

AUTOREFERAT

MICHAŁ INGLOT

*Wydział Matematyki i Fizyki Stosowanej
Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza
Al. Powstańców Warszawy 12, 35-959 Rzeszów, Polska*



**POLITECHNIKA
RZESZOWSKA**
im. IGNACEGO ŁUKASIEWICZA

Rzeszów, 2025

Spis treści

1	Informacje ogólne	3
1.1	Posiadane dyplomy, stopnie naukowe	3
1.2	Informacje o zatrudnieniu i stażach naukowych	3
2	Wskazanie osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego	4
3	Omówienie celu naukowego prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania	5
3.1	Cel naukowy pracy	5
3.2	Metody badawcze	5
3.3	Szczegółowe omówienie prac	10
3.4	Podsumowanie autoreferatu	52
4	Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych	54
5	Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej	54
6	Osiągnięcia dydaktyczne, organizacyjne oraz popularyzujące naukę	54
6.1	Dydaktyka - prowadzone zajęcia dydaktyczne	54
6.2	Projekty dydaktyczne	55
6.3	Działalność organizacyjna	55
6.4	Działalność popularyzująca naukę	55
6.5	Nagrody i wyróżnienia	55
7	Działalność związana z karierą naukową	56
7.1	Projekty B+R	56
7.2	Szkolenia i certyfikaty	56

1 Informacje ogólne

Imię i Nazwisko	Michał Inglot
Orcid	0000-0001-6468-4593
Web of Science ResearcherID	O-1987-2019
Web page	www.spintronics.prz.edu.pl

1.1 Posiadane dyplomy, stopnie naukowe

Doktor Nauk Fizycznych 2012	Uniwersytet Rzeszowski Wydział Matematyczno-Przyrodniczy
Tytuł Rozprawy	<i>Magnetyzacja indukowana domieszkami i generacja prądu spinowego w grafenie</i>
Promotor	Prof. dr hab. inż. Vitalii Dugaev
Magister Fizyki 2007	Uniwersytet Rzeszowski Wydział Matematyczno-Przyrodniczy
Tytuł Pracy	<i>Elektron w polu magnetycznym</i>
Promotor	Prof. dr hab. Marian Kuźma
Inżynier Elektryk 2006	Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza Wydział Elektrotechniki i Informatyki
Tytuł Pracy	<i>Konstrukcja par nadprzewodzących w dwuwymiarowym gazie elektronowym dla modelu elektronu wędrującego</i>
Promotor	Prof. dr hab. Tadeusz Lulek
Licencjat 2005	Uniwersytet Rzeszowski Wydział Matematyczno-Przyrodniczy
Tytuł Pracy	<i>Czarna dziura Schwarzschilda</i>
Promotor	dr hab. Wiesław Rudnicki

1.2 Informacje o zatrudnieniu i stażach naukowych

1.2.1 Zatrudnienie

2019 - obecnie, Profesor PRz	Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza Wydział Matematyki i Fizyki Stosowanej Katedra Fizyki i Inżynierii Medycznej
2016 - 2019 Adiunkt	Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza Wydział Matematyki i Fizyki Stosowanej Katedra Fizyki i Inżynierii Medycznej
2015 - 2017 Kierownik	Fotowoltaiczne Centrum Badawczo-Rozwojowe ML System S.A.
2012 - 2015 Adiunkt	Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza Wydział Matematyki i Fizyki Stosowanej Katedra Fizyki i Inżynierii Medycznej

2 Wskazanie osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego

Jako osiągnięcie naukowe w myśl ustawy art. 219 ust. 1 pkt 2b ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, przedstawiam cykl 8 publikacji na temat:

Własności optyczne i transportowe wybranych struktur grafenowych.

	Publikacja	IF	Liczba cyto- wań
[H1]	M. Inglot , V.K. Dugaev, E.Ya. Sherman, J. Barnaś, <i>Optical spin injection in graphene with Rashba spin-orbit interaction</i> , Phys. Rev. B 89 , 155411 (2014)	3.736	25
[H2]	M. Inglot , A. Dyrdał, V.K. Dugaev, J. Barnaś, <i>Thermoelectric effect enhanced by resonant states in graphene</i> , Phys. Rev. B 91 , 115410 (2015)	3.718	15
[H3]	M. Inglot , V.K. Dugaev, E.Ya. Sherman, J. Barnaś, <i>Enhanced photogalvanic effect in graphene due to Rashba spin-orbit coupling</i> , Phys. Rev. B 91 , 195428 (2015)	3.718	23
[H4]	M. Inglot , V.K. Dugaev, J. Barnaś, <i>Thermoelectric and thermospin transport in a ballistic junction of graphene</i> , Phys. Rev. B 92 , 085418 (2015)	3.718	17
[H5]	M. Inglot , V.K. Dugaev, J. Berakdar, E.Ya. Sherman, J. Barnaś, <i>Charge and spin currents in graphene generated by tailored light with orbital angular momentum</i> , Appl. Phys. Lett 112 , 231102 (2018)	3.597	7
[H6]	M. Inglot , V.K. Dugaev, J. Berakdar, J. Barnaś, <i>Light absorption and pseudospin density generation in graphene nanoribbons</i> , Phys. Rev. B 100 , 165406 (2019)	3.575	2
[H7]	M. Inglot , V.K. Dugaev, A. Dyrdał, J. Barnaś, <i>Graphene with Rashba spin-orbit interaction and coupling to a magnetic layer: Electron states localized at the domain wall</i> , Phys. Rev. B 104 , 214408 (2021)	3.720	6
[H8]	M. Inglot , J. Barnaś, V.K. Dugaev, A. Dyrdał, <i>Localized states at the Rashba spin-orbit domain wall in a magnetized graphene: interplay of the Rashba and magnetic domain walls</i> , Phys. Rev. B 109 , 134435 (2024)	3.2	1

3 Omówienie celu naukowego prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania

3.1 Cel naukowy pracy

Celem naukowym przedstawionego cyklu publikacji jest teoretyczna analiza struktur grafenowych w obecności zewnętrznych pól skalarnych i wektorowych. Badania te mają na celu lepsze zrozumienie fundamentalnych zjawisk fizycznych istotnych dla potencjalnych zastosowań w elektronice klasycznej i spinowej. Szczególną uwagę poświęciłem zjawiskom termoelektrycznym, optoelektrycznym oraz topologicznym, które mogą stanowić podstawę do projektowania nowoczesnych urządzeń wykorzystujących kontrolowane właściwości elektronowe i spinowe. [1, 2]

Motywacją do podjęcia tych badań jest wyjątkowy potencjał grafenu jako materiału o unikalnych właściwościach kwantowych. Jego heksagonalna sieć oraz struktura pasmowa opisująca relatywistyczne elektrony czynią go doskonałą platformą do badania transportu elektronowego, efektów spinowych oraz ich interakcji z polami zewnętrznymi. Współczesne osiągnięcia w zakresie manipulacji spinem elektronów w układach kwantowych nie tylko otwierają nowe możliwości teoretyczne, ale również znajdują potwierdzenie w rzeczywistych układach nanoskopowych. [3–7]

Grafen, jako odmiana alotropowa węgla o strukturze plastra miodu, cechuje się szczególnymi właściwościami elektronowymi, które można opisać modelem ciasnego wiązania (TB). W swoich badaniach skupiłem się na analizie niskoenergetycznej struktury elektronowej, uwzględniając hybrydyzację π oraz liniową zależność energii elektronów od wektora falowego $\mathbf{k}$, co jest zgodne z relatywistycznym modelem Weyla-Diraca (WD). Opis ten pozwala na precyzyjne modelowanie pasm walencyjnych i przewodnictwa w pobliżu punktów Diraca K i K' .

W kontekście własności optycznych i transportowych grafenu przeprowadziłem analizę transportu elektronowego w reżimie balistycznym i dyfuzyjnym badając warunki umożliwiające wzbudzanie prądów spinowych poprzez efekty termoelektryczne. Istotnym aspektem pracy badawczej była również analiza oddziaływania grafenu z promieniowaniem elektromagnetycznym (PE) w zakresie terahercowym, ze szczególnym uwzględnieniem wpływu oddziaływania spinowo-orbitalnego Rashby na procesy absorpcji i generację polaryzacji spinowej.

Cykl publikacji obejmuje także badania nad własnościami transportowymi, spinowymi i topologicznymi struktur grafenowych, koncentrując się na stanach zlokalizowanych indukowanych przez ścianki magnetyczne utworzone w wyniku obecności warstw ferromagnetycznych. Prace te wpisują się w szerszy nurt badań nad zastosowaniami grafenu w nowoczesnej spintronice i elektronice kwantowej.

Z perspektywy dalszego rozwoju nauki, badania nad grafenem i jego właściwościami kwantowymi są kluczowe dla przyszłości technologii elektronowych i spintroniki. W szczególności pogłębiona analiza zjawisk topologicznych oraz oddziaływania spinowo-orbitalnych może przyczynić się do opracowania nowych metod manipulacji stanami kwantowymi oraz projektowania innowacyjnych urządzeń elektronicznych o wysokiej wydajności. W związku z tym warto kontynuować badania nad grafenem oraz innymi materiałami dwuwymiarowymi, zwłaszcza w kontekście ich potencjalnych zastosowań w komputerach kwantowych, układach logicznych nowej generacji oraz technologiach spintronicznych.

3.2 Metody badawcze

Dobór metody teoretycznego opisu w przedstawionych badaniach wynika bezpośrednio z rozpatrywanego problemu fizycznego. W swoich pracach skupiłem się przede wszystkim na analizie struktury elektronowej grafenu, stosując przybliżenie Weyla-Diraca (WD)[8–10]. Podejście to pozwala na opisanie zależności energii elektronów w pobliżu punktów Diraca, co jest szczególnie

istotne w kontekście efektów relatywistycznych oraz wpływu oddziaływania spinowo-orbitalnego (SO) [11–13].

W grafenie występują dwa podstawowe mechanizmy oddziaływania SO: wewnętrzne (intrinsic) oraz typu Rashby (Rashba-type) [14–16]. Z uwagi na wyjątkowo niską wartość oddziaływania wewnętrznego (rzędu μeV), w przeprowadzonych analizach skupiłem się wyłącznie na jednorodnym oddziaływaniu Rashby, zakładając stałą wartość sprzężenia ($\lambda = \text{const}$). Wartość tego oddziaływania zależy od rodzaju podłoża i może mieścić się w zakresie od pojedynczych do kilkudziesięciu meV [16–21].

Pod wpływem asymetrycznego pola elektrycznego, indukowanego przez podłoże, spin elektronu sprzęga się z jego ruchem orbitalnym. W konsekwencji następuje modyfikacja struktury pasmowej grafenu – pierwotnie liniowy charakter zależności energetycznej $E(\mathbf{k})$ ulega zmianie, przyjmując kształt paraboliczny.

W ramach swoich badań przeprowadziłem szczegółową analizę transportowych oraz optycznych właściwości wybranych struktur grafenowych w obecności oddziaływania Rashby. Efekt ten odgrywa kluczową rolę w większości rozważanych przypadków przedstawionych w niniejszym autoreferacie [20, 22–24].

Silne modyfikacje struktury elektronowej można uzyskać poprzez zastosowanie zewnętrznego pola magnetycznego o indukcji $\mathbf{B}$ lub poprzez sprzężenie elektronów w grafenie z warstwami ferromagnetycznymi – oba te przypadki stanowiły również przedmiot moich badań. Szczególnie interesującym efektem jest współistnienie oddziaływania Rashby oraz prostopadłego do płaszczyzny grafenu pola Zeemanowskiego, które prowadzi do otwarcia przerwy energetycznej. Wykorzystałem ten efekt do analizy stanów krawędziowych indukowanych na ściankach magnetycznych, co ma istotne znaczenie w kontekście potencjalnych zastosowań w spintronice [25–29].

Dobór metod badawczych wynikał bezpośrednio z charakteru postawionej na wstępie tezy. W szczególności, w badaniach własności transportowych grafenu zastosowałem podejście oparte na metodzie funkcji Greena, która pozwala na precyzyjne modelowanie dynamiki elektronów w układach o złożonej, niejednorodnej strukturze [30]. Metody te umożliwiły szczegółową analizę rezonansowych stanów elektronów zlokalizowanych na domieszkach, co jest kluczowe dla zrozumienia wpływu zaburzeń strukturalnych na transport elektronowy [14, 31–33].

Dodatkowo, funkcje Greena pozwoliły na określenie czasów relaksacji pędu, co jest istotne w kontekście transportu dyfuzyjnego, zwłaszcza w obecności gradientu temperatury. Dzięki temu mogłem opisać dynamikę elektronów, uwzględniając efekty rozpraszania na fononach, defektach oraz niejednorodnościach potencjału, co pozwoliło na dokładniejsze zrozumienie mechanizmów przewodnictwa w grafenie [34–37].

W celu uzupełnienia tej analizy wykorzystałem również podejście semi-klasyczne, zwane kinetycznym równaniem Boltzmanna ([H2], [H4]). Umożliwiło to szczegółowe prześledzenie przepływu nośników ładunku i energii w grafenie pod wpływem różnicy temperatur (efekt termoelektryczny) [38–41]. Zastosowanie równania Boltzmanna pozwoliło na opisanie transportu w warunkach poza równowagą, z uwzględnieniem wpływu rozpraszania na domieszkach oraz defektach krystalicznych. Dzięki temu możliwe było modelowanie zarówno przewodnictwa cieplnego, jak i elektrycznego, a także ocena wpływu różnych parametrów fizycznych na efektywność transportu [42].

W ramach tej analizy szczególną uwagę poświęciłem własnościom termoelektrycznym w transporcie dyfuzyjnym, gdzie elektrony ulegają wielokrotnemu rozpraszaniu. W takich warunkach gradient temperatury prowadzi do powstania różnicy potencjałów elektrycznych – zjawiska opisywanego jako efekt Seebecka [43, 44]. Warto jednak zaznaczyć, że efekt ten może występować również w warunkach transportu balistycznego, w którym elektrony przemieszczają się przez materiał niemal bezrozproszeniowo [45–47]. W takim przypadku ich ruch jest determinowany głównie przez granice układu lub interakcję z kontaktami elektrodowymi, co prowadzi

do odmiennego mechanizmu generowania siły elektromotorycznej.

Transport balistyczny w grafenie jest charakterystyczny dla wysokiej jakości próbek i zachodzi w skali długości porównywalnych lub krótszych od średniej drogi swobodnej elektronów. W takich warunkach rozpraszanie nośników na defektach i fononach jest znikome, a transport elektronów odbywa się głównie poprzez odbicia od granic układu lub oddziaływanie z elektrodami. W tym reżimie gradient temperatury prowadzi do różnic w rozkładzie energii nośników między gorącymi i zimnymi obszarami układu, co z kolei prowadzi do pojawienia się efektów termoelektrycznych [48–50].

W transporcie balistycznym efekt Seebecka wynika przede wszystkim z asymetrii w transmisji elektronów o różnych energiach, co jest silnie związane zarówno z kwantowym charakterem przewodnictwa jak i topologią pasm elektronowych w grafenie. Analiza tego zjawiska wymaga uwzględnienia nie tylko gradientu temperatury, ale także wpływu granic układu i specyficznych warunków brzegowych. W swoich badaniach szczególną uwagę poświęciłem oddziaływaniu spinowo-orbitalnemu (SO) Rashby, które znacząco wpływa na strukturę pasmową grafenu, a także na mechanizm transferu energii pomiędzy rezerwuarami o różnych potencjałach chemicznych, wywołanych różnicą temperatur [51, 52].

Takie podejście pozwala na dokładne modelowanie transportu balistycznego w nanostrukturach grafenowych, takich jak paski grafenu, w których dominują efekty kwantowe. Wyniki tych analiz wskazują, że transport balistyczny może prowadzić do znacznie większej sprawności efektu Seebecka, a także do powstawania nowych efektów termoelektrycznych charakterystycznych dla niskowymiarowych układów kwantowych. W szczególności, jednym z kluczowych efektów w tym kontekście jest spinowy efekt Nernsta, w którym różnica temperatur indukuje spinowy prąd termoelektryczny [53].

Z tego punktu widzenia możliwość generowania prądów ładunkowych i spinowych w grafenie poprzez różnicę temperatur otwiera nowe kierunki badań – zarówno pod kątem fundamentalnych właściwości transportowych, jak i zastosowań w urządzeniach termoelektrycznych nowej generacji. W szczególności, kontrolowana generacja spinowych prądów termoelektrycznych może mieć kluczowe znaczenie dla spintroniki opartej na grafenie, w której różnica temperatur może być wykorzystana jako źródło polaryzacji spinowej [54–56].

Zjawiska termoelektryczne w grafenie mogą być również ściśle związane z efektami optycznymi, zwłaszcza w kontekście wzbudzeń plazmonowych i efektów fotoelektrycznych. Dzięki unikalnej strukturze pasmowej oraz wysokiej ruchliwości nośników grafen wykazuje silne interakcje ze światłem, co prowadzi do szeregu interesujących efektów, takich jak: nieliniowa absorpcja, generacja wyższych harmonicznych (w procesach nieliniowych) czy optyczne efekty termoelektryczne.

Przykładem takiego sprzężenia jest lokalne ogrzewanie grafenu za pomocą światła, które może generować gradienty temperatury, a te z kolei mogą indukować prądy spinowe lub ładunkowe w układzie. To połączenie efektów optycznych i termoelektrycznych może być kluczowe dla rozwoju nowych technologii w dziedzinie opto-spintroniki i nanofotoniki. [57, 58]

Grafen, dzięki swojej strukturze pasmowej (bezprzerwowej) ma ogromny potencjał w zakresie konwersji energii świetlnej na energię elektryczną. Efektywność tego procesu może być wzmacniana przez różne mechanizmy, w tym efekty kwantowe i oddziaływania spinowo-orbitalne. [59–61]

W moich badaniach własności optycznych grafenu skupiłem się na analizie związków między zmianą struktury elektronowej a współczynnikiem absorpcji promieniowania elektromagnetycznego. Szczególną uwagę poświęciłem:

- wpływowi zewnętrznego pola magnetycznego na indukcję prądów ładunkowych i spinowych,
- możliwości wstrzykiwania polaryzacji spinowej światłem w grafenie z uwzględnieniem oddziaływania SO Rashby,

- roli potencjału wektorowego promieniowania elektromagnetycznego uwzględniając orbitalny moment pędu fotonów (OAM)
- manipulowaniu własnościami optycznymi poprzez kontrolę geometrii układu grafenowego.

Aby opisać oddziaływanie dwuwymiarowej płaszczyzny grafenu z falą elektromagnetyczną (FE), zastosowałem złotą regułę Fermiego (FGR), szeroko wykorzystywaną w teorii zaburzeń [H1], [H3], [H5], [H6]. Reguła ta umożliwia obliczanie prawdopodobieństwa przejść kwantowych, co czyni ją użytecznym narzędziem do analizy absorpcji promieniowania w układach kwantowych [30].

Dzięki tej metodzie udało się wyznaczyć kluczowe własności optoelektroniczne struktur grafenowych, w tym:

- absorpcję PE – głównie w zakresie terahercowym,
- możliwość generowania (pompowania) polaryzacji spinowej i pseudospinowej,
- indukcję prądów ładunkowych i spinowych pod wpływem PE.

Warto jednak zaznaczyć, że złota reguła Fermiego ma swoje ograniczenia – sprawdza się najlepiej w przypadku słabych oddziaływań, gdzie zaburzenie można traktować jako zaburzenie pierwszego rzędu.

Po określeniu podstawowych możliwości wykorzystania grafenu w zjawiskach optycznych, kolejnym etapem badań było szczegółowe określenie własności elektronowych stanów krawędziowych, które pojawiają się wzdłuż ścianki magnetycznej. Stany te odgrywają kluczową rolę w topologicznym transporcie spinowym, a ich analiza dostarcza cennych informacji na temat potencjalnych zastosowań grafenu w spintronice oraz w inżynierii kwantowej [62–64].

Do opisu jednowymiarowych stanów elektronowych zlokalizowanych na ścianie domenowej wykorzystałem równanie Schrödingera uwzględniające oddziaływanie spinowo-orbitalne Rashby (SO Rashby) oraz czynnik zeemanowski, który opisuje efekty zbliżeniowe wprowadzone przez sąsiadującą warstwę ferromagnetyczną. W analizowanym układzie warstwa ta charakteryzuje się namagnesowaniem prostopadłym do płaszczyzny grafenu, co prowadzi do istotnych zmian w strukturze pasmowej układu. W wyniku tych oddziaływań w grafenie pojawia się przerwa energetyczna, której wielkość jest proporcjonalna do wartości energii sprzężenia spinowo-orbitalnego oraz energii Zeemana. Powstanie tej przerwy sprzyja formowaniu stanów dyskretnych, które są zlokalizowane wzdłuż ścianki magnetycznej. Stany te istnieją w szczelinie energetycznej, która powstaje na skutek oddziaływania grafenu z warstwą ferromagnetyczną oraz obecności sprzężenia Rashby. Dla każdego punktu Diraca otrzymujemy dwa jednowymiarowe pasma stanów chiralnych, które są do siebie podobne w różnych punktach Diraca.

Z analizy własności topologicznych wynika, że domeny magnetyczne odpowiadają topologicznie różnym obszarom, które można opisać liczbami Chern’a (np. $C = 2$ oraz $C = -2$ po przeciwnych stronach ścianki magnetycznej). Oznacza to, że w przypadku, gdy poziom Fermiego znajduje się w szczelinie, wzdłuż ścianki magnetycznej propagują cztery chiralne stany krawędziowe, co prowadzi do kwantowego anomalnego efektu Halla (QAH) z przewodnictwem równym czterem kwantom przewodnictwa. Niemniej jednak stany te nie są topologicznie chronione przed rozpraszaniem międzypolinowym, co może prowadzić do osłabienia efektu QAH w rzeczywistych układach.

Dodatkowo badania wskazują na możliwość wzbudzenia polaryzacji spinowej w stanach krawędziowych, która pojawia się w przypadku nierównomiernego obsadzenia punktów Diraca K i K' . Jest to efekt wynikający z symetrii układu, zgodnie z którą $\varepsilon^K(k_y) = -\varepsilon^K(-k_y)$ oraz $\varepsilon^K(k_y) = -\varepsilon^{K'}(k_y)$. W przypadku ścianek o różnych wartościach namagnesowania po obu stronach, przerwa energetyczna może ulegać redukcji, a niektóre chiralne stany mogą mieć małe wartości energii i wolno zanikać wraz z odległością od ścianki magnetycznej.

W celu precyzyjnego opisu własności transportowych elektronów propagujących się wzdłuż ścianki domenowej zastosowałem metodę $k \cdot p$. Metoda ta umożliwiła m.in. wyznaczenie masy efektywnej elektronów, która w pewnych warunkach może być bardzo duża. Co więcej, w przypadku antysymetrycznych ścianek Rashby i ścianek magnetycznych, relacja dyspersyjna stanów krawędziowych jest liniowa w k_y i zdegenerowana zarówno dla punktów Diraca K, jak i K'. W takich układach można obserwować termoelektryczne prądy spinowe, natomiast prąd ładunkowy indukowany termicznie zanika.

Moje badania ostatecznie, potwierdziły, że właściwości elektronowe stanów krawędziowych w grafenie z warstwą ferromagnetyczną można kontrolować poprzez zmiany parametrów sprzężenia Rashby oraz pola magnetycznego, co otwiera nowe możliwości dla projektowania urządzeń spintronicznych. [\[H7\]](#), [\[H8\]](#)

Poniżej zostaną opisane bardziej szczegółowo prace wchodzące w skład dorobku publikacyjnego określonego ogólnym tytułem *Własności optyczne i transportowe wybranych struktur grafenowych*.

3.3 Szczegółowe omówienie prac

3.3.1 Efekty termoelektryczne i termomagnetoelektryczne [H2][H4]

[H2] M. Inglot, A. Dyrdał, V.K. Dugaev, J. Barnaś, *Thermoelectric effect enhanced by resonant states in graphene*, *Phys. Rev. B* **91**, 115410 (2015)

Model *Efekt Seebecka* jest jednym z podstawowych zjawisk termoelektrycznych [38, 65]. W niniejszej pracy przedstawiłem możliwość kontrolowania tego efektu poprzez domieszkowanie warstwy grafenu atomami o różnej wartości potencjału elektrycznego V_0 . Wskutek rozpraszania elektronów na domieszkach (zarówno magnetycznych, jak i niemagnetycznych) powstają rezonansowe poziomy energetyczne, które – jak się okazuje – prowadzą do wzmocnienia efektu termoelektrycznego oraz są przyczyną łamania prawa Wiedemanna-Franza w grafenie. [39–41, 66–69]. Stany elektronowe w pobliżu punktów Diraca można opisać hamiltonianem Weyla-Diraca.[8]

$$\hat{H}_0 = v \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{k} \quad (1)$$

gdzie $v = \hbar v_F$, $v_F = c/300$ c jest prędkością światła w próżni, $\boldsymbol{\tau} = [\tau_x, \tau_y, \tau_z]$ są macierzami Pauliego w przestrzeni pseudospinu (dwie podsieci grafenu).

W moich obliczeniach założyłem, że gradient temperatury ∇T oraz pole elektryczne $\mathbf{E}$ są skierowane wzdłuż osi x . Dla tak zdefiniowanego układu wyznaczyłem funkcję rozkładu elektronów $f^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ dla n -tego pasma energii, stosując kinetyczne równanie Boltzmanna. W liniowym przybliżeniu, dla niewielkiego odchylenia równowagowej funkcji rozkładu f_0 , równanie Boltzmanna w przybliżeniu czasu relaksacji można zapisać w postaci:

$$v_x^{(n)} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \left(\nabla \mu + \frac{\varepsilon - \mu}{T} \nabla T - eE \right) = -\frac{\delta f^{(n)}}{\tau^{(n)}} \quad (2)$$

gdzie $f^{(n)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f_0 + \delta f^{(n)}$, $\tau^{(n)}$ oznacza czas relaksacji pędu, a μ to potencjał chemiczny grafenu, który może być przestrzennie niejednorodny wzdłuż osi x . Z tego powodu gradient potencjału chemicznego $\nabla \mu = \partial \mu / \partial x$ również przyczynia się do kierunkowego ruchu ładunku elektrycznego.

Korzystając z równania (2), wyznaczyłem gęstości prądu ładunkowego (elektrycznego) $j = e \sum_{n, \mathbf{k}} v_x^{(n)} \delta f^{(n)}$ oraz strumienia energii $J_E = \sum_{n, \mathbf{k}} v_x^{(n)} \varepsilon^{(n)} \delta f^{(n)}$ wzdłuż osi x , wymuszone działaniem E , ∇T i $\nabla \mu$. Aby scharakteryzować domieszkowany grafen pod względem termoelektrycznym w ujęciu semi-klasycznym, wyznaczyłem współczynniki kinetyczne K_{rs} , które dla grafenu przyjmują całkowitą postać:

$$K_{rs} = -\frac{1}{4\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} |\varepsilon| \varepsilon^{r-1} \tau^s(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (3)$$

Wyznaczyłem współczynniki kinetyczne dla obu pasm energii, uwzględniając zależność czasu relaksacji pędu od energii, mianowicie $\tau^{(1)}$ dla $\varepsilon > 0$ i $\tau^{(2)}$ dla $\varepsilon < 0$. Warto zauważyć, że gęstość prądu ciepła J_Q można zdefiniować jako $J_Q = J_E - \mu j$, tak więc $J_Q = J_E$ jeśli gęstość prądu ładunkowego wynosi zero, czyli $j = 0$.

Jasne jest, że całkowita siła termoelektryczna E osiągnie maksimum, gdy prąd ładunkowy w układzie nie płynie ($j = 0$). Dlatego, aby ją znaleźć, wykorzystałem relację $E^\alpha = \alpha \nabla T$, gdzie E^α jest siłą termoelektryczną wywołaną gradientem temperatury, a $E^\mu = \nabla \mu / e$ jest

siłą wynikającą z niejednorodności potencjału chemicznego. W przypadku zerowego prądu ładunkowego $J_Q = -\kappa \nabla T$. Z tego wynika, że całkowita siła termoelektryczna jest sumą odpowiednich wkładów: $E = E^\alpha + E^\mu$.

Do wyznaczenia własności transportowych konieczne jest obliczenie współczynników kinetycznych zdefiniowanych wyrażeniem (3). W tym celu niezbędne jest określenie zależności czasu relaksacji pędu od energii $\tau^{(n)}(\varepsilon)$. W publikacji [H1] zaproponowany został model domieszki zlokalizowanej w jednej z podsieci grafenu (A lub B), czyli przestrzennie atom węgla zastąpiono innym atomem o określonym potencjale punktowym V_0 .

Z uwagi na to, że w obliczeniach przyjęto hamiltonian zdefiniowany wzorem (1) (nie uwzględniając oddziaływań spin-orbitalnych), każdy poziom energetyczny domieszki znajduje się na tle pasma elektronowego grafenu. W takim przypadku mówimy o rozpraszaniu rezonansowym. Szerszą dyskusję na temat domieszkowania, stanów dyskretnych i rezonansowych można znaleźć w pracach [32, 70–72].

W celu określenia czasu relaksacji pędu $\tau^{(n)}$ wykorzystano metody funkcji Green’a, obliczając energię własną (*self-energy*) $\Sigma(\varepsilon)$, która pozwala uwzględnić koncentrację domieszek N_i o zadanym potencjale domieszki V_0 .

W tym przypadku rozważany hamiltonian zawierać będzie również część opisującą potencjał domieszki (zaburzenie), dlatego $\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_i V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, gdzie V to potencjał domieszki zlokalizowany w punkcie o położeniu $\mathbf{R}_i$. W obliczeniach przyjęto równomierny i losowy rozkład domieszek w obu podsieciach, co można przedstawić następująco:

$$\hat{V}^{A(B)}(\mathbf{r}) = \hat{V}_0^{A(B)} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A(B)}), . \quad (4)$$

W celu wyznaczenia energii stanów zlokalizowanych wykorzystano metodę macierzy T . Jest to dobrze znana technika używana w obliczeniach np. transportu w ciele stałym, pozwalająca uwzględnić wszystkie rzędy rachunku zaburzeń. W ogólnym przypadku równanie macierzy- T ma postać:

$$\hat{T}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\varepsilon) = \hat{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}''} \hat{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}''} \hat{G}_{\mathbf{k}''}(\varepsilon) \hat{T}_{\mathbf{k}''\mathbf{k}}, \quad (5)$$

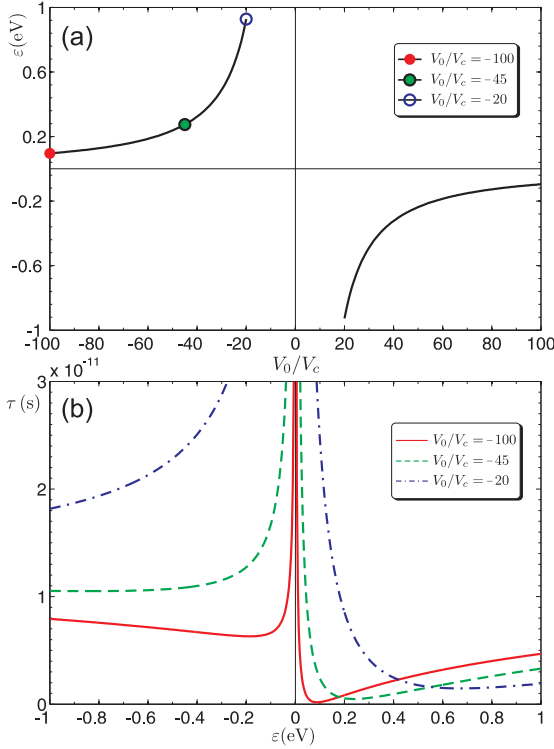
gdzie $\hat{G}_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ jest retardowaną funkcją Green’a elektronów opisanych niezaburzonym hamiltonianem (1).

Dla wyżej zdefiniowanego krótkozasięgowego potencjału domieszki (4), macierz- T ma postać $\hat{T}^{A,B}(\varepsilon) = (1 - V_0 F(\varepsilon))^{-1} V_0^{A,B}$, gdzie $F(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon / ((\varepsilon + i\delta)^2 - (\hbar v k)^2)$. W wyniku przeprowadzonych obliczeń zawartych w pracy [H2] otrzymałem analityczną postać czasu relaksacji pędu $\tau^{(n)}(\varepsilon)$ elektronów rozpraszanych na rezonansowych domieszkach niemagnetycznych w postaci:

$$\frac{\hbar}{\tau(\varepsilon)} = \frac{N_i V_0^2 |\text{Im} F(\varepsilon)|}{(1 - V_0 \text{Re} F(\varepsilon))^2 + V_0^2 (\text{Im} F(\varepsilon))^2}. \quad (6)$$

Bazując na powyższych obliczeniach, poniżej przedstawione zostaną najważniejsze wyniki pracy.

Wyniki Tak jak badania fizyki półprzewodników domieszkowanych okazały się kluczowe w rozwoju tych materiałów, tak wydaje się być konieczne analizowanie zaburzeń w jednowarstwowym grafenie [31, 73, 74]. Grafen nie jest pozbawiony różnego rodzaju defektów, takich jak luki atomowe, dodatkowe atomy zastępujące węgiel, defekty liniowe na brzegach czy domieszki obszarowe [70, 71, 75–79].



Rysunek 1: (a) Energia stanów rezonansowych w funkcji potencjału domieszki V_0/V_c . (b) Czas relaksacji pędu τ w funkcji energii elektronów zlokalizowanych na domieszce ε , obliczony dla koncentracji domieszki $N_i = 2 \times 10^{14} \text{m}^{-2}$ oraz dla stanów rezonansowych odpowiadających punktom zaznaczonym na (a).

Na rysunku 1(b) przedstawiłem zależność czasu relaksacji pędu $\tau(\varepsilon)$ w funkcji energii (stanów rezonansowych) ε dla wybranych potencjałów domieszek V_0/V_c . Analizując zależność $\tau(\varepsilon)$ od energii dla $\varepsilon > 0$ można stwierdzić, że minimum funkcji znajduje się w pobliżu energii poziomu domieszkowego. Zwróciłem również uwagę, że w tym modelu czas relaksacji pędu τ wykazuje osobiwość dla $\varepsilon \rightarrow 0$.

W rzeczywistości przerwa energetyczna w grafenie jest indukowana przez wewnętrzne oddziaływanie spin-orbita, jednak jego wartość jest bardzo mała, wynosząc około $\Delta \simeq 24, \mu\text{eV}$. W związku z tym można stwierdzić, że odcięcie czasu relaksacji pędu należy spodziewać się właśnie dla tej energii [81, 82].

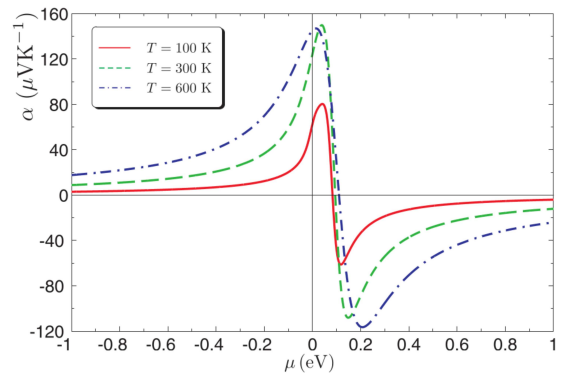
Określiłem również związek pomiędzy stanami rezonansowymi a własnościami transportowymi, co przedstawiłem na rysunku 2(b), gdzie zilustrowałem rezystancję R w funkcji potencjału chemicznego μ . Stwierdzić można, że maksymalny termoprąd uzyskujemy dla wartości potencjału chemicznego bliskiej energii poziomu rezonansowego, kiedy rezystancja jest jeszcze stosunkowo niska. Jednak w sytuacji, gdy potencjał chemiczny osiąga wartość energii poziomu domieszkowego, obserwujemy maksimum R oraz wyraźny spadek wartości prądu.

Również zaobserwować można, że w rezonansie rezystancja osiąga maksimum, a indukowany różnicą temperatur ∇T prąd wynosi zero $j = 0$. Wynika to z faktu, że prąd elektronowy jest w pełni

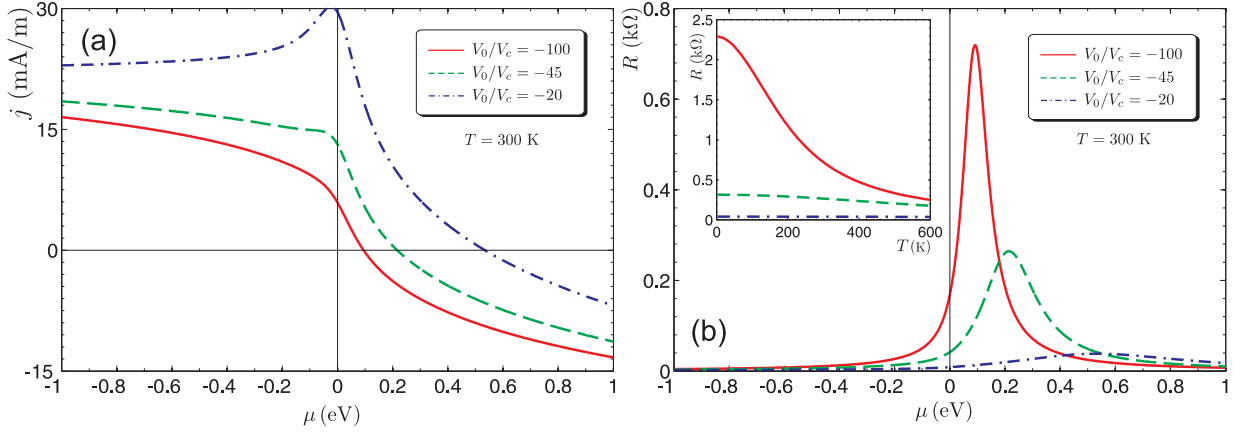
W mojej analizie wykazałem pozytywny wpływ istnienia domieszek rezonansowych na bezwymiarowy współczynnik dobroci termoelektrycznej ZT . Projektując sieć grafenu do zastosowań w termoelektrycznym efekcie Seebecka, uwzględniłem odpowiedni dobór potencjału domieszki V_0 oraz ich koncentrację N_i , co pozwoliło na efektywne wzbudzenie nierównowagowego prądu ładunkowego.

Na rysunku 1(a) przedstawiłem zależność poziomu energii rezonansowej od potencjału V_0 . Stany te wykazują odwrotną zależność w porównaniu do tradycyjnych półprzewodników [31, 80]: przyciągający potencjał $V_0 < 0$ powoduje powstanie dodatniej energii rezonansowej $\varepsilon > 0$, natomiast odpychający potencjał $V_0 > 0$ prowadzi do energii rezonansowej $\varepsilon < 0$.

Aby wyznaczyć zależność energii rezonansowej od znormalizowanego potencjału V_0/V_c , gdzie $V_c = ta_0^2$ ($t = 3 \text{ eV}$ jest całącałką przeskoiku pomiędzy najbliższymi sąsiadami, a a_0 oznacza odległość między atomami węgla), wykorzystałem równanie macierzy- T , której bieguny stanowią poszukiwane rozwiązanie (szczegóły w [H2]). Zauważyć należy, że graniczne przypadki $V_0 \rightarrow \pm\infty$ opisują lukę w sieci grafenu.



Rysunek 3: Współczynnik Seebecka α dla grafenu jako funkcja potencjału chemicznego μ dla różnych wartości temperatur T i dla $V_0/V_c = -100$.

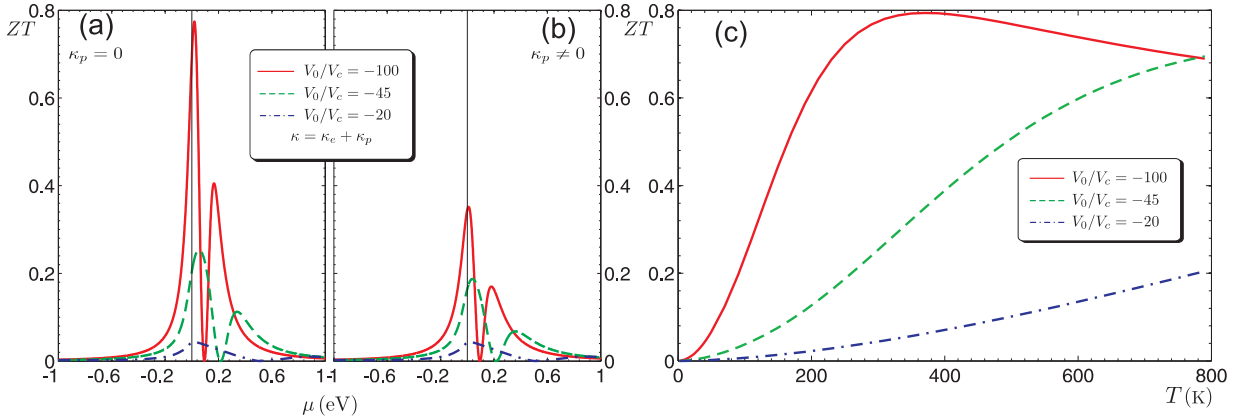


Rysunek 2: (a) Prąd indukowany gradientem temperatury ∇T jako funkcja potencjału chemicznego μ dla $T = 300$ K i wskazanych wartości potencjału domieszek V_0/V_c . (b) Rezystywność grafenu w funkcji potencjału chemicznego μ dla $T = 300$ K i wskazanych wartości V_0/V_c . Wstawka w (b) przedstawia rezystywność w funkcji temperatury T dla wybranego potencjału chemicznego odpowiadającego maksimum rezystywności. Pozostałe parametry przyjąłem zgodnie z opisem w tekście głównym.

kompensowany przez prąd dziurowy. Zwiększając wartość potencjału chemicznego w kierunku wartości dodatnich, przechodzimy do obszaru, gdzie dominuje prąd elektronowy, dlatego całkowity prąd przyjmuje wartości ujemne. Natomiast po lewej stronie dominuje prąd dziurowy wówczas prąd ładunkowy jest dodatni.

Podobną zależność dostrzegłem między rezystancją R a siłą termoelektryczną α (współczynnikiem Seebecka), co przedstawiłem na rysunku 3. W tym przypadku obliczenia wykonałem dla jednej wybranej wartości potencjału domieszki $V_0/V_c = -100$ dla której poziom energii rezonansowej jest najniższy, natomiast zmieniałem temperaturę T .

Analizując zależność między termoprądem j a siłą termoelektryczną α , zauważyłem, że w obu przypadkach następuje zmiana znaku oraz przejście przez $\alpha = 0$ dla poziomu energii potencjału chemicznego μ . Ponadto zwróciłem uwagę na fakt, że amplituda współczynnika Seebecka rośnie znacząco wraz z temperaturą T , co zilustrowałem na rysunku 3.



Rysunek 4: Wartość współczynnika dobroci ZT jako funkcja potencjału chemicznego μ przy zaniedbaniu wkładu fononowego w przewodności cieplnej, $\kappa_p = 0$ (a) oraz dla $\kappa_p = 40 \times 10^{-9} \text{ K}^{-1} \text{ W}$ (b). Obliczenia wykonałem dla $T = 300$ K i różnych wartości V_0/V_c . (c) Zależność temperaturowa ZT dla $\kappa_p = 0$ oraz dla potencjału chemicznego odpowiadającego maksimum ZT na wykresie (a). Pozostałe parametry przyjąłem zgodnie z opisem w tekście głównym.

Z technologicznego punktu widzenia kluczową informacją o przydatności materiału w termoelektryce pełni bezwymiarowy współczynnik dobroci ZT . Zdefiniowałem go jako:

$$ZT = \frac{T\alpha^2\sigma}{\kappa}, \quad (7)$$

gdzie κ jest całkowitą przewodnością cieplną, uwzględniającą wkłady od elektronów i fononów, tj. $\kappa = \kappa_e + \kappa_p$. W moich obliczeniach uwzględniłem wyznaczoną eksperymentalnie wartość przewodnictwa cieplnego $\kappa_p = 40 \times 10^{-9} \text{ WK}^{-1}$ [47, 83, 84].

Na rysunkach 4(a) i 4(b) przedstawiłem zależność współczynnika ZT od potencjału chemicznego μ dla różnych wartości κ_p , natomiast rysunek 4(c) przedstawia zależność temperaturową ZT dla wartości potencjału chemicznego odpowiadającej maksymalnej wartości ZT w rysunku 4(a).

Jak przedstawiłem na rysunkach 4(a-c), dobroć termoelektryczna silnie zależy od potencjału domieszek V_0 . W mojej pracy wykazałem również negatywny wpływ fononowej przewodności cieplnej κ_p , której wzrost znacząco obniża wartość współczynnika ZT . Co istotne, wybór niemagnetycznych domieszek V_0 wpływa na położenie maksimum ZT w funkcji temperatury układu T , co zilustrowałem na rysunku 4(c).

W moich analizach wykazałem także, że domieszkowanie grafenu prowadzi do naruszenia prawa Wiedemanna-Franza. Zgodnie z tym prawem (dotyczącym metali) dwa rodzaje przewodnictwa – elektronowe i cieplne – są do siebie proporcjonalne i związane stałą zwaną liczbą Lorentza L , zgodnie z równaniem:

$$\frac{\kappa}{T\sigma} = L, \quad (8)$$

gdzie $L = \pi^2 k_B^2 / 3e^2$ [66]. Prawo to przez ponad 150 lat uznawano za słuszne, jednak w 1996 roku C. L. Kane i Matthew Fisher [85] wykazali, że w przypadku jedno-wymiarowych (1D) układów może ono zostać naruszone. Ich przewidywania zostały eksperymentalnie potwierdzone w 2011 roku przez Nicholasa Wakehama i współpracowników [69]. Zaburzenia prawa Wiedemanna-Franza wykazano również w materiałach topologicznych, nanodrutach oraz w układach pod wpływem silnych pól magnetycznych [86–88].

W mojej pracy [H2] pokazałem, że także w materiałach dwuwymiarowych (2D) prawo Wiedemanna-Franza nie jest spełnione. Na rysunku 5 przedstawiłem zależność stałej Lorentza L od potencjału chemicznego μ dla wybranych wartości potencjału domieszek V_0 . Stosunek ten (zgodnie z równaniem 8) silnie zmienia się w okolicach potencjału chemicznego μ równego potencjałowi domieszki V_0 , a jego maksymalna wartość rośnie wraz z V_0 , czyli dla energii poziomu rezonansowego dążącego do zera $\varepsilon \rightarrow 0$.

Dla stałej wartości czasu relaksacji $\tau = \text{const}$ dla potencjału chemicznego równego zero $\mu = 0$ można analitycznie wyznaczyć wartość stałej L w punkcie Diraca. W tym przypadku współczynnik K_{21} jest równy zero, a pozostałe współczynniki kinetyczne można znaleźć w postaci analitycznej.

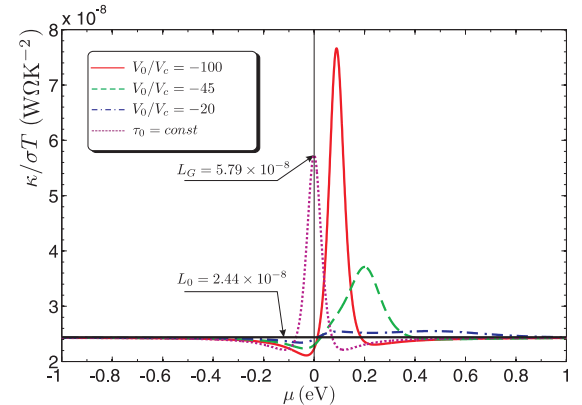
Korzystając z tych rozwiązań, wyznaczyłem nową stałą fizyczną – stałą Lorentza dla grafenu L_G , której postać jest następująca:

$$L_G = \frac{\kappa}{\sigma T} \Big|_{\mu=0} = \frac{9k_B^2 \zeta(3)}{2e^2 \ln 2}, \quad (9)$$

gdzie $\zeta(x)$ jest funkcją ζ Riemanna.

Podsumowanie

W niniejszej pracy przeanalizowałem efekt termoelektryczny w grafenie, ze szczególnym uwzględnieniem wpływu rezonansowego rozpraszania na domieszkach. Zastosowałem metodę macierzy



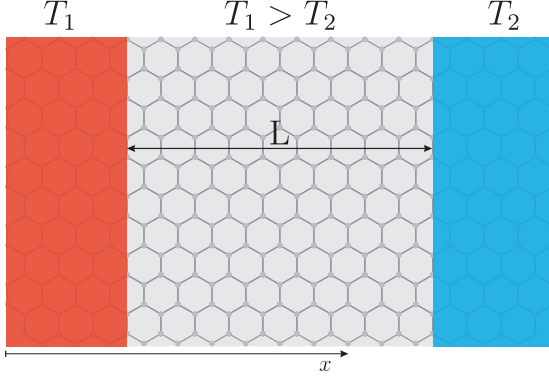
Rysunek 5: Współczynnik Wiedemanna-Franza w funkcji potencjału chemicznego μ dla temperatury $T = 300$ K oraz dla trzech wskazanych wartości potencjału rozpraszania (poziomy rezonansowe), jak również dla przypadku stałego czasu relaksacji (linia kropkowana).

T do wyznaczenia stanów rezonansowych oraz czasu relaksacji pędu wynikającego z rozpraszania elektronów na domieszkach. Określiłem współczynnik termoelektryczny na podstawie kinetycznego równania Boltzmann'a. Wykazałem, że obecność stanów rezonansowych w pobliżu poziomu Fermiego prowadzi do rezonansowego wzmocnienia współczynnika Seebecka oraz współczynnika sprawności termoelektrycznej ZT . Ponadto zaobserwowałem istotne odchylenia prawa Wiedemanna-Franza od klasycznej wartości liczby Lorentza, co ma miejsce przy małych potencjałach chemicznych oraz w pobliżu stanów rezonansowych. W szczególnym przypadku stałego czasu relaksacji, stosunek ten został obliczony analitycznie dla $\mu = 0$.

[H2] - Wkład do pracy polegał na: sformułowaniu koncepcji pracy, opracowaniu metodologii obliczeń, wykonaniu obliczeń analitycznych, przygotowaniu kodu oraz wykonaniu obliczeń numerycznych z prezentacją wizualną wyników, wstępne przygotowanie manuskryptu, udział w procesie redakcyjnym publikacji, prowadzenie korespondencji z redakcją.

[H4] M. Ingłot, V.K. Dugaev, J. Barnaś, *Thermoelectric and thermospin transport in a ballistic junction of graphene*, *Phys. Rev. B* **92**, 085418 (2015)

Model W niniejszej pracy rozważamy strukturę elektronową grafenu w przypadku idealnego, czystego materiału, tj. bez domieszek. Uwzględniamy jednak obecność podłoża, które indukuje stałe oddziaływanie spinowo-orbitalne Rashby $\lambda(x) = \text{const}$ [11, 19–21].



Rysunek 6: Schemat złącza balistycznego składającego się z wstęgi grafenowej o długości L oraz dwóch obszarów elektronicznych 2D o różnych temperaturach.

W tym przypadku założyłem, że na powierzchni grafenu umieszczono dwie elektrody (rys. 6). Jedna z nich jest ciepła (kolor czerwony), a druga zimna (kolor niebieski), co powoduje powstanie gradientu temperatury ∇T . Elektrody są oddalone o odległość L , która jest mniejsza niż średnia droga swobodna elektronów ℓ .

Spektrum energetyczne elektronów opisujemy relatywistycznym hamiltonianem H_0 (1), rozszerzonym o człon uwzględniający oddziaływanie spinowo-orbitalne Rashby w grafenie [12]:

$$H_{\mathbf{k}} = v\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{k} + \lambda(\sigma_x\tau_y - \sigma_y\tau_x), \quad (10)$$

gdzie $\lambda = \alpha/2$, przy czym α jest parametrem sprzężenia SO Rashby, a macierze $\sigma_{x,y}$ to macierze Pauliego działające w przestrzeni spinu elektronów.

Tak jak w przypadku pracy [H2], hamiltonian (10) opisuje niskoenergetyczną część pasma walencyjnego i pasma przewodnictwa w pobliżu punktów Diraca K i K'. Tym razem jednak mamy do czynienia z czterema pasmami energetycznymi, co wynika z rozszczepienia spin-orbitalnego. Struktura pasmowa układu przyjmuje postać:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}n} = \mp\lambda \mp \sqrt{v^2k^2 + \lambda^2}, \quad (11)$$

gdzie indeks pasma n zmienia się od 1 do 4. Pasma $n = 1$ odpowiada najniższemu energetycznie stanowi, a $n = 4$ – najwyższemu, przy czym nie obserwujemy punktów degeneracji. Natomiast pasma $n = 2$ i $n = 3$ stykają się w punkcie $k = 0$.

Aby zapewnić przejrzysty opis układu, zakładamy, że szerokość wstęgi grafenu jest na tyle duża, iż możemy zaniedbać efekt kwantyzacji. Jednocześnie wymagamy, aby długość L spełniała warunek $L \ll \ell$, co jednoznacznie określa balistyczny reżim transportu zarówno ładunku, jak i spinu pomiędzy dwoma rezerwuarami ciepła.

Statystykę elektronów w tych dwóch rezerwuarach opisujemy równowagową funkcją rozkładu Fermiego-Diraca:

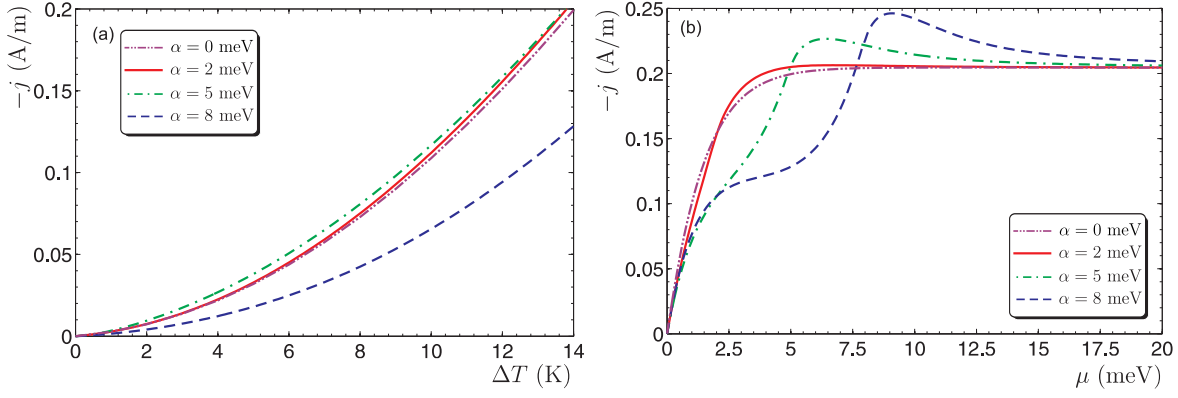
$$f_{1,2}(\varepsilon_{\mathbf{k}n}) = [\exp((\varepsilon_{\mathbf{k}n} - \mu_{1,2})/k_B T_{1,2}) + 1]^{-1}, \quad (12)$$

gdzie μ_1 i μ_2 to potencjały chemiczne, które w ogólnym przypadku mogą być różne.

W balistycznym reżimie transportu elektrony poruszające się w kierunku od lewej do prawej oraz od prawej do lewej opisujemy funkcjami rozkładu $f_1^>(\varepsilon_{\mathbf{k}n})$ oraz $f_2^<(\varepsilon_{\mathbf{k}n})$. Dzięki tym definicjom możemy dokładnie przeanalizować własności transportowe ładunku i spinu w rozważanym układzie.

Wyniki W analizie złącza balistycznego w grafenie przyjmujemy, że $\mu_1 = \mu_2 = \mu$ oraz $\Delta T = T_1 - T_2 > 0$. Ponieważ prąd ładunkowy to nic innego jak ruch ładunku elektrycznego w określonym kierunku, możemy go zdefiniować jako:

$$j = e \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}n | \hat{v}_x | \mathbf{k}n \rangle [f_1^>(\varepsilon_{\mathbf{k}n}) - f_2^<(\varepsilon_{\mathbf{k}n})], \quad (13)$$



Rysunek 7: Prąd termoelektryczny w reżimie balistycznym w funkcji T (a) i w funkcji potencjału chemicznego μ (b) dla różnych wartości parametru sprzężenia Rashby α , $T = 1$ K oraz dla $\mu = 5$ meV (a) i $T = 14$ K (b).

gdzie e jest ładunkiem elementarnym, a $\hat{v}_x = v_F \tau_x$ to operator prędkości elektronowej. Przy analizie wyrażenia (13) należy pamiętać, że sumowanie po $\mathbf{k}$ ograniczamy do całkowania po kątach, dla którego składowa x prędkości elektronowej $v_x n = \langle \mathbf{k} n | \hat{v}_x | \mathbf{k} n \rangle$ jest dodatnia.

W publikacji [H4] przedstawiamy rozwiązania numeryczne dla prądu ładunkowego w funkcji różnicy temperatur ΔT oraz potencjału chemicznego μ (Rysunki 7(a,b)). W obu przypadkach wyznaczamy zależność $j(\Delta T, \mu)$ dla kilku wartości parametru sprzężenia spinowo-orbitalnego Rashby: $\alpha = [0, 2, 5, 8]$ meV, przy niskiej temperaturze $T = 1$ K. Co ciekawe, niezależnie od wartości α , w punkcie symetrii elektron-dziura ($\mu = 0$) prąd ładunkowy zanika. Wynika to z kompensacji wkładów pochodzących od elektronów i dziur.

Analizując zależność $j(\mu)$ (Rysunek 7(b)), zauważamy podobieństwo kształtu krzywych dla $\alpha = [0, 2]$ meV oraz $\alpha = [5, 8]$ meV. Jest to związane ze strukturą pasmową – dla małych wartości α przejście od charakteru parabolicznego do liniowego w widmie energii następuje bardzo szybko.

W miarę przesuwania potencjału chemicznego μ poza punkt neutralny w stronę dodatnich energii ($\varepsilon > 0$), wpływ pasma walencyjnego staje się coraz mniejszy. W zakresie $\mu \lesssim kT_1, kT_2$ obserwujemy nierównowagę pomiędzy elektronami i dziurami, co prowadzi do gwałtownego wzrostu prądu. Natomiast dla $\mu \gg kT_1, kT_2$ prąd j dąży do stałej wartości. Wynika to z dominacji wkładów pasm przewodnictwa ($n = 3, 4$) oraz liniowego charakteru $\varepsilon_{\mathbf{k}n}$ w zakresie $\mu \gg 2\alpha$.

Inny charakter transportu balistycznego obserwujemy dla większych wartości sprzężenia Rashby, tj. $\alpha = [5, 8]$ meV. Gdy $\alpha \gg kT_1, kT_2$, pojawia się plateau w zakresie $kT_1, kT_2 \lesssim \mu \lesssim \alpha$. Jeśli jednak potencjał chemiczny μ przekroczy wartość α , zauważamy wyraźne maksimum prądu. Szczegółową analizę tej zależności omawiamy w [H4], rozdziale A.

W przypadku prądu w transporcie balistycznym warto zwrócić uwagę na istotne różnice pomiędzy dwuwymiarowym gazem elektronowym (2DEG) z parabolicznym widmem a gazem bezmasowych fermionów Diraca. Mianowicie termoelektryczny prąd balistyczny w 2DEG w opisywanych warunkach nie występuje. Wynika to z faktu, że gęstość stanów ν_{2D} w takim układzie jest niezależna od energii – pozostaje stała.

W grafienie, jeśli rozważamy wkład do prądu pochodzący od pasm $n = 3$ i $n = 4$ w zakresie $\mu > \alpha$, a dodatkowo spełniony jest warunek $k_B T \ll (\mu - \alpha)$, można wykazać, że:

$$j \simeq \frac{e\pi k_B^2 T \Delta T}{15} \sum_n \frac{\partial}{\partial \varepsilon} [\nu_n(\varepsilon), v_n(\varepsilon)] \Big|_{\varepsilon=\mu}. \quad (14)$$

Ponieważ w pobliżu brzegów pasm struktura elektronowa ma charakter paraboliczny, gęstość stanów w dwóch wymiarach ma postać skokową: $\nu_4(\varepsilon) = \theta(\varepsilon - \alpha)$, a prędkość elektronów zależy

od energii jako $v_4(\varepsilon) \sim (\varepsilon - \alpha)^{1/2}$. Ostatecznie możemy wyznaczyć:

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} [\nu_n(\varepsilon), v_n(\varepsilon)]|_{\varepsilon=\mu} = (\mu - \alpha)^{-1/2}, \quad (15)$$

co oznacza, że zmniejszenie potencjału chemicznego powoduje wzrost termoprądu aż do osiągnięcia maksimum.

Natomiast dla $\mu \gg \alpha$ pasma stają się liniowe względem $\mathbf{k}$, co oznacza, że zarówno gęstość stanów, jak i prędkość elektronów przyjmują następujące postaci:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\pi v^2}, \quad v(\varepsilon) = v_F. \quad (16)$$

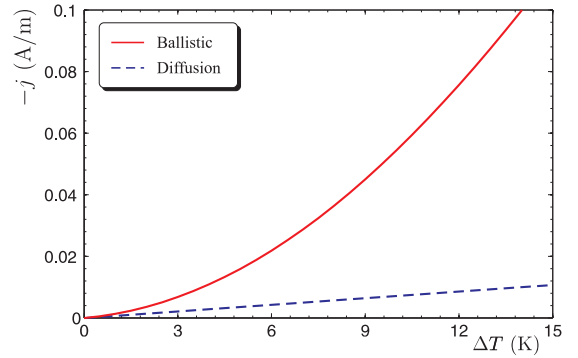
W takim przypadku, dla $k_B T \gg \mu$, możemy określić termoprąd w reżimie balistycznym jako:

$$j = \frac{ek_B^2 T \Delta T}{15 \hbar v}. \quad (17)$$

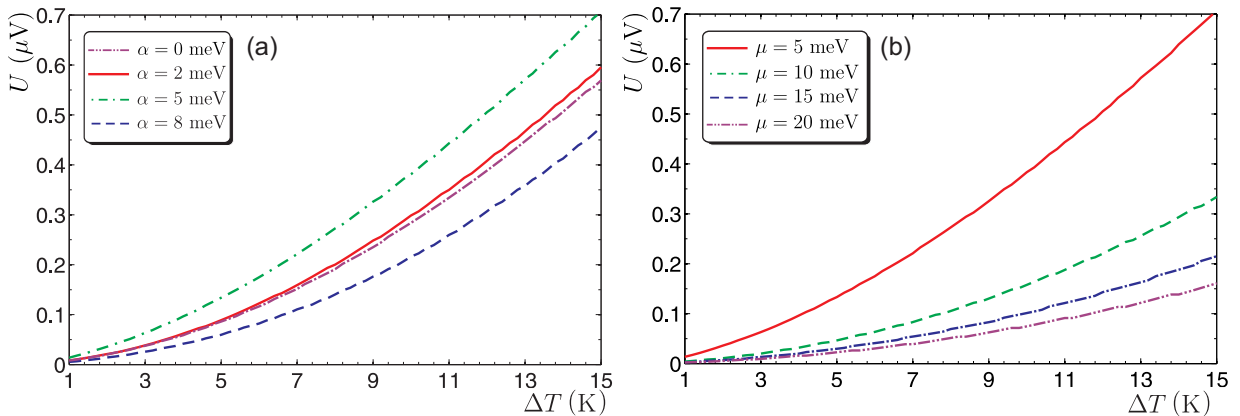
Dla porównania prądów indukowanych gradientem temperatury w dwóch różnych reżimach transportowych przedstawiamy Rysunek 8. Różnica między nimi jest wyraźna. W transporcie dyfuzyjnym generowany prąd rośnie liniowo wraz z różnicą temperatur ΔT , podczas gdy w reżimie balistycznym zależność termoprądu $j(\Delta T)$ jest nieliniowa i wzrost prądu następuje znacznie szybciej.

Oprócz prądu elektrycznego określiłem również napięcie termoelektryczne U , które jest indukowane gradientem temperatury w złączu balistycznym. W tym celu wykorzystałem wyrażenie (13), uwzględniając różne potencjały chemiczne $\mu_1 \neq \mu_2$. Szukane rozwiązanie znalazłem, przyjmując warunek $j = 0$. W takich warunkach napięcie termoelektryczne można zdefiniować jako:

$$U = \frac{\mu_1 - \mu_2}{e}. \quad (18)$$

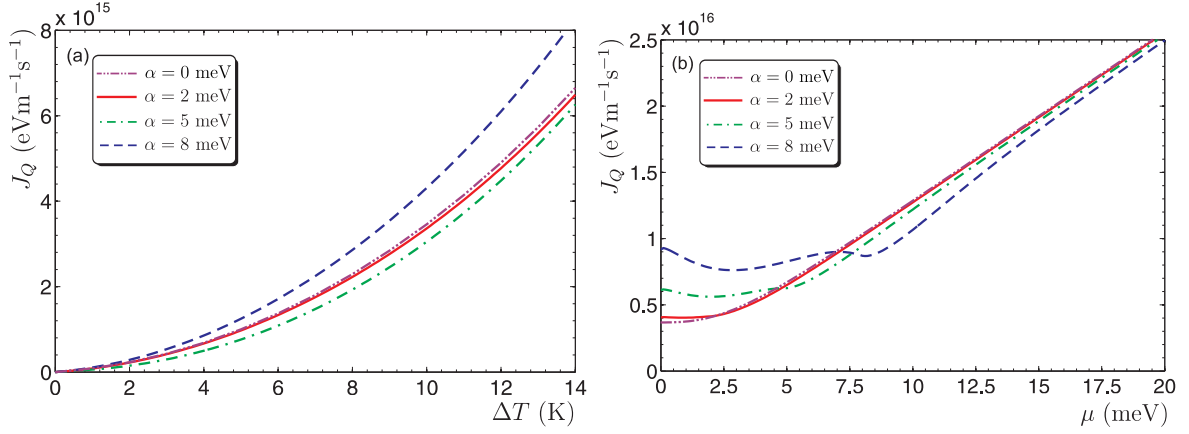


Rysunek 8: Porównanie prądu indukowanego termoelektrycznie w reżimie transportu balistycznego i dyfuzyjnego, obliczonego dla $\mu = 5$ meV, $T = 1$ K i $\alpha = 8$ meV. Prąd elektryczny w reżimie dyfuzyjnym jest proporcjonalny do różnicy temperatur ΔT .



Rysunek 9: Napięcie termoelektryczne w funkcji T , obliczone dla $T = 1$ K: (a) dla $\mu = 5$ meV i różnych wartości parametru Rashby α , (b) dla $\alpha = 5$ meV i różnych wartości potencjału chemicznego μ .

Otrzymane wyniki (Rysunek 9(a,b)) wykazują podobieństwo do zależności termoprądu w funkcji ΔT . Szczególną uwagę zwrócić można na krzywe z Rysunku 9(b), gdzie pokazałem, jak



Rysunek 10: Prąd cieplny przekazywany przez elektrony dla $T = 1$ K i różnych wartości parametru Rashby α , obliczony w funkcji T dla $\mu = 5$ meV (a) oraz w funkcji μ dla $T = 14$ K (b).

napięcie U rośnie wraz ze zmniejszającym się potencjałem chemicznym μ dla wybranej wartości α .

Przeanalizowałem zależność prądu ciepła w funkcji różnicy temperatur δT oraz potencjału chemicznego μ dla wybranych wartości sprzężenia spinowo-orbitalnego Rashby α . Prąd cieplny określiłem jako:

$$J_Q = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}n | \{ (H_{\mathbf{k}} - \mu), \hat{v}_x \} | \mathbf{k}n \rangle [f_1^>(\varepsilon_{\mathbf{k}n}) - f_2^<(\varepsilon_{\mathbf{k}n})], \quad (19)$$

gdzie $\hat{A}, \hat{B}$ oznacza komutator operatorów $\hat{A}$ i $\hat{B}$.

Podobnie jak w przypadku termoprądu, zauważyłem, że zależność prądu ciepła J_Q od ΔT wykazuje podobny charakter. Szczególną uwagę zwróciłem na krzywe z Rysunku 10(b), które przedstawiają zależność prądu ciepła J_Q od μ dla różnych wartości α . Okazuje się, że prąd ciepła rośnie wraz z μ , w przeciwieństwie do termoprądu, który osiąga nasycenie w wyniku zmiany charakteru struktury pasmowej z parabolicznej na liniową ($E(k)$). Jest to związane z tym, że elektronowy prąd ciepła zależy od energii jak $\varepsilon \sim \mu$, podczas gdy termoprąd w tym zakresie od energii nie zależy.

Interesującym wynikiem jest obserwacja, że prąd ciepła J_Q pozostaje niezerowy dla $\mu = 0$, a jego najniższą wartość otrzymałem dla $\alpha = 0$. Wynika to z faktu, że prąd ładunkowy i dziurowy mają przeciwne znaki, podczas gdy prąd ciepła zachowuje ten sam znak. W zakresie wyższych energii ($\mu \gg \alpha$) oddziaływanie spinowo-orbitalne Rashby w niewielkim stopniu obniża transfer energii cieplnej w układzie.

Z punktu widzenia własności spinowych analiza efektu termoelektrycznego również okazała się bardzo interesująca. Wyniki obliczeń numerycznych dotyczących balistycznego transportu spinowo-zależnego indukowany gradientem temperatury przedstawiłem w publikacji [H4]. Podobnie jak w poprzednich przypadkach, również i tutaj założyłem jednorodność potencjału chemicznego w obu rezerwuarach elektronowych, czyli $\mu_1 = \mu_2 = \mu$.

W celu określenia efektu termoelektrycznego dla spinu obliczyłem średnią wartość operatora spinu, korzystając z relacji:

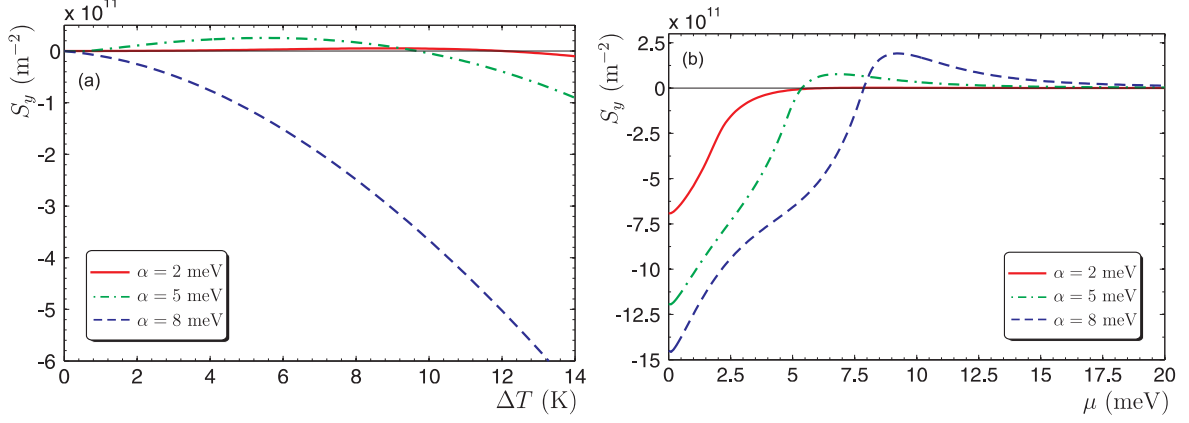
$$S_\alpha = \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}n | \sigma_\alpha | \mathbf{k}n \rangle [f_1^>(\varepsilon_{\mathbf{k}n}) - f_2^<(\varepsilon_{\mathbf{k}n})]. \quad (20)$$

Należy podkreślić, że gradient temperatury został przyjęty wzdłuż osi x , natomiast niezerowa polaryzacja spinu jest generowana wzdłuż kierunku y , czyli prostopadle do gradientu ∇T . [56]

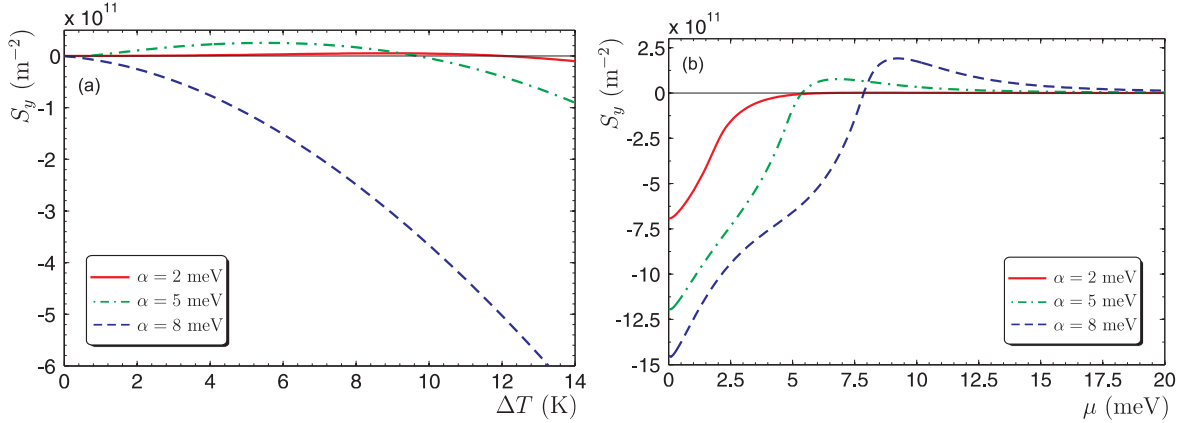
Porównując polaryzację spinów w grafenie z oddziaływaniem Rashby oraz w dwuwymiarowym gazie elektronowym (2DEG), zauważyłem, że mechanizmy polaryzacji w obu przypadkach są

bardzo podobne. Wielkość polaryzacji spinowej jest mała dla $k \ll \alpha/v$ i osiąga maksymalną wartość $\hbar/2$ dla $k \gg \alpha/v$. [11]

Interesującym wynikiem jest fakt, że dla małych wartości energii, gdy $\alpha \simeq kT_1 \cdot kT_2$, polaryzacja spinowa przyjmuje wartości ujemne i przechodzi do zera w zakresie $\mu \gg \alpha$. Efekt ten wynika z nierównowagi generowanego spinu pochodzącego z pasm przewodnictwa $n = 3$ i $n = 4$.



Rysunek 11: Termoelektrycznie indukowana polaryzacja spinowa dla wskazanych wartości parametru Rashba i $T = 1$ K, obliczone jako funkcja T dla $\mu = 5$ meV (a) i jako funkcja μ dla $T = 14$ K (b).



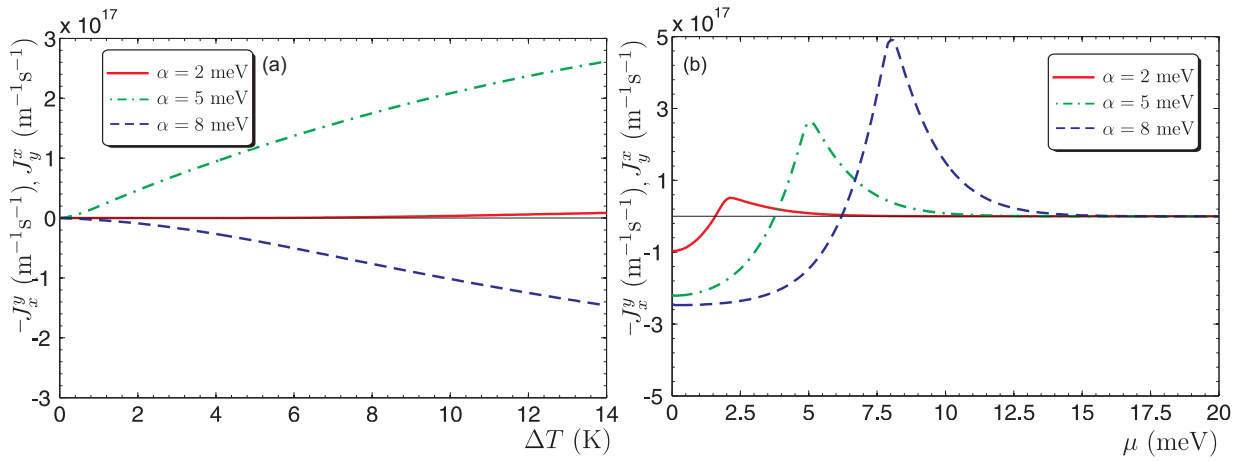
Rysunek 12: Termoelektrycznie indukowana polaryzacja spinowa dla wskazanych wartości parametru Rashba i $T = 1$ K, obliczone jako funkcja T dla $\mu = 5$ meV (a) i jako funkcja μ dla $T = 14$ K (b).

Przechodząc od polaryzacji S_y do prądu spinowego J_x^y (równoległe do ∇T) lub J_y^x (prostopadły do ∇T), gdzie górny indeks oznacza składową spinową, a dolny oznacza kierunek przepływu prądu spinowego, możemy przedstawić ogólną formułę jako

$$J_i^\alpha = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{\mathbf{k}}' \langle \mathbf{k}n | \{ \sigma_\alpha, \hat{v}_i \} | \mathbf{k}n \rangle [f_1^>(\varepsilon_{\mathbf{k}n}) - f_2^<(\varepsilon_{\mathbf{k}n})]. \quad (21)$$

Opisując generowanie prądu spinowego różnicą temperatur (Rysunki 13(a,b)) przede wszystkim warto zauważyć, że zachodzi relacja $J_x^y = -J_y^x$. Drugą cechą przedstawionych prądów spinowych jest to, że mamy do czynienia z dwoma mechanizmami:

- pierwszy z nich dla J_x^y jest bezpośrednio związany z dyskutowanym powyżej efektem termicznej generacji polaryzacji spinowej S_y ,
- podczas gdy efekt prądu spinowego J_y^x odnosi się do spinowego efektu Halla indukowanego gradientem temperatury ∇T , zwanego częściej jako efekt Nernsta.[53] W tym przypadku indukowany prąd płynie prostopadle do ∇T .



Rysunek 13: Termicznie indukowane prądy spinowe J_x^y i J_y^x dla różnych wartości α , jako funkcja od ΔT dla $\mu = 5 \text{ meV}$, (b) jako funkcja μ dla $\Delta T = 14 \text{ K}$, dla obu rysunków $T = 1 \text{ K}$.

Charakter i zmiany w prądzie spinowym szczególnie dobrze widoczne są na Rysunku 13(b). W funkcji potencjału μ zauważamy, że dla $\mu = 0$ prąd J_i^α przyjmuje wartość niezerową. Wraz ze wzrostem μ pojawia się przejście przez punkt $J_i^\alpha = 0$, a następnie prąd osiąga maksimum w okolicach $\mu \simeq \alpha$. Dla wartości $\mu \gg \alpha$ obserwujemy spadek J_i^α do zera.

Podczas analizy transportu balistycznego w efekcie termoelektrycznym skupiłem się na wpływie oddziaływania spinowo-orbitalnego Rashby na generację prądów ładunkowych, ciepłych oraz spinowych w układzie o strukturze stożka Diraca. Wykazałem, że gradient temperatury prowadzi nie tylko do transportu energii cieplnej, ale także do powstawania prądów spinowych oraz spinowej polaryzacji elektronów.

Podsumowanie

Główne wnioski są następujące:

1. Prąd ciepła J_Q pozostaje niezerowy nawet dla zerowego potencjału chemicznego ($\mu = 0$). Najniższą wartość uzyskuje przy braku oddziaływania Rashby ($\alpha = 0$), natomiast w zakresie wysokich energii ($\mu \gg \alpha$) efekt Rashby nieznacznie redukuje przepływ energii cieplnej.
2. Polaryzacja spinowa S_y indukowana gradientem temperatury rośnie wraz z energią nośników, osiągając maksymalną wartość dla dużych wartości liczby falowej $k \gg \alpha/v$. Dla małych energii ($\alpha \simeq kT_1, kT_2$) polaryzacja spinowa przyjmuje wartości ujemne i przechodzi do zera przy $\mu \gg \alpha$.
3. Prądy spinowe J_x^y i J_y^x wykazują ciekawą zależność od potencjału chemicznego oraz różnicy temperatur. Prąd spinowy generowany w kierunku gradientu temperatury (J_x^y) związany jest z indukowaną polaryzacją spinową, natomiast prąd J_y^x odpowiada efektowi spinowego Halla indukowanemu gradientem temperatury (efekt Nernsta).
4. Zależność prądów spinowych od μ wykazuje charakterystyczne maksimum dla $\mu \simeq \alpha$, po czym obserwujemy jego stopniowy spadek do zera dla $\mu \gg \alpha$.

Uzyskane wyniki wskazują, że efekt termoelektryczny w materiałach z silnym oddziaływaniem Rashby może być wykorzystany do kontrolowanej generacji prądów spinowych oraz manipulacji polaryzacją spinową, co ma potencjalne zastosowania w przyszłych urządzeniach spintronicznych i termo-spintronicznych.

[H4] - **Wkład do pracy polegał na:** sformułowaniu koncepcji pracy, opracowaniu metodologii obliczeń, wykonaniu większości obliczeń analitycznych, przygotowaniu kodu oraz wykonaniu obliczeń numerycznych z prezentacją wizualną wyników, wstępne przygotowanie manuskryptu, udział w procesie redakcyjnym publikacji, prowadzenie korespondencji z redakcją.

3.3.2 Efekty fotoelektryczne [H1][H3][H5][H6]

[H1] M. Inglot, V.K. Dugaev, E.Ya. Sherman, J. Barnaś, *Optical spin injection in graphene with Rashba spin-orbit interaction*, *Phys. Rev. B* **89**, 155411 (2014)

Model W pierwszych dwóch pracach przedstawione zostały możliwości zastosowania warstwy grafenu w termoelektryce [H2][H4]. Kolejnym interesującym aspektem wykorzystania grafenu jest jego oddziaływanie ze światłem, które może prowadzić do generacji prądu ładunkowego, spinowego oraz indukowania gęstości spinowej.

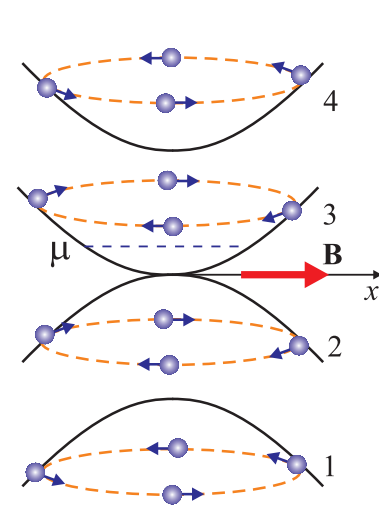
Grafen, jako monowarstwa o grubości jednego atomu, charakteryzuje się stałą absorpcją fotonów w zakresie liniowej części widma energii. Absorpcja ta, niezależna od energii fotonów $E = \nu h$, wynosi $I_0 = \pi\alpha$, gdzie $\alpha = e^2/\hbar c$ jest stałą struktury subtelnej.[89–91] Oznacza to, że grafen pochłania około 2.3% padającego promieniowania elektromagnetycznego.[92] Właściwości te zostały potwierdzone w pracach [H1], [H3], [H5], [H6]. Ponadto wykazałem możliwość konwersji promieniowania na prąd elektryczny i spinowy, a efektywność tych procesów jest stosunkowo wysoka.

Pierwsza z wymienionych prac w cyklu habilitacyjnym dotyczy wykorzystania warstwy grafenu do generowania polaryzacji spinowej indukowanej przez FE. W tym przypadku zastosowano hamiltonian 10, rozszerzony o człon Zeemanowski związany z zewnętrznym polem magnetycznym. Elektrony w pasmach walencyjnym i przewodnictwa w okolicach punktów K i K' są opisywane na podłożu, które indukuje oddziaływanie spin-orbitalne Rashby $\alpha(\mathbf{r}) \neq 0$. Całość znajduje się w stałym polu magnetycznym $\mathbf{B}$, a opis układu jest dany przez hamiltonian (22):

$$H_{\mathbf{k}} = v\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{k} + \lambda(\sigma_x\tau_y - \sigma_y\tau_x) + g(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (22)$$

gdzie $g = g_L\mu_B/2$, a g_L to czynnik Landégo.

Stosując hamiltonian (22), należy zwrócić uwagę na pewne ograniczenia. Zakładamy, że pole magnetyczne $\mathbf{B}$ jest stałe i słabe, tj. $g\mathbf{B}/\lambda \gg 1$, gdzie $\lambda = \alpha/2$. Oznacza to, że nie dochodzi do kwantyzacji Landaua, a struktura pasmowa grafenu jest jedynie słabo zaburzona. W konsekwencji polaryzacja spinowa wykazuje liniową zależność od pola magnetycznego $\mathbf{B}$.



Rysunek 14: Struktura pasmowa grafenu z oddziaływaniem spin-orbitowym Rashby w granicy $gB/\lambda \ll 1$. Strzałki pokazują zależną od $\mathbf{k}$ orientację spinów elektronów w stanach własnych hamiltonianu.

Aby lepiej zrozumieć fizyczne mechanizmy, analizujemy schematyczną strukturę pasmową wynikającą z hamiltonianu (22). Numeracja pasm pozostaje zgodna z wcześniejszymi przypadkami: najniższe energetycznie pasmo oznaczamy jako $n = 1$, a najwyższe jako $n = 4$. Istotną różnicą w porównaniu do poprzednich modeli (prace [H2] i [H4]) jest fakt, że pasma $n = 2$ i $n = 3$ nie stykają się w punkcie degeneracji dla $k = 0$, lecz są względem siebie przesunięte o energię Zeemana $\Delta \equiv gB$. Wcześniejsze modele nie uwzględniały wpływu zewnętrznego pola magnetycznego.

Dla dalszej analizy zakładamy, że pole magnetyczne $\mathbf{B}$ leży w płaszczyźnie grafenu, a jego kierunek przyjmujemy wzdłuż osi x , tj. $\mathbf{B} = B_x$.

Powyżej opisałem model układu grafen/podłoże/zewnętrzne pole magnetyczne. Teraz scharakteryzuję hamiltonian oddziaływania grafenu z FE, można go zapisać następująco:

$$\hat{H}_A = -\frac{ev}{\hbar c}(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}) \quad (23)$$

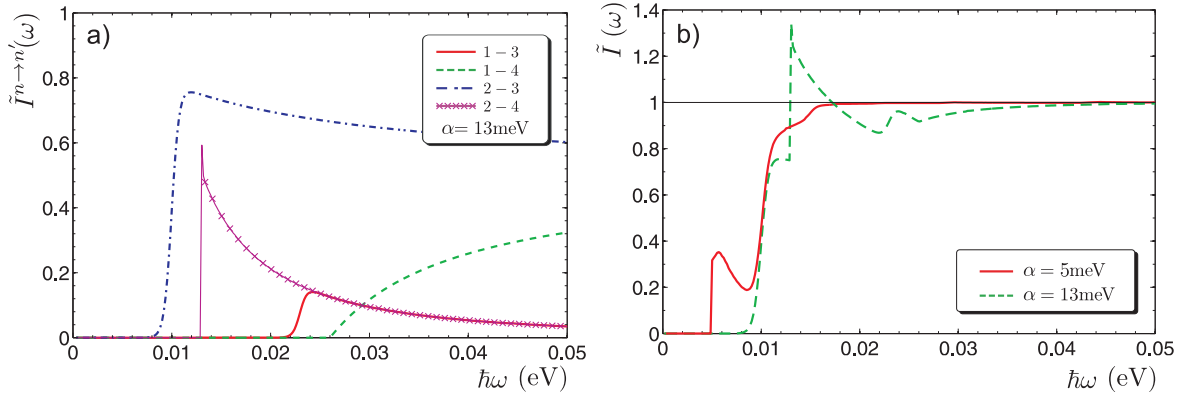
gdzie potencjał wektorowy $\mathbf{A}(t)$ pola elektromagnetycznego zależy od czasu i ma postać

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t}. \quad (24)$$

Wybieramy liniową polaryzację w kierunku osi y , czyli $\mathbf{A}_0 = (0, A_0, 0)$. W przypadku światła o polaryzacji liniowej spełniona jest zasada zachowania pędu, co oznacza $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ [30]. Dzięki temu rozważamy przejścia prostopadłe, dla których w pracy [H1] opisano absorpcję oraz mechanizm pompowania spinu, korzystając ze złotej reguły Fermiego (FGR), wyrażonej równaniem

$$I^{n \rightarrow n'}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}; \left| \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H} A | \Psi_{n'\mathbf{k}} \rangle \right|^2 \delta(E_{n\mathbf{k}} + \hbar\omega - E_{n'\mathbf{k}}), f(E_{n\mathbf{k}}), [1 - f(E_{n'\mathbf{k}})]. \quad (25)$$

Wyniki W poniższych obliczeniach numerycznych przedstawiono unormowaną absorpcję światła ze wzoru (25), znormalizowaną do stałej I_0 . Szczegóły obliczeń znajdują się w [H1] (rozdział II). Stała I_0 odpowiada absorpcji w grafenie bez oddziaływania spin-orbitowego Rashby i dla pola magnetycznego $\mathbf{B} = 0$.



Rysunek 15: (a) Znormalizowane współczynniki absorpcji odpowiadające wskazanym przejściom międzypasmowym, obliczone dla $\alpha = 2\lambda = 13$ meV. (b) Całkowity znormalizowany współczynnik absorpcji dla dwóch różnych wartości parametru spin-orbitowego Rashby. Obliczenia wykonano dla pola magnetycznego $B = 5$ T i potencjału chemicznego $\mu = 5$ meV.

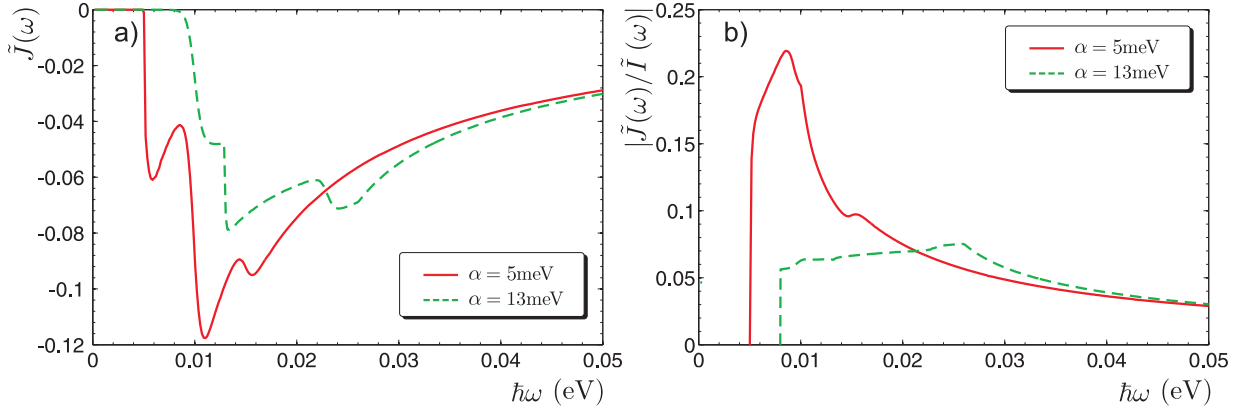
Analizując Rysunek 15(a), warto zauważyć ostre krawędzie przejść międzypasmowych, szczególnie dla przejść 2 – 3 i 2 – 4. Jest to zgodne z oczekiwaniami wynikającymi ze struktury pasmowej. Pierwsze możliwe przejście elektronowe związane jest z pasmami $n = 2$ i $n = 3$. Ze względu na niezerowy potencjał chemiczny $\mu = 5$ meV, skok w absorpcji obserwowany jest w okolicach energii fotonów $\hbar\omega \simeq 2\mu$.

Następnie pojawia się absorpcja wynikająca z przejścia 2 – 4, które zachodzi dla energii fotonów $\hbar\omega = 2\alpha$. Ostra krawędź w tym przypadku związana jest ze skokiem w gęstości stanów dla tej części energii. Dalej obserwujemy wkład od przejścia 1 – 3 dla $\hbar\omega \simeq \alpha + 2\mu$ oraz przejścia 1 – 4 dla $\hbar\omega = 2\alpha$.

Warto zwrócić uwagę, że mimo częściowego zapelnienia pasma $n = 3$ ($\mu = 5$ meV), przejście 3 – 4 nie zachodzi, ponieważ elementy macierzowe operatora sprzężenia światła z elektronami są w tym przypadku zerowe. Dlatego dla tej konfiguracji nie obserwuje się absorpcji PE.

W przypadku pomiarów spektrofotometrem, nie jesteśmy w stanie zaobserwować osobnych wkładów do absorpcji promieniowania pochodzących od poszczególnych pasm struktury elektronowej - widzimy jedynie ich sumę. Tę sytuację przedstawiono na rysunku 15(b), gdzie wykreślono dwie krzywe absorpcji dla różnych parametrów sprzężenia spin-orbita Rashby α , przy tej samej wartości potencjału chemicznego $\mu = 5$ meV oraz indukcji pola magnetycznego $B = 5$ T. Należy podkreślić istotny wpływ podłoża na absorpcję w grafenie dla energii fotonów w zakresie $0 < \hbar\omega \lesssim 3\alpha$ (zob. [93]). Dla wyższych energii, $\hbar\omega \gg 2\alpha$, paraboliczny charakter pasm zanika, a

liniowe spektrum manifestuje się stałą wartością absorpcji $\tilde{I}(\omega) = 1$, co jest zgodne z wynikami eksperymentalnymi.[94]



Rysunek 16

Głównym zagadnieniem omawianym w niniejszej pracy jest możliwość bezkontaktowego indukowania gęstości spinowej w jednowarstwowym grafenie. W tym celu analizowałem międzypasmowe przejścia elektronowe, którym towarzyszy zmiana spinu - tzw. przejścia spin-flip.

Przykładowo wzór (25) do postaci pozwalającej na obliczenie różnicy pomiędzy średnią wartością operatora σ_i w stanie $|\Psi_{n'\mathbf{k}}\rangle$ a średnią wartością tego operatora w stanie $|\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle$:

$$J_i^{n \rightarrow n'}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left| \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H} A | \Psi_{n'\mathbf{k}} \rangle \right|^2 (\langle \Psi_{n'\mathbf{k}} | \sigma_i | \Psi_{n'\mathbf{k}} \rangle - \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \sigma_i | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle) \times \delta(E_{n\mathbf{k}} + \hbar\omega - E_{n'\mathbf{k}}) f(E_{n\mathbf{k}}), [1 - f(E_{n'\mathbf{k}})]. \quad (26)$$

Powyższe równanie (26) opisuje tempo wstrzykiwania nierównowagowej gęstości spinowej. Podobnie jak w przypadku absorpcji fotonów, również dla polaryzacji spinowej wprowadzamy całkowitą gęstość spinową $J_i(\omega) = \sum_{n,n'} J_i^{n \rightarrow n'}(\omega)$, którą można wyrazić w unormowanej postaci jako $J_i(\omega) = I_0 \tilde{J}_i(\omega)$.

W przypadku braku pola magnetycznego ($\mathbf{B} = \mathbf{0}$) wartość oczekiwana spinu w przejściach międzypasmowych wynosi zero. Wynika to z symetrii elementów macierzowych oraz z niezależności energii $E_{n\mathbf{k}}$ od orientacji wektora falowego $\mathbf{k}$. Natomiast wprowadzenie pola magnetycznego ($\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$) zmienia sytuację – linie o stałej energii przestają być okręgami, a pasma ulegają przesunięciu w kierunku $\pm \mathbf{B}$. Z uwagi na to funkcja falowa również ulega modyfikacji, co w pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń można zapisać jako

$$\Psi_{n\mathbf{k}} - \Psi^{(0)}_{n\mathbf{k}} = g \sum_{n'} \frac{\langle \Psi^{(0)}_{n'\mathbf{k}} | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) | \Psi^{(0)}_{n\mathbf{k}} \rangle}{E^{(0)}_{n\mathbf{k}} - E^{(0)}_{n'\mathbf{k}}} \Psi^{(0)}_{n'} \quad (27)$$

W konsekwencji, wprowadzone pole magnetyczne $\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$ sprawia, że zarówno oczekiwana wartość spinu $\langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \sigma_i | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle$, jak i elementy macierzowe $\langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H} A | \Psi_{n'\mathbf{k}} \rangle$ są niezerowe, co prowadzi do polaryzacji spinów w grafenie indukowanej światłem.

Effekt oddziaływania światła o energii $\hbar\omega$ ze spinami elektronów walencyjnych przedstawiono na rysunku 16(a,b). Analiza numeryczna wykazała, że niezerowa gęstość spinowa jest indukowana tylko wtedy, gdy wektor polaryzacji światła jest prostopadły do kierunku pola magnetycznego. W rozważanym przypadku przyjęto $\mathbf{B} = [B, 0, 0]$ oraz wektor polaryzacji światła $\mathbf{A}_0 = [0, A_0, 0]$.

Warto również zwrócić uwagę na efektywność wstrzykiwania spinu, przedstawioną na rysunku 16(b). Efektywność tę definiujemy jako stosunek średniej wartości wstrzykiwanego spinu $\tilde{J}(\omega)$ do absorpcji pojedynczego fotonu $\tilde{I}(\omega)$, co można zapisać jako:

$$\left| \frac{\tilde{J}(\omega)}{\tilde{I}(\omega)} \right|. \quad (28)$$

Analiza numeryczna wykazała, że efektywność generowania polaryzacji spinowej za pomocą światła jest w przybliżeniu rzędu $gB/\lambda \simeq 0.6/2.5 = 0.24$, co jest zgodne z uzyskanymi wynikami.

Podsumowanie

W przedstawionej pracy omówiono mechanizmy oddziaływania światła z jednowarstwowym grafenem, uwzględniając zarówno absorpcję promieniowania, jak i możliwość optycznej polaryzacji spinów elektronów.

Analiza absorpcji światła wykazała, że w rzeczywistych eksperymentach spektroskopowych rejestrowana jest suma wkładów od różnych przejść międzypasmowych wynikających ze struktury pasmowej. Wykazano, że wpływ podłoża na grafen prowadzi do zmian w widmie absorpcji dla energii fotonów w zakresie $0 < \hbar\omega \leq 3\alpha$, natomiast dla wyższych poziomów energii spektrum zmienia charakter na zależność liniową która, zgodnie z wynikami doświadczalnymi prowadzi do stałej wartości absorpcji promieniowania elektromagnetycznego.

Główna część rozdziału poświęcona została analizie bezkontaktowego indukowania gęstości spinowej w grafenie poprzez spinowo-zależne przejścia międzypasmowe (*spin-flip transitions*). Wprowadzono formalizm opisujący tempo wstrzykiwania nierównowagowej gęstości spinowej, pokazując, że bez zewnętrznego pola magnetycznego efektywność tego procesu jest zerowa. Natomiast w obecności pola magnetycznego $\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$ równoległego do płaszczyzny grafenu, pasma energetyczne ulegają przesunięciu, co prowadzi do niezerowej polaryzacji spinowej indukowanej światłem.

Obliczenia wykazały, że efektywność optycznego pompowania spinowego zależy od wzajemnej orientacji wektora polaryzacji światła i pola magnetycznego – największa polaryzacja spinowa jest uzyskiwana, gdy wektor polaryzacji światła jest prostopadły do kierunku pola magnetycznego. Numeryczne wyniki wskazują, że efektywność wstrzykiwania spinów wynosi około $gB/\lambda \approx 0.24$, co jest zgodne z przewidywaniami teoretycznymi.

Przedstawione dopuszczają możliwość kontrolowanego sterowania spinami elektronów w grafenie za pomocą światła, co otwiera nowe perspektywy dla zastosowań w optospintronice.

[H1] - Wkład do pracy polegał na: sformułowaniu koncepcji pracy, opracowaniu metodologii obliczeń, wykonaniu obliczeń analitycznych, przygotowaniu kodu oraz wykonaniu obliczeń numerycznych z prezentacją wizualną wyników, wstępne przygotowanie manuskryptu, udział w procesie redakcyjnym publikacji, prowadzenie korespondencji z redakcją.

[H3] M. Inglot, V.K. Dugaev, E.Ya. Sherman, J. Barnaś, *Enhanced photogalvanic effect in graphene due to Rashba spin-orbit coupling*, *Phys. Rev. B* **91**, 195428 (2015)

Model Generacja prądu ładunkowego za pomocą światła jest również możliwa w układzie dokładnie takim jak zaprezentowany w pracy [H1]. Kiedy efekt indukowania światłem prądu ładunkowego (elektrycznego) zachodzi w obecności zewnętrznego pola magnetycznego $\mathbf{B} \neq 0$, mamy do czynienia z efektem fotogalwanicznym.

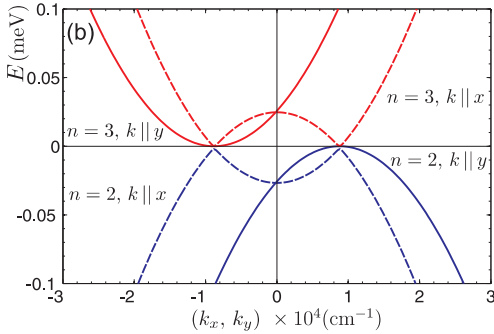
Z uwagi na to, że model układu fizycznego jest identyczny jak w pracy [H1], to do opisu struktury pasmowej wykorzystuję również hamiltonian (22). Hamiltonian oddziaływania elektronów w grafenie z periodycznym polem elektromagnetycznym przyjmuję w postaci (23), natomiast sam efekt fotogalwaniczny opisuję przy użyciu reguły Fermiego (FGR) (26). W tym przypadku operator prądu definiuję jako $\hat{I}_i \equiv e\hat{v}_i$, gdzie e to jednostkowy ładunek elektryczny (w mojej pracy przyjmuję $e = 1$), a operatory prędkości w kierunkach x i y zapisuję jako $\hat{v}_x = \pm v_F \tau_x$ i $\hat{v}_y = \pm v_F \tau_y$.

Formalnie, regułę Fermiego można zapisać jako:

$$\mathcal{O}^{n \rightarrow n'}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left| \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H}_A | \Psi_{n'\mathbf{k}} \rangle \right|^2 \hat{O}^{n \rightarrow n'} \delta(E_{n\mathbf{k}} + \hbar\omega - E_{n'\mathbf{k}}) f(E_{n\mathbf{k}}) [1 - f(E_{n'\mathbf{k}})]. \quad (29)$$

Tym razem szukana różnica wartości oczekiwanych operatora $\hat{I}_i$ przyjmuje postać:

$$\hat{O}^{n \rightarrow n'} \equiv \langle \Psi_{n'\mathbf{k}} | \hat{I}_i | \Psi_{n'\mathbf{k}} \rangle - \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{I}_i | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle. \quad (30)$$



Rysunek 17: Dyspersja stanów niskoenergetycznych dla wskazanych orientacji wektora falowego. Na rysunku zaznaczono także indeks pasm. Przyjęte pole magnetyczne $B \parallel x$ wynosi 5T.

Rozważając prąd elektryczny indukowany światłem, warto przyjrzeć się pasmom $n = 2$ i $n = 3$, które przedstawiam na rysunku 17. W otrzymanym widmie można zauważyć przesunięcie pasm w dwóch kierunkach: dla $\mathbf{k} \parallel x$ i $\mathbf{k} \parallel y$ w obecności zewnętrznego pola magnetycznego ($\mathbf{B} \neq 0$). Pasma te mieszają się, powodując przesunięcia zarówno w kierunku ($\mathbf{k} \parallel x$), jak i dla ($\mathbf{k} \parallel y$) względem pozycji $k = 0$.

Analizując te przesunięcia można dostrzec, że są one związane z asymetrią energii w układzie ze spinowo-rozdziałonymi pasmami. Szczególnie istotna okazuje się rola efektu Zeemana, który prowadzi do rozszczepienia poziomów energetycznych w pobliżu $E = \pm gB$. Właśnie te zmiany mają kluczowe znaczenie dla wzmocnienia

fotogalwanicznego efektu w jednowarstwowym grafenie. Aby to zjawisko opisać w sposób ilościowy, można przyjąć aproksymację słabej energii Zeemana ($gB \ll \alpha$) oraz warunku pędu elektronów ($k \gg \sqrt{\alpha g B}/v$), co prowadzi do wyrażenia:

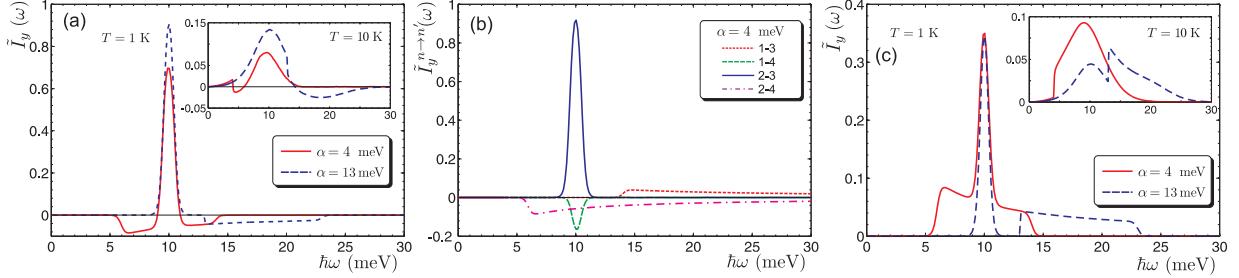
$$E_{n,k}(B) - E_{n,k}(B = 0) = \mp \frac{gB}{2} \frac{v_k}{v_F} \sin \theta, \quad (31)$$

gdzie $v_k = v_F \times vk/\sqrt{\lambda^2 + v^2 k^2}$ określa bezwzględną prędkość elektronów dla $\alpha \neq 0$ i przy $B = 0$. Znaki górny i dolny odnoszą się odpowiednio do pasm $n = (1, 4)$ oraz $n = (2, 3)$.

W praktyce oznacza to, że w obecności zewnętrznego pola magnetycznego, zaobserwować można istotne zmiany w dynamice elektronów, które przekładają się na możliwość kontrolowania

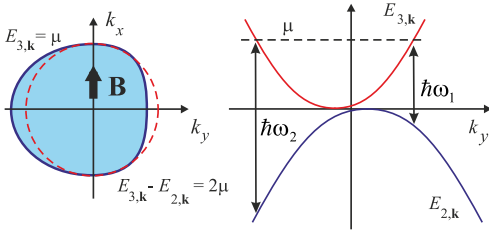
generacji prądu ładunkowego poprzez odpowiedni dobór parametrów zewnętrznych. W szczególności, poprzez zmianę wartości pola magnetycznego i częstotliwości FE. Parametry te mogą wpływać na intensywność i kierunek generowanego prądu, co stanowi istotny krok w stronę wykorzystania tych efektów w przyszłych zastosowaniach spintronicznych i optoelektronicznych.

Wyniki W wyniku obliczeń numerycznych (korzystając ze wzorów (29) i (30)) obliczyłem prąd ładunkowy $\tilde{I}(\omega)$ indukowany spolaryzowanym światłem o potencjale wektorowym $\mathbf{A}(t)$.



Rysunek 18: (a) Znormalizowany prąd ładunkowy – $\tilde{I}_y$ w przypadku niskiej temperatury $T = 1$ K ($T = 10$ K rysunek wewnętrzny). Siła sprzężenia Rashby SO wynosi $\alpha = 4$ meV (czerwona linia ciągła) i $\alpha = 13$ meV (niebieska linia przerywana). Potencjał chemiczny $\mu = 5$ meV, B jest równoległy do osi x ($B = 5$ T), natomiast $A \parallel B$. (b) Udział wskazanych przejść międzypasmowych w całkowitym prądzie przedstawionym w (a) dla $\alpha = 4$ meV. (c) Znormalizowany prąd ładunkowy $\tilde{I}_y$ dla B równoległego do osi x przy $A \perp B$.

W rozważanym przypadku przejścia optyczne rozpoczynają się od energii $\hbar\omega \approx 2\mu - \alpha$ dla $\mu \geq \alpha$ lub $\hbar\omega \approx 2\mu$ w innych przypadkach. W obu sytuacjach ostry pik w generacji prądu ładunkowego obserwować można dla energii $\hbar\omega \approx 2\mu$. Jednocześnie zauważyć można, że pik ten jest silniejszy dla polaryzacji fotonów o składowej równoległej do pola magnetycznego $\mathbf{A} \parallel \mathbf{B}$ (porównaj Rysunki 18(a) i (c)) niż w przypadku gdy statyczne pole magnetyczne jest prostopadłe do wektora polaryzacji światła $\mathbf{A} \perp \mathbf{B}$.



Rysunek 19: Z lewej: Schematyczny obraz linii Fermiego (ciągła) i linii rezonansowej (przerywana) dla wybranych pasm. Przejścia optyczne możliwe są jedynie w części linii przerywanej poza wypełnionym obszarem. Każde przejście generuje prąd rzędu $2evk_F$, dzięki czemu wytwarzanie jest bardzo wydajne. Po prawej: Widok z boku przejść międzypasmowych, które mogą wystąpić w przedziale częstotliwości $\omega_1 \leq \omega \leq \omega_2$.

Do opisanego mechanizmu efektywnego wstrzykiwania ładunków w grafenie indukowanego światłem należy przeanalizować rysunek (19) gdzie schematycznie pokazane są linie Fermiego (dla energii $\mu \gg gB$) i rezonansowa dla przejść optycznych pomiędzy pasmami $n = 2$ i $n = 3$. W tej sytuacji z równania (31) otrzymamy wektor falowy Fermiego o długości

$$\hbar k_F = \frac{\sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu}}{v_F} \mp \frac{gB}{2v_F} \sin \theta, \quad (32)$$

co daje dla poszczególnych kierunków brzegi powierzchni Fermiego w postaci:

$$-\frac{\sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu}}{v_0} - \frac{\Delta}{2v_0} < \hbar k_{F,y} < \frac{\sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu}}{v_0} - \frac{\Delta}{2v_0}, \quad (33a)$$

$$-\frac{\sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu}}{v_0} < \hbar k_{F,x} < \frac{\sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu}}{v_0}. \quad (33b)$$

Z uwagi na zależność od $\mathbf{k}$ oddziaływania Zeemana sfera Fermiego jest zdeformowana i anizotropowa (pasma z lewej strony rysunku (19)). Maksimum deformacji (piku) jest niezależne od potencjału chemicznego i sprzężenia SO dlatego linia rezonansowa jest ciągle okręgiem danym wzorem

$$\hbar k_\omega = \frac{\sqrt{\hbar^2 \omega^2 / 4 + \lambda \hbar \omega}}{v_F}. \quad (34)$$

Jak można zauważyć, część linii rezonansowej znajduje się w obszarze o energii $E_{3,\mathbf{k}} = \mu$ (lewa strona rysunku (19)), a pozostała poza nim. W przypadku przejść prostopadłych szerokość pików rezonansowych pochodzi od energii ($\hbar\omega_1, \hbar\omega_2$). Jeżeli $E_{3,\mathbf{k}} - E_{2,\mathbf{k}} = \hbar\omega$ jest energią rezonansową fotonów, to dla potencjału chemicznego μ będzie ona równa $\hbar\omega = 2\mu$, a graniczne energie w rozważanym przypadku dla $\mu \gg gB$ mają postać

$$\hbar\omega_1 = 2\mu - \Delta \frac{v_{k_F}}{v_0}, \quad (35)$$

$$\hbar\omega_2 = 2\mu + \Delta \frac{v_{k_F}}{v_0}, \quad (36)$$

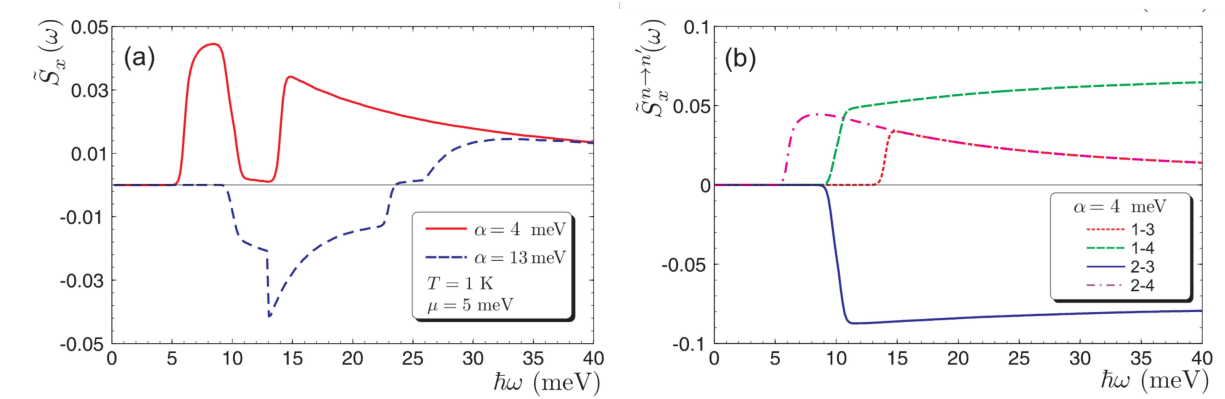
tym samym szerokość pików rezonansowych określić można jako

$$\hbar(\omega_2 - \omega_1) = 2 \frac{\sqrt{\mu^2 + 2\lambda\mu}}{\mu + \lambda} \Delta. \quad (37)$$

Przedstawione obliczenia fotogalwanicznego efektu w grafenie wykonane były dla temperatury $T = 1$ K, natomiast przyglądając się rysunkom na Rys. 18(a,c) możemy zauważyć wpływ rosnącej temperatury na wysokość i szerokość pików rezonansowych. Zmiany te podyktowane są zależnością temperaturową w funkcjach rozkładu Fermiego-Diraca.

W dalszej części pracy [H3] przedstawiona została polaryzacja spinów w kontekście możliwej generacji prądu spinowego w rozważanym układzie grafenu w zewnętrznym polu magnetycznym.

Dla kompletności analizy pokrótce przedstawię zagadnienie indukowania gęstości spinowej i generowania prądu spinowego [95]. Dla obu polaryzacji światła padającego uzyskaliśmy niezerową polaryzację spinu wzdłuż osi x i y . Wyniki obliczeń numerycznych przedstawiono na rys. 20(a) dla całkowitej polaryzacji spinowej S_x , natomiast rys. 20(b) przedstawia polaryzację spinową związaną z określonymi przejściami optycznymi. Ogólnie, fizyczny mechanizm optycznie wstrzykiwanego spinu jest jasny, przejścia optyczne spin-flip są związane głównie z faktem, że stany własne hamiltonianu (22) nie są stanami własnymi spinu. Również łamanie symetrii odwrócenia czasu przez pole magnetyczne pozwala na wstrzykiwanie gęstości spinu. Ponieważ kierunek przepływu prądu elektrycznego przebiega wzdłuż osi y , uzyskujemy efektywny prąd spolaryzowany spinowo, przenoszący w płaszczyźnie spin o składowej w kierunku y .



Rysunek 20: (a) Całkowity wstrzykiwany spin $\tilde{S}_x = \sum_{n,n'} \tilde{S}_x^{n \rightarrow n'}$. Stała sprzężenia oddziaływania spin-orbita Rashby $\alpha = 4$ meV (ciągła czerwona linia) i $\alpha = 13$ meV (linia przerywana niebieska), potencjał chemiczny $\mu = 5$ meV i indukcja pola magnetycznego $B = 5$ T. Orientacja $\mathbf{A}$ i $\mathbf{B}$ są równoległe do osi x . (b) Przejścia międzypasmowe dla wstrzykiwanego spinu $\tilde{S}_x^{n \rightarrow n'}$.

Prąd elektryczny wstrzykiwany jest tylko w skończonym zakresie częstotliwości światła podczerwonego, określonego przez potencjał chemiczny μ i siłę sprzężenia spin-orbita (SOR). Charakterystyczną cechą tego procesu jest wąski pik przy częstotliwości rezonansowej $\omega \approx 2\mu$, co może być bardzo skuteczne.

Podsumowanie

W analizowanym przypadku efekt fotogalwaniczny w grafenie jest związany z pojawieniem się prądu ładunkowego (elektrycznego). Przejścia optyczne związane z oddziaływaniem fali elektromagnetycznej z materią prowadzą do wzbudzenia elektronów, co skutkuje generowaniem prądu elektrycznego w strukturze materiału. Istotnym aspektem tego procesu jest jego silna zależność od częstotliwości padającego światła, zwłaszcza w okolicach rezonansu, gdy częstotliwość światła jest bliska 2μ , dla której proces można nazwać efektywnym.

Prąd ładunkowy (elektryczny) jest wstrzykiwany w określonym zakresie terahercowej częstotliwości światła, którego pasmo zależy od potencjału chemicznego μ grafenu oraz wartości sprzężenia spin-orbita. W wyniku oddziaływania fotonów z elektronami, dochodzi do zmian w koncentracji nośników ładunku w grafenie, co umożliwia kontrolowaną generację prądu. Dodatkowo, zmiany temperatury wpływają na rozkład Fermiego-Diraca, co może modyfikować szerokość i wysokość piku rezonansowego, a tym samym wpłynąć na efektywność opisanego powyżej procesu.

Całkowita generacja prądu ładunkowego w grafenie może być kontrolowana poprzez odpowiedni dobór częstotliwości światła i parametry materiału, takie jak potencjał chemiczny i sprzężenie spin-orbita, otwiera to możliwości zastosowań w optoelektronice, takich jak fotodetektory czy ogniwa fotowoltaiczne.

[H3] - Wkład do pracy polegał na: sformułowaniu koncepcji pracy, opracowaniu metodologii obliczeń, wykonaniu większości obliczeń analitycznych, przygotowaniu kodu oraz wykonaniu obliczeń numerycznych z prezentacją wizualną wyników, wstępne przygotowanie manuskryptu, udział w procesie redakcyjnym publikacji, prowadzenie korespondencji z redakcją.

[H5] M. Inglot, V.K. Dugaev, J. Berakdar, E.Ya. Sherman, J. Barnaś, *Charge and spin currents in graphene generated by tailored light with orbital angular momentum*, *Appl. Phys. Lett.* **112**, 231102 (2018)

Model Kolejna praca poświęcona jest również oddziaływaniu fali elektromagnetycznej z grafenem. Przedstawiono w niej możliwość generacji polaryzacji spinowej $\tilde{S}_i$, prądu ładunkowego $\tilde{J}_j$ oraz prądu spinowego $\tilde{J}_j^i$ w płaszczyźnie grafenu. W niniejszej pracy zbadałem jednak zupełnie inny charakter pola elektromagnetycznego. Rozważany model fali elektromagnetycznej przedstawia wiązkę światła z orbitalnym momentem pędu (ang. orbital angular momentum, OAM). Możliwość wytwarzania wiązki promieniowania o potencjale wektorowym opisanym funkcją Bessela na dużych odległościach została przedstawiona przez grupę naukowców z Niemiec w 2019 roku [96].

W moich obliczeniach przyjąłem potencjał wektorowy $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ w postaci wzoru (38) który opisuje falę elektromagnetyczną z wykorzystaniem funkcji Bessela $J_\ell(qr)$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i(q_z z - \omega t)} \left[\boldsymbol{\epsilon}_\eta, J_\ell(qr), e^{i\ell\theta} - i\eta \hat{\mathbf{z}}, \frac{q}{q_z} J_{\ell+\eta}(qr) e^{i(\ell+\eta)\theta} \right] + \text{c.c.}, \quad (38)$$

gdzie wektor polaryzacji $\boldsymbol{\epsilon}_\eta = \hat{\mathbf{x}} + i\eta \hat{\mathbf{y}}$, a parametr $\eta = \pm 1$ zmienia kierunek cyrkulacji kołowej fali (prawo- lub lewoskrętność). Parametrami charakteryzującymi falę Bessela i mającymi wpływ na odpowiedź optyczną grafenu są: orbitalna liczba kwantowa ℓ oraz wektor falowy $\mathbf{q} = (q, \phi, q_z)$.

W tym przypadku hamiltonian oddziaływania fali elektromagnetycznej (FE) z grafenem można zapisać jako:

$$\hat{H}_A = -\frac{2A_0 e v_F J_\ell(qr)}{c} \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\omega t - \ell\theta)} \\ e^{-i(\omega t - \ell\theta)} & 0 \end{pmatrix}. \quad (39)$$

Zakładając, że stosunek A_0^2/ω^2 jest mały oraz q jest znacznie mniejsze niż wektor falowy Fermiego to wykorzystując ponownie FGR, absorpcję promieniowania opisałem wzorem:

$$I(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{n, n', \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left| \langle n\mathbf{k} | \hat{H}_A | n'\mathbf{k}' \rangle \right|^2 \delta(E_{n\mathbf{k}} + \hbar\omega - E_{n'\mathbf{k}'}) f(E_{n\mathbf{k}}) [1 - f(E_{n'\mathbf{k}'})], \quad (40)$$

gdzie funkcje własne przedstawić można jako $|n\mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_{n\mathbf{k}}/\sqrt{\Omega}$, a Ω jest powierzchnią próbki. Bispinor $\chi_{n\mathbf{k}}$ jest wektorem własnym hamiltonianu (22).

Przestrzennie niejednorodna fala elektromagnetyczna indukuje przejścia międzypasmowe pomiędzy stanem $|n\mathbf{k}\rangle$ i $|n'\mathbf{k}'\rangle$, co można opisać elementami macierzowymi:

$$\langle n\mathbf{k} | \hat{H}_A | n'\mathbf{k}' \rangle = -\frac{2A_0 e v_F}{c\Omega} \int_0^R r, dr, J_\ell(qr) \int_{-\pi}^{\pi} d\theta, e^{i\kappa r \cos\theta} \chi_{n\mathbf{k}}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\omega t - \ell\theta)} \\ e^{-i(\omega t - \ell\theta)} & 0 \end{pmatrix} \chi_{n'\mathbf{k}'}. \quad (41)$$

gdzie $\kappa = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$, R jest promieniem próbki, a $\Omega = \pi R^2$.

Ostatecznie, po obliczeniu wektora Poyntinga $\mathbf{S} = \frac{c}{8\pi} [\mathbf{E}^* \times \mathbf{B} + \mathbf{E} \times \mathbf{B}^*]$, uzyskujemy relację na absorpcję promieniowania z potencjałem wektorowym OAM w jednostkach $I_0 = \frac{\pi e^2 Q}{\hbar c}$, którą wyrażamy jako:

$$\frac{I(\omega)}{I_0} = P_0 \sum_{nn'} \int d^2\mathbf{k} \int_0^{2\pi} d\varphi \left| \chi_{n\mathbf{k}}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \chi_{n',\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right|^2 \times \delta(E_{n\mathbf{k}} + \hbar\omega - E_{n',\mathbf{k}+\mathbf{q}}) f(E_{n\mathbf{k}}), [1 - f(E_{n',\mathbf{k}+\mathbf{q}})], \quad (42)$$

gdzie P_0 jest zdefiniowane jako:

$$P_0 = 32, v^2 \omega \left[\hbar q^3 R \Omega, (c^2 q^2 + 2\omega^2) B_\ell \right]^{-1}, \quad (43)$$

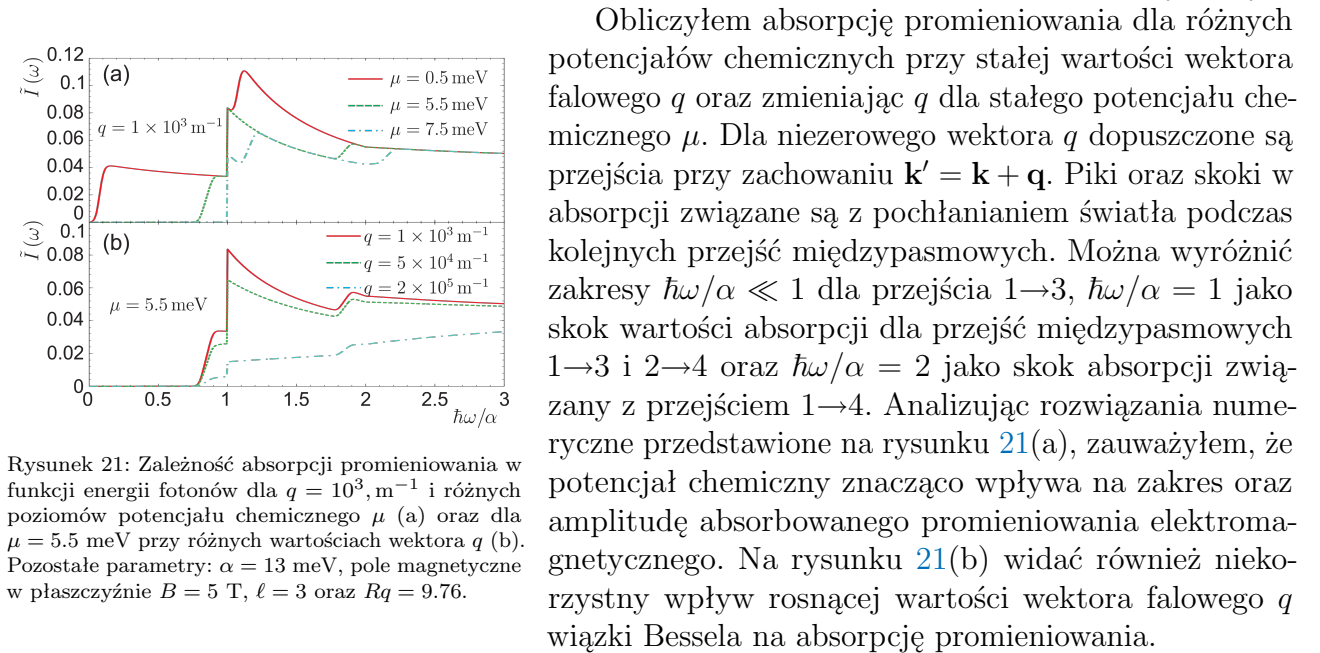
a funkcja B_ℓ ma postać:

$$B_\ell = -2\ell J_\ell(Rq) J_{\ell+1}(Rq) + Rq, [J_\ell^2(Rq) + J_{\ell+1}^2(Rq)]. \quad (44)$$

Korzystając z powyższych zależności, zdefiniowałem *złotą regułę Fermiego* dla obliczania indukowania nierównowagowego prądu spinowego i elektrycznego oraz gęstości spinowej, jako:

$$\frac{O(\omega)}{I_0} = P_0 \sum_{nn'} \int d^2\mathbf{k}, \int d\varphi \left| \chi_{n\mathbf{k}}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \chi_{n'\mathbf{k}'} \right|^2 \times (\langle n'\mathbf{k}' | \hat{O} | n'\mathbf{k}' \rangle - \langle n\mathbf{k} | \hat{O} | n\mathbf{k} \rangle), \delta(E_{n\mathbf{k}} + \hbar\omega - E_{n'\mathbf{k}'}) \times f(E_{n\mathbf{k}}), [1 - f(E_{n'\mathbf{k}'})] \Big|_{\mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \quad (45)$$

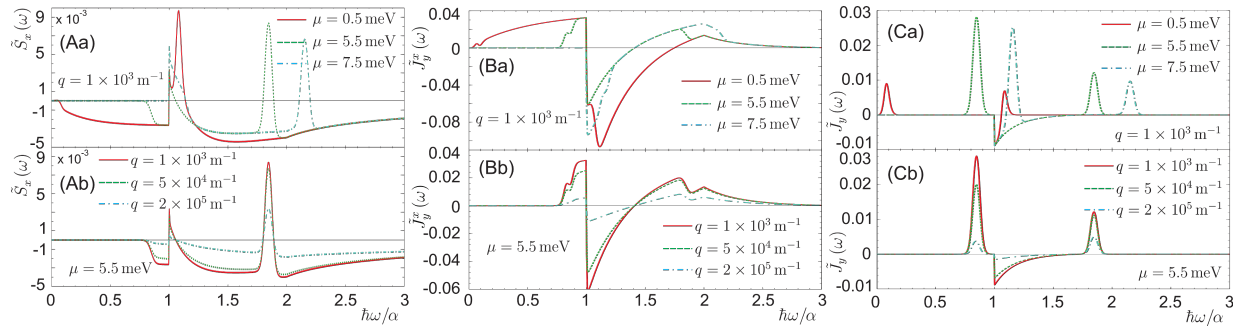
Podobnie jak w pracach [H1], [H3], zdefiniowałem operator prądu spinowego, gęstości spinowej i prądu elektrycznego: $\hat{O} = \hat{J}_j^i, \hat{S}_i$, lub $\hat{J}j$. Operator prądu spinowego określiłem jako antykomutator: $\hat{J}j^i = \{\sigma_i, \hat{v}_j\}/2$, gdzie σ_i to macierz Pauliego, a $\hat{v}_j = v_F \tau_j$ jest operatorem prędkości. Gęstość spinowa i operator prądu spinowego opisałem wzorami: $\hat{S}_i = \sigma_i, \hat{J}_j = e \hat{v}_j$.



Rysunek 21: Zależność absorpcji promieniowania w funkcji energii fotonów dla $q = 10^3, \text{m}^{-1}$ i różnych poziomów potencjału chemicznego μ (a) oraz dla $\mu = 5.5 \text{ meV}$ przy różnych wartościach wektora q (b). Pozostałe parametry: $\alpha = 13 \text{ meV}$, pole magnetyczne w płaszczyźnie $B = 5 \text{ T}$, $\ell = 3$ oraz $Rq = 9.76$.

Obliczyłem absorpcję promieniowania dla różnych potencjałów chemicznych przy stałej wartości wektora falowego q oraz zmieniając q dla stałego potencjału chemicznego μ . Dla niezerowego wektora q dopuszczone są przejścia przy zachowaniu $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$. Piki oraz skoki w absorpcji związane są z pochłanianiem światła podczas kolejnych przejść międzypasmowych. Można wyróżnić zakresy $\hbar\omega/\alpha \ll 1$ dla przejścia 1→3, $\hbar\omega/\alpha = 1$ jako skok wartości absorpcji dla przejść międzypasmowych 1→3 i 2→4 oraz $\hbar\omega/\alpha = 2$ jako skok absorpcji związany z przejściem 1→4. Analizując rozwiązania numeryczne przedstawione na rysunku 21(a), zauważyłem, że potencjał chemiczny znacząco wpływa na zakres oraz amplitudę absorbowanego promieniowania elektromagnetycznego. Na rysunku 21(b) widać również niekorzystny wpływ rosnącej wartości wektora falowego q wiązki Bessela na absorpcję promieniowania.

Należy wspomnieć, że dla wybranego kierunku pola magnetycznego (wzdłuż osi x) składowe $\tilde{S}_y, \tilde{S}_z, \tilde{J}_x, \tilde{J}_y$ i $\tilde{J}_z$ są równe zero. Główne wyniki mojej pracy przedstawia rysunek 22, gdzie Aa (Ab), Ba (Bb) i Ca (Cb) ilustrują odpowiednio gęstość spinową, prąd spinowy i prąd



Rysunek 22: Gęstość spinu generowana przez światło $\tilde{S}_x$, prąd spinowy $\tilde{J}_y^x$ oraz prąd ładunkowy $\tilde{J}_y$ dla różnych potencjałów chemicznych μ (Aa), (Ba) i (Ca); oraz dla różnych wartości parametru q (Ab), (Bb) i (Cb). Pozostałe parametry jak na rysunku 21.

elektryczny dla różnych wartości potencjału chemicznego μ oraz parametru q wiązki Bessela. Analizując rozwiązania numeryczne, zauważyłem, że zmiany pików rezonansowych silnie zależą od położenia potencjału chemicznego, co może pozwolić na kontrolowanie efektów optycznych poprzez modyfikację potencjału chemicznego w grafenie.

Charakter i analiza otrzymanych wyników są dość skomplikowane ze względu na wkłady do indukowanych światłem wielkości fizycznych pochodzące z kilku przejść międzypasmowych. Mimo to zaobserwowałem, że istnieją takie przedziały energii promieniowania, dla których można spodziewać się czystego indukowania prądu spinowego czy gęstości spinowej bez udziału przepływu prądu ładunkowego.

Zaprezentowane wyniki wskazują na istotną zmianę gęstości spinu oraz generacji prądu elektrycznego i spinowego w zależności od wartości parametru q fali OAM. Główną przyczyną tej zależności jest modyfikacja elementów macierzy oddziaływania elektronów z polem elektromagnetycznym OAM. Dodatkowo, niezerowa składowa poprzeczna q wektora falowego w polu elektromagnetycznym umożliwia skośne przejścia międzypasmowe elektronów dla wektora falowego q zorientowanego w płaszczyźnie grafenu.

W moich rozważaniach założyłem zewnętrzne pole magnetyczne równoległe do płaszczyzny grafenu. Jak pokazują wyniki, pole to znacząco zwiększa wielkość prądu spinowego indukowanego przez absorpcję światła. Zauważyłem również, że stosując światło charakteryzujące się orbitalnym momentem pędu OAM o parametrach ℓ i q , można zwiększyć wydajność i sterowalność generowania spinu lub prądu elektrycznego/spinowego.

Podsumowanie

W przedstawionej pracy przeanalizowałem absorpcję promieniowania podczerwonego zawierającego orbitalny moment pędu (OAM) w grafenie z oddziaływaniem Rashby. Przedstawione wyniki pokazują znaczącą zmianę zarówno w gęstości spinu, jak i w generacji prądu spinowego oraz ładunkowego w zależności od parametru q FE OAM w stosunku do liniowej polaryzacji światła.

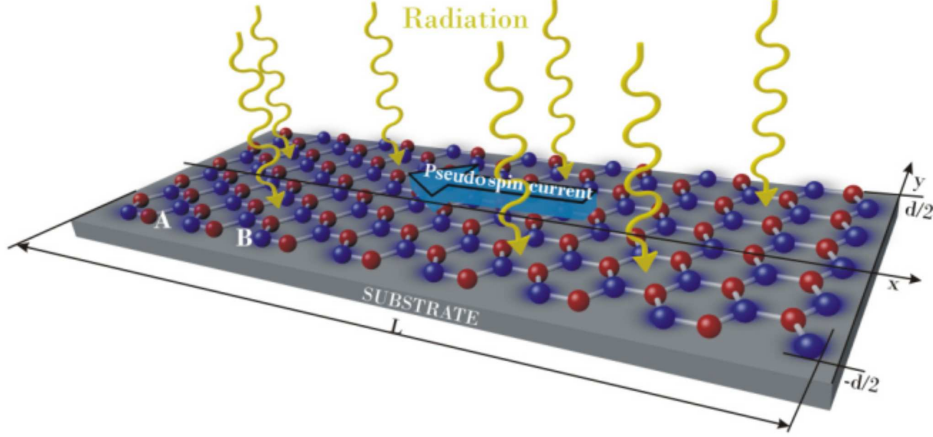
Głównym powodem tej zależności jest modyfikacja elementów macierzowych opisujących oddziaływanie elektronów z polem elektromagnetycznym OAM. Ponadto, niezerowa poprzeczna składowa q wektora falowego umożliwia skośne przejścia międzypasmowe elektronów z $k' = k + q$.

W analizie założono obecność zewnętrznego pola magnetycznego leżącego w płaszczyźnie. Jak wykazałem, pole to znacząco zwiększa wielkość prądu spinowego indukowanego przez absorpcję światła. W podsumowaniu można stwierdzić, że stosowanie światła OAM o odpowiednich parametrach ℓ i q pozwala na znaczące zwiększenie efektywności i kontroli nad generacją prądu spinowego oraz ładunkowego indukowanego optycznie.

[H5] - Wkład do pracy polegał na: sformułowaniu koncepcji pracy, opracowaniu metodologii obliczeń, wykonaniu większości obliczeń analitycznych, przygotowaniu kodu oraz wykonaniu obliczeń numerycznych z prezentacją wizualną wyników, wstępne przygotowanie manuskryptu, udział w procesie redakcyjnym publikacji, prowadzenie korespondencji z redakcją.

[H6] M. Inglot, V.K. Dugaev, J. Berakdar, J. Barnaś, *Light absorption and pseudospin density generation in graphene nanoribbons*, *Phys. Rev. B* **100**, 165406 (2019)

Model W przypadku pracy [H6] podjąłem badania paska grafenowego o szerokości d i długości L , gdzie $d \ll L$ co oznacza silne ograniczenie w jednym kierunku Rys.23. Ze względu na niskoenergetyczne stany elektronowe zastosowałem opis elektronowego spektrum oparty na równaniu Diraca, uwzględniając odpowiednie warunki brzegowe, znane jako warunki Berry’ego-Mondragona, dla brzegów typu *armchair*. [97]



Rysunek 23: Rysunek schematyczny paska grafenowego z brzegami *armchair* o szerokości d i długości L .

W modelu przyjąłem, że oś x leży wzdłuż paska grafenu, a oś y jest do niego prostopadła. Dla doliny K hamiltonian przyjął postać

$$\hat{H} = -iv(\tau_x \nabla_x + \tau_y \nabla_y) + \tau_z \Delta^K(y), \quad (46)$$

gdzie

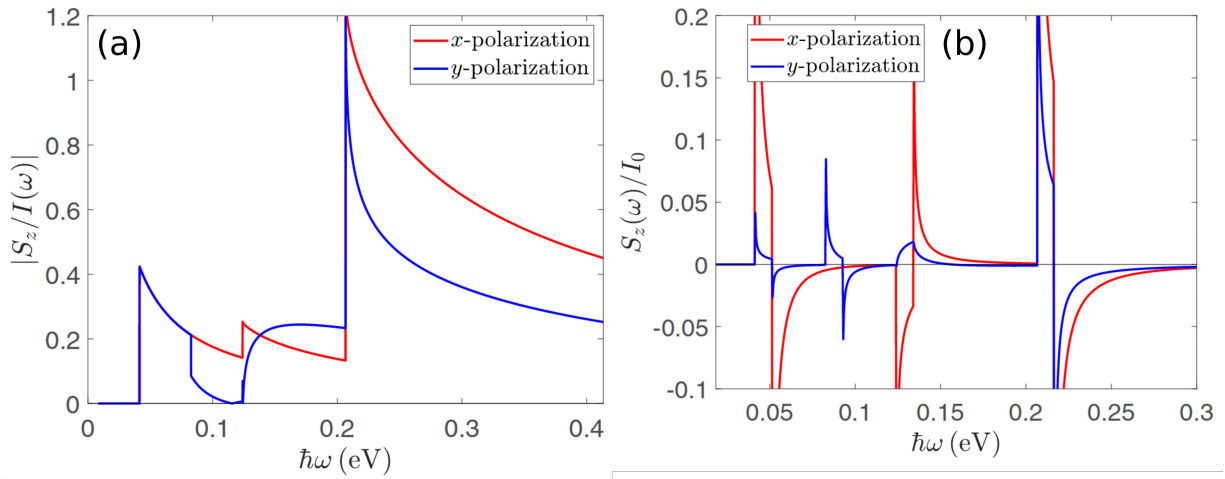
$$\Delta^K(y) = \begin{cases} 0, & |y| < d/2 \\ \Delta_0, & |y| \geq d/2 \end{cases}, \quad (47)$$

z Δ_0 odpowiadającej energii próżni ($\Delta_0 \rightarrow \infty$).

W rozwiązaniu problemu wykorzystano równanie Schrödingera $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$ dla spinorowej funkcji falowej $\psi^T = (\varphi, \chi)$. Dla przypadku $k_x = 0$ oraz w granicy $|\Delta_0| \rightarrow \infty$ określono symetryczne i asymetryczne funkcje falowe, analizując stany elektronowe na brzegach paska. W szczególności wyznaczyłem spinory odpowiadające pseudospinowym stanom „górną” i „dół” w podsieci grafenu.

Stosując przybliżenie $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dla $k_x \neq 0$, obliczyłem elementy macierzowe hamiltonianu i wyznaczyłem strukturę pasmową elektronów w nanowstążce grafenowej (pasku grafenowym). Zgodnie z oczekiwaniami, widmo energetyczne wykazuje przerwę energetyczną, której wartość zależy od szerokości paska i wynosi $2\varepsilon_a = \pi/d$.

Dla tak określonej struktury przeprowadziłem analizę absorpcji promieniowania elektromagnetycznego. Wykorzystałem do tego regułę Fermiego (FGR), a hamiltonian opisujący oddziaływanie grafenu z polem elektromagnetycznym spolaryzowanym wzdłuż osi y wyznaczyłem w postaci:



Rysunek 24: Efektywność pompowania pseudospinu w pasku grafenowym dla polaryzacji światła wzdłuż (linie czerwone) i prostopadle (linie niebieskie) do paska (w kierunkach x i y) (a). Znormalizowana gęstość pseudospinu indukowana absorpcją światła przy rozszczepieniu dwóch dolin $E = E_K - E_{K'} = 0.01$ eV dla różnej polaryzacji światła (b).

$$\hat{H}_A = \frac{ev_F}{c} \begin{pmatrix} 0 & \frac{2iA_y}{\pi} & 0 & -\frac{2iA_y}{3\pi} & 0 & A_x + \frac{2iA_y}{5\pi} \\ -\frac{2iA_y}{\pi} & 0 & -\frac{2iA_y}{\pi} & 0 & A_x + \frac{2iA_y}{3\pi} & 0 \\ 0 & \frac{2iA_y}{\pi} & 0 & A_x + \frac{2iA_y}{\pi} & 0 & \frac{2iA_y}{3\pi} \\ \frac{2iA_y}{3\pi} & 0 & A_x - \frac{2iA_y}{\pi} & 0 & -\frac{2iA_y}{\pi} & 0 \\ 0 & A_x - \frac{2iA_y}{3\pi} & 0 & \frac{2iA_y}{\pi} & 0 & \frac{2iA_y}{\pi} \\ A_x - \frac{2iA_y}{5\pi} & 0 & -\frac{2iA_y}{3\pi} & 0 & -\frac{2iA_y}{\pi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (48)$$

Wyniki W rozważanym przypadku można zauważyć, że na absorpcję promieniowania wpływa kierunek polaryzacji światła.

Głównym celem mojej pracy było wykazanie możliwości generowania niezerowej gęstości pseudospinu za pomocą fali elektromagnetycznej (Rys. 24). W tym celu zdefiniowałem macierz z -towej składowej pseudospinu S_z i obliczyłem różnicę przejść międzypasmowych, korzystając z złotej reguły Fermiego (FGR).

Okazuje się, że charakter generowanego pseudospinu wykazuje zależność podobną do absorbowanego promieniowania. Z obliczeń numerycznych wynika również, że polaryzacja S_z może mieć znak zarówno dodatni, jak i ujemny, a jej wartość zależy od kierunku polaryzacji światła względem orientacji paska grafenowego. Przedstawione wyniki numeryczne dotyczą doliny K . Okazuje się jednak, że indukowany światłem pseudospin jest kompensowany przez istnienie drugiej doliny w grafenie, K' .

Z uwagi na tę równowagę wprowadziłem czynnik różnicujący energię obu dolin $\Delta = 0.01$ eV. Ponieważ gęstość pseudospinu ma charakter ostrych pików, różnica sygnału generowanego w dolinach K i K' , wynikająca z różnicy energii, jest znacząca.

Podsumowanie

W niniejszej pracy przeanalizowałem absorpcję światła dla paska grafenowego, uwzględniając dwie polaryzacje liniowe: równoległą i prostopadłą do osi paska (nanowstążki). Wykazałem, że na skutek kwantyzacji rozmiarowej absorpcja jest wzmocniona w określonych zakresach energii fotonu w porównaniu do grafenu planarnego.

Gdy podsieci są zdegenerowane, polaryzacja pseudospinowa indukowana absorpcją światła zanika z powodu kompensacji wkładów pochodzących z dwóch dolin. Jednak wprowadzenie odpowiedniego potencjału stopniowanego prowadzi do rozszczepienia dolin, co uniemożliwia ich wzajemne znoszenie się. W efekcie absorpcja światła powoduje powstanie niezerowej gęstości pseudospinu. Może to mieć istotne znaczenie w kontekście dolintroniki, a szczególnie optodolintroniki.

Warto podkreślić, że w moim opisie generacji pseudospinu istotnym czynnikiem jest złamanie symetrii odwrócenia czasu, co umożliwia powstawanie nierównowagowej polaryzacji dolinowej na skutek absorpcji światła. Obliczając strukturę elektronową i funkcje falowe nanowstążki grafenu, wykorzystałem jednoelektronowy hamiltonian z warunkami brzegowymi Berry'ego-Mondragona.

W pracy wykazałem, że w nanostrukturalnym grafenie istnieje możliwość generowania gęstości elektronów spolaryzowanych dolinowo w wyniku absorpcji światła. Proces ten prowadzi do powstania nierównowagowego stanu stacjonarnego, w którym istnieje równowaga między generacją a relaksacją elektronów. Jednym z mechanizmów relaksacji jest mieszanie dolin wskutek rozpraszania międzypasmowego na zanieczyszczeniach i fononach. Uważam, że problem relaksacji dolinowej w nanowstążkach grafenu stanowi interesujące zagadnienie, które wymaga dalszych badań.

[H6] - Wkład do pracy polegał na: sformułowaniu koncepcji pracy, opracowaniu metodologii obliczeń, wykonaniu większości obliczeń analitycznych, przygotowaniu kodu oraz wykonaniu obliczeń numerycznych z prezentacją wizualną wyników, wstępne przygotowanie manuskryptu, udział w procesie redakcyjnym publikacji, prowadzenie korespondencji z redakcją.

[H7] M. Inglot, V.K. Dugaev, J. Barnaś, *Graphene with Rashba spin-orbit interaction and coupling to a magnetic layer: Chiral electron states at the domain wall*
Phys. Rev. B 104, 214408 (2021)

Ostatnie dwie prace z cyklu habilitacyjnego dotyczą bardzo ciekawego zagadnienia związanego z istnieniem stanów zlokalizowanych (dyskretnych) na jednowymiarowej ścianie domenowej w grafenie. Rozważymy trzy przypadki ścianki domenowej:

- magnetyczna ścianka domenowa w obecności stałego oddziaływania spin-orbitalnego Rashby,
- ścianka domenowa typu Rashby z jednorodnym namagnesowaniem grafenu,
- kombinacja obu ścianek: magnetycznej i typu Rashby.

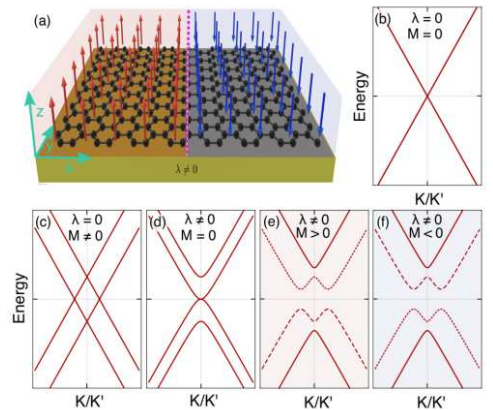
W pracy [H7] opisano przypadek magnetycznej ścianki domenowej z udziałem stałego oddziaływania spin-orbitalnego Rashby. Poniżej przedstawione zostaną najważniejsze wyniki tej pracy.

Model Rozważane zagadnienie sprowadza się głównie do wyznaczenia funkcji falowych elektronów zlokalizowanych w położeniu $x = 0$ (patrz rysunek 25), których energie znajdują się w przerwie energetycznej.

Rysunek 25 schematycznie przedstawia rozważany układ fizyczny. W części (a) pokazano grafen przykryty z obu stron warstwami funkcjonalnymi. Podłoże grafenu generuje sprzężenie spin-orbitalne Rashby o wartości $\alpha \neq 0$. Natomiast górna warstwa to dwa ferromagnetyki, gdzie dla $x < 0$ kierunek spinu (namagnesowanie) jest skierowany wzdłuż dodatnich wartości osi z (w górę) dla $x > 0$ kierunek spinu jest przeciwny. Hamiltonian opisujący ten układ zapisuję w postaci:

$$\hat{H} = -iv(\tau_x \partial_x + \tau_y \partial_y) + \lambda(\sigma_y \tau_x - \sigma_x \tau_y) + \sigma_z M(x), \quad (49)$$

Pierwszy składnik hamiltonianu (49) opisuje energię kinetyczną elektronów w grafenie, drugi uwzględnia jednorodne oddziaływanie spin-orbitalne Rashby z energią sprzężenia elektronów z podłożem równą $\lambda/2 = \alpha$, a ostatni określa wpływ namagnesowania grafenu pochodzącego od górnej warstwy, z uwzględnieniem zmiany znaku namagnesowania w funkcji położenia wzdłuż osi x .



Rysunek 25: Schematyczny obraz struktury: warstwa grafenu umieszczona pomiędzy podłożem indukującym sprzężenie spin-orbita Rashby a warstwą magnetyczną ze ścianką domenową. (b)–(f) Schematyczna struktura pasmowa grafenu przy braku namagnesowania i sprzężenia Rashby (b); w obecności namagnesowania $M = 0$ (c); w obecności sprzężenia Rashby, $\lambda = 0$ (d); oraz w obecności zarówno namagnesowania, jak i sprzężenia Rashby (e), (f). Chociaż struktura pasm dla $M > 0$ i $M < 0$ jest taka sama, pasma po obu stronach są odwrócone.

$$M(x) = \begin{cases} M_0, & x < 0, \\ -M_0, & x \geq 0, \end{cases} \quad (50)$$

Jak widać w dolnej części rysunku 25(e-f), struktura pasmowa (przy $\lambda \neq 0$ i $M \neq 0$) charakteryzuje się przerwą energetyczną, która wyrażona jest wzorem:

$$E_g = \frac{2|M_0\lambda|}{\sqrt{M_0^2 + \lambda^2}}, \quad (51)$$

gdzie M_0 jest bezwzględną wartością magnetyzacji, a λ wartością parametru sprzężenia SO Rashby. Warto podkreślić, że w przypadku, gdy jeden z tych parametrów dąży do zera ($M_0 = 0$ lub $\lambda = 0$), przerwa energetyczna zanika.

Korzystając z równania Schrödingera $(\hat{H} - \varepsilon)\psi(\mathbf{r}) = 0$ oraz biorąc pod uwagę geometrię układu, można zapisać ogólną postać funkcji falowej $\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_y y}, \psi_{k_y}(x)$, gdzie $\psi_{k_y}(x)$ jest czteroskładnikowym bispinorem:

$$\psi_{k_y}^T = (\varphi_{k_y}^\uparrow, \varphi_{k_y}^\downarrow, \chi_{k_y}^\uparrow, \chi_{k_y}^\downarrow). \quad (52)$$

W pierwszej kolejności obliczam stany zlokalizowane na ścianie domenowej w przypadku, gdy $k_y = 0$. Wtedy równania dla funkcji falowej określonej wzorem (52) dla obszarów $x < 0$ i $x > 0$ przyjmują postaci:

$$\begin{aligned} (M - \varepsilon), \varphi_0^\uparrow - iv, \partial_x \chi_0^\uparrow &= 0, \\ (M + \varepsilon), \varphi_0^\downarrow - 2i\lambda\chi_0^\uparrow + iv, \partial_x \varphi_0^\downarrow &= 0, \\ iv, \partial_x \varphi_0^\uparrow + 2i\lambda\varphi_0^\downarrow - (M - \varepsilon), \chi_0^\uparrow &= 0, \\ iv, \partial_x \varphi_0^\downarrow + (M + \varepsilon), \chi_0^\downarrow &= 0, \end{aligned} \quad (53)$$

gdzie $M = M_0$ dla $x < 0$ oraz $M = -M_0$ dla $x > 0$. Stany zlokalizowane w tym przypadku opisane są funkcjami falowymi $\chi_0^{\uparrow,\downarrow}$ i $\varphi_0^{\uparrow,\downarrow}$ w postaci:

$$\varphi_0^\uparrow(x) = Ae^{\kappa x}, \quad \varphi_0^\downarrow(x) = Be^{\kappa x}, \quad \chi_0^\uparrow(x) = Ce^{\kappa x}, \quad \chi_0^\downarrow(x) = De^{\kappa x}, \quad (54)$$

gdzie A, B, C, D są pewnymi stałymi współczynnikami, natomiast κ zapewnia eksponencjalny spadek funkcji falowej po obu stronach ścianki domenowej. Oznacza to, że część rzeczywista κ musi być dodatnia dla $x < 0$ i ujemna dla $x > 0$. Korzystając z warunku ciągłości funkcji falowej w $x = 0$, wyznaczyłem równanie wiążące poziom energii stanu zlokalizowanego na ścianie domenowej z parametrem κ :

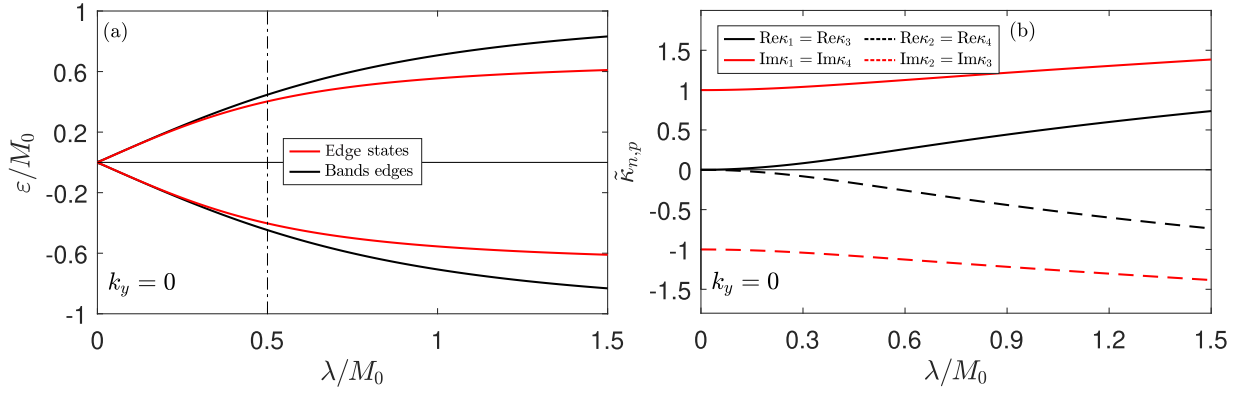
$$\kappa^4 + 2M_0^2\kappa^2 + 2\varepsilon^2\kappa^2 + M_0^4 - 2M_0^2\varepsilon^2 + 4M_0^2\lambda^2 - 4\varepsilon^2\lambda^2 + \varepsilon^4 = 0. \quad (55)$$

Na podstawie powyższego równania wyznaczyłem zależności na κ_n dla $x > 0$ i κ_p dla $x < 0$ w postaci:

$$\kappa_n = \frac{1}{v} \left(-M_0^2 - \varepsilon^2 \pm 2\sqrt{M_0^2\varepsilon^2 - M_0^2\lambda^2 + \varepsilon^2\lambda^2} \right)^{1/2}, \quad (56)$$

$$\kappa_p = -\frac{1}{v} \left(-M_0^2 - \varepsilon^2 \pm 2\sqrt{M_0^2\varepsilon^2 - M_0^2\lambda^2 + \varepsilon^2\lambda^2} \right)^{1/2}. \quad (57)$$

Zależność energii stanów zlokalizowanych przedstawiłem na rysunku 26(a), natomiast na rysunku 26(b) zobrazowałem część rzeczywistą i urojoną parametru $\kappa_{n,p}$. Obie wielkości wyznaczyłem w funkcji parametru sprzężenia SO Rashby λ . Jak widać, wartości energii stanów



Rysunek 26: (a) Energia stanów elektronowych (dla $k_y = 0$) zlokalizowana na ścianie domeny (czerwona linia) w funkcji λ dla $M_0 = 20$ meV. Czarna linia odpowiada krawędziom przerwy w widmie grafenu. Zarówno energia, jak i parametr Rashby λ są normalizowane do M_0 . Pionowa przerywana linia oznacza wartość energii λ/M_0 która będzie analizowana na kolejnych rysunkach. (b) Część rzeczywista i urojona $\kappa_{n,p}$ (znormalizowane do M_0/v) określona równaniem. (56) i (57) dla $k_y = 0$.

zlokalizowanych w przypadku $k_y = 0$ znajduje się w przerwie energetycznej, co oznacza, że są to stany dyskretne. Analizując rysunek 26(a), można zauważyć, że przerwa energetyczna zanika przy $\lambda = 0$. Oznacza to brak stanów zlokalizowanych. Nie oznacza to jednak, że nie mogą istnieć stany rezonansowe dla $\text{Re}, \kappa = 0$ i $\text{Im}, \kappa \neq 0$.

Po określeniu zależności dla $\kappa_{n,p}$ korzystając z równania Schrödingera wyznaczono funkcję falową stanu zlokalizowanego na ścianie domenowej w postaci

$$\psi_{n(p)}(x) = e^{\kappa_{n(p)}x} \begin{pmatrix} \frac{1}{-k_y^2 v^2 + \kappa_{n(p)}^2 v^2 + (M \pm \varepsilon)^2} \\ \frac{2\lambda v (k_y + \kappa_{n(p)})}{\pm \frac{i (M \pm \varepsilon)}{v (k_y + \kappa_{n(p)})}} \\ \pm \frac{i (k_y - \kappa_{n(p)}) (\kappa_{n(p)}^2 v^2 - k_y^2 v^2 + (\varepsilon + M)^2)}{2\lambda (k_y + \kappa_{n(p)}) (M \mp \varepsilon)} \end{pmatrix}, \quad (58)$$

Korzystając z warunku ciągłości funkcji falowej określonej wzorem (58) obliczyłem wartości energii stanów dyskretnych

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{3} \sqrt{3 M_0^2 + 4 \lambda^2} (\sqrt{3} \sin \gamma_{1,2} - \cos \gamma_{1,2}) \pm \frac{2\lambda}{3}, \quad (59)$$

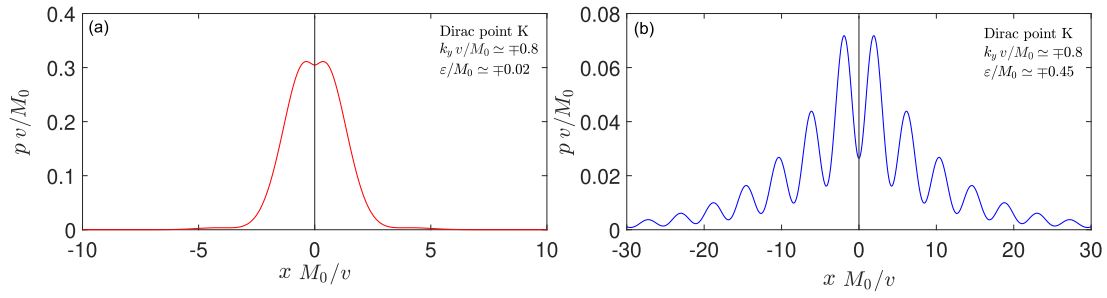
gdzie

$$\gamma_1 = \begin{cases} \frac{1}{3} \arctan \left(\frac{12\sqrt{3}|M_0|\xi_1}{\xi_2} \right) + \frac{\pi}{3}, & \xi_2 < 0 \\ \frac{1}{3} \arctan \left(\frac{12\sqrt{3}|M_0|\xi_1}{\xi_2} \right), & \xi_2 > 0 \end{cases} \quad (60)$$

$$\gamma_2 = \begin{cases} \frac{1}{3} \arctan \left(\frac{3\sqrt{3}|M_0|\xi_1}{-\xi_2} \right), & \xi_2 < 0 \\ \frac{1}{3} \arctan \left(\frac{3\sqrt{3}|M_0|\xi_1}{-\xi_2} \right) + \frac{\pi}{3}, & \xi_2 > 0 \end{cases}, \quad (61)$$

z $\xi_1 = \sqrt{4 M_0^4 + 13 M_0^2 \lambda^2 + 32 \lambda^4}$ i $\xi_2 = -36 M_0^2 \lambda + 64 \lambda^3$ (szczegóły obliczeń [H7]).

W dalszej części przedstawiłem obliczenia dla stanów z $k_y \neq 0$ gdzie w opisywanej pracy wybrano przypadek wartości energii stanu zlokalizowanego dla $\lambda/M_0 = 0.5$ (rysunek 26(a) linia przerywana). W tej części pracy ograniczyłem się do rozwiązań numerycznych, które przedstawione są poniżej.

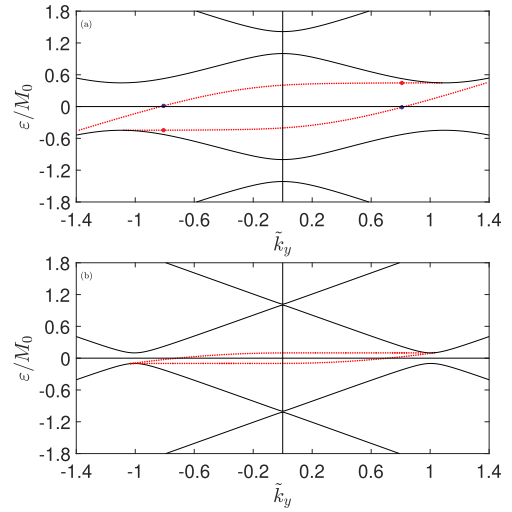


Rysunek 28: Znormalizowana gęstość prawdopodobieństwa p jako funkcja położenia x dla stanów krawędzi odpowiadających punktom czerwonym (a) i niebieskim (b) na krzywych dyspersji na rys. 28(a) i opisanych energią ε/M i znormalizowanym wektorem falowym k_y . Ze względu na symetrię zależności, krzywe te opisują gęstość prawdopodobieństwa dla punktów Diraca K i K' . Pozostałe parametry: $\lambda/M = 0,5$ i $M_0 = 20$ meV.

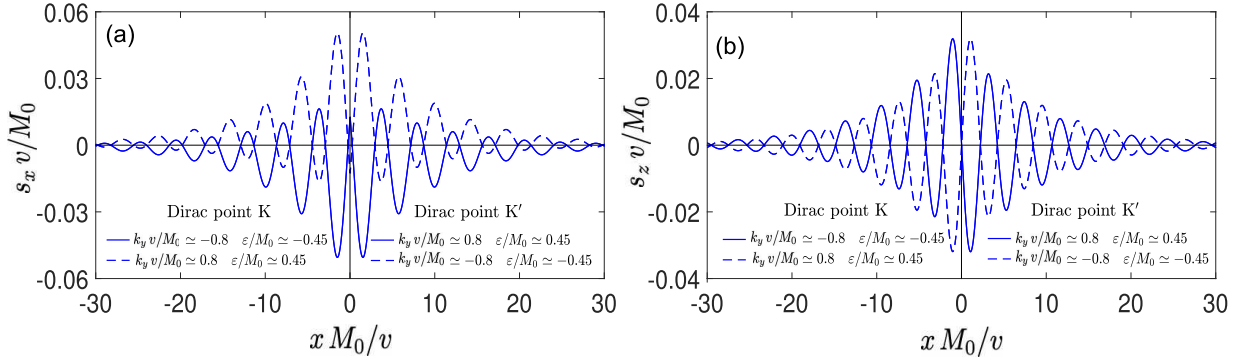
Energie stanów zlokalizowanych dla $k_y \neq 0$ przedstawia rysunek 27(a) rozwiązania dla punktu Diraca K i (b) dla punktu Diraca K' . Linie czerwone kropkowane reprezentują poziomy energii stanów zlokalizowanych (szczególny przypadek $k_y = 0$ na rysunku 27(a) i (b) tożsame z poziomami dla $\lambda/M_0 = 0.5$ z rysunku 26) w funkcji zmiany wektora falowego k_y . Poziomy energii w punktach Diraca K i K' są antysymetryczne, dla których słuszną jest relacja $\varepsilon_1(k_y) = -\varepsilon_2(-k_y)$. Mody zlokalizowane na ścianie domenowej mieszczą się w przerwie energetycznej, natomiast stany będące na tle struktury pasmowej są stanami quasi-zlokalizowanymi lub rezonansowymi i w dalszym opisie zostały one pominięte. Rozwiązania numeryczne przedstawione zostały dla wybranego wektora falowego $\tilde{k}_y \simeq \pm 0.8$ i zaznaczone są na rysunku 27 czerwoną i niebieską kropką (rozdzielono kolorem z uwagi na poziom energii blisko zera $\varepsilon \simeq 0$ i blisko krawędzi pasma $\varepsilon \simeq \pm E_g/2$).

Z uwagi na część urojoną w $\kappa_{n,p}$ funkcja falowa ma niezerowy wkład oscylacyjny, co wyraźnie widać na rys. 28(c), gdzie gęstość prawdopodobieństwa $p = \psi^\dagger(x)\psi(x)$ (znormalizowana do M_0/v) przedstawiono jako funkcję bezwymiarowego parametru xM_0/v dla modów oznaczonych kolorem czerwonym i niebieskim. Gęstość prawdopodobieństwa maleje po obu stronach wraz z rosnącą odległością od ścianki domenowej. Rozkład ten ma charakter wykładniczy i oscylacyjny, a amplituda oscylacji maleje wraz ze wzrostem odległości od ścianki. W rezultacie oczekiwane wartości wielkości fizycznych określonych na stanach brzegowych mogą zachowywać się w podobny sposób. Wszystkie dotychczas przedstawione wyniki odpowiadają rozwiązaniom dla punktu Diraca K w strefie Brillouina. Podobne mody istnieją także w drugim punkcie Diraca, K' . Szczegóły dotyczące rozwiązań w punkcie K' można znaleźć w publikacji [H7].

Rozważmy teraz przestrzenną zależność gęstości spinu związaną z poszczególnymi stanami krawędziowymi, $s(x) = \psi^\dagger(x)\tau_0\sigma\psi(x)$, gdzie τ_0 jest macierzą jednostkową w przestrzeni podsiatki grafenu. Na rys. 29(a) przedstawiona została składowa x gęstości spinu, s_x , znormalizowana do czynnika M_0/v jako funkcję położenia xM_0/v dla modów wskazanych przez niebieskie punkty na rys. 27(a) dla punktów K i K' . Należy zauważyć, że składowa x gęstości spinu w tych dwóch punktach oscyluje wraz ze wzrostem odległości od ścianki ze zmienioną fazą. Znormalizowana gęstość spinu przedstawiona jest na rysunkach s_x 29(a) i s_z 29(b) dla punktów Diraca K i K' . W



Rysunek 27: Mody krawędziowe (czerwona linia przerywana) zlokalizowane na ścianie domenowej, przedstawione jako funkcja k_y (znormalizowane do M_0/v) dla (a) $\lambda/M_0 = 0,5$, $\lambda = 10$ meV i (b) $\lambda/M_0 = 0,1$, $\lambda = 2$ meV. Na obu wykresach $M_0 = 20$ meV. Ciągłe czarne linie wyznaczają odpowiednio pasma przewodnictwa i walencyjne grafenu ze sprzężeniem spinowo-orbitalnym Rashby i namagnesowaniem. Duże czerwone i niebieskie kropki na krzywych dyspersji stanów krawędziowych odpowiadają modom wybranym na rys. 28 i 29. Obydwa czerwone punkty (oraz niebieskie) są ze sobą powiązane symetrią. Krzywe dyspersji modów krawędziowych w punktach K i K' są takie same.



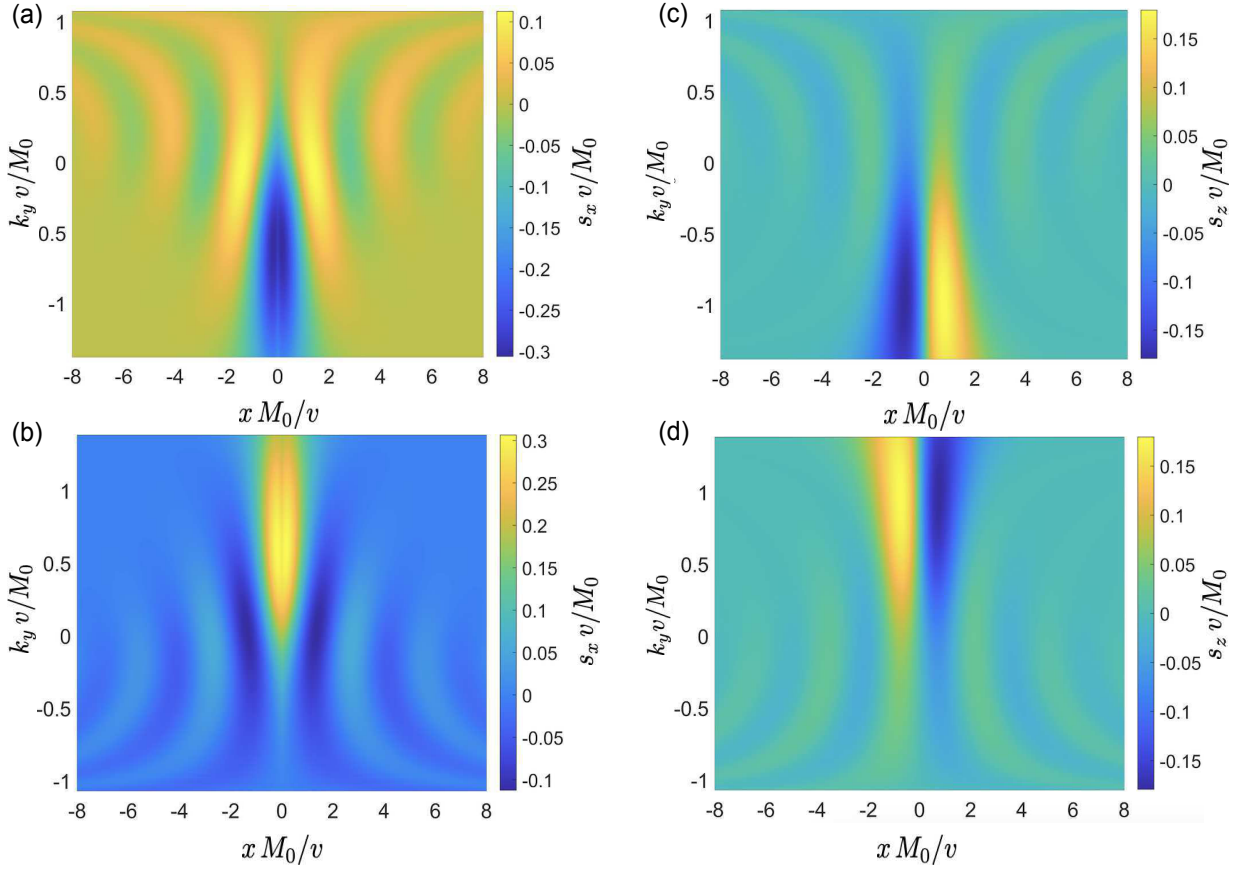
Rysunek 29: Znormalizowana gęstość spinowa s_x (a) i s_z (b) dla punktów Diraca K i K'. Przyjęte parametry są zgodne z wcześniej wskazaniami wartościami parametrów (niebieski punkt Rys.27. Pozostałe parametry: $\lambda/M = 0,5$ i $M_0 = 20$ meV.

związku z tym, gdy uwzględnimy oba punkty Diraca, ich wkłady znoszą się nawzajem. Poza tym s_x jest funkcją symetryczną względem x . Jakościowo podobne zachowanie można zaobserwować dla gęstości spinowej komponentu s_z . Składowa y gęstości spinu zanika, tj. $s_y(x) = 0$. Z rys. 29 wynika, że (i) lokalna gęstość spinu jest zorientowana w płaszczyźnie (x, z) oraz (ii) jej wielkość maleje w sposób oscylacyjny wraz ze wzrostem odległości od ścianki domenowej. Okres oscylacji zależy od wektora falowego, jak pokazano na rys. 30, gdzie lokalna gęstość s_x i s_z jest przedstawiona dla obu modów brzegowych jako funkcja znormalizowanego wektora falowego i położenia na osi x .

Warto zauważyć pewne podobieństwo do problemu *ortogonalnej polaryzacji spinu* na ścianie domenowej pola Rashby w jednorodnie namagnesowanym nanodrucie [98]. Chociaż hamiltonian grafenu różni się znacznie od jednowymiarowego modelu Rashby rozważanego w pracy ref.[98], niezerowe s_x na ścianie domenowej grafenu odpowiada ortogonalnej polaryzacji spinu, ponieważ oś x w naszym modelu jest prostopadła do M i pola Rashby, gdy weźmiemy pod uwagę elektrony poruszające się wzdłuż osi x (jak w przykładzie nanodrutu). Całkowita polaryzacja spinów na stanach krawędziowych ma przeciwny znak w punktach K i K' . Zatem całkowita polaryzacja spinu, uzyskana przez sumowanie po energii do poziomu Fermiego, zanika z uwagi na wkłady pochodzące z obu punktów Diraca. Prowadzi to do wniosku, aby uzyskać niezerową wartość polaryzacji, należy wprowadzić degenerację dolinową.

W dalszej części pracy opisałem kwantowy efekt Halla, korzystając z teorii Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs, wyznaczając liczbę Cherna w grafenie po obu stronach ścianki magnetycznej, otrzymując $n_{Ch} = 2\text{sgn}(M)$. Liczba Cherna (n_{Ch}) jest topologicznym wskaźnikiem układu, który wskazuje na obecność chiralnych stanów brzegowych. Liczba ta opisuje topologię fazy kwantowego anomального efektu Halla (QAH) i wskazuje, że w takim systemie pojawiają się dwa chiralne stany brzegowe, które są odpowiedzialne za przewodnictwo QAH. W szczególności, w układzie z ścianką domenową (np. z krawędzią pomiędzy dwoma różnymi fazami), na tej granicy mogą pojawić się cztery stany brzegowe propagujące w tym samym kierunku. Przewodnictwo anomального efektu Halla na tej ścianie wynosi wtedy $-4e^2/h$, co jest wynikiem połączenia dwóch topologicznie różnych faz, których liczby Cherna wynoszą odpowiednio $n_{Ch}(x < 0) = 2$ i $n_{Ch}(x > 0) = -2$.

Jednakże, te stany krawędziowe nie są w pełni chronione przed rozpraszaniem. Istotnym problemem jest rozpraszanie międzydolinowe (intervalley scattering), które jest dozwolone w tym układzie. W grafenie, rozpraszanie międzydolinowe może zniszczyć topologiczne właściwości układu, co utrudnia uzyskanie stabilnego efektu QAH w rzeczywistych układach. Symetria odwrócenia czasu, którą łamie magnetyzacja prostopadła do płaszczyzny, umożliwia rozpraszanie między różnymi punktami Diraca, co prowadzi również do osłabienia efektu QAH.



Rysunek 30: Składowe x i z gęstości spinowej związane z stanami brzegowymi o wyższej (a),(c) i niższej (b),(d) energii, przedstawione jako funkcja unormowanego wektora falowego k_y oraz unormowanemu położeniu x na osi prostopadłej do ściany domenowej.

Podsumowanie

W powyższej pracy przedstawiłem analizę zależności energii elektronów zlokalizowanych w grafenie z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita typu Rashby i sprzężonego z warstwą magnetyczną posiadającą ściankę domenową. Głównym celem badania było zrozumienie właściwości stanów elektronowych zlokalizowanych na ścianie domenowej, których energia mieści się w przerwie energetycznej.

Analiza wykazała, że dla każdego punktu Diraca w układzie istnieją dwa jednowymiarowe pasma chiralnych stanów, a polaryzacja spinowa dla tych stanów w różnych punktach K i K' wzajemnie się znosi. Ponadto z symetrii wynika, że energia w punkcie K jest funkcją antysymetryczną względem zmiany momentu pędu w kierunku y , a energia w punkcie K' jest symetryczna, co prowadzi do tego, że $\varepsilon_K(k_y) = \varepsilon_{K'}(k_y)$.

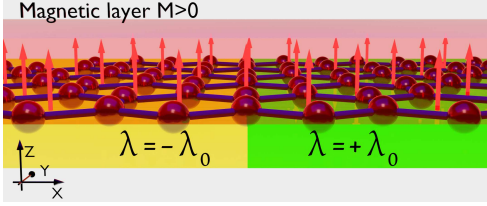
W pracy również wskazałem topologicznie różne regiony (o antyrównoległym kierunku magnetyzacji), które charakteryzują się różnymi liczbami Cherna: 2 po jednej stronie ścianki oraz -2 po drugiej. Z tej analizy wynika, że gdy energia Fermiego leży w przerwie energetycznej, cztery chiralne stany propagują wzdłuż ścianki domenowej. To z kolei prowadzi do zaobserwowania zdyskretyzowanej anomalnej przewodności Halla (QAH) wzdłuż ścianki domenowej z czterema kwantami przewodności.

Jednakże należy zaznaczyć, że stany chiralne na ścianie domenowej nie są chronione przed rozpraszaniem międzypolinowym. Tego typu procesy rozpraszania mogą prowadzić do tłumienia efektu QAH, co jest istotnym wyzwaniem w kontekście rzeczywistych realizacji tego efektu w materiałach grafenowych.

[H7] - Wkład do pracy polegał na: sformułowaniu koncepcji pracy, opracowaniu metodologii obliczeń, wykonaniu obliczeń analitycznych, przygotowaniu kodu oraz wykonaniu obliczeń numerycznych z prezentacją wizualną wyników, wstępne przygotowanie manuskryptu, udział w procesie redakcyjnym publikacji, prowadzenie korespondencji z redakcją.

[H8] M. Ingłot, J. Barnaś, V.K. Dugaev, A. Dyrdał, *Localized states at the Rashba spin-orbit domain wall in a magnetized graphene: interplay of the Rashba and magnetic domain walls* Phys. Rev. B *in press* (2024)

Kontynuując tematykę ścianek domenowych w grafenie, w kolejnej pracy rozszerzyłem moje badania w kierunku możliwego pojawienia się niejednorodności w oddziaływaniu Rashby. W analizowanym przypadku prowadzi to do powstania interfejsu, w którym znak sprzężenia zmienia się przestrzennie tj. $\pm\lambda(x)$. Przeprowadziłem również analizę dotyczącą możliwości jednoczesnego wystąpienia w tym samym położeniu dwóch rodzajów ścianek: magnetycznej oraz typu Rashby.



Rysunek 31: Rysunek schematyczny równomiernie namagnesowanego grafenu ze ścianką domenową sprzężenia spinowo-orbitalnego Rashby. Warstwa leży w płaszczyźnie (x, y) , z osią y wzdłuż ścianki. Oś z jest normalna do płaszczyzny.

Model W zaproponowanym modelu założyłem występowanie dwóch domen typu Rashby, których oddziaływanie indukowane jest przez podłoże, a znak sprzężenia zależy od położenia wzdłuż osi x . Taki układ można opisać hamiltonianem:

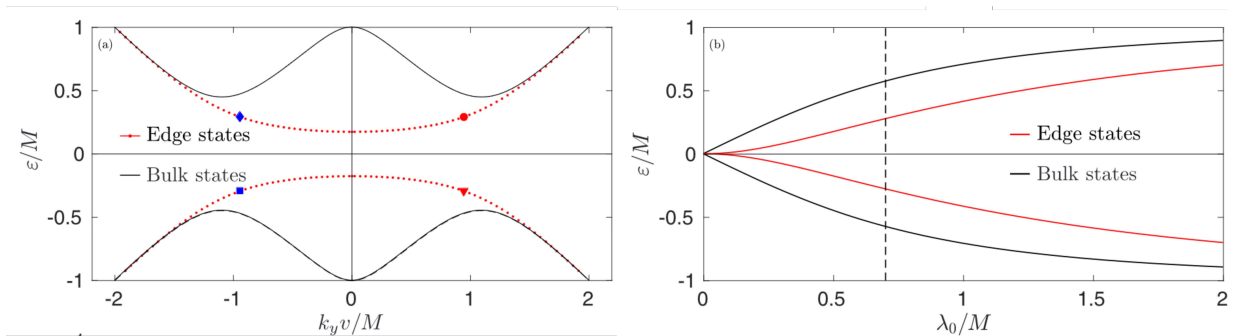
$$\hat{H} = -iv(\tau_x \nabla_x + \tau_y \nabla_y) + \lambda(x)(\tau_x \sigma_y - \tau_y \sigma_x) + \sigma_z M, \quad (62)$$

gdzie M odpowiada za namagnesowanie związane z rozszczepieniem typu Zeemana, wynikające z efektów bliskosciowych. Przyjąłem, że kierunek wektora M jest zorientowany wzdłuż osi z , czyli kierunku normalnym do płaszczyzny grafenu. Parametr $\lambda(x)$ opisuje stałą sprzężenia Rashby, zmieniającą znak na interfejsie w punkcie $x = 0$ zgodnie z relacją:

$$\lambda(x) = \begin{cases} -\lambda_0, & x < 0, \\ \lambda_0, & x > 0. \end{cases} \quad (63)$$

Obliczenia przeprowadziłem analogicznie do wcześniejszej pracy (patrz [H7]), uzyskując tym razem energię stanów krawędziowych w postaci:

$$\frac{(-\varepsilon + M) \left[-(-2M^2 - \lambda_0^2) \varepsilon^2 + M^2 \lambda_0^2 \xi(\zeta) \xi(-\zeta) + \lambda_0^2 (-\varepsilon + M) (\varepsilon + M) (-v^2 k_y^2 + M^2 + \varepsilon^2) \right]}{\lambda_0^2 (\varepsilon + M) (M^2 + \varepsilon^2 - \zeta) (M^2 + \varepsilon^2 + \zeta)} = 0, \quad (64)$$



Rysunek 32: (a) Krzywe dyspersji stanów krawędziowych, $\varepsilon(k_y)$ (czerwone linie przerywane), dla $\lambda_0 = 5$ meV i $M = 10$ meV oraz (b) zależność $\varepsilon(k_y = 0)$ od parametru λ_0 . Ciągłe czarne linie odpowiadają pasmom stanów objętościowych (*bulk*) grafenu. Kropki w (a) wskazują punkty, dla których obliczyłem polaryzację spinu, co zostanie omówione w dalszej części pracy. Pionowa linia przerywana w (b) wskazuje wartość λ_0/M analizowaną później przy obliczaniu polaryzacji spinowej.

W powyższym równaniu funkcja $\xi(\zeta)$ została zdefiniowana jako $\xi(\zeta) = \sqrt{v^2 k_y^2 - M^2 - \varepsilon^2 + \zeta}$, gdzie $\zeta = 2\sqrt{(M^2 + \lambda_0^2)\varepsilon^2 - M^2\lambda_0^2}$.

Jak wynika z równania (64), energia stanów krawędziowych jest funkcją wektora falowego k_y . Uzyskałem dwa rozwiązania tego równania, odpowiadające wartościom $\pm\varepsilon(k_y)$. Rozwiązania te wyznaczają pasma stanów krawędziowych, przedstawione na rys. 32(a) czerwoną linią przerywaną. Jak można zauważyć, pomiędzy obiema gałęziami pasm istnieje przerwa energetyczna - w przeciwieństwie do wyników przedstawionych w poprzedniej pracy, gdzie stany krawędziowe wypełniały przerwę wzbronioną stanów objętościowych (*bulk*).

Na rys. 32(b) pokazałem, jak zmienia się energia stanów krawędziowych dla zerowego wektora falowego $\varepsilon(k_y = 0)$ w funkcji parametru λ_0 . Widać wyraźnie, że energia ta rośnie wraz ze wzrostem λ_0 . Jednocześnie szerokość przerwy wzbronionej dąży do zera dla $\lambda_0 \rightarrow 0$, co oznacza, że w tym limicie zanikają również stany zlokalizowane, a rzeczywiste części parametrów κ_i również zbliżają się do zera.

Jednym z kluczowych zagadnień, które poruszyłem w tej pracy, było wyznaczenie masy efektywnej stanów krawędziowych w funkcji unormowanego parametru namagnesowania $k_y v/M$. Do analizy masy efektywnej wykorzystałem metodę $k \cdot p$ dla odpowiednio zdefiniowanych funkcji falowych.

$$\begin{aligned}\psi^{(1)}(\mathbf{r}) &= e^{ik_y y} \psi_0^{(1)}(x), \\ \psi^{(2)}(\mathbf{r}) &= e^{ik_y y} \psi_0^{(2)}(x),\end{aligned}\tag{65}$$

gdzie $\psi_0^{(1,2)}(x)$ są funkcjami falowymi przy $k_y = 0$, którym odpowiadają energie własne $\pm\varepsilon(0)$. Pomijając szczegóły obliczeń z pracy [H8] zdefiniowałem Hamiltonian efektywny (66) określający stany krawędziowe i pozwalający wyznaczyć masę efektywną

$$H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \Delta & k_y w \\ k_y w^* & -\Delta \end{pmatrix},\tag{66}$$

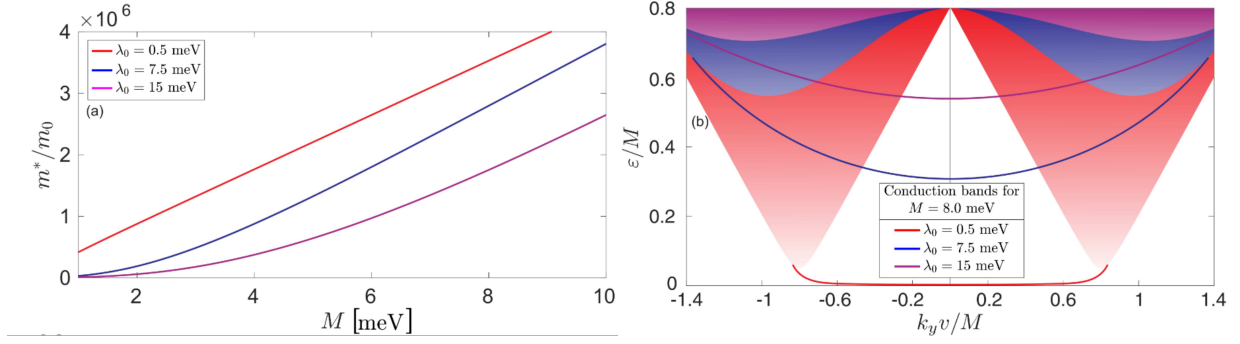
gdzie przyjęta została $\Delta = \varepsilon(0)$. Dla małych wartości k_y , parametr w jest stały i może być wyliczony numerycznie. Relacja dyspersyjna dla hamiltonianu (66) wynosi $\varepsilon(k_y) = \pm(\Delta^2 + k_y^2 |w|^2)^{1/2}$, a odpowiadająca mu masa efektywna dla elektronu o energii stanu krawędziowego to $m^* = \hbar^2 \Delta / |w|^2$.

Zależność masy efektywnej m^* od parametru Rashby i namagnesowania M zaprezentowana jest na rys. 33(a). Zależność ta pokazuje, że masa efektywna rośnie wraz ze wzrostem M , a także ze spadkiem λ_0 . Efektywna masa elektronu może być niezwykle duża dla małych wartości λ_0 , co w rzeczywistości odpowiada ciężkim elektronom w bardzo wąskim paśmie. Krzywa dyspersji stanów brzegowych jest wówczas bardzo płaska, patrz rys. 33(b) dla $\lambda_0 = 0,5$ meV.

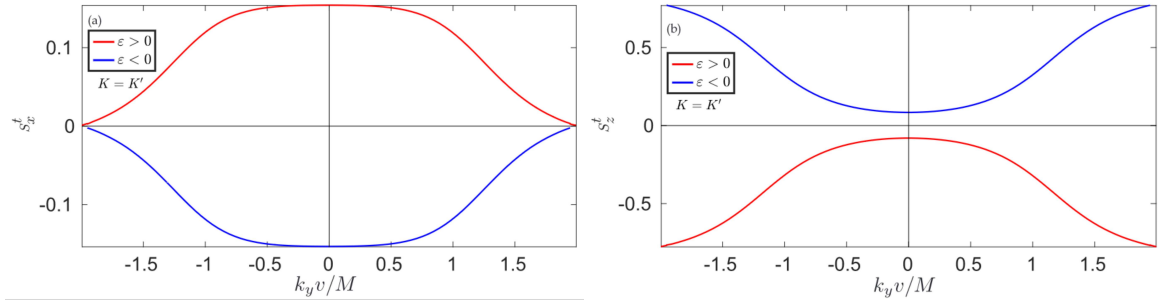
Zależność masy efektywnej m^* w funkcji parametru Rashby λ_0 i namagnesowania M przedstawiłem na rys. 33(a). Moje obliczenia pokazują, że masa efektywna rośnie wraz ze wzrostem M , a także ze spadkiem λ_0 . Zauważyłem, że efektywna masa elektronu może osiągać bardzo duże wartości dla małych λ_0 , co w praktyce odpowiada ciężkim elektronom w bardzo wąskim paśmie. W takich przypadkach krzywa dyspersji stanów brzegowych staje się wyjątkowo płaska. Przykładem takiej sytuacji jest krzywa dyspersji na rys. 33(b) dla $\lambda_0 = 0,5$ meV.

W dalszej części pracy skupiłem się na analizie polaryzacji spinowej stanów brzegowych, pomijając szczegółowe badanie charakteru gęstości prawdopodobieństwa stanów brzegowych wynikających z hamiltonianu (62). Na rysunku 34 przedstawiłem gęstość spinu $\mathbf{s}_{k_y}^t$ w stanie k_y , którą obliczyłem zgodnie ze wzorem:

$$\mathbf{s}_{k_y}^t = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{s}_{k_y}(x) dx,\tag{67}$$



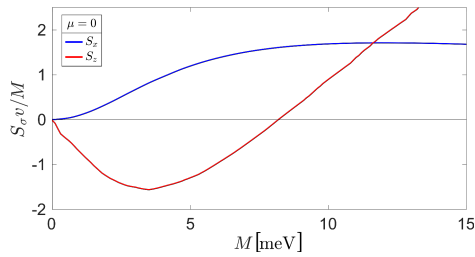
Rysunek 33: (a) Efektywna masa elektronów w stanach brzegowych, m^*/m_0 , odpowiadająca małym wartościom k_y i przedstawiona jako funkcja namagnesowania M dla wskazanych wartości parametru Rashby. (b) Pasma pozakrawędziowe (obszary kolorowe) i odpowiadające im stany brzegowe (linie tego samego koloru co odpowiadające im pasma pozakrawędziowe) dla różnych wartości λ_0 , jak pokazano w legendzie.



Rysunek 34: Składowa x (a) i z (b) gęstości spinu dla elektronów zlokalizowanych na ścianie domenowej w stanach krawędziowych w funkcji k_y . Czerwone (niebieskie) krzywe odpowiadają gałęzom stanów krawędziowych o dodatniej (ujemnej) energii. Tutaj energia sprzężenia spin-orbita Rashby jest równa $\lambda_0 = M/2$.

dla stanów krawędziowych o energiach ($\varepsilon > 0$) oraz ($\varepsilon < 0$).

Z moich wyników wynika, że wartość bezwzględna składowej x całkowitego spinu osiąga maksimum dla małych wektorów falowych. Natomiast składowa z całkowitego spinu wykazuje odwrotną zależność – jest mała dla małych wektorów falowych i osiąga największe wartości w punktach, w których krzywe dyspersji wchodzą w pasma pozakrawędziowe.

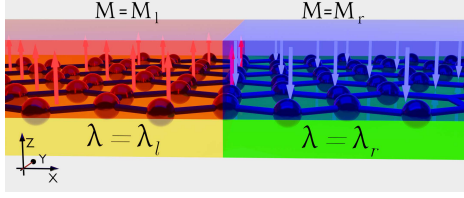


Rysunek 35: Całkowity spin na jednostkę długości zgromadzony na ścianie domenowej w funkcji namagnesowania M .

Całkowity spin zgromadzony na ścianie domenowej (na jednostkę długości ściany) przedstawiłem na rys. 35. W moich obliczeniach założyłem, że poziom Fermiego znajduje się w przerwie energetycznej, pomiędzy dwiema gałęziami stanów brzegowych. W związku z tym całkowity spin obejmuje wkłady wszystkich stanów krawędziowych o energiach $\varepsilon(k_y) < 0$.

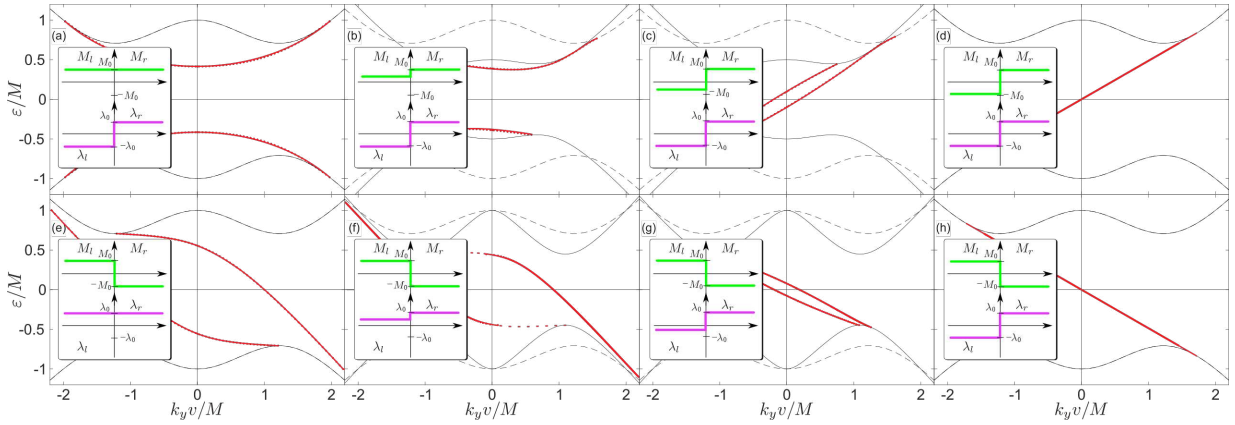
W kolejnej części pracy rozpatruję szczególny przypadek podwójnej ścianki domenowej. Z wcześniejszej analizy wiem, że właściwości topologiczne stanów krawędziowych w przypadku poszczególnych obszarów pola Rashby w obecności jednorodnego namagnesowania róż-

nią się od właściwości topologicznych poszczególnych domen magnetycznych w jednorodnym polu Rashby. Ponieważ w pierwszym przypadku stany brzegowe nie łączą pasma walencyjnego i przewodnictwa, a tym samym nie zamykają przerwy energetycznej, nie są one chronione topologicznie. Z kolei stany krawędziowe związane z magnetyczną ścianką domenową łączą pasma walencyjne i przewodnictwa, zamykając przerwę energetyczną, i są powiązane z kwantową anomalną fazą Halla. Dlatego interesujące jest dla mnie zbadanie ewolucji stanów brzegowych pomiędzy tymi dwiema sytuacjami granicznymi poprzez zmianę odpowiednich parametrów (magnetyzacji i stałej Rashby).



Rysunek 36: Rysunek schematyczny układu hybrydowego na bazie grafenu z nierównomiernym sprzężeniem spinowo-orbitalnym Rashby i niejednorodnym namagnesowaniem.

Można rozważyć bardziej ogólną sytuację, gdy współistnieje zarówno ścianka typu Rashby, jak i magnetyczna. Założyłem, że obie ścianki znajdują się w tych samych pozycjach, jak pokazano schematycznie na rys. 36. Wzajemne oddziaływanie obu ścianek domenowych prowadzi do interesujących właściwości stanów brzegowych. Wyniki obliczeń numerycznych przedstawiłem na rys. 37, gdzie znajdują się stany krawędziowe w kilku sytuacjach dla różnych kombinacji parametru Rashby i namagnesowania po obu stronach ścianek. Panele (a) i (e) przedstawiają odpowiednio ściankę Rashby i ściankę magnetyczną. Pierwszą sytuację omówiłem powyżej, drugą zaś analizowałem w mojej wcześniejszej pracy [H7].



Rysunek 37: Stany krawędziowe dla różnych parametrów $[\lambda_l, \lambda_r]$ sprzężenia Rashby i różnych wartości namagnesowania $[M_l, M_r]$ po lewej i prawej stronie. Górne panele: $[\lambda_l, \lambda_r] = [-\lambda_0, \lambda_0]$ (a-d), $[M_l, M_r] = [M_0, M_0]$ (a), $[M_0/2, M_0]$ (b), $[-M_0/2, M_0]$ (c), $[-M_0, M_0]$ (d). Panele dolne: $[M_l, M_r] = [M_0, -M_0]$ (e-h), $[\lambda_l, \lambda_r] = [\lambda_0, \lambda_0]$ (e), $[\lambda_0/2, \lambda_0]$ (f), $[-\lambda_0/2, \lambda_0]$ (g), $[-\lambda_0, \lambda_0]$ (h). Tutaj $\lambda_0 = 10\text{meV}$ i $M_0 = 10\text{meV}$. Wstawki pokazują chemicznie odpowiednie wielkości $[M_l, M_r]$, i $[\lambda_l, \lambda_r]$.

Gdy znak namagnesowania lub znak sprzężenia Rashby jest po obu stronach interfejsu przeciwny, mówię o ściance domenowej. W sytuacji, gdy znak po obu stronach namagnesowania lub sprzężenia Rashby jest taki sam, nazywam tę sytuację stopniem. Ścianka jest antysymetryczna, gdy odpowiadające wartości bezwzględne parametrów są takie same po obu stronach, a w przeciwnym razie asymetryczna. Na rys.37(a-d) antysymetryczna ścianka Rashby jest stała, podczas gdy namagnesowanie zmienia się z jednolitego (a) na asymetryczną ściankę magnetyczną (d). Sytuacje w (b) i (c) odpowiadają odpowiednio stopniowi magnetycznemu (b) i asymetrycznej ściance magnetycznej (c). Z rys.37(a-d) wynika, że gdy ścianka domeny magnetycznej znajduje się w obecności ścianki Rashby, istnieją dwa stany krawędziowe, które zamykają szczelinę, niezależnie od tego, czy ścianka magnetyczna jest asymetryczna, czy antysymetryczna. Jednakże w przypadku braku ścianki magnetycznej dwa stany krawędziowe nie zamykają szczeliny.

Z kolei na rys.37(e-h) ścianka magnetyczna jest stała, podczas gdy parametr Rashby zmienia się z jednorodnego (e) na antysymetryczną ściankę Rashby (h). Sytuacje w (f) i (g) odpowiadają różnym wartościom bezwzględnych parametrów Rashby po obu stronach ścianki magnetycznej; tj. stopniowi (f) i asymetrycznej ścianie domeny Rashby (g). Obliczenia numeryczne pozwalają uogólnić wniosek z rys.37(a-d) i stwierdzić, że w przypadku istnienia ścianki magnetycznej, mamy dwa stany krawędziowe, które łączą pasma walencyjne i przewodnictwa, zamykając przerwę energetyczną – niezależnie od parametru Rashby.

W omawianej pracy przedstawione zostały własności transportowe (elektronowe i spinowe) związane ze stanami krawędziowymi. Pojawienie się prądów nierównowagowych ładunkowych i spinowych, które mogą być indukowane przez zewnętrzną siłę, taką jak pole elektryczne lub gradient temperatury, zostało przeanalizowane w odniesieniu do stanów przedstawionych na

rys. 37(d,h). W przypadku, gdy obie ścianki domenowe (Rashby i magnetyczna) są antysymetryczne, wówczas oba stany krawędziowe są zdegenerowane. W takiej sytuacji można uzyskać proste rozwiązania analityczne dla energii stanów brzegowych. Równanie określające energie stanów brzegowych w rozpatrywanym przypadku jest następujące:

$$\varepsilon = \pm Q \frac{\hbar v_F}{2\lambda_0^2} k_y, \quad (68)$$

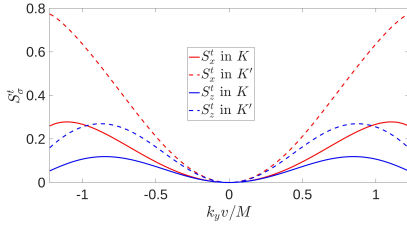
gdzie

$$Q = \sqrt{2[M_0^2 (M_0^2 + 4\lambda_0^2) (M_0^2 + \lambda_0^2)^2]^{1/2} - 2M_0^4 - 6M_0^2\lambda_0^2} \quad (69)$$

a znaki $+$ i $-$ odpowiadają konfiguracjom $M_r > 0$ [Rys.37(d)] oraz $M_r < 0$ [Rys.37(h)], odpowiednio.

Pomijając szczegółową dyskusję związaną z analizą gęstości prawdopodobieństwa dla elektronów zlokalizowanych na ścianie, warto zauważyć różnicę pomiędzy rozkładami w punkcie K i K'. Takie właściwości mogą być interesujące z punktu widzenia elektroniki dolinowej. Również rozkład gęstości spinowej odpowiadający rozpatrywanym stanom krawędziowym, związanym z asymetryczną ścianką podwójnej ścianki magnetycznej i Rashby, istotnie różni się od rozkładu gęstości spinowej dla stanów krawędziowych związanych z niezależną ścianką Rashby i równomiernym namagnesowaniem (patrz rys.5 w pracy [H8]).

Całkowita gęstość spinu scałkowana po x i zsumowana po dwóch stanach zdegenerowanych daje różnicę w punktach K i K' co wyraźnie przedstawiono na rysunku 38.



Rysunek 38: Składowe x i z spinu związane ze stanami krawędziowymi, przedstawione w funkcji k_y określone dla K i K'.

Dla rozpatrywanych stanów krawędziowych scharakteryzowanych liniową dyspersją (Rys. 37 d i h) wyznaczono prąd elektryczny korzystając z równania kinetycznego Boltzmanna. Założyliśmy, że stan stacjonarny może być osiągnięty dla długości relaksacji energii $L_\varepsilon = |v|\tau_\varepsilon$ która powinna być mniejsza niż długość ścianki domenowej $L_\varepsilon \ll L$. Wówczas nierównowagowy prąd ładunkowy może być zapisany jako:

$$I = 4e\nu \int \rho(\varepsilon) \delta f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{4e^2}{h} \nu \tau_\varepsilon E \int_{-\varepsilon_0}^{\varepsilon_0} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad (70)$$

gdzie $h = 2\pi\hbar$, e^2/h to kwant przewodnictwa, $\rho(\varepsilon) = 1/2\pi\hbar|\nu|$ to gęstość stanów (na kanał), a $\varepsilon_0 \simeq \varepsilon_g/2$ wyznacza granice energetyczne dla liniowej dyspersji, gdzie ε_g to szerokość przerwy energetycznej, w obrębie której rozchodzą się stany brzegowe. Czynniki 4 w równaniu 70 uwzględnia dwa punkty Diraca oraz podwójną degenerację stanów brzegowych w każdym z tych punktów (tj. istnieją cztery kanały transportu kwantowego).

Powyższą formułę 70 można przekształcić do postaci:

$$I = \frac{4e^2}{h} \frac{L_\varepsilon}{L} V \int_{-\varepsilon_0}^{\varepsilon_0} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad (71)$$

gdzie V to napięcie. Zatem przewodność $G = I/V$ jest:

$$G = \frac{4e^2}{h} \frac{L_\varepsilon}{L} \int_{-\varepsilon_0}^{\varepsilon_0} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad (72)$$

W niskich temperaturach, $k_B T \ll \varepsilon_0$, całka w równaniach (71) i (72) wynosi 1, a zatem przewodność jest dana wzorem $G = (4e^2/h)(L_\varepsilon/L)$.

W prac tej uwzględniłem również analizę i obliczenia związane z istnieniem gradientu temperatury wzdłuż ścianki domenowej. Okazuje się, że w takim przypadku może płynąć

nierównowagowy prąd. Aby obliczyć ten prąd, zakładam, że układy elektronów i fononów są w lokalnej quasi-równowadze, tzn. temperatura elektronów jest równa temperaturze fononów ($T_{el} = T_{ph} \equiv T$), a funkcja rozkładu elektronów odpowiada równowadze przy lokalnej temperaturze sieci. Ta sytuacja jest możliwa, gdy długość relaksacji energii L_ε jest znacznie mniejsza od długości ściany domeny $L_\varepsilon \ll L$.

Z powodu liniowej dyspersji i symetrii elektron-dziura, prąd ładunkowy (elektryczny) termoelektryczny znika w wyniku wzajemnego znoszenia się wkładów elektronów i dziur, zarówno dla potencjału chemicznego $\mu = 0$ (środek przerwy), jak i dla μ przesuniętego w niewielkim stopniu od środka luki, natomiast odpowiadający temu prąd spinowy zanika tylko dla $\mu = 0$, a dla $\mu \neq 0$ jest niezerowy.

Stany elektronów zlokalizowane na ścianie domenowej są spolaryzowane spinowo, a wartość oczekiwana spinu, $s_i(k_y) = \langle \sigma_i \rangle_{k_y}$, w stanie k_y może być przybliżona przez $s_i(k_y) = a_i k_y^2 + b_i k_y^4$, gdzie $i = x, z$ odpowiada nieliniowej składowej spinu. Parametry a_i i b_i można uzyskać przez dopasowanie.

W takim wypadku możemy wyznaczyć termoelektryczny prąd spinowy wzdłuż ściany domenowej jako:

$$J_i^s = \nu \int [s_i^K(\varepsilon) + s_i^{K'}(\varepsilon)] \rho(\varepsilon) \delta f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (73)$$

Po podstawieniu i przy niskich temperaturach, uzyskujemy formułę na prąd spinowy termoelektryczny:

$$J_i^s \simeq -\frac{2\pi\tau\varepsilon\mu k_B^2 T^2}{3\hbar^3\nu} \frac{\nabla T}{T} \sum_{\chi=K,K'} \left(a_i^\chi + \frac{2b_i^\chi \mu^2}{\hbar^2\nu^2} \right) \quad (74)$$

W tym przypadku prąd ładunkowy termoelektryczny wynosi zero, co prowadzi do uzyskania czystego termoelektrycznego prądu spinowego.

Podsumowanie

W pracy dokonano analizy stanów elektronowych zlokalizowanych na ścianach domeny Rashby, które prowadzą do powstania stanów krawędziowych. Stany te pojawiają się w przerwie między pasmami przewodnictwa i walencyjnym oraz propagują wzdłuż ścianki domenowej. Pomimo tego, że stany te nie zamykają przerwy (nie łączą pasm przewodnictwa i walencyjnego), przerwa zostaje znacznie zredukowana. Tego typu zachowanie jest zgodne z równością liczb Chern'a po obu stronach ściany domeny Rashby.

Zbadano również koegzystencję ścianek domenowych typu Rashby i magnetycznych w grafenie, gdy obie ściany są ostre (typu delta Diraca) i znajdują się w tej samej pozycji. W przypadku braku ścianki Rashby i dla jednorodnego pola Rashby, problem sprowadza się do analizy przedstawionej w pracy [99]. Niezależnie od tego, czy ścianka magnetyczna jest antysymetryczna, czy asymetryczna, stany krawędziowe pojawiają się w przerwie między pasmami przewodnictwa i walencyjnym oraz propagują wzdłuż ścianki. Ponadto, stany te łączą pasma przewodnictwa i walencyjne, co prowadzi do zamknięcia luki.

Kiedy jednak występuje ścianka domenowa magnetyczna, niezależnie od tego, czy jest ona symetryczna, czy asymetryczna, stany krawędziowe zamykają przerwę, czyli łączą pasma przewodnictwa i walencyjne. Zachowanie to występuje niezależnie od obecności lub braku ścianki Rashby, chociaż krzywe dyspersji stanów krawędziowych zależą od wartości sprzężenia spin-orbity Rashby. Wynika to z różnych liczb Chern'a po obu stronach ściany domeny magnetycznej.

W przypadku symetrycznej ściany Rashby i jednorodnego namagnesowania, relacja dyspersji stanów krawędziowych jest symetryczna względem zmiany kierunku propagacji ($k_y \rightarrow -k_y$). W pobliżu małych wektorów falowych (w pobliżu punktów Diraca) dyspersja może być przybliżona

przez paraboliczne pasmo, a masa efektywna elektronów w tym przypadku może być bardzo duża. Masa ta rośnie wraz ze wzrostem magnetyzacji M i zmniejszaniem się parametru sprzężenia Rashby λ_0 . Tego typu ciężkie fermiony mogą być odpowiedzialne za specyficzne właściwości transportowe stanów zlokalizowanych na ściankach domenowych. W ogólnym przypadku jednak krzywe dyspersji stanów krawędziowych nie są symetryczne w k_y .

Szczególnie interesujący jest przypadek antysymetrycznych ścianek Rashby i magnetycznych, ponieważ krzywe dyspersji obu stanów krawędziowych są wtedy liniowe w k_y i zdegenerowane, co ma miejsce w obu punktach Diraca K i K' . Ponadto, przeanalizowałem przestrzenny rozkład gęstości spinowej związanej ze stanami krawędziowymi.

Oprócz prądów równowagowych, obliczyłem również prądy nierównowagowe ładunkowe i spinowe indukowane przez pole elektryczne lub gradient temperatury. W przypadku antysymetrycznych ścian domen (z liniową dyspersją w k_y) wyprowadzono wyniki analityczne, które wykazały, że termoelektryczny prąd ładunkowy zanika, podczas gdy termoelektryczny prąd spinowy pozostaje niezerowy.

[H8] - Wkład do pracy polegał na: sformułowaniu koncepcji pracy, opracowaniu metodologii obliczeń, wykonaniu większości obliczeń analitycznych, przygotowaniu kodu oraz wykonaniu obliczeń numerycznych z prezentacją wizualną wyników, wstępne przygotowanie manuskryptu, udział w procesie redakcyjnym publikacji, prowadzenie korespondencji z redakcją.

3.4 Podsumowanie autoreferatu

W cyklu prac naukowych przedstawiłem analizę teoretyczną wybranych zjawisk fizycznych w grafenie, koncentrując się na zagadnieniach optospintroniki, termoelektryki oraz właściwościach ścianek domenowych. Badania te obejmują efektywne mechanizmy generacji i manipulacji spinem, polaryzację spinową oraz transport prądów elektrycznych (ładunkowych) i spinowych w obecności sprzężenia spin-orbita Rashby, pól magnetycznych oraz gradientów temperatury.

Optospintronika Badania w zakresie optospintroniki wykazały, że w grafenie z silnym sprzężeniem spin-orbita Rashby możliwa jest optyczna iniekcja spinu, której efektywność zależy od wzajemnego oddziaływania rozszczepienia Rashby i efektu Zeemana. Wykazano, że w zakresie częstości odpowiadającym skali energetycznej sprzężenia Rashby można generować prądy spinowo spolaryzowane, przy czym ich natężenie można kontrolować poprzez zewnętrzne pole magnetyczne o indukcji rzędu kilku tesli. Oprócz tego, przedstawiłem rezonansowy efekty fotogalwaniczny, w którym kierunek prądu można precyzyjnie kontrolować poprzez zewnętrzne parametry, takie jak polaryzacja światła czy pole magnetyczne. Odkrycia te otwierają nowe możliwości zastosowań w zakresie optycznej manipulacji spinem oraz projektowania urządzeń optospintronicznych opartej na grafenie.

Termoelektryka W kontekście właściwości termoelektrycznych wykazałem, że rozpraszanie elektronów na stanach rezonansowych domieszek może istotnie wpływać na współczynniki termoelektryczne w grafenie. Analiza z wykorzystaniem metody macierzy T pozwoliła na dokładne określenie parametrów transportowych, co pozwoliło określić współczynnik Seebecka oraz współczynnika dobroci ZT . Wykazałem również, że obecność stanów rezonansowych blisko poziomu Fermiego może znacząco poprawić wydajność termoelektryczną, otwierając nowe możliwości zastosowań grafenu jako materiału termoelektrycznego. Dodatkowo, stwierdziłem odstępstwa od klasycznego prawa Wiedemanna-Franza dla małych potencjałów chemicznych, co wskazuje na możliwość kontrolowania przewodnictwa cieplnego i elektrycznego w grafenie.

Ścianki domenowe i anomalny efekt Halla Analizy teoretyczne właściwości ścianek domenowych w grafenie ze sprzężeniem spin-orbita Rashby oraz w obecności magnetyzacji wykazały istnienie stanów elektronowych zlokalizowanych wzdłuż granic domenowych. Kluczowym wynikiem jest wykazanie, że liczba stanów krawędziowych jest determinowana różnicą liczb Chern'a po obu stronach ścianki domenowej, co umiejscawia system w fazie kwantowego anomalnego efektu Halla.

Wykazałem również, że w przypadku ściany domenowej typu Rashby powstają zlokalizowane stany krawędziowe, które nie zamykają przerwy energetycznej, lecz prowadzą do formowania pasm o silnie zredukowanej prędkości grupowej. W konsekwencji mogą powstawać płaskie pasma elektronowe, które odpowiadają fermionom o ekstremalnie dużej masie efektywnej. Zjawisko to może mieć istotne konsekwencje dla transportu elektronowego w nanostrukturach grafenowych.

W przypadku współistnienia ścianek domenowych Rashby oraz magnetycznych wykazano, że ich oddziaływanie prowadzi do zamknięcia przerwy energetycznej i powstania stanów krawędziowych o liniowej dyspersji. Oznacza to, że można kontrolować propagację elektronów poprzez odpowiedni dobór parametrów domen magnetycznych oraz sprzężenia Rashby, co może być wykorzystane w przyszłych urządzeniach spintronicznych. Szczególnie interesujący przypadek stanowi konfiguracja, w której obie ścianki domenowe są antysymetryczne – wówczas powstają degenerowane stany krawędziowe o liniowej dyspersji, co może prowadzić do topologicznie chronionego transportu spinowego.

Dodatkowo przeanalizowałem transport prądów ładunkowych i spinowych w stanie równowagowym oraz nierównowagowym. Stwierdzono, że w przypadku antysymetrycznych ścianek

domenowych (dla których krzywe dyspersji są liniowe w funkcji wektora falowego k_y) termoelektryczny prąd ładunkowy zanika, natomiast termoelektryczny prąd spinowy pozostaje niezerowy. Wyniki te wskazują na potencjalne zastosowania w spintronice termoelektrycznej, umożliwiając konwersję gradientu temperatury na spinowy prąd elektryczny bez generowania prądu ładunkowego.

Perspektywy zastosowań Przeprowadzone badania wskazują na szerokie spektrum zastosowań struktur grafenowych w nowoczesnych technologiach spintroniki, optospintroniki i termoelektryki. Analizowane modele teoretyczne dostarczają nowych narzędzi do efektywnego sterowania spinem oraz projektowania stanów krawędziowych w nanostrukturach grafenowych. Możliwość precyzyjnej kontroli prądów spinowych oraz ich polaryzacji otwiera perspektywy dla rozwoju innowacyjnych urządzeń bazujących na efektach spinowo-transportowych.

4 Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych

5 Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej

- I – Martin Luther Universitat Halle Winttenberg, Faculty of Natural Sciences II Chemistry, Physics and Mathematics, Institute of Physics, Sierpień 2014. Badania związane z własnościami termoelektrycznymi grafenu.
- II – Martin Luther Universitat Halle Winttenberg, Faculty of Natural Sciences II Chemistry, Physics and Mathematics, Institute of Physics, Sierpień 2015. Badania związane z oddziaływaniem fali elektromagnetycznej z orbitalnym momentem pędu dla warstwy grafenu w zewnętrznym polu magnetycznym i oddziaływaniem SO Rashby.
- III – Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Fizyki, Zakład Fizyki Mezoskopowej, maj-listopad 2021. Tematyka związana z badaniem transportu elektronowego i spinowego przez dwuwymiarowe układy warstwowe i interfejsy.
- IV – Martin Luther Universitat Halle Winttenberg, Faculty of Natural Sciences II Chemistry, Physics and Mathematics, Institute of Physics, wrzesień-grudzień 2024 r. Badania wpływu oddziaływania spin-orbita Rashby na dyskretne stany elektronowe paska warstwy grafenu, określenie własności optycznych, spinowych oraz transportowych. Badania własności optoelektronicznych 2D warstwy antyferromagnetyka. Badania wpływu domieszkowania międzywarstwowego podwójnej skręconej warstwy grafenu, określenie absorpcji promieniowania elektromagnetycznego w funkcji kąta skręcenia.

6 Osiągnięcia dydaktyczne, organizacyjne oraz popularyzujące naukę

6.1 Dydaktyka - prowadzone zajęcia dydaktyczne

- Fizyka I, wykład,
- Konwersja energii słonecznej, wykład, laboratorium, projekt,
- Informatyka I, laboratorium,
- Algebra z geometrią, ćwiczenia,
- Technologie informacyjne, laboratorium,
- Modelowanie komputerowe, laboratorium,
- Ćwiczenia rachunkowe z fizyki,
- Pierwsza pracownia fizyczna, laboratorium,
- Wprowadzenie do systemu L^AT_EX, laboratorium,
- Narzędzia wspomagania obliczeń inżynierskich,

6.2 Projekty dydaktyczne

- [PR1] Nowa jakość – zintegrowany program rozwoju Politechniki Rzeszowskiej, POWR.03.05.00-00-Z209/17 PROGRAM NCBiR, **koordynator**, 2018-2022 r.
- [PR2] Inżynier na Staż WYSOKIEJ JAKOŚCI PROGRAM STAŻOWY DLA STUDENTÓW INŻYNIERII MEDYCZNEJ WYDZIAŁU MATEMATYKI I FIZYKI STOSOWANEJ POLITECHNIKI RZESZOWSKIEJ, POWR.03.01.00-IP.08-00-SP2/17 PROGRAM NCBiR, **kierownik**, 2017-2019 r.

6.3 Działalność organizacyjna

- Przewodniczący Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne, PRz,
- Członek Uczelnianej komisji ds. Nauki,
- Członek Rady Nadzorującej Centrum Transferu Technologii PRz,
- Członek Wydziałowej Komisji ds. Oceny Nauczycieli Akademickich,
- Członek Wydziałowej Komisji ds. Zapewnienia Jakości Kształcenia,
- Współorganizator konferencji międzynarodowej *Symmetry and Structural Properties of Condensed Matter SSPCM* SSPCM, 2019, 2014, 2016, 2018 r.
- Członkostwo w Rzeszowskim Oddziale LFPPI,
- Członkostwo w Rzeszowskim Kłastrze Energii Odnawialnej PKEO,
- Administrowanie stroną internetową Katedry Fizyki.
- Członek Rady Koordynacyjnej ds. Rozwoju Sektora Fotowoltaiki w MKiŚ

6.4 Działalność popularyzująca naukę

- Udział w zajęciach Politechniki Dziecięcej (pokazy z fizyki),
- Wykłady z okazji *Dnia Liczby π* ,
- Prace związane z promocją Katedry Fizyki na dniach otwartych PRz.

6.5 Nagrody i wyróżnienia

- Brązowy Krzyż Zasługi 2022r.
- Nagroda indywidualna Rektora Politechniki Rzeszowskiej - 2013 r.,
- Zespołowa Nagroda Rektora Politechniki Rzeszowskiej za badania w zakresie fizyki mezoskopowej i grafenu - 2012 r.,
- Wyróżnienie na konferencji *IV Rzeszowska Konferencja Młodych Fizyków* Rzeszów 2009 r.

7 Działalność związana z karierą naukową

7.1 Projekty B+R

W karierze naukowej miałem okazję pracować w firmie prywatnej, gdzie prowadziłem następujące projekty:

- [PR1] Aktywny zestaw szybowy dla budownictwa energetycznie dodatniego REALIZACJA PROJEKTU DOFINANSOWANEGO Z FUNDUSZY EUROPEJSKICH W RAMACH: PODDZIAŁANIE 1.1.1 BADANIA PRZEMYSŁOWE I PRACE ROZWOJOWE REALIZOWANE PRZEZ PRZEDSIĘBIORSTWA, PROGRAM NCBiR, kierownik, 2015-18, ML System S.A. Celem badań fazy B+R było przygotowanie technologii pozwalającej wdrożyć zestaw szybowy przeznaczony dla budownictwa energetycznie dodatniego.
- [PR2] Fotowoltaiczne Centrum Badań i Rozwoju ML System S.A. Projekt realizowany w ramach Programu Operacyjnego Inteligentny Rozwój 2014-2020, Oś priorytetowa 2 – Wsparcie otoczenia i potencjału przedsiębiorstw do prowadzenia działalności B+R+I, Działanie 2.1 – Wsparcie inwestycji w infrastrukturę B+R przedsiębiorstw, okres realizacji 2017-20, ML System S.A. Głównym celem planowanego przedsięwzięcia było osiągnięcie przewagi technologicznej spółki, głównie w produkcji ogniw fotowoltaicznych III generacji.

Praca w ML System S.A. pozwoliła mi zdobyć cenne doświadczenie w realizacji projektów badawczo-rozwojowych na styku nauki i przemysłu. Miałem okazję współpracować zarówno z zespołami inżynierskimi, jak i badawczo-rozwojowymi, co pozwoliło mi lepiej zrozumieć wyzwania związane z komercjalizacją technologii. Tworząc Fotowoltaiczne Centrum Badań i Rozwoju, połączyłem kompetencje fizyka teoretyka z pracą doświadczalną, co umożliwiło mi zdobycie praktycznej wiedzy w zakresie technologii fotowoltaicznych oraz ich wdrażania w skali przemysłowej.

7.2 Szkolenia i certyfikaty

- PRINCE2 Foundation certificat in Project Management,
- MoR Foundation certificat in Risk Management,
- Kurt J Lesker company - Introduction to Physical Vapor Deposition (PVD) and Thin Film Growth,
- Kurt J Lesker company - Introduction to Vacuum System Design,
- Kurt J Lesker company - Introduction to Atomic Layer Deposition.

Literatura

- [1] J. Inoue, A. Yamakage, and S. Honda. *Graphene in Spintronics: Fundamentals and Applications*. Jenny Stanford Publishing, (1st ed.) edition, 2016.
- [2] P. Lazić, G. M. Sipahi, R. K. Kawakami, and Igor Žutić. Graphene spintronics: Spin injection and proximity effects from first principles. *Phys. Rev. B*, 90:085429, Aug 2014.
- [3] Albert Fert. Nobel lecture: Origin, development, and future of spintronics. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1517–1530, Dec 2008.
- [4] Peter A. Grünberg. Nobel lecture: From spin waves to giant magnetoresistance and beyond. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1531–1540, Dec 2008.
- [5] Rahul Mishra and Hyunsoo Yang. Emerging spintronics phenomena and applications. *IEEE Transactions on Magnetics*, 57(1):1–34, 2021.
- [6] A. S. Núñez, R. A. Duine, Paul Haney, and A. H. MacDonald. Theory of spin torques and giant magnetoresistance in antiferromagnetic metals. *Phys. Rev. B*, 73:214426, Jun 2006.
- [7] Sabpreet Bhatti, Rachid Sbiaa, Atsufumi Hirohata, Hideo Ohno, Shunsuke Fukami, and S.N. Piramanayagam. Spintronics based random access memory: a review. *Materials Today*, 20(9):530–548, 2017.
- [8] K. S. Novoselov. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438:197–200, 2005. 10.1038/nature04233.
- [9] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov. Transport of dirac quasiparticles in graphene: Hall and optical conductivities. *Phys. Rev. B*, 73(24):245411, Jun 2006.
- [10] Palash B. Pal. Dirac, majorana, and weyl fermions. *American Journal of Physics*, 79(5):485–498, 2011.
- [11] Emmanuel I. Rashba. Graphene with structure-induced spin-orbit coupling: Spin-polarized states, spin zero modes, and quantum hall effect. *Phys. Rev. B*, 79:161409, Apr 2009.
- [12] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95(22):226801, Nov 2005.
- [13] Yugui Yao, Fei Ye, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, and Zhong Fang. Spin-orbit gap of graphene: First-principles calculations. *Phys. Rev. B*, 75(4):041401, Jan 2007.
- [14] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81(1):109–162, Jan 2009.
- [15] Guido van Miert, Vladimir Juričić, and Cristiane Morais Smith. Tight-binding theory of spin-orbit coupling in graphynes. *Phys. Rev. B*, 90:195414, Nov 2014.
- [16] Sergej Konschuh, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Tight-binding theory of the spin-orbit coupling in graphene. *Phys. Rev. B*, 82:245412, Dec 2010.
- [17] Martin Gmitra and Jaroslav Fabian. Graphene on transition-metal dichalcogenides: A platform for proximity spin-orbit physics and optospintronics. *Phys. Rev. B*, 92:155403, Oct 2015.

- [18] Tobias Frank, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Theory of electronic and spin-orbit proximity effects in graphene on cu(111). *Phys. Rev. B*, 93:155142, Apr 2016.
- [19] A. Varykhalov, D. Marchenko, M. R. Scholz, E. D. L. Rienks, T. K. Kim, G. Bihlmayer, J. Sánchez-Barriga, and O. Rader. Ir(111) surface state with giant rashba splitting persists under graphene in air. *Phys. Rev. Lett.*, 108:066804, Feb 2012.
- [20] Yu. S. Dedkov, M. Fonin, U. Rüdiger, and C. Laubschat. Rashba effect in the graphene/n(111) system. *Phys. Rev. Lett.*, 100:107602, Mar 2008.
- [21] Philipp Leicht, Julia Tesch, Samuel Bouvron, Felix Blumenschein, Philipp Erler, Luca Gagnaniello, and Mikhail Fonin. Rashba splitting of graphene-covered au(111) revealed by quasiparticle interference mapping. *Phys. Rev. B*, 90:241406, Dec 2014.
- [22] Mahmoud M. Asmar and Sergio E. Ulloa. Rashba spin-orbit interaction and birefringent electron optics in graphene. *Phys. Rev. B*, 87:075420, Feb 2013.
- [23] A. Dyrdal, J. Barnaś, and V. K. Dugaev. Current-induced spin polarization in graphene due to rashba spin-orbit interaction. *Phys. Rev. B*, 89:075422, Feb 2014.
- [24] Ma Luo and Zhibing Li. Optical excitation of valley and spin currents of chiral edge states in graphene with rashba spin-orbital coupling. *Phys. Rev. B*, 96:165424, Oct 2017.
- [25] F. Escudero, L. Sourrouille, J. S. Ardenghi, and P. Jasen. Magnetization in pristine graphene with zeeman splitting and variable spin-orbit coupling. *Superlattices and Microstructures*, 101:537–546, January 2017.
- [26] Wenchen Luo and R. Côté. Zeeman coupling and screening corrections to skyrmion excitations in graphene. *Phys. Rev. B*, 88:115417, Sep 2013.
- [27] N. Arabchigavkani, R. Somphonsane, H. Ramamoorthy, G. He, J. Nathawat, S. Yin, B. Barut, K. He, M. D. Randle, R. Dixit, K. Sakanashi, N. Aoki, K. Zhang, L. Wang, W.-N. Mei, P. A. Dowben, J. Fransson, and J. P. Bird. Remote mesoscopic signatures of induced magnetic texture in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 126:086802, Feb 2021.
- [28] Yasufumi Araki, Akihide Yoshida, and Kentaro Nomura. Localized charge in various configurations of magnetic domain wall in a weyl semimetal. *Phys. Rev. B*, 98:045302, Jul 2018.
- [29] Nico S. Baßler and Kai Phillip Schmidt. Effects of domain walls in bilayer graphene in an external magnetic field. *Phys. Rev. B*, 103:155422, Apr 2021.
- [30] Gerald D. Mahan. *Many-particle physics*. A Division of Plenum Publishing Corporation, 2nd edition, 1993.
- [31] E. Conwell and V. F. Weisskopf. Theory of impurity scattering in semiconductors. *Phys. Rev.*, 77:388–390, Feb 1950.
- [32] M. Inglot and V. K. Dugaev. Impurity states in graphene with intrinsic spin-orbit interaction. *Journal of Applied Physics*, 109(12):123709, 2011.
- [33] V. K. Dugaev, M. Inglot, E. Ya. Sherman, and J. Barnaś. Robust impurity-scattering spin hall effect in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 82:121310, Sep 2010.
- [34] V. K. Dugaev and M. I. Katsnelson. Spin relaxation related to edge scattering in graphene. *Phys. Rev. B*, 90:035408, Jul 2014.

- [35] Christian Ertler, Sergej Konschuh, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Electron spin relaxation in graphene: The role of the substrate. *Phys. Rev. B*, 80:041405, Jul 2009.
- [36] Denis Kochan, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Spin relaxation mechanism in graphene: Resonant scattering by magnetic impurities. *Phys. Rev. Lett.*, 112:116602, Mar 2014.
- [37] S. Winnerl, M. Orlita, P. Plochocka, P. Kossacki, M. Potemski, T. Winzer, E. Malic, A. Knorr, M. Sprinkle, C. Berger, W. A. de Heer, H. Schneider, and M. Helm. Carrier relaxation in epitaxial graphene photoexcited near the dirac point. *Phys. Rev. Lett.*, 107:237401, Nov 2011.
- [38] H. J. Goldsmid. *Introduction to thermoelectricity*. Springer, Heidelberg New York, 2010.
- [39] M. I. Alomar and David Sánchez. Thermoelectric effects in graphene with local spin-orbit interaction. *Phys. Rev. B*, 89:115422, Mar 2014.
- [40] Liangbo Liang, Eduardo Cruz-Silva, Eduardo Costa Girão, and Vincent Meunier. Enhanced thermoelectric figure of merit in assembled graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 86:115438, Sep 2012.
- [41] Lijun Zhu, Rong Ma, Li Sheng, Mei Liu, and Dong-Ning Sheng. Universal thermoelectric effect of dirac fermions in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 104:076804, Feb 2010.
- [42] Kireev P S. *Semiconductor physics*. M I R, Moscow, 1975.
- [43] Eui-Sup Lee, Sanghee Cho, Ho-Ki Lyeo, and Yong-Hyun Kim. Seebeck effect at the atomic scale. *Phys. Rev. Lett.*, 112:136601, Apr 2014.
- [44] P. R. Rzeszutko, S. Kudła, and V. K. Dugaev. Transmission of charge and spin in a topological-insulator-based magnetic structure. *Phys. Status Solidi B*, 254(9):1600685, February 2017.
- [45] Vadim V. Cheianov and Vladimir I. Fal’ko. Selective transmission of dirac electrons and ballistic magnetoresistance of $n - p$ junctions in graphene. *Phys. Rev. B*, 74(4):041403, Jul 2006.
- [46] Gengchiao Liang, Neophytos Neophytou, D.E. Nikonov, and M.S. Lundstrom. Performance projections for ballistic graphene nanoribbon field-effect transistors. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 54(4):677–682, April 2007.
- [47] Koichi Saito, Jun Nakamura, and Akiko Natori. Ballistic thermal conductance of a graphene sheet. *Phys. Rev. B*, 76:115409, Sep 2007.
- [48] Luis E. F. Foa Torres, Stephan Roche, and Jean-Christophe Charlier. *Klein tunneling and ballistic transport in graphene and related materials*, pages 118–142. Cambridge University Press, 2014.
- [49] Ryan J. Scott, Pavel Valencia-Acuna, and Hui Zhao. Spatiotemporal observation of quasi-ballistic transport of electrons in graphene, December 2023.
- [50] Shamik Das and Nicolas S. Arango. Performance assessment of a graphene-based ballistic switch design. In *2017 Silicon Nanoelectronics Workshop (SNW)*, page 75–76. IEEE, June 2017.
- [51] Joseph G. Checkelsky and N. P. Ong. Thermopower and nernst effect in graphene in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 80:081413, Aug 2009.

- [52] Peipei Zhang, Chao Wang, Yu-Xian Li, Lixue Zhai, and Juntao Song. Controllable nernst and seebeck effects in graphene with o-shaped kekulé structure. *Applied Physics Letters*, 123(16):163501, 10 2023.
- [53] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and A. A. Varlamov. Anomalous thermospin effect in the low-buckled dirac materials. *Phys. Rev. B*, 90:155107, Oct 2014.
- [54] P. Němec, M. Fiebig, T. Kampfrath, and A. V. Kimel. Antiferromagnetic opto-spintronics. *Nature Physics*, 14(3):229–241, March 2018.
- [55] A. Avsar, H. Ochoa, F. Guinea, B. Özyilmaz, B. J. van Wees, and I. J. Vera-Marun. Colloquium: Spintronics in graphene and other two-dimensional materials. *Rev. Mod. Phys.*, 92:021003, Jun 2020.
- [56] A. Dyrdal, M. Inglot, V. K. Dugaev, and J. Barnaś. Thermally induced spin polarization of a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 87:245309, Jun 2013.
- [57] Line Jelter and Joel D. Cox. Nonlinear thermoplasmonics in graphene nanostructures. *Nano Letters*, 24(43):13775–13782, 2024. PMID: 39417652.
- [58] Eduardo J. C. Dias, Renwen Yu, and F. Javier García de Abajo. Thermal manipulation of plasmons in atomically thin films. *Light: Science & Applications*, 9(1):87, May 2020.
- [59] Lin Cui, Jingang Wang, and Mengtao Sun. Graphene plasmon for optoelectronics. *Reviews in Physics*, 6:100054, 2021.
- [60] Amun Jarzembski, Michael Goldflam, Aleem Siddiqui, Isaac Ruiz, and Thomas E. Beechem. Enhancing graphene plasmonic device performance via its dielectric environment. *Phys. Rev. Appl.*, 14:034044, Sep 2020.
- [61] Viktoryia Shautsova, Themistoklis Sidiropoulos, Xiaofei Xiao, Nicholas A. Güsken, Nicola C. G. Black, Adam M. Gilbertson, Vincenzo Giannini, Stefan A. Maier, Lesley F. Cohen, and Rupert F. Oulton. Plasmon induced thermoelectric effect in graphene. *Nature Communications*, 9(1):5190, Dec 2018.
- [62] G. W. Semenoff, V. Semenoff, and Fei Zhou. Domain walls in gapped graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 101:087204, Aug 2008.
- [63] M. Khodas, I. A. Zaliznyak, and D. E. Kharzeev. Spin-polarized transport through a domain wall in magnetized graphene. *Phys. Rev. B*, 80:125428, Sep 2009.
- [64] Stuart S. P. Parkin, Masamitsu Hayashi, and Luc Thomas. Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science*, 320(5873):190, April 2008.
- [65] Kunihiro Koumoto, Ryoji Funahashi, Emmanuel Guilmeau, Yuzuru Miyazaki, Anke Weidenkaff, Yifeng Wang, and Chunlei Wan. Thermoelectric ceramics for energy harvesting. *Journal of the American Ceramic Society*, 96(1):1–23, January 2013.
- [66] R. Franz and G. Wiedemann. Ueber die wärme-leitungsfähigkeit der metalle. *Ann. Phys.*, 165(8):497–531, January 1853.
- [67] Deqi Wang and Jing Shi. Effect of charged impurities on the thermoelectric power of graphene near the dirac point. *Phys. Rev. B*, 83:113403, Mar 2011.

- [68] Min Zhong, Shuai Li, Hou-Jian Duan, Liang-Bin Hu, Mou Yang, and Rui-Qiang Wang. Effect of impurity resonant states on optical and thermoelectric properties on the surface of a topological insulator. *Scientific Reports*, 7(1):3971, 2017.
- [69] Nicholas Wakeham, Alimamy F. Bangura, Xiaofeng Xu, Jean-Francois Mercure, Martha Greenblatt, and Nigel E. Hussey. Gross violation of the wiedemann-franz law in a quasi-one-dimensional conductor. *Nature Communications*, 2(1):396, 2011.
- [70] Yang Li, Jing He, Xiao Kong, and Su-Peng Kou. Vacancy-induced intrinsic magnetic impurity with quasilocalized spin moment in graphene. *Phys. Rev. B*, 90:201406, Nov 2014.
- [71] Dmitry V. Fedorov, Martin Gradhand, Sergey Ostanin, Igor V. Maznichenko, Arthur Ernst, Jaroslav Fabian, and Ingrid Mertig. Impact of electron-impurity scattering on the spin relaxation time in graphene: A first-principles study. *Phys. Rev. Lett.*, 110:156602, Apr 2013.
- [72] Yu. V. Skrypnik and V. M. Loktev. Impurity effects in a two-dimensional system with the dirac spectrum. *Phys. Rev. B*, 73:241402, Jun 2006.
- [73] Takeo Matsubara and Yutaka Toyozawa. Theory of impurity band conduction in semiconductors: An approach to random lattice problem. *Progress of Theoretical Physics*, 26(5):739–756, 11 1961.
- [74] M. Lannoo. The theory of impurity states in semiconductors. *Physica Scripta*, 1992:135–139, 1992.
- [75] Mark T. Lusk and L. D. Carr. Nanoengineering defect structures on graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 100(17):175503, Apr 2008.
- [76] Tomas Löthman and Annica M. Black-Schaffer. Defects in the $d + id$ -wave superconducting state in heavily doped graphene. *Phys. Rev. B*, 90:224504, Dec 2014.
- [77] María P. López-Sancho, Fernando de Juan, and María A. H. Vozmediano. Magnetic moments in the presence of topological defects in graphene. *Phys. Rev. B*, 79(7):075413, Feb 2009.
- [78] Oleg V. Yazyev and Lothar Helm. Defect-induced magnetism in graphene. *Phys. Rev. B*, 75(12):125408, Mar 2007.
- [79] M. A. H. Vozmediano, M. P. López-Sancho, T. Stauber, and F. Guinea. Local defects and ferromagnetism in graphene layers. *Phys. Rev. B*, 72(15):155121, Oct 2005.
- [80] Joseph Callaway and A. James Hughes. Localized defects in semiconductors. *Phys. Rev.*, 156:860–876, Apr 1967.
- [81] M Inglot and V K Dugaev. Discrete and resonance states in graphene near the dirac point. *Journal of Physics: Conference Series*, 303:012050, jul 2011.
- [82] Michał Inglot and Tomasz Szczepański. Impurity-induced magnetization of graphene. *Materials*, 15(2), 2022.
- [83] Jae Hun Seol, Insun Jo, Arden L. Moore, Lucas Lindsay, Zachary H. Aitken, Michael T. Pettes, Xuesong Li, Zhen Yao, Rui Huang, David Broido, Natalio Mingo, Rodney S. Ruoff, and Li Shi. Two-dimensional phonon transport in supported graphene. *Science*, 328(5975):213, April 2010.

- [84] Kin Chung Fong, Emma E. Wollman, Harish Ravi, Wei Chen, Aashish A. Clerk, M. D. Shaw, H. G. Leduc, and K. C. Schwab. Measurement of the electronic thermal conductance channels and heat capacity of graphene at low temperature. *Phys. Rev. X*, 3:041008, Oct 2013.
- [85] C. L. Kane and Matthew P. A. Fisher. Thermal transport in a luttinger liquid. *Phys. Rev. Lett.*, 76:3192–3195, Apr 1996.
- [86] Francesco Buccheri, Andrea Nava, Reinhold Egger, Pasquale Sodano, and Domenico Giuliano. Violation of the wiedemann-franz law in the topological kondo model. *Phys. Rev. B*, 105:L081403, Feb 2022.
- [87] Alessandro Principi and Giovanni Vignale. Violation of the wiedemann-franz law in hydrodynamic electron liquids. *Phys. Rev. Lett.*, 115:056603, Jul 2015.
- [88] M. F. Smith and Ross H. McKenzie. Apparent violation of the wiedemann-franz law near a magnetic field tuned metal-antiferromagnetic quantum critical point. *Phys. Rev. Lett.*, 101:266403, Dec 2008.
- [89] Jahan M. Dawlaty, Shriram Shivaraman, Jared Strait, Paul George, Mvs Chandrashekar, Farhan Rana, Michael G. Spencer, Dmitry Veksler, and Yunqing Chen. Measurement of the optical absorption spectra of epitaxial graphene from terahertz to visible. *Appl. Phys. Lett.*, 93(13):131905, December 2018.
- [90] Y. H. Ho, J. Y. Wu, Y. H. Chiu, J. Wang, and M. F. Lin. Electronic and optical properties of monolayer and bilayer graphene. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 368(1932):5445–5458, 2010.
- [91] A. Marini, J. D. Cox, and F. J. García de Abajo. Theory of graphene saturable absorption. *Phys. Rev. B*, 95:125408, Mar 2017.
- [92] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim. Fine structure constant defines visual transparency of graphene. *Science*, 320(5881):1308, June 2008.
- [93] P. Ingenhoven, J. Z. Bernád, U. Zülicke, and R. Egger. Features due to spin-orbit coupling in the optical conductivity of single-layer graphene. *Phys. Rev. B*, 81:035421, Jan 2010.
- [94] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, and A. C. Ferrari. Graphene photonics and optoelectronics. *Nature Photonics*, 4:611, August 2010.
- [95] Julien Rioux and Guido Burkard. Photoinduced pure spin-current injection in graphene with rashba spin-orbit interaction. *Phys. Rev. B*, 90:035210, Jul 2014.
- [96] Christian Vetter, Ralf Steinkopf, Klaus Bergner, Marco Ornigotti, Stefan Nolte, Herbert Gross, and Alexander Szameit. Realization of free-space long-distance self-healing bessel beams. *Laser & Photonics Reviews*, 13(10):1900103, October 2019.
- [97] Mikhail I. Katsnelson. *Graphene - Carbon in Two Dimensions*. Cambridge University Press, 2012.
- [98] Lorenzo Rossi, Fabrizio Dolcini, and Fausto Rossi. Majorana-like localized spin density without bound states in topologically trivial spin-orbit coupled nanowires. *Phys. Rev. B*, 101:195421, May 2020.

- [99] M. Inglot, V. K. Dugaev, A. Dyrdał, and J. Barnaś. Graphene with rashba spin-orbit interaction and coupling to a magnetic layer: Electron states localized at the domain wall. *Phys. Rev. B*, 104:214408, Dec 2021.