

4. 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 témám a topologikus tulajdonságok vizsgálata két -és háromdimenziós rendszerekben. A kétdimenziós rendszerre egy példa a grafén, mely laborban könnyen előállítható, mérésekre jól felhasználható. A kétdimenziós, időtükrözésre inverziánssal, tiltott sávval rendelkező anyagoknak, két szigetelő fázisa lehetséges: a triviális és a topologikus. A tiszta grafén ideális félfém, azonban elektronikai tulajdonságai nagymértékben befolyásolhatóak, ha nehéz fémekkel szennyezzük, ekkor létre jöhet a tiltott sáv. Ehhez olyan fémeket kerestünk, amiknek a kötési energiájuk minimuma a grafénrács hatszögeinek a közepe felett helyezkedik el. Ekkor két fontos, általam vizsgált kölcsönhatás jelenhet meg, ami a tiltott sáv topologikus jellegét befolyásolja: a Kekulé-féle rácstorzítás és a Kane-Mele típusú másodsomszéd kölcsönhatás. Ezen kölcsönhatások vizsgálata izgalmas kutatási terület.

A háromdimenziós, időtükrözési szimmetriával rendelkező szigetelők 3-féle topologikus állapottal rendelkezhetnek: triviális (TI), gyenge (WTI) -vagy erős (STI) topologikus szigetelő. A cirkónium-pentatellurid (ZrTe_5) jó lehetőséget nyújt a WTI-STI átmenet elméleti és kísérleti vizsgálatára, ugyanis a ZrTe_5 már kis deformációk hatására fázisátalakuláson megy keresztül.

Az előző három félévben elért kutatási eredmények összegzése: A grafénnel kapcsolatos kutatásokat folytattuk, az azzal kapcsolatos numerikus modelt finomhangoltuk. A szennyezett grafént leíró szoros kötésű modellben minden adatot a hozzá legközelebb eső 6 szénatom között indukál Kekulé és Kane-Mele típusú hoppingokat. A Kekulé-torzítás, a grafén geometriájából fakadóan, egy oszcilláló előjelű kölcsönhatásként jelenik meg, mely miatt létrejön egy $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -as szupercella. Egy ilyen rendszer leírható a Potts-modell segítségével, ami a 3 állapotú Ising-modellnek felel meg. Ha az adatok relatív pozíciói megegyeznek ezen szupercellán belül, akkor ez a kölcsönhatás konstruktív módon jelenik meg és triviális tiltott sávot nyit. A Potts-modellben ez a ferromágneses esetnek felel meg. Ekkor az adatok eloszlása korrelált, de nem periódikus. Ha az adatok relatív pozíciói véletlenszerűek, akkor eloszlása korrelálatlanná válik, a Kekulé kölcsönhatás nem tud tiltott sávot nyitni. Ez a Potts-modellben a paramágneses

esettel írható le. Az adatom szupercellán belüli 3 lehetséges relatív pozícióját a Potts-modellben színnel szokás jelölni. Ekkor a ferromágnes eset "egyszínű", a paramágneses eset "háromszínű". A továbbiakban én is az egyszínű és a háromszínű elnevezést fogom használni. Így egy 3×3 -as elemi cella egy adatommal, periódikus határfeltételek mellett egyszínű lesz, míg egy 4×4 -es elemi cella ugyanúgy egy adatommal már háromszínű, mivel a periodicitás miatt minden relatív pozíció egyenlő arányban jelenik meg.

A numerikus számolások során a kernel polinom módszert (kpm) használtam, mely kiváló a nagyméretű, véletlenszerű rendszerek probabilisztikus vizsgálatára [2]. A számolásokhoz különböző méretű grafénrács, állapotsűrűségét (1000×1000 elemi cella) és vezetőképességét (500×500 elemi cella) határoztam meg a két hopping paraméter széles tartományában. Ezen felül kisebb rendszer (50×50 elemi cella) teljes energiáját egzakt diagonalizációval állapítottam meg szintén széles paraméter tartományban, illetve a kölcsönhatási energia hely- és távolságfüggését vizsgáltam két reprezentatív paraméter párossal. A kapacitás igényes numerikus számolásokat a NIIF Debrecen1 és Debrecen2 szuperszámítógép klasztereken végeztem.

Időközben bevontak egy már folyamatban lévő kísérleti kutatásba, ahol a $ZrTe_5$ -en bizonyos deformációk mellett megjelenő felületi állapotait, annak eredetét vizsgáltuk. A $ZrTe_5$ egy orthorombos, puha, kristályos anyag, melynek elemi cellájában 12 atom található. A kristálybeni anizotrópia miatt hat különböző Poisson számmal rendelkezik, és összesen 12 rugalmassági együtthatóval jellemezhető. Az anyag rétegelt, a rétegeket gyenge van der Waals erők tartják össze. Kiszámoltuk a rendszer rugalmassági állandóit, melyekből meghatározhatóak a Poisson számok és a nyírási együtthatók. Kiszámoltuk a sáv szerkezetet a torzítatlan rendszeren, majd meghatároztuk a topologikus fázisát. Ehhez én ab initio számolásokkal járultam hozzá a Siesta nevű program használatával, valamint további adatfeldolgozással a sisl python modul segítségével. A topologikus fázis meghatározásához a Fu, Kane és Mele által meghatározott algoritmust [1] vettük alapul. Ehhez továbbfejlesztettem egy kétdimenziós rendszeren működő matlab kódot, ezt átírtam pythonra, így a sislben történő utófeldolgozás könnyebbé vált, és általánosítottam, hogy 3 dimenziós rendszereken is működjön, majd a kód segítségével kiszámoltam, hogy a relaxált rendszer STI.

Az összes ab initio számolást VASP-ban is elvégeztük, az eredményeket összevettük, a van der Waals irányú Poisson állandók között, a kölcsönhatás hosszú hatótávolsága miatt, egy 2-es faktorú eltérés mutatkozott, egyéb irányokban a 2 számolás numerikus eltérése 10 % körüli.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése: Az előző félévben megírt topologikus fázist számoló algoritmust kibővítettem, hogy tetszőleges 2 dimenziós felületen működjön, így már Weyl-félfémek is vizsgálhatóak vele. Praktikusági okokból hozzáadtam néhány függvényt, melyekkel könnyen lehet tetszőleges (nyitott, zárt, félig zárt) felületeket létrehozni és transzformálni. A kódot elláttam megfelelő mennyiségű kommentel és dokumentációval, majd nyilvánosan elérhetővé tettem githubon. A modul validálásához még hiányzik egy Weyl-félfémmel kapcsolatos számolás, ami a lehetséges hibákat vagy hiányosságokat feltárná. A modullal kapcsolatos tervekben szerepel, hogy a validálás után a kódot megpróbáljuk integrálni a sisl modulba.

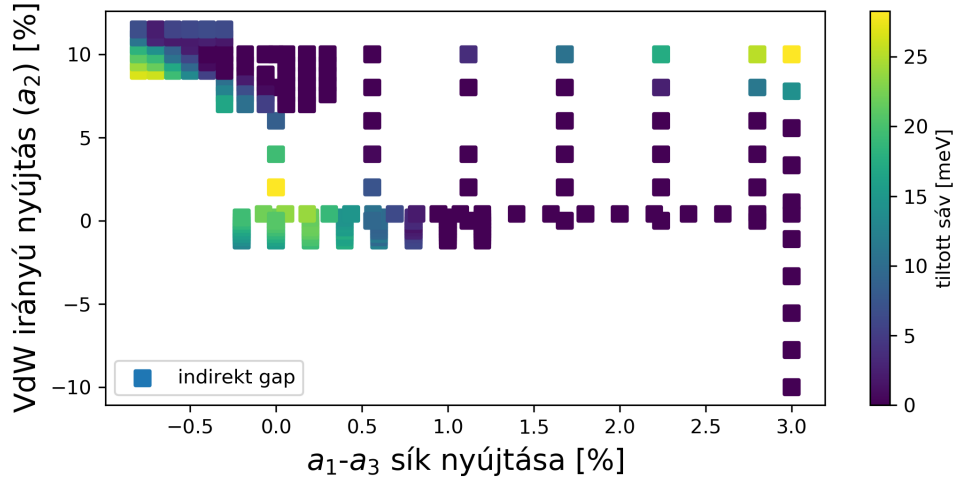
A ZrTe₅ kapcsolatos, Nemes-Incze Péter vezette kutatás mellett egy másik, Makk Péter vezette kutatócsoporttal is elkezdtünk együttműködni. Az ő kísérleteikhez kapcsolódóan meghatároztuk a ZrTe₅ különböző mértékű homogén deformációk és nyírások esetén a sáv szerkezetet, melyből a meghatároztuk a direkt és indirekt gap nagyságát. Amennyiben a szigetelő állapotot ketté választja a direkt gap bezáródása, majd újbóli kinyílása, az új szigetelő tartomány topologikus fázisát is meghatároztuk.

A ZrTe₅ rácsvektorai legyenek \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 és \mathbf{a}_3 . Ekkor az \mathbf{a}_2 irány párhuzamos a van der Waals iránnyal. A homogén nyújtások két részből álltak: a van der Waals iránnyal megegyező (\mathbf{a}_2), és az arra merőleges komponensekből (\mathbf{a}_1 és \mathbf{a}_3). Az (1.) ábrán láthatjuk, hogy a különböző irányú homogén nyújtások esetén két szigetelő tartomány jön létre, melyeket egy fémes rész választ el. A két szigetelő tartomány topologikus állapotát kiszámoltuk, a relaxált rendszerrel összekötésben levő rész STI-nek, míg a másik tartomány (az ábrán jobb-felül) WTI-nek bizonyult.

A Nemes-Incze Péter vezette kutatáshoz szükséges volt vizsgálni a van der Waals rétegek egymáshoz képesti elmozdulását, ezért kiszámoltuk az \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 és \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3 irányú, különböző mértékű nyírások esetén a sáv szerkezetet, és a tiltott sáv nagyságát. A számolás eredménye a (2.) ábrán látható, mely szerint a \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3 irányú nyújtás képes fémessé tenni a szigetelő anyagot, míg a \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 irányú nem.

A nyírás és a nyújtás közötti különbség, hogy a nyújtás nem szimmetrikus az összenyomásra, de képes topologikus átmenetet létrehozni, míg a nyírás esetén, az irányok előjelére szimmetrikus a tiltott sáv nagysága, de nem generál fázisátalakulást a vizsgált tartományban.

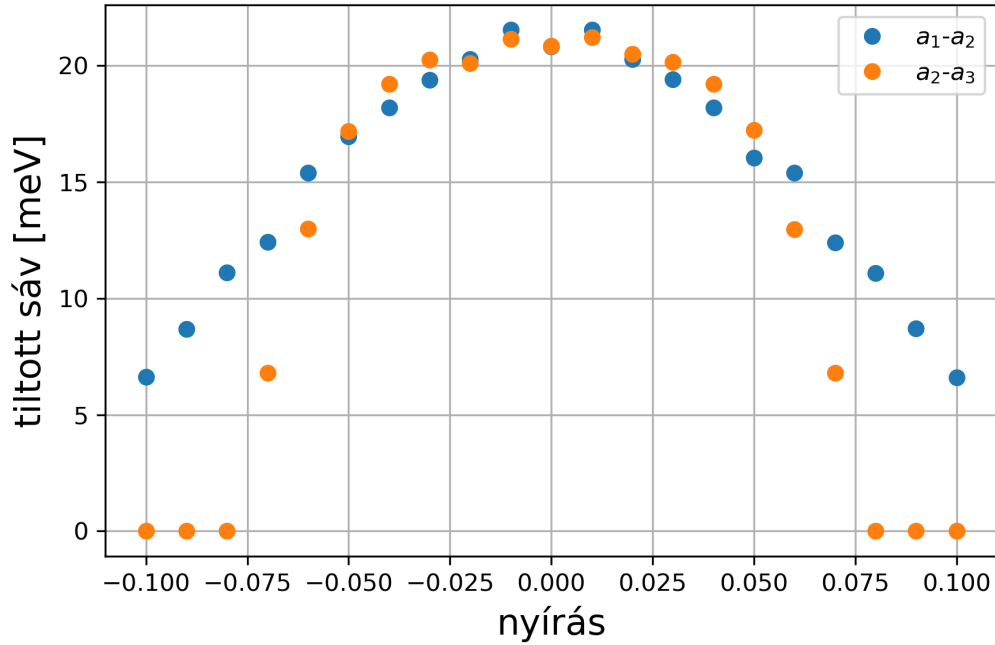
A grafénnel kapcsolatos kutatásnál felmerült az igény olyan esetek vizsgálatára, amik kísérletileg realizálhatóak. Ehhez ab initio számolásokat végeztünk szintén a Siesta és a VASP nevű programok használatával. Először olyan anyagot kerestünk, ami nem mágneses, a grafén szennyezése esetén a rács hatszögeinek



1. ábra. Különböző irányú nyújtások esetén a ZrTe_5 tiltott sávjának mérete. Jól látható, hogy két szigetelő tartomány van (jobb felső és bal alsó részek), amiket egy fémes tartomány választ el. Ahol a négyzetek sötkek színűek, ott az anyag fémes a tiltott sáv bezáródása miatt.

közepe felett van a kötési energiájának minimuma és elegendően erős spin-pálya csatolást tud létrehozni a grafén p_z elektronjaival ahhoz, hogy képes legyen topologikus gap nyitására. Számos atom rendelkezik nem elhanyagolható mágneses momentummal, ezt sok esetben jelentősen csökkenteni lehet, ha dimereket használunk atomok helyett. Ilyenkor a két különböző atom eredő momentuma közel nulla lesz. Ezen kritériumnak a higany és a tálium felelt meg az általunk vizsgált atomok és dimerek közül. Mivel a táliumal szennyezett grafénnek volt nagyobb a tiltott sávja, így ezzel az atommal folytattuk a számolásokat. Két, különböző adatom eloszlású ab initio számolásból kapott tiltott sáv nagyságára a már fentebb ismertetett szoros kötésű modell 2 hopping paraméterét illesztettem.

Az első esetben egy 3×3 a második esetben 4×4 -es elemi cellát használtunk, benne egy tálium adatommal, periódikus határfeltétellel. Így, az első, egyszínű esetben az adatom koncentráció $\frac{1}{9}$, míg a második eset háromszínű $\frac{1}{16}$ koncentráció mellett. A második esetben a Kekulé-torzítás vezető rendben nem tud gapet nyitni. Ez a plusz feltétel megkönnyítette a szoros kötésű modell paramétereinek illesztését. Az illesztett Kekulé torzítás nagysága: $\delta t = 93$ meV, míg a Kane-Mele hopping nagysága ennek kevesebb, mint a harmada: $|m| = 27$ meV. Ebből a modellünk alapján az következik, hogy egyszínű adatom eloszlás esetén a



2. ábra. Az ábrán a két különböző irányú nyújtás eltérően viselkedése látszik. Az $\mathbf{a}_1\text{-}\mathbf{a}_2$ irányú nyírás a tiltott sávot csak enyhén befolyásolja, míg az $\mathbf{a}_2\text{-}\mathbf{a}_3$ irányú fémessé teszi a rendszert $\gamma \approx \pm 0.075$ esetén.

Kekulé-torzítás triviális tiltott sávot nyit, míg háromszínű esetben a Kane-Mele hopping fog topologikus gapet nyitni. Ezen jóslatok az ab initio számolásokból kinyert eredményekkel megegyeznek, azonban a modellünk nem veszi figyelembe az összes hatást, ami a tiltott sáv nagyságát befolyásolja, így numerikus megbízhatósága elmarad az ab initio számolásokétól. Ezért a jövőben tervezzük a modellünket bővíteni Rashba-típusú hopping integrállal.

Az illesztett paraméterekkel, 50×50 elemi cella esetén, néhány különböző koncentráció érték mellett nagyszámú mintán kiszámoltam a rendszer teljes energiáját egzakt diagonalizációval egyszínű és háromszínű adatom eloszlás mellett. Az egyszínű rendszer alacsonyabb energiájú, a két eloszlás közötti energiakülönbség az adatom koncentráció négyzetével arányosan nő. A háromszínű számolások során az adatomok véletlenszerű eloszlását feltételeztük, ezért véges (50×50 -es elemi cella) méret esetén a rendszerben túlsúlyban lehet valamelyik szín (enyhe ferromágneses jelleg jelenhet meg), ennek nagysága néhány %.

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

- Az érzékelés biofizikája II.: Bioakusztika: érdekes biológiai jelenségekkel ismerkedtem meg. Illetve terepmunkák megtervezéséről és kivitelezéséről szereztem ismereteket.
- Fullerének és szén nanocsövek EA: ezen a kurzuson a fullerén felfedezéséről és tulajdonságairól tanultam. Továbbá arról, hogy hogyan lehet csoportelméleti megfontolásokkal fizikai problémákat megoldani.

Konferenciák az aktuális félévben: Az online megrendezett nemzetközi APS March Meeting 2021-en vettem részt, március 16-án adtam elő. Az előadásom címe: Topological Phase Transition Induced by Partial Ordering of Heavy Alkali Adatoms in Graphene Monolayer.

Oktatási tevékenység az aktuális félévben: A fizika numerikus módszerei nevű tantárgy egyik társ-gyakorlatvezetője voltam heti 2×45 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] C. L. Kane and E. J. Mele. “ Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect”. In: *Phys. Rev. Lett.* 95 (14 2005), p. 146802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.146802.
- [2] Alexander Weiß et al. “The kernel polynomial method”. In: *Rev. Mod. Phys.* 78 (1 2006), pp. 275–306. DOI: 10.1103/RevModPhys.78.275.