

VÁLASZ

Tichy Géza Professzor Úr opponensi véleményére

Köszönöm Tichy Géza Professzor Úrnak, hogy az akadémiai doktori értekezésemben leírt tudományos eredményeimet elismerte.

Szeretnék rátérni az opponensi véleményre elhangzott bírálatokra. Az első megjegyzés szerint a módszerleírásban inkább a konkrét sűrűségfüggvények leírására kellett volna helyezni a hangsúlyt. Az értekezésben arra törekedtem, hogy minél általánosabb leírást adjak, így bizonyos esetekben részletesebb módszerleírásnak nem jutott hely. Az általános leírást azért választottam, hogy azoknak is követhető legyen az értekezés, akik nem a szakterület közvetlen specialistái.

Az opponensi véleményben konkrét kérdések és megjegyzések is elhangzanak, amelyekre részletesen válaszolok alább:

Az értekezésben előforduló elírások miatt elnézést kérek. A 35. oldalon szereplő HFR-egyenlet a Hartree-Fock-Roothaan-egyenletre utal. A "descarti koordináták" alatt valóban Descartes-i koordinátákat értek.

További kérdésekre a válasz:

1) A DFT és HF módszert azért „egyesítem”, mert megfelelően megválasztott hibridfüggvények esetén a tökéletes kristályok illetve pont hibák elektronszerkezetét pontosabban lehet számítani. A szupercella-módszeren belül egy másik lehetséges megoldás a soktestelmélet perturbációs közelítésén alapuló GW-módszer alkalmazása az általam alkalmazott DFT-módszeren fellépő ön-kölcsönhatási hiba korrekciójára. Ez a módszer azonban még időigényesebb, mint a hibridfüggvények módszere.

2) A (2.3)-(2.5) képletekben az értekezésben definiáltam a mennyiségeket (idézetek röviden a szövegből):

„ $\mathbf{k}_q$ a Brillouin-zónabeli $\mathbf{k}$ -vektornak a teljes csillaga; $\omega(\mathbf{k}_q)$ a súlyfaktor; a belső összegzés a (2.3) egyenletben az egyenlő hosszúságú rácsvektorokra történik.” A belső összegzés az $\mathbf{R}$ -vektor szerint megy (2.3) képletben, emiatt a fenti leírás megadja az $\mathbf{R}$ -vektor jelentését. Az $n_k(\mathbf{r})$ -t a 20. oldal tetején definiálom (ld. még 4. lábjegyzetet ott). Az egyelektron szinteket a $\phi_i(\mathbf{r})$ bázisfüggvények szerint sorbafejtem (2.6) képlet szerint, ahol valóban a $\phi_i(\mathbf{r})$ -t konkrétan nem definiálom. A 2.6 alfejezetben írom le, hogy a sorfejtésben használt bázisfüggvény lehet pl. lokalizált bázis vagy síkhullámbázis.

3) A 25. oldal előtt az elektrosztatikus cgs egységet használtam. Valóban célszerűbb lett volna az SI egységet használni, amely esetben a Coulomb-tagokban egy $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ szorzót kellett volna beírni.

4) A 28. oldalon a HF-egyenletek megoldására valóban többfajta módszert lehet használni. A „csak önkonzisztens módon” alatt azt értettem, hogy végeredményben a HF-függvényekkel konstruált potenciál és az abból származó megoldások (az új HF-függvények) összhangban kell legyenek egymással. Ez a megállapítás érvényes függetlenül attól, hogy milyen módon találtuk meg rá a megoldást.

5) A (2.69) képletben a Kohn-Sham egyenlet fiktív egyrészecskeivel meghatározott töltéssűrűséget írtam fel, amely a Kohn-Sham közelítésből adódik.

6) A (2.99) képletben a jobb oldalon ∇n helyett ∇r_s értendő. Elnézést az elírásért és köszönöm, hogy felhívta erre az elírásra a figyelmemet.

7) A Harrison-féle pszeudopotenciálok [Transition-Metal Pseudopotentials, Phys. Rev., vol. 181, 1036–1053 (1969)] felírásának alakja hasonló az értekezésben felírt pszeudopotenciálokhoz. A lényeges különbség abban rejlik, hogy a Harrison-féle pszeudopotenciálokat speciálisan fémek számítására fejlesztették ki perturbációs közelítést alkalmazva a lokalizált d-pályák és a fém kristálpályái kölcsönhatásának figyelembe vétele céljából. Emiatt a fenti pszeudopotenciálok kifejezetten speciális fémekre alkalmazhatóak, egy általános rendszerre (pl. molekulára vagy félvezetőre) nem.

8) A szeparábilis pszeudopotenciálok esetén az eredeti integrál (2.123 képlet kifejtése) szétesik két integrálra (2.126 képlet). A 2.123 képletben általánosan egy $\psi_i(\mathbf{r})$ és egy $\psi_j(\mathbf{r}')$ között írjuk fel az integrált, amelyeket ha N darab bázisfüggvénnyel fejezünk ki, akkor N^2 számítást kell végeznünk és N^2 integrálértéket kell tárolni a memóriában. Ezzel szemben a szeparábilis pszeudopotenciálok esetén 2.126 képlet alapján mind a számításigény, mind az adatok tárolása lecsökken pN -re, ahol p az alkalmazott projektorok száma egy adott atomon (ami tipikusan jóval kisebb, mint a bázisfüggvények száma).

9) (2.147)-es képlet valóban így hibás. A (2.147)-es képlet bal oldalán két Gaussi-pálya szorzatának a teljes térre vett integrálja (azaz a Gaussi-pályák átlapolása) értendő, míg a jobb oldalán a helyes integrálérték található. Köszönöm, hogy figyelmeztetett rá, és elnézést a hibáért.

10) A 98. oldalon a „legstabilabb” hiba alatt azt értem, hogy azonos típusú hibákból több metastabil konfiguráció kialakítható. Azok közül a legalacsonyabb képződési energiájú hibát nevezem a legstabilabbnak.

11) Az akceptorszint lehet magasabb energiájú, mint egy donorszint egy félvezetőbeli ponthibára. Ezt röviden negatív-U tulajdonságnak nevezzük. Ez a tulajdonság elsőre valóban meglepő. A jelenség magyarázata az, hogy az akceptorszint elektronnal való betöltésének hatására a ponthiba geometriája lényegesen megváltozhat, amelyet röviden relaxációs energiának nevezek. Ez a relaxációs energia csökkenti a rendszer teljesenergiáját. Amennyiben ez a

relaxációs energia nagyobb, mint az akceptorszinten levő elektronok közötti taszító kölcsönhatás energiája, akkor az összenergia-mérleg negatív, amelyet úgy is felfoghatunk, mintha a rácsrelaxáció miatt a két elektron egymást effektíve „vonzaná” és nem taszítaná.

12) A „születéssel egyidőben” szubjektív időmeghatározás talán nem eléggé tudományos nyelvezet illetve definíció. Itt arra szerettem volna utalni, hogy egy meglehetősen régi problémáról van szó, amelynek megértéséhez számításaim nagyrészt hozzájárultak.

13) A „konjugált gradiens” egy elírás, amely alatt valóban konjugens gradienst értettem.

14) A Bell-Dean féle lokalizációfok tudomásom szerint a rezgési módusokra vonatkozik [R J Bell, P Dean and D C Hibbins-Butler, J. Phys. C, vol. 3, 2111 (1970)]. A 142. oldalon az elektronállapot lokalizációjáról beszélek. Itt is lehetséges kvantitatív analízis, amennyiben az általam megválasztott térfogatban nézem meg, hogy az adott állapotfüggvény hanyad része található ott meg a teljes térrészhez képest. Hasonló kvantitatív analízist az NV-centrum spinsűrűségére végeztem (168. oldal teteje).

15) A 175. oldalon a 14-es és 15-ös izotópszámú nitrogénatom Bohr-magnetonjáról beszélek, amelyeknek értékei rendre 0,4038 és -0,2832 a proton Bohr-magnetonjának egységében kifejezve, tehát azok ellenkező előjelűek. Az (5.3)-as képletben μ_B helyére a ^{15}N Bohr-magnetonját helyettesítem be az analízisben.

16) Az NV-centrummal kapcsolatban hamarosan megjelenik egy speciális New Journal of Physics kiadvány, amelyben három olyan cikk fog megjelenni, amelyben fő társszerző vagyok. Az egyik cikk kézírata megtekinthető az alábbi helyen: <http://arxiv.org/abs/1010.1338>

17) Az NV-centrumot tartalmazó nanogyémántot fluoreszcens biomarkerként lehet használni. A néhány nanométer átmérőjű gyémánt nagysága közel van a biológiai molekulák tipikus méretéhez, ezért a sejtekben levő fehérjék vagy egyéb molekulák vizsgálatában használható. Az NV-centrum zöld gerjesztő fény hatására vörös fénnel emittál szobahőmérsékleten közel 100% belső kvantumhatásfokkal. Emiatt ha a fluoreszcens nanogyémántot a vizsgálandó biomolekulához sikerül kötni, akkor ez ideális biomarkerként működhet. Egy viszonylag friss alkalmazásra mutat példát a következő cikk: N. Mohan et al., In Vivo Imaging and Toxicity Assessments of Fluorescent Nanodiamonds in *Caenorhabditis elegans*, Nano Lett., vol. 10 (9), pp 3692–3699 (2010).

Még egyszer szeretném megköszönni Tichy Géza Professzor Úrnak, hogy az akadémiai doktori értekezésemben leírt tudományos eredményeimet pozitívan értékelte.

Dr. Gali Ádám