

A Zitterbewegung általános elmélete

Dávid Gyula

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Atomfizikai Tanszék

PhD értekezés

2010

Tartalomjegyzék

Bevezetés	1
1. A Zitterbewegung (ZB) története	3
1.1. A Dirac-egyenlet és a Schrödinger-féle ZB	4
1.2. Interpretációk és spekulációk	5
1.3. ZB szilárdtestekben és mezoszkopikus rendszerekben	8
1.3.1. A mindenütt jelenvaló Zitterbewegung	10
1.3.2. Kimutatták-e az utóbbi években a Zitterbewegungot?	11
1.3.3. Az egységes elmélet felé	12
2. A Schrödinger-féle Zitterbewegung	15
2.1. A Dirac-egyenlet	16
2.2. A sebességoperátor	17
2.3. A helyoperátor Heisenberg-képben	20
2.4. ZB-mentes állapotok	21
2.5. A kísérleti kimutatás problémái	23
2.6. A ZB mint az egyrészecske-QM határa	24
3. ZB kvázi-mágneses kvázispin-rendszerekben	27
3.1. Kvázispin állandó kvázi-mágneses térben	28
3.2. Szilárdtestfizikai és nanofizikai modellrendszerek	30
3.2.1. Szabad és kvázi-szabad Hamilton-operátorok a szilárdtestfizikában és a nanofizikában	30
3.3. Mozgásegyenletek	33
3.4. Kvázispin-precesszió	34
3.5. A helyoperátor meghatározása	35
3.6. A megoldás értelmezése	36
3.7. Az anomális sebesség eredete	37
3.8. ZB-mentes állapotok	39
4. ZB többkomponensű kváziszabad kvantumrendszerekben	41
4.1. Kváziszabad rendszerek – a legáltalánosabb Hamilton-operátor	42
4.2. Áttérés Heisenberg-képre	42
4.3. Projektor-felbontás	44
4.4. A helyoperátor meghatározása	44
4.5. Az eredmény értelmezése	46
4.6. Az eredmény alternatív alakjai	48
4.6.1. A shift eltüntetése	49

4.6.2.	A Berry-konnexió mátrixelemei	49
4.6.3.	A Zitterbewegung-amplitudók átalakítása	51
4.7.	ZB-mentes állapotok	52
4.8.	Kifejtés altér-párok szerint	52
4.9.	Két energiaszintű rendszerek	55
5.	Alkalmazás különböző kvantummodellekre	59
5.1.	A szilárdtestfizikában és a nanofizikában szereplő egyszerű kvázispin-rendszerek	60
5.2.	Az egyrétegű grafén	62
5.3.	Néhány további egyszerű rendszer	66
5.3.1.	A kétrétegű grafén egyszerűsített modellje	67
5.3.2.	Nehéz lyukak kvantumvölgyben	70
5.3.3.	Cooper-párok kétdimenziós szupravezetőkben	72
5.4.	A Rashba–Dresselhaus-modell	74
5.4.1.	A kombinált RD-rendszer speciális szimmetriája	76
5.5.	A Schrödinger-féle ZB származtatása	78
5.6.	A Luttinger-modell	82
5.7.	(S)-kvázispin-rendszerek	85
5.8.	A kétrétegű grafén izotróp modellje	90
5.9.	Tanulságok	95
	Konklúzió	99
	Köszönetnyilvánítás	103
A.	Gyengén involutórikus operátorok	105
A.1.	Egyszerű struktúrájú operátorok és függvényeik	105
A.2.	Involutórikus operátorok és függvényeik	106
A.3.	Gyengén involutórikus operátorok és függvényeik	109
A.4.	Egy alkalmazás: háromdimenziós forgatások	113
B.	A kvázispin-precesszió egyenletének megoldása	115
C.	Lagrange-mátrixpolinomok	117
D.	A gradiens-operátor mátrixelemei	119
	Saját publikációk	121
	Irodalomjegyzék	123

Bevezetés

A Zitterbewegung (a továbbiakban ZB) – mint neve is mutatja – néhány hozzá hasonlóan máig német nevet viselő jelenséggel és fogalommal (Brehmsstrahlung, Pendellösung, Eigenvektor) együtt a kvantummechanika hőskorából, a 20. század húszas-harmincas éveiből maradt ránk.

Erwin Schrödinger, a kvantummechanika egyik megalapozója azt a (Galilei és Newton után három évszázaddal már igencsak feleslegesnek tűnő) kérdést tette fel [1], hogyan is mozog egy magára hagyott, azaz külső erőhatásoktól mentes részecske. A magától értetődőnek gondolt válasz szerint természetesen egyenes vonalú, egyenletes (állandó sebességű) mozgással. Ám a relativisztikus kvantummechanika frissen felfedezett formalizmusa mást állít: az állandó sebességű mozgásra egy nagy frekvenciájú, parányi amplitudójú rezgőmozgás rakódik, minden különösebb ok, erőhatás nélkül. A „Zitterbewegung” szó erre a furcsa, nem várt jelenségre, a „reszkető” (németül *zittering*) mozgásra (németül *Bewegung*) utal.

A ZB-ot sokáig ártalmatlan relikviának gondolták, érdekességnek, amellyel a relativisztikus kvantummechanikával ismerkedő diákokat lehet riogatni (...milyen furcsa dolgokra képes ez az érthetetlen kvantumelmélet...), amely azonban a reális és mérhető kvantumjelenségek körében nem jelenik meg, nem befolyásolja a szédületes ütemben terjeszkedő kvantumelmélet gyakorlati alkalmazásait és elméleti értelmezéseit. Talán csak azért nem felejtették el teljesen, mert felfedezése és első interpretációja a kvantummechanika egyik alapító atyjának nevéhez fűződik.

Az ezredforduló körül azonban fordulat történt: az új, egyre növekvő fontosságú mezoszkopikus, spintronikai rendszerek modellelméleteinek vizsgálata során felfigyeltek a régi, Schrödinger-féle ZB-hoz hasonló megoldásokra. A szilárdtestfizikusok furcsállták a dolgot: a ZB közismerten relativisztikus effektus, a szilárdtestekben és a nanofizikai rendszerekben pedig nem lépnek fel a fénysebességgel összemérhető sebességű mozgások...

Magam is így kerültem kapcsolatba a témával: barátom és kollégám, hajdani tanítványom, Cserti József elkapott a folyosón, és megkérdezte: tudom-e, hogy mi a csoda is az a Zitterbewegung – ő ugyanis a mezoszkopikus fizika új csodaanyagával, a grafénnel foglalkozó szakcikkekben találkozott az ismeretlen jelenség nevével.

Az azóta közösen folytatott vizsgálataink során kiderült, hogy a Zitterbewegung egyáltalán nem kivételes, elhanyagolható, periférikus jelenség, hanem nyílt vagy álcázott formában lényegében minden nemtriviális kvantummechanikai rendszerben fellép, és jelentősen befolyásolhatja a kvantumrendszerek mérhető, sőt általunk szabályozni kívánt tulajdonságait, például az elektromos vezetőképességet és egyéb transzportjellemzőket. Mi több, épp ez a mindenütt jelenlévősége teszi lehetővé, hogy igen általános szinten tárgyaljuk, megoldjuk a rá vonatkozó egyenleteket, vizsgáljuk tulajdonságait, és ezeket az általános eredményeket konkrét kvantumrendszerek modelljeire alkalmazva gyakorlatilag is hasznosítható eredményekhez jussunk. E rendszerek vizsgálatakor javaslatokat tehetünk a jelenség kísérleti kimutatására és esetleges felhasználására is. Nem utolsósorban pedig ez az univerzalitás teszi lehetővé azt

is, hogy a lehető legáltalánosabb formában válaszoljunk az alapkérdésre: tulajdonképpen mi a csoda is ez a Zitterbewegung?

Jelen disszertációban ennek az eddig elhanyagolt jelenségnek az általános elméletét mutatom be, kiindulva az eredeti, Schrödinger-féle levezetéstől, és eljutva annak bizonyításáig, hogy a Zitterbewegung, illetve megfelelő általánosítása jelen van az összes többkomponensű hullámfüggvénnyel leírható kvantumrendszer alapvető mozgásformái között. Látni fogjuk, hogy a ZB-nak semmi köze sincs sem a relativitáselmülethez, sem a spinhez, az eddigi interpretációkat pedig mintegy a fejükről a talpukra kell állítani, mert végig rosszul tették fel a kérdést: nem az egyenes vonalú egyenletes mozgásra rakódó rezgés eredetére kell rácsodálkozni és rákérdezni – hiszen a kvantumelméletben a rezgések jelenléte általános és törvényszerű –, hanem az állandó sebességű mozgás kialakulásának matematikai és fizikai háttere szorul tisztázásra és indoklásra. Végül rövid pillantást vetünk az itt kinyílt perspektíva nyomán elképzelhető következő lépésekre: a ZB numerikus és analóg szimulációjára, esetleges kísérleti kimutatására, vezérelhetőségére, valamint a ZB tárgyalása során hasznosnak bizonyult matematikai módszerek felhasználására a rokon jelenségek, pl. a Berry-fázis és a Kubo-formulával tárgyalt vezetőképesség tanulmányozása során – mely munkákhoz kollégáimmal már hozzá is kezdtünk.

A dolgozat felépítése a következő: az 1. részben röviden áttekintem a Zitterbewegung jelenségének történetét és az eddigi interpretációs kísérleteket, majd a ZB felbukkanását a szilárdtestfizikában és a nanofizikában. A 2. rész részletesen ismerteti a Dirac-egyenletben felbukkanó ZB eredeti, Schrödinger-féle levezetését és a vele kapcsolatos interpretációs kérdéseket. Saját kutatási eredményeim bemutatása a 3. részben kezdődik: itt – az [A] cikkünkben megjelent anyag részletezésével – megmutatom, hogy a kvázi-mágneses térben mozgó kvázispin-rendszerekben (melyek közé a szilárdtestfizikai és nanofizikai modellek jelentős része is tartozik) mindig fellép a ZB. Általános formalizmust mutatok be e rendszerekben fellépő ZB egzakt tárgyalására. A 4. rész tovább általánosítja a ZB elméletét, és megmutatja, hogy a ZB jelensége minden többkomponensű hullámfüggvénnyel leírható kváziszabad kvantumrendszer alapvető tulajdonsága (kivéve, ha speciális szimmetriák kizárják felléptét, erre később az 5.4 fejezetben mutatok példát). A ZB általános elmélete megadja a helyoperátor időfüggésének leírását mindezen rendszerek esetére. Az eredményeket többféle ekvivalens alakba lehet átírni, melyek a konkrét rendszerek egyedi tárgyalása során lehetnek hasznosak. Az e részben ismertett eredmények rövid összefoglalását a [B] cikkben publikáltuk. Az 5. részben az általános elméletet alkalmazom számos konkrét, a szilárdtestfizikában és a nanofizikában használt kvantummodell részletes vizsgálatára, illetve a 3. részben tárgyalt rendszerek, valamint az eredeti, Schrödinger-féle ZB leírásának levezetésére az általános elméletből. Az egyes rendszerek részletes tárgyalása a ZB jelenségének számos új, eddig figyelmen kívül hagyott részletére irányítja a figyelmet, ezeket a jellemzőket az 5. részt záró 5.9 fejezetben foglalom össze. Az 5. részben leírt eredmények jelentős része megjelent a [B] cikkben, illetve az azt kiegészítő [B1] közleményben. A dolgozat négy függeléke a főszövegben felhasznált, de nem közismert matematikai ismereteket, fogalmakat, tételeket és levezetéseket foglalja össze.

1. rész

A Zitterbewegung (ZB) története

1.1. A Dirac-egyenlet és a Schrödinger-féle ZB

A Zitterbewegung előtörténete Galileivel és Newtonnal kezdődik. A modern természettudomány hajnalán ők tették fel azt a kérdést: hogyan is mozog egy magára hagyott – azaz környezetével kölcsönhatásban nem álló – test? És ők adták meg erre a kérdésre a köznapi tapasztalattal és az ókori tudomány álláspontjával (mely szerint a testek természetes állapota a nyugalom, és a mozgó testek állandó külső „erőszak” híján előbb-utóbb megállnak, nyugalomba jutnak) élesen szemben álló választ: a testek természetes állapota az egyenes vonalú, egyenletes, azaz állandó sebességű mozgás, és a környezettel való kölcsönhatás híján a testek megtartják ezt a mozgásállapotukat. Ez a törvény aztán Newton első axiómája vagy a tehetetlenség törvénye néven a születő új fizika, ezen belül a mechanika egyik alapszabálya lett, egyben jól illusztrálva azt a helyzetet, hogy a kialakuló modern természettudomány túllépett a közvetlen érzék tapasztalatok pusztá rögzítésén, az absztrakt fizikai fogalmak kialakítása, logikai kezelése, a lényeges és lényegtelen tényezők szétválasztása, a modellalkotás, az idealizált – és ezzel egyszerűbben tárgyalható, matematikailag könnyebben vizsgálható – esetek tanulmányozása olykor meghökkentő, a köznapi tapasztalatoknak és a „józan észnek” ellentmondó, de a szigorú tudományos vizsgálat kritikáját kiálló eredményre vezethet. Ez a szituáció később számtalanszor megismétlődött a természettudomány, ezen belül a fizika történetében, és a tehetetlenség törvénye az új tudomány absztrakt eredményeinek didaktikailag is jól használható mintapéldájává vált.

A tehetetlenség törvénye túlélte a klasszikus mechanika trónfosztását is, változatlanul érvényes maradt a huszadik század két új, forradalmi, a köznapi szemlélettel és a korábbi fizikai fogalmakkal radikálisan szakító elméletrendszerében, a relativitáselméletben és a kvantumelméletben is. A speciális relativitáselméletben az egyenes vonalú egyenletes mozgások megőrizték kitüntetett szerepüket: bár a tér- és időkoordináták mérése és értelmezése módosult, a magukra hagyott testek itt is állandó sebességgel mozognak. Egyedüli változás, hogy e sebességnek felső korlátja van: egyetlen test (bármely inerciarendszerhez viszonyított) sebessége sem érheti el a kölcsönhatások terjedésének maximális sebességét, a vákuumbeli fénysebességet. Az általános relativitáselméletben az „egyenes vonalú” és az „állandó sebességű” fogalmak jelentését kellett módosítani, hiszen a görbült téridőben a hagyományos egyenesek helyébe az időszerű geodétikus vonalak léptek, ezek lettek a magukra hagyott pontszerű testek téridőbeli trajektóriái, világvonalai. A Schrödinger–Heisenberg–Dirac–Neumann-féle kvantumelmélet megkérdőjelezte a részecske helyének és sebességének klasszikus fogalmát, az ezeket leíró fizikai mennyiségek helyébe operátorokat állított, melyekre speciális számolási szabályokat írt elő, és külön méréselméleti axiómarendszerrel írta le az elmélet alapvető szintjén használt matematikai objektumok és a gyakorlati mérési eredmények közötti kapcsolatrendszerét. Mindazonáltal a kvantummechanikában is változatlanul érvényes maradt a tehetetlenség törvénye, abban a formában, hogy a magára hagyott (potenciálgradiens nélküli térben mozgó) részecskét leíró hullámcsomag tömegközéppontja, más megfogalmazásban a helyoperátor várható értéke egyenes vonalú, állandó sebességű mozgást végez. Mindez még jobban kiviláglik a kvantummechanika Heisenberg-képbeli megfogalmazásából: ekkor az időtől függőnek tekintett operátorok kielégítik a nekik megfelelő klasszikus mennyiségekre vonatkozó differenciálegyenleteket, ezért az egyenletek megoldása is azonos a klasszikus fizikából ismerttel. Speciálisan a magára hagyott test helyoperátorának idő szerinti második deriváltja zérus, az első derivált tehát állandó, maga a Heisenberg-képbeli helyoperátor pedig az idő lineáris vektorfüggvénye lesz.

A huszadik század két nagy forradalma tehát csak újraértelmezte a benne szereplő fogalmakat, de meghagyta tudománytörténetileg kiérdemelt trónusán a klasszikus fizika egyik

alapját, a tehetetlenség törvényét. Ezért keltett igen nagy meglepetést, amikor a két modern elméletet összekapcsoló új diszciplína, az elektron relativisztikus mozgását leírni kívánó (speciális) relativisztikus kvantummechanika alapegyenletéből, a Dirac-egyenletből Erwin Schrödinger 1929-ben azt a következtetést vonta le, hogy ebben az új elméletben a tehetetlenség törvénye már nem érvényes.

Schrödinger nevezetes cikkében [1] a Dirac-egyenlet Hamilton-operátorából kiindulva megoldotta a szabad (azaz erőhatás nélkül mozgó) feles spinű, pontszerű részecske helyoperátorának Heisenberg-képbeli mozgásegyenletét. Meglepetésére azt kapta, hogy a részecske nem egyenletes vonalú, egyenletes mozgást végez, hanem a – speciális relativitáselméletből kiszámítható nagyságú – állandó sebességű, egyenletes mozgásra egy igen nagy frekvenciájú, ám igen kis amplitudójú oszcilláló, „citerázó” mozgás szuperponálódik. Az utóbbit kapta Schrödingertől a „Zitterbewegung”, azaz „reszkető mozgás” nevet (a gyakran szereplő „Zitterbewegung” szót a továbbiakban „ZB”-vel rövidítjük).

Schrödinger úttörő cikkének gondolatmenetét és eredményeit dolgozatunk 2. részében idézzük fel részletesebben.

1.2. Interpretációk és spekulációk

A Zitterbewegung, azaz a szabad, erőhatás alatt nem álló részecske bonyolult oszcilláló mozgásának – elméleti – fellépte igencsak meglepte a klasszikus fizikához és a tehetetlenség törvényéhez szocializálódott fizikusokat. Nem csoda, hogy azonnal megindultak a spekulációk, a kísérletek a furcsa új jelenség matematikai és fizikai okának feltárására, illetve az eredmény beágyazására a kvantumelmélet és a speciális relativitáselmélet kontextusába.

Kézenfekvőnek látszott, hogy a ZB kapcsolatban áll a Dirac-egyenlet által leírt másik új jelenséggel, a spinnel. A feles spin kísérletileg felismert tényét korábban „kézzel” erőszakolták bele a Schrödinger-egyenletbe (így született meg a Pauli-egyenlet), a spinhez kapcsolódó mágneses momentum ugyancsak kísérletileg felismert, a modellek alapján érthetetlen szorzótényezőjét, későbbi nevén az elektron giromágneses együtthatóját szintén erőszakkal, mindenféle elméleti indoklás nélkül kellett behelyezni az egyenletbe. A Dirac-egyenlet viszont – egyesítve a Schrödinger-féle elsőrendű hullámegyenlet ideológiáját az energia és impulzus közötti, a speciális relativitáselmélet által megkövetelt összefüggéssel – mintegy varázsütésre megoldotta ezt a problémát: helyes értéket szolgáltatott az elektron saját impulzusmomentumára és mágneses momentumára is. Úgy tűnt, a (speciális) relativitáselmélet által bevezetett új szemlélet, a tér- és időkoordináták összekapcsolása, a téridő szimmetriáit leíró Poincaré-szimmetriacsoport konzekvens alkalmazása szinte automatikusan elvezet új, azelőtt nem is sejtett összefüggésekhez, a legegyszerűbb elemi objektumok („részecskék”) új szabadsági fokainak felismeréséhez, a korábban oly egyszerűnek ismert szabad mozgás mélyebb és komplexebb szemléletéhez.

Ebbe a tudománytörténeti kontextusba illeszkedett bele a Zitterbewegung felfedezése is. Nyilvánvalónak tűnt, hogy ebben az esetben is a korábban egyszerűnek és triviálisnak ismert szabad mozgás új, nemtriviális jellegzetessége bukkant fel, amelynek jobb megértéséhez elsősorban a relativitáselmélet alapösszefüggéseit, a Lorentz-, illetve a Poincaré-csoport szerkezetét és ábrázolásait kell alaposabban tanulmányozni, összekapcsolva mindezt – a spin elméletének tanulsága szerint a részecske mechanikai tulajdonságaival intim kapcsolatban levő – elektromágneses jellemzők vizsgálatával.

Ebben az irányban az első lépést maga Schrödinger tette meg, aki már magában a témát megnyitó cikkében megkísérelte a spin jelenségét a Zitterbewegung alapján értelmezni [1]. E

később többek által felelevenített elképzelés szerint a ZB a részecske alapvető tulajdonsága: a téridő fizikája következtében minden szabad részecske valamiféle spirális mozgást kénytelen végezni a haladás iránya körül. Ez az oszcilláló mozgás a részecskétől elidegeníthetetlen impulzusmomentumot képvisel, ezt észleli a makroszkópikus megfigyelő a részecske saját impulzusmomentumaként, spinjeként (lásd pl. Huang klasszikus cikkét [2]). E kvalitatív magyarázat nem vezetett részletes számításokkal igazolható kvantitatív egyezéshez, ezért a következő évtizedekben ennek az alapgondolatnak sok, egyre bonyolultabb változata bukkant fel.

Az egyik iskola igyekezett az elektron helykoordinátáját és sebességét két, kovariánsan is egyértelműen elkülöníthető összetevőre bontani, ezek egyike az állandó sebességű haladó mozgást, a másik az e körüli oszcillációt írta le. A kétféle „helykoordináta” végleges matematikai elkülönítésére a nekik megfelelő operátorokra más-másfajta csererelációkat írtak elő – ehhez természetesen kétféle impulzusváltozó bevezetésére is szükség volt. Változatos alakú csererelációk születtek, bekerültek a képbe a pályamomentum és a spin operátorai is, a kinematikai mennyiségek száma egyre bővült, a kommutátorok által definiált Lie-algebra egyre bonyolultabbá vált. Ennek az iskolának fő képviselője A. O. Barut, aki munkatársaival számos cikkben (pl. [3], [4], [5]) kísérte meg szétválasztani az elektron „belső” és „külső” dinamikáját. A Dirac-elektront homogén külső mágneses térbe helyezve az algebrát újabb változókval és újabb kommutátor-relációkkal bővítették [6].

A másik iskola a ZB és a töltött részecskék homogén mágneses térben végzett spirális mozgásának hasonlóságából indult ki: a ZB-t úgy tekintette, mint egy „effektív mágneses tér” okozta Larmor-precessziót. Ha a részecskék mozgásegyenletébe a valódi elektromos és mágneses tér által kifejtett Lorentz-erő mellé ezt az effektív Lorentz-erőt is beírjuk, a hely- és impulzusoperátorokra vonatkozó Heisenberg-egyenletek bonyolultabb, ám szimmetrikusabb alakúak lettek. Végül megfelelő matematikai trükkökkel sikerült az elektromos és mágneses mennyiségek teljes szimmetriáját felmutató egyenletrendszer felírni. Az irányzathoz tartozó cikkek közül megemlíttjük a következőket: [7], [8], [9] [10] és [11], további hivatkozások e cikkekben. Mindezen próbálkozásokat leíró cikkek olvasása során gondosan ügyelnünk kell, melyik lépésnél történik csupán a már meglévő, a „létező fizikából” levezetett egyenletek átalakítása, és mikor vezetnek be a szerzők – pl. a szimmetria kedvéért – új, hipotetikus tagokat az egyenletekbe, ezzel persze új, sohasem látott fizikai jelenségeket előrejelezve.

A fentebb említett két irányzat többször összekapcsolódott, és az ötvenes–hatvanas években többször történtek hasonló próbálkozások a ZB „magyarázatára”, illetve magyarázó elvvé, alapjelenséggé emelésére. Mindenesetre azt mindenki evidenciának tekintette, hogy a ZB fellépte szorosan összefügg a téridő nem-Galilei, hanem Minkowski-jellegével, lásd pl. [12].

Mások a Zitterbewegung kvantummechanikai interpretációjára tettek kísérletet, megvizsgálván a tömegközéppont kicsiny, de állandó amplitudójú spirális mozgása és a hullámcsomag ismert szétfolyása közti kapcsolatot. Lásd pl. Lock cikkét [13], aki arra következtetett, hogy a ZB csak átmeneti, tranziens jelenség lehet, mert a szétfolyás dinamikája rövid időn belül elmosa az effektust.

A ZB elméleti tárgyalásának egyik fő eszköze a Foldy–Wouthuysen-transzformáció ([14], [15]), mely a helyoperátor különböző reprezentációi között teremt kapcsolatot.

A ZB idővel besimult a Dirac-egyenlet, illetve más relativisztikus hullámegyenletek standard, matematikailag részletesen tárgyalt következményei közé. Ha nem úgy gondolunk a helyoperátorra, mint ami egyetlen részecske helyét adja meg, hanem mint egy többkomponensű hullámcsomag tömegközéppontjának várható értékére, a helyzet – az egyenes vonalú egyenletes mozgástól való eltérés – már kevésbé tűnik drámainak. A ZB ekkor úgy lép fel, mint a hullámcsomag pozitív és negatív energiás része közti interferencia, lebegési jelenség

eredménye. A tisztán pozitív energiás komponenseket tartalmazó elektron-hullámfüggvény mellett csak akkor lépnek fel szükségszerűen a negatív energiás komponensek is, ha a részecske helyét megkíséreljük a Compton-hullámhossznál nagyobb pontossággal lokalizálni. Ebben a szellemben tárgyalja a jelenséget pl. Feshback és Villars relativisztikus hullámmechanikáról írt, sokat hivatkozott összefoglaló cikke [16] is. E tárgyalásban szó sincs a tehetetlenség törvényéről vagy annak érvénytelenségéről, a ZB egyike lesz a számtalan furcsa kvantumeffektusnak, amelyeket úgysem lehet „józan köznapi ésszel” megérteni (ezért ezt meg sem kell kísérlni), pontosan ki lehet viszont számolni a kvantumelmélet részletesen kidolgozott matematikai apparátusával. A ZB méregfogát így kihúzták, a jelenség részletes tárgyalása benne van a szakcikkekben, a mögöttes természetfilozófiai probléma pedig elő sem kerül...

Érdekes, hogy bár Feshback és Villars idézett cikkében [16] nem csak a feles, hanem a zérus spinű részecskék esetében is tárgyalta a ZB jelenségét és annak matematikai részleteit, mégis az élt a köztudatban, hogy a ZB közvetlenül a Dirac-egyenlethez és a feles spinhez kapcsolódik. Amikor Fuda és Furiani [17] ezzel ellentétes következtetésre jutott, külön hangsúlyozták, hogy a közhiedelemmel ellentétben a ZB (és más, a Dirac-egyenlethez kapcsolódó jelenségek, pl. a Klein-paradoxon) a zérus spinű részecskék Klein–Gordon-egyenletéből is levezethetők. Látni fogjuk, hogy a dolgozatunkban tárgyalt általános séma szerint ez magától értetődő: a ZB mindig fellép, ha a vizsgált jelenséget több komponensű hullámfüggvényre felírt Schrödinger-jellegű hullámegyenlet írja le. Márpedig az egy komponensű, skalár hullámfüggvényre felírt *másodrendű* Klein–Gordon-egyenlet matematikailag ekvivalens egy két komponensű (kvázi-)spinorra vonatkozó *elsőrendű* egyenletrendszerrel. Fuda és Furiani is megpróbálkozott leválasztani a helyoperátorból egy az átlagos mozgást leíró, ZB-mentes tagot, valamint megvizsgálták, hogyan befolyásolja a külső elektrosztatikus tér a ZB fellépését.

Meg kell említenünk a ZB jelenségére alapozott néhány „ezoterikus” próbálkozást is. Ha a relativisztikus kvantummechanikában a tehetetlenség törvénye, a szabad részecskék egyenes vonalú, egyenletes mozgása nem igaz, akkor talán már a klasszikus mechanikában sem áll fenn ez a törvény... Az ún. nem-newtoni mechanika alapobjektumai spinnel rendelkező pont-részecskék, melyek klasszikus mozgásegyenleteit a kvantummechanika Dirac-egyenletéből, illetve annak nemrelativisztikus közelítéséből „visszafelé” konstruálják meg [18].

A ZB-t a részecskék tömegének kvalitatív magyarázatára is alkalmasnak találták: a gyors oszcilláló mozgás az elektron pontszerű töltésének térbeli elmosódottságához vezet, és az így keletkező töltésfelhőnek saját elektromos terében véges elektrosztatikus sajátenergiája, ezért véges tömege lesz – legalábbis a [19] cikk szerint.

A Mach-elv, mely szerint az Univerzum globális tömegeloszlása határozza meg a lokális inerciális jelenségeket, időről időre felbukkan a fizikátörténetben – egyebek közt ez volt Einstein egyik motivációja az általános relativitáselmélet kidolgozásához. Mivel az elkészült elmélet végül nem elégítette ki a Mach-elv elvárásait, további spekulációkra nyílt lehetőség. Sciamia 1952-ben állt elő az elmélet egyik verziójával [20], melyben az ekvivalencia-elvet, a gravitáció vonzó jellegét, valamint a gravitációs állandót egy sík téridőn értelmezett mezőelméletből vezette le, nem tételezve fel eközben a newtoni általános tömegvonzás fennállását, sőt az inerciarendszerek *a priori* létezését sem. Az elméletben a részecskék egymáshoz (és nem az inerciarendszerekhez) képesti gyorsulása határozza meg a kölcsönhatásukat, és e gyorsulások egy séma szerinti átlaglása tünteti ki utólag a sok lehetséges vonatkoztatási rendszer közül az inerciarendszereket, amelyekben a mozgásegyenletek a legegyszerűbb alakúak lesznek. De miért mozognak egymáshoz képest gyorsulva a részecskék? Cook [21] ennek okát a Zitterbewegungban találta meg: a világ fermionokból áll, azokat a Dirac-egyenlet írja le, ebből az egyenletből azonban a ZB, a gyors oszcilláló, tehát gyorsuló mozgás következik.

A Schrödinger-féle ZB-ra vonatkozó számításokat felhasználva így nem csak a tehetetlenség, a tömeg felléptére, hanem a gravitációs vonzóerő létezésére és nagyságára is sikerült (kvantitatív) magyarázatot adnia...

Mindezek a kísérletek azonban távol maradtak a fizikai kutatás fősodrától, sem az elemi részecskék fizikájában, sem a relativitáselméletben, sem a kvantumtérelméletben időközben lezajló forradalmi fejleményeket nem befolyásolták. A ZB létezését ugyanis lényegében senki sem vette komolyan, nem tekintette számottevő, más folyamatokba beavatkozni képes fizikai realitásnak. Ennek alapvető oka az volt, hogy a ZB csupán elméleti feltételezés volt, ténylegesen senki sem látta, senki sem mérte meg, ráadásul erre semmiféle gyakorlati remény sem volt. Részletesebb számításokkal a 2.5 szakaszban vizsgáljuk meg a Schrödinger-féle ZB kísérleti kimutathatóságának kérdését. A jelenséget leíró összefüggésekben lényegében csak fizikai alapállandók (fénysebesség, Planck-állandó, az elektron tömege) szerepelnek, ezért meg lehet becsülni a ZB által leírt oszcilláció frekvenciáját és amplitudóját. A frekvencia túlságosan nagynak bizonyult a kimutathatósághoz, az amplitudó pedig túlságosan kicsinek adódott, a Compton-hullámhossz nagyságrendjébe esett. Ezért a fősodor fizikusai hamarosan úgy tekintettek a ZB-re, mint egy relativisztikus „műtermékre”, amely abból következett, hogy az egyrészecske-quantummechanika képleteit hatókörükön túl alkalmazták. A Compton-hullámhossz ugyanis – mint a 2.6 fejezetben részletezzük – az egyrészecske-elmélet határát jelzi: az elektron Compton-hullámhossznyi méretre történő összenyomásához annyi energiát kellene befektetnünk, amennyi már egy elektron–pozitron pár keltéséhez is elegendő. Innentől kezdve tehát a soktest-quantumelmélet, más néven a kvantumtérelmélet apparátusát (másodkvantálás, stb.) kellene alkalmaznunk, ezért nem vehetjük komolyan az egyrészecske-elmélet Dirac-egyenletének jóslatait. Feshbach és Villars korábban említett cikke [16] is implicit módon erre a következtetésre jut: a hullámfüggvény pozitív és negatív energiás részeinek interferenciája tulajdonképpen elektronok és pozitronok kölcsönhatását jelenti, ez pedig igazából a kvantumtérelmélet illetékességi körébe tartozik.

A fenti gondolatmenet a tankönyvekben is megjelent, és általánosan elterjedté vált a fizikusok körében. (Bár meg kell jegyeznünk, hogy ellenvélemények is akadtak: Krekora és társai [22] a Dirac-egyenlet numerikus megoldása és a részecskék lokalizációs problémájának vizsgálata alapján épphogy arra következtettek, hogy a kvantumtérelmélet lehetővé teszi a részecskék tetszőleges pontosságú lokalizációját, és megakadályozza a ZB felléptét. De ezt a véleményt kevés fizikus osztja.) A ZB tehát valódi fizikai jelenségből afféle cirkuszi érdekességgé vált: lám, milyen furcsa eredményekre vezethetnek a korrektnak tűnő számítások, ha óvatlanul, hatókörükön túl alkalmazzuk, illetve óvatlanul interpretáljuk őket. Az eredeti, Schrödinger-féle gondolatmenet tankönyvi példává szelidült [23], ami az operátor-algebra meglepő eredményeinek bemutatására szolgálhat. Fentebb láttuk, hogy a furcsa, nehezen értelmezhető ZB néhány elvadult, valószínűleg saját szerzője által sem komolyan vett gondolatmenetnek is kiindulópontjává vált. A ZB hívei időnként egyre bonyolultabb algebrai konstrukciókkal jelentkeztek (pl. [24]), de ez nem befolyásolta a főáram fizikájának fejlődését.

1.3. ZB szilárdtestekben és mezoszkopikus rendszerekben

A helyzet a 2000-es évek elején gyökeresen megváltozott. A Zitterbewegung, ez az elméleti fizikusok, relativisták és téridő-algebristák játékszerének tartott hipotetikus jelenség ott bukkant fel, ahol a legkevésbé várták: a kőkemény realitások, az olykor alig egy évtized alatt

milliószámra gyártott eszközöket (később Nobel-díjakat) termő gyakorlati alkalmazásokba forduló alap kutatások világában, a szilárdtestfizika és az anyagtudomány modern csodanyagaival foglalkozó, a kutatás frontvonalába tartozó területeken, a nanofizika és a mezoszkopikus rendszerek birodalmában.

A témába vágó első, később sokat emlegetett és hivatkozott cikket 2004 végén írta Schliemann, Loss és Westervelt, a Rashba-, illetve Dresselhaus-típusú spin-pálya-kölcsönhatással jellemezhető félvezetőkről [25]. E cikkekre és a benne szereplő állításokra, módszerekre (amelyek sok további, más rendszerekre vonatkozó hasonló munka példájául szolgáltak) hamarosan részletesen visszatérünk. E pontnál azonban meg kell említenünk, hogy – mint a tudomány történetében már számtalan hasonló esetben – itt is az történt, hogy a szakértők és a tudománytörténészek csak egy téma divatossá válása után fedeztek fel olyan régebbi, olykor évtizedekkel korábban írt cikkeket, amelyek már tartalmazták az új ötletek, megállapítások jelentős részét, tehát akár ki is robbanthatták volna a forradalmat – a maguk korában ezek a cikkek mégis visszhangtalanok, csak szűk körben ismertek maradtak. A késői igazolás, a későbbi divatos téma történetébe való utólagos beillesztés valószínűleg nem vigasztalta az „elfeledett” cikkek szerzőit.

Esetünkben két ilyen munkát kell megemlítenünk.

Az egyik Cannata és társai nevéhez fűződik. Ők 1990-ben és 1991-ben írt cikkeikben ([26], [27], [28]) kimutatták, hogy a szilárdtestek elektronszerkezetének leírására használt effektív kétsávú Hamilton-operátorok a relativisztikus szabad elektron Dirac-féle Hamilton-operátorával állíthatók párhuzamba, és ezért a Dirac-elméletben fellépő fogalmak (nyugalmi tömeg, Compton-hullámhossz és Zitterbewegung) analogonjai is alkalmazhatók e modellekre. Azt is megmutatták, hogy bár e modellek esetén az elektron (kvázi-)impulzusát leíró operátor kommutál a Hamilton-operátorral (az ilyen modelleket fogjuk ebben a dolgozatban *kvázi-szabadnak* nevezni, részletesebben lásd a 3.2 fejezetet), az elektron sebességoperátora viszont nem – és ez vezet e modellekben a sebességoperátor nem eltűnő időderiváltjához, azaz a részecske gyorsulásához, ami a ZB által leírt oszcilláció alapja. Cannata és társai megvizsgálták e modellek különböző változatait, valamint a ZB hatását az elektron-fonon kölcsönhatásra.

A másik, korát megelőző munka Lurié és Cremer cikke [29] volt, amelyben a szupravezetőkben mozgó Bogoljubov-kvázirészecskék esetén mutatták ki a ZB jelenségének fellépését. A tárgyalás analóg a Schrödinger eredeti cikkében szereplővel, csak a szabad elektron Dirac-féle Hamilton-operátora helyett a szupravezetők Bogoljubov-féle Hamilton-operátorból indulnak ki, ennek megfelelően a Dirac-féle 4×4 -es γ -mátrixok helyett a szupravezetők elméletében szokásos 2×2 -es, (formálisan a Pauli-mátrixokkal megegyező) τ -mátrixok lépnek fel. A ZB amplitudójára a Schrödinger-félénél sok nagyságrenddel nagyobb érték, 10^{-4} cm adódik, amely a Cooper-pár hullámfüggvényének átmérője, a Pippard-féle koherencia-hossz nagyságrendjébe esik. Lurié és Cremer a szupravezetőkbeli ZB jelenségét a kvázirészecskék koherencia-hosszon belüli lokalizálhatatlanságának bizonyítékaként értelmezték.

E cikkeken leírt rendszerek és az esetükben kapott eredmények egyértelműen besorolhatók a ZB ügyében 2004-ben megindult pezsgés során tárgyalt rendszerek közé (lásd pl. az 5.1 táblázatot), de mint fentebb már említettük, a maguk korában nem váltottak ki különösebb visszhangot, és nem irányították a szilárdtestfizikusok figyelmét a ZB jelenségre. Nem úgy, mint Schliemann és társai 2004-es cikke [25].

Schliemann és társai nevezetes cikkükben megállapították, hogy a szilárdtestfizikában, illetve a spintronikában használt kvantummodellek Hamilton-operátorai sok hasonlóságot mutatnak a relativisztikus szabad elektron Dirac-féle Hamilton-operátorával, ezért e rendszerekben is várhatók a relativisztikus elektronnál tapasztaltakhoz hasonló effektusok, például a

Zitterbewegung. Ezután felírták a Heisenberg-képbeli helyoperátort, és kiszámították annak várható értékét gaussi hullámcsomagok esetére. Elemezték a vékony kvantumdrótban terjedő hullámcsomag esetét, és becslést adtak az effektus nagyságrendjére. Kimutatták, hogy a Schrödinger-féle ZB-hez hasonló jelenségről van szó, de az effektív Hamilton-operátorban szereplő paraméterek eltérése miatt az oszcilláló mozgás frekvenciája és amplitudója több nagyságrenddel eltér a korábbi esetétől, ezért sokkal nagyobb az esély a jelenség kísérleti észlelésére (amire cikkünkben rögtön javaslatot is tettek). (A Schliemann és társai által vizsgált rendszerben fellépő ZB levezetésével és tulajdonságaival e dolgozat 5.4 fejezetében foglalkozunk részletesen. Általános formalizmusunkból könnyen levezethetők az ő korábbi eredményeik.)

1.3.1. A mindenütt jelenvaló Zitterbewegung

Ezt az alapvető cikket számos másik követte, amelyek sok különböző – az irodalomban amúgy is gyakran és részletesen tanulmányozott – kvantumrendszer esetén mutatták ki a ZB jelenlétét. A teljesség igénye nélkül:

Schliemannék cikkük kibővített változatában [30] a kvantumvölgyben mozgó nehéz lyukak modelljét is megvizsgálták (lásd e dolgozat 5.3.2 szakaszát).

Brusheim és Xu [31] a kvázi-egydimenziós hullámvezetőkben mozgó elektronokat vizsgálta, és kimutatta, hogy a ZB és a spin-pálya-kölcsönhatás által indukált spin-Hall effektus mechanizmusa azonos, és mindkettő a hullámvezetőben kialakuló koherens elektron-állapotokkal kapcsolatos.

Zawadzki a félvezetőben mozgó elektronok esetét vizsgálva azt találta [32], hogy a ZB az elektronok effektív méretének növekedéséhez vezet.

Rusin és Zawadzki [33] a szilárdtestekben mozgó majdnem szabad, illetve szorosan kötött elektronok esetében fellépő ZB tulajdonságait hasonlította össze. Szoros kötés esetén megjelenik a ZB, a majdnem szabad elektronok esetében a jelenség a részecskék effektív méretének megnövekedésében jelentkezik.

Bernardes és társai szimmetrikus potenciálvölgyben mozgó elektronok esetére értelmeztek egy új típusú spin-pálya-csatolást, és megmutatták, hogy ebben az esetben is fellép a Zitterbewegung [34], de a korábban vizsgált rendszerekben tapasztalt transzverzális jellegű mozgással szemben itt ciklois-jellegű részecskepályák alakulnak ki.

Demikhovskii és társai [35] a szilárdtestekben mozgó könnyű és nehéz lyuk jellegű kvázirészecskéket leíró Luttinger-modellt tanulmányozták. E modellben az effektív $3/2$ -es spin operátorai szerepelnek. Az erősen anizotróp felépítésű hullámcsomagok mozgásának analitikus vizsgálata során meghatározták annak feltételeit, hogy a hullámcsomag középpontja oszcilláló mozgást, ZB-t végezzen. Ugyancsak a Luttinger-modellben fellépő ZB-ról szól Jiang és társai cikke [36]. (A Luttinger-modell elemzéséről és a ZB-re vonatkozó egzakt formulák levezetéséről szól dolgozatunk 5.6 fejezete.)

Zülicke és társai [37] a spin-felhasadást mutató rendszerekben vizsgálták a felhasadás kapcsolatát a részecskék ciklotron-jellegű mozgásával és a mágneses fókuszálás jelenségével. Meghatározták a ZB járulékát, és a rendszerben fellépő különböző hatások egymással való kapcsolatát és nagyságrendi viszonyát.

Zawadzki [38] kimutatta, hogy az egyfalú félvezető nanocsövekben az elektronok mozgása az egydimenziós Dirac-egyenlettel tárgyalható. E leírás közvetlenül elvezet a ZB felléptéhez. A kapott eredmények megegyeznek a később az egyrétegű grafén esetében levezetettekkel, melyeket dolgozatunkban az 5.2 fejezet tárgyal.

Természetesen megvizsgálták a ZB felléptét a nanofizika 2004-ben felfedezett (és 2010-ben Nobel-díjjal jutalmazott) új csodaanyaga, a grafén különböző változataiban is. Katsnelson [39] a grafén és a szabad, tömegtelen elektron Dirac-elmélete diszperziós relációjának hasonlóságából, a nevezetes Dirac-kúpokból kiindulva tanulmányozta a grafénben mozgó töltéshordozók dinamikáját, valamint a Kubo- és a Landauer-formulák (az utóbbi formuláról lásd [40]) alapján kiszámította a grafén minimális elektromos vezetőképességét. E számítások során Schrödinger-képet és másodkvantált formalizmust használt. (A Zb-re vonatkozó eredményeit a dolgozatunkban bemutatott általános formalizmus alapján az 5.2 fejezetben reprodukáljuk.)

Ugyancsak az egyrétegű, illetve kétrétegű grafénban, valamint a szén nanocsövekben fellépő ZB tranziens dinamikáját vizsgálta Rusin és Zawadzki [41]. Azt találták, hogy a ZB nagyon gyorsan, femtomásodperces skálán lecseng. Ennek okát abban jelölték meg, hogy a ZB oka a különböző energiasávok közötti interferencia, amely a hullámcsomag különböző sávokba tartozó komponenseinek ellentétes irányú mozgása miatt gyorsan megszűnik, a hullámcsomag komponensei „szétcsúsznak”, és a továbbiakban interferenciára képtelenek lesznek. (Ezt a jelenséget azóta Széchenyi Gábor vizsgálta numerikusan Cserti Józseffel közös témavezetésünkkel készült tudományos diákköri dolgozatában [42]. E dolgozatban és a belőle jelenleg készülő közös cikkünkben a fenti nehézség meghaladására is javaslatot teszünk: a kétrétegű grafén diszperziós relációjának speciális tulajdonságai lehetővé teszik bizonyos ZB-módusok tartós fennmaradását.)

Winkler és társai összefoglaló cikkükben [43] számos spintronikai és nanofizikai rendszer esetében mutatták ki a ZB jelenlétét, vezették le a helyoperátor oszcilláló mozgására vonatkozó formulákat. Cikkük címe is arra utal, hogy a ZB „mindenütt jelen van”. Mindazonáltal nem találtak – nem is kerestek – pontos kritériumokat arra vonatkozóan, vajon mely rendszerekben, milyen feltételek fennállása esetén várhatjuk a ZB megjelenését.

1.3.2. Kimutatták-e az utóbbi években a Zitterbewegungot?

Miután ilyen sok különböző rendszer egyszerű vagy egyszerűsített modelljében kimutatták a ZB (elméleti) fellépését, természetesen felmerült a jelenség közvetlen kísérleti kimutatásának problémája is. Ilyen jellegű hírek időnként felröppennek, de a szilárdtestekben fellépő ZB közvetlen észlelése máig nem sikerült. Egy elektron mozgását természetesen nem tudjuk követni, ezért csak közvetett mérésekben reménykedhetünk. A ZB és a transzportjelenségek (elektromos és hővezetőképesség, Hall-effektus, sörétzaj stb.) közti mély kapcsolat (melyet e jelenségek leírásában ugyanazon együttműködőrendszerek fellépte jelez, mint az legújabb cikkünkben [C] megmutattuk) reményt nyújt arra, hogy a transzportjelenségek paramétereinek gondos mérésével közvetett módon igazolni lehessen az elektronmozgás nemtriviális jellegét, azaz a ZB jelenlétét.

Mégis, mit jelentenek az ismeretterjesztő irodalomban vagy a világhálón időnként megjelenő szenzációs fogalmazású hírek a ZB kimutatásáról (lásd pl. a Gerritsma és társai által 2010-ben írott Nature-cikk [44] körüli sajtófelhajtást)? Ebben az esetben *nem a ZB-t*, hanem egy vele matematikailag analóg, ugyancsak a Dirac-egyenlet által leírt *optikai* jelenséget vizsgáltak, a kvantumoptika jól bevált és rugalmasan kezelhető mérési és manipulációs technikáival. A kétkomponensű Dirac-egyenletet egy csapdázott ion két kiválasztott energiaszintjének esetére írták fel, és megkeresték az egyenlet helyoperátorának kvantumoptikai megfelelőjét. Ennek a mennyiségnek a kezdeti értékét kvantumoptikai preparációkkal állították be, majd hasonló módon követték a mennyiség időbeli fejlődését – ami természetesen közvetlenül, a két fizikai diszciplína közti „fordítás” bevezetése nélkül is megtehető lett volna: ez esetben

a csapdázott ion két állapota közti átmenetekről, lebegési jelenségekről szólt volna a cikk. A vizsgált jelenség, a kimutatott hatás természetesen önmagában is érdekes, hasonlóképp fontos a matematikai kapcsolat a két jelenségkör között, ugyanakkor az elvégzett mérés nem igazolja közvetlenül a szilárdtestekben (vagy akár a relativisztikus szabad elektron esetében) fellépő Zitterbewegung létezését.

Hasonló mondható el az utóbbi időben megszorodott „Observing Zitterbewegung...” címkezetű cikkek többségéről. Ezek egyrészt nem elvégzett mérésekről, hanem mérési javaslatokról szólnak, másrészt közös bennük, hogy a jelenséget matematikailag hasonlóképpen leírható, de fizikailag más jellegű környezetbe transzponálják, és e másik fizikai rendszer esetében tesznek javaslatot bizonyos paraméterek időbeli fejlődésének mérésére – ami matematikailag a helyoperátor ZB által leírt oszcilláló mozgásának felelne meg.

Zhang [45] kétdimenziós fotonikus kristályok fizikájára fordítja le a ZB jelenségét. A mérendő paraméter a transzmissziós együttható időbeli változása lenne. A cikk szerint a részletes numerikus számítások igazolják a jelenség létezését. Vashnav és Clark [46] ultrahideg atomok négy állapotú modelljével dolgozik. A rendszer leírására használt modellben nem-abeli mértékterek és Dirac-jellegű Hamilton-operátor lépnek fel. A modellszámítások szerint az atomok mozgása ZB-t mutat, a paraméterek az észlelhető tartományba esnek. Ugyancsak ultrahideg atomok mozgásának numerikus vizsgálata során mutatja ki a ZB jelenlétét Merkl és társai cikke [47]. Lamata és társai a Dirac-bispinort csapdázott ionok négy állapotával modellezik [48], így vizsgálják a ZB és a Klein-paradoxon felléptét. Wang [49] ezt a modellt kvantumtérelméleti érvekkel támasztja alá. Bermudez és társai [50] relativisztikus Dirac-oszcillátorok vizsgálata alapján ion-csapdás kísérletet javasolnak a ZB kimutatására.

Itt is csak megismételhetjük a fentebb mondottakat. E jelenségek kétségtelenül önmagukban is érdekesek, a javasolt kísérleteket érdemes lenne végrehajtani. Ezek esetleges sikere a vizsgált rendszerről szóló tudásunkat gyarapítaná, másrészt közvetetten igazolná a leírásukra használt – a Dirac-elmélettel analóg – modell (legalábbis részbeni) helyességét. Nem mondana azonban semmit közvetlenül a szilárdtestekben fellépő ZB tulajdonságairól, létezéséről vagy nemlétezéséről, és az erre vonatkozó modellek helyességéről.

Megemlítünk egy cikket [51], amely valóban a szilárdtestekben végbemenő ZB közvetlen gerjesztésére és kimutatására tesz javaslatot. Az elektronokat femtoszekundumos lézerpulzusokkal vinnék gerjesztett Landau-állapotokba, és a hullámcsomagok meginduló multifrekvenciás mozgását az indukált dipólmomentum és a kisugárzott elektromos tér alapján detektálnák.

Trauzettel és társai [52] is külső elektromos térrel indukálnák a ballisztikus grafén belső dinamikáját, egyebek közt a ZB módusait.

1.3.3. Az egységes elmélet felé

A fentiekben felsorolt cikkek igen sok különböző fizikai rendszer kvantummodelljében keresték és találták meg – igencsak különböző módszerekkel – a ZB jelenségét. Érthető, hogy az egyik – sok alesetet tárgyaló és összehasonlító – összefoglaló cikk [43] címe egyenesen a Zitterbewegung „mindenütt jelenvalóságát” jelenti ki (magam is kaptam olyan javaslatot, hogy az általános elméletet leíró cikkünknek legyen ez a címe – azt kellett válaszolnom, hogy ez a cím sajnos már foglalt). Természetesen felmerült az igény a számos különböző rendszerben megjelenő hasonló jelenséget egységesen értelmező elmélet kidolgozására.

Az egyik irány a spintronika születőfélben levő elméletével kapcsolja össze a ZB jelenségét. E témában a spin-áramra ható transzverzális erők létéről vagy nemlétéről, leírásuk módszereiről szólnak a cikkek (pl. [53], [54], [55], [56], [57]). A cél a spinnel rendelkező

töltött részecskék mozgásának minél részletesebb és pontosabb leírása, a mozgásegyenletek felírása, a szükséges fogalmak bevezetése, a teljes elmélethez szükséges hiányzó mennyiségek vagy fizikai entitások (pl. a spin mozgására ható nem-abeli mértékterek) bevezetése (pl. [58], [59], [60]). Ez az irányzat azt reméli, hogy pl. a spin-Hall effektus és a ZB jelensége az általános elmélet speciális eseteként adódik. Ide tartozik az is, hogy egy megfelelően általános elmélet nem csak a szilárd testekben mozgó elektronok, hanem más, analóg rendszerek leírására is alkalmas lehet – pl. megjósolhatja a kristályokban terjedő fény esetleges Zitterbewegungját vagy az optikai Hall-effektust is (lásd pl. [61], [62], [63]), a fénysugárra ható Lorentz-erőt [64] esetleg a fotonikus és a fononikus kristályok közti analógiát [65].

Egy érdekes irányzat a kvantum-bolyongás mostanában divatba jött témájával kapcsolja össze a ZB jelenségét: a folytonos pályájú ZB-t a kvantum-valószínűség törvényeinek engedelmeskedő diszkrét lépések egymásutánjával igyekszik magyarázni [66].

E dolgozat ezeknél a nagyívű céloknál kisebbet tűz ki. Nem törekszünk a szilárdtestekben lezajló elektronmozgás teljes leírására és magyarázatára – ehelyett a Zitterbewegung jelenségére összpontosítunk. Azt vizsgáljuk, mi a közös mindazon rendszerekben, amelyek esetén a különböző szerzők a ZB felléptét jelezték. Ha ezt megtaláljuk, megkíséreljük egységes és megfelelően általános formalizmussal leírni a ZB tulajdonságait, meghatározni a helyoperátor mozgását. Látni fogjuk, hogy az irodalomban szereplő esetek az általános formalizmus speciális eseteként, a rendszert leíró Hamilton-operátor egyszerű behelyettesítése után, jól áttekinthető egységes formában adódnak ki. És persze ez az általános formalizmus olyan rendszerek esetén is lehetővé teszi a ZB-ra vonatkozó eredmények levezetését, amelyek korábban még nem szerepeltek az irodalomban (lásd pl. e dolgozatnak a kétrétegű grafén izotróp modelljéről szóló 5.8 fejezetét, melynek eredménye először [B] cikkünkben jelent meg).

2. rész

A Schrödinger-féle Zitterbewegung

2.1. A Dirac-egyenlet

Paul Dirac 1929-ben vezette be a később róla elnevezett relativisztikus hullámeqyenletet. Erwin Schrödinger, a kvantummechanika egyik megalapítója 1930-ban a Dirac-egyenletből vezette le [1] a Zitterbewegung meglepő jelenségét.

A Dirac-egyenlet kiindulópontja az m nyugalmi tömegű részecske \mathbf{p} impulzusa és E energiája közt a speciális relativitáselmélet szerint fennálló összefüggés:

$$E = \sqrt{(c\mathbf{p})^2 + (m c^2)^2} . \quad (2.1)$$

Dirac a kifejezésben szereplő négyzetgyökvonást szimbolikusan elvégezve kapta a Dirac-féle \hat{H}_D Hamilton-operátort:

$$\hat{H}_D = c \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta m c^2 , \quad (2.2)$$

ahol α_k ($k = 1, 2, 3$) és β (legalább) 4×4 -es mátrixok, az $\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}}$ kifejezés pedig formális skaláris szorzatot jelent:

$$\boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} = \sum_{k=1}^3 \alpha_k \hat{p}_k .$$

A bevezetett (mátrix-)operátoroknak ki kell elégíteniük a következő antikommutációs relációkat:

$$\begin{aligned} \{\alpha_k, \alpha_l\} &\equiv \alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 2 \delta_{kl} \mathbb{I}_4 , \\ \{\alpha_k, \beta\} &\equiv \alpha_k \beta + \beta \alpha_k = \mathbb{O}_4 , \\ \beta^2 &= \mathbb{I}_4 , \end{aligned} \quad (2.3)$$

ahol \mathbb{I}_4 a 4×4 -es egységmátrixot jelenti, \mathbb{O}_4 pedig a megfelelő nullmátrix. Az α_k mátrixok antikommutátorait részletesen kiírva:

$$\alpha_k^2 = \mathbb{I}_4 , \quad \text{illetve} \quad \alpha_k \alpha_l = -\alpha_l \alpha_k , \quad \text{ha } k \neq l .$$

A szimbolikus négyzetgyökvonással Dirac mintegy „fű alatt” megváltoztatta az operátorok értelmezési tartományát, azaz a hullámfüggvény jelentését. A $|\psi\rangle$ hullámfüggvény az elektron relativisztikus Dirac-elméletében ettől kezdve négy komponensű komplex vektor (bispinor):

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \\ \psi_3(\mathbf{r}, t) \\ \psi_4(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} ,$$

melynek komponensei szokásos \mathcal{L}^2 -beli hullámfüggvények. Pontosabban:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathbb{C}^4 , \quad (2.4)$$

azaz a Dirac-féle Hilbert-tér a szokásos \mathcal{H}_0 Hilbert-tér (pl. \mathcal{L}^2) és egy négydimenziós komplex lineáris tér direkt szorzata.

Ezért az operátorok szokásos definíciója is módosul: pl. a (Schrödinger-képbeli) helyoperátor a szokásos \mathcal{L}^2 -beli operátor és a \mathbb{C}^4 tér \mathbb{I}_4 egységmátrixának $\hat{\mathbf{x}} \otimes \mathbb{I}_4$ tenzori szorzata lesz. Az egységmátrixot általában nem szoktuk kiírni. A Heisenberg-féle cserereláció pedig a következő alakú lesz:

$$[\hat{p}_k, \hat{x}_l] = \frac{\hbar}{i} \delta_{kl} \mathbb{I} . \quad (2.5)$$

Ebben a képletben \mathbb{I} már a teljes \mathcal{H} Hilbert-tér egységoperátora:

$$\mathbb{I} = \mathbb{I}_{\mathcal{L}^2} \otimes \mathbb{I}_4 . \quad (2.6)$$

E dolgozatban az operátoroknak járó „kalapot” csak a Hilbert-tér \mathcal{H}_0 -komponensére ható operátorokra (pl. $\hat{\mathbf{x}}$ és $\hat{\mathbf{p}}$) tesszük ki, az operátorok mátrix-komponensét közönséges nagybetűvel (illetve a Dirac-mátrixok esetén a hagyományt követve görög betűvel) jelöljük.

A megkövetelt antikommutációs relációk következtében a Dirac-féle \hat{H}_D Hamilton-operátor négyzete valóban megegyezik a relativisztikus E energiakifejezés (direktszorzat-térre kiterjesztettjének) négyzetével:

$$\hat{H}_D^2 = \left((c\hat{\mathbf{p}})^2 + (mc^2)^2 \right) \mathbb{I}_4 .$$

A szokásos Schrödinger-egyenletet a Dirac-féle \hat{H}_D Hamilton-operátorral felírva adódik a Dirac-egyenlet nemrelativisztikus alakja:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H}_D |\psi\rangle , \quad (2.7)$$

illetve a megfelelő időfüggetlen egyenlet, azaz a Hamilton-operátor sajátérték-egyenlete:

$$\hat{H}_D |\psi\rangle = E |\psi\rangle . \quad (2.8)$$

2.2. A sebességoperátor

Kövessük Schrödinger gondolatmenetét: keressük a Dirac-egyenlet által leírt szabad (külső erőhatás alatt nem álló) részecske helyoperátorának időfüggését!

Közvetlenül kínálkozik a Heisenberg-képre való áttérés képleteinek alkalmazása (lásd a 4.2 fejezetben). Schrödinger azonban nem ezt az utat választotta, hanem differenciálegyenletet vezetett le a keresett $\hat{\mathbf{x}}(t)$ operátorra.

Első lépésként vegyük észre, hogy az impulzus operátorának \hat{p}_k komponensei (és természetesen maga a Hamilton-operátor is) kommutálnak a \hat{H}_D Hamilton-operátorral, így Heisenberg-képbeli időderiváltjuk nulla:

$$\frac{d}{dt} \hat{H}_D(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_D, \hat{H}_D] = 0 , \quad \frac{d}{dt} \hat{p}_k(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_D, \hat{p}_k] = 0 .$$

A levezetés következő lépéseiben ezért a \hat{H}_D és a \hat{p}_k operátorokat skalárként lehet kezelni. Pontosabban fogalmazva: a továbbiakban dolgozhatunk ezen operátorok közös sajátalterében, ahol az operátorok sajátértékükkel helyettesíthetők.

Számítsuk ki a sebességoperátort, azaz az $\hat{\mathbf{x}}$ helyoperátor Heisenberg-képbeli deriváltját:

$$\begin{aligned} \hat{v}_k &= \frac{d}{dt} \hat{x}_k(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_D, \hat{x}_k(t)] = \frac{i}{\hbar} [c\boldsymbol{\alpha}\hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2, \hat{x}_k(t)] = \\ &= \frac{ic}{\hbar} \alpha_l [\hat{p}_l, \hat{x}_k(t)] = \frac{ic}{\hbar} \alpha_l \frac{\hbar}{i} \delta_{kl} \mathbb{I} = c\alpha_k \end{aligned} \quad (2.9)$$

(itt és a továbbiakban a vektor- és mátrix-indexekre a „néma index” konvenciót, azaz a kétszer előforduló azonos indexekre történő automatikus összegezést alkalmazzuk, csak az ezektől eltérő – pl. sajátalterekre történő – összegezést jelöljük külön szumma-jellel).

Azt a meglepő eredményt kaptuk, hogy a Dirac-egyenlet sebességoperátora megegyezik a bevezetett α mátrix-vektorral (pontosabban ennek később kiszámítandó Heisenberg-képbeli változatával), és független a részecske $\hat{\mathbf{p}}$ impulzusától:

$$\hat{\mathbf{v}} = c \boldsymbol{\alpha} . \quad (2.10)$$

Az eredmény azért meghökkenítő, mert a klasszikus mechanikában (most beleértve a nemkvantumozott relativisztikus mechanikát is!) megszoktuk, hogy az impulzus és a sebesség vektora arányos egymással: a Dirac-elméletben ez láthatóan nem áll fenn.

A sebességoperátorra kapott kifejezés más furcsaságot is rejt. Emeljük négyzetre az előző egyenletet:

$$\hat{v}_k^2 = (c \alpha_k)^2 = c^2 (\alpha_k)^2 = c^2 \mathbb{I} .$$

Ebből arra következtethetnénk, hogy a sebességvektor operátora négyzetének várható értéke

$$|\overline{\hat{\mathbf{v}}^2}| = \sum_k |\overline{\hat{v}_k^2}| = 3 c^2 > c^2 ,$$

azaz a sebesség abszolút értékének várható értéke nagyobb a fénysebességnél:

$$|\overline{\hat{\mathbf{v}}}| > c .$$

Ez a következtetés természetesen téves. A Dirac-féle α_k mátrixok nem kommutálnak:

$$[\alpha_k, \alpha_l] \neq 0 ,$$

így nincs olyan állapot, amelyben a sebesség három komponensének abszolút értéke egyszerre c lenne. Ez megint a relativisztikus kvantummechanika újszerű eredménye, hiszen a nemrelativisztikus elméletben megszoktuk, hogy a helyoperátor különböző komponensei kommutálnak egymással. (A szokásos nemrelativisztikus kvantumelméletben is van olyan vektoroperátor, jelesül a $\hat{\mathbf{J}}$ impulzusmomentum, amelynek komponensei nem kommutálnak egymással – ez a forgáscsoport nem-abeli voltából következik –, de a kommutatív Galilei-féle boostokkal kapcsolatos helyoperátor komponensei felcserélhetők egymással.)

Kövessük tovább Schrödinger gondolatmenetét! A sebességoperátor ismeretében számítsuk ki ennek Heisenberg-képbeli időderiváltját, azaz a gyorsulás operátorát!

$$\begin{aligned} \hat{a}_k &= \frac{d}{dt} \hat{v}_k(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_D, \hat{v}_k(t)] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_D, c \alpha_k(t)] = \\ &= \frac{i c}{\hbar} [c \boldsymbol{\alpha} \hat{\mathbf{p}} + \beta m c^2, \alpha_k] = \frac{i c}{\hbar} (c \hat{p}_l [\alpha_l, \alpha_k] + m c^2 [\beta, \alpha_k]) . \end{aligned} \quad (2.11)$$

A képletben fellépő kommutátorokat fejezzük ki antikommutátorokkal, és használjuk ki az antikommutátorokra megkövetelt (2.3) relációkat:

$$[\beta, \alpha_k] = \beta \alpha_k - \alpha_k \beta = \beta \alpha_k + \alpha_k \beta - 2 \alpha_k \beta = \{\beta, \alpha_k\} - 2 \alpha_k \beta = -2 \alpha_k \beta ,$$

$$[\alpha_l, \alpha_k] = \alpha_l \alpha_k - \alpha_k \alpha_l = \alpha_l \alpha_k + \alpha_k \alpha_l - 2 \alpha_k \alpha_l = \{\alpha_l, \alpha_k\} - 2 \alpha_k \alpha_l = 2 \delta_{kl} \mathbb{I} - 2 \alpha_k \alpha_l .$$

Ezeket a gyorsulásoperátor kifejezésébe visszahelyettesítve:

$$\hat{a}_k = \frac{ic}{\hbar} \left(c \hat{p}_l (2 \delta_{kl} \mathbb{I} - 2 \alpha_k \alpha_l) + m c^2 (-2 \alpha_k \beta) \right) = \frac{2ic}{\hbar} \left(c \hat{p}_k - \alpha_k (c \hat{p}_l \alpha_l + m c^2 \beta) \right).$$

A belső zárójelben álló mennyiségben felismerhetjük a Dirac-féle (2.2) Hamilton-operátort, ezért

$$\hat{a}_k = \frac{2ic^2}{\hbar} \hat{p}_k - \frac{2ic}{\hbar} \alpha_k \hat{H}_D = \frac{2ic^2}{\hbar} \hat{p}_k - \frac{2i}{\hbar} \hat{v}_k \hat{H}_D.$$

Emeljük ki mindkét tagból a Hamilton-operátort:

$$\hat{a}_k = \frac{d}{dt} \hat{v}_k = -\frac{2i}{\hbar} \hat{v}_k \hat{H}_D + \frac{2ic^2}{\hbar} \hat{p}_k = (-\hat{v}_k + c^2 \hat{p}_k \hat{H}_D^{-1}) \frac{2i}{\hbar} \hat{H}_D. \quad (2.12)$$

A Dirac-féle \hat{H}_D operátor inverze létezik, hiszen sajátértékeinek spektruma nem tartalmazza a nullát, $-m c^2$ és $+m c^2$ között nincs megengedett energiaérték. Ez a kérdés általánosabb Hamilton-operátorok esetén fontossá válik, ezért a 3.7 fejezetben részletesen visszatérünk rá.

A (2.12) képletben megjelent egy nevezetes mennyiség, jelöljük $\hat{\mathbf{W}}$ -vel:

$$\hat{\mathbf{W}} = c^2 \hat{\mathbf{p}} \hat{H}_D^{-1}. \quad (2.13)$$

Ez a kifejezés a pontrészcse nemkvantumoz relativisztikus dinamikájából ismerős. Írjuk fel ugyanis az impulzus és az energia relativisztikus képletét:

$$\mathbf{p} = \frac{m \mathbf{V}}{\sqrt{1 - \frac{\mathbf{V}^2}{c^2}}}, \quad E = \frac{m c^2}{\sqrt{1 - \frac{\mathbf{V}^2}{c^2}}}. \quad (2.14)$$

Ezeket egymással elosztva kapjuk:

$$\frac{c^2 \mathbf{p}}{E} = \mathbf{V}, \quad (2.15)$$

azaz a \mathbf{V} kifejezés egyszerűen a \mathbf{p} impulzusú és E energiájú relativisztikus részecske sebessége (amely szabad részecske esetén természetesen állandó), a (2.15)-beli $\hat{\mathbf{W}}$ pedig az ennek a mennyiségnek megfelelő (az energia-sajátérték előjelét is magába olvasztó) operátor.

Ezzel a jelöléssel a (2.12) egyenlet a \hat{v}_k operátorra vonatkozó lineáris differenciálegyenlet lesz:

$$\frac{d}{dt} \hat{v}_k = (-\hat{v}_k + \hat{W}_k) \frac{2i}{\hbar} \hat{H}_D, \quad (2.16)$$

vagy vektoros alakban:

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{v}} = (-\hat{\mathbf{v}} + \hat{\mathbf{W}}) \frac{2i}{\hbar} \hat{H}_D. \quad (2.17)$$

Az egyenletben szereplő $\hat{\mathbf{W}}$ operátor a $\hat{\mathbf{p}}$ és H_D operátorok függvénye, ezért maga is kommutál a Hamilton-operátorral. Így a Heisenberg-képben a $\hat{\mathbf{W}}$ operátor is konstans, időben állandó operátor lesz. A (2.16) lineáris operátor-differenciálegyenletben tehát $\hat{\mathbf{W}}$ állandó mennyiségnek tekintendő, ezért a differenciálegyenlet a szokásos módon alakítható át és oldható meg:

$$\hat{\mathbf{a}} = \frac{d}{dt} \hat{\mathbf{v}} = \frac{d}{dt} (\hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{W}}) = -(\hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{W}}) \frac{2i}{\hbar} \hat{H}_D, \quad (2.18)$$

melynek megoldása:

$$\hat{\mathbf{v}}(t) - \hat{\mathbf{W}} = (\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}}) e^{-\frac{2i}{\hbar} \hat{H}_D t}, \quad (2.19)$$

ahol $\hat{v}_k(0) = c \alpha_k(0)$ a sebesség-komponens-operátor kezdeti értéke, azaz a (2.2) Dirac-operátorban szereplő α_k mátrix Schrödinger-képbeli alakjának c -szerese. Ezzel

$$\hat{\mathbf{v}}(t) = \hat{\mathbf{W}} + (\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}}) e^{-i\hat{\Omega}t}, \quad (2.20)$$

ahol bevezettük az

$$\hat{\Omega} = \frac{2}{\hbar} \hat{H}_D \quad (2.21)$$

frekvencia-dimenziójú operátort.

A szabad részecske sebességoperátora tehát nem konstans, hanem a klasszikusan várható állandó érték körül Ω frekvenciájú rezgést végez. Ezt a furcsa jelenséget nevezték el Zitterbewegungnak.

2.3. A helyoperátor Heisenberg-képben

Ismervén a sebességoperátor (2.20) időfüggését, tovább integrálhatunk, és megkapjuk a helyoperátor Heisenberg-képbeli alakját:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \hat{\mathbf{W}}t + (\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}})(i\hat{\Omega}^{-1})(e^{-i\hat{\Omega}t} - 1). \quad (2.22)$$

Schrödinger és kortársai nagy meglepetésére a szabad részecske helyoperátora nem a klasszikus (és a relativisztikus) mechanikában elvárható $\mathbf{x}_0 + \mathbf{V}t$ alakú lett, hanem ezen felül tartalmaz még egy Ω frekvenciájú oszcilláló tagot is. Ez a nevezetes „reszkető mozgás”, azaz a Zitterbewegung.

Jelöljük a (2.22) kifejezés utolsó, a Zitterbewegungot leíró tagját $\hat{\mathbf{Z}}(t)$ -vel:

$$\hat{\mathbf{Z}}(t) = (\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}})(i\hat{\Omega}^{-1})(e^{-i\hat{\Omega}t} - 1). \quad (2.23)$$

E kifejezésből leválasztható egy állandó $\hat{\mathbf{Y}}$ vektor:

$$\hat{\mathbf{Y}} = -(\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}})i\hat{\Omega}^{-1}, \quad (2.24)$$

a fennmaradó, tisztán oszcilláló részt jelöljük $\hat{\mathbf{C}}(t)$ -vel:

$$\hat{\mathbf{C}}(t) = (\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}})(i\hat{\Omega}^{-1})e^{-i\hat{\Omega}t}. \quad (2.25)$$

E jelölésekkel a Heisenberg-képbeli helyoperátor a következő alakba írható:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \hat{\mathbf{W}}t + \hat{\mathbf{Z}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \hat{\mathbf{Y}} + \hat{\mathbf{W}}t + \hat{\mathbf{C}}(t). \quad (2.26)$$

A szabad, erőmentes mozgást végző Dirac-részecske helyoperátorának Heisenberg-képbeli (2.26) alakja tehát a következőképpen interpretálható: az elvárt, állandó sebességű mozgást leíró $\hat{\mathbf{x}}(0) + \hat{\mathbf{W}}t$ tagok mellett megjelenik egy Ω frekvenciájú oszcilláló, reszkető mozgás, a $\hat{\mathbf{C}}(t)$ tagnak megfelelő Zitterbewegung, valamint egy állandó $\hat{\mathbf{Y}}$ vektorú eltolódás, amely – mint a (2.23) képlet alapján könnyen látható – megegyezik $\hat{\mathbf{C}}(0)$ (-1)-szeresével, azaz mintegy a $\hat{\mathbf{C}}(t)$ oszcilláció kezdőállapotának beállítására szolgál. A részecske (2.20) sebességoperátora is két részből áll: a klasszikus, nemkvantumoz mozgás állandó (2.15) sebessége mellett megjelenik a Zitterbewegungnak megfelelő oszcilláló tag is. A klasszikus $\hat{\mathbf{W}}$ sebesség

most tehát a *driftsebesség* szerepét játssza: leírja a részecske átlagos, eredő mozgását, míg a valódi, részleteiben követett mozgás a drift körüli fluktuációkat is tartalmazza. E fluktuációk „magyarázatát” az eddigi levezetés természetesen nem tartalmazza, ez még további értelmezésre szorul, az azonban kétségtelen, hogy e furcsa reszkető mozgás, a Zitterbewegung a szabad részecske Dirac-egyenlete közvetlen következményeként lép fel, és mivel a szabad részecske nemrelativisztikus Schrödinger-egyenlete kapcsán nem találkoztak hasonlóval, érdekes relativisztikus effektusnak tekintették. Erre a kérdésre az általános eset tárgyalása után, az 5.5 fejezetben visszatérünk.

2.4. ZB-mentes állapotok

A helyoperátor kifejezését az állapotvektor Schrödinger-képbeli $|\psi(0)\rangle$ kezdőértékével (azaz a Heisenberg-képbeli állandó állapotvektorral) „szendvicselve” megkaphatjuk a részecske helyének várható értékét mint az idő függvényét:

$$\bar{\mathbf{x}}(t) = \langle \psi(0) | \hat{\mathbf{x}}(t) | \psi(0) \rangle . \quad (2.27)$$

Önkényes kezdőállapotot felvéve a várható érték is tartalmazza az Ω frekvenciájú rezgő tagot. Ha viszont speciális kezdőállapotot tételezünk fel, a Zitterbewegung járuléka eltűnik. A következőkben megmutatjuk, hogy a \hat{H}_D Hamilton-operátor energia-sajátállapotai épp ilyen speciális, „ZB-mentes” állapotok.

Vezessük be a következő operátort:

$$\hat{T} = \hat{H}_D / E , \quad (2.28)$$

ahol \hat{H}_D a (2.2) Dirac-féle Hamilton-operátor, E pedig a részecske (2.1) relativisztikus energiája. Világos, hogy $\hat{T}^2 = \mathbb{I}$, azaz a \hat{T} tükröző, előkelőbb nevén involutórikus operátor (lásd: [67], [68]). (Itt \mathbb{I} a teljes Hilbert-tér (2.6) egységoperátora.) Az involutórikus operátorokra vonatkozó fontosabb matematikai ismereteket az A. függelék A.3 fejezetében foglaltuk össze.

A \hat{T} operátor segítségével definiálhatunk két projektor-operátort is:

$$\hat{Q}_{\pm} = \frac{\mathbb{I} \pm \hat{T}}{2} . \quad (2.29)$$

Ezek teljesítik a Neumann-féle teljes ortogonális projektor-rendszerre vonatkozó szokásos összefüggéseket:

$$\hat{Q}_{\pm} \hat{Q}_{\pm} = \hat{Q}_{\pm} , \quad \hat{Q}_{\pm} \hat{Q}_{\mp} = \mathbb{O} , \quad \hat{Q}_{+} + \hat{Q}_{-} = \mathbb{I} . \quad (2.30)$$

Egyszerű behelyettesítéssel belátható a következő egyenlőség is:

$$\hat{Q}_{\pm} \hat{T} = \hat{T} \hat{Q}_{\pm} = \pm \hat{Q}_{\pm} . \quad (2.31)$$

Ha a \hat{Q}_{\pm} operátorok valamelyikét egy tetszőleges $|\psi(0)\rangle$ állapotra alkalmazzuk, akkor az állapotvektornak a tisztán pozitív vagy tisztán negatív energiájú állapotok alterére vett vetületét kapjuk (ezeket tiszta elektron-, illetve pozitron-állapotoknak is szokás nevezni):

$$|\psi_{\pm}(0)\rangle = \hat{Q}_{\pm} |\psi(0)\rangle . \quad (2.32)$$

Ilyen tiszta állapotok között is kereshetjük a helyoperátor várható értékét:

$$\bar{\mathbf{x}}_{\pm}(t) = \langle \psi_{\pm}(0) | \hat{\mathbf{x}}(t) | \psi_{\pm}(0) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{Q}_{\pm}^{\dagger} \hat{\mathbf{x}}(t) \hat{Q}_{\pm} | \psi(0) \rangle, \quad (2.33)$$

ahol \hat{Q}^{\dagger} a \hat{Q} operátor adjungáltját jelöli. (Lévén a \hat{H}_D operátor valós együtthatós polinomja, \hat{Q} is önadjungált, így az adjungálás jelét a későbbiekben nem kell kitenünk.)

A fenti várható érték tehát megegyezik az $\hat{\mathbf{x}}_{\pm}(t) = \hat{Q}_{\pm} \hat{\mathbf{x}}(t) \hat{Q}_{\pm}$ operátornak a tetszőleges $|\psi(0)\rangle$ állapotra vett várható értékével.

Vizsgáljuk meg először a helyoperátor $\hat{\mathbf{W}}t$, azaz az állandó sebességű mozgást leíró tagjának várható értékét ilyen tiszta elektron- vagy pozitron-állapotokban! Számítsuk ki tehát a (2.13) driftsebesség-operátorból kivetített

$$\hat{\mathbf{W}}_{\pm}(t) = \hat{Q}_{\pm} \hat{\mathbf{W}}(t) \hat{Q}_{\pm} \quad (2.34)$$

operátort! Helyettesítsük be a $\hat{\mathbf{W}}$ driftsebesség (2.13) alakját, és használjuk ki, hogy a $\hat{\mathbf{p}}$ impulzusoperátor kommutál a \hat{Q}_{\pm} projektorokkal, a \hat{T} operátor (2.28) definíciójának közvetlen következményeként pedig fennáll a $\hat{H}_D^{-1} = \hat{T}/E$ egyenlőség, végül használjuk fel a projektorokra vonatkozó (2.31) és (2.30) azonosságokat:

$$\hat{\mathbf{W}}_{\pm}(t) = \hat{Q}_{\pm} (c^2 \hat{\mathbf{p}} \hat{H}_D^{-1}) \hat{Q}_{\pm} = \hat{Q}_{\pm} (\hat{T}/E) \hat{Q}_{\pm} (c^2 \hat{\mathbf{p}}) = \pm \hat{Q}_{\pm} \hat{Q}_{\pm} (c^2 \hat{\mathbf{p}}/E) = \pm \mathbf{V}. \quad (2.35)$$

A $\hat{\mathbf{W}}$ driftsebesség várható értéke tehát pozitív energiás állapotokban megegyezik a (2.15) klasszikus relativisztikus sebességgel, negatív energiás állapotokban pedig ennek ellentettje.

Számítsuk ki ezután az $\hat{\mathbf{x}}_{\pm}(t)$ operátor Zitterbewegungot leíró része, azaz a

$$\hat{\mathbf{Z}}_{\pm}(t) = \hat{Q}_{\pm} \hat{\mathbf{Z}}(t) \hat{Q}_{\pm} \quad (2.36)$$

operátor várható értékét! Ha a (2.23) képletből behelyettesítjük $\hat{\mathbf{Z}}(t)$ értékét, észrevehetjük, hogy az időfüggő tényező átemelhető a projektorokon, hiszen az exponenciálisban fellépő $\hat{\Omega}$ frekvenciaoperátor – lévén a \hat{Q}_{\pm} projektorokhoz hasonlóan csak a \hat{H}_D Hamilton-operátor függvénye – kommutál a projektorokkal. Ezért csak az időfüggő tényező előtti

$$\hat{\mathbf{w}} = \hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}} \quad (2.37)$$

sebességeltérés-operátor \hat{Q}_{\pm} -szal vett szorzatát kell kiszámolnunk:

$$\hat{\mathbf{Z}}_{\pm}(t) = \hat{Q}_{\pm} \hat{\mathbf{w}} \hat{Q}_{\pm} (e^{-i\hat{\Omega}t} - 1) i\hat{\Omega}^{-1}. \quad (2.38)$$

A $\hat{\mathbf{w}}$ tényező a (2.18) képletben jelent meg először, ezt összehasonlítva az \hat{a}_k gyorsulás-operátor eredeti (2.11) definíciójával, láthatjuk, hogy $\hat{\mathbf{w}}$ kifejezhető a Hamilton-operátor és a sebességoperátor kommutátorával:

$$2 \hat{\mathbf{w}} = [\hat{H}_D, \hat{\mathbf{v}}(t)] \hat{H}_D^{-1}. \quad (2.39)$$

Használjuk ki ismét a \hat{T} operátor (2.28) definíciójának közvetlen következményeként fennálló $\hat{H}_D^{-1} = \hat{T}/E$ azonosságot, majd vigyük be a nevezőben levő E értéket a kommutátorba:

$$\begin{aligned} 2 \hat{\mathbf{w}} &= [\hat{H}_D, \hat{\mathbf{v}}(t)] (\hat{T}/E) = [(\hat{H}_D/E), \hat{\mathbf{v}}(t)] \hat{T} = \\ &= [\hat{T}, \hat{\mathbf{v}}(t)] \hat{T} = \hat{T} \hat{\mathbf{v}}(t) \hat{T} - \hat{\mathbf{v}}(t). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Szorozzuk be az utóbbi egyenlőséget mindkét oldalról a \hat{Q}_{\pm} projektorral, majd használjuk

ki a (2.31) összefüggést:

$$\begin{aligned} 2 \hat{Q}_{\pm} \hat{\mathbf{w}} \hat{Q}_{\pm} &= \hat{Q}_{\pm} \hat{T} \hat{\mathbf{v}}(t) \hat{T} \hat{Q}_{\pm} - \hat{Q}_{\pm} \hat{\mathbf{v}}(t) \hat{Q}_{\pm} = \\ &= (\pm \hat{Q}_{\pm}) \hat{\mathbf{v}}(t) (\pm \hat{Q}_{\pm}) - \hat{Q}_{\pm} \hat{\mathbf{v}}(t) \hat{Q}_{\pm} = 0 . \end{aligned} \quad (2.41)$$

A fentiek alapján a (2.38) képletben szereplő $\hat{\mathbf{Z}}_{\pm}(t)$ mennyiség azonosan nulla. Ugyancsak nulla ennek tetszőleges $|\psi(0)\rangle$ kezdeti állapotra számított várható értéke is, amelyről viszont korábban beláttuk, hogy megegyezik a Zitterbewegungot leíró $\hat{\mathbf{Z}}(t)$ operátornak tiszta pozitív-, illetve negatív energiájú állapotokban számított várható értékével.

Ha tehát a helyoperátor várható értékét tiszta pozitív vagy tisztán negatív energiájú állapotokra képezzük, a Zitterbewegung járuléka eltűnik, és csak az egyenes vonalú egyenletes mozgásnak megfelelő

$$\bar{\mathbf{x}}_{\pm}(t) = \bar{\mathbf{x}}_{\pm}(0) + \bar{\mathbf{W}} t \quad (2.42)$$

formulát kapjuk. (Megjegyzés: ne felejtsük el, hogy a korábban levezetett (2.35) képlet szerint a $\hat{\mathbf{W}}$ driftsebesség csak egy előjel erejéig egyezik meg a klasszikus \mathbf{V} sebességgel, a (2.42) képlettel leírt állandó sebességű mozgás során az elektron-, illetve a pozitron-komponens sebessége ellenkező előjelű!)

Tiszta elektron- vagy pozitron-állapotban tehát nincs Zitterbewegung. Ezért a ZB felismerése után hamarosan elfogadták azt az álláspontot, hogy a Zitterbewegungot a Dirac-elektron hullámfüggvénye pozitív és negatív energiájú része közti interferencia okozza.

Rögtön hozzá kell tennünk, hogy Lorentz-transzformáció során a hullámfüggvény pozitív és negatív frekvenciájú részei keverednek. Ha tehát egy inerciarendszerben tisztán pozitív energiájú állapotokat látunk, és ezért nincs Zitterbewegung, az ehhez képest állandó sebességgel mozgó többi inerciarendszerben már előfordul mindkét komponens, és fellép a ZB is. A ZB jelenléte vagy hiánya tehát nem objektív, megfigyelőtől független fizikai állítás!

Később látni fogjuk, hogy sokkal általánosabb Hamilton-operátorral felírható rendszerekre is fennáll a most kapotthoz hasonló általános tétel: a helyoperátor Zitterbewegungot leíró tagjának várható értéke energia-sajátállapotokban mindig nulla. A fentebb részletes számítással belátott eredmény ennek a sokkal általánosabb állításnak speciális esete.

2.5. A kísérleti kimutatás problémái

A Zitterbewegung furcsa, nem várt, a hagyományos mechanikának ellentmondó jelenségének (elméleti) felfedezése azonnal felvetette a kérdést: ki lehet-e mutatni, és ha igen, hogyan ezt az érdekes effektust? E kérdés vizsgálatához becsüljük meg a ZB leírásában felbukkanó paramétereket.

A Dirac-egyenlet minden fermion-típusú részecske leírására alkalmas, de először az elektronra (és antirészecskéjére, a pozitronra) alkalmazták. Becsléseink során tehát az elektron adatait használjuk.

A Zitterbewegung frekvenciájának várható értéke a (2.21) képlet szerint

$$\bar{\Omega} = \frac{2}{\hbar} \overline{\hat{H}_D} . \quad (2.43)$$

A Hamilton-operátor várható értéke, azaz a részecske energiája nemrelativisztikus sebes-

ségű mozgások esetén az mc^2 nyugalmi energia nagyságrendjébe esik: $\overline{\hat{H}_D} \sim mc^2$, ezért

$$\overline{\Omega} \sim \frac{2mc^2}{\hbar}. \quad (2.44)$$

Helyettesítsük be az elektron nyugalmi energiája $mc^2 \sim 0,5 \text{ MeV}$ és a Planck-állandó $\hbar \sim 10^{-34} \text{ Js}$ értékét, így megbecsülhetjük a ZB frekvenciáját:

$$\overline{\Omega} \sim 10^{21} \text{ Hz}. \quad (2.45)$$

A ZB amplitudója a (2.22) képlet alapján a részecske V sebessége és az Ω frekvencia hányadosával becsülhető:

$$A \sim \frac{V}{\Omega} \sim \frac{c}{\Omega} = \frac{\hbar}{mc} = \lambda_C \sim 2 \cdot 10^{-13} \text{ m} \sim \text{H-atomméret} / 1000. \quad (2.46)$$

A kapott frekvenciaérték túl nagy, a Compton-hullámhossz nagyságrendjébe eső amplitudó pedig túlságosan kicsi ahhoz, hogy kísérletileg észlelni lehessen. Ez az oka annak, hogy komoly formában sohasem merült fel a ZB kísérleti kimutatása.

Ezért váltott ki nagy érdeklődést, amikor a 2000-es évek elején a hagyományos, Schrödinger-féle ZB-hoz hasonló jelenség létezésére következtettek egyes szilárdtestfizikai és mezoszkopikus rendszerekben. E jelenségek esetén a képletek ugyanis hasonlóak, de a paraméterek több nagyságrenddel eltérnek a Schrödinger-féle ZB esetétől. Így a jelenség esetleg a kísérletileg tanulmányozható tartományba csúszhat.

2.6. A ZB mint az egyrészecske-QM határa

A Zitterbewegung jelenségét szemléletesen úgy képzelhetjük el, mintha a részecske a klasszikus fizika szerinti $\mathbf{x}_0 + \mathbf{V}t$ egyenes vonalú egyenletes mozgás által meghatározott pillanatnyi helyzete körül egy kicsiny (Compton-hullámhossznyi) amplitudójú, nagy frekvenciájú rezgést végezne. A pálya tehát egy dugóhúzóhoz, a klasszikus egyenesre mint tengelyre rátekeredő spirálhoz hasonlít. Ilyen spirál persze sok van, hogy melyik valósul meg, az a kezdőfeltételtől, kvantumelméletben a $|\psi(0)\rangle$ kezdeti hullámfüggvénytől függ.

Hogyan lehetne eldönteni, hogy éppen melyik spirál valósul meg? Meg kell határozni az elektron helyzetét, a spirál sugaránál, azaz a ZB amplitudójánál kisebb bizonytalansággal.

Ennél a pontnál szól közbe a kvantumelmélet egyik alapvető összefüggése, a Heisenberg-féle határozatlansági reláció. Most csak nagyságrendi becslésekre használjuk, tehát a következő „számításokat” nem szabad túlságosan komolyan venni.

Ha egy részecske helyzetét Δx pontossággal szeretnénk meghatározni, ez a határozatlansági reláció miatt $\Delta p \sim \hbar/\Delta x$ nagyságú impulzus-bizonytalansághoz vezet.

Ennek következtében viszont (nemrelativisztikus részecske esetén) $\Delta E \sim (\Delta p)^2/m \sim \hbar^2/m(\Delta x)^2$ nagyságú energia-bizonytalanság lép fel. Pongyolán fogalmazva: ha a részecskét Δx méretű helyre akarjuk lokalizálni, a fenti ΔE nagyságrendű energiát kell befektetnünk.

Helyettesítsük be most a Δx méret helyébe a ZB amplitudóját, azaz a Compton-hullámhosszt:

$$\Delta x \sim \lambda_C = \frac{\hbar}{mc}.$$

Ekkor a befektetendő

$$\Delta E \sim \frac{\hbar^2}{m \left(\frac{\hbar}{m c}\right)^2} \sim m c^2 \quad (2.47)$$

energia eléri a részecske $E_0 = m c^2$ nyugalmi energiájának nagyságrendjét. Ekkora energia-befektetés viszont részecske–antirészecske párok keletkezéséhez vezet. Amikor tehát az elektront a Zitterbewegung finom részleteinek vizsgálata céljából a Compton-hullámhossznál pontosabban szeretnénk lokalizálni, óhatatlanul elmoszuk a vizsgált részecske egyediségét, hiszen az eredeti részecskével azonos új részecskék (és antirészecskék) jelennek meg. Ezek leírására azonban már nem alkalmas a kvantummechanika, a kvantumtérelmélet formalizmusát, keltő és eltüntető operátorokat kell(ene) bevetnünk. Röviden szólva tehát: a Compton-hullámhossz az egyrészecske-quantummechanika alkalmazhatóságának méretbeli alsó határa. Nem csak kísérletileg nehéz, hanem elméletileg is lehetetlen tehát az elektront a ZB spiráljának egyes részei mentén lokalizálni.

A most ismertetett érvelés szerint a Zitterbewegung „jelensége”, annak formális felbukkanása a relativisztikus elektron Dirac-elméletében egyszerűen az elmélet határait utal: az elektron ténylegesen elmosódott, helye objektíve határozatlan a Compton-hullámhossznál kisebb tartományokban. A klasszikus végtelenül vékony egyenes részecskepálya fogalmát tehát egy „bolyhos”, kb. λ_C vastagságú „rúddal” kell pótolnunk. Ezen belül az elektron helyének keresése értelmetlen. A Zitterbewegung jelensége tehát műtermék, azért lép fel, mert olyasmit kérdezzünk (az elektron helyoperátorát az elméletileg lehetséges pontosságon túl), amit nem lenne szabad.

Ez az ideológia igen megnyugtatónak tűnik, el is fogadták hét évtizedig. Kisebb fizikuscsoportok próbálkoztak csak a ZB további értelmezésével (pl. [3]), de igen messze a kutatás főáramától.

Az ideológiai megnyugtató persze nem teljes körű, felmerülhet néhány további kérdés. Vajon miért csak a fermionok relativisztikus elméletében lép fel ez a helyoperátort korlátozó jelenség? Van-e ZB a zérus spinű részecskéket leíró Klein–Gordon-egyenlet vagy a tömeges vektormezonok relativisztikus egyenlete esetén? Mi a helyzet a zérus tömegű relativisztikus objektumok, pl. a foton egyenletével – hiszen ebben az esetben a Compton-hullámhossz nem is értelmezhető?

Ha alaposan követjük a fentebb vázolt számítást, vagy inkább becslést, láthatjuk, hogy az összes negatív következtetés egyetlen kritikus számadatra vezethető vissza. Ez pedig a ZB (2.44), azaz (2.45) frekvenciája, amely viszont a pozitív és negatív energiájú állapotokat elválasztó $2 m c^2$ energiakülönbségből, gap-ból határozható meg. Ha a gap kisebb lenne, a ZB amplitudója sokkal nagyobb lenne a Compton-hullámhossznál, a részecske–antirészecske párok keletkezésére vezető gondolatmenet értelmetlenné válna.

A Dirac-egyenlet (és a többi relativisztikus hullámeqyenlet) esetén természetesen a gap nagysága adott, hiszen azt a (2.1) relativisztikus energiaképlet határozza meg. A ZB „módosításának” igénye vagy lehetősége tehát fel sem merülhet.

A 2000-es évek elején ezért keltett feltűnést, amikor szilárdtestfizikai rendszerekben a ZB-hoz hasonló jelenség létezésnek lehetősége bukkant fel [25] – de nagyságrendileg más paraméterekkel: jóval kisebb volt a gap és a fénysebesség helyébe lépő paraméter értéke is. Talán a ZB mégis szorosan összekötve a relativitáselmélettel és a relativisztikus $2 m c^2$ gap-pel? Ez esetben a Zitterbewegung nem az elmélet határát jelölné ki, hanem új, esetleg észlelhető jelenségek felé nyitna kaput. Látni fogjuk, hogy valóban ez a helyzet.

3. rész

ZB kvázi-mágneses kvázispin-rendszerekben

3.1. Kvázispin állandó kvázi-mágneses térben

A következőkben megvizsgálunk egy sor szilárdtestfizikai és nanofizikai modellrendszert. Látni fogjuk, hogy e rendszerek Hamilton-operátora közös alakra hozható. Ehhez az alakhoz az állandó külső mágneses térben mozgó S spinű pontrészcseke szolgáltatja a mintát.

Mozogjon egy m tömegű, μ mágneses dipólmomentumú pontrészcseke térben és időben állandó \mathbf{B} mágneses mezőben! A rendszer Hamilton-operátora (mivel csak egyszerű modelltől van szó, a diamágneses, \mathbf{B}^2 -tel arányos tagot, valamint a pályamomentum és a mágneses tér kölcsönhatását elhanyagoljuk):

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \hat{\mu} \mathbf{B} . \quad (3.1)$$

A $\hat{\mu}$ mágneses momentum operátora a fenti feltevések alapján arányos a spin $\hat{\mathbf{S}}$ operátorával. Az arányossági tényezőt beolvaszthatjuk a mágneses tér \mathbf{B} vektorába, a kapott vektort jelöljük $-\Omega$ -val. A spin operátora nem a \mathcal{H}_0 Hilbert-téren, hanem egy véges, $2S+1$ dimenziós komplex euklideszi téren hat, ezért a továbbiakban nem teszünk rá operátor-kalapot.

Tegyük meg egy általánosítási lépést, és engedjük meg, hogy a részecske kinetikus energiája a \mathbf{p} impulzusnak a klasszikus mechanikában megszokottnál általánosabb $\varepsilon(\mathbf{p})$ függvénye legyen! Ekkor a Hamilton-operátor a következő alakú lesz:

$$\hat{H} = \hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}}) + \mathbf{S} \Omega . \quad (3.2)$$

Ebben a formulában $\hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}})$ mellé természetesen oda kell érteni a $(2S+1) \times (2S+1)$ -es \mathbb{I}_{2S+1} egységmátrixot, hiszen csak így adható hozzá a spinmátrixokhoz. Az egységmátrixot a továbbiakban nem írjuk ki, hiszen a félreértés veszélye nem áll fenn.

A (3.2) Hamilton-operátor nem függ a hely $\hat{\mathbf{x}}$ operátor-vektorától, ezért kommutál az impulzus $\hat{\mathbf{p}}$ operátorával. Az impulzus így mozgásállandó, a mozgás vizsgálata során tehát szorítkozhatunk a Hilbert-tér egy-egy impulzus- (és így egyben energia-) sajátalterére. Eme alterekben a $\hat{\mathbf{p}}$ operátor \mathbf{p} sajátértékével pótolható. E megfigyelés alapján a (3.2) Hamilton-operátor még egy lépésben általánosítható: feltehetjük, hogy az Ω (kvázi-)mágneses tér függ a \mathbf{p} impulzustól. Ez a feltevés egy-egy rögzített \mathbf{p} érték esetén nem befolyásolja a mozgásokat, csak akkor válik lényegessé, ha a különböző \mathbf{p} értékekhez tartozó sajátalterekben kapott eredményeket szuperponálni akarjuk.

Megkaptuk tehát a (3.1) egyszerű és fizikailag plauzibilis Hamilton-operátor nagymértékben általánosított, de számos matematikai sajátosságát őrző alakját:

$$\hat{H} = \hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}}) + \hat{\Omega}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{S} . \quad (3.3)$$

A következőkben meg fogjuk mutatni, hogy a (3.3) képlettel leírható Hamilton-operátorok osztálya

- magában foglalja a szilárdtestfizikában, a nanofizikában és a mezoszkópikus fizikában felbukkant számos modellrendszer Hamilton-operátorát, köztük majdnem mindegyiket azok közül, amelyekkel kapcsolatban a Zitterbewegung felléptének gyanúja vagy lehetősége felmerült;
- az osztályba tartozó rendszerek mindegyike esetén valóban fellép a Zitterbewegung;
- a helyoperátor Heisenberg-képbeli időfüggése a (3.3) alakból kiindulva mindezen esetekben egységesen, egzaktul, zárt alakban meghatározható;

- az így kapott eredmények valamennyi esetben visszaadják (egyes esetekben korrigálják) az irodalomban korábban közölt eredményeket.

Vizsgáljuk először a 2×2 -es mátrixszal leírható (azaz a $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathbb{C}^2$ Hilbert-téren ható) legáltalánosabb kvázi-szabad Hamilton-operátort! Mostantól fogva *kvázi-szabadnak* fogunk nevezni egy rendszert, ha Hamilton-operátora csak a $\hat{\mathbf{p}}$ impulzusoperátortól függ, azaz nem függ az $\hat{\mathbf{x}}$ helyoperátortól. (Ez a rendszer \mathbf{x} -térbeli transláció-invarianciáját jelenti. A *kvázi-szabad* fogalom felléptének okával és fizikai jelentésével a 3.2 fejezetben foglalkozunk részletesebben.) Az ilyen Hamilton-operátor legáltalánosabb alakja:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{11}(\hat{\mathbf{p}}) & \hat{H}_{12}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \hat{H}_{21}(\hat{\mathbf{p}}) & \hat{H}_{22}(\hat{\mathbf{p}}) \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

A \hat{H}_{kl} mátrixelemek \mathcal{H}_0 -on (pl. \mathcal{L}^2 -n) ható operátorok. A hermiticitás követelménye miatt ki kell elégíteniük a következő relációkat:

$$\hat{H}_{11} = \hat{H}_{11}^+, \quad \hat{H}_{22} = \hat{H}_{22}^+, \quad \hat{H}_{21} = \hat{H}_{12}^+. \quad (3.5)$$

Közismert, hogy a 2×2 -es hermitikus mátrixok körében a σ^k Pauli-mátrixok (nulladik Pauli-mátrixnak az egységmátrixot tekintve) bázist alkotnak. Minden 2×2 -es hermitikus mátrix, köztük a (3.4) Hamilton-operátor is kifejezhető e mátrixok szerint. Vezessük be rögtön az $S = 1/2$ spin szokásos operátorait:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad \text{ahol } \boldsymbol{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3).$$

Ezzel

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \begin{pmatrix} \hat{H}_{11} & \hat{H}_{12} \\ \hat{H}_{21} & \hat{H}_{22} \end{pmatrix} = \frac{\hat{H}_{11} + \hat{H}_{22}}{2} \mathbb{I} + \frac{\hat{H}_{12} + \hat{H}_{21}}{\hbar} S^1 + \frac{\hat{H}_{21} - \hat{H}_{12}}{i\hbar} S^2 + \frac{\hat{H}_{11} - \hat{H}_{22}}{\hbar} S^3 = \\ &= \hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbb{I} + \hat{\Omega}_k(\hat{\mathbf{p}}) S^k = \hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbb{I} + \hat{\boldsymbol{\Omega}}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{S}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

ahol az $\hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}})$ mennyiséget és az $\hat{\boldsymbol{\Omega}}(\hat{\mathbf{p}})$ vektor komponenseit az utolsó egyenlőség definiálja. Az eredmény megegyezik a korábban megkapott (3.3) formula $S = 1/2$ esetre specializált alakjával.

Megmutattuk tehát, hogy a legáltalánosabb (3.4) alakú 2×2 -es Hamilton-operátor felírható a (3.3) alakban. A továbbiakban ezért a (3.3) alakú Hamilton-operátorok esetén vizsgáljuk a Zitterbewegung fellépését. Felhívjuk azonban a figyelmet arra, hogy $S > 1/2$, azaz 2×2 -esnél nagyobb mátrixok esetén a spinoperátorok már nem alkotnak bázist a hermitikus mátrixok terében, ezért nem minden hermitikus Hamilton-operátor írható (3.3) alakba. A még általánosabb Hamilton-operátorokat a dolgozat 4. részében vizsgáljuk. Az irodalomban előforduló legtöbb eset mindazonáltal belefér a most tárgyalt kategóriába (lásd a 3.2 fejezetet).

E rendszerek Hamilton-operátora formailag hasonlít a jelen szakasz elején bemutatott egyszerű példához, az állandó mágneses térben mozgó, S spinű részecskéhez. A szerteágazó fizikai példák során azonban látni fogjuk, hogy a többkomponensű hullámfüggvénnyel leírt több szabadsági fok fizikailag általában nem spint jelent, az $\boldsymbol{\Omega}$ vektorral leírt mennyiség sem mágneses tér, hanem az $\boldsymbol{\Omega}$ vektor \mathbf{p} -függése miatt – általában közvetetten – maga az impulzus, így az $\hat{\boldsymbol{\Omega}}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{S}$ kifejezés egy általánosított spin-pálya csatolást jelent. A fentiek miatt a (3.3) Hamilton-operátorokkal leírt rendszerekre mint *kvázi-mágneses térben mozgó*

kvázi-spinre hivatkozunk. Hamarosan megmutatjuk, hogy a Zitterbewegung jelensége minden rendszerekben fellép, és egységesen tárgyalható.

3.2. Szilárdtestfizikai és nanofizikai modellrendszerek

E fejezetben megvizsgáljuk, miért, milyen feltevések és/vagy közelítések kövekeztében lépnek fel nagy számban a szilárdtestfizikában és nanofizikában a (3.3) alakú Hamilton-operátorral leírható modell-rendszerek. Az 5. részben részletesen megvizsgálunk jónéhány kvantummodell, és ott az 5.5 fejezetben táblázatos formában is bemutatjuk az irodalomban szereplő legfontosabb, a „kvázi-mágneses térben mozgó kvázispin” kategóriába beillő fizikai rendszereket.

3.2.1. Szabad és kvázi-szabad Hamilton-operátorok a szilárdtestfizikában és a nanofizikában

A dolgozat 2. részében a Schrödinger által eredetileg felfedezett Zitterbewegung jelenségét vizsgáltuk. Itt definíció szerint szabad, külső erőhatás nélkül mozgó fermionikus részecskéről volt szó, amelyet a szabad Dirac-egyenlet írt le.

Szabad részecskén általában külső erőhatás nélkül mozgó objektumot értünk. A pontosabb definíció szerint a szabad mozgások megvalósítják az aktuális elmélet kinematikai szimmetriacsoportjának (a klasszikus fizikában ez a Galilei-, a speciális relativitáselméletben pedig a valódi Poincaré-csoport) egy ábrázolását. Más szavakkal egy objektum összes szabad mozgásállapota az állapottéren ható szimmetriacsoport egyetlen orbitját alkotja. Ismét másképp fogalmazva: egy (inerciális) megfigyelő által adott szabadon mozgó állapotban látott objektumot egy hozzá képest megfelelően mozgó másik (szintén inerciális) megfigyelő *akármelyik* másik szabad állapotban találhatja.

Mind a klasszikus, mind a speciális relativisztikus szabad mozgás esetén az előbbi definícióból egyértelműen levezethető a szabad részecske hatásintegráljának, illetve Lagrange-függvényének lehetséges alakja. Ennek alapján meghatározható a Hamilton-függvény (pl. a (2.1) relativisztikus energiaképlet), illetve (további csoportelméleti és ábrázoláselméleti lépések után) a kvantummechanikai tárgyalás alapjául szolgáló Hamilton-operátor, pl. a feles spinű részecskék (2.2) Dirac-féle Hamilton-operátora.

A *szabad* mozgás fenti definíciói közvetlenül nem vihetők át a szilárd testekben mozgó elektronokra. Itt nem érvényes az egymáshoz képest állandó sebességgel mozgó inerciális rendszerek ekvivalenciája, hiszen létezik egy kitüntetett koordinátarendszer, amelyben a vizsgált szilárd test nyugalomban van. Az atomok kristályrácsbeli elrendeződése miatt a rendszer forgásinvarianciája sem áll fenn, a vákuumbeli szabad mozgás translációs invarianciacsoportja pedig részcsoporthoz, a rácsvektorokkal való eltolások diszkrét csoportjára csönkül (ez a szimmetria is csak akkor áll fenn, ha a rács méretét végtelennek tekintjük, és ezzel elhanyagoljuk a felületi és végesméret-effektusokat). Azt sem mondhatjuk, hogy a kristályrácsban mozgó elektron a szó eredeti, köznapi értelemben szabad részecske lenne, amelyre nem hat erő – a rácsban az elektronok az atommagok és egymás igen bonyolult, atomnyi távolságon is erősen változó elektromos térben, és a többi részecske mozgása, valamint spinmomentuma által keltett mágneses térben mozognak.

A szilárdtestfizika szokásos apparátusa a sáv szerkezet felfedezésével ennek a kérdésnek igen elegáns megoldását nyújtja. Az ideális (végtelen, rácshibáktól és szennyezésektől mentes, a rácsmozgások fonon-szabadsági fokainak elhanyagolása után szigorúan periodikusnak

tekinthető) rács az elektronok számára egy bonyolult, ám szigorúan periodikus potenciálteret szolgáltat. Az elektronok egymással való kölcsönhatását elhanyagolva az egyrészecke-kvantummechanika módszerei alkalmazhatók: egyetlen elektron hullámfüggvényét kell megkeresni a periodikus potenciáltérben. A $\hat{H}_0(\mathbf{p}, U(\mathbf{x}))$ egyelektron-Hamilton-operátor tehát a kinetikus energián felül a szigorúan periodikus $U(\mathbf{x})$ rácspotenciált tartalmazza. A sávméret a \hat{H}_0 Hamilton-operátor periodicitását, azaz diszkrét eltolási invarianciáját kihasználva Bloch-hullám megoldásokat keres (és talál) a szilárdtestben mozgó elektron Schrödinger-egyenletének megoldásául, amelyeket egy impulzus-jellegű mennyiséggel, a (folytonos vektoriális értékeket felvevő) \mathbf{p}' kváziimpulzussal jellemez. Emellett megjelenik egy diszkrét n index, amely a lehetséges sávokat, azaz a Hamilton-operátor azonos kváziimpulzus-vektorhoz tartozó különböző sajátfüggvényeit indexeli. A sávindex általában végtelen sok különböző értékeket vehet fel, a gyakorlati számolásokhoz azonban csak véges sok értékre van szükség.

Ennek magyarázatához túl kell lépni az eddig alkalmazott egyrészecke-kvantummechanikán, és a sokrészecke-fizika apparátusát kell bevetni. Ennek egyik legfontosabb eredménye a Pauli-elv, mely szerint egy állapotban egyszerre csak egy fermion tartózkodhat. A Pauli-elvre alapozva (és egy pillanatra ismét figyelembe véve a rendszer, azaz a vizsgált kristály – atomokhoz képest hatalmas, de mégis csak – véges méretét, ezzel a jelenlévő elektronok véges számát) kiépíthető a sáv szerkezet szokásos elmélete, amely szerint az alacsonyabb energiájú állapotok mind be vannak töltve, a magasabb energiájúak mind üresek, ezért az elektronok dinamikai folyamatai csak a Fermi-energia körüli néhány (extrém esetben csak két) energiasávra korlátozódnak. Így a sávindex a dinamikai számításokban csak véges sok (általában igen kevés) értéket vehet fel.

A (\mathbf{p}' helyett mostantól egyszerűen \mathbf{p} -vel jelölt) kváziimpulzus mint az energiasajátállapotok egyik indexe természetesen mozgásálló. A \mathbf{p} vektor értékei csak egy Brillouin-zónán belül jelölnek ki új állapotokat, a további zónák fizikailag ugyanazokat az állapotokat ismétlik. Ezért a kváziimpulzus fogalmilag élesen különbözik a szabad részecske szokásos impulzusától. A kváziimpulzus-térben lokálisnak tekinthető (azaz a Brillouin-zóna méretéhez képest elhanyagolható különbségű kváziimpulzus-vektorokat tartalmazó) folyamatok esetében azonban lényegében a szokásos impulzusvektorhoz hasonlóan kezelhető. Emellett \mathbf{p} a közönséges impulzushoz hasonlóan felcserélhető a Hamilton-operátorral, azaz az állapottér a kváziimpulzus-téren értelmezett többkomponensű függvények terének tekinthető, a Hamilton-operátor sajátvektorai pedig a kváziimpulzus-tér egyes pontjaira koncentráltak. Ennyiben a szilárdtestekben mozgó elektronok kvantumelméleti leírása rokon a többkomponensű hullámfüggvénnyel leírt (pl. nem nulla spinű) szabad részecskék elméletével. A szabad részecskék energiájának nemrelativisztikus $\mathbf{p}^2/2m$, illetve relativisztikus (2.1) képletét viszont a szilárdtestekben az egyes sávok állapotainak kváziimpulzusa és energiája közti nemtriviális, a Bloch-egyenletek megoldásával meghatározható $\varepsilon_n(\mathbf{p})$ diszperziós relációk váltják fel. Ezek az energiaképletek viszont úgy tekinthetők, mintha egy formális, csak a kváziimpulzustól függő, ezért azzal kommutáló $\hat{H}'(\mathbf{p})$ Hamilton-operátor sajátértékeit adnák meg. E fiktív Hamilton-operátor nem függ az $\hat{\mathbf{x}}$ helyoperátortól, a koordinátatérben eltolásinvariáns, sajátfüggvényei pedig a bonyolult helyfüggésű Bloch-függvények helyett egyszerű \mathbf{p} impulzusú síkhullámok. Az eredeti, periodikus potenciált, viszont egyszerű kinetikus energiát tartalmazó helyoperátor spektruma megegyezik a helyfüggetlen, viszont sávonként más és más $\varepsilon_n(\mathbf{p})$ diszperziós relációval jellemezhető fiktív $\hat{H}'(\mathbf{p})$ Hamilton-operátoréval. A fiktív \hat{H}' Hamilton-operátor \mathbf{p} -ben diagonális, az egyes \mathbf{p} -altérbeli sajátértékeit éppen az $\varepsilon_n(\mathbf{p})$ diszperziós relációk adják meg. Az eredetileg *szabadnak* semmiképp sem nevezhető elektronok energiaviszonyait jól szimuláló, a koordinátatérben eltolásinvariáns fiktív $\hat{H}'(\mathbf{p})$ Hamilton-operátort *kvázi-szabadnak* nevezzük.

A szilárdtestfizika egyik alapfeladatát, az elektronok mozgásának leírását (a fentebb részletezett közelítésekkel és elhanyagolásokkal) az ismertett eljárás – elvileg – kielégítően megoldja. A gyakorlatban előforduló esetekben azonban a Bloch-függvények meghatározása, és így az $\varepsilon_n(\mathbf{p})$ energiaspektumok kiszámítása igen nehéz számítási feladattal járhat. Ráadásul nincs is szükség a probléma teljes megoldására, hiszen a teljesen betöltött, valamint az igen magasan fekvő, ezért a szokásos gerjesztési energiákkal elérhetetlen energiaszintek a hétköznapi folyamatokban nem játszanak szerepet. Célszerű tehát a rendszer – elvileg – egzakt effektív $\hat{H}'(\mathbf{p})$ Hamilton-operátort egy újabb, közelítő Hamilton-operátorral pótolni, amely a Fermi-energia környékén jól közelíti a diszperziós reláció energiafelületét, de nem tartalmaz felesleges, nehezen kezelhető információkat. A szilárdtestfizika jól kidolgozott módszerekkel rendelkezik az ilyen „még effektívebb” $\hat{H}''(\mathbf{p})$ Hamilton-operátorok konstrukciójára. A $\hat{H}''(\mathbf{p})$ operátor természetesen továbbra is a kváziimpulzus függvénye, és nem tartalmazza a helyoperátort. Matriként viszont már általában nem diagonális: úgy építik fel, hogy egy adott \mathbf{p} impulzus-érték esetén (két vagy több) sajátértéke megegyezzen a diszperziós reláció által adott (két vagy több) $\varepsilon_n(\mathbf{p})$ energia-sajátértékekkel.

A fenti logikai lépéseken, közelítéseken, elhanyagolásokon és feltételezéseken végighaladva kapjuk a szilárdtestfizikában és a nanofizikában használt modell-Hamilton-operátorok egy jellegzetes osztályát: véges (a legtöbb esetben csak 2×2 -es) mátrixszal leírható, ám a \mathbf{p} kváziimpulzustól függő Hamilton-mátrixot. Ha a mátrix 2×2 -es, máris a 3.1 fejezetben szereplő (3.4) operátor áll előttünk, amelyet kis átalakítással a (3.3) alakra tudtunk hozni.

Nagyobb mátrixok esetén a spinoperátorok nem alkotnak bázist a hermitikus mátrixok lineáris terében, ezért az előbbi gondolatmenet nem feltétlenül vezet el a (3.3) alakú operátorokhoz. Az általánosabb esetben fellépő (4.2) operátorok és a ZB kapcsolatát a dolgozat 4. részében tárgyaljuk. Mindazonáltal a 2×2 -esnél nagyobb mátrixszal leírható modell-Hamilton-operátorok körében is gyakori a (3.3) alakra hozható eset.

A fenti gondolatmenet nem az egyetlen, amely a (3.3) alakú Hamilton-operátorokat eredményezi. A sávindeken kívül felléphet másfajta, véges értékészlettel leírható szabadsági fok is, például:

- figyelembe vehetjük a részecske spinjét, mint extra szabadsági fokot (ez általában az elektron $1/2$ spinjével egyezik meg, de egyes esetekben, pl. az 5.6 fejezetben tárgyalandó Luttinger-modellben $3/2$ spinű kvázirészecskék jelennek meg), a Hamilton-operátor új mátrixelemei ebben az esetben a spin-pálya-kölcsönhatást képviselik;
- egy bonyolult elemi cellájú rács nem ekvivalens helyzetű atomjai extra szabadsági fokot jelentenek, a két alrács közti csatolás jelenik meg új tagként a Hamilton-operátorban (lásd az 5.2 fejezetben tárgyalandó, hatszöges rácsú grafén esetét);
- a két párhuzamos atomrácsból álló kétrétegű grafén esetében (lásd az 5.8 fejezetben) az új tagok a két párhuzamos rács közti kölcsönhatást írják le.

A fenti esetek külön-külön és együtt is előfordulhatnak. Az utóbbi esetben mindegyik opció figyelembe vétele megsokszorozza (általában duplázza) a szabadsági fokokat, azaz az adott kváziimpulzus-értékhez tartozó altér dimenzióját, az azonos \mathbf{p} értékhez tartozó energia-sajátértékek számát. Ugyanannak a rendszernek az egyik modellje figyelembe vehet, egy másik modellje pedig elhanyagolhat bizonyos kölcsönhatásokat, így ugyanazt a rendszert különböző méretű mátrixokkal is megpróbálhatjuk leírni. Pl. a kétrétegű grafén leírására 2×2 -es és 4×4 -es mátrixú modellek is forgalomban vannak, ráadásul ezek egyike sem vesz tudomást a spin szabadsági fokról, tehát elvileg még nagyobb dimenziójú modellek felbukkanása is várható. Azonos rendszer különböző modelljeinek közvetlen összehasonlítása nem

mindig lehetséges, ilyenkor érdemes a modellek alapján levezethető integrális mennyiségeket (pl. a rendszer vezetőképességét vagy egyéb transzport-jellemzőit) összevetni egymással és a mérési adatokkal.

Megállapíthatjuk tehát, hogy a szilárdtestfizikában gyakran, olykor automatikusan, a részletek pontos végig gondolása és kifejtése nélkül alkalmazott megfontolások és közelítések igen sokszor vezetnek el olyan egyszerű modellekhez, amelyek Hamilton-operátora a 3.1 fejezetben szereplő (3.3), illetve a később tárgyalandó általánosabb (4.2) alakra hozható.

A szilárdtestfizikai irodalomban szereplő számos modell Hamilton-operátora hozható tehát a (3.3) alakra. Érdemes tehát az ilyen rendszerek tulajdonságait általános formában, a (3.3) Hamilton-operátorból kiindulva tanulmányozni. A következő fejezetekben látni fogjuk, hogy e rendszerek mindegyikében fellép a Zitterbewegung jelensége, amely e módszerrel általános formában tárgyalható.

3.3. Mozgásegyenletek

Induljunk ki a (3.3) képletben szereplő

$$\hat{H} = \hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbb{I} + \hat{\Omega}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{S} \quad (3.7)$$

Hamilton-operátorból, és vezessük le a Heisenberg-képbeli mozgásegyenleteket!

A mozgásegyenleteket a vizsgált mennyiség operátora és a Hamilton-operátor kommutátora szolgáltatja, ezért szükségünk van a szereplő mennyiségek kommutátoraira. Az alapvető dinamikai mennyiségek kommutátorai a szokásosak:

$$[\hat{p}_k, \hat{x}_l] = \frac{\hbar}{i} \delta_{kl} \mathbb{I}, \quad [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = \mathbb{O}, \quad [\hat{x}_k, \hat{x}_l] = \mathbb{O}. \quad (3.8)$$

Az \mathcal{L}^2 -n ható operátorok és a \mathbb{C}^2 -n ható mátrixok kommutálnak:

$$[\hat{p}_k, S_l] = \mathbb{O}, \quad [\hat{x}_k, S_l] = \mathbb{O}. \quad (3.9)$$

A spinmátrixok kommutátorai a szokásos $SU(2)$ algebrát követik:

$$[S_k, S_l] = i \hbar \epsilon_{klm} S_m. \quad (3.10)$$

E relációk felhasználásával számíthatjuk ki a fizikai mennyiségek időderiváltjait. Első lépésként ismét megállapíthatjuk, hogy az impulzus $\hat{\mathbf{p}}$ operátora kommutál a Hamiltonnal, ezért mozgásállandó (a továbbiakban \mathbb{O} helyett egyszerűen 0-t írunk):

$$\frac{d}{dt} \hat{p}_k = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_k] = -\frac{\widehat{\partial H}}{\partial x_k} = 0. \quad (3.11)$$

A következő kiszámítandó mennyiségek az $\hat{\mathbf{x}}$ helyoperátor-vektor deriváltjának, a $\hat{\mathbf{v}}$ sebességoperátor-vektornak komponensei:

$$\begin{aligned} \hat{v}_k &= \frac{d}{dt} \hat{x}_k = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}_k] = \frac{i}{\hbar} [\hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbb{I} + \hat{\Omega}_l(\hat{\mathbf{p}}) S_l, \hat{x}_k] = \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}}), \hat{x}_k] + \frac{i}{\hbar} [\hat{\Omega}_l(\hat{\mathbf{p}}), \hat{x}_k] S_l. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Használjuk ki a tetszőleges \hat{A} operátorra érvényes

$$[\hat{A}(\hat{\mathbf{p}}), \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{A}}{\partial p_k} \quad (3.13)$$

összefüggést:

$$\hat{v}_k = \frac{\partial \hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}})}{\partial p_k} \mathbb{I} + \frac{\partial \hat{\Omega}_l(\hat{\mathbf{p}})}{\partial p_k} \hat{S}_l . \quad (3.14)$$

Vezessük be az átlagsebesség komponens-operátorait:

$$\hat{V}_k = \frac{\partial \hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}})}{\partial p_k} , \quad (3.15)$$

és az $\hat{\Omega}(\mathbf{p})$ kvázimágneses tér derivált-mátrixát:

$$\hat{K}_{kl}(\hat{\mathbf{p}}) = \frac{\partial \hat{\Omega}_l(\hat{\mathbf{p}})}{\partial p_k} . \quad (3.16)$$

Ezekkel a jelölésekkel a sebesség operátora:

$$\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{V}}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbb{I} + \hat{\mathbf{K}}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbf{S} . \quad (3.17)$$

ahol a második tagban a $\hat{\mathbf{K}}$ mátrix és az \mathbf{S} vektor mátrixszorzata áll.

A következő kiszámítandó mennyiség az \mathbf{S} spinoperátor komponenseinek deriváltja:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_k &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, S_k] = \frac{i}{\hbar} [\hat{\varepsilon}(\hat{\mathbf{p}}) \mathbb{I} + \hat{\Omega}_l(\hat{\mathbf{p}}) S_l, S_k] = \\ &= \frac{i}{\hbar} \hat{\Omega}_l(\hat{\mathbf{p}}) [S_l, S_k] = \frac{i}{\hbar} \hat{\Omega}_l(\hat{\mathbf{p}}) (i \hbar \epsilon_{lkm} S_m) = \\ &= -\epsilon_{lkm} \hat{\Omega}_l S_m = (\hat{\Omega} \times \mathbf{S})_k , \end{aligned} \quad (3.18)$$

azaz vektoros alakban:

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = (\hat{\Omega} \times \mathbf{S}) . \quad (3.19)$$

Ez az egyenlet a spin-precesszió szokásos egyenlete. Utólag látszik, miért volt érdemes Ω -val jelölni a megfelelő állandókkal beszorzott \mathbf{B} (kvázi-)mágneses teret, illetve a (3.3) operátorban felbukkanó vele analóg mennyiséget: $\hat{\Omega}$ a (kvázi-)Larmor-precesszió szögsebességének megfelelő operátor.

3.4. Kvázispin-precesszió

A kvázispin-precesszió (3.19) differenciálegyenlete megoldásának kiindulásaként vegyük figyelembe, hogy a $\hat{\mathbf{p}}$ impulzus, és így a tőle függő $\hat{\Omega}(\hat{\mathbf{p}})$ szögsebesség-operátor is mozgásállandó. Egy rögzített \mathbf{p} impulzus-sajátértékhez tartozó altérben tehát Ω -t állandó vektorként kezelhetjük. Bontsuk fel Ω -t abszolút értéke és egy \mathbf{n} egységvektor szorzatára:

$$\Omega(\mathbf{p}) = \Omega(\mathbf{p}) \mathbf{n}(\mathbf{p}) , \quad \Omega = |\Omega| , \quad |\mathbf{n}| = 1 . \quad (3.20)$$

Ezzel a jelöléssel a kvázispin-precesszió (3.19) egyenlete a következő alakú lesz:

$$\frac{d \mathbf{S}(t)}{dt} = \Omega (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) . \quad (3.21)$$

A (3.21) operátor-differenciálegyenlet-rendszerhez járuló kezdeti feltétel szerint az \mathbf{S} operátor kezdőértéke a Schrödinger-képbeli \mathbf{S}^0 spinoperátor:

$$\mathbf{S}(0) = \mathbf{S}^0 . \quad (3.22)$$

A fenti egyenletrendszer részletes megoldását a B. függelékben mutatjuk be. A kezdőfeltételhez illesztett megoldás, azaz a (kvázi-)spin-operátor Heisenberg-képbeli $\mathbf{S}(t)$ alakja a következő:

$$\mathbf{S}(t) = \mathbf{n}(\mathbf{nS}^0) + \sin \Omega t (\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0) + \cos \Omega t (\mathbf{S}^0 - \mathbf{n}(\mathbf{nS}^0)) . \quad (3.23)$$

A későbbiekben fontos lesz, ezért már most megjegyezzük, hogy az $\mathbf{S}(t)$ vektor (3.23) kifejezésének első, állandó tagja párhuzamos az \mathbf{n} egységvektorral, a másik két, időtől függő tagja pedig merőleges rá.

3.5. A helyoperátor meghatározása

Most már ismerjük az $\mathbf{S}(t)$ kvázispin-operátor (3.23) időfüggését. Az $\hat{\mathbf{x}}(t)$ helyoperátor meghatározása céljából ezt az alakot helyettesítsük be a $\hat{\mathbf{v}}(t)$ sebességoperátor (3.17) képletébe

$$\frac{d \hat{\mathbf{x}}(t)}{dt} = \hat{\mathbf{v}}(t) = \mathbf{V} \mathbb{I} + \mathbf{K} \mathbf{S}(t) , \quad (3.24)$$

majd integráljunk az idő szerint:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}(t) &= \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{V} t + \mathbf{K} \int_0^t \mathbf{S}(t') dt' = \\ &= \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{V} t + (\mathbf{K} \mathbf{n})(\mathbf{nS}^0) t + \frac{\sin \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} (\mathbf{S}^0 - \mathbf{n}(\mathbf{nS}^0)) + \\ &\quad + \frac{1 - \cos \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} (\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0) . \end{aligned} \quad (3.25)$$

A megjelenő $\hat{\mathbf{x}}(0)$ integrációs állandó megegyezik a Schrödinger-képbeli helyoperátorral, hiszen a kifejezés többi tagja a $t = 0$ pillanatban a 0 (azaz a zérus-operátor) értéket veszi fel.

Alakítsuk át a fenti kifejezés harmadik tagját:

$$(\mathbf{K} \mathbf{n})_k = K_{kl} n_l = \frac{\partial \Omega_l}{\partial p_k} \frac{\Omega_l}{\Omega} = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial (\Omega_l \Omega_l / 2)}{\partial p_k} = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial \Omega^2 / 2}{\partial p_k} = \frac{\partial \Omega}{\partial p_k} . \quad (3.26)$$

Ezt behelyettesítve megkapjuk a (3.3) Hamilton-operátorral leírt rendszer $\hat{\mathbf{x}}(t)$ hely-

operátorát:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \left(\mathbf{V} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n} \mathbf{S}^0) \right) t + \\ + \frac{\sin \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{S}^0 - \mathbf{n} (\mathbf{n} \mathbf{S}^0) \right) + \frac{1 - \cos \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0 \right). \end{aligned} \quad (3.27)$$

3.6. A megoldás értelmezése

A kapott megoldás értelmezése céljából válasszuk külön a (3.27) formula utolsó tagjában szereplő konstans vektort:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0 \right) + \left(\mathbf{V} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n} \mathbf{S}^0) \right) t + \\ + \left[\frac{\sin \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{S}^0 - \mathbf{n} (\mathbf{n} \mathbf{S}^0) \right) - \frac{\cos \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0 \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.28)$$

A fenti végeredmény a következő alakban tagonként értelmezhető:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{Y} + \mathbf{W} t + \mathbf{C}(t), \quad (3.29)$$

ahol

- $\hat{\mathbf{x}}(0)$ a helyoperátor kezdeti értéke (megegyezik a Schrödinger-képbeli helyoperátorral);
- egy állandó eltolódás, shift:

$$\mathbf{Y} = \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0 \right) \quad (3.30)$$

- az állandó *driftsebesség* operátora:

$$\mathbf{W} = \mathbf{V} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n} \mathbf{S}^0) = \mathbf{V} + \mathbf{W}_a \quad (3.31)$$

amely a diszperziós relációból adódó (3.15) átlagsebesség mellett egy \mathbf{W}_a „anomális sebességet” is tartalmaz (az „anomális sebesség” kifejezést a szakirodalom más fizikai fogalomra is alkalmazza (lásd pl. [69] és [70]) – jelen dolgozatban, [B] cikkünk szóhasználatával egyezően ez a kifejezés mindig a driftsebességben megjelenő, a diszperziós relációból származó átlagsebességen felüli tagokat fogja jelölni, részletesebben lásd a 3.7 szakaszt);

- a tulajdonképpeni Zitterbewegung:

$$\mathbf{C}(t) = \left[\frac{\sin \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{S}^0 - \mathbf{n} (\mathbf{n} \mathbf{S}^0) \right) - \frac{\cos \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0 \right) \right] \quad (3.32)$$

Ω szögsebességgel oszcilláló tagokat tartalmaz.

Az „anomális sebesség” kivételével mindezek a tagok szerepeltek a Schrödinger-féle Zitterbewegung (2.23) formulájában is. A két kifejezés kapcsolatára és eltérésére még visszatérünk. Az anomális sebesség eredetéről szól a 3.7 fejezet.

Könnyen látható, hogy $\mathbf{Y} = -\mathbf{C}(0)$, azaz az állandó eltolódás éppen a rezgő tagok kezdőértékét állítja be.

Eredményünk szerint a (3.3) alakú Hamilton-operátorral leírható kvantumrendszerek mindegyikében fellép a Zitterbewegung, az eredeti Schrödinger-féléhez igen hasonló tagokkal, de a frekvencia és a rezgés amplitúdója rendszerfüggő, nem fejezhető ki a 2.5 fejezethez hasonlóan univerzális fizikai állandókkal. Így semmi alapunk sincs arra az évtizedeken át szokásos kijelentésre, hogy a Zitterbewegung mérhetetlenül kis amplitúdójú és mérhetetlenül nagy frekvenciájú, csak elméletileg érdekes mozgásforma, amely más interpretációban az egyrészecke-kvantummechanika határait jelöli ki. Ellenkezőleg, a szilárdtestek és nano-rendszerek tanulmányozása és modellezése során felmerült sokféle, a 3.2 fejezetben ismertett kvantum-modell (reális rendszerekhez illesztett) paramétereiből számított frekvencia- és amplitúdó-értékek jelentős része a ma vagy a közeljövőben mérhető tartományba esik. Az itt bemutatott általános Zitterbewegung tehát reális kvantummechanikai effektusnak tekinthető, és érdemes megvizsgálni, hogy jelenléte milyen következményekkel jár pl. a szilárdtestek transzportjelenségei területén. (E témával foglalkozik legújabb, a dolgozat összeállítása után elkészült cikkünk [C].)

Fejezetünk fő eredménye a (3.28) képlet, melyet az [A] cikkben publikáltunk. Formulánkat alkalmaztuk az 5.1 táblázatban szereplő rendszerek mindegyikére, és megkaptuk a helyoperátor konkrét alakját. Ezeket az eredményeket az 5. részben ismertetjük részletesebben. Ahol volt irodalmi előzmény, eredményünket összehasonlítottuk vele, és néhány algebrai átalakítás után általában tökéletes egyezést tapasztaltunk. Egyetlen esetben volt kisebb eltérés, ez a szerzőkkel levélben történt egyeztetés során az eredeti cikkbe bekerült sajtóhibának bizonyult [30].

3.7. Az anomális sebesség eredete

Az eredeti Schrödinger-féle ZB és a jelen részben tárgyalt kvázispin-rendszerekben fellépő Zitterbewegung közti egyedüli formai különbség a driftsebesség (3.31) képletében megjelenő második tag, az *anomális sebesség*. Járjunk utána, mi ennek a különbségnek az oka!

Térjünk vissza a kvázispin-precesszió (3.21) egyenletéhez! Az \mathbf{n} egységvektorral elvégzett vektoriális szorzás, mint lineáris operáció az A. függelék (A.49) képlete szerint egy gyengén involutórikus mátrixszal való szorzással is leírható.

$$\mathbf{n} \times \mathbf{w} = i M \mathbf{w} , \quad (3.33)$$

ahol M -re teljesül: $M^3 = M$.

E jelöléssel a (3.21) egyenlet így írható:

$$\frac{d \mathbf{S}(t)}{dt} = \Omega (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) = i \Omega M \mathbf{S}(t) . \quad (3.34)$$

E mátrix-differenciálegyenletnek a (3.22) kezdeti feltételt is kielégítő megoldása:

$$\mathbf{S}(t) = e^{i \Omega M t} \mathbf{S}^0 = R(\Omega t) \mathbf{S}^0 , \quad (3.35)$$

ahol $R(\varphi)$ az \mathbf{n} egységvektor mint tengely körüli φ szögű elforgatás operátora.

Az A. függelék (A.54) összefüggése szerint az így felírt eredmény valóban megegyezik a kvázispin-precesszió egyenletének megoldásául kapott (3.23) kifejezéssel.

Folytassuk most a helyoperátor meghatározásának 3.5 fejezetben leírt eljárását, de ne a (3.23), hanem a (3.35) megoldás alapján. A megoldást helyettesítsük be a $\hat{\mathbf{v}}(t)$ sebességoperátor (3.17) képletébe:

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}(t)}{dt} = \hat{\mathbf{v}}(t) = \mathbf{V}\mathbb{I} + \mathbf{K}\mathbf{S}(t) = \mathbf{V}\mathbb{I} + \mathbf{K} e^{i\Omega M t} \mathbf{S}^0 .$$

Ez a kifejezés erősen emlékeztet a Schrödinger-féle ZB sebességoperátorának (2.20) alakjára.

Integráljunk az idő szerint:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{V}t + \mathbf{K} \int_0^t e^{i\Omega M t'} \mathbf{S}^0 dt' . \quad (3.36)$$

Szükségünk van tehát a (3.35) megoldásban szereplő exponenciális mátrixfüggvény idő szerinti integráljára. A (2.22) kifejezés mintájára ezt kényelmes lenne a következő alakba írni:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{V}t + \mathbf{K} (e^{i\Omega M t} - 1) (i\Omega M)^{-1} \mathbf{S}^0 . \quad (***)$$

Csakhogy – szemben a Schrödinger-féle ZB (3.35) képletében szereplő $\hat{\Omega}$ operátorral – a (3.33) egyenlőséggel bevezetett M mátrixnak nem létezik az inverze, lévén valódi gyengén involutórikus operátor! Ez a körülmény okozza a két eset közti lényeges különbséget.

A (***) kifejezés tehát matematikailag értelmetlen. Értelmessé tehetjük, ha az M mátrix mint operátor értelmezési tartományát két altérre bontjuk: az egyik az M mátrix $+1$ és -1 sajátértékéhez tartozó alterek \mathbb{V}_0 direkt összege, a másik ennek komplementere, a 0 sajátértékhez tartozó sajátaltér, azaz az M magtere. Az előbbi, reguláris altérre megszorítva az M operátort már létezik M inverze (éppen megegyezik M -mel), azaz a (***) kifejezés helyes lesz, a magtéren viszont határátmenethez kell folyamodnunk. Az (***) formula utolsó tagjának formális $M \rightarrow 0$ határátmenettel (az exponenciális sorbafejtésével vagy operátor-l'Hospital-szabállyal) vett határértéke éppen t . Így jelenik meg a „rezgő” megoldások speciális eseteként az idővel lineárisan változó mennyiség.

A reguláris \mathbb{V}_0 altérre vetítő projektör – amely egyben ennek az altérnek egységoperátora – az A. függelék (A.29) képlete szerint éppen a $P = M^2$ operátor. Az M operátor exponenciális függvényének hatása alatt álló \mathbf{S}^0 vektort tehát a P projektör segítségével kell felbontanunk a \mathbb{V}_0 altérbe eső és arra merőleges komponensre:

$$\mathbf{S}^0 = I\mathbf{S}^0 = P\mathbf{S}^0 + (I - P)\mathbf{S}^0 = \mathbf{S}_r^0 + \mathbf{S}_m^0 , \quad (3.37)$$

ahol az r index a reguláris, az m index az M magterébe eső komponensre utal.

A reguláris \mathbb{V}_0 altéren a helyoperátor (3.36) képletében szereplő integrál olyan alakú lesz, mint a szimbolikus (***) képletben. Ezen az altéren létezik az M operátor inverze, de nem jelenik meg explicit módon, hiszen összevonható a mögötte álló $P = M^2$ operátorral, szorzatuk pedig $M^{-1}P = MP = M$ lesz:

$$\begin{aligned} \mathbf{K} \int_0^t \mathbf{S}_r(t') dt' &= \mathbf{K} \int_0^t e^{i\Omega M t'} \mathbf{S}_r^0 dt' = \mathbf{K} (e^{-i\Omega M t} - 1) (i\Omega M)^{-1} P \mathbf{S}^0 = \\ &= \mathbf{K} (e^{-i\Omega M t} - 1) (i\Omega)^{-1} M \mathbf{S}^0 . \end{aligned} \quad (3.38)$$

Helyettesítsük be a fenti képletbe az M operátor exponenciális függvényének (A.54) alakját, majd használjuk fel az M és P mátrixok szorzásának (A.21) és (A.27) szabályait:

$$\begin{aligned} \mathbf{K} \int_0^t \mathbf{S}_r(t') dt' &= \frac{1}{i\Omega} \mathbf{K} \left[(\cos(\Omega t) - 1) P + i \sin(\Omega t) M \right] M \mathbf{S}^0 = \\ &= \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} \left[(\cos(\Omega t) - 1) \frac{M}{i} + \sin(\Omega t) P \right] \mathbf{S}^0 . \end{aligned} \quad (3.39)$$

Ha most ide behelyettesítjük az M és P mátrixok (A.49) és (A.52) konkrét alakját, láthatjuk, hogy eredményünk megegyezik a (3.32) képletben szereplő Zitterbewegunggal: ez tehát a sebességoperátor időintegráljának az M operátor reguláris \mathbb{V}_0 alteréből származó része.

A \mathbb{V}_0 altér ortokomplementer terére, azaz az M operátor magjára vetítő projektor az (A.52) képlet szerint

$$I - P = \mathbf{n} \circ \mathbf{n} , \quad (3.40)$$

ezért a fenti időintegrál a magtérer a következőképp alakul:

$$\begin{aligned} \mathbf{K} \int_0^t \mathbf{S}_m(t') dt' &= \mathbf{K} \int_0^t e^{i\Omega M t'} \mathbf{S}_m^0 dt' = \mathbf{K} \lim_{M \rightarrow 0} \left[(e^{-i\Omega M t} - 1) (i\Omega M)^{-1} \right] \mathbf{S}_B^0 = \\ &= \mathbf{K} t (I - P) \mathbf{S}(0) = \mathbf{K} t (\mathbf{n} \circ \mathbf{n}) \mathbf{S}^0 = t (\mathbf{K} \mathbf{n}) (\mathbf{n} \mathbf{S}^0) . \end{aligned} \quad (3.41)$$

Ez az eredmény azonos a (3.25) kifejezés harmadik tagjával (amelyet később a (3.26) egyszerűbb alakra hoztunk), ebben a t idő együtthatója éppen a \mathbf{W}_a anomális sebesség. Látjuk, hogy az anomális sebesség, illetve a neki megfelelő állandó sebességű mozgás a sebességoperátornak az M gyengén involutórikus operátor magterére vett integrálásából származik.

Ez a levezetésünk természetesen a jelölés módosításától eltekintve azonos a 3.5 fejezetben bemutatottal. Ott közvetlenül látszott, hogy a (3.17) sebességoperátornak van egy állandó, időfüggetlen tagja, amely az $\mathbf{S}(t)$ kvázispin-operátor (3.23) alakjának első, állandó tagjából származik. A mostani levezetés viszont rámutatott arra, mi rejlik ennek a ténynek matematikai hátterében: az M „időfejlesztő” operátor nemtriviális, valódi gyengén involutórikus volta, nulla sajátértékéhez tartozó magterének létezése.

3.8. ZB-mentes állapotok

A (3.28) képlet csak a helyoperátor időfüggését adja meg. A (3.3) Hamilton-operátorral leírt (kvázi-)részecske helyének várható értéke a szokásos „szendvics” formájában kapható meg:

$$\bar{\mathbf{x}}(t) = \langle \psi_0 | \hat{\mathbf{x}}(t) | \psi_0 \rangle . \quad (3.42)$$

Itt is megvizsgálhatjuk a ZB-mentes állapotok kérdését. Ehhez határozzuk meg a (3.3) Hamilton-operátor sajátfüggvényeit! Az operátor kommutál az impulzus operátorával, sajátvektorai tehát az impulzus-sajátalterekben keresendők. Itt az impulzus operátora felveszi sajátértékét, a tőle függő $\hat{\Omega}(\hat{\mathbf{p}})$ operátor is állandó vektornak tekinthető, majd a (3.20) képletnek megfelelően felbontható abszolút értéke és egy egységvektor szorzatára. Ezzel az impulzus-altérre korlátozott a (3.3) Hamilton-operátor (immár csak mátrix, kalap nélkül) a

következő alakba írható:

$$H = \varepsilon(\mathbf{p}) + \Omega(\mathbf{p}) (\mathbf{n} \mathbf{S}) . \quad (3.43)$$

Ennek sajátvektorai egybeesnek az $\mathbf{n} \mathbf{S}$ operátor sajátvektoraival. Ez az operátor pedig az \mathbf{S} spinoperátor adott tengelyre vett vetülete, sajátértékproblémája megegyezik az S_z operátor elemekből ismert feladatával, csak a kvantálás tengelye a szokásos z -tengely helyett az \mathbf{n} vektor irányával esik egybe. Jelöljük a megfelelő sajátvektorokat $|m\rangle$ -mel: az m (feles vagy egész) sajátérték $-S$ és $+S$ között egész lépésként változhat. Az $|m\rangle$ vektorok egyben a (3.3) Hamilton-operátor sajátvektorai is,

$$E_m(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}) + m \hbar \Omega(\mathbf{p}) \quad (3.44)$$

sajátértékkel. A rendszer $|\psi_0\rangle$ kezdőállapota ezen $|m\rangle$ vektorok lineáris kombinációjaként állítható elő, a (3.42) várható értékek tehát a spinoperátorok ismert mátrixelemeivel fejezhetők ki.

Tekintsük azt a speciális esetet, amikor a kezdeti állapotvektor megegyezik az egyik $|m\rangle$ sajátvektorral! Az elemi spinalgebrából ismert, hogy az $\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0$ és az $(\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0) \times \mathbf{n}$ operátorok (melyek a szokásos S_x , illetve S_y operátorok megfelelői) diagonális mátrixelemei mind nullák. Kimondhatjuk tehát, hogy az általános esetben, a (3.3) Hamilton-operátorral leírt rendszerekre is fennáll a Schrödinger-féle Zitterbewegung esetében megismert tétel megfelelője: a (3.28) megoldás oszcilláló részének várható értéke tiszta energia-sajátállapotok esetén eltűnik, ilyen állapotokban a Zitterbewegung nem észlelhető. A 4. részben látni fogjuk, hogy a tétel még általánosabb Hamilton-operátorok esetén is fennáll.

4. rész

ZB többkomponensű kváziszabad kvantumrendszerekben

4.1. Kváziszabad rendszerek – a legáltalánosabb Hamilton-operátor

Vizsgáljuk meg a legáltalánosabb, többkomponensű hullámfüggvénnyel és kvázi-szabad Hamilton-operátorral leírható kvantumrendszert! A rendszer hullámfüggvénye direktszorzat alakú Hilbert-tér eleme:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathbb{C}^N, \quad (4.1)$$

ahol \mathcal{H}_0 a szokásos Hilbert-tér (pl. \mathcal{L}^2), \mathbb{C}^N pedig az N -dimenziós komplex euklideszi tér.

A Hamilton-operátor feltevésünk szerint kvázi-szabad, azaz nem függ az $\hat{\mathbf{x}}$ helyoperátortól, csak a $\hat{\mathbf{p}}$ impulzusoperátortól (a kvázi-szabadság fogalmába az időtől való függetlenséget is beleértettük). Többkomponensű hullámfüggvényre hatván a Hamilton-operátor $N \times N$ -es mátrix alakú lesz:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{11}(\hat{\mathbf{p}}) & \hat{H}_{12}(\hat{\mathbf{p}}) & \dots & \hat{H}_{1n}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \hat{H}_{21}(\hat{\mathbf{p}}) & \hat{H}_{22}(\hat{\mathbf{p}}) & \dots & \hat{H}_{2N}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{H}_{N1}(\hat{\mathbf{p}}) & \hat{H}_{N2}(\hat{\mathbf{p}}) & \dots & \hat{H}_{NN}(\hat{\mathbf{p}}) \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

ahol az egyes $\hat{H}_{kl}(\hat{\mathbf{p}})$ komponensek a \mathcal{H}_0 téren ható operátorok, a hermiticitás követelménye ($\hat{H} = \hat{H}^+$) miatt a diagonális komponensek önadjungáltak, a nemdiagonális elemek pedig egymás adjungáltjai: $\hat{H}_{kk} = \hat{H}_{kk}^+$, $\hat{H}_{kl} = \hat{H}_{lk}^+$, ha $k \neq l$.

Az egyes $\hat{H}_{kl}(\hat{\mathbf{p}})$ operátorokról csak a p_k szerinti differenciálhatóságot tételezzük fel. Levezetésünk a $\hat{H}_{kl}(\hat{\mathbf{p}})$ függvények konkrét alakjától független lesz.

Első lépésként ismét azt kell megállapítanunk, hogy a $\hat{\mathbf{p}}$ operátor kommutál a Hamilton-operátorral, ezért (akárcsak maga a Hamilton-operátor) mozgásállandó:

$$\frac{d}{dt} \hat{p}_k(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_k] = 0. \quad (4.3)$$

Ha a számítások során egy-egy \mathbf{p} -sajátállatra korlátozódunk, akkor a $\hat{\mathbf{p}}$ operátor sajátértékével, az állandó \mathbf{p} vektorral helyettesíthető.

Célunk az $\hat{\mathbf{x}}(t)$ Heisenberg-képbeli helyoperátor meghatározása tetszőleges (4.2) alakú Hamilton-operátor esetére. Látni fogjuk, hogy az $\hat{\mathbf{x}}(t)$ operátorban minden ilyen esetben fellépnek a Zitterbewegungot leíró tagok.

4.2. Áttérés Heisenberg-képre

A Heisenberg-képre való áttérést az $\hat{U}(t)$ unitér időfejlesztő operátor generálja:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{U}(t)^{-1} \hat{\mathbf{x}}(0) \hat{U}(t), \quad (4.4)$$

ahol a helyoperátor $\hat{\mathbf{x}}(0)$ kezdeti értéke megegyezik a Schrödinger-képbeli helyoperátorral:

$$\hat{\mathbf{x}}(0) = i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}. \quad (4.5)$$

Az $\hat{U}(t)$ időfejlesztő operátor a Hamilton-operátor exponenciális függvénye:

$$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) t}, \quad \hat{U}^{-1} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}) t}. \quad (4.6)$$

Esetünkben a Hamilton-operátor nem függ a helytől, ezért a időfejlesztő operátor az idő mellett csak az impulzus függvénye:

$$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}) t}, \quad \hat{U}^{-1} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(\hat{\mathbf{p}}) t}. \quad (4.7)$$

Ezért a Heisenberg-képbeli helyoperátor a következő alakba írható:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{U}(t, \hat{\mathbf{p}})^{-1} \hat{\mathbf{x}}(0) \hat{U}(t, \hat{\mathbf{p}}). \quad (4.8)$$

Használjuk ki a Schrödinger-képbeli (4.5) operátor közismert tulajdonságát: a $\hat{\mathbf{p}}$ impulzus tetszőleges differenciálható $f(\hat{\mathbf{p}})$ függvényére fennáll:

$$[\hat{\mathbf{x}}(0), f(\hat{\mathbf{p}})] = i\hbar \frac{\partial f(\hat{\mathbf{p}})}{\partial \mathbf{p}}. \quad (4.9)$$

Alakítsuk át a (4.8) képletet a kommutátor bevezetésével, és használjuk ki a (4.9) szabályt:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{U}^{-1} \hat{\mathbf{x}}(0) \hat{U} = \hat{U}^{-1} \left[\hat{\mathbf{x}}(0), \hat{U} \right] + \hat{U}^{-1} \hat{U} \hat{\mathbf{x}}(0) = \hat{\mathbf{x}}(0) + i\hbar \hat{U}^{-1} \frac{\partial \hat{U}}{\partial \mathbf{p}}. \quad (4.10)$$

Behelyettesítve a Schrödinger-képbeli helyoperátor (4.5) alakját:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(0) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}. \quad (4.11)$$

Eddig kizárólag azt használtuk ki, hogy a Hamilton-operátor csak az impulzustól függ, a számolás során sehol sem számított, hány komponensű a hullámfüggvény. Tegyük fel most egy rövid kitérő erejéig, hogy a hullámfüggvény csak egykomponensű! Ekkor a \mathbf{p} szerinti deriválás (gradiensképzés) közvetlenül elvégezhető:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} t \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{V}}(\hat{\mathbf{p}}) t e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad (4.12)$$

ahol bevezettük a $\hat{\mathbf{V}}$ sebességoperátort:

$$\hat{\mathbf{V}}(\hat{\mathbf{p}}) = \frac{\partial \hat{H}(\hat{\mathbf{p}})}{\partial \mathbf{p}}. \quad (4.13)$$

Ezt visszahelyettesítve a (4.11) egyenletbe kihasználhatjuk, hogy $\hat{\mathbf{V}}$ és \hat{H} egyaránt csak \mathbf{p} függvénye, így kommutálnak. Ezért az exponenciális kifejezések egyszerűen kiejtik egymást. A második tagból így csak $\hat{\mathbf{V}} t$ marad.

Egykomponensű (kvázi-)szabad rendszer esetére tehát megkaptuk a szokásos eredményt: a Heisenberg-képbeli helyoperátor egyenes vonalú, állandó sebességű mozgást végez:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \hat{\mathbf{V}}(\hat{\mathbf{p}}) t. \quad (4.14)$$

Többkomponensű hullámfüggvény esetén ez az egyszerű számítás nem érvényes, a Hamilton-operátor projektor-felbontásához kell folyamodnunk.

4.3. Projektor-felbontás

A (4.2) szerinti $\hat{H}(\hat{\mathbf{p}})$ Hamilton-operátor egy \mathbf{p} -sajátaltérre korlátozva egy $N \times N$ -es H hermitikus mátrix, amely paraméterként tartalmazza a \mathbf{p} impulzust. Megoldva e mátrix sajátérték-problémáját, a mátrix felírható az E_a sajátértékek és a sajátaltérre vetítő Q^a projektorok segítségével:

$$H(\mathbf{p}) = \sum_a E_a(\mathbf{p}) Q^a(\mathbf{p}) . \quad (4.15)$$

Mind az E_a energia-sajátértékek, mind a Q^a projektorok függenek a \mathbf{p} impulzusoktól, így a (4.15) projektor-felbontás impulzus-alterenként eltérő.

Egy-egy altéren belül a Q^a projektor-mátrixok kielégítik a szokásos ortogonalitási és teljességi összefüggéseket:

$$Q^a Q^b = \delta_{ab} Q^a , \quad \sum_a Q^a = \mathbb{I}_N , \quad (4.16)$$

ahol \mathbb{I}_N az $N \times N$ -es egységmátrix.

A mátrixfüggvények alaptétele [67] szerint hermitikus mátrix tetszőleges (az összes E_a sajátérték helyén értelmezett) analitikus függvénye megkapható a (4.15) projektor-felbontás alapján:

$$f(H) = \sum_a f(E_a) Q^a , \quad (4.17)$$

azaz a mátrixfüggvény kiszámításához a (4.15) projektorfelbontáson kívül csak az $f(x)$ függvénynek az $x = E_a$ helyeken felvett $f(E_a)$ helyettesítési értékeit kell ismernünk (feltéve, ha ezek léteznek).

Mivel az exponenciális függvény az egész komplex síkon értelmezve van, ezért a (4.7) szerinti $\hat{U}(t, \mathbf{p})$ időfejlesztő operátor (amely a \mathbf{p} -altérre korlátozva maga is egy $N \times N$ -es $U(t)$ mátrix) is mindig kifejezhető a Q^a projektorok kombinációjaként:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(\mathbf{p})t} = \sum_a e^{-\frac{i}{\hbar} E_a(\mathbf{p})t} Q^a(\mathbf{p}) , \quad (4.18)$$

és inverze is hasonló alakba írható:

$$U^{-1}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(\mathbf{p})t} = \sum_a e^{\frac{i}{\hbar} E_a(\mathbf{p})t} Q^a(\mathbf{p}) . \quad (4.19)$$

4.4. A helyoperátor meghatározása

Az $U(t)$ időfejlesztő operátor projektor-felbontása segítségével részletesen kiszámíthatjuk a Heisenberg-képbeli helyoperátort. Igen lényeges, hogy a \mathbf{p} szerint kijelölt deriválás során mind az E_a energia-sajátértékek, mind a Q^a projektorok \mathbf{p} -függését figyelembe kell vennünk. A deriválás elvégzése után viszont kihasználhatjuk, hogy a fellépő (nem mátrix jellegű)

mennyiségek mind \mathbf{p} függvényei, ezért kommutálnak egymással, így az exponenciálisokat a kifejezés elejére gyűjthetjük össze (a különböző, amúgy szintén \mathbf{p} -függő mátrixok, így a Q^a projektorok és \mathbf{p} szerinti deriváltjaik már nem kommutálnak egymással):

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}}(t) - \hat{\mathbf{x}}(0) &= U^{-1}(t) i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} U(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \\ &= \left(\sum_a e^{\frac{i}{\hbar} E_a t} Q^a \right) i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\sum_b e^{-\frac{i}{\hbar} E_b t} Q^b \right) = \\ &= \sum_a \sum_b e^{\frac{i}{\hbar} (E_a - E_b) t} \left(\frac{\partial E_b}{\partial \mathbf{p}} t \right) Q^a Q^b + i\hbar \sum_a \sum_b e^{\frac{i}{\hbar} (E_a - E_b) t} Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}}.\end{aligned}\quad (4.20)$$

A kifejezés első tagjában elvégezhetjük a b -re történő összegezést. A projektorok (4.16) formula szerinti ortogonalitása miatt csak a kettős összeg diagonális tagjai maradnak meg, az ezekhez tartozó exponenciálisokban viszont a két energia-sajátérték megegyezik, így az exponenciálisok 1-re egyszerűsödnek, és csak a tag t -ben lineáris időfüggése marad. A kifejezés legutolsó tagjában is érdemes különválasztani a diagonális tagokat, ezekben a fentihez hasonló okból az időfüggés kiesik. Ezért ezen tagok összege egy állandó vektort ad. Az összeg többi tagja időben oszcilláló jellegű. Ezzel az átalakítással megkapjuk a Heisenberg-képbeli helyoperátor végső kifejezését:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + t \sum_a \frac{\partial E_a}{\partial \mathbf{p}} Q^a + i\hbar \sum_a Q^a \frac{\partial Q^a}{\partial \mathbf{p}} + i\hbar \sum_a \sum_{b \neq a} e^{\frac{i}{\hbar} (E_a - E_b) t} Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}}. \quad (4.21)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

- az E_a és E_b energiaszinteknek megfelelő különbségi vagy *lebegési frekvencia*:

$$\omega_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar = -\omega_{ba} \quad (4.22)$$

- az a -ik sajátértékhez tartozó *parciális sebesség*:

$$\mathbf{V}^a(\mathbf{p}) = \frac{\partial E_a(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (4.23)$$

- a *driftsebesség* operátora:

$$\mathbf{W} = \sum_a^N \mathbf{V}^a Q^a \quad (4.24)$$

- a *Zitterbewegung-amplitudók* mátrixa:

$$\mathbf{Z}^{ab} = i\hbar Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} \quad (4.25)$$

(ez két értelemben is mátrix: egyrészt az $N \times N$ -es Q^a projektor-mátrixok és deriváltjaik szorzata, másrészt mátrix az (ab) indexekben, melyek a (4.15) projektor-felbontásban szereplő különböző sajátértékek és sajátalterek számáig futnak), emellett a \mathbf{Z} mennyiségek hármavektorok is (ezért a vastag betűs jelölés), vektorindexüket a \mathbf{p} szerinti gradiens-képzéstől kapják;

- a *kezdeti eltolódás* (shift):

$$\mathbf{Y} = \sum_a^N \mathbf{Z}^{aa} \quad (4.26)$$

- a tulajdonképpeni *Zitterbewegung* operátora:

$$\mathbf{C}(t) = \sum_a \sum_{b \neq a} \mathbf{Z}^{ab} e^{i\omega_{ab} t} . \quad (4.27)$$

A fenti jelölésekkel a Heisenberg-képbeli helyoperátor a következő alakban írható:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{Y} + \mathbf{W}t + \mathbf{C}(t) \quad (4.28)$$

Ez az alak teljesen megegyezik a (2.26) és a (3.29) képletekkel, és az egyes tagok jelentése is hasonló, de a különbségek is számottevők.

4.5. Az eredmény értelmezése

Hasonlítsuk össze tagonként a (2.26), a (3.29) és a (4.28) kifejezések megfelelő tagjait!

- Az $\hat{\mathbf{x}}(0)$ tag mindhárom esetben a helyoperátor kezdeti értéke, amely megegyezik a Schrödinger-képbeli (4.5) operátorral.
- A képletek harmadik tagja az állandó \mathbf{W} sebességű, t -vel arányos mozgást írja le. A Schrödinger-féle esetben ez a sebesség egy előjel erejéig megegyezik a klasszikus, nemkvantum relativisztikus impulzus és energia (2.14) formuláiból számítható, a (2.13) képletben szereplő \mathbf{V} sebességgel.

A kvázimágneses esetben levezetett (3.29) formulában fellépő \mathbf{W} átlagsebesség már két tagból áll: a „kölcsonhatásmentes” $\varepsilon(\mathbf{p})$ kinetikus energia gradienseként definiált (3.15) átlagsebességhez hozzáadódik az $\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{n} \mathbf{S}^0)$ kifejezés, az anomális sebesség. Ez már nem állandó vektor, hanem operátor, amely az $(\mathbf{n} \mathbf{S}^0)$ operátor különböző $|m\rangle$ sajátvektorain különböző értékeket vesz fel. A 3.7 fejezetben megvizsgáltuk felléptének okát, és megmutattuk, miért nem szerepel hasonló tag a Schrödinger-féle ZB esetében.

Pontosabban megmondolva: a Schrödinger-féle ZB esetén fellépő \mathbf{W} sebesség is operátor, hiszen a pozitív és negatív energiájú altereken $+\mathbf{V}$, illetve $-\mathbf{V}$ értéket vesz fel. Ez tehát épp az anomális sebesség megfelelője — a Schrödinger-féle esetben igazából az $\varepsilon(\mathbf{p})$ tag hiányzik! Ennek oka egyszerű (a részleteket a 4.8 fejezetben fogjuk látni): a Dirac-elektron azonos impulzushoz tartozó két sajátértékének összege (ami megegyezik a Hamilton-mátrix nyomával) éppen nulla.

A legáltalánosabb (4.28) esetben látható, hogy a (4.24) képlet által megadott \mathbf{W} sebességoperátor az egyes energia-sajátértékekhez tartozó, a Q^a projektorok által megadott altereken a \mathbf{V}^a parciális sebességekkel egyezik meg: a (4.24) formula a \mathbf{W} sebességoperátor projektor-felbontása. Hamarosan megmutatjuk, hogy az előző két esetben levezetett sebességképlet ennek az általános alaknak speciális eseteként adódik.

A Zitterbewegung szemléletes értelmezésével szemben általában nincs tehát egyetlen „igazi” állandó sebesség: a többkomponensű (kvázi-)szabad részecske egyes energia-sajátaltereihez tartozó módusai, vetületei más-más driftsebességgel sodródnak – és erre a máris összetett mozgásra szuperponálódik a nemtriviális Zitterbewegung.

Felhívjuk a figyelmet a Zitterbewegung egy eddig rejtve maradt, de legalábbis nem eléggé méltányolt tulajdonságára: semmiféle fizikai vagy matematikai kényszerítő ok nincs arra, hogy a \mathbf{W} sebességoperátor egésze, illetve különböző összetevői, a \mathbf{V}^a parciális sebességek párhuzamosak legyenek egymással, illetve az őket meghatározó \mathbf{p} impulzussal! A részecske driftsebessége – ami a Zitterbewegung rezgéseinek átlagolásával, kisimításával alakul ki – tehát általában nem az impulzus irányába mutat. Ennek az elemi ténynek fontos szerep juthat a későbbi vizsgálatok során, amikor a Zitterbewegung egyetlen részecskére vonatkozó fogalmaira építve a szilárdtestek elektronrendszerének kollektív (pl. transport-) tulajdonságait kívánjuk vizsgálni. (A helyzet a kristályokban terjedő fény esetéhez hasonlít, ahol az energia terjedését meghatározó csoportsebesség általában nem merőleges a hullámfrontokra. Ennek következménye a kristályban terjedő fény kettőtörése. Megfelelően bonyolult Hamilton-operátor esetén a Zitterbewegung különböző módusai más irányú részecskemozgásnak felelnek meg, azaz itt az elektronok vagy kvázirészecskék „kettőtörése” lép fel.)

- Az \mathbf{Y} eltolódás mindhárom esetben a Zitterbewegungot leíró $\mathbf{C}(t)$ taggal együtt lépett fel, abból választottuk le. A Schrödinger-féle ZB és a kvázimágneses rendszer esetén egyszerű behelyettesítéssel belátható, hogy a $t = 0$ időpontban az eltolódás és a rezgőmozgás $\mathbf{C}(0)$ kezdeti értékének összege éppen nulla. Ugyanez fennáll az általános esetben is, ennek belátása azonban kisebb számolást igényel.

Összegezzük a (4.25) képlettel definiált \mathbf{Z}^{ab} operátorokat második indexük szerint, és használjuk ki a projektor-rendszer teljességét kifejező (4.16/b) összefüggést:

$$\sum_b \mathbf{Z}^{ab} = \sum_b \left[Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} \right] = Q^a \sum_b \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} = Q^a \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \sum_b Q^b = Q^a \frac{\partial \mathbb{I}_N}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (4.29)$$

A \mathbf{Z}^{ab} mátrix egy-egy sorának összege tehát zérus. Fejezzük ki ebből a diagonális \mathbf{Z}^{aa} elemet:

$$\mathbf{Z}^{aa} = - \sum_{b \neq a} \mathbf{Z}^{ab}. \quad (4.30)$$

Ezzel az \mathbf{Y} eltolódás (4.26) képlete így írható:

$$\mathbf{Y} = \sum_a^N \mathbf{Z}^{aa} = - \sum_a \sum_{b \neq a} \mathbf{Z}^{ab}. \quad (4.31)$$

Hasonlítsuk össze ezt a képletet a (4.27) formulával: látható, hogy a $\mathbf{C}(t)$ operátor $\mathbf{C}(0)$ kezdeti értéke előjel erejéig megegyezik \mathbf{Y} -nal.

Általánosan is beláttuk tehát, hogy az \mathbf{Y} eltolódás minden esetben a $\mathbf{C}(t)$ oszcilláló tagok kezdőértékét kompenzálja ki.

- A három vizsgált formula között a legnagyobb különbség a $\mathbf{C}(t)$ tagok, azaz a tényleges Zitterbewegungot leíró oszcilláló tagok alakjában jelentkezik. Schrödinger eredeti levezetése óta úgy gondoltuk, hogy a ZB egyetlen, jól meghatározott frekvenciájú, az állandó sebességű mozgásra rakódó oszcillációt jelent. Ez volt a helyzet a Schrödinger-féle ZB esetén, és a 3. részben tanulmányozott kvázispin-rendszerek esetén is. Figyelemre méltó, hogy a 3. rész levezetései nem voltak érzékenyek arra, mekkora az S kvázispin értéke. Az irodalomban szereplő legtöbb rendszer az $S = 1/2$, azaz a

2×2 -es mátrixokkal leírható esetnek felelt meg, de a levezetés változatlanul érvényes nagyobb S kvázispin, azaz $(2S+1) \times (2S+1)$ -es Hamilton-mátrix esetén is. A Hamilton-operátornak (egy \mathbf{p} -sajátaltéren belül) $2S+1$ különböző energia-sajátértéke volt (lásd a (3.44) formulát), ennek ellenére ebben az esetben is csak egyetlen, jól meghatározott Ω ZB-frekvencia lépett fel. E tény magyarázatát az 5.7 fejezetben adjuk meg.

Homlokegyenest más a helyzet az ebben a fejezetben vizsgált általános többkomponensű rendszerek esetében. A (4.27) formulából jól látszik, de az egész, a Hamilton-mátrix projektor-felbontásán alapuló levezetésből is világos, hogy minden E_a és E_b energiaszint-pár közti $\omega_{ab} = (E_a - E_b)/\hbar$ *különbési* vagy *lebegési* frekvencia fellép a Zitterbewegung általános képletében (hacsak speciális, pl. szimmetria-okból az adott módus \mathbf{Z}^{ab} együtthatója nullává nem válik — erre az 5.4 fejezetben mutatunk példát).

A Zitterbewegung tehát alapvetően lebegési, és mint ilyen, többkomponensű, kettőnél több energiaszinttel rendelkező rendszerek esetén tipikusan *multifrekvenciás* jelenség. Miért nem derült ez ki korábban? Csak egyetlen frekvencia jelenik meg,

- ha összesen csak két energiaszint van – ez volt a helyzet a Schrödinger-féle ZB és a 2×2 -es mátrixszal leírható szilárdtestfizikai és nanofizikai rendszerek esetén;
- ha speciális kioltási effektusok lépnek fel: pl. a \mathbf{Z}^{ab} ZB-amplitudók jelentős része (esetleg egy kivétellel mindegyike) nulla, illetve ha az energiaszintek ekvidisztánsak, így különböző energiaszint-párok közti átmeneti frekvenciák egybeesnek, a többlépcsős átmenetek együtthatói pedig mind eltűnnek. Az (5.7) fejezetben látni fogjuk, hogy a korábban vizsgált kvázispin-rendszerek esetében éppen ez a speciális eset valósult meg, ezzel elfedve a korábbi kutatások elől a Zitterbewegung alapvetően multifrekvenciás jellegét.

A multifrekvenciás Zitterbewegung részletesebb tanulmányozásához kettőnél több energiaszintes, azaz kettőnél több komponensű, nem elfajult spektrumú rendszereket kell vizsgálnunk. Ilyeneket lehet „játékmodellként” konstruálni, de előfordulnak a szilárdtestfizikában, reális rendszerek modelljeiként is. Ezek vizsgálatát megnehezíti, hogy a Hamilton-operátor (\mathbf{p} -től függő) spektrumát legtöbbször csak numerikusan lehet meghatározni, vagy a kapott analitikus kifejezések áttekinthetetlenül bonyolultak, és nem alkalmasak további feldolgozásra. Szerencsére vannak olyan reális rendszerek, amelyek gyakran használt modelljei éppen megfelelnek céljainknak: elegendő komponensűek a ZB multifrekvenciás jellegének megnyilvánulásához, de még eléggé egyszerűek ahhoz, hogy analitikusan le lehessen vezetni a helyoperátor pontos időfüggését. Az 5.8 fejezetben a kétrétegű grafén gyakorlatilag is fontos esetében részletesen végigszámolt példát mutatunk erre a nemtriviális viselkedésre.

4.6. Az eredmény alternatív alakjai

A dolgozat jelen részének fő eredménye a (4.2) alakú Hamilton-operátorral leírható rendszerek helyoperátorának Heisenberg-képbeli általános, a Zitterbewegungot is tartalmazó (4.21) alakja. Ezt az eredményt a későbbiekben konkrét fizikai rendszerek, modellek vizsgálatára kívánjuk alkalmazni. Ennek érdekében a (4.21) formulát több, ekvivalens alakra írjuk át, mert az egyes rendszerek tanulmányozása során hol az egyik, hol a másik alak bizonyul hasznosabbnak vagy kényelmesebbnek.

4.6.1. A shift eltüntetése

Korábban láttuk, hogy az \mathbf{Y} eltolódásvektor egyszerűen a $\mathbf{C}(t)$ Zitterbewegung-tag kezdőértékének kompenzálására szolgál. A (4.31) képlet szerint az eltolódás ugyanolyan kettős összeggel írható fel, mint az oszcilláló tagok. Érdemes tehát a konstans eltolódásvektor összeadandóit formálisan is hozzádefiniálni az egyes rezgési módusokhoz, az így adódó módosított Zitterbewegung-tag kezdő, $t=0$ pillanatbeli értéke 0 lesz. Jelöljük e két tag összegét a továbbiakban $\mathbf{Z}(t)$ -vel:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(t) &= \mathbf{Y} + \mathbf{C}(t) = - \sum_a \sum_{b \neq a} \mathbf{Z}^{ab} + \sum_a \sum_{b \neq a} \mathbf{Z}^{ab} e^{i\omega_{ab} t} = \\ &= \sum_a \sum_{b \neq a} \mathbf{Z}^{ab} (e^{i\omega_{ab} t} - 1) = \sum_a \sum_b \mathbf{Z}^{ab} (e^{i\omega_{ab} t} - 1). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Az utolsó átalakításnál elhagytuk a kettős szummából a $b \neq a$ feltételt. Ez ugyanis automatikusan teljesül, hiszen az egybeeső indexű tagokban a lebegési frekvencia nulla, így a zárójelben álló időfüggvény azonosan nulla lesz. E tagok tehát továbbra sem lépnek fel az összegben, csak a jelölés lett egyszerűbb.

A $\mathbf{Z}(t)$ mennyiség bevezetésével a helyoperátor (4.28) általános alakja a következőre egyszerűsödik:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{W}t + \mathbf{Z}(t) \quad (4.33)$$

Ez az alak különösen hasznosnak bizonyul azokban az esetekben, amikor az exponenciális formában felírt oszcilláló tagokat szinuszos és koszinuszos valós rezgésekkel akarjuk kifejezni.

4.6.2. A Berry-konnexió mátrixelemei

A képleteinkben fellépő projektorokat kifejezhetjük a Hamilton-operátor sajátvektoraival:

$$Q^a(\mathbf{p}) = \sum_{\beta} |u_{\beta}^a(\mathbf{p})\rangle \langle u_{\beta}^a(\mathbf{p})|, \quad (4.34)$$

ahol az $|u_{\beta}^a(\mathbf{p})\rangle$ vektorok a (4.2) Hamilton-operátor E_a sajátértékhez tartozó sajátvektorai, és a β index az elfajulásra utal, egy adott sajátértékhez tartozó többdimenziós sajátaltérben a különböző β indexhez tartozó $|u_{\beta}^a\rangle$ vektorokat egymásra merőlegesnek kell választani:

$$H(\mathbf{p}) |u_{\beta}^a(\mathbf{p})\rangle = E_a(\mathbf{p}) |u_{\beta}^a(\mathbf{p})\rangle. \quad (4.35)$$

A különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok ortonormáltak:

$$\langle u_{\beta}^a(\mathbf{p}) | u_{\gamma}^b(\mathbf{p}) \rangle = \delta_{ab} \delta_{\beta\gamma}. \quad (4.36)$$

A későbbiekben az egyszerűség kedvéért a β elfajulási index jelölését elhagyjuk. Ez nem okoz zavart, mert ha két különbözőnek feltételezett E_a és E_b energiasajátérték véletlenül egybeesne, a \mathbf{W} driftsebesség (4.24) formulájában az egyenlővé váló \mathbf{V}^a és \mathbf{V}^b parciális sebességek mellett álló Q^a és Q^b projektorok összeadódnak: ez éppen megfelel a hozzájuk tartozó sajátaltérek direkt összeadásának. A Zitterbewegungot leíró tagban pedig a (4.32) képlettel megadott $\mathbf{Z}(t)$ kifejezés időfüggő tényezője azonosan zérussá válik, így az adott – nulla energiakülönbségű – átmenethez tartozó tag nem jelenik meg. A továbbiakban tehát a

β indexet nem használjuk. Konkrét rendszerek energiaszintjeinek elfajulására természetesen ügyelni kell, ekkor az adott rendszer esetében szokásos *ad hoc* jelöléseket használunk.

A projektorok (4.34) előállítására tehát így írható egyszerűbben:

$$Q^b(\mathbf{p}) = |u^b(\mathbf{p})\rangle \langle u^b(\mathbf{p})|. \quad (4.37)$$

E képletben a b index tehát már egyesíti a korábbi b és β indexeket, az elfajult sajátértékekhez tartozó diadikus projektorok, azaz a (4.34) összeg egyes tagjai külön-külön szerepelnek, és az összes Q^b projektor összege kiadja az egységmátrixot. Arra természetesen továbbra is ügyelni kell, hogy az egyes $|u^b\rangle$ vektorok ortonormáltak legyenek.

Megjegyezzük, hogy az $|u^b(\mathbf{p})\rangle$ sajátvektorok választása nem egyértelmű: mindegyikben szabadon választhatunk egy – általában a \mathbf{p} impulzustól tetszőlegesen függő – egységnyi fázisfaktort:

$$|u'^b(\mathbf{p})\rangle = |u^b(\mathbf{p})\rangle e^{i\varphi_b(\mathbf{p})}. \quad (4.38)$$

Ez az $U(1)$ „mérték-szabadság” fontos szerepet játszik a nemtriviális geometriájú rendszerek geometriai vagy Berry-fázisának fellépésekor. Esetünkben azonban a projektorok képzésekor ez a fázisfaktor kiesik, ezért (a 4.37) projektorok már egyértelműek.

Számítsuk ki a (4.25) képletben szereplő ZB-amplitudókat a sajátvektorok segítségével! Képezzük a (4.37) projektor \mathbf{p} szerinti deriváltját:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} Q^b(\mathbf{p}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} |u^b(\mathbf{p})\rangle \langle u^b(\mathbf{p})| = \frac{\partial |u^b(\mathbf{p})\rangle}{\partial \mathbf{p}} \langle u^b(\mathbf{p})| + |u^b(\mathbf{p})\rangle \frac{\partial \langle u^b(\mathbf{p})|}{\partial \mathbf{p}}. \quad (4.39)$$

Ha ezt a kifejezést balról beszorozzuk a b -től különböző a indexhez tartozó Q^a projektorral, akkor a projektorban második tényezőként szereplő $\langle u^a(\mathbf{p})|$ bra-vektor a (4.39) formula második tagjában álló $|u^a(\mathbf{p})\rangle$ ket-vektorral megszorozva nullát ad, így csak az első tag marad meg:

$$Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} = |u^a\rangle \langle u^a| \frac{\partial |u^b\rangle}{\partial \mathbf{p}} \langle u^b|. \quad (4.40)$$

A skaláris szorzás eredményét kiemelhetjük a ket és a bra vektorok közül. A \mathbf{Z}^{ab} ZB-amplitudóhoz még szoroznunk kell $i\hbar$ -sal, definiáljuk ezt bele a skalárszorzat eredményébe, és vezessük be a következő mátrixot:

$$\mathbf{A}_{ab}(\mathbf{p}) = i\hbar \langle u^a(\mathbf{p})| \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} |u^b(\mathbf{p})\rangle. \quad (4.41)$$

Az \mathbf{A}_{ab} mennyiséget a *Berry-konnexió* mátrixának nevezzük. (Az \mathbf{A}_{ab} mennyiségek az energia-sajátalterekre utaló ab indexeket viselik, emellett hármasektorok – erre utal vastag szedésük –, ki nem írt vektorindexüket a \mathbf{p} szerinti gradiensképzéskor kapják.)

A Berry-konnexió mátrixának neve a közismert geometriai vagy Berry-fázisra utal. (Az ősforrás Berry cikke [71]. A grafén esetén tapasztalható igen nagy amplitudójú Berry-fázis fizikájáról lásd [72].) Ennek képletében a (4.41) formulához hasonló kifejezés szerepel, azzal a különbséggel, hogy a deriválást a rendszer egy közelebből meg nem határozott külső paramétere szerint kell végezni. Ennek a paraméternek a szerepét esetünkben az impulzus játssza. A Berry-konnexió szokásos képleteiben a skaláris szorzat mindkét tényezőjében ugyanaz a sajátvektor szerepel: úgy is mondhatjuk, hogy a Berry-fázis elméletében az általunk bevezetett $\mathbf{A}_{ab}(\mathbf{p})$ mátrix diagonális komponensei játszanak szerepet, míg a Zitterbewegung képleteiben a nemdiagonális mátrixelemek lépnek fel.

Ha a sajátvektorokon végrehajtjuk a (4.38) képlet szerinti $U(1)$ mértéktranszformációt,

a Berry-konnexió mátrixelemeinek (4.41) definíciójában szereplő derivált két tagból fog állni, az első az eredeti sajátvektor, a második a fázistényező \mathbf{p} szerinti deriváltját tartalmazza. Az utóbbi azonban az $\langle u^a(\mathbf{p}) |$ vektorral megszorozva a sajátvektorok ortogonalitása miatt zérust ad (bennünket most csak a mátrix nemdiagonális komponensei érdekelnek!). Végeredményben a Berry-konnexió (4.41) nemdiagonális mátrixeleme a mértéktranszformáció során egy $(\varphi_b - \varphi_a)$ fázistényezőt kap.

A bevezetett jelöléssel a (4.25) ZB-amplitudók a következő alakba írhatók:

$$\mathbf{Z}^{ab} = \mathbf{A}_{ab}(\mathbf{p}) |u^a(\mathbf{p})\rangle \langle u^b(\mathbf{p})|. \quad (4.42)$$

A fenti képletben szereplő $|u^a(\mathbf{p})\rangle \langle u^b(\mathbf{p})|$ diád az $U(1)$ mértéktranszformáció során egy $(\varphi_a - \varphi_b)$ fázistényezővel szorzódik. E diád és az $\mathbf{A}_{ab}(\mathbf{p})$ mátrixelem (4.42) szorzata tehát mértékinvariáns lesz, mint az a képlet tisztán mértékinvariáns projektorokkal kifejezett (4.25) alakja alapján el is várható.

A Heisenberg-képbeli helyoperátor Berry-együtthatókkal kifejezett teljes alakja a következő lesz:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + t \sum_a \mathbf{v}^a |u^a(\mathbf{p})\rangle \langle u^a(\mathbf{p})| + \sum_a \sum_{b \neq a} (e^{i\omega_{ba}t} - 1) \mathbf{A}_{ab}(\mathbf{p}) |u^a(\mathbf{p})\rangle \langle u^b(\mathbf{p})|. \quad (4.43)$$

Eredményünknek ez az alakja akkor lesz különösen hasznos, ha a vizsgált rendszerben a Zitterbewegung mellett más olyan jelenségeket is tanulmányozunk, amelyek leírásában ugyancsak feltűnnek a Berry-konnexió mátrixelemei. Ilyen pl. a Kubo-formula alapján vizsgált vezetőképesség, Hall-effektus [C], sörétzaj és más transzportjelenségek.

4.6.3. A Zitterbewegung-amplitudók átalakítása

Egyes esetekben bonyolult a projektor-operátorok deriváltjainak alakja, egyszerűbb magának a Hamilton-operátornak a deriváltját kiszámítani. Szerencsére van egy egyszerű képlet, amely lehetővé teszi a (nem azonos energia-sajátértékhez tartozó) \mathbf{Z}^{ab} ZB-amplitudók közvetlen kifejezését a Hamilton-operátor \mathbf{p} szerinti gradiensevel (az azonos sajátértékhez tartozó ZB-amplitudókat a (4.32) formulában szorzó időfüggvény azonosan nulla, így ezeket az amplitudókat ki sem kell számítanunk). Az átalakítás közismert, ezért a D. függelékben bemutatott rövid ismertetésre hivatkozunk.

A függelékben leírt átalakítás felhasználásával a nemdiagonális ($a \neq b$) (4.25) ZB-amplitudók egy olyan alternatív formába írhatók át, amelyben nem a projektorok vagy a sajátvektorok, hanem az eredetileg adott Hamilton-operátor \mathbf{p} paraméter szerinti gradiense szerepel:

$$\mathbf{Z}^{ab} = i\hbar Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} = i\hbar \frac{Q^a \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} Q^b}{E_b - E_a}, \quad E_b \neq E_a. \quad (4.44)$$

A ZB-amplitudóknak ez az alakja különösen hasznosnak bizonyul majd, amikor a kvázispin-rendszerekre kapott korábbi eredményeinket próbáljuk elhelyezni az e fejezetben tárgyalt általánosabb keretek között.

A fentihez hasonló módszerrel átalakíthatjuk a Berry-konnexió (4.41) ($a \neq b$) mátrixelemeit is:

$$\mathbf{A}_{ab}(\mathbf{p}) = i\hbar \langle u^a(\mathbf{p}) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} |u^b(\mathbf{p})\rangle = i\hbar \frac{\langle u^a(\mathbf{p}) | \frac{\partial H(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} |u^b(\mathbf{p})\rangle}{E_b - E_a}, \quad E_b \neq E_a. \quad (4.45)$$

4.7. ZB-mentes állapotok

Az előző részekben láttuk, hogy mind a Schrödinger-féle Zitterbewegung, mind a kvázimágneses térben mozgó kvázispin-rendszerek esetében igaz az az állítás, hogy tiszta energiasajátállapotban a helyoperátor Zitterbewegungot leíró részének várható értéke zérus, azaz a Heisenberg-képbeli helyoperátor várható értéke egyenes vonalú, állandó sebességű mozgást végez.

A Schrödinger-féle Zitterbewegung esetében a 2.4 fejezetben bemutatott hosszabb – és nem túlságosan transzparens – levezetés eredménye volt a fenti állítás. A kvázispin-rendszerek esetében a 3.8 fejezetben a spinoperátorok speciális tulajdonságaira kellett hivatkoznunk. Az ebben a részben bemutatott általános elmélet lehetővé teszi e korábbi eredmények általános kontextusba helyezését és magyarázatát.

A helyoperátor általános elméletből következő alakjaiból, különösen pl. a (4.21) vagy még inkább a (4.43) képletből közvetlenül látszik, hogy az energia-sajátállapotok bázisán felírt helyoperátor-mátrix oszcilláló részének minden diagonális komponense azonosan nulla, hiszen az összegezés csak a nemdiagonális komponensekre terjed ki. A tiszta energiasajátvektorokkal történő várhatóérték-képzés pedig épp e mátrix diagonális elemeit csip-pentené ki. Ezek az elemek azonban nem szerepelnek az összegben, így az az energia-sajátállapotokban az oszcilláló rész várható értéke minden rendszerre azonosan nulla. Joggal mondhatjuk tehát, hogy a Zitterbewegung az azonos impulzusértékhez tartozó különböző energia-sajátállapotok közötti interferencia, lebegési jelenség. Ezt már a Schrödinger-féle ZB-gal kapcsolatban is felismerték, részletes vizsgálataink megmutatták, hogy az állítás általánosan is igaz.

4.8. Kifejtés altér-párok szerint

Mint az előzőekben levezetett formuláink, pl. a (4.43) mutatják, a Heisenberg-képbeli helyoperátor ZB-ot leíró tagja a Hamilton-operátor sajátaltéréiből képzett párokra vonatkozó összegként állítható elő. Érdemes tehát bevezetni az altér-párok jellemzésére szolgáló mennyiségeket, az

$$M^{ab} = Q^a - Q^b = -M^{ba} \quad (4.46)$$

operátorokat. Az A. függelék A.3 szakaszában részletesen megmutatjuk, hogy egy lineáris tér két ortogonális alterére vetítő Q^a és Q^b projektorokból a (4.46) képlet által származtatott M^{ab} operátor gyengén involutórikus, azaz kielégíti az

$$(M^{ab})^3 = Q^a - Q^b = M^{ab} \quad (4.47)$$

egyenletet, négyzete, a

$$P^{ab} = (M^{ab})^2 = Q^a + Q^b \quad (4.48)$$

operátor pedig projektor,

$$(P^{ab})^2 = (M^{ab})^4 = Q^a + Q^b = (M^{ab})^2 = P^{ab}, \quad (4.49)$$

amely a Q^a és Q^b projektorokhoz tartozó alterek direkt összegére (lineáris burkára) vetít.

A gyengén involutórikus operátorok és függvényeik, valamint az ilyen operátorokból álló paraméteres operátor-seregek deriváltjainak legfontosabb tulajdonságait az A. függelék A.3 szakaszában foglaltuk össze.

A Q^a és Q^b projektorok egyszerűen kifejezhetők az M^{ab} mátrixokkal:

$$Q^a = (P^{ab} + M^{ab})/2, \quad Q^b = (P^{ab} - M^{ab})/2. \quad (4.50)$$

A Q^a projektoroknak és deriváltjaiknak a ZB-amplitudók (4.25) definíciójában szereplő kombinációja az A. függelék (A.46) és (A.47) képletei alapján szintén kifejezhető az M^{ab} és P^{ab} mátrixokkal:

$$Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} = \frac{P^{ab} + M^{ab}}{4} \frac{\partial M^{ab}}{\partial \mathbf{p}} M^{ab}, \quad Q^b \frac{\partial Q^a}{\partial \mathbf{p}} = \frac{P^{ab} - M^{ab}}{4} \frac{\partial M^{ab}}{\partial \mathbf{p}} M^{ab}. \quad (4.51)$$

Alakítsuk át most a helyoperátor (4.21) alakjában, illetve annak összevont (4.33) formájában a Zitterbewegungot leíró, (4.32)-beli $\mathbf{Z}(t)$ tagot! Első lépésként vonjuk össze a kettős összeg (ab) és (ba) ($a \neq b$) indexpárokhoz tartozó tagjait, hiszen mindkettő ugyanazon két altérre ható operátorokat tartalmaz, majd írjuk fel a $\mathbf{Z}(t)$ egyes tagjaiban szereplő exponenciális időfüggvényeket szinuszos és koszinuszos tagok összegeként, és közben használjuk ki az $\omega_{ba} = -\omega_{ab}$ összefüggést:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(t) &= \sum_a \sum_b \mathbf{Z}^{ab} (e^{i\omega_{ab}t} - 1) = \frac{1}{2} \sum_a \sum_b [\mathbf{Z}^{ab} (e^{i\omega_{ab}t} - 1) + \mathbf{Z}^{ba} (e^{i\omega_{ba}t} - 1)] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_a \sum_b \left[\frac{\mathbf{Z}^{ab} + \mathbf{Z}^{ba}}{2} (\cos(\omega_{ab}t) - 1) + \frac{\mathbf{Z}^{ab} - \mathbf{Z}^{ba}}{2} (i \sin(\omega_{ab}t)) \right]. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Helyettesítsük be most a (4.25) \mathbf{Z}^{ab} ZB-amplitudók helyébe a (4.51) alakokat:

$$\mathbf{Z}(t) = \frac{i\hbar}{4} \sum_a \sum_b \left[P^{ab} \frac{\partial M^{ab}}{\partial \mathbf{p}} M^{ab} (\cos(\omega_{ab}t) - 1) + M^{ab} \frac{\partial M^{ab}}{\partial \mathbf{p}} M^{ab} (i \sin(\omega_{ab}t)) \right]. \quad (4.53)$$

Az egyes tagokból kiemelhetjük a gradienst és az utolsó M^{ab} mátrixot:

$$\mathbf{Z}(t) = \frac{i\hbar}{4} \sum_a \sum_b [P^{ab} (\cos(\omega_{ab}t) - 1) + M^{ab} (i \sin(\omega_{ab}t))] \frac{\partial M^{ab}}{\partial \mathbf{p}} M^{ab}. \quad (4.54)$$

A szögletes zárójelben álló kifejezésben felismerhetjük a A. függelék (A.38) képletével értelmezett exponenciális mátrixfüggvényt:

$$\mathbf{Z}(t) = \frac{1}{4} \sum_a \sum_b \left(e^{i\omega_{ab} M^{ab} t} - 1 \right) \left(i\hbar \frac{\partial M^{ab}}{\partial \mathbf{p}} M^{ab} \right). \quad (4.55)$$

A (4.53) képlettől másképp is továbbléphetünk. Használjuk ki az A. függelék (A.44) képletei közül az első, ekkor (4.53) így írható:

$$\mathbf{Z}(t) = -\frac{i\hbar}{4} \sum_a \sum_b M^{ab} \frac{\partial M^{ab}}{\partial \mathbf{p}} [P^{ab} (\cos(\omega_{ab}t) - 1) - M^{ab} (i \sin(\omega_{ab}t))] . \quad (4.56)$$

A szögletes zárójelben álló kifejezés ismét az (A.38) exponenciális alakba írható:

$$\mathbf{Z}(t) = -\frac{1}{4} \sum_a \sum_b \left(i \hbar M^{ab} \frac{\partial M^{ab}}{\partial \mathbf{p}} \right) \left(e^{-i \omega_{ab} M^{ab} t} - 1 \right). \quad (4.57)$$

A Zitterbewegungot leíró $\mathbf{Z}(t)$ kifejezést tehát sikerült az egyes altérpárokra mintegy egymástól függetlenül megvalósuló lebegési jelenségek összegeként előállítanunk: az egyes tagokban csak az ω_{ab} lebegési frekvencia, valamint az altérpárra jellemző M^{ab} gyengén involutórikus operátor, illetve ennek \mathbf{p} szerinti gradiense szerepel. A kettős összeg tagjainak a (4.57) kifejezésben szereplő alakja erősen emlékeztet az eredeti Schrödinger-féle Zitterbewegungot leíró (2.23) képletre.

A helyoperátor Heisenberg-képbeli mozgását leíró (4.21) formulában szereplő \mathbf{W} sebesség is felírható az egyes altérpárokra vonatkozó összegként. Ehhez első lépésként összegezzük az M^{ab} mátrixok (4.46) definiáló egyenletét a b indexre (a diagonális M^{aa} elemet tekintjük nullának):

$$\sum_b M^{ab} = \sum_b Q^a - \sum_b Q^b = N Q^a - I,$$

ahol az utolsó lépésben figyelembe vettük a projektorok (4.16) teljességét (a képletben I az $N \times N$ -es egységmátrix). Ebből:

$$Q^a = \frac{1}{N} \left(\sum_b M^{ab} + I \right). \quad (4.58)$$

Ezután vezessük be az E_a energia-sajátértékek átlagát, azaz a (4.2) Hamilton-operátor spurjának N -ed-részét:

$$E_0 = \frac{1}{N} \sum_a E_a. \quad (4.59)$$

Az egyes E_a energiaszinteket az átlagos E_0 értékhez is viszonyíthatjuk:

$$E'_a = E_a - E_0. \quad (4.60)$$

Az eltoló energiaszintek összege nulla:

$$\sum_a E'_a = 0 \quad (4.61)$$

Az energiaszintek $\hbar \omega_{ab}$ különbsége természetesen eltolásinvariáns:

$$\hbar \omega_{ab} = E_a - E_b = E'_a - E'_b. \quad (4.62)$$

Írjuk fel a (4.24) \mathbf{W} sebességet az eltoló energiaértékek segítségével:

$$\mathbf{W} = \sum_a \frac{\partial E_a}{\partial \mathbf{p}} Q^a = \sum_a \frac{\partial (E_0 + E'_a)}{\partial \mathbf{p}} Q^a = \frac{\partial E_0}{\partial \mathbf{p}} \sum_a Q^a + \sum_a \frac{\partial E'_a}{\partial \mathbf{p}} Q^a. \quad (4.63)$$

Az első tagban ismét használjuk ki a projektorok (4.16) teljességét, és vezessük be a

$$\mathbf{W}_0 = \frac{\partial E_0(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{N} \frac{\partial \text{Sp } H(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (4.64)$$

átlagsebességet, a második tagba pedig helyettesítsük be a Q^a projektor (4.58) alakját:

$$\begin{aligned} \mathbf{W} &= \mathbf{W}_0 I + \frac{1}{N} \sum_a^N \frac{\partial E'_a}{\partial \mathbf{p}} \left(\sum_b^N M^{ab} + I \right) = \\ &= \mathbf{W}_0 I + \frac{1}{N} \sum_a^N \sum_b^N \frac{\partial E'_a}{\partial \mathbf{p}} M^{ab} + \frac{\partial \left(\sum_a^N E'_a \right)}{\partial \mathbf{p}} I . \end{aligned} \quad (4.65)$$

Az utolsó tagban levő összeg (4.61) szerint nulla. Alakítsuk tovább a kifejezést, írjuk fel a kettős összeg felét az a és b indexek felcserélésével, majd használjuk ki az M^{ab} mátrixok antiszimetriáját:

$$\begin{aligned} \mathbf{W} &= \mathbf{W}_0 I + \frac{1}{2N} \left(\sum_a^N \sum_b^N \frac{\partial E'_a}{\partial \mathbf{p}} M^{ab} + \sum_b^N \sum_a^N \frac{\partial E'_b}{\partial \mathbf{p}} M^{ba} \right) = \\ &= \mathbf{W}_0 I + \frac{1}{2N} \sum_a^N \sum_b^N \frac{\partial (E'_a - E'_b)}{\partial \mathbf{p}} M^{ab} = \mathbf{W}_0 I + \frac{1}{2N} \sum_a^N \sum_b^N \frac{\partial \hbar \omega_{ab}}{\partial \mathbf{p}} M^{ab} . \end{aligned} \quad (4.66)$$

Sikerült tehát a \mathbf{W} driftsebességet is kifejeznünk a \mathbf{W}_0 átlagsebesség, valamint az egyes altérpárokhoz tartozó tagok összegeként: az utóbbiakban az ω_{ab} lebegési frekvenciák gradiense, valamint az altérpárra jellemző M^{ab} gyengén involutórikus operátor szerepel.

Az előbbivel megegyező számítási lépésekkel maga a (4.2) Hamilton-operátor is felírható hasonló formában, az altérpárokra vonatkozó összegként:

$$H = E_0 I + \frac{1}{2N} \sum_a^N \sum_b^N \hbar \omega_{ab} M^{ab} . \quad (4.67)$$

A driftsebesség \mathbf{W} operátorának (4.66) alakjában könnyű felismerni a kvázimágneses térben mozgó kvázispin-rendszerek (3.31) driftsebességének általánosítását. A \mathbf{W}_0 átlagsebesség a kvázispin-rendszerek \mathbf{V} átlagsebességének felel meg, amely a (3.3) Hamilton-operátor „skaláris”, az egységmátrix arányossági tényezőjeként fellépő $\varepsilon(\mathbf{p})$ tagjának gradiense. E tag általánosítása a (4.59) képlettel bevezetett átlagenergia, amely a (4.2) Hamilton-operátor (4.67) alakjában maga is az egységmátrix együtthatója.

Az ebben a szakaszban levezetett összefüggések különösen akkor bizonyulnak hasznosnak, ha jól ismerjük az egyes energia-sajátalterek fizikai jellemzőit, illetve ha a rendszernek összesen két energia-sajátaltere van.

4.9. Két energiaszintű rendszerek

A szilárdtestfizikai és nanofizikai irodalomban előforduló kvantummodellek jelentős része csak két energiaszinttel rendelkezik. Ez kétféleképpen valósulhat meg:

- A (rögzített \mathbf{p} értékhez tartozó) Hamilton-operátor csak 2×2 -es mátrix. Ebben az esetben az általános, $N \times N$ -es (4.2) Hamilton-mátrix helyett elég a dolgozat 3. részében tárgyalt (3.3) mátrixszal foglalkoznunk, hiszen – mint a (3.1) fejezetben megmutattuk, minden 2×2 -es, csak \mathbf{p} -től függő mátrix felírható a (3.3) alakban. Az ilyen rendszerek általános leírására tehát elegendő a kvázispin-rendszerekre kapott eredményeket 2×2 -es mátrixokra, azaz az $S = 1/2$ esetre specializálni.
- Érdekesebb, tanulságosabb, és új eredményekhez vezethet a másik eset. Ekkor a Hamilton-mátrix 2×2 -esnél nagyobb méretű – azaz a tárgyalás során kettőnél több szabadsági fokot veszünk figyelembe –, ám a Hamilton-mátrix spektruma degenerált, és csak két különböző energia-sajátérték jelenik meg, a megfelelő sajátaltér pedig többdimenziósak. Az 5. részben látni fogjuk, hogy ebbe a kategóriába tartozik pl. az eredeti Schrödinger-féle ZB esete (5.5 fejezet), valamint a nevezetes szilárdtestfizikai modellek közül a Luttinger-modell (5.6 fejezet) is.

A két energiaszinttel jellemezhető rendszerek leírására az általános elmélet ekvivalens matematikai átfogalmazásai közül a 4.8 fejezetben ismertetett, altér-párok szerinti kifejtés kínálkozik a legjobb kiindulópontnak. Esetünkben összesen két sajátaltér, tehát egyetlen sajátaltér-pár szerepel. Ennek közvetlen következménye, hogy az ilyen rendszerekben felépő Zitterbewegung csak egyetlen egy lebegési frekvenciával rendelkezik, az eredeti Schrödinger-féle (és a kvázispin-rendszerekben fellépő) ZB-hez hasonlóan.

Esetünkben a $\mathbf{Z}(t)$, illetve a \mathbf{W} mennyiségek (4.55) vagy (4.57), illetve (4.66) képleteiben (valamint a Hamilton-operátor (4.67) alakjában) csak egyetlen összeadandó, azaz egyetlen $\omega_{ab}(\mathbf{p})$ lebegési frekvencia, valamint egyetlen $M^{ab}(\mathbf{p})$ gyengén involutórikus operátor lép fel. Ezért az altér-párokra utaló (ab) indexek el is hagyhatók. (Ne felejtsük el, hogy a (4.55) és (4.66) jellegű összegekben minden (ab) tag kétszer szerepel, ezért a kifejezések behelyettesítésekor szoroznunk kell egy kettes faktoriall.) Mi több, mint az A. függelékben megmutatjuk, ebben az esetben $M^{ab}(\mathbf{p})$ nem valódi gyengén involutórikus operátor, hanem a az (A.6) összefüggést kielégítő tükröző operátor, hiszen négyzete épp az egységoperátor: $P = M^2 = Q_1 + Q_2 = I$. Az előző fejezetben szereplő levezetések során nem használtuk ki az M^{ab} gyengén involutórikus operátorok *valódi* gyengén involutórikus voltát, ezért az ott leírtak esetünkben is változatlanul érvényesek, csak egyszerűbb formában. A speciális eset tárgyalására mindazonáltal érdemes speciális jelöléseket bevezetni.

Írjuk fel a kétszintes rendszer Hamilton-operátorát a következő alakban:

$$H = E_+(\mathbf{p}) Q_+(\mathbf{p}) + E_-(\mathbf{p}) Q_-(\mathbf{p}) , \quad (4.68)$$

ahol E_+ és E_- a két energia-sajátérték (feltesszük, hogy $E_+ > E_-$), Q_+ és Q_- pedig a megfelelő (egy- vagy többdimenziós altérre vetítő) projektorok, amelyek természetesen kielégítik a Neumann-féle ortogonalitási és teljeségi összefüggéseket:

$$(Q_+)^2 = Q_+ , \quad (Q_-)^2 = Q_- , \quad Q_+ Q_- = Q_- Q_+ = 0 , \quad Q_+ + Q_- = I . \quad (4.69)$$

Vezessük be a (4.46) definíciónak megfelelően a projektorok különbségét:

$$T = Q_+ - Q_- , \quad (4.70)$$

amely most involutórikus operátor:

$$T^2 = Q_+ + Q_- = I ,$$

és amellyel maguk a projektorok is kifejezhetők:

$$Q_+ = \frac{I + T}{2}, \quad Q_- = \frac{I - T}{2}. \quad (4.71)$$

Vezessük be ezen felül a következő jelöléseket:

$$\varepsilon = \frac{E_+ + E_-}{2}, \quad \omega = \frac{E_+ - E_-}{\hbar}. \quad (4.72)$$

E jelölések és projektorok a (4.71) alakjának felhasználásával a (4.68) Hamilton-operátor is átírható a (4.67) képletnek megfelelő alakra:

$$H(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}) I + \frac{\hbar \omega(\mathbf{p})}{2} T(\mathbf{p}). \quad (4.73)$$

Helyettesítsük be a Hamilton-operátor (4.73) alakját a helyoperátor Heisenberg-képbeli (4.28) alakjában megjelenő \mathbf{W} és $\mathbf{Z}(t)$ mennyiségek (4.66) és (4.55) képleteibe, majd használjuk ki a tükröző operátorok deriváltjaira vonatkozó (A.20) összefüggést:

$$\mathbf{W} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} I + \frac{1}{2} \frac{\partial \hbar \omega}{\partial \mathbf{p}} T, \quad (4.74)$$

$$\mathbf{Z}(t) = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t) \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} + \frac{i\hbar}{2} (1 - \cos(\omega t)) T \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}. \quad (4.75)$$

Az utóbbi képletet a (4.55) vagy a (4.57) formula mintájára átírhatjuk exponenciális alakra is, kihasználva az A. függelék (A.17) összefüggését:

$$\mathbf{Z}(t) = -\frac{1}{2} (e^{i\omega T t} - 1) \left(i\hbar T \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} \right) = -\frac{1}{2} \left(i\hbar T \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} \right) (e^{-i\omega T t} - 1). \quad (4.76)$$

E formulák közvetlenül is megkaphatók a 4.8 fejezet (4.55) és (4.57) képletéből, $N = 2$ helyettesítéssel, figyelembe véve a fentebb már említett kettes szorzótényezőt és az (A.19) összefüggést.

Képleteink most levezetett alakja közvetlenül alkalmazható konkrét kétszintes rendszerek vizsgálatára. Ilyen rendszereket elemzünk részletesen az 5. rész első néhány fejezetében.

5. rész

Alkalmazás különböző kvantummodellekre

E részben az eddigiekben részletesen kifejtett elméletet alkalmazzuk speciális, a szilárdtest-fizikai és nanofizikai irodalomban gyakran előforduló kvantum-modellekre. E modellek egy részében a szakirodalom már vizsgálta a Zitterbewegung felléptét, és a szerzők egymástól jelentősen különböző, általában az adott rendszerre kidolgozott *ad hoc* módszerekkel levezették a helyoperátor, illetve annak várható értéke időfüggésére vonatkozó formulákat. A modellek jelentős része beleillik a 3. részben leírt kvázispin-rendszerek családjába. Először ezekkel foglalkozunk az ott leírt séma alapján, majd megvizsgálunk az e családba nem illeszkedő, többkomponensű kvantum-modelleket is, és ezekre is megadjuk a ZB kifejezését.

5.1. A szilárdtestfizikában és a nanofizikában szereplő egyszerű kvázispin-rendszerek

Az 5.1 táblázatban összefoglaltuk ([A] cikkünk nyomán) az irodalomban gyakran szereplő szilárdtestfizikai és nanofizikai modelleket, amelyek Hamilton-operátora egységesen a (3.3) alakba írható. (A mezoszkopikus fizika legfontosabb fogalmait és modelljeit ismerheti [73], [74] és [75].) A táblázatban megadtuk a modell nevét, a Hamilton-operátor irodalmi alakját az ott értelmezett paraméterekkel és jelölésekkel, a (3.3) alakba történő átírás során fellépő $\mathbf{\Omega}(\mathbf{p})$ vektor és az $\varepsilon(\mathbf{p})$ függvény kifejezését az eredeti adatokkal, valamint megjelöltünk néhány irodalmi hivatkozást, ahol a szóban forgó modellt, illetve az abban fellépő Zitterbewegungot vizsgálják (az utóbbit általában *ad hoc*, az adott modellre kidolgozott módszerekkel).

Az 5.1 táblázatban $\sigma_{\pm} = \sigma^1 \pm i\sigma^2$, $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$, D pedig a modell térbeli dimenziójának száma (a tömbi modellekre $D = 2$, a síkbeli modellekre $D = 2$).

A táblázatban szereplő modellek – térbeli dimenziójuktól függetlenül – mind 2×2 -es Hamilton-operátorral írhatók le, így beleillenek a 3. részben tanulmányozott rendszerek sémájába. A fellépő Zitterbewegung vizsgálatára tehát elég azonosítani a (3.3) képletben fellépő $\varepsilon(\mathbf{p})$ átlagenergiát és a kvázi-mágneses tér szerepét játszó $\mathbf{\Omega}(\mathbf{p})$ vektort – ez a táblázat felállításával mindegyik esetben megtörtént. A következő lépésben néhány deriválással ki kell számítani az $\varepsilon(\mathbf{p})$ és az $\mathbf{\Omega}(\mathbf{p})$ mennyiségek \mathbf{p} szerinti gradiensét, majd ezeket behelyettesíteni a shift, a driftsebesség és az oszcilláló tagok (3.30), (3.31) és (3.32) képleteibe, végül a ZB kapott alakját összehasonlítani az irodalomban szereplővel. Sajnos egyes esetekben ez nem ilyen egyszerű, ugyanis az irodalomban levezetett alakok más jellegű számítás alapján jöttek létre, és a fizikailag összetartozó tagok (pl. a driftsebesség) a levezetés során különböző tagokra szétbontva jelentek meg a cikkekben. Ezért, hogy könnyebb legyen az összehasonlítás (főleg a [43] cikkben több rendszer esetén levezetett) ZB-formulákkal, kissé átalakítjuk a 3. rész központi (3.28) végeredményét (az ott szereplő \mathbf{S}^0 vektort mostantól egyszerűen \mathbf{S} -sel jelöljük):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}(t) &= \hat{\mathbf{x}}(0) + \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times \mathbf{S} \right) + \left(\mathbf{V} + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n} \mathbf{S}) \right) t + \\ &+ \left[\frac{\sin \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{S} - \mathbf{n} (\mathbf{n} \mathbf{S}) \right) - \frac{\cos \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times \mathbf{S} \right) \right] = \\ &= \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{V} t + \mathbf{K} \mathbf{S} t + \\ &+ \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times \mathbf{S} \right) (1 - \cos \Omega t) + \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} \left(\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) \right) (\Omega t - \sin \Omega t) , \end{aligned} \quad (5.1)$$

ahol kihasználtuk a (3.26) összefüggést. A képletben az \mathbf{S}^0 spinoperátor mindegyik rendszer esetében az $S = 1/2$ spinhez tartozik, ezért helyébe mindenütt $(\hbar/2)\sigma$ írható.

Ha képletünknek ebbe az alakjába helyettesítjük be az egyes vizsgált rendszerek adatait, az eredmény már közvetlenül összehasonlíthatóvá válik az irodalomban szereplő formulákkal.

A táblázatban szereplő modellek közül néhányat részletesebben is megvizsgálunk.

rendszer	D	Hamilton-operátor	$\Omega(\mathbf{p})$	$\varepsilon(\mathbf{p})$	hivatkozások
Rashba-Dresselhaus-modell	2	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\alpha}{\hbar} (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x) + \frac{\beta}{\hbar} (p_y \sigma_y - p_x \sigma_x)$	$\frac{2}{\hbar^2} \begin{pmatrix} -\alpha p_y - \beta p_x \\ \alpha p_x + \beta p_y \\ 0 \end{pmatrix}$	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$	[25, 30, 76–83]
Nehéz lyukak kvantum-völgyben	2	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i \frac{\tilde{\alpha}}{2\hbar^3} (p_-^3 \sigma_+ - p_+^3 \sigma_-)$	$\frac{2\tilde{\alpha}}{\hbar^4} \begin{pmatrix} p_y (3p_x^2 - p_y^2) \\ p_x (3p_y^2 - p_x^2) \\ 0 \end{pmatrix}$	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$	[30, 80–83, 88–92]
Tömbi Dresselhaus-modell	3	$\frac{\gamma}{\hbar^3} [\sigma_x p_x (p_y^2 - p_z^2) + \sigma_y p_y (p_z^2 - p_x^2) + \sigma_z p_z (p_x^2 - p_y^2)]$	$\frac{2\gamma}{\hbar^4} \begin{pmatrix} p_x (p_y^2 - p_z^2) \\ p_y (p_z^2 - p_x^2) \\ p_z (p_x^2 - p_y^2) \end{pmatrix}$	0	[76–83]
Egyrétegű grafén	2	$v (p_x \sigma_x + p_y \sigma_y)$	$\frac{2v}{\hbar} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ 0 \end{pmatrix}$	0	[39, 93–99, 102–106]
Kétrétegű grafén 2 × 2-es modellje	2	$\frac{1}{2m} \left(\frac{p_+^2 + p_-^2}{2} \sigma_x - \frac{p_-^2 - p_+^2}{2i} \sigma_y \right)$	$\frac{1}{m\hbar} \begin{pmatrix} p_x^2 - p_y^2 \\ 2p_x p_y \\ 0 \end{pmatrix}$	0	[39, 107, 108]
Cooper-párok	3	$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_F \right) \sigma_z + \Delta \sigma_x$	$\frac{2}{\hbar} \begin{pmatrix} \Delta \\ 0 \\ \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} - E_F \end{pmatrix}$	0	[29, 109, 110]
Majdnem szabad elektronok	3	$H = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} & V_{\mathbf{q}} \\ V_{\mathbf{q}}^* & \epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \Re\{V_{\mathbf{q}}\} \\ -\Im\{V_{\mathbf{q}}\} \\ \frac{1}{2} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \end{pmatrix}$	0	[26–28, 33]

5.1. táblázat. A (3.3) alakú Hamilton-operátorral leírható különböző rendszerek.

 Jelölések: $\sigma_{\pm} = \sigma^x \pm i \sigma^y$, $p_{\pm} = p_x \pm i p_y$, D pedig a modell térbeli dimenzióinak száma.

5.2. Az egyrétegű grafén

A grafén 2004-es felfedezése óta a nanofizika divatos csodaanyaga. Ennek oka egyrészt majdani karrierje, amit kutatói az elektronikai alkalmazásokban számára befutni remélnek (és amihez már csak a makroszkópikus méretű grafénkristályok kontrollált nagyüzemi előállítását, no meg a kristályban zajló folyamatok elektromos térrel történő vezérlésének apró kérdéseit kell megoldani), másrészt unikális fizikai tulajdonságai, elsősorban a grafénben mozgó elektronoknak a relativisztikus Dirac-egyenletre emlékeztető diszperziós relációja. A grafén felfedezésének, előállításának és első vizsgálatának tudománytörténeti jelentőségét ismerte el az André Geimnek és Konstantin Novoselovnak ítélte 2010. évi fizikai Nobel-díj. A grafén elektronszerkezetét már jó előre, az anyag tényleges létezéséről mit sem tudva kiszámolták [93], a grafén felfedezését és első fizikai vizsgálatát lásd [102, 103], a részleteket lásd: [94–101]. A grafénben megjelenő ZB-ról [39] számol be. A grafénben mozgó elektronok ballisztikus tulajdonságai és a sörétzaj diffúziós jellege közti ellentmondást vizsgálja a [111] cikk - a szerzők az ellentmondás feloldását a ZB megjelenésének tulajdonítják. A kétdimenziós hullámcsomagok terjedésének nemtriviális tulajdonságait vizsgálja [112]. Az egy- és kétrétegű grafén elektronszerkezetéről és számos más érdekes fizikai tulajdonságairól részletes leírás olvasható magyarul pl. Cserti József akadémiai doktori értekezésében [113].

A(z egyrétegű) grafén a tömbös grafitból származtatható: egyetlen, szénatomokból álló hatszöges szerkezetű atomsík alkotja. A szénatomok négy elektronjából három sp^2 hibridizációval hozza létre a 120° -os szögben álló síkbeli kötéseket, így minden atomnak marad egy elektrona, amely a rács síkjára merőleges atompályán helyezkedik el. Ezek mozgása, ug-rálása, kölcsönhatása okozza a grafén számos érdekes elektronikus és transzport-jellemzőjét.

A szoros kötésű (tight-binding) modell alapján végzett számítások szerint az ideális végtelen grafénrács vegyérték- és vezetési sávja a Brillouin-zóna ún. K- és K'-pontjaiban érintkezik. E pontok környékén a diszperziós reláció lineárisan függ a K-ponttól számított (kvázi-)impulzustól. Az így kialakuló ún. Dirac-kúpok a szabad, tömeg nélküli fermionok Dirac-egyenletének diszperziós relációját imitálják. Alapállapotban (elektromosan semleges, szennyezésmentes esetben) a Fermi-energia épp a Dirac-kúpok csúcsánál helyezkedik el, ezért első közelítésben a bonyolult energiasáv-felületnek csak ez a része játszik szerepet a grafén elektronikus jellemzőinek, vezetési jelenségeinek kialakításában. Így a grafén a relativisztikus kvantumelmélet nanofizikai laboratóriumokban megvalósuló tesztelésének ideális anyaga. A grafén elektronszerkezetének különböző kvantum-modelljei a diszperziós reláció Fermi-szint körüli részét, azaz a Dirac-kúpokat próbálják reprodukálni, lehetőleg minél egyszerűbb szerkezetű, analitikusan is kezelhető effektív Hamilton-operátor segítségével, közben a valódi grafén számos tulajdonságát (pl. az elektronspint vagy a diszperziós reláció hatszöges síkbeli anizotróp irányfüggő szerkezetét) elhanyagolva.

A következőkben a grafén legegyszerűbb effektív kvantum-modelljét használjuk. A hatszöges struktúra elemi cellájában két, nem ekvivalens helyzetű atom helyezkedik el. Ezért a grafén elektronszerkezetét leíró effektív Hamilton-operátor 2×2 -es mátrix lesz, melynek diagonális elemei az egyes atomokhoz kötött elektronok sajátenergiáját, nemdiagonális elemei pedig a két alrács közti kölcsönhatást írják le. Mindkét típusú mátrixelem csak a \mathbf{p} kvázi-impulzus függvénye. (Az elektronok spin-szabadsági foka ebben az egyszerű modellben nem jelenik meg, az csak külső mágneses tér alkalmazása esetén játszik szerepet.) Az egyrétegű grafénnek ez a modellje tehát beillik a 3. részben tárgyalt kvázispin-rendszerek közé, és az ott leírt módszerekkel vizsgálható.

Az egyrétegű grafén effektív Hamilton-operátora az 5.1 táblázatban szereplő rendszerek közül a legegyszerűbb alakú:

$$\hat{H} = v(\mathbf{p} \sigma), \quad (5.2)$$

ahol \mathbf{p} a kvázi-impulzusnak a Brillouin-zóna K (vagy K') pontjától számított értékét jelenti. E vektor harmadik, a rendszer (xy) síkjára merőleges p_z komponensét azonosan nullának tekintjük. A képletben v egy sebesség-dimenziójú állandó paraméter, mérésekből meghatározott értéke kb. 10^6 m/s, azaz $v \approx c/300$, ahol c a vákuumbeli fénysebesség.

Azonnal látható, hogy az (5.2) Hamilton-operátor sajátértékei $(\pm vp)$, ahol p a két-dimenziós \mathbf{p} vektor abszolút értéke.

Az (5.2) Hamilton-operátort a relativisztikus elektron Dirac-féle (2.2) Hamilton-operátorával szokták összehasonlítani. A hasonlóság szembeeső, ezért beszélnek a grafénban Dirac-kúpról, ezért nevezik a grafént a relativisztikus kvantumelmélet nanofizikai próbaterepének stb. Ám a két operátor különbségei is feltűnőek:

- A Dirac-esetben a Hamilton-operátor 4×4 -es mátrix, a grafén esetében csak 2×2 -es. Ennek megfelelően a négy Dirac-féle 4×4 -es α^k és β mátrix szerepét a három 2×2 -es σ^k Pauli-mátrix veszi át (ténylegesen csak σ^1 és σ^2 jelenik meg).
- A Dirac-egyenletben az egyik kettősséget a (2.1) relativisztikus energia pozitív és negatív értéke, másképp fogalmazva az elektron- és pozitron-sáv jelenléte adta, a másik kettősség az elektronspin két lehetséges beállását tükrözte, így lett az állapotvektor négy komponensű. A grafén esetében a kettősség a hatszögrács két alrácsára utal, a spin mint szabadsági fok nem jelenik meg. A formális párhuzam mögött tehát nincs mély fizikai hasonlóság.
- A leglényegesebb különbség az m tömeget tartalmazó tag hiánya a grafén Hamilton-operátorában. Ezt szokták úgy fogalmazni, hogy a grafén kvázirészecskeje *tömegtelen Dirac-fermion*. Ennek következménye a Dirac-pont megjelenése, ahol az alsó és felső sáv, azaz a vegyértéksáv és a vezetési sáv gap nélkül érintkezik. A két sáv közti ugrásokra tehát tetszőlegesen kis energiakülönbséggel sor kerülhet.
- A Dirac-elektron Hamilton-operátorában az impulzust tartalmazó tag együtthatója c , a vákuumbeli fénysebesség. Ezzel szemben a grafén esetén a megfelelő helyen álló v paraméter a Dirac-pontbeli Fermi-sebesség, ami kb. 300-szor kisebb a vákuumbeli fénysebességnél. Ezért remélik azt, hogy a Dirac-elektron esetén kimutathatatlan frekvenciájú és amplitudójú (részletesen lásd a 2.5 fejezetben) Zitterbewegung a grafén (és más hasonló rendszerek) esetén kísérletileg kimutathatóvá válik.

Az egyrétegű grafénban fellépő Zitterbewegung vizsgálatához számítsuk ki az $\varepsilon(\mathbf{p})$ és az $\Omega(\mathbf{p})$ mennyiségeket, valamint \mathbf{p} szerinti gradiensüket! Az $\varepsilon(\mathbf{p})$ átlagenergia nulla, ezért a driftsebesség reguláris tagja is eltűnik. Az effektív kvázi-mágneses tér egyszerűen arányos a \mathbf{p} impulzussal:

$$\Omega(\mathbf{p}) = \frac{2v}{\hbar} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

ezért a \mathbf{K} deriváltmátrix állandó, nevezetesen az (xy) síkra vetítő projektorral arányos mátrix lesz:

$$\mathbf{K} = \frac{2v}{\hbar} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

A Zitterbewegung frekvenciája az $\Omega(\mathbf{p})$ vektor abszolút értéke:

$$\Omega = \frac{2v}{\hbar} p . \quad (5.5)$$

Az anomális sebességben ennek \mathbf{p} szerinti gradiense jelenik meg:

$$\frac{\partial \Omega(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{K} \mathbf{n} = \frac{2v}{\hbar} \mathbf{n} , \quad (5.6)$$

ahol \mathbf{n} a \mathbf{p} vektor irányába mutató egységvektor.

Az anomális sebesség (3.31) képletében ezt még szorozni kell az $(\mathbf{n} \mathbf{S}) = \hat{H}/\Omega$ operátorral. Ha a spinmátrixból leválasztjuk a $(\hbar/2)$ szorzót, az anomális sebességre, és a vele egyenlő driftsebességre a következőt kapjuk:

$$\mathbf{W} = \mathbf{V} + \mathbf{W}_a = \mathbf{W}_a = \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n} \mathbf{S}) = v \mathbf{n} (\mathbf{n} \sigma) . \quad (5.7)$$

Az $(\mathbf{n} \sigma)$ operátor sajátértékei ± 1 . A grafén effektív (5.2) Hamilton-operátorában szereplő v paraméter tehát nem csak a Fermi-sebességet, azaz a Dirac-kúp meredekségét jelenti, hanem egyben a részecske driftsebességének abszolút értékét is. A driftsebesség iránya párhuzamos a \mathbf{p} impulzusvektorral, a pozitív energiájú sajátállapotban ugyanabba az irányba, a negatív energiájú sajátállapotban ellenkező irányba mutat, mint az impulzus.

Végül írjuk fel a helyoperátor oszcilláló tagjainak együtthatóit:

$$\mathbf{K} (\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0) = \frac{2v}{\hbar} \begin{pmatrix} n_y \\ -n_x \\ 0 \end{pmatrix} S^3 = v (\mathbf{n} \times \mathbf{e}) \sigma^3 = v (\mathbf{n} \times \mathbf{e}) (\mathbf{e} \sigma) , \quad (5.8)$$

$$\mathbf{K} (\mathbf{S}^0 - (\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0) \mathbf{n}) = \frac{2v}{\hbar} \begin{pmatrix} n_y \\ -n_x \\ 0 \end{pmatrix} (n_y S^1 - n_x S^2) = v (\mathbf{n} \times \mathbf{e}) ((\mathbf{n} \times \mathbf{e}) \sigma) , \quad (5.9)$$

ahol bevezettük a rendszer (xy) síkjára merőleges $\mathbf{e} = (0, 0, 1)$ egységvektort.

Ezekkel már felírhatjuk a helyoperátor oszcilláló részét:

$$\mathbf{C}(t) = \frac{v}{\Omega} (\mathbf{n} \times \mathbf{e}) \left[((\mathbf{n} \times \mathbf{e}) \sigma) \sin \Omega t - (\mathbf{e} \sigma) \cos \Omega t \right] . \quad (5.10)$$

Az $(\mathbf{n} \times \mathbf{e}) \sigma$ operátor $n_z = 0$ esetben könnyen átírható $i\sigma^3 (\mathbf{n} \sigma)$ alakra. Ezzel az egyrétegű grafénben mozgó elektron helyoperátorának teljes alakja Heisenberg-képben:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + v \mathbf{n} (\mathbf{n} \sigma) t + \frac{v}{\Omega} (\mathbf{n} \times \mathbf{e}) (\mathbf{e} \sigma) \left[(1 - \cos \Omega t) I + i (\mathbf{n} \sigma) \sin \Omega t \right] . \quad (5.11)$$

Vezessük be az $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$ vektor komplex komponenseit a

$$n_{\pm} = n_x \pm i n_y$$

definícióval. A Pauli-mátrixok és az \mathbf{e} vektor konkrét alakját behelyettesítve végeredmé-

nyünk a következő alakba írható:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + vt \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & n_- \\ n_+ & 0 \end{pmatrix} + \frac{v}{\Omega} \begin{pmatrix} -n_y \\ n_x \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \Omega t - 1 & -i n_- \sin \Omega t \\ i n_+ \sin \Omega t & 1 - \cos \Omega t \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

(Ebben és a későbbi hasonló képletekben az \mathbf{n} vektor és az őt követő mátrix között nem mátrixszorzás, hanem tenzori szorzás szerepel – ezt külön nem jelöljük. Már a Dirac-modell a (2.10) sebességvektorának komponensei is az α mátrixok voltak: fenti képletünkben ez a tömör jelölés jelenik meg vektor- és mátrix-komponensekre bontva.)

Az (5.12) képlet – jelölésektől és a tagok csoportosításától eltekintve – megegyezik Schlie-
mann et al. [30] cikkében közölt, és az [A] cikkünkben reprodukált következő eredménnyel:

$$x(t) = x_0 + v\sigma_x t + \frac{p_y \hbar}{p^2} \frac{\hbar}{2} \sigma_z \left[1 - \cos \left(\frac{2pv}{\hbar} t \right) \right] + \frac{p_y \hbar}{p^3} \frac{\hbar}{2} (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x) \left[\frac{2pv}{\hbar} t - \sin \left(\frac{2pv}{\hbar} t \right) \right],$$

$$y(t) = y_0 + v\sigma_y t - \frac{p_x \hbar}{p^2} \frac{\hbar}{2} \sigma_z \left[1 - \cos \left(\frac{2pv}{\hbar} t \right) \right] - \frac{p_x \hbar}{p^3} \frac{\hbar}{2} (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x) \left[\frac{2pv}{\hbar} t - \sin \left(\frac{2pv}{\hbar} t \right) \right].$$

Az (5.11) vagy az (5.12) formulákból leolvashatók az egyrétegű grafénban kialakuló elektromozgás általános tulajdonságai. Már láttuk, hogy a $\varepsilon(\mathbf{p})$ átlagenergia-tag hiányában (másképp megfogalmazva: mert az (5.2) Hamilton-operátor spurtalan) a driftsebességnek nincs reguláris komponense. A teljes driftsebesség az anomális tagból származik, ez párhuzamos a \mathbf{p} impulzussal, iránya pedig az energia-sajátérték előjelének megfelelően megegyezik vagy ellentétes az impulzussal. Fellép az oszcilláló Zitterbewegung is. Ez – lévén a rendszer csak kétkomponensű – egyetlen frekvenciával jellemezhető.

A Zitterbewegung iránya ebben a rendszerben merőleges a részecske \mathbf{p} impulzusára, azaz a ZB itt transzverzális jelenség. Ez azt jelenti, hogy ha a részecske helyoperátorának várható értéke iránt érdeklődve a helyoperátorra kapott fenti kifejezést az állapotvektor kezdeti értékével „szendvicseljük”, az állapotvektor és a képletben szereplő mátrixok egy-egy skaláris amplitudót eredményeznek, a helyzet várható értékének vektori jellegét pedig az impulzusra merőleges, de a rendszer síkjába eső $(\mathbf{e} \times \mathbf{p})$ vektor határozza meg. A helyoperátor várható értékének rezgőmozgása ezért minden esetben merőleges lesz az impulzus – és így a driftsebesség – irányára. (Később látni fogjuk, hogy más rendszerekben longitudinális, illetve vegyes típusú ZB is fellép.) A ZB amplitúdója az egyrétegű grafénban (\hbar/p) nagyságrendjébe esik (ne felejtsük el, hogy a p kifejezés itt a Brillouin-zónában a K ponttól, azaz a Dirac-ponttól mért távolságot jelenti). Kis p , azaz a Fermi-szinttől mért kis energia-értékek esetén tehát a Zitterbewegung amplitúdója jelentős lehet.

Az (5.12) formulát tovább alakíthatjuk, ha bevezetjük az (x, y) síkban fekvő \mathbf{p} vektor φ azimutuszögét: $\mathbf{p} = p(\cos \varphi, \sin \varphi, 0)$. Ezzel a jelöléssel a Heisenberg-képbeli helyoperátor a következő lesz:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + t \frac{v \mathbf{p}}{p} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2p^2} (\mathbf{p} \times \mathbf{e}) \begin{pmatrix} 1 - \cos \Omega t & i e^{-i\varphi} \sin \Omega t \\ -i e^{i\varphi} \sin \Omega t & \cos \Omega t - 1 \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Eredményünknek ezt az alakját érdemes összehasonlítani a kétrétegű grafén egyszerűsített modelljének Hamilton-operátora alapján levezetett (5.32) képlettel.

5.3. Néhány további egyszerű rendszer

Ebben a fejezetben három további, az 5.1 táblázatban szereplő egyszerű rendszert vizsgálunk meg. A számítások nem nehezek, az eredmények interpretációja azonban a ZB néhány új jellemzőjére mutat rá, ezért érdemes ezeket részletezni.

A három vizsgált egyszerű rendszer közös tulajdonsága, hogy a/ két energiaszintes és degenerátlan, azaz a modell 2×2 -es mátrixokkal dolgozik; b/ kétdimenziós, azaz a modellbeli részecskék mozgása egy síkban (a koordináta-rendszer célszerű választása mellett az (x, y) síkban) történik, a \mathbf{p} impulzusvektor harmadik, p_z komponense zérus.

A vizsgálandó három modell beleillik a 3. részben vizsgált kvázispin-rendszerek közé, a spinparaméter $S = 1/2$ választásával, másrészt a 4.9 fejezetben tárgyalt két energiaszintű rendszerek közé is. Így mindkét, a dolgozat megfelelő helyén bemutatott általános módszer alkalmazható leírásukra. Mi most a 3. rész formalizmusát, nevezetesen a (3.27) képletet használjuk az egyes rendszerekben fellépő ZB kiszámítására. Elegendő lenne egyszerűen az egyes rendszerek Hamilton-operátorát és az abból származtatott mennyiségeket behelyettesíteni e formulába. A 2×2 -es spinmátrixok most arányosak a Pauli-mátrixokkal: $\mathbf{S} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$, ezek fellépte viszont további egyszerűsítést tesz lehetővé.

Induljunk ki a Pauli-mátrixok jellegzetes $\sigma^k \sigma^l = \delta_{kl}I + i \varepsilon_{klm} \sigma^m$ szorzásszabályából, és szorozzuk meg ezt az \mathbf{n} egységvektor n_l komponensével (ezt automatikus szummázás követi az l indexre):

$$\sigma^k (\mathbf{n} \sigma) = n_k I + i \varepsilon_{klm} n_l \sigma^m, \quad (5.14)$$

vagy vektoros alakban:

$$\sigma (\mathbf{n} \sigma) = \mathbf{n} I + i \mathbf{n} \times \sigma. \quad (5.15)$$

Fejezzük ki ebből a (3.27) formulában is szereplő $\mathbf{n} \times \mathbf{S}$ kifejezést:

$$\mathbf{n} \times \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2i} (\sigma (\mathbf{n} \sigma) - \mathbf{n} I). \quad (5.16)$$

Írjuk fel az I egységmátrixot mint az $(\mathbf{n} \sigma)$ mátrix négyzetét, majd emeljük ki jobbról az $(\mathbf{n} \sigma)$ mátrixot, és használjuk ki, hogy $(\mathbf{n} \mathbf{n}) = 1!$ A kifejezésben felismerhetjük a kétszeres vektoriális szorzatot:

$$\mathbf{n} \times \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2i} (\sigma (\mathbf{n} \mathbf{n}) - \mathbf{n} (\mathbf{n} \sigma)) (\mathbf{n} \sigma) = -i (\mathbf{n} \times (\mathbf{S} \times \mathbf{n})) (\mathbf{n} \sigma). \quad (5.17)$$

Szorozzuk meg a képletet jobbról a $i(\mathbf{n} \sigma)$ kifejezéssel:

$$\mathbf{S} - \mathbf{n} (\mathbf{n} \mathbf{S}) = \mathbf{n} \times (\mathbf{S} \times \mathbf{n}) = i (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) (\mathbf{n} \sigma). \quad (5.18)$$

A (3.27) képlet oszcilláló tagjában szereplő szinuszos és koszinuszos tag együtthatómátrixa tehát csak egy $i(\mathbf{n} \sigma)$ szorzóban különbözik egymástól. Ez összhangban van a 4.9 fejezet eredményével is, mely szerint a kétszintes rendszerekben a koszinuszos és a szinuszos tagok együtthatói csak egy (iT) szorzóban különböznek, ahol T involutórikus, tükröző mátrix, melynek négyzete az egységmátrix – ezt a szerepet most az $(\mathbf{n} \sigma)$ mátrix játssza. A fentiek

alapján tehát 2×2 -es spinmátrixok esetén a (3.27) formula a következőképp alakul:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \left(\mathbf{V} + \frac{\hbar}{2} \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n} \sigma) \right) t + \\ + \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) \left[(1 - \cos \Omega t) I + i (\mathbf{n} \sigma) \sin \Omega t \right]. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Az $(\mathbf{n} \sigma)$ mátrix egyszerűen kifejezhető a (3.3) képletbeli \hat{H} Hamilton-operátor második, spurttalan \hat{H}' tagjával: $(\mathbf{n} \sigma) = 2 \hat{H}' / \hbar \Omega$. Ezért az egyes konkrét rendszerekre csak az (5.19) formulában szereplő további néhány kifejezést kell kiszámítanunk. E fejezetben ezt a képletet alkalmazzuk három konkrét kvantummodell vizsgálatára.

E modellek kétdimenziós rendszereket írnak le, azaz az elektronok, illetve más vizsgált kvázirészecskék mozgása az (x, y) síkra korlátozódik. Ezért a \mathbf{p} (kvázi-)impulzus-vektor harmadik, z -irányú komponensét nullának tekintjük. Így e vektor irányának jellemzésére elegendő az (x, y) síkbeli φ azimutszög. Ennek segítségével a \mathbf{p} vektor így írható fel: $\mathbf{p} = p (\cos \varphi, \sin \varphi, 0)$. Hasznos lesz bevezetni a \mathbf{p} vektor „gömbi” komponenseit is:

$$p_{\pm} = p_x \pm i p_y = p e^{\pm i \varphi}, \quad (5.20)$$

valamint az (x, y) síkra merőleges $\mathbf{e} = (0, 0, 1)$ egységvektort.

Az (5.19) képlet szögletes zárójelében szereplő kifejezés a Pauli-mátrixok konkrét alakja és a φ azimutszög felhasználásával a következő alakra hozható:

$$(1 - \cos \Omega t) I + i (\mathbf{n} \sigma) \sin \Omega t = \begin{pmatrix} 1 - \cos \Omega t & i e^{-i \varphi} \sin \Omega t \\ i e^{i \varphi} \sin \Omega t & 1 - \cos \Omega t \end{pmatrix}. \quad (5.21)$$

Ha ezt a mátrixot balról megszorozzuk a $\sigma^3 = (\mathbf{e} \sigma)$ mátrixszal, az eredmény megegyezik az egyrétegű grafénra kapott eredményünk utolsó, (5.13) alakjában szereplő oszcilláló taggal. Ezen nem kell csodálkoznunk, hiszen a 5.2 fejezetben részletesen tárgyalt egyrétegű grafén is beillik a jelen fejezetben vizsgált 2×2 -es mátrixokkal leírt kétdimenziós modellek közé.

5.3.1. A kétrétegű grafén egyszerűsített modellje

A kétrétegű grafén két hatszöges szerkezetű szénatom-rétegből áll, melyek egymáshoz képest elcsúsztatva helyezkednek el. Az anyag felfedezéséről és első vizsgálatáról lásd [107], fizikai tulajdonságairól lásd [108], a kétrétegű grafénban megjelenő ZB-ról [39] számol be, magyar nyelvű áttekintés [113]. A rendszer különböző modelljeiben a rétegeken belüli elsőszomszéd-kölcsönhatáson kívül a két rétegben egymás fölött elhelyezkedő atomok közt fellépő kölcsönhatást veszik figyelembe. A rendszer természetes modellje négy komponensű, mert mindkét réteg A és B alrácsaiban elhelyezkedő atomok hullámfüggvényeit használja bázisul. E modellt az 5.8 fejezetben vizsgáljuk meg részletesebben. A modell továbbfejlesztett változatában már a két réteg mindkét alrácsában elhelyezkedő atomok egymással való kölcsönhatásait is figyelembe veszik. Szemben az előző modellel, ebben a változatban már megszűnik a rendszer (x, y) síkjában fennálló izotrópia, és a valódi rendszer hatszöges szerkezetét jobban tükröző, háromfogsú szimmetriájú szögfüggés jelenik meg. Ezzel együtt a diszperziós reláció felülete is jellegzetes topológiai változást szenved, a körszimmetrikus Dirac-kúpok közelében 3–3 új, anizotróp, elliptikus Dirac-kúp jelenik meg („trigonal warping”, „trigonális torzulás”). Mint a [D] cikkben megmutattuk, ez a topológiai módosulás a grafén minimális vezetőképességében az újonnan bevezetett csatolási állandótól nem analitikus módon függő lényeges változáshoz

vezet. A rendszerben fellépő ZB meghatározására az 5.8 fejezetben leírt számítás erre az anizotrop rendszerre is kiterjeszthető, sok technikai nehézség árán, és viszonylag kevés elméleti újdonságot eredményezve.

Ebben a szakaszban a kétrétegű grafén legegyszerűbb modelljével foglalkozunk. E modellhez úgy juthatunk, hogy az előzőekben vázolt négykomponensű modellben a rétegek közti kölcsönhatás erősségét leíró paraméter szerint perturbációs számítást hajtunk végre, és az első rendben megállunk. Az eljárás hasonlít ahhoz, ahogy az elektromágneses térben mozgó elektronok Dirac-elméletének nemrelativisztikus közelítésekor az E energia és az mc^2 nyugalmi energia különbsége szerint fejtünk sorba, a négykomponensű bispinorokat pedig „nagy” és „kis” spinorokra bontva végül a kétkomponensű spinorokra vonatkozó Pauli-egyenlethez jutunk. Hasonlóképp kapjuk a kétrétegű grafén egyszerűsített modelljét. A diszperziós reláció nyelvén is megfogalmazhatjuk az eljárást. Mint az 5.8 fejezetben részletesen látni fogjuk, a kétrétegű grafén izotrop modelljében a diszperziós reláció négy parabolából áll, melyek közül kettő (egy felfelé és egy lefelé nyitott parabola) az origóban érinti egymást, a másik két parabola pedig az előző kettő állandó értékkel eltolt kópiája. Az egyszerűsített modell csak a két érintkező parabolát veszi figyelembe, a másik két parabola „túl messze van”, ezért az őket érintő elektron-átmeneteket, azaz a két „távoli” parabolát elhanyagolják. Az egyrétegű grafén origóban (pontosabban a Brillouin-zóna K és K' pontjaiban) csúcsukkal érintkező „Dirac”-kúpjai helyébe tehát az ugyancsak e pontokban csúcsukkal egymást érintő „Newton”-parabolák lépnek. Ezért a diszperziós reláció a lineáris kváziimpulzus-függés helyett \mathbf{p} -ben kvadratikus lesz (a kváziimpulzust az érintkezési ponttól számítjuk).

A kétrétegű grafén egyszerűsített Hamilton-operátora a fenti eljárás eredményeképpen a következő alakú lesz:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{p_+^2 + p_-^2}{2} \sigma_x - \frac{p_-^2 - p_+^2}{2i} \sigma_y \right) = \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 0 & p_-^2 \\ p_+^2 & 0 \end{pmatrix} = \frac{p^2}{2m} \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\varphi} \\ e^{2i\varphi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.22)$$

E Hamilton-operátor energia-sajátértékei, mint az könnyen ellenőrizhető: $\pm p^2/2m$. Ez két, egymást az origóba érintő parabolával ábrázolható, melyek az egyrétegű grafén Dirac-kúpja eltorzult változatának tekinthetők. Mindazonáltal az érintés következtében energiahézag, „gap” továbbra sincs a két sáv között, ezért tetszőlegesen kis energiájú átmenetek is lehetségesek.

E modell jellegzetessége, hogy a kvadratikus \mathbf{p} -függés következtében nem tartalmaz semmiféle, az egyrétegű grafén elméletében szereplő v -hez hasonló sebesség-dimenziójú paramétert, így a kísérleti adatokhoz való illesztés kizárólag az m effektív tömeg-paraméter segítségével lehetséges. Igen figyelemre méltó, hogy az egyszerűsített modell első közelítésben így is helyesen adja vissza a kétrétegű grafén elektronikus és transzport-jellemzőit [108].

Az (5.22) Hamilton-operátor beleillik a 3. részben vizsgált kvázispin-rendszerek közé, és az ott leírt módszerrel tárgyalható. Mivel a diszperziós reláció – az egyrétegű grafénhez hasonlóan – továbbra is két, egymástól csak előjelben különböző ágból áll, a (3.3) Hamilton-operátorban az egységmátrix együtthatójaként fellépő $\varepsilon(\mathbf{p})$ átlagenergia most is eltűnik. Az effektív (kvázi-)mágneses térként viselkedő $\Omega(\mathbf{p})$ vektor pedig a következő lesz:

$$\Omega(\mathbf{p}) = \frac{1}{m\hbar} \begin{pmatrix} p_x^2 - p_y^2 \\ 2p_x p_y \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{p^2}{m\hbar} \begin{pmatrix} \cos 2\varphi \\ \sin 2\varphi \\ 0 \end{pmatrix} = \Omega(\mathbf{p}) \mathbf{n}(\mathbf{p}), \quad (5.23)$$

ahol

$$\Omega = p^2/m\hbar, \quad (5.24)$$

az $\Omega(\mathbf{p})$ vektor irányába mutató $\mathbf{n}(\mathbf{p})$ egységvektor pedig a $(\cos 2\varphi, \sin 2\varphi, 0)$ vektor lesz. Ezután a (3.16) képletben definiált derivált-mátrixot kell kiszámítanunk:

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{m\hbar} \begin{pmatrix} 2p_x & 2p_y & 0 \\ -2p_y & 2p_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{2p}{m\hbar} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Az anomális sebességben a frekvencia \mathbf{p} szerinti gradiense jelenik meg:

$$\frac{\partial \Omega(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{K} \mathbf{n} = \frac{2}{m\hbar} \mathbf{p} = \frac{2\Omega}{p^2} \mathbf{p}. \quad (5.26)$$

Az anomális sebesség operátorának (3.31) képletében ezt még szorozni kell az $(\mathbf{n} \mathbf{S}) = \hat{H}/\Omega$ operátorral:

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}_a = \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n} \mathbf{S}) = \frac{2\hat{H}}{p^2} \mathbf{p} = \frac{\mathbf{p}}{m} \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\varphi} \\ e^{2i\varphi} & 0 \end{pmatrix} = \frac{\mathbf{p}}{m} (\mathbf{n} \sigma). \quad (5.27)$$

Az $(\mathbf{n} \sigma)$ operátor sajátértékei ± 1 . A driftsebesség iránya tehát a kétrétegű grafén egyszerűsített modelljében is párhuzamos a \mathbf{p} impulzusvektorral, a pozitív energiájú sajátállapotban ugyanabba az irányba, a negatív energiájú sajátállapotban ellenkező irányba mutat, mint az impulzus.

Végül írjuk fel a helyoperátor oszcilláló tagjainak együtthatóit:

$$\mathbf{n} \times \mathbf{S} = \begin{pmatrix} -S_z \sin 2\varphi \\ S_z \cos 2\varphi \\ -S_y \cos 2\varphi + S_x \sin 2\varphi \end{pmatrix} = S_z \begin{pmatrix} -\sin 2\varphi \\ \cos 2\varphi \\ i(\mathbf{n} \sigma) \end{pmatrix}, \quad (5.28)$$

ahol az S_z operátor kiemelésekor kihasználtuk a Pauli-mátrixok szorzásának ismert szabályait. Az (5.25) képletben szereplő K mátrixszal szorozva:

$$\mathbf{K} (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) = \frac{2p}{m\hbar} S_z \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ -\cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2\Omega}{p^2} (\mathbf{p} \times \mathbf{e}) S_z. \quad (5.29)$$

Most már felírhatjuk a helyoperátor oszcilláló részét:

$$\mathbf{C}(t) = \frac{2}{p^2} (\mathbf{e} \times \mathbf{p}) S_z \left(\cos \Omega t - i(\mathbf{n} \sigma) \sin \Omega t \right). \quad (5.30)$$

A kétrétegű grafén egyszerűsített modelljében az elektron helyoperátorának teljes alakja Heisenberg-képben:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + \frac{\mathbf{p} \hat{H}}{m\Omega} t + \frac{2}{p^2} (\mathbf{p} \times \mathbf{e}) S_z \left[(1 - \cos \Omega t) + i(\mathbf{n} \sigma) \sin \Omega t \right]. \quad (5.31)$$

A \mathbf{n} vektort az azimutszöggel kifejezve, valamint a Pauli-mátrixok konkrét alakjának behelyettesítése után a helyoperátor következő formájához jutunk:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + t \frac{\mathbf{p}}{m} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i2\varphi} \\ e^{i2\varphi} & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{p^2} (\mathbf{p} \times \mathbf{e}) \begin{pmatrix} 1 - \cos \Omega t & i e^{-i2\varphi} \sin \Omega t \\ -i e^{i2\varphi} \sin \Omega t & \cos \Omega t - 1 \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

Ezt az eredményt közvetlenül összehasonlíthatjuk az egyrétegű grafénra kapott (5.13) képlettel. A hasonlóság szembeszökő. A különbségek: a) a driftsebesség nagysága nem a Dirac-jellegű modellben szereplő v paraméter, hanem a kvadratikus impulzusfüggésű modellekben megszokott p/m érték; b) az oszcilláló tagok együtthatójában megjelenik egy kettes faktor; c) az impulzusvektor φ azimutszöge helyett mindenütt annak kétszerese szerepel (ez a \mathbf{p} vektor helyett a $\mathbf{\Omega}$ vektor azimutszöge); d) a rezgés frekvenciáját az (5.5) helyett az (5.24) formula adja meg. A két rendszer alapvető hasonlósága a Zitterbewegung fő vonásaiban is megnyilvánul: a driftsebesség mindkét esetben párhuzamos az impulzussal, az oszcilláló mozgás pedig transzverzális, merőleges az impulzusra.

A kétrétegű grafén egyszerűsített, kétkomponensű modelljében tehát jellegében az egyrétegű grafénhoz hasonló Zitterbewegung jelenik meg. Az 5.8 fejezetben látni fogjuk, hogy a kétrétegű grafén több szabadsági fokot figyelembe vevő, realiztikusabb négykomponensű modelljében lényegesen bonyolultabb, komplexebb struktúrát mutató Zitterbewegung lép fel.

5.3.2. Nehéz lyukak kvantumvölgyben

A kétdimenziósnaak tekinthető félvezető-rendszerek egyik típusában nehéz (nagy effektív tömegű) lyukak mozognak egy külső elektromos tér által kialakított potenciálvölgyben (lásd pl. [80–83, 88–92], a rendszerben fellépő ZB-ról [30]). E rendszer tanulmányozására használják a következő, köbös impulzusfüggést mutató effektív Hamilton-operátort:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i \frac{\beta}{2} (p_-^3 \sigma_+ - p_+^3 \sigma_-) . \quad (5.33)$$

A képletben $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$, a $\sigma_{\pm} = \sigma^1 \pm i\sigma^2$ mátrixok pedig a Pauli-mátrixok hasonló kombinációi. Az impulzusvektor harmadik komponense ismét zérus. A 5.1 táblázatban szereplő, az irodalomból származó jelölést egyszerűsítve az $\tilde{\alpha}/\hbar^3$ együtthatót β -val jelöltük. A fentieket behelyettesítve leolvashatjuk az $\mathbf{\Omega}$ vektor alakját:

$$\mathbf{\Omega} = \frac{\beta}{\hbar} \begin{pmatrix} p_y (3p_x^2 - p_y^2) \\ p_x (3p_y^2 - p_x^2) \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (5.34)$$

A későbbi számításokat jelentősen leegyszerűsíti, ha ismét bevezetjük a \mathbf{p} impulzusvektor φ azimutszögét. Ezzel a Hamilton-operátor, illetve az $\mathbf{\Omega}$ vektor a következő alakba írható:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i \frac{\beta}{2} \begin{pmatrix} 0 & p_-^3 \\ -p_+^3 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i \frac{\beta}{2} p^3 \begin{pmatrix} 0 & e^{-3i\varphi} \\ -e^{3i\varphi} & 0 \end{pmatrix} , \quad (5.35)$$

$$\mathbf{\Omega} = \frac{\beta}{\hbar} p^3 \begin{pmatrix} \sin 3\varphi \\ -\cos 3\varphi \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (5.36)$$

Ennek abszolút értéke:

$$\Omega = \frac{\beta}{\hbar} p^3 . \quad (5.37)$$

Az $\mathbf{\Omega}$ vektor irányába mutató \mathbf{n} egységvektor tehát $\mathbf{n} = (\sin 3\varphi, -\cos 3\varphi, 0)$ lesz.

Ezután a (3.16) képletben definiált derivált-mátrixot kell kiszámítanunk:

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} = \frac{3\beta}{\hbar} \begin{pmatrix} 2p_x p_y & p_y^2 - p_x^2 & 0 \\ p_x^2 - p_y^2 & 2p_x p_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{3\beta}{\hbar} p^2 \begin{pmatrix} \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi & 0 \\ \cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.38)$$

Az anomális sebességben a frekvencia \mathbf{p} szerinti gradiense jelenik meg:

$$\frac{\partial \Omega(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{K} \mathbf{n} = \frac{3\beta}{\hbar} p \mathbf{p} = \frac{3\Omega}{p^2} \mathbf{p}. \quad (5.39)$$

Az anomális sebesség (3.31) képletében ezt még szorozni kell az $(\mathbf{n} \mathbf{S}) = \hat{H}'/\Omega$ operátorral:

$$\mathbf{W} = \frac{\mathbf{p}}{m} I + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n} \mathbf{S}) = \frac{\mathbf{p}}{m} I + \frac{3\hat{H}'}{p^2} \mathbf{p} = \frac{\mathbf{p}}{m} I + \frac{3\beta p}{2} \mathbf{p} \begin{pmatrix} 0 & i e^{-3i\varphi} \\ -i e^{3i\varphi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.40)$$

Az (5.40) képletben szereplő mátrix sajátértékei ± 1 . Ezért a driftsebesség operátorának sajátértékei, azaz az (5.33) Hamilton-operátor egyes sajátállapotaiban megvalósuló sebességvárhatóértékek (melyek megegyeznek a (4.23) képletben definiált parciális sebességekkel) a következők lesznek:

$$\mathbf{W} = \frac{\mathbf{p}}{m} \left(1 \pm \frac{3m\beta p}{2} \right). \quad (5.41)$$

Az anomális sebesség iránya tehát a most vizsgált modellben is párhuzamos a \mathbf{p} impulzusvektorral, és hozzáadódik az ugyanilyen irányú reguláris sebességvektorhoz, illetve levonódik abból. Az, hogy az eredő driftsebesség azonos, vagy ellenkező irányba mutat, mint az impulzus, már az impulzus p abszolút értékétől függ: ha p kisebb a $p_0 = 2/(3m\beta)$ kritikus értéknél, mindkét parciális sebesség ugyanabba az irányba mutat, mint az impulzus, ha az impulzus nagyobb a kritikus értéknél, akkor a kisebbik energiasajátértékhez tartozó parciális sebesség az impulzussal ellentétes irányba mutat.

Végül írjuk fel a helyoperátor oszcilláló tagjainak együtthatóit:

$$\mathbf{n} \times \mathbf{S} = \begin{pmatrix} -S_z \cos 3\varphi \\ -S_z \sin 3\varphi \\ S_y \sin 3\varphi + S_x \cos 3\varphi \end{pmatrix} = -S_z \begin{pmatrix} \cos 3\varphi \\ \sin 3\varphi \\ i(\mathbf{n}\sigma) \end{pmatrix}, \quad (5.42)$$

ahol az S_z operátor kiemelésekor kihasználtuk a Pauli-mátrixok szorzásának ismert szabályait.

Az (5.38) képletben szereplő K mátrixszal szorozva:

$$\mathbf{K} (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) = \frac{3\Omega}{p} S_z \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ -\cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\Omega}{p^2} (\mathbf{p} \times \mathbf{e}) S_z, \quad (5.43)$$

ahol ismét bevezettük a rendszer (xy) síkjára merőleges $\mathbf{e} = (0, 0, 1)$ egységvektort.

Most már felírhatjuk a helyoperátor oszcilláló részét:

$$\mathbf{C}(t) = \frac{3}{p^2} (\mathbf{e} \times \mathbf{p}) S_z \left(\cos \Omega t - i(\mathbf{n}\sigma) \sin \Omega t \right). \quad (5.44)$$

A kvantumvölgyben mozgó nehéz lyukak modelljében az elektron helyoperátorának teljes alakja Heisenberg-képpen:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + t \frac{\mathbf{p}}{m} \left(I + \frac{3m\hat{H}'}{p^2} \right) + \frac{3}{p^2} (\mathbf{p} \times \mathbf{e}) S_z \left[(1 - \cos \Omega t) + i(\mathbf{n}\sigma) \sin \Omega t \right]. \quad (5.45)$$

A \mathbf{n} vektort az azimutszöggel kifejezve, valamint a Pauli-mátrixok konkrét alakjának behelyettesítése után a helyoperátor következő formájához jutunk:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + t \frac{\mathbf{p}}{m} \begin{pmatrix} 1 & i \frac{3\beta m p}{2} e^{-i3\varphi} \\ -i \frac{3\beta m p}{2} e^{i3\varphi} & 1 \end{pmatrix} + \\ + \frac{3\hbar}{2p^2} (\mathbf{p} \times \mathbf{e}) \begin{pmatrix} 1 - \cos \Omega t & e^{-i3\varphi} \sin \Omega t \\ +e^{i3\varphi} \sin \Omega t & \cos \Omega t - 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.46)$$

Ezt az eredményt közvetlenül összehasonlíthatjuk az egyrétegű grafénra kapott (5.13), illetve a kétrétegű grafén egyszerűsített modelljéből levezetett (5.32) képlettel. A hasonlóság szembeszökő. A különbségek: a) a driftsebességben a nehéz lyukak esetén reguláris és anomális tag is megjelenik, az (5.33) Hamilton-operátor két tagjának megfelelően; b) az oszcilláló tagok együtthatójában megjelenik egy hármasszorzó faktor; c) az impulzusvektor φ azimutszöge helyett mindenütt annak háromszoros szerepel (ez a \mathbf{p} vektor helyett a $\mathbf{\Omega}$ vektor azimutszöge); d) a rezgés frekvenciáját az (5.5) helyett az (5.37) formula adja meg. A három rendszer alapvető hasonlósága a Zitterbewegung fő vonásaiban is megnyilvánul: a driftsebesség mindhárom esetben párhuzamos az impulzussal, az oszcilláló mozgás pedig transzverzális, merőleges az impulzusra.

5.3.3. Cooper-párok kétdimenziós szupravezetőkben

A szupravezetés BSC-elmélete szerint a szupravezető anyagokban az ellentétes kváziimpulzusú és spinvetületű elektronokat a fononok közvetítette kölcsönhatás Cooper-párokká kapcsolja össze (lásd pl. [109, 110], a szupravezetőkben fellépő ZB korai megsejtéséről [29]). A kétdimenziós szupravezetőkben mozgó Cooper-párok dinamikájának leírására elterjedten használják a következő effektív Hamilton-operátort:

$$\hat{H} = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_0 \right) \sigma_z + \Delta \sigma_x = \begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m} - E_0 & \Delta \\ \Delta & E_0 - \frac{p^2}{2m} \end{pmatrix}, \quad (5.47)$$

ahol m az effektív tömeg, E_0 a Fermi-energia, Δ pedig a gap nagysága, mindhárom paraméter valós állandó. (A modell kiterjeszhető a Δ paraméter komplex értékeire is, ekkor az (5.47) mátrix H_{21} komponense helyére a paraméter komplex konjugáltját, Δ^* -ot kell írni. A következőkben levezetendő eredmények ekkor csak minimálisan módosulnak, ezért ettől az általánosítástól most eltekintünk.) A \mathbf{p} impulzusvektorról most is feltételezzük, hogy az (x, y) síkban fekszik, harmadik komponense zérus.

Az (5.47) Hamilton-operátor beleillik a 3. részben vizsgált kvázispin-rendszerek közé, és az ott leírt módszerrel tárgyalható. Mivel a disperziós reláció – az egyrétegű grafénhoz hasonlóan – továbbra is két, egymástól csak előjelben különböző ágból áll, a (3.3) Hamilton-operátorban az egységmátrix együtthatójaként fellépő $\varepsilon(\mathbf{p})$ átlagenergia most is eltűnik. Az effektív (kvázi-)mágneses térként viselkedő $\mathbf{\Omega}(\mathbf{p})$ vektor pedig a következő lesz:

$$\mathbf{\Omega}(\mathbf{p}) = \frac{2}{\hbar} \begin{pmatrix} \Delta \\ 0 \\ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_0 \end{pmatrix}, \quad (5.48)$$

melynek abszolút értéke:

$$\Omega = \frac{2}{\hbar} \sqrt{\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_0\right)^2 + \Delta^2}, \quad (5.49)$$

az \mathbf{n} egységvektort pedig most is az $\mathbf{n} = \mathbf{\Omega}/\Omega$ egyenlőség definiálja. Az (5.47) Hamilton-operátor sajátértékei $\pm\hbar\Omega/2$.

Ezután a (3.16) képletben definiált derivált-mátrixot kell kiszámítanunk:

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{2}{m\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & p_x \\ 0 & 0 & p_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.50)$$

E mátrixot kell az \mathbf{n} egységvektorra hattatnunk, az eredmény:

$$\mathbf{K}\mathbf{n} = \frac{2}{m\hbar} n_z \mathbf{p} = \frac{4}{m\hbar^2\Omega} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_0\right) \mathbf{p}. \quad (5.51)$$

Végül ezt a vektort meg kell szoroznunk az $(\mathbf{n}\mathbf{S}) = \hat{H}/\Omega$ operátorral, hogy megkapjuk a driftsebesség operátorát:

$$\mathbf{W} = \mathbf{V} + \mathbf{W}_a = \mathbf{W}_a = \left(\frac{2\hat{H}}{\hbar\Omega}\right) \frac{2}{\hbar\Omega} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_0\right) \frac{\mathbf{p}}{m}. \quad (5.52)$$

Az $(2\hat{H}/\hbar\Omega)$ operátor sajátértékei ± 1 . A driftsebesség iránya tehát a kétdimenziós szupravezető egyszerű modelljében is párhuzamos a \mathbf{p} impulzusvektorral, a pozitív energiájú sajátállapotban ugyanabba az irányba, a negatív energiájú sajátállapotban ellenkező irányba mutat, mint az impulzus. A sebesség abszolút értéke azonban a szokásos p/m értékhez képest egy 1-nél kisebb szorzófaktorot is tartalmaz.

Az oszcilláló tagok együtthatóinak kiszámítása nagyon hasonlít a korábban vizsgált egyszerű modelleknél követett számoláshoz. Az eredmény:

$$\mathbf{K}(\mathbf{S} \times \mathbf{n}) = -\frac{n_x}{m} \sigma_y \mathbf{p}. \quad (5.53)$$

A fentieket behelyettesítve a (3.27) képletbe megkapjuk az elektron helyoperátorának teljes alakját Heisenberg-képben:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) + t \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{2 \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_0\right)}{\hbar\Omega} \frac{2\hat{H}}{\hbar\Omega} + \frac{\mathbf{p}}{m\Omega} \frac{2\Delta}{\hbar\Omega} \sigma_y \left[(1 - \cos \Omega t) I + i \frac{2\hat{H}}{\hbar\Omega} \sin \Omega t \right]. \quad (5.54)$$

Érdekes újdonság a korábban vizsgált rendszerekhez képest, hogy az oszcilláló tagok együtthatóvektora párhuzamos a \mathbf{p} impulzusvektorral. Az így mozgó részecske tehát nem hagyja el a klasszikus mozgás egydimenziós, egyenes pályáját, mint a többi egyszerű kétdimenziós rendszerben fellépő transzverzális Zitterbewegung esetén, hanem a mozgás irányában előresiet, illetve hátramarad az állandó sebességű mozgáshoz képest. Az ilyen, az

egyenes vonalú egyenletes mozgásra rakódó longitudinális rezgést ciklois-jellegű mozgásnak nevezhetjük, mert egy gördülő kerék (közönséges, rövidített vagy hosszabbított) cikloismozgást végző pontjának a mozgás irányára vett vetületével modellezhetjük. A kétdimenziós szupravezető egyszerű modelljében tehát ciklois-jellegű ZB lép fel.

5.4. A Rashba–Dresselhaus-modell

A Rashba- és Dresselhaus-modelleket gyakran alkalmazzák a szilárdtest-fizikában, illetve a nanofizikában (kvázi-)kétdimenziós elektronrendszerek spin–pálya-kölcsönhatásának leírására (lásd pl. [25, 30, 76–84], az elektronok dinamikájáról lásd [85], [86], [87]). A vizsgált rendszer állapotvektorai két komponensű komplex vektorok, a két komponens a spin két beállításának felel meg. Ennek megfelelően a Hamilton-operátor 2×2 -es mátrix lesz. Az elektron mint (kvázi-)részecske rácsbeli mozgását egy (a sáv szerkezeti számításokból leszármasztatható) effektív $\varepsilon(\mathbf{p})$ diszperziós reláció írja le (ezt a legegyszerűbb esetben a szabad elektron $\mathbf{p}^2/2m$, diszperziós relációjának választják, az impulzusvektornak a rendszer (xy) síkjára merőleges p_z komponensét nullának tekintik), a spin–pálya-csatolást pedig a két spinállapot között fellépő, a pályamozgás \mathbf{p} impulzusától függő csatolási taggal veszik figyelembe. E tagok a rendszer inverziós szimmetriájának sérülésével állnak kapcsolatban. Az impulzusfüggést Rashba levezetése nyomán lineárisnak választják. A két modell csak a csatolási tag alakjában különbözik egymástól.

A Rashba-modell Hamilton operátora a következő:

$$H_R(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} I + \frac{\alpha}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -p_y - i p_x \\ -p_y + i p_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.55)$$

a Dresselhaus-modellé pedig:

$$H_D(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} I + \frac{\beta}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -p_x - i p_y \\ -p_x + i p_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.56)$$

ahol I a 2×2 -es egységmátrix, p_x és p_y az impulzusvektor megfelelő komponensei (a harmadik komponens nulla), α és β pedig a spin–pálya-csatolásra jellemző valós együtthatók (közülük α értéke a vonatkozó kísérletekben külső elektromos térrel hangolható).

A kapott 2×2 -es Hamilton-operátorok tehát csak a \mathbf{p} impulzustól függenek, így beleillenek a 3. részben tárgyalt modellek családjába. Ha a kölcsönhatási tagokat összeadjuk, a kombinált Rashba–Dresselhaus-modellt (RD-modellt) kapjuk, melynek az eredeti modellek speciális esetei. Ezért sokkal egyszerűbb rögtön a kombinált modellt vizsgálni, ez nem jár extra matematikai nehézségekkel, majd az egyes modellekre vonatkozó eredményeket a megfelelő együtthatók nullává tételével kaphatjuk meg.

A kombinált RD-modell Hamilton-operátora:

$$H_{RD}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} I + H'_{RD}(\mathbf{p}), \quad (5.57)$$

ahol a spin–pálya-kölcsönhatást leíró rész:

$$H'_{RD}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -(\alpha p_y + \beta p_x) - i(\alpha p_x + \beta p_y) \\ -(\alpha p_y + \beta p_x) + i(\alpha p_x + \beta p_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.58)$$

A későbbi kifejezések egyszerűsítése céljából most is érdemes a \mathbf{p} impulzusvektort

$$\mathbf{p} = p \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

alakba írunk, valamint bevezetni a μ és ϑ paramétereket a következő definícióval:

$$\mu = \frac{2}{\hbar^2} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \quad \text{tg } \vartheta = \frac{\beta}{\alpha}. \quad (5.59)$$

A fenti jelölések felhasználásával az (5.58) Hamilton-operátor a következő alakba írható:

$$H'_{RD}(\mathbf{p}) = \frac{\hbar}{2} \mu p \left(-\sin(\varphi + \vartheta) \sigma^1 + \cos(\varphi - \vartheta) \sigma^2 \right), \quad (5.60)$$

ahol σ^k a szokásos Pauli-mátrixokat jelöli.

Mint a 3.2 fejezetben közölt táblázatban is látható, a kombinált RD-modell közvetlenül beilleszthető a 3. részben tárgyalt, a (3.3) Hamilton-operátorral leírható modellek családjába. Az $\varepsilon(\mathbf{p})$ diszperziós reláció egyszerűen $\mathbf{p}^2/2m$, lesz, a kvázi-mágneses tér funkcióját betöltő $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{p})$ vektor pedig a következő:

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{p}) = \frac{2}{\hbar^2} \begin{pmatrix} -\alpha p_y - \beta p_x \\ \alpha p_x + \beta p_y \\ 0 \end{pmatrix} = \mu p \begin{pmatrix} -\sin(\varphi + \vartheta) \\ \cos(\varphi - \vartheta) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.61)$$

A RD-modellben fellépő Zitterbewegung leírásához a fenti kifejezéseket egyszerűen be kell helyettesítenünk a (3.27) egyenletbe.

A \mathbf{V} reguláris sebesség a kvadratikus diszperziós reláció miatt \mathbf{p}/m -mel egyezik meg. A $\mathbf{K}(\mathbf{p})$ derivált mátrix a lineáris \mathbf{p} -függés miatt állandó:

$$\mathbf{K} = \frac{2}{\hbar^2} \begin{pmatrix} -\beta & \alpha & 0 \\ -\alpha & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} -\sin \vartheta & \cos \vartheta & 0 \\ -\cos \vartheta & \sin \vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.62)$$

Az $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{p})$ függvény \mathbf{p} szerinti deriváltja tehát a konstans \mathbf{K} mátrix, így az eredeti függvény lineáris. A \mathbf{K} mátrix (3.16) definícióját és az indexkiosztást figyelembe véve ezt a kapcsolatot így írhatjuk:

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{p}) = \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{p}, \quad (5.63)$$

ahol $\tilde{\mathbf{K}}$ a \mathbf{K} mátrix transzponáltját jelenti. Ezt az összefüggést a későbbiekben fel fogjuk használni.

Érdeemes kiszámítani a \mathbf{K} mátrix és transzponáltjának később többször szereplő szorzatát:

$$\mathbf{K} \tilde{\mathbf{K}} = \mu^2 \begin{pmatrix} -\sin \vartheta & \cos \vartheta & 0 \\ -\cos \vartheta & \sin \vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin \vartheta & -\cos \vartheta & 0 \\ \cos \vartheta & \sin \vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \mu^2 \begin{pmatrix} 1 & \sin 2\vartheta & 0 \\ \sin 2\vartheta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.64)$$

A fent bevezetett jelölésekkel a Zitterbewegung frekvenciája, azaz az $\boldsymbol{\Omega}$ vektor abszolút

értéke a következő alakú lesz:

$$\Omega(\mathbf{p}) = |\Omega| = \sqrt{\tilde{\Omega}\Omega} = \sqrt{\mathbf{p}\mathbf{K}\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{p}} = \mu p \sqrt{1 + \sin 2\vartheta \sin 2\varphi} \quad (5.65)$$

Az anomális sebesség

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_a &= \frac{\partial \Omega(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{n}\mathbf{S}) = (\mathbf{K}\mathbf{n}) (\mathbf{n}\mathbf{S}) = \frac{1}{\Omega^2} (\mathbf{K}\Omega) (\Omega\mathbf{S}) = \frac{1}{\Omega^2} (\mathbf{K}\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{p}) (\Omega\mathbf{S}) = \\ &= \frac{\mathbf{K}\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{p}}{(\mathbf{p}\mathbf{K}\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{p})} H'_{RD} = \frac{H'_{RD}}{p(1 + \sin 2\vartheta \sin 2\varphi)} \left[\begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix} + \sin 2\vartheta \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \right], \end{aligned} \quad (5.66)$$

ahol H'_{RD} az (5.58) képletben definiált mátrix, a Hamilton-operátor kölcsönhatási tagja.

Végül az oszcilláló, Zitterbewegungot leíró tagokra a (3.32) képlet és a fenti számítások alapján, néhány algebrai átalakítás után a következő alakot kapjuk:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(t) &= \left[\frac{\sin \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} (\mathbf{S} - \mathbf{n}(\mathbf{n}\mathbf{S})) - \frac{\cos \Omega t}{\Omega} \mathbf{K} (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) \right] = \\ &= \mu^2 \cos 2\vartheta (\mathbf{p} \times \mathbf{e}) \sigma^3 \left(\frac{\hbar}{2} I \frac{\cos \Omega t}{\Omega^2} + i H'_{RD} \frac{\sin \Omega t}{\Omega^3} \right), \end{aligned} \quad (5.67)$$

ahol bevezettük a rendszer síkjára merőleges $\mathbf{e} = (0, 0, 1)$ egységvektort. A fenti, az (5.66) és (5.67) képletekben összefoglalt eredmény – jelölésbeli különbségektől eltekintve – megegyezik a [30] cikk (7) és (8) képletével.

Az (5.67) képletből jól látszik, hogy a Rashba–Dresselhaus-rendszerben fellépő Zitterbewegung iránya merőleges a részecske \mathbf{p} impulzusára, azaz a ZB itt is transzverzális jelenség. A helyzet várható értékének vektori jellegét az impulzusra merőleges, de a rendszer síkjába eső $(\mathbf{p} \times \mathbf{e})$ vektor határozza meg. A várható érték rezgőmozgása ezért minden esetben merőleges lesz az impulzus irányára.

Érdekes tulajdonsága e rendszernek, hogy az (5.66) anomális sebességben viszont a $\mathbf{p} = (p_x, p_y, 0)$ vektorral párhuzamos komponens mellett megjelenik egy másik, a $\mathbf{p}' = (p_y, p_x, 0)$ vektorral párhuzamos komponens is. Ezt a vektort az eredeti impulzusvektornak az $(x+y, z)$ síkra tükrözöttjeként foghatjuk fel. A teljes \mathbf{W} driftsebesség tehát nem lesz párhuzamos a \mathbf{p} impulzussal: a Rashba–Dresselhaus-rendszer az elektronokra nézve „kettőtörőként” viselkedik. Ez a jelenség nyilvánvalóan a rendszernek a modell felállításakor figyelembe vett jellegzetes tulajdonságát, az inverziós szimmetria hiányát tükrözi. Másként kifejezve: bár az oszcilláló mozgás iránya merőleges az impulzusra, de nem lesz merőleges az eredő driftsebességre. Így a hullámsomag középpontja rezgőmozgásának van a driftsebességhez képest longitudinális, cikloidális jellegű komponense is. Érdemes megjegyezni, hogy az (5.66) képlet szerint az anomális sebességnek ez a $\mathbf{p}' = (p_y, p_x, 0)$ vektorral párhuzamos komponense arányos a $\sin 2\vartheta$ mennyiséggel, azaz az $\alpha\beta$ szorzattal, így ez a komponens csak a kombinált RD-modellben jelenik meg, a „tisztá” Rashba-, illetve Dresselhaus-modellekben nem.

5.4.1. A kombinált RD-rendszer speciális szimmetriája

A kombinált RD-modellnek további érdekes tulajdonsága a következő: ha a modellben az α és β paramétereket egyforma abszolút értékűnek választjuk (a gyakorlatban ezek a paramé-

terek külső elektromos terek alkalmazásával hangolható, tehát a degenerált eset kísérletileg megvalósítható), akkor az (5.59) képlettel bevezetett ϑ szög $\pi/4$ -gyel vagy $3\pi/4$ -gyel lesz egyenlő, és az (5.67) képletben megjelenő $\cos 2\vartheta$ együttható nullává válik. Ebben az esetben tehát a Zitterbewegung egyáltalán nem lép fel! Ezt a jelenséget már a [25] cikk szerzői is észrevették, és egy extra (időtükrozési) szimmetria miatt fellépő új megmaradási tételnek tulajdonították.

Közvetlen behelyettesítéssel valóban könnyen belátható, hogy a rendszer síkjába eső spin-komponensek $(S^x + S^y)$ összegének, illetve $(S^x - S^y)$ különbségének időderiváltja, ami a rendszer (5.57) Hamilton-operátorával való kommutálással számítható ki, arányos lesz $(\cos \vartheta - \sin \vartheta)$, illetve $(\cos \vartheta + \sin \vartheta)$, azaz $(\alpha - \beta)$, illetve $(\alpha + \beta)$ értékével. A paraméterek egybeesésével degenerálttá váló RD-modellben tehát a spinnek az x és y tengelyek egyik vagy másik szögfelezőjére eső vetülete megmaradó mennyiséggé válik. Ez a megmaradási tétel azonban nem új, hiszen láttuk, hogy a (kvázi-)spin precessziója során az Ω vektor iránya által meghatározott \mathbf{n} tengelyre eső $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{S})$ spinvetület állandó marad. A helyzet specialitása másban rejlik.

Ha a \mathbf{K} mátrix (5.62) definíciójába behelyettesítjük az $\alpha = \beta$, azaz a $\vartheta = \pi/4$ értéket, láthatjuk, hogy a mátrix az (x, y) tengelyek 135° -os szögfelezője és a z -tengely által meghatározott síkra vetítő projektorral lesz arányos (hasonló a helyzet az $\alpha = -\beta$ esetben is, csak ekkor a 45° -os szögfelező szerepel). Az $\Omega(\mathbf{p})$ függvény tehát igen speciálissá válik: az Ω vektor \mathbf{p} -től függetlenül egy fix, a kristályrács által meghatározott irányba mutat, az Ω irányába eső \mathbf{n} egységvektor tehát \mathbf{p} -től független állandó (esetünkben speciálisan $\mathbf{n} = (1, -1, 0)$ egységvektor. Mint a 3.4 fejezetben láttuk, a spin precessziója e tengely körül történik, az időben változó, oszcilláló tagok tehát merőlegesek az \mathbf{n} vektorra.

A (3.24) egyenlet szerint a sebességoperátor meghatározásához a spinoperátor Heisenberg-képbeli, időben változó alakját meg kell szorozni a \mathbf{K} mátrixszal. Ha viszont az \mathbf{n} vektor irányára vetítő \mathbf{K} projektort a fent leírt alakú spinoperátorra alkalmazzuk, az \mathbf{n} irányra merőleges oszcilláló tagok azonnal lenullázódnak. Így e rendszerben nem lép fel a Zitterbewegung. Ez a tény számításainkban formálisan úgy jelenik meg, hogy a (spin-precesszió alapján kiszámított) Zitterbewegung amplitúdója nullává válik.

Látható, hogy ez a mechanizmus nem a Rashba–Dresselhaus-modell sajátossága, minden esetben ez a helyzet, ha az $\Omega(\mathbf{p})$ függvény \mathbf{K} deriváltmátrixa egy fix vektorra vetítő projektorral arányos. A kvázispin-formalizmus keretében ennél mélyebb magyarázathoz nem juthatunk. Ha viszont a 4. részben vizsgált általános elmélethez fordulunk, azonnal megérthetjük a jelenség okát. A ZB-amplitúdók a (4.27) formula szerint a Q^a projektorok impulzus szerinti deriváltjával arányosak. Ha az \mathbf{n} vektor az impulzustól független állandó vektor, akkor vele együtt a (3.3) Hamilton-operátor $\Omega(\mathbf{p}) \mathbf{S}$ kölcsönhatási része, tehát ennek sajátvektorai és a rájuk vetítő projektorok sem függenek az impulzustól. Így a projektorok \mathbf{p} szerinti deriváltjai, azaz az összes ZB-amplitúdó is zérussal egyenlők. Az ilyen esetekben tehát nem lép fel a Zitterbewegung.

Tanulságként megjegyezhetjük, hogy bár a Zitterbewegung igen általános, sok kvantumrendszerben fellépő jelenség, egyes speciális esetekben a körülmények (tipikusan bizonyos szimmetriák megjelenése) tiltottá tehetik a ZB mint szabadsági fok aktiválódását.

Az oszcilláló tagok hiánya azonban még nem jelenti a ZB-gal kapcsolatos jelenségek teljes hiányát. Az anomális sebesség a (3.31) képlet szerint nem az $\Omega(\mathbf{p})$ vektor irányára, hanem abszolút értékére érzékeny. Ez pedig függhet az impulzustól azokban az esetekben is, amikor az Ω vektor iránya állandó. Ez a helyzet az RD-modell most vizsgált speciális degenerált esetében is. Az az (5.66) anomális sebességben fellépő $\sin 2\vartheta$ együttható éppen 1 vagy -1 lesz, és a \mathbf{W}_a anomális sebesség épp a fizikailag kitüntetett x és y tengelyek valamelyik

szögfelezője irányába mutat. Oszcilláló Zitterbewegung tehát ebben az esetben nincs, de az anomális sebesség, az effektív kettőstörés ilyenkor is megjelenik az elektronok mozgásában, ezen át a rendszer transzport-tulajdonságaiban.

5.5. A Schrödinger-féle ZB származtatása

Ebben a fejezetben beillesztjük a 2. részben tárgyalt eredeti, Schrödinger-féle Zitterbewegung leírását a 4. részben leírt általános elméletbe. Megvizsgáljuk, mennyire illik bele a Schrödinger-féle ZB az általános keretekbe, és melyek a speciális tulajdonságai.

Írjuk fel ismét a (2.2) Dirac-féle Hamilton-operátort:

$$\hat{H}_D = c \boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + mc^2 \beta . \quad (5.68)$$

Ennek alapvető jellemzője – hiszen épp ezen az úton konstruálták –, hogy négyzete megegyezik a (2.1) relativisztikus energia négyzetével:

$$\hat{H}^2 = E^2 , \quad (5.69)$$

ahol

$$E = \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + (mc^2)^2} . \quad (5.70)$$

Az (5.68) operátor nem függ az \mathbf{x} helyoperátortól, csak a \mathbf{p} impulzustól, beleillik tehát a kvázi-szabad Hamilton-operátorok kategóriájába. Rögzített \mathbf{p} impulzus esetén \hat{H}_D 4×4 -es mátrixszal reprezentálható. Tudjuk, hogy sajátértékei épp a $\pm E(\mathbf{p})$ relativisztikus energiák, és mindkettő kétszeresen degenerált. A szabad Dirac-elektron tehát a 4.9 fejezetben tárgyalt két energiaszintű rendszerek közé tartozik (a 3. részben vizsgált kvázispin-rendszerek közé viszont nem illeszthető be). Leírásához ezért meg kell keresnünk a (4.70) tükröző operátort és a (4.72) jellemző paramétereket.

Vezessük be a következő operátort:

$$\hat{T} = \hat{H}/E , \quad (5.71)$$

mely nyilvánvalóan involutórikus:

$$\hat{T}^2 = \hat{H}^2/E^2 = I , \quad (5.72)$$

és megegyezik a (2.28) formulában szereplő operátorral, valamint az

$$\Omega(\mathbf{p}) = 2 E(\mathbf{p})/\hbar \quad (5.73)$$

frekvenciát. E jelölésekkel a \hat{H}_D Hamilton-operátor a következő alakba írható:

$$\hat{H} = \frac{\hbar \Omega}{2} \hat{T} . \quad (5.74)$$

A (4.72) képletben értelmezett ε mennyiség, az átlagenergia most azonosan nulla, hiszen az azonos impulzushoz tartozó pozitív és negatív energia átlaga épp zérus: $\varepsilon = 0$, a (4.72) képletbeli ω pedig azonos a (2.21) definícióval megadott Ω frekvenciával.

A Dirac-féle Hamilton-operátor (5.74) alakja közvetlen kiindulópontul szolgálhat a helyoperátor meghatározásához. Első lépésként a (4.74) és a (4.76) képletekben szereplő derivál-

takat kell kiszámítanunk:

$$\hat{\mathbf{W}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} I + \frac{1}{2} \frac{\partial \hbar \Omega}{\partial \mathbf{p}} \hat{T} = 0 I + \frac{1}{2} \frac{\partial \hbar (2E/\hbar)}{\partial \mathbf{p}} \hat{T} = \frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \hat{T}. \quad (5.75)$$

Az (5.70) relativisztikus energia gradiense:

$$\frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + (mc^2)^2}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{c^2 \mathbf{p}}{E} = \mathbf{V}, \quad (5.76)$$

ahol a most bevezetett \mathbf{V} mennyiség megegyezik a (2.15) relativisztikus sebességgel.

A $\hat{\mathbf{W}}$ driftsebesség-operátor tehát a következő alakba írható:

$$\hat{\mathbf{W}} = \frac{c^2 \mathbf{p}}{E} \hat{T} = \mathbf{V} \hat{T}. \quad (5.77)$$

Használjuk ki a $\hat{T}^{-1} = \hat{T}$ és a $\hat{H}_D = E \hat{T}$ összefüggéseket: ezek következményeképpen $\hat{T}/E = (E \hat{T})^{-1} = \hat{H}_D^{-1}$, így a $\hat{\mathbf{W}}$ driftsebesség átírható:

$$\hat{\mathbf{W}} = c^2 \mathbf{p} \hat{H}_D^{-1}. \quad (5.78)$$

Az utóbbi eredmény megegyezik a \mathbf{W} mennyiség (2.13) definíciójával. Látjuk tehát, hogy az általános formalizmus is reprodukálta a korábbi elmélet eredményeit, köztük a (2.35) képlet után említettet, mely szerint a Dirac-elektron driftsebességének abszolút értéke megegyezik a klasszikus relativisztikus \mathbf{V} sebességgel, (az impulzus irányához képesti) előjele pedig azonos az energia-sajátérték előjelével (azaz a \hat{T} operátor sajátértékével).

Számítsuk ki a \hat{T} operátor gradiensét is! A 3. részben bemutatott számolással szemben most az $\mathbf{v} = \partial \hat{H} / \partial \mathbf{p} = c \boldsymbol{\alpha}$ operátort nem tekintjük időfüggőnek: a most következő számításokban \mathbf{v} a kezdeti pillanatbeli, Schrödinger-képbeli $\mathbf{v}(0)$ operátort jelenti. A 4. részben bemutatott általános eljárás ugyanis különválasztja, részletesen tárgyalja az operátorok időfüggését, ezért az operátorok manipulációját (kommutálásokat, deriválásokat stb.) az időfüggetlen, állandó, Schrödinger-képbeli operátorokon kell elvégezni:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial (\hat{H}/E)}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{E} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{1}{E^2} \hat{H} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{E} (c \boldsymbol{\alpha}(0) - \hat{T} \mathbf{V}) = \frac{\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}}}{E}, \quad (5.79)$$

ahol $\hat{\mathbf{v}}(0) = c \boldsymbol{\alpha}(0)$ a (2.10) képlet szerint a kezdősebesség operátora.

Helyettesítsük most be \hat{T} gradiensének (5.79) alakját a két energiaszintű rendszerekben fellépő Zitterbewegungot leíró $\hat{\mathbf{Z}}(t)$ operátor (4.76) általános képletének második alakjába:

$$\hat{\mathbf{Z}}(t) = -\frac{1}{2} \left(i \hbar \hat{T} \frac{\partial \hat{T}}{\partial \mathbf{p}} \right) \left(e^{-i\omega \hat{T} t} - 1 \right) = -\frac{1}{2} \left(i \hbar \hat{T} \frac{\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}}}{E} \right) \left(e^{-i\Omega \hat{T} t} - 1 \right). \quad (5.80)$$

Az oszcilláló tag együtthatójának átalakításához először cseréljük fel a \hat{T} operátort az utána álló törttel (ez, mint láttuk, egy előjelváltást eredményez), majd ismét használjuk ki a $\hat{T}/E = \hat{H}_D^{-1}$ összefüggést, végül a kitevőben írjuk át a t idő előtti tényezőt a következőképpen: $\Omega \hat{T} = (2E/\hbar) (\hat{H}/E) = 2\hat{H}/\hbar$. Így a $\hat{\mathbf{Z}}(t)$ operátor következő alakját kapjuk:

$$\hat{\mathbf{Z}}(t) = \frac{i \hbar}{2} (\hat{\mathbf{v}}(0) - \hat{\mathbf{W}}) \hat{H}_D^{-1} \left(e^{-i2\hat{H}_D t/\hbar} - 1 \right). \quad (5.81)$$

Ez a kifejezés megegyezik a Schrödinger-féle Zitterbewegungot tárgyaló 2. rész (2.23) képletével, ha figyelembe vesszük az $\hat{\Omega}$ frekvenciaoperátor (2.21) definícióját.

A dolgozat 4. részében bemutatott általános tárgyalás tehát pontról pontra visszaadta a Schrödinger-féle Zitterbewegung ismert jellemzőit. Közben viszont néhány fontos, korábban rejtve maradt tényezőre is fény derült:

- A számítás során sehol sem volt szükség annak kihasználására, hogy a Dirac-féle Hamilton-operátor a speciális relativitáselmélettel kapcsolatban definiált mennyiség. Csak azt használtuk ki, hogy az operátor
 - többkomponensű hullámfüggvényre hat,
 - kizárólag a \mathbf{p} impulzustól függ.

A Zitterbewegungnak (általában, és ezen belül a Schrödinger-félének is) semmi köze a relativitáselmülethez, a ZB nem relativisztikus jelenség! Puszta történeti véletlen, hogy a fizikusok először a szabad elektron relativisztikus kvantumelméletében botlottak ZB-hez vezető többkomponensű hullámfüggvényekbe, illetve hogy e rendszerrel kapcsolatban tették fel a szabad részecske helyoperátorának időfüggésére vonatkozó kérdést.

- A levezetés során fel se merült a spin-szabadsági fok! A szabad Dirac-elektron Hamilton-operátorának spektruma spinben degenerált, ez a degeneráció nem oldódott fel, a számolási módszer nem érzékeny rá, hiszen csak az (általában többdimenziós) energia-sajátalterekre vetítő projektoroktól függ, ezen alterek belső struktúrájától nem. Az a városi legendaként terjedő, és egyes szerzők által komolyan kidolgozott gondolat, hogy a Zitterbewegung, mint valamiféle belső térben (esetleg a közönséges térben) történő spirális mozgás impulzusmomentumot hordoz, és ezzel a spin jelenségének rejtett, de közvetlen okozója, teljesen hamis! *A Zitterbewegungnak semmi köze a spinhez!* Puszta történeti véletlen, hogy az a kontextus, amelyben a fizikusok először találkoztak ZB-hez vezető többkomponensű hullámfüggvényekkel, egyben a feles spin (és a hozzá kapcsolódó mágneses momentum) automatikus leszarmaztatásának zseniális, meglepő, és ezért sokakat lenyűgöző, továbbgondolásra késztető diraci elmélete volt. De a Dirac-elmélet e két következményének, a spinnek és a Zitterbewegungnak semmiféle kauzális kapcsolata sincs. (Természetesen azt is láttuk – a 4.2 fejezet (4.12) képleténél –, hogy egykomponensű, skalár hullámfüggvény esetén nincs Zitterbewegung. Nem nulla spinű részecske hullámfüggvénye mindig több komponensű. De ehhez formálisan hasonló, ugyancsak több komponensű hullámfüggvény léphet fel a spintől fizikailag gyökeresen eltérő okból, pl. a grafén alrácspai vagy rétegei által képviselt szabadsági fokok leírására. Ezért a hullámfüggvény többkomponensű jellege és a spin értéke nincs egymással szükségszerű kapcsolatban. A Schrödinger-féle ZB most bemutatott levezetése élesen rámutat arra, hogy magát a spin jelenségét ennek a rendszernek a tárgyalása során sem kell felhasználni a ZB leírására.)
- A szabad elektron Dirac-elmélete a korábban tárgyalt két energiaszintű rendszerek családjába tartozik. Az a specialitása, hogy a két energiaszintnek megfelelő $E(\mathbf{p})$ disperziós reláció egymás ellentettje, ezért az adott \mathbf{p} impulzushoz tartozó két energiasajátérték átlaga, a 4.8 fejezet (4.72) képletében szereplő ε átlagenergia azonosan nulla. A Schrödinger-féle Zitterbewegung \mathbf{W} driftsebessége tehát teljesen a második tagból, az energiaszintek különbségének gradienséből származik. A 3. részben tárgyalt

kvázispin-rendszerek tanulságaként ezért a teljes driftsebességet az anomális sebesség kategóriájába kellene sorolnunk. Ennek azonban ellentmondanak a 3.7 fejezetben leírtak, hiszen ott láttuk, hogy a kvázispin-rendszerek anomális sebessége az M gyengén involutórikus operátor magteréből származik. Két energiaszintű rendszerek esetében viszont a megfelelő T operátor involutórikus, magtere nulla. E driftsebesség tehát nem anomális.

- A Schrödinger-féle ZB-nak az a korábban magától értetődőnek tartott tulajdonsága, hogy egyetlen határozott Ω frekvencia jellemzi (ezért lehetett kedves dugóhúzó-ábrákkal illusztrálni), csak esetlegességnek bizonyult: ez a helyzet minden két energiaszintű kvázi-szabad rendszerben, de vannak több energiaszintes rendszerek is.
- Ezzel szemben a Zitterbewegung általános tulajdonságának, minden ZB-ot mutató rendszer közös jellemzőjének bizonyult az a szintén a Schrödinger-féle esetben felismert jellegzetesség, hogy tiszta energia-sajátállapotokban a helyoperátor Zitterbewegungot leíró részének várható értéke azonosan nulla. A Schrödinger esetben ezt a 2.4 fejezetben hosszabb számolással kellett megmutatnunk. A helyoperátor általános elméletből következő alakjaiból, különösen pl. a (4.43) képletből közvetlenül látszik, hogy az energia-sajátállapotok bázisán felírt helyoperátor-mátrix oszcilláló részének minden diagonális komponense azonosan nulla. Ezért az energia-sajátállapotokban a ZB várható értéke minden rendszerre nulla. Joggal mondhatjuk tehát, hogy a Zitterbewegung az azonos impulzushoz tartozó különböző energia-sajátállapotok közötti interferencia, lebegési jelenség. Ezt már a Schrödinger-féle ZB-gal kapcsolatban is felismerték, részletes vizsgálataink megmutatták, hogy az állítás általánosan is igaz.
- Van azonban a Schrödinger-féle Zitterbewegungnak egy olyan vonása is, ami csak erre az esetre igaz, a többi – általában szilárdtestfizikai, nanofizikai rendszerben fellépő – rokon jelenség esetén nem áll fenn. Ez pedig a rendszer Galilei- (vagy Lorentz-) transzformációkkal szembeni viselkedésével kapcsolatos. Képzeljük el, hogy egy adott inerciarendszerben a Dirac-egyenlet által leírt szabad elektron hullámfüggvényének csak pozitív energiás komponensei vannak, ezért a helyoperátor várható értéke egyenes vonalú egyenletes mozgást végez (lásd a 2.4 fejezet (2.42) képletét), nincs Zitterbewegung. Vizsgáljuk ugyanezt a részecskét az eredetihez képest állandó sebességgel mozgó másik inerciarendszerből! A Dirac-bispinorok transzformációs szabályai szerint az eltranszformált hullámfüggvényben fellépnek a negatív energiás komponensek is, ezért e másik inerciarendszer megfigyelője ZB-ot tapasztal. Dirac-elektronra tehát a ZB hiánya vagy jelenléte nem objektív, Lorentz-invariáns kijelentés. Mi a helyzet a többi, ZB-t mutató szilárdtestfizikai rendszer esetén? Ezekben az esetekben a Lorentz- (vagy akár csak a Galilei-) transzformáció kérdése nem releváns, nem vethető fel értelmes keretek között. A vizsgált modell-Hamilton-operátorok bonyolult szilárdtestfizikai számítások egyszerűsített végeredményei. A számításokat pedig nyilvánvalóan abban a kiténtett koordinátarendszerben végezték el, amelyben a vizsgált anyagdarab nyugszik. Az eredményül kapott (viszonylag egyszerű) Hamilton-operátorok Galilei- vagy Lorentz-féle eltranszformálásának kérdése tehát fel sem merül. Ezért ezekben a rendszereken a Zitterbewegung fellépte vagy hiánya – a modellalkotás adott szintjén – objektív, egyértelműen megválaszolható kérdés. (A jelenség tényleges – közvetlen vagy közvetett – észlelése természetesen további megfontolásokat igényel.) Az eredeti, Schrödinger-féle Zitterbewegung ezért még ma is, számtalan hasonló jelenséget mutató rendszer felfedezése és vizsgálata után is speciális, a többi rokon rendszertől eltérő szerepet játszik.

5.6. A Luttinger-modell

A Luttinger-modell a félvezető rendszerek egyik gyakran használt kvantummodellje, kétféle effektív tömeggel rendelkező kvázirészecskék (könnyű és nehéz lyukak) mozgásának és kölcsönhatásainak leírására használják (lásd [114], a rendszerben fellépő ZB-ről [35, 36]). A Hamilton-mátrix négykomponensű spinorokra hat, de az energiaszintek kétszeresen degeneráltak. A modellbe foglalt egyik kettősség a kétféle kvázirészecskét különbözteti meg, a másik kettősség a spin-szabadsági fokhoz tartozik: ez alapesetben nem nyilvánul meg, csak ha explicit szimmetriasértéssel (pl. külső mágneses térrel) feloldjuk a degenerációt. A szabad Luttinger-modellben tehát a spin degenerált, így a modell csak két energiaszinttel rendelkezik. A négyszer négyes mátrixok felbukkanása miatt a $3/2$ -es spinoperátorok használata kézenfekvő, de tisztán formális lépés.

A négydimenziós spinortéren ható mátrixokat a modellben az $S = 3/2$ spin operátorainak nemlineáris függvényeivel adják meg. A modellben két numerikus paraméter jelenik meg, ezekről feltesszük, hogy $\gamma_1 > 2\gamma_2 > 0$. (E fejezetben a modell tárgyalásakor szokásos jelölésekhez igazodva legyen $\hbar = 1$.) A Luttinger-féle Hamilton-operátor szokásos alakja:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \mathbf{p}^2 - 2\gamma_2 (\mathbf{p}\mathbf{S})^2 \right] \quad (5.82)$$

A képletben \mathbf{p} a háromdimenziós impulzusvektort jelöli. A Luttinger-modellt főleg két-dimenziós rendszerek vizsgálatára szokták használni, ebben az esetben a \mathbf{p} vektor harmadik (a rendszer síkjára merőleges) komponense azonosan zérus, de formálisan ilyenkor is háromdimenziós vektornak tekintjük. Az \mathbf{S} jelölés az $S = 3/2$ spin operátoraiból alkotott vektort takarja. Ezek az operátorok 4×4 -es mátrixok, melyeknek konkrét alakjára a számítás során nem lesz szükség. A minden spinoperátorra kötelező $SU(2)$ kommutációs relációkon felül az egyetlen kihasználható tulajdonságuk az, hogy sajátértékeik $\pm 3/2$ és $\pm 1/2$, ezért az operátor valamilyen tengelyre vett vetülete négyzetének sajátértékei $9/4$ és $1/4$. A \mathbf{p} és \mathbf{S} operátorok más altereken hatnak, ezért kommutálnak egymással.

Az (5.82) Hamilton-operátor nem függ a helykoordinátától, a \mathbf{p} impulzus tehát mozgásálló. Most is érdemes a \mathbf{p} impulzusvektort felbontani p abszolút értéke és egy $\mathbf{n}(\mathbf{p})$ egységvektor szorzatára:

$$\mathbf{p} = p \mathbf{n}(\mathbf{p}) . \quad (5.83)$$

Ezzel a jelöléssel az (5.82) Hamilton-operátor (és számos később szereplő kifejezés) egyszerűbb alakba írható:

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) - 2\gamma_2 (\mathbf{n}\mathbf{S})^2 \right] \quad (5.84)$$

A rögzített \mathbf{p} értékhez tartozó altérben az (5.84) kifejezésben szereplő egyetlen operátor az $(\mathbf{n}\mathbf{S})$ mátrix. Ez nem más, mint az \mathbf{S} spinoperátornak az \mathbf{n} egységvektorral megadott tengelyre eső vetülete. Ennek négyzetének sajátértékei tehát az $S = 3/2$ spin tulajdonságai következtében $1/4$ és $9/4$. Ezért az $(\mathbf{n}\mathbf{S})^2$ operátor kielégíti a következő minimálegyenletet:

$$\left((\mathbf{n}\mathbf{S})^2 - \frac{1}{4} I \right) \left((\mathbf{n}\mathbf{S})^2 - \frac{9}{4} I \right) = (\mathbf{n}\mathbf{S})^4 - \frac{5}{2} (\mathbf{n}\mathbf{S})^2 + \frac{9}{16} I = 0 , \quad (5.85)$$

ahol I a 4×4 -es egységmátrixot jelenti. Ezt az összefüggést a későbbiekben többször kihasználjuk.

A két energiaszintű rendszerek tárgyalásának általános, a 4.9 fejezetben bemutatott sé-

mája, azaz a (4.68) képlet alapján írjuk fel az (5.82) Hamilton-operátort a következő alakban:

$$\hat{H} = E_H(\mathbf{p})Q_H(\mathbf{p}) + E_L(\mathbf{p})Q_L(\mathbf{p}) , \quad (5.86)$$

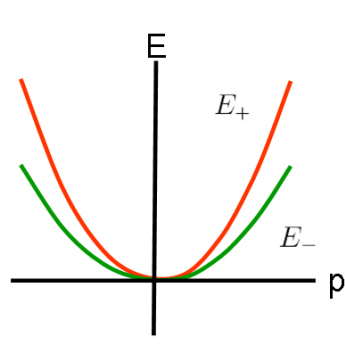
ahol az H és L indexek a nehéz (Heavy), illetve könnyű (Light) lyukakra, mint az adott energiasávhoz tartozó kvázirészecskékre utalnak. A két energiaszint, azaz az (5.82) Hamilton-mátrix két sajátértéke a következő:

$$E_L(\mathbf{p}) = \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2m} \mathbf{p}^2 , \quad E_H(\mathbf{p}) = \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2m} \mathbf{p}^2 , \quad (5.87)$$

a megfelelő projektorok pedig:

$$Q_H(\mathbf{p}) = -\frac{1}{8} I + \frac{(\mathbf{nS})^2}{2} , \quad Q_L(\mathbf{p}) = \frac{9}{8} I - \frac{(\mathbf{nS})^2}{2} . \quad (5.88)$$

Ezek összege láthatóan az egységoperátor, ortogonalitásuk pedig az $S = 3/2$ -es spinmátrixok algebrája, azaz az (5.85) összefüggés alapján látható be.



5.1. ábra. A Luttinger-modell diszperziós relációja.

Felírhatjuk a rendszert generáló (4.70) tükrözésoperátort, azaz a két projektor különbségét:

$$T = Q_+ - Q_- = \frac{5}{4} I - (\mathbf{nS})^2 . \quad (5.89)$$

A rendszer jellemző paraméterei, a (4.72) egyenlőségekkel definiált átlagenergia és lebegési frekvencia is leolvashatók az (5.87) képletekből:

$$\varepsilon = \frac{E_+ + E_-}{2} = \frac{\gamma_1}{2m} \mathbf{p}^2 , \quad \omega = E_+ - E_- = \frac{2\gamma_2}{m} \mathbf{p}^2 . \quad (5.90)$$

(látható, hogy az (5.82) Hamilton-operátor szokásos paraméterezése is eleve ehhez a felbontáshoz igazodik.)

Most már csak a $T(\mathbf{p})$ projektor \mathbf{p} szerinti gradiensét (illetve ennek T -vel vett szorzatát) kell kiszámítanunk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{5}{4} I - (\mathbf{nS})^2 \right) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(-\frac{(\mathbf{pS})^2}{p^2} \right) = \frac{2\mathbf{p}(\mathbf{pS})^2}{p^4} - \frac{\mathbf{S}(\mathbf{pS}) + (\mathbf{pS})\mathbf{S}}{p^2} = \\ &= \frac{2\mathbf{n}(\mathbf{nS})^2 - \mathbf{S}(\mathbf{nS}) - (\mathbf{nS})\mathbf{S}}{p} = \frac{(\mathbf{nS})[\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{S})] + [\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{S})](\mathbf{nS})}{p} . \end{aligned} \quad (5.91)$$

A kifejezés legutolsó alakjából látszik, hogy ez a gradiens transzverzális a \mathbf{p} impulzus irányára: \mathbf{n} -nel skalárisan szorozva azonosan nullát kapunk.

A most kiszámított gradienst jobbról és balról is megszorozhatjuk az (5.89) képletbeli $T(\mathbf{p})$ mátrixszal:

$$T \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{p} \left\{ \left(\frac{5}{2} (\mathbf{nS})^2 - 2 (\mathbf{nS})^4 \right) \mathbf{n} - \frac{5}{4} \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) + (\mathbf{nS})^2 \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) \right\},$$

$$\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} T = \frac{1}{p} \left\{ \left(\frac{5}{2} (\mathbf{nS})^2 - 2 (\mathbf{nS})^4 \right) \mathbf{n} - \frac{5}{4} \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) + \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) (\mathbf{nS})^2 \right\}.$$

Az \mathbf{n} egységvektor együtthatóját az (5.85) azonosság alapján átalakíthatjuk:

$$\frac{5}{2} (\mathbf{nS})^2 - 2 (\mathbf{nS})^4 = \frac{9}{8} I - \frac{5}{2} (\mathbf{nS})^2. \quad (5.92)$$

Ha a $T^2 = I$ egyenlőség gradienst képezzük, láthatjuk, hogy a fenti két kifejezés összegének azonosan nullának kell lennie:

$$0 = \frac{\partial I}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial T^2}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} T + T \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}. \quad (5.93)$$

Ez egy azonosságot szolgáltat a szereplő mennyiségek között:

$$\left(\frac{5}{2} (\mathbf{nS})^2 - \frac{9}{8} I \right) \mathbf{n} - \frac{5}{4} \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) = (\mathbf{nS})^2 \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) + \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) (\mathbf{nS})^2.$$

Az (5.93) összefüggés és a benne szereplő két tagra kapott fenti eredmények segítségével egyszerűbb alakra hozhatjuk a két energiaszintű rendszerekben fellépő ZB-ot leíró (4.75) képletben szereplő kifejezést:

$$T \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{2} \left(T \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} T \right) = (\mathbf{nS})^2 \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) - \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) (\mathbf{nS})^2. \quad (5.94)$$

A jobboldalon szereplő kommutátor a spinoperátorok általános SU(2) algebrája alapján néhány lépésben tovább alakítható, a végeredmény:

$$\left[(\mathbf{nS})^2, \left(\mathbf{S} (\mathbf{nS}) + (\mathbf{nS}) \mathbf{S} \right) \right] = -i \left((\mathbf{n} \times \mathbf{S}) + 4 (\mathbf{nS})^2 (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) (\mathbf{nS})^2 \right). \quad (5.95)$$

Ennyi előkészület után a 4.9 fejezetben szereplő (4.74) és (4.75) képletek közvetlenül megadják a Luttinger-modellben fellépő driftsebesség és ZB alakját:

$$\hat{\mathbf{W}} = \frac{\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2}{m} \mathbf{p} - \frac{2\gamma_2}{m} \frac{\mathbf{p} (\mathbf{pS})}{p^2} = \frac{2\hat{H}}{p^2} \mathbf{p}, \quad (5.96)$$

$$\hat{\mathbf{Z}}(t) = \sin(\omega t) \frac{(\mathbf{nS}) [\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{S})] + [\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{S})] (\mathbf{nS})}{2p} +$$

$$+ (\cos(\omega t) - 1) \frac{(\mathbf{n} \times \mathbf{S}) + 4 (\mathbf{nS})^2 (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) (\mathbf{nS})^2}{4p}. \quad (5.97)$$

Az utóbbi formulából azonnal látszik, hogy a Luttinger-modellben a Zitterbewegung

transzverzális jelenség: ha az (5.97) képletet skalárisan megszorozzuk a \mathbf{p} impulzusvektorral, azonosan nullát kapunk. A \mathbf{W} driftsebesség azonban a Luttinger-modell esetében (5.96) szerint mindig párhuzamos a \mathbf{p} impulzussal.

Az (5.96) és az (5.97) formulákat a két energiaszintes rendszerek 4.9 fejezetben ismertetett általános formalizmusából, közvetlen behelyettesítéssel és némi algebrai átalakítással kaptuk. Eredményünk – az utolsó néhány átalakítástól és egyszerűsítéstől eltekintve – megegyezik a Winkler et al [43] cikkében szereplő részeredménnyel, valamint a J. Schliemann [115] magánlevelében közöltekkel: mindketten az adott rendszerre kidolgozott speciális formalizmussal (Clifford-algebrával, illetve a kommutátorok közvetlen kiszámításával) jutottak eredményükhöz. Az általános módszer sokkal egyszerűbb és kézenfekvőbb utat szolgáltatott, egyben beágyazta az eredményt a hasonló rendszerek kontextusába.

5.7. (S)-kvázispin-rendszerek

Ebben a fejezetben ismét megvizsgáljuk a 3. részben tárgyalt kvázispin-rendszereket, és levezetjük az ezekben fellépő Zitterbewegung tulajdonságait a 4. rész általános elméletéből. Egyben rámutatunk a kvázispin-rendszereknek azokra a matematikai és fizikai sajátosságaira, amelyek speciálissá (egyebek között egyfrekvenciássá) teszik a ZB-ot.

Idézzük fel ismét a kvázispin-rendszerek (3.3) Hamilton-operátorát:

$$H = \varepsilon(\mathbf{p}) I + \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{p}) \mathbf{S} . \quad (5.98)$$

Itt $\varepsilon(\mathbf{p})$ és $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{p})$ a \mathbf{p} impulzus skalár, illetve hármasszoros-értékű függvénye, melyek folytonosságát és differenciálhatóságát feltételezzük. \mathbf{S} az S spinhez tartozó spinoperátorokból (ezek $(2S + 1) \times (2S + 1)$ -es mátrixok) alkotott vektor, I pedig a megfelelő méretű egységmátrix. A 3. részben bemutatott számolással szemben most az \mathbf{S} operátort nem tekintjük időfüggőnek: az e fejezetben következő számításokban \mathbf{S} mindenütt a kezdeti pillanatbeli, Schrödinger-képbeli (a 3. részben \mathbf{S}^0 -lal jelölt) operátort jelenti. A 4. részben bemutatott általános eljárás ugyanis különválasztja, részletesen tárgyalja az operátorok időfüggését, ezért az operátorok manipulációját (kommutálásokat, deriválásokat stb.) az időfüggetlen, állandó, Schrödinger-képbeli operátorokon kell elvégezni.

Az \mathbf{S} operátor komponensei kielégítik a szokásos SU(2) csererelációkat:

$$[S_k, S_l] = i \hbar \epsilon_{klm} S_m . \quad (5.99)$$

A \mathbf{p} és a \mathbf{S} operátorok a Hilbert-tér más-más alterein hatnak, ezért egymással kommutálnak. Az (5.98) Hamilton-operátor nem függ az \mathbf{x} helyoperátortól, ezért a \mathbf{p} , és így a $\boldsymbol{\Omega}$ operátorok is kommutálnak H -val, tehát mozgásállandók. Egy adott \mathbf{p} -hez tartozó altéren belül konstans numerikus vektoroknak tekinthetjük őket. Az $\boldsymbol{\Omega}$ vektort a szokásos módon felbontjuk az Ω abszolút érték és egy \mathbf{n} egységvektor szorzatára. Ezzel az (5.98) Hamilton-operátor a következő alakba írható:

$$H = \varepsilon(\mathbf{p}) I + \Omega(\mathbf{p}) (\mathbf{n}(\mathbf{p}) \mathbf{S}) . \quad (5.100)$$

A 4. részben leírt általános módszer a Hamilton-operátor sajátértékeiből és a sajátaltérekre vetítő projektorokból indul ki. Először tehát ezeket kell meghatároznunk.

Jól látható, hogy az (5.98) Hamilton-operátor sajátvektorai egybeesnek a $(\mathbf{n}\mathbf{S})$ operátor sajátvektoráival. Az utóbbi viszont az \mathbf{S} spinnek az \mathbf{n} egységvektorral jellemzett tengelyre

eső vetülete. A spin egyes vetületeinek sajátértékei ismert módon a $-S$ és S közé eső, egymást egyesével követő m számok, \hbar -sal szorozva. Feladatunk során a spinoperátor többi komponense is szerepet kap, ezért először a z -tengely helyett a „ferde” \mathbf{n} -tengelyre mint kvantálási tengelyre vonatkozó spin-algebrát kell felírunk (lásd pl. [23]).

Egy rögzített \mathbf{n} vektorhoz vezessünk be két \mathbf{n} -re és egymásra is merőleges $\mathbf{e}(\mathbf{n})$ és $\mathbf{f}(\mathbf{n})$ egységvektort (az \mathbf{n} -függést a továbbiakban nem jelöljük) úgy, hogy ezek $(\mathbf{e}, \mathbf{f}, \mathbf{n})$ sorrendben jobbsodrású ortonormált bázist alkossanak. (Látni fogjuk, hogy a végeredmény – várakozásunknak megfelelően – nem fog függeni az $\mathbf{e}(\mathbf{n})$ és $\mathbf{f}(\mathbf{n})$ vektorok speciális választásától: a végső képletekben csak a fizikai jelentéssel bíró \mathbf{n} vektor szerepel.) A 3×3 -as I egységmátrix kifejezhető a bázisvektorokból alkotott diádokkal:

$$I = \mathbf{e} \circ \mathbf{e} + \mathbf{f} \circ \mathbf{f} + \mathbf{n} \circ \mathbf{n} . \quad (5.101)$$

Alkalmazzuk ezt az azonosságot az \mathbf{S} spinvektorra:

$$\mathbf{S} = (\mathbf{eS}) \mathbf{e} + (\mathbf{fS}) \mathbf{f} + (\mathbf{nS}) \mathbf{n} . \quad (5.102)$$

Vezessük be a következő ideiglenes jelöléseket:

$$S^{(1)} = (\mathbf{eS}) , \quad S^{(2)} = (\mathbf{fS}) , \quad S^{(3)} = (\mathbf{nS}) . \quad (5.103)$$

Nyilvánvaló, de az (5.99) relációkból könnyen le is vezethető, hogy a felső indexes $S^{(k)}$ spinkomponensek az (5.99)-fel megegyező alakú kommutációs relációkat elégítenek ki:

$$[S^{(k)}, S^{(l)}] = i \hbar \epsilon_{klm} S^{(m)} . \quad (5.104)$$

Térjünk át a spinoperátorok „gömbi” komponenseire, azaz vezessük be a következő operátorokat:

$$S_0 = S^{(3)} = (\mathbf{nS}) , \quad S_{\pm} = S^{(1)} \pm i S^{(2)} = (\mathbf{e} \pm i \mathbf{f}) \mathbf{S} . \quad (5.105)$$

A most bevezetett gömbi komponensekkel az (5.102) spinoperátor a következő alakban fejezhető ki:

$$\mathbf{S} = S_+ \frac{\mathbf{e} - i \mathbf{f}}{2} + S_- \frac{\mathbf{e} + i \mathbf{f}}{2} + S_0 \mathbf{n} . \quad (5.106)$$

Jelöljük az S_0 spinvetület-operátor sajátvektorait $|m\rangle$ -mel (a sajátvektorok \mathbf{p} -alterenként különböznek, de a \mathbf{p} -függést nem jelöljük):

$$S_0 |m\rangle = m \hbar |m\rangle , \quad (5.107)$$

ahol az m sajátérték $-S$ és S között egyesével változhat. Az $|m\rangle$ vektorokból konstruálható

$$Q^m(\mathbf{p}) = |m\rangle \langle m| \quad (5.108)$$

projektorok teljes rendszert alkotnak, és segítségükkel maga az S_0 operátor is előállítható:

$$\sum_m Q^m(\mathbf{p}) = \sum_m |m\rangle \langle m| = I , \quad (5.109)$$

$$\hbar \sum_m m Q^m(\mathbf{p}) = \hbar \sum_m m |m\rangle \langle m| = S_0 = (\mathbf{nS}) . \quad (5.110)$$

(Az összegezés határait nem jelöljük, az értelemszerűen $-S$ -től S -ig tart.)

Az S_{\pm} operátorok az $|m\rangle$ vektorokon léptetnek:

$$S_+ |m\rangle = \alpha_m \hbar |m+1\rangle, \quad S_- |m\rangle = \beta_m \hbar |m-1\rangle, \quad (5.111)$$

ahol az α_m és β_m numerikus együtthatók a spin-algebrából ismeretesek.

Maguk az S_+ és S_- operátorok a következő alakban állíthatók elő az $|m\rangle$ sajátvektorokkal:

$$S_+ = \hbar \sum_m \alpha_m |m+1\rangle \langle m|, \quad S_- = \hbar \sum_m \beta_m |m-1\rangle \langle m|. \quad (5.112)$$

Erre az alakra a későbbiekben szükségünk lesz.

A most megkonstruált $|m\rangle$ spinvetület-sajátvektorok egyben az (5.100) Hamilton-operátornak is sajátvektorai:

$$H |m\rangle = E_m |m\rangle, \quad E_m(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}) + m \hbar \Omega(\mathbf{p}). \quad (5.113)$$

A megfelelő projektorok egyszerűen az (5.108) diádok. E jelölésekkel a Hamilton-operátor

$$H = \sum_m E_m |m\rangle \langle m| \quad (5.114)$$

alakba írható. Ez az alak máris alkalmas a \mathbf{W} driftsebesség-operátor előállítására, csak a (4.24) és a (4.23) képletekbe kell behelyettesítenünk, és a végén fel kell használnunk az (5.109) összefüggéseket:

$$\begin{aligned} \mathbf{W} &= \sum_m \frac{\partial E_m}{\partial \mathbf{p}} Q^m = \sum_m \frac{\partial (\varepsilon + m \hbar \Omega)}{\partial \mathbf{p}} Q^m = \\ &= \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} \sum_m Q^m + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} \hbar \sum_m m Q^m = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} I + \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{nS}). \end{aligned} \quad (5.115)$$

Az utolsó átalakításnál felhasználtuk az (5.109) összefüggéseket.

A kapott kifejezés megegyezik a kváziszin-rendszereket tárgyaló 3. rész (3.31) képletével.

A (3.32) képlet vagy valamelyik megfelelője levezetéséhez írjuk át az általános tárgyalás (4.25) képletében szereplő mátrixokat a D. függelék (D.3) képlete alapján, és a nemdiagonális elemekbe helyettesítsük be az energia-sajátértékek (5.113), azaz a különbségi frekvenciák $\omega_{nm} = (n - m)\Omega$ értékét:

$$\mathbf{Z}^{nm} = i\hbar Q^n \frac{\partial Q^m}{\partial \mathbf{p}} = i\hbar \frac{Q^n \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} Q^m}{E_m - E_n} = i \frac{Q^n \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} Q^m}{\Omega (m - n)}. \quad (5.116)$$

Az (5.116) képletben szereplő derivált kiszámításához a Hamilton-operátor (5.98) alakjából indulunk ki:

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_k} I + \frac{\partial \Omega_l}{\partial p_k} S_l = V_k I + K_{kl} S_l, \quad (5.117)$$

ahol a most bevezetett V_k sebességkomponensek, illetve a K_{kl} mátrix megegyeznek a 3.3 fejezetben használt (3.15) átlagsebesség-komponensekkel, illetve a (3.16) deriváltmátrixszal. Ezt az alakot az (5.116) képletbe helyettesítve a nemdiagonális komponensek ($m \neq n$) esetén a Q^m és Q^n projektorok ortogonalitása miatt az első tag kiesik, és a következőt kapjuk (a

\mathbf{K} mátrix K_{kl} komponensei, mint – a spinmátrixok szempontjából – skalárok kiemelhetők a mátrixszorzás elé):

$$Z_k^{nm} = i \frac{K_{kl}}{\Omega(m-n)} Q^n S_l Q^m . \quad (5.118)$$

Helyettesítsük be ebbe a formulába az \mathbf{S} spinoperátor (5.106) előállítását, valamint a Q^m projektorok (5.108) diadikus alakját:

$$Z_k^{nm} = i \frac{K_{kl}}{\Omega(m-n)} |n\rangle \left[\langle n| S_+ |m\rangle \frac{e_l - i f_l}{2} + \langle n| S_- |m\rangle \frac{e_l + i f_l}{2} + \langle n| S_0 |m\rangle n_l \right] \langle m| . \quad (5.119)$$

A szereplő mátrixelemek az (5.107) és az (5.111) képletek alapján

$$\langle n| S_+ |m\rangle = \alpha_m \delta_{n,m+1} , \quad \langle n| S_- |m\rangle = \beta_m \delta_{n,m-1} , \quad \langle n| S_0 |m\rangle = m \delta_{n,m} . \quad (5.120)$$

Mivel csak a nemdiagonális komponensek ($m \neq n$) iránt érdeklődünk, az (5.119) kifejezés utolsó tagja a továbbiakban nem játszik szerepet. A másik két tag esetén viszont a nevezőben szereplő $(m-n)$ tényező -1 , illetve $+1$ értéket vesz fel. Helyettesítsük be ezeket az értékeket, és közben térjünk vissza a K_{kl} mátrixelemek és az e_k, f_k vektorkomponensek vektoros jelölésére:

$$\mathbf{Z}^{nm} = \frac{i}{\Omega} \mathbf{K} \left[-\alpha_m \delta_{n,m+1} \frac{\mathbf{e} - i \mathbf{f}}{2} |m+1\rangle \langle m| + \beta_m \delta_{n,m-1} \frac{\mathbf{e} + i \mathbf{f}}{2} |m-1\rangle \langle m| \right] . \quad (5.121)$$

A (4.32) általános formulánkban az $(e^{i\omega_{nm}t} - 1)$ kifejezésekkel kell megszoroznunk a most kiszámított \mathbf{Z}^{nm} ZB-együtthatókat. Az együtthatókban szereplő Kronecker-delták viszont csak a szomszédos, $n = m \pm 1$ indexű állapotok fellépését engedik meg. Ezért az ω_{nm} különbségi frekvenciák értéke minden esetben csak $\pm\Omega$ lesz. Ez az alapvető oka annak, hogy a kvázispin-rendszerekben fellépő Zitterbewegungban mindössze egyetlen Ω frekvencia jelenik meg.

Kövessük tovább a számolást, helyettesítsük be az (5.121) ZB-együtthatókat az oszcilláló tagok a (4.32) képletébe:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(t) &= \sum_m \sum_n \mathbf{Z}^{nm} (e^{i\omega_{nm}t} - 1) = \\ &= \frac{i}{\Omega} \mathbf{K} \sum_m \sum_n \left[-(e^{i\Omega t} - 1) \alpha_m \delta_{n,m+1} \frac{\mathbf{e} - i \mathbf{f}}{2} |m+1\rangle \langle m| + \right. \\ &\quad \left. + (e^{-i\Omega t} - 1) \beta_m \delta_{n,m-1} \frac{\mathbf{e} + i \mathbf{f}}{2} |m-1\rangle \langle m| \right] . \end{aligned} \quad (5.122)$$

A spin-sajátértékekre történő összegezés alól mind az időfüggő oszcilláló függvények, mind az \mathbf{e} és \mathbf{f} vektorokat tartalmazó tényezők kiemelhetők, hiszen egyik sem tartalmazza az m vagy n spin-quantumszámokat. A megmaradó kifejezésekben végezzük el az n -re való összegezést:

$$\mathbf{Z}(t) = \frac{i}{\Omega} \mathbf{K} \left[-(e^{i\Omega t} - 1) \frac{\mathbf{e} - i \mathbf{f}}{2} \sum_m \alpha_m |m+1\rangle \langle m| + (e^{-i\Omega t} - 1) \frac{\mathbf{e} + i \mathbf{f}}{2} \sum_m \beta_m |m-1\rangle \langle m| \right] . \quad (5.123)$$

Az összegekben felismerhetjük az (5.112) kifejezéseket, azaz az S_+ és S_- léptető operáto-

rokat. Ezzel

$$\mathbf{Z}(t) = \frac{i}{\Omega} \mathbf{K} \left[-(e^{i\Omega t} - 1) \frac{\mathbf{e} - i\mathbf{f}}{2} S_+ + (e^{-i\Omega t} - 1) \frac{\mathbf{e} + i\mathbf{f}}{2} S_- \right]. \quad (5.124)$$

A levezetés záró lépéseiben írjuk fel az exponenciális függvényeket koszinuszos és szinuszos tagokkal kifejezve, az S_+ és S_- léptető operátorokat pedig fejezzük ki az (5.103) spinvetületekkel:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(t) &= \frac{i}{\Omega} \mathbf{K} \left[(\cos \Omega t - 1) \left(-\frac{\mathbf{e} - i\mathbf{f}}{2} (S^{(1)} + iS^{(2)}) + \frac{\mathbf{e} + i\mathbf{f}}{2} (S^{(1)} - iS^{(2)}) \right) + \right. \\ &+ i \sin \Omega t \left. \left(-\frac{\mathbf{e} - i\mathbf{f}}{2} (S^{(1)} + iS^{(2)}) - \frac{\mathbf{e} + i\mathbf{f}}{2} (S^{(1)} - iS^{(2)}) \right) \right] = \\ &= \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} \left[(\cos \Omega t - 1) (S^{(2)} \mathbf{e} - S^{(1)} \mathbf{f}) + \sin \Omega t (S^{(1)} \mathbf{e} + S^{(2)} \mathbf{f}) \right]. \end{aligned} \quad (5.125)$$

A spinvetületek (5.103) definícióit behelyettesítve a vektorkifejezések egyszerűbb alakra hozhatók:

$$S^{(2)} \mathbf{e} - S^{(1)} \mathbf{f} = (\mathbf{f} \mathbf{S}) \mathbf{e} - (\mathbf{e} \mathbf{S}) \mathbf{f} = (\mathbf{f} \times \mathbf{e}) \times \mathbf{S} = -\mathbf{n} \times \mathbf{S}, \quad (5.126)$$

$$\begin{aligned} S^{(1)} \mathbf{e} + S^{(2)} \mathbf{f} &= (\mathbf{e} \mathbf{S}) \mathbf{e} + (\mathbf{f} \mathbf{S}) \mathbf{f} = (\mathbf{e} \circ \mathbf{e} + \mathbf{f} \circ \mathbf{f}) \mathbf{S} = (I - \mathbf{n} \circ \mathbf{n}) \mathbf{S} = \\ &= \mathbf{S} - (\mathbf{S} \mathbf{n}) \mathbf{n} = (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) \times \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (5.127)$$

Kifejezéseinkből – várákozásunknak megfelelően – kiestek az ideiglenesen bevezetett \mathbf{e} és \mathbf{f} vektorok, és csak a fizikai jelentéssel bíró \mathbf{n} vektor maradt meg. A helyoperátor $\mathbf{Z}(t)$ oszcilláló tagjának végső kifejezése tehát a következő:

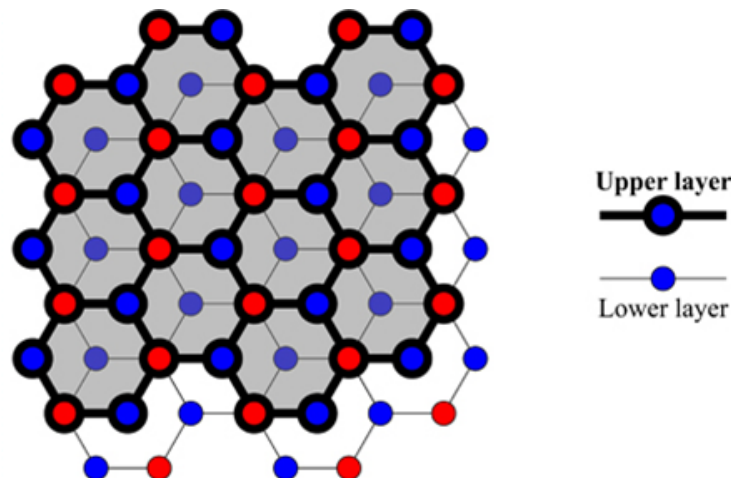
$$\mathbf{Z}(t) = \frac{1}{\Omega} \mathbf{K} \left[(1 - \cos \Omega t) (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) + \sin \Omega t ((\mathbf{n} \times \mathbf{S}) \times \mathbf{n}) \right]. \quad (5.128)$$

Ez a eredmény pedig megegyezik a kváziszin-rendszereket tárgyaló 3. részben levezetett (3.27) formula megfelelő tagjával.

A 4. részben leírt általános, projektoros formalizmus tehát visszaadta a kváziszin-rendszerekre speciális módszerekkel, a kváziszin-precesszió (3.19) egyenletére alapozva levezetett ZB-formulákat. Ez a tárgyalás ugyanakkor azt is megmutatta, hogy – az $S = 1/2$ kváziszin triviális esetén túlmenően – miért lép fel tetszőleges S kváziszin esetén is csak egyetlen ZB-frekvencia. Ennek oka a spin-operátorok azon sajátosságából következik, hogy az S_+ és S_- léptető operátorok mátrixának csak a főátló mellett vannak nem eltűnő elemei, és ennek következtében a \mathbf{Z}^{nm} ZB-együtthatók csak szomszédos n és m értékek esetén különböznek nullától. A spinoperátorok ekvidisztáns spektruma következtében azonban e szomszédos állapotok közti átmenetek mind azonos frekvenciájúak. Így lehet a sokszintes kváziszin-rendszereket is egyetlen frekvenciájú Zitterbewegunggal, illetve annak félklasszikus „pörgettyű”-modelljével leírni – szemben a többi sokszintes kvantumrendszerben fellépő sokkal bonyolultabb, kevésbé szemléletes jellegű Zitterbewegunggal. Az utóbbira a következő fejezetben mutatunk egy nemtriviális példát.

5.8. A kétrétegű grafén izotróp modellje

A kétrétegű grafén – mint már az 5.3.1 szakaszban említettük – két hatszöges szerkezetű szénatom-rétegből áll, melyek egymáshoz képest elcsúsztatva helyezkednek el. A rendszer legegyszerűbb modelljei csak a rétegeken belüli elsőszomszéd-kölcsönhatást, valamint a két réteg egymáshoz legközelebbi atomjai közti kölcsönhatást veszik figyelembe. Mivel mindkét réteg két, egymáshoz képest elcsúsztatott elemi rácsot tartalmaz (egy rombusz alakú elemi cellához két szénatom tartozik), a modell négy komponensű lesz, hiszen mindkét réteg A és B alrácsaiban elhelyezkedő atomok hullámfüggvényeit használja bázisul.



5.2. ábra. A kétrétegű grafén szerkezete. Mindkét réteg minden elemi cellájában két bázisatom (két szénatom) van (az ábrán a kék körök az A típusú, a piros körök a B típusú szénatomok).

A rendszer bonyolultabb modelljeiben a távolabbi (másod-, harmad- stb) szomszéd-kölcsönhatásokat is figyelembe veszik, az eredmény azonban megfelelő „renormálási” technikával visszavezethető a négykomponensű modellre, csak az abban szereplő, a kváziimpulzustól függő függvények lesznek bonyolultabb, „renormált” alakúak. A modellt egyszerűsíteni is lehet, és bizonyos közelítésekkel kétkomponensű modellel lehet helyettesíteni – ennek módszerét az 5.3.1 szakaszban ismertettük, és ott vizsgáltuk meg az egyszerűsített modellben fellépő Zitterbewegungot, amely jellegében nem különbözött az egyrétegű grafénnél talált eredménytől: a driftsebesség párhuzamos az impulzussal, az oszcilláció pedig transzverzális, merőleges az impulzusvektorra.

Jelen fejezetben a kétrétegű grafén négykomponensű modelljének legegyszerűbb, izotróp változatát vizsgáljuk. E modell a két réteg közti kölcsönhatások közül csak egyet, a leg erősebbet veszi figyelembe, és ennek nemtriviális következményeként a diszperziós reláció felülete a K -pont körül síkbeli forgásszimmetriát mutat, izotróp lesz. A következő közelítés már két kölcsönhatás-erősséggel jellemzi a két réteg kapcsolatát. Szemben az előző modellel, ebben a változatban már megszűnik a rendszer (x, y) síkjában fennálló izotrópia, és a valódi rendszer hatszöges szerkezetét jobban tükröző, háromfogasú szimmetriájú szögfüggés jelenik meg. Ezzel együtt a diszperziós reláció felülete is jellegzetes topológiai változást szenved, a körszimmetrikus Dirac-kúpok közelében 3–3 új, anizotróp, elliptikus Dirac-kúp jelenik meg („trigonal warping”). Mint a [D] cikkben megmutattuk, ez a topológiai módosulás a grafén minimális vezetőképességében az újonnan bevezetett csatolási állandótól nem analitikus módon függő lényeges változáshoz vezet. Az anizotróp modellben fellépő ZB meghatározására a most bemutatandó, a 4. részben leírtakon alapuló számítás jelentős elméleti újdonságok

nélkül, de sok technikai nehézség árán kiterjeszthető.

A kétrétegű grafén izotróp modelljében szereplő adatok megfelelő átskálázásával elérhető, hogy a modell (átskálázott) Hamilton-operátora az (átskálázott) impulzuson kívül mindössze egyetlen numerikus paramétertől függjön. Ezt a paramétert, amely lényegében a két réteg közti kölcsönhatás erősségét (pontosabban ennek a rétegen belüli elsőszomszéd-kölcsönhatáshoz viszonyított nagyságát) jellemzi, a későbbi képletek egyszerűsítése céljából $2m$ -mel jelöljük. A rendszert most is az (x, y) síkba fektetjük, és feltételezzük, hogy a \mathbf{p} impulzusvektornak az e síkra merőleges p_z komponense azonosan nulla. A Hamilton-operátor mátrixa a fenti feltételezésekkel és jelölésekkel a következő alakú lesz:

$$H(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & p_- \\ 0 & 0 & p_+ & 0 \\ 0 & p_- & 0 & 2m \\ p_+ & 0 & 2m & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.129)$$

ahol $p_{\pm} = p_x \pm ip_y = p e^{\pm i\varphi}$ a szokásos módon a (K ponttól mért) kváziimpulzus-vektor gömbi komponenseit jelöli, m pedig egy pozitív állandó (φ a szokásos módon a \mathbf{p} vektor (x, y) síkbeli azimutszöge). Megjegyezzük, hogy $p_+ p_- = p^2$. Érdeemes bevezetni még a következő jelölést:

$$\Omega(\mathbf{p}) = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}. \quad (5.130)$$

A későbbiekben szükségünk lesz az (5.129) mátrix inverzére, ami közvetlen módon kiszámítható:

$$H(\mathbf{p}) = \frac{1}{p^2} \begin{pmatrix} 0 & -2m e^{-2i\varphi} & 0 & p_- \\ -2m e^{2i\varphi} & 0 & p_+ & 0 \\ 0 & p_- & 0 & 0 \\ p_+ & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.131)$$

A kétrétegű grafén jelenleg vizsgált modellje – szemben a korábbi fejezetekben szereplő többkomponensű modellekkel – valóban többfrekvenciás Zitterbewegungot fog mutatni. Ez azt jelenti, hogy sem az energiaszintek degenerációja, sem azok ekvidisztáns eloszlása, sem a ZB-együtthatók eltűnése nem takarja el a Zitterbewegung alapvetően multifrekvenciás jellegét. Ezért ennek a modellnek a leírására a korábbi egyszerűsítő módszerek – beleértve a 3. rész kvázispin-formalizmusát is – nem alkalmazhatók, egyedül a 4. részben bemutatott általános elmélet és tárgyalásmód vezet célra.

Első lépésként meg kell határoznunk az (5.129) Hamilton-operátor sajátértégeit és projektor-felbontását. A mátrix negyedfokú karakterisztikus polinomja szerencsére egy másodfokú polinom négyzeteként írható fel, ezért a sajátértékek egyszerűen kiszámíthatók. A négy sajátérték a következő:

$$E_1 = -\alpha, \quad E_2 = -\beta, \quad E_3 = \beta, \quad E_4 = \alpha, \quad (5.132)$$

ahol a következő jelöléseket vezettük be:

$$\alpha(\mathbf{p}) = \Omega(\mathbf{p}) + m, \quad \beta(\mathbf{p}) = \Omega(\mathbf{p}) - m. \quad (5.133)$$

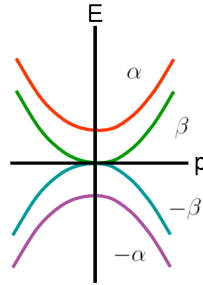
Az energiaszintek az $E = 0$ egyenesre szimmetrikusan helyezkednek el, egy adott \mathbf{p} impulzus-értékhez tartozó négy energiaszint átlaga nulla. Ezért – a 4.8 fejezetben mondtak és a (4.64) formula szerint – a driftsebesség „reguláris” \mathbf{V}_0 része nulla lesz, a teljes driftsebesség „anomális” eredetű lesz.

Az $\alpha(\mathbf{p})$ és $\beta(\mathbf{p})$, illetve a $-\alpha(\mathbf{p})$ és $-\beta(\mathbf{p})$ görbék (hiperbolák, amelyek az origó

közelében parabolákkal közelíthetők) egymással párhuzamosak, egymás $2m$ értékkel való függőleges eltoltjai.

A $\mathbf{p} = 0$ pontban az $\Omega(\mathbf{p})$ függvény értéke m , ezért a $\beta(\mathbf{p})$ függvény itt nulla értéket vesz fel. Ennek következtében az origóban a $\beta(\mathbf{p})$ és a $-\beta(\mathbf{p})$ görbék parabolikusan érintik egymást. Ezt a struktúrát úgy tekinthetjük, mint az egyrétegű grafén esetében megismert Dirac-kúpoknak a két réteg közt fellépő kölcsönhatás következtében „Newton”-parabolákká torzult változatát. A két parabola érintkezése következtében viszont – akárcsak az egyrétegű grafén esetében – továbbra sincs energiahézag, „gap” a két sáv között, azaz tetszőlegesen kicsiny energiájú átmenetek is lehetségesek. A másik két sáv, melyeket az $\alpha(\mathbf{p})$ és a $-\alpha(\mathbf{p})$ függvények írnak le, az origóban érintkező sávoktól véges, $2m$ távolságra húzódik, a két közeli sávtól véges gap választja el őket. Kis energiájú közelítésben ezért ezt a két sávot el szokás hagyni, és a csonkított diszperziós reláció egy egyszerűbb, 2×2 -es Hamilton-mátrixszal is reprezentálható, mint azt az 5.3.1 szakaszban láttuk.

A kétrétegű grafén jelenleg vizsgált izotróp modelljének diszperziós relációját (az érintési pont közelében) az 5.3 ábrán mutatjuk be.



5.3. ábra. A kétrétegű grafén izotróp modelljének diszperziós relációja a K pontok közelében.

Az energiaszintek ismeretében rögtön meghatározhatjuk a (4.22) különbségi frekvenciákat is. Négy különböző energiaszint esetén – mivel bármelyik két szint között felléphet átmenet – összesen hat átmeneti frekvenciát várhatunk. A kétrétegű grafén szintszerkezetének speciális tulajdonságai következtében azonban csak kevesebb frekvencia szerepel, hiszen az $\alpha(\mathbf{p})$ és a $\beta(\mathbf{p})$ szintek $2m$ távolsága megegyezik a $-\beta(\mathbf{p})$ és a $-\alpha(\mathbf{p})$ szintek közti távolsággal, és hasonlóképpen az $\alpha(\mathbf{p})$ és a $-\beta(\mathbf{p})$ szintek közti $2\Omega(\mathbf{p})$ távolság is azonos a $\beta(\mathbf{p})$ és a $-\alpha(\mathbf{p})$ szintek távolságával. Így összesen négy különböző frekvencia lép fel:

$$\omega_{\alpha,-\alpha} = 2\alpha(\mathbf{p}), \quad \omega_{\beta,-\beta} = 2\beta(\mathbf{p}) \quad (5.134)$$

$$\omega_{\beta,-\alpha} = \omega_{\alpha,-\beta} = \alpha + \beta = 2\Omega(\mathbf{p}), \quad \omega_{\beta,\alpha} = \omega_{-\alpha,-\beta} = \beta - \alpha = 2m.$$

Az egybeeső frekvenciájú rezgésekhez tartozó ZB-együtthatók összeadódnak. A most tárgyalthoz hasonló jelenség lépett fel az 5.7 fejezetben tárgyalt kvázispin-rendszerek esetében is, azzal a különbséggel, hogy ott sok ZB-együttható zérusnak adódott, a nem zérus együtthatókhöz tartozó frekvenciák pedig mind egybeestek.

A következő lépés a projektorok meghatározása. Ehhez a C. függelékben leírt módszert, a Lagrange-mátrixpolinomok vagy más néven a Frobenius-invariánsok módszerét használhatjuk, amely a Hamilton-operátor polinomjaként állítja elő a projektorokat. A polinomok kiszámítása közben kihasználhatjuk a Cayley–Hamilton-tételt, mely szerint minden mátrix kielégíti a saját karakterisztikus egyenletét:

$$(H - \alpha I)(H + \alpha I)(H - \beta I)(H + \beta I) = H^4 - (\alpha^2 + \beta^2)H^2 + \alpha^2\beta^2 I = 0. \quad (5.135)$$

Négy különböző egyszeres sajátérték, ennek megfelelően négy egydimenziós sajátaltér esetén további egyszerűsítés érhető el: a projektorok előállíthatók két involutórikus (tükröző) mátrix segítségével, melyek egyike az 1. és 4. sajátértékekhez tartozó alteret tükrözi a 2. és 3. sajátértékhez tartozó alterre, a másik pedig az 1. és 3. sajátértékhez tartozó alteret tükrözi a 2. és 4. sajátértékekhez tartozó alterre.

$$\begin{aligned} Q_\alpha &= \frac{I+R}{2} \frac{I+T}{2}, & Q_\beta &= \frac{I-R}{2} \frac{I-T}{2}, \\ Q_{-\beta} &= \frac{I+R}{2} \frac{I-T}{2}, & Q_{-\alpha} &= \frac{I-R}{2} \frac{I+T}{2}. \end{aligned} \quad (5.136)$$

Esetünkben az egyik tükröző mátrix igen könnyen megkapható, hiszen a sajátértékek ellentétes előjellel párosával fordulnak elő: $\pm\alpha$, illetve $\pm\beta$, ezért a Hamilton-operátor H^2 négyzetének sajátértékei α^2 és β^2 . Így a Lagrange-mátrixpolinomok módszerét a H^2 operátora alkalmazva, közvetlenül megkaphatjuk a két projektort, különbségüként pedig az egyik involutórikus mátrixot:

$$\begin{aligned} T &= (Q_\alpha + Q_{-\alpha}) - (Q_\beta + Q_{-\beta}) = \frac{H^2 - \alpha^2 I}{\alpha^2 - \beta^2} - \frac{H^2 - \beta^2 I}{\beta^2 - \alpha^2} = \\ &= \frac{2H^2 - (\alpha^2 + \beta^2)I}{\alpha^2 - \beta^2} = \frac{H^2 - (m^2 + \Omega^2)I}{2m\Omega}, \end{aligned} \quad (5.137)$$

ahol az utolsó lépésben kihasználtuk a sajátértékek (5.133) előállítását.

A másik tükröző mátrix hasonló módon, bár kissé több számolással vezethető le, közben kihasználhatjuk az (5.135) egyenlőséget. Az eredmény legegyszerűbben az (5.131) képletbeli H^{-1} mátrix segítségével fejezhető ki:

$$\begin{aligned} R &= (Q_\alpha + Q_{-\beta}) - (Q_\beta + Q_{-\alpha}) = \frac{H^3 - (\alpha^2 + \beta^2 - \alpha\beta)H}{\alpha\beta(\alpha - \beta)} = \\ &= H^{-1} \frac{H^4 - (\alpha^2 + \beta^2 - \alpha\beta)H^2}{\alpha\beta(\alpha - \beta)} = H^{-1} \frac{H^2 - \alpha\beta I}{\alpha - \beta} = \frac{H - p^2 H^{-1}}{2m}. \end{aligned} \quad (5.138)$$

A Hamilton-operátor (5.129) alakját behelyettesítve végül megkapjuk a projektorokat generáló T és R involutórikus mátrixok konkrét alakját:

$$T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & p_- & 0 \\ 0 & -1 & 0 & p_+ \\ p_+ & 0 & 1 & 0 \\ 0 & p_- & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\varphi} & 0 & 0 \\ e^{2i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.139)$$

Mindezeket a technikai bonyodalmakat azért érdemes vállalni, mert a – viszonylag bonyolult alakú – Q^k projektorok az (5.136) egyenlőségek alapján kifejezhetők az igen egyszerű alakú T és R mátrixokkal. Ezek után a ZB-együtthatók (4.25) kifejezései is visszavezethetők a T és R mátrixokra és \mathbf{p} szerinti deriváltjaikra. A hosszú, de elemi számítást nem részletezzük, csak a végeredményt közöljük. A kétrétegű grafén izotróp modelljében a helyoperátor Heisenberg-képbeli mozgása a szokásos módon a következő alakú lesz:

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \hat{\mathbf{x}}(0) + \mathbf{W}t + \mathbf{Z}(t), \quad (5.140)$$

ahol a \mathbf{W} driftsebesség mátrixa:

$$\mathbf{W} = \mathbf{p} \frac{1}{\Omega^2} \begin{pmatrix} 0 & -m e^{-2i\varphi} & 0 & p_- \\ -m e^{2i\varphi} & 0 & p_+ & 0 \\ 0 & p_- & 0 & m \\ p_+ & 0 & m & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.141)$$

az oszcilláló tagok pedig a következő alakúak:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(t) = \frac{\hbar}{4\Omega^2} \frac{\mathbf{e} \times \mathbf{p}}{p^2} & \left\{ (\cos 2mt - 1) \begin{pmatrix} 2p^2 & 0 & 2mp_- & 0 \\ 0 & -2p^2 & 0 & -2mp_+ \\ 2mp_+ & 0 & -2p^2 & 0 \\ 0 & -2mp_- & 0 & 2p^2 \end{pmatrix} + \right. \\ & + i \sin 2mt \begin{pmatrix} 0 & 2p^2 e^{-2i\varphi} & 0 & 2mp_- \\ -2p^2 e^{2i\varphi} & 0 & -2mp_+ & 0 \\ 0 & -2mp_- & 0 & 2p^2 \\ 2mp_+ & 0 & -2p^2 & 0 \end{pmatrix} + \\ & + (\cos 2\alpha t - 1) \begin{pmatrix} \beta^2 & 0 & -\beta p_- & 0 \\ 0 & -\beta^2 & 0 & \beta p_+ \\ -\beta p_+ & 0 & p^2 & 0 \\ 0 & \beta p_- & 0 & -p^2 \end{pmatrix} + \\ & + i \sin 2\alpha t \begin{pmatrix} 0 & \beta^2 e^{-2i\varphi} & 0 & -\beta p_- \\ -\beta^2 e^{2i\varphi} & 0 & \beta p_+ & 0 \\ 0 & -\beta p_- & 0 & p^2 \\ \beta p_+ & 0 & -p^2 & 0 \end{pmatrix} + \\ & + (\cos 2\beta t - 1) \begin{pmatrix} \alpha^2 & 0 & \alpha p_- & 0 \\ 0 & -\alpha^2 & 0 & -\alpha p_+ \\ \alpha p_+ & 0 & p^2 & 0 \\ 0 & -\alpha p_- & 0 & -p^2 \end{pmatrix} + \\ & \left. + i \sin 2\beta t \begin{pmatrix} 0 & -\alpha^2 e^{-2i\varphi} & 0 & -\alpha p_- \\ \alpha^2 e^{2i\varphi} & 0 & \alpha p_+ & 0 \\ 0 & -\alpha p_- & 0 & -p^2 \\ \alpha p_+ & 0 & p^2 & 0 \end{pmatrix} \right\} + \\ & + \frac{i\hbar m}{2\Omega^3} \frac{\mathbf{p}}{p^2} \left\{ (\cos 2\Omega t - 1) \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Omega p_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega p_+ \\ -\Omega p_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Omega p_- & 0 & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ & \left. + i \sin 2\Omega t \begin{pmatrix} 0 & -p^2 e^{-2i\varphi} & 0 & mp_- \\ -p^2 e^{2i\varphi} & 0 & -mp_+ & 0 \\ 0 & -mp_- & 0 & p^2 \\ -mp_+ & 0 & p^2 & 0 \end{pmatrix} \right\}. \quad (5.142) \end{aligned}$$

A végeredményből leolvashatjuk a kétrétegű grafén izotróp modelljében fellépő Zitterbewegung alapvető jellemzőit. A driftsebesség az (5.141) képlet szerint párhuzamos a \mathbf{p} impulzussal. Az (5.134) formula szerint négy különböző frekvenciájú oszcilláló ZB módus lép fel, ezek közül három transzverzális, az $(\mathbf{e} \times \mathbf{p})$ vektorral párhuzamos irányú, míg egy, az Ω frekvenciájú rezgés longitudinális, a \mathbf{p} vektorral párhuzamos irányú.

Látható, hogy már a viszonylag egyszerű alakú (5.129) Hamilton-operátor esetén is milyen bonyolult (mindazonáltal egzaktul, közelítés nélkül kezelhető) mozgást végez a helyoperátor. E mozgásformák igazi gazdagsága természetesen akkor tárul fel, ha az (5.140) helyoperátor várható értékét különböző kezdőfeltételek, azaz kezdeti állapotvektorok esetén kiértékeljük, és a várható értéket (amely pl. egy hullámcsomag középpontjának mozgását jellemezheti) az idő függvényében, lehetőleg három dimenzióban ábrázoljuk. Ezt a munkát végezte el TDK-diákunk, Széchenyi Gábor, aki az (5.140) helyoperátor várható értékét számos különböző kezdőállapotra kiértékelte és ábrázolta. TDK-dolgozatára [42] az ELTE TTK 2009-es Tudományos Diákköri konferenciáján első díjat kapott.

5.9. Tanulságok

Ebben a részben a kvázispin-rendszerekre kidolgozott, a 3. részben bemutatott elméletet, illetve a 4. részben bemutatott általános formalizmust alkalmaztuk a fizika különböző ágaiban, ezen belül is a szilárdtestfizikában és a nanofizikában felbukkant különböző kvantummodellekre. E részletesen megvizsgált modellek a legegyszerűbbek közé tartoznak, mégis a Zitterbewegung számos változatos aspektusa tárult fel tanulmányozásuk során. Nincs elvi akadálya annak, hogy ugyanezeket az eljárásokat és formulákat bonyolultabb rendszerekre, még több komponensű állapotvektorokra ható Hamilton-operátorokat használó modellekre is alkalmazzuk. A technikai nehézségek matematikai programcsomagokkal, illetve numerikus módszerekkel könnyen legyőzhetők. Látjuk, hogy a Zitterbewegung fellépte nem a Dirac-elektron vagy a relativitáselmélet kuriózuma, hanem a többkomponensű kvázi-szabad kvantumrendszerek általános tulajdonsága.

A vizsgált legegyszerűbb kvantummodellek tanulmányozása a Zitterbewegung következő, korábban nem ismert vagy nem eléggé hangsúlyozott jellemzőire mutatott rá:

- A Zitterbewegung speciális kivételektől eltekintve minden vizsgált modellben fellépett.
- A ZB – a korábbi általános vélekedéssel szemben – nem egyetlen frekvenciájú jelenség, hanem általában a kvázi-szabad rendszer adott impulzusértékhez tartozó különböző energiaszintjei közötti különbségi frekvenciák mindegyike megjelenik a helyoperátorban.
 - A legegyszerűbb rendszereket 2×2 -es effektív Hamilton-operátor írja le. Ebben az esetben csak két energiaszint, így evidensen csak egyetlen különbségi frekvencia jelenik meg.
 - Vannak olyan rendszerek, amelyeket többdimenziós állapotvektor, ezért nagyobb méretű Hamilton-mátrix ír le, de a sajátértékek degeneráltak, és végeredményben csak két különböző energiaszint alakul ki. Ebben az esetben ismét csak egyetlen ZB-frekvencia lép fel. Vizsgált modelljeink közül ide tartozik Schrödinger eredeti ZB-ja és a Luttinger-modell.
 - Speciális esetet képeznek az $S > 1/2$ spinértékű kvázispin-modellek. Ilyenkor $(2S + 1)$ különböző energiaszint van jelen, de a köztük levő átmenetekhez

tartozó ZB-együtthatók jelentős része a spin-algebra sajátosságai következtében nulla, csak a szomszédos szintek közötti átmenetekhez tartoznak nem eltűnő ZB-együtthatók. A szomszédos szintek viszont ekvidisztánsak, ezért minden lehetséges átmenet azonos frekvenciájú. Így a ZB ismét csak egyetlen frekvenciával jellemezhető.

- Hasonló, de részleges egybeesés előfordul a legbonyolultabb megvizsgált rendszer, a kétrétegű grafén izotróp modellje esetén is. Itt – a spektrum speciális szimmetriája miatt – a négy energiaszint közötti hat lehetséges átmenet közül kettőnek–kettőnek egybeesik a frekvenciája, ezért összesen csak négy különböző frekvenciájú ZB-oszcilláció lép fel.
- Az általános esetben az N komponensű állapotvektorral leírható rendszerben az N energiaszint között $N(N-1)/2$ különböző frekvenciájú ZB-módus jelenik meg.
- A ZB rezgések vektoriálisak. A rezgések amplitudóvektorai a legkülönbözőbbek lehetnek.
 - Schrödinger eredeti példájához hasonlóan több rendszerben transzverzális ZB lép fel. A kétdimenziós rendszerek (pl. az egyrétegű grafén vagy a kvantumvölgyben mozgó nehéz lyukak) esetében ez az impulzusvektorra merőleges amplitudóvektor a rendszer síkjába esik. Más, háromdimenziós mozgások esetén a polarizáció merőleges az impulzusra, de konkrét irányát a kezdőfeltételek szabják meg. Ez a helyzet a Luttinger-modell esetén. A Schrödinger-féle ZB esetében a rendszer „kihasználja a három dimenziót”, a helyvektor várható értéke dugóhúzó alakú pályán mozog az átlagos, egyenes vonalú, állandó sebességű mozgás körül.
 - A kétdimenziós szupravezetőkben mozgó Cooper-párok egy másik lehetőségre, a longitudinális, vagy cikloidális ZB-re mutatnak példát. Ekkor a részecske nem tér le az egyenes pályáról, de az állandó sebességű mozgáshoz képest előresiet, illetve hátramarad.
 - Több szabadsági fokú rendszerek esetén bonyolultabb esetek is előfordulhatnak. A kétrétegű grafén izotróp modelljében négy ZB-módus lép fel, ezek közül három transzverzális, egymással párhuzamos, a rendszer síkjába eső irányú, a negyedik módus longitudinális. Ilyen rendszerek esetén a kezdőállapottól függően a helyoperátor várható értéke igen érdekes és bonyolult ábrákat rajzolhat ki. (Ezek közül sok megtekinthető Széchenyi Gábor dolgozatában [42].)
 - Az eddig említett rendszerek – térben vagy síkban – izotrópok voltak. Bonyolultabb jelenségek léphetnek fel, ha a rendszer nem izotróp, a Hamilton-operátorban explicit módon megjelennek a részecskemozgás háttéréül szolgáló kristály kitüntetett irányai, szimmetriatulajdonságai és anizotrópiái. Vizsgált modelljeink közül ilyen volt a Rashba–Dresselhaus-rendszer. Itt a kristály x - és y -tengelye kitüntetett szerepet játszik. A ZB-rezgések itt is transzverzálisak, de a driftsebesség már bonyolultabb módon függ az impulzus irányától. Egy másik anizotróp rendszer a kétrétegű grafén „trigonális torzulást” is tartalmazó anizotróp modellje, amelynek részletes leírásától itt helyhiány miatt eltekintettünk (a vizsgálat eredményeit később kívánjuk publikálni). Ebben a modellben a ZB-rezgések iránya bonyolult módon függ az impulzusvektor irányától és nagyságától, miközben ez a függés tükrözi a vizsgált fizikai rendszer háromfokúsú szimmetriáját.

- Méltatlanul kevés figyelmet fordítottak korábban a Zitterbewegung „driftsebességére”. A Schödinger-féle esetben ez nagyságra és irányra megegyezett a klasszikus fizika (a speciális relativitáselmélet) alapján a \mathbf{p} impulzusú és E energiájú részecskének „járó” \mathbf{V} sebességgel. Ezért magától értetődőnek gondolták, hogy a ZB rezgései a klasszikusan kiszámítható, állandó sebességű részecskepálya körül zajlanak le. Eredményeink azt mutatják, hogy a helyzet ennél sokkal komplexebb.
 - A kvázispin-rendszerek esetén elkülönítettük a Hamilton-operátor egységoperátorral arányos tagjából származó „reguláris” és a kvázimágneses térrel kölcsönhatásban álló kvázispin-tagtól származó „anomális” tagját. A 3.7 fejezetben megmutattuk, hogy az anomális sebesség fellépésének oka a (3.21) egyenletben szereplő M „időfejlesztő” operátor nemtriviális, valódi gyengén involutórikus volta, nulla sajátértékéhez tartozó magterének létezése. Sok rendszer esetén a Hamilton-operátor reguláris tagja hiányzik, a teljes sebesség „anomális”.
 - Az „anomális” sebességet leíró mennyiség (a klasszikus fizikai sebességgel azonosítható reguláris sebességtől eltérően) operátor. Más-más értéket vehet fel attól függően, milyen állapotvektorra értékeljük ki a helyoperátort. Ez a legegyszerűbb esetben, kétállapotú rendszerek esetén úgy jelenik meg, hogy a sebesség az egyik energia-sajátállapotban ugyanabba az irányba mutat, mint az impulzus, a másik esetben pedig az ellenkező irányba. Ezért szuperponált állapotban is azt kapjuk, hogy a driftsebesség várható értéke párhuzamos az impulzussal, csak nagysága változik az állapottól függően. Ezt a jelenséget nagyvonalúan egy „effektív tömeg” fogalommal lehetne leírni. Egy kissé bonyolultabb, anizotróp rendszerek esetében azonban az anomális sebességoperátor sajátérték-vektorai már általában nem párhuzamosak az impulzusvektorral. Erre jó példa a Rashba–Dresselhaus-modell.
 - A 4. részben megmutattuk, hogy a driftsebesség operátora az egyes energia-sajátértékek impulzus szerinti gradienseként adódik. Ezek a vektorok – kellően bonyolult Hamilton-operátor esetén – általában sem egymással, sem az impulzussal nem párhuzamosak.
 - A vizsgált rendszerekben fellépő Zitterbewegungot a 4.8 fejezetben altérpárok szerinti felbontásban tanulmányoztuk. Láttuk, hogy – akárcsak az oszcilláló tagok – a driftsebesség is felbontható az egyes altérpárokhoz tartozó járulékok, valamint egy effektív „átlagos” sebesség összegére. Az utóbbi kétállapotú rendszerek esetén egybeesett a korábban tárgyalt „reguláris” sebességgel. Ha a vizsgált rendszernek egyáltalán létezik klasszikus megfelelője, csak az így leválasztott átlagsebesség azonosítható a klasszikus modellbeli sebességgel.
 - A fentieknek megfelelően a Zitterbewegung semmiképpen sem egyszerűsíthető le „a klasszikus egyenes vonalú egyenletes mozgás körüli oszcilláció” jelenségére — hiszen az általános esetben sem az egyetlen sebességvektorral jellemezhető klasszikus mozgás, sem az egyetlen frekvenciájú oszcilláció nem létezik. A Zitterbewegung sokkal komplexebb jelenség, és az itt részletesen tanulmányozott egyszerű rendszereken túllépve azt várhatjuk, hogy az ismert leegyszerűsítésekkel már nem élhetünk, a jelenség a maga teljes bonyolultságában mutatkozik meg.
- A kombinált Rashba–Dresselhaus-modell speciális esetében, a paraméterek megfelelő választásakor azt tapasztaltuk, hogy egyáltalán nincs Zitterbewegung. Ez az érdekes eset arra utal, hogy az általános sémával ellentétben bizonyos speciális szimmetriák

elnyomhatják a ZB jelenségét. Különösen figyelemre méltó, hogy a RD-modell egyik paramétere kísérleti körülmények között külső elektromos térrel hangolható. Ez lehetőséget nyújthat a ZB „vezérlésére”. Mivel a dolgozat megírása óta végzett számításaink (lásd a [C] cikket) arra utalnak, hogy a ZB fontos szerepet játszik a szilárdtestek és nanoszerkezetek transzponttulajdonságaiban, ez a hangolhatóság érdekes perspektívákat nyújthat a majdani nanoelektronikai és spintronikai eszközök szabályozása tekintetében.

Konklúzió

Dolgozatom a Zitterbewegung immár nyolcvan éve felfedezett, de még ma sem eléggé ismert jelenségének fizikai és matematikai alapjairól szolt, különös tekintettel az utóbbi években számos különböző szilárdtestfizikai és nanofizikai rendszerben felbukkant, az eredeti Schrödinger-féle ZB-hez hasonló, de tőle sok tekintetben eltérő jelenségekre. Főbb megállapításaim a következők:

- A ZB igen általános kvantumjelenség, számos kvantumrendszerben előfordul. Fellépésének szükséges feltételei a következők:
 - Több komponensű kvantumrendszer, melynek Hilbert-tere a szokásos végtelen dimenziós tér (pl. függvényter) és egy véges dimenziós komplex vektortér tenzori szorzata. A hullámfüggvény több komponense által leírt véges sok szabadsági fok fizikailag igen eltérő lehet (pl. a Dirac-elektron spinor-komponensei, az egyrétegű grafén elemi cellájának két nem ekvivalens helyzetű atomja, a kétrétegű grafén rétegei, szilárdtestek vegyérték- és vezetési sávja, a másodrendű Klein–Gordon-egyenlet elsőrendűre visszavezetésekor megjelenő komponensek stb.).
 - Kvázi-szabad kvantumrendszer. Ez azt jelenti, hogy a rendszert leíró, dinamikáját megadó Hamilton-operátor csak az impulzustól (vagy kváziimpulzustól) függ, a helyoperátortól nem. Ez kétféleképp fordulhat elő: a rendszer ténylegesen eltolásinvariáns (pl. a relativisztikus szabad elektron), vagy a rendszer matematikai leírása formálisan kiküszöböli a helyfüggést (a szilárdtestek sávmélete, amely a bonyolult helyfüggő részleteket a soksávú diszperziós reláció függvényalakjába transzformálja). Megjegyzés: ez a feltétel nem azt jelenti, hogy helyfüggő Hamilton-operátor esetén nem léphet fel a ZB-hez hasonló, vagy még bonyolultabb mozgás, hanem inkább arra utal, hogy ilyen esetben nincs egyértelmű módszer a klasszikusnak megfelelő „sima” mozgás és az arra rakódó oszcillációk szétválasztására.
 - A belső szabadsági fok és a translációs szabadsági fok összekapcsolódása. Ezt a legegyszerűbben az impulzusfüggő mátrixelemeket tartalmazó nemdiagonális Hamilton-operátorral tudjuk megvalósítani. Ezt a kapcsolatot nevezhetjük „általánosított spin–pálya-csatolásnak” is.

A fenti feltételek fennállása esetén – hacsak speciális extra szimmetria nem tiltja – a rendszerben fellép a Zitterbewegung.

- A dolgozat 4. részében bemutatott eljárás a fenti alakú Hamilton-operátorok esetén megadja a ZB jelenségének teljes leírását, azaz a Heisenberg-képbeli helyoperátor egzakt időfüggését. A helyoperátor a következő tagokból áll:

- A kezdeti helyzet operátora, amely megegyezik a Schrödinger-képbeli helyoperátorral, azaz az impulzus szerinti gradiensevel.
 - Lineáris, állandó sebességű mozgás. A sebességoperátor a Hamilton-operátor egyes energia-sajátaltereire vetítő projektorok és a megfelelő energia-sajátérték impulzus szerinti gradienseként előálló parciális sebességek szorzatainak összege. E parciális sebességvektorok általában nem párhuzamosok sem egymással, sem az impulzusvektorral.
 - Állandó eltolódás – ez a tag lényegében az oszcilláló tagok kezdeti értékének beállítására szolgál, technikailag érdemes az oszcilláló tagokba beolvasztani.
 - Oszcilláló tagok, azaz a tulajdonképpeni Zitterbewegung. A korábbi vélekedéssel szemben megmutattuk, hogy a ZB általában nem egyetlen frekvenciájú jelenség, hanem az adott impulzus-értékhez tartozó összes energiaérték közti különbségi, lebegési frekvenciák megjelennek. Az egyes módusok együtthatói az energia-sajátalterekre vetítő projektorokból és azok impulzus szerinti gradienseiből konstruálhatók meg.
- A Zitterbewegungnak a közvélekedéssel szemben sem a speciális relativitáselmélethez, sem a spin jelenségéhez nincs közvetlen köze. Pusztán történeti véletlen, hogy a ZB jelensége először az elektron spinjét is leíró relativisztikus Dirac-egyenletben bukkant fel. Ez a jelenségkör is teljesíti a ZB fenti három kritériumát – csak ennyi a kapcsolat. Így már érthető, hogy a szilárdtestfizikai modellrendszerekben, ahol nincsenek relativisztikus sebességek, de van többkomponensű hullámfüggvény és általánosított SO-kölcsönhatás, miért oly gyakori a ZB megjelenése.
 - Mikor nem jelenik meg a ZB? Erre egy érdekes példát tudunk mutatni: a Rashba–Dresselhaus-modell speciális esetét, amikor csak a rendszer energia-sajátértékei függenek az impulzustól, a sajátalterek nem, lévén azok fixek. Ebben az esetben a projektorok impulzus szerinti gradiensei, így az összes ZB-együttható is zérus. Hasonló jelenség más kvantumrendszerekben is előfordulhat.
 - Általános tárgyalásunk könnyen alkalmazható volt az irodalomban a ZB-re vonatkozó összes korábbi, elszórt, más-más *ad hoc* számítási módszerrel előállított részeredmény rekonstrukciójára. Emellett természetesen korábban nem tárgyalt, bonyolultabb rendszerek vizsgálatára is alkalmaztuk. A kétrétegű grafén izotróp modelljében fellépő ZB jelenségét az irodalomban elsőként [B] cikkünk, illetve [B1] kiegészítése írta le (lásd a dolgozat 5.8 fejezetét). A kétrétegű grafén anizotróp modelljére vonatkozó hasonló, még bonyolultabb eredményeink publikálását a közeljövőben tervezzük.
 - Új, meglepő és fontos fejlemény, hogy a vizsgált modellrendszerek transzportjelenségeinek (elektromos vezetőképesség, Hall-effektus stb.) leírása során ugyanazok az együttható-mátrixok jelennek meg, mint a ZB esetén. Ez a két jelenségkör közti mély kapcsolatra utal. A részleteket [C] cikkünkben írtuk le. A számítás kulcslépése itt is a Hamilton-operátor projektor-felbontása volt. Ez a kapcsolat egyrészt segíthet a ZB – közvetett – kísérleti kimutatásában, másrészt lehetővé teszi a nemtriviális egyedi elektronmozgású rendszerek bonyolult transzportjelenségeinek mélyebb megértését, esetleges vezérlését is.
 - A különböző impulzusú hullámok keveredése a gyakorlatban a ZB kioltásához, gyors lecsengéséhez vezethet. Általános elméletünk segíthet megtalálni azokat az eseteket,

amikor a diszperziós reláció impulzusfüggésének speciális alakja miatt a ZB nem cseng le, hanem tartósan fennmaradhat. Ez a kérdés további tanulmányozást igényel, valószínűleg a másodkvantált formalizmus felhasználásával.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetemet fejezem ki barátomnak és kollégámnak, Cserti Józsefnek, aki megismertetett a témával, bevont kutatásaiba, beavatott a modern szilárdtestfizika és nanofizika gondolatvilágába, problémáiba, módszereibe, emellett több konferencián és iskolán összeismertetett a téma hazai és külföldi művelőivel. A témáról folytatott megbeszéléseink, a közös számolások, az egyénileg végzett számítások egyeztetése és összecsiszolása, az eredmények interpretálásáról folytatott diszkussziók, a közösen írt cikkek előkészítése és megírása – mindez emlékezetes és élvezetes munka volt.

Köszönöm Csordás András segítségét, aki a dolgozat alapos elolvasásával és hasznos tanácsaival elősegítette a tárgyalás érthetőbbé és követhetőbbé tételét.

Köszönöm Király Andreának, hogy a dolgozat többszöri átnézésével és részletekbe menő javításával megszabadította azt számos zavaró technikai és formai hibától. A kéziratban most is benne maradt hibákért természetesen csakis engem terhel a felelősség.

Köszönöm Egri Győzőnek, hogy felhívta a figyelmemet a Mach-elv és a Zitterbewegung feltételezett kapcsolatára.

Köszönetet mondok azoknak a kollégáknak, valamint szeminárium- és nyáriiskola-szervezőknek, akik az utóbbi években, az anyag elkészültének különböző fázisaiban többször is felkértek előadások tartására. Ezek a felkérések rákényszerítettek az elkészült anyag át-gondolására, letisztázására, megfogalmazására, ezzel nagyban hozzájárultak a jelen dolgozat elkészüléséhez is. Köszönöm az említett előadások hallgatóinak, hogy érdeklődésükkel, kérdéseikkel, megjegyzéseikkel, olykor értetlenségükkel hozzájárultak az anyag csiszolásához, érthetőbbé formálásához.

Utólag is köszönetet mondok a néhai Marx György professzornak, akitől az elméleti fizika szeretetét, a világ érdekességei iránti olthatatlan érdeklődést, a matematikai leírás eleganciája iránti (a megfelelő pillanatban némi szükséges lazasággal enyhített) rajongást és tiszteletet, ráadásként pedig az ismeretek átadása iránti határtalan vágyat és lelkesedést tanultam.

Végül köszönetet mondok mindazon kollégámnak és barátomnak (beleértve a fentebb név szerint említetteket is), akik a cikkek és a dolgozat elkészítésének ideje alatt baráti sürgetésükkel és noszogatásukkal a munka megkezdésére, folytatására és mielőbbi befejezésére ösztönöztek.

A munkát anyagilag a Marie Curie ITN NanoCTM (FP7-PEOPLE-ITN-2008-234970) pályázat, illetve a 75529. és 81492. számú OTKA pályázatok támogatták.

A. függelék

Involutórikus és gyengén involutórikus operátorok

Az alábbiakban a levezetéseinkben használt néhány lineáris algebrai fogalmat és tételt foglalunk össze. A részleteket illetően Rózsa Pál könyveire [67, 68] utalunk.

A.1. Egyszerű struktúrájú operátorok és függvényeik

Legyen \mathbb{V} egy véges dimenziós, komplex, hermitikus skaláris szorzattal ellátott lineáris tér, A pedig a \mathbb{V} téren ható lineáris operátor. (A lineáris operátorokat általában mátrixokkal reprezentáljuk, a használt fogalmak, jelzők operátorok helyett értelemszerűen mátrixokra is alkalmazhatók.) Az A operátor *minimálegyenlete* az a legalacsonyabb fokú algebrai egyenlet, amelyet az operátor kielégít. Ezt nullára rendezve és a főegyütthatót 1-nek választva kapjuk a *minimálpolinomot*. Ennek gyökei megegyeznek a karakterisztikus polinom gyökeivel, azaz az operátor sajátértékeivel, és mindegyik gyök szerepel, legfeljebb annyiszor, mint a karakterisztikus polinomban [67]. A kétféle polinom megkülönböztetésnek tehát csak akkor van jelentősége, ha a karakterisztikus polinomnak többszörös gyöke(i) is van(nak).

A \mathbb{V} téren ható A lineáris operátort *egyszerű struktúrájú* nevezzük, ha minimálpolinomjának minden gyöke egyszeres multiplicitású. Az egyszerű struktúrájú operátorok legfontosabb tulajdonsága, hogy sajátvektoraik kifeszítik a lineáris teret, amelyen az operátor hat, tehát a sajátvektorokból bázist lehet alkotni. A kvantummechanikában leggyakrabban előforduló hermitikus és unitér operátorok véges dimenziójú változatai mind az egyszerű struktúrájú operátorok közé tartoznak [67]. A továbbiakban csak egyszerű struktúrájú operátorokkal foglalkozunk.

Vizsgáljuk meg a \mathbb{V} téren ható A lineáris operátor analitikus függvényeit! Olyan $f(z)$ komplex változós függvényeknek az operátorokra általánosításáról van szó, amelyeket hatványsorokkal értelmezünk:

$$f(z) = c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots + c_n z^n + \dots \quad (\text{A.1})$$

ahol a c_k együtthatók rögzített, általában komplex számok.

A mátrixfüggvények alaptétele szerint (lásd [68]) ha egy A operátor minden sajátértéke az (A.1) hatványsor konvergenciakörén belül fekszik, akkor a z változó helyébe az A operátor behelyettesítésével kapott operátor-hatványsor is konvergens, és értelmezi az A operátor $f(A)$ függvényét:

$$f(A) = c_0 I + c_1 A + c_2 A^2 + \dots + c_n A^n + \dots \quad (\text{A.2})$$

Az exponenciális függvény és származékai (sin, cos, sh, ch) az egész komplex síkon konvergensek, ezek a függvények tehát tetszőleges operátorra értelmezhetők.

Véges dimenziójú \mathbb{V} téren ható, egyszerű struktúrájú operátorok esetén a mátrixelmélet egyszerű konstruktív eljárást is kínál a mátrixfüggvény kiszámítására. Készítsük el az A operátor projektorfelbontását:

$$A = \sum_a \lambda_a Q_a , \quad (\text{A.3})$$

ahol a λ_a számok az A operátor sajátértékei, Q_a pedig az a -ik sajátaltérre vetítő projektor. E projektorok kielégítik a Neumann-féle ortogonalitási és teljességi összefüggéseket:

$$Q_a Q_b = \delta_{ab} Q_a , \quad \sum_a Q_a = I . \quad (\text{A.4})$$

Ezeket felhasználva (és hivatkozva a konvergenciára vonatkozó tételekre) könnyen belátható, hogy

$$f(A) = \sum_a f(\lambda_a) Q_a , \quad (\text{A.5})$$

feltéve, hogy az λ_a sajátértékek valamennyien belül vannak az (A.1) hatványsor konvergenciakörén. Az (A.5) konstrukció a lineáris algebra egyik legalapvetőbb és legsokrétűbben használható összefüggése, e dolgozatban is igen sokszor hivatkozunk rá.

Megjegyzés: A sajátaltérre vetítő Q_a projektorokat általában a sajátvektorok diadikus szorzataiból állítják elő. A mátrixalgebra egy egyszerűbb, direkt eljárást is szolgáltat, amelyhez nem szükségesek a sajátvektorok, elegendő az eredeti A operátor és a λ_a sajátértékek ismerete. Ezt az eljárást, amely a Lagrange-féle mátrixpolinomokon alapul, a C. függelékben mutatjuk be. Az eljárás könnyen implementálható szimbolikus programokba (pl. Mathematica), és jelentősen egyszerűbbé teszi, ezzel meggyorsítja a mátrixfüggvények kiszámítását.

A.2. Involutórikus operátorok és függvényeik

Egy egyszerű struktúrájú T operátort tükröző, vagy előkelőbb szóval *involutórikus* operátornak (mátrixnak), rövidebben *involúciónak* nevezünk, ha minimálegyenlete a következő:

$$T^2 = \mathbb{I}_{\mathbb{V}} , \quad (\text{A.6})$$

azaz négyzete megegyezik a \mathbb{V} tér egységoperátorával (ő maga viszont nem az egységoperátor, hiszen akkor a $\lambda = 1$ elsőfokú egyenlet lenne a minimálegyenlete). A továbbiakban az egyszerűbb jelölés kedvéért az egységoperátor \mathbb{V} indexét nem írjuk ki, magát az egységoperátort pedig egyszerűen I -vel jelöljük. Az involúciók közé tartoznak a pontra, egyenesre, síkra vagy hipersíkra történő merőleges vagy ferde tükrözések, innen az operátor-osztály neve.

Az involutórikus operátorokat definiáló (A.6) összefüggésből közvetlenül következik, hogy a T operátor minden páratlan hatványa megegyezik T -vel, a páros hatványok pedig (beleértve a definíció szerint az egységoperátorral azonosított nulladik hatványt is) I -vel:

$$T^{2n+1} = T , \quad T^{2n} = I , \quad \text{ahol } n \in \{0, 1, 2, \dots\} . \quad (\text{A.7})$$

Az involutórikus operátorok sajátértékeinek ki kell elégíteniük a minimálegyenletet, azaz

a

$$\lambda^2 = 1 \quad (\text{A.8})$$

egyenletet. Ennek gyökei 1 és -1 . Mivel a minimálegyenlet gyökei közt az operátor összes sajátértéke szerepel (és csak azok szerepelnek), a tükröző operátorok sajátértéke e két szám. Ennek megfelelően a \mathbb{V} tér felbomlik két ortokomplementer altér direkt összegére, amelyek az 1, illetve a -1 sajátértékhez tartozó sajátalterek. Mindkét altér legalább 1, legfeljebb $N-1$ dimenziós, ahol N a \mathbb{V} tér dimenziója. A két altérre vetítő projektorokat könnyen előállíthatjuk a T tükröző operátor segítségével:

$$Q_1 = \frac{I+T}{2}, \quad Q_{-1} = \frac{I-T}{2}. \quad (\text{A.9})$$

Az (A.6) egyenlet alapján könnyen beláthatjuk a projektorokra vonatkozó alapvető Neumann-összefüggések teljesülését:

$$Q_1^2 = Q_1, \quad Q_{-1}^2 = Q_{-1}, \quad Q_1 Q_{-1} = Q_{-1} Q_1 = 0, \quad Q_1 + Q_{-1} = I. \quad (\text{A.10})$$

Egyszerűen következnek az alábbi formulák is:

$$T Q_1 = T \frac{I+T}{2} = \frac{T+I}{2} = Q_1, \quad T Q_{-1} = T \frac{I-T}{2} = \frac{T-I}{2} = -Q_{-1}. \quad (\text{A.11})$$

Egy tetszőleges \mathbf{w} vektorból kiindulva a Q_1 , illetve Q_{-1} operátorok kivetítik a \mathbf{w}_1 , illetve \mathbf{w}_{-1} vektorokat, melyek a \mathbf{w} vektor két altérre vett vetületei. Az (A.10) relációk alapján könnyen belátható, hogy a két vetület merőleges, összegük pedig a \mathbf{w} vektor. Alkalmazzuk ezután \mathbf{w}_1 -re és \mathbf{w}_{-1} -re a T tükröző operátort, és használjuk ki az (A.11) összefüggéseket:

$$T \mathbf{w}_1 = T Q_1 \mathbf{w} = Q_1 \mathbf{w} = \mathbf{w}_1, \quad T \mathbf{w}_{-1} = T Q_{-1} \mathbf{w} = -Q_{-1} \mathbf{w} = -\mathbf{w}_{-1}, \quad (\text{A.12})$$

azaz a \mathbf{w}_1 , illetve \mathbf{w}_{-1} vektorok valóban a T tükröző operátor $+1$, illetve -1 sajátértékhez tartozó sajátvektorai. A Q_1 és Q_{-1} operátorok tehát valóban a T tükröző operátor sajátaltéréire vetítenek.

Az (A.9) definíciók alapján maga a T tükröző operátor is előállítható a két altér Q_1 és Q_{-1} projektorja segítségével:

$$T = Q_1 - Q_{-1}. \quad (\text{A.13})$$

A fenti konstrukció meg isfordítható. Bontsunk fel egy \mathbb{V} véges dimenziós komplex euklideszi teret két ortokomplementer \mathbb{V}_1 és \mathbb{V}_2 altér direkt összegére, és vezessük be az alterekre vetítő Q_1 és Q_2 projektorokat. Ekkor ezek definíciójuk alapján kielégítik (megfelelő jelölésmódosítással) az (A.9) egyenlőségeket. Az (A.13) egyenlőséggel *definiált* T operátor ekkor kielégíti az (A.6) egyenletet, tehát tükröző operátor lesz.

Egy tükröző operátor tehát egyértelműen definiál egy kételemű teljes ortogonális projektor-rendszert, és fordítva, egy kételemű teljes ortogonális projektor-rendszer meghatározza a megfelelő tükröző operátort. Az utóbbi lépés azonban nem egyértelmű, hiszen a két projektor (A.13) különbségének ellentettje, azaz a $(-T)$ operátor is – az eredetivel egyenrangú – tükröző operátor lesz.

Ezzel analóg konstrukciók végtelen dimenziós terekben is megadhatók, és a kvantumelméletben gyakran használják a fenti egyenlőségeket kielégítő tükröző és projekciós operátorokat, pl. a Dirac-egyenlet Hilbert-terének pozitív és negatív energiájú alterekre történő felbontásával kapcsolatban.

Térjünk vissza a véges dimenziós terekre, és vizsgáljuk meg a T operátor analitikus függvényeit! Alkalmazzuk a mátrixfüggvények (A.5) alaptételét egy T involutórikus operátorra, és tegyük fel, hogy a kiszámítandó $f(z)$ függvény konvergenciasugara nagyobb 1-nél! Ekkor az (A.5) képlet alapján a mátrixfüggvény a Q_1 és Q_{-1} projektorok lineáris kombinációja lesz:

$$f(T) = f(1)Q_1 + f(-1)Q_{-1} . \quad (\text{A.14})$$

Helyettesítsük be a projektorok (A.9) definícióit, így megkapjuk az általános $f(T)$ mátrixfüggvény kifejezését a T involutórikus operátorral:

$$f(T) = f(1)\frac{I+T}{2} + f(-1)\frac{I-T}{2} = \frac{f(1)+f(-1)}{2}I + \frac{f(1)-f(-1)}{2}T . \quad (\text{A.15})$$

Figyelemre méltó, hogy a T involutórikus operátor *tetszőleges* f függvénye T -nek *lineáris* kifejezéseként adható meg. Ez ugyanakkor nem meglepő, hiszen az involúciókat defináló (A.6) képlet értelmében T -nek minden elsőnél magasabb fokú polinomjában T^{2n+1} a T operátorral, T^{2n} pedig az I egységoperátorral helyettesíthető, ezért T magasabb hatványai nem lépnek fel a kifejezésben.

Alkalmazzuk most az (A.15) alatti eredményünket egy, a kvantumelméletben gyakran előforduló operátorfüggvény, a paraméteres exponenciális függvény kiszámítására! Azaz legyen

$$f(z) = e^{i\varphi z} . \quad (\text{A.16})$$

Ekkor

$$f(T) = e^{i\varphi T} = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}I + \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2}T = \cos\varphi I + i\sin\varphi T . \quad (\text{A.17})$$

Ez az eredmény természetesen közvetlenül, az általános mátrixfüggvény-tételre hivatkozás nélkül is megkapható, ha az (A.16) exponenciális függvény hatványsorába közvetlenül behelyettesítjük a T tükröző operátort, felhasználjuk az (A.6) összefüggést, majd összegyűjtjük I és T együttható-hatványsorát, és felismerjük bennük a \cos és \sin függvények definiáló sorát.

Tegyük fel most, hogy nem egyetlen T involutórikus operátorunk van, hanem ilyen operátoroknak egy – egy vagy több komponensű – folytonos p paramétertől függő halmaza! (Feltételezzük, hogy ez a függés folytonos, sőt differenciálható.) Ekkor az (A.6) definíció alapján összefüggéseket vezethetünk le a $T(p)$ operátorok és a p paraméter szerinti $T'(p)$ deriváltjuk között. Írjuk fel először az (A.6) egyenlőséget, majd differenciáljuk le a p paraméter szerint! Vegyük figyelembe, hogy az operátor és deriváltja általában nem kommutál egymással:

$$T(p)^2 = I , \quad T'(p)T(p) + T(p)T'(p) = 0 , \quad (\text{A.18})$$

azaz

$$T'(p)T(p) = -T(p)T'(p) . \quad (\text{A.19})$$

Ezt az egyenlőséget jobbról vagy balról megszorozva $T(p)$ -vel kapjuk az összefüggés gyakran használt változatát:

$$T(p)T'(p)T(p) = -T'(p) . \quad (\text{A.20})$$

A.3. Gyengén involutórikus operátorok és függvényeik

Most az előzőekben vizsgált involutórikus operátorok osztályának egy – az alkalmazásokban gyakran előforduló – általánosításával, az ún. *gyengén involutórikus operátorokkal*, algebrai tulajdonságaikkal és függvényeikkel foglalkozunk.

Egy \mathbb{V} véges dimenziójú, komplex, hermitikus skalárszorzattal ellátott lineáris téren ható egyszerű strukturájú M operátort (illetve az őt reprezentáló mátrixot) *gyengén involutórikus operátornak* (mátrixnak), rövidebben *gyenge involúciónak* nevezünk, ha kielégíti a következő egyenletet:

$$M^3 = M . \quad (\text{A.21})$$

Szorozzuk meg a fenti képletet M -mel, következésképpen:

$$M^4 = M^2 . \quad (\text{A.22})$$

A következő szorzás viszont visszavezet M -hez:

$$M^5 = M^3 = M . \quad (\text{A.23})$$

A gyengén involutórikus operátorokat definiáló (A.21) összefüggésből tehát közvetlenül következik, hogy az M operátor minden páratlan hatványa megegyezik M -mel, a páros hatványok pedig (ezúttal *nem* beleértve a definíció szerint az egységoperátorral azonosított nulladik hatványt is) M^2 -tel:

$$M^0 = I , \quad M^{2n-1} = M , \quad M^{2n} = M^2 , \quad \text{ahol } n \in \{1, 2, 3, \dots\} . \quad (\text{A.24})$$

Ha az M operátornak van inverze, akkor azzal megszorozva az (A.21) egyenletet az (A.6) összefüggést kapjuk az M mátrixra. Látjuk tehát, hogy a tükröző operátorok a gyengén involutórikus operátorok halmazának valódi részhalmazát alkotják.

A gyengén involutórikus operátorok sajátértékeinek ki kell elégíteniük az operátorokat definiáló (A.21) egyenlet skalár megfelelőjét, azaz a

$$\lambda^3 = \lambda \quad (\text{A.25})$$

egyenletet. Ennek gyökei 0, 1 és -1 . Ezek a számok szerepelhetnek csak a minimálegyenlet gyökei között (mindegyik legfeljebb egyszer, hiszen feltettük, hogy egyszerű strukturájú operátorról van szó). A következő esetek fordulhatnak elő:

- csak egyetlen gyök szerepel: ekkor az M operátor vagy a nulloperátor, vagy az egységoperátor, vagy ennek ellentettje – ezek meglehetősen érdektelen esetek, de beleférnek definíciónkba;
- csak két sajátérték fordul elő:
 - ha ezek 1 és -1 , akkor az előbbiekben részletesen tárgyalt tükröző operátorról van szó;
 - ha a két sajátérték 1 és 0, akkor projektossal találkozunk, amely kielégíti az $M^2 = M$ egyenletet is, ennek triviális következménye az (A.21) összefüggés;
 - ha a két sajátérték -1 és 0, akkor az M operátor ún. antiprojektor, amely az $M^2 = -M$ egyenletet elégíti ki, ebből M -mel való beszorzással ugyancsak következik az (A.21) összefüggés;

- mindhárom sajátérték szerepel a minimálegyenlet gyökei között: ekkor az (A.21) definiáló összefüggés maga a minimálegyenlet. Ezt az esetet nevezik *valódi gyengén involutórikus operátornak* – a továbbiakban csak ezzel az esettel foglalkozunk.

Az utóbbi esetben, valódi gyengén involutórikus operátorok esetén a \mathbb{V} tér felbomlik három, kölcsönösen ortogonális altér direkt összegére, amelyek a 0, az 1, illetve a -1 sajátértékhez tartozó sajátaltérek. Mindhárom altér legalább 1, legfeljebb $N-2$ dimenziós, ahol N a \mathbb{V} tér dimenziója. Keressük meg a három altérre vetítő Q_0 , Q_1 és Q_{-1} projektorokat! Definiáljuk az M operátor négyzetét, és jelöljük P -vel:

$$P = M^2 . \quad (\text{A.26})$$

Ezzel a jelöléssel az (A.21) alapegyenlet a következő formába írható:

$$P M = M P = M . \quad (\text{A.27})$$

Az (A.22) egyenlet e jelöléssel így írható:

$$P^2 = P , \quad (\text{A.28})$$

a P operátor tehát kielégíti a projektorok alapegyenletét. Vajon tényleg valódi projektor?

A bevezetett P operátor sajátértékei az M operátor sajátértékeinek négyzeteivel egyeznek meg, azaz értékük 0 és 1. Mindkét sajátértékhez legalább 1 dimenziós sajátaltér tartozik. P tehát projektor-operátor, amely az M operátor $+1$ és -1 sajátértékeihez tartozó altérek direkt összegére vetít. Jelöljük ezt a teret \mathbb{V}_0 -al. Ez a tér az eredeti \mathbb{V} térnek valódi altére. Ha vizsgálatainkat a \mathbb{V}_0 altérre korlátozzuk, észrevehetjük, hogy e téren P játssza az egységoperátor szerepét:

$$\mathbb{I}_{\mathbb{V}_0} = P , \quad (\text{A.29})$$

az M és P operátorok viszonya az altéren pedig éppen olyan, mint az előző szakaszban vizsgált T és I operátoroké volt a teljes téren. Ezért e két operátor segítségével azonnal előállíthatjuk a Q_1 és Q_{-1} projektorokat:

$$Q_1 = \frac{P + M}{2} , \quad Q_{-1} = \frac{P - M}{2} . \quad (\text{A.30})$$

A harmadik projektor, mely a 0 sajátértékhez tartozó altérre vetít, egyszerűen a P projektor kiegészítője lesz:

$$Q_0 = I - P . \quad (\text{A.31})$$

Az (A.30) és az (A.31) képletekkel definiált három operátor összege azonnal láthatóan az egységoperátor, az pedig, hogy mindegyikük négyzete önmaga, egymással vett szorzatuk viszont a nulloperátor, az (A.21), az (A.27) és az (A.22) egyenlőségek alapján látható be. A három Q_a operátor tehát kielégíti az (A.4) Neumann-féle ortogonalitási és teljességi relációkat, azaz teljes ortonormált projektor-rendszert alkot.

Egyetlen (valódi) gyengén involutórikus operátor tehát definiálja az alaptér három ortogonális altérre bontását, egyben egyszerű képleteket szolgáltat a megfelelő altérekre vetítő projektorokra is. Vajon megfordítható ez a konstrukció?

Tekintsük a \mathbb{V} lineáris tér tetszőleges felbontását három, kölcsönösen ortogonális \mathbb{V}_1 , \mathbb{V}_2 és \mathbb{V}_3 altér direkt összegére, és jelöljük a megfelelő projektorokat Q_1 -gyel, Q_2 -vel és Q_3 -mal. Ezek természetesen kielégítik az (A.4) Neumann-féle ortogonalitási és teljességi relációkat.

Definiáljuk most az M operátort a következőképpen:

$$M = Q_1 - Q_2 . \quad (\text{A.32})$$

Ennek négyzete az ortogonalitási összefüggések alapján könnyen megkapható:

$$P = M^2 = Q_1 + Q_2 = I - Q_3 . \quad (\text{A.33})$$

Még egyszer szorozva M -mel:

$$P M = M^3 = Q_1^2 - Q_2^2 = Q_1 - Q_2 = M . \quad (\text{A.34})$$

Az (A.32) képlettel definiált mátrix tehát kielégíti az (A.21) összefüggést, ezért gyengén involutórikus operátor. Az így kapott konstrukció megegyezik az előzőekben a M operátorból kiindulva felépített rendszerrel. Az alterekből és a projektorokból kiindulva viszont több, pontosabban hat különböző lehetőségünk van az M gyengén involutórikus operátor előállítására: Q_1 és Q_2 helyett másik projektor-párt is tekinthetünk volna, és a (A.32) képlet helyett annak (-1) -szeresével is definiálhattuk volna az M operátort.

Egy M gyengén involutórikus operátor tehát meghatározza az altereket és a projektorokat, a tér három ortogonális alterre bontása viszont nem egy, hanem hat gyengén involutórikus operátor definiálását teszi lehetővé.

Vizsgáljuk meg ezután a (valódi) gyengén involutórikus operátorok analitikus függvényeit! Ismét tegyük fel, hogy a (A.1) hatványsor konvergenciasugara nagyobb 1-nél, tehát tartalmazza az M operátor mindhárom sajátértékét. Ekkor az általános (A.5) formula alapján felírhatjuk M tetszőleges függvényét:

$$f(M) = f(0) Q_0 + f(1) Q_1 + f(-1) Q_{-1} . \quad (\text{A.35})$$

Felhasználva a projektorok (A.30) és (A.31) definícióit, az eredményt kifejezhetjük az M , P és I operátorokkal, valamint az $f(z)$ függvénynek (feltevésünk szerint létező) $f(0)$, $f(1)$ és $f(-1)$ értékeivel:

$$\begin{aligned} f(M) &= f(0) (I - P) + f(1) \frac{P + M}{2} + f(-1) \frac{P - M}{2} = \\ &= f(0) I + \left(\frac{f(1) + f(-1)}{2} - f(0) \right) P + \frac{f(1) - f(-1)}{2} M . \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Figyelemre méltó, hogy az M gyengén involutórikus operátor *tetszőleges* f függvénye M -nek *kvadratikus* kifejezéseként adható meg. Ez ugyanakkor nem meglepő, hiszen a gyenge involúciókat defináló (A.21) képlet értelmében M -nek minden másodiknál magasabb fokú polinomjában M^{2n+1} az M , M^{2n} pedig az $M^2 = P$ operátorral helyettesíthető, ezért M magasabb hatványai nem lépnek fel a kifejezésben.

Alkalmazzuk most az (A.36) alatti eredményünket egy, a kvantumelméletben gyakran előforduló operátorfüggvény, a paraméteres exponenciális függvény kiszámítására! Azaz legyen ismét

$$f(z) = e^{i\varphi z} . \quad (\text{A.37})$$

Ekkor

$$\begin{aligned} f(M) &= e^{i\varphi M} = e^0 I + \left(\frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} - e^0 \right) P + \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2} M = \\ &= I + (\cos \varphi - 1) P + i \sin \varphi M . \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Ez az eredmény természetesen közvetlenül, az általános mátrixfüggvény-tételre hivatkozás nélkül is megkapható, ha az (A.16) exponenciális függvény hatványsorába közvetlenül behelyettesítjük a M gyengén involutórikus operátort, felhasználjuk az (A.21) összefüggést, majd összegyűjtjük I , M és P együttható-hatványsorát, végül felismerjük bennük az 1, a $(\cos \varphi - 1)$ és $\sin \varphi$ függvények definiáló sorát. Az általános (A.5) szabály ezt a hosszadalmas algoritmust rövidíti néhány lépésre.

Tegyük fel most, hogy nem egyetlen M gyengén involutórikus operátorunk van, hanem ilyen operátoroknak egy – egy vagy több komponensű – folytonos p paramétertől függő halmaza! (Feltételezzük, hogy ez a függés folytonos, sőt differenciálható.) Ekkor a (A.21) definíció alapján összefüggéseket vezethetünk le az $M(p)$ operátorok és p paraméter szerinti $M'(p)$ deriváltjuk között. Írjuk fel először a (A.21) egyenlőséget, majd differenciáljuk le a p paraméter szerint! Vegyük figyelembe, hogy az operátor és deriváltja általában nem kommutál egymással:

$$M(p) = M(p)^3 , \quad (\text{A.39})$$

$$M'(p) = M'(p) M(p)^2 + M(p) M'(p) M(p) + M(p)^2 M'(p) . \quad (\text{A.40})$$

Szorozzuk meg az egyenletet jobbról $M(p)$ -vel:

$$M'(p) M(p) = M'(p) M(p)^3 + M(p) M'(p) M(p)^2 + M(p)^2 M'(p) M(p) . \quad (\text{A.41})$$

Az (A.21) összefüggésünk alapján a baloldal egyenlő a jobboldal első tagjával. Kapjuk tehát:

$$M(p) M'(p) M(p)^2 = - M(p)^2 M'(p) M(p) . \quad (\text{A.42})$$

Ha az (A.42) formulát (akár jobbról, akár balról) ismét megszorozzuk $M(p)$ -vel, és ismét kihasználjuk az (A.21) összefüggést, a következő egyenlőséget kapjuk:

$$M(p)^2 M'(p) M(p)^2 = - M(p) M'(p) M(p) . \quad (\text{A.43})$$

A p -függés jelölését elhagyva, és alkalmazva az (A.26) képletben bevezetett P jelölést az M^2 projektorra, az (A.42) és az (A.43) formulák egyszerű, könnyen megjegyezhető és felhasználható alakját kapjuk:

$$M M' P = - P M' M , \quad M M' M = - P M' P . \quad (\text{A.44})$$

Számítsuk ki a fenti összefüggések alapján a $Q_1 Q'_{-1}$ és $Q_{-1} Q'_1$ operátor-kombinációkat:

$$\begin{aligned} Q_1 Q'_{-1} &= \frac{1}{4} (P + M) (P - M)' = \frac{1}{4} (P + M) (M' M + M M' - M') = \\ &= \frac{1}{4} \left[(P + M) (M' M) + (P + M) (M - I) M' \right] . \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

A $(P + M) (M - I)$ szorzat az (A.21) definiáló egyenlet következtében azonosan nulla.

Hasonlóképp nulla a $(P - M)(M + I)$ szorzat is. Ezért – a fenti számolást megismételve a $Q_{-1} Q'_1$ kifejezésre is – kapjuk:

$$Q_1 Q'_{-1} = \frac{P + M}{4} (M' M) = \frac{1}{2} Q_1 (M' M) , \quad (\text{A.46})$$

$$Q_{-1} Q'_1 = \frac{P - M}{4} (M' M) = \frac{1}{2} Q_{-1} (M' M) . \quad (\text{A.47})$$

A.4. Egy alkalmazás: háromdimenziós forgatások

Legyen \mathbf{n} a háromdimenziós geometriai tér egy egységvektora. (Ez a tér valós vektortér, de a számítások során ideiglenesen a valós vektorok komplex együtthatós lineárkombinációit is használjuk – a geometriailag felhasználható végső képletek valójában csak valós mennyiségeket tartalmaznak.) Ha a tér egy tetszőleges \mathbf{w} vektorához hozzárendeljük a

$$\mathbf{w}' = \mathbf{n} \times \mathbf{w} \quad (\text{A.48})$$

vektort (ahol a kereszt a közönséges vektoriális szorzást jelöli), ezzel egy lineáris transzformációt definiáltunk. Jelöljük e transzformációt leíró mátrix $(-i)$ -szeresét M -mel:

$$M \mathbf{w} = -i \mathbf{n} \times \mathbf{w} . \quad (\text{A.49})$$

(Az i -vel való szorzásra azért van szükség, hogy az M mátrix hermitikus legyen. A negatív előjel kényelmi konvenció.)

Az M operátor mátrixa könnyen felírható:

$$M = -i \begin{pmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{pmatrix} , \quad (\text{A.50})$$

de a mátrix konkrét alakjára nem lesz szükségünk. Számítsuk ki az M operátor négyzetét (ezt természetesen közvetlenül, mátrixszorzással is kiszámolhatnánk, de nehezebb lenne észrevenni az eredmény struktúráját):

$$\begin{aligned} M^2 \mathbf{w} &= M ((-i) \mathbf{n} \times \mathbf{w}) = -\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{w}) = \\ &= (\mathbf{nn}) \mathbf{w} - \mathbf{n} (\mathbf{nw}) = (\mathbb{I}_3 - \mathbf{n} \circ \mathbf{n}) \mathbf{w} = P \mathbf{w} , \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

ahol \mathbb{I}_3 a 3×3 -as egységmátrix, a továbbiakban az egyszerűség kedvéért csak I . Az utolsó lépés definiálja a P operátort,

$$P = (I - \mathbf{n} \circ \mathbf{n}) , \quad (\text{A.52})$$

amelyben felismerhetjük az \mathbf{n} egységvektorra merőleges síkra vetítő projektort. Az (A.49) képlettel megadott M mátrix négyzete tehát a P projektor. Számítsuk ki M harmadik hatványát is:

$$M^3 \mathbf{w} = M (\mathbf{w} - (\mathbf{n} \circ \mathbf{n}) \mathbf{w}) = -i \mathbf{n} \times (\mathbf{w} - (\mathbf{n} \circ \mathbf{n}) \mathbf{w}) = -i \mathbf{n} \times \mathbf{w} = M \mathbf{w} . \quad (\text{A.53})$$

Ez minden w vektorra teljesül, az M mátrix köbe ezért egyenlő magával a mátrixszal. Eredményünk szerint az (A.49) képlettel megadott M mátrix kielégíti a (A.21) egyenletet, tehát gyengén involutórikus mátrix. Nem tükröző mátrix, hiszen van nulla sajátértéke (a hozzá

tartozó sajátvektor éppen az \mathbf{n} vektor), a $+1$ és -1 sajátértékekhez tartozó (komplex együtt-ható) sajátvektorok pedig könnyen meghatározhatók. Az M mátrix tehát valódi gyengén involutórikus operátor, érvényesek rá tehát az előző szakaszban leírt összefüggések.

Számítsuk ki most az M mátrixból kiindulva az (A.16) függvényt:

$$f(M) = e^{i\varphi M} = I + (\cos \varphi - 1)P + i \sin \varphi M = (I - P) + \cos \varphi P + i \sin \varphi M. \quad (\text{A.54})$$

Alkalmazzuk ezt az operátort a \mathbf{w} vektorra, majd helyettesítsük be az M és P mátrixok (A.49) és (A.52) alakját:

$$\begin{aligned} f(M) \mathbf{w} &= e^{i\varphi M} \mathbf{w} = (I - P) \mathbf{w} + \cos \varphi P \mathbf{w} + i \sin \varphi M \mathbf{w} = \\ &= (\mathbf{n} \circ \mathbf{n}) \mathbf{w} + \cos \varphi (I - \mathbf{n} \circ \mathbf{n}) \mathbf{w} + \sin \varphi \mathbf{n} \times \mathbf{w} = R(\varphi) \mathbf{w}. \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

Az utolsó képletben felismerhetjük az \mathbf{n} tengely körüli φ szögű elforgatás $R(\varphi)$ mátrixát. Rögzített \mathbf{n} tengely körüli különböző φ szögű forgatások egy $\text{SO}(2)$ csoportot alkotnak: ennek a csoportnak hermitikus generátora az (A.49) képlet által megadott gyengén involutórikus mátrix.

A fenti példában bemutatott számolást alkalmaztuk a 3.7 fejezetben a kvázispin-rendszerekben fellépő ZB tanulmányozására.

B. függelék

A kvázispin-precesszió egyenletének megoldása

Írjuk fel a (kvázi-)spin-precesszió (3.21) egyenletét a következő alakban:

$$\frac{d \mathbf{S}(t)}{dt} = \Omega (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) . \quad (\text{B.1})$$

A (B.1) operátor-differenciálegyenlet-rendszerhez járuló kezdeti feltétel szerint az \mathbf{S} operátor kezdőértéke a Schrödinger-képbeli \mathbf{S}^0 spinoperátor:

$$\mathbf{S}(0) = \mathbf{S}^0 . \quad (\text{B.2})$$

Az \mathbf{n} egységvektor és az \mathbf{S}^0 (állandó) operátor-vektor felhasználásával vezessük be a következő három lineárisan független operátor-vektort:

$$\mathbf{e}^1 = \mathbf{n}(\mathbf{nS}^0) , \quad \mathbf{e}^2 = \mathbf{n} \times \mathbf{S}^0 , \quad \mathbf{e}^3 = (\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0) \times \mathbf{n} = \mathbf{S}^0 - \mathbf{n}(\mathbf{nS}^0) . \quad (\text{B.3})$$

A t időponthoz tartozó $\mathbf{S}(t)$ operátor kifejezhető a három \mathbf{e}^k vektor lineáris kombinációjaként:

$$\mathbf{S}(t) = \alpha(t) \mathbf{e}^1 + \beta(t) \mathbf{e}^2 + \gamma(t) \mathbf{e}^3 . \quad (\text{B.4})$$

Az $\mathbf{S}(t)$ operátor időderiváltja

$$\frac{d \mathbf{S}(t)}{dt} = \dot{\alpha}(t) \mathbf{e}^1 + \dot{\beta}(t) \mathbf{e}^2 + \dot{\gamma}(t) \mathbf{e}^3 . \quad (\text{B.5})$$

A (B.1) egyenlet jobboldalának előállításához szükség van az $\mathbf{n} \times \mathbf{S}$ szorzat kiszámítására. Az \mathbf{n} vektor és az \mathbf{e}^k vektorok vektoriális szorzata:

$$\mathbf{n} \times \mathbf{e}^1 = \mathbf{0} , \quad \mathbf{n} \times \mathbf{e}^2 = -\mathbf{e}^3 , \quad \mathbf{n} \times \mathbf{e}^3 = \mathbf{e}^2 . \quad (\text{B.6})$$

Ezért

$$\mathbf{n} \times \mathbf{S} = -\beta(t) \mathbf{e}^3 + \gamma(t) \mathbf{e}^2 . \quad (\text{B.7})$$

A (B.5) és a (B.7) egyenleteket behelyettesítve a (B.1) differenciálegyenletbe a komponens-együtthatókra kapunk egyenleteket:

$$\dot{\alpha}(t) = 0 , \quad \dot{\beta}(t) = \Omega \gamma(t) , \quad \dot{\gamma}(t) = -\Omega \beta(t) . \quad (\text{B.8})$$

A fenti egyenletekhez járuló kezdőfeltételek a (B.2) egyenletből kaphatók:

$$\alpha(0) = 1, \quad \beta(0) = 0, \quad \gamma(0) = 1. \quad (\text{B.9})$$

A (B.8) egyenleteknek a fenti kezdőfeltételeket kielégítő megoldásai:

$$\alpha(t) = 1, \quad \beta(t) = \sin \Omega t, \quad \gamma(t) = \cos \Omega t. \quad (\text{B.10})$$

E függvényeket visszahelyettesítve a (B.4) felbontásba megkapjuk a (B.1) egyenletnek a (B.2) kezdőfeltételhez tartozó megoldását, azaz a (kvázi-)spin-operátor Heisenberg-képbeli $\mathbf{S}(t)$ alakját:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(t) &= \mathbf{e}^1 + \sin \Omega t \mathbf{e}^2 + \cos \Omega t \mathbf{e}^3 = \\ &= \mathbf{n}(\mathbf{nS}^0) + \sin \Omega t (\mathbf{n} \times \mathbf{S}^0) + \cos \Omega t (\mathbf{S}^0 - \mathbf{n}(\mathbf{nS}^0)). \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Ha ezt a végeredményt összehasonlítjuk az (A.55) kifejezéssel, egyenletünk megoldását exponenciális alakba is írhatjuk:

$$\mathbf{S}(t) = R(\Omega t) \mathbf{S}^0 = e^{i\Omega M t} \mathbf{S}^0, \quad (\text{B.12})$$

ahol M az A. függelék (A.49) képletével értelmezett hermitikus mátrix. Ennek felhasználásával a (B.1) egyenlet is egyszerűbb alakba írható:

$$\frac{d\mathbf{S}(t)}{dt} = \Omega (\mathbf{n} \times \mathbf{S}) = i\Omega M \mathbf{S}. \quad (\text{B.13})$$

Az utóbbi egyenletnek a (B.12) képlet utolsó, exponenciális alakja jól láthatóan megoldása.

C. függelék

A projektorok előállítása Lagrange-mátrixpolinomokkal

A Zitterbewegungot leíró képleteink a Hamilton-mátrix (4.15) projektor-felbontásából indulnak ki, és a helyoperátorra Heisenberg-képbeli időfüggésére vonatkozó fő eredményünk, a (4.21) formula is a sajátalterekre vetítő Q^a projektorokat, illetve azok impulzus szerinti deriváltjait tartalmazza. A projektorok a (4.34) képlet szerint kifejezhetők a Hamilton-operátor sajátvektoraival. A sajátvektorokat nagyobb méretű Hamilton-mátrix esetén általában csak numerikusan tudjuk előállítani. A sajátértékek meghatározása, azaz a karakterisztikus egyenlet gyökeinek megkeresése után ez már nem is tűnik nehéz feladatnak, hiszen csak egy homogén lineáris egyenletrendszer megoldásáról van szó, amire jól működő programcsomagok állnak rendelkezésünkre. Nehézséget jelent azonban, hogy esetünkben nem egy konkrét numerikus mátrix, hanem egy \mathbf{p} paramétervektortól függő mátrixsereg – általában komplex – sajátvektoraival van szükség. E vektorok – még ha meg is követeljük normált voltukat – egy egységnyi komplex fázisfaktor erejéig határozatlanok maradnak. A különböző numerikus megoldóprogramok valamilyen önkényes előírás alapján a fázisfaktort is megadják, azt azonban általában nem tudják garantálni, hogy a \mathbf{p} paraméter különböző értékeihez tartozó sajátvektorok így meghatározott fázisa folytonosan függjön a paramétertől. Ez a – kvantumelméleti numerikus számítások során sokszor előforduló – probléma sok kényelmetlenséget szokott okozni, ha pl. a sajátvektort a paraméter szerint differenciálni kellene (pl. a Berry-konnexió mátrixának (4.43) képletében). Esetünkben ráadásul ez az egész bonyodalom teljesen felesleges, hiszen a Q^a projektor párban tartalmazza a megfelelő bra- és ket-vektorokat, melyek fázisa így kiesik, a projektor már egyértelmű. Ha a sajátvektorra amúgy nincs közvetlenül szükség a számítások más lépéseiben, időt és fáradságot (még persze numerikus hibákat és bonyodalmakat) takaríthatunk meg, ha a sajátvektorok helyett közvetlenül a projektorokat határozzuk meg, minél kevesebb lépésben.

Szerencsére létezik egy igen egyszerű, de nem eléggé közismert eljárás, amely a mátrix és a sajátértékek ismeretében néhány egyszerű művelettel közvetlenül előállítja a projektorokat, függetlenül attól, hogy egyszeres vagy többszörös sajátértékről, egy- vagy többdimenziós sajátaltérről van szó. Az egyetlen feltétel, hogy a mátrix ún. *egyszerű struktúrájú* legyen, azaz sajátvektoraiból bázist lehessen készíteni, másképp fogalmazva: sajátaltereinek lineáris burka az egész tér legyen. Ennek feltétele az, hogy a minimálpolinom – lásd az A. függelékben – gyökei egyszeresek legyenek: ez a feltétel hermitikus és unitér mátrixok esetén mindig teljesül, lásd [67,68].

Az eljárás a Lagrange-féle mátrixpolinomok (ezek a Lagrange-féle interpolációs polinomok mátrixokra történő általánosításai), másnéven a mátrix Frobenius-féle kovariánsainak

meghatározásán alapul.

Legyen H egy $N \times N$ -es hermitikus mátrix, és legyenek a λ_k komplex számok ($1 \leq k \leq M \leq N$) a mátrix egymástól különböző sajátértékei (minden sajátértéket csak egyszer veszünk figyelembe). Definiáljuk a Q^k mátrixokat a következő módon:

$$Q^k = \prod_{l \neq k}^M \frac{H - \lambda_l I}{\lambda_k - \lambda_l}, \quad (\text{C.1})$$

ahol I a megfelelő méretű egységmátrix.

Egyszerűen ellenőrizhető, hogy a λ_k sajátértékhez tartozó sajátaltérbe eső vektorokon, amikor a H mátrix felveszi a λ_k sajátértéket, a Q^k operátor az 1 értéket veszi fel, az összes többi altér vektorain pedig a 0 értéket, hiszen a megfelelő l indexre a számláló egyik tényezője nulla lesz. A Q^k operátor tehát a k -ik sajátaltérre vetítő projektor. Mivel a sajátaltérek kifeszítik az egész teret, a projektorok összege az egységoperátor lesz. Két különböző projektor szorzata pedig nulla, hiszen minden sajátaltérhez van a szorzat számlálójában nulla tényező. E projektorok tehát kielégítik a Neumann-féle ortogonális és teljes projektorrendszer (4.16) ortogonalitási és teljességi kritériumait.

A projektorok ismeretében az eredeti H mátrix a (4.15), a mátrix tetszőleges függvénye (melynek az összes sajátérték a konvergenciakörén belül helyezkedik el) pedig a (4.17) képlet alapján állítható elő.

A fenti definíció könnyen beprogramozható szimbolikus matematikai programokba, és – a sajátértékek meghatározása után – gyorsan előállítja a projektorokat. Mivel a Zitterbewegung tárgyalásán túl is számos olyan képlet szerepel a fizikában, ezen belül a szilárdtest-fizikában, amely a Hamilton-operátor függvényeit tartalmazza (pl. a vezetőképesség és a Hall-effektus leírásához szükséges Kubo-formula különböző változatai), a projektorok gyors és kényelmes előállítása ezeken a helyeken is meggyorsíthatja és leegyszerűsítheti a számításokat.

D. függelék

A gradiens-operátor mátrixelemei

Egyes esetekben bonyolult a projektor-operátorok deriváltjainak alakja, egyszerűbb magának a Hamilton-operátornak a deriváltját kiszámítani. Szerencsére van egy egyszerű képlet, amely lehetővé teszi a \mathbf{Z}^{ab} ZB-amplitudók közvetlen kifejezését a Hamilton-operátor \mathbf{p} szerinti gradiensével. Az átalakítás közismert, ezért csak röviden ismertetjük.

Induljunk ki a Hamilton-operátor (4.15) projektor-felbontásából és a Q^b projektorok (4.16) ortogonalitási relációiból:

$$H(\mathbf{p}) = \sum_c E_c(\mathbf{p}) Q^c(\mathbf{p}), \quad Q^c(\mathbf{p}) Q^b(\mathbf{p}) = \delta_{cb} Q^b(\mathbf{p}).$$

Vegyük e két egyenlőség \mathbf{p} szerinti gradiensét:

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \sum_c \left(\frac{\partial E_c}{\partial \mathbf{p}} Q^c + E_c \frac{\partial Q^c}{\partial \mathbf{p}} \right), \quad \frac{\partial Q^c}{\partial \mathbf{p}} Q^b + Q^c \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} = \delta_{cb} \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}}. \quad (\text{D.1})$$

Szorozzuk meg az első egyenlőséget balról Q^a -val, jobbról Q^b -vel, majd helyettesítsük be a másodikat, végül (többször is) használjuk ki a Q^a és Q^b projektorok (4.16) ortogonalitási tulajdonságát:

$$\begin{aligned} Q^a \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} Q^b &= \sum_c \left(\frac{\partial E_c}{\partial \mathbf{p}} Q^a Q^c Q^b + E_c Q^a \frac{\partial Q^c}{\partial \mathbf{p}} Q^b \right) = \\ &= \frac{\partial E_b}{\partial \mathbf{p}} Q^a Q^b + \sum_c E_c Q^a \left(\delta_{cb} \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} - Q^c \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} \right) = \\ &= \delta_{ab} \frac{\partial E_a}{\partial \mathbf{p}} Q^a + E_b Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} - \sum_c E_c Q^a Q^c \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} = \\ &= \delta_{ab} \frac{\partial E_a}{\partial \mathbf{p}} Q^a + (E_b - E_a) Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Alkalmazzuk eredményünket az ($a \neq b$) esetre, és fejezzük ki a jobboldalról a Zitterbewegung-amplitudókhoz szükséges szorzatot:

$$Q^a \frac{\partial Q^b}{\partial \mathbf{p}} = \frac{Q^a \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} Q^b}{E_b - E_a}. \quad (\text{D.3})$$

Ezt az alakot használhatjuk fel a ZB-együtthatók átalakításához.

Írjuk fel a (D.2) formula diagonális komponensét is – ekkor a második tag esik ki:

$$Q^a \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} Q^a = \frac{\partial E_a}{\partial \mathbf{p}} Q^a . \quad (\text{D.4})$$

A (4.44) formula (ab) -ik mátrixelemét véve hasonló képletet vezethetünk le a Berry-konnexió mátrixelemeinek átalakítására:

$$\mathbf{A}_{ab}(\mathbf{p}) = i\hbar \langle u^a | \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} | u^b \rangle = i\hbar \frac{\langle u^a | \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} | u^b \rangle}{E_b - E_a} , \quad (a \neq b) . \quad (\text{D.5})$$

Ezt az átalakítást gyakran használják a Berry- vagy geometriai fázis tárgyalása során.

Az összefüggés diagonális párja a következő:

$$\langle u^a | \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} | u^a \rangle = \frac{\partial E_a}{\partial \mathbf{p}} . \quad (\text{D.6})$$

A dolgozathoz kapcsolódó saját publikációk

- [A] József Cserti and Gyula Dávid, 'Unified Description of the *Zitterbewegung* for Spintronic, Graphene, and Superconducting Systems', Phys. Rev. B **74**, 172305 (2006). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, November 27, 2006 issue.)
- [B] Gyula Dávid and József Cserti, 'General Theory of the *Zitterbewegung*', Phys. Rev. B **81**, 121417(R) (2010).
- [B1] Az előző cikk részletesebb verziója: arXiv:0909.2004v3 (2009).
- [C] József Cserti and Gyula Dávid, 'Relation between *Zitterbewegung* and the charge conductivity, Berry curvature and the Chern number of multi band systems', Phys. Rev. B **82**, 201405(R) (2010).
- [D] József Cserti, András Csordás, and Gyula Dávid 'Role of the trigonal warping on the minimal conductivity of bilayer graphene', Phys. Rev. Lett. **99**, 066802 (2007). (Selected for *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, August 20, 2007 issue.)

Irodalomjegyzék

- [1] E. Schrödinger, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. Kl. **3**, 1 (1931).
- [2] K. Huang, Am. J. Phys. **20**, 479 (1952).
- [3] A. O. Barut and A. J. Bracken, Phys. Rev. D **23**, 2454 (1981).
- [4] A. O. Barut and N Zanghi, Phys. Rev. Lett **52**, 2009 (1984).
- [5] A. O. Barut and W. Thacker, Phys. Rev. D **31**, 1386 (1985).
- [6] A. O. Barut and A. J. Bracken, Aust. J. Phys. **35**, 353 (1982).
- [7] E. N. Adams and E. I. Blount, J. Phys. Chem. Solids **10**, 286 (1959).
- [8] G. Sundaram and Q. Niu, Phys. Rev. B **59**, 14915 (1999).
- [9] M. R. Douglas and N. A. Nekrasov, Rev. Mod. Phys. **73**, 977 (2001).
- [10] D. Culcer, A. MacDonald, and Q. Niu, Phys. Rev. B **68**, 045327 (2003).
- [11] N. Nagaosa, J. Phys. Soc. Jap. **75**, 042001 (2006).
- [12] J. A. Lock, Am. J. Phys. **52**, 223 (1984).
- [13] J. A. Lock, Am. J. Phys. **47**, 797 (1979).
- [14] T. D. Newton, and E. P. Wigner, Rev. Mod. Phys. **21**, 400 (1949).
- [15] L. L. Foldy, and S. A. Wouthuysen, Phys. Rev. **78**, 29 (1950).
- [16] H. Feshbach and F. Villars, Rev. Mod. Phys. **30**, 24 (1958).
- [17] M. G. Fuda and E. Furiani, Am. J. Phys. **50**, 545 (1982).
- [18] G. Salesi, Int. J. Mod. Phys. **A20**, 2027 (2005).
- [19] P. Brovotto, V. Maxia, M. Salis, arXiv:quant-ph/0512047
- [20] D. W. Sciama, Month. Not. Roy. Astr. Soc. **113**, 34 (1953).
- [21] R. J. Cook, Nuov. Cim. **35B**, 25 (1976).
- [22] P. Krekora, Q. Su, and R. Grobe, Phys. Rev. Lett. **93**, 043004 (2004).
- [23] F. Constantinescu – E. Magyari, *Kvantummechanika feladatok* (Tankönyvkiadó, Budapest, 1972), p. 376.

- [24] W. E. Baylis, R. Cabrera, D. Keselica, arXiv:0710.3144 (2007)
- [25] J. Schliemann, D. Loss, and R. M. Westervelt, Phys. Rev. Lett. **94**, 206801 (2005).
- [26] F. Cannata, L. Ferrari, and G. Russo, Solid State Commun. **74**, 309 (1990).
- [27] F. Cannata and G. Russo, Phys. Rev. B **42**, 7554 (1990).
- [28] F. Cannata and L. Ferrari, Phys. Rev. B **44**, 8599 (1991).
- [29] D. Lurié and S. Cremer, Physica **50**, 224 (1970).
- [30] J. Schliemann, D. Loss, and R. M. Westervelt, Phys. Rev. B **73**, 085323 (2006).
- [31] P. Brusheim and H. Q. Xu, Phys. Rev. B **74**, 205307 (2006).
- [32] W. Zawadzki, Phys. Rev. B **72**, 085217 (2005).
- [33] T. M. Rusin and W. Zawadzki, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 136219 (2007).
- [34] E. Bernardes, J. Schliemann, M. Lee, J. C. Egues, D. Loss, Phys. Rev. Lett. **99**, 076603 (2007).
- [35] V. Y. Demikhovskii, G. M. Maksimova, and E. V. Frolova, Phys. Rev. B **78**, 115401 (2008).
- [36] Z. F. Jiang, R. D. Li, S.-C. Zhang, and W. M. Liu, Phys. Rev. B **72**, 045201 (2005).
- [37] U. Zülicke, J. Bolte and R. Winkler, New J. Phys. **9**, 355 (2007).
- [38] W. Zawadzki, Phys. Rev. B **74**, 205439 (2006).
- [39] M. I. Katsnelson, Eur. Phys. J. B **51**, 157 (2006).
- [40] G. Mahan, *Many-Particle Physics*, 3rd ed. (Kluwer, New York, 2000).
- [41] T. M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **76**, 195439 (2007).
- [42] Széchenyi Gábor, *A mindenütt jelenvaló Zitterbewegung*, TDK-dolgozat, ELTE TTK, (2009)
- [43] R. Winkler, U. Zülicke, and J. Bolte, Phys. Rev. B **75**, 205314 (2007).
- [44] R. Gerritsma *et al*, Nature, **463**, 08688 (2010).
- [45] X. Zhang, Phys. Rev. Lett. **100**, 113903 (2008).
- [46] J. Y. Vaishnav and C. W. Clark, Phys. Rev. Lett. **100**, 153002 (2008).
- [47] M. Merkl, F. E. Zimmer, G. Juzeliūnas, and P. Öhberg, EPL **83**, 54002 (2008).
- [48] L. Lamata, J. León, T. Schätz, and E. Solano, Phys. Rev. Lett. **98**, 253005 (2007).
- [49] Z.-Y. Wang and C.-D. Xiong, Phys. Rev. A **77**, 045402 (2008).
- [50] A. Bermudez, M. A. Martin-Delgado, and E. Solano, Phys. Rev. A **76**, 041801(R) (2007).

- [51] T. M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **80**, 045416 (2009).
- [52] B. Trauzettel, Ya. M. Blanter, A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B **75**, 035305 (2007).
- [53] S.-Q. Shen, Phys. Rev. Lett. **95**, 187203 (2005).
- [54] K. Y. Bliokh and Y. P. Bliokh, Phys. Rev. B **75**, 205314 (2007).
- [55] B. Zhou, L. Ren, and S.-Q. Shen, Phys. Rev. B **73**, 165303 (2006).
- [56] B. K. Nikolić, L. P. Zârbo, and S. Welack, Phys. Rev. B **72**, 075335 (2005).
- [57] X.-L. Qi, Y.-S. Wu, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **74**, 085308 (2006).
- [58] P.-Q. Jin, Y.-Q. Li and F.-C. Zhang, J. Phys. A: Math. Gen. **39**, 7115 (2006).
- [59] S. G. Tan, M. B. A. Jalil, X.-J. Liu, and T. Fujita, Phys. Rev. B **78**, 245321 (2008).
- [60] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **69**, 235206 (2004).
- [61] K. Y. Bliokh, D. Y. Frolov and Y. A. Kravtsov, Phys. Rev. A **75**, 053821 (2007).
- [62] M. Onoda, S. Murakami and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **93**, 083901 (2004).
- [63] M. Onoda, S. Murakami and N. Nagaosa, Phys. Rev. E **74**, 066610 (2006).
- [64] K. Sawada and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett **95**, 237402 (2005).
- [65] C. Qiu, Z. Liu, J. Mei and M. Ke, Sol. State. Comm **134**, 765 (2005).
- [66] P. Kurzynski, arXiv quant-ph/0606171 (2006).
- [67] Rózsa Pál, *Lineáris algebra és alkalmazásai*, (Tankönyvkiadó, Budapest, 1991).
- [68] Rózsa Pál, *Bevezetés a mátrixelméletbe*, (Typotex, Budapest, 2009).
- [69] R. Karplus and J. M. Luttinger, Phys. Rev. Lett. **95**, 1154 (1954).
- [70] Y. D. Chong, Phys. Rev. B. **81**, 052303 (2010).
- [71] M. V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A **392**, 45 (1984).
- [72] R. Englman and T. Vértesi, Phys. Rev. B **78**, 205311 (2008).
- [73] *Mesoscopic Quantum Physics, Les Houches Summer School*, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J. L. Pichard, and J. Zinn-Justin (Elsevier Science B. V., Amsterdam, The Netherlands, 1995).
- [74] *Transport Phenomena in Mesoscopic Systems*, edited by H. Fukuyama and T. Ando (Springer-Verlag, Berlin, 1992).
- [75] C. W. J. Beenakker and H. van Houten in *Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures*, Solid State Physics, Vol. **44**, pp. 1-228, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull, (Academic Press, Inc., Boston, 1991).

- [76] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova and D. M. Treger, *Science* **294**, 1488 (2001).
- [77] *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, edited by D. D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth (Springer, Berlin, 2002).
- [78] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [79] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer, Berlin, 2003).
- [80] S. Murakami, *Adv. in Solid State Phys.* **45**, 197 (2005)
- [81] J. Sinova, S. Murakami, S.-Q. Shen, and M.-S. Choi, *Solid State Comm.* **138**, 214 (2006) (see also in cond-mat/0512054).
- [82] J. Schliemann, *Int. J. Mod. Phys. B* **20**, 1015 (2006)
- [83] H.-A. Engel, E. I. Rashba, and B. I. Halperin, cond-mat/0603306.
- [84] R. S. Calsaverini, E. Bernardes, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **78**, 155313 (2008).
- [85] J. Schliemann, *Phys. Rev. B* **75**, 045304 (2007).
- [86] J. Schliemann, *Phys. Rev. B* **77**, 125303 (2008).
- [87] M. Lee and C. Bruder, *Phys. Rev. B* **72**, 045353 (2005).
- [88] R. Winkler, *Phys. Rev. B* **62**, 4245 (2000).
- [89] M. G. Pala, M. Governale, J. König, and U. Zülicke, *Europhys. Lett.* **65**, 850 (2004).
- [90] M. G. Pala, M. Governale, J. König, U. Zülicke, and G. Iannaccone, *Phys. Rev. B* **69**, 045304 (2004).
- [91] J. Schliemann, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **71**, 085308 (2005).
- [92] M. Zarea, and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **73**, 165306 (2006).
- [93] J. W. McClure, *Phys. Rev.* **104**, 666 (1956).
- [94] A. W. W. Ludwig, M. P. A. Fisher, R. Shankar, and G. Grinstein, *Rev. B* **50**, 7526 (1994).
- [95] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1984).
- [96] Y. Zheng, and T. Ando, *Phys. Rev. B* **65**, 245420 (2002).
- [97] H. Suzuura, and T. Ando, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 266603 (2002).
- [98] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146801 (2005).
- [99] N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006).
- [100] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **29**, 1685 (1984).

- [101] M. Koshino and T. Ando, Phys. Rev. B **73**, 245403 (2006).
- [102] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).
- [103] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, Nature **438**, 197 (2005).
- [104] Y. Zhang, J. P. Small, M. E. S. Amori, and P. Kim, Phys. Rev. Lett. **94**, 176803 (2005).
- [105] Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, Nature **438**, 201 (2005).
- [106] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, Nature **438**, 201 (2005).
- [107] K. S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morozov, V. I. Fal'ko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, A. K. Geim, Nature Physics **2**, 177 (2006).
- [108] E. McCann and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805 (2006).
- [109] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Benjamin, New York, 1996).
- [110] J. B. Ketterson and S. N. Song, *Superconductivity* (Cambridge University Press, United Kingdom, 1999).
- [111] J. Tworzydło, B. Trauzettel, M. Titov, A. Rycerz, C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **96**, 246802 (2006)
- [112] G. M. Maksimova, V. Y. Demikhovskii, and E. V. Frolova, Phys. Rev. B **78**, 235321 (2008).
- [113] Cserti J., *Kétdimenziós kvantumrendszerek nanoszerkezetekben*, (MTA doktori értekezés, Budapest, 2009)
- [114] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [115] J. Schliemann, magánlevél Cserti Józsefnek, (2008)