

Doktori értekezés összefoglalása:
Fotoemissziós és pásztázó alagútmikroszkópos mérések modellezése
Dirac-féle elektronok vizsgálatánál

Rakya Péter

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

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

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

A második generációs topologikus szigetelők felületi állapotait a felületi vonalhibák mentén kialakuló állapotsűrűség-hullámok modellezésével tanulmányoztam. Megmutattam, hogy Bi_2Te_3 kristály felületén a ΓK irányú vonalhiba mentén kialakuló, STM technikával megmért állapotsűrűség-hullámok az aszimptotikus tendenciától eltérő tulajdonságokkal jellemezhetőek: (i) az állóhullámok hullámhosszát a vonalhibához közelebbi tartományban a reciproktérbeli energiakontúrok párhuzamosan futó részei helyett a csoportsebesség vonalhibával párhuzamos komponensének minimuma határozza meg. (ii) Az állóhullámok lecsengése pedig hatványszerű helyett exponenciális lecsengéssel jellemezhető. Elméleti eredményeim kiváló egyezést mutattak a mérési eredményekkel.