

# Nodális csomó félfémek elméleti vizsgálata

Osváth Botond



Szakkdolgozat

Témavezető: Oroszlány László

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar  
Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>1</b>
<b>2. Csomóelméleti alapok</b>	<b>3</b>
2.1. Csomó diagram . . . . .	3
2.2. Csomó invariánsok . . . . .	4
2.2.1. Színezhetőség . . . . .	5
2.2.2. Nemszám . . . . .	5
2.2.3. Csomó polinomok . . . . .	5
<b>3. Topológikus félfémek</b>	<b>6</b>
3.1. Matematikai alapok . . . . .	6
3.2. Weyl-félfémek . . . . .	7
3.3. Dirac-félfémek . . . . .	8
3.4. Nodális vonal félfémek . . . . .	8
<b>4. Mágneses oszcillációk</b>	<b>11</b>
<b>5. Nodális csomó félfém modellek</b>	<b>12</b>
5.1. Kontinuum modell . . . . .	12
5.2. Rács modell . . . . .	13
5.3. A csomó eltűntetése . . . . .	13
<b>6. A numerikus vizsgálat menete</b>	<b>14</b>
6.1. Mintavételezési irányok . . . . .	14
6.2. A csomó megtalálásának menete . . . . .	16
6.3. A szükséges mennyiségek kiszámolása . . . . .	17
6.4. Az extrémális felület(ek) megtalálása . . . . .	19
<b>7. Az eredményeim</b>	<b>20</b>
<b>8. Köszönetnyilvánítás</b>	<b>24</b>
<b>Hivatkozások</b>	<b>25</b>

# 1. Bevezetés

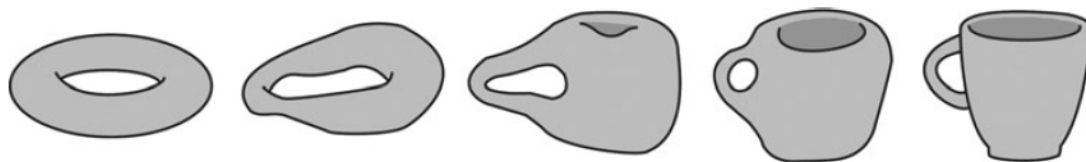
A szilárdtestfizika a fizika egyik legnagyobb és legjelentősebb része. Ez részben annak köszönhető, hogy rengeteg mindennel foglalkozik és rengeteg, a hétköznapi emberek számára is fontos fejlődést köszönhetünk neki. Talán az egyik legszembetűnőbb példa a számítástechnikában található, hiszen az a napjaink szerves részévé vált. Az elektronikai eszközök legfontosabb alkotóelemei a tranzistorok (több száz milliárd darab található csupán egy okostelefonban), amiket próbálnak minél kisebbre tervezni. A kisebb méretnek számos előnye van, például több fér el egymás mellett, ami lehetőséget biztosít nagyobb teljesítmény elérésére, valamint energiatakarékosabbak, ami növeli az akkumulátor élettartamát és csökkenti a hőtermelést. A Qualcomm Snapdragon 865 [1], ami 2020 első felében az egyik legerősebb, telefonokba szánt egylapkás rendszer, már 7nm-es gyártási technológiájú [2]. Ilyen kicsi méreteknél egyre fontosabbá válnak a szilárd testek kvantummechanikai tulajdonságainak a megnyilvánulásai, ami amellett, hogy nehezíti a fejlődést, ösztönzően hat a kvantummechanikai jelenségek tanulmányozására és esetlegesen új alkalmazások felé mutathat utat.

Az előző évszázad egyik legnagyobb előrelépése a szilárdtestfizikában az volt, hogy különböző anyagi állapotokat tudtak csoportosítani a spontán szimmetriasértés elve alapján [3]. Az ilyen szimmetriasértésre az egyik leggyakoribb példa a kristályszerkezet, ami a forgási és eltolási szimmetriát sérti, hiszen a vákuummal ellentétben csak bizonyos eltolások és forgatások hatására nem változik meg a rendszer.

A spontán szimmetriasértések adták az alapját Landau elméletének, ami az akkor vizsgált fázisok legnagyobb részének megértéséhez elég is volt [4, 5], de a kvantált Hall-effektus felfedezése 1980-ban [6] (amiért később, 1985-ben Nobel-díjat adtak) nem várt következtetéseket vont maga után. Klaus von Klitzing nagyon tiszta, kétdimenziós elektrongáz vizsgálata során azt vette észre, hogy nagy mágneses tér esetén a Hall-vezetőképesség kvantált volt olyan módon, hogy a rendszer geometriájától nem függött (a várakozás az volt, hogy az ellenállás a mágneses térrel egyenesen arányos lesz), csupán egy természeti állandókból kikombinált mennyiség,  $e^2/h$  (ahol  $e$  az elemi töltést,  $h$  pedig a Planck-állandó), egész számú többszöröse volt. Ez azért is volt meglepő, mert az effektusért felelős kvantumállapot semmilyen szimmetriát sem sértett. Ezután elkezdtek még többet foglalkozni a kvantum Hall-effektussal és 1982-ben Daniel Tsui és Horst Störmer a korábbinál tisztább, kétdimenziós elektrongázt, a korábbinál nagyobb mágneses térben vizsgáltak és azt vették észre, hogy a kvantumszám nem csak egész szám lehet, hanem racionális szám is [7] (ezért később, 1998-ban ők és Robert Laughlin, aki a jelenség elméleti leírásában játszott nagy szerepet, kaptak Nobel-díjat).pdf

Légyegében ennek a jelenségnek a vizsgálata vezetett egy új osztályozási módszerhez, ami a vizsgált rendszereket topologikus tulajdonságaik alapján osztályozza [8]. Ez a kvantum Hall-effektust azzal magyarázza, hogy a Hall vezetőképesség egy topologikus invariáns [5], azaz nem érzékeny az anyagi paraméterek sima megváltozására és nem is tud megváltozni, hacsak nem történik kvantum fázis átmenet. A fizikai rendszerekben megfigyelt topologikus jelenségek elméleti leírása nagyban támaszkodik matematika topologikus elméleteire. Az egyik topologikus invariáns, ami alapján a zárt felületeket tudjuk csoportosítani, a nemszám. A nemszám egy természetes szám, ami a zárt felületen lévő "lyukak" számát adja meg. Az így történő cso-

portosítás szerint a bögre és a tórusz ugyan abba a csoportba kerül, mivel mindkettőn egy lyuk található. Ennek az egyik következménye az, hogy a két alakzat egymásba átvihető "kellően sima" transzformációval (ez látható az 1. ábrán).



1. ábra. Így lesz a fánkból bögre (a transzformációt érdemes inkább a másik irányban alkalmazni). Forrás: [9]

Innen ered a következő vicc is: "A topológus olyan személy, aki nem tudja megmondani a különbséget a kávéscsésze és a fánk között.". Látszott tehát, hogy van létjogosultsága a topológiai módszereknek a fizikában is, ezért szélesebb körben is megpróbálták alkalmazni. Így kezdtek el először a tiltott sávval rendelkező kvantumállapotok topológiai szempontok szerint történő csoportosításával foglalkozni, létrehozva a topológikus szigetelők csoportját. Mivel ez sikeresnek bizonyult, az elmúlt években a szigetelők topologikus karakterizálására kifejlesztett eszköztárat a fémek és félfémek vizsgálatára is kiterjesztették.

A dolgozatomban a nodális csomó félfémek vizsgálatával foglalkozom. A célom az, hogy a csomók numerikus vizsgálatának segítségével (közvetlenül vagy közvetetten) mérhető adatokat nyerjek ki belőlük. Ezek az adatok azért fontosak, mivel a csomók topologikus tulajdonságaitól függenek. Emiatt felhasználhatóak a csomók topologikus tulajdonságai és bizonyos fizikai mennyiségek közötti kapcsolatteremtésre. Az ilyen összefüggések azért lennének hasznosak számunkra, mivel a csomó invariánsok számolása nehézkes, viszont a fizikai mennyiségek mérhetőek. Ennek az egyik következménye az lenne, hogy fizikai mérések segítségével lehetne a csomókat csoportosítani. Ez tehát nem csak a fizikában jelenthetne előrelépést, hanem a matematikában is, mivel a csomóelméletben rengeteg megoldatlan probléma van még napjainkban is. Az ötlet alapját az adta, hogy a Hall-effektus esetében a Hall-vezetőképesség, azaz egy fizikailag mérhető mennyiség, összefüggésben áll a Chern-számmal [10], ami egy topologikus invariáns.

## 2. Csomóelméleti alapok

A fejezet célja az, hogy bevezessem a legalapvetőbb csomóelméletbeli definíciókat, valamint bemutassak pár csomóinvariánst. A csomókkal részletesen a [11] könyv foglalkozik; én csupán egy rövid áttekintést biztosítok.

Egy  $K \subset \mathbb{R}^3$  halmazt csomónak hívunk, ha előáll  $f(\mathbb{R}) = K$  alakban, ahol  $f \in C^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R}^3)$  olyan függvény, aminek a deriváltja sosem nulla és eleget tesz a  $f(x_1) = f(x_2) \iff x_1 - x_2 \in 2\pi\mathbb{Z}$  feltételnek. Ez azt jelenti, hogy a csomó "kellően sima" és nem keresztezi saját magát. Két csomót ekvivalensnek nevezünk, ha egymásba átvihetők egy folytonos transzformációval úgy, hogy közben "nem szakítjuk el" őket. Mivel az ekvivalens csomók között legtöbbször nem érdemes különbséget tenni, ezért, lehetséges csomók helyett csomók ekvivalenciaosztályával foglalkozni. Mivel a szövegkörnyezetből egyértelmű, hogy éppen melyikről van szó, ezért azzal a konvencióval fogok élni, hogy azonosítom mindegyik ekvivalenciaosztályt egy elemével. Ez a konvenció ismerős lehet az olvasó számára a mértékelméletből, ahol a "csomó" szerepét a "függvény" veszi át, valamint az "egymásba transzformálható" helyett az ekvivalencia relációt a "majdnem mindenhol egyenlő" biztosítja.

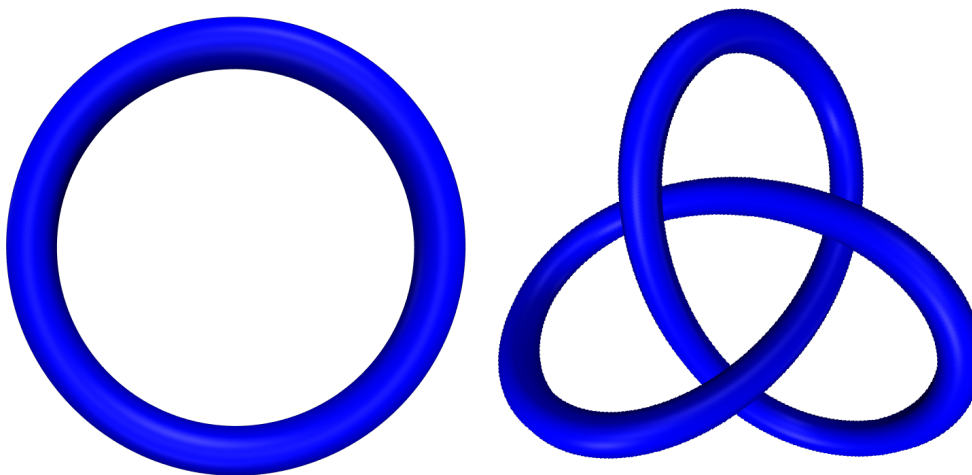
A két legegyszerűbb példa a triviális csomó és a háromlevelű csomó. Az előbbit leírására egy lehetőség például a következő függvény:

$$f(t) = [\cos(t), \sin(t), 0], \quad (1)$$

az utóbbira pedig egy lehetséges függvény:

$$f(t) = [\sin(t) + 2\sin(2t), \cos(t) - 2\sin(2t), -\sin(3t)]. \quad (2)$$

Ez a két csomó látható a 2. ábrán.

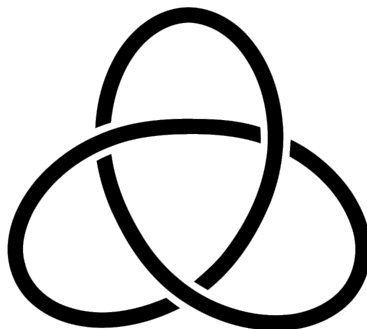


2. ábra. A triviális csomó (bal oldalon) és a háromlevelű csomó (jobb oldalon).

### 2.1. Csomó diagram

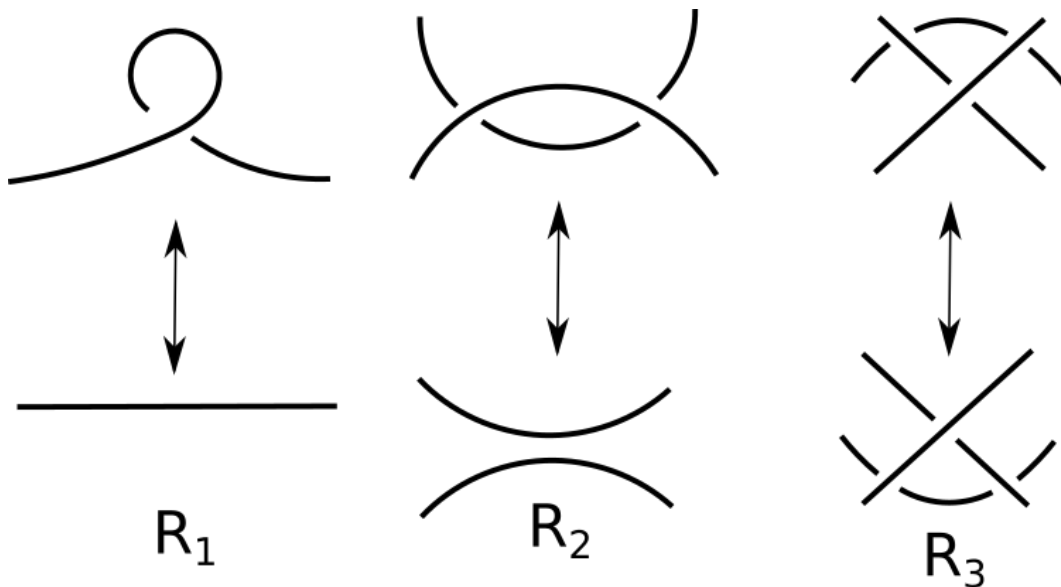
Az egyszerűbb kezelhetőség érdekében érdemes bevezetni a csomó diagramokat. A csomó diagram egy "majdnem bijektív" 2 dimenziós projekciója a csomónak. A "majdnem bijektív"

azt jelenti, hogy csupán azokban a pontokban nem egyértelmű, ahol két ág keresztezi egymást; ezért ezekben a pontokban meg kell különböztetni valamilyen módon a "felső" és az "alsó" ágot. Példaként a 3. ábrán látható a háromlevelű csomó diagramja.



3. ábra. A háromlevelű csomó diagramja. Forrás: [12].

Két 3 dimenziós csomóról általában nehéz eldönteni, hogy azok ekvivalensek-e. Erre a problémára talált egy egyszerűbb megoldást K. Reidemeister, aki bebizonyította, hogy két csomó diagram ugyan ahhoz a csomóhoz tartozik, ha három fajta speciális transzformáció véges sokszor történő alkalmazásával azok egymásba vihetőek. Ezt a három fajta transzformációt a tiszteletére Reidemeister transzformációknak nevezték el; ezek láthatóak a 4. ábrán.



4. ábra. A három lehetséges Reidemeister transzformáció.

## 2.2. Csomó invariánsok

A csomókhoz lehet rendelni úgynevezett csomó invariánsokat, amik az ekvivalens csomók esetén egyenlőek, viszont ha két csomó esetén bizonyos invariánsok egyenlőek, az nem jelenti még azt,

hogy a két csomó ekvivalens. Ezek több csoportba rendezhetőek a lehetséges értékük alapján; a három leggyakoribb a logikai változó, egész szám valamint a polinom.

### 2.2.1. Színezhetőség

Egy csomó diagram akkor színezhető, ha minden ív (azaz két csomópont közötti szakasz) kiszínezhető 3 szín használatával úgy, hogy legalább két szín felhasználásra kerül és egy csomópontnál vagy egy vagy három szín találkozik. Ez alapján a triviális csomó nem színezhető, a háromlevelű csomó viszont igen.

### 2.2.2. Nemszám

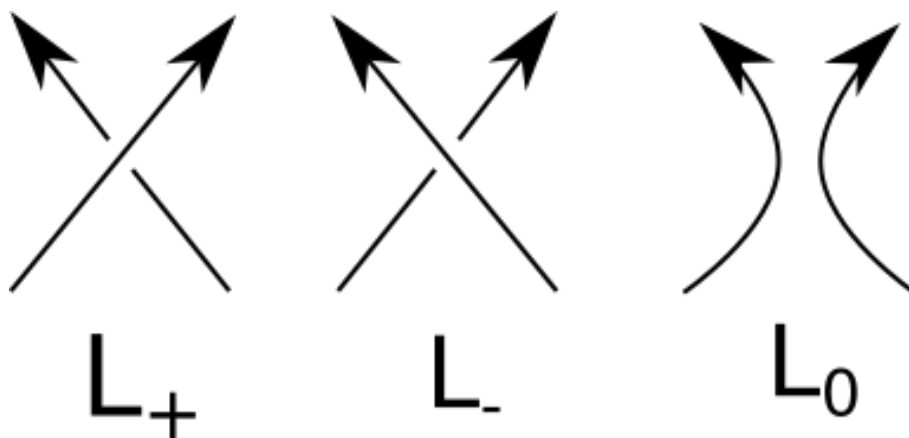
Ahhoz, hogy egy csomónál a csomó nemszámáról lehessen beszélni, hozzá kell rendelni valamilyen felületet, ami valamilyen módon reprezentálja. Ezt többféleképpen is meg lehet tenni, viszont ez nem minden esetben eredményez csomó invariánst, hiszen több, különböző nemszámú felület is hozzárendelhető. Viszont belátható, hogy ha vesszük az összes olyan felületet, aminek a határa az adott csomó és ezeknek vesszük a nemszámát, akkor a lehető legkisebb nemszám csomó invariáns, ezért ezt érdemes a csomó nemszámának nevezni.

### 2.2.3. Csomó polinomok

A legtöbb csomó polinom definíciója ugyan azt a "receptet" követi: először a csomónak irányítotttságot kell adni, majd rekurzívan, a csomó "kibogozásával" kell felépíteni. A kibogozás azt jelenti, hogy az 5. ábrán látható kereszteződések cseréjével és a rekurziós reláció segítségével a csomót vissza kell vezetni a triviális csomóra. Erre egy példa a Conway-polinom,  $C(z)$ , aminek a rekurziós relációja:

$$C_{L_+}(z) = C_{L_-}(z) + zC_{L_0}(z). \quad (3)$$

Ezen felül ha  $O$  a triviális csomó, akkor  $C(O) = 1$  valamint ha  $M$  több triviális csomó együttese, akkor  $C(M) = 0$ .



5. ábra. A három lehetséges csomópont.

### 3. Topológikus félfémek

Ebben a fejezetben röviden ismertetem a topológikus félfémeket legelterjedtebb típusait. Mindegyik előtt viszont érdemes pár, a témához tartozó definíciót megemlíteni; ezeket megpróbálom a [13] könyvhöz igazítani.

#### 3.1. Matematikai alapok

A szakdolgozatomban a 3 dimenziós  $k$ -térben lévő rendszereket vizsgálom, viszont úgy érzem, hogy ebben az alfejezetben érdemes kicsit általánosabban bevezetni a fogalmakat. Emiatt egy általános, 2 vagy 3 dimenziós  $\mathcal{P}$  paraméter-teret fogok használni a következőkben. Ekkor a paraméter-tér elemeivel indexelhetők a Hilbert-térbeli állapotok, azaz minden állapot  $|\psi(R)\rangle$  alakú, ahol  $R \in \mathcal{P}$ . A Berry konnektiót az  $R$  pontban a következőképpen lehet definiálni:

$$A(R) = i\langle\psi(R) | \nabla_R | \psi(R)\rangle. \quad (4)$$

Aminek a rotációja pedig az úgynevezett Berry-konnektió:

$$B(R) = \text{rot}(A(R)). \quad (5)$$

Ahol egy 2 dimenziós vektor rotációját legegyszerűbben a vektor három dimenziós "változatának" rotációjaként lehet elképzelni. Azaz az  $[u, v]$  vektorból képzett  $[u, v, 0]$  vektor rotációja  $[0, 0, f]$  alakban írható, ahol  $f$  az eredeti vektor rotációja.

Ezek után pedig lehet definiálni két topológikus invariánst: a Chern-számot és a Berry-fázist.

Legyen  $\mathcal{F}$  egy felületet a  $\mathcal{P}$  paraméter-térben. Ekkor az  $\mathcal{F}$  felület Chern-számának a definíciója a következő:

$$Q = -\frac{1}{2\pi} \oint_{\partial\mathcal{F}} A \cdot dR = -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{F}} B \cdot dS. \quad (6)$$

Ahol második egyenlőség a Stokes-tétel következménye.

A Chern-számot lehet rendelni például a 2 dimenziós szigetelők minden sávjához, amennyiben azok nem degeneráltak. Ilyen esetben  $\mathcal{F}$  a Brillouin-zóna, ami egy tórusz. Hasonlóan lehet eljárni 3 dimenziós rendszerekben is, ha a zárt felületen lévő állapotok nem degeneráltak. Ebben az esetben az  $\mathcal{F}$  felület lehet például a Fermi-felület.

Ezen felül egy  $\mathcal{C}$  zárt, paraméter-térbeli görbe esetén definiálható a hozzá tartozó Berry-fázis:

$$\Gamma(\mathcal{C}) = -\arg \exp \left( -i \oint_{\mathcal{C}} A \cdot dR \right). \quad (7)$$

A Berry-fázist általában az 1 dimenziós rendszerek Brillouin-zónájához szokták rendelni, valamint 2 és 3 dimenziós rendszerek esetén pedig a Brillouin-zónában lévő zárt görbékhez.



### 3.2. Weyl-félfémek

A Weyl-félfémek jellegzetes tulajdonsága, hogy a momentum-térben legalább két olyan izolált Weyl-pont van, ahol két, nem-degenerált sáv érintkezik. Egy Weyl-pont Chern-számát az azt körbevevő, megfelelően kicsi felület (annyira, hogy a felületen belül ne legyen másik Weyl-pont) Chern-számaként lehet definiálni. Ezek a pontok topológiailag stabilak olyan értelemben, hogy megszüntetni nem lehet őket a Hamilton-operátor perturbációjával, csak úgy, ha két, ellentétes Chern-számú pont annihilálja egymást [14, 15]. Ezt azzal lehet megmagyarázni, hogy a Chern-szám egy topologikus invariáns, ezért az értéke nem tud megváltozni.

A Hamilton-operátort sorba fejtve egy ilyen  $k_0$  Weyl-pont körül lineáris rendig:

$$H(k_0 + \delta k) = \varepsilon_0(k_0)I + (v_0 \cdot \delta k)I + \sum_{j=1}^3 (v_j \cdot \delta k)\sigma_j. \quad (8)$$

Ahol  $\varepsilon_0(k_0)$  a  $k_0$ -beli energia, a  $(v_j)_{j=0}^3$  mennyiségek az úgynevezett effektív sebességek,  $I$  a  $2 \times 2$ -es egységmátrix,  $\sigma_i$  pedig az  $i$ . Pauli-mátrix. Ekkor a Hamilton-operátor sajátértékei a következő alakban írhatóak:

$$\varepsilon_{\pm}(\delta k) = \varepsilon_0(k_0) + v_0 \cdot \delta k \pm \sqrt{\delta k^t \cdot V \cdot V^t \cdot \delta k}. \quad (9)$$

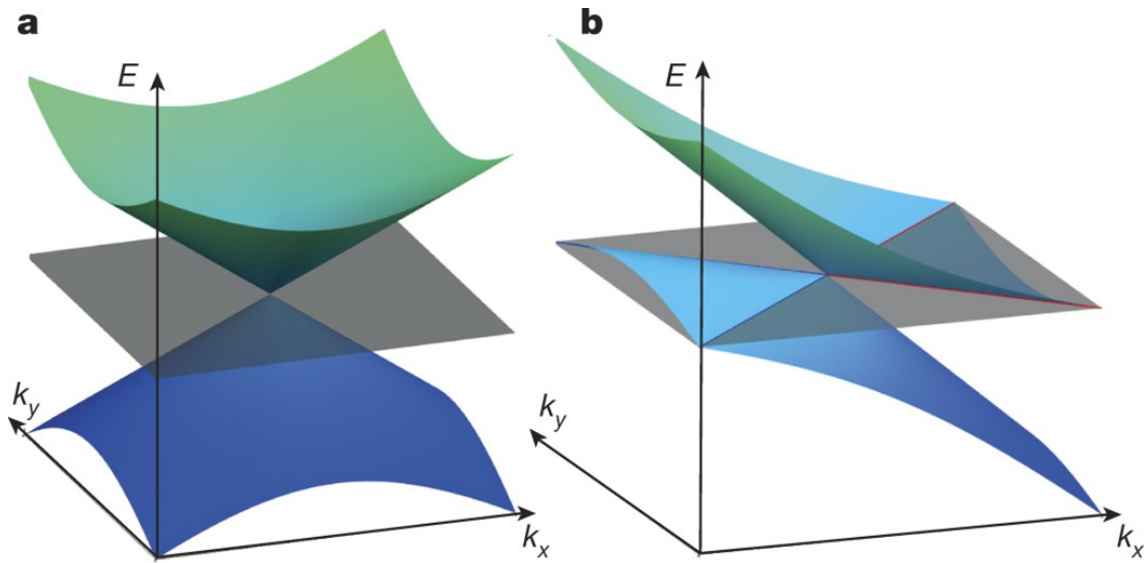
Ahol  $V_{jk} = v_j(k)$ , azaz a  $(v_j)_{j=0}^3$  vektorokat tartalmazza "egymás mellé állítva". A két részt szokás elnevezni kinetikus ( $T$ ) és potenciál ( $U$ ) tagnak, azaz

$$T(\delta k) = \varepsilon_0(k_0) + v_0 \cdot \delta k \quad \text{és} \quad U(\delta k) = \sqrt{\delta k^t \cdot V \cdot V^t \cdot \delta k}. \quad (10)$$

Ezzel a jelöléssel a sajátértékek a következő alakban írhatóak:

$$\varepsilon_{\pm}(\delta k) = T(\delta k) \pm U(\delta k). \quad (11)$$

Ez alapján a Weyl-pontokat két csoportba lehet sorolni: 1-es és 2-es típusú. Egy Weyl-pont akkor számít 2-es típusúnak, ha létezik olyan 1 normájú  $\delta k$  pont, amelyre teljesül a  $T(\delta k) > U(\delta k)$  egyenlőtlenség; ellenkező esetben a 1-es típusúnak nevezzük. 1-es típusú Weyl-pont esetén a Fermi-felület zárt, ami egy pontba megy át, amikor a Fermi-energia egyenlő a Weyl-pont energiájával. A 2-es típusú Weyl-pont pedig az elektron és a lyuk közötti átmeneti pontként jelenik meg.



6. ábra. 1-es típusú (bal oldalon) és 2-es típusú (jobb oldalon) Weyl félfém. Forrás: [16]

Ezen felül egy Weyl-félfémekben nem lehet egyszerre jelen az idő és hely tükrözési szimmetria, ezért az alapján is lehet őket csoportosítani, hogy melyik szimmetria hiányzik [14, 17, 15].

A Weyl-félfémekkel kísérletileg is foglalkoztak, ezért érdemes megemlíteni pár példát rájuk: a  $\text{HgCr}_2\text{Se}_4$  [18] valamint a  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  [19, 20] időtükrözési szimmetriát sértő ferromágneses félfémek; a  $\text{Mn}_3\text{Sn}$  [21] valamint a  $\text{Mn}_3\text{Ge}$  [22] pedig antiferromágnesek; A  $\text{MoTe}_2$  [23, 24] pedig olyan 2-es típusú Weyl-félfém, ami a térbeli tükrözési szimmetriát sérti.

### 3.3. Dirac-félfémek

A Dirac-félfémek jellegzetes tulajdonsága, hogy a momentum-térben van egy (vagy akár több) olyan  $k_0$  pont, ahol két, kétszeresen degenerált sáv érintkezik. Ez az érintkezés már nem olyan stabil, mint a Weyl-félfémek esetében. Egy ilyen Dirac-pontra lehet akár úgy is tekinteni, mint két, ellentétes királis töltésű Weyl-pontra. Viszont a Weyl-félfémekkel ellentétben itt már extra szimmetriára van általában szükség ahhoz, hogy egy Dirac-pont stabil legyen.

A Dirac-félfémek esetében a Hamilton-operátor általános alakja a következő:

$$H(k) = \begin{bmatrix} 0 & (k \cdot \sigma)v_F \\ (k \cdot \sigma)v_F & 0 \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Ahol  $v_F$  a Fermi-sebesség,  $\sigma$  pedig a Pauli-vektor.

Valamint pár példa Dirac-félfémekre:  $\text{VAl}$  [25],  $\text{Na}_3\text{Bi}$  [26, 27],  $\text{K}_3\text{Bi}$  [26],  $\text{Rb}_3\text{Bi}$  [26],  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  [28, 29].

### 3.4. Nodális vonal félfémek

A nodális vonal félfémek jellegzetes tulajdonsága, hogy azoknak a pontoknak a halmaza, ahol a valencia sáv és vezető sáv érintkezik egy egy dimenziós vonalat alkot. Általában egy ilyen típusú

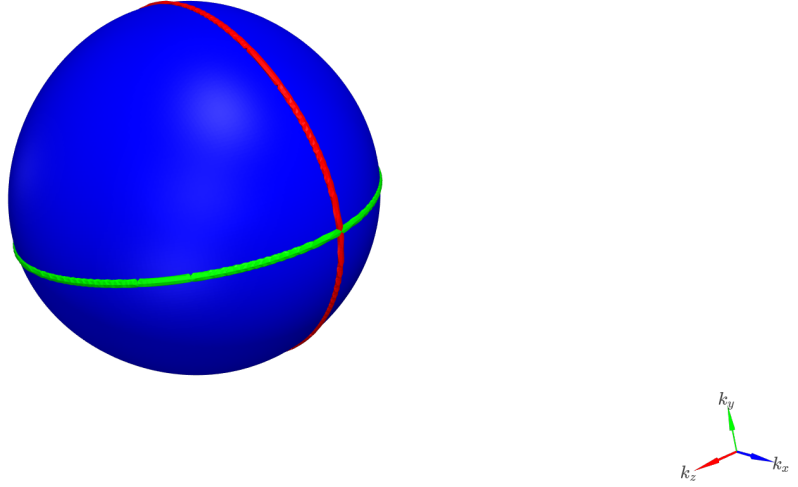
félfémekben szükség van valamilyen extra szimmetriára is, aminek a megszüntetésével az anyag Weyl-félfémé, Dirac-félfémé vagy akár topologikus szigetelővé válhat [30]. Ezt illusztrálható az alábbi, szoroskötésű modell Hamilton-operátorán keresztül:

$$H(k) = \left( 5 - 2 \sum_{j=1}^3 \cos(k_j) \right) \sigma_x + 2 \sin(k_y) \sigma_y + 2 \sin(k_z) \sigma_z. \quad (13)$$

A Hamiltoni egy Weyl-félfémet ír le. A  $H(k) = 0$  egyenletnek két megoldása van; a két Weyl-pont. Ezt úgy lehet a legszemléletesebben látni, ha a  $\sigma_x$  együtthatóját Taylor-sorba fejtsük:

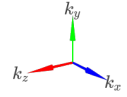
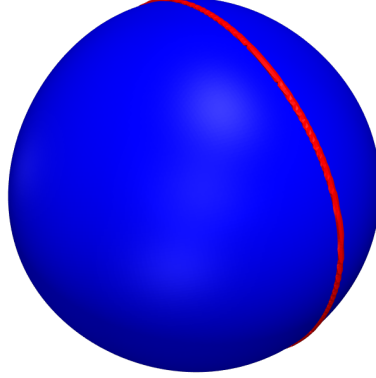
$$\left( 5 - 2 \sum_{j=1}^3 \cos(k_j) \right) \approx \left( 5 - 2 \sum_{j=1}^3 \left( 1 - \frac{k_j^2}{2} \right) \right) = (-1 + k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (14)$$

Azaz az energia (jó közelítéssel) ott lesz 0, ahol a  $k_y = 0$ ,  $k_z = 0$  síkok és a  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = 1$  gömb metszi egymást (7. ábra):  $k_{\pm} = (0, 0, \pm 1)$  (míg az egzakt megoldás  $k_{\pm} = (0, 0, \pm \pi/3)$ ).



7. ábra. A három felület egy ábrán: a kék a  $\sigma_x$ -ből, a piros a  $\sigma_z$ -ből, a zöld pedig a  $\sigma_y$ -ből származik.

A  $\sigma_y$  tag nullának való választása azt eredményezi, hogy a rendszerben megjelenik egy anti-unitér szimmetria, hiszen a  $\sigma_y \sigma_x \sigma_y^\dagger = -\sigma_x$ , valamint a  $\sigma_y \sigma_z \sigma_y^\dagger = -\sigma_z$  relációk miatt  $\sigma_y H \sigma_y^\dagger = -H$  teljesül. Ennek továbbá az a következménye, hogy a korábbi 3 feltétel közül az egyik megszűnik, aminek köszönhetően az energia egy "körvonal" mentén lesz nulla, tehát a két Weyl-pontból egy nodális vonal jött létre (8. ábra).



8. ábra. A két felület egy ábrán: a kék a  $\sigma_x$ -ből, a piros a  $\sigma_z$ -ből származik.

A nodális vonal félfémek esetén is lehet definiálni egy topologikus invariánst, a csavarodási számot. Ehhez vennünk kell egy  $\mathcal{C}$  zárt görbét a  $k$ -térben, ami "körülöleli" a nodális vonalat és amentén integráljuk a Berry-konnectiót:

$$w = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} A \cdot dR. \quad (15)$$

Érdeemes megjegyezni, hogy az  $w$  csavarodási szám és a  $\Gamma$  Berry-fázis között a következő összefüggés áll fent:

$$\Gamma \equiv 2\pi w \pmod{2\pi}. \quad (16)$$

Topológiailag azok a görbék érdekesek, amelyeknek a csavarodási számuk páratlan, ezért ezeknek az elnevezése "topologikus", a többié pedig "triviális". Az ilyen görbék természetesen előjönnek például a mágneses oszcillációk vizsgálatánál, az extrémális keresztmetszetek peremgörbéiként.

Egy nodális vonal félfémet nodális hurok félfémnek nevezünk, ha degenerációs vonal magába zárul. Továbbá, ha ez a hurok egy (nem triviális) csomó, akkor nodális csomó félfémnek nevezük.

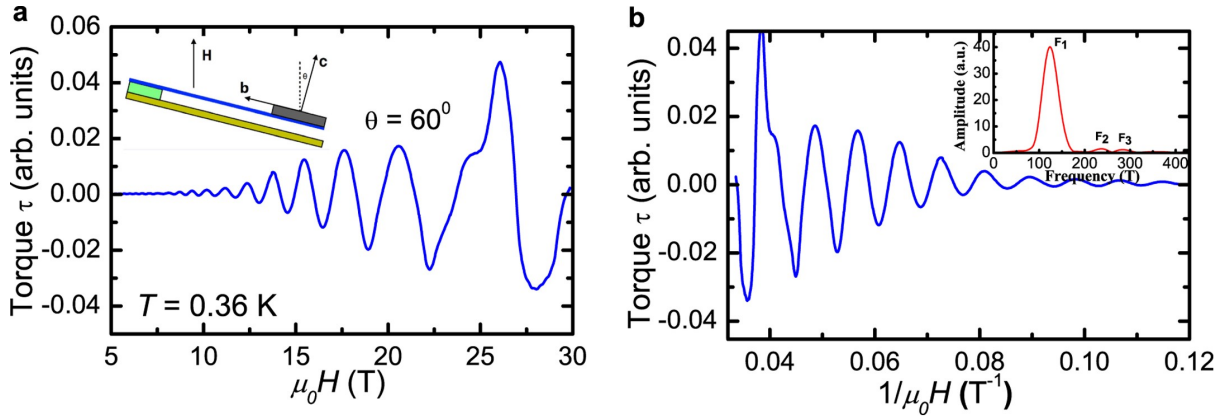
Nodális vonal félfémekkel is foglalkoztak kísérleti úton, például a  $\text{KCu}_2\text{EuTe}_4$  anyagban több nodális vonalat is megfigyeltek [31].

## 4. Mágneses oszcillációk

A mágneses oszcillációk azért fontosak, mivel a segítségükkel következtetni lehet a Fermi-felület alakjára [32].

1930-ban Schubnikov és de Haas bizmut kristály vizsgálata során azt vették észre, hogy az ellenállás az alkalmazott mágneses tér reciprokában oszcillált. Ez azért is volt érdekes, mivel egy kvantumos jelenség makroszkopikus megnyilvánulásáról van szó [33].

Nem sokkal ezután (még ugyan ebben az évben) de Haas és van Alphen a korábbi eredmények miatt tovább vizsgálták a bizmut kristályt, ezúttal a mágnesezettségét. A korábbiakhoz hasonlóan azt vették észre, hogy a mágnesezettség is a mágneses tér reciprokában oszcillált. Érdekes továbbá, hogy Landau ezt a jelenséget a kísérlet elvégzése előtt megjósolta [34]. Egy mérés eredménye látható a 9. ábrán.



9. ábra. a) A de Haas–van Alphen oszcilláció a  $\mu_0 H$  függvényében, a polinomiális háttér eltávolítása után. A bal felső sarokban pedig a kísérleti elrendezés látható. b) A de Haas–van Alphen oszcilláció a  $1/\mu_0 H$  függvényében, a polinomiális háttér eltávolítása után. A jobb felső sarokban pedig a gyors Fourier-transzformációja látható. Forrás: [35]

A mágneses oszcillációk egyik legfontosabb felhasználása, a Fermi-felület meghatározása, az Onsager kvantálási feltétel alapján. Az összefüggés levezetése megtalálható a [32] könyvben; én csupán az eredményt használom fel. A módszer lényege az, hogy a de Haas–van Halphen effektusnál az Onsager kvantálási feltétel a mágneses tér nélküli Fermi-felület alakja és a mágneses tér hatására kialakult spektrum között teremt kapcsolatot. Ha az alkalmazott mágneses tér nagysága  $B$ , akkor az irányával párhuzamosan meg kell néznünk, hogy hol extrémális a Fermi-felület keresztmetszete. Ha az extrémális felület nagysága  $\mathcal{A}$ , akkor a következő összefüggés áll fent:

$$\frac{\mathcal{A} \hbar}{eB} = 2\pi(n + \gamma). \quad (17)$$

Ahol  $\pi(1 - 2\gamma)$  az extrémális felületet körülölelő zárt görbe Berry fázisa.

## 5. Nodális csomó félfém modellek

Az általam vizsgált nodális csomó félfémek modelljeivel a [30] cikk foglalkozik részletesen; én csupán a gondolatmenet lényeges lépéseit vettem át.

### 5.1. Kontinuum modell

Először egy kontinuum modellt építünk fel. Egy általános, két sávú modell Hamilton-operátora a következő alakban írható:

$$H(k) = a_0(k)I + a_1(k)\sigma_x + a_2(k)\sigma_y + a_3(k)\sigma_z. \quad (18)$$

Viszont ahogy korábban is említettem, a nodális vonal létezéséhez extra szimmetriára van szükség. Erre egy lehetséges megoldás az időbeli és térbeli tükrözés választása, aminek a hatására a  $H^*(k) = H(k)$  feltételnek kell eleget tennie a Hamilton-operátornak. A szimmetria következménye az, hogy  $a_2(k)$ -nek 0-nak kell lennie. Ezen felül az egyszerűség kedvéért az  $a_0(k)I$  tagot is elhanyagolom. Ezen tag figyelembe vétele ugyan a rendszer Berry-konnexióját nem befolyásolja de a Fermi-felület alakjára potenciálisan hatással lehet. Emiatt a választott szimmetriának megfelelő Hamilton-operátor:

$$H(k) = a_1(k)\sigma_x + a_3(k)\sigma_z, \quad (19)$$

aminek a sajátértékei:

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{a_1^2(k) + a_3^2(k)}. \quad (20)$$

Azaz úgy kell megválasztani  $a_1$ -et és  $a_3$ -at, hogy a  $a_1(k) = a_3(k) = 0$  teljesüljön egy csomó mentén. Bi-ék felismerése az volt, hogy ha vesznek két komplex változót,  $z = n_1 + in_2$ -t és  $w = n_3 + in_4$ -t, akkor a  $|z|^2 + |w|^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 + n_4^2 = 1$  megkötés mellett (ami egy 4 dimenziós gömb felülete) a  $|z|^p = |w|^q$  felület egy 3 dimenziós tórusz felülete. Ekkor bevezetve az

$$f(z, w) = z^p + w^q \quad (21)$$

függvényt, az  $f(z, w) = 0$  egyenlet megoldásai a korábbi tóruszon helyezkednek el és csomót formáznak, ha  $p$  és  $q$  relatív prímek. A  $k$ -tér kompakttá tétele után létre lehet hozni egy bijekciót a tér és a 4 dimenziós gömb felülete között. Erre egy lehetséges megoldás a következő 4 dimenziós vektor bevezetése:

$$N = [k_x, k_y, k_z, m - \|k\|_2^2/2]. \quad (22)$$

Ahol  $m > 0$  konstans, hiszen ekkor az  $n = N/\|N\|_2$  választás megfelelő. Ekkor a  $k = 0$  pontnak a  $(0, 0, 0, 1)$  pont felel meg, a bevezetett  $k$ -beli végtelennek pedig a  $(0, 0, 0, -1)$ . Ez a konstrukció azért jó, mivel az

$$a_1(k) = \Re(f(z, w)) \quad \text{és} \quad a_3(k) = \Im(f(z, w)) \quad (23)$$

definíciók a várákozásnak megfelelően biztosítják, hogy az  $a_1^2(k) + a_3^2(k) = 0$  egyenlet megoldása éppen egy csomó lesz. Végül  $n$ -ről át lehet térni  $N$ -re, hiszen a kettő csak egy skalár szorzóban tér el, ezért topológiailag ekvivalensek.

## 5.2. Rács modell

A rács modell Hamilton-operátorát az előző konstrukcióhoz hasonlóan lehet létrehozni, amyi különbséggel, hogy ebben az esetben az  $N$  függvénynek periódikusnak kell lennie. Erre is több lehetőség van, én a cikk alapján a következőt választottam:

$$N = [\sin(k_x), \sin(k_y), \sin(k_z), \cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z) - m_0]. \quad (24)$$

Ezt másodrendig sorba fejtvé:

$$N \approx \left[ k_x, k_y, k_z, 1 - \frac{k_x^2}{2} + 1 - \frac{k_y^2}{2} + 1 - \frac{k_z^2}{2} - m_0 \right] = \left[ k_x, k_y, k_z, 3 - \frac{\|k\|_2^2}{2} - m_0 \right]. \quad (25)$$

Amiből látszik, hogy a korábbi  $m$ -nek itt  $3 - m_0$  felel meg.

## 5.3. A csomó eltüntetése

Van lehetőség arra is, hogy a nodális csomóból nodális hurkot csináljunk. Ezt meg lehet valósítani például egy  $m_z \sigma_z$  tag hozzáadásával a Hamilton-operátorhoz, vagy ami ezzel ekvivalens,  $m_z$  tag hozzáadásával  $a_3$ -hoz. Erre az átmenetre lehet látni egy példát a 17. és a 18. ábrákon.

## 6. A numerikus vizsgálat menete

A numerikus vizsgálat 4 fő részre osztható fel. Mivel a nem triviális extrémális keresztmetszetek számának mágneses tér irányától való függését is vizsgáltam, ezért az első feladat az volt, hogy valamilyen módon kiválasszam a vizsgálati irányokat. Ez azt jelenti, hogy valamilyen módon ki kellett választanom egy 3 dimenziós, 1 sugarú gömb felületéről pontokat és azokból az irányokból vizsgálni a mintákat. Itt egyből meg tudtam tenni egy egyszerűsítést azzal, hogy csak egy teljes gömb helyett csupán egy félgömbről választottam pontokat, ugyanis ugyan azokért a felületekért felelős az  $n$  és a  $-n$  irány. Ezek után minden irány mentén meg kell találni az adott  $E_F$  Fermi-energiájú felület mágneses tér irányára merőleges metszeteit a kiválasztott síkokban. A következő lépés az adatok feldolgozása volt: ki kellett számolnom minden esetben a keresztmetszetet és csavarodási számot, majd a keresztmetszet extrémumait meghatározni. A következő alfejezetekben ezekről a feladatokról írok részletesen.

### 6.1. Mintavételezési irányok

A numerikus vizsgálat során fontos szerepe van a vizsgált irányok megválasztásának, hiszen egy jó választással könnyen le lehet csökkenteni a szükséges pontok számát, ami azt eredményezi, hogy kevesebb erőforrásra van szükség és ezáltal hamarabb lefut a script. Erre a problémára két megoldást találtam; ezeket ismertetem és hasonlítom össze ebben az alfejezetben.

Az első megoldás az egyenes mintavételezés a szögekben. A lényege az, hogy veszek egy tetszőleges félgömböt, úgy, hogy az alaplapja valamelyik két tengely által kifeszített síkba essen, azaz a

$$\{B_{ij} \mid i \in \{1, 2, 3\}, j \in \{1, 2\}\} \quad (26)$$

halmazból választok egy félgömböt, ahol

$$B_{ij} = \{v \in \mathbb{R}^3 \mid \|v\|_2 = 1, (-1)^j v_i \geq 0\}. \quad (27)$$

A félgömbhöz hozzá lehet rendelni egy  $\pi^2$  területű  $T$  téglalapot úgy, hogy a téglalap  $f$ -általi képe a félgömb legyen, ahol

$$f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3, (\theta, \varphi) \mapsto [\sin(\theta) \cos(\varphi), \sin(\theta) \sin(\varphi), \cos(\theta)], \quad (28)$$

azaz a félgömbön a pontokat az azimut és polár szögeivel reprezentáljuk. Ezután  $T$ -t szét lehet bontani két intervallum szorzatára úgy, hogy

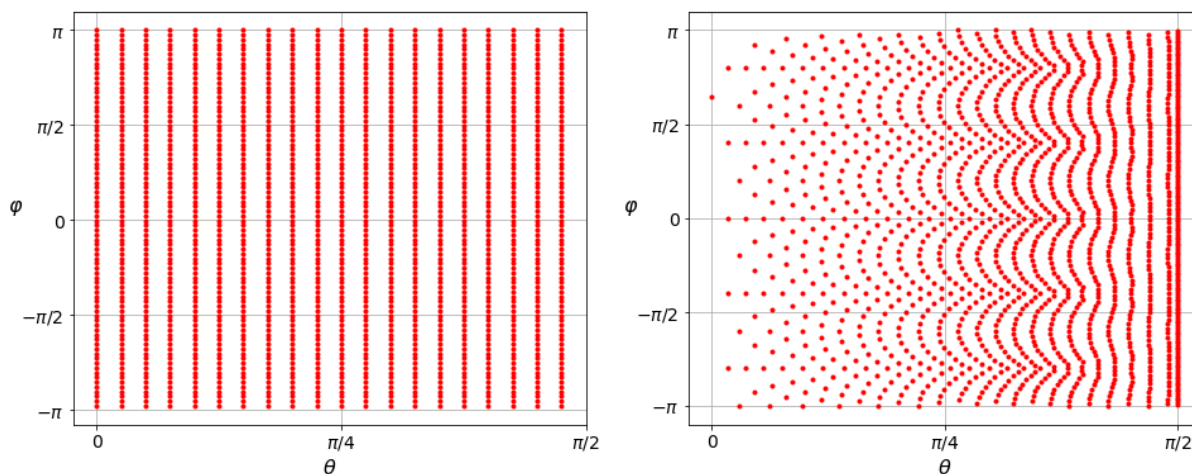
$$\Theta = \{x \mid \exists y : (x, y) \in T\} \quad \text{és} \quad \Phi = \{y \mid \exists x : (x, y) \in T\} \quad (29)$$

esetén  $T = \Theta \times \Phi$ . Végül  $\Theta$ -t és  $\Phi$ -t egyenesen mintavételeztem, majd "invertáltam" a folyamatot, ezzel megkapva a félgömb egy lehetséges mintavételezését.

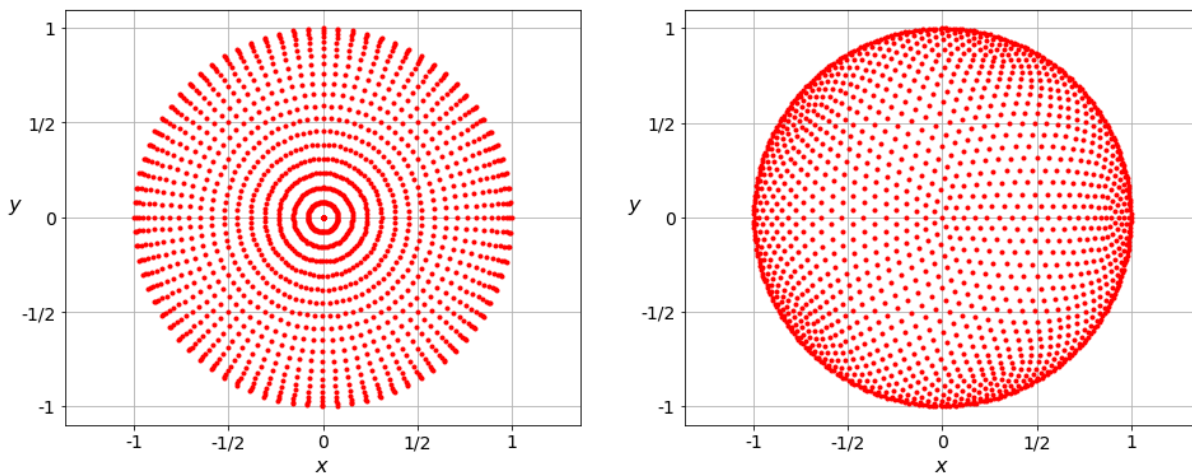
A másik lehetséges megoldás az ikozaéder osztás használata. A módszer lényege az, hogy egy ikozaéderből kiindulva az oldalakat fel kell osztani azonos nagyságú háromszögekre és azokat a pontokat, ahol a csúcsok "találkoznak", az egységgömbre vetíteni, majd ezt ismétli addig, amíg szeretnénk. A módszert a pyDome[36] nevű, python nyelven írt programmal valósítottam meg.



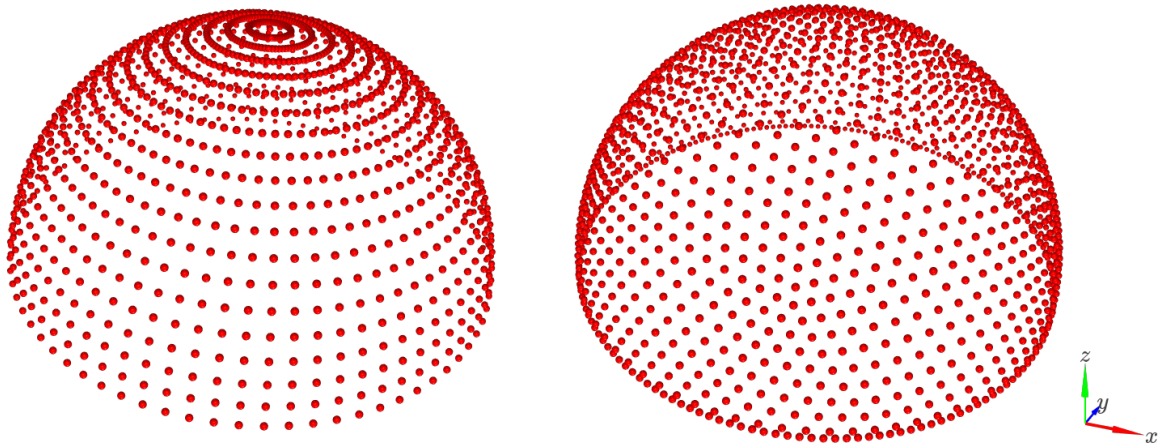
A két módszer közötti különbséget egy példával lehet a legjobban szemléltetni. Ehhez a  $B_{32}$  félgömböt mintavételeztem mindkét módon: egyenletes mintavételezéssel 1600, ikozaéder osztással pedig 1616 ponttal. A  $\theta$ - $\varphi$  síkban lévő téglalap a 10. ábrán;  $x$ - $y$  síkban a 11 ábrán; 3D-ben pedig a 12 ábrán látható.



10. ábra. A  $B_{32}$  félgömbhöz tartozó téglalap mintavételezése. Bal oldalon egyenletes mintavételezéssel (1600db pont), jobb oldalon pedig ikozaéder osztással mintavételezve (1616db pont).



11. ábra. A  $B_{32}$  félgömb mintavételezése, az  $x$ - $y$  síkban ábrázolva. Bal oldalon egyenletes mintavételezéssel (1600db pont), jobb oldalon pedig ikozaéder osztással mintavételezve (1616db pont).



12. ábra. A  $B_{32}$  félgömb mintavételezése, az x-y síkban ábrázolva. Bal oldalon egyenletes mintavételezéssel (1600db pont), jobb oldalon pedig ikozaéder osztással mintavételezve (1616db pont).

Az egyenletes mintavételezéssel a szögekben két probléma is volt. Az első az volt, hogy  $\varphi$ -től függetlenül,  $\theta = 0$  esetében minden pont a  $(0, 0, 1)$ -be került,  $\theta = \pi$  esetében pedig a  $(0, 0, -1)$ -be. A második pedig az, hogy ugyan a  $\theta$ - $\varphi$  síkban "jól néz ki", viszont a gömb egyes részein a pontok túl közel, máshol pedig túl távol vannak egymástól. Az első problémát még meg lehetett volna egyszerűen oldani azzal, hogy az azonos pontokat "eldobjuk", viszont a második probléma megoldása nem lett volna ilyen egyszerű, viszont az ikozaéder osztás mindkét problémára egyszerre jelentett megoldást.

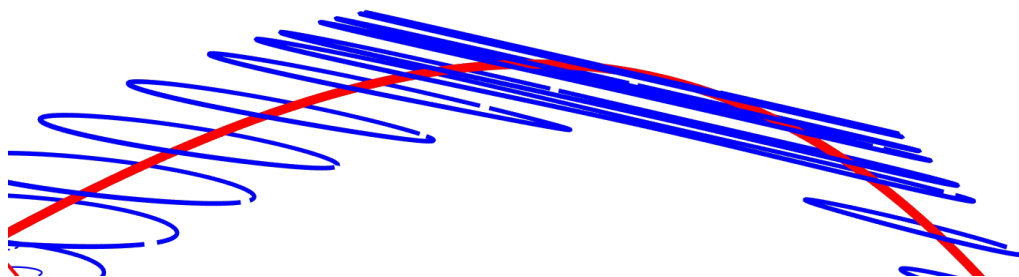
## 6.2. A csomó megtalálásának menete

A vizsgálat során ez volt az a rész, ami a legtöbb változáson ment át. Ez annak is köszönhető, hogy rengeteg numerikus megoldás van explicit felület keresésre, a feladat bonyolultsága miatt. Legelőször azzal próbálkoztam, hogy egy adott irány mentén kijelölök síkokat és azokban keresem meg a 2 dimenziós felületet, mint kontúr. Ezzel a megoldással két nagyobb probléma volt: lassú volt és nehéz volt eldönteni, hogy a különböző metszeteken lévő kontúrok hogyan "tartoznak össze". A második probléma elsőre lehet, hogy nem hangzik olyan nehezen megoldhatónak, hiszen egy ember ránézve másodpercek alatt meg tudja oldani a problémát, de ez rengeteg passzív tanuláshoz köszönhető. Látszik tehát, hogy ez a megoldás jó kiindulópont volt, viszont nem a legideálisabb, ezért próbáltam tovább lépni rajta. Az egyik lehetőség az volt, hogy a kontúr-keresést 3 dimenzióba kiterjesztem, viszont ez lassabb volt a korábbi megoldásnál és a memóriaigénye is sokkal nagyobb volt. A másik ötletem az volt, hogy maradok a "szeletelés" megoldásnál, viszont a kontúr megtalálását próbálom felgyorsítani. Erre megoldásként az adaptív kontúr keresést találtam. Ez a megoldás csökkentette a memóriaigényt és a futási időt, hiszen az adaptív megoldás az "érdekes részekre" fókuszál, de a második problémát még ez sem oldotta meg.

Ekkor éreztem úgy, hogy a korábbi módszereket nem érdemes tovább fejlesztenem, hanem egy teljesen újat kell készítenem. Az új ötletem az volt, hogy először a nullenergiás csomót keresem meg. Erre azt a megoldást találtam, hogy egy tetszőleges pontból kiindulva megkerestem egy pontot a csomón és innen továbbhaladva az energia négyzetének a Hesse-mátrixának a szinguláris irányában lépkedve "körbejártam" a csomót. Ezek után ugyan ezt az ötletet használtam az adott energiájú Fermi-felület megtalálásához, minden egyes pontjában a nullenergiás csomónak: a mágneses térre merőleges irányban megkerestem egy pontot a felületen és a felületet ismét "körbejártam" az előbb említett módon. Ezzel a módszerrel csupán egy apró probléma volt: a keresztmetszet így nem egy mágneses térrel párhuzamos vektor nagyságától függ, hanem egy új paramétertől, a nullenergiás vonalon "megtett úttól". Erre a problémára a megoldás a következő: az általánosság elvesztése nélkül fel lehet tenni, hogy a mágneses tér párhuzamos a  $k_z$  tengellyel és legyen a korábban említett paraméter  $p$ . Azok a pontok kelljenek, ahol  $\mathcal{A}'(k_z) = 0$ , de helyette az  $\mathcal{A}'(p) = 0$  pontokat lehet egyszerűen meghatározni. Ha minden pont környezetében létre lehet hozni egy  $k_z(p)$ , kellően sima függvényt, akkor ez nem okozhat nagy problémát, mivel a lánc szabály értelmében:

$$(\mathcal{A} \circ k_z)'(p) = \mathcal{A}'(k_z(p))' = \mathcal{A}'(k_z(p))k'_z(p). \quad (30)$$

Azaz ilyen esetben a deriváltak gyökei ugyan ott vannak, ha  $k'_z(p)$ -nek nincsenek gyökei. Ezt viszont utólag lehet ellenőrizni. Nagyobb probléma akkor lehetne, ha a nullenergiás csomó "sokáig menne" a mágneses térre merőlegesen, viszont szerencsére egy általános csomónál ez nem fordul elő. Egy másik lehetséges problémaforrás az, hogy a módszer nem találja meg azokat a felületeket, amik nem ölelik körül a csomót legalább egyszer. Erre egy példa látható a 13. ábrán. Viszont ezek a kimaradó pontok topológiailag triviálisak, mivel nem ölelik körbe a csomót, ezért nem jelentenek problémát.



13. ábra. Egy példa a kimaradó felületekre.

### 6.3. A szükséges mennyiségek kiszámolása

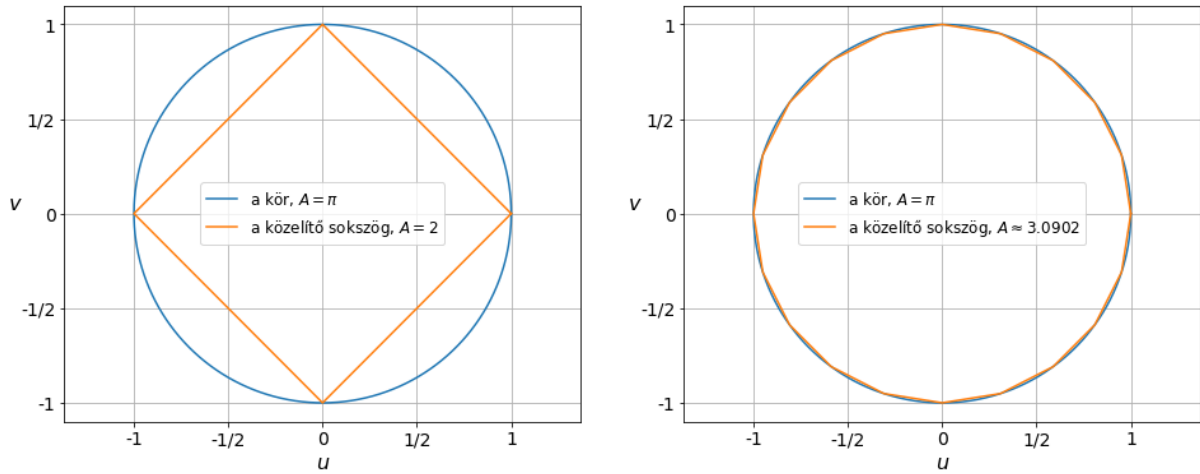
Két mennyiséget kellett numerikusan meghatározni: a keresztmetszetek felületét és a csavarodási számát. Azért van szükség erre a két mennyiségre, mivel a keresztmetszet a mágneses oszcillációk frekvenciájával van kapcsolatban, a csavarodási szám pedig a rendszer topológiájával.

A felületet egy poligonnal közelítettem és annak a területét a "cipőfűző" formulával [37] határoztam meg. A módszer lényege az, hogy egy poligon  $\{(u_i, v_i)\}_{i=1}^n$  csúcsait pozitív vagy negatív irányban sorba rendezve a területét a következő formula adja meg:

$$A = \frac{1}{2} \left| \sum_{i=1}^{n-1} u_i v_{i+1} + u_n v_1 - \sum_{i=1}^{n-1} u_{i+1} v_i - u_1 v_n \right| \quad (31)$$

$$= \frac{1}{2} |u_1 v_2 + u_2 v_3 + \dots + u_n v_1 - u_2 v_1 - u_3 v_1 - \dots - u_1 v_n|. \quad (32)$$

Érdemes megjegyezni, hogy azért elég két koordináta minden csúcs leírásához, mivel a konstrukcióból adódóan a pontok egy síkban vannak. A módszer akkor működik jól, ha a keresztmetszet széle sima és a poligon csúcsai közel vannak egymáshoz. A módszer pontosságának szemléltetéséhez kiszámoltam vele a kör területét 4 és 20 csúcsú sokszög esetén, ez látható a 14. ábrán.



14. ábra. A módszer használata a kör területének kiszámításához. A bal oldalon 4, a jobb oldalon 20 csúccsal rendelkező sokszöget használtam a közelítésre.

A csavarodási szám számolásánál is egy poligonnal közelítettem a felületet, de ezúttal minden csúcsot 3 koordinátával kell leírni, hiszen az  $a_1$  és az  $a_3$  a  $k$  vektortól függ. Az átláthatóság kedvéért érdemes több lépésben felépíteni a formulát. Legyenek a poligon csúcsai (pozitív irányban rendezve)  $\{(u_i, v_i, w_i)\}_{i=1}^n$ . Ezekben a pontokban kell kiértékelni  $a_1$ -et és  $a_3$ -at; ezeket a következő módon fogom jelölni:

$$a_1(j) = a_1(u_j, v_j, w_j) \quad \text{és} \quad a_3(j) = a_3(u_j, v_j, w_j). \quad (33)$$

Ezeket pedig érdemes egy "vektorba csoportosítani" úgy, hogy a  $(0, 0)$  vektor legyen a pontok átlaga:

$$a_j = [a_1(j), a_3(j)] - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n [a_1(k), a_3(k)] \quad (34)$$

Végül pedig a csavarodási szám a következő módon számítható ki:

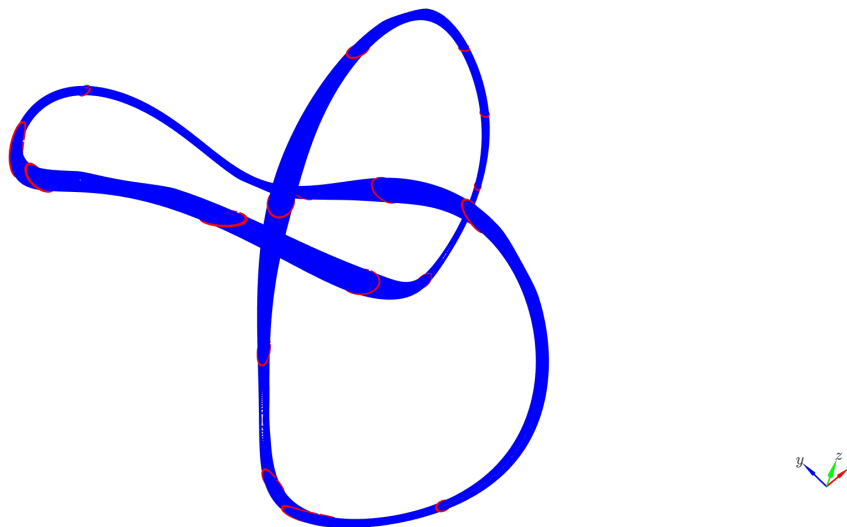
$$w = \frac{1}{2\pi} \left( \sum_{k=1}^{n-1} \text{atan2}(a_k \times a_{k+1}, a_k \cdot a_{k+1}) + \text{atan2}(a_n \times a_1, a_n \cdot a_1) \right). \quad (35)$$

Ez természetesen nem lesz egzaktul egész szám (viszont a tapasztalataim alapján az 5. vagy későbbi tizedes jegyben tér el), ezért ezt kerekíteni kell.

#### 6.4. Az extrémális felület(ek) megtalálása

Az extrémális felület(ek) megtalálása talán a legnehezebb numerikus feladat. A probléma két forrásból származik: a nagyobbik az, hogy a felület-paraméter függvényénél nehéz eldönteni, hogy miből származik egy-egy ugrás. Itt két lehetőség van: nem elég finom a mintavételezés vagy az ugrás két oldalán két különböző ág van. Az előbbi lehetőséget további finomítással ki lehet küszöbölni, viszont az utóbbihoz sokkal komplexebb megoldásra van szükség. A második problémaforrás pedig az, hogy minél kisebb a keresztmetszet, annál nehezebb eldönteni, hogy egy kis változás azért történik-e, mert valóban a felület változik, vagy csupán zaj miatt. Ezt részben a mintavételezés finomításával lehet megoldani, részben pedig valamilyen "simító" algoritmussal.

Én a következő módszert találtam a leghatékonyabbnak: először a listát feldaraboltam a csavarodási számuk alapján. ezután minden darabot DBSCAN [38, 39] algoritmussal tovább daraboltam és a kapott darabokat enyhén simábbá tettem Savitzky–Golay filter [40] segítségével. Ezek után spline [41] segítségével interpoláltam a darabokat (mivel az interpoláló függvényt egyszerűen lehet deriválni) és deriválással meghatároztam az extrémális pontokat. Erre egy példa látható a 15. ábrán.

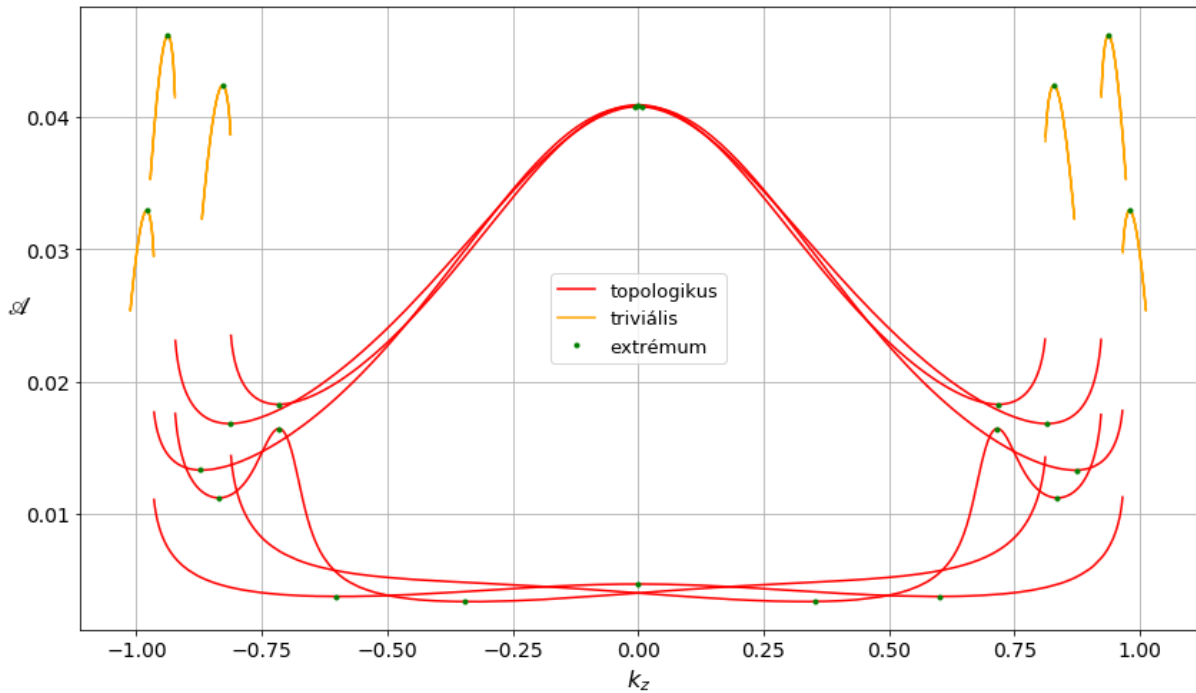


15. ábra. A  $p = 3$ ,  $q = 2$ -es csomón a nem triviális szélsőértékek pirossal jelölve, a  $k_z$  tengellyel párhuzamos mágneses tér esetén.

## 7. Az eredményeim

A fent vázolt procedúrát alkalmaztam különböző nodális csomó félfémek esetén felbukkanó, releváns paraméterek meghatározására. A módszer sok információval tud szolgálni a csomókról; ezeket két módon fogom illusztrálni ebben a fejezetben. Érdeemes megjegyezni, hogy minden esetben az  $m_0$  értékét 2.5-nek választottam.

Először egy adott mágneses térirány mellett kapott adatokat mutatom be. A (3, 2)-es csomó a lehető legegyszerűbb, nem triviális csomó, amit a modellel elő lehet állítani, ezért ez a legalkalmasabb példának. A 16. ábrán látható ennél a csomónál az, hogy hogyan változnak a keresztmetszetek a  $k_z$  függvényében, a  $k_z$  tengellyel párhuzamos mágneses tér esetén, 0.1-es Fermi-energiával. Érdeemes megjegyezni, hogy az adatokból még további információk is kinyerhetők, például meg lehet határozni, hogy egy adott frekvencia mennyire dominál a mágneses oszcillációkban. Ez azért lehetséges, mivel az extrémális felület a görbületével fordítottan arányos járulékot jelent az állapotosűrűségben.

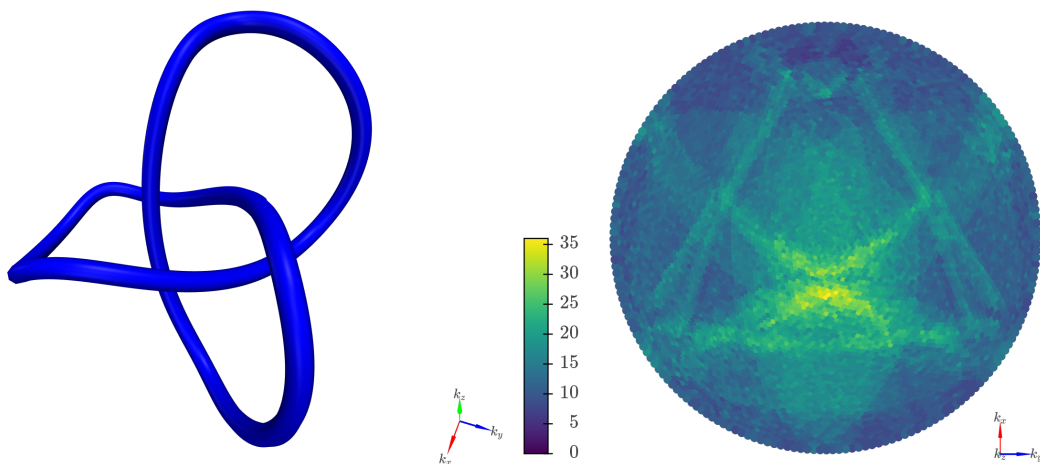


16. ábra. A (3, 2)-es csomó esetén, a  $k_z$  tengellyel párhuzamos mágneses tér mellett a keresztmetszet  $k_z$  függése.

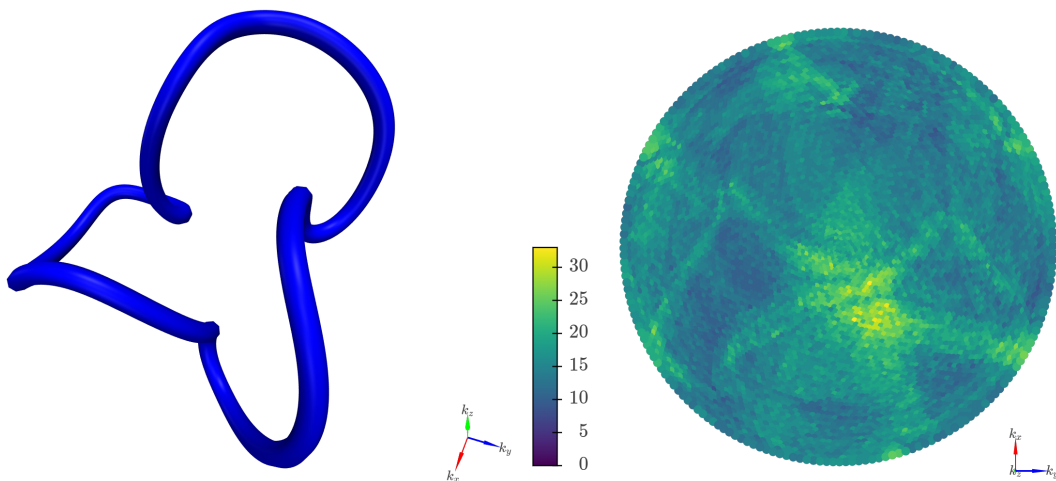
A második lehetőség pedig a nem triviális extrémális felületek számának a mágneses tér iránytól való függésének illusztrálása. Ez az irányfüggőség azzal magyarázható, hogy a nodális hurok félfémek bizonyos szimmetriákat sértenek, ezért a mágneses oszcillációk anizotropok. Ennek a következménye az, hogy a Fermi-felület feltérképezéséhez több irányból kell megvizsgálni a csomót. Itt két érdekes átalakulást is lehet vizsgálni: az irányfüggés változását egy folytonos és egy diszkrét paraméter változtatásának hatására. A folytonos paraméter a már korábban definiált  $m_z$ , ami a csomót folytonosan triviális csomóvá transzformálja, a diszkrét paraméter

pedig a  $(p, q)$  pár, ami a kiindulási csomó topológiájáért felel.

Először azt vizsgáltam meg, hogy a nem triviális extrémális felületek számának irányfüggésére milyen hatással van a csomó kibogozása. Ebben az esetben is a  $(3, 2)$ -es csomót vizsgáltam, két  $m_z$  értéknél: először  $m_z = 0$  esettel foglalkoztam, amikor a nodális vonal egy háromlevelű csomó volt, majd áttértem az  $m_z = 0.5$  esetre, amikor már csupán egy triviális csomó (azaz nodális hurok) volt. A Fermi-energiát mindkét esetben 0.1-nek választottam meg. A kiindulási állapot látható a 17. ábrán, a csomó eltűnése utáni állapot pedig a 18. ábrán.



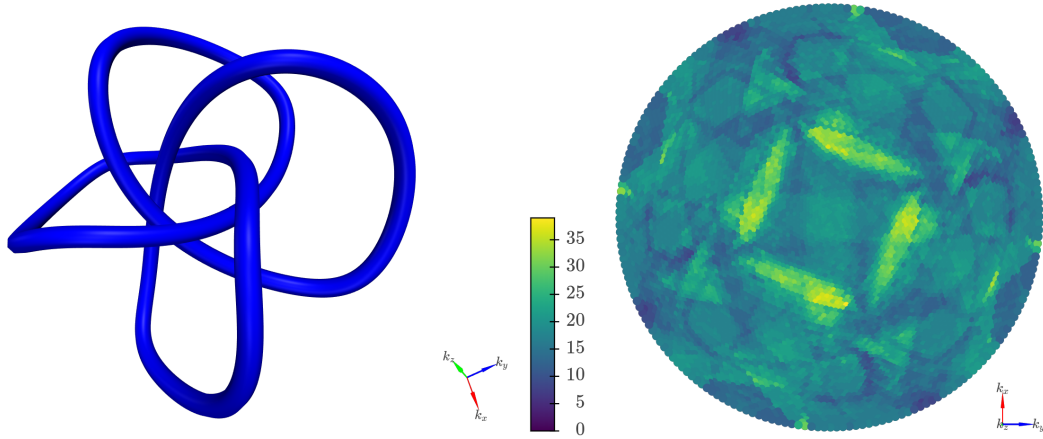
17. ábra. Jobb oldalon látható a  $(3,2)$ -es csomóhoz tartozó nem-triviális extrémális keresztmetszetek száma, bal oldalon pedig maga a csomó,  $m_z = 0$  mellett.



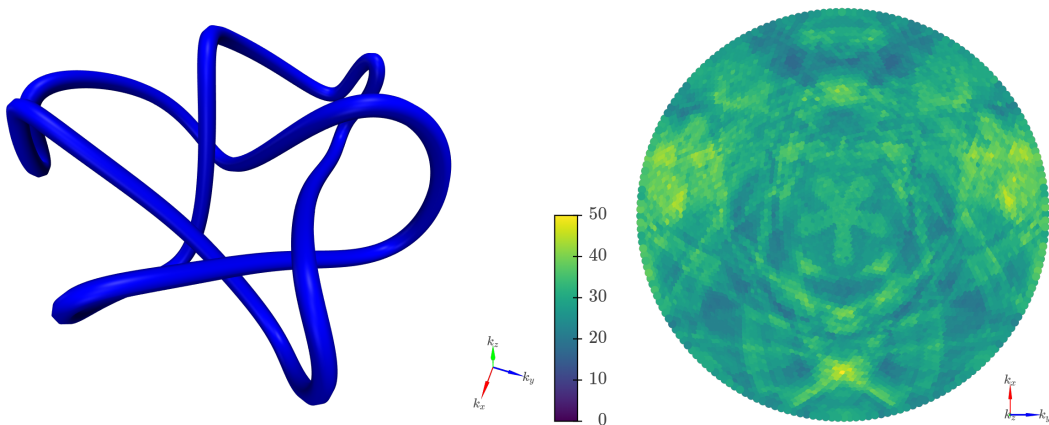
18. ábra. Jobb oldalon látható a  $(3,2)$ -es csomóhoz tartozó nem-triviális extrémális keresztmetszetek száma, bal oldalon pedig maga a csomó a "kicsomózás" után,  $m_z = 0.5$  mellett.

Ezek után pedig azt néztem meg, hogy a diszkrét paraméter változtatása milyen hatással van a nem triviális extrémális felületek számának irányfüggésére. Ehhez a következő csomókat

vizsgáltam,  $m_z = 0$  és  $E_F = 0.1$  mellett: A (4,3)-ast (19 ábra), az (5,2)-est (20 ábra) és az (5,3)-ast (21 ábra).

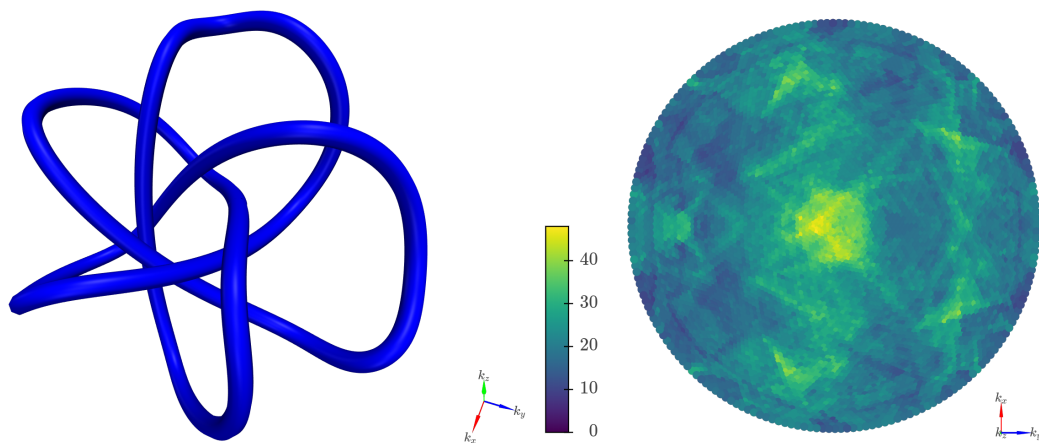


19. ábra. Jobb oldalon látható a (4,3)-as csomóhoz tartozó nem-triviális extrémális keresztmetszetek száma, bal oldalon pedig maga a csomó.



20. ábra. Jobb oldalon látható az (5,2)-es csomóhoz tartozó nem-triviális extrémális keresztmetszetek száma, bal oldalon pedig maga a csomó.





21. ábra. Jobb oldalon látható az  $(5,3)$ -as csomóhoz tartozó nem-triviális extrémális keresztmetszetek száma, bal oldalon pedig maga a csomó.

Összefoglalva tehát, sikerült megalkotnom egy olyan numerikus módszert, ami újszerű, kísérletileg is releváns adatokkal szolgál a nodális csomó félfémekről. A távlati célom az, hogy kapcsolatot találjak a csomók topologikus tulajdonságai és bizonyos fizikai mennyiségek között. Viszont a probléma bonyolultsága miatt ez további kutatásokat igényel. Úgy gondolom, hogy ezen cél elérésében a gépi tanulás eszköztára nyújthat segítséget, mivel a képi mintázatok klasszifikálása egy tipikus feladat a neurális hálók számára [42].

## 8. Köszönetnyilvánítás

Elsőként Oroszlány Lászlónak szeretnék köszönetet mondani a témavezetéséért, valamint azért, mert már az első féléveimtől kezdve tanulhatok tőle és számíthatok a segítségére. Ezen felül köszönettel tartozom a családomnak, akik minden tőlük telhetőt megtettek azért, hogy idáig eljuthassak. Valamint köszönetet szeretnék mondani a KIFÜ-nek, a scriptjeim futtatásához szükséges erőforrások biztosításához. A dolgozatban elvégzett munkát a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal a 2017-1.2.1-NKP-2017-00001. számú projekt keretében a Nemzeti Kvantumtechnológia Programon keresztül támogatta.

## Hivatkozások

- [1] Qualcomm snapdragon 865. <http://web.archive.org/web/20200408040543/https://www.qualcomm.com/products/snapdragon-865-5g-mobile-platform>. [Online; accessed 08-April-2020].
- [2] Mohit Bansal. The benefits and challenges of 7nm technology. <https://www.wipro.com/blogs/mohit-bansal/the-benefits-and-challenges-of-7nm-technology/>.
- [3] P.W. Anderson. *Basic Notions Of Condensed Matter Physics*. CRC Press, 2018.
- [4] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82:3045–3067, Nov 2010.
- [5] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1057–1110, Oct 2011.
- [6] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45:494–497, Aug 1980.
- [7] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48:1559–1562, May 1982.
- [8] Xiao-Gang Wen. Topological orders and edge excitations in fractional quantum hall states. *Advances in Physics*, 44(5):405–473, 1995.
- [9] Amin Saied. Introduction to data analysis and topology. <https://aminsaied.github.io/topology-and-data-analysis/introduction>.
- [10] Joseph E. Avron, Daniel Osadchy, and Ruedi Seiler. A topological look at the quantum hall effect. *Physics Today*, 56(8):38–42, August 2003.
- [11] Colin Adams. *The Knot Book*. 2004.
- [12] Wikipedia contributors. Trefoil knot — Wikipedia, the free encyclopedia, 2020. [Online; accessed 12-May-2020].
- [13] János K. Asbóth, László Oroszlány, and András Pályi. *A Short Course on Topological Insulators*. Springer International Publishing, 2016.
- [14] Heng Gao, Jörn W.F. Venderbos, Youngkuk Kim, and Andrew M. Rappe. Topological semimetals from first principles. *Annual Review of Materials Research*, 49(1):153–183, 2019.
- [15] N. P. Armitage, E. J. Mele, and Ashvin Vishwanath. Weyl and dirac semimetals in three-dimensional solids. *Rev. Mod. Phys.*, 90:015001, Jan 2018.

- [16] Alexey A. Soluyanov, Dominik Gresch, Zhijun Wang, QuanSheng Wu, Matthias Troyer, Xi Dai, and B. Andrei Bernevig. Type-II weyl semimetals. *Nature*, 527(7579):495–498, November 2015.
- [17] Jin Hu, Su-Yang Xu, Ni Ni, and Zhiqiang Mao. Transport of topological semimetals. *Annual Review of Materials Research*, 49(1):207–252, 2019.
- [18] A. A. Burkov and Leon Balents. Weyl semimetal in a topological insulator multilayer. *Phys. Rev. Lett.*, 107:127205, Sep 2011.
- [19] Qiunan Xu, Enke Liu, Wujun Shi, Lukas Muechler, Jacob Gayles, Claudia Felser, and Yan Sun. Topological surface fermi arcs in the magnetic weyl semimetal  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ . *Phys. Rev. B*, 97:235416, Jun 2018.
- [20] Qi Wang, Yuanfeng Xu, Rui Lou, Zhonghao Liu, Man Li, Yaobo Huang, Dawei Shen, Hongming Weng, Shancai Wang, and Hechang Lei. Large intrinsic anomalous hall effect in half-metallic ferromagnet  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  with magnetic weyl fermions. *Nature Communications*, 9(1), September 2018.
- [21] Satoru Nakatsuji, Naoki Kiyohara, and Tomoya Higo. Large anomalous hall effect in a non-collinear antiferromagnet at room temperature. *Nature*, 527(7577):212–215, October 2015.
- [22] Ajaya K. Nayak, Julia Erika Fischer, Yan Sun, Binghai Yan, Julie Karel, Alexander C. Komarek, Chandra Shekhar, Nitesh Kumar, Walter Schnelle, Jürgen Kübler, Claudia Felser, and Stuart S. P. Parkin. Large anomalous hall effect driven by a nonvanishing berry curvature in the noncolinear antiferromagnet  $\text{Mn}_3\text{Ge}$ . *Science Advances*, 2(4):e1501870, April 2016.
- [23] Zhijun Wang, Dominik Gresch, Alexey A. Soluyanov, Weiwei Xie, S. Kushwaha, Xi Dai, Matthias Troyer, Robert J. Cava, and B. Andrei Bernevig.  $\text{MnTe}_2$ : A type-II weyl topological metal. *Phys. Rev. Lett.*, 117:056805, Jul 2016.
- [24] A. Tamai, Q. S. Wu, I. Cucchi, F. Y. Bruno, S. Riccò, T. K. Kim, M. Hoesch, C. Barreteau, E. Giannini, C. Besnard, A. A. Soluyanov, and F. Baumberger. Fermi arcs and their topological character in the candidate type-II weyl semimetal  $\text{MnTe}_2$ . *Phys. Rev. X*, 6:031021, Aug 2016.
- [25] Tay-Rong Chang, Su-Yang Xu, Daniel S. Sanchez, Wei-Feng Tsai, Shin-Ming Huang, Guoqing Chang, Chuang-Han Hsu, Guang Bian, Ilya Belopolski, Zhi-Ming Yu, Shengyuan A. Yang, Titus Neupert, Horng-Tay Jeng, Hsin Lin, and M. Zahid Hasan. Type-II symmetry-protected topological dirac semimetals. *Phys. Rev. Lett.*, 119:026404, Jul 2017.
- [26] Zhijun Wang, Yan Sun, Xing-Qiu Chen, Cesare Franchini, Gang Xu, Hongming Weng, Xi Dai, and Zhong Fang. Dirac semimetal and topological phase transitions in  $\text{A}_3\text{Bi}$  ( $a = \text{Na, K, Rb}$ ). *Phys. Rev. B*, 85:195320, May 2012.

- [27] Z. K. Liu, B. Zhou, Y. Zhang, Z. J. Wang, H. M. Weng, D. Prabhakaran, S.-K. Mo, Z. X. Shen, Z. Fang, X. Dai, Z. Hussain, and Y. L. Chen. Discovery of a three-dimensional topological dirac semimetal, na<sub>3</sub>bi. *Science*, 343(6173):864–867, January 2014.
- [28] Zhijun Wang, Hongming Weng, Quansheng Wu, Xi Dai, and Zhong Fang. Three-dimensional dirac semimetal and quantum transport in cd<sub>3</sub>as<sub>2</sub>. *Phys. Rev. B*, 88:125427, Sep 2013.
- [29] Z. K. Liu, J. Jiang, B. Zhou, Z. J. Wang, Y. Zhang, H. M. Weng, D. Prabhakaran, S.-K. Mo, H. Peng, P. Dudin, T. Kim, M. Hoesch, Z. Fang, X. Dai, Z. X. Shen, D. L. Feng, Z. Hussain, and Y. L. Chen. A stable three-dimensional topological dirac semimetal cd<sub>3</sub>as<sub>2</sub>. *Nature Materials*, 13(7):677–681, May 2014.
- [30] Ren Bi, Zhongbo Yan, Ling Lu, and Zhong Wang. Nodal-knot semimetals. *Physical Review B*, 96(20), November 2017.
- [31] Shuo-Ying Yang, Hao Yang, Elena Derunova, Stuart S. P. Parkin, Binghai Yan, and Mazhar N. Ali. Symmetry demanded topological nodal-line materials. *Advances in Physics: X*, 3(1):1414631, 2018.
- [32] Sólyom Jenő. *A modern szilárdtest-fizika alapjai II*. 2010.
- [33] L. SCHUBNIKOW and W. J. DE HAAS. A new phenomenon in the change of resistance in a magnetic field of single crystals of bismuth. *Nature*, 126(3179):500–500, October 1930.
- [34] L. Landau. Diamagnetismus der metalle. *Zeitschrift für Physik*, 64(9-10):629–637, September 1930.
- [35] Yongjian Wang, Jinglei Zhang, Wenka Zhu, Youming Zou, Chuanying Xi, Long Ma, Tao Han, Jun Yang, Jingrong Wang, Junmin Xu, Lei Zhang, Li Pi, Changjin Zhang, and Yuheng Zhang. De hass-van alphen and magnetoresistance reveal predominantly single-band transport behavior in PdTe<sub>2</sub>. *Scientific Reports*, 6(1), August 2016.
- [36] badassdatascience. pydome. <https://github.com/badassdatascience/pyDome>, 2013.
- [37] Younhee Lee and Woong Lim. Shoelace formula: Connecting the area of a polygon with vector cross product. *The Mathematics Teacher*, 110(8):631, 2017.
- [38] Martin Ester, Hans-Peter Kriegel, Jörg Sander, and Xiaowei Xu. A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise. pages 226–231. AAAI Press, 1996.
- [39] Erich Schubert, Jörg Sander, Martin Ester, Hans Peter Kriegel, and Xiaowei Xu. Dbscan revisited, revisited: Why and how you should (still) use dbscan. *ACM Trans. Database Syst.*, 42(3), July 2017.

- [40] Abraham. Savitzky and M. J. E. Golay. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry*, 36(8):1627–1639, July 1964.
- [41] Aris Perperoglou, Willi Sauerbrei, Michal Abrahamowicz, and Matthias Schmid. A review of spline function procedures in r. *BMC Medical Research Methodology*, 19(1), March 2019.
- [42] Stuart Russell. *Artificial intelligence a modern approach*. Pearson, Boston, 2020.