

Beszámoló 2016-17/2 félévről

Tajkov Zoltán – EZZL8G0 - PhD. hallgató

Témavezetők: Koltai János, Oroszlány László

A grafén számos újszerű elektronikus alkalmazás szempontjából kitűnő alapanyagnak bizonyult az elmúlt időkben. A grafén alapú eszközök nagy kihívása, hogy hangolható erősségű spin-pálya kölcsönhatást indukáljunk bennük. A spin-pálya kölcsönhatás manipulálása nemcsak elméleti kutatások szempontjából igen izgalmas téma hanem ipari alkalmazások tekintetében is forradalmi alkalmazásokkal kecsegtet. Az elmúlt évtizedben a topologikusan védett állapotokkal rendelkező anyagok vizsgálata nagy érdeklődésnek örvend, mely állapotok stabilizálásához elengedhetetlen a spin-pálya kölcsönhatás. A grafén alapú, kétdimenziós, hibrid, réteges heterostrukturák egyre felnövekvőbb ágát képezik a nanoméretű kvantumrendszereknek. Az MSc-s diplomamunkám során kifejlesztettem egy leegyszerűsített modellt, amely segítségével leírható egy olyan grafén réteg, melybe valamilyen módon – például a fent ismertetett nanoszerkezetekkel – hangolható spin-pálya kölcsönhatást indukálunk.

Az előző félévben egy elektronikus vezetőképességet számoló szoftverbe – az EQuUs-ba – implementáltam a modelletem. Ennek segítségével jelen félévben képes voltam a származtatott modell fázisdiagramjait körbejárni és transzport tulajdonságait az egyes paraméterkiosztások mellett megvizsgálni. A számolás során egy dópolt, tiszta grafén szalaghoz kontaktáltunk meg a szoftverben egy olyan szórási tartományt, amely az én modellem alapján felépített grafén rétegből állt. Ezek után meghatároztuk a vezetőképesség kapufeszültség függését. A konduktancia görbékből következtetni lehet a mért tartomány topologikus tulajdonságaira. A transzport számolás eredményei jól illeszkedtek a fázisdiagram megfelelő tartományába. Ezután egy SIESTA számolóhoz illesztett paraméter kiosztásban is elvégeztük a transzport-kalkulációt és azt találtuk, hogy a szórási tartomány méretétől jelentősen függ, hogy találunk-e a topologikusan védett állapotokat, vagy sem. Ez annak köszönhető, hogy a szórási tartományban a gap értéke kicsi, nagyjából 40 meV. Az EQuUs szoftveres megoldásainak, illetve a Budapest2 szuper klaszter Intel® Xeon Phi™ kártyáinak köszönhetően képesek voltunk a már kísérletileg is releváns mikronos tartományban számolásokat végezni, egy 1 mikrométerszer 1 mikrométeres négyzeten. Ez a számolás egyértelműen azt mutatta, hogy a szimulált rendszer topologikus szigetelő. Ezekről az eredményekről a februári IWEPNM konferencián, Tirolban poszter prezentációt tartottam.

Az egyik lehetséges út egy adott rendszerről eldönteni, hogy topologikus szigetelő-e vagy sem, ha rajta transzport számolásokat végzünk. Azonban a tapasztalatok azt mutatják, hogy a kis gappal rendelkező anyagok esetén ez az eljárás komoly számítási kapacitást igényel. Azonban Wilson-hurkokon alapuló egyszerű matematikai eljárással, a translációinvariáns tömbi Hamilton-operátor használatával is eldönthető a kérdés. A félév második felében ezen algoritmus implementálásán dolgoztam. Az elkészült kód segítségével a sűrűségfüggvény elméleten alapuló számolások kimeneteként létrejövő Hamilton- és átfedési-mátrixokból meghatározhatóak a vizsgált rendszer topologikus tulajdonságai. Ezt az algoritmust teszteltük már ismert rendszereken és jelenleg is folyik a vizsgálat más anyagokkal kapcsolatban.

Áprilisban beadásra került egy publikáció a *physica status solidi (b)* folyóiratban, jelenleg elbírálás alatt van.

Májusban részt vettem egy nyári iskolán, a SIESTA Summer School-on Barcelonában, melyen egyenesen a SIESTA szoftver fejlesztőitől tanulhattam mélyebben a kód tulajdonságait. (A kurzus elvégzéséről lásd a csatolmányt a második oldalon.)

Ebben a félévben tavalyhoz hasonlóan részt vettem a fizika BSc hallgatóinak tartott Modern Fizika Laboratórium holográfia mérésében, mint laborvezető. Tartottam az elsőéves kémia BSc-s hallgatóknak egy gyakorlatot heti 45 percben Fizikai Feladatok Megoldása címen. Sikeresen elvégeztem 3 kurzust: A Lecture Series in English keretein belül a Time Dependent Quantum Dynamics c. kurzust, a Nemegeyensúlyi statisztikus fizika és a Szupravezetés előadásokat.



Training Course

Certificado de Asistencia
Certificate of Attendance

SIESTA school organized by the European Centre of Excellence MaX

Dirección / Address: BSC - CNS
C/ Jordi Girona, 29
Edifici Nexus II
E-08034 Barcelona

País / Country: Spain

Certifica que / hereby certifies that:

**El/la investigador/a / the researcher *Tajkov, Zoltán* procedente de /
coming from *Eötvös Loránd University* ha asistido a dicho evento en la
siguiente fecha/ has attended this event on the following dates:**

Días /day	Mes / month	Año / year
23-26	05	2017

Education & Training Manager

Maria-Ribera Sancho

Firma /signature:

Sello / Stamp:



Fecha / date: 29-05- 2017

Este documento no será válido si lleva cualquier tachadura o enmienda / This document will not be valid if crossed out or corrected