

Diplomamunka

# Spin relaxáció elméleti alapjainak és alkalmazásainak vizsgálata

Szolnoki Lénárd

Témavezető: Simon Ferenc egyetemi tanár BME Fizikai Intézet Fizika tanszék

> BME 2014.

### Fizika MSc :: Diplomatéma :: Kiírás

Té	émavezető:
Neve:	Simon Ferenc
Tanszéke:	Fizika Tanszék
E-mail címe:	simon@esr.phy.bme.hu
Telefonszáma:	1215

Azonosító: DM-2013-63			
Diplomatéma címe:	Spin-relaxáció elméleti leírásának vizsgálata és spin-relaxációs mérések új anyagokon		
Melyik szakiránynak ajánlott?	"Kutatófizikus"		
A jelentkezővel szemben támasztott elvárások:	biztos elméleti háttér		
Leírása:	A spintronika egy új tudományos paradigma, ami nem kisebb ambícióval rendelkezik mint, hogy leváltsa a hagyományos, az elektron momentumán alapuló elektronikát az elektron spinje mint információ hordozó egység használatával. A területen jelenleg intenzív alapkutatás zajlik, elsősorban a spin-relaxációs folyamatok elméleti leírása és a spin-relaxáció mérése új anyagokon témaköreiben. A nemrégiben felfedezett grafén ideálisnak tűnik spintronika számára, azonban mind a kísérleti szituáció, mind az elméleti leírás igen vitatott a nemzetközi tudomány szintjén, amely diszkusszióban mi is aktívan részt veszünk. A jelentkező feladatai: az alkáli atommal dópolt grafit anyagok ESR vizsgálata és a kapott eredmények elméleti értelmezése, a spin-relaxáció elméleti leírásának feldolgozása és továbbfejlesztése, különös tekintettel az empirikus, ún. Beuneu-Monod plot-ra, a spin-relaxáció elméleti és gyakorlati problémáinak összefoglalása a grafénra, ill. az ún spin-drift jelenségének elméleti vizsgálata.		

# Önállósági nyilatkozat

Alulírott Szolnoki Lénárd, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem fizikus MSc szakos hallgatója kijelentem, hogy ezt a diplomamunkát meg nem engedett segédeszközök nélkül, önállóan, a témavezető irányításával készítettem, és csak a megadott forrásokat használtam fel. Minden olyan részt, melyet szó szerint, vagy azonos értelemben, de átfogalmazva más forrásból vettem, a forrás megadásával jelöltem.

Budapest, 2014. június 2.

Szolnoki Lénárd

### Köszönetnyilvánítás

Köszönöm témavezetőmnek, Simon Ferencnek a sok lehetőséget tanulásra és tapasztalatszerzésre, továbbá a témámban való sok segítséget. Köszönettel tartozom Kiss Annamáriának a közös munkáért, illetve a hasznos tanácsaiért a dolgozatommal kapcsolatban. Köszönöm még Dóra Balázsnak a konzultációkat. Köszönöm Jánossy Andrásnak a publikációval kapcsolatos hasznos megjegyzéseit. Köszönöm még továbbá Forró Lászlónak, hogy nála dolgozhattam, illetve Náfrádi Bálintnak a sok technikai segítséget. Köszönöm még diáktársaimnak a közös munkát.

Hálával tartozom továbbá szüleimnek, akik mindvégig támogattak tanulmányaim során. Hálás vagyok középiskolai tanáromnak, Tófalusi Péternek az áldozatos tanításáét és a versenyekre való felkészítéséért, illetve egyetemi tanáraim tanításaiért és a fizika iránti érdeklődésem további erősítéséért.

Financial support by the European Research Council Grant Nr. ERC-259374-Sylo is acknowledged.

# Tartalomjegyzék

1.	. Bevezetés és motiváció 1					
2.	Elméleti összefoglaló 3					
	2.1.	A spin	-pálya kölcsönhatás	3		
	2.2.	A spin-	-relaxáció elmélete fémekben	5		
		2.2.1.	Spin relaxáció Elliott-Yafet elmélete	5		
		2.2.2.	Az empirikus Beuneu-Monod összefüggés	10		
	2.3.	Spin-p	álya kölcsönhatás kétrétegű grafénban	13		
		2.3.1.	Kétrétegű grafén szoros kötésű közelítésbeli felírása	13		
3.	Eredmények és diszkusszió 18					
	3.1. A Beuneu-Monod skálázás javítása					
	3.2.	Spin-re	elaxáció vizsgálata kétrétegű grafénban	21		
		3.2.1.	Grafén csoportelméleti tárgyalása	21		
		3.2.2.	Elliott-Yafet elmélet kétrétegű grafénban	26		
4.	Össz	zefogla	lás	31		
A.	. Csoportelméleti számolások 3					
	A.1.	Forgat	ások hatása spinnel rendelkező hullámfüggvényekre	32		
	A.2.	Unitér	transzformációk hatása a spin-pálya operátorra	33		
	A.3.	Anti-u	nitér transzformációk hatása a spin-pálya operátorra	35		

### 1. fejezet

### Bevezetés és motiváció

Az informatika rohamos fejlődése előrevetíti, hogy a következő 10-15 évben a hagyományos elektronikai architektúrára, működési elvre épülő eszközök elérik teljesítőképességük fizikai határait, tovább nem növelhető a sebességük és a tárolókapacitásuk. Ennek egyik oka, hogy a mai hagyományos elektronikai architektúrák az elektronok momentumán keresztül történő információtovábbításra épülnek. Ahogy ez a hagyományos technológia fejlődik, úgy csökkennek az áramköri elemek méretei és működésük időskálája is rövidül. Ez azt eredményezi, hogy egy bit információ közléséhez egyre kevesebb elektron momentumát használjuk fel. Egy bizonyos határ alatt viszont el kezd számítani az elektronok egyenkénti momentumszórása, ami csökkenti az átadott információ megbízhatóságát és nem engedi, hogy az áramköri elemek egy adott mérethatár alá kerüljenek.

Ennek a jövőbeli feloldását jelentheti a spintronika [1], melynek lényege, hogy információhordozásra nem az elektronok momentumát, hanem annak feles spinjét használjuk fel. Ez intenzíven kutatott terület [2], mely azért lehet ígéretes mert sok anyagban a spinrelaxációs idő nagyságrendekkel hosszabb, mint a momentum-relaxációs idő, így kevesebb elektronnal továbbíthatunk egy bit információt hasonló biztonsággal, mint a hagyományos architektúrán.

A spintronikának logikai áramkörök építéséhez való felhasználásának lehetséges módja, hogy a spineket nem mágneses, hanem elektromos térrel próbáljuk manipulálni. Ennek egy lehetséges módja az ún. Datta-Das tranzisztor használata [3], ami spineket a spin-pálya kölcsönhatás segítségével manipulálja. Ez azért fontos mert miniatűr eszközökben lokális nagy elektromos teret könnyebben tudunk kelteni, mint lokális nagy mágneses teret.

Spin-polarizált áramot mágnesezett kontaktusokkal érhetünk el [4,5], a spinek olvasását pedig az óriás mágneses ellenállás jelensége alapján (GMR) tehetjük meg [6,7], aminek a

#### 1. FEJEZET. BEVEZETÉS ÉS MOTIVÁCIÓ

felfedezését 2007-ben Nobel-díjjal is jutalmazták.

Manapság a merevlemezekben az olvasófejek már egy spintronikai elv, az ún. óriás mágneses ellenállás (giant magnetoresistance, GMR) elvén működnek, de még a spintronikai elven működő logikai áramkörök még váratnak magukra. Nagy kihívás egyáltalán olyan anyagot találni, melynek a paraméterei minden szempontból megfelelnének a feladatnak.

Ígéretesnek tűnik azonban a grafén használata spintronikai eszközök gyártására, ugyanis abban sokkal nagyobb a maximális elektromos térre kirótt határ, így abban lehetőség van kollektív spin-áramok gerjesztésére.

Viszont az irodalomban igen szélsőségesek és ellentmondásosak a grafén spin-relaxációjának jóslatai [8–14], illetve a hagyományosnak tekintett Elliott-Yafet elmélet empirikus igazolásáról is megmutatom, hogy finomításra szorul.

Ezen kérdések motiválták a diplomamunkát. Ebben ismertetem a vezetési elektron spin-relaxációjának egy alapvető elméletét, illetve ezt alkalmazom a kétrétegű grafén spinrelaxációjának leírására félig töltéstől eltérő esetben. Valamint az Elliott Yafet elmélet empirikus megalapozását is megvizsgálom, és megmutatom, hogy bizonyos esetekben kiigazításra szorul. Az eredmények egy része publikálásra is került [15].

### 2. fejezet

### Elméleti összefoglaló

### 2.1. A spin-pálya kölcsönhatás

A spin-pálya kölcsönhatás egy relativisztikus effektus. Ismeretes, hogy az időfüggő klasszikus Schrödinger-egyenlet nem Lorentz-invariáns. Több Lorentz-invariáns kvantummechanikai egyenlet létezik szabad részecskére, pl. a Klein-Gordon vagy a Dirac-egyenletek. Elektronra a Dirac-egyenlet bizonyult érvényesnek, ami magát a spin jelenlétét is magyarázza. A Dirac-egyenlet:

$$(\hat{\gamma}^{\mu}\hat{\mathbf{p}}_{\mu} - m_0 c\hat{I})|\Psi\rangle = 0.$$
(2.1)

Az elektromágneses kölcsönhatást a négyes vektorpotenciállal vehetjük figyelembe Lorentzinvariáns módon. A Pauli-Schrödinger egyenlet illetve a spin-pálya kölcsönhatás mind a Dirac-Hamilton operátor kis (nemrelativisztikus) energiák szerinti sorfejtéséből adódik. A Dirac-Hamilton operátor elektronra:

$$\mathcal{H} = c\hat{\boldsymbol{\alpha}} \left( \hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A} \right) - e\phi + m_0 c^2 \hat{\beta}, \qquad (2.2)$$

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \gamma_0 \boldsymbol{\gamma} = \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix}, \qquad (2.3)$$

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} I_2 & 0\\ 0 & -I_2 \end{bmatrix}.$$
(2.4)

A sorfejtésből adódik a Pauli-Schrödinger egyenlet, illetve három azonos nagyságrendű tag. Egy kinetikus energia korrekció, a Darwin-tag illetve a spin-pálya kölcsönhatást leíró

tag. A kinetikus energia korrekció illetve a Darwin-tag nem tartalmaz spin-függő tagot, így a hatását elhanyagolhatjuk, illetve könnyedén belevehetjük a spin-független Hamiltonba. A spin-pálya kölcsönhatási Hamilton (SOC) alakja:

$$\mathcal{H}_{\rm SOC} = \frac{\hbar e}{4mc^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \boldsymbol{\sigma}.$$
 (2.5)

A spin-pálya kölcsönhatást egy különálló atomban legegyszerűbben hidrogén-szerű atom modellen vizsgálhatjuk.

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_{\rm e}} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze^2}{r} + \xi(r)\mathbf{ls},\tag{2.6}$$

$$\xi(r) = \frac{\hbar e}{2mc^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{\hbar}{8\pi\varepsilon_0 mc^2} \frac{Ze^2}{r^3}.$$
(2.7)

ahol **p** a kanonikus impulzus,  $\varepsilon_0$  a vákuum permittivitása, Z a mag töltésszáma, e az elektron töltése, r a magtól vett távolság, illetve **l** és **s** a dimenziótlan perdület és spin operátorok<sup>1</sup>.

Mivel a Hamilton-operátor kommutál  $s^2$ ,  $l^2$  és  $j^2 = (\mathbf{l} + \mathbf{s})^2$ -nel és ezek is kommutálnak egymással, így ezek jó kvantumszámok maradnak a spin-pálya kölcsönhatás mellett is. Ha első rendű perturbációként kezeljük a spin-pálya kölcsönhatást, akkor könnyen számolhatjuk az energia-felhasadást, hiszen a spin-pálya operátor térszög és spin-szerinti része kifejezhető megmaradó mennyiségekkel:

$$\mathbf{ls} = \frac{1}{2} \left( j^2 - l^2 - s^2 \right). \tag{2.8}$$

Így az energia felhasadás írható a következőképpen:

 $<sup>^1\</sup>hbar$ egységekben

$$E_{n,l,j} = E_{n,l,0} + \langle \Phi_{n,l,m} | \xi(r) \frac{1}{2} \left( j^2 - l^2 - s^2 \right) | \Phi_{n,l,m} \rangle,$$
(2.9)

$$\Phi_{n,l,m} = \frac{1}{r} R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\Omega), \qquad (2.10)$$

$$E_{n,l,j} = E_{n,l,0} + \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \int_0^\infty \xi(r) \left( R_{n,l}(r) \right)^2 \mathrm{d}r, \qquad (2.11)$$

$$\Delta E_{n,l} = E_{n,l,j=l+1/2} - E_{n,l,j=l-1/2} = \frac{1}{2} (2l+1) \int_0^\infty \xi(r) \left( R_{n,l}(r) \right)^2 \mathrm{d}r, \qquad (2.12)$$

ahol  $E_{n,l,j}$  jelöli a kvantumszámokhoz tartozó nívó energiáját,  $\Delta E_{n,l}$  pedig a nívó felhasadását a spin-pálya kölcsönhatás következtében.

Hidrogén-szerű hullámfüggvényekre analitikusan számolható a felhasadás:

$$\Delta E_{n,l} = \frac{1}{2} \frac{e^8}{(4\pi\varepsilon_0)^4 \hbar^4 c^2} \frac{Z^4}{n^3 l(l+1)}.$$
(2.13)

Látható, hogy a felhasadás mértéke erősen függ a mag töltésétől, ezt alátámasztják a mérési adatok. Azonban ezt a felhasadást a vezetési héjon lévő elektronokon lehet mérni, amikre már csak a törzselektronok által leárnyékolt tér hat, így a  $Z^4$ -es függés valamelyest mérséklődik. Hidrogén atomra a (2.13) képlet a kísérleti eredményekkel nagyon jó egyezéstad, amit a 2.1 ábra mutat.

### 2.2. A spin-relaxáció elmélete fémekben

### 2.2.1. Spin relaxáció Elliott-Yafet elmélete

Vezetési elektronok spin-relaxációját inverziós szimmetriával rendelkező anyagokban az Elliott-Yafet elmélet tárgyalja [17–19]. Az elmélet szerint a relaxációt vezetési elektronok és a rácspotenciál közti spin-pálya kölcsönhatása okozza az elektronok momentum-szórásán keresztül. Elliott cikkéből [17] kiindulva részletesen tárgyalom az elmélet alapjait. Az elmélet a spin-pálya kölcsönhatás hatását perturbatív módon veszi figyelembe, illetve elsőrendű időfüggő perturbációként veszi figyelembe az elektron-szórási folyamatokat.

#### Bevezetés

Egy elektron Hamilton-operátora:



2.1. ábra. A (2.13) képletbeli felhasadás és a spektroszkópiailag mért [16] értékek összevetése hidrogén atomra.

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V + \frac{\hbar}{4mc^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \qquad (2.14)$$

ahol V a periodikus potenciál,  $\sigma$  pedig a Pauli-mátrixokból képzett vektor. Az utolsó tag a spin-pálya Hamilton, melyet a továbbiakban SOC-nak rövidítek. Mivel a Hamiltonoperátor időtükrözésre invariáns és feltettük az inverziós szimmetriát, ezért az időtükrözés T és az inverzió I operátorok szorzatával degenerált Kramers-párok képezhetőek, melyek egymásra ortogonálisak. Mivel mind az időtükrözés, mind az inverzió tükrözi a hullámszámot, így egy adott hullámszámnál a sávok kétszeres spin szerinti degeneráltsága megmarad a SOC operátor figyelembevételével is.

$$\mathcal{H}\Psi^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}\Psi^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$
  

$$\widetilde{\Psi}^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) := TI\Psi^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$
  

$$\mathcal{H}\widetilde{\Psi}^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}\widetilde{\Psi}^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$
(2.15)

Ebből látható, hogy elkerülhetetlen figyelembe venni a szomszédos sávok hatását.

#### A spin-pálya operátor vizsgálata

Elliott sok nagy közelítést tesz egy végső, könnyen értelmezhető eredmény érdekében. Az első nagy közelítés, hogy a rácspotenciált egy Wigner-Seitz cellán belül centrálisnak feltételezi, így a spin-pálya operátor egy cellán belül jelentősen egyszerűsödik. Ahhoz, hogy ezt egzaktul tudjuk kezelni, vezessük be a Wannier-függvényeket, illetve bontsuk fel a potenciált cellánként. A Wannier függvények:

$$\Phi_{\mathbf{k}}^{s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} w_{\mathbf{k}}^{s}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}).$$
(2.16)

A potenciált írhatjuk egyszerűsített alakban:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} V_{\rm c}(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \qquad (2.17)$$

ahol  $V_c = 0$  a Wigner-Seitz cellán kívül. Erről tesszük fel, hogy közel centrális (legalábbis abban a tartományban, ahol a Wannier-függvényekkel átfed). Ezzel a potenciállal az SOC Hamilton-operátor:

$$\mathcal{H}_{\rm SOC} = \frac{\hbar}{4mc^2} \sum_{\mathbf{R}} (\nabla V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}.$$
 (2.18)

Egy Bloch-függvényre hattatva:

$$\mathcal{H}_{\rm SOC}\Phi^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{4mc^{2}} \sum_{\mathbf{R}} (\nabla V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}'} w^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$$

$$= \frac{\hbar}{4mc^{2}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial V_{c}}{\partial r} \mathbf{l}\right) |_{\mathbf{r} - \mathbf{R}} w^{s}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}.$$
(2.19)

Praktikusan a Wannier-függvényekre használható a szokásos L-S operátor:

$$\frac{\hbar}{4mc^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \xi(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}.$$
(2.20)

Mivel nekünk később csak két közeli sávban lévő mátrixeleme érdekel  $\mathcal{H}_{SOC}$ -nak, ezért érdemes bevezetni egy további paramétert:

$$\langle \phi_s(\mathbf{k}) | \mathcal{H}_{\text{SOC}} | \phi_t(\mathbf{k}') \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle w^s_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | \xi(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} | w^t_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \rangle,$$
  
=  $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \lambda \langle w^s_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} | w^t_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \rangle,$  (2.21)

ahol  $\lambda$  a sugár szerinti integrálásból adódik, feltéve, hogy a Wannier-függvény szorzat alakban írható a magtól való távolság és a térszög függvényeben (Az eddigi erős feltevésekből ez már adódik). Ha csak két sáv között vizsgáljuk a spin-pálya kölcsönhatást, akkor az alábbi egyszerű formula adódik:

$$\mathcal{H}_{\rm SOC} = \lambda \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}. \tag{2.22}$$

#### Spinpálya szerinti perturbációszámítás

Az SOC operátor hatását elsőrendű perturbációként veszem figyelembe. Mivel a kezdeti állapotok degeneráltak, így degenerált perturbációszámítást kell végezni. Vehetek olyan bázist, ahol  $\mathbf{l}_{\mathbf{k}}^{s} \| z$ , így  $\mathcal{H}_{\text{SOC}}$  a kérdéses blokkban éppen diagonális lesz. A perturbálatlan teljes hullámfüggvények:

$$\Psi_{\mathbf{k},\sigma}^{s}(\mathbf{r}) = \Phi_{\mathbf{k}}^{s}(\mathbf{r})\chi_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{R}} w_{\mathbf{k}}^{s}(\mathbf{r} - \mathbf{R})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R})\chi_{\sigma},$$
(2.23)

A perturbált hullámfüggvények:

$$\widetilde{\Psi}^{s}_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}) = \Psi^{s}_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{k}',\sigma'} \frac{\langle \Psi^{t}_{\mathbf{k}',\sigma'} | \mathcal{H}_{\text{SOC}} | \Psi^{s}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle}{\Delta} \Psi^{t}_{\mathbf{k}',\sigma'}(\mathbf{r}), \qquad (2.24)$$

$$\widetilde{\Psi}^{s}_{\mathbf{k},\uparrow} = \Psi^{s}_{\mathbf{k},\uparrow}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2\Delta} \lambda \left( \langle w^{t}_{\mathbf{k}} | l_{z} | w^{s}_{\mathbf{k}} \rangle \Psi^{t}_{\mathbf{k},\downarrow} + \langle w^{t}_{\mathbf{k}} | l_{x} + i l_{y} | w^{s}_{\mathbf{k}} \rangle \Psi^{t}_{\mathbf{k},\downarrow} \right).$$
(2.25)

 $\Psi^s_{{\bf k},\downarrow}\text{-ra}$ az eredmény hasonlóan számolható.

#### Spin-relaxáció számítása

A spin-relaxáció számításához felteszem, hogy az elektron momentumszórása modellezhető egy esetleg időfüggő  $\mathcal{H}_{int}$  Hamilton-operátorral, ami tisztán térszerű, nem tartalmaz spinfüggő kölcsönhatást. A spinrelaxációt az okozza, hogy a perturbált állapotok már nem tiszta spin állapotok, így momentumszórás révén a spin is változhat.

Ebből az operátorból könnyen származtathatjuk az átlagos momentum-szórási időt:

$$\frac{1}{\tau} \propto \left| \langle \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\uparrow} | \mathcal{H}_{\text{int}} | \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \right|^2 + \left| \langle \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\downarrow} | \mathcal{H}_{\text{int}} | \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \right|^2, \qquad (2.26)$$

ahol a második tag elhanyagolható. A spinrelaxációt leíró taghoz csak a különböző spinek közötti átmenetet kell vizsgáljuk:

$$\frac{1}{T_1} \propto \left| \langle \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\downarrow} | \mathcal{H}_{\text{int}} | \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \right|^2, \qquad (2.27)$$

A perturbált hullámfüggvények a (2.25) egyenletből egyszerűsítve írhatóak:

$$\widetilde{\Psi}^{s}_{\mathbf{k},\uparrow}(\mathbf{r}) = a_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\chi_{\uparrow} + b_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\chi_{\downarrow}.$$
(2.28)

Az időtükrözés és inverzió operátorokat hattatva könnyen megkaphatjuk a másik perturbált hullámfüggvényt:

$$\widetilde{\Psi}^{s}_{\mathbf{k},\downarrow}(\mathbf{r}) = a^{*}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\chi_{\downarrow} - b^{*}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\chi_{\uparrow}.$$
(2.29)

Első rendben  $b_{\mathbf{k}} \ll a_{\mathbf{k}}$ , így ahol az arányuk másodrenben megjelenik, az a tag elhanyagolható. Így a relaxációs idők aránya első rendben:

$$\frac{T_1}{\tau} \propto \frac{\left| \langle \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\downarrow} | \mathcal{H}_{\text{int}} | \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \right|^2}{\left| \langle \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\uparrow} | \mathcal{H}_{\text{int}} | \widetilde{\Psi}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \right|^2} \propto \left( \frac{\lambda}{\Delta} \right)^2.$$
(2.30)

#### g-faktor eltolódás számítása

A g-faktor eltolódás jelensége, hogy a Zeeman-effektus Hamilton operátorban található elektron g-faktor effektíve megváltozik a szabad elektron esetéhez képest ( $g_e \approx 2.0023$ ). Az Elliott-Yafet elméletben a spin-pálya kölcsönhatás hozza létre az effektust.

A Zeeman-Hamilton operátor:

$$\mathcal{H}_{\rm Z} = -\mu_{\rm B} \mathbf{B} (\mathbf{l} + g_{\rm e} \mathbf{s}). \tag{2.31}$$

Felvehetjük a koordináta-rendszerünk z irányát a mágneses tér irányába:

$$\mathcal{H}_{\rm Z} = -\mu_{\rm B} B(l_z + g_{\rm e} s_z). \tag{2.32}$$

Ha nem vennénk figyelembe a spin-pálya kölcsönhatást, akkor az állapotok tiszta spin állapotok lennének. Így ha olyan állapotokat tekintünk, melyek csak a spin állapotukban különbözik, akkor azok a Zeeman-effektus hatására pontosan  $\Delta E = g_{\rm e} \mu_{\rm B} B$ távolságra hasad fel a degenerációjuk.

Ha a spin-pálya kölcsönhatást elsőrendű perturbációként vesszük figyelembe, akkor ez a felhasadás főként azért változik, mert a perturbált állapotokban  $l_z$ -nek lesz 0-tól különböző várható értéke.

$$\langle \widetilde{\uparrow} | l_z | \widetilde{\uparrow} \rangle = \alpha, \tag{2.33}$$

$$\langle \widetilde{\downarrow} | l_z | \widetilde{\downarrow} \rangle = -\alpha. \tag{2.34}$$

Ekkor az energia különbség:

$$\Delta E = g_{\rm e}\mu_{\rm B}B + 2\alpha\mu_{\rm B}B = (g_{\rm e} + \Delta g)\mu_{\rm B}B, \qquad (2.35)$$

$$\Delta E = g_{\rm e}\mu_{\rm B}B + 2\alpha\mu_{\rm B}B = (g_{\rm e} + \Delta g)\mu_{\rm B}B, \qquad (2.35)$$
$$\Delta g = 2\langle \tilde{\uparrow} | l_z | \tilde{\uparrow} \rangle. \qquad (2.36)$$

A pontos számításhoz a (2.25) egyenletben számolt perturbált hullámfüggvényeket használom:

$$\Delta g = 2 \langle \widetilde{w}^s_{\mathbf{k},\uparrow} | l_z | \widetilde{w}^s_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = \frac{2\lambda}{\Delta} | \langle w^t_{\mathbf{k},\uparrow} | l_z | w^s_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle |^2.$$
(2.37)

Mivel  $l_z$  a dimenzió nélküli perdület operátor, ha feltesszük, hogy a mátrixelem 1 nagyságrendjébe esik, úgy:

$$\Delta g \approx \frac{\lambda}{\Delta}.\tag{2.38}$$

### 2.2.2. Az empirikus Beuneu-Monod összefüggés

Monod és Beuneu empirikusan igyekezett megerősíteni az Elliott-Yafet elméletet [20]. Több elemi fémen végzett kísérlet adatait összegyűjtve összeskálázták az összeillő paramétereket az Elliott-Yafet elmélet alapján, így egy univerzális függvényt kaptak.

Az Elliott-Yafet összefüggések:

$$\frac{1}{T_1} = \alpha_1 \left(\frac{\lambda}{\Delta}\right)^2 \frac{1}{\tau},\tag{2.39}$$

$$\Delta g = \alpha_2 \frac{\lambda}{\Delta}.\tag{2.40}$$

Itt ugyan  $\tau$  az elektron-momentumok átlagos élettartama, de magas hőmérsékleten  $(T > T_{\rm D})$ , ahol  $T_{\rm D}$  a Debye-hőmérséklet) a transzport momentum relaxációs idő jól közelíti  $\tau_{\rm tr}$ . Alacsony hőmérsékleten ugyan  $\tau \propto T^{-3}$  és  $\tau_{\rm tr} \propto T^{-5}$ , de Yafet megmutatta, hogy alacsony hőmérsékletre a spinrelaxáció is  $T^{-5}$  függést mutat.  $1/\tau_{\rm tr}$  közvetlen összefüggésben van az anyag  $\rho$  fajlagos ellenállásával:

$$\frac{1}{\tau_{\rm tr}} = \varepsilon_0 \omega_{\rm pl}^2 \rho, \qquad (2.41)$$

ahol  $\varepsilon_0$  a vákuum permittivitása, illetve  $\omega_{\rm pl}$  a plazmafrekvencia. Igy közvetlen összefüggést írhatunk fel a spin-relaxációs idő, az ellenállás és a  $\lambda$  spin-pálya paraméter között.

$$\frac{1}{T_1} = \alpha_1 \left(\frac{\lambda}{\Delta}\right)^2 \varepsilon_0 \omega_{\rm pl}^2 \rho.$$
(2.42)

A spin-relaxációs időt vezetési-elektron ESR (CESR) mérések eredményeiből vették. Egy ilyen mérés során egy tömbös anyag mágneses szuszceptibilitás képzetes részét lehet felvenni egy adott mikrohullámú frekvencián a mágnes tér függvényében. A szuszceptibilitásban rezonancia-csúcs jelenik meg a Zeeman-átmenetnek megfelelő helyen, melynek vonalszélességéből lehet következtetni a spin-relaxációs időre.

$$\frac{1}{T_1} = |\gamma| \Delta B, \tag{2.43}$$

$$\frac{\gamma}{2\pi} = -28 \,\mathrm{GHz/T.} \tag{2.44}$$

ahol  $\gamma$  az elektron giromágneses együtthatója,  $\Delta B$  pedig a rezonancia-csúcs szélessége.

Mivel hőmérséklet függő mérési eredmények elérhetőek voltak, ezért az ellenállások hőmérsékleti-függését is figyelembe lehet venni. Ezt a legkönnyebben a fémek ellenállásának Grüneisen-elméletével tehetjük meg.

$$\frac{1}{\tau_{\rm tr}} = {\rm const} \cdot \frac{T}{T_{\rm D}} G_1\left(\frac{T_{\rm D}}{T}\right),\tag{2.45}$$

$$G_1(x) = 4x^{-4} \left[ 5 \int_0^x \frac{z^4 dz}{e^z - 1} - \frac{x^5}{e^x - 1} \right].$$
 (2.46)

Mindent összevetve írhatjuk:

$$\frac{1}{2}\Delta B\left(\frac{\Delta}{\lambda}\right)^2 = \text{const}\frac{T}{T_{\rm D}}G_1\left(\frac{T_{\rm D}}{T}\right).$$
(2.47)

Így ha a bal oldalt  $\frac{T}{T_{\rm D}}$  függvényében ábrázoljuk, úgy egy univerzális függvényt kell kapjunk. Alkáli fémekre ezt a feltételezést a kísérleti eredmények összevetése megerősíti. Megjegyzendő azonban, hogy a fenti számolásokban több apró hiba található, amelyek a 3.1 fejezetben pontosításra kerülnek.



2.2. ábra. Az összeskálázott mért értékek Beuneu és Monod cikkéből [21]. Az eredeti cikkbeli  $\Delta E$ -t mi  $\Delta$ -val jelöljük, illetve  $\Delta H$ -t  $\Delta B$ -vel.

### 2.3. Spin-pálya kölcsönhatás kétrétegű grafénban

### 2.3.1. Kétrétegű grafén szoros kötésű közelítésbeli felírása

A szakdolgozatom másik részében az ún. kettős v. kétrétegű grafénbeli spin-relaxációt vizsgálom a spin-pálya kölcsönhatás irodalomból vett alakja [22] ismeretében az Elliott-Yafet elmélet keretén belül.

A grafén elektron szerkezetét a szén atomokon lévő delokalizált  $p_z$  pályák szoros kötésű (tight-binding) közelítéséből számolhatjuk [23]. Tudjuk, hogy komolyabb elméletet igénylő számolás nem szükséges félig töltés esetén, az elektron-elektron kölcsönhatás alig észrevehető alakváltozást okoz a gerjesztési spektrumban. A szoros kötésű közelítésben a 2.3a ábrán látható szomszédságokat vesszük figyelembe, az átfedési integrálokat [22]-ből vettem. Egyelőre eltekintünk a spin-pálya kölcsönhatástól, a spinmentes Hamilton-operátort írjuk le.



2.3. ábra. Az (a) ábra a különböző átfedési integrál (hopping) tagokat mutatja a kétrétegű grafénen belül. A (b) ábrán a négyatomos bázist, illetve a bázisvektorokat láthatjuk felülnézetből.

Figyelembe veendő, hogy a szén atomok nem egészen ekvivalensek, így különböző kötési energiát feltételezhetünk az  $A_1$  és  $B_2$  szén atomokon, mint az  $A_2$  és  $B_1$ -eken. Az energia nulla szintjét úgy választom, hogy az  $A_2$  és  $B_1$  atomokon a kötési energia 0 legyen. Így a másik két típusú szén atomon a kötési energiát  $\Delta$ -nak választva az ebből adódó energia járulék másodkvantált formalizmusban:

$$\mathcal{H}_{\Delta} = \Delta \sum_{\mathbf{R}} \left( a_{1\mathbf{R}}^{\dagger} a_{1\mathbf{R}} + b_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{2\mathbf{R}} \right).$$
(2.48)

A különböző átfedési integrálokból adódó járulékok:

$$\mathcal{H}_{\gamma_0} = \gamma_0 \sum_{\mathbf{R}} \left( a_{1\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}} + a_{1\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_1} + a_{1\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_2} + a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{2\mathbf{R}} + a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{2\mathbf{R}-\mathbf{a}_1} + a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{2\mathbf{R}-\mathbf{a}_2} \right) + \text{h.c}, \qquad (2.49)$$

$$\mathcal{H}_{\gamma_1} = \gamma_1 \sum_{\mathbf{R}} a_{1\mathbf{R}}^{\dagger} b_{2\mathbf{R}} + \text{h.c}, \qquad (2.50)$$

$$\mathcal{H}_{\gamma_3} = \gamma_3 \sum_{\mathbf{R}} \left( a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_1} + a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_2} + a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2} \right) + \text{h.c.}$$
(2.51)

$$\mathcal{H}_{\gamma_4} = \gamma_4 \sum_{\mathbf{R}} \left( b_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}} + b_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_1} + b_{2\mathbf{R}}^{\dagger} b_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_2} + a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} a_{1\mathbf{R}} + a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} a_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_1} + a_{2\mathbf{R}}^{\dagger} a_{1\mathbf{R}-\mathbf{a}_2} \right) + \text{h.c.}$$

$$(2.52)$$

A szoros kötésű Hamilton-operátort Wannier-transzformációval blokk-diagonális alakra hozhatjuk. Ebben az alakban a Hamilton-operátor hullámszámonként független  $4 \times 4$ -es mátrixokra bomlik szét. A Wannier-transzformáció:

$$a_{\mathbf{R}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} a_{\mathbf{k}},\tag{2.53}$$

ahol a egy tetszőleges eltüntető operátor. A kötési energiákból adódó Hamilton a Wannier-transzformált keltő és eltüntető operátorokkal:

$$\mathcal{H}_{\Delta} = \Delta \sum_{\mathbf{k}} \left( a_{1\mathbf{k}}^{\dagger} a_{1\mathbf{k}} + b_{2\mathbf{k}}^{\dagger} b_{2\mathbf{k}} \right).$$
(2.54)

A különböző szoros kötésű tagok járulékai:

$$\mathcal{H}_{\gamma_0} = \gamma_0 \sum_{\mathbf{k}} \underbrace{\left(1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}\right)}_{f(\mathbf{k})} \left(a_{1\mathbf{k}}^{\dagger}b_{1\mathbf{k}} + a_{2\mathbf{k}}^{\dagger}b_{2\mathbf{k}}\right) + \text{h.c.}$$
(2.55)

$$\mathcal{H}_{\gamma_1} = \gamma_1 \sum_{\mathbf{k}} a_{1\mathbf{k}}^{\dagger} b_{2\mathbf{k}} + \text{h.c}, \qquad (2.56)$$

$$\mathcal{H}_{\gamma_3} = \gamma_3 \sum_{\mathbf{k}} \underbrace{\left(e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}\right)}_{g(\mathbf{k})} a_{2\mathbf{k}}^{\dagger} b_{1\mathbf{k}} + \text{h.c.}$$
(2.57)

$$\mathcal{H}_{\gamma_4} = \gamma_4 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) (b_{2\mathbf{k}}^{\dagger} b_{1\mathbf{k}} + a_{2\mathbf{k}}^{\dagger} a_{1\mathbf{k}}) + \text{h.c.}$$
(2.58)

A teljes Hamilton-operátor rövidebb alakban írható:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} a_{1\mathbf{k}}^{\dagger} & b_{1\mathbf{k}}^{\dagger} & a_{2\mathbf{k}}^{\dagger} & b_{2\mathbf{k}}^{\dagger} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{H}}_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} a_{1\mathbf{k}} & b_{1\mathbf{k}} & a_{2\mathbf{k}} & b_{2\mathbf{k}} \end{bmatrix}^{T}, \qquad (2.59)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{H}}}_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} \Delta & \gamma_0 f(\mathbf{k}) & \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) & \gamma_1 \\ \gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & 0 & \gamma_3 g^*(\mathbf{k}) & \gamma_4 f^*(\mathbf{k}) \\ \gamma_4 f(\mathbf{k}) & \gamma_3 g(\mathbf{k}) & 0 & \gamma_0 f(\mathbf{k}) \\ \gamma_1 & \gamma_4 f(\mathbf{k}) & \gamma_0 f^*(\mathbf{k}) & \Delta \end{bmatrix}.$$
(2.60)

A $\underline{\mathbb{H}}_{\mathbf{k}}$ önadjungált, unitér mátrixszal diagonalizálható.

$$\underline{\mathbf{H}}_{\mathbf{k}} = \underline{\mathbf{U}}_{\mathbf{k}} \underline{\mathbf{D}}_{\mathbf{k}} \underline{\mathbf{U}}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \qquad (2.61)$$

ahol ugyanezzel az  $\underline{\underline{U}}$  mátrixszal a keltő és eltüntető operátorok transzformálhatóak, az így kapott operátorok pedig szintén fermion keltő és eltüntető operátorok lesznek.

$$\begin{bmatrix} c_{1\mathbf{k}} & c_{2\mathbf{k}} & c_{3\mathbf{k}} & c_{4\mathbf{k}} \end{bmatrix}^T = \underline{\underline{\mathbf{U}}}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \begin{bmatrix} a_{1\mathbf{k}} & b_{1\mathbf{k}} & a_{2\mathbf{k}} & b_{2\mathbf{k}} \end{bmatrix}^T.$$
(2.62)

Így a Hamilton-operátor teljesen diagonális:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} c_{1\mathbf{k}}^{\dagger} & c_{2\mathbf{k}}^{\dagger} & c_{3\mathbf{k}}^{\dagger} & c_{4\mathbf{k}}^{\dagger} \end{bmatrix} \underline{\mathbf{D}}_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} c_{1\mathbf{k}} & c_{2\mathbf{k}} & c_{3\mathbf{k}} & c_{4\mathbf{k}} \end{bmatrix}^{T}, \qquad (2.63)$$

$$=\sum_{\mathbf{k}}\varepsilon_{1\mathbf{k}}c_{1\mathbf{k}}^{\dagger}c_{1\mathbf{k}}+\varepsilon_{2\mathbf{k}}c_{2\mathbf{k}}^{\dagger}c_{2\mathbf{k}}+\varepsilon_{3\mathbf{k}}c_{3\mathbf{k}}^{\dagger}c_{3\mathbf{k}}+\varepsilon_{4\mathbf{k}}c_{4\mathbf{k}}^{\dagger}c_{4\mathbf{k}},\qquad(2.64)$$

ahol  $\varepsilon_{\alpha \mathbf{k}}$  a  $\underline{\mathbf{D}}_{\mathbf{k}}$  mátrix diagonálisában lévő elemek. Ebből rögtön látszik, hogy pontosan milyen lesz a sávszerkezetünk. A spektrum numerikusan számolható (elvileg analitikusan is, de a negyedfokú egyenlet megoldása nem segít a szemléltetésben). Az ábrázolt spektrum a 2.4 ábrán látható.

A (2.60) mátrix valamelyest eltér a [22] cikkbeli mátrixtól, azonban a kettő között csak egy unitér transzformációval lehet áttérni.



2.4. ábra. Az (a) ábrán a  $\Lambda$  és a K pont közti metszete látható a spektrumnak. A (b) ábrán láthatjuk a teljes spektrumot és a K és K' pontbeli degenerációkat.

### 3. fejezet

### Eredmények és diszkusszió

### 3.1. A Beuneu-Monod skálázás javítása

Beuneu és Monod sikeresen megerősítette a Elliott-Yaffet elmélet jóslatát, de számolásaikban több apróbb hibát vétettek.

- $\lambda$  spin-pálya paraméternek közvetlenül a spektroszkópiai felhasadást vették.
- Figyelmen kívül hagyták a (2.47) képletbeli konstans anyagtól való függését.

Az Elliott-Yaffett elméletben láthattuk, hogy a  $\lambda$  paraméter nem más, mint a SOC Hamilton radiális része kiintegrálva két sávbeli Wannier-függvényekkel. Ezzel szemben Beuneu és Monod a spektroszkópiai felhasadásokat használta, melyek az azonos sávbeli mátrixelemmel arányosak. Ezek az értékek általában nem egyeznek meg, de feltehetjük, hogy nagyságrendileg nem vétünk nagy hibát ezek használatával. Érdemesebb ezeket ismeretleneknek tekinteni, melyeket a mérési adatok ismeretében meghatározhatunk.

Ahhoz, hogy a (2.47) képletbeli konstans anyagfüggését vizsgáljuk, fel kell írjuk a pontos Grüneisen-formulát:

$$\frac{1}{\tau_{\rm tr}} = \frac{2\pi k_{\rm B} T \lambda_{\rm tr}}{\hbar} G\left(\frac{T}{T_{\rm D}}\right),\tag{3.1}$$

$$G(x) = \int_0^1 \mathrm{d}u \frac{u^5}{x^2 \sinh^2\left(u/(2x)\right)}.$$
(3.2)

Megjegyzendő, hogy (3.2) ekvivalens a (2.46) képlettel, csupán a konstans szorzót pontosítja.

A (3.2), (2.43) és (2.39) egyenletekből:

$$\Delta B \cdot \left(\frac{\Delta}{\lambda}\right)^2 = \alpha_1 T_{\rm D} \lambda_{\rm tr} \frac{2\pi k_{\rm B}}{\gamma \hbar} F\left(\frac{T}{T_{\rm D}}\right),\tag{3.3}$$

$$F(x) = xG(x), \qquad (3.4)$$

ahol  $\lambda_{tr}$  az elektron-fonon kölcsönhatást jellemző paraméter (ez a paraméter független a spin-pálya kölcsönhatást jellemző  $\lambda$  paramétertől). Látható, hogy az eredetileg univerzálisnak gondolt (2.47) bal oldala valójában anyagtól függő paraméterektől függ, így azokkal is le kell osztanunk, hogy univerzális függvényt kapjunk  $T/T_{\rm D}$  függvényében. Az egyszerűség kedvéért  $\alpha_1 \approx 1$ -et feltételezek. A különböző alkáli fémekre jellemző adatokat a 3.1 táblázatban találjuk.

	$\lambda_{ m tr}$	$T_{\rm D}[{ m K}]$	atomi $(\lambda/\Delta)^2$	illesztett $(\lambda/\Delta)^2$
Na	0.14	158	$2.73 \cdot 10^{-5}$	$3.81 \cdot 10^{-6}$
Κ	0.11	91	$2.06\cdot 10^{-4}$	$8.99\cdot 10^{-5}$
$\operatorname{Rb}$	0.15	56	$3.16\cdot10^{-3}$	$2.96\cdot10^{-3}$
$\mathbf{Cs}$	0.16	38	$1.91 \cdot 10^{-2}$	$3.08 \cdot 10^{-2}$

3.1. táblázat. Különböző alkáli atomok elektron-fonon  $\lambda$  paramétere, Debye-hőmérséklete, illetve spektroszkópiából nyert  $\lambda/\Delta$  paramétere [19]. Az utolsó oszlopban a 3.2 ábrán látható univerzális függvényre illeszkedő  $\lambda/\Delta$  értékeket ábrázoltam.

Ha elvégezzük az osztást a 2.2 látható adatokkal, akkor a 3.2 ábrán látható adatsorokat kapjuk az alkáli fémekre. Látható, hogy ezek igen eltérnek az univerzálisnak mondott függvénytől. Ez annak tudható be, hogy az atomi felhasadásokból kapott  $\lambda$  értékeket használtuk. Kaphatunk egy másik  $\lambda$  értéket, ha az adatsorokat az univerzális függvényre illesztjük. Az illesztett  $\lambda$  értékeket a 3.1 utolsó oszlopában láthatjuk. Azonban feltettük, hogy  $\alpha_1 \approx 1$ , ami még igen erős feltevés és nagy bizonytalanságot okozhat a mátrixelemben.

Megállapítottuk, hogy a  $\lambda$  paraméterek ugyan egy nagyságrendbe esnek az atomi energianívók felhasadásával, általában nem egyenlóek velük. Ezt a (2.13) egyenlet alapján könnyen megvizsgálhatjuk Hidrogén-szerű atomra. A  $\lambda$  paraméterhez egyszerűen csak a radiális részét kell kiintegrálni a hullámfüggvényeknek, illetve a spin-pálya operátornak:

$$\lambda_{n,l;n',l'} = \int_0^\infty R_{n,l}(r) R_{n',l'}(r) \xi(r) \mathrm{d}r.$$
 (3.5)



3.1. ábra. A kísérleti  $\Delta B \cdot (\Delta/\lambda)^2 / \lambda_{\rm tr} T_{\rm D}$  ábrázolva $T/T_{\rm D}$  függvényében. A folytonos vonal az univerzális  $2\pi k_{\rm B} / \gamma \hbar F(T/T_{\rm D})$  függvényt jelöli.



3.2. ábra. Az atomi spektrumokból származtatott és az adatsorokra illesztett $\lambda/\Delta$  értékek.

Megjegyzendő, hogy ugyan  $\lambda$  ha nem 0 értéket ad, addig a térszög szerinti rész integrálja nullázhatja a mátrixelemet. Konkrét pályákra kiszámolva egyértelműen látszik, hogy ezek a  $\lambda$  paraméterek nem egyeznek a spketroszkópiában mérhető felhasadásokkal (3.3).



3.3. ábra. Összehasonlítás a  $\lambda$  paraméterek illetve az atomi felhasadások között.

### 3.2. Spin-relaxáció vizsgálata kétrétegű grafénban

### 3.2.1. Grafén csoportelméleti tárgyalása

Ugyan a [22] cikkben találunk egy részletekbe menő tárgyalást a kétrétegű grafén szimmetriáiról, illetve annak a spin-pálya operátorra való következményeiről, de az eredményeik reprodukálása során egy olyan módszert sikerült kifejlesztenem ami általánosabban használható más szituációban is. A spin-pálya operátor Neumann-elvet használunk, miszerint a spin-pálya operátor alakja nem változhat szimmetria-transzformáció hatására. Ezt általában könnyen számolhatjuk olyan esetben, amikor csak unitér szimmetria transzformációk vannak, hiszen ekkor a szimmetria transzformációk unitér mátrixként reprezentálhatók. Csupán ennek a reprezentációnak az irreducibilis felbontásában kell megtalálnunk az invariáns ( $A_1$ -hez tartozó) alteret, melyben az invariáns mennyiségünknek – jelen esetben a spin-pálya operátornak – tartózkodnia kell.

Azonban amennyiben vannak anti-unitér szimmetriáink, mint például az időtükrözés vagy az adjungálás, akkor ezeket nem tudjuk unitér mátrixként, vagy egyáltalán mátrixként reprezentálni.

A következőkben szó lesz arról, hogyan lehet mégis ezeket az operátorokat együtt kezelni az unitér szimmetria transzformációkkal valós reprezentációra való áttéréssel.

#### K pontbeli szimmetriák és degeneráció

A kétrétegű grafén alapvetően magas szimmetriákkal rendelkezik. A rácsszerkezet  $D_{3d}$  szimmetriájú, amit a 3.4 ábrán figyelhetünk meg.



3.4. ábra. Megfigyelhetjük, hogy <br/>a $D_{3d}$ szimmetria transzformációi illeszkednek a kétrétegű grafén rácsára.

Azonban ha a különböző hullámfüggvényeket nézzük, akkor ez a szimmetria csak a  $\Gamma$  pontban marad meg, a K pontban viszont egyszerűsödik. Érdekes módon a K-beli hullámfüggvények által kifeszített altérnek még igen magas a szimmetriája. Ez konkrétan a  $D_3$  pontcsoporttal írható le, melynek generátorai a  $C_3$  és  $C'_2$  forgatások. A  $C_3$  forgatás 120°-os forgatást jelent, míg a  $C'_2$  forgatás egy az előbbire merőleges tengelyre való 180°-os forgatást. Ha egy K-beli hullámfüggvényre a  $C_3$  vagy  $C'_2$  szimmetria transzformációkkal hatunk, abból ismét K-beli hullámfüggvény lesz. Hogy a hullámfüggvény pontosan hogyan transzformálódik, azt számolhatjuk:

Írjunk fel egy K-beli hullámfüggvényt:

$$\Phi_K = \begin{bmatrix} \lambda_{A_1} & \lambda_{B_1} & \lambda_{A_2} & \lambda_{B_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_{K,A_1} & \Phi_{K,B_1} & \Phi_{K,A_2} & \Phi_{K,B_2} \end{bmatrix}^T, \quad (3.6)$$

$$\Phi_{K,\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} p_z(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d}_\alpha), \qquad (3.7)$$

ahol  $p_z$  az atomi pálya,  $\alpha$  a bázison belüli indexelés illetve  $\mathbf{d}_{\alpha}$  a bázison belüli rácsvektor.

Ha egy ilyen mátrixra hatunk  $C_3$ -mal vagy  $C'_2$ -vel, úgy ismét egy K-beli hullámfüggvényt kapunk. Ezt könnyen láthatjuk, ha csak a Bravais-rácsot rajzoljuk fel. Ekkor mindkét transzformáció során az azonos fázishoz tartozó rácspontok egymásba mennek, a fázisviszonyok csak a bázison belül változnak. Ezek a transzformációk a  $\lambda$  vektorra hatva  $4 \times 4$ -es mátrixokként reprezentálódnak. A mátrixokat, illetve a karaktereket kiszámolva az irreducibilis felbontás kiszámolható, megkapjuk, hogy hány degenerált állapot lesz a K pontban csupán a pályamenti hullámfüggvényeket figyelembe véve.

$$C_3\Phi_K = C_3(\boldsymbol{\lambda}\Phi) = \boldsymbol{\lambda}C_3\Phi = \boldsymbol{\lambda}'\Phi, \qquad (3.8)$$

$$C_3 \Phi_{K,A_1} = \Phi_{K,A_1}, \tag{3.9}$$

$$C_3 \Phi_{K,B_1} = e^{-i2\pi/3} \Phi_{K,B_1}, \tag{3.10}$$

$$C_3 \Phi_{K,A_2} = e^{i2\pi/3} \Phi_{K,A_2},\tag{3.11}$$

$$C_3 \Phi_{K,B_2} = \Phi_{K,B_2},\tag{3.12}$$

$$\boldsymbol{\lambda}' = \underline{\underline{\mathbf{C}}}_3 \boldsymbol{\lambda}, \tag{3.13}$$

$$\underline{\underline{\mathbf{C}}}_{3} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i2\pi/3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i2\pi/3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$
(3.14)

$$\chi(C_3) = 1. \tag{3.15}$$

Hasonlóan kaphatjuk meg $C_2'$ reprezentációját, viszont arra ügyelni kell, hogy $C_2'$  forgatásra a $p_z$ pályák átfordulnak a-1-szeresére.

$$\underline{\underline{C}}_{2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\chi(C_{2}) = 0.$$
(3.16)
(3.17)

A  $D_3$  csoport karaktertáblája:

	E	$2C_3$	$3C'_2$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
E	2	-1	0

3.2. táblázat.  $D_3$  karaktertáblája.

A 3.2 karaktertáblából és a számolt karakterekből az irreducibilis felbontása a reprezentációnak  $A_1 + A_2 + E$ , melyek közül az E kétdimenziós. Így a 4 dimenziós K-beli altérben van egy 2 dimenziós degenerált altér. Ez magyarázza meg a K pontbeli, jól megfigyelhető degenerációt. Eddig csupán a spin nélküli hullámfüggvényeket vizsgáltuk.

#### A spin-pálya operátor alakja

Tudjuk, hogy a spin-pálya operátor rendelkezik a fenti szimmetriákkal. Továbbá mivel rácsperiodikus, a spin-pálya operátor nem keveri a momentumokat sem. Azonban mivel tartalmaz spinoperátort, így a továbbiakban a teljes, spinnel rendelkező hullámfüggvényeket kell vizsgáljuk. Nem tekinthetünk el attól sem, hogy a forgatások a spin állapotokat is változtatják.

Az új bázis  $\Psi_{\mathbf{K},A_1,\uparrow}, \Psi_{\mathbf{K},B_1,\uparrow}, \Psi_{\mathbf{K},A_2,\uparrow}, \Psi_{\mathbf{K},B_2,\uparrow}, \Psi_{\mathbf{K},A_1,\downarrow}, \Psi_{\mathbf{K},B_1,\downarrow}, \Psi_{\mathbf{K},A_2,\downarrow}$  és  $\Psi_{\mathbf{K},B_2,\downarrow}$  függvényekből áll. Ezeket egy  $\Psi_{\mathbf{K}}$  vektorba összefoglalva egy általános **K** hullámszámú hullámfüggvény  $\lambda \Psi_{\mathbf{K}}$  alakban írható. A spinpálya operátor hatása  $\lambda' = \underline{\mathbf{H}_{\text{SOC}}} \lambda$ . Ennek a mátrixnak a lehetséges alakjára vagyunk kíváncsiak.

Ha egy unitér  $\mathcal{P}$  szimmetria transzformációra az operátor invariáns:

$$\mathcal{PH}_{\rm SOC}\mathcal{P}^{\dagger} = \mathcal{H}_{\rm SOC},\tag{3.18}$$

$$\underline{\mathbf{PH}}_{\mathrm{SOC}}\underline{\mathbf{P}}^{\dagger} = \underline{\mathbf{H}}_{\mathrm{SOC}}.$$
(3.19)

A (3.19) egyenletből indulunk ki. A bal oldalon lévő hasonlósági transzformáció egy lineáris transzformáció  $\mathbb{C}^{8\times8}$  komplex vektortéren, így az egyenlet egy sajátérték egyenletnek értelmezhető, 1 sajátértékkel. Ez  $\underline{\mathbf{H}}_{SOC}$ -ra ad megkötést, miszerint ennek a mátrixnak a lineáris transzformáció 1 sajátértékhez tartozó alterében kell hogy legyen. Mivel ennek minden  $\underline{\mathbf{P}}$  szimmetria transzformációra teljesülnie kell, ezért  $\underline{\mathbf{H}}_{SOC}$  ezeknek az altereknek a metszetében helyezkedik el. Innentől annyi a feladatunk, hogy ezeknek a mátrixoknak a vektorterén felvegyünk egy bázist és a hasonlósági transzformációt mátrixként reprezentáljuk. Az erre vonatkozó részletes levezetést az A.2 fejezetben tárgyalom. Miután ezt megtettük, úgy ezeknek a mátrixoknak az 1 sajátértékhez tartozó alterei és azok metszetei már programmal számolhatóak.

Azonban nem csak unitér  $\mathcal{P}$  szimmetria transzformációkkal van dolgunk. Észrevehetjük, hogy a **K** pontban a Hamilton invariáns az időtükrözés és inverzió szorzatára (amit a Kramers-pároknál is kihasználtunk). Ez egy anti-unitér transzformáció, amit nem lehet komplex mátrixszal reprezentálni. Ekkor azonban érdemes  $\mathbb{C}^{8\times8}$ -at egy 128 dimenziós valós vektortérnek tekinteni, ahol a mátrix komplex komponenseit egyszerűen további 2 dimenziós valós altereknek tekintjük. Mivel a vektortér feletti számtestet megszorítottuk a valós számokra annak az árán, hogy sokkal nagyobb mátrixokkal dolgozunk, úgy a konjugálás illetve adjungálás valós mátrixokként reprezentálhatóak ezen a téren, így ezeknek is megkereshetjük az 1 sajátértékhez tartozó komponenseit. Az erre vonatkozó részletes számolást az A.3 fejezetben tárgyalom.

 $\underline{\mathbf{H}}_{SOC}$  invariáns  $D_3$  generátoraira, az időtükrözés is inverzió szorzatára, illetve az adjungálásra. Ez utóbbi kettő anti-unitér operátor.

Egy további altérre való megszorítás adódik abból, hogy az operátor az alábbi alakban felírható:

$$\mathcal{H}_{\text{SOC}} = \mathcal{H}_1 \sigma_x + \mathcal{H}_2 \sigma_y + \mathcal{H}_3 \sigma_z, \qquad (3.20)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{H}}}_{\text{SOC}} = \operatorname{kron}(\underline{\underline{\mathbf{H}}}_1, \sigma_x) + \operatorname{kron}(\underline{\underline{\mathbf{H}}}_2, \sigma_y) + \operatorname{kron}(\underline{\underline{\mathbf{H}}}_3, \sigma_z), \qquad (3.21)$$

ahol kron mátrixok Kronecker-szorzatát jelöli.

Ez nem feszíti ki a teljes 128 dimenziós teret, mivel hiányzik egy  $2 \times 2$ -es egységmátrixos tag hozzá.

Mindent összevetve a szimmetriacsoport generátorainak 1 sajátértékhez tartozó közös altere mindössze négy dimenziós marad, ami azt jelenti, hogy négy valós paraméterrel jellemezhető a spin-pálya operátor.

$$\mathcal{H}_{SOC} = \operatorname{kron} \left( s_z, \begin{bmatrix} \lambda_{I2} & 0 & 0 & \lambda_1 \\ 0 & -\lambda_{I1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{I1} & 0 \\ \lambda_1 & 0 & 0 & -\lambda_{I2} \end{bmatrix} \right) \\ + \operatorname{kron} \left( s_+, \begin{bmatrix} 0 & 0 & i\lambda_4 & 0 \\ -i\lambda_0 & 0 & 0 & -i\lambda_4 \\ 0 & -i\lambda_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\lambda_0 & 0 \end{bmatrix} \right) \\ + \operatorname{kron} \left( s_-, \begin{bmatrix} 0 & i\lambda_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\lambda_3 & 0 \\ -i\lambda_4 & 0 & 0 & -i\lambda_0 \\ 0 & i\lambda_4 & 0 & 0 \end{bmatrix} \right), \quad (3.22)$$
$$s_{\pm} = \frac{1}{2} (s_x \pm is_y). \quad (3.23)$$

Kompaktabb módon szimbolikusan írhatjuk:

$$\mathcal{H}_{SOC} = \begin{bmatrix} \lambda_{12}s_z & i\lambda_0s_- & i\lambda_4s_+ & \lambda_1s_z \\ -i\lambda_0s_+ & -\lambda_{11}s_z & i\lambda_3s_- & -i\lambda_4s_+ \\ -i\lambda_4s_- & -i\lambda_3s_+ & \lambda_{11}s_z & -i\lambda_0s_- \\ \lambda_1s_z & i\lambda_4s_- & i\lambda_0s_+ & -\lambda_{12}s_z \end{bmatrix}$$
(3.24)

### 3.2.2. Elliott-Yafet elmélet kétrétegű grafénban

Kétrétegű grafénban beszélhetünk az Elliott-Yafet elmélet érvényességéről, hiszen jelen van az inverziós szimmetria, amennyiben nem tesszük ki külső elektromos tér hatásának. Az egyetlen problémát az okozza, hogy a dópolatlan félig töltött kétrétegű grafén Fermi-szintje éppen a K pontban van, ahol a spin-pálya relaxációt nem tudjuk perturbatívan figyelembe venni. Azonban ha eltolt Fermi-szintű esetet vizsgálunk, akkor ez minden további nélkül

megtehető. Erre létező példa lehet az alkálival dópolt grafitok, melyek jó modellrendszerei a különböző többrétegű grafénoknak. Az alkáli atomok 1-1 további elektronnal járul hozzá a vezetéshez, ami feljebb tolja a Fermi-szintet (3.5).



3.5. ábra. Feltolt Fermi-szint esetén a Fermi-felület jó közelítéssel kör alakú a K és a K' pontok közelében.

Hogy az Elliott-Yafet elméletet alkalmazni tudjuk, úgy át kell térnünk a kinetikus Hamilton-szerinti sajátenergia-bázisra. Ezen a bázison kell vegyük a spin-pálya operátor mátrixelemeit, melyekből számolhatunk spin-relaxációs időket.

Számolásaimat Mathematica-val végeztem. Az SOC operátort a K pont közelében írtam fel. A különböző  $\gamma$  együtthatókkal arányos tagok különböző sávok között adnak nagy mátrixelemet. Különböző spin-állapotok között csak a  $\gamma_0$ -val és  $\gamma_4$ -el arányos tagok adnak mátrixelemet. Azonban, ha a spin-bázis elforgatjuk 90°-kal, úgy éppen a  $\lambda_{I1}$  és  $\lambda_{I2}$ -vel arányos tagok adnak járulékot a különböző spinállapotok között.

Léteznek a 3.6 ábrán jelöltektől különböző elsőrendű átmenetek is, de sokkal kisebb járulékkal.

A spin-pálya mátrixelemeket egy adott Fermi-szintnél kell számoljuk, hogy fizikailag releváns eredményt kapjunk. Mivel az Elliott-Yafet elmélet nem használható közvetlenül a K pontban, ezért dópolt esetet vizsgálunk és továbbra is feltesszük, hogy megmarad az inverziós szimmetria. Erre az alkálival dópolt grafitok jó modellrendszerek, hiszen az alkáli atomok elektront adnak át a grafén rétegeknek, viszont nem vesznek részt a vezetésben.



3.6. ábra. Az (a) ábrán a különböző spinállapotok közötti átmenetek láthatóak. Ekkor  $s_z$  merőleges a grafén síkjával. A (b) ábrán hasonló átmenetek láthatóak, ebben az esetben viszont  $s_z$  merőleges a grafén síkjára.

Így a Fermi-szint magasabbra növekszik. Stage I-es dópolású  $KC_8$  grafiton  $\varepsilon_{\rm F} \approx 1.35 \, eV$ Fermi-szintet mértek [24], ennek pedig  $0.8 \, e^-/K$  elektronátadást feleltettek meg. A stage II-es  $KC_{24}$ -ben a dópolt elektronok száma a harmadára esik szén-atomonként, elemi cellánként viszont csak a 2/3-ra. Mivel a [24]-beli elektronátadást nem tudtam reprodukálni a mért Fermi-szintből, ezért a Fermi-szintet paraméterként hagyom benn a numerikus számolásokban. Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban  $\varepsilon_{\rm F} = 0.7 \, eV$ -tal számolok, de minden számolás megismételhető tetszőleges Fermi-szinttel. A Fermi szintet szög szerint jártam körbe és átlagoltam a  $(\lambda/\Delta)^2$  értékeket. Az átlagolást lehetne pontosabban végezni állapotsűrűség szerinti súlyozással, viszont mivel diszperzió majdnem izotróp illetve a Fermi-felület jó közelítéssel kör alakú, ez nem okoz számottevő hibát.

A spin-pálya mátrixelemeket különböző  $\Theta$  szögeknél megvizsgáltam, ahol  $\Theta$  az  $s_z$  és a grafén síkjára merőleges irány által bezárt szög. A mátrixelemek nem változtak számottevően a különböző grafén síkjával párhuzamos  $\phi$  irányokban, ezért csak a  $\Theta$  szerinti függést ábrázolom. Ebből a szögfüggésből lehet az irányfüggő anizotróp spin-relaxációra következtetni.

A 3.7(c) ábrán látható az átlagos  $(\lambda/\Delta)^2$  együttható a szög függvényében. A szögfüggés jól magyarázza az anizotróp spin-relaxációt, viszont látható, hogy az értékek nagyságrendekkel kisebbek bármelyik alkálifémbeli értéknél. Mivel az értékek ennyire kicsik, így a spin-relaxációs időkre is meglehetősen magas becslést kapunk a 2.39 képlet alapján. A momentum-relaxáció kétrétegű grafénban [25] alapján  $\tau_{\rm tr} \approx 10^{-14} s$ , így a becsült spin-relaxációs idő  $T_1 \approx 10^{-4} s$ , ami meglehetősen magas becslés. A [25] cikkben



3.7. ábra. Az (a) ábrán látható az alulról a 3. sáv összegzett  $(\lambda/\Delta)^2$  értékei  $\Theta$  függvényében. A (b) ábrán ugyanez látható a 4. sávra. A (c) ábrán az átlagolt  $(\lambda/\Delta)^2$  értékek láthatóak.

 $T_1 \approx 1 - 7 ns$ -ot mértek a Dirac-pont közelében, azonban még nincsenek adatok az erősen eltolt Fermi-energiájú kétrétegű grafénra. A spin-pálya operátorhoz tartozó  $\lambda$  paramétereket [22] cikkből vettem, ahol ezeket a paramétereket sűrűség-funkcionál szimulációkból származtatták [26]. A  $\lambda$  paraméterek értékei:

$$\lambda_0 = 5 \,\mu eV,$$
  

$$\lambda_4 = -12 \,\mu eV,$$
  

$$\lambda_{I1} = 12 \,\mu eV,$$
  

$$\lambda_{I2} = 10 \,\mu eV.$$
  
(3.25)

Bár a kölcsönható elektronrendszereknél ezek a szimulációk egyre inkább jeleskednek, a spin-pálya kölcsönhatásra közvetlenül nem alkalmazhatóak ugyanazok a modellek.

Ezen eredményeink egyelőre előzetesnek minősíthetőek. A továbblépés a kísérletekkel való jobb egybevetés, minek során Li-mal dópolt stage II grafit spin-relaxációját fogjuk vizsgálni. A Li mint a legkönnyebb fém, lényegében nem ad mérhető járulékot a spinrelaxációhoz, lévén igen kicsi a spin-pálya kölcsönhatása.

## 4. fejezet

# Összefoglalás

A diplomamunkában ismertettem a spin-pálya kölcsönhatás eredetét. Hatását bemutattam atomok kötött elektronpályáin, illetve vezetési elektronokon, amennyiben a kristályrács szimmetrikus az inverzióra (Elliott-Yafet elmélet). Részletesen ismertettem az Elliott-Yafet elmélet alapvetéseit és következményeit.

Részletesebben vizsgáltam a kétrétegű grafént, mint ígéretes spintronikai anyagot. Levezettem a kétrétegű grafén alapvető sávszerkezetét. A kétrétegű grafén szimmetriáit tüzetesebben megvizsgáltam és ez alapján felírtam a spin-pálya kölcsönhatás lehetséges alakját csoportelméleti megfontolásokból a félig töltés közelében. Sajátenergia bázisban felírtam a spin-pálya kölcsönhatás mátrixelemeit, majd az Elliott-Yafet elmélet érvényességét feltételezve kiszámoltam a lehetséges relaxációs időket. Bár a reális relaxációs időtől nagyságrendekkel eltérő eredményt kaptam, az eredményből látható, hogy milyen jellegű anizotróp spin-relaxációra számíthatunk.

Kijelenthetjük, hogy a kétrétegű grafén sávszerkezetét és alapvető szimmetriáit megértettük. Még lehetőség nyílik arra, hogy a spin-relaxáció jelenségét kétrétegű grafénban komolyabb fizikai apparátus segítségével is megvizsgáljuk az Elliott-Yafet elmélet korlátain kívül. Ígéretes továbbá, hogy a megalapozott elmélettel az alkálival dópolt grafitokon végzett ESR méréseket értelmezni tudjuk, egy összefogó elmélettel akár extrapolálni tudunk a kétrétegű grafénbeli spin-pálya paraméterekre.

Hátra van még továbbá a g-faktor eltolódás elméletének leírása grafénra, ami nem tehető meg az Elliott-féle egyszerű módon. Ez a későbbiekben hasonlóan fontos lehet a grafénbeli spin-pálya paraméterek kinyeréséhez.

További lehetőség még a spin-pálya operátor hatásának megbízható szimulációs számolása, ami szintén egy aktívan kutatott terület.

### A. függelék

### Csoportelméleti számolások

A 3.2.1 fejezetben láthattuk, hogy hogyan történik nagy vonalakban a spin-pálya operátor alakjának meghatározása. Ebben a függelék szakaszban részletesen tárgyalom, hogyan lehet az operátor alakját precízen, módszeresen megkapni. Mint azt láthattuk, alapvetően kettő típusú szimmetriával kell számolnunk: unitér, és anti-unitér transzformációkra vett szimmetriákkal. Az unitér transzformációkra vett szimmetriák egyszerűbben, csoportok komplex reprezentációival kezelhetőek, úgyhogy ezekkel kezdem a csoportelméleti tárgyalást.

### A.1. Forgatások hatása spinnel rendelkező hullámfüggvényekre

Amíg nem vettük a spineket figyelembe, addig a  $\Phi_{K,A_1}$ ,  $\Phi_{K,B_1}$ ,  $\Phi_{K,A_2}$ ,  $\Phi_{K,B_2}$  hullámfüggvényeket vettük figyelembe. Ezen túl most figyelembe kell vegyük a spinnel rendelkező hullámfüggvényeket, így a bázis kétszeresére bővül:  $\Psi_{A_1,\uparrow}$ ,  $\Psi_{B_1,\uparrow}$ ,  $\Psi_{A_2,\uparrow}$ ,  $\Psi_{B_2,\uparrow}$ ,  $\Psi_{A_1,\downarrow}$ ,  $\Psi_{B_1,\downarrow}$ ,  $\Psi_{A_2,\downarrow}$ ,  $\Psi_{B_2,\downarrow}$ .

Tudjuk, hogy a forgatás operátorok a spineket nem hagyják változatlanul. Egy  $\varphi$  szöggel való forgatás spinoperátora egyetlen spinorra ható spinoperátora:

$$\mathcal{R}_{\boldsymbol{\varphi},\mathrm{s}} = e^{-\frac{1}{2}i\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\varphi}},\tag{A.1}$$

ahol  $\phi$  forgatásvektor, melynek nagysága a forgatás szöge, iránya pedig a forgatás tengelyébe mutat, a forgatás irányát pedig a jobbkéz-szabály határozza meg.  $\sigma$  a Pauli-mátrixokból képzett vektor. Az így kapott egyenlet jobb oldalán végeredményben egy 2 × 2-es mátrixot

#### A. FÜGGELÉK. CSOPORTELMÉLETI SZÁMOLÁSOK

teszünk az exponenciális kitevőjébe, ami könnyen számolható a mátrix diagonalizálásával.

Megjegyzendő, hogy  $\phi = 2\pi$ -re az operátor -1-et ad. Ennek fizikailag nincs jelentősége, hiszen csak a hullámfüggvény fázisa változik. A (3.14) Egyenletben láthattuk a spinmentes hullámfüggvény transzformációját. Mivel szerencsésen rendeztük a spinnel rendelkező állapotokat, így a 8 elemű bázison vett reprezentációja a forgatásnak könnyen származtatható.

$$\underline{\mathbf{C}}_{3}^{\prime} = \operatorname{kron}\left(\mathcal{C}_{3,s}, \underline{\mathbf{C}}_{3}\right),\tag{A.2}$$

ahol  $\underline{\underline{C}}_{3}'$  a 8 elemű bázison vett reprezentációja a forgatás operátornak,  $\mathcal{C}_{3,s}$  a forgatás spinoperátora, illetve  $\underline{\underline{C}}_{3}$  a spin nélküli 4 elemű bázison vett reprezentációja a forgatásnak. kron a Kronecker-szorzatát jelöli két mátrixnak.

$$\operatorname{kron}\left(\underline{\underline{\mathbf{A}}},\underline{\underline{\mathbf{B}}}\right) = \begin{bmatrix} a_{11}\underline{\underline{\mathbf{B}}} & \cdots & a_{1n}\underline{\underline{\mathbf{B}}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}\underline{\underline{\mathbf{B}}} & \cdots & a_{mn}\underline{\underline{\mathbf{B}}} \end{bmatrix}.$$
(A.3)

### A.2. Unitér transzformációk hatása a spin-pálya operátorra

Ahhoz, hogy egy  $\mathbb{C}^{n \times n}$  teret numerikusan vektorként kezeljük, ahhoz fel kell vennünk rajta egy bázist. Egy igen kézenfekvő bázisnak mutatkozik a következő:

$$\underline{\mathbf{e}}_{1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \qquad \underline{\mathbf{e}}_{2} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \qquad \cdots \\ \underline{\mathbf{e}}_{n+1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \qquad \cdots ,$$
$$\left[\underline{\mathbf{e}}_{m}\right]_{i,j} = \left[\delta_{i,m \text{ div } n}\delta_{j,m \text{ mod } n}\right]. \tag{A.4}$$

A sorokat és az oszlopokat 0-tól számozom. Így az  $n \times n$ -es mátrixokra ható lineáris operátorokat ezen a bázison kifejthetjük. Vizsgáljuk meg, hogy ezen a bázison hogy alakul egy (3.19) alakú transzformáció mátrixeleme.

$$\phi_{k,i} = \left(\underline{\underline{\mathbf{e}}}_k, \phi\left(\underline{\underline{\mathbf{e}}}_i\right)\right)_{\mathbb{C}^{8\times 8}},\tag{A.5}$$

$$\phi(\underline{\mathbf{O}}) = \underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{O}} \cdot \underline{\mathbf{B}},\tag{A.6}$$

ahol  $\phi \mathbb{C}^{8 \times 8}$ -on vett lineáris operátor. A skalárszorzatot a pontról-pontra vett szorzatok összegének értelmezem. A továbbiakban az Einstein-konvenciót alkalmazom.

$$\begin{bmatrix} \phi(\underline{\mathbf{e}}_{i}) \end{bmatrix}_{j,s} = a_{j,l} \left(\underline{\mathbf{e}}_{i}\right)_{l,m} b_{m,s},$$

$$= a_{j,l} \delta_{l,i \text{ div } n} \delta_{m,i \text{ mod } n} b_{m,s},$$

$$= a_{j,i \text{ div } n} b_{i \text{ mod } n,s}.$$
(A.7)

Az (A.5) skalárszorzat a jobb oldali tagnak pontosan egy mátrixelemét veszi ki.

$$\phi_{k,i} = a_k \operatorname{div} n, i \operatorname{div} n b_i \operatorname{mod} n, k \operatorname{mod} n,$$

$$= a_k \operatorname{div} n, i \operatorname{div} n (b)_h^T \operatorname{mod} n, i \operatorname{mod} n,$$
(A.8)

$$\underline{\phi} = \operatorname{kron}\left(\underline{\underline{\mathbf{A}}}, \underline{\underline{\mathbf{B}}}^T\right), \tag{A.9}$$

Így egy  $\mathcal{P}$  unitér transzformációhoz tartozó mátrix:

$$\phi_{\mathcal{P}}(\underline{\mathbf{O}}) = \underline{\mathbf{P}} \cdot \underline{\mathbf{O}} \cdot \underline{\mathbf{P}}^{\dagger}, \tag{A.10}$$

$$\underline{\phi}_{\mathcal{P}} = \operatorname{kron}\left(\underline{\mathbf{P}}, \underline{\mathbf{P}}^*\right). \tag{A.11}$$

Reprezentációk Kronecker-szorzatára vannak táblázatbeli összefüggések (tenzor-szorzat ábrázolások), de nekünk nem kell ezzel foglalkoznunk, hogy eredményre jussunk. Nekünk mindössze a  $\phi_{\mathcal{P}} \lambda = 1$  sajátértékhez tartozó sajátalterét kell meghatároznunk, hiszen  $\phi_{\mathcal{P}}$ szimmetriája a SOC operátornak. Mivel  $\phi$ -t megkaptuk mátrix alakban ezt egy numerikus diagonalizáló rutinnal megkaphatjuk. Szerencsére a *Mathematica* szoftver ezzel analitikusan is meg tud birkózni, így a későbbiekben is analitikusan lesz meg a spin-pálya operátor alakja.

### A.3. Anti-unitér transzformációk hatása a spin-pálya operátorra

Az anti-unitér operátorokkal általában az a probléma, hogy nem is lineárisak az adott vektortéren, így mátrixszal nem reprezentálhatóak. Ez alól ki lehet bújni, ha az eredetileg komplex vektorteret valós vektortérnek tekintem, mégpedig úgy, hogy az eredeti komplex komponenst két független valós komponensnek tekintem. Ezzel látszólag semmit nem csináltunk, de azzal, hogy az új vektorteret a valós számtest fölött értelmezzük, úgy az anti-unitér operátor lineárissá tehető. Eredetileg a linearitást az borította ugyanis fel, hogy annak eredetileg komplex együtthatóra is teljesülnie kellene.

Most a bázisunk már 16 dimenziós, viszont csak valós együtthatókat engedünk meg:  $\Psi_{A_1,\uparrow}, \Psi_{B_1,\uparrow}, \Psi_{A_2,\uparrow}, \Psi_{B_2,\uparrow}, \Psi_{A_1,\downarrow}, \Psi_{B_1,\downarrow}, \Psi_{A_2,\downarrow}, \Psi_{B_2,\downarrow}, i\Psi_{A_1,\uparrow}, i\Psi_{B_1,\uparrow}, i\Psi_{A_2,\uparrow}, i\Psi_{B_2,\uparrow}, i\Psi_{A_1,\downarrow}, i\Psi_{B_1,\downarrow}, i\Psi_{B_1,\downarrow}, i\Psi_{A_2,\downarrow}, i\Psi_{B_2,\downarrow}.$ 

Ezeknek a tagoknak az együtthatóin a  $\mathcal{K}$  konjugálás már lineáris operátorként reprezentálódik.

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{8\times8} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{0}}} & -\underline{\underline{\underline{\mathbf{E}}}}_{8\times8} \end{bmatrix}.$$
 (A.12)

Minden anti-unitér operátor felírható egy unitér és a konjugáció szorzataként. Ha ismerjük az unitér operátort akkor azt a fentiek alapján reprezentálhatjuk egy  $\underline{\underline{A}}$  mátrixszal az eredeti bázison. Az új bázison viszont ez a mátrix másképp reprezentálódik.

$$\underline{\mathbf{A}}' = \begin{bmatrix} \Re(\underline{\mathbf{A}}) & -\Im(\underline{\mathbf{A}}) \\ \Im(\underline{\mathbf{A}}) & \Re(\underline{\mathbf{A}}) \end{bmatrix}, \qquad (A.13)$$

ahol $\Re$ és  $\Im$ rendre a valós és képzetes részt jelölik.

Ezekből és az (A.9) egyenletből már felépíthető, hogy mi a hatása egy anti-unitér operátornak a spin-pálya operátorra. Ezt általánosan egy  $128 \times 128$ -as valós mátrixszal tudjuk reprezentálni.

A K pontban a kétrétegű grafén  $D_3$  pontcsoport-beli szimmetriával rendelkezik. Továbbá van még egy nem triviális anti-unitér operátorral leírható szimmetria, az inverzió és időtükrözés szorzata. Vannak olyan szimmetriák is melyek kifejezetten a spin-pálya operátor jellemzői. Mint mérhető energiatag a spin-pálya operátor önadjungált, tehát az adjungálásra invariáns, továbbá felírható  $\mathcal{H}_x s_x + \mathcal{H}_y s_y + \mathcal{H}_z s_z$ , ahol a  $\mathcal{H}$  operátorok csak

#### A. FÜGGELÉK. CSOPORTELMÉLETI SZÁMOLÁSOK

a térbeli hullámfüggvényre hatnak.

Elegendő a szimmetriacsoportból annyi elemet vizsgálni, amennyi már generálja a teljes csoportot. Ha a spin-pálya operátor invariáns ezekre az elemekre, akkor már invariáns a csoport minden más elemére is.

Az egy-egy csoportelemet reprezentáló  $128 \times 128$ -as mátrix 1 sajátértékéhez *Mathe*matica-val analitikusan megkaptam a sajátvektorokat. Ezeket ortonormálva könnyedén megkaphatjuk a sajátaltérre vetítő  $\underline{\mathbf{P}}$  projekciót. Tegyük fel, hogy  $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \ldots, \mathbf{s}_k$  a sajátaltérhez tartozó ortonormált rendszer. Ekkor az ehhez tartozó projekció:

$$\underline{\mathbf{P}} = \sum_{i=1}^{k} \mathbf{s}_{i} \circ \mathbf{s}_{i}, \tag{A.14}$$

ahol $\circ$ a diadikus szorzat jele.

Már csak azt kell megtudjuk, hogyan kapjuk meg az alterek metszetét a rájuk vetítő ortogonális projekcióból. Tegyük fel, hogy van két projekciónk,  $\underline{\mathbf{P}}_{V_1}$  és  $\underline{\mathbf{P}}_{V_2}$ , rendre a  $V_1$  és  $V_2$  alterekre vetítenek. Ekkor ha ezeket felváltva egymás után alkalmazom, akkor intuitív módon bármelyik pont a két projekció által meghatározott alterek metszetébe fut be (A.1 ábra).

Ezt az állítást analitikusan megfogalmazva:

$$\underline{\mathbf{P}}_{V_1 \cap V_2} = \lim_{n \to \infty} \left( \underline{\mathbf{P}}_{V_1} \underline{\mathbf{P}}_{V_2} \right)^n.$$
(A.15)

Hasonló állítást megfogalmazhatunk több altérre is:

$$\underline{\underline{\mathbf{P}}}_{\bigcap_{i=1}^{k} V_{i}} = \lim_{n \to \infty} \left( \prod_{i=1}^{k} \underline{\underline{\mathbf{P}}}_{V_{i}} \right)^{n}.$$
(A.16)

Mivel a mátrix hatványozást és a határérték végzést is ki tudja analitikusan számolni a *Mathematica*, ezért arra hagyatkoztam. A végső projekcióból egy ismételt sajátvektor számítással megkapható az az altér, melyben a spin-pálya kölcsönhatás végül lehet. Az alteret kifeszítő vektorok mátrixokat reprezentálnak. Ezeket vissza transzformálva megkapjuk azt a pár független mátrixot, ami előfordulhat.

A kétrétegű grafénra ezt a módszert hattatva mindössze egy 4 dimenziós invariáns altér marad. Így a spin-pálya mátrixban 4 szabad valós paraméter szerepel. A mátrix végső alakja a (3.24) egyenletben látható.



A.1. ábra. Az ortogonális projekciókat egymás után hattatva bármely pont a két altér metszetére vetül.

### Irodalomjegyzék

- Igor Žutić, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma. Spintronics: Fundamentals and applications. Rev. Mod. Phys., 76:323–410, Apr 2004.
- [2] M.W. Wu, J.H. Jiang, and M.Q. Weng. Spin dynamics in semiconductors. <u>Physics</u> Reports, 493(2–4):61 – 236, 2010.
- [3] S. Datta and B. Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. <u>Applied Physics</u> Letters, 56:665–667, February 1990.
- [4] Mark Johnson and R. H. Silsbee. Coupling of electronic charge and spin at a ferromagnetic-paramagnetic metal interface. Phys. Rev. B, 37:5312–5325, Apr 1988.
- [5] FJ Jedema, HB Heersche, AT Filip, JJA Baselmans, and BJ van Wees. Electrical detection of spin precession in a metallic mesoscopic spin valve. <u>NATURE</u>, 416(6882):713–716, APR 18 2002.
- [6] T. Valet and A. Fert. Theory of the perpendicular magnetoresistance in magnetic multilayers. Phys. Rev. B, 48:7099–7113, Sep 1993.
- [7] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. <u>Phys. Rev.</u> B, 39:4828–4830, Mar 1989.
- [8] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas. Spin-orbit coupling in curved graphene, fullerenes, nanotubes, and nanotube caps. Phys. Rev. B, 74:155426, 2006.
- [9] C. Ertler, S. Konschuh, M. Gmitra, and J. Fabian. Electron spin relaxation in graphene: the role of the substrate. Phys. Rev. B, 80:041405, 2009.

- [10] M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler, C. Ambrosch-Draxl, and J. Fabian. Band-structure topologies of graphene: spin-orbit coupling effects from first principles . <u>Phys. Rev.</u> B, 80:235431, 2009.
- [11] A. H. Castro Neto and F. Guinea. Impurity-induced spin-orbit coupling in graphene. Phys. Rev. Lett., 103:026804, 2009.
- [12] B. Dóra, F. Murányi, and F. Simon. Electron spin dynamics and electron spin resonance in graphene. Eur. Phys. Lett., 92:17002, 2010.
- [13] P. Zhang and MW Wu. Electron spin relaxation in graphene with random rashba field: comparison of the d'yakonov-perel'and elliott-yafet-like mechanisms. <u>New Journal of</u> Physics, 14(3):033015, 2012.
- [14] H. Ochoa, A. H. Castro Neto, and F. Guinea. Elliot-yafet mechanism in graphene. Phys. Rev. Lett., 108:206808, May 2012.
- [15] L. Szolnoki, A. Kiss, L. Forró, and F. Simon. Empirical monod-beuneu relation of spin relaxation revisited for elemental metals. Phys. Rev. B, 89:115113, Mar 2014.
- [16] AE Kramida. A critical compilation of experimental data on spectral lines and energy levels of hydrogen, deuterium, and tritium. <u>Atomic Data and Nuclear Data Tables</u>, 96(6):586–644, 2010.
- [17] R. J. Elliott. Theory of the effect of spin-orbit coupling on magnetic resonance in some semiconductors. Phys. Rev., 96:266–279, Oct 1954.
- [18] Y. Yafet. The g value in conduction electron spin resonance. <u>Phys. Rev.</u>, 106:679–684, May 1957.
- [19] Y. Yafet. g factors and spin-lattice relaxation of conduction electrons. <u>Solid State</u> Physics, 14:1–98, 1963.
- [20] P. Monod and F. Beuneu. Conduction-electron spin flip by phonons in metals: Analysis of experimental data. Phys. Rev. B, 19(2):911–916, Jan 1979.
- [21] P. Monod and F. Beuneu. Conduction-electron spin flip by phonons in metals: Analysis of experimental data. Phys. Rev. B, 19:911–916, Jan 1979.

- [22] S. Konschuh, M. Gmitra, D. Kochan, and J. Fabian. Theory of spin-orbit coupling in bilayer graphene. Phys. Rev. B, 85:115423, Mar 2012.
- [23] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss. Band structure of graphite. <u>Phys. Rev.</u>, 109:272– 279, Jan 1958.
- [24] A. Grüneis, C. Attaccalite, A. Rubio, D. V. Vyalikh, S. L. Molodtsov, J. Fink, R. Follath, W. Eberhardt, B. Büchner, and T. Pichler. Angle-resolved photoemission study of the graphite intercalation compound kc8: A key to graphene. <u>Phys. Rev. B</u>, 80:075431, Aug 2009.
- [25] Wei Han and R. K. Kawakami. Spin relaxation in single-layer and bilayer graphene. Phys. Rev. Lett., 107:047207, Jul 2011.
- [26] John P. Perdew, Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple. Phys. Rev. Lett., 77:3865–3868, Oct 1996.