

2. félévi beszámoló

Nagy Dániel nadtabt@caesar.elte.hu

Statisztikus fizika, biológiai fizika és kvantumrendszerek fizikája PhD program

Témavezetők: Dr. Oroszlány László, Dr. Koltai János

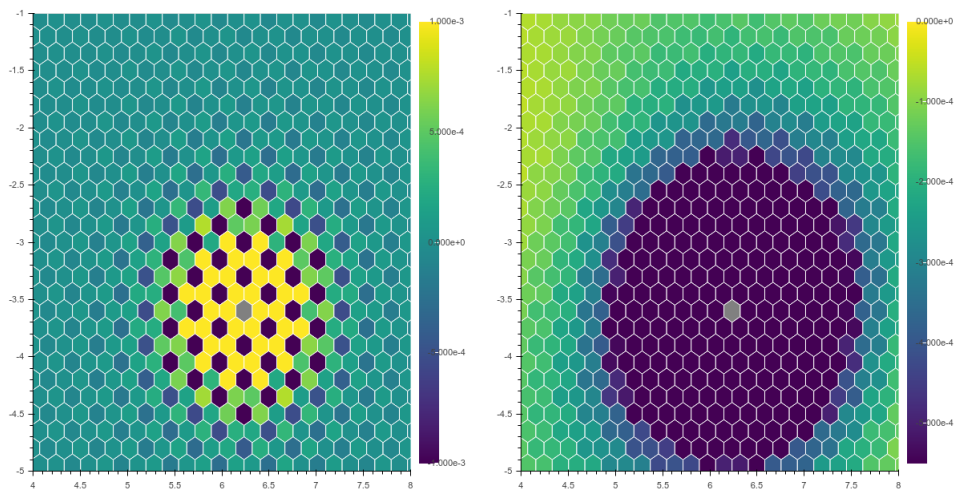
A dolgozat címe: Study of Electron Transport in Patterned Disordered Graphene

Bevezetés: A topologikus szigetelők vizsgálata, azok kísérleti előállítása óta ígéretes területté vált. A grafénnel kapcsolatos kutatások szintén ígéretesek, annak remek elektronikai, mechanikai és optikai tulajdonságainak köszönhetően. Az utóbbi néhány év kutatásainak egy része arra irányult, hogy a topologikus szigetelőket grafén alapú anyagon valósítsák meg. A kutatási témám a grafén alapú alacsony dimenziós rendszerek topológikus fázisátalakulásának vizsgálata.

Az előző félév rövid összefoglalása: A tiszta grafén alkáli atomokkal való szennyezése során az adatomok energetikailag stabil helye a hatszögrács közepén van. Az általunk használt modellben a szennyező atomok csak az őket tartalmazó plakettekre fejtik ki a hatásukat, amit a következőképpen veszünk figyelembe: módosítják az első szomszéd hopping nagyságát a geometriai torzítás miatt, ez a Kekule-torzítás; a spin-pálya csatolás révén komplex másod-szomszéd hoppingot vezetnek be. A grafénben természetes módon be lehet vezetni egy 3 elemi cella méretű szupercellát, mely alapján az összes plakethez periódikusan hozzá lehet rendelni 3 különböző színt [1]. Amennyiben az adatomok egyenlően oszlanak el mind a 3 különböző színű plaketten, akkor a rendszert színesnek nevezzük, abban az esetben, mikor összes adatomot tartalmazó plakett egy adott színű, a rendszert egyszínűnek nevezzük. A modellünkben csak a fentebb említett két határesetet vizsgáltuk.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése: Alacsony hőmérsékleten az adatomok között effektív RKKY típusú kölcsönhatás lép fel, melynek helyfüggését numerikusan megvizsgáltuk két szélsőséges esetben: mikor csak Kekule-torzítást tételeztünk fel, valamint amikor csak spin-pálya csatolást. A számolás során a tiszta grafén rendszerbe 2 adatomot helyeztem, egyet egy középső $\mathbf{R}_{0,0}$ plakettre, egyet pedig egy tetszőleges $\mathbf{R}_{i,j}$ -re. 1 ábrán az figyelhető meg, hogy amikor Kekule-torzítás van, a kölcsönhatás előjelet vált, ha azonos színű a két adatom, a spin-pálya csatolás esetében viszont nem. A kapott eredmény összhangban van az előző félévben levezetett analitikus formulával.

A szennyezés által létrehozott tiltott sáv önkonzisztensségéhez numerikusan ki-

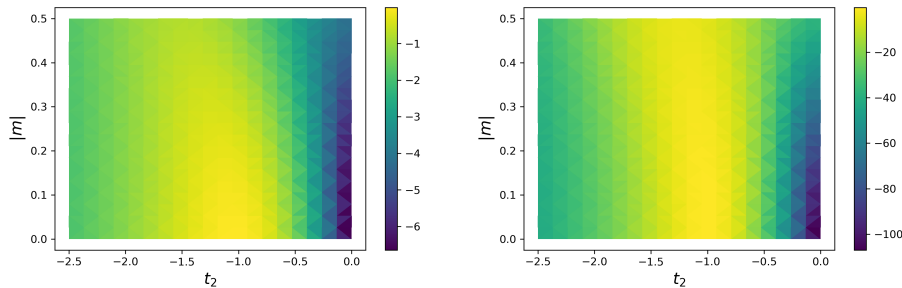


1. ábra. Az effektív RKKY kölcsönhatás helyfüggése, 50×50 elemi cellát tartalmazó, szabad peremfeltételű rendszerben. Mindegyik plakett a középső és az adott plakett közötti RKKY kölcsönhatási energiát mutatja. Baloldalt: a két adatom csak Kekule-típusú torzítást tartalmaz, a kölcsönhatási energia 3 elemi cellánként oszcillál. Jobboldalt: a két adatom csak spin-pálya csatolást tartalmaz, a kölcsönhatás pozíciófüggésében nincs oszcilláció, az amplitúdú egyenletesen, r^{-3} szerint csökken.

számoltuk a betöltött energiaállapotok összegét (egzakt diagonalizációval) az egyszínű és a színes rendszerben egyaránt különböző adatom koncentráció mellett. A számolásból megállapítottuk, hogy magas adatom sűrűség mellett is helytállóak az analitikus számolásban végzett közelítések, vagyis az egyszínű rendszer energiája alacsonyabb, amint azt a 2 ábrán láthatjuk. Emiatt az előző félév analitikus számolásai, amiket alacsony adatom koncentráció mellett végeztünk el érvényesek magasabb koncentráció mellett is.

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

- Topologikus szigetelők II.: Ezen a kurzuson megismerkedtem a topológikus szupravezetőkkel, a legegyszerűbb 1 dimenziós modelltől, a Kitaev-lánctól kezdve az összetettebb rendszerekig, mint amilyen a Lutchyn-drót. Ezen rendszerek topológikus invariánsa a Pfaffian-szám, melynek nemnulla értéke jelzi a rendszer szélein megjelenő Majorana-zéró módusokat. Az



2. ábra. Egyszínű és színes rendszer energiájának különbsége a paraméter térben. A különbség mindenütt negatív, vagyis magas adatom koncentráció mellett is kedvező a színek szerinti rendeződés Baloldal: 10/3 %-os koncentráció, jobb oldal: 50/3 %-os koncentráció.

órán tanultunk továbbá a normálfém-szupravezető (NS) átmenetekről, az Andreev-szórásról. A Majorana-fermionokon végrehajtható kvantum operációkról, mint amilyen a qbitek írása, olvasása, melyek a zajtűrő kvantumszámítógépek elméleti alapjait képezik.

- Kvantuminformáció-elmélet: Ezen a kurzuson tanultunk a klasszikus információelméletről, statisztikus sokaságon végzett mintavételezésről. Kvantum műveletekről két állapotú rendszerben, ezen állapotok leírása különböző bázisokon. Tiszta, kevert és összefonódott állapotokról, Az egybites kvantum operációkról, a kvantum információelmélet matematikai megalapozásáról. Különböző kvantum programokról. Qbitek termodinamikája, melyet az entrópián keresztül vezetünk be.

Konferenciák az aktuális félévben: Heti 1 alkalommal kutatócsoporton belüli online megbeszélésen vettem részt, melyen megbeszélés szerint valaki előadott.

Oktatási tevékenység az aktuális félévben: A fizika numerikus módszerei I 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] V.V. Cheianov, V.I. Fal'ko, O. Syljuåsen, and B.L. Altshuler. “Hidden Kekulé ordering of adatoms on graphene”. In: *Solid State Communications* 149.37 (2009), pp. 1499–1501. ISSN: 0038-1098.