

### 3. félévi beszámoló

**Nagy Dániel** daniel.nagy@ttk.elte.hu

Statisztikus fizika, biológiai fizika és kvantumrendszerek fizikája PhD program

Témavezetők: Dr. Oroszlány László, Dr. Koltai János

A dolgozat címe: Study of Electron Transport in Patterned Disordered Graphene

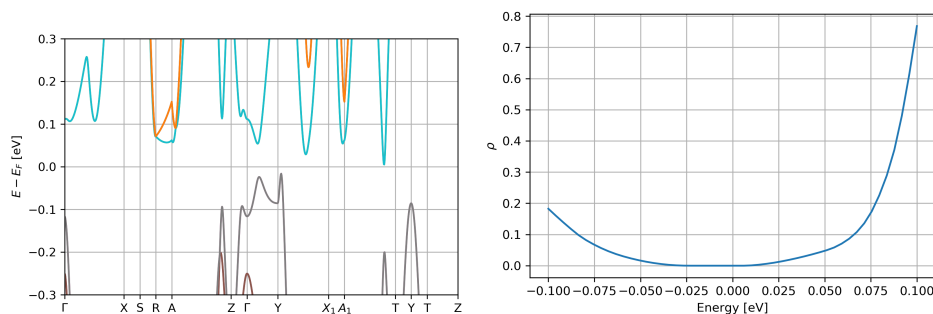
**Bevezetés:** A topologikus szigetelők vizsgálata, azok kísérleti előállítása óta ígéretes területté vált kutatási szempontból. A kutatási témám a grafén alapú alacsony dimenziós rendszerek topologikus fázisátalakulásának vizsgálata. Ebben a félévben csatlakoztam egy kutatócsoporthoz, ahol a cirkónium-pentatelluriddal ( $\text{ZrTe}_5$ ) foglalkoztunk, melynek topologikus tulajdonságai máig nem tisztázottak. Néhány cikk gyenge topologikus szigetelőként írja le: [1], [4], valamelyik erősnek: [3], míg másik Weyl-félfémnek: [2]. Jelen kutatás célja tisztázni a topologikus tulajdonságait a  $\text{ZrTe}_5$ -nak.

**Az előző félév rövid összefoglalása:** A Kekule-torzított grafén adatom eloszlásának két szélsőséges esetének energiáját egzakt diagonalizálással meghatároztuk, és az analitikus számolással egyező eredményt kaptunk, annak eredményét kiterjesztettük nagyobb koncentráció értékekre is.

**Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése:** Egy, már folyó kutatásba csatlakoztam be, ahol a cirkónium-pentatelluridot ( $\text{ZrTe}_5$ ) vizsgáltuk mind kísérletileg, mind ab initio számolásokkal. A csapat tagjai: Nemes-Incze Péter, Vancsó Péter, Tajkov Zoltán, Koltai János, Oroszlány László-, és én. A kutatás során előállítottunk egy néhány réteg vastagságú  $\text{ZrTe}_5$ -ot, majd azt vizsgáltuk, hogy a fizikai deformációk hatására hogyan változik a topologikus fázisa. A  $\text{ZrTe}_5$  kristály orthorombos geometriával rendelkezik, az elemi cellájában 12 atom található, 2 Zr és 10 Te atom. Az anyag rétegelt felépítésű, a szomszédos síkokat Vand der Waals erők kötik össze. A kristálybeni anizotrópia miatt hat különböző Poisson számmal rendelkezik.

Én a numerikus számolásban vettem részt a Siesta nevű programot és a sisl python modult használva. A számításgényes számolásokat a KIFÜ Debreceni klaszterében végeztem.

Először meghatároztuk a rendszer rugalmassági állandóit, melyből megkaphatóak a Poisson számok, melyek a deformációk helyes figyelembevételéhez szükségesek. Ezután a torzítatlan rendszer topológiáját határoztuk meg.



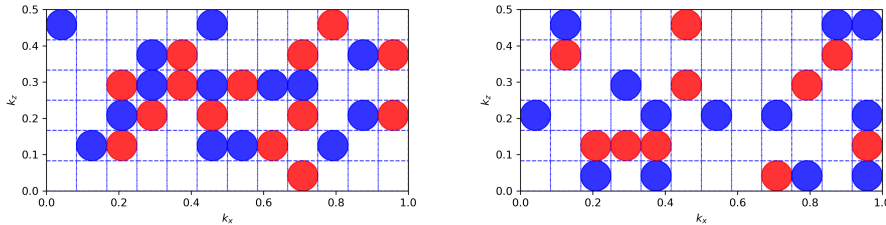
1. ábra. Balra: a  $\text{ZrTe}_5$  sáv szerkezete a Fermi energia környékén. Látható, hogy a gap sosem záródik be. Jobbra: Az állapotsűrűség, a Fermi-energia környékén értéke nullára esik.

Ehhez meghatároztuk a sáv szerkezetet a sisl modullal ahogy az a 1 ábrán látható. A topologikus fázis meghatározásához egy már meglévő matlab kódot átírtam python nyelvre és kibővíttem, hogy kompatibilis legyen a sisl modulal. A számolás menete, hogy kiválasztunk egy időtükrözésre invariáns félsíkot az impulzus térben ( $\mathbf{k}$  egyik komponense legyen 0 vagy  $\pi$ ), felosztjuk  $n$  cellára, és a rácspontokon körbejárva kiszámoljuk a rácsnégyzethez tartozó Berry-görcsületet. Ezek összegének páros/páratlan volta a topologikus  $Z_2$  értéke. Egy ilyen számolás látható a 2 ábrán. Összesen 6 ilyen sík van, az ezekhez tartozó  $Z_2$  invariánsok határozzák meg az anyag topologiai fázisát. A torzítatlan, relaxált rendszer a fent leírt számolás alapján gyenge topologikus szigetelőként viselkedik.

Ezután megnéztük néhány, a síkkal párhuzamos homogén deformációra a sáv szerkezetet, és a gap változását, valamint meghatároztuk a Hamilton mátrixokat a rétegekre párhuzamos, homogén, valamint a rétegekre merőleges deformációk esetén. A következő lépés a sáv szerkezetek és a hozzájuk tartozó topologikus fázis meghatározása lesz.

**Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben:** az alábbi ELTE-s kurzusokon vettem részt (kurzus neve és rövid tematikája):

- Makromolekulák: Ezen a kurzuson megismerkedtem a polimerek és a fehérjék alapvető tulajdonságaival.
- Preklinikai modellek a daganatkutatásban: Itt a daganatok típusairól, gyógyításukról, és a különböző *in vitro* és *in situ* modellekről tanultunk.



2. ábra. A piros kör negatív Berry-görbületnek, a kék kör pozitívnak felel meg. Az impulzus értékek 1-re redukáltak.  $6 \times 12$  helyen számoljuk ki a Berry-görbületet. Balra:  $k_y = 0$  félsík. A körök előjeles összege páros, ami triviális topologikus fázist jelent. Jobbra:  $k_y = \pi$  félsík. A körök előjeles összege páratlan, ami nem-triviális topologikus fázist jelent.

- Klaszterezés hálózatokkal: Itt hasonló csoportok keresésére használt különböző algoritmusokat tanultunk meg.

**Konferenciák az aktuális félévben:** Heti 1 alkalommal kutatócsoporton belüli online megbeszélésen vettem részt, mely alkalmak során az előre meghatározottak szerint a csoport egy-egy tagja adott elő.

Hallgatóként részt vettem a nemzetközi CMD2020GEFES online konferencián, ami a kondenzált anyagok fizikáját széles körben lefedi.

**Oktatási tevékenység az aktuális félévben:** A számítógépes alapismeretek nevű tantárgy egyik társ-gyakorlatvezetője voltam heti  $2 \times 45$  percben.

**Elismerések:** A „Kvantumbitek előállítás, megosztása és kvantuminformációs hálózatok fejlesztése”, 2017-1.2.1-NKP-2017-00001. számú projekt a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból biztosított támogatással, a "Nemzeti Kiválósági Program" finanszírozásában valósult meg.

# Hivatkozások

- [1] Xiang-Bing Li et al. “Experimental Observation of Topological Edge States at the Surface Step Edge of the Topological Insulator  $\text{ZrTe}_5$ ”. In: *Phys. Rev. Lett.* 116 (17 2016), p. 176803. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.176803. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.176803>.
- [2] Tian Liang et al. “Anomalous Hall effect in  $\text{ZrTe}_5$ ”. In: *Nature Physics* 14.5 (2018), pp. 451–455. ISSN: 1745-2481. DOI: 10.1038/s41567-018-0078-z. URL: <https://doi.org/10.1038/s41567-018-0078-z>.
- [3] G. Manzoni et al. “Evidence for a Strong Topological Insulator Phase in  $\text{ZrTe}_5$ ”. In: *Phys. Rev. Lett.* 117 (23 2016), p. 237601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.237601. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.117.237601>.
- [4] R. Wu et al. “Evidence for Topological Edge States in a Large Energy Gap near the Step Edges on the Surface of  $\text{ZrTe}_5$ ”. In: *Phys. Rev. X* 6 (2 2016), p. 021017. DOI: 10.1103/PhysRevX.6.021017. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.6.021017>.