

Beszámoló 2017-18/1 félévről

Tajkov Zoltán – EZL8G0 - PhD. hallgató

Témavezetők: Koltai János, Oroszlány László

Bevezetés: Az előző félévben egy kétdimenziós grafén alapú heteroatomos van der Waals szerkezet szoros kötésű modeljét illesztettük sűrűségfüggvény-elméleten (DFT) alapuló számításokhoz és végeztünk ennek segítségével transzport számításokat, melynek segítségével feltérképeztük a vizsgált rendszer topologikus tulajdonságait.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése: Felvettük a kapcsolatot a Budapesti Műszaki Egyetemen működő kísérleti csapat vezetőjével, Csonka Szabolccsal. A csoport az általunk elméletileg vizsgált anyag tulajdonságait kutatja. Arany szubsztrátumon sikerült egyetlen réteget előállítani BiTeI-ből. A BiTeI réteges anyag, amelyben a három atomi réteget ionos kötés kapcsolja össze, míg ezen három-rétegek között csupán gyengébb, van der Waals erők hatnak, hasonlóan a grafithoz. DFT számításokkal igazoltuk, hogy a BiTeI az arany (111) felülethez erősebben köt, mint a rétegek egymással. Az arany felület magához köti a BiTeI jód, vagy tellúr réteget és a szonikációt követően az arany felületen vékony BiTeI réteg marad. DFT számításokkal meghatároztuk a szabadon álló, illetve az aranyhoz kötött BiTeI rétegek állapotssűrűségét és jelentős eltéréseket tapasztaltunk. Meglepő módon az eltérés erősen függ attól, hogy a BiTeI jód vagy tellúr oldallal köt az aranyfelülethez. A szabadon álló BiTeI rétegben egy 740 meV-os gap van, ezt az arany véges állapotssűrűsége árnyékolja ugyan, de a szabadon álló BiTeI főbb jellegzetességei megfigyelhetőek maradnak.

A következőkben a szabadon álló BiTeI egyrétegre készítettünk egy tight-binding modellt, melybe első- és másodsomszéd kölcsönhatásokat tételeztünk fel és megkezdtük az illesztést az előzőleg elvégzett DFT számításokhoz. A következő félévben szeretnénk a már illesztett modellünkön transzport számításokat végezni.

Felvettük a kapcsolatot a Lancaster University Fizika Intézetével, ahol molekuláris transzporttal foglalkoznak és bekapcsolódtunk a kutatásukba. Ismert tény, hogy elektródákhoz kapcsolt grafén-szerű molekulák vezetési tulajdonságai függenek attól, hogy a molekulák mely atomjait kötik össze az elektródák. A molekula vezetőképességét a különböző atomok között a kvantum-interferencia határozza meg. Az elmúlt fél évben azt vizsgáltam, hogy ezt hogyan befolyásolja a spin-pálya kölcsönhatás. Elsőként tight-binding modelleket alkottunk egyszerű molekulákról és a Gollum transzport számoló program segítségével vizsgáltuk a vezetőképességet. Azt találtuk, hogy

spin-rezolvált számolás esetén kimutatható eltérés figyelhető meg. A továbbiakban DFT-alapú számolásokkal szeretnénk az eredményeinket megerősíteni valódi molekulákon. Ezt úgy érjük el, hogy a pirén molekula egyik szén atomját heteroatomra cseréljük, nitrogénre, majd bizmutra. A bizmut az egyik legnehezebb, még stabil elem amelyben erős a spin-pálya kölcsönhatás, így itt várható a legnagyobb hatás.

Publikációk: Megjelent az előző félévben beküldött publikációnk, a *physica status solidi (c)* referált folyóiratban (doi: 10.1002/pssc.201700215), ezen kívül beadásra került a kísérleti csoporttal közösen egy cikk a BiTeI egyréteg előállításáról, jelenleg elbírálás alatt van.

Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben: Az aktuális félévben a Topologikus szigetelők c. tárgyat vettem fel, január 15-ig még nem kaptam rá érdemjegyet.

Konferenciák az aktuális félévben: Részt vettem meghívott előadóként az **International Conference on the Theory of Molecular-scale Transport** konferencián októberben a Lancaster University-n.

Megemlíthetők még: -

Szabadalmak: -

Oktatási tevékenység az aktuális félévben: -

Szakmai közéleti tevékenység: -

Elismerések: -