

Modelovanie 2D polovodičov metódami exascale computingu

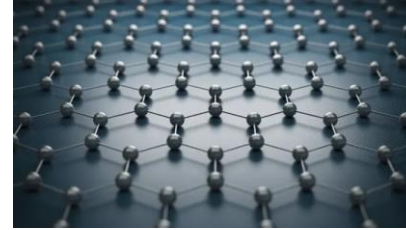
I. Štich

Fyzikálny ústav Slovenskej akadémie vied Bratislava, Slovensko



2D materiály

□ 2D materiály: **hrúbka 1 atómu**
najznámejší: grafén



Nobelova cena za fyziku (2010)
Geim & Novoselov

unikátne vlastnosti:

- vysoká pevnosť
- ultra vysoká **mobilita náboja** (massless Fermion)

ALE:

- semimetal \leftrightarrow nie polovodič
- žiadny magnetizmus
- žiadne spinové vlastnosti...

nové materiály pripravené
s inými vlastnosťami:
napr. **polovodiče** +
vlastnosti grafénu (**mob. nab.**)

2D materiál fosforén

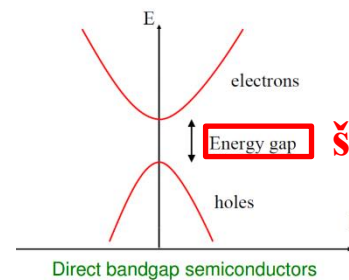
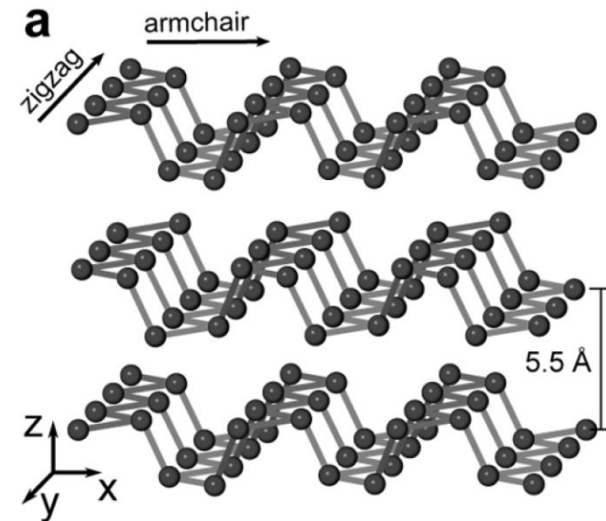
□ napr. 2D materiál **fosforén**

□ iná štruktúra ako grafén

⇒ **puckered honeycomb**

⇒ **silná anizotropia**

⇒ **polovodič**



šírka zakázaného pásu

Castellanos-Gomez, A., J. Phys. Chem. Lett. **6**, 4280 (2015)

2D materiál fosforén

určnie šírky zakázaného pásu:

	Δ_f		Δ_o
method	DFT GGA	DFT H	
gap	0.8*	1.5*	
		1.7	
exciton	-	-	
spread	≈ 1		



bežná metóda

!!!rozptyl pokrýva spektrum od infračerveného po zelené svetlo!!!

2D materiál fosforén

určenie šírky zakázaného pásu:

	Δ_f									Δ_o
method	DFT GGA	DFT H	GW_0 GGA	GW_0 H	GW_0 GGA	GW_0 GGA	G_0W_0 GGA	G_0W_0 GGA	G_0W_0 GGA	
gap	0.8*	1.5* 1.7	1.9♣	2.4♣	2.3♡	2.29•	2.03•	1.8°	1.6◇	
exciton	-	-	-	-	0.9♡	-	-	0.5°	0.1◇	
spread	≈1					≈1				



bežná metóda



lepšia metóda

2D materiál fosforén

určnie šírky zakázaného pásu:

method	Δ_f									Δ_o				
	DFT GGA	DFT H	GW_0 GGA	GW_0 H	GW_0 GGA	GW_0 GGA	G_0W_0 GGA	G_0W_0 GGA	G_0W_0 GGA	exp. STS	exp. PLES	exp. PL	exp. OA	
gap	0.8*	1.5*	1.9♣	2.4♣	2.3♡	2.29♣	2.03♣	1.8°	1.6◇	2.0♣	2.2±0.1⊕	2.1±0.02⊖, 1.6⊗	2.0±0.04⊖, 1.5∞	1.7◇
exciton	-	-	-	-	0.9♡	-	-	0.5°	0.1◇	-	0.9±0.12⊕	-	-	-
spread	⊖	⊖				⊖						⊖		



bežná metóda



lepšia metóda



experiment

⇒ typické aj pre iné 2D materiály

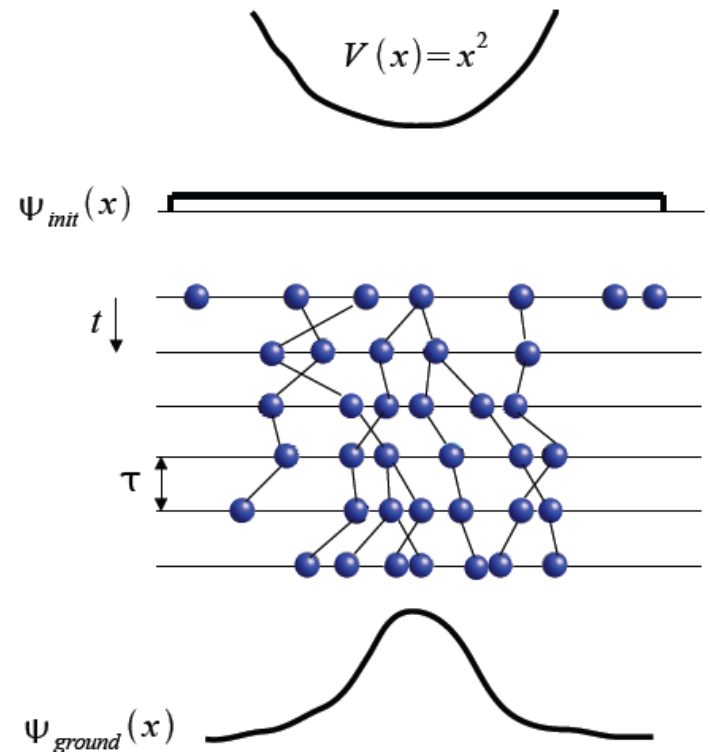
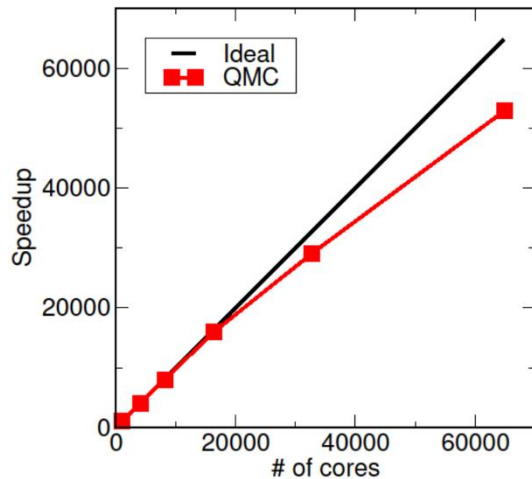
⇒ potrebujeme lepšie výpočtové metódy!!!



Kvantové Monte Carlo (QMC)

Stochastická metóda riešenia Schrödingerovej rovnice

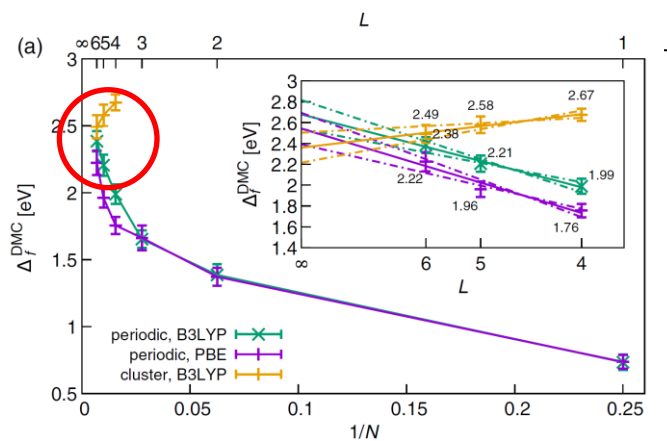
- **ultra presná** **1:10**
- **ultra drahá numericky** **1:1000**
- **(neobmedzená) škálovateľnosť**



QMC vo fosforéne

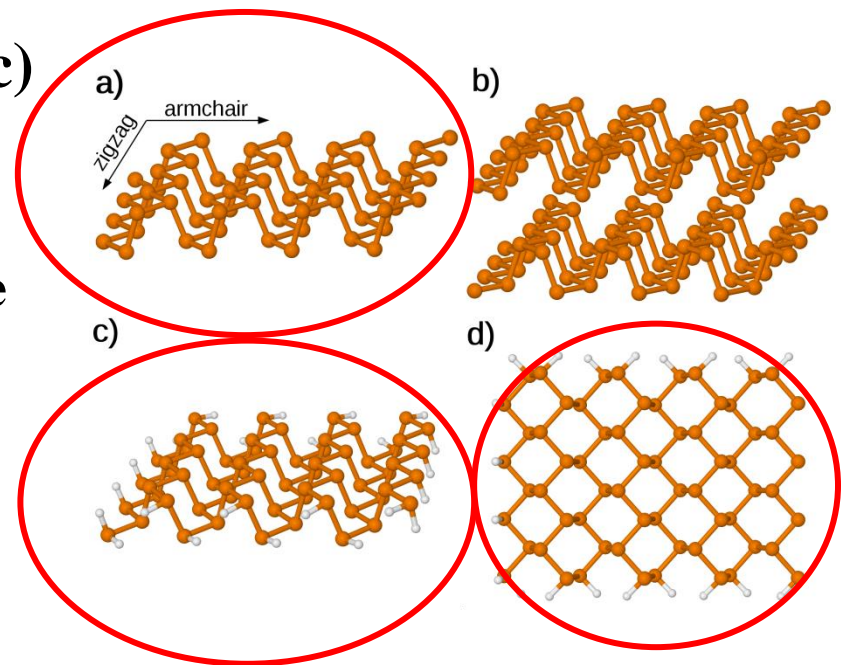
3 kompletne QMC výpočty (včítane tzv. finite-size škálovania):

- periodický setup: $1 \times 1 \dots 6 \times 6$ i.e. 20...720 explicitly corr. electrons
- klastrový setup: 4×4 , 5×5 , 6×6
- spočítanie šírky zakázaného pásu:
cca. **30 mil. core hours** (SuperMuc)



najpresnejšie
spočítaná
hodnota v
2D materiále

⇒ DMC: $\Delta_f \approx 2.4$ eV



Sumár

- ❑ **elektrónové vlastnosti 2D materiálov vieme ultra presne spočítať metódami QMC**
- ❑ **na výpočty je potrebný (pre-)exascale computing**