

Doktori beszámoló

3. félév

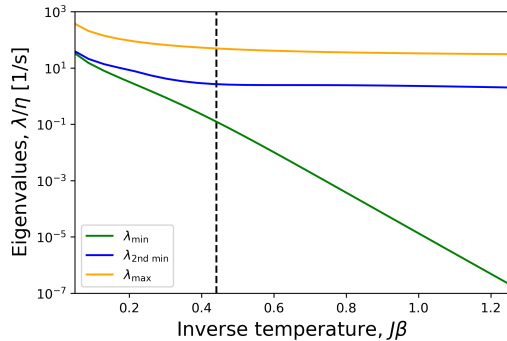
Veszeli Máté Tibor
témavezető: Vattay Gábor

2019. január 21.

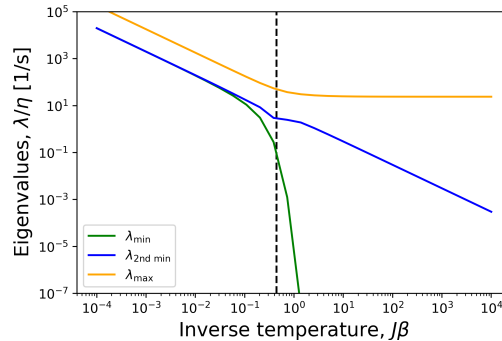
1. Kutatási tevékenység

A félév során két témakörrel foglalkoztam: folytattam a hőmérsékletfüggő spinrendszerek vizsgálatát, és fehérjevezetést számoltam. Előbbinél sikerült belátni, hogy a relaxációs idő alacsony hőmérsékleten exponenciálisan nő, a gyors módusok azonban konvergálnak. Magas hőmérsékleten a dinamikai mátrix összes sajátértéke hőmérséklettel arányos (1-es ábra). A görbék viselkedése a kritikus pont környékén változik meg. Egy redukált elmélettel a teljesen összecsatolt, uniform spin modellt lehet nagyobb rendszerekre is vizsgálni, és itt már jól látszik, hogy a kritikus hőmérsékleten változik meg relevánsan a viselkedés. Releváns kérdés, amin még dolgozom, hogy az időnek milyen függvénye legyen a hőmérséklet, ha minél gyorsabban az alapállapot közelébe szeretnénk juttatni a rendszert.

A másik téma amin dolgoztam az fehérjevezetés volt. Mivel a fehérjék nem szabályos kristályszerűek, ezért a hullámfüggvényeik nem kiterjedtek, hanem lokalizáltak. Ennek következtében a Landauer-formulából kiindulva szigetelőként kellene viselkedniük. Kísérletek azonban azt mutatják, hogy bizonyos fehérjék vezetőképessége sokkal nagyobb, mint ahogy azt a Landauer-formula jósná. Azt feltételezzük, hogy a környezet is jelentős funkciót tölt be ebben. Az elektron bealagutazik a fehérjébe, ahol a fononok miatt már egy master



(a) Eigenvalues of M



(b) Eigenvalues of M

1. ábra. 2D ferromagnetic Ising model

$N = 3 \times 3$, Ohmic spectral strength, Critical temperature is shown by the dashed black line.

egyenlet írja le a dinamikáját, ami sokkal nagyobb vezetést enged meg. Ehhez kapcsolódóan egy új bio-Landauer-formulát lehet levezetni. Ez nulla hőmérsékleten is új eredményeket ad, mivel ilyenkor is össze van kapcsolva a rendszer és a fürdő, azonban a fürdő csak elnyelni tud energiát. Akkor kaphatjuk vissza a szokásos képleteket, ha a két rendszer és a környezet közötti csatolás tart a nullába, azaz az abszorpció és emisszió karakterisztikus ideje végtelenül nagy lesz. Ebben a projektben főleg a numerikával foglalkoztam. A molekulák hullámfüggvényeit a kiterjesztett Hückel-módszerből kaptuk meg. Ezek segítségével meghatározhatóak a Lindblad-egyenletben szereplő, disszipációért felelős mátrixok. A következő lépés a mikroszkopikus mennyiségekből a mérhető vezetőképesség számolása volt. A kapott eredményeket konkrét mérésekhez illesztettük. Alacsony hőmérsékleten bizonyos esetben több nagyságrendnyi esést tapasztaltak a kísérletekben. Jelenleg ezt az effektust próbáljuk reprodukálni.

2. Tanulmányi tevékenységek

A félév során a Ráctérelmélet II című tárgyat végeztem el ötös osztályzattal.

3. Oktatás

Számítógépes alapismeretek gyakorlatot tartottam.