

1. 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

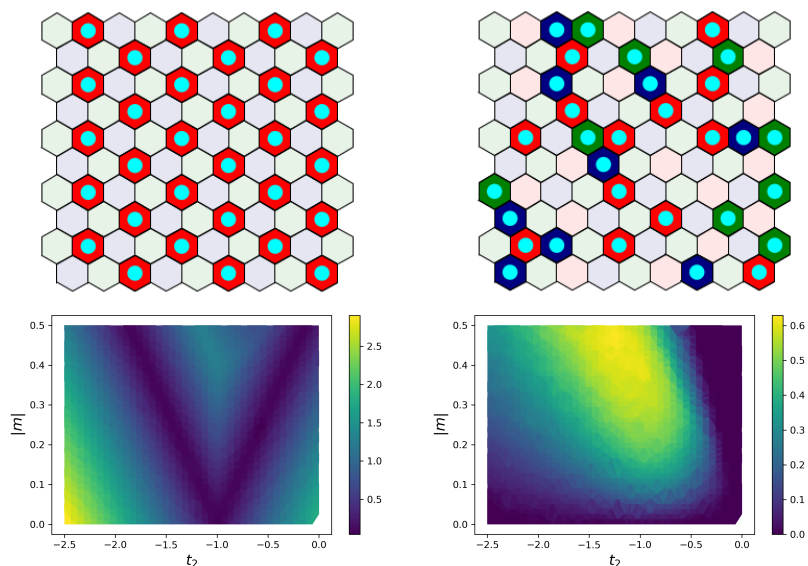
Bevezetés: a témám a topológiai fázisátalakulások vizsgálata 2 dimenziós rendszerekben. A topologikus szigetelők vizsgálata, azok kísérleti előállítására óta ígéretes területté vált. Az alacsony dimenziós rendszerek egy erősen kutatott területe a grafénnel foglalkozik, annak rendkívül jó mechanikai, hővezetési és elektromos tulajdonságai miatt.

A tiszta grafénről azt gondoljuk, hogy topologikus szigetelő, ám a vezetési és vegyérték elektronok közötti energiakülönbség apró volta miatt ez a gyakorlatban nem jelentkezik. A grafént szennyezve az a célunk, hogy a jó tulajdonságait megtartva újabb, a gyakorlatban is használható plusz tulajdonságokkal vétezzük fel. Ennek egy lehetséges módja, ha a grafént szennyezzük nehéz alkáli fémekkel kis, néhány százalékos koncentrációban. A szennyező atomok ekkor a hatszögek (plakettek) közepébe ülnek. A szennyező atomok miatt nincs periodicitás, viszont pozíciójukban lehetséges korreláció közöttük [1]. A feltevésünk az, hogy alacsony hőmérsékleten az adatomok korrelált állapotban vannak, magason pedig korrelálatlanon. A modellben mind a számolásokat, mind a numerikát a szoros kötésű közelítés keretein belül vizsgáljuk. Az adatomokat csak közvetve vesszük figyelembe a következőképpen: azon plakettek, amelyek tartalmaznak adatot:

1. az indukált spin-pálya hatás következményeképpen effektíve egy komplex másodsomszéd hoppingot adnak hozzá.
2. megváltoztatják az első szomszéd hopping amplitúdóját

Míg előbbi topologikus tiltott sávot nyit, addig az utóbbi triviálisat. E két tiltott sáv versengése határozza meg a rendszer topologikus tulajdonságait.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése: az MSc keretein belül elkezdett kutatások folytatásaként ebben a félévben a numerikus számolásokat a NIIF Debrecen2 szuperszámítógép klaszteren végeztem, így nagyobb rendszereket, jobb energiafelbontásban tudtam vizsgálni. A vizsgált rendszer, és a tiltott sáv méretének a hopping amplitúdó függése a 1 ábrán látható. Ha két szomszédos plakett adatot tartalmaz, akkor a két hatszöget határoló szénatomok közötti hopping nagysága nem egyértelmű, ezért módosítottam a



1. ábra. Bal oldalt korrelált, jobb oldalt korrelálatlan rendszer sematikus képe (felső sor), és a tiltott sáv nagysága a hopping amplitudók függvényében (alsó sor), nagy koncentráció esetén.

programom, hogy csak olyan eseteket vizsgáljon, ahol az adatommal töltött plakettek nem közvetlen szomszédok.

Továbbá felmerült az a probléma, hogy az indukált tiltott sáv önkonzisztens figyelembevételéhez ki kellett számolni a betöltött energiaállapotok összegét a korrelált és a korrelálatlan rendszerben egyaránt.

A témavezetőm útmutatásával megvizsgáltam egy, a diplomamunkámban leírtaktól eltérő, annál általánosabb analitikus számolási eljárást, melyel meghatározhatóak a fizikailag releváns mennyiségek a korrelált és korrelálatlan állapotban.

Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben: az alábbi ELTE-s kurzusokon vettem részt:

- Az érzékelés biofizikája EA
- Csapdába zárt atomi rendszerek II.
- Kísérleti módszerek a szilárdtest fizikában I.
- Topologikus szigetelők I.

Konferenciák az aktuális félévben: hallgatóként részt vettem egy a BME által szervezett konferencián október 24-25-én, melynek címe: 4th Graphene and Two-Dimensional Materials Workshop. Ahol hazai és nemzetközi fizikusok adták elő a legújabb kutatási eredményeiket.

Továbbá heti 1 alkalommal kutatócsoporton belüli megbeszélésen vettem részt, melyen megbeszélés szerint valaki előadott. A félév során kétszer adtam elő:

- ELTE-n október 25-én, a kernel polinom módszerről, ami egy hatékony numerikus eljárás tight binding Hamilton mátrixok (ritka mátrixok) spektrumának, és az azzal kapcsolatos operátorok várható értékének kiszámításához.
- BME-n szeptember 19-én, topológikus szigetelőkről és a grafénről. Bővebben: bevezettem a topológiai szigetelő fogalmát a Chern szigetelőn keresztül, majd a realisztikusabb Kane-Mele modellt, amit a grafén leírására használtam.

Oktatási tevékenység az aktuális félévben: a Számítógépes alapismeretek nevű tantárgy egyik társ gyakorlatvezetője voltam heti 2×45 percben.

Elismerések: A „Kvantumbitek előállítása, 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.