síkokon belül. A szén nanocsövek rendkívüli mechanikai tulajdonságaikról, rekord nagyságú szakítószilárdságukról lettek híresek [17, 18], ami a grafénra is jellemző, hiszen már a pusztán létezésével is ámulatba ejtette a tudományos társadalmat. Bár, az amerikai elméleti fizikus, P. R. Wallace már 1947-ben kiszámolta a sáv szerkezetét [19], még igen hosszú ideig tartotta magát az álláspont, miszerint ilyen kétdimenziós szerkezet, a Mermin–Wagner-tétel értelmében, termodinamikailag instabil, önmagában nem létezhet.¹ A tapasztalat szerint azonban nemcsak hogy létezik, de mechanikailag kifejezetten stabil, még szobahőmérsékleten is. Ez a nagyszerű, 2004-es felfedezés Novoselov és Geim érdeme [21], akik először izolálták, és vizsgálták meg a grafént, és akiket ezért, hat évvel később, fizikai Nobel-díjjal jutalmaztak. Eredményeik azóta számos kutatót inspiráltak arra, hogy ezzel az anyaggal, illetve az utóbbi időben már szintén intenzíven kutatott kétrétegű módosulatával kezdjenek el foglalkozni. A grafén csakhamar több meglepetéssel is szolgált az elektronikai tulajdonságait illetően. Mind az egyrétegű, mind pedig a kétrétegű grafénban (később mint ERG és KRG), az elektronok mozgása jól leírható egy kétdimenziós modellel: bennük úgynevezett *kétdimenziós elektrongáz* (2DEG) alakul

¹ Wallace számolását ekkor még csak elméleti jelentőségű modellnek tekintették, bár később jó kiindulási pont volt a grafit sáv szerkezetének leírásához [20].



1. ábra. A grafén és módosulatai [23]: (a) egyrétegű grafén, (b) grafit, (c) szén nanocső és (d) buckminsterfullerén (C_{60})².

ki [22], melyben a szénatomok közötti kovalens σ -kötésből kimaradó π -pályák elektronjai a grafitréteg síkjában szabadon mozoghatnak. Sávszerkezetéből kiderül, hogy az önmagában álló grafén *félfém*, tiltott sáv nélküli félvezető, amiben szobahőmérsékleten is meglepően nagy a töltéshordozók mozgékonyasága. Emellett a kicsiny töltésfluktuációk, vagyis a jó jel/zaj arány kedvező feltételeket teremtenek az esetleges nanoelektronikai alkalmazásokhoz. Napjainkban ugyanis a szilícium alapú elektronika már leginkább csak helyben toporog, teljesítménysűrűségének jelentős növelése már nem lehetséges, amit a számítógépek CPU-jába épített processzormagok egyre növekvő száma is jelez. Az Intel például 2011 novemberében mutatta be az új, 1 teraflopot is meghaladó teljesítményű processzorát [25], amiben több, mint ötven processzormag dolgozik. A tranzisztorok, és általában véve az áramköri elemek zsugorítása mára tehát elérte azt az elvi határt, ami után a kvantumfizika felerősödő hatásai már teljesen megváltoztatnák működésüket, és olyan jelenségek lépnének fel, amelyekkel eddig még nem kellett számolni. A fizika alaptörvényei akadályát képezik tehát a jelenlegi technológia további fejlesztésének, pusztán a miniatürizálás ezután már nem vezethet eredményre. Moore törvénye, mely kimondja, hogy a számítógépek teljesítménye másfél évente megduplázódik, a mindmáig jól bevált technológiával nem tartható többé. Forradalmian új eszközökre van szükség, amiket a félvezetőipar már régóta kétségbeesetten keres. Az egyik

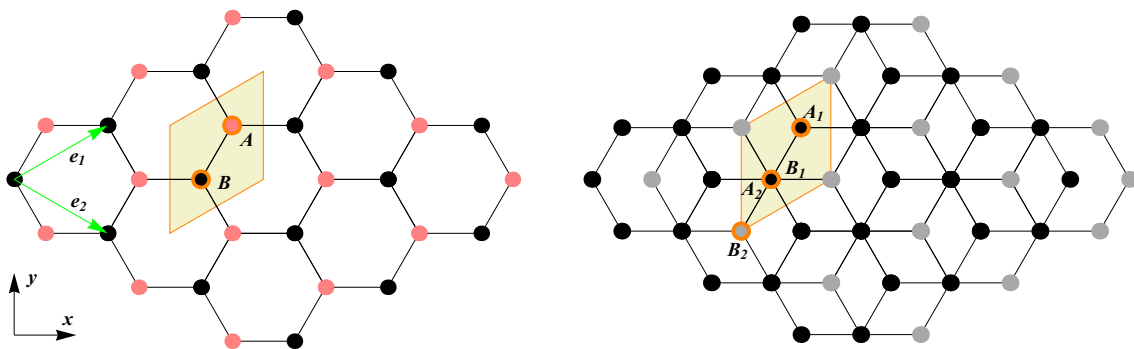
² A fullerénben a 60 szénatom egy gömbfelületen ötös és hatos gyűrűket alkotva egy fociabdára emlékeztető molekulát alkot. Az ötszögös gyűrűk eredményezik a görbületet, a fullerén ezért lesz gömb alakú, ellentétben a tisztán hatszögös síkbeli grafénnal. A C_{60} -at 1985-ben fedezték fel, amit 1996-ban kémiai Nobel-díjjal honoráltak [24]. Vegyük észre, hogy a fullerén nulla dimenziós, a szén nanocső egydimenziós, a grafén kétdimenziós, míg a grafit és az ún. gyémántrácsban kristályosodó gyémánt háromdimenziós módosulata a szénnek!

potenciális megoldást a szén nanocső kínálta, ám ez elbukott a nanocsövek ipari méretekben ma még szinte reménytelenül nehézkes megmunkálhatósága miatt. Még laboratóriumi körülmények között is bonyolult probléma nagy számú nanocső manipulálása, nanométeres pontossággal történő elhelyezése, főleg, ha egy komplex áramkört kell belőlük egyesével összerakni. Ezzel szemben a grafén nagy előnye, hogy belőle viszonylag egyszerűen méretre lehet szabni a különböző elektronikai alkatrészeket, ideális alapanyaga lehet például a jövő tervezérelt tranzisztorainak. Látható tehát, hogy a nanoelektronikával foglalkozó kutatók az ipar oldaláról is erősen motiválva vannak ennek az új anyagnak a megismerésében, alkalmazásához szükséges technológiák mielőbbi kidolgozásában, a benne rejlő lehetőségek alapos feltérképezésében. Ezek a lehetőségek pedig igen biztatóak! Az ezidáig legkisebb tranzisztor is grafénból készült el az IBM műhelyében 2008-ban, vastagsága egyetlen atom, szélessége tíz atom, működési frekvenciája 26 GHz [26].

A grafén sáv szerkezete

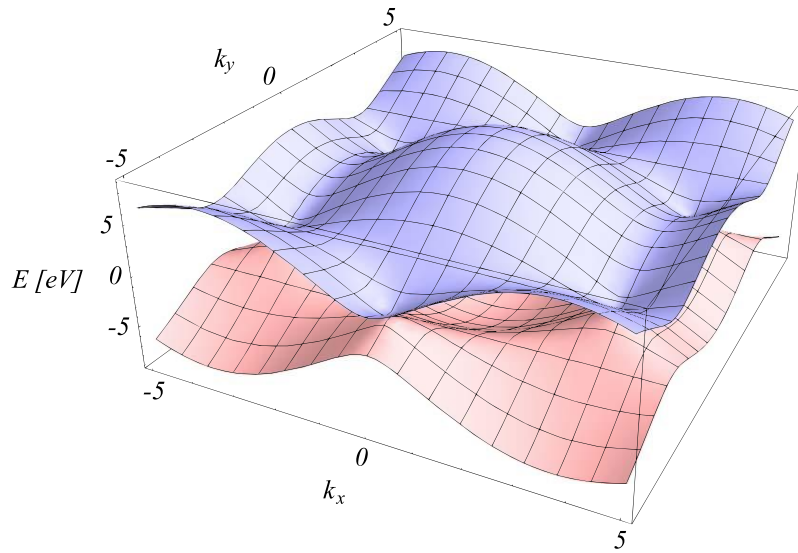
Az ERG Hamilton-operátorának, illetve sáv szerkezetének felírásához [18] célszerű kiindulni a szoros kötésű közelítésből [27]. Amint a 2. ábrán látható, hatszögrácsos elemi cellájában két nemekvivalens rácspont található. Ennek az impulzustérben is hatszögrács felel meg, melynek Brillouin-zónájában ugyancsak két nemekvivalens pont van, jelölésük általában K és K' . A legegyszerűbb esetben, mikor eltekintünk az elektronok hullámfüggvényeinek átfedésétől, és csak elsőszomszéd kölcsönhatásokat veszünk figyelembe, az alábbi eredményre jutunk [19]:

$$E_{\text{ERG}}(\mathbf{k}) = \pm \gamma_0 \sqrt{3 + 2(\cos \mathbf{k} \mathbf{e}_1 + \cos \mathbf{k} \mathbf{e}_2 + \cos \mathbf{k}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2))}, \quad (1)$$



2. ábra. Az egyrétegű grafén (balra), illetve a kétrétegű grafén (jobbra). Az ERG elemi cellája két atomot tartalmaz. Azonos színnel jelöltük az ekvivalens pozíciókban levő atomokat, vagyis amelyek az elemi rácsvektorokkal egymásba átvihetők. A KRG elemi cellája négy atomos, és a középső két atom (B_1 és A_2) egymás felett helyezkedik el. Az azonos színű atomok alkotta síkok ugyanúgy rétegződnek egymásra, mint a grafitban (Bernal-féle pakolás).

ahol \mathbf{e}_1 és \mathbf{e}_2 a 2. ábrán látható elemi rácsvektorok, γ_0 pedig az elsőszomszéd kölcsönhatáshoz rendelt átugrási (*hopping*) integrál, melynek értéke megkapható például első elvekből számolt sávszerkezetre való illesztéssel [28]: -2.97eV . Ezt a diszperziós relációt ábráztuk a 3. ábrán. Látható, hogy a hatszögárcsos Brillouin-zóna rácspontjaiban a diszperziós reláció



3. ábra. Vegyértékkötési és a vezetési sáv ERG-ben, a lineáris tartományt meghaladó energiákra, az (1) képlet alapján.

kis energiákra, csúcsaiknál érintkező kúpokat határoz meg, amelyek ezen pontok kis környezetében tehát lineáris kapcsolatot teremtenek az impulzus és az energia között. Mindebből következik, hogy a kvázirészecskék nyugalmi tömege nulla [29, 30]. Ezen hat pont környékén az elektronok és a lyukak mint a Dirac-egyenlet feles spinű relativisztikus részecskéi viselkednek, minél fogva *Dirac-fermionok*nak nevezzük őket, a Brillouin-zóna hat rácspontját pedig *Dirac-pontok*nak (K és K') [31, 32]. Könnyen megmutatható, hogy elektrosztatikusan semleges és szennyezőktől mentes grafénban a Fermi-energia éppen ezeknek az energiájával lesz egyenlő, és ezért célszerű a Dirac-pontok energiáját az energiaskála nullszintjének választani. Miután az érdekes jelenségeket többnyire a Fermi-energia körüli, tehát egyben a Dirac-pont körüli elektronok alakítják, a szoros kötésű számolás eredményét sorbafejtjük a Dirac-pontok körül [29]. Az ezekhez tartozó állapotokat a külső elektromágneses terek összecsatolják, de ha ezek potenciáljai a rácsállandóhoz képest térben lassan változnak, akkor a Hamilton-operátor szétesik két 2×2 -es blokkra, vagyis a K -hoz és K' -höz tartozó állapotok függetlenné válnak. Végül tehát egy folytonos spektrumú, effektív Hamilton-operátorhoz jutunk, amely a K és K' pontok körüli, \pm néhány eV-os töltéshordozókra lesz pontos (lásd a 4(a) ábrát). Egy adott

Dirac-pont, pl. a K környezetében, $\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0$ tehát egy 2×2 -es mátrixként áll elő:³

$$\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0 = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_- \\ p_+ & 0 \end{pmatrix} = v_F(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) = v_F \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}, \quad (2)$$

ahol $v_F \approx 10^6 \text{ m/s}$ a Fermi-sebesség, $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ a Pauli-mátrixokból képzett xy síkbeli vektort jelöli, $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla = (p_x, p_y)$ pedig az impulzusoperátor vektorát, amit az adott K Dirac-ponttól mérjük. Inhomogén elektrosztatikus térben $\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0$ természetesen kiegészül egy $-e\Phi \mathbb{I}$ taggal, ahol Φ az elektrosztatikus tér potenciálja, \mathbb{I} pedig a 2×2 -es egységmátrix. A (2) formula felírásánál eltekintettünk a külső mágneses tér hatásától, ami a legtöbb esetben realiztikus feltevés, és az elektron spinjétől is, amiben pedig diagonális az ezt is figyelembe vevő Hamilton-operátor. Az ebből adódó degenerációt egy 2-es szorzóval vesszük figyelembe éppúgy, mint a K - K' miatti degenerációt. A σ Pauli-mátrixok tehát nem a feles elektronspin miatt jelentek meg, hanem a kétatomos elemi cella miatt, de a formalizmus hasonlósága okán, ezt a belső szabadsági fokot *pseudospin*nek nevezik. Vegyük észre, hogy az érintkező kúpok egy *gap* nélküli sáv szerkezetet határoznak meg, amiben kémiai adalékolás nélkül is, tetszőlegesen kis potenciálkülönbséggel kelthetünk n és p típusú töltéshordozókat, és a grafént ezért a félfémek közé soroljuk [7, 8, 27]. Ez könnyen megvalósítható például egy, a grafénra helyezett kapuelektrodával, illetve több ilyennel, tetszőleges geometriájú n - p átmenetek hozhatóak létre. Ehhez a jelenségkörhöz köthető az ún. *Klein-paradoxon*, illetve a Klein-alagutazás [15, 33] is. Ebben egy elektron egy olyan potenciálgáton hatol át, amelynek magassága meghaladja az elektron energiáját, ezért azt várjuk, hogy a potenciál szélességével exponenciálisan csökken az átjutás valószínűsége. Mivel azonban az elektron nem evaneszcens hullám alakjában, hanem egy lyukállapotként halad tovább a potenciálgát belsejében, az átjutás valószínűsége függetlenné válik a potenciálgát szélességétől. A paradoxon feloldása tehát az, hogy itt nem igazi alagutazásról van szó, létezik haladó hullám alakú megoldás az átmenet mindkét oldalán [33]. Ez a jelenség megfigyelhető a grafén kétrétegű módosulatában is [34].

$\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0$ pontosságát kísérletileg is igazolták már szögfelbontásos fotoemissziós spektroszkópiával (angol rövidítése ARPES) [35]. $\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0$ sikeresen írja le továbbá az ERG-ben lejátszódó folyamatok sokaságát, például az egyik legérdekesebbet, az anomális kvantum Hall-effektust, amikor a Hall-vezetőképességben a platók az egész számok helyett a fél-egész számokhoz igazodnak [7, 8].⁴

A kétrétegű grafén (KRG) esetében ennél kissé bonyolultabb a helyzet. A sáv szerke-

³ Ekkor a K' körüli Hamilton-operátor $\sigma_x \mathcal{H}_{\text{ERG}}^0 \sigma_x$ -szel lesz egyenlő. Ennek az unitér transzformációnak köszönhetően a diszperziós reláció ugyanaz lesz mindegyik Dirac-pont körül. Az ebből adódó degenerációt egy 2-es szorzóval szokás figyelembe venni.

⁴ Bár ezt a jelenséget más anyagokban csak a folyékony hélium hőmérsékletén lehetett megfigyelni, grafénban ez már szobahőmérsékleten is lehetséges. Ennek jelentősége van többek közt az ellenállás-kvantum szabványosításában is [36].

zet meghatározásához vagy sűrűségfüncionál-elméletet használunk [37], vagy ismét a szoros kötésű modelltől indulunk ki [38, 39]. Az utóbbi választás esetén, és csak elsőszomszéd kölcsönhatásokat figyelembe véve, a π -pályákhoz tartozó energiákat az alábbi alakban kapjuk meg:

$$E_{\text{KRG}}(\mathbf{k}) = \pm\gamma_1(\sqrt{3.25 + 2(\cos \mathbf{k}\mathbf{e}_1 + \cos \mathbf{k}\mathbf{e}_2 + \cos \mathbf{k}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2))} \pm 0.5). \quad (3)$$

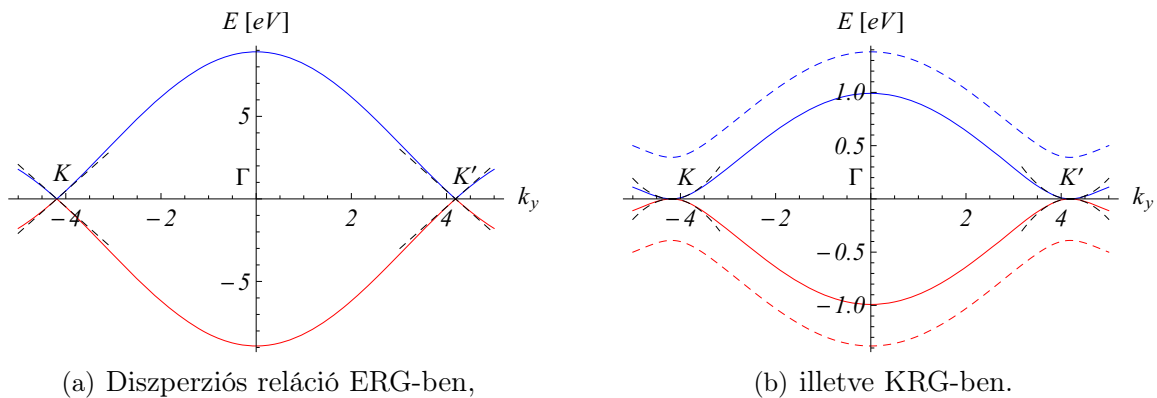
Ezt a diszperziós relációt ábrázoltuk a 4(b) grafikonon. A K és K' pontokban érintkező két görbének felelnek meg az A_1 és B_2 rácspontokban lokalizált állapotok, míg a $\pm\gamma_1$ -gyel eltoltt energiájú görbék adják meg az A_2 és B_1 rácspontokban lokalizált állapotok energiáját. Célszerű lesz ismét a Brillouin-zóna csak egyik K pontjára koncentrálni, megadni egy effektív, alacsony energián érvényes alakját a Hamilton-operátornak. Eltekintve az elektronspintól, a Hamilton-operátor ekkor egy 4×4 -es mátrix lesz, ami az A_1 , A_2 , B_1 és B_2 valós térbeli pontok körüli állapotokat keveri (lásd a 2. ábrát). Operátorunk diagonális elemei, ebben a bázisban, az első és a második réteg π -elektronokra vonatkozó atomi energiaszintjeinek különbségével arányos, ha azonban a két réteg egyenértékűnek tekinthető, ez az energiarés nullával egyenlő. A nemdiagonális elemek között vannak az egy rétegen belüli A és B pontok közötti ugrálást kifejező tagok (hopping integrálok), amelyek egy v csatolási állandószerő a p_{\pm} operátorokkal egyenlők. Ennél gyengébb, v_3 csatolási állandóval vannak jelen az A_1 - B_2 hopping tagok, amiknek csak viszonylag alacsony energiákon, kb. ± 100 meV-ig van jelentősége, ezért sokszor elhanyagolhatóak. Most azonban ezt is figyelembe véve, a Hamilton-operátor tehát az alábbiak szerint hat:

$$\mathcal{H}\psi = \xi \begin{pmatrix} 0 & vp_- & 0 & v_3p_+ \\ vp_+ & 0 & \xi\gamma_1 & 0 \\ 0 & \xi\gamma_1 & 0 & vp_- \\ v_3p_- & 0 & vp_+ & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_{A_1} \\ \psi_{B_1} \\ \psi_{A_2} \\ \psi_{B_2} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

ahol $v = \sqrt{3}a\gamma_0/2 \approx 10^6$ m/s és $v_3 = \sqrt{3}a\gamma_3/2 \approx 10^5$ m/s. Itt $a = 2.42$ Å a rácsállandó, $\gamma_0 \approx 3.16$ eV az elsőszomszéd kötés energiája egy síkon belül, $\gamma_1 \approx 0.39$ eV a B_1 - A_2 dimer kötéshez rendelhető energia, és $\gamma_3 \approx 0.315$ eV az A_1 - B_2 kötés energiája. A γ együtthatók számszerű értékei grafiton végzett mérések eredményei [40–42]. A $\xi = \pm 1$ paraméter választja ki a két nemekvivalens K pont egyikét. Felírva a Schrödinger-egyenletet a (4) kifejezésben szereplő operátorral, négy skaláregyenletet kapunk, melyekből ψ_{A_2} -t és ψ_{B_1} -et eliminálva két egyenlethez jutunk ψ_{A_1} -re és ψ_{B_2} -re. Kiválasztva a négy sajátenergiából abszolút értékben a két legkisebbet, és feltéve, hogy ezek jóval kisebbek, mint γ_1 , a ψ_{A_1} és ψ_{B_2} komponensekhez ezt a Hamilton-operátort rendelhetjük:

$$\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2m}p_-^2 + \xi v_3p_+ \\ -\frac{1}{2m}p_+^2 + \xi v_3p_- & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Itt $m = \gamma_1/2v^2 \approx 0.035m_e$ az effektív tömeg, és m_e az elektron nyugalmi tömege. Csak úgy, mint ERG-nél, $\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0$ levezetésénél is a Dirac-pontokhoz igazítottuk az energiaskála nullpontját, az impulzust pedig a K (illetve a K') ponttól mérjük. Összevetve a (2) és (5) kifejezéseket, illetve ezek diszperziós relációját (4. ábra) megállapítható, hogy KRG-ben a $p^2/2m$ alakú diszperziós reláció kvadratikus, ami véges tömegű kvázirészecskékre utal, ellenében a nulla tömegű Dirac-fermionokkal ERG-ben. Továbbá sejthető az is, hogy KRG-ben az impulzusoperátorok második hatványa miatt, egy adott energiához több állapot tartozik, mint ERG-ben. Például minden k impulzusú, síkhullám alakú megoldáshoz létezik egy ik impulzusú evaneszcens hullám is, melyek pontos alakjáról az 1. fejezetben lesz szó.



4. ábra. Az (a) ábra megfelel a 3. ábra $k_x = 0$ metszetének, melyet a K , Γ és K' impulzustérbeli pontok jelölnek ki, és ahol Γ a Brillouin-zóna középpontja ($\mathbf{k}_\Gamma = \mathbf{0}$). Kék vonal jelöli az elektronállapotokat (n típus), piros a lyukállapotokat (p típus), és szaggatott fekete az alkalmazott sorfejtéseket. KRG-ben a színes, szaggatott görbékkel jelölt, γ_1 -gyel nagyobb energiájú állapotok azok, melyekről az effektív $\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0$ már nem ad számot. Látható, hogy γ_1 valóban jóval nagyobb, mint azok az energiák, melyekre a kvadratikus közelítés még jogosnak mondható.

$\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0$ pontosságát szintén számos méréssel igazolták már, többek közt ARPES-sel [43] és kvantum Hall-effektus (QHE) mérésekkel, elsőként Novoselov és munkatársai [44]. Míg ERG-ben a Hall-vezetőképesség fél-egész számú többszöröse $4e^2/h$ -nak⁵, KRG-ben újra az egész számoknál vannak a platók, azonban a 0 indexű Landau-szintnek megfelelő plató hiányzik. Az anomális QHE jelenség azzal magyarázható, hogy a grafénban a legelső, vagy ha úgy tetszik, a nulladik Landau-szint zérus energiánál van, és ez az állapot ERG-ben négyszeresen, míg KRG-ben nyolcszorosan degenerált.

Ahhoz, hogy lássuk, mennyire reálisak a számolásaink során alkalmazott modellek feltevései és közelítései, vizsgáljuk meg érvényességi tartományukat, és lássunk néhány valós paramétert, amik kielégítik a kapott feltételeket! Az elektronok mozgásáról a dolgozatban tárgyalt rendszerek mindegyikében feltételezzük, hogy a ballisztikus, vagyis az l_{sz} átlagos szá-

⁵ Az ellenálláskvantum reciprokában a négyes faktor az állapotok fent említett $2 \cdot 2 = 4$ -szeres degenerációja miatt van jelen.

bad úthosszuk jóval nagyobb, mint a szórópotenciál R sugara.⁶ A szórópotenciált pedig akkor tekinthetjük lépcsőszerűnek, ha a vezetési elektronok tipikus λ hullámhossza jóval nagyobb a potenciállépcső, vagyis a térerősség változásának d átmeneti szélességénél, aminek nyilván R -nél is jóval kisebbnek kell lennie.⁷ Az a rácsállandónál ugyanakkor d -nek jóval nagyobbnak kell lennie, hogy a hirtelen potenciálugrás ne indukáljon átmenetet a különböző K pontokhoz tartozó állapotok között, illetve hogy eltekinthessünk a potenciál gradiensétől függő tagoktól, amik a Schrieffer–Wolff-transzformáció során lépnek fel [50]. Tehát mindezt egybevetve, a rendszer karakterisztikus méreteinek az alábbi viszonyban kell állniuk egymással:

$$a \ll d \ll R \ll l_{sz} \text{ és } d \ll \lambda . \quad (6)$$

A (szemi)klasszikus közelítésnek is van egy feltétele, mégpedig az, hogy $\lambda \ll R$, hiszen csak ekkor lehet egyáltalán elektronnyalábról, és görbék mentén terjedő részecskékről beszélni. Tekintsük először az egyrétegű grafént, melyben minden feltétel kielégíthető a paraméterek alábbi megválasztásával: $E = 40$ meV a bejövő elektronok energiája, $V = 80$ meV a kapupotenciál, $R = 1\mu\text{m}$ és $d = 10$ nm [51] (lásd az 1.1. ábrát). Ekkor $k_i R = k_o R = 60.8$, és $\lambda = 103$ nm $= 10.3 d = 0.103 R$. Kétrétegű grafénban az alábbi paraméterek felelnek meg a kikötéseknek: $E = 100$ meV, $V = 200$ meV, $R = 1\mu\text{m}$ és $d = 3$ nm. Ekkor $k_i R = k_o R = 376$, és $\lambda = 16.7$ nm $= 5.57 d = 0.0167 R$. A 4(b) ábrán látható, hogy KRG-ben körülbelül $\gamma_1/2 \approx 200$ meV-ig használható a kvadratikus közelítés a diszperziós relációban, utána az energia közel lineáris függvénye lesz a hullámszámnak. Az 1. és a 2. fejezetekben elhanyagoljuk a v_3 -mal arányos tagokat a (4) Hamilton-operátorban, ami a 200 meV-ig terjedő tartománynak elsősorban a felső felében lesz jogos közelítés, hiszen a v_3 -mal arányos *háromszögletű gyűrő hatás* (angolul *trigonal warping*) [38, 39, 47] a néhányszor 10 meV-ig terjedő tartományban játszik jelentős szerepet, 100 meV környékén már elhanyagolható. A 3. fejezetben azonban v_3 -at nem elhanyagolva, az alacsonyabb energiákon tapasztalható anizotrop diszperziós reláció hatásait fogjuk megvizsgálni (3.3. ábra).

A ballisztikus esetben, az l_{sz} átlagos szabad úthosszra csupán az a feltételünk, hogy minél nagyobb legyen a kísérleti elrendezés legnagyobb méreténél, ami a fenti példában nagyságrendileg 1 mikron, a 3. fejezetben pedig a 3.2. ábrán látható elrendezés x irányú mérete, ami az ott bemutatott konkrét példában szintén a mikronos nagyságrendbe esik. Számos tanulmány szerint ez a feltétel mindkét graféntípusban teljesíthető még szobahőmérsékleten is [52–56]! Tiszta mintát feltételezve, az elektronok rugalmatlan szórásának forrása a hőmérsékletfüggő elektron-fonon kölcsönhatás. Ugyanakkor, a töltéshordozók nagy koncentrációja esetén, kevésbé tiszta mintákban is elhanyagolható a szennyezőkön való szórás, kisebb koncentrációknál pedig szintén leárnyékolható a szórópotenciál a minta nagy dielektromos állandójú fürdőbe

⁶ Ballisztikus [45], és rendezetlen [46–48] grafén rendszerek transzporttulajdonságaival szintén sokan foglalkoztak már.

⁷ Az ellenkező, $\lambda \ll d$ határesetre is találunk számolást a szakirodalomban [46, 49].

helyezésével [52]. Chen, illetve Morozov mérései szerint szobahőmérsékleten ERG-ben [54] és KRG-ben [55] is több mikron lehet a szabad úthossz, és a szórásban az akusztikus módusok játszókat a főszerepet. Borysenko és munkatársai perturbációs sűrűségfunkcionál-elmélet (DFPT) segítségével, első elvekből számolták ki KRG-ben a fononokon történő szórás rá-tát [53], ami ugyancsak 2 mikront meghaladó szabad úthosszt eredményezett, és szintén az akusztikus fononok adták a fő járulékat. Cikkükben megjegyzik, hogy a KRG elektro-mos tulajdonságai jobban hasonlítanak a tömbi grafitéhoz, mint az ERG-re kapott eredmé-nyek [57], ami megfelel az intuitív várakozásoknak. Még sokkal hosszabb szabad úthosszt jó-solnak Gunlycke és társai grafén nanoszalagokban (GNS), ami körülbelül 70 mikron egy 11 nm széles, egyrétegű, cikk-cakk szélű, hidrogénatomokkal lezárt, szobahőmérsékletű gra-fénszalagban [56], feltéve, hogy eltekinthetünk a szennyezőkön való szórástól. Eredményeik szerint a kémiai potenciállal növekszik a szabad úthossz, ami egyenes arányban áll a szalag szélességével is, egy adott pontig. Az elektronok energiájának azonban kisebbnek kell lennie a fonon emissziós határértéknél, ami körülbelül 0.16 és 0.18 eV-nál van az akusztikus, illetve az optikai ágra nézve. A végtelen, kétdimenziós grafénréteg, illetve a szén nanocső elektroni-kájával való jelentős különbség az eltérő peremfeltételekből fakad. A grafénszalagban befagy az oldalirányú mozgás, és a széleken a Dirichlet-határfeltételt kell kielégítenie a hullámfügg-vénynek, míg a nanocsövek esetében a periodikusit. Emiatt, a szalagban tiltottá válik egy, a nanocsövekben jelentős visszaszórás folyamat, és l_{sz} a szélességgel arányosan egészen addig nő, amíg olyan széles nem lesz a minta, hogy a következő transzverzális módus már termi-kusan gerjeszthetővé válik. Ekkor kezd el a rendszer a végtelen széles grafénhoz hasonlítani. Természetesen segíthetünk mindezen a hőmérséklet csökkentésével is, ami a fononok számát tovább redukálva, még nagyobb szabad úthosszt biztosít.

A fenti, (6) feltételrendszerben tehát igazából csak az a rácsállandó, és a diszperziós relá-ciók vannak kőbe vésve, az összes többi paraméter tekintetében van egy kis mozgásterünk. A számolások szempontjából lényeges szerepet játszó kR szorzat a fent megadott nagyságrendi-leg 100-as értéktől tehát ± 1 nagyságrenddel eltérhet mindkét típusú grafén esetében, vagyis kR -t illetően, a 10-től néhány-szor 1000-ig terjedő tartományt tekinthetjük a kísérletileg reális paraméterek tartományának.

Elektronoptika, avagy kausztikák grafénban

A fény kettős természetének felismerése Albert Einstein nevéhez köthető, aki 1905-ben, elsőként a fotoelektromos jelenség kapcsán vezette be a fotonok fogalmát. Azóta tudjuk, hogy a fény hullámként terjed, de az anyaggal való kölcsönhatásában kvantált energiájú részecskéként viselkedik. Az anyagi részecskék természetének kettősségét viszont Louis de Broglie írta le először 1923-ban, mikor hullámhosszt rendelt egy p_m mechanikai impulzusmomentumú részecskéhez:

$$\lambda = \frac{h}{p_m},$$

ahol h a Planck-állandó.

Jóllehet William Rowan Hamilton már 1831-ben felfedezte a hasonlóságot a tömegpontok potenciáltérben való trajektóriái és a fénysugarak inhomogén közegbeli görbéi között, az analógia első alkalmazásáig majd száz év telt el, amikor 1925-ben H. Busch optikai alapokon magyarázta elektronnyalábok fókuszálódását elektromágneses terekben. Erwin Schrödinger pedig a hamiltoni párhuzam mentén, de Broglie elképzelését általánosítva dolgozta ki a részecskék terjedésének hullámmechanikáját, amit a Schrödinger-egyenlet formájában, 1926-ban publikált.⁸ Azóta, a mai napig számos alkalmazása született ennek az analógiának, erre épül például az elektronmikroszkópia működési elve, és a dolgotatban is többhelyütt támaszkodni fogunk rá. A hullámoptikának és a kvantummechanikának az analógiája tehát a Helmholtz-egyenletnek, és a stacionárius Schrödinger-egyenletnek a formális ekvivalenciájából fakad. A klasszikus határesetben, ez a megfeleltetés a Hamilton–Fermat-elven keresztül jut érvényre, ezt tekintjük át most röviden [58].

Induljunk ki a Fermat-elvből, amiből levezethetőek a geometriai optika törvényei:

$$\delta \int_{P_1}^{P_2} n(\mathbf{r}) dr = 0, \quad (7)$$

miszerint a P_1 és P_2 pontokat összekötő görbe akkor lesz egy megvalósuló fénynyaláb pályája, ha a görbéje mentén felintegrált optikai úthossz a rögzített pontok közötti szomszédos pályákra variálva nullát kapunk. Ez nem feltétlen minimum, vagy maximum, lehet inflexiós pont is.

Most tekintsük egy pontszerű test mozgását zárt rendszerben a (P_1, t_1) és (P_2, t_2) rögzített téridő-koordináták között, és írjuk fel a mozgásegyenletét ugyancsak variációs formában:

$$\delta \int_{(P_1, t_1)}^{(P_2, t_2)} L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) dt = 0, \quad (8)$$

⁸ Vegyük észre, hogy mivel a hullámoptika magába foglalja a geometriai optikát, és az előbbinek az utóbbi csak egy közelítése, a geometriai optikának megfelelő klasszikus mechanikából egyáltalán nem következik triviálisan a hullámmechanika, vagyis a Schrödinger-egyenlet levezetésénél nagy szerepet kellett kapnia az intuíciónak!

ahol L a Lagrange-függvény, \mathbf{r} és $\dot{\mathbf{r}}$ pedig az általános koordinátákból, illetve azok időderívtjából alkotott vektor. Egy relativisztikus elektron Lagrange-függvénye:

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \beta^2} - e(\phi - \dot{\mathbf{r}} \mathbf{A}),$$

ahol $\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}$ az elektron sebessége, c a fénysebesség, $\beta = v/c$ a sebességparaméter, m és e az elektron nyugalmi tömege illetve töltése, ϕ az elektrosztatikus potenciál és \mathbf{A} a mágneses teret leíró vektorpotenciál. A vonatkozó Maxwell-egyenletek, $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}} - \nabla\phi$ és $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ felhasználásával, a Lagrange-féle mozgásegyenletekbe való behelyettesítés után visszakapjuk a mozgásegyenletet a megszokott Lorentz-erővel:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

Az optikai törésmutató a fotonok energiájának, vagyis hullámhosszának a függvénye. Mint látni fogjuk, az elektronoptikai törésmutató közvetlenül a teljes impulzusnak lesz a függvénye, ami szintén kifejezhető a de Broglie hullámhosszal. Az egyszerűség kedvéért azonban tegyünk most egy megszorítást, és szorítkozzunk egy monoenergiás nyalábra, melyben részecskék energiáját E -vel jelöljük. Ez elvezet minket a legkisebb hatás, vagy pontosabban fogalmazva a *stacionárius hatás* elvéhez:

$$\delta \int_{(P_1, t_1)}^{(P_2, t_2)} (L + E) dt = 0. \quad (9)$$

A teljes energiát az $E = \mathbf{v}\mathbf{p} - L$ alakjában visszahelyettesítve az időfüggés kiesik az egyenletekből:

$$\delta \int_{(P_1, t_1)}^{(P_2, t_2)} \mathbf{v}\mathbf{p} dt = \delta \int_{P_1}^{P_2} \mathbf{p}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0. \quad (10)$$

Megállapítható tehát, hogy a (7) Fermat-elv, és a (10) stacionárius hatás elve teljesen analógok egymással, amennyiben az elektronoptikai törésmutatót az impulzusnak a mozgás irányába mutató komponensével azonosítjuk. Az is kiderül, hogy az optikai törésmutatóval analóg mennyiség az impulzus, és nem a sebesség, ami nagy különbség relativisztikus elektronok, és/vagy véges mágneses tér esetén.

Tisztán elektrosztatikus térben, a momentum teljes mértékben mechanikai eredetű, és párhuzamos a trajektóriával. Mágneses tér jelenlétében ez azonban már nem lesz igaz:

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \beta^2}} + e\mathbf{A},$$

ahol a mágneses tér miatt megjelenő \mathbf{A} -val arányos tag mozgás irányába eső komponense megjelenik az elektronoptikai törésmutatóban is. Mivel a vektorpotenciál egy tetszőleges skalármező gradienseinek erejéig határozatlan, a belőle származtatható törésmutató sem lehet egyértékű fizikai mennyiség. Azonban a törésmutatóban megjelenő mértékszabadság a (10)

egyenlettel meghatározott stacionárius pontokra, vagyis a mérhető fizikai valóságra nincs hatással, tehát nem is szükséges, hogy egyértékű függvénye legyen a helynek!

Az elektronoptikai analógia egy másik szempontból is sérül, ha mágneses tér is jelen van. Tisztán elektrosztatikus tér esetén ugyanis az elektronok hullámfrontja az optikaihoz hasonlóan definiálható, mint a részecskék azonos fázisú pontjainak halmaza, és ez mindenhol merőleges lesz az elektronpályák görbéire. Véges mágneses tér esetén ez már nem lesz igaz, mert ekkor nem a trajektóriát érintő mechanikai impulzusmomentum-vektor, hanem a teljes impulzusmomentum-vektor lesz merőleges a hullámfrontra, mely vektorok különbsége \mathbf{A} -val arányos.

Az elektronoptikai analógiára hivatkozva tehát, a klasszikus optika eszköztára, kis óvatossággal, bevethető a nemkölcönható, ballisztikus elektronok görbéinek számolásánál a legtöbb gyakorlati alkalmazásban. Amennyiben nem változik meg jelentősen a térerősség az elektronok hullámhosszának megfelelő távolságon belül, elégséges a diffrakciós problémákban hagyományosan alkalmazott Kirchhoff-integrálást használni az elektronoptikai problémákban is [58]. A térerősség túlzottan drasztikus ugrása a természetben leginkább csak az atommag közvetlen közelében fordul elő, és a számításaink során előforduló idealizált *lépcsőpotenciálok* esetében is figyelni fogunk rá, hogy a *lépcsők* ne legyenek túl meredek. Dolgozatom 2. és 3. fejezetében egy Kirchhoff típusú integrált fogunk levezetni és különböző grafén rendszerekre alkalmazni. Mint látni fogjuk, bár az elektronállapotokat ott spinorokkal lehet leírni, a propagáló sajátállapotok megoldják a Helmholtz-egyenletet, ezért továbbra is érvényben marad az analógia.

Számításaink során feltételezzük, hogy a rendszerben szabadon mozgó elektronok tartományonként jó közelítésben monoenergiásak, tehát nincsen nagyon szétkenve a spektrum. Ellenkező esetben, például a túl magas hőmérséklet következményeként, az energiafüggő törésmutató elektrononként eltérő értéke miatt, az egyébként éles diffrakciós kép elmosódhat.

A dolgozat felépítése

Ballisztikus, kétdimenziós elektrongáz áramának potenciállépcsőkkel, mint optikai törő felületekkel történő kontrollja immár két évtizede publikált kísérleti valóság [59]. Veselago már jóval korábban, a '60-as évek végén végzett úttörő munkát a negatív törésmutatójú rendszerek ma már igen népszerű területén [60], és az ő síklencséje nyomán később sok elméleti [61–63] és kísérleti [64–68] munka született. Utóbbiak közül is ki kell emelni az elektronok áramáról közvetlen képet alkotó pásztázó technikát ismertető munkákat [69, 70]. Ugyancsak pásztázó alagútmikroszkóppal nyert kísérleti bizonyosságot, hogy egy statikus szennyező környezetben, az elektronsűrűségben jelentkező anomális hullámmás leképezhető egy távoli pontban [71].

A grafén, 2005 óta tartó sikertörténete során a fentiekben hivatkozott elméleti és kísérleti

technikák teljes arzenálját alkalmazták már rá. Amint az számos kutatócsoport publikációjából kiderül, grafénban is sikerrel végeztek kísérleteket kapuelektrodákkal hangolható n - p átmenetekkel [51, 72–77]. Évekkel ezelőtt bizonyítást nyert már az is, hogy grafén nano-rendszerekben az elektronok árama negatív törésmutatójú közegben történő törésekkel és visszaverődésekkel jól leírható [78]. Mindezek az eredmények a grafén alapú elektronoptikai eszközök realitását támasztják alá, és munkánk során mi is erre építkeztünk.

A dolgozat 1. fejezetében, az egy- és kétrétegű grafénban létrejövő szórási folyamatokat vizsgáljuk egzaktul az 1.1. ábrán látható rendszerben, majd az eredményeket numerikusan is kiértékeljük és diszkutáljuk, elsősorban a szórópotenciál belsejére koncentrálna. Látni fogjuk, hogy a kör geometriájú potenciállépcső az elektronsugarakat egy gyűjtőlencséhez hasonlóan fókuszálni képes, de fókuszpont csak ERG-ben jelenik meg, KRG-ben nem. Különösen rövid hullámhosszak esetén, a lokális maximumok szembevető módon görbe vonalak mentén rendeződnek, melyeket gyűjtőgörbéként azonosítunk. Felismerve az analógiát, a görbék alakját a klasszikus geometriai optika keretein belül, negatív törésmutatóval magyarázzuk. A tapasztalt jelenségeket összefüggésbe hozzuk a Klein-paradoxonnal, és rávilágítunk a két-fajta grafénbeli n - p átmeneteken történő szórási folyamatok közötti különbségekre, különös tekintettel a fókuszpont hiányára KRG-ben [79, 80].

A *kausztikát*, vagy *gyűjtőgörbét*, mint egymást érintő fény- vagy kölcsönhatásmentes részcsonyalábok érintési pontjainak összességét definiáljuk, ami más szóval a sugarak burkolója. A kausztika mentén, a klasszikus, geometriai optikai értelemben vett fénynyaláb intenzitása divergál, tehát fizikailag helytelen képet ad a rendszerről. A 2. fejezetben a katasztrófaelméletből kiindulva keressük egy divergenciamentes, félklasszikus megoldását a problémának. A fejezet első részében a kausztikák elméleti hátterével foglalkozunk, és röviden ismertetjük a katasztrófaoptika releváns eredményeit [81–85]. Definiálni fogjuk a kausztikák *ekvivalenciaosztályait*, és kitérünk ezek jellemzésére. Az optikai analógiára építve, az 1. fejezetben ismertetett problémáknak egy divergenciamentes, Kirchhoff típusú integrál formájában szemiklasszikus közelítését adjuk, melyet kiértékelve kvantitatívan is összevetjük az egzakt megoldással. Alkalmazni fogjuk a *skálatörvényeket*, melyek információval szolgálnak a rendszer rövid hullámhosszú, aszimptotikus viselkedéséről, vagyis a kausztikák finomszerkezetének és intenzitásának alakulásáról az energia függvényében. Amint látni fogjuk, ez az a határeset, amelynél az egzakt számolás numerikusan egyre nehezebben értékelhető ki. Az alacsony energiájú határesetben persze az egzakt számolás pontos és gyors, feltéve persze, hogy a rendszer geometriája ezt megengedi [86].

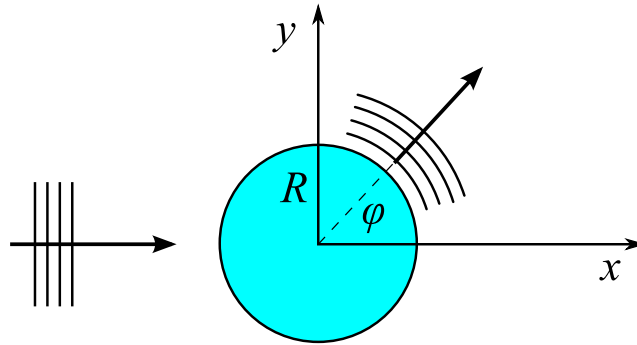
A 3. fejezetben már kizárólag kétrétegű grafénnal foglalkozunk, és az előző fejezetek közelítésén túllépve, egy véges v_3 -mal, figyelembe vesszük a háromszögletű gyűrő hatást is (*trigonal warping*). Ez egy minőségileg különböző, anizotrop problémához fog vezetni, melyben a diszperziós reláció energiakontúrjai már nem koncentrikus körök, hanem többé-

kevésbé szabályos háromszögre emlékeztető görbék. Ebből igyekszünk előnyt kovácsolni, és egy sík, n - n átmenet segítségével divergens elektronnyalábokat fókuszálni, ami ezidáig, KRG-ben n - p átmenetekkel nem sikerült. A háromszögletű, avagy a trigonális gyűrő hatást leíró v_3 tagon kívül, meg fogjuk vizsgálni egy újabb tagnak a hatását is a Hamilton-operátorban, amivel közelítőleg leírhatjuk a grafénrácstra ható külső mechanikai feszültségeket [87].

1. fejezet

Elektronok szóródása egy- és kétrétegű grafénban

Ebben a fejezetben előbb meghatározzuk az egy-, illetve kétrétegű grafénban (ERG és KRG) létrejövő elektronállapotokat, majd felírjuk a stacionárius Schrödinger-egyenlet megoldását az 1.1. ábrán látható kísérleti elrendezésre, ahol egy síkhullám szóródik egy hengerszimmetrikus potenciállépcsőn. Az egzakt kvantummechanikai megoldást egy végtelen összeg formájában kapjuk meg, amit numerikusan is kiértékelünk különböző energián bejövő elektronnyalábok és szórópotenciálok mellett. Ezt követően megmutatjuk, hogy elegendően rövid hullámhosszak esetén, az elektronok klasszikus pályái a geometriai optikában megszo- kott módon, leírhatóak a Snellius–Descartes-törvénnyel, amelyben a törésmutató negatív, ha az átmenet határán sávváltás történik, vagyis Klein-alagutazás lép fel [15, 33, 34]. Látni fog- juk, hogy a negatív törésmutató annak a következménye, hogy a valenciasávbéli részecskék hullámszámvektora, és csoportsebessége ellentétes irányú. Meg fogjuk vizsgálni egy síkátme- netnél a transzmisszió valószínűségének szögfüggését is, amiben nagy különbség mutatkozik a kétfajta grafén között. Végül pedig differenciálgeometria segítségével írjuk le az egzakt megoldásban is határozottan kirajzolódó kausztikák görbéit.



1.1. ábra. Az 1. és a 2. fejezetben tárgyalt rendszereknek ERG-ben és KRG-ben azonos a geometriá- ja: az xy síkban a pozitív x irányba terjedő kétdimenziós elektrongáz síkhulláma az origóba helyezett R sugarú hengerszimmetrikus, konstans V magasságú potenciálhegyen rugalmasan szóródik.

1.1. Szórási folyamatok egyrétegű grafénban

Tekintsük az 1.1. ábrán látható rendszert ERG-ben! Ekkor a Dirac-pont közelébe eső energiákra a Hamilton-operátor az alábbi egyszerű alakban írható fel:

$$\mathcal{H}_{\text{ERG}} = \mathcal{H}_{\text{ERG}}^0 + V(r)\mathbb{I} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + V(r)\mathbb{I} ,$$

ahol $c \approx 10^6 m/s$ a Fermi-sebesség, és $\mathbf{p} = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{r}$ a kétdimenziós impulzusoperátor. A Pauli-mátrixokból felépülő $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ operátor, és az \mathbb{I} egységmátrix az izospintérben hatnak. A $V(r) = V\Theta(R-r)$ szórópotenciál hengerszimmetriáját kihasználva írjuk fel $\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0$

operátort is az (r, φ) polárkoordinátákban!

$$\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0 = -i\hbar \left(\sigma_r \partial_r + \frac{1}{r} \sigma_\varphi \partial_\varphi \right), \quad (1.1)$$

ahol ∂_r és ∂_φ az origótól való távolság és a szög szerinti parciális deriváltakat jelentik, σ_r és σ_φ pedig definíció szerint: $\sigma_r = \cos \varphi \sigma_x + \sin \varphi \sigma_y$ és $\sigma_\varphi = -\sin \varphi \sigma_x + \cos \varphi \sigma_y$. A forgásszimmetriának megfelelően keressük a sajátfüggvényeket Bessel-függvényekkel kifejezett spinorok formájában, és alkalmazzuk a parciális hullámok módszerét [88]! A stacionárius Schrödinger-egyenletbe való közvetlen behelyettesítéssel könnyen belátható, hogy az alábbi függvények megoldását adják a problémának:

$$\mathbf{h}_j^{(1,2)}(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} H_{j-\frac{1}{2}}^{(1,2)}(k_o r) e^{-i\varphi/2} \\ i\tau_o H_{j+\frac{1}{2}}^{(1,2)}(k_o r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi} \quad \text{és} \quad (1.2a)$$

$$\mathbf{j}_j(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} J_{j-\frac{1}{2}}(k_i r) e^{-i\varphi/2} \\ i\tau_i J_{j+\frac{1}{2}}(k_i r) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} e^{ij\varphi}. \quad (1.2b)$$

A z irányú teljes impulzusmomentum operátora $J_z = -i\hbar\partial_\varphi + \hbar\sigma_z/2$, ami felcserélhető az (1.1) Hamilton-operátorral, tehát megmaradó mennyiség. Eszerint jó kvantumszám a diszkrét, fél-egész értékeket felvevő $j \in \mathbb{J} \equiv \{\dots, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$. A szóródó részecskék energiája az átmeneten kívül E ($r > R$), belül pedig $E - V$ ($r < R$). Teljesen általános esetben, mindkét tartományban lehet negatív és pozitív is az energia. Bár a numerikus kiértékelés során többnyire azt az esetet vizsgáljuk, mikor $0 < E$, és $E - V < 0$, az analitikus számolás során nem zárjuk ki a többi esetet sem. Ha az elektronok energiája pozitív, akkor vezetési sávbeli n típusú töltéshordozóként terjednek, ha viszont negatív az energiájuk, akkor valenciasávbeli p típusú töltéshordozóként, lyukállapotban vannak jelen a rendszerben [33]. A részecskék hullámfüggvényében k_i és k_o jelöli a hullámszámokat, melyeket polárkoordináta-rendszerben ábrázolunk, vagyis definíció szerint mindig pozitívak: $k_o = |E|/(\hbar c)$ és $k_i = |E - V|/(\hbar c)$. A hullámszámvektor irányyszögét φ_0 -val jelöljük, amely azonban nem összetévesztendő a síkhullám csoportsebességének irányyszögével, ami lyukállapotban ellentétes irányt jelöl, vagyis éppen π -vel nagyobb. Az 'i' és 'o' indexek az átmeneten belüli, illetve kívüli tartományra utalnak, melyekre később úgy is hivatkozunk, mint belső és külső tartomány. Az energia előjelét τ_i és τ_o adják meg. $\mathbf{h}_j^{(1)}$ és $\mathbf{h}_j^{(2)}$ kifutó, illetve befutó hengerhullámokat írnak le a külső tartományban, míg \mathbf{j}_j a belső állapotfüggvény bázisa. A $H_j^{(1,2)}$ Hankel-függvényeket a J_j első- és Y_j másodfajú Bessel-függvények állítják elő. A belső tartományban az origóbeli szingularitása miatt azonban, a másodfajú Bessel-függvényt ki kell zárni a megoldásból [89].

Az (1.2)-ben megadott parciális hullámok közül tekintsünk egy befutó $\mathbf{h}_j^{(2)}$ hengerhullámot, és annak a szóródását! Ez a hullám részben visszaverődik egy azonos momentumú és

energiájú kifutó hullámba, és részben be is hatol a belső tartományba:

$$\psi_j^{(o)} = \mathbf{h}_j^{(2)} + S_j \mathbf{h}_j^{(1)} \quad \text{és} \quad (1.3a)$$

$$\psi_j^{(i)} = A_j \mathbf{j}_j. \quad (1.3b)$$

Az S_j szórési mátrixot és az A_j együtthatókat a határfeltételek rögzítik, miszerint a hullámfüggvény folytonosan megy át az átmenet határán: $\psi_j^{(i)}(R, \varphi) = \psi_j^{(o)}(R, \varphi)$. (Az adott j impulzummomentumú hengerhullám szóródását leíró megoldást jelöljük ψ_j -vel, míg a komplett síkhullám szóródását leíró megoldást Ψ -vel.) A határfeltételek alkalmazása után, az egyenletek rendezése az alábbi eredményre vezet:

$$S_j = \frac{\tau_o J_{j-\frac{1}{2}}(k_i R) H_{j+\frac{1}{2}}^{(2)}(k_o R) - \tau_i J_{j+\frac{1}{2}}(k_i R) H_{j-\frac{1}{2}}^{(2)}(k_o R)}{D_j} \quad \text{és} \quad (1.4a)$$

$$A_j = \frac{\tau_o \left(H_{j-\frac{1}{2}}^{(1)}(k_o R) H_{j+\frac{1}{2}}^{(2)}(k_o R) - H_{j+\frac{1}{2}}^{(1)}(k_o R) H_{j-\frac{1}{2}}^{(2)}(k_o R) \right)}{D_j}, \quad \text{ahol} \quad (1.4b)$$

$$D_j = \tau_i J_{j+\frac{1}{2}}(k_i R) H_{j-\frac{1}{2}}^{(1)}(k_o R) - \tau_o J_{j-\frac{1}{2}}(k_i R) H_{j+\frac{1}{2}}^{(1)}(k_o R). \quad (1.4c)$$

Tekintsük a síkhullám alakú sajátállapotát a rendszernek:

$$\Phi_{\varphi_0}(r, \varphi) = \eta(\varphi_0) e^{ikr \cos(\varphi - \varphi_0)}, \quad \text{ahol} \quad (1.5a)$$

$$\eta(\varphi_0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_0/2} \\ \tau e^{i\varphi_0/2} \end{pmatrix}. \quad (1.5b)$$

ERG-ben, $\eta(\varphi_0)$ tekinthető a részecske pszeudospinjének is, hiszen τ sajátértékkel sajátvektora a $\sigma_x \cos \varphi_0 + \sigma_y \sin \varphi_0$ operátornak. Tehát ha $\tau = 1$, akkor a részecske pszeudospinje egyirányba mutat a hullámszámvektorral, ha viszont $\tau = -1$, akkor ellentétes irányba. Eszerint τ a részecske helicitása, vagyis a helicitásoperátor sajátértéke, amit általában a $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$ szorzattal definiálunk.

Az (1.5)-ben felírt síkhullám kifejezhető a Hankel-függvényekkel is:

$$\Phi_{\varphi_0} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} \left(\mathbf{h}_j^{(1)} + \mathbf{h}_j^{(2)} \right) e^{-ij\varphi_0}. \quad (1.6)$$

Ezután (1.3) mindkét kifejezésére végrehajtva az (1.6)-ban definiált összegzést, a külső tartományban a teljes hullámfüggvény az alábbi alakot ölti:

$$\Psi^{(o)} = \Phi_{\varphi_0} + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} (S_j - 1) \mathbf{h}_j^{(1)} e^{-ij\varphi_0}, \quad (1.7a)$$

illetve a belső tartományban:

$$\Psi^{(i)} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{J}} i^{j-\frac{1}{2}} A_j \mathbf{j}_j e^{-ij\varphi_0} . \quad (1.7b)$$

Vegyük észre, hogy (1.7a)-ban a második tag írja le a szórt hullámot!

Összefoglalva tehát, előbb a határfeltételek alapján felírt, (1.4) kifejezésekből meghatározzuk az A_j és S_j együtthatókat, majd azokat behelyettesítve az (1.7) egyenletekbe kapjuk meg a teljes hullámfüggvényt az átmenet mindkét oldalán.

1.2. Szórási folyamatok kétrétegű grafénban

Idézzük fel $\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0$ (5) kifejezését, ami a kétrétegű grafén Hamilton-operátora! Ez az operátor a v_3 -mal arányos tag elhanyagolásával, az 1.1. ábrán látható rendszerben az alábbiak szerint alakul:

$$\mathcal{H}_{\text{KRG}} = \mathcal{H}_{\text{KRG}}^0 + V(r)\mathbb{I} = -\frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & p_-^2 \\ p_+^2 & 0 \end{pmatrix} + V(r)\mathbb{I} ,$$

ahol

$$p_{\pm} = -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) .$$

Itt m az elektronok effektív tömegét jelöli, és minden egyéb jelölés megegyezik az előző fejezetben használtakkal.

A rendszer hengersizimetriáját hasonló módon kihasználva, most is felírhatjuk $\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0$ sajátfüggvényeit Bessel-függvényekkel, egy spinor alakjában:

$$\mathbf{z}_j(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} Z_{j-1}(kr)e^{-i\varphi} \\ \tau Z_{j+1}(kr)e^{i\varphi} \end{pmatrix} e^{ij\varphi} . \quad (1.8)$$

Ha az $E = \tau \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ sajátenergia pozitív, vagyis $\tau = +1$, akkor elektronokról beszélünk, negatív energia esetén pedig lyukakról ($\tau = -1$) [33]. A k hullámszám meghatározására egyszerű összefüggés írható fel az energiamegmaradásból:

$$E_o = \tau_o \frac{\hbar^2 k_o^2}{2m} = E_i + V = \tau_i \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + V .$$

(1.8)-ban Z bármelyik Bessel-függvényt jelölheti: J -t, Y -t, I -t vagy K -t, amelyek közül az utolsó kettő az első és másodrendű módosított Bessel-függvények [89]. A teljes impulzusmomentum ismét jó kvantumszám lesz, de mivel $J_z = -i\hbar\partial_\varphi + \hbar\sigma_z$ operátorában most kétszeres súlyt kap a pszeudospinnek megfelelő tag, a hozzá rendelt kvantumszámok megengedett ér-

tékei az egész számok halmaza: $j \in \mathbb{Z}$.

A külső tartományban terjedő síkhullám hengerhullámokkal való kifejtése jelen esetben:

$$\Phi_{\varphi_0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_0} \\ -\tau_o e^{i\varphi_0} \end{pmatrix} e^{ik_o r \cos(\varphi - \varphi_0)} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{Z}} i^{j-1} \left(\mathbf{h}_j^{(1)} + \mathbf{h}_j^{(2)} \right) e^{-ij\varphi_0}. \quad (1.9)$$

Egyrétegű grafénban ez az (1.6) képletnek felel meg. Itt $\mathbf{h}_j^{(1,2)}$ \mathbf{z}_j -ből kapható az (1.8) képletben a $Z \rightarrow H^{(1,2)}$ behelyettesítéssel. A csoportsebességeknek megfelelően $\mathbf{h}^{(1)}$ -et a kimenő, míg $\mathbf{h}^{(2)}$ -t a bejövő hullámokkal azonosítjuk, a K másodrendű módosított Bessel-függvényből képezett \mathbf{k} hengerhullám pedig egy csillapodó hullám, aminek csak a határfeltételek megoldásánál lesz szerepe, de egyébként áramot nem szállít. Amíg az félreértést nem okozhat, ugyanazzal a jelöléssel látjuk el az egymásnak megfeleltethető függvényeket ERG-ben és KRG-ben, mint például $\mathbf{h}_j^{(1,2)}$.

Először tekintsünk újra csak egyetlen bejövő hengerhullámot! A teljes impulzusmomentum és az energia megmaradása miatt, a megoldást az alábbi, lehető legáltalánosabb próba-függvény alakjában keressük:

$$\psi_j^{(o)} = \mathbf{h}_j^{(2)} + S_j \mathbf{h}_j^{(1)} + C_j \mathbf{k}_j, \quad (1.10a)$$

$$\psi_j^{(i)} = A_j \mathbf{j}_j + B_j \mathbf{i}_j, \quad (1.10b)$$

ahol a \mathbf{k} , \mathbf{j} és \mathbf{i} függvényeket $\mathbf{h}^{(1,2)}$ -höz hasonlóan definiáljuk a megfelelő Bessel-függvényekkel, és az adott, külső/belső tartományhoz tartozó k_i , τ_i és k_o , τ_o értékekkel. A külső tartományban, a megoldásból az I másodrendű módosított Bessel-függvényt kell kihagyni, mert nagy argumentumok esetén divergál, míg a belső tartomány megoldásából a K és Y függvényeket kell kihagyni az origóbeli szinguláris viselkedésük miatt.

KRG-ben, az átmenetnél, két határfeltételt kapunk. Nemcsak a hullámfüggvénynek, hanem a deriváltjának is folytonosnak kell lennie:

$$\psi_j^{(o)}(R, \varphi) = \psi_j^{(i)}(R, \varphi) \quad \text{és} \quad (1.11a)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} \psi_j^{(o)}(r, \varphi) \right|_{r=R} = \left. \frac{\partial}{\partial r} \psi_j^{(i)}(r, \varphi) \right|_{r=R}. \quad (1.11b)$$

Az (1.10) egyenleteket az (1.11) határfeltételekbe helyettesítve analitikusan kiszámolhatóak az S_j , A_j , B_j és C_j együtthatók minden j impulzusmomentum-kvantumszámra.¹ Ezen

¹ A j -hez és $-j$ -hez tartozó együtthatók között szimmetriaösszefüggések állnak fent:

$$\begin{aligned} S_{-j} &= S_j, & C_{-j} &= (-1)^{j+1} C_j, \\ A_{-j} &= \tau_i \tau_o A_j, \text{ és} & B_{-j} &= (-1)^{j+1} \tau_i \tau_o B_j. \end{aligned}$$

Ezek az összefüggések felhasználhatóak a számszerű kiértékelés felgyorsítására, ráadásul segítségükkel következtetni lehet a $\psi^{(o)}$ és $\psi^{(i)}$ hullámfüggvények szimmetriáira is.

együtthatók ismeretében, könnyen felírható a teljes hullámfüggvény az átmeneten kívül és belül egyaránt. A parciális hullámok járulékát az (1.9) képletnek megfelelően, j -ben felösszegezve megkapjuk a hullámfüggvényt, amit egy bejövő síkhullám kelt. Az átmeneten kívül az alábbi eredményre jutunk:

$$\Psi^{(o)} = \Phi_{\varphi_0} + \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{Z}} i^{j-1} \left((S_j - 1) \mathbf{h}_j^{(1)} + C_j \mathbf{k}_j \right) e^{-ij\varphi_0}, \quad (1.12a)$$

a belső tartományban pedig:

$$\Psi^{(i)} = \frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{Z}} i^{j-1} (A_j \mathbf{j}_j + B_j \mathbf{i}_j) e^{-ij\varphi_0}. \quad (1.12b)$$

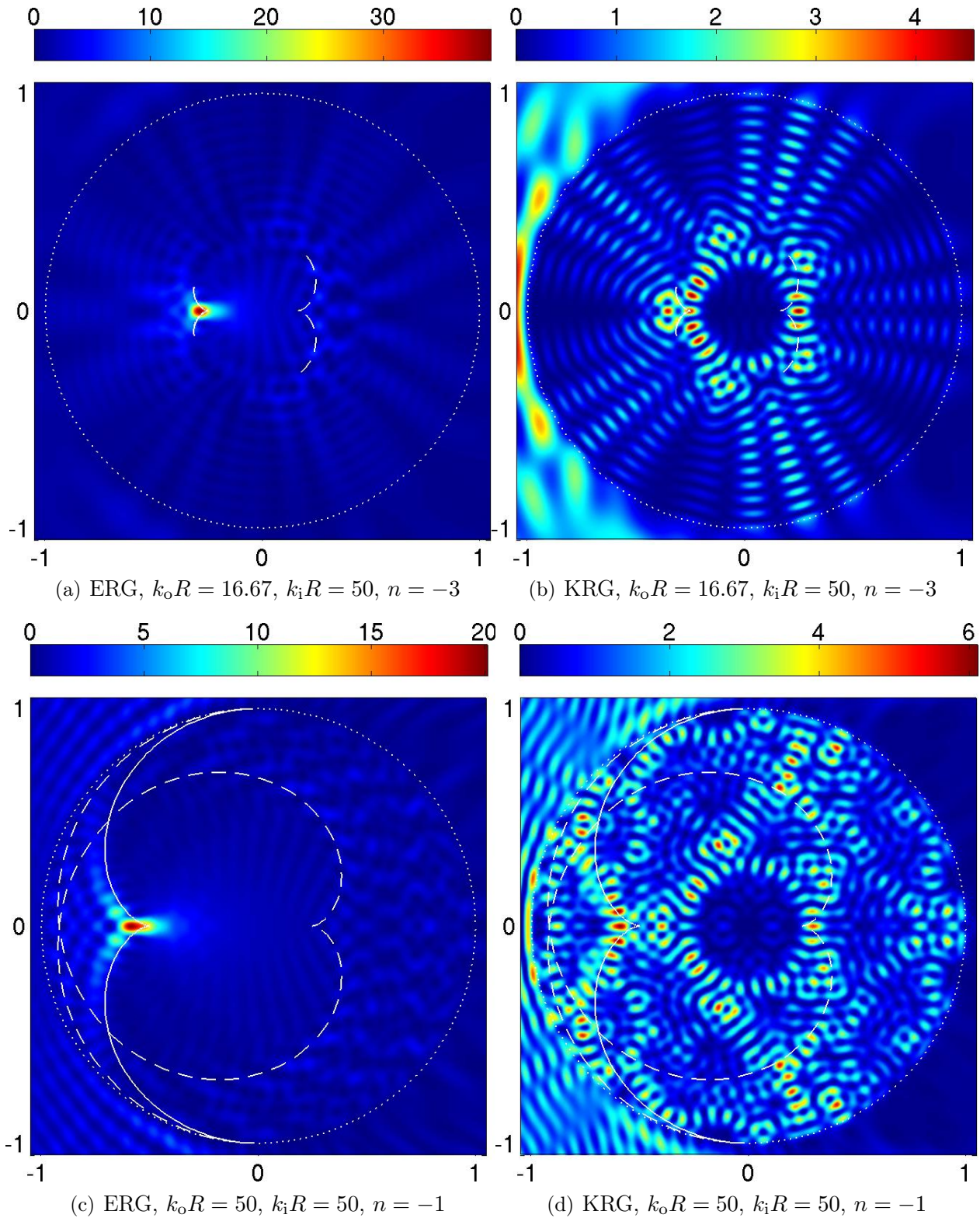
Az (1.12a) egyenlet jobb oldalának második tagja adja meg a szórt hullámot.

1.3. Az eredmények numerikus kiértékelése

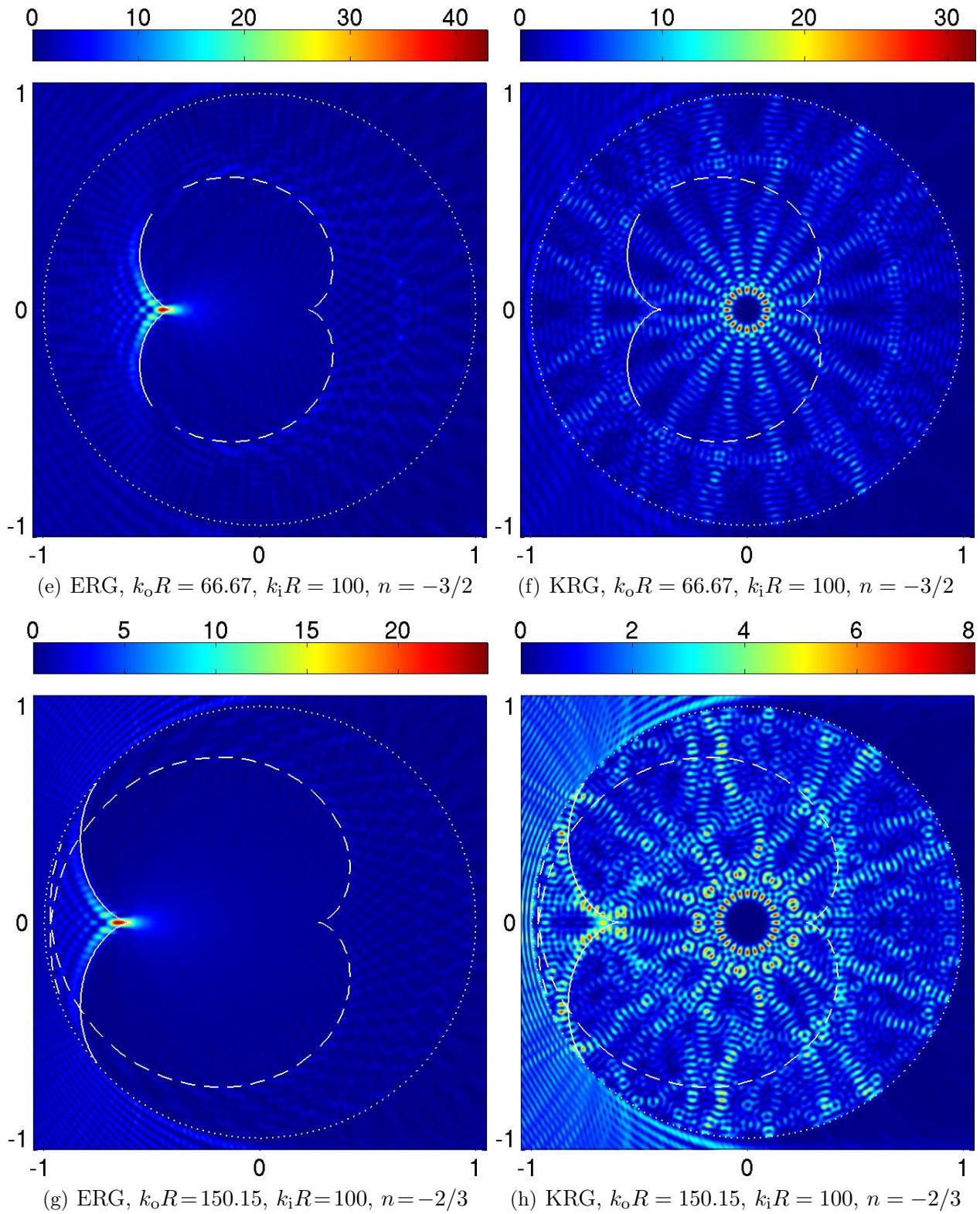
Egyrétegű grafénban az (1.4) és az (1.7) egyenletek egyértelműen meghatározzák a teljes hullámfüggvényt mindkét tartományban. KRG-ben az (1.12) képletek adják meg a megoldást. (Az (1.12) egyenletekben megjelenő együtthatók pontos alakja rendkívül bonyolult, és mivel ennek nincs jelentősége, itt nem tüntetjük fel őket.) A megoldások minden esetben csupán két dimenziótlan paramétertől függenek, nevezetesen $k_o R$ -tól és $k_i R$ -tól. Az elektronok a külső tartományban részecskeállapotban vannak, belül pedig lyukállapotban, vagyis $0 < E_o$ ($\tau_o = 1$) és $E_i < 0$ ($\tau_i = -1$). Elsősorban a belső tartományra koncentrálna, számos $k_o R - k_i R$ párosra kiértékeljük a megoldásokat, ügyelve arra, hogy a kR számok a kísérletileg is realizálható értéktartományt fedjék le. Ezek eredménye az 1.2. ábrákon látható, ahol feltüntettük a kausztikák analitikus görbéit is (lásd az 1.4.1. szakaszt). Elvárásainknak megfelelően, a legnagyobb intenzitású lokális maximumok annál pontosabban igazodnak a kausztikák görbéihez, minél nagyobb a hullámszám, ugyanakkor ERG-ben az egyezés sokkal szembetűnőbb, mint KRG-ben.

Az 1.4. alfejezetben adjuk meg az elméleti magyarázatát annak, hogy KRG-ben az elsőrendű kausztikák görbéi alkotta csúcspontban miért olyan kicsi az intenzitás, és miért nem találunk ott is egy fókuszpontot éppúgy, mint ERG-ben. Látni fogjuk, hogy ez a jelenség a Klein-alagutazásnak a kétféle grafénban teljesen különböző természetével van összefüggésben: a T transzmissziós együttható merőleges beesésnél ERG-ben 1, KRG-ben viszont 0 (lásd az 1.3(b) ábrát)!

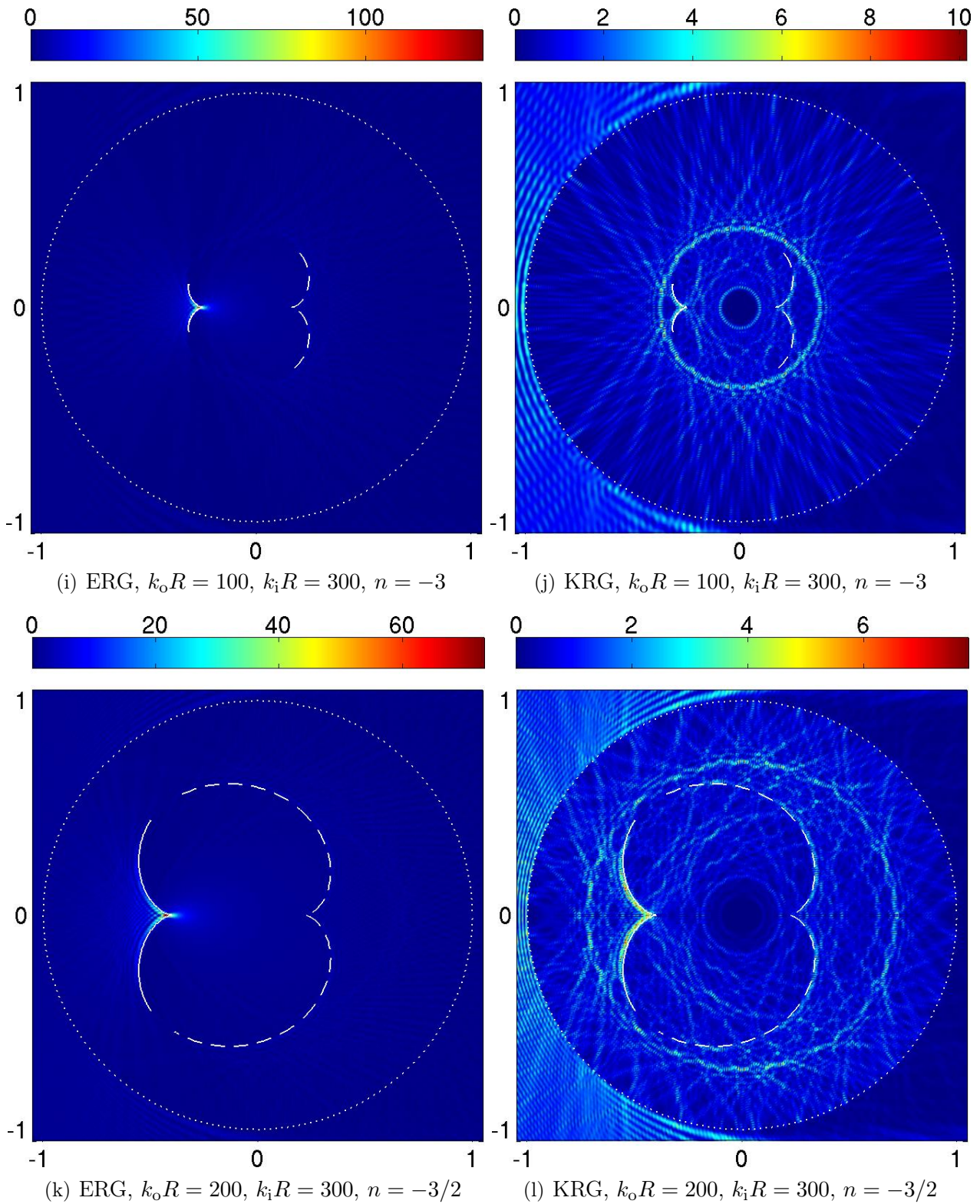
Habár a második kausztika többnyire még jól kivehető a mintázatból, az ennél magasabb rendű kausztikák a nyalábok belső visszaverődése során történő részleges kiszóródása miatt már olyan gyengék, hogy csak kivételes esetben válnak láthatóvá.



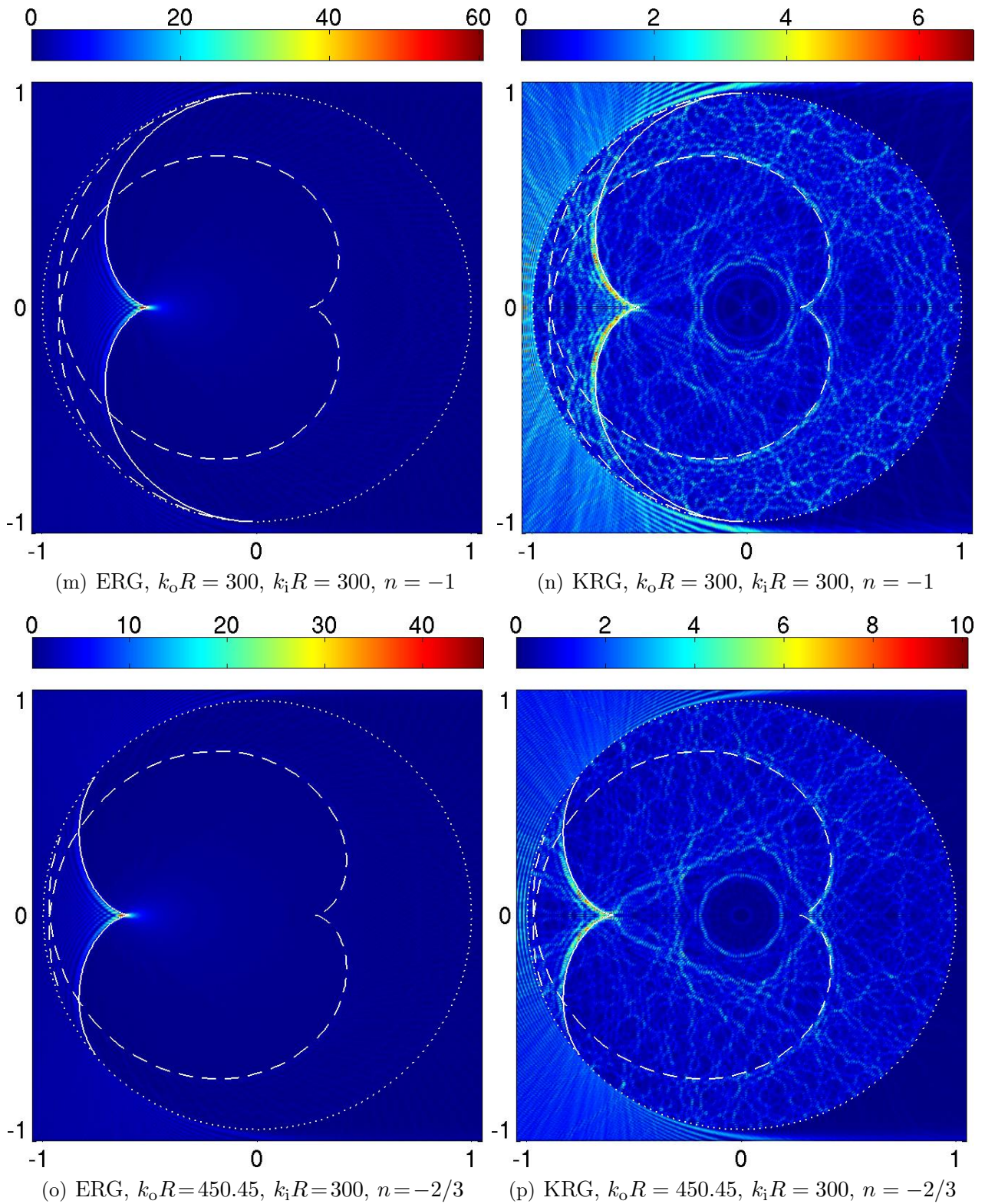
1.2. ábra. A $-x$ tengely irányából érkező síkhullám keltette hullámkép ERG-ben és KRG-ben, a kör alakú szórópotenciál környezetében. Pontozott vonal az átmenetet, folytonos és szaggatott vonalak az első és második kausztikákat jelölik.



1.2. ábra. A $-x$ tengely irányából érkező síkhullám keltette hullámkép ERG-ben és KRG-ben, a kör alakú szórópotenciál környezetében. Pontozott vonal az átmenetet, folytonos és szaggatott vonalak az első és második kausztikákat jelölik.



1.2. ábra. A $-x$ tengely irányából érkező síkhullám keltette hullámkép ERG-ben és KRG-ben, a kör alakú szórópotenciál környezetében. Pontozott vonal az átmenetet, folytonos és szaggatott vonalak az első és második kausztikákat jelölik.



1.2. ábra. A $-x$ tengely irányából érkező síkhullám keltette hullámkép ERG-ben és KRG-ben, a kör alakú szórópotenciál környezetében. Pontozott vonal az átmenetet, folytonos és szaggatott vonalak az első és második kausztikákat jelölik.

Mikor $n < -1$, mindkét anyagban egy, a *kausztikákat befogó koncentrikus kör* jelenik meg az átmeneten belül, melynek sugara jó közelítéssel $1/|n|$. Könnyen belátható, hogy az átmenetet éppen csak súroló, vagyis $\alpha = \pm\pi/2$ szögnél megtörő nyalábok éppen ezt a befogó kört érintik, melynek sugaránál tehát az összes többi, $|\alpha| < \pi/2$ szögnél megtörő nyaláb közelebb halad el az origóhoz. A hurok origótól való távolsága a belső visszaverődések számától pedig független. Így érthetővé válik, miért csak ezen a körön belül alakulnak ki a nyalábok érintési görbéi, vagyis a kausztikák.

KRG-ben, az origóhoz közel, mindig találunk egy elektronokban ritka *üres kört* is, ahol viszonylag homogén módon, nagyon alacsony a megtalálási valószínűség. Ez a jelenség feltehetően szintén a tiltott előreszórással magyarázható, mint a hiányzó fókuszpont, ám egyszerű összefüggést a sugarára nem találtunk.

1.4. Klasszikus megközelítés – geometriai optika

Az 1.2. ábrákat megfigyelve első pillantásra is feltűnik, hogy rövidebb hullámhosszak esetén, a lokális intenzitásmaximumok jól meghatározott görbéhez rendeződnek. A jelenség ERG esetén még hangsúlyosabb, mint KRG-nél. Cheianov és munkatársainak számításai is hasonló eredményekre vezettek sík p - n átmeneteket vizsgálva [78], illetve Vodo kutatócsoportja kísérleti úton, mikrohullámokkal állított elő hasonló mintázatot egy fotonikus kristály sík-konkáv lencséje által, melynek szintén negatív volt a törésmutatója [90]. Mindez olyan hullámhosszak esetén válik jól megfigyelhetővé, melyek jóval kisebbek, mint az átmenet sugara. Ez azt sugallja, hogy talán lehetséges az elektronok terjedését a klasszikus geometriai optikával, jól meghatározott görbék mentén terjedő nyalábok segítségével leírni. Ha ez így van, akkor az átmeneten kívül és belül nyilván egyenes mentén terjednek a nyalábok, hiszen homogén közegről van szó. Az átmenet határán egy nyaláb tökéletesen vagy részben visszaverődik, illetve megtörik. Hogy milyen szögben, és milyen amplitúdóval, azt az (1.11) határfeltételek szabják meg, melyek közül ERG-re csak a folytonosságot kifejező (1.11a) feltétel vonatkozik. Végezzük el a számolás előbb ERG-re! Az (1.5) kifejezés egy homogén közegben terjedő síkhullám alakú megoldás, amire klasszikus értelemben, mint nyalábra gondolhatunk. Hullámszámvektorának irányszöge φ_0 , ami részecskeállapotban megegyezik a csoportsebesség irányszögével (a nyaláb terjedésének iránya alatt mindig ezt értjük, és ϕ_0 -val jelöljük), lyukállapotban viszont $\phi_0 = \varphi_0 + \pi$. Általánosan tehát: $\phi_0 = \varphi_0 + (1 - \tau)\pi/2$. A szemléletesség kedvéért az (1.5) kifejezést is célszerű ennek megfelelően átírni, vagyis ϕ_0 -val kifejezni:

$$\Phi_{\phi_0}(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi_0/2} \\ e^{i\phi_0/2} \end{pmatrix} e^{i\tau_0 k_0 r \cos(\varphi - \phi_0) + i(1 - \tau_0)\pi/4},$$

ahol a kitevőben megjelenő $i(1 - \tau_o)\pi/4$ fázist persze nyugodtan el is lehetne hagyni, illetve beleolvasztani az együtthatókba, most azonban mégis megtartjuk, hogy összhangban legyünk az (1.5) képlettel.

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy, az y tengelyre illeszkedő síkátmenetet! A rendszer y irányú eltolási szimmetriája miatt, a beeső és a visszaverődő elektron impulzusának azonos lesz az y irányú vetülete, és ezért a visszaverődés szöge $\pi - \alpha$ kell hogy legyen, ahol α a beesés szöge. Ugyanezen érvelés miatt, a megtört nyaláb hullámszámvektorának y komponense is megegyezik a bejövő hulláméval: $\tau_o k_o \sin \alpha = \tau_i k_i \sin \beta$, ahol a megtört nyaláb terjedésének irányát jelöltük β -val. A törésmutató optikában megszokott definíciójának megfelelően, a Snellius–Descartes-törvény grafénban érvényes alakja tehát:

$$n = \frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{\tau_i k_i}{\tau_o k_o}. \quad (1.13)$$

Vegyük észre, hogy ez a törésmutató negatív is lehet, amennyiben τ_i és τ_o ellentétes előjelűek!

Írjuk fel a hullámfüggvényt az origóban az átmenet mindkét oldalán, majd a határfeltételeknek megfelelően illesszük őket! Ekkor:

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \\ e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} + iS^{(ERG)} \begin{pmatrix} -e^{i\alpha/2} \\ e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} = A^{(ERG)} \begin{pmatrix} e^{-i\beta/2} \\ e^{i\beta/2} \end{pmatrix} e^{i(\tau_o - \tau_i)\pi/4}.$$

Ennek a 2×2 -es egyenletrendszernek a megoldása az alábbi együtthatókat eredményezi:

$$S^{(ERG)} = -\frac{\sin((\alpha - \beta)/2)}{\cos((\alpha + \beta)/2)} \quad \text{és} \quad A^{(ERG)} = e^{i(\tau_i - \tau_o)\pi/4} \frac{\cos \alpha}{\cos((\alpha + \beta)/2)}.$$

A $T^{(ERG)}$ transzmissziós és $R^{(ERG)}$ reflexiós együttható meghatározásához szükségünk van az áramoperátorokra:

$$\begin{aligned} j_x &= i\frac{e}{\hbar} [\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0, x] = ce\sigma_x \quad \text{és} \\ j_y &= i\frac{e}{\hbar} [\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0, y] = ce\sigma_y, \end{aligned}$$

ahol e az elektronok töltése, x és y a megfelelő helykoordinátákkal való szorzás operátorai, j_x és j_y pedig az elektromos áramoperátorok komponensei.² Miután jelen esetben az átmenet y irányú, elegendő csak az x irányú árammal foglalkozni. A reflexiós együtthatót a visszavert hullámhoz rendelhető áram és a beérkező áram x komponenseinek hányadosaként értelmezzük, a transzmissziós együtthatót pedig ugyanígy, de a megtört nyaláb által

² Természetesen azonos eredményre jutunk, ha az elméleti mechanika Hamilton-egyenleteiből kiindulva $\mathcal{H}_{\text{ERG}}^0$ -t differenciáljuk az impulzus szerint.

szállított árammal:

$$R^{(ERG)} = \frac{-S^{(ERG)*} \begin{pmatrix} -e^{i\alpha/2} \\ e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}^\dagger \sigma_x S^{(ERG)} \begin{pmatrix} -e^{i\alpha/2} \\ e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \\ e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}^\dagger \sigma_x \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \\ e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}} = |S^{(ERG)}|^2 = \frac{\sin^2((\alpha - \beta)/2)}{\cos^2((\alpha + \beta)/2)},$$

$$T^{(ERG)} = \frac{A^{(ERG)*} \begin{pmatrix} e^{-i\beta/2} \\ e^{i\beta/2} \end{pmatrix}^\dagger \sigma_x A^{(ERG)} \begin{pmatrix} e^{-i\beta/2} \\ e^{i\beta/2} \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \\ e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}^\dagger \sigma_x \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \\ e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}} = \frac{\cos \beta}{\cos \alpha} |A^{(ERG)}|^2 = \frac{\cos \alpha \cos \beta}{\cos^2((\alpha + \beta)/2)}.$$

$R^{(ERG)}$ számolásánál a mínusz jel a visszavert hullám ellentétes irányú haladása miatt szükséges. Csillag* jelöli a komplex konjugálást, míg kereszt[†] az adjungálást. Könnyen ellenőrizhető, hogy minden α -ra és β -ra teljesül az $R^{(ERG)} + T^{(ERG)} = 1$ összefüggés. Ezen együtthatókat most az α és β szögekkel fejeztük ki, azonban β -t egyértelműen rögzíti α , τ_i , τ_o , k_i és k_o az (1.13) képlet alapján, és többnyire célszerű ez utóbbiakat független változónak tekinteni. Az α szög értékét az általánosság elvesztése nélkül választhatjuk nemnegatívnak, a hullám-számok pedig definíció szerint mindig pozitívak. A β szög előjele tehát τ_o/τ_i lesz. Mivel $R^{(ERG)}$ és $T^{(ERG)}$ nem pontosan merőleges beesés esetén nem páros függvényei β -nak, ezért függni fognak az n törésmutató τ_o/τ_i előjelétől, viszont nem fognak függni a τ_o -tól és τ_i -től külön-külön. Az 1.3. ábrákon láthatóak a transzmissziós együttható görbéi az α beesési szög függvényében, a törésmutató néhány értékére. Látható, hogy merőleges beesés esetén ERG-ben az elektronok 100% valószínűséggel átjutnak az átmeneten, illetve hogy $|n| < 1$ esetén $\alpha > \arcsin(|n|)$ szögekre teljes visszaverődést szenvednek [15, 33, 49, 78, 91, 92]. Egyébként pedig a transzmisszió a beesési szög abszolút értékének monoton csökkenő függvénye. Amennyiben $n = -1$, úgy $T^{(ERG)}(\alpha) = \cos(\alpha)^2$, ami megegyezik Cheianov és Fal'ko eredményével [49].

Ugyanez a számolás KRG-re elvi nehézséggel nem jár, csupán arra kell odafigyelni, hogy az átmenet közelében az egyébként mindenhol másutt elhanyagolható evaneszcens hullámok is járulékot adnak, ami két újabb együtthatót jelent az (1.11) határfeltételekbe való behelyettesítésnél. Az (1.13) képlet kétrétegű grafénban is érvényben van. A síkhullám alakú megoldás ezúttal derékszögű koordináta-rendszerben:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau \exp(-i\phi_0) \\ -\exp(i\phi_0) \end{pmatrix} \exp(i\tau k(x \cos \phi_0 + y \sin \phi_0)),$$

míg az átmenettől $\pm x$ irányban csillapodó hullámok:

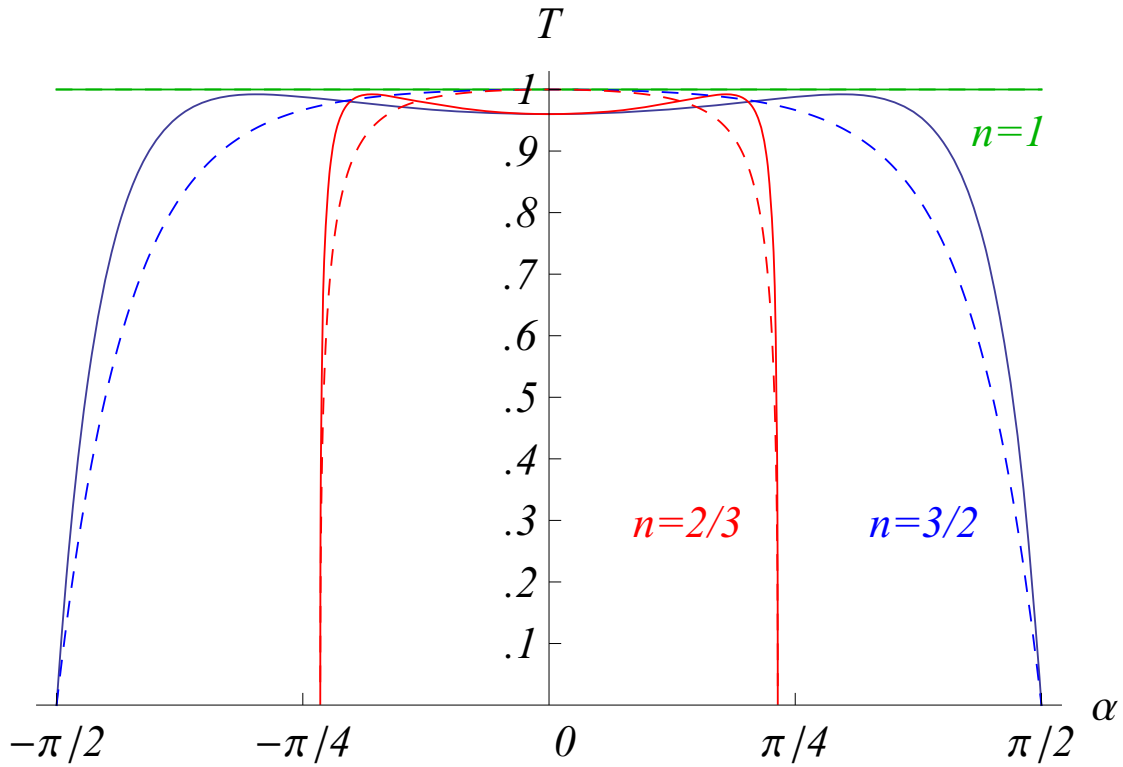
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left(\sin \phi_0 + t\tau \sqrt{1 + \sin^2 \phi_0} \right)^2 \right) \exp \left(-i\phi_0 + i\tau ky \sin \phi_0 - tkx \sqrt{1 + \sin^2 \phi_0} \right),$$

ahol $t = \pm 1$ a hullámok csillapodásának irányát adja meg: $tx = \pm x$. Ezúttal a deriváltakat is illesztünk kell, tehát egy négy egyenletből álló rendszert kell megoldani. Ez ugyan nehéznek nem mondható feladat, de az analitikus eredmények olyan nagyok és komplikáltak, hogy nem érdemes őket itt expliciten megadni. Az evaneszcens hullámoknak tulajdonképpen csak a határfeltételek kielégítésénél van szerepe, áramot nem szállítanak, és a hullámfüggvényhez való járulékok néhány hullámhossznyira az átmenettől már elhanyagolható. KRG esetében már nehezebben indokolható, de szintén igaz, hogy a transzmisszió függ n előjelétől, de nem függ τ_1 és τ_0 előjelétől külön-külön. Ennek belátásához tekintsünk két esetet csupán azzal a különbséggel, hogy bennük τ_1 , τ_0 és ϕ_0 mindkét oldalon ellentétes előjelű! ϕ_0 előjelváltása a transzmisszió szempontjából nézve teljesen irreleváns, szimmetriamegfondolásokból kifolyólag T mindig páros függvénye α -nak. A három paraméter együttes előjelváltása azonban a határfeltételeket megfogalmazó négy egyenletben azt eredményezi, hogy kettő megszoródik -1 -gyel, és a szórási amplitúdókon kívül minden mennyiség komplex konjugálódik. A -1 -gyel való szorzás könnyen helyrehozható egy újabb szorzással, a komplex konjugált spinorokat tartalmazó egyenletrendszert pedig nyilván kielégítik az eredeti amplitúdók, ha őket is konjugáljuk. Mivel azonban az áramokban ezen amplitúdók abszolút értékének négyzete szerepel, végül ugyanazt a transzmissziót és reflexiót kapjuk mindkét esetben.

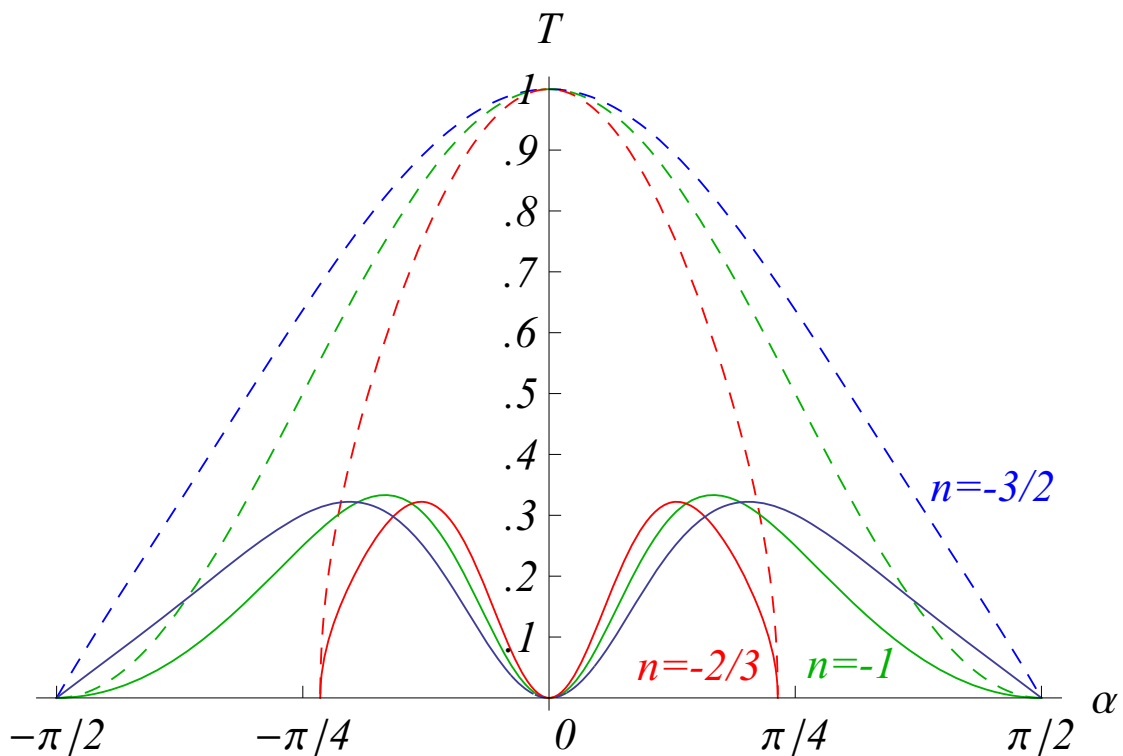
Az 1.3. ábrákon láthatóak $T^{(KRG)}(\alpha)$ kiértékelt görbéi. Érdekes, hogy ha negatív a törésmutató, akkor a Klein-paradoxonnak megfelelően [15, 33, 34], merőleges beesésnél, ERG-ben minden elektron átjut az átmeneten, KRG-ben azonban mind visszaverődik! Ez könnyen megérthető, ha figyelembe vesszük, hogy míg ERG-ben a sajátállapotok Berry-fázisa π , addig KRG-ben 2π , ami azt eredményezi, hogy adott τ esetén, az egymással ellentétes irányban haladó elektronokhoz tartozó spinorok ERG-ben merőlegesek, KRG-ben viszont párhuzamosak! Tekintve ugyanakkor az x irányban haladó elektronok spinorjait, vegyük észre, hogy sávváltáskor τ , vagyis a helicitás előjelet vált, és mivel a fázissebesség irányszöge is elfordul π -vel, látható, hogy ERG-ben az előreszóródó részecske spinora párhuzamos lesz a bejövőével, míg KRG-ben merőleges. Mindez tehát meggyőz minket arról, hogy ERG-ben szükségszerű a tökéletes előreszórás, KRG-ben pedig a tökéletes hátraszórás. Negatív törésmutató esetén ezért KRG-ben a maximális transzmisszió mindig egy véges szögnél lesz.³

Az 1.1. ábrán látható kísérleti elrendezés feltételezi az x tengellyel párhuzamosan érkező kollimált elektronnyalábot. Ennek előállításához felhasználhatjuk a transzmissziós együttha-

³ A kétrétegű grafénban potenciállépcsőn történő elektronszórás ennél általánosabb tárgyalására a 3.2. alfejezetben kerül sor.

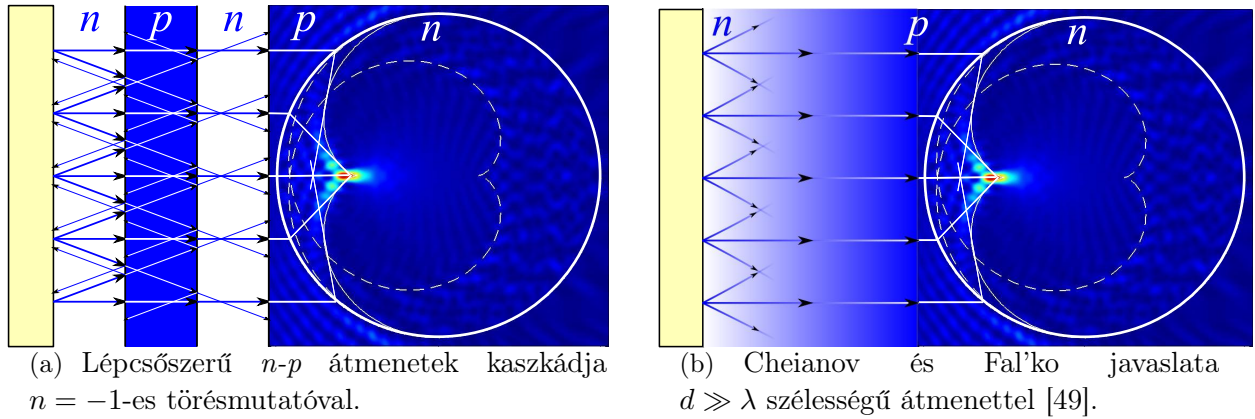


(a) A $T(\alpha)$ transzmisszió $n > 0$ pozitív törésmutató esetén, mikor $\tau_o = \tau_i$.



(b) A $T(\alpha)$ transzmisszió $n < 0$ negatív törésmutató esetén, mikor $\tau_o = -\tau_i$.

1.3. ábra. Transzmissziós valószínűség az α beesési szög függvényében egy síkátmenetnél ERG-ben (szaggatott vonal) és KRG-ben (folytonos vonal), különböző pozitív és negatív törésmutatók esetén.



1.4. ábra. Alternatív megoldások elektronok kollimálására ERG-ben. Sárga téglalap szimbolizálja a forrást, amely minden irányba monoenergiás elektronokat bocsát ki.

tó erős szögfüggését. Ez egyszerűen megoldható ERG-ben, ahol a merőleges beesés körüli viszonylag szűk szögtartományban közel egységnyi a T transzmisszió, ami $|\alpha|$ növelésével gyorsan tart a nullához. Eszerint egy lehetséges kísérleti elrendezés tartalmaz egy forrás elektródát az x tengelyen, majd azt követően, x -re merőleges, sík n - p átmenetek kaszkádját $n = -1$ -es törésmutatóval, és végül a kör alakú szórópotenciált, melynek környezetében az elektronsűrűség letapogatható volna valamely pásztázó elektronmikroszkópos technikával. Egy ilyen elrendezés látható az 1.4(a) ábrán.

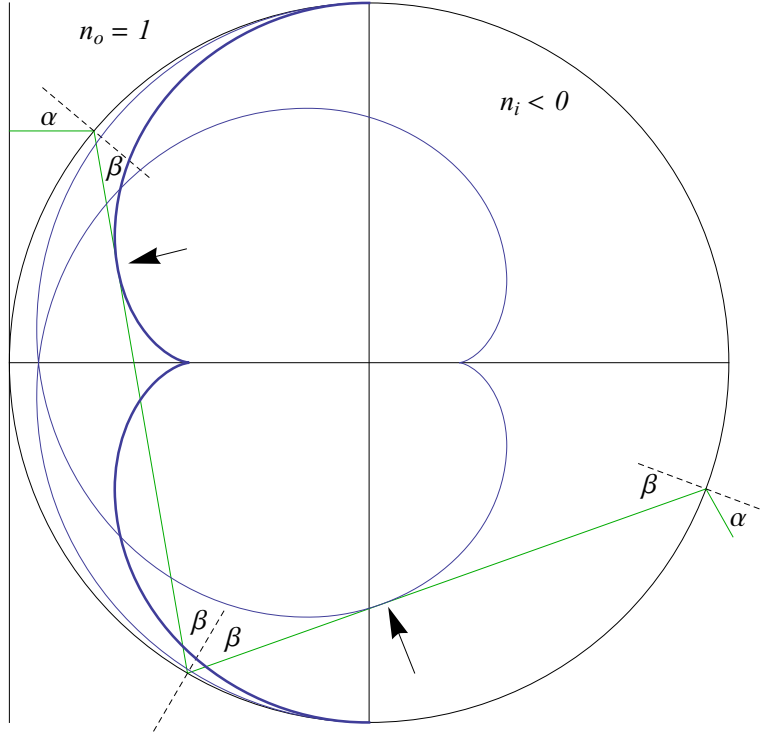
Alternatív megoldást találunk Cheianov és Fal'ko munkájában [49], akik megmutatták, hogy amennyiben az átmenet jóval szélesebb, mint az elektronok hullámhossza, úgy az áthaladás valószínűsége még élesebben az $\alpha = 0$ szögű merőleges beesés környékére korlátozódik: $T_{\lambda \ll d}^{(ERG)}(\alpha) = \exp(-\pi k_i d \sin(\alpha)^2)$, ahol d a potenciállejtő szélessége, és $|\alpha|$ nem lehet túl közel $\pi/2$ -höz. Ezt használja ki az 1.4(b) ábrán látható elrendezés.

1.4.1. Kausztikák

Bár a geometriai optikával való klasszikus közelítésnek súlyos hiányosságai vannak az egzakt hullámoptikával szemben, a nyalábok mentén terjedő részecskék modelljének van egy nagy előnye is. Lehetővé teszi olyan összetett jelenségeknek, mint a kausztikáknak egy leegyszerűsített leírását: a geometriai optikai keretein belül, kausztikának nevezzük részecske- vagy fénynyalábok érintési felületét vagy görbét a térben, illetve ezek vetületét egy síkra. A kausztikák ennél pontosabb és általánosabb definíciójáról a 2. fejezetben lesz szó.

Az alábbiakban, a differenciálgeometria segítségével levezetett, az 1.2. ábrákon látható görbék egyenletét adjuk meg arra az esetre, amikor az (1.13) törésmutató negatív. A kausztikák pontjait két paraméter segítségével tudjuk egyértelműen megadni: $p-1$ adja meg, hogy az adott kausztikán egymást érintő nyalábok hány belső visszaverődést szenvedtek előzőleg, ahol a $p \in \mathbb{N}$ természetes szám tehát a kausztikát érintő húr sorszáma, illetve $-\pi/2 \leq \alpha \leq \pi/2$

annak a nyalábnak a beesési szöge, amely az adott pontban érinti a kausztikát. Az 1.5. ábrán látható egy elektron klasszikus pályája egy belső visszaverődéssel és azt követően egy kiszóródással, illetve az 1.6. ábrán a $p = 1$ -es kausztika, és az azt alkotó sugármenetek figyelhetőek meg. Ekkor a kausztikák Descartes-rendszerbeli egyenletei a következőképpen néznek ki:



1.5. ábra. Egy α szög alatt érkező elektron egy lehetséges klasszikus pályája (zöld tört vonal) a negatív törésmutatójú átmenet alkotta tartományban. A relatív törésmutató jelen esetben $n = -1$, tehát $\alpha = -\beta$, és a húrok száma $p = 2$. A belső visszaverődés előtt a nyaláb érinti a $p = 1$ -es kausztikát (vastag, sötétkék görbe), visszaverődés után pedig a $p = 2$ -es kausztikát (vékony, kék görbe). Az ábra bal szélén a függőleges vonal jelképezi a bejövő elektronok egy hullámfrontját.

$$\mathbf{r}_c(p, \alpha) = (-1)^{p-1} R \left[\begin{pmatrix} -\cos \Theta \\ \sin \Theta \end{pmatrix} + \cos \beta \frac{1 + 2(p-1)\beta'}{1 + (2p-1)\beta'} \begin{pmatrix} \cos(\Theta + \beta) \\ -\sin(\Theta + \beta) \end{pmatrix} \right], \quad (1.14a)$$

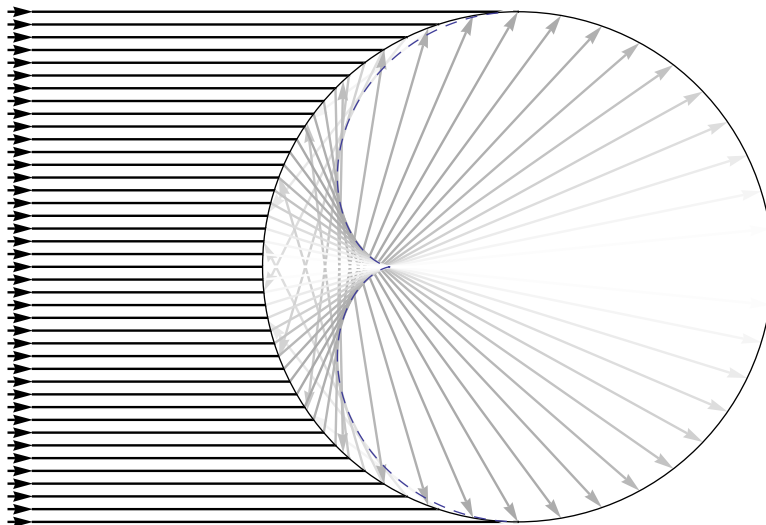
ahol $\mathbf{r}_c(p, \alpha)$ a p -edik kausztika α -val parametrizált pontjának helyvektora,

$$\Theta(p, \alpha) = \alpha + 2(p-1)\beta, \quad (1.14b)$$

$$\sin \beta = \frac{\sin \alpha}{|n|}, \quad (1.14c)$$

$$\beta' = \frac{\cos \alpha}{\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha}}, \quad (1.14d)$$

vesszővel pedig az α szerinti deriválást jelöljük. Az 1.2. ábrákon, az (1.14) egyenletek által meghatározott görbék szemmel láthatóan jól illeszkednek a lokális intenzitásmaximumok mintázatára. Mivel minden belső visszaverődés jelentősen csökkenti a nyaláb intenzitását, a

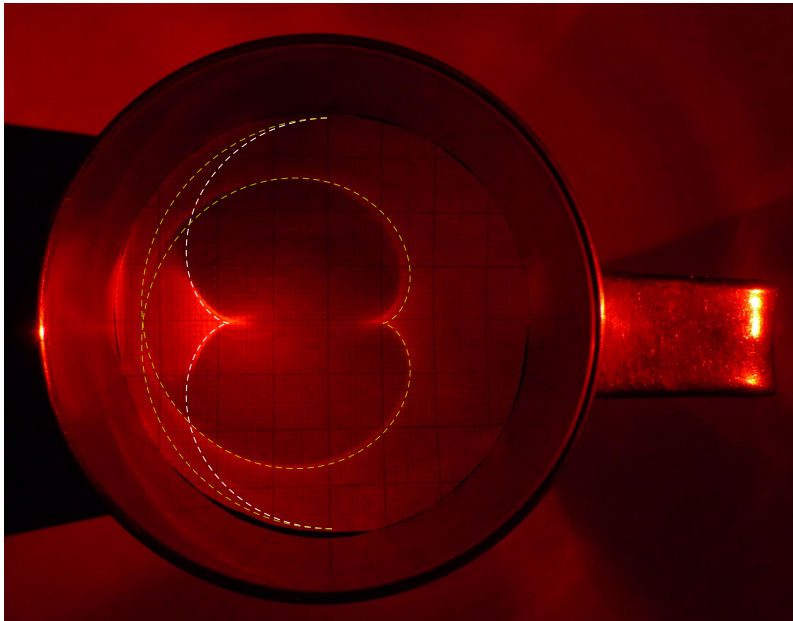


1.6. ábra. A $p = 1$ -es kausztika (szaggatott vonal) azon nyalábok érintési pontjainak burkolója, melyek előzőleg még nem szenvedtek belső visszaverődést. A megtört nyaláboknak megfelelő vonalak árnyalata arányos $T^{(KRG)}(\alpha)$ -val. A törésmutató $n = -1$.

magasabb rendű kausztikák már jóval gyengébbek, vagy egyáltalán nem látszanak. Könnyen belátható, hogy minden kausztikához tartozó fókuszpont az x tengelyen kell hogy legyen, és miután a fókuszpontoknál (\mathcal{F}_p) mindig az $\alpha = 0$ környéki nyalábok adnak járulékot, az x koordináta csak p -től fog függni: $x_{\mathcal{F}}(p) = \frac{(-1)^p}{|n|-1+2p} R$. Eszerint, p növelésével a váltakozó előjelű $x_{\mathcal{F}}(p)$ abszolút értékben egyre kisebb, vagyis a fókuszpont egyre közelebb húzódik az origóhoz. Intenzitása miatt, legnagyobb jelentősége a $p = 1$ -es csúcskausztikának⁴ van, amihez a $(-R, 0)$ koordinátájú ponttól mért fókusz távolság $R|n|/(1 + |n|)$ lesz. Megnyugtató, hogy ez a kifejezés valóban megegyezik a hagyományos geometriai optika fókusz távolságra kapott eredményével egy negatív törésmutató behelyettesítésével [93].

Az 1.7. ábrán egy ismerős, mindennapi jelenség látható, ami szépen szemlélteti az optikai analógiát az $n = -1$ -es törésmutatójú rendszerrel. Megjegyezzük, hogy a $p = 1$ -es kausztika *nephroid* görbe néven is ismeretes, és a végpontjait összekötő szakaszra vett tükörképével együtt, megegyezik egy egységnyi átmérőjű kör mentén körbegördülő $1/2$ átmérőjű kör egy kiszemelt pontja által leírt görbével. Megmutatható az is, hogy egy körvonalról belül többször visszaverődő fénysugarak burkolói magasabb rendű epiciklusok [94].

⁴Bár a csúcskausztika nem pontszerű, mégis néha fókuszpontként hivatkozunk rá. Valóban pontszerű fókusz egyébként sem létezhet, az csak egy absztrakt fogalom a valóság egy idealizált és egyszerűsített leírására.



1.7. ábra. A $p = 1$ -es (fehér, szaggatott vonal) és 2-es (sárgás, szaggatott vonal) kausztikák megfigyelhetők egy bögre belsejében is, ha a fénysugarak elegendően lapos szögben érkeznek. Ez a szép, hétköznapi jelenség teljesen analóg az $n = -1$ -es törésmutatójú esettel, hiszen az alkalmasan megválasztott kezdőpontú optikai úthosszak a negatív törésmutatónak, és az ellentétes érkezési iránynak köszönhetően éppen egymás ellentettjei, tehát a stacionárius pontok halmaza ugyanaz.

2. fejezet

A kausztikák szemiklasszikus leírása

Mint láttuk, a geometriai optika sok tekintetben jól írja le a fény vagy akár elektronok nyalábjainak terjedését, különösen a rövid hullámhosszú határesetben, mikor a terjedő részecskékhez rendelt hullámhossz a rendszer minden más karakterisztikus hosszánál jóval rövidebb. Összevetve a hullámoptikával elmondható, hogy egyszerűbb és szemléletesebb, ugyanakkor csupán közelítő leírását adja az adott problémának. Például a sugarak érintési pontjainak burkolóján, vagyis egy kausztikán, az ebben a közelítésben definiált fénynyalábok keresztmetszete nullához tart, intenzitásuk pedig a végtelenhez. Ezért bár geometriai optikával jól leírhatóak a kausztikák pontjai, görbéi vagy síkjai [95–97], az intenzitás az adott altérben mindenhol divergálni fog. Ebben a klasszikus közelítésben tehát sem a kausztikák intenzitásvizonyai, sem a finomszerkezetük nem vizsgálható, vagyis teljesen függetlenül a nyalábok hullámhosszától, a geometriai optika éppen a legérdekesebb, legnagyobb intenzitású részeknél mond csődöt. Ebben a fejezetben, először ezt a problémát járjuk körbe Berry és Upstill összefoglaló műve alapján [84]. Az elméleti háttérbe való rövid bevezetés során felvázoljuk a *katasztrófaelmélet* [81, 82] által kínált megoldást: a *katasztrófaoptika* keretein belül, egy integrálreprezentáció formájában szemiklasszikus közelítést adjuk a hullámtérnek a kausztikák környezetében, miközben két különböző úton is megmutatjuk, hogy miért nem működik a geometriai optika a kausztikákon. Látni fogjuk, hogy bár a katasztrófaoptika topologikus, tehát kvalitatív jellegű elméletekben gyökerezik, mégis sok jelenség esetén, különösen alacsony szimmetriájú rendszerekben, csak a katasztrófaoptika eszközeivel kaphatunk pontos eredményeket, nemcsak kvalitatív, de kvantitatív értelemben is! A hullámoptikával ellentétben, a katasztrófaoptika lehetővé teszi továbbá a kausztikák struktúrális stabilitáson alapuló ekvivalenciaosztályokba sorolását, illetve hatványfüggvények formájában képes megjósolni a kausztikák geometriájának és intenzitásának rövid hullámhosszú aszimptotikus viselkedését. Ebben a határesetben, az analitikus megoldások sokszor egyre nehezebben értékelhetőek ki numerikusan, például az előző fejezetben a Bessel-függvények miatt. Fontos hangsúlyozni azt is, hogy amíg egy komplex geometriájú szórási tartományban a legtöbb esetben nem létezik analitikus megoldás, a katasztrófaoptika módszere ezekben az esetekben is eredményre vezet! Elmondható tehát, hogy a katasztrófaoptika jól ötvözi a geometriai optika egyszerű, szemléletes és rugalmas módszerét a hullámoptika valósághű leírásával, vagyis amellet, hogy viszonylag nagy pontossággal visszaadja a kausztikák mintázatát és intenzitásvizonyait, a részecskéknek köszönhetően, az egzakt számolásnál jóval több betekintést enged a jelenségek fizikai hátterébe.

2.1. Rövid bevezetés a katasztrófaoptikába

Az optika tudománya hagyományosan magas szimmetriájú rendszerekkel foglalkozik, amit többek közt az alkalmazott technológia is motivál, például fényképezőgépek, távcsövek objektívjeinek megtervezése. Bármilyen precíz is a tervezés, a leképezni kívánt tárgyról

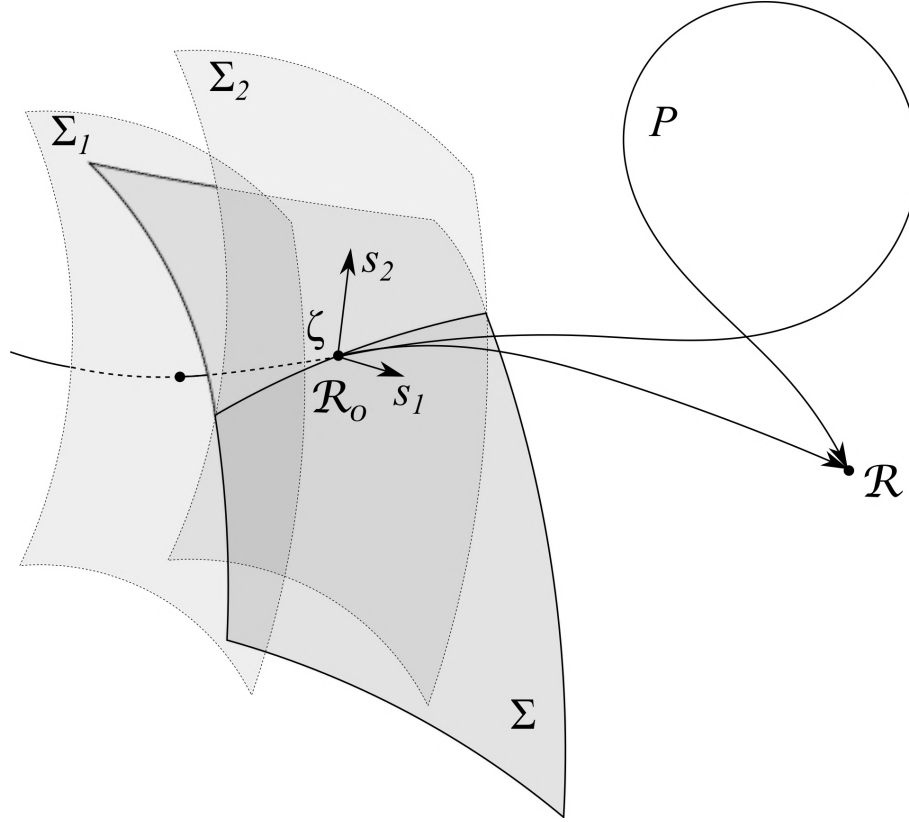
érkező fénysugarak egy része nem a fókusz síkban fog találkozni, vagy éppen a hullámhossz függvényében kissé máshogy térülnek el a nyalábok a lencséken. Minden ilyen jelenséget a leképezés tökéletlenségének tulajdonítunk, és a fent említett optikai rendszerekben kisebb-nagyobb hibának számít. Mint látni fogjuk, a *tökéletes* fókuszpont is egy ún. instabil kausztika, ezért nem is lehet előállítani. Ezzel szemben, a természetben leggyakrabban alacsony szimmetriájú rendszerekkel találkozunk! Gondoljunk csak a lágy szellő által keltett kis hullámzásra egy sekély tó felszínén, és a hullámok által a tó fenekére leképezett napfényre, a táncoló gyújtógörbék játékára! Ezzel, a bizonyos értelemben a hagyományos optikára *merőleges* problémával foglalkozik a katasztrófaoptika. Központi fogalma a *kausztika*, amely magyarul jelenthet gyújtópontot, -görbét, vagy -síkot, illetve ezeknek vetületét egy altérre. Mint látni fogjuk, a kausztikák osztályokba sorolhatók, a katasztrófaoptika legfőbb rendező elve, a struktúrális stabilitás alapján.

Mindenekelőtt azonban tisztázzunk néhány fogalmat! *Fénysugárnak*, vagy csupán *sugárnak* nevezzük a görbe mentén terjedő fényt, vagy általában tetszőleges tartalmú hullámcsomagot, amelyhez nem rendelünk oldalirányú kiterjedést, és amit egyértelműen jellemez a görbét (vagy sugármenetet, pályát) érintő hullámszámvektora. Ezzel szemben a *(fény)nyaláb* egy sugár, és a rendszer minden egyéb méretéhez képest elhanyagolható, de véges szélességű környezetében terjedő sugarak összessége, amelynek teljes fluxusa nemdisszipatív közegben állandó.¹ A továbbiakban az alábbi jelölésekkel élünk: \mathcal{R} a mindenkori megfigyelési pont, \mathbf{k} a hullámszámvektor, $\hat{\mathbf{k}}$ a hullámszámvektor irányvektora, k az abszolút értéke, és κ a vákuumbeli hossza. A helyfüggő $n(\mathcal{R}) = k(\mathcal{R})/\kappa$ törésmutatóról feltesszük, hogy nem függ a sugár terjedési irányától, sem az időtől.² Monokromatikus, ω körfrekvenciájú hullámokra teszünk állításokat, de az eredmények elvi nehézség nélkül általánosíthatóak lesznek. Egy sugár görbéje mentén mért ívhosszat ζ (*zeta*) jelöli, és ha egy sugár ζ -nál átdöf egy hullámfrontot az \mathcal{R}_0 pontban, akkor a hullámfronton \mathcal{R}_0 origóval definiálhatunk egy koordináta-rendszert az (s_1, s_2) koordinátákkal. Ily módon egy sugárral, és azon az ívhossz kezdőpontjának megadásával, definiálhatunk egy lokális, háromdimenziós koordináta-rendszert a (ζ, s_1, s_2) koordinátákkal (lásd a 2.1. ábrát).

A katasztrófaelmélet a szingularitáselmélet egy ága, és elsősorban olyan rendszerekkel foglalkozik, amelyek változó külső paraméterek mellett, minden pillanatban arra törekszenek, hogy egy függvény (energia, entrópia, vagy valamely hatásfüggvény) szélsőértéket vegyen fel. A paramétertérben történő kis elmozdulás hatására a szélsőérték helye néha ugrásszerűen megváltozik, ami adott rendszerekben akár katasztrófához is vezethet, innen az elnevezés. A módszer legtöbb alkalmazása azonban ártalmatlan, és igen sokszínű lehet, kezdve a hajak stabilitásának vizsgálatánál, a szilárd testekben történő fázisátalakulásokon át, egészen

¹ A fénynyaláb keresztmetszetének ennél pontosabb meghatározására később még visszatérünk.

² Jelen definíció szerint a törésmutató pozitív, azonban eredményeink kiterjeszhetőek lesznek a negatív törésmutatójú esetre is, amivel később foglalkozunk.



2.1. ábra. A Σ_1 és Σ_2 hullámfrontokat, és a tetszőleges Σ felületet átdőfő sugár, és az általa, Σ_2 -höz rögzített lokális koordináta-rendszer: (ζ, s_1, s_2) . A P pálya variálásával jutunk el a megvalósuló sugármenethez \mathcal{R}_0 -ból \mathcal{R} -be.

az olyan optikai jelenségekig, mint a szivárvány. A katasztrófoptika tehát a nála általánosabb katasztrófaelmélet egy ága, egy matematikai szempontból analóg módszer az optika témakörére alkalmazva. Az analógia oka a fény Hamilton–Fermat-elvnek megfelelő terjedése, miszerint az összes lehetséges sugármenet közül a megvalósuló pályák azok, amelyeken a hatásfüggvény, vagyis az optikai úthossz szélsőértéket vesz fel, vagy inflexiós pontja van. A stabil kausztikáknak emiatt az analógia miatt lesz ugyanolyan a szerkezete, mint a Thom által leírt katasztrófáknak [81].

A hatásfüggvényt az \mathcal{R} pontban így írjuk fel:

$$\phi(\mathcal{R}) = \phi(\mathcal{R}_0) + \int_{\zeta(\mathcal{R}_0)}^{\zeta(\mathcal{R})} n(\mathcal{R}(\zeta)) d\zeta, \quad (2.1)$$

ahol a törésmutatóra vett integrál a 2.1. ábrán látható P pálya menti integrált jelenti. A geometriai optikában a hatásfüggvény nívófelületeként definiáljuk a hullámfrontot, amely mindenütt merőleges a rajta áthaladó, és a metszéspontban azonos fázisú sugarakra. Jelöljük ki egy Σ felületet, ami nem feltétlenül hullámfront, de tartalmazza az \mathcal{R}_0 pontot és \mathcal{R} -t nem (lásd a 2.1. ábrát)! Variáljuk az \mathcal{R}_0 és \mathcal{R} pontokat összekötő P pályát rögzített Σ sík

és \mathcal{R} pont mellett! Ekkor a Σ -t metsző, és \mathcal{R} -en áthaladó megvalósuló pályákat a

$$\delta \left[\phi(\mathcal{R}_0) + \int_{\zeta(\mathcal{R}_0)}^{\zeta(\mathcal{R})} n(\mathcal{R}(\zeta)) d\zeta \right] \Big|_{\Sigma, \mathcal{R}} = 0 \quad (2.2)$$

egyenlet fogja kijelölni, ahol δ jelöli a pályák első rendű variációját. Parametrizáljuk a P pályákat az $s = (s_1, s_2, \dots, s_i, \dots)$ változókkal! Ekkor a (2.2) feltétel az alábbi alakot ölti:

$$\frac{\partial \phi(s, \mathcal{R})}{\partial s_i} = 0 \quad \text{minden } i\text{-re.} \quad (2.3)$$

Felmerül a kérdés, hogy hogyan válasszuk meg ezeket az s_i változókat, vagyis hogyan parametrizáljuk a P pályákat? Ez bár végtelen sokféleképpen megtehető, nyilván célszerű törekedni arra, hogy csak P egyértelmű leírásához szükséges információt tartalmazzák az s_i -k, tehát redundáns információktól mentesek legyenek. Tartományonként homogén közegben ezért elegendő csak a tartományok határán parametrizálni azokat a pontokat, ahol megtörik a sugár, és egyébként élni a triviális feltevessel, miszerint a homogén közegben az egyenes pálya adja az extrémumot a hatásintegrálban. Ha egy ilyen homogén közegben terjed a fény Σ és \mathcal{R} között, akkor az $s = (s_1, s_2)$ -vel elég csak az \mathcal{R}_0 pontot meghatározni. A pályák egyértelmű leírásához minimálisan szükséges s_i változókat hívjuk *állapotváltozóknak*, a $\phi(s, \mathcal{R})$ -t pedig *generátorfüggvénynek*, melynek (2.3) szerinti stacionárius pontjai felelnek meg a megvalósuló pályáknak. A (2.3) egyenlet által meghatározott sugarak jelen esetben expliciten csak \mathcal{R} -nek a függvényei. Általános esetben azonban függvényei lesznek a rendszer geometriájának, tehát például tükröző felületek dőlésszögének, a fénytörő közeg helyfüggő törésmutatójának, vagy adott esetben akár az időnek is. Mindezen paramétereket, melyek a megvalósuló sugarak egyértelmű meghatározásához szükségesek és az adott problémában szabad paraméterként vannak jelen (beleértve az \mathcal{R} megfigyelési pontot is), összefoglaló névvel *kontrollparamétereknek* hívjuk, és $C = (C_1, C_2, \dots, C_j, \dots)$ -vel jelöljük. A generátorfüggvény általános alakja tehát: $\phi(s, C)$. Egy nagyon egyszerű példával élve, C megfeleltethető a vízben úszó hal valós helyének, s pedig a látszólagos helyének a vízfelszín feletti megfigyelő szemszögéből.

Tegyük fel, hogy rögzítjük az összes C paramétert, csak \mathcal{R} -t változtatjuk! Ekkor az \mathcal{R} -en áthaladó sugarakhoz tartozó stacionárius $s_{\mathcal{R}}$ megoldások \mathcal{R} -rel együtt változnak. Ha pedig \mathcal{R} -rel egy kausztikához közelítünk, akkor definíció szerint kettő, vagy több ilyen megoldás össze fog olvadni, és ezért a kausztikán $\phi(s, \mathcal{R})$ s -ben legalább másodrendben stacionárius lesz. Szemléletesen ezt úgy képzelhetjük el, mint egy térképet, amelyen (s_1, s_2) jelölik a síkkoordinátákat, és ϕ a magasságot. Dombtetők, völgykatlanok és nyeregponatok felelnek meg a megvalósuló sugaraknak. Ha \mathcal{R} -t változtatjuk, az egész domborzat változik, és az $\mathcal{R} \rightarrow \text{kausztika}$ mozgatás pl. két domb összeolvadásának felel meg. Az új dombtető ekkor egy $s_1 s_2$ síkbeli irányban *laposabb lesz*, mint rá merőlegesen, tehát ϕ magassága másodrendben

állandó.³ Ezt az irányt a

$$\sum_i \frac{\partial^2 \phi}{\partial s_i \partial s_j} ds_i = 0$$

egyenlet megoldása adja meg, vagyis a Hessian-mátrix 0 sajátértékhez tartozó sajátvektora. Hogy létezzon megoldás, a Hessian-determinánsának el kell tűnnie:

$$\det \frac{\partial^2 \phi}{\partial s_i \partial s_j} = 0, \quad (2.4)$$

ami egyben annak a szükséges, és a (2.3)-mal együtt elégséges feltétele, hogy az \mathcal{R} pont egy kausztikára illeszkedjen.

2.1.1. Ekvivalenciaosztályok a katasztrófaelméletben

Az előző fejezetben leírtuk, hogy egy adott $\phi(s, C)$ generátorfüggvényből, (2.3) és (2.4) segítségével hogyan határozhatóak meg a kausztikák a C kontrolltérben. Most megvizsgáljuk, hogyan jellemezhetjük ezeket a kausztikákat, és mi alapján sorolhatjuk őket különböző osztályokba.

Egy kausztikát *struktúrálisan stabilnak* mondunk, ha mintázatának topológiája változatlan marad kis perturbációk hatására, például a rendszer geometriájának kis módosítására. Ha például a törésmutatót $\delta n(\mathbf{r})$ -rel megperturbáljuk, és az új kausztika mintázatát át lehet deformálni a régiébe egy, az inverzével együtt folytonos és differenciálható transzformációval (diffeomorfizmussal), akkor az adott kausztika stabil.⁴ A stabil kausztikákat ezen tulajdonságuknál fogva, ún. ekvivalenciaosztályokba sorolhatjuk, melyek összes elemét egy diffeomorfizmussal egymásba lehet transzformálni. Ezen osztályok megfeleltethetőek az egyes *katasztrófáknak*, és mindhez egy-egy standard polinomot rendelhetünk, amely, mint az osztályra jellemző, általános generátorfüggvény (Φ), előállítja az osztály kausztikáinak karakterisztikus mintázatát.

A kausztika N korangja definíció szerint a kausztika leírásához minimálisan szükséges s állapotváltozók számával egyenlő. Optikai alkalmazásokban ez maximálisan 2 lehet. *Teljes kontrolltérnek* nevezzük a C paraméterek által kifeszített vektorteret, aminek vagy altere a rendszerünket tartalmazó valós tér, vagy megegyezik azzal. A kausztika K kodimenziója

³ Ezt a kvalitatív érvelést alátámasztandó, tekintsük az *áthajláskausztika* generátorfüggvényének standard polinomját, ami $s^3/3 + Cs$ (lásd a 2.1. táblázatot)! A kausztikától távol, véges C -nél ennek a függvénynek két kvadratikus függvénnyel közelíthető, lokális szélsőértéke van $\pm\sqrt{-C}$ -nél, ami $C < 0$ esetén, két önálló, valós sugármenetnek felel meg. Azonban ahogy közeledünk a kausztikához, vagyis $C \rightarrow 0$, a generátorfüggvény $s^3/3$ -ba megy át, ami a kvadratikus függvénnyel eggyel magasabb rendben stacionárius, vagyis ilyen értelemben *laposabb*.

⁴ A stabil kausztikák sima sokaságokat alkotnak az őket befoglaló vektortérben [85], a kontrollparaméterek és az állapotváltozók tere pedig normált vektortér, ezért van értelme diffeomorfizmusról beszélni. Ismeretes az is, hogy egy, kettő és három térdimenzióban minden homeomorf sima sokaság egyben diffeomorf is, ami magasabb dimenziókban azonban már nem lesz igaz.

2.1. táblázat. Az elemi katasztrófák standard polinomjai $K \leq 4$ kodimenzió esetén

Angol [81] és magyar [85] elnevezés	Arnol'd jelölése [82]	kodimenzió (K) és korang (N)		$\Phi(s, C)$ standard polinom
fold				
áthajlás	A_2	1	1	$s^3/3 + Cs$
cuspl				
csúcs	A_3	2	1	$s^4/4 + C_2s^2/2 + C_1s$
swallowtail				
fecskefarok	A_4	3	1	$s^5/5 + C_3s^3/3 + C_2s^2/2 + C_1s$
elliptic umbilic				
elliptikus umbilikus	D_4^-	3	2	$s_1^3 - 3s_1s_2^2 - C_3(s_1^2 + s_2^2) - C_2s_2 - C_1s_1$
hyperbolic umbilic				
hiperbolikus umbilikus	D_4^+	3	2	$s_1^3 + s_2^3 - C_3s_1s_2 - C_2s_2 - C_1s_1$
butterfly				
pillangó	A_5	4	1	$s^6/6 + C_4s^4/4 + C_3s^3/3 + C_2s^2/2 + C_1s$
parabolic umbilic				
parabolikus umbilikus	D_5	4	2	$s_1^4 + s_1s_2^2 + C_4s_2^2 + C_3s_1^2 + C_2s_2 + C_1s_1$

pedig a teljes kontrolltér kausztikára merőleges alterének a dimenziószáma, amiben a szingularitást keressük: $K = \text{Dim}(\text{teljes kontrolltér}) - \text{Dim}(\text{kausztika})$. Ezt az alteret tehát a C paraméterek egy K elemű részalmazza feszíti ki: (C_1, C_2, \dots, C_K) , és csak akkor egyezik meg a teljes kontrolltérrel, ha nulla dimenziós, pontszerű kausztikáról van szó.

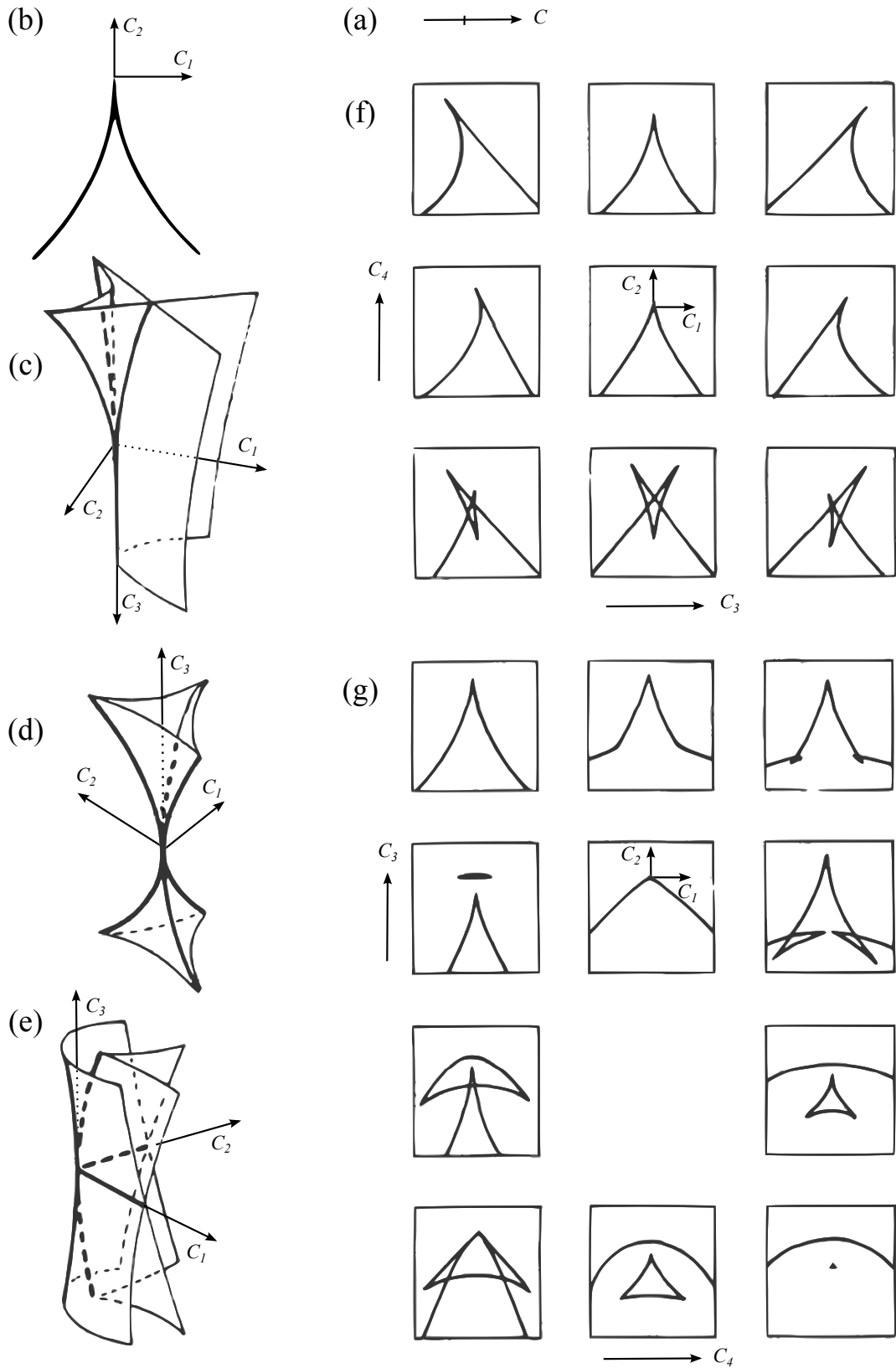
A négynél nem nagyobb kodimenziójú elemi katasztrófák standard polinomjait, vagy más néven *normálalakjait* a 2.1. táblázat tartalmazza.⁵ Az Arnol'd-féle jelölés indexében szereplő szám a kausztika legnagyobb szingularitású pontjában egymásba olvadó sugarak számát adja meg, vagy más szóval a (2.3) egyenlet megoldásának degenerációs fokát az adott s pontban. Erről a számról megmutatható, hogy mindig egyenlő $K + 1$ -gyel.⁶ Az elmélet egyik legfontosabb eredménye, hogy $K \leq 4$ esetén, minden olyan kausztika, amit nem tartalmaz a 2.1. táblázat, instabil! Eszerint a természetben fellelhető stabil (tipikus) kausztikák mindegyike megtalálható a táblázatban, és diffeomorfak a 2.2. ábra egyik kausztikájával. Azonban speciális szimmetriájú, mesterséges rendszerekben, optikai eszközökkel elvileg előállíthatóak instabil (atipikus) kausztikák is, amelyek a gyakorlatban persze sosem mentesek, és a katasztrófaoptika szerint elvileg sem lehetnek mentesek minden leképezési hibától, amikkel együtt azonban mégiscsak stabil kausztikának minősülnek! Egészen pontosan fogalmazva, az instabil kausztikák generátorfüggvényeinek halmazza az összes generátorfüggvény halmazának egy nullmértékű részalmazza.

⁵ Az elmélet kiterjesztése magasabb kodimenziók felé megtalálható Arnol'd írásában [82]. Megjegyezzük, hogy $K > 7$ esetén a struktúrális stabilitásnak nem feltétele a diffeomorfizmus, csupán a homeomorfizmus.

⁶ Minden K kodimenziójú kausztikát $K + 1$ érintkező sugár alkot, amelyek közt azonban lehetnek csillapódó sugarak is, ami alatt a (2.3) egyenlet komplex megoldásait értjük.

A standard polinom minden esetben felbontható két részre: a *germ*, vagy magyarul *csíra* csak az állapotváltozókat tartalmazó, a C paramétereiktől független rész, míg a *kifejtési tagok* elnevezéssel hivatkozunk a kontrollparamétereiktől lineárisan függő részre. A csíra írja le a kausztika legnagyobb szingularitású pontját a K -dimenziós altér origójában, a kifejtési tagok pedig azt, ahogy a *csíra kihajt*, vagyis ahogy alacsonyabb rendű kausztikákba bontakozik ki (lásd a 2.2. ábrát⁷).

⁷ Az ábrák elkészítéséhez az adott kausztika normálalakjára kell megoldani a (2.3) egyenletet, majd ezekből meghatározni azokat a C paramétereket, amelyekre az s -re kapott megoldások degeneráltak, tehát kettő vagy több sugarat eredményeznek. A megoldásként kapott C és s értékek ki kell hogy elégítsék a (2.4) egyenletet is.



2.2. ábra. Az elemi katasztrófák a teljes kontrolltérben: (a) áthajlás; (b) csúcs; (c) fecskefarok; (d) elliptikus umbilikus; (e) hiperbolikus umbilikus; (f) pillangó; (g) parabolikus umbilikus [84].

2.1.2. Diffrakciós katasztrófák

Jelen esetben időfüggetlen problémák megoldására szorítkozunk, ezért hullámok terjedésének vizsgálatánál célszerű a

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \psi(\mathcal{R}, t) = 0$$

hullámegyenlet megoldásánál szeparálni az idő- és helyfüggő tagokat: $\psi(\mathcal{R}, t) = \psi(\mathcal{R})T(t)$, és csak $\psi(\mathcal{R})$ -re megoldani a Helmholtz-egyenletet⁸:

$$(\nabla^2 + \kappa^2 n(\mathcal{R})^2) \psi(\mathcal{R}) = 0 . \quad (2.5)$$

A megoldást az aszimptotikus $\kappa \rightarrow \infty$ határesetben keressük, és a WKB-közelítésben az alábbi ansatzból indulunk ki:

$$\psi(\mathcal{R}) = a(\mathcal{R}) \exp(i\kappa\chi(\mathcal{R})) , \quad (2.6)$$

ahol az amplitúdó és a fázis is valós. Behelyettesítve ezt a (2.5) egyenletbe, majd szeparálva a valós és képzetes részt, az alábbi egyenletekhez jutunk:

$$|\nabla\chi|^2 = n^2 + \frac{\nabla^2 a}{\kappa^2 a} \quad \text{és} \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot (a^2 \nabla \chi) = 0 . \quad (2.8)$$

A nagy energiájú határeset miatt, ésszerűnek tűnik elhanyagolni a κ^{-2} -nal arányos tagot, miután χ -re visszkapjuk a (2.1) egyenletet a $\chi = \phi$ megfeleltetéssel: $|\nabla\chi| = |n|$, ami nem más, mint az eikonál-egyenlet. A (2.8) egyenlet megoldásához alkalmazzuk a Gauss-tételt az \mathcal{R}_0 -ból \mathcal{R} -be haladó fénynyaláb intenzitására [58]:

$$a(\mathcal{R})^2 = a(\mathcal{R}_0)^2 \frac{d\mathcal{A}(\mathcal{R}_0)n(\mathcal{R}_0)}{d\mathcal{A}(\mathcal{R})n(\mathcal{R})} , \quad (2.9)$$

ahol $d\mathcal{A}$ a nyaláb haladási irányára merőleges keresztmetszetét jelöli és definíció szerint mindig pozitív.⁹ Ezt felhasználva, egy fénynyaláb járuléka a hullámfüggvény aszimptotikus

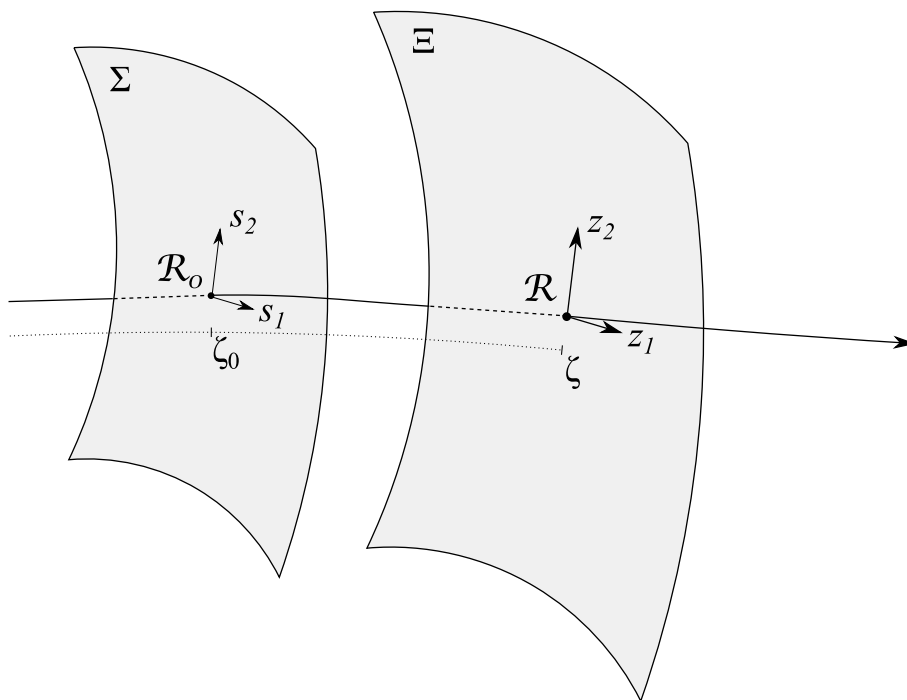
⁸ Inhomogén közegben a skalár egyenlettel való leírás nem teljesen pontos, az elektromágneses komponenseket külön-külön kellene figyelembe venni. Ettől mi most eltekintünk, és csak a skalár Helmholtz-egyenlet írjuk fel és oldunk meg.

⁹ Ez nem feltétlenül egy triviális választás, hiszen mint később látni fogjuk, minden kausztikán való áthaladáskor $d\mathcal{A}(\mathcal{R})$ nullává válik, és mivel a nyaláb hullámfrontjának egy görbületi sugara is előjelet vált a konvencionális definíció szerint, kézenfekvő választás lehet, ha ugyanígy megengedjük a nyalábkeresztmetszet előjelváltását is.

közelítésében:

$$\psi(\mathcal{R}) = a(\mathcal{R}_0) \sqrt{\frac{d\mathcal{A}(\mathcal{R}_0)n(\mathcal{R}_0)}{d\mathcal{A}(\mathcal{R})n(\mathcal{R})}} \exp(i\kappa\phi(\mathcal{R})) . \quad (2.10)$$

Vegyük észre, hogy ez a közelítés szükséges ahhoz, hogy a geometriai optikában használt hullámfront fogalom értelmet nyerjen. Hiszen a hullámfront, az eredeti definíciója szerint a $\chi = \text{konstans}$ fázisú felület, ahol χ csak ebben a közelítésben egyezik meg a ϕ optikai úthosszal! Ha ragaszkodunk az eredeti definícióhoz, és χ meghatározásánál (2.7)-ben nem élünk elhanyagolással, akkor a hullámfront egy alternatív definíciójához jutunk, mégpedig a *diffrakciós hullámfront*hoz¹⁰. A geometriai hullámfront tehát csak egy fiktív fogalom, a *fénysugár* segítségével definiálható, míg a diffrakciós hullámfront egzakt egyenletekkel megadható. Ezen túl vannak még más fontos különbségek is: például a geometriai hullámfrontok egymást, és önmagukat is számtalanszor átmetszhetik, a diffrakciósak esetében ez kizárt. További különbségeket találunk, ha megvizsgáljuk a két típus szingularitásainak szerkezetét, amiket a diffrakciónál az $a(\mathcal{R}) = 0$ és $\chi(\mathcal{R}) \rightarrow \infty$ feltételekkel definiálunk, és *hullámfront diszlokációknak* hívunk, a geometriai esetben pedig *Legendre-szingularitások*ról beszélünk, és a definíciót a kausztikákhoz kötjük. Ezen szingularitások vizsgálata azonban túlmutat a dolgozat célkitűzésein, mélyebb ismertetésük és számtalan hivatkozás található viszont Berry és Upstill munkájában [84].



2.3. ábra. A Σ és a Ξ hullámfrontok, és egy sugár által definiált lokális koordináta-rendszerek.

¹⁰ A későbbiekben, ha különben félreértésre adhat okot, az elnevezésben is megkülönböztetjük a *geometriai hullámfrontot* és a *diffrakciós hullámfrontot*, egyébként pedig jelző nélkül, az előbbi értelemben használjuk a *hullámfront* kifejezést.

A (2.10) formula kiértékeléséhez szükségünk lesz a nyalábkeresztmetszetek hányadosára. Szerencsére ezek kifejezhetőek a hatásfüggvény segítségével. Tekintsünk egy sugarat, ami a Σ és Ξ hullámfrontokon kijelöli a lokális koordináta-rendszerek \mathcal{R}_0 és \mathcal{R} origóját, az s és z lokális koordinátákkal (lásd a 2.3. ábrát)! Ekkor a fénysugár létezésének Fermat-elv értelmében felírt feltétele:

$$\partial_{s_i} \phi(\zeta_0, s, \zeta, z)|_{s=z=0} = 0 \quad \text{minden } i\text{-re } 1\text{-től } N\text{-ig,}$$

ahol ζ_0 és ζ méri a sugár mentén mért ívhosszat \mathcal{R}_0 -ban és \mathcal{R} -ben. Itt a ϕ optikai úthosszt tehát az \mathcal{R} pontig integráljuk és \mathcal{R}_0 -ban variáljuk. Definiáljuk most az $s(z)$ függvényt úgy, hogy megadja az s koordinátáit annak a sugárnak, ami a Ξ hullámfrontot z -ben dőfi át, és képezzük az előbbi egyenlet teljes deriváltját a z koordináták szerint! A fenti $z \rightarrow s(z)$ hozzárendelés miatt, z értékétől függetlenül mindig nullával egyenlő az egyenlet jobb oldala, tehát z szerinti deriváltja is nulla lesz. Így végül egy mátrixegyenletet kapunk, aminek átrendezése után, a determinánsokra nézve, az alábbi összefüggést írhatjuk fel:

$$\det \left. \frac{\partial s_i(z)}{\partial z_j} \right|_{z=0} \det \partial_{s_i, s_j} \phi(\zeta_0, s, \zeta, z)|_{s=z=0} = - \det \partial_{s_i, z_j} \phi(\zeta_0, s, \zeta, z)|_{s=z=0} .$$

A $\partial_{z_j} s_i(z)$ mátrixot $z = 0$ -ban egy főtengely-transzformációval diagonális alakra hozhatjuk, ahol a diagonális elemek $\partial s_i / \partial z_i$ lesznek, a mátrix determinánsa abszolút értékben pedig $d\mathcal{A}(\mathcal{R}_0)/d\mathcal{A}(\mathcal{R})$. Mindezt összefoglalva a következő eredményre jutunk:

$$\frac{d\mathcal{A}(\mathcal{R}_0)}{d\mathcal{A}(\mathcal{R})} = \left| \det \frac{\partial s_i(z)}{\partial z_j} \right|_{s=z=0} = \left| \frac{\det \partial_{s_i, z_j} \phi(\zeta_0, s, \zeta, z)}{\det \partial_{s_i, s_j} \phi(\zeta_0, s, \zeta, z)} \right|_{s=z=0} . \quad (2.11)$$

A második egyenlőség jobb oldalán a $\phi(\zeta_0, s, \zeta, z)$ függvényben s és z tehát független változókat jelölnek, és s nem függvénye z -nek. Vegyük észre, hogy (2.11) jobb oldalán lévő hányados nevezőjében lévő determináns megegyezik (2.4)-gyel, ami pedig egy kausztikán, ahol ϕ legalább másodrendben stacionárius, nullává válik. Tekintsük újra a (2.10) formulát, és mozgassuk az \mathcal{R} pontot egy kausztikára! Rögtön látható tehát, hogy a ψ hullámfüggvény a kausztikán divergálni fog, hiszen a fénynyaláb $d\mathcal{A}$ keresztmetszete a nullához tart!¹¹ A probléma abból fakad, hogy (2.7)-ben elhanyagoltuk a $\nabla^2 a / (\kappa^2 a)$ tagot, amibe az így kapott megoldást visszahelyettesítve, már tetszőlegesen nagy energián is divergál a kausztikákon. Ha az a -ra és χ -re felírt egyenletrendszeret egzaktul oldjuk meg, akkor $a(\mathcal{R})$ -re egy teljesen más jellegű, nemdivergens megoldást kapunk.

Hogy áthidaljuk a divergencia problémáját, (2.7) egzakt megoldása helyett, közelítsük meg a problémát egy másik irányból, és hívjuk segítségül a szuperpozíció elvét! Keressük egy

¹¹ Emiatt, egyes szerzők [97] úgy is definiálják a kausztikákat, mint a hullámfrontok principális görbületi sugaraihoz tartozó középpontok halmazát.

vagy több fénynyaláb járulékát az általuk közrefogott fénysugarak integráljának alakjában!

$$\psi(\mathcal{R}) = \exp(-iN\pi/4) \left(\frac{\kappa}{2\pi}\right)^{N/2} \int d^N s \, b(\zeta_0, s, \mathcal{R}) \exp(i\kappa\phi(\zeta_0, s, \mathcal{R})) , \quad (2.12)$$

ahol az N szám a korangot jelöli, $b(\zeta_0, s, \mathcal{R})$ pedig egy súlyfüggvény, amit később a (2.9)-ből származtatható amplitúdóval hozunk kapcsolatba. Ez tulajdonképpen egy Fresnel–Kirchhoff típusú diffrakciós integrálformula inhomogén közegre alkalmazva, amely természetesen már nem fog divergálni a kausztikákon.

Alkalmazzuk a (2.12) formulát arra a háromdimenziós esetre, mikor két állapotváltozó szerint kell integrálnunk, vagyis $N = 2$:

$$\psi(\mathcal{R}) = \frac{\kappa}{2\pi i} \int ds_1 \int ds_2 \, a(\zeta_0, s) \left[\frac{n(\zeta_0, s)}{n(\mathcal{R})} \det \partial_{s_i, z_j} \phi(\zeta_0, s, \zeta, z) \right]_{z=0}^{\frac{1}{2}} \exp(i\kappa\phi(\zeta_0, s, \mathcal{R})) , \quad (2.13)$$

ahol $b(\zeta_0, s, \mathcal{R})$ függvény pontos alakjára vonatkozó sejtésünket most azzal támasztjuk alá, hogy megmutatjuk, a (2.13) integrál a stacionárius fázisok közelítésében pontosan visszaadja a (2.10) kifejezést felösszegezve az egymással interferáló nyalábokra. Born és Wolf művének [58] III. függeléke értelmében a fenti dupla integrált az alábbiak szerint lehet közelíteni:

$$\iint f(x_1, x_2) \exp(i\kappa\phi(x_1, x_2)) dx_1 dx_2 = \frac{2\pi i \sigma}{\kappa \sqrt{|\det \partial_{x_i, x_j} \phi(x_1, x_2)|_{(x_1^s, x_2^s)}}} f(x_1^s, x_2^s) \exp(i\kappa\phi(x_1^s, x_2^s)),$$

ahol $\sigma = +1$ (-1), ha a determináns pozitív definit, és $\partial_{x_1}^2 \phi(x_1, x_2)$ a stacionárius pontban pozitív (negatív), illetve $\sigma = -i$, ha a determináns negatív definit. A (2.13) integrálra alkalmazva ezt a közelítő összefüggést, az alábbi eredményre jutunk:

$$\psi(\mathcal{R}) \approx \sum_{\mu \text{ a stac. pontokra}} a(\zeta_0, s^\mu) \left[\frac{n(\zeta_0, s^\mu)}{n(\mathcal{R})} \left| \frac{\det \partial_{s_i, z_j} \phi(\zeta_0, s, \zeta, z)}{\det \partial_{s_i, s_j} \phi(\zeta_0, s, \mathcal{R})} \right| \right]_{s=s^\mu, z=0}^{\frac{1}{2}} \exp(i\kappa\phi(\zeta_0, s^\mu, \mathcal{R})) , \quad (2.14)$$

ami, felhasználva (2.11)-et, valóban megegyezik (2.10) minden stacionárius pontra vett összegével. Ez utóbbi formulában a nyalábok járulékát egymástól teljesen függetlenül összegezzük fel. Ez nem okoz nagy hibát, amíg az \mathcal{R} pont távol esik minden kausztikától. Ekkor az egyes nyalábok a (2.13) integrálban is jól elkülönülnek egymástól, vagy más szóval, a gyorsan oszcilláló fázis destruktív interferenciát okoz az állapotváltozók terében bármely két szomszédos stacionárius pont között. Eszerint a nyalábok járulékei a teljes integrálban egymástól valóban függetlenül adódnak össze, tehát közelítőleg ugyanazt kapjuk, amit (2.14)-gyel. Azonban amint közelebb visszük az \mathcal{R} pontot egy kausztikához, a lerontó interferencia eltűnik a stacionárius pontok közül, amelyek ezáltal magasabb rendben is stacionáriusak lesznek, és ekkor a (2.13) integrálban már egyszerre adják meg kettő, vagy több nyaláb járulékát, melyek már

nem választhatóak szét egymástól¹², és persze közös járulékok nem lesz egyenlő a (2.14)-gyel. Vegyük észre azt is, hogy (2.14)-ben, a nevezőben, pontosan a stacionárius közelítés következtében jelent meg az a determináns, ami a divergenciát okozza a kausztikákon! Ez nem meglepő, hiszen éppen a stacionárius közelítés felel meg a fénysugárképre való áttérésnek!

Látjuk tehát, hogy a stacionárius pontok módszere azért lesz pontatlan, mert a nyalábok környékén, a fázist külön-külön egy kvadratikus függvénnyel közelíti, majd az így nyert integrálok értékét egyszerűen felösszegzi. A sima megoldást kínáló (2.12) integrálban is alkalmazhatunk egy hasonló, de *magasabb rendű* közelítést, mégpedig úgy, hogy $\phi(\zeta_0, s, \mathcal{R})$ -t lecseréljük a 2.1. táblázatban szereplő standard polinomok egyikével. A katasztrófaelmélet garantálja, hogy a megfelelő osztály polinomja a stacionárius pontoknak ugyanazt az eloszlását adja vissza, és a pontok körül a fázist is a helyes hatványfüggvénnyel közelíti. Feltéve, hogy a $b(s, \mathcal{R})$ súlyfüggvény az összesűrűsödött stacionárius pontok környékén lassan változik, a (2.12) integrál a fenti behelyettesítéssel, és κ kitranszformálásával az alábbi közelítő alakra hozható:

$$\Psi(C) = (2\pi)^{-N/2} \int ds^N \exp(i\Phi(s, C)) . \quad (2.15)$$

Ez a kifejezés C -ben ugyanolyan mintázatú kausztikákat fog eredményezni, mint az eredeti, (2.12) integrál, pontosabban fogalmazva, ugyanabba az ekvivalenciaosztályba tartozó kausztikát, amely egy diffeomorfizmussal folytonosan áttranszformálható az eredetibe.¹³ A (2.15) integrálokat nevezzük *diffrakciós katasztrófáknak*.¹⁴

Vegyük észre az érdekes szemléletbeli különbséget a sugár- és a hullámreprezentáció között! Míg (2.3)-ban az állapotváltozók szerinti differenciálás vezetett el minket a fénysugarak geometriájához, (2.15)-ben az állapotváltozók szerinti integrálásra van szükség a hullámtér leírásához!

2.1.3. Diffrakciós skálatörvények

A $\kappa \rightarrow \infty$ rövid hullámhosszú határesetben a kausztika lokális maximumainak, avagy a *diffrakciós rojtoknak* az intenzitása divergál, míg egymástól való távolságuk a nullához tart. Ezt a jelenséget az úgynevezett *univerzális skálatörvények* írják le, amelyek a (2.15) $\Psi(C)$ standard diffrakciós katasztrófák és a (2.12) valós $\psi(C')$ hullámfüggvény között teremtenek

¹² Vajon mikor kezd el összeolvadni s függvényében két stacionárius pont, vagyis mit mondhatunk \mathcal{R}_0 -ban egyetlen önálló nyaláb szélességéről? A lerontó interferenciához a fázis egységnyi megváltozása szükséges (2.13) integrandusában, és mivel egyetlen nyalábhoz tartozó stacionárius pont körül ϕ megváltozása ds^2 -tel arányos, ezért a $\kappa ds^2 \approx 1$ feltétel szerint a nyalábok szélessége \mathcal{R}_0 -ban $\kappa^{-1/2}$ -nel lesz arányos.

¹³ Az ekvivalenciaosztályok közül kizárólag az áthajláskatasztrófának lehet felírni az integrálját zárt alakban: $\Psi(C) = \sqrt{2\pi} \text{Ai}(C)$, ahol Ai az Airy-függvényt jelöli.

¹⁴ Megjegyezzük, hogy a kausztikák mintázatának (2.15)-tel való leírása csak a kausztikák közelében, és rövid hullámhosszak esetén pontos. A kausztikától távolodva, az a amplitúdó s -függése és ϕ -nek a standard polinomtól való eltérése pontatlansághoz vezet. Ekkor az ún. *uniform* közelítések jelentik a megoldást, amelyek tárgyalására itt nem térünk ki.

kapcsolatot:

$$\psi(C') = \kappa^\beta \Psi(\kappa^{\sigma_j} C'_j) . \quad (2.16)$$

Itt C' -vel jelöljük a valós fizikai kontrollparamétereket, amely C' tartalmazza például az \mathcal{R} térbeli koordinátákat is. A (2.16) skálatörvényben, a κ -tól független $\Psi(C)$ -t a hullám-szám megfelelő hatványaival felskálázva nyerjük vissza a ψ hullámfüggvényt a C' -vel definiált koordináta-rendszer origójának kis környezetében. Ez a transzformáció a K darab, j -vel indexelt koordináta κ^{σ_j} , illetve az amplitúdó κ^β skálafaktorokkal való szorzásával jár. Tehát β az intenzitás divergenciájának a mérőszáma a $C' = C = 0$ pontban, σ_j pedig a mintázatban megfigyelhető rojttávolságok aszimptotikus zsugorodását írja le a j -edik dimenzió mentén. Ezek összegeként szokás még definiálni a $\gamma = \sum_{j=1}^K \sigma_j$ számot, ami a diffrakciós maximum K -dimenziós térfogatának κ -függését adja meg. Az ekvivalenciaosztályokat jellemző β , σ_j és γ indexeket a 2.2. táblázatban adjuk meg [84]. Látható, hogy β a K kodimen-

2.2. táblázat. A skálatörvények exponensei a $K \leq 4$ kodimenziójú elemi katasztrófákra

Katasztrófa	K	β	σ_j	γ
áthajlás	1	1/6	$\sigma_1 = 2/3$	2/3
csúcs	2	1/4	$\sigma_1 = 3/4, \sigma_2 = 1/2$	5/4
fecskefarok	3	3/10	$\sigma_1 = 4/5, \sigma_2 = 3/5, \sigma_3 = 2/5$	9/5
elliptikus umbilikus	3	1/3	$\sigma_1 = 2/3, \sigma_2 = 2/3, \sigma_3 = 1/3$	5/3
hiperbolikus umbilikus	3	1/3	$\sigma_1 = 2/3, \sigma_2 = 2/3, \sigma_3 = 1/3$	5/3
pillangó	4	1/3	$\sigma_1 = 5/6, \sigma_2 = 2/3, \sigma_3 = 1/2, \sigma_4 = 1/3$	7/3
parabolikus umbilikus	4	3/8	$\sigma_1 = 5/8, \sigma_2 = 3/4, \sigma_3 = 1/2, \sigma_4 = 1/4$	17/8

zióval együtt növekszik, ami érthető, hiszen a legnagyobb szingularitású, $C = 0$ pontban összeolvadó fénynyalábok száma mindig $K + 1$. Ugyanakkor a γ kitevőre is igaz ez, vagyis a magasabb kodimenziójú katasztrófák mintázata a $\kappa \rightarrow \infty$ limeszben gyorsabban zsugorodik. Ez a zsugorodás azonban anizotrop, mivel a σ_j kitevők értéke más és más a különböző irányokban.

Hogy könnyebben érthetővé váljon a skálázás matematikája, és az exponensek eredete, röviden levezetjük a (2.16) egyenletet a legegyszerűbb esetre, az áthajláskatasztrófára. A (2.12) egyenletből indulunk ki, melyben a κ vákuumbeli hullám-szám megjelenik a prefaktorban, és az integrandusban lévő exponenciálisban is, mint a ϕ generátorfüggvény szorzója. (2.12)-ben az a amplitúdót a járulékot adó integrálási tartományban továbbra is közel állandónak feltételezve, és erről az állandóról a komplex fázis értékű prefaktorral együtt az egyszerűség kedvéért megfeledkezve, illetve a kausztika közelében ϕ -t a standard polinomjával közelítve, $\psi(C')$ -t így írhatjuk fel:

$$\psi(C') = \left(\frac{\kappa}{2\pi} \right)^{N/2} \int ds' \exp(i\kappa\Phi(s', C')) .$$

Helyettesítsük be most az áthajláskausztikák standard polinomját, és N helyére 1-et! Ekkor

$$\psi(C') = \left(\frac{\kappa}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} ds' \exp(i\kappa(s'^3/3 + C's')) .$$

Jusson eszünkbe, hogy mindegyik Φ felbontható egy *csírára*, amely független a kontroll-paraméterektől, és egy *kifejtési tagra*, amely lineáris függvénye a C' -knek. A skálázás első lépésében egy alkalmas $s' \rightarrow s$ transzformációval megszabadulunk a csíra κ szorzójától, ami jelen esetben $\kappa s'^3 \rightarrow s^3$, aminek következtében a prefaktorban κ kitevője $\frac{1}{2} - \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$ lesz. Második lépésben a kifejtési tagokban megjelenő κ -hatványokat olvasztjuk bele C' -be, vagyis: $\kappa^{\sigma_j} C'_j \rightarrow C_j$, ahol jelen esetben $\sigma_1 = \frac{2}{3}$:

$$\psi(C') = \frac{\kappa^{\frac{1}{6}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp(i(s^3/3 + \kappa^{\frac{2}{3}} C' s)) .$$

Az eredményül kapott egyenletet összevetve a (2.15) és a (2.16) egyenletekkel látható, hogy az áthajláskatasztrófa exponensei $\beta = \frac{1}{6}$ és $\sigma_1 = \gamma = \frac{2}{3}$ lesznek.

2.2. Számszerű összevetés az egzakt számolással

Az első fejezetben, az elektronok hullámfüggvényét egy kör geometriájú szórópotenciál környezetében számoltuk ki egzaktul, egy- és kétrétegű grafénban. Az analitikus eredményeket numerikusan kiértékelve az 1.2. ábrákon tettük szemléletessé. Ezt követően, a 2.1. alfejezetben bemutattuk az optikának egy, a katasztrófaelméletben gyökerező ágát, ami egy szemiklasszikus, közelítő integrál segítségével írja le a hullámfüggvényt a kausztikák környezetében. Bár alapvetően optikai elméletről van szó, amit a (2.5) Helmholtz-egyenletből vezettünk le, ugyanazt a Helmholtz-egyenletet kielégítik az ERG (1.2) és a KRG (1.8) sajátállapotai is, habár az utóbbiak közül a \mathbf{k} és \mathbf{i} csillapodó hullámok k helyett egy tisztán képzetes ik hullámszámmal. Jogosnak tűnik tehát a várakozás, hogy a katasztrófaoptika eszköztárát ebben az *elektronoptikai* problémában is sikerrel alkalmazzuk! Ebben az alfejezetben pontosan ezt tesszük: az első fejezet egzakt eredményeit referenciaként használva, teszteljük a (2.12) integrálból kapható megoldás pontosságát mindkét graféntípusra, majd leellenőrizzük a skálatörvények teljesülését is. Látni fogjuk, hogy már a kísérletileg reális kR paraméterekre is jó az egyezés az egzakt, és a katasztrófaoptika $k \rightarrow \infty$ határesetre levezetett eredményei között, illetve hogy kR növelésével az eltérés monoton csökken.

A (2.13) integrál kétdimenziós megfelelőjére lesz szükségünk a számoláshoz:

$$\psi(\mathcal{R}) = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi i}} \int ds a(\zeta_0, s) \left[\frac{n(\zeta_0, s)}{n(\mathcal{R})} \partial_{s,z} \phi(\zeta_0, s, \zeta, z) \right]_{z=0}^{\frac{1}{2}} \exp(i\kappa \phi(\zeta_0, s, \mathcal{R})) . \quad (2.17)$$

Mivel esetünkben tartományonként homogén a törésmutató, a megfelelő tagot kiemelhetjük az integráljel elé. Ugyanakkor az is igaz, hogy a $\partial_{s,z}\phi(\zeta_0, s, \zeta, z)$ derivált az elvégzésre kerülő számításokban nagyon lassan változik s függvényében, ezért ezt is ki lehet emelni az integráljel elé. A (2.17) kifejezés tehát így módosul:

$$\psi(\mathcal{R}) = \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi i} \frac{n(\mathcal{R}_0)}{n(\mathcal{R})}} \partial_{s,z}\phi(\zeta_0, s, \zeta, z)|_{s=z=0} \int ds a(\zeta_0, s) \exp(i\kappa\phi(\zeta_0, s, \mathcal{R})) , \quad (2.18)$$

ahol \mathcal{R}_0 -t célszerű úgy megválasztani, hogy az átmenet belső oldalára essen, ahol $n(\mathcal{R}_0) = n(\mathcal{R})$. Ekkor $a(\zeta_0, s)$ éppen a megtört sugár spinoramplitúdója lesz, amit a határfeltételek felhasználásával tudunk kiszámolni. Az integráljel előtti skalár prefaktort az egyszerűség kedvéért az egzakt eredményekhez való illesztésből határoztuk meg úgy, hogy minimalizáltuk a négyzetes eltérést, ami egyetlen illesztést jelentett minden egyes ábrán bemutatott számolásra. Az integrálást az α beesési szög, mint állapotváltozó szerint végeztük el a $\pm \arcsin(\min(1, |n|))$ intervallumban, $|n| < 1$ esetén ugyanis az adott értéknél laposabb szögben érkező elektronok teljes visszaverődést szenvednek az átmenet határán. (2.18) numerikus kiértékelése tehát különösebb bonyodalom nélkül elvégezhető, legalábbis a $p = 1$ -es hurok által alkotott kausztikákra: ekkor az átmenet határán csupán egyszer, a beérkező elektronnyalábok megtörésénél kell elvégezni a határfeltételek szabta illesztést, és az optikai úthosszat is egyetlen törtvonalra kell kiszámolni, amelyet az α változó egyértelműen meghatároz. A $p = 2$ -es hurok által alkotott, és az annál magasabb rendű kausztikák esetében már bonyolultabb a helyzet: habár továbbra is csak egyetlen α állapotváltozónk van,¹⁵ a belső visszaverődési pontokat az integrálás során α minden egyes értékére külön-külön meg kell határozni, hogy számolható legyen a $\phi(\alpha)$ generátorfüggvény, ráadásul ugyancsak minden integrálási pontban el kell végezni a határfeltételek szerinti illesztést, hogy megkapjuk az eredő $a(\alpha)$ amplitúdót. Így, bár elvi nehézséggel nem jár a számolás kiterjesztése tetszőlegesen magas rendű kausztikákra, az eljárás számítási igénye a sokszorosára nőhet. Persze az is igaz, hogy a magasabb rendű kausztikák jelentősége általában az amplitúdójukkal egyenes arányban csökken az átmenetből való kiszóródás miatt.

Az egzakt és a szemiklasszikus számolások eredménye $(p, n) = (1, -1)$ esetén a 2.4., $(p, n) = (1, -1/3)$ esetén a 2.5., illetve $(p, n) = (2, -1)$ esetén a 2.6. ábrán látható. Hogy az eredmények egyezését számszerűsíteni tudjuk, definiálnunk kell egy hibát, amivel a szemi-

¹⁵ Bár először úgy tűnhet, hogy a belső visszaverődési pontok helyzete újabb és újabb állapotváltozóként jelenik meg, és így a magasabb rendű kausztikák már más és más osztályokba tartoznak, ez nem így van! Könnyen belátható ugyanis, hogy a belső visszaverődési pont is csak egy első rendben stacionárius pont és másod rendben már nem az, tehát helyzetét éppen úgy nem kell variálni, mint ahogy egy homogén tartományban nyilvánvalóan egyenes mentén terjedő nyalábot sem kell törtvonalként kezelni, és végtelen sok töréspontjában felvett változója szerint variálni. Ez nyilván megengedett, de a felbontási lemma [85] értelmében ezek a változók kitranszformálhatóak, vagyis feleslegesek. Következésképpen minden jelen dolgozatban tárgyalt kausztika korangja $N = 1$.

klasszikus eredmények eltérését mérjük az egzakt eredményektől, mint referenciától:

$$\xi = \frac{\left\| \left| \psi_{i,j}^{(\text{sk})} \right|^2 - \left| \psi_{i,j} \right|^2 \right\|}{\left\| \left| \psi_{i,j} \right|^2 \right\|},$$

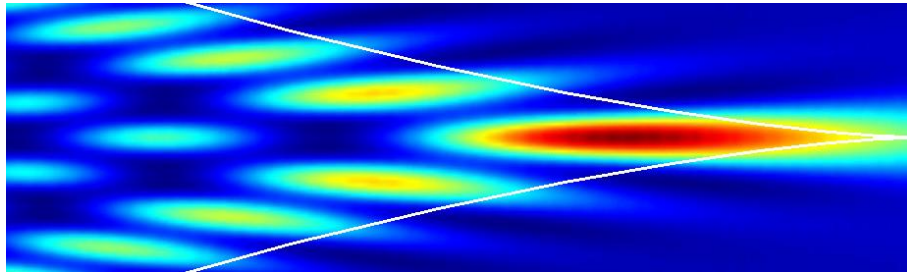
ahol $\left| \psi_{i,j}^{(\text{sk})} \right|^2$, és $\left| \psi_{i,j} \right|^2$ a szemiklasszikus, illetve az egzakt számolásból kapható megtalálási valószínűség az (i, j) -vel indexelt rácspontban, $\| \cdot \|$ pedig az így kapott mátrixok Frobenius-normája.¹⁶ Az így definiált hiba természetesen invariáns a rácspontok számára nézve, illetve a felbontás finomításával pontosabbá válik.¹⁷

A 2.4. ábrákon szépen látszik, hogy milyen pontos a szemiklasszikus közelítés, főleg ERG-ben, ahol szemmel nem tehető különbség a közelítés, és az egzakt eredmények között. A ξ hibahányados ERG-ben 0.01089, míg KRG-ben 0.2038. KRG-ben a nagyságrendileg nagyobb hiba oka nyilván abban a fodrozódásban keresendő, ami jelen van az egzakt eredményben, de nyoma sincs a közelítésben. Mivel a hullámzás hullámhossza körülbelül az elektronok de Broglie hullámhosszának felével egyezik meg – ami igaz lesz a további ábrák esetében is –, egy interferenciajelenségről van szó, amit a szemiklasszikus módszer nem képes visszaadni. Ehhez hasonló fodrozódást tapasztaltak Topinka és társai kétdimenziós elektrongázban egy kvantum pontkontaktuson végzett méréseik során [70].

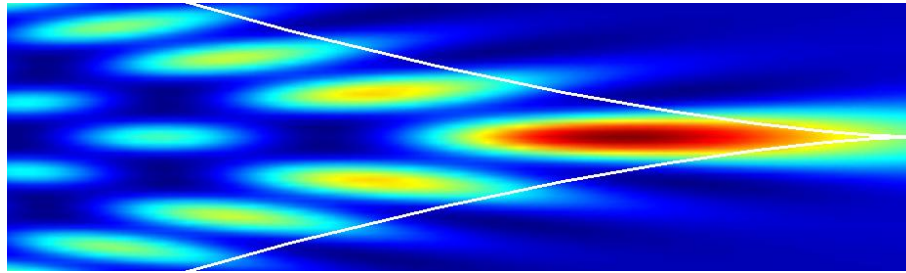
Feltűnő különbség látható az ERG-ben és a KRG-ben létrejövő mintázatok között: KRG-ben teljesen hiányzik a fókuszpont! Itt jusson eszünkbe a Klein-paradoxon [15, 33, 34], az 1.3. ábrák diszkussziója, és az azt megelőző számolás, ahol megmutattuk, hogy merőleges beesés esetén, egy n - p átmenetnél, ERG-ben egységnyi valószínűséggel jutnak át az elektronok, míg KRG-ben egységnyi valószínűséggel verődnek vissza! Miután pontosan az optikai tengelyhez közel haladó nyalábok formálnák a csúcskausztikát, ez ERG-ben a legerősebb intenzitású pont lesz, míg KRG-ben teljesen hiányozni fog. Felmerül a kérdés, hogy a hiányzó fókuszpont hogyan egyeztethető össze a katasztrófoptika azon állításával, miszerint az egy osztályba tartozó kausztikák mindegyikének azonos a mintázata egy diffeomorf deformációtól eltekintve. Nyilvánvaló, hogy 2.4(d) nem vihető át 2.4(b)-be. Az ellentmondást feloldja a katasztrófoptikának az a kitétele, miszerint (2.12)-ben $b(\zeta_0, s, \mathcal{R})$ -nek, s függvényében, a stacionárius pont körül, egy lassan változó függvénynek kell lennie, ami KRG-ben $\alpha = 0$ -nál nem teljesül, hiszen $a(\alpha)$ éppen előjelet vált ebben a pontban. Rögtön érthetővé válik az is, hogy csúcskausztikát ERG-ben is, miért csak $p = 1$ esetén tapasztalunk: mivel csúcskausztikát

¹⁶ Az A mátrix Frobenius-normáját így definiáljuk: $\|A\| = \sqrt{\text{Tr}(A^+A)} = \sqrt{\sum_{i,j} |A_{i,j}|^2}$, ahol A^+ jelöli az adjungált mátrixot.

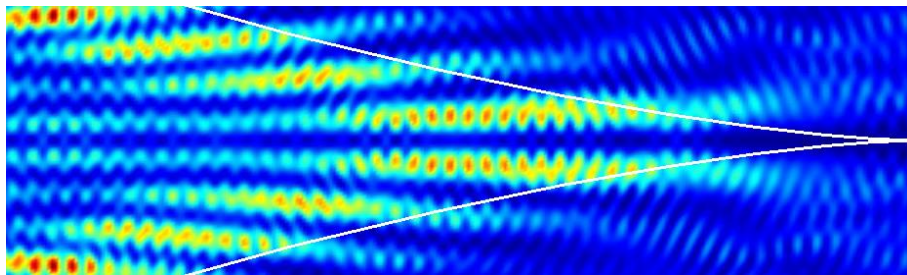
¹⁷ Természetesen az (1.7), (1.12) és (2.17) képletekben szereplő végtelen összegzéseket és integrálokat is csak egy bizonyos pontossággal lehet elvégezni. A relatív numerikus tolerancia az egzakt képletek kiértékelésénél 10^{-8} volt, míg a szemiklasszikus számolásoknál $p = 1$ esetén 10^{-4} , pedig $p = 2$ -nél 10^{-3} volt.



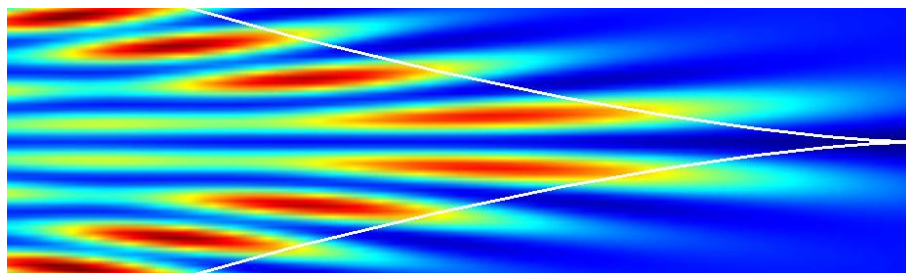
(a) Egzakt számolás (1.7) alapján.



(b) Szemiklasszikus közelítés (2.17) alapján.

 $|\psi(\mathcal{R})|^2$ a $p = 1$ -es csúcskausztikánál, ERG-ben.

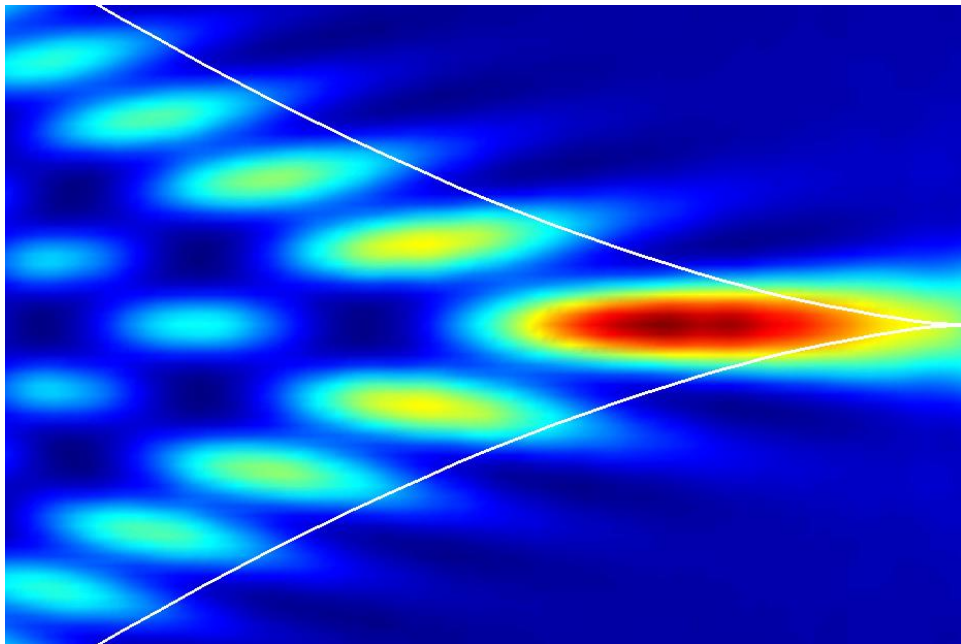
(c) Egzakt számolás (1.12) alapján.



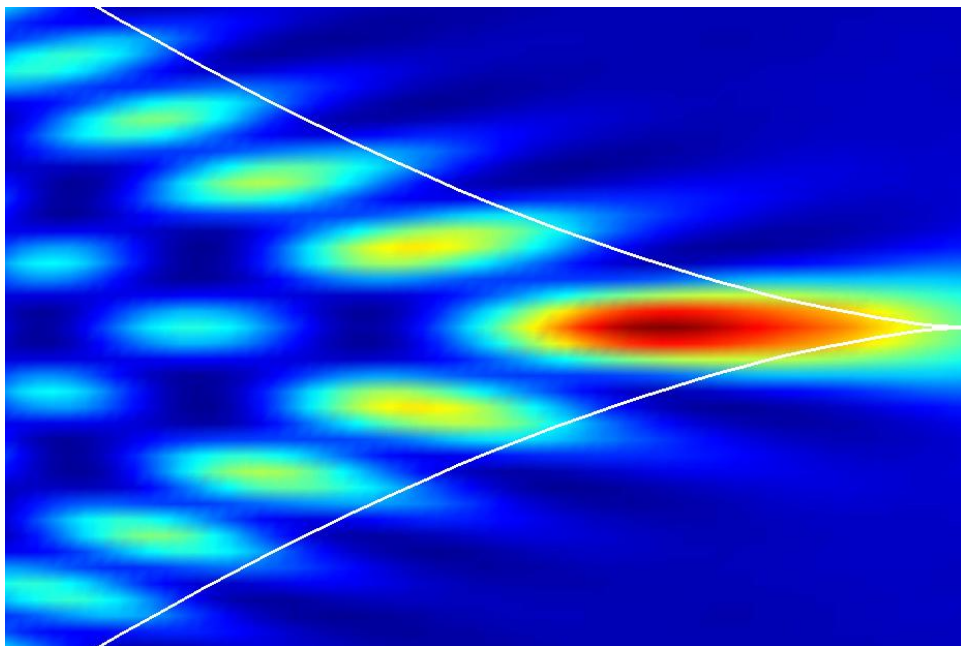
(d) Szemiklasszikus közelítés (2.17) alapján.

 $|\psi(\mathcal{R})|^2$ a hiányzó, $p = 1$ -es csúcskausztikánál, KRG-ben.

2.4. ábra. Az egzakt és a szemiklasszikus számolás összevetése a $p = 1$ -es csúcskausztikák környezetében. A folytonos vonal jelöli a kausztika (1.14)-ből számolt analitikus görbéjét. Az ábrázolt tartomány az $-0.517 < x < -0.5$ és $-0.0025 < y < 0.0025$. $k_o R = k_i R = 10000$, tehát $n = -1$.



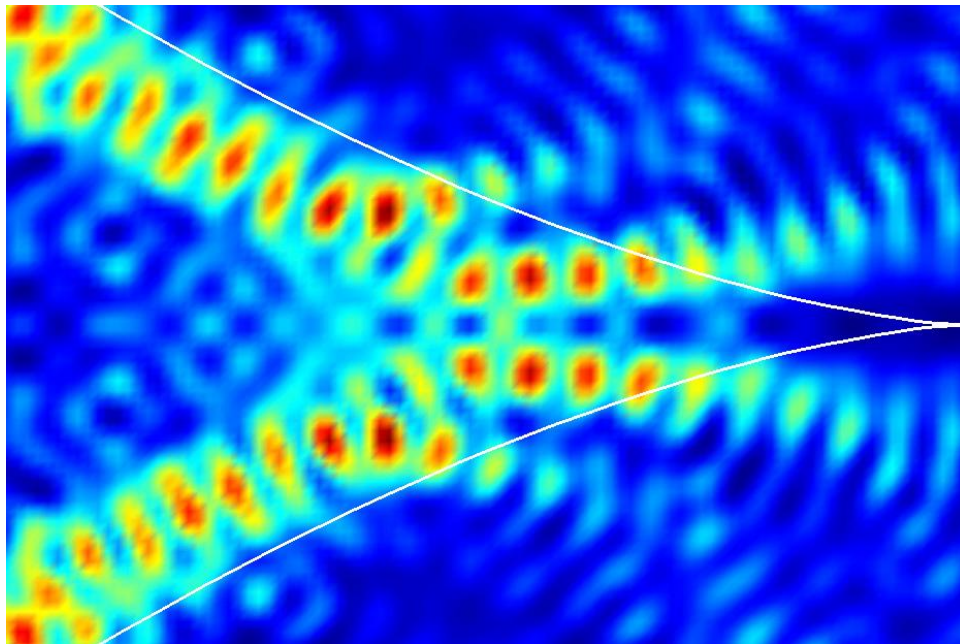
(a) Egzakt számolás (1.7) alapján.



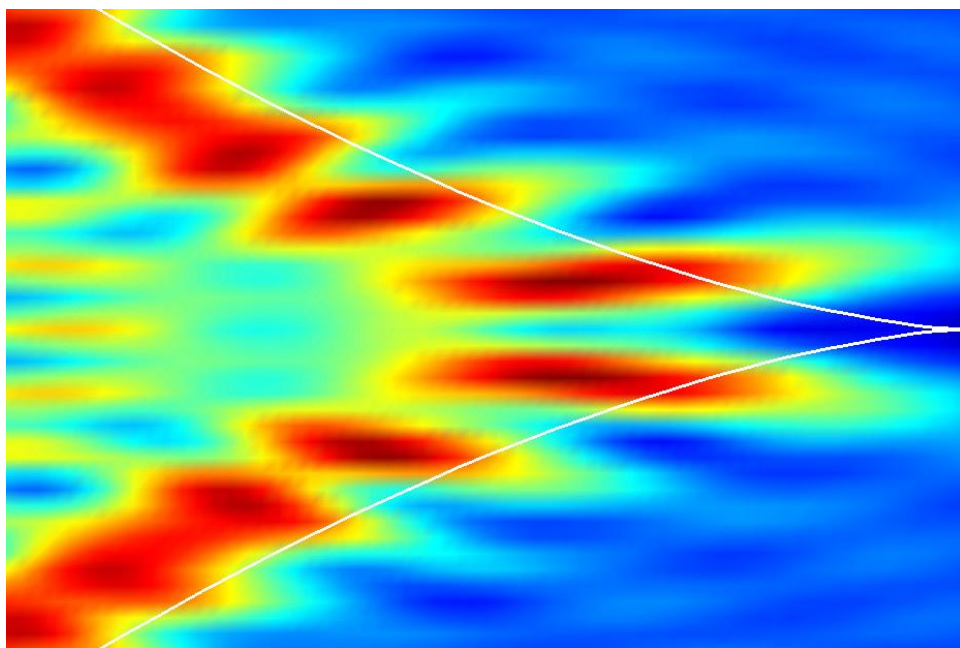
(b) Szemiklasszikus közelítés (2.17) alapján.



2.5. ábra. Az egzakt és a szemiklasszikus számolás összevetése: $|\psi(\mathcal{R})|^2$ a $p = 1$ -es csúcskausztikánál ERG-ben. A folytonos vonal jelöli a kausztika (1.14)-ből számolt analitikus görbéjét. Az ábrázolt tartomány az $-0.81 < x < -0.75$ és $-0.02 < y < 0.02$. $k_o R = 3000$ és $k_i R = 1000$, tehát $n = -1/3$.



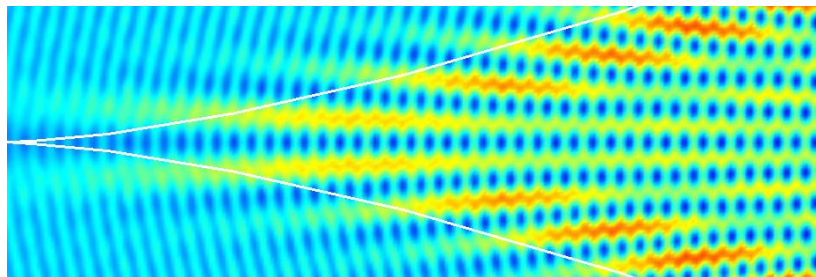
(c) Egzakt számolás (1.12) alapján.



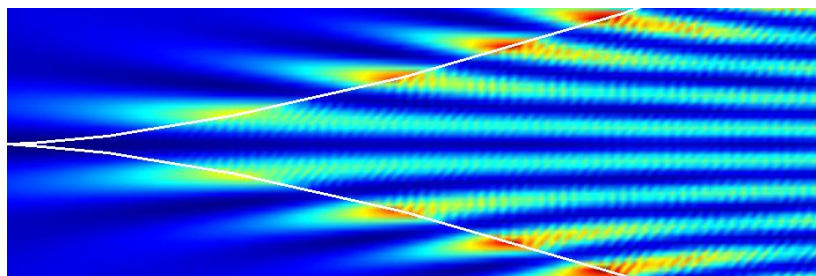
(d) Szemiklasszikus közelítés (2.17) alapján.



2.5. ábra. Az egzakt és a szemiklasszikus számolás összevetése: $|\psi(\mathcal{R})|^2$ a hiányzó, $p = 1$ -es csúcskausztikánál KRG-ben. A folytonos vonal jelöli a kausztika (1.14)-ből számolt analitikus görbét. Az ábrázolt tartomány az $-0.81 < x < -0.75$ és $-0.02 < y < 0.02$. $k_o R = 3000$ és $k_i R = 1000$, tehát $n = -1/3$.



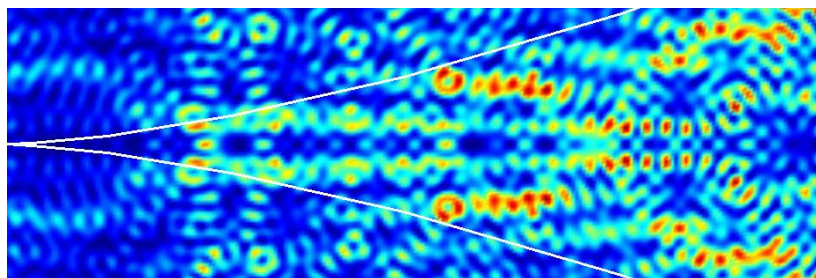
(a) Egzakt számolás (1.7) alapján.



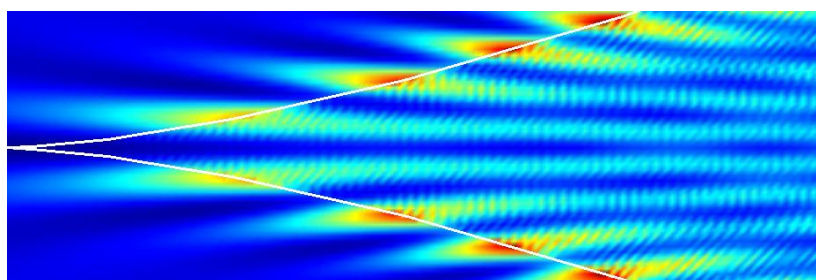
(b) Szemiklasszikus közelítés (2.17) alapján.



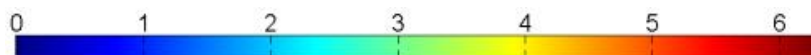
$|\psi(\mathcal{R})|^2$ a hiányzó, $p = 2$ -es csúcskausztikánál, ERG-ben.



(c) Egzakt számolás (1.12) alapján.



(d) Szemiklasszikus közelítés (2.17) alapján.



$|\psi(\mathcal{R})|^2$ a hiányzó, $p = 2$ -es csúcskausztikánál, KRG-ben.

2.6. ábra. Az egzakt és a szemiklasszikus számolás összevetése a $p = 2$ -es csúcskausztikák környezetében. A folytonos vonal jelöli a kausztika (1.14)-ből számolt analitikus görbét. Az ábrázolt tartomány az $0.25 < x < 0.265$ és $-0.0025 < y < 0.0025$. $k_o R = k_i R = 10000$, tehát $n = -1$.

mindegyik p rendben az optikai tengelyhez közeli nyalábok formálják, és ezek ugyanazok a nyalábok lesznek a belső visszaverődések után is, KRG-ben egyáltalán nem alakul ki fókusz, hiszen ezek a nyalábok be se lépnek a belső tartományba, míg ERG-ben belépnek ugyan, de már az első belső visszaverődésnél az átmenetre újra csak közel merőlegesen érkező nyalábok majdnem 100%-ban ki is szóródnak, így már nem vesznek részt a $p > 1$ -es csúcskausztikák létrehozásában.

Két megjegyzést érdemes hozzáfűzni a 2.5. ábrákhoz: látható egyrészt, hogy a kisebb hullámszámnak köszönhetően a mintázat mindkét dimenzió mentén nagyobb léptékű, ráadásul a kausztikák görbéi kinyílnak, tehát a megnyúlás anizotrop, ami összhangban van a skálatörvények különböző σ_1 és σ_2 exponenseivel (lásd a 2.2. táblázatot). Másrészt pedig, szintén a kisebb hullámszámnak köszönhetően, a $k \rightarrow \infty$ limeszben pontos közelítő módszer ezúttal nagyobb eltérést ad az egzakt megoldástól: ERG-re $\xi = 0.07779$, illetve KRG-re $\xi = 0.3132$.

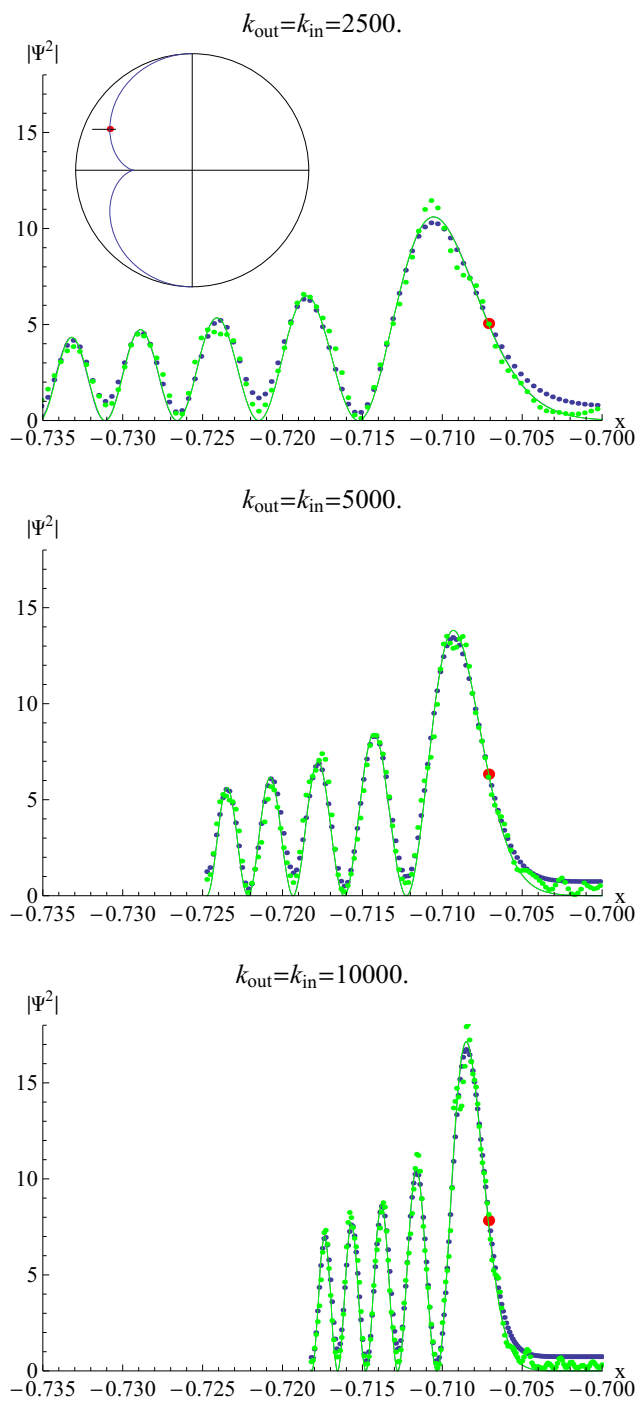
A $p = 2$ -es kausztikákra vonatkozó eredmények a 2.6. ábrákon láthatóak. Habár intenzitásuk kisebb, mint az elsőrendűeké, még jól kivehetőek az egzakt számolások ábráin is. Várakozásainknak megfelelően, mindegyik ábráról hiányzik a fókuszpont. A hibahányadosok viszonylag nagyok, 0.4553 ERG-re, és 0.5458 KRG-re.

Három egymást érintő nyaláb alkotja a pontszerű csúcskausztikát, melyből kiinduló két gyújtógörbe mentén már csak két-két nyaláb érinti egymást. A $p = 1$ -es áthajláskausztika görbéjére merőleges, az x tengellyel párhuzamos irányban számolt intenzitás értékeket mutatja a 2.7. ábra. Az egzakt számolást jelölő zöld pontokra jól illeszkedik az Airy-függvény négyzete, ami majdnem ugyanazokkal az illesztési paraméterekkel köti össze a szemiklasszikus számolást jelölő kék pontokat is.

Elvégeztünk néhány tesztet a skálatörvények numerikus igazolására is, illetve annak vizsgálatára, hogy már a hullámszám reálisnak mondható tartományában is érvényesülnek-e ezek az összefüggések, melyeket egyébként a nagy energiájú határesetre írtunk fel. Ezért az alábbi tesztek mindegyikében az egzaktul számolt hullámfüggvény intenzitására és térbeli mintázatának k -függésére illesztjük a skálatörvények hatványfüggvényeit, melyekből kinyerve a β és σ illesztési paramétereket, összevetjük azokat a 2.2. táblázatban található elméleti értékekkel.

ERG-ben, rögzített $n = -1$ -es törésmutató mellett, a $p = 1$ -es csúcskausztikában számolt $|\psi(-1/2R, 0)|^2$ intenzitás k -függésére a $kR \in [100 \dots 10^5]$ intervallumban, log-log skálán egy 2β meredekségű egyenes illeszthető, ahol a kettes szorzó ψ második hatványa miatt jelent meg, és $\beta = 0.2554 \pm 0.0006$. Ugyanez a kitevőt csupán a $kR \in [10^4 \dots 10^5]$ intervallumban illesztve $\beta = 0.24995 \pm 0.00148$ -at kapunk, ami még közelebb esik az elméleti $1/4$ -es értékhez.

Ugyancsak ERG-ben, $n = -1$ -re, egy tetszőleges, fókuszhoz közel eső pont intenzitásának k -függését vizsgáltuk úgy, hogy a térbeli zsugorodást leíró törvényeknek megfelelően az adott pontot k növelésével együtt mozgattuk közelebb a fókuszponthoz, hogy ezáltal in-



2.7. ábra. $|\psi(x)|^2$ ERG-ben $y = 1/\sqrt{8}$ -nál, a $p = 1$ -es áthajláskausztikára merőleges irányban (lásd a kis ábrát balra, fent). $k_o R = k_i R = 2500, 5000$ és 10000 , így $n = -1$ mindegyik esetben. Zöld pontok jelölik az egzakt eredményeket és kékek a közelítést. A piros pötty a kausztikával való metszéspontot jelöli, koordinátái $(-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{8})$. A folytonos vonal az illesztett $a\text{Ai}^2(bx + c)$ függvény, ahol a , b és c illesztési paraméterek, és Ai az Airy-függvény. A szemiklasszikus, és az egzakt eredményekre illesztett görbék szinte tökéletesen átfednek, így csak egy görbe látszik mindhárom esetben! Vegyük észre, hogy k megduplázásával a lokális maximumok körülbelül $\sqrt[3]{2}$ -vel szorozódnak, távolságuk pedig a $\sqrt[3]{1/4}$ -ére csökken a skálatörvényeknek megfelelően!

direkt módon igazoljuk σ_1 és σ_2 elméleti értékeit is.¹⁸ A $kR \in [100...10^5]$ intervallumban $\beta = 0.2615 \pm 0.0010$ -nek adódott, míg a $kR \in [10^4...10^5]$ intervallumban $\beta = 0.2519 \pm 0.0006$ -nak. Ezúttal is pontosabb az egyezés a nagyobb hullámszámokra.

KRG-ben, a hiányzó fókuszpont miatt, körülményesebb a fentiekhez hasonló tesztek kivitelezése, mégis sikerült igazolni, hogy a diffrakciós rojtok összehúzódása követi az elméleti hatványfüggvényeket, és elvi úton az is megmutatható, hogy pontosan a csúcskausztikában az intenzitás k -től független. Mindez igaz mindkét típusú grafénban $p > 1$ esetén.

Ami az áthajláskausztikákat illeti, a 2.7. ábrán bemutatott számolások megismétlésével a $kR \in [10^3...10^5]$ intervallumban, az a és b illesztési paraméterekből könnyen meghatározhatóak a β és σ exponensek: ERG-ben $\beta = 0.1601 \pm 0.0002$ és $\sigma = 0.6727 \pm 0.0010$, míg KRG-ben $\beta = 0.1764 \pm 0.0188$ és $\sigma = 0.6749 \pm 0.0023$. Az elméleti értékek: $\beta = 1/6$ és $\sigma = 2/3$.

¹⁸A kontrollparaméterek terében, a csúcskausztikákhoz rögzített koordináta-rendszer megegyezik az (x, y) koordináta-rendszerrel a fókuszpontba tolt origóval. Az áthajlásokhoz rögzített egyetlen koordinátatengely merőleges a gyújtógörbére, és az origó a metszéspontban van.

3. fejezet

Anizotrop diszperzió kétrétegű grafénban

Ebben a fejezetben kizárólag kétrétegű grafénnal foglalkozunk, amiben ezúttal a Dirac-pontokhoz közeli elektronállapotokat az (5) Hamilton-operátorban, a v_3 -mal arányos tag figyelembevételével írjuk le. Ez jelentős különbséghez vezet, hiszen az új, *háromszögletű* vagy *trigonális gyűrő hatást* leíró tag (angolul *trigonal warping*) anizotroppá teszi a diszperziós relációt. Mint látni fogjuk, a diszperziós görbék a k térben valóban háromszögletűek lesznek, pontosabban fogalmazva egy hármas szimmetria jelenik meg bennük. Az anizotropia körülményesebbé teszi ugyan a számolást, de a pontosabb Hamilton-operátor lehetővé teszi olyan jelenségek leírását is, mint a pontszerű forrásból szétsugárzó elektronok fókuszálása egy sík lépcsőpotenciállal, ugyanazon a sávon belül. Hasonlóan a Veselago-féle síklencsékhez [60], most is definiálhatunk egy törésmutatót, aminek a negatív értékével hozható összefüggésbe a fókuszáló hatás, de ezúttal, ez nem a helicitás előjelváltásával lesz magyarázható, mint az 1. fejezetben. Az anizotropia következtében célszerű lesz magát a törésmutatót is a hagyományostól eltérően definiálni, és amint látni fogjuk, az immár szögfüggő törésmutató előjelváltása ekkor az ekvienergiás kontúrok görbületváltásával lesz kapcsolatos. Az előző fejezetekben tárgyalt rendszerben nem tapasztaltunk fókuszálást KRG-ben, és ezt a n - p átmenetknél a tiltott előreszórással magyaráztuk. Ebben a fejezetben, az elektronok szóródása során nem történik sávváltás, és ilyenkor az átmeneti valószínűség közel egységnyi lesz merőleges beesésnél. Hogy a síkátmeneten keresztül történő fókuszálás jelenségét demonstráljuk, a katasztrófoptika (2.18) egyenletét alkalmazzuk anizotrop közegre, és az átmenet határán megtört nyalábokra vett integrált kiértékelve kapjuk meg a teljes hullámfüggvényt az átmenet forrással átellenes oldalán. Az új Hamilton-operátorban figyelembe veszünk egy komplex u paramétert is, amivel le lehet írni a grafénrács mechanikai deformációjának a sávszerkezetre való hatását. Ez a paraméter kihat a Dirac-pontok környékén a sávszerkezet topológiájára is, amire közvetett úton következtethetünk a fókuszpont helyéből. Látni fogjuk, hogy bár egy véges u az általunk vizsgált energiákon a fókuszáló hatást nem szünteti meg, a mintázatot diffeomorf módon deformálja.

3.1. Alacsony energiájú sajátállapotok KRG-ben

Az (5) Hamilton-operátor a millielektronvoltage energiaskálán is pontosan írja le KRG-ben a Dirac-ponthoz közeli állapotok diszperzióját, amennyiben egy feszültségmentes és hibátlan grafénrácstról, és az abban egymástól függetlenül, ballisztikusan terjedő elektronokról van szó. Ellenkező esetben, egy újabb taggal bővül a $\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0$ Hamilton-operátor. Mucha-Kruczyński és munkatársai egyenleteket vezettek le KRG-ben a külső mechanikai feszültségek hatásának leírására [98], és arra az eredményre jutottak, hogy a rács síkjában ébredő külső erők okozta deformációk miatt, az effektív, 2×2 -es Hamilton-operátorban egy komplex u paraméter

jelenik meg a nemdiagonális mátrixelemekben¹:

$$\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2m}p_-^2 + \xi v_3 p_+ + u \\ -\frac{1}{2m}p_+^2 + \xi v_3 p_- + u^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

ahol $\xi = +1$ a K pont környezetének felel meg, $\xi = -1$ pedig a K' pont környezetének. Ez a Hamilton-operátor tulajdonképpen annak felel meg, mintha a rendszerben aszimmetrikus módon megváltoznának az átfedési integrálok, amint az a 3.1. ábrán látható.

A sajátérték probléma megoldásához célszerű áttérni egy kényelmes mértékegységrendszerre, melyben $\hbar = 1$, $m = 1$, $v = 1$, következésképpen $v_3 \approx 0.1$ és $\gamma_1 \approx 2$. Ahhoz, hogy a (3.1) Hamilton-operátor alkalmazható legyen, a k hullámszámnak nem szabad jóval nagyobbak lennie, mint 1, vagyis $300 \mu\text{m}^{-1}$.²

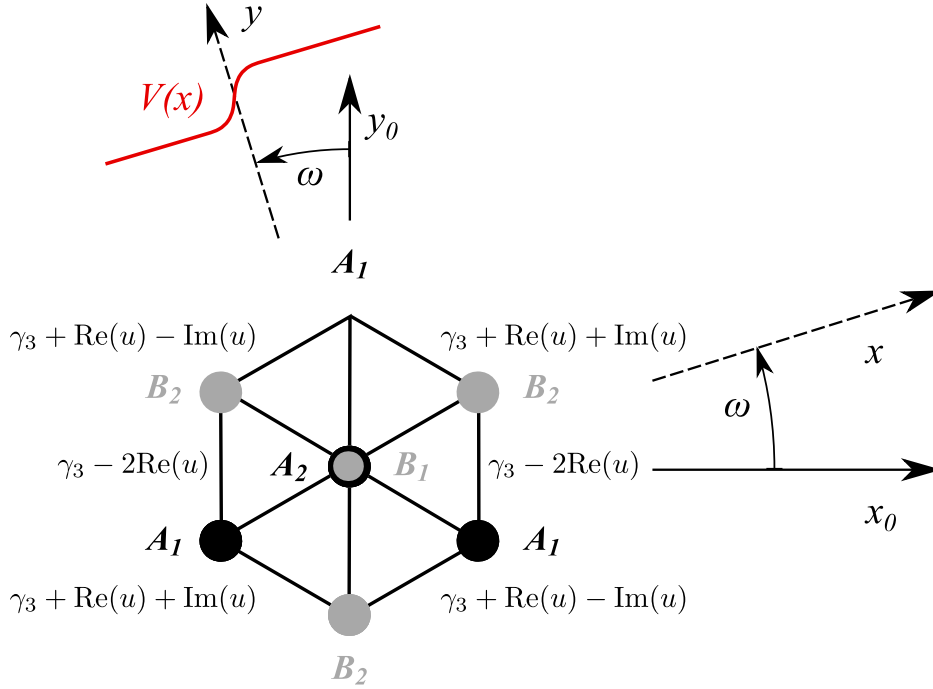
Vegyük észre, hogy mivel ebben a fejezetben egy síkátmenettel lesz dolgunk, az előzőektől eltérően nem lesz forgásszimmetrikus a rendszerünk! Célszerű ezért bevezetni két koordináta-rendszert: az (x_0, y_0) rendszert a grafénrácshoz rögzítjük, vagyis a (3.1) Hamilton-operátorban, az impulzusoperátorokban ezen koordináták szerint deriválunk. Az (x, y) rendszert pedig rögzítsük a kísérleti elrendezéshez úgy, hogy az y tengely essen egybe az U magasságú potenciállépcsővel, az elektronok pontszerű forrása pedig illeszkedjen az x tengely negatív szárára! A két koordináta-rendszer origója megegyezik, elfordulásuk szögét pedig ω jelöli (lásd a 3.1. és 3.2. ábrákat). A beérkező elektronok energiáját jelölje $E_i = E$, az átmeneten keresztüljutó elektronokét pedig $E_t = E - U$!

¹ Érdekes, hogy Fal'ko és társai, KRG-ben, az elektron-elektron kölcsönhatást tárgyaló munkájukban is hasonló eredményekre jutottak [99]. Megmutatták, hogy a hosszú távú Coulomb-erő leárnýekolódása miatt, csak egy rövid hatótávú kölcsönhatás van jelen a rendszerben, ami az effektív Hamilton-operátor nemdiagonális elemeiben ugyancsak egy komplex paraméter segítségével vehető figyelembe, formailag éppúgy, ahogy a mechanikai feszültség. Ezek azonban sokkal inkább kvalitatív jellegű eredmények! A kutatók számos feltételezésre támaszkodnak a végeredmény levezetése során, melynek érvényességi tartománya is csupán a Lifshitz-energia (~ 1 meV) környékére szorítkozik, amit a későbbiekben definiálunk. Ezen felül, ellentétben a mechanikai hatást leíró u paraméterrel, távolról sem állítható, hogy a kölcsönhatást leíró tag a (3.1) Hamilton-operátor kb. -200 meV-től 200 meV-ig terjedő érvényességi tartományában közel állandó volna! Mindezen okoknál fogva, u véges értékét kizárólag a mechanikai feszültségekkel hozzuk majd összefüggésbe. Megjegyezzük azonban, hogy az e - e kölcsönhatás kis mértékben ugyan, de módosítja u -t, és néhány más paramétert is. A renormalizáció mértéke az energia függvénye [98, 99]:

$$\begin{aligned} m &\rightarrow m (\gamma_1/E)^{0.02}, \\ v_3 &\rightarrow v_3 (\gamma_1/E)^{-0.02} \text{ és} \\ u &\rightarrow u (\gamma_1/E)^{0.11}. \end{aligned}$$

Miután ezek a többnyire csak néhány %-os korrekciók az eredményeket minőségileg nem befolyásolják, és a fentiek értelmében alkalmazhatóságuk is megkérdőjelezhető, a számolások során elfeledkezünk róluk.

² Ebben a rendszerben az energia egysége körülbelül 195 meV, a hosszegység pedig 3.45 nm. Bár az egyenleteket általában a dimenziótlanított mennyiségekkel írjuk fel, a végeredményeket mindig μm -ben, meV-ban és ezekből származtatott dimenziós egységekben adjuk meg.



3.1. ábra. Az átfedési integrálok KRG-ben kiegészülnek u valós és képzetes részével, ami a rendszer szimmetriáját C_{6v} -ről C_{2v} -re csökkenti. A grafénrácshoz rögzített (x_0, y_0) koordináta-rendszerhez képest ω szöggel van elforgatva az (x, y) rendszer, aminek az y tengelyére illeszkedik a potenciálugrás, és x bal szárán ül a forrás. (Ezúttal az (x_0, y_0) rendszer $+30$ fokkal el van forgatva a 2. ábrán látható rendszerhez képest!)

Válasszunk egy alkalmas, síkhullám alakú próbafüggvényt, és oldjuk meg stacionárius Schrödinger-egyenletet:

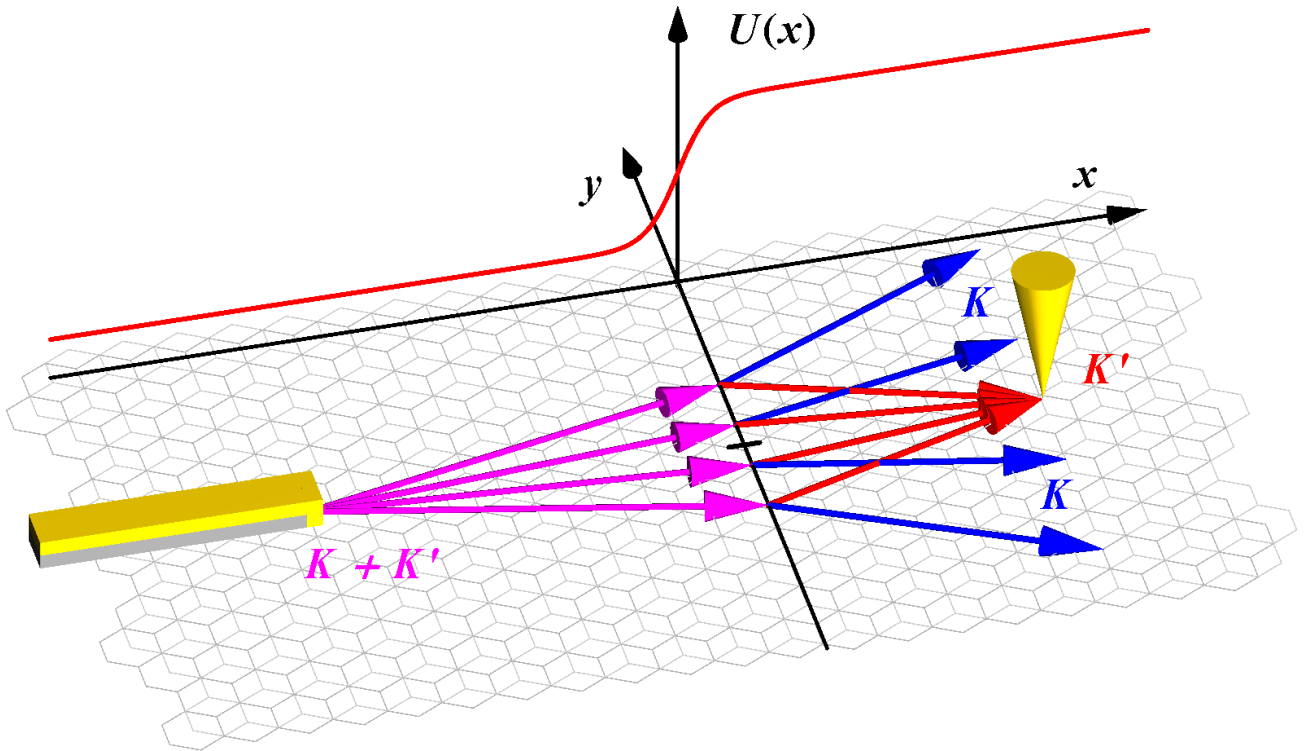
$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik(x \cos(\varphi) + y \sin(\varphi))} \begin{pmatrix} \theta^{-1} \\ \tau \theta \end{pmatrix}, \text{ ahol} \quad (3.2)$$

$$\theta = -ie^{i(\varphi-\omega)} \sqrt[4]{\frac{k^2 - 2kv_3 e^{-3i(\varphi-\omega)} - 2u^* e^{-2i(\varphi-\omega)}}{k^2 - 2kv_3 e^{3i(\varphi-\omega)} - 2u e^{2i(\varphi-\omega)}}}. \quad (3.3)$$

A megoldáshoz tartozó sajátenergia pedig:

$$E = \tau \frac{k^2}{2} \sqrt{1 - 4 \left(\frac{v_3 \cos(3(\varphi - \omega))}{k} - \frac{v_3^2 - \text{Re}(ue^{2i(\varphi-\omega)})}{k^2} - \frac{2v_3 \text{Re}(ue^{-i(\varphi-\omega)})}{k^3} - \frac{|u|^2}{k^4} \right)}, \quad (3.4)$$

ahol $\text{Re}(\cdot)$ és $\text{Im}(\cdot)$ jelöli a valós és képzetes részt. Itt φ -vel jelöltük a síkhullámok hullámszámvektorának irányát az (x, y) rendszerben, ami az (x_0, y_0) rendszerben a $\varphi_0 = \varphi - \omega$ iránynak felel meg: ezzel összhangban, a (3.2)-(3.4) képletekben ψ exponenciálisán kívül minden csak φ_0 -n keresztül függ φ -től. Könnyen belátható, hogy θ csak egy komplex fázist jelöl, hiszen a gyökjel alatti tört nevezője a számláló komplex konjugáltja. A negyedik gyök azonban i



3.2. ábra. A 3. fejezetben vizsgált rendszer sematikus elrendezése és az elektronok klasszikus trajektóriája az (x, y) koordináta-rendszerben. Az átmenettől balra található pontforrást például egy aranykontaktus valósíthatja meg, amit a vége kivételével egy szigetelőréteg tart távol a grafénrácstól. Így, a kontaktus kiterjedése a 10 nm-es szintre korlátozható, ami már pontszerűnek tekinthető. Az átmenettől jobbra, a fókuszpontot és környezetét egy mozgatható STM tűvel deríthetjük fel. A potenciállépcső az y tengelyre esik, de kellőképpen sima a spontán sávváltást elkerülendő, illetve hogy eltekinthessünk a gradiens tagoktól [50]. Az elektronszórás szelektív a K és K' völgyekre nézve, hiszen amíg az egyikből érkező elektronokat fókuszálja, addig a másiból érkezőket szétszórja. Az átmenethez érkező elektronok véges valószínűséggel vissza is verődhetnek, az ábrán ezt nem jelöltük. Az origót az y tengelyen egy vonás jelzi, az x tengely csak az átláthatóság kedvéért lett az ábra szélére csúsztatva.

tetszőleges többszörösében határozatlan marad, vagyis a négy Riemann-síknak megfelelően, θ -nak négy különböző értéket enged meg ugyanazon paraméterek mellett! (3.2)-ben mindez ψ , és a spinor egyik komponensének tetszőleges előjelének felel meg. A spinorban a tetszőleges előjelet azonban kiemelhetjük, és $\tau = \pm 1$ -gyel azonosíthatjuk a vezetési és valenciasávbeli megoldásokat, melyek energiája $\tau|E|$, ami miatt tehát (3.4)-ben mindig a pozitív gyököt kell választanunk. Így végül a (3.2)-(3.4) kifejezésekkel meghatározott haladó hullámot leíró megoldások egyértelműek, de a megoldások folytonossága miatt, a számszerű kiértékelésnél a négy gyök közül mindig ugyanazt kell kiválasztani. Igaz ugyan, hogy θ egy tetszőleges i -hatvánnyal megszorozható, mégis célszerű egy $-i$ szorzót beledefiniálni, mégpedig azért, mert $v_3 = 0$ és $u = 0$ estén, a $\sqrt[4]{1}$ -et 1-nek véve kapjuk vissza a legegyszerűbb, külső feszültségektől és trigonális torzulástól eltekintő sajátfüggvényeket a helyes előjelű sajátenergiákkal.

Továbbra sem szabad elfeledkezni a csillapodó hullámokról, melyek az átmenetnél, a határfeltételek kielégítésénél játszanak szerepet. A síkhullám ansatzban, a hullámszám x komponense helyett, meg kell engednünk egy komplex számot, melynek képzetes részének előjelétől függően fog exponenciálisan csillapodni a hullámfüggvény az átmenettől az egyik, illetve a másik irányba távolodva. A φ irányba propagáló, τ sávbeli, E energiájú megoldáshoz tehát az alábbi csillapodó hullám társul:

$$\psi_e = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{ik(xa+y \sin(\varphi))} \begin{pmatrix} \chi^{-1} \\ \tau \chi \end{pmatrix}, \text{ ahol} \quad (3.5)$$

$$\chi = \frac{i}{\sqrt{|E|}} \sqrt{\frac{1}{2} k^2 e^{-2i\omega} (a + i \sin(\varphi))^2 - kv_3 e^{i\omega} (a - i \sin(\varphi)) - u^*}, \quad (3.6)$$

és az a szám egy harmadfokú egyenletből számolható ki:

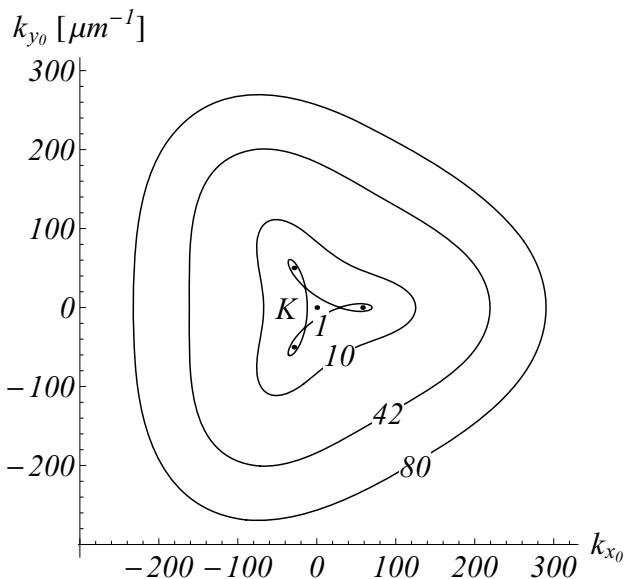
$$\begin{aligned} & k(a + \cos(\varphi)) \left((2a^2 + 3) k^2 - k^2 \cos(2\varphi) + 8v_3^2 \right) - 24k^2 v_3 \sin(\varphi) \sin(3\omega) (a + \cos(\varphi)) \\ & - 8k^2 v_3 \cos(3\omega) (a^2 + a \cos(\varphi) + 2 \cos(2\varphi) - 1) - 8k(a + \cos(\varphi)) \operatorname{Re}(e^{-2i\omega} u) \\ & + 16k \sin(\varphi) \operatorname{Im}(e^{-2i\omega} u) + 16v_3 \operatorname{Re}(e^{i\omega} u) = 0. \end{aligned}$$

Mivel az egyenletben minden tag valós, kivéve az a -t, szükségszerű, hogy a -ra legyen két megoldás, melyek egymás komplex konjugáltjai, plusz egy valós megoldás. A minket érdeklő komplex megoldások közül a pozitív (negatív) képzetes részű adja az $x \rightarrow +\infty$ ($x \rightarrow -\infty$) irányba csillapodó megoldást.

Könnyen belátható, hogy (3.2)-ben és (3.5)-ben τ miéért csak a spinor egyik komponensének szorzójaként van jelen: mivel a Hamilton-operátornak csak nemdiagonális elemei vannak, egy sajátvektor bármelyik komponensének előjelváltása szintén sajátvektort eredményez elmentett előjelű sajátértékkel. Az általánosság elvesztése nélkül, szorítkozhatunk most csupán a vezetési sávbeli megoldásokra. Mint látni fogjuk a 3.2. alfejezetben, ha nincs sáv váltás, akkor egy potenciállépcsőn sokkal nagyobb valószínűséggel tudnak áthaladni az elektronok, ezért a 3.3. alfejezetben már az átmenet mindkét oldalán $\tau = 1$ -gyel fogunk számolni. Emiatt, a potenciállépcső magassága ott nem haladhatja meg a bejövő elektronok energiáját: $0 < U < E$.

A 3.3. és a 3.4. ábrákon látható a kétrétegű grafén (3.4) képlettel leírt diszperziós relációja a K Dirac-pont környezetében $\omega = 0$ -nál, tehát amikor az (x, y) és (x_0, y_0) koordináta-rendszerek egybeesnek. A K' Dirac-pontra való áttérés megfelel egy π -vel való elforgatásnak ω -ban. Vegyük észre, hogy $u = 0$ -nál, tehát kizárólag v_3 véges értéke miatt, az egyébként egyetlen Dirac-pontban csúcsosodó hengersizmetrikus diszperziós felület az energia csökkenésével növekvő mértékben torzul, és hármas szimetriát mutat, ami megtöri az izotropiát. Erre a hármas szimetriájú torzulásra utal a je-

lenség angol elnevezése is: *trigonal warping*. Az egészen alacsony, $mv_3^2/2 \approx 1$ meV alatti energiákon, a Lifshitz-átmenetben négy nemösszefüggő szigetre szakadó diszperziós görbe végül a K pont mellett másik három, oldalsó Dirac-pontban csúcsosodik ki. Általában véve, a Fermi-felület, vagy jelen esetben görbe topológiájának megváltozását Lifshitz-átalakulásnak hívjuk. Az átalakulás végbemehet az elektronsűrűség megváltozásának, vagy egy külső paraméternek, például a mechanikai feszültségnek a hatására [98].³

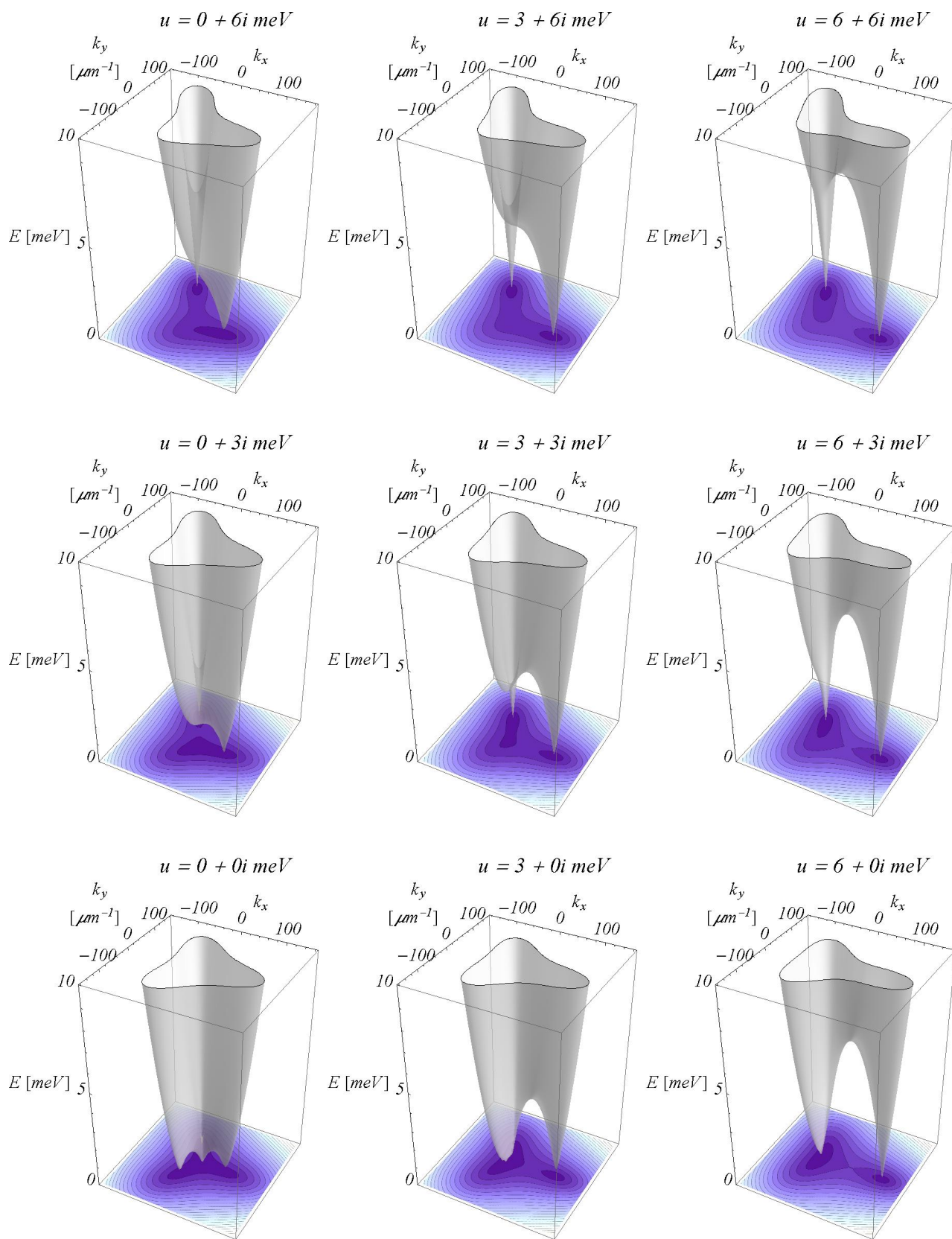


3.3. ábra. Energiakontúrok a K pont, és a további három Dirac-pont körül, meV-ban mérve. A későbbiekben, 80 és 10 meV-tal fogunk számolni az átmenet két oldalán, a kontúrok görbületváltása pedig először 42 meV-nál történik meg (lásd a 3.11. ábrát). 1 meV-nál következik be a Lifshitz-átalakulás, vagyis a diszperziós görbe topologikus transzformációja, mikor is több különálló kontúrra szakad szét.

Ábrán, $u = 3 + 3i$ meV-nál, a két Dirac-pont mellett még találunk egy lokális minimumot is. Általánosságban elmondható, hogy kettő, vagy négy Dirac-pontunk van, és az előbbi esetben még lehet egy lokális minimumunk. A Dirac-pontok számának alakulásáról az u komplex síkján, pontos analízis található Dávid és társai [100], illetve Mucha-Kruczyński és társai cikkében [98]. A fókuszpont helyzetének u -függése kapcsán a 3.14. ábránál térünk még vissza erre a kérdésre.

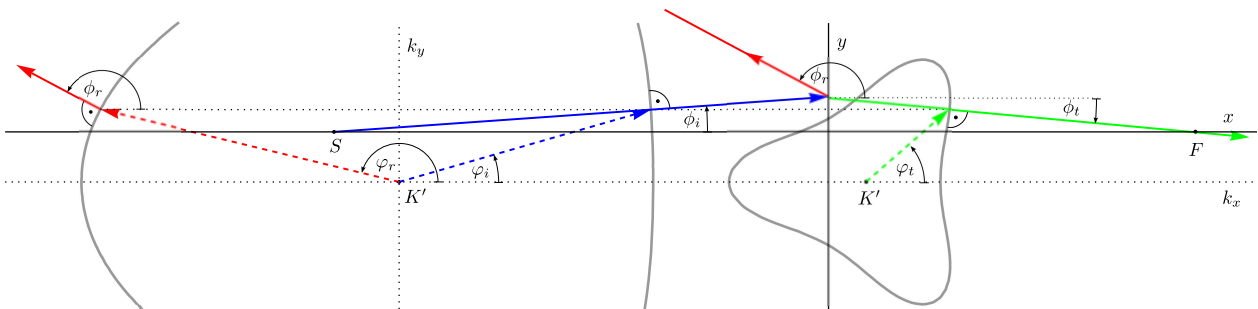
Mivel a topológia nem tud folytonosan megváltozni, a Lifshitz-átalakulás során anomáliák jelennek meg minden mérhető mennyiségben. Vegyük észre, hogy az új Dirac-csúcsok most a kvadratis kupolák helyett újra lineáris kúpok, amik zérus tömegű Dirac-részecskéket írnak le, hasonlóan az ERG-ben tapasztaltakhoz. Megfigyelhető továbbá a 3.4. ábrákon az is, hogy míg u valós része k_y -ra szimmetrikus módon, k_x mentén nyújtja meg az ekvienergiás görbéket, u képzetes része k_y -ban aszimmetrikus diszperzióhoz vezet. Ez a további deformáció is hatással van a Dirac-pontok számára. A bal alsó ábrától jobbra haladva látható, amint $u = 3$ meV-nál három Dirac-pont egyé olvad, és így végül a négy helyett $\text{Re}(u) > 3$ meV esetén már csak kettő marad. A bal alsó ábrától u képzetes tengelyén felfele indulva $u = 3i$ meV-nál pedig azt láthatjuk, amint a két Dirac-pont mellett, a másik kettőt felváltó lokális minimum tűnik el éppen, és $\text{Im}(u) > 3i$ meV esetén már szintén csak két Dirac-pontunk lesz. A középső

³ Mivel a Lifshitz-átmenethez tartozó elektronsűrűség mv_3 -tól függ, az e - e kölcsönhatás miatt az nem renormalizálódik, viszont az átmenet energiája, ami $mv_3^2/2$, 1 meV-ről 0.9 meV-ra csökken [99].

3.4. ábra. Diszperziós reláció KRG-ben, különböző u paraméterek mellett.

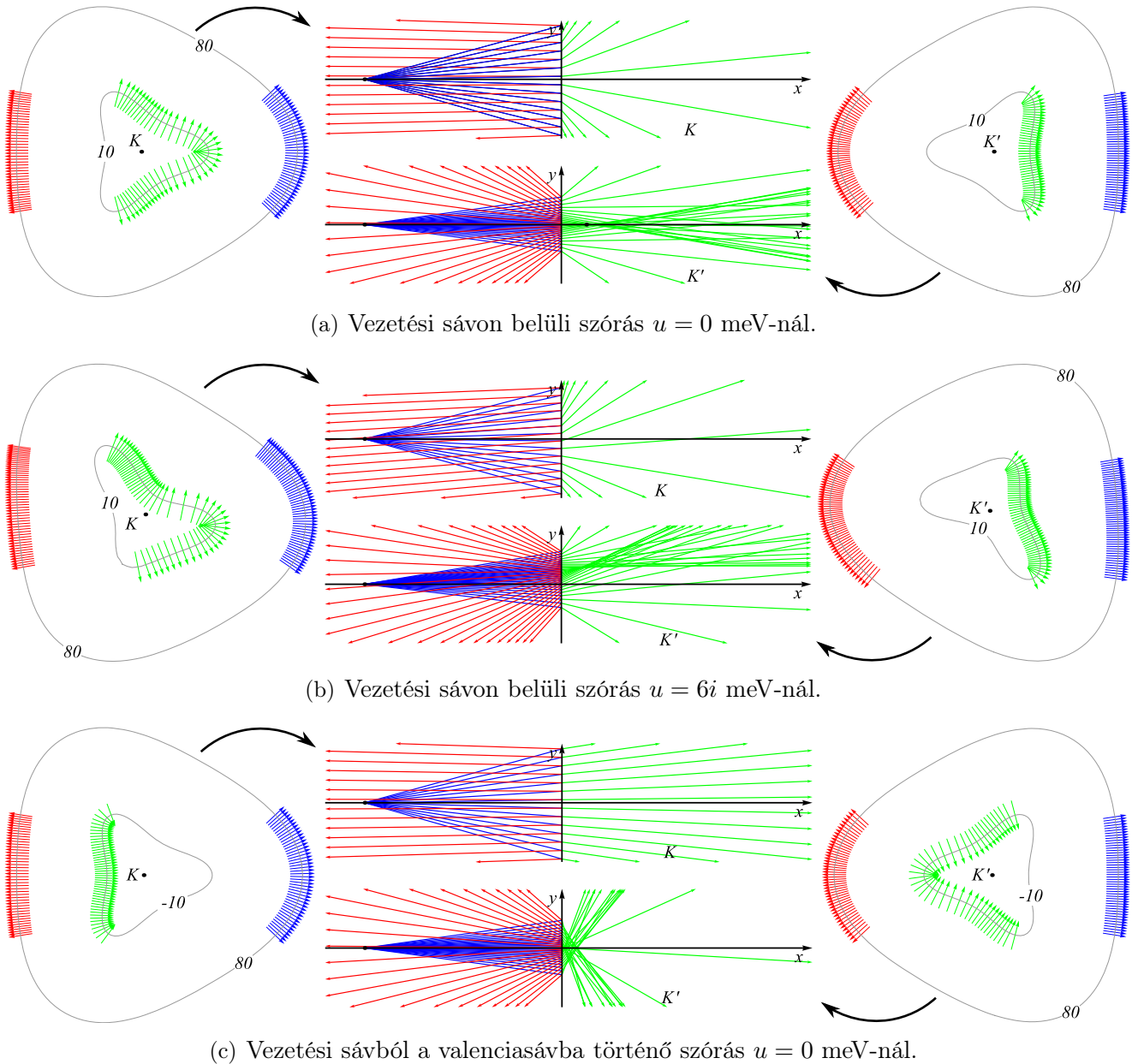
3.2. Átmeneti valószínűség potenciállépcsőn azonos sávba és sáv váltással

Tekintve a 3.2. ábrán bemutatott rendszert, és figyelembe véve a 3.4. ábra deformált diszperziós görbéit, felvázolhatjuk az elektronok klasszikus pályáját, és ezt, a 3.5. ábrán, a reciprok és a valós tér egymásra illesztésével tehetjük szemléletessé. Induljunk ki az S forrásban keltett, szaggatott kék nyíllal jelölt hullámszámvektorú elektronállapotból! Miután a csoportsebessége az $E(\mathbf{k})$ függvény gradiense, klasszikus pályája (folytonos kék nyíl) merőleges lesz az ekvienergiás kontúrra az adott k térbeli pontban, és általában nem lesz párhuzamos magával a \mathbf{k}_i vektorral! Az y tengelynél lévő átmenetnél, csak azonos k_y vetülettel rendelkező hullámszámvektorú állapotokba szóródhat, melyeket zöld (transzmittált) és piros (visszavert) szaggatott nyilak jelölnek a megfelelő kontúrokon. Nyilván mindkét esetben, a trajektória folytatása is merőleges lesz az energiakontúrokra. Vegyük észre, hogy a 3.5. ábra esetében, az eredetileg $\phi_i > 0$ pozitív beesési szöggel érkező elektron egy $\phi_t < 0$ negatív szög alatt folytatja útját, hacsak vissza nem verődik ϕ_r irányba, ami nem valószínű, tekintve a közel 1 valószínűséggel bekövetkező előreszórást (lásd később a 3.7. ábrákat)!



3.5. ábra. Diszperziós reláció a K' pont körül, és sugármenetek a valós térben: szaggatott nyilak jelölik a reciprok térbeli vektorokat, és folytonos vonalak az elektronok egy lehetséges klasszikus pályáját. A diszperziós görbék a (3.4) összefüggésnek tesznek eleget: a bal oldalon $E_i = 80$ meV (csak részben ábrázolva), a jobb oldalon $E_t = 10$ meV, és $\omega = 0$.

A 3.6. ábrákon van feltüntetve a valós és a reciprok térben az összes megvalósuló elektronátmenet három paraméterhalmaz mellett. A 3.6(a) ábrán, a K' pont környezete felel meg a 3.5. ábrán bemutatott esetnek. Látható, hogy az energiakontúrok görbületváltása miatt, a K' pont körül keltett, eredetileg divergáló állapotok az átmenet túloldalán összetartó állapotokba szóródnak, és így a sugármenetek egy jól meghatározott fókuszpontban találkoznak. Ezzel szemben, a K pont körüli állapotok erősen divergálnak az $x > 0$ félsíkon, így nem jelentős a járuléka a teljes megtalálási valószínűséghez. A 3.6(b) ábra az $u = 6i$ meV esetet mutatja. Az aszimmetrikusan deformálódott diszperzió miatt, a K' körüli állapotok által alkotott fókuszpont továbbra is jól felismerhető, de az első síknegyedbe csúszik fel.



3.6. ábra. A potenciállépcsőn szóródó elektronállapotok a k térben, és a megfelelő sugármenetek a valós térben. Kék nyilak jelölik a forrásban adott hullámszámmal keltett állapotok csoportsebességének irányát, illetve a középső ábrákon az ilyen állapotú elektronok klasszikus pályáját. A befutó állapotok az azonos k_y koordinátájú transzmittált (zöld), illetve reflektált (piros) állapotokba szóródhatnak. Csak azok az állapotok vannak itt feltüntetve, amelyekhez tartozik transzmittált állapot, vagyis nem szenvednek teljes visszaverődést ($T > 0$).

A 3.6(c) ábrán látható, hogy sávváltásnál, a K' körüli elektronok még erősebben fókuszálódnak, és többé-kevésbé két nyaláb mentén távolodnak az origótól. A probléma csupán az, hogy sávváltás esetén az áthaladási valószínűség nagyon alacsony, amint az leolvasható a később bemutatott 3.7. ábrákról.

Vizsgáljuk meg az elektronok átjutási valószínűségét az $x = 0$ -nál lévő potenciállépcsőn a

kezdeti hullámszámvektor φ_i irányszögének függvényében!⁴ Ehhez előbb ki kell számolnunk az x irányú áramoperátort a (3.1) Hamilton-operátorral megadott rendszerben:

$$j_x = i\frac{e}{\hbar} [\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0, x] = -\frac{e}{m} \begin{pmatrix} 0 & \exp(2i\omega)p_- \\ \exp(-2i\omega)p_+ & 0 \end{pmatrix} + ev_3 \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\omega) \\ \exp(i\omega) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Ennek az operátornak képezzük a várható értékét a (3.2) sajátállapotban:

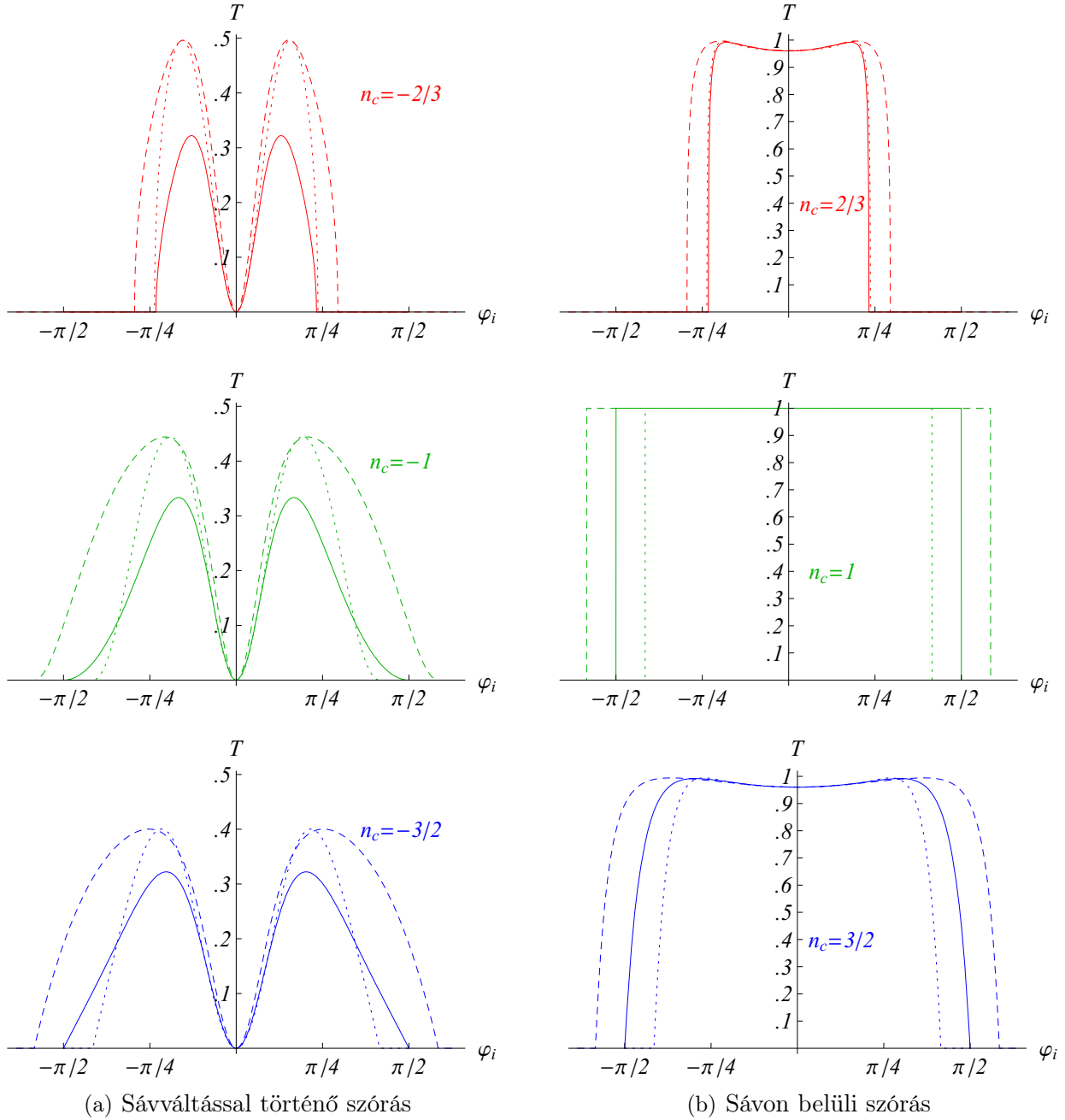
$$\langle \psi | j_x | \psi \rangle = \tau \frac{k^3 \cos(\varphi) - 3k^2 v_3 \cos(2\varphi - 3\omega) + 2k v_3^2 \cos(\varphi) - 2k \operatorname{Re}(ue^{i(\varphi-2\omega)}) + 2v_3 \operatorname{Re}(ue^{i\omega})}{|k^2 - 2e^{3i(\varphi-\omega)}v_3k - 2e^{2i(\varphi-\omega)}u|}, \quad (3.8)$$

ahol már éltünk a $\hbar = 1$, $m = 1$ és $e = 1$ behelyettesítésekkel is. Ha (3.8)-ban ψ helyére a beeső síkhullámot helyettesítjük, akkor megkapjuk az átmenethez szállított áramot, ha pedig a bejövő hullámhoz a határfeltételeknek megfelelően illesztett transzmittált elektronok hullámával számolunk, akkor megkapjuk az átmenettől, az $x \rightarrow +\infty$ -be szállított elektromos áramot. Ezek hányadosa adja meg a $T(\varphi_i)$ transzmissziós együtthatót. Az $R(\varphi_i)$ reflexiós együttható is hasonlóan számolható ki a visszavert elektronok hullámfüggvényével. Mivel az evanescens hullámok nem szállítanak áramot, $T(\varphi_i) + R(\varphi_i) = 1$ mindig teljesül.⁵

A 3.7. ábrákon látható a transzmissziós együttható irányfüggése: bal oldalon a sávváltással járó, warping nélkül mindig negatív törésmutatójú esetek görbéi láthatók, jobb oldalon pedig az azonos sávbéli átmenetekhez tartozó görbék vannak, melyekre v_3 elhanyagolása mellett mindig pozitív a törésmutató. Sávváltás esetén, a warping tag jelentősen megnöveli T maximális értékét, de a maximumhely alig módosul. Az (x_0, y_0) koordináta-rendszer (x, y) -hoz képesti $\omega = \pi$ -vel való elforgatása a Hamilton-operátorban megfelel ξ előjelváltásának, és egy báziscserével együtt, ez ekvivalens K -ról a K' Dirac-pontra való áttérésnek. A báziscserének viszont csak formális jelentősége van, ezért a szaggatott és a pontozott görbéket gondolatban hozzátársíthatjuk a K és K' pontokhoz. Látható, hogy elegendően nagy φ_i szögeknél, a K pont járuléka mindig a legnagyobb, és jelentős valószínűséggel transzmittálódnak elektronok $\varphi_i > \pi/2$ -nél is, ha $|n_c| > 1$. Ez nyilván annak tudható be, hogy a deformált diszperziós görbe normálisa még az átmenettől ellentétes irányba mutató hullámszámvektorok egy részénél is az átmenet felé mutat. Ez utóbbi állítás igaznak bizonyul $n_c > 0$ -ra is (lásd a (b) ábrákat). Nagyon fontos hangsúlyozni, hogy sávon belüli szóródás esetén T közel 1,

⁴ Az ERG-ben és KRG-ben warping nélkül kapott eredményeknek az összehasonlítása az 1.4. fejezetben található.

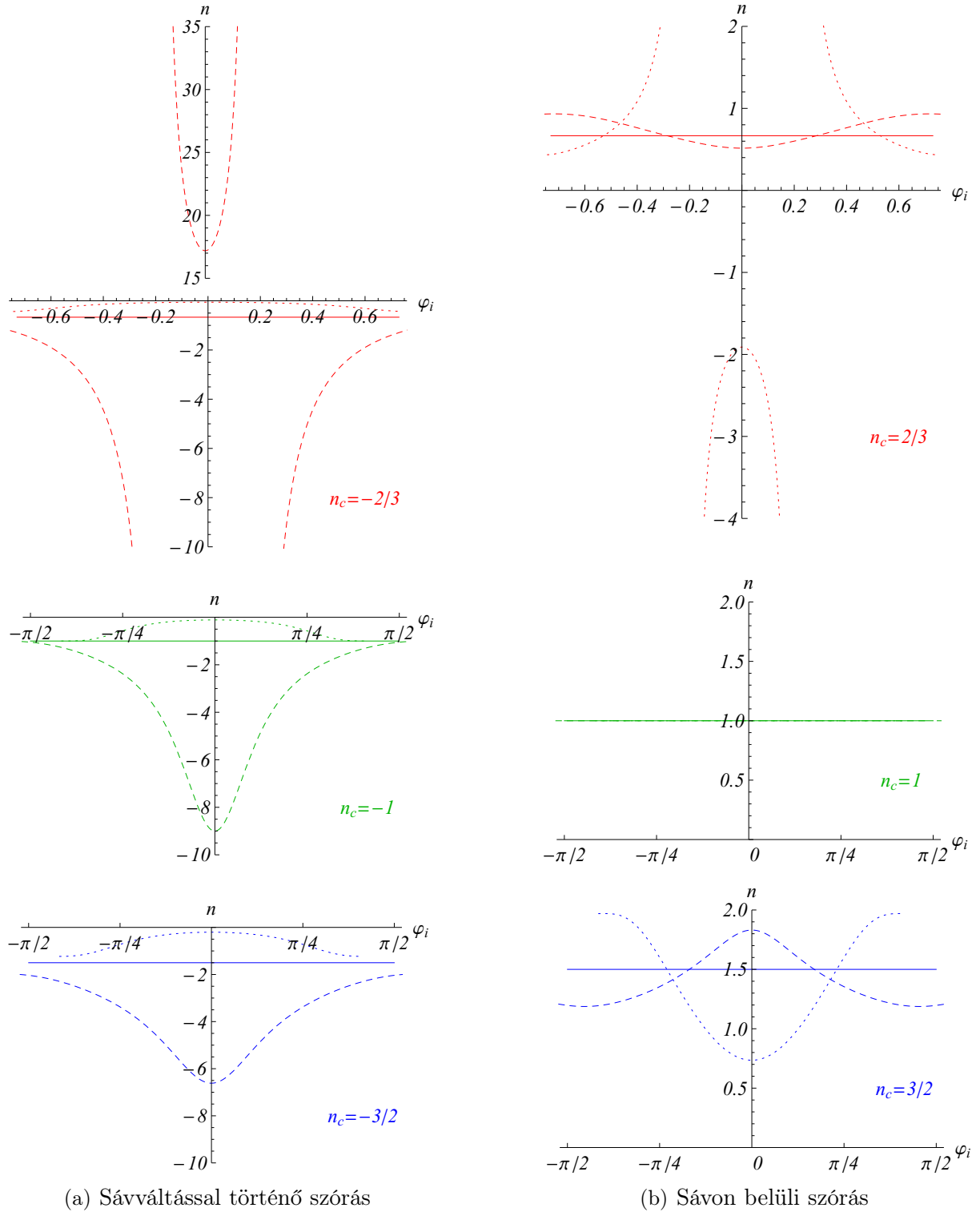
⁵ ω speciális értékeinél, és különösen az 1 meV körüli, és az alatti energiákon bonyolódik a helyzet, hiszen az erősen torzult, esetleg több részre szakadó diszperziós görbe, egy csillapodó hullám helyett, egy újabb propagáló megoldást eredményezhet, ami már szállít áramot! Ennek a tárgyalása elvi nehézséggel nem jár, de az újabb transzmissziós és/vagy reflexiós csatorna megnyílásával módosul az egyenlet: $T_1 + T_2 + R_1 + R_2 = 1$. Erre itt részleteiben nem térünk ki, és a későbbiekben végigszámolt példákban is mindig igaz lesz, hogy az átmenet mindkét oldalán, mindig csak egy, összefüggő energiakontúrunk van. Ez ugyanakkor mindig, minden irányban csak egy propagáló és egy csillapodó megoldást is jelent, csupán egyetlen kivétellel, a 3.15. ábra esetében, $\omega = 30^\circ$ -nál.



3.7. ábra. A transzmissziós együttható φ_i függvényében KRG-ben, $E_i = 80$ meV és különböző E_t energiák esetén. $E_t = -n_c^2 E_i$ $n_c < 0$ -nál (a), illetve $E_t = n_c^2 E_i$ $n_c > 0$ -nál (b), ahol n_c a szögfüggetlen törésmutató a v_3 -at elhanyagoló esetben: v.ö. a folytonos görbéket itt, és az 1.3. ábrákon! A szaggatott és a pontozott görbék v_3 figyelembevételével, azonos (E_i, E_t) értékpár mellett lettek kiszámolva, rendre a K , illetve a K' nemekvivalens völgyekből érkező elektronokra, mikor a törésmutató φ_i függvénye (lásd a 3.8. ábrákat). Mindegyik esetben $u = 0$ meV.

szinte minden φ_i -re, azonban sávvaltás esetén T maximális értéke is jóval kisebb egynél, az optikai tengelyhez közeli elektronokra pedig el is tűnik: $T(\varphi_i \rightarrow 0) \rightarrow 0!$ ⁶

⁶ Park és munkatársai rávilágítottak, hogy kapuzással megfelelően megválasztott energiárral, mégis lehetséges az átmenet merőleges beesés esetén is [101].



3.8. ábra. A törésmutató φ_i függvényében KRG-ben, $E_i = 80$ meV és különböző E_t energiák esetén. $E_t = -n_c^2 E_i$ $n_c < 0$ -nál (a), illetve $E_t = n_c^2 E_i$ $n_c > 0$ -nál (b), ahol n_c a szögfüggetlen törésmutató a v_3 -at elhanyagoló esetben (folytonos vonal). A szaggatott és a pontozott görbék v_3 figyelembevételével, azonos (E_i, E_t) értékpár mellett lettek kiszámolva, rendre a K , illetve a K' nemekvivalens völgyekből érkező elektronokra. Mindegyik esetben $u = 0$ meV.

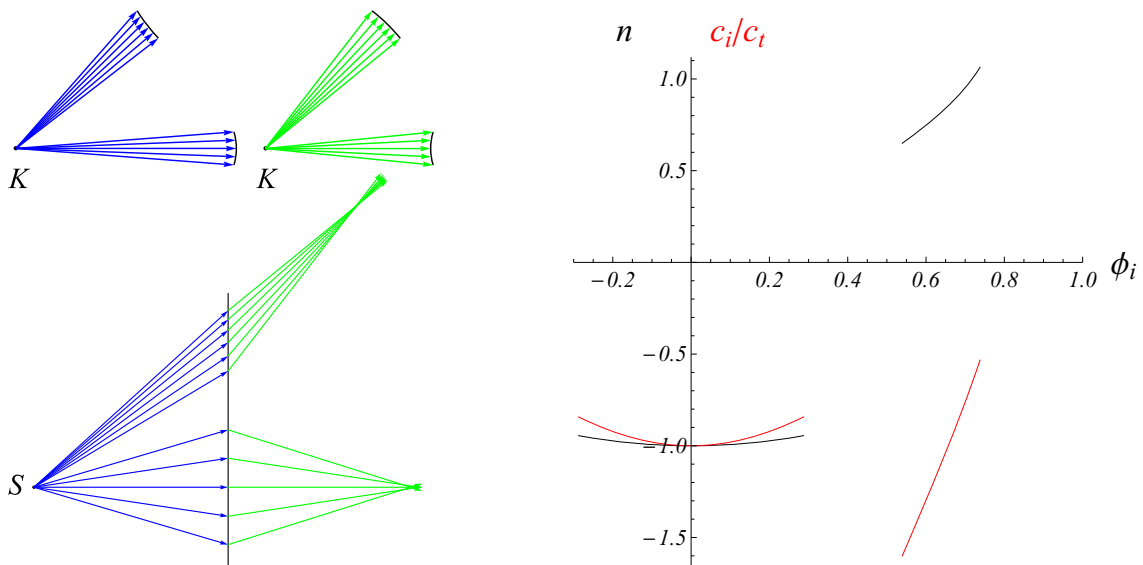
Ezidáig törésmutatóról csak izotrop rendszerek kapcsán beszéltünk. Az ebben a fejezetben vizsgált anizotrop rendszerben azonban újra kell gondolnunk a törésmutató fogalmát! A hagyományos definíció értelmében, ez a mennyiség a rendszerben terjedő hullám fázisában jelenik meg szorzófaktorként, amiből könnyen levezethető két eltérő optikai sűrűségű közeg relatív törésmutatója (lásd az 1.4. alfejezetet): $\sin(\varphi_i)/\sin(\varphi_t)$, ahol φ_i a beérkező, és φ_t az átmeneten megtört nyalábok irányszöge. Automatikusan felmerül a kérdés, hogy egy anizotrop közegben mit tekintünk egy nyaláb irányszögének, hiszen a hullámszámvektor és a csoportsebesség vektora ekkor általában már nem párhuzamosak. A hagyományos definíciót követő levezetés továbbra is a \mathbf{k} vektorok irányszögéhez vezet, azonban egy alternatív definíció gyakorlati szempontból egy sokkal hasznosabb fogalmat ad a (relatív) törésmutatóra, és ezért az egész fejezetben, törésmutató alatt az alábbi mennyiséget értjük: $n(\varphi_i) = \sin(\phi_i(\varphi_i))/\sin(\phi_t(\varphi_i))$. Itt ϕ_i és ϕ_t a beérkező, és az átmeneten megtört nyalábok csoportsebességének iránya, vagyis részecskeképben az elektronok trajektóriájának irányszöge, ami közvetlen geometriai jelentése miatt, egy sokkal használhatóbb fogalom, mint a φ_i és φ_t szögekkel definiált törésmutató. Igaz ugyan, hogy ez az n már semmit nem árul el az átmenet két oldalán terjedő elektronok relatív hullámszámáról. A fenti jelölésnek megfelelően tehát, a ϕ_i és ϕ_t szögeket φ_i függvényeinek tekintjük, amiktől n is függni fog. Természetesen az anizotropiát okozó v_3 eltűnésével, ϕ_i és ϕ_t folytonosan átmennek a φ_i és φ_t szögekbe, és így n -re is visszakapjuk a konvencionális definíciót.⁷

A 3.7. ábrákat azokkal az n_c törésmutatókkal címkéztük fel, amik az adott energiákon, $v_3 = 0$ esetén írnák le az elektronnyalábok törését, azok φ_i haladási irányától függetlenül. A fentiek értelmében azonban, az n törésmutató v_3 véges értéke miatt most függvénye φ_i -nek, és eltér n_c konstans értékétől. A 3.6. ábrákra tekintve ez könnyen belátható, ahol a törésmutató szemléletesen az egymásnak megfelelő kék és zöld nyilak y komponenseinek hányadosaként jelenik meg, ami nyilván különböző érték minden nyílparra. A 3.8. ábrákon látható a törésmutató szögfüggése, ahol a számolást ugyanazokon az (E_i, E_t) energiákon végeztük el, amiken a 3.7. grafikonok függvényeit értékeltük ki. A konstans egyenesek azt mutatják, hogy a gyűrő hatás (warping) nélküli n_c törésmutató független a beesési szögtől, amint azt már megtanulhattuk az 1.4. fejezetből. A szaggatott és pontozott görbék pedig a törésmutató különböző K pontokból érkező elektronokra vonatkozó eltérő szögfüggésére világít rá. Az $n_c = 1$ -es ábra teljes trivialisával szemben első pillantásra meglepő lehet, hogy $n = -1$ -nél viszont jelentősen megváltozik a kép: hiába szóródnak az elektronok a valenciasáv szimmetrikus energiakontúrjára, ha az ellentétes előjelű gradiens miatt a kontúr átellenes sarkában lévő állapotokat töltik be, ahol már teljesen más irányú a görbe normálisa! Mintha a 3.6(c) ábrán, a kék állapotok, ugyanazon a kontúron, a pirosakba szóródnának

⁷ Az 1.4. fejezetben tárgyalt negatív törésmutató esete csak annyiban hasonlít a mostani helyzethez, hogy bár lyukállapotban akkor párhuzamos volt a csoportsebesség és a fázissebesség vektora, de ellentétes irányítottágú. Ez viszont az energia k térbeli gradiensének ellentétes irányával, és közvetve az ellentétes helicitással magyarázható, teljesen függetlenül az egyébként izotrop energiakontúroktól.

(feltéve, hogy azok most a $+x$ irányba terjednek)! A 3.8. ábrákon, ahol n -nek szakadása van, ott a véges szög alatt érkező elektron egy, az x tengellyel párhuzamosan propagáló állapotba szóródik. Ilyenkor, a két szakadás között, a törésmutató előjele eltér a warping nélküliétől, ami az ekvienergiás kontúr negatív görbületére utal. A következő fejezetben, gondosan megválasztott paraméterek mellett, ezt a negatív görbületet fogjuk kihasználni annak demonstrálására, hogy sávon belüli szórás esetén is lehetséges az elektronnyalábok fókuszálása az átmenet forrással átellenes oldalán!

Vegyük észre azonban, hogy a sík potenciálugrás sávon belüli fókuszáló hatásáért tulajdonképpen nem a negatív törésmutató, hanem közvetlenül az energiakontúrok konkáv-konvex geometriája a felelős (lásd a 3.9. ábrát)! Megmutatható, hogy egy pontforrásból, a diszper-



(a) Hullámszámvektorok a k térben, és a megfelelő sugármenetek a valós térben, az átmenet két oldalán.

(b) Az n törésmutató (fekete), és a görbületek hányadosa (piros) a beesési szög függvényében, az (a) ábrán látható nyalábok által definiált intervallumokban.

3.9. ábra. A fókuszálásnak csak az optikai tengely környékén feltétele a negatív törésmutató, általános esetben a görbületek negatív hányadosa a meghatározó.

ziós kontúr egy szűk k térbeli tartományába szétsugárzott elektronok akkor, és csak akkor fókuszálódnak az átmenet túloldalán, ha a két diszperziós görbe egymásnak megfeleltethető, a beérkező és a megtört nyalábok által kijelölt pontjaiban, a görbületek előjele különbözik. Amennyiben ez igaz az optikai tengellyel közel párhuzamos, vagyis az átmenetre merőlegesen érkező elektronok hullámszámvektorára is, akkor az eltérő előjelű görbületek ugyanakkor egy negatív törésmutatót eredményeznek, ami tehát csak ekkor szükséges feltétel, de már nem az, ha eltávolodunk az optikai tengely irányától. Ha a diszperziós görbék, legalábbis lokálisan, szimmetrikusak az optikai tengely irányára (ami igaz lesz valós értékű u esetén az x tengely mentén érkező és transzmittált elektronokra), akkor az $n(\varphi_i) = \sin(\phi_i(\varphi_i)) / \sin(\phi_t(\varphi_i))$ de-

finíció a 0/0 eredményre vezet. Ebben a speciális esetben, a fenti hányadosnak a $\delta\varphi_i \rightarrow 0$ limeszben vett határértéke közvetlenül visszavezethető az energiakontúrok görbületének a hányadosára: $n(\varphi_i) = c_i(E_i, \varphi_i)/c_t(E_t, \varphi_i)$ [102], amit igazolni látszik a 3.9(b) ábra is $\phi_i \approx 0$ környékén. A kontúrok k térbeli görbülete meghatározható az alábbi képlet segítségével [103]:

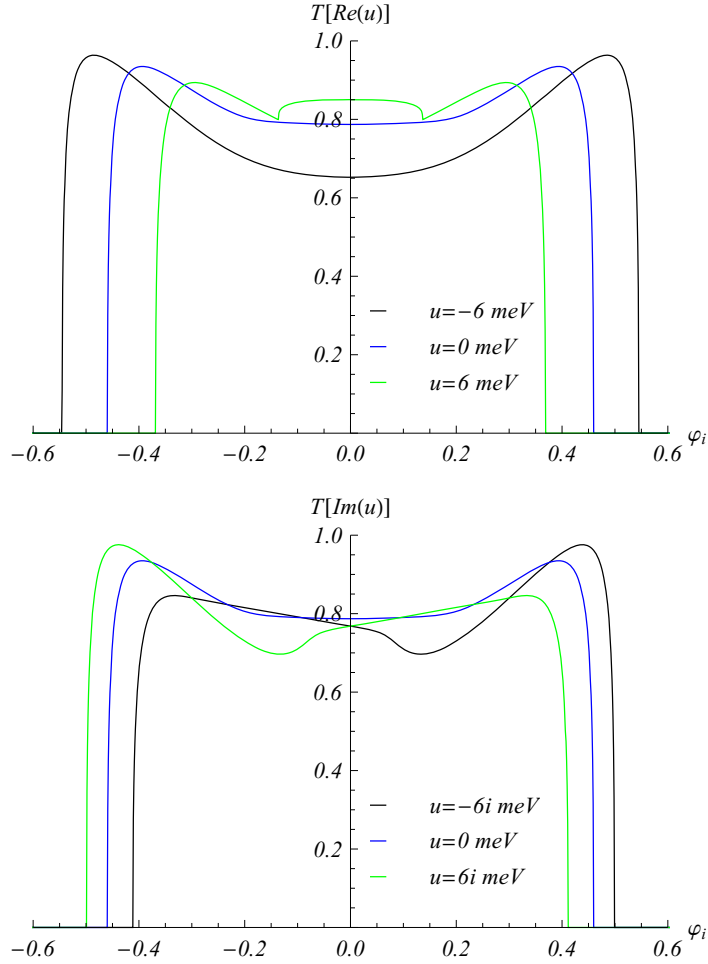
$$c(k_x, k_y) = (\partial_{k_x}^2 + \partial_{k_y}^2)^{-3/2} \det \begin{pmatrix} \partial_{k_x}^2 & \partial_{k_y, k_x} & \partial_{k_x} \\ \partial_{k_x, k_y} & \partial_{k_y}^2 & \partial_{k_y} \\ \partial_{k_x} & \partial_{k_y} & 0 \end{pmatrix} (E(k_x, k_y)).$$

Megjegyezzük, hogy amennyiben a (3.1) Hamilton-operátor diagonális elemeiben véges, de az általunk vizsgált jelenségek energiájánál jóval kisebb értékkel megjelenne a két grafénsík közötti potenciálkülönbség, a fenti gondolatmenetből változatlanul levezethető a fókuszálás. Bár a diszperziós görbék alakja módosulna kissé, az éppúgy bekövetkező görbületváltás miatt minőségileg ugyanazzal a jelenséggel volna dolgunk. Az elektrosztatikus aszimmetria csak a vele összemérhető energiáig módosítja jelentősen a diszperziós felületet, egy energiarést nyitva a Dirac-kúpok helyén [42].

Mielőtt áttérnénk az elektronnyalábok felösszegzésére, vizsgáljuk még meg az átjutási valószínűség u komplex paramétertől való függését is, amit a 3.10. ábrákon láthatunk! A legfontosabb észrevétel, hogy míg u valós részének variálása megőrzi a transzmisszió szimmetriáját φ_i -re nézve, a komplex rész véges értéke megbontja ezt, de oly módon, hogy mégis teljesül egy tágabb értelemben vett szimmetria: $T_u(\varphi_i) = T_{u^*}(-\varphi_i)$. Természetesen ez az aszimmetria felismerhető lesz a teljes megtalálási valószínűség mintázatában a 3.13. ábrákon, de már a 3.6(b) ábra sugármeneteiben is.

3.3. Az elektronsugarak szemiklasszikus felösszegzése

Az előző fejezetben megvizsgáltuk a Schrödinger-egyenlet síkhullám alakú megoldásainak terjedését és a potenciállépcsőn való átjutását. A 3.2. ábrán látható rendszerben kialakuló stacionárius állapot megtalálásához azonban hiányzik még egy lépés: célunk a pontforrásból szétsugárzó elektronok megtalálási valószínűségének leírása, vagyis az egyes nyalábok járulékának koherens felösszegzése. Az 1. fejezetben egy relatíve egyszerű problémával szembesültünk, hiszen a beérkező részecskék síkhulláma által az átmeneten belül keltett hullámfüggvény egy többnyire gyorsan konvergáló végtelen összeg formájában felírható volt. Ezúttal bonyolódik a feladat, mégpedig több okból: bár megtakarítjuk a hengerhullámokra való összegzést a síkátmenetnek köszönhetően, a közelébe helyezett pontforrás miatt integrálnunk kell a különböző irányokba induló nyalábokra. Ezt tovább komplikálja az anizotrop diszperziós reláció, ami miatt a k térben is integrálnunk kellene a 3.6. ábrák kontúrjai mentén. Mindez tehát két integrálást jelent: egyszer az S forrást, és az átmenet túloldalán lévő



3.10. ábra. A $T(\varphi_i)$ transzmissziós együttható u valós és képzetes részétől való függése a K' körüli elektronokra. Látható, hogy a valós rész variálása nem bontja meg a szimmetriát φ_i -ben, a képzetes rész véges értéke azonban igen. A kék görbe azonos a két ábrán, és $E_i = 80$ meV és $E_t = 10$ meV.

P pontot összekötő törtvonal közbülső T pontjaira az y tengelyen, és másszor, egy adott \vec{STP} sugármenet mellett, az összes \mathbf{k} hullámszámra a forrás E energiáján. Ez utóbbi integrált azonban a stacionárius fázisok módszerével közelíthetjük: érthető módon, adott \vec{STP} sugármenet mellett, azok a \mathbf{k} hullámszámok fogják erősíteni egymást az interferenciában, amelyeknél a diszperziós görbe normálisa, vagyis a csoportsebesség, az \vec{ST} irányba mutat. Vegyük észre, hogy itt tulajdonképpen újra egy szép alkalmazására találtunk ugyanannak a szemiklasszikus módszernek, amit a katasztrófoptikából vezettünk le a 2. fejezetben! A különbség csupán az, hogy most (2.18) exponenciálisában szereplő fázisfaktorban a törtvonal helyvektorainak, és a fenti feltételnek eleget tevő \mathbf{k} vektoroknak a skaláris szorzata fog szerepelni:

$$\exp\left(i\left(\chi_0 + \vec{ST}\mathbf{k}_{\phi_i|\vec{ST}} + \vec{TP}\mathbf{k}_{\phi_t}\right)\right), \quad (3.9)$$

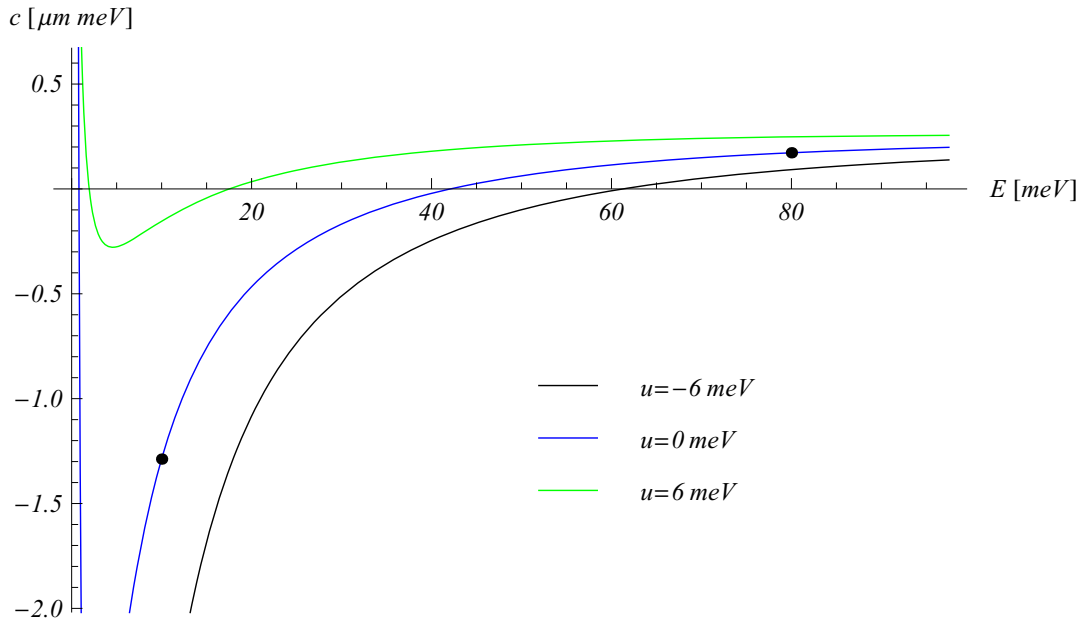
ahol χ_0 egy kezdeti fázis. Itt a $\mathbf{k}_{\phi_i|\vec{ST}}$ hullámszámvektort tehát a csoportsebesség irányára kirótt feltétel határozza meg, \mathbf{k}_{ϕ_t} -t pedig a bejövő nyaláb ismeretében, egyszerűen a határ-

feltételek. Ugyanez jelenik meg a 3.5. ábrán, a $(\varphi_i - \phi_i)$ szöget bezáró vektorokkal a bal oldalon, és a $(\varphi_t - \phi_t)$ szöget bezáró vektorokkal a jobb oldalon. Izotrop esetben, az optikai úthosszban szereplő vektorok természetesen párhuzamosak, ezért többnyire csak a hosszuk szerepel a képletekben.

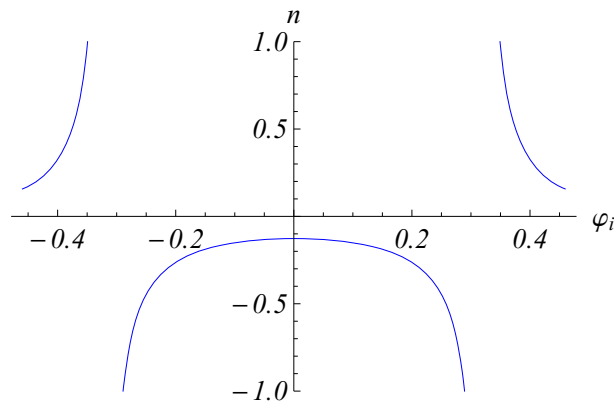
Általánosan, az energiakontúr alakjának függvényében, egynél több $\mathbf{k}_{\phi_i \parallel \vec{ST}}$ és hozzá tartozó \mathbf{k}_{ϕ_t} vektorpár is létezhet, ilyenkor ezeket külön sugárként kell felösszegezni, hiszen más fázisfaktor, és más amplitúdó is tartozik hozzájuk. Előfordulhat persze az is, hogy egy nyaláb teljes visszaverődést szenved, ha a beérkező elektron hullámszámának y komponense abszolút értékben nagyobb, mint a jobb oldali diszperziós kontúr megfelelő irányú kiterjedése, ilyenkor ezek az elektronok csak a bal oldalon adnak járulékot a hullámfüggvényhez. Egy másik speciális esetben, az esetlegesen több részre szakadó diszperziós görbe egy második transzmittált, és/vagy egy második visszavert megoldást eredményez a csillapodó hullámok helyett. Miután ezek is szállítanak áramot, figyelembe kell őket venni a teljes hullámfüggvény koherens felösszegzésénél.

A χ_0 kezdeti fázisnak mindezidáig nem volt jelentősége, hiszen egyetlen síkhullám írta le a bejövő részecskéket, aminek a fázisa egy nem mérhető, irreleváns mennyiség. Most azonban egymással interferáló nyalábokról beszélünk, amelyek relatív fázisa megjelenik a mérhető mennyiségekben! χ_0 megválasztása látszólag önkényes, azonban mint látni fogjuk az A függelékben, a rendszer szimmetriájával bíró sajátfüggvények automatikusan megoldják a relatív fázis kérdését, és χ_0 kiesik az egyenletekből.

Mostmár minden rendelkezésünkre áll ahhoz, hogy feltételezve egy φ_0 -ban homogén intenzitással sugárzó forrást, (2.18)-nak megfelelően felösszegezzük a 3.6. ábrák elektronnyalábjainak $a(\phi_i) \exp\left(i\left(\vec{ST}\mathbf{k}_{\phi_i \parallel \vec{ST}} + \vec{TP}\mathbf{k}_{\phi_t}\right)\right)$ járulékat a 3.2. elrendezés átmenetének jobb oldalára. Az $a(\phi_i)$ spinoramplitúdókat az (1.11) határfeltételek szabják meg, azzal a formális különbséggel, hogy most egy y tengelyre eső potenciállépcsőn kell illeszteni a hullámfüggvényt, és az x irányú deriváltját. A befutó hullám mellett, egy-egy kifutó és egy-egy csillapodó hullámot, vagy a csillapodó hullámok helyett, esetleg második haladó hullámokat kell figyelembe venni. Az alkalmas energiák megtalálásához, tekintsük a 3.11. ábrát! Ahhoz, hogy sávon belüli szórásnál is tapasztaljuk a sík potenciállépcső fókuszáló hatását, szükséges, hogy ellenkező előjelű legyen a görbülete az energiakontúroknak az átmenet két oldalán. Ez a helyzet áll elő például a 3.11. ábrán fekete pontokkal jelölt energiákon, ami megfelel a 3.6(a) ábrán, a K' pontnál, az x tengely mentén haladó elektronoknak. Szükséges továbbá az is, hogy a beesési szög 0 körüli viszonylag széles tartományában minél lassabban változzon az n törésmutató, hogy minél több elektron térüljön el a fókuszpont minél kisebb környezetének irányába. A 3.12. ábrán látható az imént kiválasztott paraméterek melletti $n(\varphi_i)$ függvény, melyből kiderül, hogy $n \approx -0.13$ környékén van φ_i egy elegendően széles intervallumában. Ezen kritériumok alapján, egy lehetséges választás az $E_i = 80$ meV és $U = 70$ meV, miszerint a transzmittált elektronok energiája $E_t = 10$ meV lesz.



3.11. ábra. Az energiakontúr görbülete $\varphi_0 = \pi$ -nél, különböző u paraméterek mellett. A fekete pontok $E = 10$ meV-nál és 80 meV-nál vannak, a megfelelő $n(\varphi_i)$ függvény pedig a 3.12. ábrán. A görbület 42 meV-nál vált előjelet (lásd a 3.3. ábrát is).



3.12. ábra. Törésmutató φ_i függvényében $E_i = 80$ meV és $E_t = 10$ meV mellett, a K' pont körül, $u = 0$ meV-nál.

Mivel a K és K' pontokban blokkdiagonális az ezeket expliciten tartalmazó Hamilton-operátor, az ezen impulzustérbeli pontok környezetéből érkező elektronok járulékát praktikusán a megtalálási valószínűségben kell összegezni, és nem a hullámfüggvényben. Ezeken az energiákon ugyanakkor általánosan igaz, hogy ha ω $\pi/3$ -nak többszöröse, akkor, legalábbis az x tengelyhez közel, csak az egyik K pont járuléka lesz jelentős, a másiké pedig elhanyagolható. Ez sejthető a 3.6. ábrákra pillantva is, ahol a K pont erősen széttartó elektronjai elhanyagolható mértékben árnyalják csak a képet.

3.3.1. Az eredmények diszkussziója

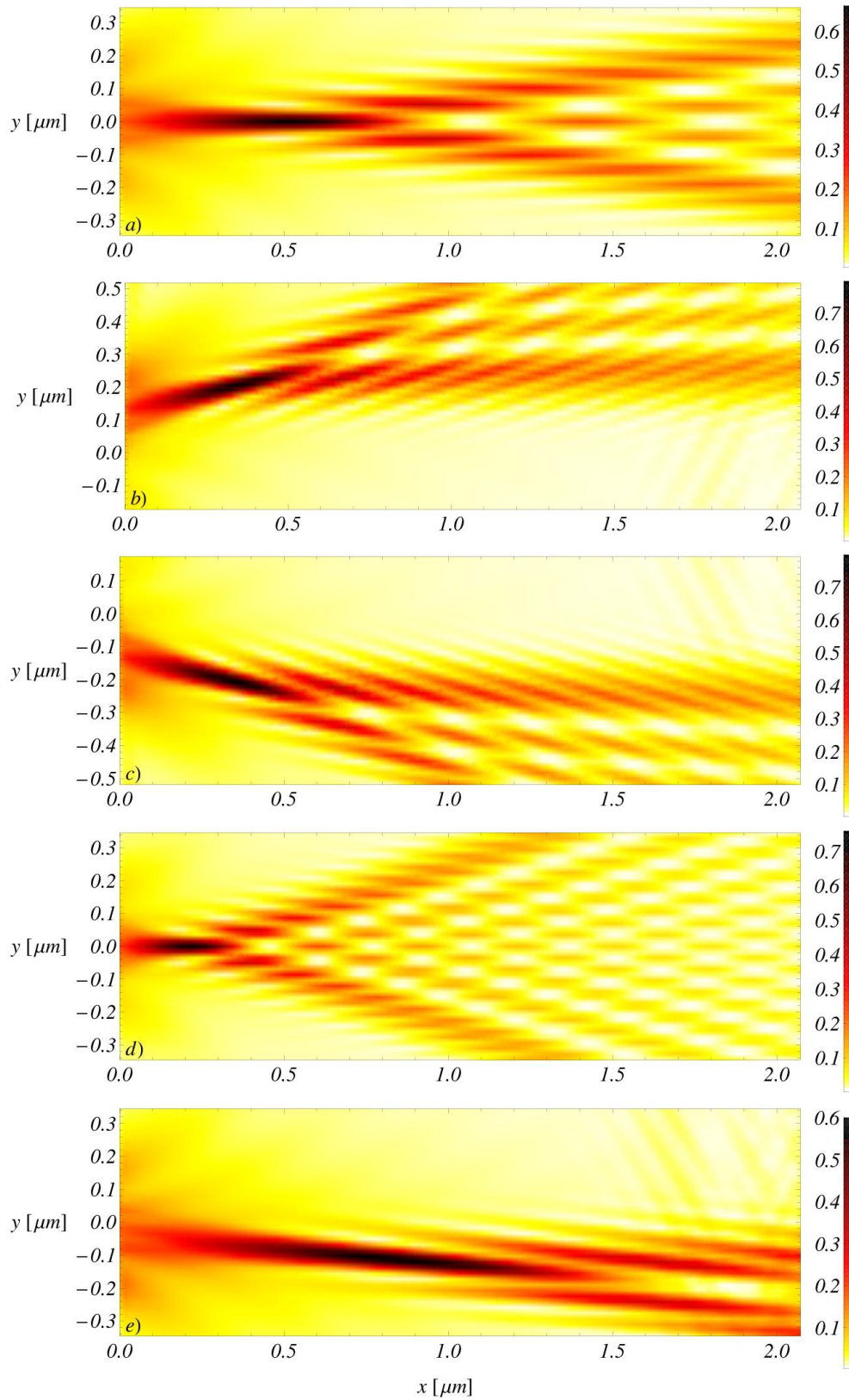
A fentiek szerint megállapított energiákon, mindkét K pont járulékát összegezve, a megtalálási valószínűségeket a 3.13. ábrákon szemléltettük. A 3.13(a) ábrán látható az $u = 0$ meV mellett számolt hullámkép, ami a 3.6(a) ábrán vázolt esetnek a szemiklasszikus kiértékelése. A 3.13(b) és (c) ábrákon láthatjuk, miként módosítja u képzetes része a mintázatot: a rojtok topológiája nem változik, sőt, úgy tűnik, mintha a mintázat egy többé-kevésbé merev objektumként forogna el egy képzeletbeli tengely körül. Az u valós részének x irányban nyújtó és összenyomó hatása van, lásd a (d) és (e) ábrákat! A két hatás szuperponálódik egy általános u esetén, ami az (e) ábrán követhető nyomon.

Érdeemes megvizsgálni a fókuszpont koordinátáinak u -függését. Ezzel kapcsolatban felmerül a kérdés, létezik-e fókuszpont minden esetben, illetve mit értünk egyáltalán fókuszpont alatt? Szigorú matematikai definíció helyett, itt egy konstruktív meghatározását adjuk a fókuszpontnak (lásd a 3.9. ábrát): [1] adott u mellett, tekintsük az n törésmutató ϕ_i -függését azokra a sugarakra, amelyek az y tengelyt $\text{Im}(u)$ előjelének megfelelő szárán érik el; [2] ha ezen ϕ_i intervallumon belül létezik egy olyan monoton növekvő szakasz $n(\phi_i)$ -ben, amin belül valamely ϕ_i^* pontban $n(\phi_i^*) = 1$, akkor beszélünk fókuszpontról: ebben a pontban ugyanis a sugár egyenesen halad át az átmeneten, míg a $\phi_i < \phi_i^*$ alatt érkező sugarak *felfelé*, a $\phi_i > \phi_i^*$ alatt érkező sugarak pedig *lefelé törnek meg*, vagyis az egyenesen haladó sugarat közrefogva konvergálnak; [3] két ilyen, egymáshoz elegendően közeli sugarat kiválasztva, meghatározzuk azok metszéspontját, amit az elkent fókusz átmenethez közelebbi csúcsaként azonosítunk. Ezen pontok helyzetének az u komplex paramétertől való függését szemléltetjük a 3.14. ábrán.

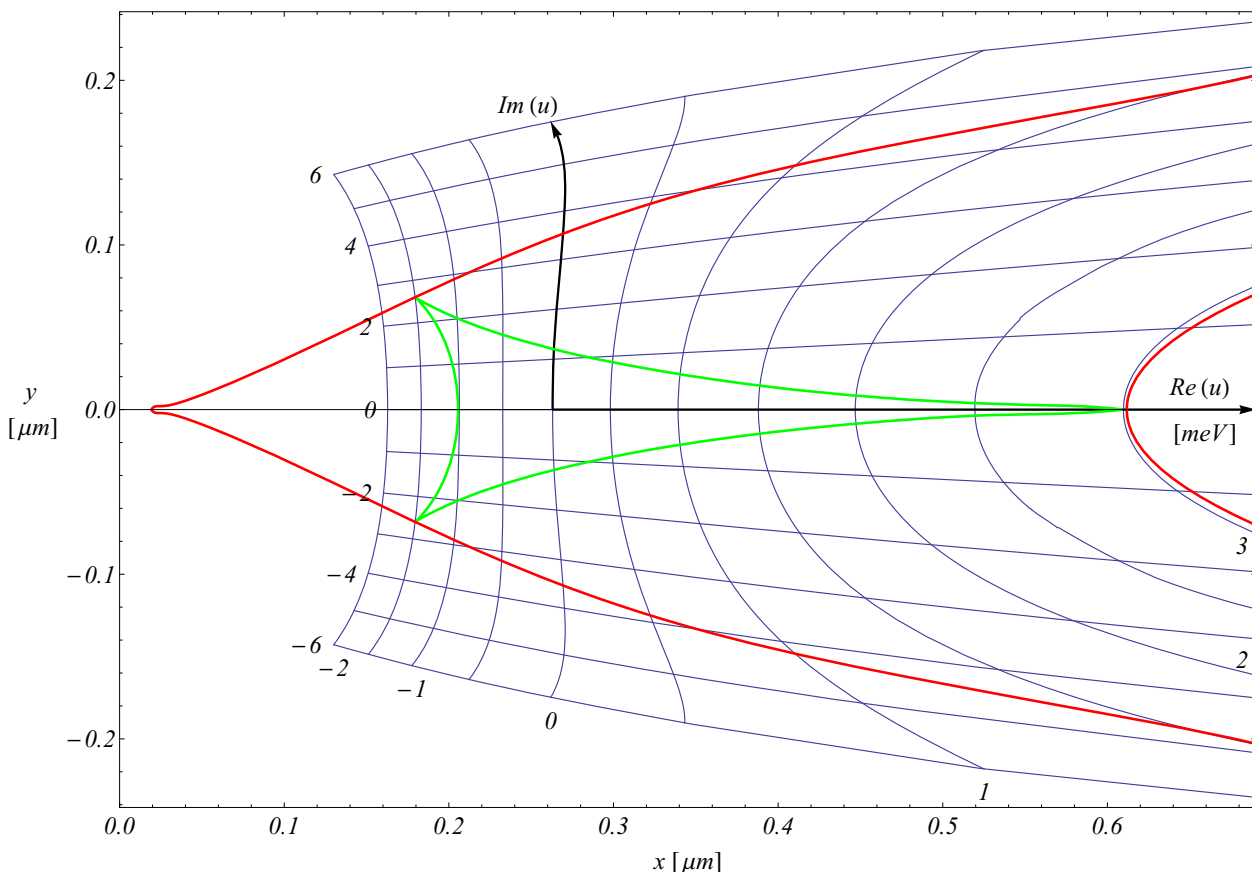
A grafénrács mechanikai torzulása és az u paraméter között az alábbi összefüggés teremt kapcsolatot [98]:

$$u = c(\delta - \delta') \exp(-2i\theta), \quad (3.10)$$

ahol c a grafénrács fizikai paramétereit tartalmazó valós konstans, $\delta > \delta'$ az $\frac{1}{2}(\partial_i d_j + \partial_j d_i)$ deformációs tenzor főtengeleyértékei, és θ a főtengeleyeknek az (x_0, y_0) tengelyekkel bezárt szöge. A deformációs tenzorban i és j az (x_0, y_0) koordinátaindexek, és (d_{x_0}, d_{y_0}) az elmozdulásvektor az atomok külső erőktől mentes egyensúlyi helyzetétől. A (3.10) kifejezésben eltekintettünk a két grafénsík egymáshoz képesti elcsúszásától. Látható, hogy ekkor u fázisa -2θ -val lesz egyenlő, ami egy közvetlen kapcsolatot jelent a külső feszültség geometriájával. Vegyük észre, hogy ha a deformációs tenzor főtengeleyei illeszkednek a grafénrácshoz rögzített (x_0, y_0) tengelyekre, vagyis $\theta = \pi/2$ -nek a többszöröse, akkor u valós, különben komplex, és tisztán képzetes, ha $\text{mod}(\theta, \pi/2) = \pi/4$. Érdekes módon, $\delta = \delta'$ esetén u eltűnik. Ez az izotrop erőhatás tulajdonképpen egy hidrosztatikus deformáció, ami csak az elektronok m effektív tömegét, v -t és v_3 -at módosítja, de u -t nem. Mucha-Kruczyński és kollégái becslései szerint, 1%-nyi deformáció az m , v és v_3 mennyiségekben csupán néhány százalékos



3.13. ábra. Megtalálási valószínűség a jobb oldalon, $E_i = 80$ meV és $E_t = 10$ meV mellett: (a) $u = 0$ meV (v.ö. a 3.6(a) ábrával), (b) $u = 6i$ meV (v.ö. a 3.6(b) ábrával), (c) $u = -6i$ meV, (d) $u = -4$ meV és (e) $u = 2 - 2i$ meV. A forrás $2.07\mu\text{m}$ távolságra van az átmenettől, az x tengelyen.



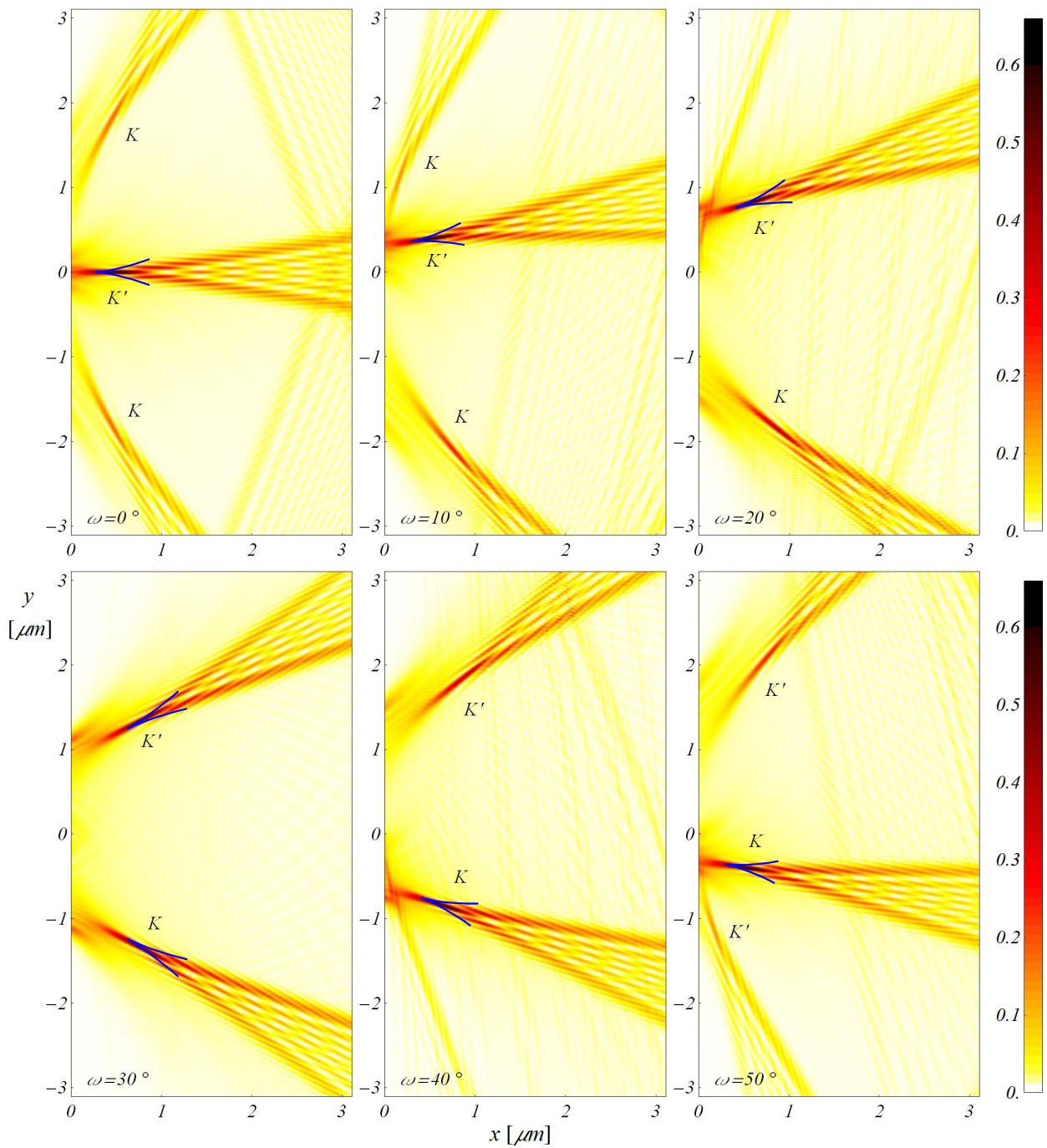
3.14. ábra. A K' völgybeli elektronok fókuszának (x, y) koordinátáinak az u komplex paramétertől való függése $E_i = 80$ meV, $E_t = 10$ meV és $\omega = 0$ esetén. Ebben a $\mathbb{C} \Rightarrow \mathbb{R}^2$ leképezésben, u komplex síkja vetül rá a fókuszpont csúcsának valós síkjára a szövegben leírt megfeleltetés szerint. (V.ö. a 3.10. és a 3.13. ábrákkal!) A kék görbesereg adott u melletti fókuszpontok diszkrét rácsára való illesztés eredménye. A vastag, zöld görbe által határolt tartományban négy Dirac-pont van, a piros és a zöld görbék által közrefogott tartományban két Dirac-pont és egy lokális minimum, az ezeken kívül eső tartományban pedig két Dirac-pont van lokális minimum nélkül. A görbék felrajzolásához a komplex u sík e három tartományra történő felosztásából indultunk ki, ami megtalálható az alábbi referenciákban: [98] és [100].

a változást eredményez [104], ami önmagában véve elhanyagolható mértékben módosítja a diffrakciós képet, viszont ugyanez a deformáció $|u|$ -ben kb. 6 meV-nak felel meg [98]. A 3.14. ábra szerint, $|u| \approx 6$ meV már nagy mértékben elcsúsztatja a fókuszot, tehát a rendszer igen érzékeny a mechanikai behatásokra. Ugyanakkor azt is elmondhatjuk, hogy az általunk vizsgált tartományban, a mintázat topologikus értelemben nem változik meg, csupán képlékeny módon deformálódik. Eszerint, a (3.10) képlet és a 3.14. ábra segítségével, adott külső feszültség alkalmazása esetén, meg tudjuk jósolni, hogy hol lesz a fókusz. Persze ez visszafelé is működik: ha egy mérés segítségével meghatározzuk a fókusz helyét, következtethetünk a grafénrácsra ható erőkre, ami egy lehetséges alkalmazási területe lehet a jelenségnek! Ezek az eredmények továbbá azért is fontosak, mert u mérésén keresztül, következtetni tudunk a sáv-

szerkezet alacsony energiájú topológiájára, például a Dirac-pontok számára is, ami egyébként egy kísérletileg nehezen hozzáférhető mennyiség [105].

Tekintsük a 3.15. ábrákat, melyeken a megtalálási valószínűség látható a potenciállépcső és a grafénrács koordináta-rendszereinek relatív elforgatásának, vagyis ω -nak függvényében! Jelen esetben csupán az $u = 0$ esetre szorítkozva, könnyen belátható, hogy a mintázatnak 60 fokként periodikusnak kell lennie, hiszen ekkor a két K pont felcserélésével ugyanazokhoz a diszperziós görbékhez jutunk. Ez a periodicitás nyomon követhető a 3.15. ábrákon is, ahol a lokális maximumok *fürtje* együtt forog a k térbeli ekvienergiás görbékkel. 30 foknál, a két K ponthoz tartozó energiakontúr a k_x tengelyre szimmetrikus helyzetbe kerül, aminek megfelel a megtalálási valószínűség mintázata is, két, x tengelyre szimmetrikus elhelyezkedésű, azonos intenzitású fürttel. A 30 foktól eltávolodva egyiknek, vagy a másiknak nő meg az intenzitása aszerint, hogy melyik van közelebb az x tengelyhez. Ezzel együtt, a nagyobb intenzitású fürt másik oldalán is megjelenik egy harmadik fürt még kisebb intenzitással, ami azonban 0 foknál szimmetrikus helyzetbe kerül a másik oldalfürttel. E kettő megfelel a 3.6(a) ábrán, a K pont körüli 10 meV-os kontúron, a jobbra fel, és jobbra le mutató nyilak két csoportjának. Az itt szembeűnően megmutatózó, K pontokra nézve szelektív elektronszórás szintén egy sokak által vizsgált, érdekes jelenség [106–109]. Ugyanakkor, az általunk javasolt *K-szelektív* eljárás egy gyakorlati szempontból némileg relevánsabb energiatartományban van, mint az eV-os nagyságrendű potenciálugrással dolgozó egyéb javaslatok [106–108].

A 3.15. ábrákon kézzel jelölt *nyírt csúcskausztrikák* (angolul *sheared cusp caustic*) egyenletét Hassler és munkatársai is meghatározták topologikus szigetelők felületén tapasztalható hasonló fókuszáló hatásról szóló írásukban [102]. Amint látható, a szemiklasszikus görbe a csúcs közelében pontosan illeszkedik az eddigi eredményeinkre. Azonban, miután a csúcskausztrikák egyenlete a csúcstól való távolság egy sorfejtéséből származik (a levezetést lásd a B függelékben), csak egy véges konvergenciasugáron belül lehet pontos, és emiatt nem illeszkednek a kék görbék az ábrázolt tartományon kívül. Természetesen, általában sem lehet elvárás a két teljesen független kausztika átlapolódása, hiszen amíg n szögfüggésének első néhány hatványa nem írja le pontosan a törésmutatót teljes szögtartományban, addig a csúcskausztrika szárjai és az áthajláskausztikák sem fognak átfedni, mivel ezeket teljesen más szög alatt megtört nyalábok alkotják. Ettől függetlenül, továbbra is fennáll a strukturális stabilitás, vagyis egy adott fürt topológiája, a 3.15. ábrákon végigkövethető módon, a kialakulásától az elhalványodásáig, invariáns egy $\Delta\omega \gtrsim 120^\circ$ -os forgatásra.



3.15. ábra. Megtalálási valószínűség a jobb oldalon, $E_i = 80$ meV, $E_t = 10$ meV, $u = 0$ meV és ω különböző értékei mellett. A mintázat ω -ban 60 fokenként periodikus. A csúcskausztkákat és a mögöttük felismerhető fürtszerű mintázatot mindig csupán az egyik, vagy a K , vagy a K' völgyből származó elektronok alkotják. A ferde csúcskausztkákat burkoló kék görbékre a katasztrófaoptika alapján egyenlet vezethető le (lásd a B függelékben). A forrás $2.07\mu\text{m}$ távolságra van az átmenettől, az x tengelyen. Az összes ábrához ugyanaz a színskála tartozik.

Rövid összefoglalásképpen, vegyük sorra az ebben a fejezetben ismertetett elméleti eredményeket és ezek kísérleti jelentőségét! A 3.2. ábrán felvázolt rendszerben, alacsony energiájú, K pont-szelektív elektronszórást tanulmányoztunk egy sík potenciállépcsőn keresztül. A (3.1) Hamilton-operátorban az új, v_3 -mal arányos tag háromszögletűvé gyűrte a diszperziós görbét (3.3. ábra), miáltal anizotroppá tette a közeget, egyúttal megkülönböztette a Brillouin-zóna K és K' pontjait. Az elektronok ballisztikus terjedését szemiklasszikus eszközökkel, az elektronoptika keretein belül vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy a részecskenyalábok terjedése a potenciálugráson keresztül leírható a Snellius–Descartes-törvénnyel, és egy esetenként negatív törésmutatóval (3.12. ábra). A törésmutató negatív értéke most azonban nem az 1. fejezetben megismert részecske- és lyukállapotok eltérő helicitásának a következménye, hanem a meggyűrt diszperziós kontúrok görbületének az előjelváltása miatt jelenik meg (3.9. és 3.11. ábrák). Ezt azért fontos hangsúlyozni, mert ezáltal lehetővé válik az elektronok fókuszálása azonos sávon belül, egy sík potenciállépcsővel (3.5. ábra), amin keresztül kétrétegű grafénban is nagyságrendileg egységnyi valószínűséggel tudnak áthaladni az elektronok egy széles szögtartományban a merőleges beesés körül (3.7. ábra). A 2. fejezetben ismertetett katasztrófaoptika szemiklasszikus módszerének egy szép alkalmazására nyílt mód a pontforrásból szétsugárzó, és az átmeneten megtört elektronnalábok járulékainak felösszegzése kapcsán (3.6. ábra). Fontos eredménynek számít a külső mechanikai feszültségnek a fókuszáló jelenségre kifejtett hatásának leírása (3.10. és 3.13. ábrák), a (3.1) Hamilton-operátorban megjelenő, komplex u paraméteren keresztül (3.1. ábra). Miáltal a potenciállépcső egy kapuelektrodával, a forrás egy pontszerű kontaktussal, az elektronok megtalálási valószínűségének leképezése pedig egy STM-típusú kísérletileg is megoldható, nem mutatkozik akadály a jelenség egy olyan alkalmazásának, melyben a külső erők okozta deformációra a fókuszpont elmozdulásának mértékéből következtetünk (3.14. ábra)! A kétrétegű grafén alacsony energiájú sáv szerkezetének topológiája (3.4. ábra), szimmetriája, illetve a Dirac-pontok száma elvi jelentőségű kérdés, amire szintén következtetni lehet a fókuszpont pozíciójából (3.14. ábra)! Megvizsgáltuk továbbá a potenciálugrás és a grafénrács a relatív elforgatásának hatását is, és a klasszikus intuíciónak megfelelően, a diffrakciós rojtok ráccsal együtt forgó sorozatában, felismertük a K - és K' -elektronok egymást felváltva követő fókuszpontjait (3.15. ábra). A katasztrófaoptika elveivel összhangban, megállapítást nyert a diffrakciós kép strukturális stabilitása is, a külső paraméterek egy széles skáláján.

Függelék

A. A hullámfüggvény szimmetriái KRG-ben

A 3.3. alfejezetben felmerült a kérdés, hogy mi alapján választhatjuk meg az elektronok (3.9) kifejezéssel definiált χ_0 relatív fázisát, amire a 3.6. ábrákon látható, különböző trajektóriák koherens felösszegzésekor van szükségünk. Ebben a függelékben, az elektronok hullámfüggvényeit igyekszünk hozzáigazítani a KRG rendszer szimmetriáihoz, miáltal a χ_0 relatív fáziskorrekciót voltaképpen beletranszformáljuk az elektronok sajátállapotaiba.

Amennyiben az átmenet elforgatásának ω szöge π -nek a többszöröse, a grafénrácsnak szimmetriája az x tengely körüli 180 fokos forgatás, ami ekkor párhuzamos x_0 -val. E transzformáció praktikusán a p_y operátor előjelváltásának felel meg a (3.1) Hamilton-operátorban, ami, egyelőre u képzetes részétől eltekintve, $\mathcal{H}_{\text{KRG}}^0$ transzponálásával egyenértékű. A transzponált operátornak azonos sajátértékkel sajátállapota lesz az eredeti sajátállapot felcserélt komponensekkel, ami tulajdonképpen a (4) egyenlet Hamilton-operátorában a $\psi_{B_1} \leftrightarrow \psi_{A_2}$ és $\psi_{A_1} \leftrightarrow \psi_{B_2}$ báziscseréknek felel meg, a 2×2 -es bázisban pedig $\psi_{A_1} \leftrightarrow \psi_{B_2}$ -nek.¹ Mivel tehát az x_0 tengely körüli elforgatás a \mathbf{k}_{φ_0} állapotot a $\mathbf{k}_{-\varphi_0}$ állapotba viszi át, a báziscsere miatt teljesülnie kell, hogy $\vartheta\psi(-\varphi_0) = \sigma_x\psi(\varphi_0)$, ahol σ_x a komponenseket felcserélő Pauli-mátrix, ϑ pedig egy komplex fázistolás. A spinorra nézve egy lehetséges próbafüggvény az

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \psi_2(\varphi_0) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

ami a fenti feltételt, miszerint

$$\vartheta \begin{pmatrix} 1 \\ \psi_2(-\varphi_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_2(\varphi_0) \\ 1 \end{pmatrix},$$

egy szögfüggő $\vartheta(\varphi_0)$ -val tudná kielégíteni minden φ_0 -ra. Bár végül azonos eredményre jutnánk, ugorjunk előre a gondolatmenetben, és *olvasszuk bele* ϑ szögfüggését az (A.1) spinorba!² Merítsünk ötletet ehhez a warping nélküli eset ismert megoldásából, és (A.1) helyett próbálkozzunk inkább az alábbi spinorral:

$$\begin{pmatrix} -ie^{-i\varphi_0} \\ \tau ie^{i\varphi_0} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

ami egyrészt kielégíti a fenti feltételt, miszerint $\vartheta\psi(-\varphi_0) = \sigma_x\psi(\varphi_0)$ a konstans $\vartheta = -\tau$ választással, másrészt megvan az a szimmetriája is, hogy $\tau\psi^*(\varphi_0) = \sigma_x\psi(\varphi_0)$. Próbáljuk meg

¹ Nyilván az elektron ψ hullámfüggvénye felbontható lesz egy spinorra, és egy, a terjedést leíró síkhullám szorzatára. Bár továbbra is ψ -vel jelöljük, ezután csak a spinorra teszünk állításokat, tehát például a (3.2) kifejezésre az origóban!

² Látni fogjuk majd, hogy ez a *beolvastás* felel meg annak, hogy megfelelően szimmetrizált sajátállapotoknál, χ_0 azonosan nullának vehető.

megtalálni a (3.1) Hamilton-operátor egy olyan megoldását, amiben a spinor tag mindezeket a feltételeket teljesíti, tehát egyszerre igaz rá, hogy

$$\vartheta\psi(-\varphi_0) = \tau\psi^*(\varphi_0) = \sigma_x\psi(\varphi_0)! \quad (\text{A.3})$$

Mostmár láthatóvá válik, hogy mi motiválta a (3.2) ansatzban a spinor alakját: amennyiben ugyanis θ -ra egy 1 abszolút értékű komplex számot kapunk, akkor (A.3) második egyenlősége azonnal teljesül. Szerencsére, a (3.3) kifejezés valóban mindig egy egységnyi komplex szám, de vajon teljesíti-e (A.3) első egyenlőségét is? Továbbra is feltételezve, hogy u valós, és kihasználva a szimmetriához szükséges feltételt, miszerint ω π -nek többszöröse ($\nu \in \mathbb{N}$):

$$\theta(\omega = \nu\pi, u = \text{Re}(u)) = (-1)^{\nu+1} i e^{i\varphi} \sqrt[4]{\frac{k^2 + (-1)^{\nu+1} 2kv_3 e^{-3i\varphi} - 2ue^{-2i\varphi}}{k^2 + (-1)^{\nu+1} 2kv_3 e^{3i\varphi} - 2ue^{2i\varphi}}},$$

amiben a komplex konjugálás valóban megfelel φ és a teljes kifejezés egyidejű előjelváltásának, tehát ugyancsak a $\vartheta = -\tau$ választással, a (3.2)-ben és (3.3)-ban definiált spinor valóban teljesíti (A.3) minden feltételét. Következésképpen, ezzel a megoldással számolva, nincs szükség további χ_0 fáziskorrekciókra, a megoldás automatikusan tudja a rendszer szimmetriáit, és valós u és $\omega = \nu\pi$ esetén, az x tengelyre valóban szimmetrikus megtalálási valószínűséget eredményez! Bár a Schrödinger-egyenlet megoldható az (A.1) próbafüggvénnyel is, abban az esetben vagy utólag szimmetrizáljuk az elektronnyalábok fázisát χ_0 -val, vagy egy, az x tengelyre aszimmetrikus megoldást kapunk, ami egy speciális, és jelen esetben alaptalan feltételezést jelent az ismeretlen forrásra nézve.

Érdekes összefüggésekre deríthetünk fényt a (3.3) kifejezéssel definiált θ átalakításával. Erre egyébként is szükség van a számszerű kiértékeléshez, a negyedik gyökvonás okozta i hatványaiban való határozatlanság miatt. A θ függvényt tehát célszerű az alábbi két alakban felírni:

$$\theta_1 = i \exp\left(i\left(\varphi - \omega - \arg\left(k^2 - 2e^{3i(\varphi-\omega)}kv_3 - 2e^{2i(\varphi-\omega)}u\right)/2\right)\right) \quad (\text{A.4})$$

$$\theta_2 = \exp\left(i\left(-(\varphi - \omega)/2 - \arg\left(2kv_3 - e^{-3i(\varphi-\omega)}k^2 + 2e^{-i(\varphi-\omega)}u\right)/2\right)\right), \quad (\text{A.5})$$

ahol az $\arg(\cdot)$ függvény teszi egyértelművé a számolást, a komplex argumentumához hozzárendelve annak fázisát a $(-\pi, \pi)$ intervallumban. $u = 0$ esetén, θ_1 és θ_2 fenti alakjainak a következő előnyei vannak: θ_1 folytonos függvénye lesz $\varphi_0 = (\varphi - \omega)$ -nak mikor $k \geq 2v_3$, ha pedig $k \leq 2v_3$, akkor θ_2 lesz folytonos függvénye φ_0 -nak! $u = 0$ esetén ugyanis éppen a $k = 2v_3$ sugarú körön helyezkednek el az oldalsó Dirac-pontok a k térben a K , illetve K' pontok körül, amely kör egy természetes határát képezi a megfelelő hullámfüggvény φ_0 -függésének, és ahol persze $\theta_1 = \theta_2$. Vegyük észre az (A.4) és (A.5) kifejezések fizikai jelentését! Amíg θ_1 -ben az exponens vezető tagja φ_0 , addig θ_2 -ben ez a tag $-\varphi_0/2$. Eszerint, ha a $k = 2v_3$

sugarú körön kívül járjuk körbe mind a négy Dirac-pontot, akkor megkapjuk a K pont környezetének teljes Berry-fázisát, ami 2π , viszont ha a körön belül járunk körbe, akkor $-2\pi/2$, vagyis $-\pi$ a Berry-fázisa a legbelső, tehát az eredeti K pontnak [110]. Mivel a Berry-fázisok összegének vissza kell adnia a teljes 2π -t, és szimmetriaokokból kifolyólag az oldalsó Dirac-pontok Berry-fázisa egyenlő, ezek értéke π -vel lesz azonos!³ Természetesen a $v_3 = 0$ és $u = 0$ speciális esetben θ_1 és θ_2 is átmennek $ie^{i\varphi_0}$ -ba, és visszacapjuk a warping nélküli (A.2) megoldást. Amint azt már a 3.4. ábrán is láttuk, u véges értékére a Dirac-pontok elmozdulnak, illetve a négyből kettő meg is szűnhet. A hullámszám $2v_3$ -hoz közeli értékei esetén ez szakadáshoz vezethet mind θ_1 -ben, mind θ_2 -ben, ezért az elektronnyalábok felösszegzése előtt le kell ellenőrizni, hogy nincs-e ugrás $\psi(\varphi)$ fázisában. Ez az ugrás azonban csak π lehet, ahogy θ_1/θ_2 is csak ± 1 -gyel lehet egyenlő, φ -ben szakaszonként váltakozó előjellel. Ezt el is várjuk, hiszen a spinorban egy $\theta \rightarrow \pm i\theta$ ugrás a másik két Riemann-sík valamelyikére, egy ugrást jelentene egy $-E$ energiájú, ellentétes sávbeli állapotba. Ezért az (E_i, E_t, ω, u) bemeneti paraméterek legszerencsétlenebb választása esetén is az esetleges előjelváltások $\psi(\varphi)$ -ben orvosolhatóak egy -1 -gyel való szorzással az adott φ -beli intervallumon. Megemlítjük továbbá, hogy amennyiben $\text{Im}(u) \neq 0$, a (3.1) Hamilton-operátorra, és így a sajátfüggvényeire is csak egy speciálisabb szimmetria van érvényben:

$$\vartheta\psi(-\varphi_0, u^*) = \tau\psi^*(\varphi_0, u) = \sigma_x\psi(\varphi_0, u), \quad (\text{A.6})$$

ami összhangban van a 3.10. ábrával is. A (3.5) és a (3.6) képletekkel megadott csillapodó hullámok kissé eltérő szimmetriáira most nem térünk ki. Ez kevésbé lényeges a számolás szempontjából is, hiszen a fázisuktól függetlenül, a határfeltételek olyan együtthatókat rendelnek hozzájuk, amelyekkel együtt már rendelkeznek a megfelelő szimmetriákkal. Végül megjegyezzük még, hogy (A.3)-ban, illetve (A.6)-ban, $\vartheta = -\tau$ csak a $\theta = \theta_1$ választás mellett igaz, θ_2 esetén $\vartheta = \tau$.

³ Az is megmutatható például, hogy a véges v_3 és véges, de valós u mellett kialakuló mindkét ekvivalens Dirac-pont Berry-fázisa π [99].

B. A nyírt csúcskausztikák egyenlete

A 3.3.1. alfejezetben már szoltunk arról, hogy a fókuszpont feltétele egy olyan ϕ^* szög alatt haladó nyaláb létezése, amely törés nélkül halad át az átmeneten, tehát rá nézve $n = 1$. Ha x_S -sel jelöljük a forrás átmenettől mért távolságát, akkor ez a nyaláb a $(0, x_S \tan(\phi^*))$ pontban metszi az átmenetet. Illesszünk ebben a pontban, mint origóban, erre az egyenesre, mint x_1 tengelyre egy (x_1, y_1) derékszögű koordináta-rendszert! Az adott rendszerben tehát ϕ^* -nak $\phi_1^* = 0$ fog megfelelni, a forrás pedig a $(-x_{1S}, 0)$ koordinátájú pontban lesz, ahol $x_{1S} = x_S / \cos(\phi^*)$. Mivel azonban a közelítés $\phi_1^* = 0$ -nak egyébként is csak egy kis környezetében érvényes, nem követünk el nagy hibát, ha x_{1S} helyett x_S -sel számolunk. Az új rendszerben ekkor $\phi_{1t}(\phi_{1i})$ lesz az a függvény, ami a beérkező nyaláb irányszögéhez rendeli a megtört nyaláb irányszögét. Ugyanilyen egyértelmű a $\tan(\phi_{1i}) \rightarrow \tan(\phi_{1t})$ hozzárendelés is, amit az egyenesen haladó nyaláb, vagyis 0 kis környezetében, közelíteni lehet $\tan(\phi_{1i})$ egy harmadrendű hatványsorával:

$$\tan(\phi_{1t}) \approx m_1 \tan(\phi_{1i}) + m_2 \tan(\phi_{1i})^2 + m_3 \tan(\phi_{1i})^3.$$

Egy tetszőleges nyaláb egyenlete pedig az átmenettől jobbra:

$$y_1 = x_S \tan(\phi_{1i}) + x_1 \tan(\phi_{1t}).$$

Az áthajláskausztikák egyenletét a $\partial y_1 / \partial \phi_{1i} = 0$ feltétel határozza meg, ami egy implicit $(x_1, y_1)(\phi_{1i})$ egyenletrendszerre vezet. Ennek első egyenletéből, a $\partial x_1 / \partial \phi_{1i} = 0$ feltétel adja meg a kausztika csúcsának iránytangensét: $\tan(\phi_{1i}) = -m_2 / (3m_3)$. Eszerint, és a végül jogosnak bizonyuló $3m_1 m_3 \gg m_2^2$ feltételezéssel élve, a csúcs koordinátái: $(-x_S / m_1, 0)$. A csúcs körül, az $(x_1, y_1)(\phi_{1i})$ egyenleteket $\varrho = \tan(\phi_{1i}) + m_2 / (3m_3)$ harmadrendű sorfejtésével közelítve kapunk a kausztikára egy még mindig implicit egyenletrendszert, de immár ϱ hatványaiban kifejtve: $(x_1, y_1)(\varrho)$. Az első egyenletből ϱ már kifejezhető, és a másodikba ezt visszahelyettesítve megkapjuk a nyírt csúcskausztikák explicit egyenletét [111]:

$$\gamma(y_1 + \epsilon(x_1 + x_S / m_1))^2 = (x_1 + x_S / m_1)^3 \quad \text{ahol} \quad (\text{B.1})$$

$$\gamma = \frac{27x_S m_3}{4m_1^4} \quad \text{és} \quad \epsilon = \frac{m_1 m_2}{3m_3}.$$

A (B.1) egyenletet visszatranszformálva az eredeti (x, y) koordináta-rendszerbe, megkapjuk a 3.15. ábrákon kézzel jelölt kausztikák egyenletét.

Köszönetnyilvánítás

A dolgozatom megírásához nyújtott segítségért sok mindenkinek tartozom köszönettel. Mindenekelőtt azonban témavezetőmnek, Cserti Józsefnek, akinek szakmai támogatásáért, lelkes biztatásáért és iránymutatásáért vagyok hálás. Két munkatársamtól, Pályi Andrástól és Oroszlány Lászlótól rengeteget tanultam, és munkámhoz nyújtott gyakorlati hozzájárulásuk nélkül még nagyon messze lennék a céltól. Hálás vagyok továbbá Colin Lambertnek, egyrészt a szakmai segítségért, másrészt pedig az elnéző türelméért, amivel időt biztosított számomra az íráshoz. Megtisztel, hogy velük dolgozhattam a közösen szerzett cikkeinken, melyek száma, remélem, gyorsan gyarapszik majd a jövőben is. Nem maradhat ki a sorból Sir Michael Berry sem, aki a katasztrófaoptika fogósabb kérdéseit levelezésünk során tette számomra világossá. Az elektron-elektron kölcsönhatással kapcsolatos tévhitek eloszlata Tőke Csaba érdeme. Gillemot Katának pedig azt a jóindulatú, de ugyanakkor igen őszinte és lankadatlan nyomásgyakorlást köszönöm, amivel talán valóban sikerült kicsit felgyorsítania az egyébként meglehetősen lassan készülő munkát.

Külön köszönetet illeti továbbá a szüleimet, és a Hubát is, akik türelmükkel és megértésükkel támogattak, és akik mindig fel tudnak vidítani. Sokkal több mindenért tartozok Nekik hálával, mint pusztán ez a dolgozat! És végül, de nem utolsó sorban köszönet a Krisztikének, aki mindig bízott bennem, és egy helyen Rutherfordot idézve* úgy nyilatkozott rólam, hogy én nem szeretem a bélyeggyűjtést.

*

„All science is either physics or stamp collecting.”

„A tudomány vagy fizika, vagy bélyeggyűjtés.”

Ernest Rutherford

Irodalomjegyzék

- [1] S. Mouras, A. Hamm *et al.*, *Revue de chimie minérale* **24**, 572 (1987).
- [2] C. W. J. Beenakker és H. Houten, Academic Press Inc., Boston, *Solid State Phys.* **44**, 1 (1991).
- [3] *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, szerző: S. Datta, Cambridge University Press, Cambridge, (1995).
- [4] *Introduction to Mesoscopic Physics*, szerző: Y. Imry, Oxford University Press, Oxford, (1997).
- [5] T. Ando, T. Nakanishi és R. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 2857 (1998).
- [6] K. S. Novoselov, D. Jiang *et al.*, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **201**, 10451 (2005).
- [7] K. S. Novoselov, A. K. Geim *et al.*, *Nature* **438**, 197 (2005).
- [8] Y. Zhang, Y. W. Tan *et al.*, *Nature* **438**, 201 (2005).
- [9] A. K. Geim és K. S. Novoselov, *Nature Materials* **6**, 183 (2007).
- [10] M. I. Katsnelson és K. S. Novoselov, *Solid State Comm.* **143**, 3 (2007).
- [11] M. I. Katsnelson, *Materials Today* **10**, 20 (2007).
- [12] M. I. Katsnelson és A. K. Geim, *Phil. Trans. R. Soc. A* **366**, 195 (2007).
- [13] M. Hentschel és F. Guinea, *Phys. Rev. B* **76**, 115407 (2007).
- [14] D. S. Novikov, *Phys. Rev. B* **76**, 245435 (2007).
- [15] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1337 (2008).
- [16] R. Saito, M. Fujita *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2204 (1992).
- [17] S. Iijima, *Nature* **354**, 56 (1991).

- [18] *Carbon Nanotubes, Basic Concepts and Physical Properties*, szerző: S. Reich, C. Thomsen és J. Maultzsch, Wiley-VCH, Berlin, (2004).
- [19] P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [20] J. W. McClure, Phys. Rev. **108**, 612 (1957).
- [21] K. S. Novoselov, A. K. Geim *et al.*, Science **306**, 666 (2004).
- [22] T. Ando, A. B. Fowler és F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
- [23] A. H. C. Neto, F. Guinea és N. M. R. Peres, Physics World **19**, 33 (2006).
- [24] H. W. Kroto, J. R. Heath *et al.*, Nature **318**, 162 (1985).
- [25] S. Barak, *Intel unveils 1 TFLOP/s Knight's Corner*, EE Times – Supercomputing 2011 (2011. nov. 16.).
- [26] Y. M. Lin, K. A. Jenkins *et al.*, Nano Letters **9**, 422 (2009).
- [27] *A modern szilárdtestfizika alapjai*, szerző: Sólyom J., I-III. kötet, ELTE, Eötvös kiadó, (2002-2003).
- [28] S. Reich, J. Maultzsch és C. Thomsen, Phys. Rev. B **66**, 035412 (2002).
- [29] D. P. DiVincenzo és E. J. Mele, Phys. Rev. B **29**, 1685 (1984).
- [30] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 777 (2005).
- [31] J. C. Charlier, P. Eklund *et al.*, Carbon Nanotubes **111**, 673 (2008).
- [32] R. Larciprete, A. Goldoni *et al.*, Appl. Surface Science **248**, 8 (2005).
- [33] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov és A. K. Geim, Nature Physics **2**, 620 (2006).
- [34] T. Tudorovskiy, K. J. A. Reijnders és M. I. Katsnelson, Physica Scripta **2012**, 014010 (2012).
- [35] A. Bostwick, T. Ohta *et al.*, Nature Physics **3**, 36 (2006).
- [36] K. S. Novoselov, Z. Jiang *et al.*, Science **315**, 1379 (2007).
- [37] S. Latil és L. Henrard, Phys. Rev. Lett. **97**, 036803 (2006).
- [38] E. McCann és V. I. Fal'ko, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805 (2006).
- [39] E. McCann, D. S. L. Abergel és V. I. Fal'ko, Solid State Comm. **143**, 110 (2007).

- [40] M. S. Dresselhaus és G. Dresselhaus, *Adv. Phys.* **51**, 1 (2002).
- [41] A. H. C. Neto, F. Guinea *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [42] M. Koshino, *New J. Phys.* **11**, 095010 (2009).
- [43] T. Ohta, A. Bostwick *et al.*, *Science* **313**, 951 (2006).
- [44] K. S. Novoselov, E. McCann *et al.*, *Nature Physics* **2**, 177 (2006).
- [45] M. Braun, L. Chirolli és G. Burkard, *Phys. Rev. B* **77**, 115433 (2008).
- [46] M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **76**, 073411 (2007).
- [47] K. Kechedzhi, V. I. Fal'ko *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 176806 (2007).
- [48] D. Culcer és R. Winkler, *Phys. Rev. B* **79**, 165422 (2009).
- [49] V. V. Cheianov és V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. B* **74**, 041403 (2006).
- [50] C. J. Poole, *Solid State Comm.* **150**, 632 (2010).
- [51] B. Huard, J. A. Sulpizio *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 236803 (2007).
- [52] R. S. Shishir és D. K. Ferry, *J. Phys. Cond. Mat.* **21**, 232204 (2009).
- [53] K. M. Borysenko, J. T. Mullen *et al.*, *Phys. Rev. B* **83**, 161402 (2011).
- [54] J. H. Chen, C. Jang *et al.*, *Nature Nanotechnology* **3**, 206 (2008).
- [55] S. V. Morozov, K. S. Novoselov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 016602 (2008).
- [56] D. Gunlycke, H. M. Lawler és C. T. White, *Phys. Rev. B* **75**, 085418 (2007).
- [57] K. M. Borysenko, J. T. Mullen *et al.*, *Phys. Rev. B* **81**, 121412 (2010).
- [58] *Principles of Optics*, szerző: M. Born és E. Wolf, 7. kiadás, Cambridge University Press, Cambridge, (2005).
- [59] J. Spector, H. L. Stormer *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 1290 (1990).
- [60] V. G. Veselago, *Sov. Phys. Usp.* **10**, 509 (1968).
- [61] J. B. Pendry, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3966 (2000).
- [62] J. B. Pendry, *Nature* **423**, 22 (2003).
- [63] D. R. Smith, J. B. Pendry és M. C. K. Wiltshire, *Science* **305**, 788 (2004).

- [64] R. A. Shelby, D. R. Smith és S. Schultz, *Science* **292**, 77 (2001).
- [65] A. A. Houck, J. B. Brock és I. L. Chuang, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 137401 (2003).
- [66] C. G. Parazzoli, R. B. Greigor *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 107401 (2003).
- [67] M. Notomi, *Phys. Rev. B* **62**, 10696 (2000).
- [68] C. Luo, S. G. Johnson *et al.*, *Opt. Express* **11**, 746 (2003).
- [69] M. A. Topinka, B. J. LeRoy *et al.*, *Science* **29**, 2323 (2000).
- [70] M. A. Topinka, B. J. LeRoy *et al.*, *Nature* **410**, 183 (2001).
- [71] H. C. Manoharan, C. P. Lutz és D. M. Eigler, *Nature* **403**, 512 (2000).
- [72] B. Özyilmaz, P. Jarillo-Herrero *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 166804 (2007).
- [73] G. Liu, J. Velasco *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 203103 (2008).
- [74] J. R. Williams, L. DiCarlo és C. M. Marcus, *Science* **3**, 638 (2007).
- [75] R. V. Gorbachev, A. S. Mayorov *et al.*, *Nano Letters* **8**, 1995 (2008).
- [76] N. Stander, B. Huard és D. Goldhaber-Gordon, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 026807 (2009).
- [77] A. F. Young és P. Kim, *Nature Physics* **5**, 222 (2009).
- [78] V. V. Cheianov, V. I. Fal'ko és B. L. Altshuler, *Science* **315**, 1252 (2007).
- [79] Cserti J., Pályi A. és Péterfalvi Cs. G., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 246801 (2007).
- [80] Péterfalvi Cs. G., Pályi A. és Cserti J., *Phys. Rev. B* **80**, 075416 (2009).
- [81] *Structural stability and morphogenesis*, szerző: R. Thom, Benjamin-Addison Wesley, New York, (1972).
- [82] V. I. Arnol'd, *Russ. Math. Survs.* **30**, 1 (1975).
- [83] M. V. Berry, *J. of Sci.&Ind. Research* **36**, 103 (1977).
- [84] 'Progress in Optics' című gyűjteményes műből *Catastrophe Optics: Morphologies of Caustics and Their Diffraction Patterns*, szerző: M. V. Berry és C. Upstill, szerkesztő: E. Wolf, 257., North-Holland, (1980).
- [85] *Katasztrófaelmélet és alkalmazásai*, szerző: T. Poston és I. Stewart, Műszaki könyvkiadó, Budapest, (1985).

- [86] Péterfalvi Cs. G., Pályi A. *et al.*, Phys. Status Solidi B **247**, 2949 (2010).
- [87] Péterfalvi Cs. G., Oroszlány L. *et al.*, New J. Phys. (elbírálás alatt); arXiv:1203.6517v1 (2012).
- [88] *Quantum Mechanics*, szerző: F. Schwabl, Springer-Verlag, Berlin, (1992).
- [89] *Handbook of Mathematical Functions*, szerkesztő: M. Abramowitz és I. A. Stegun, 9. kiadás, Dover Publication Inc., New York, (1972).
- [90] P. Vodo, P. V. Parimi *et al.*, Appl. Phys. Lett. **86**, 201108 (2005).
- [91] M. M. Fogler, D. S. Novikov *et al.*, Phys. Rev. B **77**, 075420 (2008).
- [92] L. M. Zhang és M. M. Fogler, Phys. Rev. Lett. **100**, 116804 (2008).
- [93] *Optics*, szerző: E. Hecht, 4. kiadás, Addison-Wesley, Amsterdam, (2002).
- [94] A. Cayley, *A Memoir upon Caustics*, The Royal Society, Philosophical Transactions of the Royal Society of London **147**, 273 (1857).
- [95] *Electromagnetic Theory and Geometrical Optics*, szerző: M. Kline és I. W. Kay, John Wiley & Sons, (1965).
- [96] *The optics of rays, wavefronts, and caustics*, szerző: O. N. Stavroudis, Academic Press, New York, (1972).
- [97] *The Mathematics of Geometrical and Physical Optics - The k-function and its Ramifications*, szerző: O. N. Stavroudis, Wiley-VCH, Weinheim, (2006).
- [98] M. Mucha-Kruczyński, I. L. Aleiner és V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **84**, 041404 (2011).
- [99] Y. Lemonik, I. L. Aleiner *et al.*, Phys. Rev. B **82**, 201408 (2010).
- [100] Dávid Gy., Rakyta P. *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 041402 (2012).
- [101] S. Park és H. S. Sim, Phys. Rev. B **84**, 235432 (2011).
- [102] F. Hassler, A. R. Akhmerov és C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **82**, 125423 (2010).
- [103] *Matematikai zsebkönyv*, szerkesztő: J. N. Bronstejn és K. A. Szemengyajev, 6. kiadás, Műszaki könyvkiadó, Budapest, (1987).
- [104] M. Mucha-Kruczyński, I. L. Aleiner és V. I. Fal'ko, Solid State Comm. **151**, 1088 (2011).
- [105] A. S. Mayorov, D. C. Elias *et al.*, Science **333**, 860 (2011).

- [106] J. L. Garcia-Pomar, A. Cortijo és M. Nieto-Vesperinas, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 236801 (2008).
- [107] J. M. P. Jr, F. M. Peeters *et al.*, *J. Phys. Cond. Mat.* **21**, 045301 (2009).
- [108] Z. Wang és F. Liu, *ACS Nano* **4**, 2459 (2010).
- [109] D. S. L. Abergel és T. Chakraborty, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 062107 (2009).
- [110] M. V. Berry, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**, 45 (1984).
- [111] J. F. Nye és J. H. Hannay, *J. Mod. Optics* **31**, 115 (1984).

Péterfalvi Csaba Géza

Szemiklasszikus elektronoptika grafén rendszerekben

A doktori értekezés összefoglalása

Doktori dolgozatomban egy- és kétrétegű grafénban, henger és sík geometriájú potenciállépcsőkön való rugalmas elektronszórást vizsgáltam kvantumosan, illetve szemiklasszikus eszközökkel.

Ballisztikus elektronok síkhullámának egy hengersizmetrikus potenciállépcsőn való szórási folyamatait vizsgálva, kiszámoltam a teljes hullámfüggvényt mindkét típusú grafénban. Az analitikus számolás eredményét numerikusan kiértékeltem, és felismerve az analógiát a rövid hullámhosszú határesetben, a geometriai optika eszközeivel írtam le a szórópotenciál belsejében kialakuló gyújtógörbék alakját. Az n - p átmenetek esetében, az elektronnyalábok törése és visszaverődése a Snellius–Descartes-törvénnyel, és negatív törésmutatóval volt leírható. A kausztikák geometriai optikával pontosan megadható görbéin túl, a diffrakciós rojtok gazdag részleteire csak a katasztrófoptikán belül találtam magyarázatot. Ezért a kausztikák környezetében, előállítottam a hullámfüggvényt egy szemiklasszikus integrál formájában is, amely integrál eredetét, a katasztrófoptikai bevezetőben, előzőleg tisztáztam. Az eredményeket diszkutálva, részletesen kitértem az áthajlás- és a csúcskausztikák jellemzésére, illetve a szóban forgó grafén rendszerekben megvizsgáltam az elmélet által jóslott skálatörvények érvényességét is. Összevetve az egzakt és a szemiklasszikus megoldást, általában véve jó egyezést tapasztaltam.

Kiszámoltam a síkhullámjellegű állapotok hullámfüggvényét kétrétegű grafénban, egy alacsony energián pontosabb, a trigonális gyűrő hatást is figyelembe vevő Hamilton-operátorral. Az új, anizotrop rendszerben, ahol a Lifshitz-átmenet környékén az energiakontúrok hármas szimmetriát mutatnak, egy n - n síkátmenet által létrehozott interferenciaképet vizsgáltam az előzőleg megismert, szemiklasszikus eszközökkel. Kihhasználva az energiakontúrok konkáv geometriáját, megmutattam, hogy jól megválasztott energiákon, sávon belüli szórás esetén is lehetséges a fókuszálás. Az energiakontúrok görbületének előjelváltása miatt, a síkátmenet egyik oldalán lévő pontforrásból szétsugárzó elektronok a túloldalon összetartó sugarak mentén újra, egy jól definiált fókuszban találkoznak. Meghatároztam az átmeneti valószínűséget, ami jóval meghaladta az n - p átmenetknél talált értékeket, illetve rávilágítottam a jelenség K pont-függő természetére is. Megvizsgáltam továbbá a külső mechanikai feszültségnek, valamint az átmenet és a grafénrács relatív elforgatásának hatását a diffrakciós képre, és azt találtam, hogy a diffrakciós mintázat elforoghat, folytonosan deformálódhat, de a topológiája nem sérül. Megmutattam, hogy a fókuszpont helyéből a sáv szerkezet alacsony energiájú topológiájára, és így a Dirac-pontok számára is következtetni lehet.

Csaba Géza Péterfalvi

Semiclassical electron optics in graphene systems

Summary of the PhD thesis

In my PhD thesis, I studied elastic electron scattering in single and bilayer graphene samples on circular and planar potential steps semiclassically and quantum mechanically.

In both types of graphene, I calculated the total wavefunction produced by a planewave of ballistic electrons scattering on a circular potential step. I evaluated the results of the analytical calculation numerically, and recognizing the analogy in the short wavelength limit, I described the caustical curves inside the scattering region in terms of geometrical optics. The refraction and reflection of the electron beams at the n - p junction could be explained by the Snell–Descartes law with negative refractive index. Beyond the accurate equations for the caustical curves obtained from geometrical optics, the rich details of the diffraction fringes could be described only by the theory of catastrophe optics. Thus within the framework of catastrophe optics, I derived a semiclassical integral representation of the wavefunction in the proximity of the caustics, and I verified the applicability of this integral by comparing it to the exact results obtained previously. In general, I found good agreement. During the discussion of the results, I went into the detailed characterization of the cusp and fold type caustics, and I also confirmed the scaling laws predicted by the semiclassical theory in the graphene systems under consideration.

I calculated the wavefunction of planewave-like states in bilayer graphene using a low-energy Hamilton operator also accounting for the trigonal warping effect. In the new, anisotropic system, where the energy contours around the Lifshitz transition show threefold symmetry, I studied an interference pattern produced by a flat n - n junction with the previously presented semiclassical tools. Taking advantage of the concave energy contours, I demonstrated that at appropriate energies, focusing can also occur during intraband scattering processes. Due to the sign change of the energy contours' curvature, electrons from a point source on one side of the flat junction can be scattered to converging states and eventually get focused on the other side of the junction. I determined the transmission probability, which proved to be much higher than the corresponding values for the n - p junctions, and I pointed out the valley selective nature of the scattering process in this electron optical system. I also investigated the effect of external mechanical strain on the diffraction pattern, and that of the rotation of the graphene lattice relative to the orientation of the junction. According to my findings, the diffraction pattern can be rotated and continuously stretched, but its topology remains the same. I demonstrated that from the position of the focal point, one can extract indirect information about the number of Dirac points and the low-energy topology of the band structure of bilayer graphene samples.