

4. félévi beszámoló

Tajkov Zoltán (novidad21@caesar.elte.hu)

Statisztikus Fizika, Biológiai Fizika és Kvantumrendszerek Fizikája program

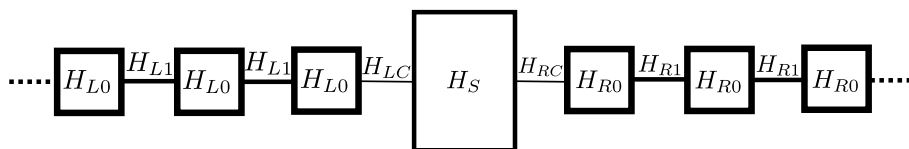
Témavezetők: Koltai János és Oroszlány László

A dolgozat címe: *Kétdimenziós hibrid nanorendszerek elméleti vizsgálata*

Bevezetés: A spintronika és a félvezető technológia házasításának alapja a spin-pálya kölcsönhatás. Ezen kutatási terület egyik fő csapása a ferromágneses eszközök elméleti és kísérleti vizsgálata. Azonban egy másik irányzat is fokozódó érdeklődésnek örvend: megérteni és irányítani a spin-polarizált áramot és kihasználni ezt informatikai eszközökben [1]. Ez a félvezető spintronika, melyben a spinek relatíve hosszú élettartalmú, akár 100 ns-ot is meghaladó koherenciaidejét használják ki [2]. Ezen rendszerekben a spin szabadsági fokok elkülönítésére erős mágneses tér, vagy ferromágneses anyagok helyett nagy spin-pálya csatolással rendelkező vegyületeket használnak. Jelenleg az erős spin-pálya kölcsönhatással rendelkező réteges anyagok között a BiTeX család ígéretes alkalmazási lehetőségekkel kecsegtet [3]. Bennük a Rashba-felhasadás mértéke elérheti az $E_R \approx 110$ meV-et. Tömbi rendszerre ez négyszer nagyobb is lehet, mint szobahőmérsékleten a termikus fluktuáció. A doktori munkám fő célkitűzése, hogy a BiTeX család egy- és kétrétegű szerkezetét elméleti úton vizsgáljam, olyan modellek megalkotásával melyek segítségével kísérletileg releváns, az alkalmazások szempontjából is érdekes fizikai mennyiségek és jelenségek tanulmányozhatóak. A modellépítés alapja a szoroskötésű közelítés, mely az alacsony energiás szabadsági fokokat kellően részletesen írja le, megragadva a rendszer szimmetriát. A kiválasztott energiatartományra koncentrált leírás lehetőséget ad a kísérletileg előforduló mérettartományok tanulmányozása, mely a részletesebb modellekkel túl nagy számítási kapacitást igényelne. Az így kapott modelleket sűrűségfüggvény-elméleten (DFT) alapuló számítások eredményeihez illeszttem. A modellek segítségével első sorban transzportszámolást végezhetünk a rendszereken, kísérletileg releváns elrendezésekben és mérettartományban.

Az *első félévben* az MSc-s diplomatémám folytatásaként a BiTeI-grafén hibrid rendszer vezetési tulajdonságainak vizsgálata volt a cél. Ehhez elsőként megismerkedtem a DFT alapjaival, majd egy konkrét programcsomag, a SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) használatát sajátítottam el [4, 5]. A félév második felében a Landauer-formalizmus és a Green-függvényes technika segítségével az elektromos vezetési tulajdonságok vizsgálatának alapjaival ismerkedtem meg. Alacsonyabb szabadsági fokú tesztrendszerekre magam is fejlesztettem rutint, gyakorlásképpen. Ezután beletanultam az EQuUs: Eötös Quantum Transport Utilities transzportszámító szoftver használatába. Ezek az eszközök elengedhetetlenek a bevezetésben is említett problémák vizsgálatához.

A tanulmány fontos eleme az – illesztéseken túl – a származtatott modelleken végzett transzportszámítás. A félvezetőipar legfontosabb problémaköre az alkalmazott anyagok nanoskálás vezetési tulajdonságainak megértése és manipulálása [6]. Az elméleti módszerek közül kiemelkedő a nemegyensúlyi Green-függvényes módszer. A módszer lényege, hogy egy nyílt kvantumrendszerként tekintünk a leírni kívánt szerkezetre. Praktikus megközelítés, ha képzeletben felosztjuk az 1. ábrán látható módon a vizsgált rendszert két részre. A bal és jobb oldala két, félvégtelen lánc – nem feltétlenül egyetlen atom alkotja a láncszemet – ezeket nevezi a szakirodalom elektródáknak, vagy lead-eknek (H_{L0} , H_{L1} ,

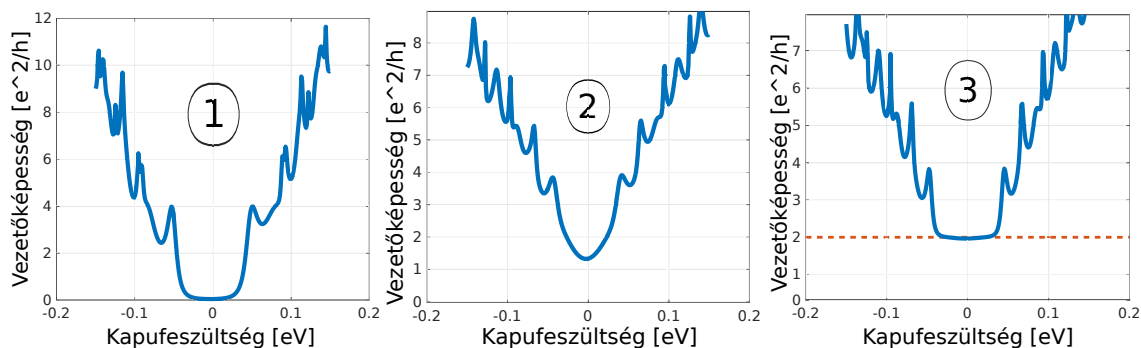


1. ábra. Szórási probléma általánosított vezetőkkel.

illetve H_{R0} , H_{R1}), amelyek a kísérletileg releváns szórási tartományhoz (H_S) csatlakoznak (H_{LC} és H_{RC}). A Green-függvények ismeretében aztán a Dyson-egyenlet felírásával a Fisher-Lee relációk segítségével megkapható a szórási mátrix. A szórási mátrix ismeretében kiszámítható a transzmisszió és reflexió, melyekből meghatározható a rendszer vezetőképessége. [13]

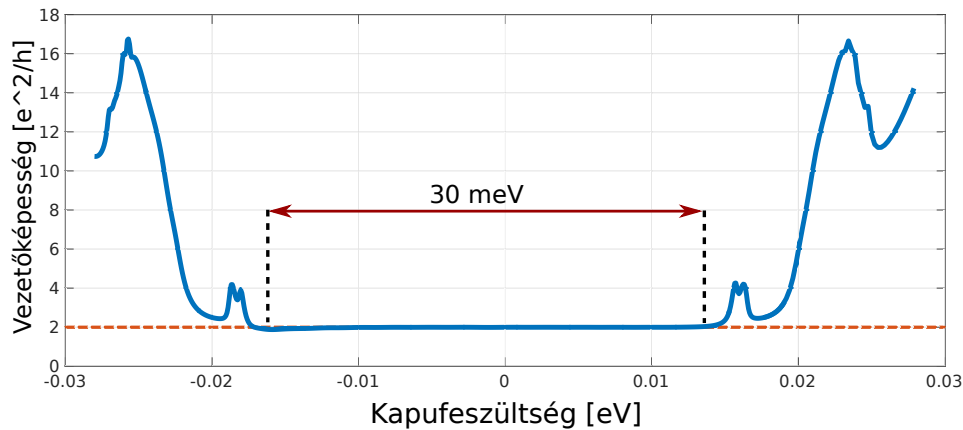
A fentebb ismertetett algoritmust számos programcsomag implementálta. Gyakorlásképpen a félévben magam is készítettem alacsony szabadsági fokú rendszerekre működő egyszerű rutinokat. Az ELTE-n működő Eötvös Quantum Transport Group csapata megalkotta az EQUUS szoftvercsomagot, amellyel kényelmesen és hatékonyan végezhetünk el számolásokat az ismertetett szórási problémákra. Az első félévben igyekeztem a programcsomag gazdag fegyvertárát megismerni és használni.

Az első félévben elvégeztem az ELTE-n három kurzust: *Mezoszkopikus rendszerek fizikája I.*, *Fázisátalakulások* és *A végeselem módszer és alkalmazása az anyagtudományban* című kurzusokat.



2. ábra. Vezetőképesség-kapufeszültség függés a különböző fázisokban. Az 1-es jelzésű ábra egy szigetelő, a 2-es egy vezető, a 3-as egy topologikus szigetelő fázist ír le.

A második félévben a már elsajátított ismeretek segítségével láttam neki az MSc-s diplomamunkám eredményeképpen kapott modell Hamilton-operátor újszerű vizsgálatának. A diplomamunkám során felírt Hamilton-operátor a benne szereplő paraméterek függvényében leírt fémes, szigetelő és topologikus szigetelő állapotokat. A paraméterek sokdimenziós fázissterében analitikusan sikerült megállapítani fázishatárokat. Ezekről a fázisokról készült beszámoló a diplomamunkám tartalmazza. A félév során az EQUUS segítségével különböző paraméterkiosztások mellett megvizsgáltam a rendszer vezetőképességét. A 2. ábrán a három különböző fázisból mutatok be egy-egy tipikus vezetőképesség görbét. A számolás során adott szélességű, tiszta, dópolt grafénzalagot használtam elektródának. A szórási tartomány az általam megalkotott modell Hamilton-operátorral



3. ábra. Vezetőképesség-kapufeszültség függés a DFT számolásokhoz illesztett paraméterekkel számolva.

vettem figyelembe. A vezetőképességet a kísérletileg gyakran vizsgált elrendezés alapján számítottam: a szórási tartományt alulról egy kapufeszültséggel szabályoztam, ezzel növelve a töltéshordozók sűrűségét a szórási tartományban. Ezeket a vezetőképesség vs. kapufeszültség görbéket ábrázoltam a 2. ábrán. Megfigyelhető mindhárom fázis jellegzetessége. A 2/1-es jelzésű ábra egy triviális szigetelőt ír le. A sávszerkezetben található tiltott sávnak megfelelő szélességű plató található. A plató teljes szélétében nulla a vezetőképesség, ez hordozza azt az információt, hogy a rendszer egy triviális szigetelő. A 2/2-es ábra egy fémes fázisú rendszert ábrázol. Látható, hogy a vezetőképesség végig véges marad. A 2/3-as jelzésű ábra mutatja a topologikus fázisból választott paraméterkiosztással készített görbét. A triviális szigetelőhöz hasonlóan megfigyelhető itt is a plató, azonban ez nem a nulla vezetőképességhez tartozik. A vezetőképesség véges marad a tiltott sávban is. Ez a véges plató jelenti a topologikusan védett élállapotok jelenlétét a tiltott sávban.

Jól ismert tény, hogy a plató csupán addig marad ennyire jól felismerhető, amíg a tiltott sáv elég nagy a vizsgált tartomány méretéhez képest. Amint a méret eléggé lecsökken, vagy a tiltott sáv elég kicsi lesz újabb szórási folyamatok lépnek be, amelyek már elmoshatják ezeket a "vízjeleket". Ezért fontos, hogy megfelelő méretű tartományon végezzük a számolást. Az MSc-s munkámban a DFT számolások alapján a BiTeI-grafén szendvicsben a tiltott sáv nagysága $E_g \approx 35$ meV. A plató megfigyeléséhez ezért nagyobb tartományon kellett számításokat végezni, amihez már komolyabb számítási kapacitás kellett. A NIIF Budapest2 klaszter és az EQuUs hatékonyan implementált technikáinak köszönhetően képes voltam több száz nanométer széles szalagon elvégezni a transzport számolásokat. Ennek az eredményét mutatja a 3. ábra. A topologikus szigetelő állapotnak már korábban ismertetett vízjele teljesen kivehető: egy plató véges vezetőképességgel. Ezek az eredmények teljes összhangban vannak a téma korábbi kutatási eredményeivel [7]. Az eredményünk felhasználható segítségül a jövő kísérleteinek interpretálásakor.

Az eredményeimről 2017. februárjában az IWEPNM (International Winterschool on Electronic Properties of Novel Materials) konferencián poszterprezentációt tartottam. A kutatásaim kimeneteléről egy publikációt is beküldtünk, mely megjelent a pssc. referált folyóiratban *Transport Properties of BiTeI-graphene Hybrid Structures* címen (<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/pssc.201700215>).

A kutatásaim során implementáltam egy algoritmust, mely a tömbi, translációinvari-

Kötés	Kötési energia
Au-I-Bi-Te \rightarrow Au + BiTeI	681 meV
Au-Te-Bi-I \rightarrow Au + BiTeI	969 meV
BiTeI - BiTeI \rightarrow BiTeI + BiTeI	543 meV
Te-Bi-I \rightarrow Te-Bi + I	2,74 eV
I-Bi-Te \rightarrow I-Bi + Te	3,64 eV

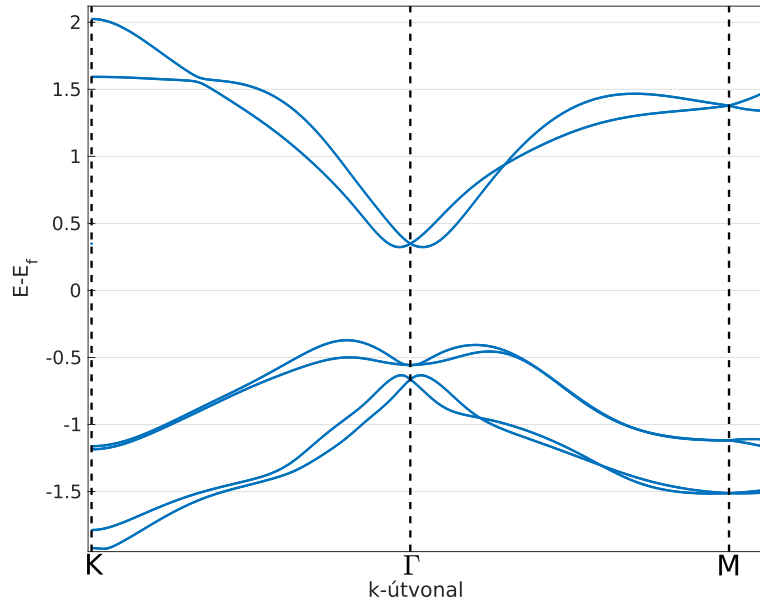
1. táblázat. Kötési energiák a VASP programcsomaggal számolva.

ans Hamilton-operátor segítségével meghatározza egy időtükrözésre szimmetrikus rendszer \mathbb{Z}_2 topologikus invariánsát. Az algoritmus a Wannier-állapotok centrumának mozgásából következtet a rendszer topologikus tulajdonságaira [14]. A SIESTA atomra lokalizált bázisának egyik nagy előnye, hogy képes visszaadni egyrészesecskes Hamilton-operátort. Ez lehetőséget nyit arra, hogy első elvű számításokból származtassuk a topologikus invariánsokat. Ezeket a rutinokat későbbi kutatásokhoz kívánjuk majd felhasználni.

A félévben elvégeztem három kurzust az ELTE-n: az *A Lecture Series in English* keretein belül a *Time Dependent Quantum Dynamics* című angol nyelvű kurzust. Ezenkívül pedig még a *Nemegyensúlyi statisztikus fizika* és a *Szupravezetés* című kurzusokat. Májusban részt vettem egy barcelonai nyári iskolán, ahol egyenesen a program készítőitől tanulhattam meg a SIESTA használatát. Június 18-án a Fizikus Doktoranduszok Konferenciáján előadást tartottam. Az előadás címe: *Transport Properties of BiTeI-graphene Hybrid Structures*.

A harmadik félévben a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen működő kísérleti csoporttal közösen dolgoztunk. A Csonka Szabolcs vezetésével a csoport az általunk elméletileg vizsgált BiTeI tulajdonságait kutatja. Sikeresen előállították az anyag egy réteg vastagságú szerkezetét arany szubsztrátumon. Az általuk alkalmazott módszer alap gondolata, hogy az arany a BiTeI-hez erősebben köt, mint a tömbi BiTeI rétegei egymáshoz. Ezt a feltételezést DFT számolásokkal igazoltuk. Ezeket az eredményeket összefoglalva találjuk az 1. táblázatban. A táblázatban látható értékeket VASP-pal (Vienna Ab initio Simulation Package) számítottuk ki. Nem használtuk a SIESTA eredményeit, ugyanis a két kód közötti alapvető eltérés - bázis megválasztása - nagyban befolyásolja a programok használhatóságát. A SIESTA segítségével körülményes módon juthatunk információhoz a kötési energiákról, ezért néhány egyszerűbb tesztrendszer összevetése után úgy döntöttünk, hogy maradunk a VASP használatánál. Az eredmények alapján világosan látszik, hogy a BiTeI erősebben köt az aranyhoz, mint a rétegek egymáshoz, de gyengébben, mint a rétegen belüli ionos kötések. Ezek alapján valóban azt várjuk, hogy ha az arany és a BiTeI kölcsönhatásba lép, akkor nagyobb valószínűséggel marad ott a felületen egyetlen réteg az anyagból.

DFT számolások segítségével megmutattam, hogy bár az arany véges állapotosságú a BiTeI állapotosságát befolyásolja, a jellegzetességei még kivehetőek maradnak. A számoláshoz ezúttal a SIESTA-t használtuk. Ismét előjönnek a különbségek a két kód között. Míg a VASP hatékony volt a kötési energiák számolásában a kód felépítése végett alkalmatlan nagy felbontásban állapotosságát számolni. A SIESTA azonban az atomokra lokalizált bázis használatának köszönhetően visszaadja az egyrészesecskes Hamilton-operátort. Ennek segítségével a Brillouin-zónát nagyobb felbontásban mintavételezhet-



5. ábra. A BiTeI egyréteg sáv szerkezete a magas szimmetriájú k pontok útvonalán a számunkra releváns energiatartományban.

$$\begin{array}{l|l}
 \langle s|H|s \rangle & V_{ss\sigma} \\
 \langle s|H|p_i \rangle & n_i V_{sp\sigma} \\
 \langle p_i|H|p_i \rangle & n_i^2 V_{pp\sigma} + (1 - n_i^2) V_{pp\pi} \\
 \langle p_i|H|p_j \rangle & -n_i n_j (V_{pp\pi} - V_{pp\sigma})
 \end{array}$$

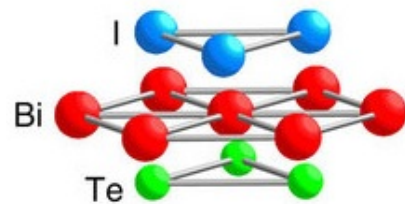
2. táblázat. Az első néhány Slater-Koster együttható.

jük, ezáltal pontosabb görbékert kapunk. Mivel a SIESTA legújabb verziója még csak béta változatban tartalmazza a spin-pálya kölcsönhatást, a számolások meggyorsítása érdekében Nick Papior által kifejlesztett Python csomagot használtam [8].

Ezekekről az eredményekről elkészült és elfogadásra került egy publikáció a 2D Materials referált folyóiratban *Exfoliation of single layer BiTeI flakes* címen (doi: <http://dx.doi.org/10.1088/2053-1583/aac652>).

A továbblépéshez a félév során elkészítettem a BiTeI és BiTeBr (mely a BiTeI-hez nagyon hasonló szerkeztű, csak a jód atomok helyén bróm atomok foglalnak helyet) egy- és kétréteg rendszereket modellező effektív Hamilton-operátorokat. A BiTeI szerkezete a 4. ábrán látható. A szerkezetben egy bizmut réteget egy tellúr és egy jód réteg fog közre. Az atomok mindegyik rétegben háromszöggrács szerkezetben helyezkednek el, ABC rétegződésben. A közelítés alapja egy olyan szoros-kötésű modell volt, melyben s , p_x , p_y , p_z pályákat tételeztem fel. Ezen pályák adják a Fermi-szint környéki sávok karakterének jelentős részét a SIESTA által számolt és az 5. ábrán látható sáv szerkezetben.

A modell felépítésénél a [9] cikkben leírt metódust használtam. A szerzők tömbi kristályos anyagok leírására használható közelítő módszert fejlesztettek ki. Amikor több



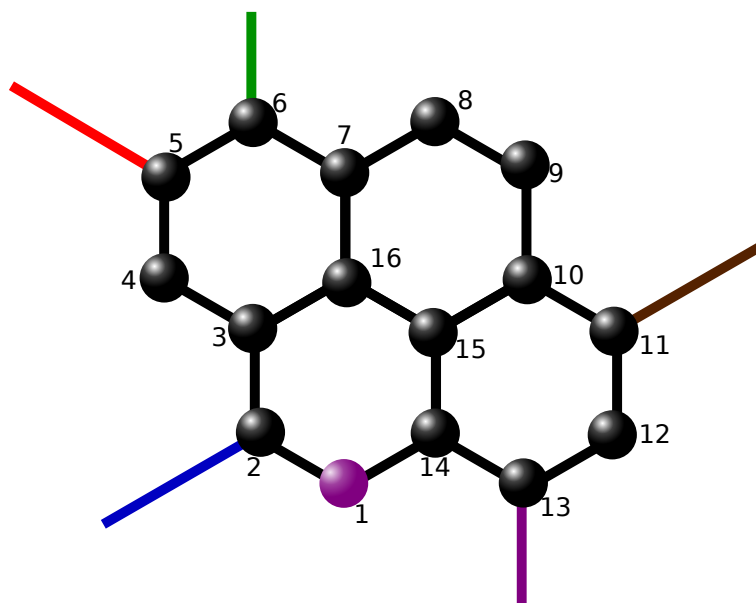
4. ábra. BiTeI szerkezete ([3]-ból átvéve).

különböző pálya figyelembe vétele szükséges a probléma leírásához az úgynevezett hopping és átfedési tagok száma rohamosan növekedni kezd. Ezen probléma megoldására dolgozták ki a szerzők a következő közelítést: használjuk ki a pályák szimmetriáit. A hopping és átfedési integrál paraméterek két különböző pontban lévő atom között kifejezhető a két atom pozícióját összekötő normált vektor és a Slater-Koster együtthatók lineáris kombinációjaként. A két atom helyzetét összekötő vektor leírására bevezethetjük az n_1 , n_2 , n_3 iránykoszinuszokat. Segítségükkel a Slater-Koster együtthatók kifejezhetőek. A 2. táblázatban az általunk használt s , p_x , p_y , p_z pályák között felírt együtthatók találhatóak. Az illesztendő paramétereket esetünkben a $V_{ss\sigma}$, $V_{sp\sigma}$, $V_{pp\sigma}$, $V_{pp\pi}$. Első-szomszéd közelítésben csupán a bizmut-tellúr és a bizmut-jód kölcsönhatást vesszük figyelembe. Atomonként 4 pályát tételezünk fel, ezeknek az atomi energiaszintje (vagy on-site energiája) atomonként három (a $p_x - p_y$ on-site energiákat összeköti a forgatási szimmetria). Az atomok közötti kölcsönhatást kötésenként négy paraméterrel írjuk le, így a spin-pálya kölcsönhatás figyelembe vétele nélkül összesen 17 illesztendő paraméterünk van. Azonban az első- és másodsomszéd távolság között annyira kicsi az eltérés, hogy utóbbit sem lehet figyelmen kívül hagyni. A másodsomszéd kölcsönhatáshoz hozzájárul a bizmut-bizmut, jód-jód, tellúr-tellúr, illetve a jód-tellúr kötés. Ez összesen már 33 illesztendő paraméter. És mindehhez hozzá kell venni még a spin-pálya kölcsönhatás járulékát. A spin-pálya kölcsönhatást atominak tételeztem fel, az ehhez tartozó Hamilton-operátor a p -pályák között nem más, mint az $\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}}$ operátor mátrixelemei a $|p_x \uparrow\rangle$, $|p_x \downarrow\rangle$, $|p_y \uparrow\rangle$, $|p_y \downarrow\rangle$, $|p_z \uparrow\rangle$, $|p_z \downarrow\rangle$ bázison:

$$\hat{H}_{\text{spin-plya}} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & i & -1 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & -i & 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -1 & 0 & i & 0 & 0 \\ 1 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

ahol λ a spin-pálya kölcsönhatás illesztendő erőssége. Ez a paraméter minden atomra különböző. Így összesen 36 illesztendő paraméterünk van.

Az illesztés a során az 5. ábrán látható sávszerkezethez illeszttem a TB modell által kapott sávszerkezetet. A cél a szerkezet minél pontosabb reprodukálása a számunkra releváns energiatartományban. Mivel transzport számolásokhoz kívánjuk elsősorban használni majd a modellt, ezért az ésszerű energiasáv a Fermi-energia környékén, maximum ± 1 eV távolságra. Az illesztés elve a legkisebb négyzetek módszere. Egészen nyilvánvaló módon a teljes 36 dimenziós paraméterter nem járható be teljes egészében ahhoz, hogy kiválasszuk a legjobb megoldást. Éppen ezért a módszer alapja, hogy a paraméterter egy véletlenszerűen választott pontjából indulva a gradiens mentén lépkedünk addig, ameddig egy lokális minimumot nem találunk. Ezután megrázzuk a rendszert és újrakezdjük a lépkedést. Ezt addig ismételjük, ameddig elfogadható eredményt nem kapunk. Az illesztésnek azonban van egy másik követelménye, amely nehezebben formulázható. Nem elegendő, hogy a modell jól visszaadja a sávszerkezetet, azt is jól kell modelleznie, hogy a sáv mely elemek mely pályáinak milyen arányú kontribúciójából tevődik össze. Ennek eldöntésére azt a módszert alkalmaztam, hogy a fentebb ismertetett eljárás végén megkapott sáv szerkezetek közül a legjobbak esetén összevetem a karaktereiket a DFT számolás eredményeivel.



6. ábra. Az általunk vizsgált pirén molekula szerkezete. A lila színnel a bizmut atomot különböztetjük meg. A különböző színű vonalak a különböző kapcsolódásokat jelölik.

A félév során alkalmam nyílt a Lancaster University Fizika Intézetén működő molekuláris transzporttal foglalkozó csoport munkájába bekapcsolódni. A csoportban molekulák hő- és elektromos vezetési tulajdonságait kutatják. Ismert tény, hogy elektródákhoz kapcsolt grafénszerű molekulák vezetési tulajdonságai jelentősen függenek a csatolás topológiájától. A molekula vezetőképességét a különböző atomok között a kvantuminterferencia határozza meg. A Prof. Colin Lambert által vezetett csoport kidolgozott egy nagyon egyszerű eljárást, mellyel megállapítható, hogy egy adott molekula adott kapcsolódási elrendezése esetén mekkora lesz a vezetőképesség. Sokkal pontosabb jóslatot mond az eljárás arról, hogy két különböző kapcsolódás esetén a vezetőképességek aránya hogyan alakul. Ennek meghatározásához a molekulában az atomok kötéseit leíró szomszédsági mátrix inverzét kell kiszámítani. A vizsgálni kívánt csatolási pontokban található számok arányának négyzete megadja a vezetőképességek arányát. Ez a *Magic number theory* [10].

Az én feladatom ezzel kapcsolatban az volt, hogy járjam körbe mennyire változnak ezek a szabályok, hogyan kell őket – amennyiben szükséges – módosítani, ha figyelembe vesszük a spin-pálya kölcsönhatást. A grafénszerű molekulák főleg szén és hidrogént tartalmaznak, ezekben a spin-pálya kölcsönhatás elhanyagolható. Ennek az az oka, hogy a spin-pálya kölcsönhatás erőssége a rendszám negyedik hatványával növekszik, így jelentékeny hatása a nehezebb elemeknél van. Éppen ezért az általam vizsgált molekulák olyanok voltak, melyekben az egyik szén atomot heteroatomos szubsztitúcióval egy nehezebb elemre, például bizmutra cseréljük.

A projekt során megalkottam egy effektív szoros kötésű Hamilton-operátort, amely ilyen molekulák leírására alkalmas. A modellben a spin-pálya kölcsönhatást egy $i\mathbf{m}\sigma$ taggal vettem figyelembe, ahol \mathbf{m} egy valós vektor, σ pedig a Pauli-mátrixok vektora. Fontos kiemelni, hogy a spin-pálya kölcsönhatás természeténél fogva merőleges a két atomot összekötő vektorra, ami egy megkötést ad az \mathbf{m} vektorra [11]. Végeredményben egyetlen csatolási állandó marad, egy valós m szám, amely az \mathbf{m} vektor hossza.

A harmadik félévben sikeresen elvégeztem a *Topologikus szigetelők I. c.* kurzust. A Lancaster University-n meghívott előadóként előadást tartottam az **International Conference on the Theory of Molecular-scale Transport** konferencián. Az előadásom címe: *Transport Properties of BiTeI-graphene Hybrid Structures* volt.

A *negyedik félévben* folytattam a munkát a lancasteri csoporttal. A kiválasztott molekula, amelyen az analízist elvégeztem a pirén lett (6. ábra). Azért erre a molekulára esett a választás, mert elég komplex ahhoz, hogy a különböző topológiájú kontaktálásoknak legyen értelme, de nem túl nagy ahhoz, hogy feleslegesen elbonyolítsa a vizsgálódást.

Elsőként az effektív modell segítségével számoltam ki a vezetőképességet a 6. ábrán látható kapcsolódásoknak megfelelően. Az m hangolható külső paramétert nullától különbözőre állítva a GOLLUM szoftvercsomag segítségével elvégeztem a transzmisszió kiszámolását [12].

A 7. és 8. ábrákon látható görbék két-két konfiguráció mellett készültek. Mindkét ábrán a bal oldali alábra a 2-6, a jobb oldali a 2-11 kötéshez tartozó számolás eredménye. A DFT számolás során elektródként olyan szénláncot használtam, melyben nem engedtem meg kötésalternálást, így a vezetékek fémesek maradtak. Az ábrák bemutatásának célja az, hogy láthatóvá váljon az effektív modell jól leírja kvalitatíve a sokkal részletesebb számolást.

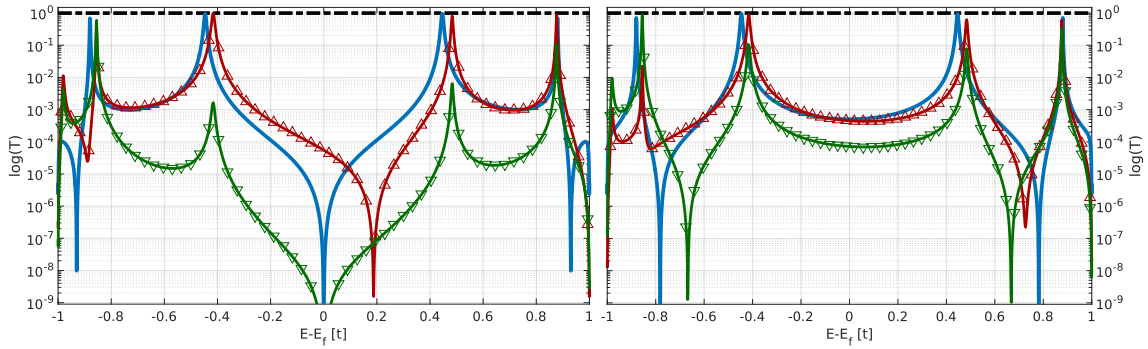
Ezzel megállapítható az eltérés a spin-pálya kölcsönhatás következtében a magic number theory-hoz képest. Az elmélet használható marad a csatolás hatására is mindaddig, amíg spin-rezolvált számolást vagy mérést nem végzünk. Az eredményeimről az 2018-as IWEPNM konferencián poszter prezentációt tartottam.

A negyedik félévem végén sikeresen elvégeztem a *Topologikus szigetelők II. c.* kurzust.

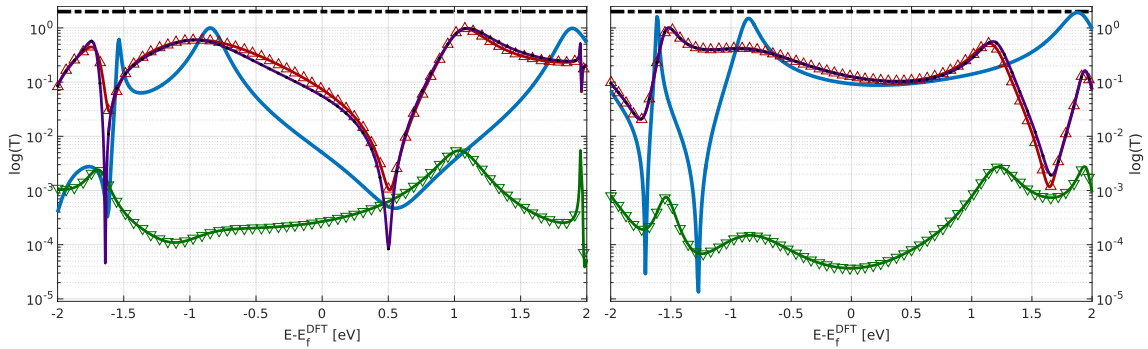
Oktatási tevékenység:

- 2016/17-es őszi félévben laborvezető a Modern fizika laboratóriumi gyakorlatok kurzuson (4 kredit, heti 4 óra).
- 2016/17-es tavaszi félévben laborvezető a Modern fizika laboratóriumi gyakorlatok kurzuson (4 kredit, heti 4 óra)
- 2016/17-es tavaszi félévben Fizikai feladatok megoldása gyakorlat vezetője (1 kredit, heti 45 perc).
- 2017/18-as tavaszi félévben laborvezető a Modern fizika laboratóriumi gyakorlatok kurzuson (4 kredit, heti 4 óra)
- 2017/18-as tavaszi félévben Fizikai feladatok megoldása gyakorlat vezetője (1 kredit, heti 45 perc).

Szakmai közéleti tevékenység: A Fizikai Mindenkié 4.0 Lágymányosi programon helyszíni tevékenység keretein belül laborvezetést tartottam.



7. ábra. A TB modell alapján készült kapufeszültség - transzmisszió görbe. A kék folytonos vonal az $m = 0$ eset. A piros és zöld görbék ugyanazon futás eredményei, csak spinpolarizált ábrázolásban. Ebben az esetben m már véges. A piros vonal jelöli a spin-fel csatornából a spin-fel csatornába történő szórást, míg a zöld vonal a spin-fel csatornából a spin-le csatornába történő szórást. A bal és jobb oldali ábra között a különbség az elektródák kötési helye, a bal oldali ábra a 2-6 kötéshez, a jobb oldali ábra pedig a 2-11 csatoláshoz tartozó görbe.



8. ábra. A SIESTA számolás alapján készült kapufeszültség - transzmisszió görbe. A kék folytonos vonal a sima pirén esetén számolt értékeket jelöli. A piros, zöld és lila vonalakkal jelölt számolás során a 6 ábrán 1-es számmal jelölt szén atom helyén bizmutot tettem. A piros vonal jelöli a spin-fel csatornából a spin-fel csatornába történő szórást, míg a zöld vonal a spin-fel csatornából a spin-le csatornába történő szórást. A lila görbe azzal a módosítással készült, hogy a SIESTA programban kézzel nullára állítottam a spinpálya csatolás erősségét. A bal és jobb oldali ábra között a különbség az elektródák kötési helye, a bal oldali ábra a 2-6 kötéshez, a jobb oldali ábra pedig a 2-11 csatoláshoz tartozó görbe.

Irodalomjegyzék

- [1] Awschalom, D., et al. *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*. Springer, 2011.
- [2] Fras, F., et al. Hole-Spin Initialization and Relaxation Times in InAs/GaAs Quantum Dots. *Physical Review B*, vol. 84, no. 12, 125431C, Sept. 2011.
- [3] Ishizaka, K., et al. Giant Rashba-Type Spin Splitting in Bulk BiTeI. *Nat Mater*, 10, 521–526, July 2011.
- [4] José M Soler, et al. The SIESTA Method for Ab Initio Order-N Materials Simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14, no. 11, Mar. 2002. p. 2745.
- [5] Hohenberg, P., and W. Kohn. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 136, B864, 1964.
- [6] Rungger, Ivan, and Stefano Sanvito. Algorithm for the Construction of Self-Energies for Electronic Transport Calculations Based on Singularity Elimination and Singular Value Decomposition. *Physical Review B*, 78, 035407, July 2008.
- [7] Kou, Liangzhi, et al. Robust 2D Topological Insulators in van Der Waals Heterostructures. *ACS Nano*, vol. 8, no. 10, pp. 10448–54, Oct. 2014.
- [8] N. R. Papior, sisl: v0.8.5.
- [9] Slater, John C., and George F. Koster. Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem. *Physical Review*, 94, no. 6, 1954.
- [10] Geng, Yan, et al. Magic Ratios for Connectivity-Driven Electrical Conductance of Graphene-like Molecules. *Journal of the American Chemical Society*, 137, Apr. pp. 4469–76, 2015.
- [11] Malkova, N., and U. Ekenberg. Spin Properties of Quantum Wells with Magnetic Barriers. I. A k_p Analysis for Structures with Normal Band Ordering. *Physical Review B*, vol. 66, no. 15, 155324, Oct. 2002.
- [12] Ferrer, J., et al. GOLLUM: A next-Generation Simulation Tool for Electron, Thermal and Spin Transport. *New Journal of Physics*, vol. 16, no. 9, 093029, Sept. 2014.
- [13] Datta, Supriyo. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1995.

- [14] Yu, Rui, et al. Equivalent Expression of \mathbb{Z}_2 Topological Invariant for Band Insulators Using the Non-Abelian Berry Connection. *Physical Review B*, vol. 84, no. 7, 075119, Aug. 2011.