

A kutatási eredmények bemutatása

A pályázat keretében kondenzált fázisú, nem kristályos szerkezetű rendszerek atomi szintű számítógépes szimulációjával foglalkoztunk. Három elem alkotta ezeket a rendszereket: szén, szilícium és szelén. A rendezetlen szerkezetű kondenzált fázisok mikroszkopikus leírására alkalmazott számítógépes szimulációkat alapvetően két nagy csoportba oszthatjuk: az első csoportba tartoznak a sztohasztikus alapon működő Monte Carlo típusú szimulációk, míg a másodikba determinisztikus molekuladinamikai módszerek. Mi mindkét módszert alkalmaztuk kutatásaink során. A számítógépes kódokat magunk fejlesztettük ki. Az elért eredményeket tézisszerűen sorolom fel a következőkben.

:

1. Amorf szilícium növekedése: Atomi bombázás alacsony energiás molekula dinamikai szimulációja. Ezen munka fő célja amorf szilícium szerkezetek vizsgálata volt. Az atomonkénti lerakódást kilenc szerkezeten tanulmányoztuk. A tizedik szerkezetet gyors hűtéssel kaptuk. A kapott szerkezetek közötti különbségeket a keletkezett gyűrűk statisztikájával írtuk le. Kaptunk háromszög és négyszög gyűrűket is. (Molecular Simulation, **30** p17, 2004)
2. Az amorf szilícium növesztésére kidolgozott tight-binding molekuladinamikai számítógépes kódunk segítségével kapott modellek alapján, az újabb fordított Monte Carlo szimulációk alapján és a Cambridge Structural Database-ben szereplő adatok alapján egy újfajta hibahely, a kis kötésszögek (háromszögek, négyszögek) létezését sikerült felismerni. Ezek a hibahelyek adják az állapotsűrűségben lévő, legmagasabb energiájú, betöltött, a kis szögeknél lokalizált állapotokat. (Solid State Comm. **127** pp305-309, 2003)
3. Olyan amorf szilícium szerkezetek struktúráit modelleztük reverse Monte Carlo módszerrel, amelyeket radikálisan különböző módszerekkel készítettek. Megmutattuk, hogy nincs lényeges mikroszerkezetű különbség a párologtatással és az ion implantációval kapott szerkezetek között. A várakozásnak megfelelően, az ion implantált szerkezetet rendezettebbnek találtuk, mint a párologtatással készítettet. (J. Phys: Condens Matter **17** pp2617-2624, 2005)
4. Kiindulva a szénatomok topológiai elrendeződéséből megadtunk egy algoritmust Descartes koordináták előállítására. A végső szerkezetet molekula mechanikai módszerrel kaptuk meg. Toroidális, vagy spirális szerkezeteket kaptunk attól függően, hogy az ötszögek és hétszögek hogyan helyezkedtek el a paralelogramma alakú szuper cellában. (Molecular nanostructures, XVII Int. Winterschool, Kirchberg Tyrol, 2003, Ed. H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring, S. Roth, AIP Conference Proceeding **685**, 2003 p423-426, 2003)
5. Hatszöges nanocsövek elektronszerkezetét legegyszerűbben az úgynevezett feltekerési módszerrel kaphatjuk meg a grafit elektronszerkezetéből. Megmutattuk, hogy a topológiai koordináta módszerrel ez megtehető olyan szerkezetekre is, amelyek a hatszögek mellett más sokszögeket, például ötszöget és/vagy hétszögeket tartalmaznak. (Solid State Comm. **127** pp305-309, 2003)
6. Amíg fullerének topológiai koordinátáinak elkészítésére három kétlebenyű sajátfüggvényt szoktunk felhasználni, nanocsövek esetében ezen koordináták előállítására négy kétlebenyű sajátfüggvény szükséges. Megmutattuk, hogy nanocsövek topológiai koordinátáit is

megkaphatjuk három kétlebenyű sajátfüggvényből, ha a cső két végét két-két fél fullerénnel lezárjuk. (Carbon 42, pp983-986, 2004)

7. Összefoglaltuk a topológiaiailag meghatározott elektronállapotok tulajdonságait és kapcsolatát gráfelméleti fogalmakkal. Megmutattuk, hogy a molekulák topológiai tulajdonságaiból az általánosabb szoros kötésű, félempirikus módszerek elektronszerkezeti tulajdonságaira is lehet következtetni. Korábbi munkák ilyen következtetések levonására az egyszerűbb Hückel elméletet szokták alkalmazni. (Internet Electron. J. Mol. Des. 3, 0 0, <http://www.biochempress.com>, 2004)

8. Haeckeli szerkezetekre alkalmaztuk a topológiai koordináta módszert. A Haeckeli szerkezeteket bevezető Terrones et al. (Phys. Rev. Lett. **84**, 1716 (2000)) közlemény Haeckeli szerkezetein leap-frog transzformációt hajtottunk végre és azt tapasztaltuk, hogy az így kapott szerkezetek továbbra is Haeckel-iek maradtak, de félvezető tulajdonságokkal rendelkeztek szemben Terrones et al. állításával, hogy az ilyen szerkezetek mindig vezetők. (Frontiers of Multifunctional Integrated Nanosystems, NATO Science Series, pp11-18, 2004)

9. Kiterjesztettük a topológiai koordináta módszert háromszorosán összefüggő síkbeli gráfok topológiai koordinátáinak meghatározására. A gráfok kétdimenziós ábrázolását egyedül a szomszédsági viszonyok felhasználásával kaptuk meg. A módszert Schlegel diagramok előállításával mutattuk be. (Nanostructures: Novel Architecture, Eds: Mircea V. Diudea pp193-202, 2005)

10. Hengerek áthatásának megszerkesztését felhasználva bemutattunk egy algoritmust, amely segítségével nanocső csatlakozást generálhatunk tetszőleges kiralítású nanocsövek között. (Fullerenes, Nanotubes and Carbon nanostructures **13**, 353-541, 2005)

11. Euler tételét felhasználva megadtunk egy összefüggést nanocső csatlakozásokban található különféle sokszögek számára. Megmutattuk, hogy egy háromvégű csatlakozás létrehozására a legegyszerűbb esetben 6 hétszögre van szükségünk. Kifejlesztettünk egy eljárást nanocső csatlakozások Schlegel diagrammal történő leírására. (Croatica Chemica Acta **78** , pp217-221, 2005)

12. Kiszámoltuk az elektronállapotok lokális állapotosságát négy különböző csatlakozásra ugyanazon két nanocső között. Megállapítottuk, hogy két nanocső esetén különféle geometriai csatlakozások és így ennek megfelelően különféle tulajdonságú elektronállapotok készíthetők. (phys. stat. sol. b **243** pp3468-3471, 2006)

13. Klasszikus empirikus potenciált használó molekuladinamikai számítógépes szimulációval megállapítottuk, hogy a laboratóriumokban gázfázisból szubsztrátumra leválasztott ill. a folyadékfázisból gyorsítottással készített amorf szelén között a lokális sűrűségfluktuációkban lényeges különbség van, azaz a gyorsított minta lényegesen homogénebb. (J. Non-Cryst. Solids, **338** pp283-286 2004).

14. Háromfajta atomközi kölcsönhatást vettünk figyelembe molekula dinamikai szimulációnk során. Az egyik klasszikus három test kölcsönhatású empirikus potenciál volt, a másik kettő pedig szoros kötésű kvantummechanikai potenciál. Az egyes potenciálokkal kapott szerkezetek lényegesen különböztek a következő paraméterek összehasonlítása során: radiális eloszlás függvény, kötés szögek, dihedrális szögek és koordinációs hibák. Összességében a

Hubbard tagot tartalmazó szoros kötésű módszer adta a legjobb eredményt. Ha nem vettük figyelembe ezt a tagot, sok lett a koordinációs hibák száma. A Cambridge Structural Database-ben összegyűjtött kísérleti adatok alapján becslést adtunk az amorf szelénben létrejövő kovalens kötések hosszára és a közöttük lévő kötésszögek alsó és felső határára. (J. Phys: Condens Matter, **17** 6459 2005).

15. Magyarázatot adtunk kalkogén üvegek fotoindukált térfogati változására. Azt tapasztaltuk molekula dinamikai szimulációkban, hogy elektron gerjesztések a kovalens kötések felszakadását adják és a lyukak pedig láncközi kötések hoznak létre ott, ahol az elektronok, illetve a lyukak lokalizálva vannak. A fotoindukált kötés elszakadás és a láncközi kötés létrejötte közötti összjáték eredményezi a térfogati növekedést vagy csökkenést. A fotoindukált térfogati változásra adott magyarázatunk kiváló összhangban van a szelénen kapott felületi magasság legújabb mérési adataival. (Phys. Rev. Lett. **95** 206803, 2005)

16. Modellünk általánosításaként leírását adtuk azon eseteknek is, amikor a fotoindukált térfogatváltozás nem reverzibilis. Ebben az esetben egy tranzienst jelenség és egy metastabil állapot írja le a térfogatváltozás időfejlődését. (J. Non-Cryst. Solids, **352** pp1587-1590, 2006)

17. Sikerült magyarázatot találni olyan esetre is, amikor fotoindukált tágulás helyett összehúzódást mérnek. Erre az esetre párologtatás atomi szintű számítógépes szimulációi azt az eredményt adták, hogy a különböző szögben álló szubsztrátum esetében más és más lesz a mintában létrejövő üregek mérete is száma. A nagyszámú nagyméretű üregek okozzák az összehúzódást. (J. Optoelectronics and Advanced Materials, **9** pp37-42, 2007)

Kutatásaink eredményeit 3 könyvfejezetben (I. László: *Topological coordinates Schlegel diagrams of fullerenes and other planar graphs*, Nanostructures: Novel Architecture, Eds: Mircea V. Diudea pp 193-202, 2005, K. Shimakawa, Y. Ikeda, S. Kugler: *Fundamental optoelectronic processes in amorphous chalcogenides*, Non-Crystalline Materials for Optoelectronics, Ed. G. Lucovsky and M. A. Popescu, INOE Publishing House, pp103-130, 2004 és S. Kugler, J Hegedüs, and K. Kohary: *Light-induced Volume Changes in Chalcogenide Glasses*, Optical Properties of Condensed Matter, Ed. J. Singh, Wiley pp143-158, 2006) és egy „topic” típusú (Koichi Shimakawa and Kugler Sándor: *Photoinduced volume changes in chalcogenide glasses*. (in Japanese), Kotai Butsuri (Solid State Physics) 42 pp313-322, 2007) cikkben is összefoglaltuk.