

Beszámoló

Munka kezdete és befejezése: 2005-2009. I. Félév

A kutatásokat kezdetben a munkatervnek megfelelően végeztük. Ahogyan azt a pályázatban előre jeleztük a tudományág gyors fejlődésének megfelelően bővítettük a kutatási témákat, amit részben a külföldi kutatókkal való szoros együttműködés, másrészt Borda László és Ujsághy Orsolya utazásainak részben külföldi forrásokból való fedezése révén Gulácsi Zsolt illetve Cserti József bevonása tett lehetővé. Az utóbbiak részvételét Gillyén Elemérné az OTKA Iroda Igazgatója KO-829/209 (2007. 01.25 keltezésű) illetve MIK-486/2008 (2008.04.29 keltezésű) levelében engedélyezte. A publikációkra a Zárójelentés közlemények fejezetének sorszámai szerint utalunk.

A) Nemegyensúlyi elektron eloszlás vizsgálata mezoszkopikus méretű huzalokban

Befejeztük a vékony drótokban, nagy ráadott feszültség mellett mért nemegyensúlyi elektron eloszlás vizsgálatát mágneses szennyezők jelenlétében, a Boltzmann egyenletet szelf-konzisztensen megoldó, korábban kifejlesztett számítógépes program segítségével. A szisztematikus vizsgálat során megmutattuk, hogy a véges feszültség miatt nem elhanyagolható Korringa élettartam elmossa a Kondo rezonanciákat, s együttes hatásuk a renormalizált csatolás kisimulását és megnövekedését eredményezi. Ezért a kísérleti adatok jól leírhatók egy konstans, ám a csupasz csatoláshoz képest akár 8-10-szeresére is megnövekedett, feszültségfüggő csatolással. Amennyiben a konstans csatolás feszültségfüggése elhanyagolható, az eloszlásfüggvény skálázást mutat a kísérletekkel egyezően [2].

B) Felületi anizotrópia, felületi szennyezések STM spektruma, fázisvesztés vizsgálata

Újra vizsgáltuk a mágneses szennyezők felületi anizotrópiájának kérdéskörét. A korábbi, meglehetősen komplikált számolásban a host atom pályák és a vezetési elektronok közti, a host atom helyzetétől függő hibridizációban az elektronok impulzusától való függést elhanyagolva, az elektronok impulzusát a Fermi impulzussal helyettesítettük. Most megmutattuk, hogy ez a feltevés okozta az anizotrópia nem oszcilláló, $1/d$ -s távolságfüggését. A hibridizáció impulzusfüggését is figyelembe véve megismételtük a korábbi számolást, s eredményül oszcilláló, $1/d^3$ -ös anizotrópiát kaptunk. Az oszcilláló anizotrópiának köszönhetően egész spinek alapállapota szinglett, vagy dublett is lehet a minta szélétől mért távolságtól függően, de megfelelően alacsony hőmérsékleten a spin továbbra is kifagy, hisz az alapállapot-dublett két állapota között nem lehet direkt elektron okozta átmenet. Félegész spinekre az alapállapot mindig dublett, de a korábbiakkal ellentétben az esetek felében most várhatunk kifagyást megfelelően alacsony hőmérsékleten [12].

Kiszámítottuk a réz felületen adszorbált kobalt monomer és dimer STM spektrumát, és a kísérleti eredményekhez jól illeszkedő görbéket kaptunk. Munkánk különleges értékét az adja, hogy elsőként kombináltuk a szubsztrát és az adatok ab initio leírását az erős korrelációk korrekt számításával [24].

A Duisburg-Esseni Egyetemmel való együttműködésben kidolgoztunk egy effektív modellt a mezoszkopikus transzport során történő fázisvesztés leírására, mely nagyobb mintákban is könnyen alkalmazható. Az irodalomban ismert más fenomenologikus modellekkel ellentétben a fázisvesztést a mintában nem folytonosan jelenlévőként írjuk le, hanem csak bizonyos sztochasztikusan kiválasztott régiókban, de ott teljes fázisvesztést feltételezve. A mintát a fázisvesztő régiók effektíve kisebb részekre osztják, s a koherens kvantum leírást csak ezekben a kisebb részekben kell

alkalmaznunk, ami a numerikus kezelést nagyban leegyszerűsíti. A módszert egyelőre 1 (vagy kvázi 1) dimenziós mintákra dolgoztuk ki. Lineáris rendezett és rendezetlen tight binding (TB) láncra való alkalmazásáról a European Physical Journal B-nél jelent meg publikációnk [27].

C) Elektron szórás H atomokon fémekben

A pontkontaktusokban helyet foglaló H atomokon való elektron szórás vizsgálatát a BME-n végzett kísérleti kutatások motiválták. A vezetési elektronok kétállapotú rendszeren való szóródásának amplitúdóját tanulmányoztuk. A kétállapotú rendszer két pozíciójához tartozó szórási amplitúdók különbségét határoztuk meg, különböző impulzusmomentum-csatornák estére. Hidrogén szennyezés esetén az árnyékolást figyelembe véve számítottuk ki az amplitúdókat, s eredményeink az átmeneti, valamint az erős csatolású tartományban is érvényesek [22].

D) A numerikus renormálási csoport módszer továbbfejlesztései

A numerikus renormálási csoport eljárás továbbfejlesztései számos esetben lehetővé tették a perturbatív tartományon való túllépést különböző fémekben elhelyezkedő dinamikus (Kondo) szennyezések esetén.

Elektronoknak mágneses szennyezéseken való szóródását vizsgáltuk abban a határesetben, mikor a bejövő elektron energiája lényegesen meghaladja a Kondo hőmérsékletet. Az így kapott inelasztikus szórási hatáskeresztmetszet a bejövő elektron energiájától gyengén függ, a tipikus energia-transzfer a Kondo hőmérséklet értékével egyezik meg [1].

A korábban általunk kifejlesztett módszert használva kiszámítottuk az elektronok inelasztikus szórási hatáskeresztmetszetének, valamint egyrészcsekés S-mátrixának energiafüggését különböző kvantum-szennyezésmodellek estére. Megvizsgáltuk az S=1/2 egycsatornás Kondo-modellt, az Anderson-modellt, valamint a nem-Fermi-folyadék viselkedést mutató kétszatornás S=1/2 Kondo-modellt. Ez utóbbi modell tárgyalásakor megmutattuk, hogy a szórások fele inelasztikus marad T=0 hőmérsékleten, még a Fermi felületen is [6,10].

A térbeli korrelációk vizsgálata hosszú ideig váratott magára a megfelelő eljárások hiányában. Ezen a területen részben széleskörű nemzetközi együttműködésben alkalmaztuk az általunk kifejlesztett pontosabb módszereket:

A módszer segítségével kiszámítottuk az egy dimenziós Kondo árnyékolási felhő hely- és hőmérsékletfüggését [8].

Megmutattuk, hogy fémekben az S=1/2 spinű mágneses szennyező körül felépülő töltéssűrűség-oszcillációk térbeli lecsengését zérus hőmérsékleten egy univerzális, $F(r/\xi_K)$ függvény írja le, ahol r a szennyezőtől mért távolság, ξ_K pedig az ún. Kondo koherenciahossz. Analitikus és numerikus módszereket egyaránt használva meghatároztuk F-et D=1,2,3 dimenzióban [16].

Megmutattuk, hogy az S=1 spinű, részlegesen árnyékolt mágneses szennyező körül felépülő spinkorrelációk térben lassabban csengenek le, mint S=1/2 spinű szennyezés esetén. Érdekes eredmény, hogy a spin-korrelátor előjelet vált a távolság függvényében, tehát az antiferromágneses csatolás ellenére ferromágneses korrelációk is fellépnek a szennyező és a vezetési elektronok között [26].

E) Kondo effektus kvantum pöttyökben

A Kondo effektus vizsgálata a kvantum pöttyök mesterséges előállításával jelentősen könnyebbé vált. A közelmúlt kísérleti eredményei arra utalnak, hogy az önszerveződő kvantum pötty rendszerekben megfigyelhető exciton-rekombináció emissziós spektrumának néhány érdekes vonását magyarázhatjuk a pöttyön elhelyezkedő elektron és a környező szabad elektronok hibridizációjával. Numerikus renormálási csoport módszert használva megvizsgáltuk az erős hibridizáció esetét, mikor a rendszer Kondo-korrelációkat mutat. Numerikus eredményeink alapján azt jósoljuk, hogy az emissziós spektrum hatványfüggvény-jellegű divergenciát mutat [3].

Két elektródához aszimmetrikusan csatolt kvantum pötty rendszert vizsgáltunk, arra az esetre szorítkozva, mikor a két szomszédos Coulomb-blokád völgyben a kvantum pötty spinje $S=1/2$ ill. $S=1$. Demonstráltuk, hogy ez a rendszer kvantum fázisátalakulást és spin-töltés szeparációt mutat: az átalakulás környezetében a pötty spinje kvantált, míg a töltése folytonosan változik. Az átalakulási tartományban a rendszer spin-szűrőként alkalmazható. (A cikk publikált változatáról félreértés miatt lemaradt az OTKA szám) [4].

A közelmúltban R. M. Potok és munkatársai sikeresen kimutatták a kétcsatornás Kondo-effektust dupla kvantum pötty rendszerekben. Ezen eredményhez kapcsolódva numerikus renormálási módszer segítségével meghatároztuk a dupla kvantum pötty rendszer frekvenciafüggő vezetőképességét. Meghatároztuk a Fermi-folyadék vs. nem-Fermi-folyadék átcsapást leíró univerzális függvényeket, és megvizsgáltuk a mágneses tér hatását [5].

Korábbi munkánkat kiegészítendő, összehasonlítottuk a ferromágneses elektródákhoz kapcsolt kvantum dotokra kapott eredményeinket az időközben elvégzett kísérletek során tapasztalt adatokkal. Mind a hőmérséklet-függés, mind pedig az effektív spin-felhasadás jó egyezést mutat a számításainkkal [11].

Analitikus és numerikus eszközökkel vizsgáltuk a disszipatív környezettel kölcsönható dobozba zárt részecske viselkedését. A disszipáció kis értékeinél a részecske megtalálási valószínűségének térbeli eloszlása egyre keskenyedik, míg nagy disszipáció esetén degenerált alapállapotba való fázisátalakulást kapunk, ami inhomogén effektív potenciál kialakulásához köthető [17].

A kvantum pöttyök területén nagy jelentőséggel bírnak a pöttyre alkalmazott véges feszültség hatására létrejövő nemegyensúlyi folyamatok. A kölcsönható rezonáns szint modellt tanulmányoztuk, arra az esetre szorítkozva, mikor a lokalizált nívó egy hibridizálódó és tetszőleges számú árnyékoló vezetési elektron csatornával hat kölcsön. A modell egyensúlyi viselkedését gyenge ill. erős csatolású esetben perturbatív-, numerikus- ill. Anderson-Yuval-féle renormálási csoport technikával vizsgáltuk. A kételektódás geometria esetében a ráadott feszültség hatására folyó áramot a gyenge csatolás határesetében számítottuk ki. Eredményeink hasznosak lehetnek más, nemegyensúlyi módszerek tesztelésénél [9].

A megelőzően ismertett eredmények jobb megértése szükségessé tette az Anderson-Yuval módszer behatóbb vizsgálatát más módszerekkel való összehasonlításban. A bozonizáció ill. az Anderson-Yuval Coulomb gáz módszer alkalmazhatóságát vizsgáltuk két, erős korrelációkat mutató szennyezésmodell, a kölcsönható rezonáns nívó-modell, ill. a Kondo-modell erős csatolású határesetében. Azt találtuk, hogy a két módszer alkalmazhatósága az erős csatolású fixpont természetétől függ: amennyiben a fixpont nem stabil, úgy az Anderson-Yuval módszerben figyelembe vett állapotssűrűség-renormálás lényeges, míg stabil fixpont esetén redundáns. Az általunk talált szabály felhasználható mindkét módszer pontosságának növelésére [18].

Perturbatív módszereket használva megmutattuk, hogy a kölcsönható rezonáns nívó modellben nagy feszültségértékeknél fellépő negatív differenciális vezetőképesség mechanizmusa megérthető a modell egyensúlyi dinamikája alapján. A több lépcsőben megfogalmazott dolgozat végleges változata a közeljövőben beküldésre kerül, egy korábbi változat a cond-mat-on elérhető [25].

F) Hubbard típusú molekulaláncok

A potenciális alkalmazások lehetősége (spin-szelep) indokolta ezen rendszerek vizsgálatát az Augsburgi Egyetemmel való együttműködésben.

Rombuszos cellával rendelkező és Hubbard típusú inter-elektronikus kölcsönhatást hordozó molekuláris láncok egzakt alapállapotait határoztuk meg olyan körülmények között, hogy a láncokat, a síkjukra merőleges mágneses tér jelenlétében vizsgáltuk, illetve, periódikusan elhelyezkedő csomópontokra ható kapufeszültségek jelenlétét is megengedtük. A lánc lehetett véges (nanoszkopikus gyűrű), vagy hosszában nagyméretű (termodinamikai határeset). Szigetelő, vezető, paramágnes, ferromágnes, illetve félfém állapotokat határoztunk meg, melyek a külső mágneses tér, kapu feszültségek, illetve elektron koncentráció segítségével be és kikapcsolhatóak, illetve egyik a másikba átvihető. Ilyen eszközök tehát nanoszkopikus kapcsolók, érzékelők, kapuk előállítására alkalmasak. Ezek közül a kimutatott korrelált félfém spintronicsban is alkalmazható nanoszkopikus spin-szelep szerepét is betöltheti, hiszen benne (külső elektromos vagy mágneses terekkel irányítható módon bekapcsolva) adott spinvetületű töltéshordozók teljesen lokalizáltak, míg ellentétes spinvetületű töltéshordozók fémes tulajdonságot eredményezve mozognak [13].

Véges (nanoszkopikus gyűrű) vagy hosszában nagyméretű Hubbard kölcsönhatások mellett spin-spin kölcsönhatásokat is tartalmazó itineráns láncok egzakt alapállapotait vizsgálva olyan ferromágneses szigetelő (egzakt) állapotokat mutattunk ki, melyek fellépése teljesen diszperzív sávszerkezet esetében is lehetséges, továbbá szigetelő-fém átmenetek jelenlétét igazoltuk [7].

A lokális és felületen ható Coulomb kölcsönhatás (U) szerepét vizsgáltuk kétsávós rendszerekben és megállapítottuk, hogy ha $U=0$ esetben a rendszer degenerált és szigetelő, akkor U megjelenése delokalizációs hatással jár, azaz szigetelő-fém átalakulást idéz elő, és vezetővé teszi a rendszert. A számítások, periodikus határfeltételek mellett mezoszkopikus esetben is érvényesek [19].

Négyzöges és háromszöges cellából álló mezoszkopikus molekuláris gyűrűk fémes és mágneses tulajdonságainak megjelenési lehetőségeit vizsgálva megállapítottuk, hogy habár trianguláris esetben kapufeszültség jelenlétében ferromágneses állapot beállítása lehetséges, de ez nem kapcsolódik vezető tulajdonságok megjelenéséhez, addig négyzetes és periodikusan ismétlődő cella esetében vezető tulajdonság ferromágnesesség megjelenésével egyidőben előidézhető külső, a rendszerre merőlegesen beállított mágneses tér felhasználásával [20].

Mezoszkopikus acén típusú láncok és gyűrűk esetében (ezen szerves és mezoszkopikus rendszereket hatszögű cellák periodikus ismétlődése jellemezi) egy újfajta vezető és egyben ferromágneses állapotot mutattunk ki mely korreláció és a láncba vett beszorítottság következménye. A talált állapot potenciális spintronicsban vett alkalmazási lehetőségeket mutat, hiszen spin-polarizált vezetés jellemzi [28].

G) Grafén rendszerek vizsgálata

A grafénnel kombinált szerkezetek új irányt nyitottak a mezoszkopikus rendszerek kutatásában.

Elméletileg tanulmányoztuk az elektronok hullámfüggvényét ballisztikus kör alakú kétrétegű grafén p-n átmenetben. Hasonlóan az egyrétegű kör alakú grafén p-n átmenethez, azt találtuk, hogy i) a hullámfüggvényben kausztika figyelhető meg a kör alakú tartomány belsejében, ii) a kausztika alakja a geometriai optika alapján írható le negatív törésmutatót feltételezve. Az egyrétegű grafénnel ellentétben az erős fókuszáló hatás nem lép fel a kétrétegű grafénben. Ezt az eredményt értelmeztük egy sík p-n átmenetnél fellépő szögfüggő Klein-alagutazással [21].

Egyrétegű és kétrétegű grafénben, mágneses térrel bezárt elektronok gerjesztéseinek szemi-klasszikus kvantálási feltételét vezettük le. Kimutattuk a szemi-klasszikus fázis, a gerjesztések spinor jellegének a fontosságát. A szemi-klasszikusan számolt sajátenergiák jó egyezést mutatnak a Dirac-egyenletből egzakt, kvantummechanikai számolással, illetve tight-binding számolással kapott eredményekkel [14].

A kétdimenziós elektrongáz közelében elhelyezett töltött szennyező spin-függő szórását tanulmányoztuk elméletileg. Megmutattuk, hogy a differenciális hatáskeresztmetszet szimmetria tulajdonságai különböznek, attól függően, hogy a szennyező a kétdimenziós elektrongáz síkjában, vagy attól véges távolságra felette van. Megmutattuk, hogy az utóbbi esetben egy aszimmetrikus (skew) szórás lép fel, ha az elektronok spin-polarizációjának van egy nem zérus komponense a kétdimenziós elektrongáz síkjára merőleges irány és a bejövő elektron iránya által meghatározott síkra. Megfelelően preparált mintában ez a szórási mechanizmus a kétdimenziós elektrongáz síkjában fekvő mágneses térben is vezethet Hall-effektushoz [15].

Elsőként tanulmányoztuk az energiaszintjeit olyan grafén alapú Andreev-biliárdoknak, amelyekben a grafén fölé szupravezető tartomány van helyezve. Az Andreev-retroreflexió esetén megmutattuk, hogy a grafén alapú Andreev-biliárd spektruma megegyezik az ugyanolyan alakú normál-szupravezető biliárdok spektrumával. Továbbá, elsőként levezettünk egy szemi-klasszikus kvantálási feltételt a grafén alapú Andreev-biliárdokra. Az egzakt és szemi-klasszikusan számolt energia szintek nagyon jól egyeznek mind Andreev-retroreflexió, mind spekuláris Andreev-reflexió esetén [23].