

Fényindukált töltéstranszport szilárdtestekben: kvantummechanikai leírás

Doktori (Ph.D.) értekezés

írta

Magashegyi István

Témavezető:

Dr. Földi Péter

egyetemi docens



SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM
FIZIKA DOKTORI ISKOLA
TERMÉSZETTUDOMÁNYI ÉS INFORMATIKAI KAR
ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

SZEGED
2022

Tartalomjegyzék

Bevezetés	1
I. Előismeretek	4
1. Kvantummechanikai alapok	5
1.1. Töltött részecske Hamilton-operátora	5
1.2. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet és tulajdonságai	7
1.2.1. Az $\{ \mathbf{r}\rangle\}$ reprezentáció	8
1.2.2. Valószínűségi sűrűség és áram	9
2. Szilárdtest-fizikai alapismeretek	11
2.1. Effektív tömeg közelítés	11
2.1.1. Az elektron mozgásegyenlete	11
2.1.2. Az elektronok effektív tömege	12
2.1.3. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbációs módszer	13
2.1.4. A burkolófüggvény módszer	15
2.2. Sáv szerkezet meghatározása pszeudopotenciálokkal	18
2.2.1. Ortogonális síkhullámok módszere	18
2.2.2. A pszeudopotenciálok módszere	19
3. A kvantumozott transzportfolyamatok alapjai	23
3.1. Kvantumos transzportfolyamatok ballisztikus vezetőkben	23
3.1.1. Stacionárius áramok ballisztikus vezetőkben	24

II. Tudományos eredmények	27
4. Áramok lokális keltése és modulációja fémekben	28
4.1. Bevezetés	28
4.2. Célkitűzés	29
4.3. Lokális gerjesztések egydimenziós modellje	30
4.3.1. Vezetési sáv effektív tömeg közelítésben	31
4.3.2. Lokális gerjesztések dinamikáját leíró egyenletek	33
4.3.3. Időablak kiterjesztése diszkrét Fourier–transzformáció segítségével	35
4.4. Lokalizált gerjesztés valószínűségi áramsűrűségének időfüggése	37
4.5. A ponderomotoros potenciál szerepének feltérképezése	39
4.6. Elektronsűrűség-oszcillációk vizsgálata fémekben	43
4.7. Összefoglalás	46
5. Lokálisan keltett töltéstranszport szilárdtestekben	49
5.1. Bevezetés	49
5.2. Célkitűzések	51
5.3. Töltéstranszport egydimenziós kvadratikus sávban	55
5.3.1. Gauss-hullámcsomag példája	59
5.4. Töltéstranszport egydimenziós kvantummechanikai modellje szilárdtestekben	64
5.4.1. Lézerimpulzussal lokálisan keltett töltések kétsávós rendszerben	75
5.5. Töltéstranszport három dimenzióban	79
5.5.1. Példa az alkalmazásra: Kvadratikus sáv esete	83
5.6. Összefoglalás	84
Összefoglalás és tézisek	87
Summary	91
Köszönetnyilvánítás	95
Publikációk	96

Irodalomjegyzék	99
-----------------	----

Bevezetés

A fény-anyag kölcsönhatás különböző formáival számtalan módon találkozunk életünk folyamán. Ennek tükrében nem meglepő, hogy régóta kutatott terület. A kvantumelmélet alapjait Max Planck úttörő munkássága alapozta meg, a feketetest-sugárzás elméleti alapjának kidolgozásával [1, 2]. Erre az eredményre építve a 20. század elején számtalan kiemelkedő elme munkájának gyümölcseként megszületett a kvantummechanika, ami a mikrovilág leírásának nagyon sikeres és pontos eszközévé vált [2]. Ezután megszületett a modern szilárdtest-fizika is, így bizonyos értelemben a kvantummechanika meghódította a makroszkopikus testek világát is.

A fény-anyag kölcsönhatás kutatások új hajnalát az első lézer megépítése jelentette 1960-ban [3]. Az azóta eltelt több mint 60 évben a lézertechnika hatalmas fejlődésen ment keresztül. Ennek köszönhetően egyrészt a fény-anyag kölcsönhatás mint tudományterület a fizikán belül is egyre hangsúlyosabbá vált, másrészt az új eredmények olyan technológiákká fejlődtek, és még napjainkban is fejlődnek, amelyek más tudományterületeknek új vizsgálati módszereket és eszközöket adnak.

Napjainkban már a jellemzően pár száz femtoszekundum hosszúságú ultrarövid lézerimpulzusok keltése is napi rutin laboratóriumi körülmények között. A femtoszekundumos időtartomány kiemelt szerepét az adja, hogy a különböző fizikai, biológiai és kémiai folyamatok nagy része piko- illetve femtoszekundumos időskálán játszódik le, ezért az időbeli feloldáshoz legalább két nagyságrenddel gyorsabb vizsgálati eszköz szükséges. A területen jelenleg csúcstechnológiának számító mérési eljárások és kísérleti berendezések nagy többsége az ún. pumpa-próba módszere épül [4–10].

Ezeknek az ultrarövid fényimpulzusoknak az elektromágneses tere jellemzően pár teljes optikai ciklusból áll. Ennek köszönhető, hogy a fényimpulzus terjedését és a kü-

lönféle anyagokkal történő kölcsönhatásának jellegét is jelentősen befolyásolja az ún. vivő-burkoló fázis (Carrier-envelope phase, röviden CEP), ami lényegében a maximális térerősség időbeli eltolódását jelenti az impulzus burkolójának maximumához képest [11–15]. Kísérleti szempontból tehát kiemelt fontosságú a CEP ismerete. A napjainkban standardnak számító CEP-et mérő berendezések vákuumkarában lévő gázatomok ionizációján alapulnak [16–19]. A csúcstechnológiás laborokban demonstrált legújabb eredmények azonban rávilágítottak arra, hogy a CEP meghatározása, a szilárdtestekben keltett töltések és töltésáramlások közvetlen mérésével is megvalósítható [20–23].

A ultrarövid lézerimpulzusok karakterizálásának ilyen irányú fejlődése hívta fel a figyelmünket a kölcsönhatás kiemelt szerepére, és az elméleti háttérének fontosságára. A szilárdtest mint sokrészecske-rendszer rendkívül összetett. Gondoljunk csak az Avogadro-számra! Ilyen nagyságrendű részecskeszámok esetén, ha csak az elektromágneses kölcsönhatásokat vesszük figyelembe, a rendszer közelítések és kompromisszumok nélküli teljes leírása kivitelezhetetlen. A szilárdtestek elektronállapotainak meghatározásában egy bevett módszer, hogy az atomi pályákból kiindulva iteratív módon közelítik meg a megoldást. Ilyen gyakran alkalmazott eljárás például a Hartree–Fock módszer, illetve a sűrűség funkcionál elmélet (Density Functional Theory, röviden DFT), amely esetén az elektronsűrűségekből indulnak ki [24–26]. Ezek a módszerek rendkívül sikeresek a kvantumkémia különböző területein, de a szilárdtestekre történő alkalmazásuk esetén az egyik legnagyobb hátrányuk, hogy nehezen kezelhető a segítségükkel a külső elektromágneses sugárzás térfüggése. A dolgozatban kifejtett modell ezt a nehézséget megkerülve, az ún. pszeudopotenciálok módszerét alkalmazva, egy hatékony eszközt ad a szilárdtestekben fényimpulzusokkal keltett áramok és töltések vizsgálatára [27, 28].

Az értekezés felépítése a következő: az I. részben röviden összefoglalom azokat a kvantummechanikai alapismereteket és elméleti szilárdtest–fizikai módszereket, amelyeket a későbbiekben felhasználok és alkalmazok. Ezután a II. részben bemutatom az új tudományos eredményeket. A 4. fejezetben a felhasznált szilárdtest–fizikai modell rövid ismertetése után megvizsgálom a keltő fényimpulzus paraméterei és a keltett áramok tulajdonságai közötti kapcsolatokat. Ezt követően a 5. fejezetben részletesen

tárgyalok egy elméleti módszert a szilárdtestekben keltett töltések meghatározására, és az alkalmazását is bemutatom egy egyszerű egydimenziós kétnívós példán keresztül. Az értekezést végezetül egy magyar és egy angol nyelvű összefoglalóval zárom.

I. rész

Előismeretek

1. fejezet

Kvantummechanikai alapok

Töltött részecskék elektromágneses térrel történő kölcsönhatását a Maxwell-egyenletek segítségével tudjuk leírni. Ezt a klasszikusnak tekintett megközelítést bizonyos egyszerűsített anyagmodellek segítségével még szigetelők és vezetők esetén is sikerrel alkalmazzák [29]. A fény-anyag kölcsönhatás klasszikus polarizáción keresztüli fenomenológikus leírása azonban kevésnek bizonyul, ha például a vizsgálni kívánt struktúrák valamelyik dimenziója olyan kicsi, hogy a kvantumtulajdonságok dominánssá válnak. Gondoljunk csak szén nanocsövekre vagy kvantum pöttyökre. Az atomok vizsgálata esetén is szükséges a kvantummechanikai megközelítés, már a sugárzási spektrum elméleti alátámasztásánál, de az ionizációs folyamatok leírásához (alagutazás) is ilyen modellekre van szükség.

A következőkben a kvantummechanika pár fontosabb, a későbbiekben is használt összefüggését és eredményét fogjuk röviden bemutatni.

1.1. Töltött részecske Hamilton-operátora

Az elektromágneses térben mozgó töltés kvantummechanikai leírásához szükségünk van a töltött részecske Hamilton-operátorára. Ezt a következőkben a Lorentz-féle erőtvétényből fogjuk levezetni a töltött részecske Hamilton-függvényén keresztül [30, 31].

Először tekintsük az elektromágneses térben mozgó q töltésű $\mathbf{v}$ sebességű részecs-

kére érvényes Lorentz-féle erőtvénnyt:

$$\mathbf{F} = q[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}], \quad (1.1)$$

ahol $\mathbf{E}$ az elektromos térerősség, míg $\mathbf{B}$ a mágneses indukció. Newton 2. törvényét alkalmazva ennek ismeretében felírható az m tömegű részecske mozgásegyenlete, amely a következő:

$$m \ddot{\mathbf{r}} = q[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)]. \quad (1.2)$$

A Helmholtz tétel értelmében bármely kellően folytonos vektortér felírható egy alkalmasan választott skalárpotenciál gradienseként és egy vektorpotenciál rotációjának az összegeként. A Maxwell-egyenletek tárgyalásánál a Helmholtz-dekompozíció longitudinális és transzverzális tagját külön használjuk az alábbi módon:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (1.3)$$

ahol $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ az elektromágneses mező vektor-, míg $\Phi(\mathbf{r}, t)$ a skalárpotenciálja. Ezt a vektorkalkulusból származó eredményt behelyettesítve a 1.2 egyenletbe, majd alkalmazva pár vektoranalitikai azonosságot a következő eredményre jutunk:

$$m \ddot{\mathbf{r}} = q \left[-\nabla\Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \underbrace{\dot{\mathbf{r}} \times \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}_{=\nabla(\dot{\mathbf{r}}\mathbf{A}) - (\dot{\mathbf{r}}\nabla)\mathbf{A}} \right]. \quad (1.4)$$

Felhasználva, hogy

$$\frac{d\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}}\nabla\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (1.5)$$

némi átrendezés után a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(m\dot{\mathbf{r}} + \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) &= -\nabla q[\Phi(\mathbf{r}, t) - \dot{\mathbf{r}}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)] \\ \frac{d}{dt}\mathbf{p} &= -\nabla U(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t), \end{aligned} \quad (1.6)$$

ahol $\mathbf{p}$ az általánosított impulzus és $U(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)$ az általánosított potenciált jelöli. A fentiek ismeretében az elektromágneses térben mozgó töltés Lagrange-függvénye is felírható,

miszerint

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = T(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) - U(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - q[\Phi(\mathbf{r}, t) - \dot{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]. \quad (1.7)$$

A Lagrange-függvény ismeretében meghatározható a dinamikai számításokban gyakran alkalmazott Hamilton-függvény is:

$$H(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \mathbf{p} \dot{\mathbf{r}} - L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t). \quad (1.8)$$

A részecske Hamilton-függvényének kvantálásával meg tudjuk határozni a Hamilton-operátort is. Jelölje az $\mathbf{r}$ helyvektornak megfelelő operátort $\hat{\mathbf{R}}$ és a $\mathbf{p}$ impulzusnak megfelelőt $\hat{\mathbf{P}}$, ekkor a részecske Hamilton-operátora a következő:

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{P}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}, t)]^2 + q\Phi(\hat{\mathbf{R}}, t). \quad (1.9)$$

Fontos megjegyezni, hogy az $\mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}, t)$ és $\Phi(\hat{\mathbf{R}}, t)$ potenciálok a koordináta operátor, valamint az idő függvényei, tehát szintén operátorok. A szilárdtest-fizikában a $q\Phi(\hat{\mathbf{R}}, t)$ helyett a $q = e$ töltéssel rendelkező elektronokra vonatkozó $V(\hat{\mathbf{R}})$ potenciált szokták használni.

A fentiekben a klasszikus elektrodinamikából kiindulva jutottunk el az elektromos térben mozgó töltés Hamilton-operátorához, de ez az eredmény természetesen tisztán kvantummechanikai megfontolások útján is belátható a szabad részecske Schrödinger-egyenletének U(1) mértékinvarianciáján keresztül.

1.2. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet és tulajdonságai

A Schrödinger-egyenlet alapvető szerepet játszik a kvantummechanikában, mivel ez határozza meg az kvantumállapotok időfejlődését és ezen keresztül a teljes fizikai rendszerét is. Ebben a fejezetben ennek az egyenletnek pár fontosabb tulajdonságát fogjuk tárgyalni. A következőkben a vizsgált kvantumos részecske állapotát a Dirac-féle jelölést alkalmazva $|\psi(t)\rangle$ jelöli [31, 32].

Legyen a vizsgált rendszerünk $\hat{H}(t)$ Hamilton-operátora adott. A Schrödinger-egyenlet szerint ekkor a rendszer $|\psi(t)\rangle$ kvantummechanikai állapotának időfejlődését az

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.10)$$

egyenlet írja le, ahol a $\hbar = h/(2\pi)$ a módosított Planck-állandó. Ez az időben elsőrendű differenciálegyenlet azt írja le, hogy nincs határozatlanság a kvantum rendszer időfejlődésében. Következésképpen, adott $|\psi(t_0)\rangle$ kezdőállapotból indulva egyértelműen megadható a t időpillanatbeli $|\psi(t)\rangle$ állapot.

1.2.1. Az $\{|r\rangle\}$ reprezentáció

Habár a fenti 1.10 egyenlet egy tömör és univerzális alakja a kvantumos részecske Schrödinger-egyenletének, a gyakorlatban gyakrabban használják a következőkben bemutatott ún. $\{|r\rangle\}$ (koordináta)reprezentációt. Definiáljuk a $\psi(\mathbf{r}, t)$ függvényt a következőképpen:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle. \quad (1.11)$$

A következőkben az feltételezzük, hogy a kvantumos rendszerben egyetlen elektron van, amely Hamilton-operátorát az 1.9 egyenlet elektronokra felírt alakja adja. Helyettesítsük be ezt a Hamilton-operátort a 1.10, egyenletbe majd szorozzuk meg balról a fent bevezetett $\langle \mathbf{r} |$ állapottal, ekkor a következő eredményre jutunk:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2m} \langle \mathbf{r} | [\hat{\mathbf{P}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}, t)]^2 | \psi(t) \rangle + \langle \mathbf{r} | V(\hat{\mathbf{R}}) | \psi(t) \rangle. \quad (1.12)$$

Felhasználva az egyes operátorok definícióit, némi átalakítás után arra juthatunk, hogy az egyrészecske Schrödinger-egyenlet $\{|r\rangle\}$ reprezentációbeli alakja

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{[-i\hbar \nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.13)$$

1.2.2. Valószínűségi sűrűség és áram

Vizsgáljuk meg, hogy a $|\psi(t)\rangle$ állapot normája hogyan változik az időben. Ennek érdekében írjuk fel az állapot normájának deriváltját, majd helyettesítsük be a 1.10 egyenletet, ekkor

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H}(t) | \psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | \hat{H}(t) | \psi(t) \rangle = 0, \quad (1.14)$$

ahol felhasználtuk, hogy a $\hat{H}(t)$ Hermitikus, azaz $\hat{H}(t) = \hat{H}^\dagger(t)$.

Ha a $|\psi(t)\rangle$ állapot egyre normált, azaz $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$, akkor (spin nélküli részecskére) az állapotához tartozó valószínűségi sűrűség

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (1.15)$$

és így annak a $d\mathcal{P}(\mathbf{r}, t)$ valószínűsége, hogy a részecskét a t időpillanatban az $\mathbf{r}$ vektor által kijelölt $d^3\mathbf{r}$ térfogatban találjuk:

$$d\mathcal{P}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}, \quad \int d\mathcal{P}(\mathbf{r}, t) = \int \rho(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = 1. \quad (1.16)$$

Megmutattuk tehát, hogy $\rho(\mathbf{r}, t)$ valószínűségi sűrűség konstans marad minden időpillanatban. Természetesen ez lokálisan nem igaz.

Vegyük először a $\rho(\mathbf{r}, t)$ valószínűségi sűrűség idő szerinti deriváltját, azaz

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.17)$$

Továbbra is az elektron példájánál maradva vegyünk Schrödinger-egyenlet $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ reprezentációban vett 1.13 alakját és tekintsük annak a komplex konjugáltját. Az így kapott egyenletek átrendezésével kifejezhetjük a fenti egyenletben szereplő $\partial \psi(\mathbf{r}, t)/\partial t$ és $\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)/\partial t$ deriváltakat. Ezeket visszaírva a 1.17 egyenletbe, némi átrendezés után arra jutunk, hogy

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2mi\hbar} \left[\psi^*(\mathbf{r}, t) \left(\nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) \right) - \left(\nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) \right)^* \psi(\mathbf{r}, t) \right], \quad (1.18)$$

ahol $\pi = -i\hbar\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. A fenti egyenlet jobb oldalából kiemelve egy ∇ -t, az egyenlet a kontinuitási egyenletek lokális alakját ölti, azaz

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) + \nabla\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1.19)$$

ahol a $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ valószínűségi áramsűrűség pontos kifejezése a következő:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) \} + \frac{e}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.20)$$

A fenti kifejezés jobb oldalán látható összeg első tagját a szakirodalomban "impulzus", míg a másodikat "mérték" valószínűségi áramnak (gauge probability current) hívják és rendre $\mathbf{j}_p$ és $\mathbf{j}_A$ -val jelölik. Külső elektromágneses tér távolléte esetén, amikor $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$, természetesen csak az impulzus valószínűségi áram marad. Ekkor a fenti kifejezés az alábbira egyszerűsödik:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) \} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) \}. \quad (1.21)$$

2. fejezet

Szilárdtest–fizikai alapismeretek

Az atommagok tömege három nagyságrenddel nagyobb az elektronokénál. A különböző erőhatásokra tehát, a Newtoni erőtvénynak megfelelően, az elektronok sokkal nagyobb mértékben reagálnak. Ezt a dinamikabeli különbséget használja ki a Born–Oppenheimer-közelítés, amelyben az elektronok mozgásegyenleteit állónak tekintett magok terében írják fel [33]. A következőkben a különféle szilárdtest-fizikai jelenségek tárgyalásánál végig alkalmazni fogjuk ezt a közelítést.

2.1. Effektív tömeg közelítés

Ebben az alfejezetben az egyszerűbb formulák érdekében egy dimenzióra és egyetlen sávra szorítkozunk, amely diszperziós függvénye $\mathcal{E}(k)$, majd az így kapott összefüggéseket általánosítjuk [34].

2.1.1. Az elektron mozgásegyenlete

Egy elektron mint hullámcsomag mozgását vizsgáljuk a kristályrács periodikus potenciáljában külső elektromos tér hatása alatt. Tegyük fel, hogy az általunk vizsgált hullámcsomagot alkotó hullámfüggvény komponensek hullámszámvektora a k egy kis környezetében található. A csoportsebesség definíció szerint $v_g(k) = d\omega(k)/dk$. Felhasználva, hogy ω körfrekvencia és az $\mathcal{E}$ közötti kapcsolatot, miszerint $\omega(k) = \mathcal{E}(k)/\hbar$,

azt kapjuk, hogy

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}(k)}{dk}, \quad (2.1)$$

azaz a $\mathcal{E}(k)$ diszperziós reláción keresztül fejeződik ki a kristály periodikus potenciáljának elektronmozgásra gyakorolt hatása. Ha megvizsgáljuk, hogy a külső E elektromos tér δt idő alatt mennyi $\delta\mathcal{E}$ munkát végez az e töltésű elektronon, akkor 2.1 egyenlet felhasználásával arra jutunk, hogy

$$\delta\mathcal{E} = -eE v_g \delta t. \quad (2.2)$$

Behelyettesítve az előző v_g -re felírt összefüggést, majd átrendezve arra jutunk, hogy $\hbar \frac{\delta k}{\delta t} = -eE$. A képletet három dimenzióra kiterjesztve, majd bevezetve az $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ erőt, azt kapjuk, hogy

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathbf{F}. \quad (2.3)$$

Ugyanerre az egyenletre juthatunk mágneses tér esetén is, ekkor az egyenlet jobb oldalán a Lorentz-erő jelenik meg.

2.1.2. Az elektronok effektív tömege

Ha Newton második törvényéhez hasonlóan deriváljuk a csoportsebességre vonatkozó 2.1 összefüggést, akkor azt kapjuk, hogy

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\mathcal{E}(k)}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2\mathcal{E}(k)}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\mathcal{E}(k)}{dk^2} \hbar \frac{dk}{dt}. \quad (2.4)$$

Behelyettesítve a 2.3 egyenletet, majd átrendezve F -re a következőket kapjuk:

$$F = \underbrace{\frac{\hbar^2}{d^2\mathcal{E}(k)/dk^2}}_{m^*} \frac{dv_g}{dt} = m^* \frac{dv_g}{dt}. \quad (2.5)$$

Azaz az m^* effektív tömeg bevezetésével visszakapjuk Newton második törvényének alakját. Arra jutottunk tehát, hogy a külső elektromos vagy mágneses térben úgy gyorsul az elektron a kristályrácsához képest, mintha a tömege az

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \mathcal{E}(k)}{dk^2} \quad (2.6)$$

egyenlettel definiált effektív tömeg lenne. Látható, hogy az effektív tömeg sávonként más és más a sávban érvényes diszperziós reláció függvényében. Ez a kifejezés általánosítható anizotrop energiafelületre is. A reciprok effektív tömegtenzor komponensei

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \mathcal{E}(\mathbf{k})}{dk_\mu dk_\nu}, \quad (2.7)$$

ahol μ és ν a koordináták indexei. Ennek segítségével az erőtvörvény is általánosítható anizotrop esetre, amely ekkor a következő alakú:

$$\sum_\nu F_\nu \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \frac{dv_{g\mu}}{dt}. \quad (2.8)$$

2.1.3. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbációs módszer

Ha megvizsgáljuk a különböző szilárdtestek elektroneloszlását, akkor világossá válik, hogy félvezetőkben és félvezető nanostruktúrákban jellemzően a vezetési sáv alsó, legkisebb energiákhoz tartozó része, illetve a valencia sáv maximuma körüli kis tartománya releváns a különféle kölcsönhatások folyamán. A $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbáció segítségével jól közelíthető a sávszerkezet a fentiekben említett extrémumok körül [34–37].

Mint ismeretes a szilárdtest $V(\mathbf{r})$ rácsperiodikus potenciáljában mozgó elektron $H_0 = \mathbf{p}^2/(2m) + V(\mathbf{r})$ Hamilton-operátorának a $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sajátállapotai az ún. Bloch-állapotok, amelyekre teljesül tehát a

$$H_0 \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

Schrödinger-egyenlet. Itt $\mathbf{r}$ a térkoordináta, míg a $\mathbf{k}$ a reciproktér koordináta. A fenti egyenletben látható továbbá, hogy a $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sajátállapothoz tartozó sajátenergia az $\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}$.

A Bloch-tétel szerint ezekre az állapotokra fennáll, hogy

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (2.10)$$

ahol az $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ egy rácperiodikus függvény és n a sávindex. A Bloch-állapotokat ilyen alakban beírva a szilárdtest Schrödinger-egyenletébe a következő egyenletre jutunk

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

ahol m az elektron tömege. Tegyük fel, hogy ismerjük ennek az egyenletnek a $\mathbf{k} = 0$ -hoz tartozó megoldásait. Feltesszük tehát, hogy ismerünk minden $\mathbf{k} = 0$ esethez tartozó $\mathcal{E}_n$ sajátenergiát és $u_{n0}(\mathbf{r})$ sajátfüggvényt. Ekkor minden $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ függvényt ki tudunk fejteni rajtuk a következőképpen:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n c_n(\mathbf{k}) u_{n0}(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

Bevezetve az $\langle n | \mathbf{r} \rangle = u_{n0}(\mathbf{r})$ jelölést, majd behelyettesítve ezt a felbontást a fenti 2.11 egyenletbe és balról megszorozva $\langle n' |$ -vel, a $c_n(\mathbf{k})$ kifejtési együtthatókra a következő egyenletet kapjuk:

$$\sum_n \left[\left(\mathcal{E}_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \underbrace{\langle n' | \mathbf{p} | n \rangle}_{\mathbf{p}_{nn'}} \right] c_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} c_n(\mathbf{k}). \quad (2.13)$$

Ezt az egyenletet felhasználva közelíthetjük a diszperziós relációt a $\mathbf{k} = 0$ környezetében a perturbációszámítás segítségével. Ennek lényege, hogy a $\mathbf{k}$ függő tagokat kis perturbációként kezeljük és sorba fejtjük őket. A sávok extrémumai környékén a diszperziós relációnak nincsenek $\mathbf{k}$ -tól lineárisan függő tagja, ezért a sorfejtés első tagjai kiesnek. Nem degenerált esetben tehát a következő másodrendű kifejezést kapjuk:

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) \approx \mathcal{E}_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{m, m \neq n} \frac{|\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nm}|^2}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m}. \quad (2.14)$$

A c indexel jelölt vezetési sáv alján a legtöbb félvezető esetén ez a kifejezés mátrixelemek kiértékelése után a következőképpen közelíthető

$$\mathcal{E}_c(\mathbf{k}) \approx \mathcal{E}_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.15)$$

ahol m^* az elektron effektív tömege a vezetési sáv alján. Hasonló módon közelíthetjük az $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ függvényeket is:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx u_{n0}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m} \sum_{m \neq n} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mn}}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} u_{m0}(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

2.1.4. A burkolófüggvény módszer

Tegyük fel, hogy a kristályra felírt Schrödinger-egyenlet megoldásait ismerjük. Azaz feltesszük, hogy a kristályrácsot leíró $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/(2m) + \hat{V}(\mathbf{r})$ Hamilton-operátor $\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}$ sajátértékei és $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sajátállapotai ismertek [35, 36]. Első lépésben vizsgáljuk meg az $\hat{U}(\mathbf{r})$ perturbáció hatását a rendszerre. Meg szeretnénk oldani tehát a következő

$$[\hat{H}_0 + \hat{U}(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

sajátértékegyenletet, ahol az $\hat{U}(\mathbf{r})$ perturbáció szintén rácsperiodikus, azaz $\hat{U}(\mathbf{r}) = \hat{U}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. Fejtsük ki a $\Psi(\mathbf{r})$ állapotot a $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ Bloch-állapotokon:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} F_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

Ezt behelyettesítve a fenti 2.17 egyenletbe majd megszorozva $\psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r})$ állapottal végül integrálva az így kapott kifejezést $d^3\mathbf{r}$ szerint, majd egy oldalra rendezve azt kapjuk, hogy

$$\sum_{n\mathbf{k}} [(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}) \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}] F_{n\mathbf{k}} = 0, \quad (2.19)$$

ahol felhasználtuk a Bloch-állapotok ortogonalitását és bevezettük az $\hat{U}(\mathbf{r})$ perturbáló potenciál

$$U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} = \int \psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (2.20)$$

mátrixelemeit. Ezt a potenciált az $u_{n\mathbf{k}}$ rácperiodikus függvények segítségével itt nem részletezett módon Fourier-sorba lehet fejteni, majd ezt a felbontást visszaírva a mátrixelemekre vonatkozó kifejezésébe az integrálok végrehajtása után a következő egyenletet kapjuk:

$$U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} = (2\pi)^3 \sum_{\mathbf{K}} U(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}) C_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}(\mathbf{K}), \quad (2.21)$$

ahol az $U(\mathbf{k})$ az $\hat{U}(\mathbf{r})$ perturbáló potenciál Fourier-transzformáltját jelöli és a $C_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}$ kifejtési együtthatókat az

$$C_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} = \frac{1}{V_c} \int u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \quad (2.22)$$

egyenlet segítségével határozhatjuk meg. A V_c az elemi cella térfogatát jelöli. Az 2.21 egyenlet tovább egyszerűsíthető, ha feltesszük, hogy a perturbáló potenciálnak a $\mathbf{k} = 0$ körüli komponensei számottevőek, továbbá azt, hogy a nagysága nem mérhető össze a tiltott sávok nagyságával. Ekkor ugyanis, ha az $F_{n\mathbf{k}}(\mathbf{k})$ együtthatók csak alacsony $\mathbf{k}$ értékekre számottevőek, a 2.21 egyenletben csak a $\mathbf{K} = 0$ tagra korlátozhatjuk az összegzést és a $U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}$ mátrixelemeket a következőképpen közelíthetjük:

$$U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} \approx (2\pi)^3 U(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) C_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}(0). \quad (2.23)$$

Az $u_{n\mathbf{k}}$ rácperiodikus függvény $\mathbf{k} = 0$ körüli sorfejtését felhasználva belátható, hogy a megmaradó $C_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}(0)$ ebben az esetben közelíthető az $\delta_{nn'}/(2\pi)^3$ formulával, így

$$U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} \approx U(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \delta_{nn'}. \quad (2.24)$$

Ez azt jelenti, hogy a fentiekben kifejtett feltételek teljesülése esetén a perturbáció nem keveri az egymással szomszédos sávban található állapotokat. Visszahelyettesítve az 2.19 egyenletbe, arra jutunk, hogy minden egyes sávban az F_{nk} együtthatókra a következőnek kell teljesülni:

$$\sum_k [(\mathcal{E}_{nk} - \mathcal{E}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + U(\mathbf{k}' - \mathbf{k})] F_{nk} = 0. \quad (2.25)$$

A fentiekben tárgyalt közelítéseknek köszönhetően a $\Psi(\mathbf{r})$ hullámfüggvény is tovább egyszerűsíthető. Mivel az $U(\mathbf{r})$ egy térben lassan változó függvény, $\Psi(\mathbf{r})$ kifejtésében is csak a $\mathbf{k} = 0$ körüli tagok lesznek dominánsak, azaz élhetünk az $u_{nk}(\mathbf{r}) \approx u_{n0}(\mathbf{r})$ közelítéssel, amelyre

$$\Psi(\mathbf{r}) \approx u_{n0}(\mathbf{r}) \sum_k F_{nk} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = u_{n0}(\mathbf{r}) F_n(\mathbf{r}). \quad (2.26)$$

A Fourier-sorból kapott $F_n(\mathbf{r})$ függvény szintén a rácperiodicitásnál lassabban változó függvény, ezért a hullámfüggvény burkolófüggvényének hívják. A diszperziós reláció $n = c$ vezetési sávra vonatkozó $\mathbf{k} = 0$ körüli 2.15 egyenletben szereplő soralakjának felhasználásával az elektronok dinamikájára vonatkozó 2.25 egyenlet a következő alakba írható fel:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} F_{c\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') F_{c\mathbf{k}'} = (\mathcal{E} - \mathcal{E}_{c,0}) F_{c\mathbf{k}}, \quad (2.27)$$

ahol m^* természetesen az elektron effektív tömege a vezetési sáv alján. Az egyenlet könnyen átirható valós térbe a Fourier-sorok tulajdonságainak felhasználásával. A valós térben a bal oldali összeg első tagja az $F_c(\mathbf{r})$ függvény második deriváltjának felel meg, míg a második a konvolúció szabályainak értelmében az $U(\mathbf{r})F_c(\mathbf{r})$ szorzatnak. Az átalakítások elvégzése után felírhatjuk tehát a burkoló függvényt definiáló differenciálegyenletet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) + \mathcal{E}_{c,0} \right] F_c(\mathbf{r}) = \mathcal{E} F_c(\mathbf{r}). \quad (2.28)$$

Ez pontosan a Schrödinger-egyenlet $V_c(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) + \mathcal{E}_{c,0}$ potenciállal és m^* effektív tömeggel. A korábban tárgyalt feltételek fennállása esetén tehát a vezetési sávban lévő elektronok úgy mozognak, mintha a rájuk ható potenciál a $V_c(\mathbf{r})$ effektív potenciál lenne és a tömegük pedig m^* [35, 37, 38].

2.2. Sávszerkezet meghatározása pseudopotenciálokkal

A szilárdtestek sávszerkezetének meghatározására számtalan módszer létezik. Első lépésként válasszuk szét az elektronrendszert a lezárt héjakból álló törzselektronokra és a vezetési- vagy valenciaelektronokra. A vezetési elektronok hullámfüggvénye az atomtörzsektől messze lévő külső tartományban közel síkhullám. Ezt a tényt felhasználva az alábbiakban tárgyalt ortogonális síkhullámok módszere (Orthogonalized Plane-Wave Method, röviden OPW) arra a felismerésre épül, hogy a valencia állapotok mindig merőlegesekek a törzsállapotokra [34, 37, 38].

2.2.1. Ortogonális síkhullámok módszere

Tegyük fel, hogy a törzsállapotokat ismerjük és a valencia állapotokat szeretnénk meghatározni. A törzsállapotok a rácspontokra jól lokalizáltak. A valenciasávokban található elektronok ezzel szemben a rácspontok közötti térben találhatók meg nagy valószínűséggel. A célunk ezeknek a valencia állapotoknak a közelítése pár síkhullám segítségével. Ennek a nehézsége abból ered, hogy a törzsközei tartományokra jellemző gyors oszcillációk nehezen közelíthetők pár síkhullám segítségével. Herring alapötlete az volt, hogy a valenciaállapotokat már eleve a törzsállapotokra ortogonalizált síkhullámállapotokból kell felépíteni [39].

A következőkben c a $\psi_{c,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ törzsállapotokat jelöli és indexeli, míg a v a $\psi_{v,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ valenciaállapotokat. Az egyszerűbb formalizmus érdekében bevezetjük a $|c, \mathbf{k}\rangle$ és a $|v, \mathbf{k}\rangle$ jelöléseket, amelyekre

$$\psi_{c,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | c, \mathbf{k} \rangle \quad \text{és} \quad \psi_{v,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | v, \mathbf{k} \rangle. \quad (2.29)$$

A bevezetőben megemlített ortogonalitási feltételt úgy tudjuk teljesíteni, hogy a szabad elektron $|\mathbf{k}\rangle$ síkhullámállapotából kivonjuk a $|c, \mathbf{k}\rangle$ törzsállapotokat. Az $|OPW, \mathbf{k}\rangle$ ortogonalizált síkhullám állapotokra tehát

$$|OPW, \mathbf{k}\rangle = |\mathbf{k}\rangle - \sum_c |c, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle, \quad (2.30)$$

ahol az összegzés az összes $\mathbf{k}$ hullámszámvektorú törzsállapotra értendő. Vegyük észre, hogy a $|\mathbf{k}\rangle$ síkhullám állapot és a második, $|c, \mathbf{k}\rangle$ törzsállapotokból képzett tag is teljesíti a Bloch-állapotokra vonatkozó feltételt $\mathbf{k}$ hullámszámvektorral, így az $|OPW, \mathbf{k}\rangle$ is. Írjuk fel ezután az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k} \rangle$ energia sajátállapotait az $|OPW, \mathbf{k}\rangle$ állapotok lineáris kombinációjaként:

$$|n, \mathbf{k}\rangle = \sum_{\mathbf{G}} c_{n,\mathbf{G}} |OPW, \mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle, \quad (2.31)$$

ahol a $\mathbf{G}$ reciprok rácsvektor befutja a Fourier-teret. Ezt a felbontást behelyettesítve az időfüggetlen Schrödinger-egyenletbe, azt kapjuk, hogy

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \right) |n, \mathbf{k}\rangle = \mathcal{E}_{n,\mathbf{k}} |n, \mathbf{k}\rangle, \quad (2.32)$$

ahol $\hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$ a kristályrács periodikus potenciálja. Az egyenletet megszorozva $\langle \mathbf{k} + \mathbf{G}' |$ -vel egy szekuláris egyenletet kapunk. Ez az egyenlet a szekuláris jellegét a $\langle \mathbf{k} + \mathbf{G}' | \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) | \mathbf{k} + \mathbf{G} \rangle$ mátrixelemeknek köszönheti. Az $\mathcal{E}_{n,\mathbf{k}}$ sajátenergiákat a komponensekre felírt egyenletrendszer megoldásával, azaz diagonalizációjával kaphatjuk meg [38].

Ennek a módszernek az előnye a sima síkhullámokra épülő módszerekkel szemben az, hogy $\hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$ potenciálra kapott mátrixelemek ez esetben sokkal kisebbek, így a megoldás során sokkal jobb konvergenciát kapunk.

2.2.2. A pseudopotenciálok módszere

Az pseudopotenciálok módszere az előző ortogonális síkhullámok módszerének továbbfejlesztésével indult. Azon túl, hogy ezzel a módszerrel finomítani lehet az OPW

számításokat, még a kvázi szabad elektron közelítés sikerességére is részben magyarázatot ad. Az 2.30 egyenlethez hasonlóan bontsuk fel a $|v, \mathbf{k}\rangle$ valencia állapotokat úgy, hogy felbontásban a $|k\rangle$ síkhullámokat cseréljük ki a 2.31 egyenletben szereplő kifejtéshez hasonlóan

$$|PS, \mathbf{k}\rangle = \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle \quad (2.33)$$

állapotokra, ahol a PS a pseudo szóra utal. A következő felbontás segítségével tehát a törzsállapotokra ortogonális valenciaállapotokat kapunk:

$$|v, \mathbf{k}\rangle = |PS, \mathbf{k}\rangle - \sum_c |c, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k} | PS, \mathbf{k}\rangle. \quad (2.34)$$

Vegyük észre, hogy $|v, \mathbf{k}\rangle$ egzakt valenciaállapot, ezért kielégíti a Schrödinger–egyenletet $\mathcal{E}_{v, \mathbf{k}}$ sajátértékkel, azaz

$$\hat{H} |v, \mathbf{k}\rangle = \mathcal{E}_{v, \mathbf{k}} |v, \mathbf{k}\rangle. \quad (2.35)$$

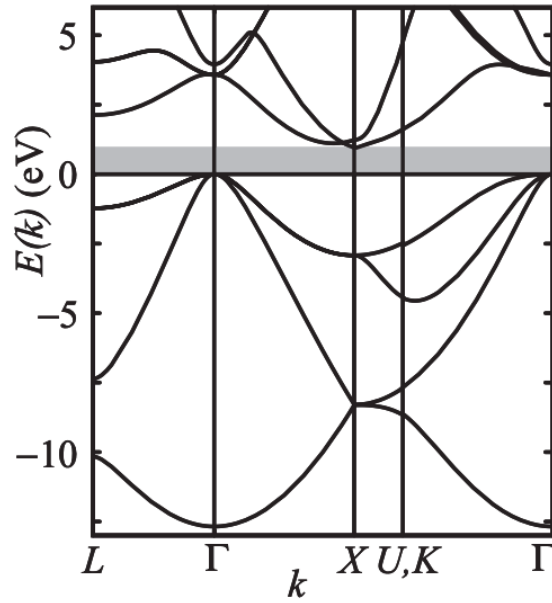
Hasonló egyenletet írhatunk fel a törzsállapotokra is (c indexeket v -re cserélve). A fenti egyenletbe behelyettesítve a valenciaállapotok 2.34 egyenlet szerinti felbontását, majd átrendezve az így kapott egyenletet, arra juthatunk, hogy

$$(\hat{H} + \hat{V}^R) |PS, \mathbf{k}\rangle = \mathcal{E}_{n, \mathbf{k}} |PS, \mathbf{k}\rangle, \quad (2.36)$$

ahol a $\hat{V}^R$ operátorba belefoglaltuk azokat a tagokat, amelyek az eredeti $\hat{H}$ operátortól való eltérést okozzák. Ennek konkrét alakja

$$\hat{V}^R = \sum_c (\mathcal{E}_{v, \mathbf{k}} - \mathcal{E}_{c, \mathbf{k}}) |c, \mathbf{k}\rangle \langle c, \mathbf{k}|. \quad (2.37)$$

Így a 2.36 egyenlet alakjában lényegében egy effektív Schrödinger–egyenletet kapunk, amelyet kielégítenek az $|PS, \mathbf{k}\rangle$ pszeudoállapotok, amelyek lényegében a Bloch–állapotok szakadások nélküli sima részei. Az OPW kidolgozásának alapja az, hogy



2.1. ábra. A szilícium pszeudopotenciál módszerrel meghatározott sávszerkezete [35].

ezek az állapotok jól közelíthetők pár síkhullám lineáris kombinációjának segítségével. Ha arra gondolunk, hogy a kvázi szabad elektron közelítésnél a valenciaállapotokat is síkhullámok segítségével keressük, eljutunk a pszeudopotenciál elmélet alapjához.

A cél tehát az, hogy találjunk egy V^{ps} potenciált úgy, hogy

$$\hat{H} + \hat{V}^R = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V^{ps}. \quad (2.38)$$

Ha megnézzük azt, hogy a periodikus rács potenciálja vonzó az atomtörzsek közelében, ezért itt a $\langle \Psi | \hat{V}^R | \Psi \rangle$ várható érték is negatív, és összehasonlítjuk azt az ugyanígy számított

$$\langle \Psi | \hat{V}^R | \Psi \rangle = \sum_c (\mathcal{E}_{v,k} - \mathcal{E}_{c,k}) |\langle c, \mathbf{k} | \Psi \rangle|^2 \quad (2.39)$$

értékkel, ami a $\mathcal{E}_{v,k} > \mathcal{E}_{c,k}$ miatt mindig pozitív, arra jutunk, hogy atomtörzsek közelében a törzsállapotok leárnyékolják a Coulomb-potenciál vonzását. Összességében tehát az elektron pseudoállapotai a rácsközi térben a vonzó kölcsönhatásnak felelnek meg, amelyet az atommagok közelében leárnyékol a törzselektronok rendszere. Fontos

kiemelni, hogy a V^{PS} pszeudopotenciál nem egyértelmű. Több különböző V^{PS} is adhat ugyanolyan sáv szerkezetet. A pszeudopotenciál a valódi potenciálnál sokkal gyengébb a külső, atomtörzsektől távoli tartományokban, azonban a két potenciál szerinti hullámfüggvények csaknem megegyeznek.

A kristály sáv szerkezetének megadásához csupán a $V^{PS}(\mathbf{G})$ Fourier-együtthatókra van szükség, amelyekre $V^{PS}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V^{PS}(\mathbf{G})$. Gyakran kevés együtthatóval is kellően pontosan meg lehet határozni a sáv szerkezetet [34–38].

3. fejezet

A kvantumoz transzportfolyamatok alapjai

A ballisztikus vezetők esete a kvantumoz transzportfolyamatok egyik kiemelten vizsgált területe. Ekkor ugyanis klasszikus képben az elektronok lényegében szóródás nélkül haladnak át a vizsgált mintán, azaz a szóródás nélkül megtett ún. szabad úthossz nagyobb, mint a vizsgált minta legnagyobb dimenziója. Áttérve a kvantummechanikai tárgyalásmódra ez lényegében azt jelenti, hogy az egyes kvantumállapotok koherens módon fejlődnek a mintában. A következőkben erre az esetre korlátozódva nézzük át röviden a kvantumoz transzportfolyamatok elméleti háttérének főbb elemeit.

3.1. Kvantumos transzportfolyamatok ballisztikus vezetőkben

Az egyszerűség kedvéért a következőkben a ballisztikus vezetők tulajdonságait alacsony hőmérsékleten vizsgáljuk. Ez lényegében a $T = 0$ határértéket jelenti. Az áramsűrűséget a vezetőkben felírhatjuk a következőképpen:

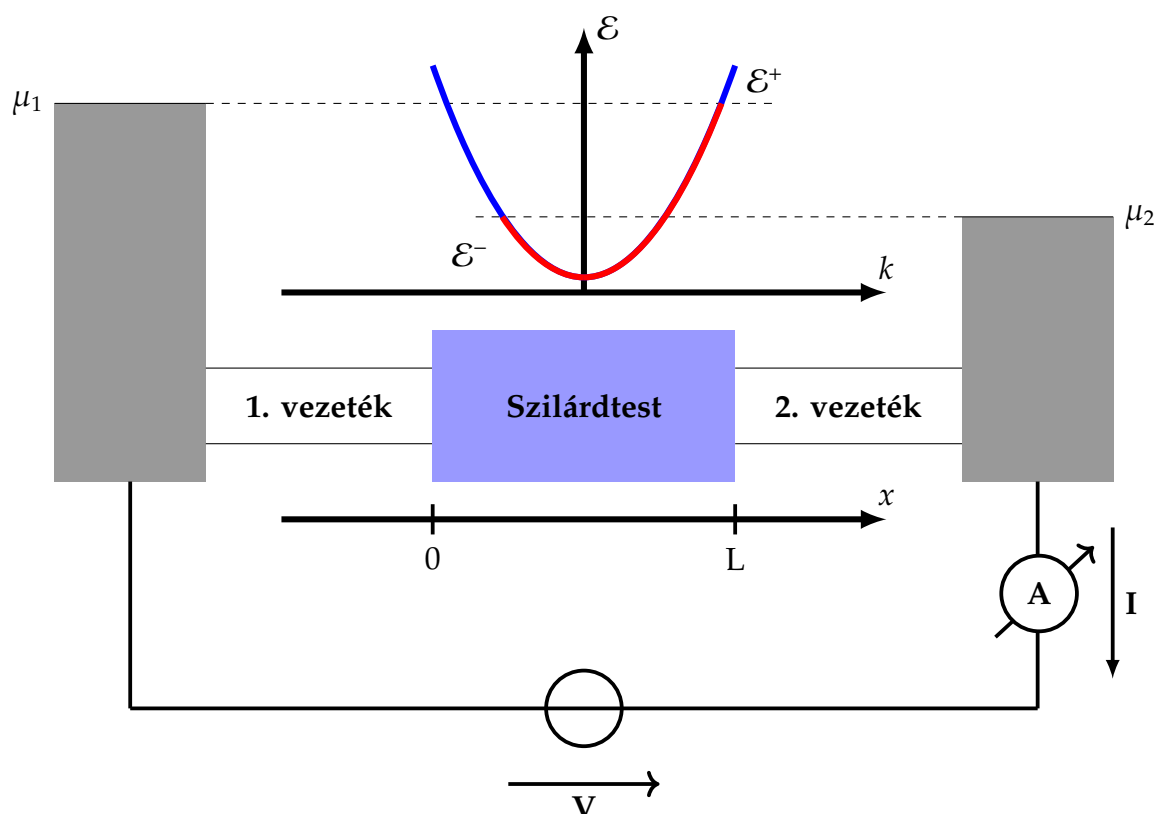
$$\mathbf{J} = en_e \mathbf{v}, \tag{3.1}$$

ahol n_e az elektronsűrűség, v pedig az elektronok átlagos sebessége. Jól ismert tény, hogy szilárdtestek vezetési tulajdonságainak kialakításához érdemben a Fermi-energiához közeli energiával rendelkező elektronok járulnak hozzá [40, 41].

Jelölje az $f(\mathcal{E}, T, \mu)$ függvény az $\mathcal{E}$ energiához, T hőmérséklethez és μ Fermi-nívóhoz tartozó Fermi-Dirac eloszlást. A zérus hőmérsékletre vonatkozó Fermi-Dirac statisztika értelmében az állapotok az $\mathcal{E}_F$ Fermi-energiáig vannak betöltve, azaz minden állapot betöltési valószínűsége, amelynek a $k = |\mathbf{k}|$ hullámszámvektorára teljesül, hogy $k < k_f$ egységnyi, míg felette zérus. Az előzőekben használt k_f a Fermi-energiához tartozó hullámszámvektor, amelyre $\mathcal{E}(k_f) = \mathcal{E}_F$. Ezt természetesen $T \neq 0$ esetben a Fermi-Dirac eloszlás árnyalja [40–42].

3.1.1. Stacionárius áramok ballisztikus vezetőkben

Tegyük fel, hogy a ballisztikus vezetőkben az áram a 3.1 ábrának megfelelően a pozitív x irányba folyik. Az ilyen irányba terjedő állapotokat, amelyeknek a k_x vetülete pozitív, a következőkben összefoglalóan $+k$, míg a negatív vetülettel rendelkezőket $-k$ -val jelöljük. Kapcsoljuk a $+k$ állapotokhoz a $\mathcal{E}^+$, míg a $-k$ állapotokhoz az $\mathcal{E}^-$ Fermi-nívót. Egyensúlyban természetesen $\mathcal{E}^+ = \mathcal{E}^-$. Ha a rendszerre a 3.1 ábrának megfelelően egy külső elektromotoros erőt kapcsolunk ideális vezetőkön keresztül, akkor könnyen belátható, hogy a ballisztikus vezető kvázi Fermi-nívói a kontaktusokban uralkodó kémiai potenciálokkal lesznek azonosak, azaz $\mathcal{E}^+ = \mu_1$ és $\mathcal{E}^- = \mu_2$. Könnyen belátható, hogy az alacsony energiás $+k$ és $-k$ állapotokból származó áramok kiegyenlítik egymás hatását egészen a $\mathcal{E}^-$ energiáig. Alacsony hőmérsékleten tehát a vezetésben csak a μ_2 és μ_1 közé eső állapotok vesznek részt. Jelölje ezeknek a μ_2 és μ_1 közé eső állapotok az energia szerinti Fermi-Dirac eloszlását az $f^+(E)$ függvény. A ballisztikus vezetőt, mint vékony hosszú vezetőt felbonthatjuk a hosszabb kiterjedés irányába eső longitudinális és arra merőleges transzverzális módusokra. A keresztirányú transzverzális módusok szempontjából a vezető zárt míg a longitudinális módusok szempontjából nyitott. A transzverzális módusok tehát "be vannak zárva" a vezetőbe és a spektrumuk ennek megfelelően kvantált. Egy adott Fermi-nívó esetén tehát csak bizonyos számú transzverzális módus tekinthető betöltöttnek. A vezetésben természetesen a longitudinális



3.1. ábra. A szilárdtestet, mint ballisztikus vezetőt bemutató sematikus ábra. A külső elektromotoros erő hatására a kémiai potenciálok eltolódnak az egyik illetve a másik kontaktusban és emiatt a vezetőben egymással ellentétes irányban haladó elektronok eltérő Fermi-nívót érzékelnek. Ezt az eltérést az ábra közepén található diszperziós reláció szemlélteti.

módusok vesznek részt, de minden transzverzális módushoz "ugyanannyi" longitudinális módus azaz ugyanakkora töltéstranszport tartozik. A következőkben egyetlen transzverzális módusra koncentrálunk, amelyre fennállnak a fenti megfontolások. Ha az l hosszúságú mintában az n elektronsűrűség állandó, akkor a módus env_g áramot szállít, ahol v_g az módusra vonatkozó csoportsebesség a 2.1 egyenletnek megfelelően. Ezek alapján egy adott módusra jutó áram

$$i_1 = \frac{e}{\hbar l} \sum_k \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E). \quad (3.2)$$

Ezt az összeget közelíthetjük egy integrál segítségével, ekkor

$$i_1 = \frac{2e}{h} \int_{\max(\varepsilon_n, \mu_1)}^{\mu_2} f^+(E) dE, \quad (3.3)$$

ahol ε_n az adott módus energiáját jelöli [43]. Ha $\varepsilon_n < \mu_1$ akkor $T = 0$ hőmérsékleten az integrál elvégzése után azt kapjuk, hogy

$$i_1 = \frac{2e}{h}(\mu_2 - \mu_1). \quad (3.4)$$

Tegyük fel, hogy összesen M módus vesz részt a vezetésben, továbbá tegyük fel azt is, hogy egy adott módus T valószínűséggel halad végig a ballisztikus vezetőn. Az eddigiekkel ellentétben feltettük tehát, hogy vannak szórócentrumok a vezetőben. Ekkor vezetőbe belépő I_{be} és az abból kilépő I_{ki} áramok rendre

$$I_{be} = \frac{M2e}{h}(\mu_2 - \mu_1), \quad I_{ki} = T \frac{M2e}{h}(\mu_2 - \mu_1). \quad (3.5)$$

A kettő különbségéből megkapjuk a visszavert áramot, azaz $I_{visz} = I_{be} - I_{ki}$. A vezetőn átfolyó teljes áram ekkor tehát $I = I_{ki} = I_{be} - I_{visz}$. A vezetőképesség ennek értelmében

$$G = \frac{I}{(\mu_2 - \mu_1)/e} = \frac{2e^2}{h}MT, \quad (3.6)$$

ami a Landauer-formula [43]. A formalizmus kibővíthető több kontaktussal rendelkező esetekre is, ekkor azonban a kémia potenciálok helyett érdekesebb bevezetni a kémiai potenciálok különbségéből származó V feszültség értékeket. A ballisztikus vezetési jelenségek ilyen módon történő általánosítása Büttiker nevéhez fűződik [44]. A szakirodalom ennek megfelelően ezt a megközelítést együtt Landauer-Büttiker formalizmusnak nevezi.

II. rész

Tudományos eredmények

4. fejezet

Áramok lokális keltése és modulációja fémekben

4.1. Bevezetés

A lézertechnológia nagymértékű fejlődésen ment keresztül az elmúlt évtizedekben. Ennek köszönhetően laborkörülmények között napjainkban már a femtoszekundumos (fs-os) impulzusok keltése is könnyen megvalósítható. Ezek a források hatékony eszközökként szolgálnak a különféle fs-os időskálán lejátszódó kémiai és fizikai folyamatok befolyásolására és feltérképezésére [22, 45–47].

Szilárdtest minták ultrarövid impulzusokkal történő vizsgálata során az elektronoknak kiemelt szerep jut. Kísérletileg igazolt tény, hogy ilyen impulzusok segítségével akár dielektrikumokban is, mint például a szilícium-dioxid, kelthetünk olyan áramokat, amelyek szoros kapcsolatban állnak a keltő elektromágneses fénnel [21]. Elméleti modellek és kísérleti eredmények is alátámasztották, hogy ilyen esetben a fs-os időskálán keltett áramok hasonlóan gyorsan el is tűnnek, ami ideális kiindulópont lehet az ultragyors kapcsolási technikák kifejlesztéséhez [20, 48–50]. Ilyen áramok keltése során a széles tiltott sávval rendelkező anyagok alkalmazása egyúttal korlátot is jelent, mert nagy térerősségekre van szükség a többfotonos folyamat lejátszódásához. Vezetők és félvezetők esetében sokkal kisebb térerősségek is elegendők az áramok keltéséhez. Nyilvánvalóan ilyen esetben nem az ultragyors kapcsolásokhoz kötődő alkalmazások

jelentik a fő célterületet. Az áramok könnyű keltése miatt ez esetben a jelenséget detektálási célokra használhatjuk. Ez lehetővé teszi olyan megfizethető szilárdtest alapú detektorok kifejlesztését, amelyek képesek lehetnek a gerjesztő impulzus paramétereinek meghatározására.

4.2. Célkitűzés

Ebben a fejezetben tehát a vezetési sávban lévő elektronok kölcsönhatását szeretnénk vizsgálni térben lokalizált elektromágneses impulzusokkal. Az egyszerűség kedvéért egydimenziós modellel dolgozunk, ami az egyszerűsége ellenére kísérleti szempontból is releváns lehet például fém vagy félvezető alapú nanohuzalok, vagy jól vezető szén nanocsövek lézerimpulzussal történő kölcsönhatása során [51–54]. A szilárdtestet ballisztikus vezetőként kezeljük és a gerjesztett elektronok dinamikáját a Landauer-Büttiker formalizmuson alapuló modell segítségével írjuk le [44, 55]. Ennek a módszernek az a lényege, hogy az egyes energia sajátállapotokat egymástól függetlenül kezeljük és az egyes sajátállapotok által létrehozott áramkomponenseket egyenként számoljuk ki, majd az így kapott áramokat összegezve határozzuk meg azok eredőjét. Ebben a fejezetben az effektív tömeg közelítést alkalmazva főként arra koncentrálnunk, hogy a különböző kezdeti síkhullám állapotok hogyan változnak meg a külső gerjesztés hatására, de az energia-sajátállapotok együttes hatására is kitérünk. Megvizsgáljuk továbbá a keltő elektromágneses tér és az egyes állapotok valószínűségi áramának kapcsolatát is.

Fontos kiemelni, hogy dipólközelítés alkalmazása esetén, amikor azt feltételezzük, hogy a elektromágneses tér térfüggése elhanyagolható, a kezdeti síkhullám időfejlődése analitikusan meghatározható az ilyenkor csak időfüggéssel bíró Hamilton-operátor ismeretében. Érdekes itt felidézni azt a tényt, miszerint a szabad töltött részecske nem nyer energiát egymódusú elektromágneses térrel történő kölcsönhatása során. Ilyen esetben tehát a részecske állapotok energiája nem változik a kölcsönhatás során. A szakirodalomban az ilyen homogén elektromágneses térben mozgó részecske kvantummechanikai állapotát felöltöztetett-, vagy Volkov-állapotnak hívják [56–58]. Mivel

ebben az esetben a dinamikát meghatározó Hamilton-operátornak síkhullámok a saját-állapotai, nincs átmenet a különböző állapotok között. A lokális gerjesztés alapfeltétele tehát annak, hogy nem triviális időfejlődéssel rendelkező dinamikát vizsgálhassunk a vezetési sávra szorítkozó modellünk alkalmazása során. Fontos megjegyezni, hogy a legújabb eredmények alapján a lokális gerjesztéseknek fontos szerepe van a magas-harmonikusok keltésének a folyamatában is [59].

A célunk tehát, hogy az alábbiakban részletesen bemutatott modell segítségével mélyebb betekintést nyerjünk abba, hogy a jellemzően fémekben ultrarövid impulzusok által keltett áramok milyen kapcsolatban állnak a folyamat különféle paraméterivel, mint például:

- (i) a keltő impulzus hossza,
- (ii) a keltő impulzus központi hullámhossza,
- (iii) a kezdeti állapot energiája,
- (iv) a kivilágítás szélessége.

Részletesen analizálni szeretnénk továbbá, hogy a rendszer különböző fizikai paramétereihez köthető idők milyen mértékben jelennek meg a keltett áramok lefolyásában, illetve az idő szerinti Fourier-transzformációból nyert spektrumban.

4.3. Lokális gerjesztések egydimenziós modellje

Szilárdtestek esetén a folyamat teljes értékű leírásához természetesen az elektron-elektron kölcsönhatásokat is figyelembe vevő több-részecske modellre lenne szükség, ennek ellenére azonban a szakirodalomban számtalan sikeres példa található nemcsak időfüggetlen (pl.: [60–63]) hanem időfüggő kvantumos transzportfolyamatot egyelektron képben leíró modellekre [64–66] is. Egyelektron kép esetén egyetlen rácspannós potenciálban mozgó elektront vizsgálunk. A modell potenciált a szilárdtestnek megfelelően választjuk.

4.3.1. Vezetési sáv effektív tömeg közelítésben

A Dirac-féle jelölésmódot alkalmazva jelölje $|n, \mathbf{k}\rangle$ a $\mathbf{k}$ hullámszám vektorú n . sávban lévő állapotot, amely energia sajátértéke $\mathcal{E}_{n,\mathbf{k}}$. Az egydimenziós esetre történő megkötés miatt a következőkben a valós térben az x koordinátát és ennek megfelelően a reciproktérben a $k = \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_x$ koordinátát használjuk. Adott T hőmérsékletű hőtartállyal termikus egyensúlyban lévő kvantummechanikai rendszer nem írható le egyetlen tiszta állapottal, hanem csak azok statisztikai keverékével. Ilyen esetben például a Fermi–Dirac eloszlás értelmében a $|n, k\rangle$ állapotok betöltöttsége azonos a $|n, -k\rangle$ állapotokéval. Felhasználva a Bloch-állapotok diszperziós relációjának szimmetriáját, miszerint $\mathcal{E}_{n,k} = \mathcal{E}_{n,-k}$, könnyen belátható, hogy az eredő valószínűségi áram várható értéke zérus. Ezek az eredmények, ahogyan a továbbiak is, formálisan származtathatók a következő, adott T hőmérsékletre tartozó sűrűségoperátorból is:

$$\hat{\rho}_{th}(T) = \sum_{n,k} f(\mathcal{E}_{n,k}, T, \mu_F) |n, k\rangle \langle n, k|, \quad (4.1)$$

ahol az f függvény az $\mathcal{E}_{n,k}$ energiához, T hőmérsékletre és μ_F Fermi-nívóhoz tartozó Fermi–Dirac eloszlás. Bár ez az egyenlet tükrözi az egyelektron-közelítés negatívumait is, nagy mértékben megkönnyíti, hogy ebben a keretben dolgozzunk. Például, ha valamely fizikai mennyiség várható értékére vagyunk kíváncsiak, akkor azt az egyes $|n, k\rangle$ állapotokra kapott várható értékeinek a Fermi–Dirac eloszlás szerinti súlyozott összegzésével kaphatjuk meg.

Ahhoz, hogy le tudjuk írni a kölcsönhatásban létrejövő transzportfolyamatokat, idézzük fel először a Bloch-állapotok ortogonalitását, miszerint

$$\langle n, k | n', k' \rangle \propto \delta_{n,n'} \delta_{k,k'}. \quad (4.2)$$

Az állapotok időfejlődését az $\hat{U}$ unitér időfejlődés operátor segítségével írjuk fel. Mivel az $|n, k\rangle$ állapotok energia sajátállapotok, az időfejlődésük jól ismert, ha a külső tér

zérus. Ekkor

$$\hat{U}(t_1, t_2) |n, k\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{E}_k(t_2 - t_1)} |n, k\rangle. \quad (4.3)$$

A külső tér bekapcsolása után a dinamika és ezzel az $\hat{U}$ időfejlődés operátor is megváltozik, de az unitér tulajdonsága megmarad. Ennek köszönhető, hogy az állapotokra vonatkozó ortogonalitási feltétel minden tetszőleges t időpillanatban teljesül. Tehát ha a külső elektromágneses teret a $t = 0$ időpillanatban kapcsoljuk be és azt mondjuk, hogy $|n, k\rangle(t) = \hat{U}(0, t) |n, k\rangle$, azaz $|n, k\rangle(t = 0) = |n, k\rangle$ akkor

$$\langle n, k | n', k' \rangle(t) \propto \delta_{n,n'} \delta_{k,k'} \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (4.4)$$

és a rendszert jellemző sűrűségoperátort továbbra is felírhatjuk az 4.1 egyenletnek megfelelően.

Annak érdekében, hogy egyszerűsítsük a számításokat és a fizikailag releváns jelenségekre koncentrálhassunk, a vizsgálataink során csak a vezetési sávra szorítkozunk és az effektív tömeg közelítést alkalmazzuk. Legyen a vezetési sáv indexe c . Ekkor az $n = c$ sáv alján az effektív tömeg közelítés értelmében a diszperziós reláció

$$\mathcal{E}_k = \mathcal{E}_{c,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \mathcal{E}_{c,0}, \quad (4.5)$$

ahol m^* jelöli az effektív tömeget. Ebben az esetben a sajátállapotok tisztán síkhullámok lesznek. Az ilyen síkhullám állapotokat gyakran alkalmazzák a transzportelméletben. Ebben a megközelítésben a kezdőállapot tehát

$$\varrho_{th}^c(T) = \sum_k |k\rangle \langle k| f(\mathcal{E}_k, T, \mu_F), \quad (4.6)$$

ahol a sávindex szerint nem kell összegeznünk, mivel minden lehetséges állapot a vezetési sávban van. A következőkben azt fogjuk tárgyalni, hogy a különböző paraméterű külső lokális terek hatására hogyan változnak meg a fenti összeg egyes alkotóelemei.

4.3.2. Lokális gerjesztések dinamikáját leíró egyenletek

A vizsgálni kívánt jelenség lényeges tulajdonságainak fenomenológia meghatározása már egy egyszerű egy dimenzióra (1D) szorítkozó modell segítségével is lehetséges. Ez a megszorítás a kapott eredmények kiértékelését és interpretációját is megkönnyíti, továbbá a probléma numerikus költsége is jelentősen csökken. Azzal a feltételezéssel éltünk, hogy a külső lézerimpulzus térben lokalizált. Ennek megfelelően a teret három tartományra bontottuk. Az a I. és a III. tartományban az elektron kölcsönhatás nélkül szabadon terjed, azaz a Hamilton-operátor ezekben a tartományokban a 2.1 fejezetben tárgyalt effektív tömeg közelítésnek megfelelően

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2m^*} + \mathcal{E}_{c,0}. \quad (4.7)$$

Ezzel szemben a középső, II. kölcsönhatási tartományban a dinamikát meghatározó Hamilton-operátor

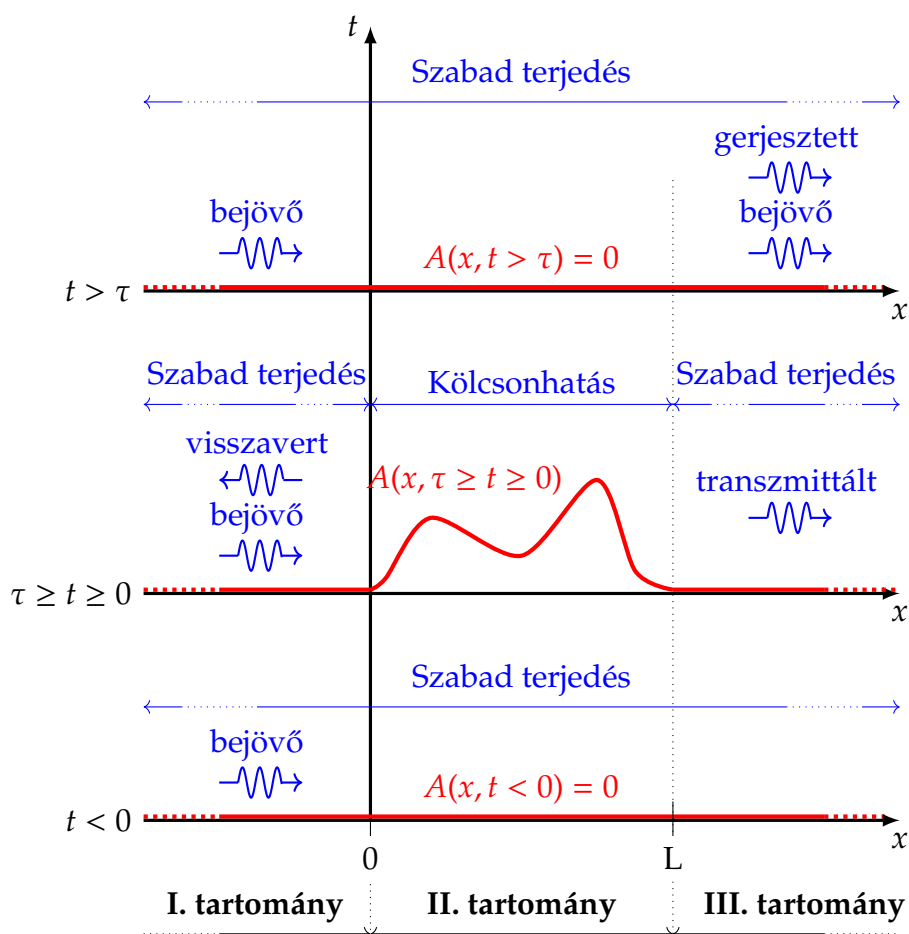
$$\hat{H}(\hat{X}, t) = \frac{1}{2m^*}(\hat{P} - e A(\hat{X}, t))^2 + e \Phi(\hat{X}, t) + \mathcal{E}_{c,0}, \quad (4.8)$$

ahol $A(\hat{X}, t)$ a külső gerjesztő elektromágneses tér vektorpotenciálját jelöli. A modell megalkotása során azzal a feltételezéssel éltünk, hogy kezdetben mind a három tartományban zérus volt a külső tér, azaz az elektron szabadon terjedt és a dinamikát mindhárom tartományban $\hat{H}_0$ határozta meg. Kezdetben tehát, amíg $t < 0$, egy adott k hullámszámhoz tartozó energia sajátállapot időfejlődése az (4.3) egyenletnek megfelelően

$$|k\rangle(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_k t} |k\rangle, \quad (4.9)$$

ahol $|k\rangle$ a kezdeti síkhullám, amelyre $\psi_k(x, 0) = \langle x|k\rangle = e^{ikx}$, továbbá $\mathcal{E}_k$ a k hullámszámhoz tartozó energia sajátérték, azaz

$$\hat{H}_0 |k\rangle = \mathcal{E}_k |k\rangle. \quad (4.10)$$



4.1. ábra. A modellben szereplő térbeli tartományok, illetve a lézerimpulzus által a szilárdtestben létrehozott vektorpotenciál sematikus rajza három különböző időtartományban.

Ahogy azt már említettük, a külső teret $t = 0$ időpillanatban kapcsoljuk be, amely térben az általunk vizsgált II. tartományra, azaz az x tengely mentén $[0, L]$ szakaszra van lokalizálva. Összefoglalva a vektorpotenciálról elmondhatjuk tehát, hogy

$$A(x, t) = \begin{cases} A'(x, t), & \text{ha } 0 \leq t \leq \tau, \text{ és } x \in [0, L] \\ 0, & \text{különben,} \end{cases} \quad (4.11)$$

ahol $A'(x, t)$ egy tetszőleges tér és időfüggéssel rendelkező függvény. A szimulációk numerikus megvalósítása során azonban az $A(x, t)$ függvényben szereplő nagymértékű ugrások instabilitásokhoz vezetnek. Ezt elkerülendő az $A'(x, t)$ -t úgy választjuk meg,

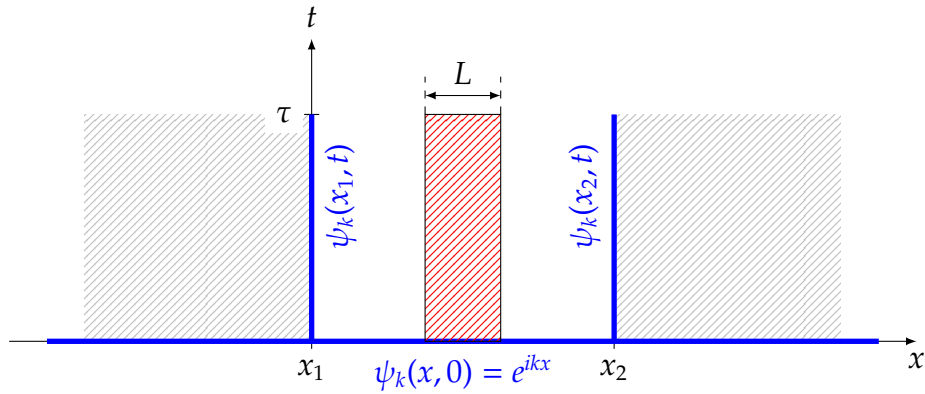
hogy a fel- és lefutása térben és időben egyaránt kellően sima legyen.

Az egyszerűség kedvéért a következőkben szorítkozzunk csak a pozitív k hullámszámú állapotokra, amelyek ennek megfelelően az x tengely mentén pozitív irányba terjedtek. A bekapcsolás után ($t > 0$), az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásai többé már nem síkhullámok. A II. tartománybéli perturbáció a kezdeti síkhullámon felüli hullámcsomagokat generál mind a pozitív mind pedig a negatív x irányba. A kezdeti állapotnak megfelelően ($k > 0$) a III. tartományban csak a transzmitált, míg a I. tartományban a bejövő $\psi_k(x, t)$ és reflektált hullámfüggvény szuperpozíciója van jelen. A modellalkotás során alkalmazott tér- és időbeli felbontást, illetve a fentiekben tárgyalt hullámcsomag komponenseket a 4.1 ábra szemlélteti.

A fentiekben kifejtett probléma numerikus módszerekkel történő megoldásának nehézségét az adja, hogy az I. és a III. tartomány félvégtelen. Más megközelítésben, ha csak egy véges tartományt vizsgálunk, ami a kölcsönhatási tartományt is magába foglalja, akkor egy nyílt kvantumrendszert kapunk, ami erős kölcsönhatásban van a környezetével. Periodikus gerjesztések esetén ez a probléma a Floquet-technika segítségével kezelhető, de széles spektrumú impulzusok esetén ez nem alkalmazható, ezért a megoldáshoz más megközelítésre van szükség [67, 68]. A problémára megoldást nyújthatnak a nem egyensúlyi Green-függvény elméletre épülő numerikus módszerek is, de a megvalósításhoz olyan időfüggő konvolúciós integrálokra van szükség a tartomány két szélén, amelyek numerikus költsége az időlépések számával egyre nő, ezért egy nagy időtávlatokban egyre lassuló algoritmust kapunk [64, 69]. A következőkben bemutatott megoldás ezzel szemben egy jól skálázódó algoritmust ad a kezünkbe.

4.3.3. Időablak kiterjesztése diszkrét Fourier-transzformáció segítségével

A célunk tehát az, hogy a sűrűségoszcillációkat keltő elektromágneses tér után meghatározzuk a keltett oszcillációk időfejlődését, azaz terjedését. Az időtartományt két részre bontjuk, az a) $t < \tau$ és a b) $t \geq \tau$ tartományokra. Az a) időtartományban arra kell figyelni, hogy a keltett oszcillációk ne érhék el szimulációs ablak x_1 és x_2 -vel



4.2. ábra. A modellezhető kölcsönhatási időtartomány kiterjesztésére használt módszer főbb elemeit szemléltető sematikus ábra: A τ időbeli és L tér kiterjedésű fényimpulzus hatására keletkező valószínűségi oszcillációk a pozitív irányban x_2 a negatív irányban pedig az x_1 pontig jutnak. Ebben az időtartományban az időfejlődést megoldhatjuk a szokványos numerikus módszerek segítségével. A τ időpillanat után kiterjeszthetjük a számításokat az x_1 és x_2 pontok túlra, mivel oda nem értek el az oszcillációk, azaz a hullámfüggvény itt a kezdeti $\psi_k(x, 0)$ időben fejlesztett alakja. A szimulációs ablak többszörösére növelésével lehetőség nyílik arra, hogy megvárjuk, amíg a perturbációk elhagyják a vizsgált L tartományt.

jelölt széleit. Ekkor ugyanis a kezdeti síkhullám időfejlődése a tartomány két szélén ismert $\psi_k(x = x_1, t) = e^{i(kx_1 - \omega t)}$ és $\psi_k(x = x_2, t) = e^{i(kx_2 - \omega t)}$, ezáltal a síkhullám számára transzparenssé tehető. Például $k > 0$ esetén ez azt jelenti, hogy az x_1 pontban egy folyamatosan bejövő, az x_2 pontban pedig egy folyamatosan kimenő síkhullámot kapunk az a) időtartományban.

Térmentes esetben (b) időtartomány) a dinamikát a $\hat{H}_0$ Hamilton-operátor határozza meg, amelynek energia sajátállapotai a $|k\rangle$ síkhullámállapotok. Ezeknek az állapotoknak az időfejlődése ismert a 4.9-as egyenlet szerinti. Ha tehát a lézertér utáni $|\Psi\rangle$ ($t = \tau$) állapotot kifejtjük a síkhullám sajátállapotokon, azaz meghatározzuk a $c_k = \langle k | \Psi \rangle$ ($t = \tau$) kifejtési együtthatókat, akkor az állapotot meg tudjuk adni bármely $t > \tau$ időpillanatban a

$$|\Psi\rangle(t) = \sum_k c_k e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{E}_k(t-\tau)} |k\rangle \quad (4.12)$$

összegzés segítségével. Ez a formula lényegében $|\Psi\rangle(t)$ Fourier-sorfejtett alakja, amely

hatékonyan implementálható a modern gyors Fourier-transzformáció (Fast Fourier Transform, FFT) segítségével.

Ahhoz, hogy minden oszcilláció, azaz a teljes gerjesztésből származó hullámcsomag kifusson a kezdeti $[x_1, x_2]$ szimulációs ablakból, ki kell terjesztenünk azt úgy, hogy a teljes hullámcsomag ki tudjon "folyni" az eredeti ablakból. Ehhez meg kell határoznunk azt, hogy a hullámcsomag leglassabb $|k_{min}\rangle$ komponense mennyi τ_k idő alatt teszi meg a tartomány széléig tartó utat, majd azt, hogy mekkora L_k utat tesz meg ekkora idő alatt a leggyorsabb $|k_{max}\rangle$ komponens. A numerikus megvalósítás során az esetek döntő többségében azonban a diszkrét Fourier-transzformációból származó $\delta k = 1/\tilde{L}$ spektrális felbontás a meghatározó, ahol $\tilde{L}$ a kiterjesztett szimulációs ablak szélességét jelöli. Ennek az értéknek a pontos meghatározása esettől függő finomhangolást igényel (az FFT algoritmus csak a kettő egész hatványaival megegyező pont esetén alkalmazható).

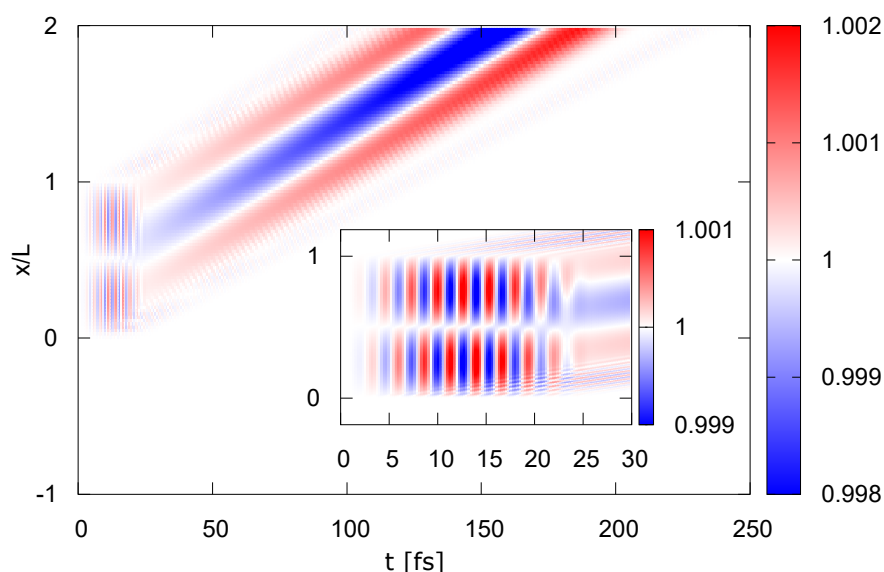
Ezzel az eljárással a szimulációs idővel lineárisan skálázódó módon, tetszőleges időlépéssel határozhatjuk meg a rendszer térmentes időfejlődést.

4.4. Lokalizált gerjesztés valószínűségi áramsűrűségének időfüggése

A vizsgálataink során egy térben és időben $\sin^2$ -es burkolóval rendelkező lézerimpulzust feltételeztünk, amely vektorpotenciálja

$$A(x, t) = A_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{\tau}t\right) \sin(\omega_0 t), \quad (4.13)$$

ha $x \in [0, L]$ és $t \in [0, \tau]$, különben $A(x, t) = 0$. A szimulációk során azt feltételeztük, hogy a lézer központi hullámhossza $\lambda_0 = \frac{2\pi c}{\omega_0} = 800$ nm, továbbá azt, hogy az impulzus teljes hossza (nem a félérték szélessége) $\tau = 26,7$ fs, ami 10 optikai oszcillációnak felel meg. A vektorpotenciál ismeretében az elektromos tér az $E(x, t) = -\partial A(x, t)/\partial t$ összefüggésnek megfelelően meghatározható. A külső elektromos tér amplitúdóját $F_0 = 1$ GV/m-re állítottuk, amiből a fentiekben említett összefüggés alapján a vektorpotenciál A_0 amplitúdója is meghatározható.



4.3. ábra. A külső elektromágneses impulzus által keltett valószínűségi sűrűség oszcillációk tér- és időfüggése. A lézertér paramétereit: $F_0 = 1\text{GV/m}$, $L = 160\text{nm}$, $\tau = 26,7\text{fs}$, $\lambda_0 = 800\text{nm}$, időfüggése a 4.13 egyenlet szerinti. Az ábra kinagyított részében az a $[0, \tau]$ időtartomány van kiemelve, amely alatt a külső tér nem zérus [27].

A szimulációk során kapott elektronsűrűség-oszcillációk tipikus tér- és időfüggését a 4.3 ábra szemlélteti. A vízszintes tengelyen a t idő- a függőlegesen pedig az x térkoordinátát ábrázoltuk. A térfüggést a kivilágítás L szélessége szerint skáláztuk az eredmények adaptációjának megkönnyítése érdekében. Ahogy az a nagyításból jól ki-vehető, a lézertér jelenléte alatt az elektromos tér az elektronok oszcillációját idézi elő. A külső tér előjelétől függően az elektronokat a pozitív vagy a negatív x irányba hajtja. Az ennek megfelelő elektronsűrűség oszcillációk a lézertér két széléről indulva egy-egy keskeny hullámcsomag formájában hagyják el a kölcsönhatási tartományt. Ezen oszcillációk frekvenciája azonos a lézertér vivőfrekvenciájával, az amplitúdója a kölcsönhatási tartomány szélességével van kapcsolatban. A tartomány növelésével ezen gyors oszcillációk amplitúdója egyre csökken egészen addig, amíg el nem érjük azt a határt, ahol már a bevezetőben említett dipólközelítés válik érvényessé. Ekkor ezek a gyors oszcillációk lényegében nem mutathatók ki, azaz eltűnnek. Ez a mérettől való függés annyira erős, hogy a lézer hullámhosszával összemérhető nagyságú fókuszfoltátmérők esetében ezek a gyors sűrűségoszcillációk lényegében nem tapasztalhatók, csak az általuk keltett áramok Fourier-transzformációja útján nyert spektrumban azonosíthatók

be. A szimulációk során azért választottunk tehát jóval a lézertér hullámhossza alatti kölcsönhatási tartományt (konkrétan az $1/5$ -ét), hogy szemléltetésük lehetővé váljon az elektronsűrűség ábrázolás révén. Ilyen lézerterek azonban kísérletileg is létrehozhatók nanolokalizált terek segítségével [70, 71].

4.5. A ponderomotoros potenciál szerepének feltérképezése

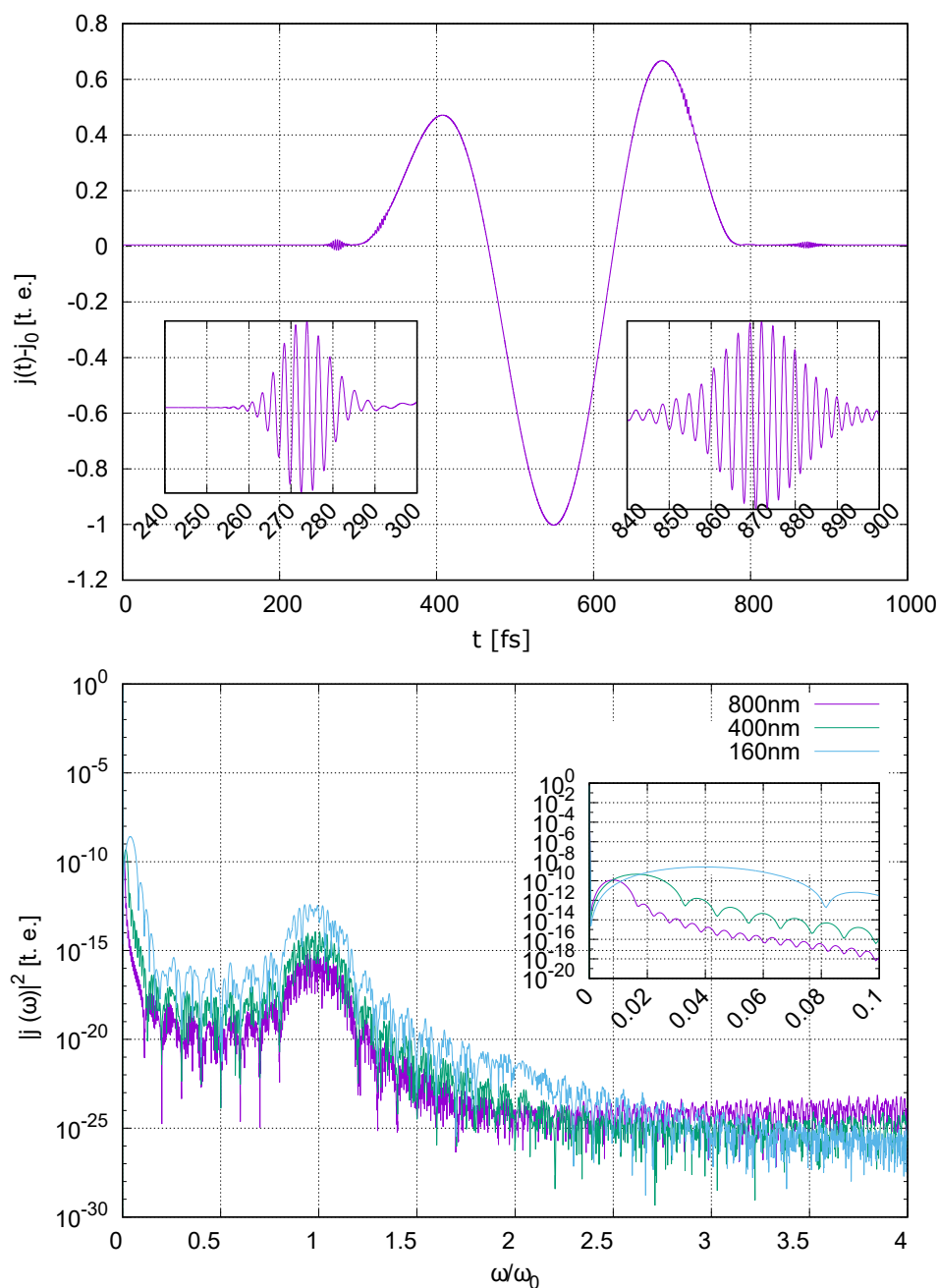
Fontos megjegyezni, hogy a gyakorlatban a gerjesztés térbeli kiterjedésének mindig van egy felső határa. Ez a térbeli lokalitási tulajdonság vezet a 4.3 ábrán látható lassan felépülő kettős csúccsal és alacsony oszcillációs frekvenciával rendelkező hullámcsomag struktúrára kialakulásához. Figyeljük meg, hogy ennek az oszcillációnak az amplitúdója a kölcsönhatási tartománytól távolodva egyre erősebb. Ezt azt mutatja, hogy a hullámcsomagot alacsony energiájú lassú síkhullámkomponensek alkotják, amelyek konstruktív interferenciája a gerjesztő fényimpulzustól térben és időben egyaránt távol alakul ki. Ezt alátámasztja a tartomány szélén ($x = 2L$ pontban) mért valószínűségi áram időfüggése is. Az időbeli Fourier-transzformáció segítségével előállított spektrum a 4.4 ábrán látható. A spektrum alacsony frekvenciás részén ez a hullámcsomag struktúra megfelel a bejövő hullámcsomag $\mathcal{E}_k$ energiája körüli keskeny energiatartománynak. Ez azt jelenti, hogy a hullámcsomag közel a kezdeti síkhullámnak megfelelő sávbéli sebességgel terjed. Ennek köszönhető, hogy ez az erős struktúra csak jóval a külső lézerimpulzussal való kölcsönhatás után jelenik meg. Alátámasztja a valószínűségi sűrűség elemzése során levont következtetés is, hogy ezek a struktúrák a gerjesztő impulzus hosszánál jelentősen nagyobb időskálán alakulnak ki. Ehhez a kettős csúccsal rendelkező sűrűség oszcillációhoz hasonló alacsony frekvenciájú oszcillációkat tapasztalhatunk akkor is, ha egy nem oszcilláló véges magasságú potenciállal be- és kikapcsolásának hatását vizsgáljuk [27]. A hasonlóság a külső lézertér ponderomotoros

potenciáljának a segítségével magyarázható. Ennek alakja

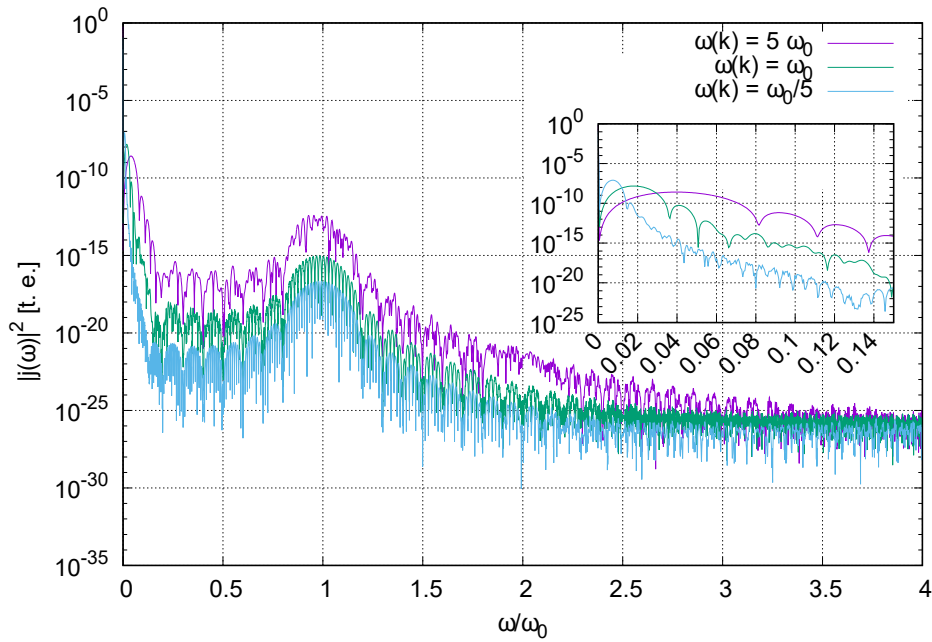
$$U_p(x, t) = \frac{e^2 E_0^2(x, t)}{4m\omega_0^2}, \quad (4.14)$$

ahol $E_0(x, t)$ jelöli az adott pontbéli elektromos térerősség lassan változó amplitúdóját, melynek időfüggése a külső lézertér időbeli burkolójából származik. A véges hosszúságú gerjesztés tehát egy olyan ponderomtoros potenciálnak felel meg, amit a lézerimpulzus kezdetekor be-, majd annak végeztével kikapcsolunk. Klasszikus képen vizsgálva az effektust azt látjuk, hogy habár az U_p -hez köthető oszcillációk a teljes általunk vizsgált paraméter tartományon megtalálhatók, intuitív módon az effektus erősebb ha az elektron több idő tölt a kölcsönhatási tartományban, azaz az elektron kezdeti $\hbar k$ impulzus kisebb. A transzmissziós oldal szélén mért $j(t) = j(x = 2L, t)$ valószínűségi áram analízise alátámasztja ezt a kvalitatív képet.

A 4.4 ábra a fent említett valószínűségi áram időfüggését és ennek, mint időfüggő jelnek a Fourier-transzformációjából kapott spektrumát mutatja be három különböző méretű kölcsönhatási tartomány esetén. Az adott $|k\rangle$ állapothoz tartozó $j(t)$ valószínűségi áramkomponens általános jellemzője, hogy három különböző jelet tartalmaz: két relatív gyenge, gyorsan oszcilláló csomagot, amelyek között található egy nagy amplitúdójú, lassan változó kettős csúcssal rendelkező tag. Összehasonlítva a 4.3 ábrán látható részecskesűrűséggel, beazonosítható, hogy a gyenge jelek a lézertér által keltett gyors sűrűségoszcillációkból származnak, amelyek a kölcsönhatási tartomány mindkét szélén, a nagy gradienssel rendelkező részekben keletkeznek. Ezzel szemben, a lassan változó rész a sűrűség oszcillációk tárgyalásánál bemutatott effektuson keresztül itt is az U_p ponderomtoros potenciálhoz köthető. Ezek a tulajdonságok megfigyelhetők az áram $|j(\omega)|^2$ spektrumában is, amelyben két erős csúcs található a két időtartománybeli tagnak megfelelően. A spektrumot a lézer központi $\omega_0 = 2\pi/\lambda_0$ körfrekvenciájának függvényében ábrázoltuk a különböző tagok könnyebb beazonosíthatóságának érdekében. Figyeljük meg, hogy a kezdeti elektronállapotnak megfelelő $\omega(k) = \mathcal{E}_k/\hbar$ csúcs lényegében nem található meg a spektrumban. Ennek oka, hogy a valószínűségi áram nem érzékeny a hullámfüggvény kvantummechanikai fázisára.

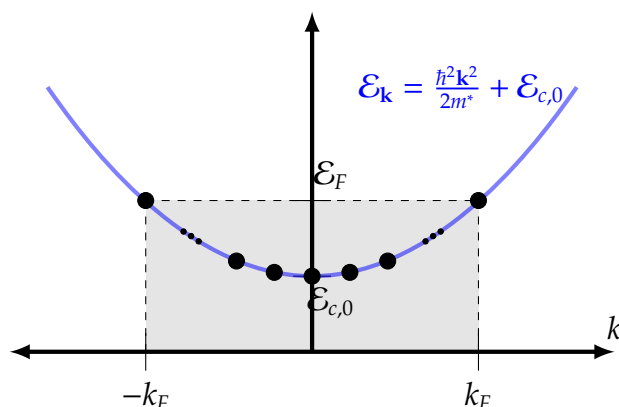


4.4. ábra. A lézerimpulzussal keltett valószínűségi áramsűrűség tipikus időfüggése (a kezdeti állapot konstans $j_0 = \hbar k/m$ áramával kompenzálva) és spektruma. A felső panelen a valószínűségi áram időfüggése látható az $x = 2L$ pontban. Az alsó panelen valószínűségi áramnak, mint időfüggő jelnek a Fourier-transzformációjából kapott spektrumát láthatjuk három különböző L szélességű kölcsönhatás tartomány esetén. Lézerparaméterek: $F_0 = 1$ GV/m, $\tau = 26,7$ fs, $\lambda_0 = 800$ nm [27].



4.5. ábra. Három különböző $|k\rangle$ állapothoz tartozó $x = 2L$ pontban mért valószínűségi áramkomponens $|j(\omega)|^2$ spektruma ($\mathcal{E}_k = \hbar\omega(k)$). A lézertér paraméterei megegyeznek az előző (4.4) ábrán közöltekkel [27].

Ahogy az a 4.4 ábra alsó részén, illetve a 4.5 ábrán látható, az ω_0 és az U_p -vel kapcsolatos spektrális csúcsok relatív súlya függ mind az elektron $\mathcal{E}_k$ energiájától, mind pedig a kölcsönhatási tartomány nagyságától. Az ábrákról egyértelműen leolvasható, hogy a ω_0 frekvenciájú oszcillációk gyengébbek nagyobb kölcsönhatási tartományok esetén. Hasonlóan tendenciózus a kapcsolat $\mathcal{E}_k$ elektron energia és a ω_0 frekvenciájú oszcillációk között: minél kisebb az elektron energiája, annál kisebb oszcillációkat kapunk. Ez a tulajdonság összhangban van a már említett egyszerű klasszikus képpel, miszerint nagyobb effektív kölcsönhatási tartomány esetén (kisebb $\mathcal{E}_k$ elektron energia esetén több időt tölt az elektron a lézertér hatása alatt) egyre inkább a dipólközelítés lép érvénybe és gyengébb lézerindukált effektusok várhatók. Habár a ponderomotoros potenciál hatása is enyhébb nagyobb kölcsönhatási tartomány esetén (mivel ekkor a burkoló gradiense is kisebb) ez a függés nagyságrenddel csekélyebb mértékű, mint a ω_0 frekvenciájú tagoké. Ennek köszönhető, hogy az L kölcsönhatási tartomány növelésével az U_p ponderomotoros potenciál hatása válik dominánssá. A 4.5 ábra külön kinagyított alacsony frekvenciás részében az látható, hogy a lassú elektronok több



4.6. ábra. A modellben szereplő vezetési sáv és az összegzés felső határának számító E_F Fermi energia szemléltetése. A vezetési sáv paraboláján található pöttyök az egyes $|k\rangle$ kiindulási síkhullámállapotokat jelölik.

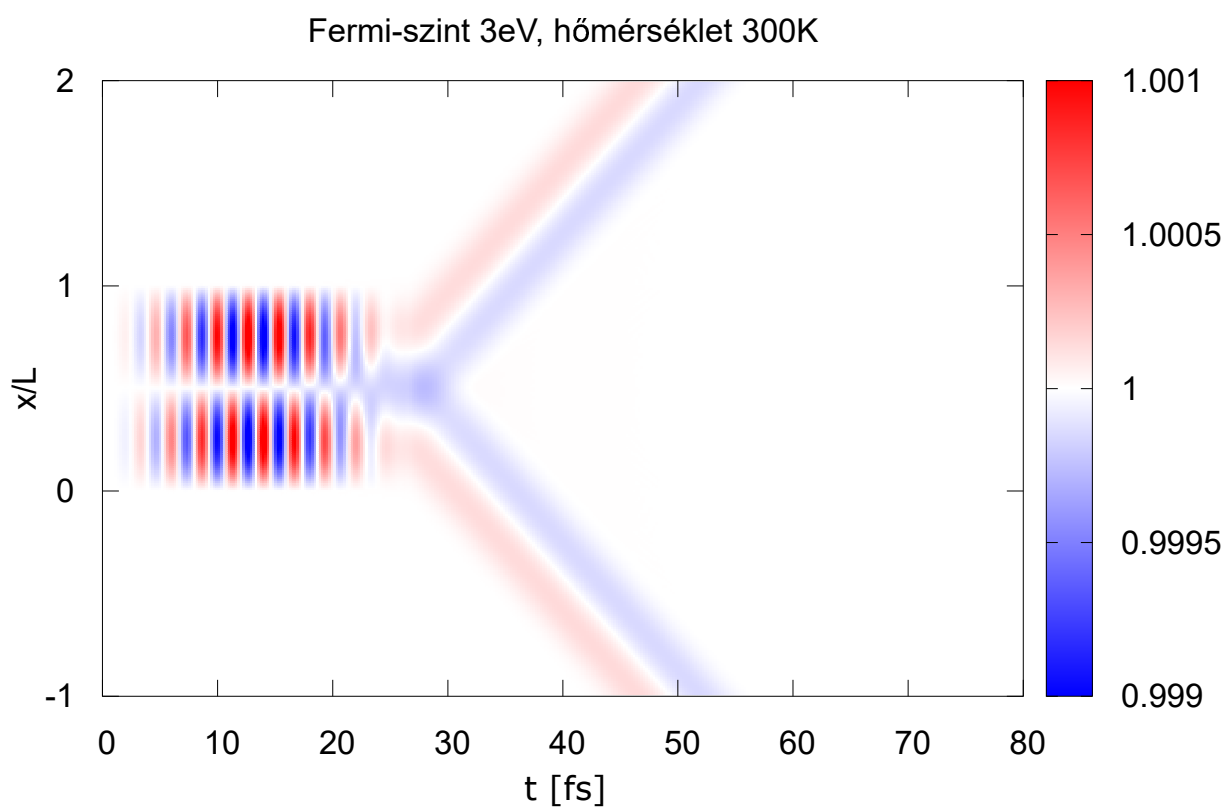
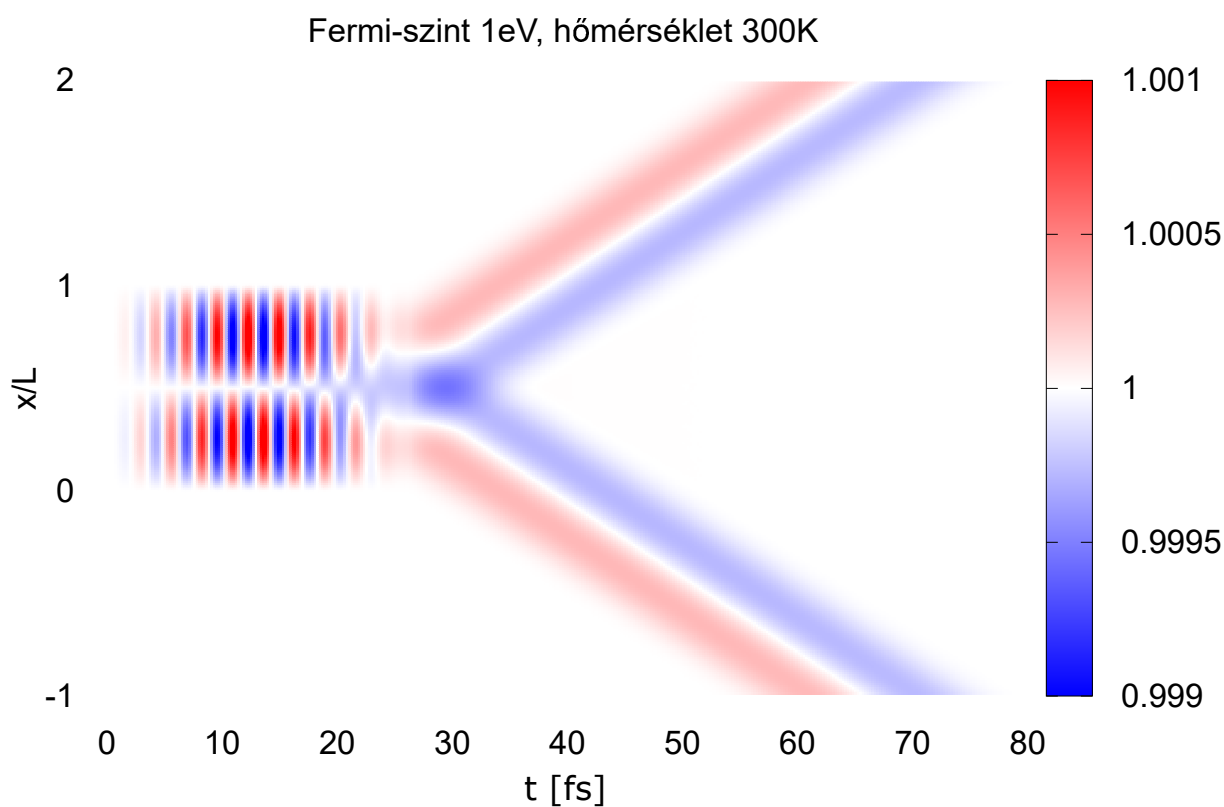
lézerciklust érzékelnek, aminek következtében nagyobb lesz az alacsony frekvenciás csúcs a spektrumban. Ezen felül, amíg az ω_0 körüli csúcsok szélessége lényegében nem változik, addig a nagyobb elektron energiák és a kisebb kölcsönhatási tartományok esetén az időtartományban rövidebb U_p által keltett jelet kapunk, és az ennek megfelelő alacsony frekvenciás csúcsok is kiszélesednek. Ez teljes összhangban van azzal az intuitív képpel, hogy megfeleltethetjük az U_p -t egy potenciálnak, amit bekapcsolva tartunk amíg a külső impulzus tart, majd kikapcsolunk annak a végeztével.

4.6. Elektronsűrűség-oszcillációk vizsgálata fémekben

Az eddigiekben egy-egy adott $|k\rangle$ állapotból indultunk ki és ezen állapotok külső elektromágneses impulzus hatása alatt létrejövő időfejlődését vizsgáltuk külön-külön, dinamikai szempontok alapján. A következőkben ezen állapotok együttes, eredő dinamikáját vizsgáljuk. A 4.6 képletnek megfelelően ezt úgy tehetjük meg, hogy meghatározzuk az egyes kezdeti $|k\rangle$ állapotok időfejlődését, majd összeadjuk az egyes állapotokból származó valószínűségi sűrűségeket. Legegyszerűbb az az eset, amikor azt feltételezhetjük, hogy a rendszer hőmérséklete $T = 0K$, ekkor az összegzést a szimmetrikus vezetési sávnak megfelelően mind pozitív, mind pedig negatív k -ra végre kell hajtani egészen az $E_F = E_{k_F} = E_{-k_F}$ Fermi-energiáig. Ezt az esetet a 4.6 ábra szemlélteti.

Nulla Kelvinnél magasabb véges hőmérsékletek esetén az egyes állapotok súlyát a Fermi–Dirac eloszlás adja. A stacionárius esethez hasonlóan (lásd: 3.1.1), ehhez egy olyan fizikai képet kapcsolhatunk, amelyben a kölcsönhatási tartomány, mint ballisztikus vezető mindkét végén egy-egy termikus egyensúlyban lévő hőtartályhoz kapcsolódik, amelyek Fermi–Dirac eloszlása minden egyes időpillanatban meghatározza a kölcsönhatási tartomány határfeltételeit és a beinjektált állapotok statisztikus eloszlását. Nem zérus hőmérsékletek esetén a Fermi–energia feletti állapotok súlya is jelentős, ezért ezekre az állapotokra is ki kell terjeszteni az összegzést. A numerikus kalkulációkat azonban nem lehet végtelen sok pontban elvégezni, ezért a Fermi–energia feletti állapotok hozzáadását az eredő elektronsűrűséghez addig folytattuk, amíg az adott állapotból származó járulék hatása az eredő sűrűségre megfelelően kis mértékű nem lett.

A 4.7 ábra az eredő elektronsűrűség időfüggését mutatja be szobahőmérsékleten két különböző Fermi–nívó esetén. Ha a 4.7 ábrán látható szobahőmérsékleten kapott elektronsűrűség időfüggését összehasonlítjuk a 4.3 ábrán láthatóval, akkor két fontos különbséget figyelhetünk meg: Az x tengely mentén mind a két irányba halad egy-egy hullámcsomag, illetve a külső lézertér által közvetlenül keltett sűrűségoscillációk lényegesen hangsúlyosabbak. Az első eltérés oka, hogy ebben az esetben mind a két irányba, azaz jobbra és balra haladó kezdeti síkhullám komponens is van az elektronsűrűségben. A második eltérés oka pedig az, hogy a lézerindukált sűrűségoscillációk fázisa lényegében megegyezik minden kezdeti állapot esetén, ezért, amikor k szerint összegzünk, mindig egy olyan tagot adunk hozzá az előzőekhez, ami ugyanolyan módon tér el az egyensúlyi sűrűségtől, mint a többi, így az eltérések hangsúlyosabbá válnak. Ezeken felül fontos azt is megjegyezni, hogy a 4.7 ábrán látható lassan haladó hullámcsomagok a Fermi–szint körüli állapotoknak felelnek meg. Ez abból is jól látszik, hogy ezek a hullámcsomagok lényegében a Fermi–sebességgel terjednek. Ezen felül hasonló időfüggéssel rendelkező elektronsűrűséget kapunk akkor is, ha a dinamikát csak a Fermi–szint szűk környezetébe (ez a $k_B T$ termikus energia néhányszorosának megfelelő szélességű tartományt jelent) eső állapotokból számoljuk. Természetesen a 4.3 ábrán látható dinamika jellemzi jóval a Fermi–szint alatt lévő állapotokat is, de a



4.7. ábra. A lézertér által egy fémben keltett normált tér- és időfüggő elektronsűrűség. A keltő elektromos tér paraméterei: $F_0 = 1\text{GV/m}$, $L = 160\text{nm}$, $\tau = 26,7\text{fs}$, $\lambda_0 = 800\text{nm}$ [27].

ponderomotoros potenciál által keltett különböző tér- és időfüggéssel rendelkező hullámcsomagok eredője lényegében elhanyagolható a Fermi-szint körüliekhez képest. Fontos kiemelni, hogy ez az effektus nem a kvantum állapotok közötti destruktív interferenciának köszönhető, mivel az összegzés a sűrűségek szintjén történt, így az egyes állapotok fázisa az összegzésben nem játszik szerepet. Ez a megfigyelés teljes mértékű összhangban van azzal a ténnyel, miszerint a transzport folyamatokban csak a Fermi-szint körüli állapotok játszanak szerepet.

4.7. Összefoglalás

Ebben a fejezetben a lézerimpulzusok által fémekben keltett áramok kapcsolatát vizsgáltuk a keltő elektromágneses tér paramétereivel. Egy térben és időben is lokalizált elektromágneses impulzust tételeztünk fel, és a vizsgálatainkat egy dimenzióra korlátoztuk. A vezetési sávbéli elektronok diszperziós relációját az effektív tömeg közelítés segítségével vettük figyelembe. A vizsgálatokhoz használt algoritmus elméleti háttere a ballisztikus vezetők kvantumelméletén alapul [40, 41]. Ebben a modellben az egyes energia sajátállapotokat egymástól függetlenül kezeltük és az általuk létrehozott valószínűségi sűrűség- és áramkomponenseket vizsgáltuk. Ez a megközelítés lehetőséget ad az egyes valószínűségi sűrűségkomponensek Fermi–Dirac eloszlás szerinti összegzése után az eredő dinamika vizsgálatára is, adott T hőmérsékleten. A külső tér által keltett oszcillációk áramát a kölcsönhatási tartományon kívül határoztuk meg. Az oszcillációk viselkedésük szerint két részre bonthatók. Az egyik részét ezeknek a tovaterjedő zavaroknak a külső lézertér alatt keletkező és azzal azonos frekvenciájú oszcillációk adják, a másik részét pedig a jellemzően a külső tér elhaladta után felépülő lassú oszcillációk. Ezen kettősségből fakadó numerikus nehézségeken felülkerekedve meghatároztuk a keltett valószínűségi áramot az $x = 2L$ pontban (L a kivilágítás szélessége), különböző fókuszátmérők és kezdeti síkhullám energiák esetén. Az így kapott áramok Fourier–transzformációjának segítségével kimutattuk, hogy a gerjesztő tér vivőfrekvenciájának súlya a spektrumban annál kisebb, minél lassabbak az elektronok, illetve minél szélesebb a kölcsönhatási tartomány. A kapott eredményeket

a ponderomotoros potenciál koncepciójának segítségével sikerült megmagyaráznunk. Klasszikus képben a kölcsönhatási tartományon áthaladó elektron mozgására a lézertér által indukált oszcilláció rakódik rá, ami a haladó mozgás szempontjából egy effektív potenciált jelent. Ennek a potenciálnak a hatása annál erősebb, minél több időt tölt az elektron a kölcsönhatási tartományban. Lassú elektronok és/vagy széles kivilágítási tartomány esetén a lézerindukált dinamika közel megegyezik egy, az impulzus burkolója szerint megjelenő, majd eltűnő potenciál által létrehozott időfejlődéssel. Végezetül az egyes kezdőállapotok valószínűségi sűrűségének időfejlődését a szobahőmérséklethez tartozó Fermi–Dirac eloszlás szerinti összegzésével meghatároztuk az eredő elektron dinamikát, majd kiemeltük, hogy az eredő valószínűségi sűrűségben a legnagyobb járulékot a Fermi–energia szűk környezetébe eső állapotok adják.

A fenteik alapján az új tudományos eredményeimet az alábbi tézispontokban foglaltam össze:

1. Lokális gerjesztések egydimenziós modellje

Szilárdtestek és lézerimpulzusok kölcsönhatását vizsgáltam. Módszert dolgoztam ki egy dimenzióban, egyrészecske-képben, effektív tömeg közelítést alkalmazó modellben a vezetési sávbeli elektronok és térben lokalizált lézerimpulzus kölcsönhatásának a leírására. Ez a numerikus eljárás túlmutat a szokásosan alkalmazott dipólközelítés keretein és alkalmas a fókuszfoltban keletkező, majd onnan tovaterjedő elektronsűrűség-oszcillációk tanulmányozására [P1].

2. Kvantumos szórás valószínűségi áramsűrűségének időfüggése

Az 1. pontban ismertetett módszert alkalmazva vizsgáltam a lézerindukált dinamika függését az elektronenergiáktól és a kivilágítás szélességétől. Kiszámítottam a lézerimpulzus által keltett áram időfüggését, majd Fourier–transzformáció segítségével megmutattam, hogy a gerjesztő tér vivőfrekvenciájának a súlya a spektrumban annál kisebb, minél lassabbak az elektronok, illetve minél szélesebb a kölcsönhatási tartomány [P1].

3. A ponderomotoros potenciál szerepének feltérképezése

A kapott eredményeket fizikailag értelmeztem a ponderomotoros potenciál koncepcióját felhasználva. Klasszikus képben az effektust úgy interpretálhatjuk, hogy a kölcsönhatási tartományon áthaladó elektron mozgására a lézertér által indukált oszcilláció rakódik rá, ami a haladó mozgás szempontjából egy effektív potenciált jelent. Ennek a potenciálnak a hatása annál erősebb, minél több időt tölt az elektron a kölcsönhatási tartományban, ami összhangban van az előző tézispontban talált összefüggésekkel. Lassú elektronok és/vagy széles kivilágítási tartomány esetén a lézerindukált dinamika közel megegyezik egy, az impulzus burkolója szerint megjelenő, majd eltűnő potenciál által létrehozott időfejlődéssel [P1].

5. fejezet

Lokálisan keltett töltéstranszport szilárdtestekben

5.1. Bevezetés

Habár a következőkben bemutatott módszer számtalan alkalmazási lehetőséggel rendelkezik, a számítások kidolgozása során a fő motivációnk az volt, hogy hatékony eszközt kapjunk a szilárdtestekben lézerimpulzus hatására elmozduló töltések meghatározására. Ennek megfelelően a számításokat is ebben a kontextusban fogjuk tárgyalni.

Kísérletileg igazolt tény, hogy dielektrikumok esetén egy kellően rövid és intenzív lézerimpulzus a dielektrikum "metalizációjához", azaz kifémesedéséhez vezethet [72]. Ilyen esetben az átmeneti fémes tulajdonságoknak köszönhetően az impulzus által "kilökött" töltés is mérhető megfelelő gyűjtő kontaktusok kialakításával [21]. Ebben a kísérletben szilícium-dioxid minta felületét világították meg egy ultrarövid (4 fs alatti) $\lambda \approx 750$ nm központi hullámhosszúságú lézerimpulzus segítségével, amelynek a maximális térerőssége $1,7 \times 10^{10}$ V/m volt. Az impulzussorozat által keltett töltéseket az aranyozott kontaktusokon keresztül egy áram-feszültség átalakító segítségével detektálták. A gyűjtő kontaktusok közötti résre merőleges polarizációjú elektromos tér által keltett töltéshordozók a kontaktusokon keresztül egy jól mérhető vivő-burkoló fázisfüggő töltést szállítottak. Napjainkban lényegesen gyengébb impulzusok segítségével is sikerült hasonló effektusokat kimutatni. Ahogy azt Hanus és társai bemutatták,

megfelelően optimalizált lock-in erősítési technikával már pJ-os tartományba eső impulzusokkal keltett jelek CEP függése is kimutatható [73]. Ezeken az eredményeken túl érdemes azt is megemlíteni, hogy napjainkban az elérhető legrövidebb kapcsolási időket optikai gerjesztések segítségével érik el [22].

Ahogy az a fentiekben felsorolt kísérleti eredmények is mutatják, a szilárdtestekben lokálisan keltett töltések vizsgálata egyre intenzívebben kutatott terület. Fontos kiemelni azonban, hogy napjaink csúcstechnológiás detektorai sem képesek az ultrarövid impulzusok által keltett áramok időfüggésének kellő felbontású direkt mérésére. Az áram időintegráljának, azaz a töltésnek a mérésére ezzel ellentétben a fentiekben felsorolt cikkekben is több különféle módszer található. A kísérleti eredmények elméleti háttérének kidolgozása során az egyik legnagyobb nehézség a kölcsönhatás természetéből fakadó különböző időskálák összeegyeztetése. Míg maga a lézerimpulzus hossza jellemzően a pár fs, a kölcsönhatás során keletkezett töltések nagyságrendekkel nagyobb, jellemzően ps-os időskálán érik el a detektort. Numerikus oldalról vizsgálva a problémát ez azt jelenti, hogy a lézertérrel való kölcsönhatás során a differenciálegyenletek megoldásához a megfelelő pontosság érdekében fs alatti időlépésekre van szükség. Ha a lépésköz változatlan a töltések transzportja során, akkor rendkívül sok időlépésre van szükség, ami magas numerikus költségekkel jár (hosszú futás, nagy mennyiségű adat). Változó, nagyobb lépésközök esetén a töltésáramlás apró oszcillációit nem lehet feloldani kellő pontossággal. Mivel a gerjesztés után az időfejlődés meghatározása az előbb felsorolt okok miatt nagy numerikus költséggel rendelkezik, érdemes olyan módszert keresni, amelyhez nincs szükség az állapot explicit időfüggésére. A külső tér távollétében segítségünkre lehet az elektromágneses tér mérték invarianciája is [74, 75]. Erre a szemléletre épül a következőkben tárgyalt Fourier-transzformációra épülő módszer is.

Visszatérve a külső lézerimpulzus alatt a fényindukált dinamika meghatározására, erre a feladatra több különböző megközelítés létezik: egy-elektron képet alkalmazó Schrödinger-egyenletre, Green-függvény technikára és a félvezetőkre alkalmazott Bloch-egyenletekre épülő numerikus módszereket is hatékonyan alkalmaznak [64, 76–84]. Természetesen a folyamat teljes értékű leírásához az elektron-elektron kölcsön-

hatásokat is figyelembe vevő több-részecske modellre van szükség. Ennek ellenére számtalan különböző rendszer esetén sikerült az egyensúlyi kvantumozott transzport tulajdonságokat megfelelően reprodukálni [40, 41, 85–89]. Vannak ezen a területen továbbá időfüggő kapocsfeszültséget és külső teret is jól leíró modellek [64–66]. Erre való tekintettel érdemes tehát első lépésként az egyelektron képre szorítkozni és megvizsgálni az így kapott eredményeket.

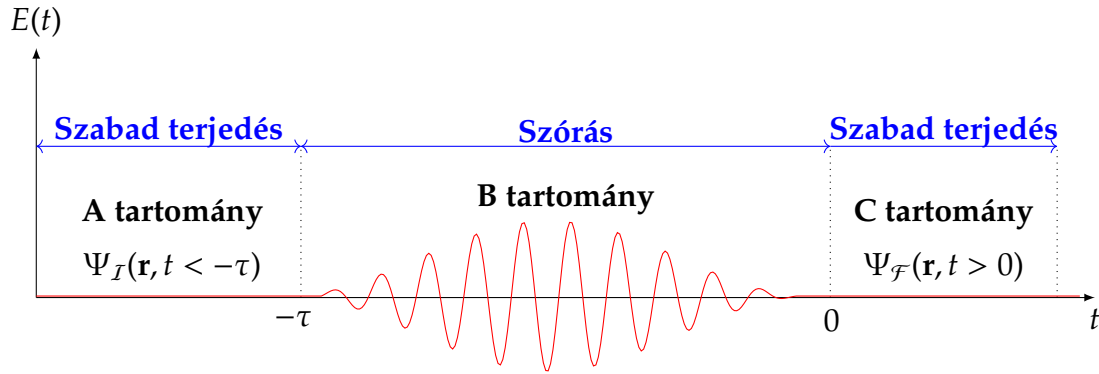
5.2. Célkitűzések

Statikus esetben, amikor a rendszert leíró paraméterek időben állandók, egy adott T hőmérsékletű ballisztikus mintán átfolyó valószínűségi áram nagyságát megadhatjuk az energia sajátértékek ismeretében 3.3 egyenlet segítségével. Időfüggő gerjesztések esetére is egy hasonló összefüggést tudunk felírni:

$$I(T, t, \mathbf{r}) = \int i(\mathcal{E}, t, \mathbf{r}) f(\mathcal{E}, T) d\mathcal{E}, \quad (5.1)$$

ahol $i(\mathcal{E}, t, \mathbf{r})$ jelöli a mintába a vezetékekből, mint külső tartályokból bejutó $\mathcal{E}$ energiájú állapotok által keltett áramot [64]. Külső behatás nélkül, amikor nincs kapufeszültség és külső elektromágnes tér sem befolyásolja a töltéshordozók viselkedését, ezek az állapotok megfelelő határfeltételek esetén szintén a vizsgált szilárdtestminta energia sajátállapotai.

Egyelektron képet alkalmazva egyetlen elektront vizsgálunk, amely jellemzően egy periodikus potenciáltérben mozog. Jelölje kezdetben a vizsgálni kívánt elektron állapotát Ψ_I . Tegyük fel, hogy az elektron állapota megváltozik egy véges τ hosszúságú külső elektromos tér, például egy lézerimpulzus hatására. A tér elhaladta után az elektron állapotát jelölje Ψ_F . A számításokat nagyban leegyszerűsíti, ha azzal a feltételezéssel élünk, hogy a külső gerjesztés $-\tau$ időpillanatban kezdődik és $t = 0$ időpillanatban fejeződik be. Ezt a 5.1 ábra szemlélteti. Ha arra vagyunk kíváncsiak, hogy a külső lézerimpulzus hatására a kezdeti állapothoz képest hogyan változott meg az elektron kvantummechanikai állapota, akkor érdemes leválasztani a már ismert kez-



5.1. ábra. A kölcsönhatás időtartományainak szemléltetése. Az időtengely (vízszintes tengely) időben véges hosszúságú külső elektromágnes impulzus előtti részét az A tartomány jelöli. A külső lézertér a hatását a B tartományban fejt ki, míg az így keltett kvantummechanikai hullámcsomagok a C tartományban érik el a detektorokat. A függőleges tengely mentén mérjük a külső elektromos tér nagyságát. Szemléltetésként ennek a térnek egy lehetséges időbeli lefolyását pirossal ábrázoltuk.

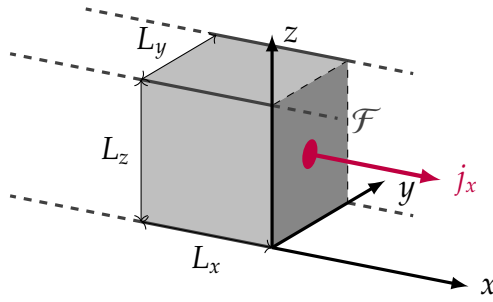
dőállapotot és csak az ezen felüli részt vizsgálni. A felbontás további előnye az, hogy a külső lézerimpulzus előtt a szilárdtest termikus egyensúlyban volt, így a kezdeti állapotból származó elemi áramot kiküszöböli a többi állapot statisztikus keveréke és a fennmaradó rész, a fény által generált eltérés hordoz minden mérhető információt a kölcsönhatásról. Az említett megfontolások miatt érdemes tehát a Ψ_F állapotot $t = 0$ időpillanatban a következőképpen felbontani

$$\Psi_F(\mathbf{r}, t = 0) = \Psi_I(\mathbf{r}, t = 0) + \Psi_A(\mathbf{r}, t = 0), \quad (5.2)$$

ahol tehát a $\Psi_A(\mathbf{r}, t = 0)$ "additív" tagba került a külső tér hatása. A fenti képletben szereplő első tag a $\Psi_I(\mathbf{r}, t = 0)$ kezdő állapot, melynek külső impulzus utáni térmentes időfejlődése ismert, mivel energia sajátállapot. Következésképpen, ha az elektron kezdetben az n_I sávban a $\mathbf{k}_I$ hullámszámvektorhoz tartozó állapotban volt, akkor egy tetszőleges t időpillanatban ez az állapot

$$\Psi_I(\mathbf{r}, t) = \Psi_I(\mathbf{r}, t = 0) e^{-i \frac{\mathcal{E}_{n_I}(\mathbf{k}_I)}{\hbar} t} = \Psi_I(\mathbf{r}, t = 0) e^{-i \omega_{n_I}(\mathbf{k}_I) t}, \quad (5.3)$$

ahol $\mathcal{E}_{n_I}(\mathbf{k}) = \hbar \omega_{n_I}(\mathbf{k})$ jelöli a kiindulási n_I sávban érvényes diszperziós relációt és $\mathbf{k}_I$ a kezdeti állapot hullámszámvektorát.



5.2. ábra. A számítások során feltételezett tartomány dimenzióinak és az $y - z$ síkon átfolyó valószínűségi áramnak a szemléltetése.

A kvantummechanikai állapot fentiekben tárgyalt felbontását behelyettesítve a térmentes valószínűségi áramsűrűség 1.21 kifejezésébe, három tagot tudunk elkülöníteni. Például az x irányú komponensre ez a következő alakú:

$$\begin{aligned}
 j_x(\mathbf{r}, t) = & \underbrace{\frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \Psi_I^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Psi_I(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right\}}_{j_I(\mathbf{r}, t)} + \underbrace{\frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \Psi_{\mathcal{A}}^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right\}}_{j_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)} \\
 & + \underbrace{\frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \Psi_I^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)}{\partial x} + \Psi_{\mathcal{A}}^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Psi_I(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \right\}}_{j_C(\mathbf{r}, t)}. \quad (5.4)
 \end{aligned}$$

Ebben a kifejezésben a $j_I(\mathbf{r}, t)$ jelöli a kezdeti $\Psi_I(\mathbf{r}, t)$ állapothoz, míg a $j_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ a dinamikát hordozó $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ hullámcsomaghoz tartozó valószínűségi áramsűrűséget, végezetül $j_C(\mathbf{r}, t)$ az ún. "kereszttag". A valószínűségi áramsűrűség egy adott felületre történő kiintegrálásával meghatározhatjuk az átfolyó teljes valószínűségi áramot. Az egyszerűség érdekében tételezzük fel, hogy a vizsgálni kívánt szilárdtest téglatest alakú, amelynek leghosszabb éle az x tengellyel mentén fekszik, ahogy ezt a 5.2 ábra szemlélteti. Ekkor egy az $y - z$ síkkal párhuzamosan fekvő $\mathbf{n} = \hat{\mathbf{x}}$ felületi normálissal rendelkező $\mathcal{F}$ felületen átfolyó teljes $I(x, t)$ valószínűségi áram azonos a $j_x(\mathbf{r}, t)$ teljes

felületre vett integráljával:

$$\begin{aligned}
 I(x, t) &= \int_{\mathcal{F}} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \mathbf{n} df = \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} j_x(\mathbf{r}, t) dy dz \\
 &= \underbrace{\int_0^{L_y} \int_0^{L_z} j_I(\mathbf{r}, t) dy dz}_{I_I(x, t)} + \underbrace{\int_0^{L_y} \int_0^{L_z} j_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t) dy dz}_{I_{\mathcal{A}}(x, t)} + \underbrace{\int_0^{L_y} \int_0^{L_z} j_C(\mathbf{r}, t) dy dz}_{I_C(x, t)}. \quad (5.5)
 \end{aligned}$$

Mint ismeretes, a töltéshordozók árama arányos a kvantumállapotokból kapott valószínűségi árammal. Töltéshordozók esetén a töltést az adott felületen áthaladó áram időintegráljaként kapjuk. Ezzel analóg módon a következőkben az adott felületen áthaladó $I(x, t)$ valószínűségi áram időintegrálját fogjuk vizsgálni és az egyszerűség érdekében a következőkben töltésként fogunk rá hivatkozni. A töltést $t = 0$ időpillanattól kezdve szeretnénk meghatározni és azzal az egyszerűsítő feltételezéssel élünk, hogy ezelőtt a töltés zérus volt. Ekkor az áram 5.4 egyenlet szerinti felbontásában szereplő első $j_I(\mathbf{r}, t)$ taghoz tartozó $Q_I(x)$ töltés az áram előjelétől függően időben lineárisan növekszik vagy csökken a sík minden pontján, ezért nem hordoz hasznos információt a kölcsönhatásról. Érdeemes itt újra megemlíteni, hogy szilárdtestek esetén termikus egyensúlyban ez nem ad detektálható töltést, mivel Bloch-állapotok esetén például $j_I(\mathbf{r}, t)$ -t kompenzálja a $\psi_{n_I}(-\mathbf{k}_I, \mathbf{r}, t)$ állapot árama.

A célunk a külső elektromágneses impulzus hatásából származó extra töltés meghatározása nagy integrálási idők esetén, ezért a következő töltéskülönbséget vizsgáljuk $t \rightarrow \infty$ határértékben:

$$Q_d(x) = Q_d(x, t \rightarrow \infty) = \int_0^{\infty} I(x, t) - I_I(x, t) dt = \underbrace{\int_0^{\infty} I_{\mathcal{A}}(x, t) dt}_{Q_{\mathcal{A}}(x)} + \underbrace{\int_0^{\infty} I_C(x, t) dt}_{Q_C(x)}, \quad (5.6)$$

ahol $Q_{\mathcal{A}}(x)$ a dinamikát közvetlenül hordozó $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ állapotból származó töltés, míg a $Q_C(x)$ kereszttag a kvantummechanikai állapot két tagjának interferenciájából származó töltés.

Fontos kiemelni, hogy a véges V térfogatú minta (periodikus potenciállal) egyenes következménye (a Fourier–sorfejtésen keresztül), hogy a reciproktérben is véges számú diszkrét $\mathbf{k}$ pontot kapunk. A következőkben, annak érdekében, hogy az analízis matematikai eszköztárát felhasználhassuk a számításaink során azzal a szilárdtest-fizikában gyakran alkalmazott közelítéssel élünk, hogy a $\mathbf{k}$ szerinti diszkrét összegzést megfelelő integrállal közelítjük. Ezen a ponton azt is kiemelnénk, hogy az elméleti összefoglalóban használt indexben szereplő jelöléssel szemben a folytonosnak tekintett reciproktér miatt a $\mathbf{k}$ az argumentumban szerepel.

5.3. Töltéstranszport egydimenziós kvadratikus sávban

A kvadratikus diszperzió esete kiemelten fontos példával szolgál az extra töltések analitikus módszerekkel történő meghatározására. Ilyen diszperzió esetén ugyanis nem csak a $x \rightarrow \pm\infty$ határértékekben tudjuk megadni az extra töltés értékét, hanem a tér bármely tetszőleges x pontjában is. Ez a térfüggés lehetővé teszi a formulák különböző módszerekkel történő igazolását is (lásd: 5.3.1 Gauss-hullámcsomag példája). A következőkben az egyszerűség kedvéért csak egyetlen kvadratikus sávra végezzük el a számításokat. Ahogy azt a későbbiekben látni fogjuk, az 2.15 egyenlet szerinti effektív tömeg közelítés alkalmazása esetén, amikor

$$\omega(k) = \frac{\hbar}{2m^*}k^2 + \omega_0, \quad (5.7)$$

a számításokban szereplő integrandusról nem kell feltételeznünk, hogy analitikus és csupán csak algebrai átalakítások szükségeltetnek. Az effektív tömeg közelítés alkalmazásának további előnye, hogy ilyen esetben az energia sajátállapotok síkhullámok, és ennek következtében bármely tetszőleges állapot kifejtése ezeken a sajátállapotokon egy egyszerű Fourier–transzformációhoz vezet. Az így kapott egyenletek a fentiekben felsorolt előnyökön túlmenően kísérleti relevanciával is bírnak, alkalmazhatóak például szabad terjedésű részecskenyalábok által szállított töltések meghatározására alacsony sebességbeli szórás esetén [90–93].

Annak ellenére, hogy nincsenek alapvető nehézségek a számítások háromdimenziós esetre történő elvégzésében, a következőkben a könnyebb átláthatóság és az egyszerűbb formulák érdekében egydimenziós esetre szorítkozunk. Ebben az esetben nem kell a felületi integrálokat végrehajtanunk és csak a tér egy adott pontján áthaladó töltésre szorítkozhatunk.

Első lépésben azzal a feltételezéssel élünk tehát, hogy a $t = 0$ időpillanatban a vizsgált rendszer $\Psi_{\mathcal{F}}$ kvantumállapota egy (L -re normált) $\Psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ik_I x}$ síkhullám és a kölcsönhatás eredményét hordozó $\Psi_{\mathcal{A}}(x, t)$ (ami szintén L -re normált) Fourier-transzformáltjának az összege, azaz

$$\Psi_{\mathcal{F}}(x, t = 0) = \Psi_I(x) + \Psi_{\mathcal{A}}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left[e^{ik_I x} + \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(k) e^{ikx} dk \right]. \quad (5.8)$$

Érdemes itt kiemelni, hogy ebben az esetben egyúttal azt is feltesszük, hogy $\mathcal{A}_n(k)$ kifejtési együtthatók reciproktérbeli tartója kellően keskeny ahhoz, hogy a kvadratikus diszperziós reláció a teljes szélességében érvényes legyen. Ez teszi lehetővé számunkra azt, hogy az integrálási határokat kiterjesszük a teljes k tengelyre. Ahogy az a fentiekből könnyen kiolvasható, a hullámfüggvényeket egy L hosszúságú szakaszra normáltuk a következő fejezetben található eredményekkel való könnyebb összevetethőség érdekében. Ez az $\mathcal{A}(k)$ kifejtési együtthatók meghatározásánál a szokásos inverz Fourier-transzformációhoz képest egy plusz $\sqrt{L}$ szorzót hoz be, azaz

$$\mathcal{A}(k) = \frac{\sqrt{L}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\mathcal{A}}(x, t) e^{-ikx} dx. \quad (5.9)$$

Ezeket a konvenciókat használva a valószínűségi sűrűség a szokásos $\rho_{\mathcal{A}}(x) = |\Psi_{\mathcal{A}}(x)|^2$, a reciproktérbeli valószínűségi sűrűség a szokásostól eltérően azonban

$$\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}(k) = \frac{2\pi}{L} |\mathcal{A}_n(k)|^2. \quad (5.10)$$

Elsőként a $Q_{\mathcal{A}}(x)$ tagon mutatjuk be a levezetés főbb lépéseit. Behelyettesítve 5.8 felbontást az x irányú valószínűségi áram egydimenziós verziójába, majd felírva a

töltést a $t \rightarrow \infty$ határértékben arra jutunk, hogy

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{A}^*(k) \mathcal{A}(\kappa) i\kappa e^{-i(k-\kappa)x} \int_0^{\infty} e^{-i[\omega(\kappa)-\omega(k)]t} dt d\kappa dk \right\}. \quad (5.11)$$

Ahogy látható, az integrandusban szereplő időfüggő tagok szeparálhatók és a $t \rightarrow \infty$ határértéknek köszönhetően az idő szerinti integrál meghatározható a Heaviside-függvény Fourier-transzformáltjának ismeretében:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Theta(t) e^{-i[\omega(\kappa)-\omega(k)]t} dt = \int_0^{\infty} e^{-i[\omega(\kappa)-\omega(k)]t} dt = \pi \delta[\omega(\kappa) - \omega(k)] - \frac{i}{\omega(\kappa) - \omega(k)}, \quad (5.12)$$

ahol $\Theta(t)$ jelöli a Heaviside-függvényt, δ a Dirac-delta disztribúciót és a jobboldali tört a Cauchy-féle főérték. Ezt visszahelyettesítve az eredeti kifejezésbe az egyenlet két tag összegére bomlik. Az egyik az 5.12 első tagjából a második pedig a főértékből származik. Tehát a $Q_{\mathcal{A}}(x) = Q'_{\mathcal{A}}(x) + Q''_{\mathcal{A}}(x)$, ahol

$$Q'_{\mathcal{A}}(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_{n,m} \int_{BZ} \int_{BZ} \mathcal{A}^*(k) \mathcal{A}(\kappa) i\kappa e^{-i(k-\kappa)x} \pi \delta[\omega(\kappa) - \omega(k)] d\kappa dk \right\}. \quad (5.13)$$

Ahogy látható, a fenti kifejezésben szereplő integrálok csak azokra a reciproktérbeli κ -ra adnak nem zérus eredményt, amelyekre teljesül, hogy $\kappa = \pm k$. A visszahelyettesítés után tehát két tagot kapunk. A kvadratikus diszperziós reláció szimmetriájából következik, hogy $\mathcal{A}^*(k) = \mathcal{A}(-k)$, így a második $\kappa = -k$ megoldással felírt tag zérus képzetes résszel rendelkezik, azaz nem ad járulékot. A diszperziós reláció deriváltjának behelyettesítése, miszerint $v(k) = \partial\omega(k)/\partial k = \hbar/m^*$, majd pár egyszerűsítés elvégzése után $Q'_{\mathcal{A}}(x)$ -re azt kapjuk, hogy

$$Q'_{\mathcal{A}}(x) = \text{sgn}(k) \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}_{\mathcal{A}}(k) dk. \quad (5.14)$$

A $Q''_{\mathcal{A}}(x)$ meghatározásához 5.12 egyenlet Cauchy-féle főértékét kell visszahelyettesítenünk 5.11 egyenletbe, majd a diszperziós reláció behelyettesítése után azt kapjuk,

hogy

$$Q''_{\mathcal{A}}(x) = \frac{m^*}{m} \frac{2}{L} \operatorname{Im} \left\{ i \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\kappa}{(\kappa^2 - k^2)} \mathcal{A}^*(k) \mathcal{A}(\kappa) e^{i(\kappa-k)x} dk d\kappa \right\}. \quad (5.15)$$

A kettős integrálban szereplő tört parciális törtekre bontható az alábbi módon

$$\frac{\kappa}{(\kappa^2 - k^2)} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{k - \kappa} - \frac{1}{k + \kappa} \right]. \quad (5.16)$$

A felbontás visszahelyettesítése után könnyen belátható, hogy a $k + \kappa$ nevezővel rendelkező integrál képzetes része zérus, ezért nem ad járulékot, így tehát

$$Q''_{\mathcal{A}}(x) = \frac{m^*}{m} \frac{1}{L} \operatorname{Im} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{i} \frac{e^{i(\kappa-k)x}}{(\kappa - k)} \mathcal{A}^*(k) \mathcal{A}(\kappa) dk d\kappa \right\}. \quad (5.17)$$

Ez képlet tovább egyszerűsíthető, ha felhasználjuk a Heaviside-féle egységugrás függvény Fourier-transzformáltját. A 5.12 egyenletből kiindulva némi átalakítás arra juthatunk, hogy

$$\frac{1}{i} \frac{e^{i(\kappa-k)x}}{\kappa - k} = -\pi \delta(\kappa - k) + \int_{-\infty}^x e^{i(\kappa-k)s} ds. \quad (5.18)$$

Ezt behelyettesítve az előző 5.17-as egyenletbe arra jutunk, hogy

$$Q''_{\mathcal{A}}(x) = -\frac{m^*}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{\pi}{L} |\mathcal{A}(\kappa)|^2}_{=\frac{1}{2} \tilde{\rho}_{\mathcal{A}}(k)} d\kappa + \frac{m^*}{Lm} \int_{-\infty}^x \underbrace{\left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(k) e^{iks} dk \right|^2}_{=\rho_{\mathcal{A}}(s)} ds. \quad (5.19)$$

Ezt hozzáadva a $Q'_{\mathcal{A}}(x)$ -ra kapott egyenlethez végül megkapjuk, hogy effektív tömeg közelítés alkalmazása esetén

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = -\frac{m^*}{m} \int_{-\infty}^0 \tilde{\rho}_{\mathcal{A}}(k) dk + \frac{m^*}{m} \int_{-\infty}^x \rho_{\mathcal{A}}(s) ds. \quad (5.20)$$

Ez a képlet azt mondja, hogy a $\Psi_{\mathcal{A}}(x)$ hullámcsomag által egy adott x ponton át szállított töltés úgy számolható mintha az x pont mögött lévő összes töltés teljes egészében áthaladna rajt. Az így kapott eredményből viszont ki kell vonnunk a negatív irányba terjedő hullámcsomag komponenseket. Ezek ugyanis negatív irányban haladnak át ugyanazon a ponton. A következőkben hasonló eredményre jutunk a Gauss-hullámcsomag példájának esetén. A $Q_c(x)$ meghatározásánál is hasonlóan kell eljárunk mint a $Q_{\mathcal{A}}(x)$ esetében. Az előzőekben felvázolt lépések végrehajtása után arra jutunk, hogy

$$Q_c(x) = 2\text{Re} \left\{ \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-\infty}^x \Psi_{\mathcal{A}}(x) e^{-ik_I s} ds \right\} - \begin{cases} \frac{4\pi}{L} \text{Re} \{ \mathcal{A}(k_I) \} & \text{ha } k_I < 0 \\ 0 & \text{különben.} \end{cases} \quad (5.21)$$

Az első tag az $x \rightarrow \infty$ esetben a $\Psi_{\mathcal{A}}(x)$ Fourier-transzformáltjának a k_I pontban felvett értéke. A második tag pedig azt írja le, hogy bármely véges x esetén az interferenciából származó kereszt töltést az első integrálban túlszámoljuk, ha a kezdeti állapot a negatív irányban halad. Végezetül a teljes extra töltést is fel tudjuk írni, amelyre azt kapjuk, hogy

$$Q_d(x) = -\frac{m^*}{m} \int_{-\infty}^0 \tilde{\rho}_{\mathcal{A}}(k) dk + \frac{m^*}{m} \int_{-\infty}^x \rho_{\mathcal{A}}(s) ds + 2\text{Re} \left\{ \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{-\infty}^x \Psi_{\mathcal{A}}(x) e^{-ik_I s} ds \right\} - \begin{cases} \frac{4\pi}{L} \text{Re} \{ \mathcal{A}(k_I) \} & \text{ha } k_I < 0 \\ 0 & \text{különben.} \end{cases} \quad (5.22)$$

5.3.1. Gauss-hullámcsomag példája

A előzőekben bemutatott kvadratikus eset eredményei könnyen alátámaszthatók, ha a külső tér által keltett zavart egy Gauss-hullámcsomagnak tételezzük fel. Ehhez hasonló hullámcsomagok lézer-anyag kölcsönhatások során jellemzően nem keletkeznek, de a speciális tulajdonságai miatt mégis érdemes megvizsgálni ezt az esetet. Ilyen esetben ugyanis a hullámcsomag időfejlődése analitikusan megadható, amelyből a szállított töltés az általunk használt módszertől függetlenül is meghatározható. A következőkben azzal a feltételezéssel élünk tehát, hogy $\Psi_{\mathcal{A}}(x)$ egy σ_x szórással, x_G várható értékkel

és $\hbar k_G$ impulzus várható értékkel rendelkező Gauss-hullámcsomag:

$$\Psi_{\mathcal{A}}(x) = \Psi_G(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma_x}} \exp\left(-\frac{(x-x_G)^2}{4\sigma_x^2} + i k_G (x-x_G)\right), \quad (5.23)$$

míg a lézertér hatása előtti kiindulási állapot egy $k_I = k_0$ impulzussal rendelkező sík-hullám, pontosabban $\Psi_I(x) = \exp(ik_0x)$. A képleteink megerősítésére és a bemutatni kívánt tulajdonságok feltárására az is elegendő, ha a következőkben a szabad terjedés esetére korlátozzuk számításainkat. Ekkor mindkét hullámfüggvény-komponens időfejlődése megkapható a potenciálmentes Schrödinger-egyenlet megoldásával. A számítások elvégzése után azt kapjuk, hogy:

$$\Psi_I(x, t) = \exp(i(k_0x - \omega_0t)) \quad (5.24)$$

$$\Psi_G(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma_x(1+i(t/\tau_\sigma))}} \exp(-\sigma_x^2 k_G^2) \exp\left[-\frac{(x-x_0-i2k_G\sigma_x^2)^2}{4\sigma_x^2(1+i(t/\tau_\sigma))}\right], \quad (5.25)$$

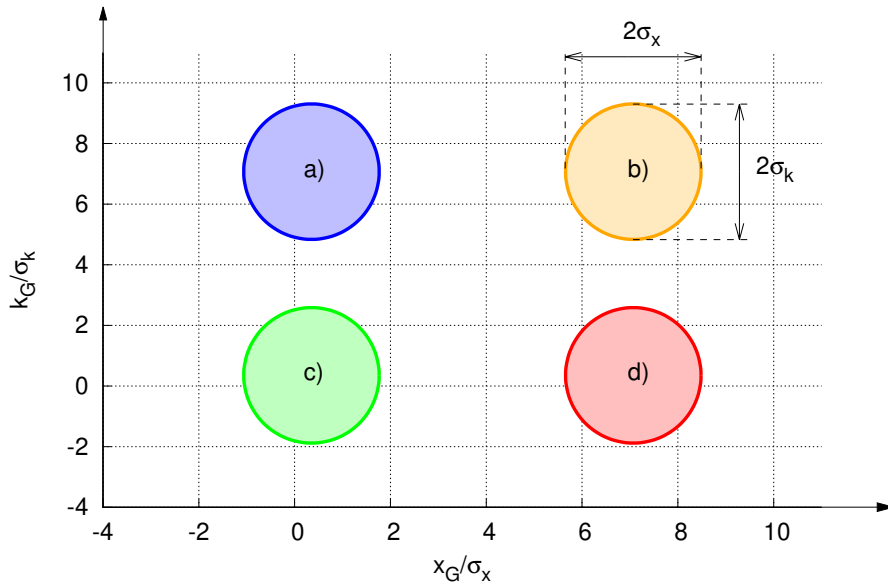
ahol $\omega_0 = \hbar k_0^2/(2m)$ és $\tau_\sigma = 2m\sigma_x^2/\hbar$ az ún. karakterisztikus idő, ami azt az időt adja meg, amely elteltével a hullámcsomag szórása a kétszeresére növekszik.

Ahogy azt már említettük, a $\Psi_G(x)$ Gauss-hullámcsomag által szállított töltés az előbbiekben felvázolt számításokon túl, többféleképpen is meghatározható. Az egyik intuitív képet adó, kevés számítással járó módszer az előző alfejezet eredményeivel összhangban az, ha a hullámcsomag valós és reciproktérbeli valószínűségi eloszlásából indulunk ki, amelyek a következők:

$$\rho_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \exp\left(-\frac{(x-x_G)^2}{2\sigma_x^2}\right), \quad (5.26)$$

$$\tilde{\rho}_G(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} \exp\left(-\frac{(k-k_G)^2}{2\sigma_k^2}\right), \quad (5.27)$$

ahol σ_p a reciproktérbeli szórás, amelyre $\sigma_x\sigma_k = \frac{1}{2}$. A valós térbeli eloszlás egy adott x pontján átmenő töltésre vagyunk kíváncsiak. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a hullámcsomag várható értéke pozitív irányba terjed, azaz $k_G > 0$. Ekkor az egyszerű intuitív kép az, hogy az adott ponton a valószínűségi sűrűségnek az x ponttól



5.3. ábra. A négy különböző Gauss-hullámcsomag paramétereinek illusztrációja. Annak érdekében, hogy be tudjuk mutatni a különböző paraméterek Q_d -re tett hatását, az egyes esetek között mind a x_G , mind pedig a k_G paraméterek jelentősen eltérnek egymástól [28].

balra fekvő része fog áthaladni. Ezt az értéket egyszerűen meghatározhatjuk a sűrűség kiintegrálásával $-\infty$ -tól x -ig, azaz

$$\int_{-\infty}^x \rho_G(s) ds = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{x - x_G}{\sqrt{2}\sigma_x}\right). \quad (5.28)$$

Ekkor azonban nem számoltunk azzal, hogy a hullámcsomagnak vannak negatív irányban terjedő komponensei. Ebből az értékből tehát ki kell vonnunk, a hullámcsomag negatív irányba haladó részét, amit a reciprokterbéli eloszlás negatív k -ra eső részének a felintegrálásával kaphatunk meg:

$$\int_{-\infty}^0 \tilde{\rho}_G(k) dk = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{k_G}{\sqrt{2}\sigma_k}\right). \quad (5.29)$$

A Gauss-hullámcsomag által szállított töltés térfüggése tehát

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_G}{\sqrt{2}\sigma_x} \right) + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{k_G}{\sqrt{2}\sigma_k} \right). \quad (5.30)$$

Az összeegyeztethetőség érdekében $m^* = m$ feltételezéssel élve ugyanerre az eredmény jutunk a 5.20-as egyenlet alkalmazásával is. A $Q_C(x)$ kereszttag meghatározására nincs egy ehhez hasonló szemléletes képpel alátámasztott módszer. Itt az ellenőrzésre a kereszttag

$$j_C(x, t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \Psi_I^*(x, t) \Psi_G(x, t) \left[-\frac{x - i2k_G\sigma_x^2}{2\sigma_x^2(1 + i(t/\tau_\sigma))} \right] + ik_0 \Psi_I(x, t) \Psi_G^*(x, t) \right\} \quad (5.31)$$

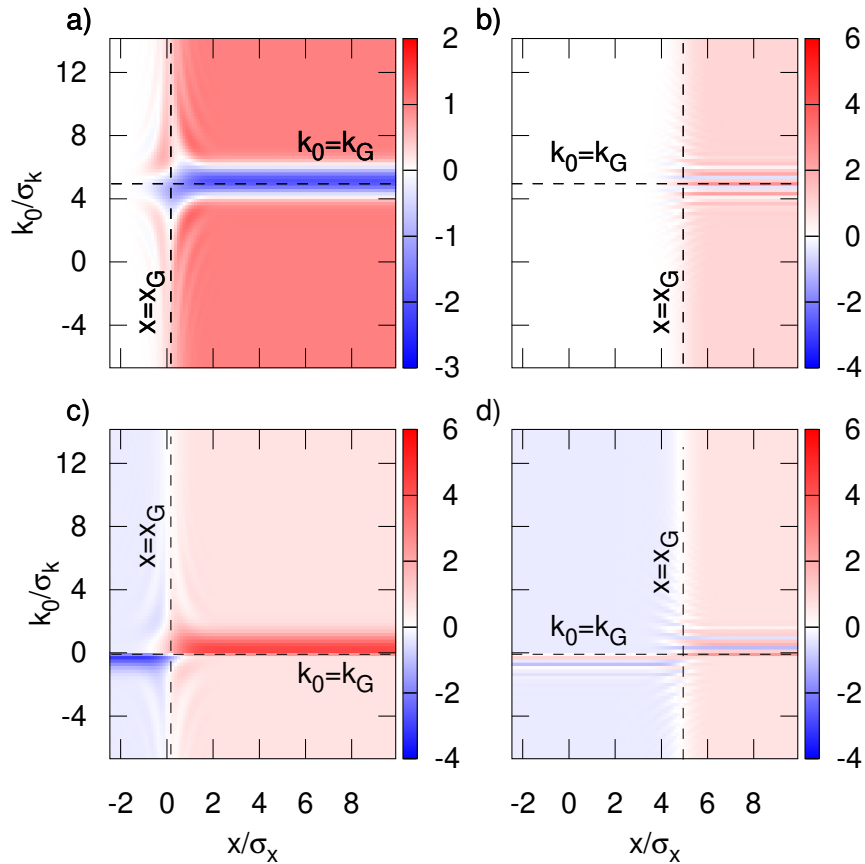
valószínűségi áramának idő szerinti numerikus integrálja adja a legegyszerűbb módot. A vizsgálataink során kapott eredmények alátámasztották, hogy kellően nagy t -ig integrálva jó egyezést kapunk a 5.21 egyenlet által szolgáltatott értékekkel, miszerint

$$Q_C(x) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\sigma_k}} \exp \left(-\frac{(k_0 - k_G)^2}{4\sigma_k^2} \right) \left[\operatorname{sgn}(k_0) \cos(k_0 x_G) + \operatorname{Re} \left\{ e^{-ik_I x_G} \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_G}{2\sigma_x} + i \frac{k_0 - k_G}{2\sigma_k} \right) \right\} \right]. \quad (5.32)$$

A $Q_d(x)$ töltést természetesen a 5.30 és a 5.32 egyenletek összegeként kapjuk meg.

Az így kapott extra töltés tulajdonságainak illusztrációjára négy különböző esetet vizsgáltunk meg. Az egyes eseteket a 5.3 ábra szemlélteti. Ahogy az az ábráról is leolvasható, mindegyik esetben szimmetrikus a Gauss-hullámcsomag valós és reciproktérbeli eloszlása, azaz $\sigma_x = \sigma_p = 1/\sqrt{2}$. Az egyes esetek a valós térbeli x_G ($t = 0$ -ban) és a reciproktérbeli k_G várható értékekben különböznek egymástól. Ügyeltünk arra, hogy az esetek között legyen olyan, amikor mind a két várható érték kicsi ((c) eset), illetve nagy ((b) eset), valamint olyan is, amikor csupán csak az egyik vagy a másik értéke alacsony ((a) és (d) eset).

Az egyes esetekben a Q_d térfüggését a 5.4 ábra szemlélteti a kezdeti síkhullám k_0 hullámszámvektorának függvényében. Figyeljük meg, hogy mind a négy esetben hirtelen változás látható az $x = x_G$ érték σ_x széles környezetében a k_0 értékétől függetlenül.



5.4. ábra. A Q_d tér és k_0 függése négy különböző paraméterű Gauss-hullámcsomag esetén. Az egyes eseteket az (a)-(d) betűk jelölik, összhangban a 5.3 ábrán alkalmazott jelölésekkel. Az ábrákat a 5.22 egyenlet segítségével készítettük az analitikus úton kapott eredményekkel megegyezően [28].

Ez a viselkedés a $Q_{\mathcal{A}}(x)$ első tagjához köthető, ugyanis ennek értéke ebben a tartományban változik a legnagyobb mértékben. Az látható továbbá, hogy minden esetben a legnagyobb mértékű térfüggést a $k_0 = k_G$ egyenes mentén tapasztalhatjuk, majd ettől az egyenestől felfelé vagy lefelé távolodva a változás mértéke egyre csökken. Ezt a $Q_C(x)$ első Gauss-os szorzótényezője magyarázza. A k_0 tengely mentén tapasztalható oszcillációk frekvenciája a x_G értékétől függően kicsi ((a) és (c) eset), vagy nagy ((b) és (d) eset) ez a 5.32 egyenletben szereplő $\cos(k_0 x_G)$ tagnak köszönhető. Jól kivehető az a tulajdonság is, hogy attól függően, hogy a síkhullám merre terjed, ez a tag vagy az x tengely pozitív, vagy a negatív részén járul hozzá a töltéshez a 5.22 egyenlet utolsó

tagjának megfelelően.

5.4. Töltéstranszport egydimenziós kvantummechanikai modellje szilárdtestekben

A következő általános esetben célravezető, ha a Bloch-állapotok következő alakját használjuk

$$\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (5.33)$$

ahol N a vizsgálni kívánt kristályrácsban található elemi cellák száma. A Bloch-állapotok rácsperiodikus részét a V_c térfogatú egységcellára normáljuk, ekkor

$$\int_{V_c} u_{n'}^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta_{nn'}. \quad (5.34)$$

Ez egyben azt is jelenti, hogy a fentiekben bevezetett jelölésekkel $N = V/V_c$. Vegyük észre, hogy ennek a normáltsági feltételnek a következtében az $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ rácsperiodikus részek $m^{-3/2}$ dimenziójúak.

Az egyszerűbb tárgyalásmód érdekében a következőkben feltesszük, hogy az elektron állapota kezdetben leírható egyetlen Bloch-állapottal, azaz $\Psi_I(\mathbf{r}, t = 0) = \psi_{n_I}(\mathbf{k}_I, \mathbf{r})$, ahol n_I kiindulási állapot sávját és $\mathbf{k}_I$ a hullámszámvektorát jelöli. Ennek az állapotnak az időfejlődését a 5.3-as egyenlet írja le. A $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t = 0)$ állapot térmentes időfejlődése is meghatározható, ha felbontjuk Bloch-állapotokra:

$$\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \int_{BZ} \mathcal{A}_n(\mathbf{k}) \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d^3\mathbf{k}, \quad (5.35)$$

ahol $\mathcal{A}_n(\mathbf{k})$ jelöli a kifejtési együtthatókat és az összegzést az első Brillouin zónán (BZ) belül kell végrehajtani az összes vizsgálni kívánt effektus szempontjából releváns sávra.

Az előző fejezethez hasonlóan, a következőkben a könnyebb átláthatóság és az egyszerűbb formulák érdekében egydimenziós esetre szorítkozunk. Ez a megközelítés

lehetővé teszi számunkra, hogy a koncepció főbb lépéseire koncentráljunk anélkül, hogy többdimenziós integrálokat kellene kiszámolnunk. Gondoljuk csak arra, hogy háromdimenziós esetben például a $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ állapot Bloch-állapotokon történő kifejtése három reciproktérbeli integrált jelent, míg egydimenziós esetben csak egyet. Az így kapott eredmények azonban általánosíthatók. Ahogy azt a következő 5.5 fejezetben ismertetni fogjuk, az így kapott eredmények bizonyos megkötések mellett kiterjeszthetők a háromdimenziós esetre.

A $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ állapot hullámfüggvény 5.35 szerinti kifejtésének egydimenziós verzióját, azaz a

$$\Psi_{\mathcal{A}}(x, t) = \sum_n \int_{BZ} \mathcal{A}_n(k) \psi_n(k, x) dk \quad (5.36)$$

kifejtést behelyettesítve a $Q_{\mathcal{A}}(x)$ definíciójába, felhasználva, hogy az idő szerinti és a reciproktérbeli integrálok sorrendje felcserélhető, némi átrendezés után a következőt kapjuk:

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_{n,m} \int_{BZ} \int_{BZ} \mathcal{A}_n^*(k) \mathcal{A}_m(\kappa) \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_m(\kappa, x)}{\partial x} \int_0^\infty e^{-i[\omega_m(\kappa) - \omega_n(k)]t} dt dk d\kappa \right\}. \quad (5.37)$$

Ahogy látható, az integrandusban szereplő időfüggő tag, a kvadratikus esethez hasonlóan itt is szeparálható, és a $t \rightarrow \infty$ határértéknek köszönhetően az idő szerinti integrál meghatározható:

$$\int_0^\infty e^{-i[\omega_m(\kappa) - \omega_n(k)]t} dt = \pi \delta[\omega_m(\kappa) - \omega_n(k)] - \frac{i}{\omega_m(\kappa) - \omega_n(k)}. \quad (5.38)$$

Ezt visszahelyettesítve az eredeti kifejezésbe az egyenlet szintén két tag összegére

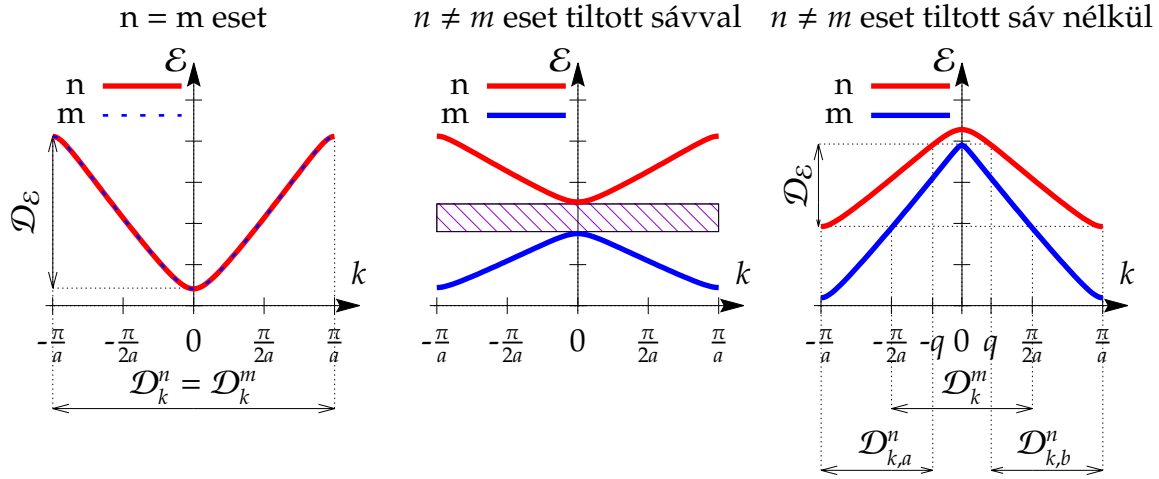
bomlik. Az első tag ez esetben

$$Q'_{\mathcal{A}}(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_{n,m} \int_{BZ} \int_{BZ} \mathcal{A}_n^*(k) \mathcal{A}_m(\kappa) \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_m(\kappa, x)}{\partial x} \pi \delta[\omega_m(\kappa) - \omega_n(k)] d\kappa dk \right\}. \quad (5.39)$$

Ahogy látható a fenti kifejezésben szereplő integrálok csak azokra a reciproktérbeli κ -ra adnak nem zérus eredményt, amelyekre teljesül a

$$\begin{aligned} \omega_m(\kappa) - \omega_n(k) &= 0 \quad / \cdot \hbar \\ \mathcal{E}_m(\kappa) - \mathcal{E}_n(k) &= 0 \end{aligned} \quad (5.40)$$

egyenlet. Ez $m = n$ esetén bármely diszperziós relációra teljesül a $\kappa = k$ pontban. Általános esetben azonban ezen felül is vannak megoldások. Gondoljunk csak a szilícium 2.1 ábra szerinti sávszerkezetére. Ha képzeletben egy adott energiaértéknél egyenest húzunk a sávszerkezetben, akkor van olyan sáv, ami több mint kétszer is metszheti az egyenesünket, és akkor a degenerált sávokat még nem is vettük figyelembe. Ez több, mint két különböző megoldást ad a 5.40 egyenletre. Általánosságban ez azt jelenti, hogy a Brillouin-zónán belül az állandó $\mathcal{E}_n(k)$ energiás felület összes pontja ad egy megoldást. Visszatérve az egydimenziós esetre, ez egyetlen pont, mégpedig a $\kappa = -k$. Ezt az esetet szemlélteti a 5.5 ábra bal szélén található sávszerkezet. Érdekes megfigyelni, hogy $m = n$ esetén a sávon belül bármely $\mathcal{E}$ értékre van megoldása az 5.40 egyenletnek és ezek a megoldások az első Brillouin-zónát teljesen lefedik. Azt a tartományt, amelyből a megoldásokat kapjuk az energia tengely mentén sávindextől függetlenül $\mathcal{D}_{\mathcal{E}}$ jelöli, amíg a lehetséges hullámszámvektorok tengelye mentén $\mathcal{D}_k^n$, illetve $\mathcal{D}_\kappa^m$, amelyek itt megegyeznek. Ez $m \neq n$ esetén eltérő is lehet. Ekkor két lehetőség áll fent. Az egyszerűbb az, amikor a sávok között tiltott sáv van, ugyanis ekkor az egyenletnek nincs megoldása (5.5 ábra közepe). Ha két sáv átfed egymással, azaz nincs közöttük tiltott sáv (5.5 ábra jobb széle), akkor azokra az energia értékekre van megoldása az egyenletnek, amelyeket mind a két sáv felvesz. A megoldások a sávok konkrét ismeretében megadhatók egy $f_{n,m}$ függvény segítségével, amelyre $|\kappa| = |f_{n,m}(k)|$. Egydimenzióban



5.5. ábra. Az $\mathcal{E}_m(\kappa) - \mathcal{E}_n(k) = 0$ egyenlet megoldásainak szemléltetése különféle sáv-szerkezetek esetén. A bal szélső ábra az $n = m$ esetet mutatja be, ekkor minden sávbeli energiához található két megoldás amelyekre $|\kappa| = |k|$. Az $n \neq m$ esetben, ha nincs átfedés a két sáv között (középső ábra), akkor az egyenletnek csak az imaginárius tengely menti képzetes megoldási vannak, amelyek időben lecsengenek. Ha van átfedés a sávok között (jobb szélső ábra), akkor attól függően, hogy az n vagy m sávban keressük a megoldásokat, más és más tartományokban találjuk meg őket. Ezeket a tartományokat rendre $\mathcal{D}_k^n$ illetve $\mathcal{D}_k^m$ jelöli.

ez azt jelenti, hogy adott k esetén a $\kappa = \pm f_{n,m}(k)$ a két megoldás. Ez a függvény a sávindexekre nem szimmetrikus, azaz $f_{n,m}(k) \neq f_{m,n}(k)$. Az ábrán ezen megoldások energiatartományát a már bevezetett $\mathcal{D}_E$ jelöli. Jól látható, hogy ilyen esetben mind a két sávból kiesnek részek, pl.: a piros n . sáv tetején, illetve a kék m . sáv alján nincs közös energiaértéke a két sávnak. A k hullámszámvektor tengely mentén vizsgálva a kérdést arra jutunk, hogy nem mindegy, hogy melyik sáv mentén keressük a megoldásokat. Az ábra jobb szélén található sáv-szerkezetnél maradva, ha az alsó m . sávon megyünk végig, akkor minden $-\pi/(2a)$ és $+\pi/(2a)$ közé eső k -ra van megoldás (van átfedés a másik sávval). Ezt a tartományt $\mathcal{D}_k^{n,m} = [-\pi/(2a), \pi/(2a)]$ jelöli. Ezzel szemben a felső n . sáv mentén két külön tartományban van megoldás, ezek a $\mathcal{D}_{k,a}^{m,n} = [-\pi/(2a), -q]$ és a $\mathcal{D}_{k,b}^{m,n} = [q, \pi/(2a)]$. Ez a feltétel tehát a diszperziós reláción keresztül összeköti a két

integrált és adott (n, m) indexpárok esetén kijelöli azokat a tartományokat a reciproktérben, ahol a töltés ezen részének a transzportja megvalósul.

Visszatérve a 5.39 egyenletre és elvégezve az egyenletben szereplő belső κ szerinti integrált és felhasználva a Dirac-delta disztribúció tulajdonságait, a következőt kapjuk:

$$Q'_{\mathcal{A}}(x) = \frac{\pi\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_{n,m} \int_{\mathcal{D}_k^{n,m}} \frac{\mathcal{A}_n^*(k) \mathcal{A}_m(f_{n,m}(k))}{|v_m(f_{n,m}(k))|} \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_m(f_{n,m}(k), x)}{\partial x} dk \right\} \\ + \frac{\pi\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_{n,m} \int_{\mathcal{D}_k^{n,m}} \frac{\mathcal{A}_n^*(k) \mathcal{A}_m(-f_{n,m}(k))}{|v_m(-f_{n,m}(k))|} \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_m(-f_{n,m}(k), x)}{\partial x} dk \right\}, \quad (5.41)$$

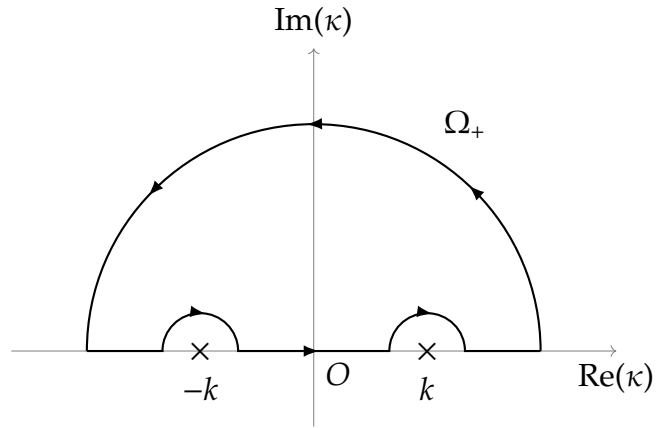
ahol $v_m(k) = \left. \frac{\partial \omega_m(\kappa)}{\partial \kappa} \right|_{\kappa=k}$ az m . sáv k -beli csoportsebessége. A formula tovább egyszerűsíthető, ha csak tiltott sávval rendelkező sávpárokra korlátozzuk a számításainkat, ekkor ugyanis csak az $n = m$ esetek adnak zérustól eltérő eredményt és a $\mathcal{D}_k^{n,m} = BZ$, azaz

$$Q'_{\mathcal{A}}(x) = \frac{\hbar\pi}{m} \text{Im} \left\{ \sum_n \int_{BZ} \frac{|\mathcal{A}_n(k)|^2}{|v_n(k)|} \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_n(k, x)}{\partial x} dk \right. \\ \left. + \sum_n \int_{BZ} \frac{\mathcal{A}_n^*(k) \mathcal{A}_n(-k)}{|v_n(-k)|} \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_n(-k, x)}{\partial x} dk \right\}. \quad (5.42)$$

Mivel Bloch-állapotok esetén $\psi_n(-k, x) = \psi_n^*(k, x)$, a kifejezésben található második tag képzetes része zérus, ezért nem járul hozzá a $Q'_{\mathcal{A}}(x)$ -hoz. Az a szélességű egységcellára történő átlagolással a formula tovább egyszerűsíthető. Ekkor egy cellán belüli tetszőleges x pontra

$$\overline{Q'}_{\mathcal{A}}(x) = \frac{1}{a} \int_x^{x+a} Q'_{\mathcal{A}}(s) ds. \quad (5.43)$$

Ez az átlagolás lehetővé teszi, hogy az integrálok sorrendjének felcserélése után behoz-



5.6. ábra. A komplex kontúrintegrál szemléltetése.

zuk az impulzus várható értékének Bloch-állapotokra érvényes képletét miszerint

$$\int_0^L \psi_n^*(k, x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_n(k, x) \right) dx = mv_n(k). \quad (5.44)$$

Egyszerűen megmutatható, hogy ha a fenti képletben a teljes kristály L hossza helyett csak az egységcella a hosszára integrálunk, akkor a kristályban lévő cellák számának megfelelően N -szer kisebb értéket kapunk. Ezt felhasználva pár apróbb átrendezés után

$$\frac{\hbar}{m} \int_0^a \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_n(k, x)}{\partial x} dx = \frac{i}{N} v_n(k). \quad (5.45)$$

Behelyettesítve ezt az eredményt a $Q'_{\mathcal{A}}(x)$ -ra vonatkozó kifejezésbe, végezetül azt kapjuk, hogy

$$\overline{Q'}_{\mathcal{A}} = \frac{\pi}{L} \sum_n \int_{BZ} \text{sgn}[v_n(k)] |\mathcal{A}_n(k)|^2 dk, \quad (5.46)$$

ahol felhasználtuk, hogy $L = Na$ és sgn a szignum függvényt jelöli. Vegyük észre, hogy $\overline{Q'}_{\mathcal{A}}$ független az x -től, ami a 5.45 következménye.

A $Q_{\mathcal{A}}(x)$ második tagjának konkrét alakja a következő:

$$Q''_{\mathcal{A}}(x) = \frac{i\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{n,m} \int_{BZ} \int_{BZ} \frac{\mathcal{A}_n^*(k) \mathcal{A}_m(\kappa) \psi_n^*(k, x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(\kappa, x)}{\omega_n(k) - \omega_m(\kappa)} d\kappa dk \right\}. \quad (5.47)$$

Vizsgáljuk meg a fenti kifejezésben szereplő κ szerinti integrált. Az integrandus pólusokkal rendelkezik a kiterjesztett κ szerinti komplex síkon, mégpedig azokon a pontokon, ahol $\omega_n(k) = \omega_m(\kappa)$. Ez lehetővé teszi, hogy a számlálóra vonatkozó bizonyos analitikus tulajdonságok teljesülése esetén kiterjesszük az integrált a teljes komplex síkra, és ekkor az elvégezhető. Általában például numerikus számításokból kapott $\mathcal{A}_m(\kappa)$ kifejtési együtthatókra nincs természetesen egy jól meghatározott mód arra, hogy kiterjesszük az integrált a teljes komplex síkra. Dipólközelítés esetén azonban minden sávátmenet vertikális, azaz a kifejtési együtthatók spektrális szélessége nem változik. Hasonló a helyzet akkor is, amikor ugyan a gerjesztés lokalizált, de a kiterjedése jóval nagyobb, mint az egységcelláé. Ilyen esetekben is végül egy, a kezdeti k_I körüli keskeny eloszlást kapunk. Lényegében, ha a $\mathcal{A}_m(\kappa)$ kifejtési együtthatók tartója végesnek tekinthető, akkor az integrálás határait kiterjeszthetjük a $\operatorname{Re}(\kappa)$ valós tengely mentén a $\pm\infty$ -be és bezárhatjuk a kontúrt. Végezetül ez elvezet minket a $\psi_m(\kappa, x)$ exponenciális tagjának vizsgálatához (lásd 5.33). Pozitív x -ek esetén az $\exp(i\kappa x)$ exponenciálisan csökken, amint $\operatorname{Im}(\kappa) \rightarrow \infty$. Ha az integrandusban ez a vezető tag, akkor bezárhatjuk a kontúrt a felső félsíkon. Ezt következőkben Ω_+ fogja jelölni. Ekkor

$$\begin{aligned} Q''_{\mathcal{A}}(x) &= \frac{i\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{n,m} \int_{BZ} \oint_{\Omega_+} \frac{\mathcal{A}_n^*(k) \mathcal{A}_m(\kappa) \psi_n^*(k, x) \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(\kappa, x)}{\omega_n(k) - \omega_m(\kappa)} d\kappa dk \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{n,m} \int_{BZ} \oint_{\Omega_+} \frac{\mathcal{N}(k, \kappa, x)}{\omega_n(k) - \omega_m(\kappa)} d\kappa dk \right\}. \end{aligned} \quad (5.48)$$

A 5.6 -es szemléltető ábrán látható módon $n = m$ esetben az integrandusnak két pólusa van, mégpedig a $\kappa = \pm k$. Feltételezve, hogy ezek elsőrendű egyszerű pólusok, a nekik megfelelő reziduumok rendre az $i\pi \mathcal{N}(k, k, x)/v_n(k)$ és az $i\pi \mathcal{N}(k, -k, x)/v_n(-k)$. Amikor $n \neq m$ és továbbra is csak tiltott sávval rendelkező sávpárokra korlátozzuk szá-

mításainkat, akkor a $\omega_n(k) = \omega_m(\kappa)$ egyenletnek csak a képzetes $\text{Im}(\kappa)$ tengely mentén lehetnek pólusai, de ezek x -ben lecsengő járulékokat hoznak. Megfelelően nagy x esetén tehát ezek a tagok lényegében eltűnnek. Ez megfelel annak a kísérleti megvalósítás szempontjából releváns esetnek, amikor maga a töltés detektáló műszer távol esik a kölcsönhatás helyétől. Ebben az esetben tehát

$$Q''_{\mathcal{A}}(x \rightarrow \infty) = \frac{\hbar\pi}{m} \text{Im} \left\{ \sum_n \int_{\text{BZ}} \frac{|\mathcal{A}_n(k)|^2}{v_n(k)} \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_n(k, x)}{\partial x} dk + \sum_n \int_{\text{BZ}} \frac{\mathcal{A}_n^*(k) \mathcal{A}_n(-k)}{v_n(-k)} \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_n(-k, x)}{\partial x} dk \right\}, \quad (5.49)$$

ami lényegében megegyezik 5.42 egyenlettel. Eltérés csupán a törtek nevezőjében van. A képletben szereplő második tag képzetes része ebben az esetben is zérus. Ha elvégezzük ugyanazokat a lépéseket, amelyekkel eljutottunk 5.42 egyenletől a 5.46 egyenletig, akkor megkapjuk a cellára átlagolt $\overline{Q''}_{\mathcal{A}}$ -t, amely

$$\overline{Q'}_{\mathcal{A}} = \frac{\pi}{L} \sum_n \int_{\text{BZ}} |\mathcal{A}_n(k)|^2 dk. \quad (5.50)$$

Összeadva a $Q_{\mathcal{A}}(x)$ két cellára átlagolt komponensét nagy pozitív x -re végezve azt kapjuk, hogy

$$\overline{Q_{\mathcal{A}}}(x \rightarrow \infty) = \frac{\pi}{L} \left(\sum_n \int_{\text{BZ}} (1 + \text{sgn}[v(k)]) |\mathcal{A}_n(k)|^2 dk \right) \quad (5.51)$$

$$= \frac{2\pi}{L} \sum_n \int_{\mathcal{D}_+} |\mathcal{A}_n(k)|^2 dk, \quad (5.52)$$

ahol $\mathcal{D}_+$ azt a tartományt jelöli, ahol az $v(k)$ pozitív. Ha negatív x -re szeretnénk egy hasonló határértéket kapni, akkor a kontúr integrált a komplex sík alsó részén kell

zárni. Az integrál után ugyanezen lépéseket végrehajtva az kapjuk, hogy

$$\overline{Q_{\mathcal{A}}}(x \rightarrow -\infty) = -\frac{2\pi}{L} \sum_n \int_{\mathcal{D}_-} |\mathcal{A}_n(k)|^2 dk, \quad (5.53)$$

ahol $\mathcal{D}_-$ azt a tartományt jelöli ahol a $v_n(k)$ negatív.

Annak érdekében, hogy meghatározzuk a $Q_d(x)$ minden tagját, rá kell térnünk a $Q_c(x)$ kereszttagra, ami a kezdőállapot és a dinamikát hordozó $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ hullámcsomag interferenciájából származik. A $Q_c(x)$ definíciójába behelyettesítve a $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ Bloch-állapotokon kifejtett egydimenziós alakját azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} Q_c(x) &= \int_0^\infty I_c(x, t) dt, \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_n \int_{BZ} \mathcal{A}_n(k) \psi_{n_I}^*(k_I, x) \frac{\partial \psi_n(k, x)}{\partial x} \int_0^\infty e^{-i[\omega_n(k) - \omega_{n_I}(k_I)]t} dt dk \right. \\ &\quad \left. + \int_{BZ} \mathcal{A}_n^*(k) \psi_n^*(k, x) \frac{\partial \psi_{n_I}(k_I, x)}{\partial x} \int_0^\infty e^{-i[\omega_{n_I}(k_I) - \omega_n(k)]t} dt dk \right\}, \quad (5.54) \end{aligned}$$

ahol felhasználtuk, hogy egydimenziós esetben a kezdőállapot a következő: $\Psi_I(x, t) = \psi_{n_I}(k_I, x) e^{-i\omega_{n_I}(k_I)t}$. Az előző $Q_{\mathcal{A}}(x)$ levezetéséhez hasonlóan itt is első lépésként be kell helyettesítenünk mindkét integrál tagba a 5.38 formulát, majd az integrálokat csoportosítjuk, mégpedig úgy, hogy a Dirac-deltát tartalmazó integrálok a $Q'_c(x)$ -be, a főértéket tartalmazók pedig a $Q''_c(x)$ kerüljenek. Ekkor azon feltételezést használva, hogy a sávok között tiltott sávok vannak, a $Q'_c(x)$ -be szereplő integrálok kiszámíthatók. A végeredményre újfent alkalmazhatjuk a 5.43 egyenletben használt cellára történő átlagolást, majd behelyettesíthetjük a 5.44 képletben szereplő sávsebességeket. Így némi egyszerűsítés után azt kapjuk, hogy

$$\overline{Q'_c}(x) = \text{sgn}[v_n(k)] \frac{2\pi}{L} \text{Re} \{ \mathcal{A}_{n_I}(k_I) \}. \quad (5.55)$$

A $Q''_c(x)$ -ben szereplő integrálokat a 5.47 egyenletnél használt komplex síkra történő kiterjesztéssel határozhatjuk meg. A $Q_{\mathcal{A}}(x)$ meghatározásához hasonlóan most is nagy

pozitív x -re vizsgálódunk, így a cellára átlagolás után az kapjuk, hogy

$$\overline{Q_C''}(x) = \frac{2\pi}{L} \operatorname{Re} \left\{ \mathcal{A}_{n_I}(k_I) \right\}. \quad (5.56)$$

Az eredményeket összegezve megkapjuk a $\overline{Q_C}(x)$ $x \rightarrow \infty$ határértékben:

$$\overline{Q_C}(x \rightarrow \infty) = \frac{4\pi}{L} \operatorname{Re} \left\{ \mathcal{A}_{n_I}(k_I) \right\}, \quad (5.57)$$

ha $v_{n_I}(k_I) > 0$ és zérus különben. Hasonlóan $x \rightarrow -\infty$ esetben is egy nem zérus tagot kapunk

$$\overline{Q_C}(x \rightarrow -\infty) = -\frac{4\pi}{L} \operatorname{Re} \left\{ \mathcal{A}_{n_I}(k_I) \right\}. \quad (5.58)$$

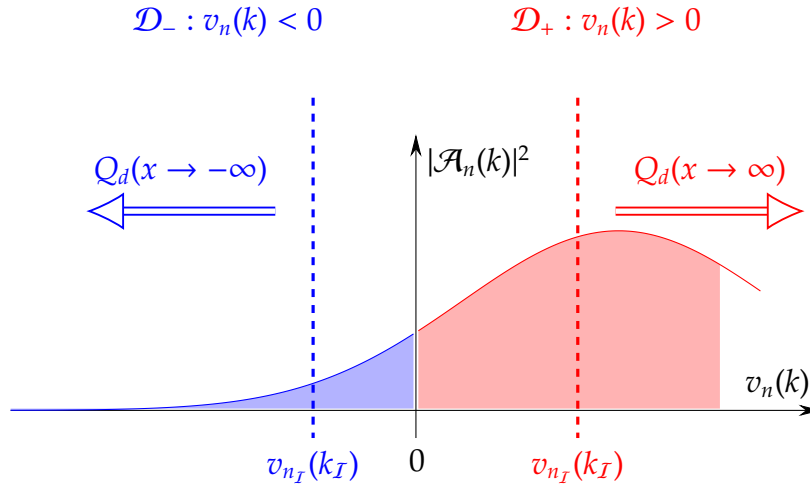
Végezetül, meg tudjuk adni $\overline{Q_d}(x)$ -re vonatkozó egyenleteket megfelelően nagy x -ek esetére:

$$\overline{Q_d}(x \rightarrow \infty) = \frac{2\pi}{L} \sum_n \int_{\mathcal{D}_+} |\mathcal{A}_n(k)|^2 dk + \begin{cases} \frac{4\pi}{L} \operatorname{Re} \left\{ \mathcal{A}_{n_I}(k_I) \right\} & \text{ha } v_{n_I}(k_I) > 0 \\ 0 & \text{különben,} \end{cases} \quad (5.59)$$

és

$$\overline{Q_d}(x \rightarrow -\infty) = -\frac{2\pi}{L} \sum_n \int_{\mathcal{D}_-} |\mathcal{A}_n(k)|^2 dk - \begin{cases} \frac{4\pi}{L} \operatorname{Re} \left\{ \mathcal{A}_{n_I}(k_I) \right\} & \text{ha } v_{n_I}(k_I) < 0 \\ 0 & \text{különben.} \end{cases} \quad (5.60)$$

Ahogy ez a fenti egyenletekből leolvasható, a lézerindukált extra töltésben egyrésről csak a "zavart" hordozó $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ hullámfüggvény kifejtési együtthatói játszanak szerepet, másrésről pedig attól függően, hogy a detektálást a pozitív vagy a negatív x irányban végezzük, ennek a hullámfüggvénynek vagy csak a pozitív, vagy csak a negatív csoportsebességgel rendelkező komponensei járulnak hozzá az extra töltés végső értékéhez. A $\Psi_I(\mathbf{r}, t)$ kezdőállapot hatása is csak akkor detektálható, ha a kiindulási n_I sávban a csoportsebesség adott k_I pontbéli értéke az előzőeknek megfelelően $x \rightarrow \infty$ esetén pozitív és $x \rightarrow -\infty$ esetén negatív.



5.7. ábra. A $v_n(k)$ csoportsebesség és a $\overline{Q_d}$ extra töltés kapcsolata. A kifejtési együtthatók csoportsebesség szerinti eloszlását a kék (negatív eset) és a piros (pozitív eset) görbe vázolja. Ha a detektor a kölcsönhatástól messze helyezkedik el akkor $|\mathcal{A}_n(k)|^2$ -nek pozitív x -ek esetén csak a piros, míg negatív x -ek esetén csak a kék része érheti el. Ezen felül ha a kezdőállapot a pozitív irányba halad, azaz $v_{n_I}(k_I) > 0$, akkor az interferenciából származó $\overline{Q_c}$ tag a pozitív x irányba eső detektoron, ellenkező esetben a negatív x irányba eső detektoron jelenik meg.

Vegyük észre, hogy a kapott formula teljes összhangban van a korábbi egysávós esetben kapott eredményeinkkel. Tekintsük az előző fejezetben bemutatott 5.22 egyenletet. Ebből a $x \rightarrow \infty$ határértékben visszkapjuk a 5.59-as egyenletet.

Fontos megjegyezni, hogy a fentiekben bemutatott számításokban nemcsak a $\mathcal{A}_n(k)$ kifejtési együtthatók nagysága játszik kiemelt szerepet, hanem azok fázisa is jelentőséggel bír. Lézerindukált folyamatok vizsgálata során ezek a fázisok nagyban függenek a kölcsönhatást leíró Hamilton-operátor átmeneti dipól mátrixelemeitől. Ilyen módon tehát újabb megerősítést kaptunk arra, hogy az átmeneti dipól-mátrix elemek fázisa kiemelt fontosságú fényindukált folyamatok időfejlődésének numerikus szimulációi során [94].

A következőkben a fentiekben bemutatott egyenletek helyességét mutatjuk be egy kétsávós szilárdtest modell segítségével. A felvázolt numerikus számítások ezen felül az egyenleteink egy lehetséges gyakorlati alkalmazását is bemutatják egy fényvel lokálisan gerjesztett szilárdtest példáján keresztül.

5.4.1. Lézerimpulzussal lokálisan kettett töltések kétsávos rendszerben

Az egyszerűség kedvéért a következőkben egy kétsávos egydimenziós modell segítségével írjuk le a szilárdtestet. Egy térben és időben egyaránt lokalizált, véges hosszúságú és kiterjedésű $E(x, t)$ külső elektromos teret tételezünk fel, amely polarizációja az x tengellyel párhuzamos. Az előzőekkel összhangban továbbá azt is feltételezzük, hogy a szabad terjedés a $t = 0$ időpillanatban kezdődik és ennek következtében τ hosszúságú külső impulzust $t = -\tau$ időpontban kapcsoljuk be. A kölcsönhatási tartományban a dinamikát a

$$H(x, t) = \frac{1}{2m} [p - eA(x, t)]^2 + U(x) \quad (5.61)$$

Hamilton-operátor írja le, ahol e és m rendre az elektron töltése és tömege és $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ az egydimenziós kanonikus impulzus. $U(x)$ a kristályrács periodikus effektív potenciálja, amíg $A(x, t)$ a külső tér vektorpotenciálja az $E(x, t) = -\frac{\partial}{\partial t}A(x, t)$ összefüggésnek megfelelően. A kölcsönhatás alatt a vektorpotenciál konkrét alakja

$$A(x, t) = A_0 \cos^2\left(\frac{\pi}{l}x\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{\tau}t\right) \cos(\omega_0 t), \quad (5.62)$$

ha x és t a kölcsönhatási tartományba esik, azaz $x \in [-l/2, l/2]$, és $t \in [-\tau, 0]$, különben $A(x, t) = 0$. A lézerimpulzus központi hullámhosszát $\lambda = 800$ nm-re állítottuk (ami megfelel az ultrarövid impulzusok keltésére gyakran alkalmazott Ti:Sa technológia központi hullámhosszának). Az impulzus előtt és után a külső tér zérus és a dinamikát az időfüggetlen

$$H_0(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x) \quad (5.63)$$

Hamilton-operátor írja le. Az $U(x)$ periodikus effektív potenciált úgy választottuk meg, hogy egy 3.2eV-os tiltott sávot kapjunk, ami megfelel a kísérletekben gyakran alkalmazott félvezetőben, a ZnO-ban található tiltott sáv szélességének [95]. A potenciál

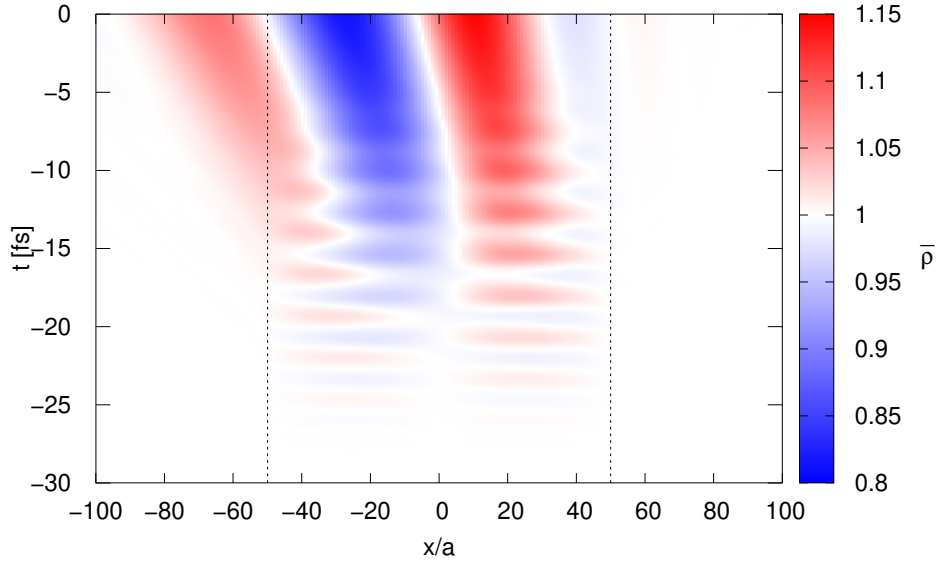
konkrét alakja a következő:

$$U(x) = -U_0 \sum_{i=1}^2 \cos^2 [\pi (x - x_i) / \Delta], \quad (5.64)$$

ahol $U_0^{(a)} = 25$ eV, $\Delta^{(a)}/a = 0.15$, $x_1^{(a)}/a = 0.3$ és $x_2^{(a)}/a = 0.607$ [95]. A bázist adó Bloch-állapotokat ennek megfelelően a $H_0(x)$ sajátértékegyenletének numerikus megoldásával kaptuk. Habár jól ismert az a tény, hogy kvantitatíve is megfelelő modellhez sok sáv szükségeltetik, ahhoz, hogy demonstráljuk a formuláink működését, két sáv is elegendő [78]. A következőkben a 3.2eV-os tiltott sávhoz legközelebb eső alsó és felső sávot rendre $n = 0, 1$ indexekkel jelöljük. Egyelektron képet alkalmazva azt tesszük fel, hogy a kezdeti Bloch-állapot az alsó sávhoz tartozik. Ezt a $\Psi_I(x, t = -\tau) = \psi_{n_I}(k_I, x)$ jelöli, ahol $n_I = 0$, $k_I = 0.1/a$ és a a modellpotenciál rácsállandója.

Az időfejlődés numerikus megoldásához használt térbeli diszkrét rács szélességét úgy választottuk meg, hogy a modellezni kívánt kölcsönhatás alatt keletkező hullámcsomagok ne ériék el a rács szélét, így elkerülve a tartomány szélén a reflexiókat. Ahogy az az 5.8 ábráról is könnyen leolvasható, a 10 teljes oszcillációt végző lézertér esetén elegendő, ha a rács szélessége a kölcsönhatási tartomány kétszerese. Az ábrán az is látható, hogy a lézertér előtt a várakozásoknak megfelelően a cella-átlagolt $\bar{\rho}(x)$ valószínűségi sűrűség értéke konstans. Jól kivehető a lézertér által keltett sűrűségoszcillációk terjedése. Az ábra készítéséhez használt paraméterek esetén az áthaladási idő, ami a kölcsönhatási tartomány és a sávban mért csoportsebesség hányadosa, lényegesen nagyobb az optikai ciklusidőnél. Ennek következtében a lézertér hatása jól magyarázható a ponderomotoros potenciál segítségével [27]. Ez a potenciál kiüríti a kölcsönhatási tartományt, majd az így keletkező sűrűség oszcillációk tovaterjednek az alsó, $n = 0$ valencia sávbeli csoportsebesség előjelének megfelelően a negatív x -ek irányába.

A külső impulzus után a $t = 0$ időpillanatban a rendszer teljes állapotát a $\Psi_{\mathcal{F}}(x, t = 0) = \Psi_{\mathcal{F}}(x)$ jelöli. Az állapot 5.2 egyenlet szerinti felbontásához szükségünk van a kiindulási állapot $t = 0$ időpillanatbeli értékére. Mivel a kezdőállapot a térmentes H_0 Hamilton-operátor sajátállapota, az időfejlődését $\mathcal{E}_{n_I}(k_I)$ sajátérték segítségével adhat-



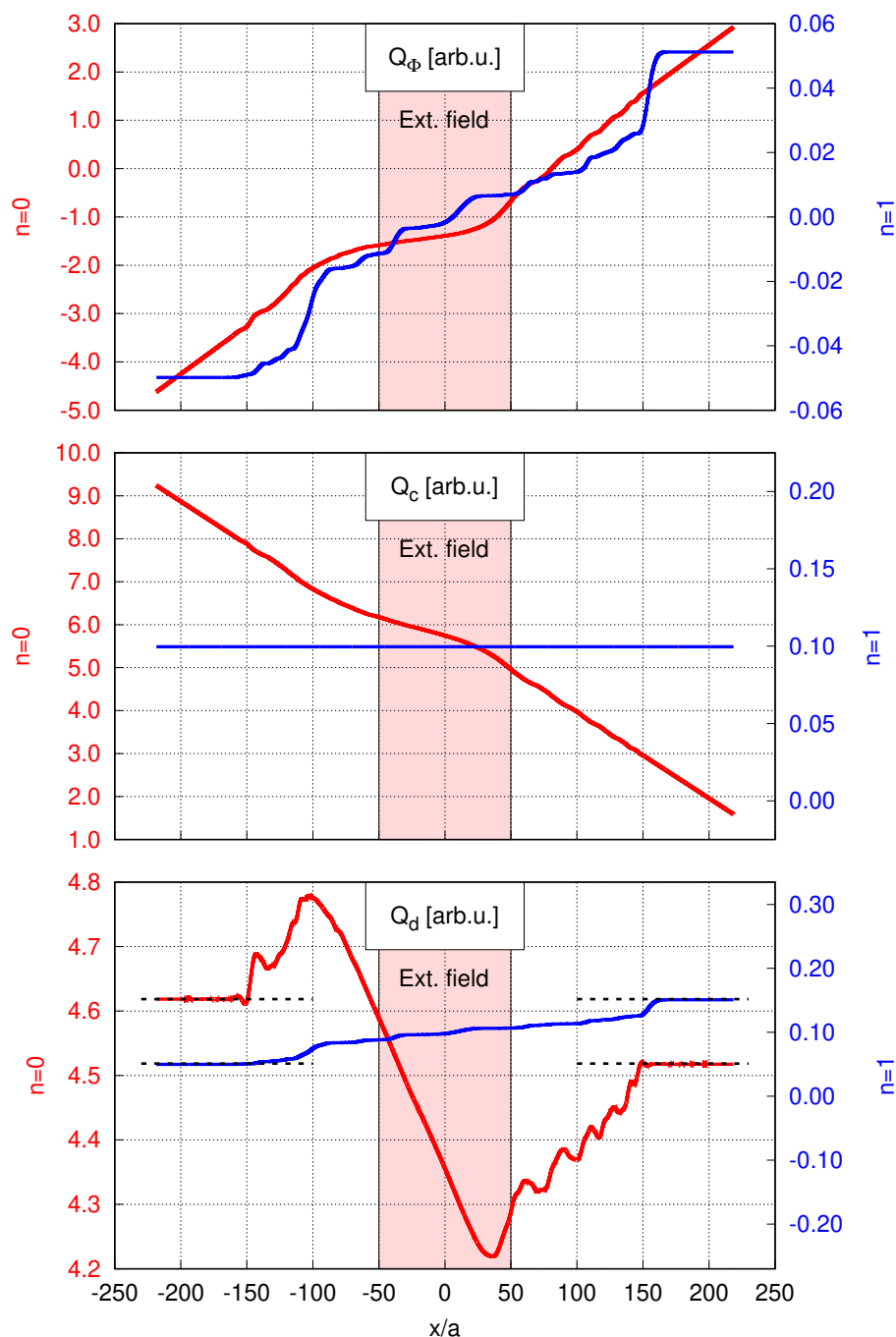
5.8. ábra. Az egységcellára átlagolt valószínűségi sűrűség numerikus módszerek segítségével meghatározott időfejlődése lokalizált lézerimpulzus hatása alatt. A kölcsönhatási tartomány $x/a \in [-50, 50]$, amely széléit a szaggatott vonalak jelzik. Az 1D-s model periodikus effektív potenciálját a 5.64 egyenlet definiálja. A kezdeti Bloch-állapot hullámszámvektorát $k_I a = 0.1$ összefüggés adja. Az elektromos tér csúcserőke 1 GV/m , az időtartama pedig $\tau = 20\pi/\omega_0$ (lásd 5.62 egyenlet). A kezdőállapotot úgy normáltuk, hogy a kezdőállapot $\bar{\rho}(x)$ cella-átlagolt sűrűsége egységnyi legyen a teljes x tengely mentén. Az ábrán jól látható a külső tér hatására keletkező hullámcsomagok kialakulása és terjedése [28].

juk meg:

$$\Psi_I(x, t = 0) = \psi_{n_I}(k_I, x) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{E}_{n_I}(k_I) \tau\right). \quad (5.65)$$

A felbontás után az 5.59 és az 5.60 egyenletek alkalmazásával megkapjuk a Q_d extra töltés értékét a kölcsönhatási tartománytól nagy távolságokra.

A Q_d extra töltést meg lehet kapni azonban az időfüggő valószínűségi áram integráljából is. A térmentes terjedést a 4.3.3-es alfejezetben felvázolt diszkrét Fourier-transzformációra épülő módszer segítségével határoztuk meg. Ezen numerikus módszerrel meghatározott időfejlődésből a térfüggő $Q_d(x)$ -et természetesen nem lehet megadni $t \rightarrow \infty$ határértékben, de kielégítő konvergencia elérhető ilyen eszközök alkal-



5.9. ábra. A numerikus módszerek segítségével meghatározott $Q_d(x)$ extra töltés tér-függése. A töltés különböző komponensei az 5.8 ábrán látható sűrűség oszcillációk eredménye. A töltés komponensek sávonként külön vannak ábrázolva: piros színnel a valencia, kék színnel a vezetési sávban kapott töltéseket ábrázoltuk. Vegyük észre, hogy $Q_c = 0$ az $n = 1$ sávban, mivel a kezdeti állapot az $n = 0$ sávban van, így a vezetési sávban nem jön létre a két tag között interferencia. Az alsó Q_d -t mutató ábrán látható szaggatott vonalak az 5.59 és az 5.60 egyenletekből adódó értékeket jelölik. Ezek relatív eltérése a tisztán numerikus úton kapottakhoz képest a vizsgált tartomány szélén kisebb, mint 10^{-4} . A szimuláció paraméterei megegyeznek az 5.8 ábrán felsoroltakkal [28].

mazásával is. A végeredményt komponensekre bontva látható az 5.9 ábrán. Az 5.6 egyenletben szereplő Q_d komponensek (Q_A és Q_C) tér szerinti változását külön ábráztuk az alsó $n = 0$ (piros) és a felső $n = 1$ (kék) sávokra. Jól látható, hogy az egyenleteinknek megfelelően a felső sávban nincs Q_C kereszttag (középső ábra), mivel a kiindulási állapot az alsó sávban helyezkedik el, azaz $n_I = 0$. Megfigyelhető az is, hogy annak ellenére, hogy a Q_A és Q_C komponensek az alsó sávban rendre növekvő és csökkenő tendenciát mutatnak, az összegük jól konvergál az analitikus formuláinkkal kapott értékhez. Ezzel szemben a felső sávban csak Q_A ad nullától különböző járulékot, amely szintén jól konvergál az egyenleteinkből származó értékhez. A kölcsönhatási tartománytól távol az 5.59 és az 5.60 egyenletekkel számolt extra töltés értékeket a szaggatott vonalak jelölik. A relatív eltérés a tisztán numerikus úton kapottakhoz képest kisebb, mint 10^{-4} . Ez figyelemre méltó eredmény annak a tükrében, hogy míg a levezetéseink során folytonos reciprokteret tételeztünk fel, addig ebben az alkalmazási körben diszkrét integrálásra, azaz véges számú elem összegzésére kellett szorítkoznunk (a kölcsönhatás eredményét csak numerikus úton tudjuk meghatározni). Érdekes továbbá azt is kiemelni, hogy az 5.59 és az 5.60 egyenletek levezetése során feltettük, hogy az integrandusok analitikus komplex függvények. Numerikus számítások esetén ez a feltétel nem teljesíthető. Ez arra utal, hogy ezek az egyenletek azon felül, hogy egy tiszta fizikai képet adnak a detektálható töltés kvantummechanikai háttéréről, sokkal általánosabbak és szélesebb körben alkalmazhatók, mint ahogy az a levezetések során tett megkötésekből következne.

5.5. Töltéstranszport három dimenzióban

Az előzőekben a könnyebb követhetőség és átláthatóság, valamint az egyszerűbb formulák érdekében a külső tér hatására keletkező extra töltések meghatározásának egydimenziós esetére szorítkoztunk. A következőkben azt fogjuk megvizsgálni, hogy mennyiben tér el ettől a háromdimenziós eset és, hogy van-e kapcsolat a két eset között.

Első lépésben a fizikai kép újraelévenítésének érdekében érdemes visszatérni a

célkitűzésben használt 5.2-es szemléltető ábrához. Az egyszerűség érdekében azt tételeztük fel tehát, hogy a vizsgálni kívánt szilárdtest téglatest alakú, amelynek egy adott x pontján átmenő, az $y - z$ síkkal párhuzamosan fekvő $\mathcal{F}$ felületen átfolyó teljes $I(x, t)$ áramot vizsgáljuk. Ennek az áramnak csak a kezdeti állapot által szállítottól eltérő részére voltunk kíváncsiak, pontosabban az általa szállított töltésre, azaz az idő szerinti integráljára. Ez a töltés, mint ahogy az az 5.6-as egyenletben is látható, két tagra bontható. Ha a $Q_{\mathcal{A}}$ első tag definíciójába az eddigiekkel ellentétben a teljes háromdimenziós $\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t)$ állapot 5.35-as egyenlet szerint felbontását helyettesítjük be, akkor a következőt kapjuk:

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_{n,n'} \int_0^\infty \int_{\mathcal{F}} \int_{\text{BZ}} \int_{\text{BZ}} \mathcal{A}_n^*(\mathbf{k}) \mathcal{A}_{n'}(\mathbf{k}') \psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r})}{\partial x} \cdot e^{-i[\omega_{n'}(\mathbf{k}') - \omega_n(\mathbf{k})]t} d^3\mathbf{k} d^3\mathbf{k}' df dt \right\}. \quad (5.66)$$

A következőkben használt jelölésmód szerint $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ és $\mathbf{k}' = (k'_x, k'_y, k'_z)$. Ha kiírjuk az integrandusban szereplő $\psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \cdot \partial/\partial x \psi_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r})$ szorzat Bloch-állapotait, akkor az exponenciális tagokat szeparálhatjuk a következőképpen:

$$\begin{aligned} \psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r})}{\partial x} &= e^{-i[(k_y - k'_y)y + (k_z - k'_z)z]} \frac{1}{\sqrt{N}} u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{-ik_x x} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{N}} u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{ik'_x x} \\ &= \mathcal{I}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{-i[(k_y - k'_y)y + (k_z - k'_z)z]}. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Az újonnan bevezetett $\mathcal{I}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r})$ függvény örökli a $\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ Bloch-állapotok rácsperiodicitását, azaz tetszőleged $\mathbf{R} = (R_x, R_y, R_z)$ rácsvektor esetén

$$\mathcal{I}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r} + \mathbf{R}) = \mathcal{I}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{r}). \quad (5.68)$$

Vegyük észre, hogy az integrandusban csak ez a két tag függ a helykoordinátáktól. Cseréljük fel az integrálok sorrendjét és végezzük el először a df felület szerinti integrálját ezen térfüggéssel rendelkező tagoknak. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a rács köbös a élhosszúságú egységcellával rendelkezik. Ekkor a rácsperiodicitás

felhasználásával mind az y , mind pedig a z szerinti integrált felírhatjuk N darab egységcellára vett integrál összegeként. Kiemelve az integrálokból az y és z szerinti R_y és R_z rácsvektor komponenseket, az összegzés kiemelése után megjelenik az integrálok előtt a $\sum_{R_y, R_z} e^{-i[(k_y - k'_y)R_x + (k_z - k'_z)R_y]}$ szorzótényező. Felhasználva a rácsvektorokra érvényes $\sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k})/V$ összefüggést, azt kapjuk, hogy

$$\sum_{R_y, R_z} e^{-i[(k_y - k'_y)R_x + (k_z - k'_z)R_y]} = \frac{(2\pi)^2}{L_y L_z} \delta(k_y - k'_y) \delta(k_z - k'_z). \quad (5.69)$$

Visszaírva az integrandus 5.67 egyenlet szerinti baloldali alakját azt kapjuk, hogy

$$\int_{\mathcal{F}} \psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r})}{\partial x} d\mathbf{f} = \frac{(2\pi)^2}{L_y L_z} \delta(k_y - k'_y) \delta(k_z - k'_z) \int_{\mathcal{F}_c} \psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r})}{\partial x} d\mathbf{f}_c, \quad (5.70)$$

ahol $\mathcal{F}_c$ az egységcella felületét és $d\mathbf{f}_c$ az egységcella felületén értelmezett felületelemet jelöli. Ezt visszaírva az 5.66 egyenletbe az integrálok sorrendjének visszaállítása után

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = \frac{(2\pi)^2}{L_y L_z} \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_{n, n'} \int_0^\infty \int_{\mathcal{F}_c} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{\text{BZ}} \mathcal{A}_n^*(\mathbf{k}) \mathcal{A}_{n'}(k'_x, k_y, k_z) \cdot \psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi_{n'}(k'_x, k_y, k_z, \mathbf{r})}{\partial x} e^{-i[\omega_{n'}(k'_x, k_y, k_z) - \omega_n(\mathbf{k})]t} d^3\mathbf{k} dk'_x d\mathbf{f}_c dt \right\}. \quad (5.71)$$

A fenti képlet rövidítésének az érdekében az integrandus időfüggetlen részére vezessük be az $\tilde{\mathcal{I}}_{nn'}(k_x, k_y, k_z, k'_x, k_y, k_z, \mathbf{r}, t)$ jelölést. Az integrálok sorrendjének újabb megváltoztatásával a következőt írhatjuk:

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = \frac{(2\pi)^2}{L_y L_z} \int_{\mathcal{F}_c} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_{n, n'} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \tilde{\mathcal{I}}_{nn'}(k_x, k_y, k_z, k'_x, \mathbf{r}, t) \cdot \int_0^\infty e^{-i[\omega_{n'}(k'_x, k_y, k_z) - \omega_n(k_x, k_y, k_z)]t} dt dk_x dk'_x \right\} dk_y dk_z d\mathbf{f}_c. \quad (5.72)$$

Az így kapott integrandust 1D-vel indexeljük, mivel a reciprok térben csak a k_x tengely

menti integrálokat tartalmazza. Bevezetve tehát a

$$Q_{\mathcal{A}}^{1D}(\mathbf{r}, k_y, k_z) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ \sum_{n, n'} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \tilde{T}_{nn'}(k_x, k_y, k_z, k'_x, \mathbf{r}, t) \cdot \int_0^\infty e^{-i[\omega_{n'}(k'_x, k_y, k_z) - \omega_n(k_x, k_y, k_z)]t} dt dk_x dk'_x \right\} \quad (5.73)$$

jelölést az egydimenziós esetben kapott 5.37-es egyenlettel analóg kifejezést kapunk, habár ebben az esetben az egydimenziós $Q_{\mathcal{A}}$ -hoz képest a $Q_{\mathcal{A}}^{1D}$ -nek az x és $k = k_x$ argumentumokon felül van y, z és k_y, k_z argumentuma is. Az integrálok számításai során kezelhetjük ezeket úgy, mint adott szabad paramétereket. Tehát a $Q_{\mathcal{A}}^{1D}$ meghatározásához használhatjuk az előző fejezetben levezett egyenleteket. Az 5.72 egyenletet tehát felírhatjuk úgy, mint $Q_{\mathcal{A}}^{1D}$ szabad paraméterek szerinti integrálját, azaz

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = \frac{(2\pi)^2}{L_y L_z} \int_{\mathcal{F}_c} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} Q_{\mathcal{A}}^{1D}(\mathbf{r}, k_y, k_z) dk_y dk_z df_c. \quad (5.74)$$

Ha Q_C meghatározásánál hasonlóképpen járunk el és végrehajtjuk ugyanazokat a lépéseket, amelyekkel eljutottunk az 5.66 egyenletől az 5.74 egyenletig a következőre jutunk:

$$Q_C(x) = \frac{(2\pi)^2}{L_y L_z} \int_{\mathcal{F}_c} Q_C^{1D}(\mathbf{r}) df_c, \quad (5.75)$$

ahol a $\mathbf{k}_I = (k_x^I, k_y^I, k_z^I)$ jelölés bevezetésével az integrandus a következő alakú:

$$\begin{aligned}
 Q_C^{1D}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sum_n \int_{BZ} \mathcal{A}_n(k_x, k_y^I, k_z^I) \psi_{n_I}^*(\mathbf{k}_I, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi_n(k_x, k_y^I, k_z^I, \mathbf{r})}{\partial x} \right. \\
 \cdot \int_0^\infty e^{-i[\omega_n(k_x, k_y^I, k_z^I) - \omega_{n_I}(\mathbf{k}_I)]t} dt dk_x \\
 + \int_{BZ} \mathcal{A}_n^*(k_x, k_y^I, k_z^I) \psi_n^*(k_x, k_y^I, k_z^I, \mathbf{r}) \frac{\partial \psi_{n_I}(\mathbf{k}_I, \mathbf{r})}{\partial x} \\
 \cdot \left. \int_0^\infty e^{-i[\omega_{n_I}(\mathbf{k}_I) - \omega_n(k_y^I, k_z^I)]t} dt dk \right\}. \quad (5.76)
 \end{aligned}$$

Köbös egységcella esetén tehát az egydimenzióra kapott eredmények felhasználásával meghatározhatjuk a külső tér által keltett $Q_d(x)$ extra töltés értékét, a következőképp:

$$Q_d(x) = \frac{(2\pi)^2}{L_y L_z} \int_{\mathcal{F}_c} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} Q_{\mathcal{A}}^{1D}(\mathbf{r}, k_y, k_z) dk_y dk_z df_c + \frac{(2\pi)^2}{L_y L_z} \int_{\mathcal{F}_c} Q_C^{1D}(\mathbf{r}) df_c. \quad (5.77)$$

5.5.1. Példa az alkalmazásra: Kvadratikus sáv esete

Az előzőekben bemutatott 3D-s esetre történő általánosítás szemléltetésének érdekében térjünk vissza az 5.3 fejezetben tárgyalt kvadratikus sáv esetére. Ha felírjuk a 5.20-as egyenlet 3D-s megfelelőjét, amikor $\rho_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}) = |\Psi_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}, t=0)|^2$ és $\tilde{\rho}_{\mathcal{A}}(\mathbf{k}) = (2\pi)^3 / (L_x L_y L_z) |\mathcal{A}_n(\mathbf{k})|^2$, akkor az integrálok elvégzése után arra jutunk, hogy

$$Q_{\mathcal{A}}(x) = -\frac{m^*}{m} \int_{-\infty}^0 \tilde{\rho}_{\mathcal{A}}(\mathbf{k}) dk_x + \frac{m^*}{m} \int_{-\infty}^x \rho_{\mathcal{A}}(\mathbf{r}') dx'. \quad (5.78)$$

Azaz az x tengelyre merőleges síkon átfolyó additív töltés az x pontban egyrészt a valószínűségi eloszlás x mögötti részéből, másrészt pedig az impulzustérbeli komponensek azon részéből adódik, amelyeknek a k_x irányú vetülete negatív.

5.6. Összefoglalás

Ebben a fejezetben a lézerimpulzusok által szilárdtestekben keltett töltések elméleti hátterét vizsgáltuk kvantummechanikai módszerek segítségével. Azt feltételeztük, hogy a szilárdtest felületére érkező külső elektromágneses impulzus véges kiterjedésű térben és időben egyaránt. A kölcsönhatást ennek megfelelően három fő időtartományra tudtuk bontani: a véges impulzus előtti, az impulzus alatti és végül az utáni. A impulzus előtti állapotról feltettük, hogy egy ismert kvantumállapot. Az impulzus alatti dinamikáról feltettük, hogy valamely széles körben alkalmazott numerikus módszer segítségével meghatározható [64, 76–84]. Vizsgálataink fókuszában a harmadik időtartomány állt, amely során a külső tér által elmozdított töltések kvantummechanikai hullámcsomagok formájában eljutnak egészen a detektorig. A szilárdtest mint komplex többrészecske-rendszer leírása meglehetősen nehéz feladat. Mint ahogy a bevezetőben is kiemeltük, sok esetben sokkal egyszerűbb rendszerekkel is jól magyarázhatók bizonyos effektusok. Első lépésként mi is egy ilyen egyszerűsített szilárdtest–fizikai modellből indultunk ki. Az egyelektron–közelítés során eltekintünk az elektron–elektron kölcsönhatásoktól és a rácsrezgésektől és úgy tekintünk a vizsgált elektronra, mint egy periodikus potenciálban mozgó töltésre. A számítások sokkal egyszerűbbek, ha egy dimenzióra szorítkozunk, de az így kapott eredmények jól szemléltetik a háttérben húzódó összefüggéseket és kapcsolatokat. A számítások során alkalmazott felbontás egyik alapköve az, hogy termikus egyensúlyban a szilárdtestbéli eredő áram zérus. Azaz az elektron bármely lehetséges Ψ_F kezdőállapotából származó áram statisztikailag (a Fermi–Dirac eloszláson keresztül) kiegyenlítődik. A harmadik időtartomány elején tehát az elektron kvantummechanikai állapotát két részre bontottuk. Az egyik része a már említett kezdeti, a másik része pedig a külső perturbáció hatását magába foglaló tag, amelyre az egyszerűség kedvéért csak additív tagként hivatkozunk. Ezt a felbontást behelyettesítve a kvantummechanikai valószínűségi áram képletébe három tagot különböztethetünk meg. Az első a kezdeti állapothoz, a második az additív taghoz, a harmadik kereszt tag pedig ezen két tag interferenciájához köthető.

A célunk a gerjesztés hatására bekövetkező, a kezdőállapot által szállított töltéstől

való eltérés meghatározása volt. Ezt az eltérést röviden extra töltésnek neveztük el. A valószínűségi áram ismeretében ezt a megfelelő tagok időintegráljával határoztuk meg.

A legegyszerűbb eset, amin a számítások elvégezhetők, a kvadratikus sáv esete. Egyetlen kvadratikus vezetési sáv esetén a diszperziós reláció csak egy additív konstansban tér el a szabad terjedés esetén érvényes $\mathcal{E}(k) = \hbar^2 k^2 / (2m)$ -től. Ennek megfelelően a sajátállapotok egyszerű síkhullámok. Ebben az esetben tehát a számítások nagymértékben egyszerűsödnek. Az így kapott analitikus eredményeket numerikusan és a Gauss-hullámcsomag példájának segítségével analitikusan is alátámasztottuk. A Gauss-hullámcsomag esete a fizikai folyamat mélyebb megértésében is nagyban segít.

Sokkal szélesebb körben alkalmazható egyenleteket kaptunk a Bloch-állapotok segítségével. Ebben az esetben azonban az egyenletek csak az egységcellára átlagolt eredményekkel szolgálnak a kölcsönhatástól nagy távolságban. Az egyenleteket egy lézerpulzussal gerjesztett kétsávú rendszeren alkalmaztuk. A példán keresztül az eredményeink numerikus ellenőrzésére és alátámasztására is lehetőség nyílt. Végezetül bemutattuk, hogy az egydimenziós esetben kapott eredmények miként általánosíthatók három dimenzióra.

A fentiek alapján az új tudományos eredményeimet az alábbi tézispontokban foglaltam össze:

4. Töltéstranszport egydimenziós kvadratikus sávban

A lézerpulzus által gerjesztett elektronsűrűség-oszcillációk időfüggő áramot jelentenek, azonban ezeknek az áramoknak az időfüggése – éppen a gyors oszcillációk miatt – a jelenlegi kísérleti eljárásokkal nem határozható meg. Időintegráljuk – azaz a lézerpulzus által elmozdított összes töltés – azonban megfelelő technikával már mérhető. Ennek elméleti meghatározására először egyetlen kvadratikus diszperzióval rendelkező vezetési sávot tekintettem egyelektron-közelítést alkalmazva. Az általam kapott analitikus eredményt numerikusan és a Gauss-hullámcsomag példájának segítségével analitikusan is validáltam [P2].

5. Töltéstranszport egydimenziós kvantummechanikai modellje szilárdtestekben

A modell továbbfejlesztéseként megvizsgáltam a több sávot is figyelembe vevő egydimenziós esetet is. Ekkor célszerű a lézerimpulzus utáni állapotot nem egyszerűen síkhullámok, hanem Bloch-állapotok lineáris szuperpozíciójaként tekinteni. Kontúrintegrálok alkalmazásával ebben az esetben is analitikus összefüggést kaptam, amelynek a segítségével a lézerimpulzus által elmozdított összes töltés meghatározható, attól függően, hogy a kölcsönhatási tartomány melyik oldalán van a detektor. A kapott összefüggés jól interpretálható fizikai képet jelent [P2].

6. Töltéstranszport három dimenzióban

További általánosításként megmutattam, hogy az előző pontban leírt eredmény átvihető a háromdimenziós esetre is. Ekkor a detektálási pontok szerepét síkok veszik át, és azt a kérdést tudjuk megválaszolni, hogy a lézeres gerjesztés után egy kiválasztott síkon keresztül mennyi, a kölcsönhatás következményeként elmozduló töltés áramlik át. Ezzel az egyelektron képet használó modellen belül a lehető legáltalánosabb formulát adtam meg ezeknek a töltéseknek a kiszámítására [P2].

Összefoglalás és tézisek

Napjainkra a femtoszekundumos optikai kísérletek elvégzése rutinszerűvé vált szinte a világban, továbbá az attoszekundumos impulzusok keltése sem elképzelhetetlen [96–98]. Ezeknek az ultrarövid fényimpulzusoknak köszönhetően olyan folyamatokba is bepillantást nyerhetünk, amelyek sokszor molekula vagy atomi szinten mennek végbe [10, 99–103]. A kísérletek folyamán az egyik legtöbbet alkalmazott mérési eljárás az ún. pumpa-próba módszer [4–9].

Az ultrarövid fényimpulzusok közegekben történő terjedése és elnyelődése nagy mértékben függ az időbeli lefolyásuktól. Ebből a szempontból az egyik legfontosabb paraméter a vivő-burkoló fázis [11–15]. A lézerimpulzusok mérések útján történő karakterizálása, sokszor egyetlen impulzus alapján, rendkívül komoly kihívás jelent [16–19]. Napjainkban, a leginnovatívabb kísérleti eredmények előrevetítik a különféle szilárdtestekből kialakított szenzorok alkalmazását. Ezekben a kísérletekben a szilárdtest felületére érkező fényimpulzus által keltett áramok és töltések detektálása útján határozzák meg a CEP értékét [20–23]. Ezeknek a detektálási eljárásoknak a hatékonysága nagyban növelhető, ha mélységeiben megértjük a kölcsönhatás mögött rejlő folyamatot. A célunk tehát egy, a fényindukált töltéstranszportot kellően pontosan leíró, hatékonyan használható kvantummechanikai szilárdtestmodell megalkotása, illetve a folyamat részletekbe menő analizálása és megértése volt a kifejlesztett modell segítségével.

A szilárdtest a részecskék számát tekintve egy rendkívül összetett sokrészecske-rendszer. A magas részecskeszámok következtében a szilárdtestek minden effektust figyelembe vevő teljes leírása kivitelezhetetlen. A Born–Oppenheimer-közelítés segítségével szét lehet választani az atommagok és az elektronok dinamikáját. Ennek alkal-

mazásával az elektronokat egy adott, a kristályrácsot leíró rácsperiódikus potenciálban mozgó töltött részecskékként kezelhetjük. A periodicitásnak köszönhetően a szilárdtestbeli elektronok kvantumállapotai egy rácsperiodikus függvény és egy síkhullám szorzataként írhatjuk fel. Ezeket a Bloch-állapotokat az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásával határozhatjuk meg.

A 4. fejezetben a ballisztikus vezetők elméletét alkalmazva a vezetési sávban kettett áramok kapcsolatát vizsgáltuk a külső impulzussal az effektív tömeg közelítés segítségével. Vizsgálataink során a számítások megkönnyítésének érdekében a szimulációinkat egy dimenzióra korlátoztuk és egy térben és időben lokalizált külső elektromágneses impulzust tételeztünk fel. Az 5. fejezetben rátértünk a kettett áramok időintegráljának segítségével meghatározható töltések vizsgálatára. A hatékony numerikus kalkulációk érdekében egy analitikus módszert dolgoztunk ki a lézertér által elmozdított "extra" töltés meghatározására. Először egy effektív tömeg közelítéssel analóg egysávos modell segítségével mutattuk be a komplex kontúrintegrálokra épülő számításokat, majd ezeket általánosítottuk Bloch-állapotokra a szilárdtestbeli egységcellákra történő átlagolásokkal.

A dolgozatban bemutatott új tudományos eredményeimet az alábbi tézispontokban foglaltam össze:

1. Lokális gerjesztések egydimenziós modellje

Szilárdtestek és lézerimpulzusok kölcsönhatását vizsgáltam. Módszert dolgoztam ki egy dimenzióban, egyrészecske-képben, effektív tömeg közelítést alkalmazó modellben a vezetési sávbeli elektronok és térben lokalizált lézerimpulzus kölcsönhatásának a leírására. Ez a numerikus eljárás túlmutat a szokásosan alkalmazott dipólközelítés keretein és alkalmas a fókuszfoltban keletkező, majd onnan tovaterjedő elektronsűrűség-oszcillációk tanulmányozására [P1].

2. Kvantumos szórás valószínűségi áramsűrűségének időfüggése

Az 1. pontban ismertetett módszert alkalmazva vizsgáltam a lézerindukált dinamika függését az elektronenergiáktól és a kivilágítás szélességétől. Kiszámítottam a lézerimpulzus által kettett áram időfüggését, majd Fourier-transzformáció

segítségével megmutattam, hogy a gerjesztő tér vivőfrekvenciájának a súlya a spektrumban annál kisebb, minél lassabbak az elektronok, illetve minél szélesebb a kölcsönhatási tartomány [P1].

3. A ponderomotoros potenciál szerepének feltérképezése

A kapott eredményeket fizikailag értelmeztem a ponderomotoros potenciál koncepcióját felhasználva. Klasszikus képben az effektust úgy interpretálhatjuk, hogy a kölcsönhatási tartományon áthaladó elektron mozgására a lézertér által indukált oszcilláció rakódik rá, ami a haladó mozgás szempontjából egy effektív potenciált jelent. Ennek a potenciálnak a hatása annál erősebb, minél több időt tölt az elektron a kölcsönhatási tartományban, ami összhangban van az előző tézispontban talált összefüggésekkel. Lassú elektronok és/vagy széles kivilágítási tartomány esetén a lézerindukált dinamika közel megegyezik egy, az impulzus burkolója szerint megjelenő, majd eltűnő potenciál által létrehozott időfejlődéssel [P1].

4. Töltéstranszport egydimenziós kvadratikus sávban

A lézerimpulzus által gerjesztett elektronsűrűség-oszcillációk időfüggő áramot jelentenek, azonban ezeknek az áramoknak az időfüggése – éppen a gyors oszcillációk miatt – a jelenlegi kísérleti eljárásokkal nem határozható meg. Időintegráljuk – azaz a lézerimpulzus által elmozdított összes töltés – azonban megfelelő technikával már mérhető. Ennek elméleti meghatározására először egyetlen kvadratikus diszperzióval rendelkező vezetési sávot tekintettem egyelektron-közelítést alkalmazva. Az általam kapott analitikus eredményt numerikusan és a Gauss-hullámcsomag példájának segítségével analitikusan is validáltam [P2].

5. Töltéstranszport egydimenziós kvantummechanikai modellje szilárdtestekben

A modell továbbfejlesztéseként megvizsgáltam a több sávot is figyelembe vevő egydimenziós esetet is. Ekkor célszerű a lézerimpulzus utáni állapotot nem egyszerűen síkhullámok, hanem Bloch-állapotok lineáris szuperpozíciójaként tekinteni. Kontúrintegrálok alkalmazásával ebben az esetben is analitikus összefüggést kaptam, amelynek a segítségével a lézerimpulzus által elmozdított összes töltés meghatározható, attól függően, hogy a kölcsönhatási tartomány melyik oldalán van a detektor. A kapott összefüggés jól interpretálható fizikai képet jelent [P2].

6. Töltéstranszport három dimenzióban

További általánosításként megmutattam, hogy az előző pontban leírt eredmény átvihető a háromdimenziós esetre is. Ekkor a detektálási pontok szerepét síkok veszik át, és azt a kérdést tudjuk megválaszolni, hogy a lézeres gerjesztés után egy kiválasztott síkon keresztül mennyi, a kölcsönhatás következményeként elmozduló töltés áramlik át. Ezzel az egyelektron képet használó modellen belül a lehető legáltalánosabb formulát adtam meg ezeknek a töltéseknek a kiszámítására [P2].

Summary

Nowdays experiments with femtosecond optics can be done routinely all over the world, and attosecond pulses are also achievable [96–98]. Using these ultrashort pulses we can get an insight into processes which are taking place at molecular or atomic level [10, 99–103]. An often used, successful measurement procedure for this is the so-called pump-probe method[4–9].

The propagation and the absorbtion of ultrashort light-pulses through medium significantly depends on the temporal behaviour, the "waveform" of the pulse. From this point of view, one of the most important parameters is the carrier–envelope phase (CEP). The characterization of the laser pulses through measurements, often using a single shot only, means a considerable challenge. Nowadays, the most innovative experimental results promise that sensors can be fabricated from solids. In these experiments the value of the CEP is determined from the currents and charges generated by the light pulses impinging on the surface of the sample [20–23]. The efficiency of this detection procedure can be improved significantly by obtaining a deep insight into the process behind the interaction. Our aim was to develop a quantum mechanical solid state model, which can efficiently be used to investigate light–induced charge transport, and to analyse and understand the related physical processes in detail.

Considering the number of the particles, solids form a very complex many–body system. As a result of the high particle number, a complete description of the solid by taking into account all of the effects is unaccomplishable. The dynamics of the electrons and the nuclei can be separated by applying the Born–Oppenheimer approximation. This allows us to consider the electrons as charged particles moving in a lattice periodic crystal potential. Due to this periodicity, the quantum state of the electron in the lattice

has the form of a product of a lattice periodic function and a plane wave. We can determine these Bloch states by solving the time independent Schrödinger equation.

In chapter 4 we investigated the relationship between the currents in the conduction band (using effective mass approximation) and the external pulse by applying the ballistic conduction theory. For the sake of simplicity, during our simulations we worked in one dimension assuming an external electromagnetic pulse localized in space and time as well. In chapter 5 we proceeded to the investigation of the light-displaced charges which can be calculated by the integral of the currents. In order to reduce the computational cost of the calculations, we developed an analytic method for the determination of this charge. First, we presented our calculations that are based on complex contour integrals by assuming a single band (analogously to the effective mass approximation). By averaging over the unit cells we can generalize our calculations to the Bloch states in 3D as well.

The new scientific results I obtained, can be summarized as follows:

1. One-dimensional model of local excitations

I investigated the interaction of solids and laser pulses. Using single electron picture and effective mass approximation, I developed a model for describing the laser-induced dynamics in the conduction band of one-dimensional solids. Since the spatial profile of the excitation is taken explicitly into account, this approach is not limited by the usual constraints of the dipole approximation. Density oscillations that emerge in the finite-sized interaction region and then propagate along the sample can be conveniently described by the aid of this model [P1].

2. Scattering processes and the time dependence of the emerging probability current density

Using the method described in point 1, I investigated the dependence of the laser induced currents on the electron energies as well as on the size of the interaction region. I calculated the time dependent current, and used Fourier transform to obtain the corresponding spectrum. I showed that the carrier frequency of the

exciting pulse has weaker contribution to the spectrum when the electron energies decrease or the laser spot size increases [P1].

3. Analyzing the role of the ponderomotive potential

I provided a clear physical interpretation of my numerical findings in terms of the ponderomotive potential. Using a classical picture, the laser field modifies the dynamics of the electron that traverses the interaction region, leading to an oscillatory motion that superimposes on the free propagation. This can be viewed as the action of a potential that decreases the speed of the electrons. The influence of the ponderomotive potential is the stronger the more time the electrons spend in the interaction region. This is in complete agreement with the numerical results presented in the previous point. For slow electrons or large interaction area, the effect of the laser pulse is essentially the same as that of the corresponding ponderomotive potential that is turned on and off according to the envelope of the pulse [P1].

4. Charge transport in a quadratic band of a one-dimensional crystal

The density oscillations that are induced by the laser pulse correspond to rapidly oscillating currents, the time dependence of which, however, is beyond the reach of currently available detectors. On the other hand, the time integral of these currents – that is, the net charge that was displaced by the laser pulse – can be detected. In order to theoretically determine this charge, first I considered a single conduction band in one dimension using the single electron picture. I obtained an analytic equation for the displaced charge, which was verified numerically and also by using the example of a Gaussian wave packet [P2].

5. One-dimensional model for the laser-induced charge transport in the multi-band case

As a natural way to proceed, I investigated one-dimensional crystals with multiple bands. In this case, the electronic state after the interaction with the laser pulse is expanded most conveniently in terms of the Bloch states. Using contour integrals,

I determined the net charge that was displaced by the laser pulse. For distant detectors, I obtained an easily interpretable analytic result that depends on which side of the interaction area the detector is positioned [P2].

6. Charge transport in three dimensional crystals

As a further generalization, I investigated the case when the crystal is three dimensional. Detection points are replaced by detection planes in this case, and we were to determine the time integral of the laser-induced current through these planes. I have shown that the results of the previous point can be transferred to this geometry with minor modifications, which leads to a general description of the problem in the framework of one-electron approximation [P2].

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom témavezetőmnek, Dr. Földi Péter egyetemi docensnek, aki útmutatásával és hozzáértésével segítette a munkámat és a szakmai fejlődésemet. Már egyetemi éveim során lehetőséget biztosított az Elméleti Fizikai Tanszéken folyó munkába történő bekapcsolódásra és töretlen lelkesedéssel vezetett be a szakma rejtelmeibe.

Ezúton szeretném megköszönni az Elméleti Fizikai Tanszék korábbi vezetőjének Dr. Fehér Lászlónak, hogy megtisztelt bizalmával és lehetőséget biztosított a Ph.D. munkám elkészítésére. Köszönettel tartozom továbbá a tanszék jelenlegi és volt munkatársainak és Ph.D. hallgatóinak, akiknek köszönhetően egy befogadó és jó hangulatú légkörben végezhettem kutatásaimat. Szeretném kiemelni a közös étkezéseinket Dr. Görbe Tamással, Dr. Szabó Lóránttal és Dr. Dömötör Piroskával. Sokat tanultam tőlük az elmúlt évek alatt mind emberileg, mind pedig szakmailag.

Köszönöm korábbi oktatóimnak és tanárainak azt az állhatatos munkát, amivel hozzájárultak a fejlődésemhez különös tekintettel Kóboriné Nagy Mariannának a fizika versenyekre való felkészítéseembe ölt munkájáért.

Végezetül, de nem utolsó sorban köszönöm a családomnak a töretlen támogatásukat és szeretetüket. Végtelenül hálás vagyok a páromnak Ágnesnek a türelméért és a nyugodt légkör megteremtéséért, amely nélkül a dolgozat nem készülhetett volna el.

Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg, EFOP-3.6.2-16-2017-00005: „Ultragyors fizikai folyamatok atomokban, molekulákban, nanoszerkezetekben és biológiai rendszerekben”.

„AZ INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI MINISZTERIUM ÚNKP-21-4 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL FINANSZÍROZOTT SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT. ”

Publikációk

Az értekezéshez felhasznált publikációk:

- [P1] I. Magashegyi, L. Zs. Szabó, and P. Földi, „*Ultrashort laser-pulse-driven currents in conductors: one-dimensional model for local excitation in the single-electron picture with quadratic dispersion*”, *J. Opt. Soc. Am. B* **35**, A116-A125 (2018)
- [P2] I. Magashegyi, K. Oltyán, and P. Földi, „*Analytic expression for the charge carried by a locally excited Bloch state*”, *Physical Review B* **103**, 245204 (2021)

Egyéb publikációk:

- J. Kasza, I. Magashegyi, P. Dombi and P. Földi, „*Polarization dependence of atomic high-order harmonic generation: Description using a discrete basis*”, *Phys. Rev. A* **105**, 033105 (2022)
- V. Szaszko-Bogár, P. Földi, I. Magashegyi and K. Varjú, „*Interference-Induced Phenomena in High-Order Harmonic Generation from Bulk Solids*”, *Appl. Sci.* **9**(8), 1573 (2019)

Az értekezés témájához kapcsolódó konferenciaanyagok:

Angol nyelvű konferencia előadások:

- COST Action 17126 TUMIEE 1ST GENERAL MEETING IN MADRID, „*Light-controlled currents in solids* “ Madrid, Spanyolország 2018.11.19– 20
- Lasers in Medicine and Life Sciences, „*Ultrashort laser pulse driven currents in conductors: physical mechanisms and time scales* “ Szeged, Magyarország 2018.07.04– 12

Angol nyelvű konferenciapozterek:

- COST Action 17126 TUMIEE 1ST WORKING GROUP MEETING IN PORTO, „*Charges displaced by short laser pulses in solids* “ Porto, Portugália 2019.03.04
- 28th International conference and Expo on Nanoscience and Nanotechnology and 3rd World congress and Expo on Graphene and 2D Materials, „*Light controlled dynamics of charge carriers* “ Barcelona, Spanyolország 2018.11.26– 27
- COST Action 17126 TUMIEE 1ST GENERAL MEETING IN MADRID, „*Light-controlled currents in solids* “ Madrid, Spanyolország 2018.11.19– 20
- Lasers in Medicine and Life Sciences, „*Ultrashort laser pulse driven currents in conductors: physical mechanisms and time scales*“ Szeged, Magyarország 2018.07.04– 12
- International Conference on Extreme Light, „*Waveform-dependent laser-induced conduction band currents* “ Szeged, Magyarország 2017.11.6–9
- ELI-ALPS 3rd User Workshop, „*Light pulse induced currents in semiconductors and metals: a possible way of detecting the waveform* “ Szeged, Magyarország 2015.11.05–6

Magyar nyelvű konferenciapozter:

- Kvantumelektronika 2018 Szimpóziun, „Vezetési elektronok dinamikája ultrarövid lézerimpulzusok terében. “ Budapest, Magyarország 2018

Magyar nyelvű konferencia kiadványok:

- Magashegyi I., Földi P., „Analitikus módszer szilárdtestekben lézerimpulzus által elmozdított töltések kiszámítására “, *Kvantumelektronika 2021 : IX. Szimpóziun a hazai kvantumelektronikai kutatások eredményeiről*, 137-142 (2020)
- Magashegyi I., Szabó L. Zs., Földi Péter, „Vezetési elektronok dinamikája ultrarövid lézerimpulzusok terében “, *Kvantumelektronika 2018 : VIII. Szimpóziun a hazai kvantumelektronikai kutatások eredményeiről*, 30-31 (2018)

Irodalomjegyzék

- [1] M. Planck, „Über eine Verbesserung der Wienschen Spektralgleichung,” *Dtsch. Phys. Ges.*, vol. 2, 1900.
- [2] M. Strauss, „Max planck and the rise of quantum theory,” in *Modern Physics and its Philosophy*, pp. 23–60, Springer Netherlands, 1972.
- [3] T. H. Maiman, „Stimulated optical radiation in ruby,” *Nature*, vol. 187, pp. 493–494, Aug. 1960.
- [4] S. X. Hu and L. A. Collins, „Attosecond pump probe: Exploring ultrafast electron motion inside an atom,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 073004, Feb 2006.
- [5] L. Argenti, C. Ott, T. Pfeifer, and F. Martín, „Attosecond transient absorption spectroscopy of doubly-excited states in helium,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 488, p. 032030, Apr. 2014.
- [6] M. Nisoli, P. Decleva, F. Calegari, A. Palacios, and F. Martín, „Attosecond electron dynamics in molecules,” *Chemical Reviews*, vol. 117, pp. 10760–10825, May 2017.
- [7] F. J. Furch, T. Witting, F. Schell, M. Osolodkov, C. P. Schulz, and M. J. J. Vrakking, „Towards attosecond pump-probe coincidence spectroscopy with high acquisition rates,” in *Latin America Optics and Photonics Conference*, OSA, 2018.
- [8] F. Martin, „Attosecond pump-probe spectroscopy of molecular electron dynamics,” in *APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics Meeting Abstracts*, vol. 2020 of *APS Meeting Abstracts*, p. C04.004, Jan. 2020.

-
- [9] Y. Kissin, M. Ruberti, P. Kolorenč, and V. Averbukh, „Attosecond pump–attosecond probe spectroscopy of auger decay,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 23, pp. 12376–12386, 2021.
- [10] M. Kretschmar, A. Hadjipittas, B. Major, J. Tümmler, I. Will, T. Nagy, M. J. J. Vrakking, A. Emmanouilidou, and B. Schütte, „Attosecond investigation of extreme-ultraviolet multi-photon multi-electron ionization,” *Optica*, vol. 9, p. 639, June 2022.
- [11] S. T. Cundiff, F. Krausz, and T. Fuji, „Carrier-envelope phase of ultrashort pulses,” in *Strong Field Laser Physics*, pp. 61–89, Springer New York, 2008.
- [12] M. Nisoli, G. Sansone, S. Stagira, J.-P. Caumes, C. Vozzi, S. D. Silvestri, M. Pascolini, L. Poletto, P. Villoresi, and G. Tondello, „Single-atom effects in high-order harmonic generation: role of carrier-envelope phase in the few-optical-cycle regime,” *Applied Physics B: Lasers and Optics*, vol. 78, pp. 873–877, May 2004.
- [13] W. Yang, X. Song, S. Gong, Y. Cheng, and Z. Xu, „Carrier-envelope phase dependence of few-cycle ultrashort laser pulse propagation in a polar molecule medium,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 133602, Sep 2007.
- [14] B. Zeng and L. Duan, „Carrier-envelope phase sensitive inversion driven by few-cycle pulse pairs,” *OSA Continuum*, vol. 1, pp. 1304–1312, Dec 2018.
- [15] M. Ruijter, V. Petrillo, T. C. Teter, M. Valialshchikov, and S. Rykovanov, „Signatures of the carrier envelope phase in nonlinear thomson scattering,” *Crystals*, vol. 11, p. 528, May 2021.
- [16] G. G. Paulus, F. Grasbon, H. Walther, P. Villoresi, M. Nisoli, S. Stagira, E. Priori, and S. D. Silvestri, „Absolute-phase phenomena in photoionization with few-cycle laser pulses,” *Nature*, vol. 414, pp. 182–184, Nov. 2001.
- [17] G. G. Paulus, F. Lindner, H. Walther, A. Baltuška, E. Goulielmakis, M. Lezius, and F. Krausz, „Measurement of the phase of few-cycle laser pulses,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 253004, Dec 2003.

-
- [18] T. Wittmann, B. Horvath, W. Helml, M. G. Schätzel, X. Gu, A. L. Cavalieri, G. G. Paulus, and R. Kienberger, „Single-shot carrier–envelope phase measurement of few-cycle laser pulses,” *Nature Physics*, vol. 5, pp. 357–362, Apr. 2009.
- [19] Z. Wei, H. Han, W. Zhang, Y. Zhao, J. Zhu, H. Teng, and Q. Du, „Measurement and control of carrier-envelope phase in femtosecond ti:sapphire laser,” in *Advances in Solid State Lasers Development and Applications*, InTech, Feb. 2010.
- [20] M. Durach, A. Rusina, M. F. Kling, and M. I. Stockman, „Predicted ultrafast dynamic metallization of dielectric nanofilms by strong single-cycle optical fields,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, p. 086602, Aug 2011.
- [21] A. Schiffrin, T. Paasch-Colberg, N. Karpowicz, V. Apalkov, D. Gerster, S. Mühlbrandt, M. Korbman, J. Reichert, M. Schultze, S. Holzner, J. V. Barth, R. Kienberger, R. Ernstorfer, V. S. Yakovlev, M. I. Stockman, and F. Krausz, „Optical-field-induced current in dielectrics,” *Nature*, vol. 493, pp. 70–74, Dec. 2012.
- [22] F. Krausz and M. I. Stockman, „Attosecond metrology: from electron capture to future signal processing,” *Nature Photonics*, vol. 8, pp. 205–213, Feb. 2014.
- [23] M. Kubulek, Z. Wang, K. von der Brelje, D. Zimin, P. Rosenberger, J. Schötz, M. Neuhaus, S. Sederberg, A. Staudte, N. Karpowicz, M. F. Kling, and B. Bergues, „Single-shot carrier–envelope-phase measurement in ambient air,” *Optica*, vol. 7, p. 35, Jan. 2020.
- [24] W. Koch and M. C. Holthausen, *A Chemist’s Guide to Density Functional Theory*. Wiley, July 2001.
- [25] D. S. Sholl and J. A. Steckel, *Density Functional Theory*. John Wiley & Sons, Inc., Mar. 2009.
- [26] C. A. Ullrich, *Time-Dependent Density-Functional Theory*. Oxford University Press, Dec. 2011.

-
- [27] I. Magashegyi, L. Z. Szabó, and P. Földi, „Ultrashort laser-pulse-driven currents in conductors: one-dimensional model for local excitation in the single-electron picture with quadratic dispersion,” *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 35, pp. A116–A125, May 2018.
- [28] I. Magashegyi, K. Oltyán, and P. Földi, „Analytic expression for the charge carried by a locally excited bloch state,” *Phys. Rev. B*, vol. 103, p. 245204, Jun 2021.
- [29] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*. New York, NY: Wiley, 3rd ed. ed., 1999.
- [30] H. Goldstein, C. Poole, J. Safko, and S. R. Addison, „Classical mechanics, 3rd ed.,” *American Journal of Physics*, vol. 70, July 2002.
- [31] C. T. Cohen, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics : Volume II: Angular Momentum, Spin, and Approximation Methods*, vol. 2. Weinheim: Verlag, 2020.
- [32] C. T. Cohen, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics : Volume I: Basic Concepts, Tools, and Applications*, vol. 1. Weinheim: Verlag, 2020.
- [33] M. Born and R. Oppenheimer, „Zur quantentheorie der molekeln,” *Annalen der Physik*, vol. 389, no. 20, pp. 457–484, 1927.
- [34] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 8 ed., 2004.
- [35] T. Ihn, *Semiconductor Nanostructures*. Oxford University Press, Nov. 2009.
- [36] I. Hevesi, *Szilárdtestfizikai alapismeretek*. Szeged: Jate Press, 2012.
- [37] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Holt-Saunders, 1976.
- [38] E. Kaxiras, *Atomic and Electronic Structure of Solids*. Cambridge University Press, 2003.
- [39] C. Herring, „A new method for calculating wave functions in crystals,” *Physical Review*, vol. 57, pp. 1169–1177, June 1940.
- [40] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, Sept. 1995.

-
- [41] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press, 2005.
- [42] I. Hevesi, *PhD doktori kurzusok fizikából*. Szeged: Jate Press, 2014.
- [43] R. Landauer, „Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 32, pp. 306–316, May 1988.
- [44] M. Buttiker, „Symmetry of electrical conduction,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 32, pp. 317–334, May 1988.
- [45] A. Baltuška, T. Udem, M. Uiberacker, M. Hentschel, E. Goulielmakis, C. Gohle, R. Holzwarth, V. S. Yakovlev, A. Scrinzi, T. W. Hänsch, and F. Krausz, „Attosecond control of electronic processes by intense light fields,” *Nature*, vol. 421, pp. 611–615, Feb. 2003.
- [46] M. Uiberacker, T. Uphues, M. Schultze, A. J. Verhoef, V. Yakovlev, M. F. Kling, J. Rauschenberger, N. M. Kabachnik, H. Schröder, M. Lezius, K. L. Kompa, H.-G. Muller, M. J. J. Vrakking, S. Hendel, U. Kleineberg, U. Heinzmann, M. Drescher, and F. Krausz, „Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms,” *Nature*, vol. 446, pp. 627–632, Apr. 2007.
- [47] A. Wirth, M. T. Hassan, I. Grguraš, J. Gagnon, A. Moulet, T. T. Luu, S. Pabst, R. Santra, Z. A. Alahmed, A. M. Azzeer, V. S. Yakovlev, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, „Synthesized light transients,” *Science*, vol. 334, pp. 195–200, Oct. 2011.
- [48] P. Földi, M. G. Benedict, and V. S. Yakovlev, „The effect of dynamical bloch oscillations on optical-field-induced current in a wide-gap dielectric,” *New Journal of Physics*, vol. 15, p. 063019, June 2013.
- [49] G. Wachter, C. Lemell, J. Burgdörfer, S. A. Sato, X.-M. Tong, and K. Yabana, „Ab initio simulation of electrical currents induced by ultrafast laser excitation of dielectric materials,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 087401, Aug 2014.

- [50] M. Schultze, K. Ramasesha, C. Pemmaraju, S. Sato, D. Whitmore, A. Gandman, J. S. Prell, L. J. Borja, D. Prendergast, K. Yabana, D. M. Neumark, and S. R. Leone, „Attosecond band-gap dynamics in silicon,” *Science*, vol. 346, pp. 1348–1352, Dec. 2014.
- [51] J.-C. Charlier, X. Blase, and S. Roche, „Electronic and transport properties of nanotubes,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 79, pp. 677–732, May 2007.
- [52] J.-S. Lauret, C. Voisin, G. Cassaboïs, C. Delalande, P. Roussignol, O. Jost, and L. Capes, „Ultrafast carrier dynamics in single-wall carbon nanotubes,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, p. 057404, Feb 2003.
- [53] Á. Kukovecz, R. Smajda, M. Őze, B. Schaefer, H. Haspel, Z. Kónya, and I. Kiricsi, „Multiwall carbon nanotube films surface-doped with electroceramics for sensor applications,” *Physica Status Solidi (b)*, vol. 245, pp. 2331–2334, Aug. 2008.
- [54] R. Rurali, „Colloquium: Structural, electronic, and transport properties of silicon nanowires,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 82, pp. 427–449, Feb. 2010.
- [55] M. Büttiker, „Four-terminal phase-coherent conductance,” *Physical Review Letters*, vol. 57, pp. 1761–1764, Oct. 1986.
- [56] W. Gordon, „Der Comptoneffekt nach der Schrödingerschen Theorie,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 40, pp. 117–133, Jan. 1926.
- [57] D. M. Wolkow, „Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 94, pp. 250–260, Mar. 1935.
- [58] S. Varró, „Bevezetés az intenzív fény és anyag kölcsönhatásainak elméleti leírásába,” 2010. SZTE elektronikus jegyzet.
- [59] C. R. McDonald, K. S. Amin, S. Aalmalki, and T. Brabec, „Enhancing high harmonic output in solids through quantum confinement,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, p. 183902, Nov 2017.

- [60] B. Molnár, F. M. Peeters, and P. Vasilopoulos, „Spin-dependent magnetotransport through a ring due to spin-orbit interaction,” *Phys. Rev. B*, vol. 69, p. 155335, Apr 2004.
- [61] P. Vasilopoulos, O. Kálmán, F. M. Peeters, and M. G. Benedict, „Aharonov-bohm oscillations in a mesoscopic ring with asymmetric arm-dependent injection,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 035304, Jan 2007.
- [62] P. Rakyta, E. Tóvári, M. Csontos, S. Csonka, A. Csordás, and J. Cserti, „Emergence of bound states in ballistic magnetotransport of graphene antidots,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 125428, Sep 2014.
- [63] P. Rakyta, A. Kormányos, and J. Cserti, „Magnetic field oscillations of the critical current in long ballistic graphene josephson junctions,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 224510, Jun 2016.
- [64] B. Gaury, J. Weston, M. Santin, M. Houzet, C. Groth, and X. Waintal, „Numerical simulations of time-resolved quantum electronics,” *Physics Reports*, vol. 534, pp. 1–37, Jan. 2014.
- [65] Z.-G. Zhu and J. Berakdar, „Photoinduced nonequilibrium spin and charge polarization in quantum rings,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 235438, Jun 2008.
- [66] V. K. Kozin, I. V. Iorsh, O. V. Kibis, and I. A. Shelykh, „Quantum ring with the rashba spin-orbit interaction in the regime of strong light-matter coupling,” *Phys. Rev. B*, vol. 97, p. 155434, Apr 2018.
- [67] G. Floquet, „Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques,” *Annales scientifiques de l’École normale supérieure*, vol. 12, pp. 47–88, 1883.
- [68] V. Szaszko-Bogár, F. M. Peeters, and P. Földi, „Oscillating spin-orbit interaction in two-dimensional superlattices: Sharp transmission resonances and time-dependent spin-polarized currents,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 235311, Jun 2015.
- [69] P. Földi, „Quantum mechanical scattering on time-dependent potentials using nonequilibrium green’s functions,” 2015. arXiv, <https://arxiv.org/abs/1505.03567>.

-
- [70] S. L. Stebbings, F. Süßmann, Y.-Y. Yang, A. Scrinzi, M. Durach, A. Rusina, M. I. Stockman, and M. F. Kling, „Generation of isolated attosecond extreme ultraviolet pulses employing nanoplasmonic field enhancement: optimization of coupled ellipsoids,” *New Journal of Physics*, vol. 13, p. 073010, July 2011.
- [71] P. Földi, I. Márton, N. Németh, V. Ayadi, and P. Dombi, „Few-cycle plasmon oscillations controlling photoemission from metal nanoparticles,” *Applied Physics Letters*, vol. 106, p. 013111, Jan. 2015.
- [72] M. Durach, A. Rusina, M. F. Kling, and M. I. Stockman, „Metallization of nano-films in strong adiabatic electric fields,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 086803, Aug 2010.
- [73] V. Hanus, V. Csajbók, Z. Pápa, J. Budai, Z. Márton, G. Z. Kiss, P. Sándor, P. Paul, A. Szeghalmi, Z. Wang, B. Bergues, M. F. Kling, G. Molnár, J. Volk, and P. Dombi, „Light-field-driven current control in solids with pJ-level laser pulses at 80 MHz repetition rate,” *Optica*, vol. 8, p. 570, Apr. 2021.
- [74] P. Földi, „Gauge invariance and interpretation of interband and intraband processes in high-order harmonic generation from bulk solids,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 035112, Jul 2017.
- [75] G. Ernotte, T. J. Hammond, and M. Taucer, „A gauge-invariant formulation of interband and intraband currents in solids,” *Phys. Rev. B*, vol. 98, p. 235202, Dec 2018.
- [76] M. Korbman, S. Y. Kruchinin, and V. S. Yakovlev, „Quantum beats in the polarization response of a dielectric to intense few-cycle laser pulses,” *New Journal of Physics*, vol. 15, p. 013006, Jan. 2013.
- [77] M. Wu, S. Ghimire, D. A. Reis, K. J. Schafer, and M. B. Gaarde, „High-harmonic generation from bloch electrons in solids,” *Phys. Rev. A*, vol. 91, p. 043839, Apr 2015.

-
- [78] P. G. Hawkins, M. Y. Ivanov, and V. S. Yakovlev, „Effect of multiple conduction bands on high-harmonic emission from dielectrics,” *Phys. Rev. A*, vol. 91, p. 013405, Jan 2015.
- [79] H. Haug and S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. World Scientific, Jan. 2009.
- [80] D. Golde, T. Meier, and S. W. Koch, „High harmonics generated in semiconductor nanostructures by the coupled dynamics of optical inter- and intraband excitations,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 075330, Feb 2008.
- [81] D. Golde, M. Kira, T. Meier, and S. W. Koch, „Microscopic theory of the extremely nonlinear terahertz response of semiconductors,” *Physica Status Solidi (b)*, vol. 248, pp. 863–866, Dec. 2010.
- [82] G. Vampa, C. R. McDonald, G. Orlando, P. B. Corkum, and T. Brabec, „Semiclassical analysis of high harmonic generation in bulk crystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 064302, Feb 2015.
- [83] G. Vampa, C. R. McDonald, G. Orlando, P. B. Corkum, and T. Brabec, „Semiclassical analysis of high harmonic generation in bulk crystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 064302, Feb 2015.
- [84] R. Buschlinger, M. Lorke, and U. Peschel, „Light-matter interaction and lasing in semiconductor nanowires: A combined finite-difference time-domain and semiconductor bloch equation approach,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 045203, Jan 2015.
- [85] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, „Gate control of spin-orbit interaction in an inverted in gaasinalas heterostructure,” *Physical Review Letters*, vol. 78, pp. 1335–1338, Feb. 1997.
- [86] M. P. Nowak, B. Szafran, and F. M. Peeters, „Fano resonances and electron spin transport through a two-dimensional spin-orbit-coupled quantum ring,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 235319, Dec 2011.

-
- [87] C. Durkan, *Current at the Nanoscale: An Introduction to Nanoelectronics*. WORLD SCIENTIFIC, 2014.
- [88] K. Kolasinski, B. Szafran, B. Brun, and H. Sellier, „Interference features in scanning gate conductance maps of quantum point contacts with disorder,” *Phys. Rev. B*, vol. 94, p. 075301, Aug 2016.
- [89] M. Patra and S. K. Maiti, „Simultaneous spin-based boolean logic operations with reprogrammable functionality,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 123, p. 58008, Oct. 2018.
- [90] K. E. Echternkamp, A. Feist, S. Schäfer, and C. Ropers, „Ramsey-type phase control of free-electron beams,” *Nature Physics*, vol. 12, pp. 1000–1004, Aug. 2016.
- [91] A. Feist, K. E. Echternkamp, J. Schauss, S. V. Yalunin, S. Schäfer, and C. Ropers, „Quantum coherent optical phase modulation in an ultrafast transmission electron microscope,” *Nature*, vol. 521, pp. 200–203, May 2015.
- [92] M. Kozák, J. McNeur, K. J. Leedle, H. Deng, N. Schönenberger, A. Ruehl, I. Hartl, J. S. Harris, R. L. Byer, and P. Hommelhoff, „Optical gating and streaking of free electrons with sub-optical cycle precision,” *Nature Communications*, vol. 8, p. 14342, Jan. 2017.
- [93] L. Z. Szabó, M. G. Benedict, and P. Földi, „Scattering of charged particles on two spatially separated time-periodic optical fields,” *Phys. Rev. A*, vol. 96, p. 063419, Dec 2017.
- [94] S. Jiang, H. Wei, J. Chen, C. Yu, R. Lu, and C. D. Lin, „Effect of transition dipole phase on high-order-harmonic generation in solid materials,” *Phys. Rev. A*, vol. 96, p. 053850, Nov 2017.
- [95] V. Szaszko-Bogár, P. Földi, I. Magashegyi, and K. Varjú, „Interference-induced phenomena in high-order harmonic generation from bulk solids,” *Applied Sciences*, vol. 9, p. 1572, Apr. 2019.

-
- [96] M. Hentschel, R. Kienberger, C. Spielmann, G. A. Reider, N. Milosevic, T. Brabec, P. Corkum, U. Heinzmann, M. Drescher, and F. Krausz, „Attosecond metrology,” *Nature*, vol. 414, pp. 509–513, Nov. 2001.
- [97] G. Sansone, E. Benedetti, F. Calegari, C. Vozzi, L. Avaldi, R. Flammini, L. Poletto, P. Villoresi, C. Altucci, R. Velotta, S. Stagira, S. D. Silvestri, and M. Nisoli, „Isolated single-cycle attosecond pulses,” *Science*, vol. 314, pp. 443–446, Oct. 2006.
- [98] F. Ferrari, F. Calegari, M. Lucchini, C. Vozzi, S. Stagira, G. Sansone, and M. Nisoli, „High-energy isolated attosecond pulses generated by above-saturation few-cycle fields,” *Nature Photonics*, vol. 4, pp. 875–879, Nov. 2010.
- [99] C. Lefebvre, T. T. Nguyen-Dang, F. Dion, M. J. J. Vrakking, V. N. Serov, and O. Atabek, „Attosecond pump-probe transition-state spectroscopy of laser-induced molecular dissociative ionization: Adiabatic versus nonadiabatic dressed-state dynamics,” *Phys. Rev. A*, vol. 88, p. 053416, Nov 2013.
- [100] M. Vrakking, „Attosecond molecular electron dynamics,” in *CLEO: 2013*, p. CTh4M.1, Optica Publishing Group, 2013.
- [101] A. Palacios, A. González-Castrillo, and F. Martín, „Molecular interferometer to decode attosecond electron–nuclear dynamics,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 111, pp. 3973–3978, Mar. 2014.
- [102] R. Moya, T. Kondo, A. C. Norris, and G. S. Schlau-Cohen, „Spectrally-tunable femtosecond single-molecule pump-probe spectroscopy,” *Opt. Express*, vol. 29, pp. 28246–28256, Aug 2021.
- [103] R. Borrego-Varillas, M. Lucchini, and M. Nisoli, „Attosecond spectroscopy for the investigation of ultrafast dynamics in atomic, molecular and solid-state physics,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 85, p. 066401, may 2022.