

Beszámoló 2016-17/1 félévről

Tajkov Zoltán – EZL8G0 - PhD. hallgató

Témavezetők: Koltai János, Oroszlány László

A kutatómunkám elején, szeptemberben megismerkedtem a SIESTA-val (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms). A SIESTA egy sűrűségfunkcionál-elméleten alapuló módszer és annak számítógépes implementációja. A SIESTA használata során az eredményeket a VASP jóslataival vetettük egybe. Bizonyos vizsgált elemeknél – jellemzően a magasabb rendszámú atomokra, mint Bi, Te, stb - jelentős eltéréseket tapasztaltunk a két DFT kód eredményei között. A további vizsgálat megmutatta, hogy a legnagyobb problémát a SIESTA pszeudopotenciál fájljai jelentették, ezért megtanultam az ATOM nevezetű program segítségével, hogyan lehet pszeudopotenciálokat generálni, amelyekkel már jobb egyezést tudtunk elérni.

Közben felvettük a kapcsolatot a kísérleti munkát végző kutatócsoporttal, amely az általunk elméletileg vizsgálat anyagokkal foglalkoznak. Elméleti szimulációkkal segítettünk értelmezni a mérések során felmerülő kérdések (például lehetséges-e, hogy a BiTeI réteg vékonyításánál a réteges anyagról nem egy BiTeI háromréteg, hanem egyetlen jód réteg válik le). Ezeket a vizsgálatokat kezdetben a VASP-pal végeztük, a pszeudopotenciál probléma megoldása után SIESTA-val is reprodukáltuk.

A félév második felében megtanultam a Landauer-formalizmussal és a Green-függvényes módszerrel szórásproblémákat számolni. Ezt alacsony szabadsági fokú tesztrendszereken magam is vizsgáltam. Beletanultam az EquUs: Eötvös Quantum Transport Utilities transzportszámító szoftver használatába. Az MSc-s diplomamunkám során kétdimenziós, heterostrukturás anyagokkal foglalkoztam és grafén-BiTeX ($X = \text{Br, I}$) réteges anyagokra egy effektív Hamilton-modellt alkottunk, amellyel fel tudtuk térképezni a rendszer elektromos tulajdonságait. Ezt a modellt sikeresen beleilleszttem az EquUs szoftverbe és ennek segítségével a korábban megismert fázisdiagramon tudunk transzporttulajdonságokat is vizsgálni.

A következő szemeszterben a fázistér különböző paraméterkiosztása mellett fogjuk a rendszer vezetési tulajdonságait számítani. Ez lehetőséget ad arra, hogy a jövőbeli kísérleti tapasztalatokat fizikailag interpretálhassuk egy mérhető mennyiség segítségével. Ezeket az eredményeket a március elején tartandó IWEPNM konferencián egy poszter formájában prezentálom majd.