

ZÁRÓJELENTÉS

Témavezető neve: Gali Ádám

A téma címe: **Ponhibák vizsgálata széles tiltott sávú anyagokban a standard sűrűségfunkcionál elméleteken túli módszerekkel**

A kutatás időtartama: **4 év (2007 július 1 – 2011 július 31.)**

Eredeti kutatási terv röviden

A kutatási tervben a szilíciumkarbidban (SiC) illetve galliumnitridben (GaN) előforduló ponhibák elektronszerkezetét illetve egyéb tulajdonságait vállaltam meghatározni a legmodernebb számítási módszerekkel. A kutatási tervben megemlítettem azt is, hogy ezeket a módszereket várhatóan a nanoszerkezetű félvezetőkre is lehet majd használni. A fő motiváció az volt, hogy ezen félvezetőket próbálják teljesítményelektronikai illetve optoelektronikai eszközökben használni, de a technológiai lépések során a félvezetőkbe akaratlanul kerülő elektromosan aktív ponhibák ezen eszközök működését jelentősen befolyásolhatják, amelyet számításaink segítségével meg tudunk jósolni. A kutatási tervet Hornos Tamás PhD diákkal együtt terveztem megvalósítani. A számításokhoz nagyteljesítményű többprocesszoros illetve többmagos szerverekre (HPC) kértem beruházási pénzt, ahol az igényelt költségvetés évi 8.000.000 Ft volt, amelyből évente egy HPC-t terveztem megvásárolni a beruházási keretből.

Kutatási infrastruktúra, személyi feltételek és utánpótlásképzés a megítélt költségvetés alapján

A megítélt költségvetés évi 7.000.000 Ft lett, így végül összesen csak két HPC-t lehetett belőle vásárolni. Emellett számításokra korlátozottan használható PC-ket sikerült vásárolni, valamint a hálózati biztonság szempontjából fontos öreg tűzfal gépünket lecserélni. A fenti PC-ket sikeresen lehetett használni diákok kutatásba vonására a BME-n. A kutatás időtartama alatt Hornos Tamás sikeresen ledoktorált 2009-ben. A kutatócsoporthoz csatlakozott Vörös Márton, aki TDK-n helyezést ért el és lediplomázott a BME-n 2009-ben, és jelenleg a BME-n PhD diák. Vörös Márton annyi eredményt tud felmutatni másodéves PhD diákként, hogy már most teljesíti a BME Doktori Iskola szigorú követelményeit a PhD fokozat megszerzéséhez. Vörös Márton mellett Szabó Áron vett részt a kutatásokban, aki 2011-ben lediplomázott. Később Simon Tamás és Somogyi Bálint diákok is csatlakoztak. Simon Tamás BSc diplomázott és jelenleg MSc diák a BME-n, és aktívan vesz részt a kutatásokban. Fiatal kora ellenére egy megjelent cikkben társszerző. Somogyi Bálint MSc diplomázó, jelenleg egy benyújtott konferenciacikkben társszerző. Várhatóan mindketten beadnak TDK dolgozatot eredményeikből 2011-ben. A témavezető 2011-ben megkapta az MTA Doktora címet, ahol a kapcsolódó disszertáció több tézispontja a jelen OTKA pályázat kutatási eredményeiből származik.

A kutatási feladatok nagy számításiigényűek, amelyet a két HPC még közelítő módon sem tudott kielégíteni. A nagy számítási igényű futtatásokat emiatt kis részben egy hazai (kissé elavult) szuperszámítógépen (NIIF), illetve nagyobb részben nemzetközi együttműködés keretében a svéd nemzetközi szuperszámítógép-központban (NSC: www.nsc.se) illetve a Harvard Egyetem egyik klaszterén (odyssey) hajtottam végre. Ez további pályázási illetve jelentési kötelezettséggel is járt, amely megterhelte a kutatási időt. A témavezető emellett társ témavezetője volt a 2008-2010 között egy MTA-DFG projektnek (No. 436), amely kapcsolódott a kutatási tervhez, ahol a német részről Prof. Thomas Frauenheim volt a témavezető a Brémai Egyetemről. Prof. Thomas Frauenheim kutatócsoportjának gépeit is felhasználhattuk a kutatás során.

A költségtervtől való eltérés részletesebb indoklása

Röviden összefoglalva a napidíj és járulékaira 238e Ft-tal kevesebb, konferencián való részvételre 204e Ft-tal kevesebb, valamint beruházásra 264e Ft-tal kevesebb összeget számoltunk el a 4 év kutatási időszak alatt az eredeti költségtervhez képest. Ugyanakkor készletbeszerzésre 287e Ft-tal több, egyéb költségre pedig 417e Ft-tal több összeget számoltunk el a 4 év kutatási idő alatt a költségtervhez képest.

A fenti átcsoportosítás nagy része csak könyvelési okokból adódott, és az eredeti kutatási terv igényeihez igazodott. Pl., az egyéb költség rovatban egy 255e Ft-os konferencia regisztrációs díjat azért az egyéb költség rovatban számolták el, mert az adott **nemzetközi** konferenciát éppen Budapesten tartották (21st European Conference on Diamond, Diamond- Like Materials, Carbon Nanotubes, and Nitrides, 5 to 9 September 2010, Budapest). Két további tétel emelte meg valójában az egyéb költség rovatát: a témavezető MTA Doktori díja OTKA-engedély alapján (120e Ft), valamint Binghai Yan kutató egyheti vendégfogadása (64e Ft), akivel egy Nano Letters cikket írtunk meg együtt. Ezeket a tételeket a napidíj és járulékaikain spórolta meg a témavezető, ahol a napidíj adóterhelése olyan kedvezőtlenül változott meg 2009 után, hogy a tervezettnek kb. a fele összegét vettük csak igénybe. A másik példa a könyvelésre: a kis értékű számítógép, kiegészítő memória, monitorok ellenértéke a készletbeszerzés rovatba került a beruházás keret helyett. Itt egy nagyobb összegű beszerzés a lézernyomatónk festékpátronjának kényszerű cseréjét jelentette, amely váratlanul sokba került (155e Ft). Összességében a számítástechnikai beszerzéseink teljes összege (amely gyakorlatilag a beruházás és készletbeszerzés összegét jelenti) nagyjából megegyezik az eredeti költségtervvel.

Új tudományos eredmények

A kutatási terv eredeti kitűzéseit új kutatási irányokkal sikerült bővíteni. Ezt főleg a témavezetőhöz csatlakozó tehetséges fiatal doktoranduszok és hallgatók munkája tette lehetővé, valamint a széleskörű nemzetközi együttműködés a Harvard Egyetem, University of California – Davis és Berkeley, Stuttgart Egyetem, Brémai Egyetem, Linköpingi Egyetem, Osloi Egyetem kutatócsoportjaival. A tématerületek szerinti felosztásban tézispontszerűen az alábbi eredményeket értük el:

a) új számítási módszerek használata a ponthiba-számításokban

A sűrűségfunkcionál-elméleten (DFT) alapuló standard (fél)lokális funkcionálok helyett elsők között ismertük fel a nem-lokális hibridfunkcionálok szerepét a ponthiba-számításokban: különböző konfigurációk relatív energiája is megváltozhat a féllokális funkcionálok „tiltottsáv” hibája miatt [Deak-MSEB]. Elsők között használtuk az *árnyékolt* hibridfunkcionált (HSE06) ponthiba-számításokra, ahol kimutattuk egy gerjesztési energiákat [Gali-PRL,Gali-PRL-2] illetve termikus ionizációs energiákat [Deak-PRB,Gali-MSF-11,Deak-PSS] is pontosan lehet velük számítani. Együttműködésben a partnerekkel elsők között sikerült egy ponthibára a soktest-perturbációs-módszeren alapuló ún. GW+BSE módszert alkalmazni a gerjesztési spektrum számítására [Ma]. A témavezető elsők között alkalmazta az időfüggő DFT elméletet (TD-DFT) ponthibák gerjesztési spektrumának számítására [Gali-PSS]. A fenti témában a témavezető előadása a legutóbbi 2011-es Materials Research Society Spring Meeting-en olyan sikeres volt, hogy a szekció szervezői megkérték, hogy az előadást kibővítve ismétlje meg egy meghívott előadásnak megfelelő időkeretben a rákövetkező napon, ezen kívül felkérést kapott, hogy a tématerületből írjon egy tetszése szerint összefoglaló jellegű vagy új eredményeket tartalmazó cikket 2011 szeptemberéig a Journal of Materials Research folyóiratban.

b) ponthibák azonosítása széles tiltott sávú félvezetőkben

Az eredeti kutatási tervben a SiC-ban és GaN-ben előforduló ponthibákat vizsgáltuk volna együttműködve a svéd Linköpingi Egyetem kísérleti csoportjával. Bár a GaN-ben is születtek eredmények, de azokat csak később fogjuk publikálni. A kísérleti csoportnál az alumíniumnitridbeli (AlN) ponthibák váltak fontosabbá, emiatt inkább ezeket a vizsgálatokat vettük előrébb és publikáltuk le a neves Applied Physics Letters-ben [Son-APL,Szabo-APL]. Sikerült azonosítani a nitrogénvakancia elektron paramágneses rezonancia (EPR) jelét, valamint a számításaink kimutatták, hogy a berilium nem ad sekély akceptor nívót szemben a korábbi elméleti és kísérleti interpretációkkal. A SiC-ban számításaink megjósolták a Si-klaszterek jelenlétét [Hornos-PRB], azonosítottuk a Si Frenkel-hibapárt [Son-PRB,Son-MSF-09], egy negatívan töltött speciális szénhibát [Umeda,Gali-MSF-09] és a szénvakanciákhoz köthető EI4 EPR centrumot [Gali-MSF-11,Carlsson]. Emellett jellemeztük az infravörös fotolumineszcenciát (PL) adó szilíciumvakanciát és divakanciát [Janzen-MSF,Janzen-PhB,Gali-MRS,Gali-MSF-10,Gali-PSS]. A fent említett speciális szénhiba semlegesén ad PL jelet is, ahol a fonon alsávokban a lokális rezgési módusok felharmónikus tagjait is lehetett detektálni, amelyet számításaink segítségével tudtunk értelmezni [Yan-MSF]. A SiC-ot tekintve a témavezető elismert és vezető kutatóvá vált, amelyet egyrészt az jelez, hogy a SiC-ban elért legújabb eredményeit összefoglaló

cikkemben [Bockstedte-PSS,Bockstedte-MSF] illetve könyvfejezetben társszerző [Janzen], valamint az európai és nemzetközi SiC konferenciák program és szervezőbizottságának tagja.

c) félvezető nanocsövek és nanohuzalok vizsgálata

Az a) pontban említett módszereket alkalmaztuk kvázi egydimenziós félvezető nanoszerkezetek vizsgálatában is. Egyfalú SiC nanocsövekre azt találtuk, hogy oxigéngáz jelenlétében könnyen tudja az oxigéneket a felületre abszorbeálni, ezért levegőn a szabadon hagyott SiC nanocső könnyen válhat oxigénnel telítetté és emiatt kérdéses, hogy valóban stabilan elő lehet-e ilyen szerkezetet állítani [Szabo-PRB].

GaAs nanohuzalok különböző polítípusainak PL jelét sikerült számításainkkal értelmezni HSE06 hibridfunkcionált alkalmazva [Heiss].

A Si nanohuzaloknak gyakorlati jelentősége is van a nanoelektronikában. Hibridfunkcionált alkalmazva meghatároztuk a foszfor donorok ionizációs energiáját kis átmérőjű nanohuzalokban, ahol a kvantumbezártság jelentősen lép fel [Rurali]. Emellett egy áttöréshez vezető elrendezést vázoltunk fel, amelynek segítségével a nagyon kisméretű nanohuzalok vezetőképességét meg lehet növelni. Az eredményeknek nagy jelentősége lehet a szobahőmérsékleten is működőképes Si:P alapú kvantumszámítógépek létrehozásában is. Eredményeinket a magas impakt faktorú Nano Letters folyóiratban közzétettük, amelyet a szerkesztő bíráló nélkül azonnal elfogadott [Yan-NL].

d) nitrogén-vakancia centrum vizsgálata a gyémántban: kvantumoptika, magnetometria

A nitrogén-vakancia centrum (NV) az egyik legfontosabb jelölt szilárdtestbeli kvantumbitek megvalósítására. NV-centrumon általában a negatívan töltött NV-hibát értik (NV⁻), de egyre érdekesebbé válik a semleges töltött NV is (NV⁰). Az NV⁻ alapállapota S=1, így paramágneses, és egyben szobahőmérsékleten mérhető optikailag detektálható mágneses rezonancia jelet ad. Mind az NV⁰ mind NV⁻ jellegzetes PL jelet ad. A kvantumbit és magnetométer alkalmazásokban a fenti hiba részletes jellemzése elengedhetetlen. Számításaimmal jelentősen hozzájárultam ehhez, amit az fémjelez, hogy többek között a Harvard Egyetem illetve UC – Berkeley szemináriumain voltam meghívott előadó [*Theory of Nitrogen-Vacancy Center in Diamond* in ITAMP Workshop of "Artificial atoms in diamond: from quantum physics to applications", Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Institute of Atomic, Molecular and Optical Physics, Harvard University, Cambridge (USA), November 11-13, 2010; *Optical excitations of nitrogen-vacancy center in diamond* at UC Berkeley Atomic Physics Seminar, April 20, 2011]. Az NV⁻ és NV⁰ hibákkal kapcsolatos publikált eredményeinket Nature Physics, Nature Nanotechnology illetve számos Physical Review Letters cikkben idézték. A ¹³C hiperfinomtenzorokat ki tudtuk számítani az NV⁻ alap és gerjesztett állapotaiban, és így sikerült az ún. „excited state leve lanti-crossing” jelenséget értelmezni [Gali-PRB-09-2,Schmeltzer]. Kiszámítottuk nagy pontossággal a gerjesztetés menetét Franck-Condon közelítés mellett értelmezve a Stokes-eltolódást [Gali-PRL], és TD-DFT számítással igazoltuk, hogy az NV⁻ gerjesztése valóban leírható kvázi egyelektron-gerjesztésként [Gali-PSS]. Kiszámítottuk a lokális rezgési módusait is és így értelmeztük az abszorpció spektrumában a rezgési csúcsokat [Gali-NJP]. A szerkesztő közlése szerint azon megjelent cikkek 10%-ába tartozott ez a cikkünk, amelyet egy hónapon belül a legtöbben töltöttek le a New Journal of Physics folyóirat honlapjáról. Emellett kiszámítottuk az NV⁻ egyéb finomszerkezeti (elektron spin-spin, spin-pálya kölcsönhatás, stb.) állandóit is csoportelméleti megfontolásokat kombinálva *ab initio* számításainkkal [Maze]. Ezen kívül azonosítottuk az NV⁰ EPR jelét és javaslatot tettünk kvantumbit és magnetométer alkalmazásra [Gali-PRB-9]. Az NV⁰ elektro-lumineszcencia jelét elsőként sikerült kimérni és számításaimmal értelmezni, ahol egy speciális elektron-lyuk gerjesztés állapot miatt az elektro-lumineszcencia jel lefutása lassabb lesz, mint a PL folyamat lefutása. Az eredményt a Nature Photonics folyóiratba nyújtottuk be, amelyet a szerkesztő referálásra küldött a bírálóknak [Mizuochi]. Itt fontos megjegyezni, mint kvantumoptikai tématerülethez kapcsolódó eredmény, hogy elsőként sikerült javasolnom a SiC-beli divakanciát, mint a gyémántbeli NV⁻ hiba alternatíváját kvantumbitek létrehozására [Gali-MSF-10,Gali-PSS]. Több kísérleti csoport dolgozik azon, hogy ezt az ötletet gyakorlatban is megvalósítsa.

e) Újfajta biomarkerek fejlesztése és jellemzésük

A félvezető nanokristályok mérete kompatibilis a biológiai molekulákéval. Ha a nanokristályok fluoreszcensek, abban az esetben biológiai molekulák érzékelésére használhatóak. Itt fontos szempont

lehet *in vivo* alkalmazásokban, hogy a fluoreszcens félvezető nanokristály bioinert legyen. A gyémánt és SiC ilyen anyagok. A fluoreszcencia elméleti vizsgálatához a standard DFT funkcionálok túl módszerekre van szükség, valamint a gerjesztés folyamán az elektron-lyuk dinamikus korrelációjának a figyelembe vételére. Ezt a nehéz feladatot TD-DFT módszerrel próbáltuk megoldani, ahol a TD-DFT magjában hibridfunkcionált alkalmaztunk. Kis gyémántdarabkák vizsgálatában azt kaptuk, hogy a PBE0 hibridfunkcionált alkalmazva nagy pontossággal megkapjuk a kísérleti spektrumot. Számításainkkal világossá tettük, hogy viszonylag nagy atomszámú gyémántdarabkák esetén is az alacsony energiájú gerjesztések ún. Rydberg-gerjesztések, ahol az alacsony energiájú betöltetlen állapotok atomszerű állapotok. Ezeket az eredményeket egy Physical Review B Rapid Communication cikkben közzétettük [Voros-PRB]. A témavezető fő ötlete az volt, hogy SiC alapú nanokristályok jól működhetnek *in vivo* biomarkerként. A SiC nanokristályok optikai spektrumát megvizsgáltuk a kvantumbezártság és a felületi borítás függvényeként. Utóbbi esetben a hidrogénnel telített, relaxált illetve rekonstruált felületeket vizsgáltuk meg, illetve tanulmányoztuk az oxigén hatását is. A fő motiváció az volt, hogy a gyakorlatban előforduló felületi szerkezetek hatását vizsgáljuk a SiC nanokristályokban. A gerjesztési spektrum számításában a gyémántdarabkákra már jól bevált TD-DFT módszert alkalmaztunk hibridfunkcionállal. Összességében azt kaptuk, hogy a kvantumbezártság valóban erősen fellép az 5nm átmérőnél kisebb SiC nanokristályokra, ahol a legkisebb nanokristályok PL jele már az ultrabolya tartományba kéne essen. Ugyanakkor karbonil-csoportok jelenléte (C=O kettős kötések) a PL spektrumot eltolhatja egészen a vörös irányába, amely hatás „felülírhatja” a kvantumbezártságból származó magas energiájú fluoreszcenciát. Lokális rezgési módusok segítségével kapcsolatot teremtettünk a felület szerkezete és a SiC nanokristály optikai sugárzása között. Ezen a módon tudunk ellentmondónak tűnő kísérleti eredményeket értelmezni [Voros-APL, Voros-JPC, Voros-MSF]. A SiC nanokristályokat megvizsgáltuk szilíciumoxidba ágyazva is, amelyet korábban a BME Atomfizika Tanszékén kísérletileg is előállítottak. Itt azokat fontos határfelületi hibákat sikerült feltérképezni, amelyek a SiC nanokristály esetleges PL spektrumát befolyásolhatják [Knaup].

f) harmadik generációs napelemek fejlesztése: félvezető nanokristályok magasenergiájú gerjesztései

Beágyazott félvezető nanokristályok napelem alkalmazásokban is fontos szerepet kaphatnak. Nemrégien elméleti munkák azt jósolták, hogy félvezető nanokristályokban a többszörös exciton állapotok létrehozásának a valószínűsége sokkal nagyobb, mint tömbi félvezetőkben. Ez esetleg esélyt nyújtana arra, hogy egy magasenergiájú fotonnak a tiltott sávnál nagyobb „fölös” energiája ne hőként vesszen el, hanem több töltéshordozót hozzon létre a lebomlás során. Ezt a folyamatot röviden multi-exciton generációnak (MEG) hívják. A MEG effektust utána kísérletekben is detektálták, de annak mértékéről és a környezet hatásáról ellentmondó eredmények születtek. Emiatt felértékelődött a nagy pontosságú számítások szerepe, ami segíthet kideríteni a fenti ellentmondó kísérleti eredmények vagy azok hibás interpretációjának okát. Elsőként azt vizsgáltuk meg TD-DFT számításokkal, hogy a Si nanokristályok gerjesztési spektruma hogyan változik a MEG gyakorlati alkalmazásának szempontjából releváns tartományán a környezet, a felületi szerkezet, illetve a nanokristályok egymáshoz képesti távolsága függvényében. Azt találtuk, hogy a felületi rekonstrukció a MEG-effektus valószínűségét megnöveli, valamint ha szén ligandumok kerülnek a felületre, akkor azok is lényegesen növelhetik ezt a hatást a hidrogénnel telített Si nanokristályokéhoz képest. Emellett azt találtuk, hogy az egymáshoz közel eső Si nanokristályok esetén megnő a MEG valószínűsége. Eredményeinket a Nano Letters folyóiratban közzétettük [Gali-NL], amelyről a Materials Research Society kiadványában egy recenziót közöltek felhívva más kutatók figyelmét az eredményeinkre. Emellett azt is megvizsgáltuk, hogy a nanokristályok szimmetriáját lecsökkentve hogyan lehetne esetleg növelni az MEG valószínűségét. Azt találtuk, hogy az axiális szimmetriájú nanorészecskék - *függetlenül* a konkrét anyagtól - nagyobb valószínűséggel mutatnak MEG effektust, mint a gömb alakú nanorészecskék, illetve az axiális szimmetriájú részecskék polarizációs tulajdonságait is részletesen analizáltuk és receptet adtunk arra, mely elrendezés adná a legnagyobb hatásfokú napelemet [Gali-PRB-11].

Budapest, 2011. augusztus 30.

Gali Ádám
témavezető

Publikációs lista

Az OTKA-támogatással megjelent cikkek fontossági (első öt publikáció) illetve megjelenési idő szerinti sorrendben, ahol az utolsó szám a pontosvessző után a folyóirat impakt faktorát jelöli:

- [Mizuochi] N. Mizuochi, T. Makino, H. Kato, D. Takeuchi, M. Ogura, H. Okushi, M. Nothaft, P. Neumann, A. Gali, F. Jelezko, J. Wrachtrup, and S. Yamasaki: **Electrically driven single photon source at room temperature in diamond**, Nature Photonics, under referee review, 2011; 26.442
- [Yan-NL] Yan BH, Frauenheim T, Gali A: **Gate-Controlled Donor Activation in Silicon Nanowires**, NANO LETTERS 10:(9) pp. 3791-3795, 2010; 12.186
- [Gali-NL] Gali Adam, Vörös Márton, Rocca Dario, Zimanyi Gergely T, Galli Giulia: **High-Energy Excitations in Silicon Nanoparticles**, NANO LETTERS 9:(11) pp. 3780-3785, 2009; 9.991
- [Gali-PRL] Gali A, Janzen E, Deak P, Kresse G, Kaxiras E: **Theory of Spin-Conserving Excitation of the N-V- Center in Diamond**, PHYSICAL REVIEW LETTERS 103:(18) p. 186404., 2009; 7.328
- [Janzen] E. Janzén, A. Gali, A. Henry, I. G. Ivanov, B. Magnusson, and N. T. Son: **Defects in SiC**, Defects in Microelectronic Materials and Devices, 2009
- [Son-APL] Son NT, Gali A, Szabo A, Bickermann M, Ohshima T, Isoya J, Janzen E: **Defects at nitrogen site in electron-irradiated AlN**, APPLIED PHYSICS LETTERS 98:(24) Paper 242116, 2011; 3.820
- [Carlsson] Carlsson P, Son NT, Gali A, Isoya J, Morishita N, Ohshima T, Magnusson B, Janzen E: **EPR and ab initio calculation study on the E14 center in 4H- and 6H-SiC**, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 82:(23) Paper 235203, 2010; 3.772
- [Ma] Ma Yuchen, Rohlfing Michael, Gali Adam: **Excited states of the negatively charged nitrogen-vacancy color center in diamond**, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 81:(4) p. 041204(R), 2010; 3.772
- [Voros-APL] Voros M, Deak P, Frauenheim T, Gali A: **The absorption spectrum of hydrogenated silicon carbide nanocrystals from ab initio calculations**, APPLIED PHYSICS LETTERS 96:(5) p. 051909, 2010; 3.820
- [Szabo-APL] Áron Szabó, Nguyen Tien Son, Erik Janzén, and Adam Gali: **Group-II acceptors in wurtzite AlN: A screened hybrid density functional study**, APPLIED PHYSICS LETTERS 96 p. 192110, 2010; 3.820
- [Deak-PRB] Peter Deák, Bálint Aradi, Thomas Frauenheim, Erik Janzén, and Adam Gali: **Accurate defect levels obtained from the HSE06 range-separated hybrid functional**, Physical Review B, 81 p. 153203, 2010; 3.772
- [Gali-MSF-10] Gali A, Gallstrom A, Son NT, Janzen E: **Theory of neutral divacancy in SiC: a defect for spintronics**, MATERIALS SCIENCE FORUM 645-648: pp. 395-397, 2010
- [Yan-MSF] Yan F, Devaty RP, Choyke WJ, Kimoto T, Ohshima T, Pensl G, Gali A: **New lines and issues associated with deep defect spectra in electron, proton and 4He ion irradiated 4H SiC**, MATERIALS SCIENCE FORUM 645-648: pp. 411-414, 2010
- [Knaup] Knaup JM, Voros M, Deak P, Gali A, Frauenheim T, Kaxiras E: **Annealing simulations to determine the matrix interface structure of SiC quantum dots embedded in SiO(2)**, PHYSICA STATUS SOLIDI C: CURRENT TOPICS IN SOLID STATE PHYSICS, VOL 7, NO 2., pp. 407-410., 2010
- [Voros-JCP] Voros M, Deak P, Frauenheim T, Gali A: **The absorption of oxygenated silicon carbide nanoparticles**, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 133:(6) Paper 064705, 2010; 2.920
- [Gali-NJP] A Gali, T Simon, J E Lowther: **An ab initio study of local vibration modes of the nitrogen-vacancy center in diamond**, NEW JOURNAL OF PHYSICS 13:(2) Paper 025016, 2011; 3.849
- [Schmeltzer] Benjamin Schmeltzer, Lilian Childress, Adam Gali: **¹³C hyperfine interactions in the nitrogen-vacancy centre in diamond**, NEW JOURNAL OF PHYSICS 13:(2) Paper 025021, 2011; 3.849
- [Deak-PSS] Deak P, Gali A, Aradi B, Frauenheim T: **Accurate gap levels and their role in the reliability of other calculated defect properties**, PHYSICA STATUS SOLIDI B-BASIC SOLID STATE PHYSICS 248:(4) pp. 790-798, 2011; 1.344
- [Gali-MSF-11] Gali A: **Defects in SiC: theory**, MATERIALS SCIENCE FORUM 679-680: pp. 225-232, 2011

- [Voros-MSF] Vörös M, Deák P, Frauenheim T, Gali A: *Influence of Oxygen on the Absorption of Silicon Carbide Nanoparticles*, MATERIALS SCIENCE FORUM 679-680: pp. 520-523, 2011
- [Hornos-MSF] Hornos T, Gali A, Svensson BG: *Large-Scale Electronic Structure Calculations of Vacancies in 4H-SiC Using the Heyd-Scuseria-Ernzerhof Screened hybrid Density Functional*, MATERIALS SCIENCE FORUM 679-680: p. 261-264, 2011
- [Gali-PSS] Gali A: *Time-dependent density functional study on the excitation spectrum of point defects in semiconductors*, PHYSICA STATUS SOLIDI B-BASIC SOLID STATE PHYSICS 248:(6) pp. 1337-1346, 2011; 1.344
- [Gali-PRB-11] Gali Adam, Kaxiras Efthimios, Zimanyi Gergely T, Meng Sheng: *Effect of symmetry breaking on the optical absorption of semiconductor nanoparticles*, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 84:(3) p. 035325, 2011; 3.772
- [Heiss] Heiss Martin, Conesa-Boj Sonia, Ren Jun, Tseng Hsiang-Han, Gali Adam, Rudolph Andreas, Uccelli Emanuele, Peir oacute Francesca, Morante Joan Ramon, Schuh Dieter, Reiger Elisabeth, Kaxiras Efthimios, Arbiol Jordi, Fontcuberta i Morral Anna: *Direct correlation of crystal structure and optical properties in wurtzite/zinc-blende GaAs nanowire heterostructures*, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 83:(4) Paper 045303, 2011; 3.772
- [Maze] Maze JR, Gali A, Togan E, Chu Y, Trifonov A, Kaxiras E, Lukin MD: *Properties of nitrogen-vacancy centers in diamond: the group theoretic approach*, NEW JOURNAL OF PHYSICS 13: Paper 025025, 2011; 3.849
- [Bockstedte-MSF] M. Bockstedte, A. Marini, A. Gali, Oleg Pankratov, and A. Rubio: *Defects Identified in SiC and Their Implications*, Mater. Sci. Forum vol. 600-603, 285-290, 2009
- [Janzen-PhB] Janzén Erik, Gali Adam, Carlsson Patrick, Gällström Andreas, Magnusson Björn, Son N T: *The silicon vacancy in SiC*, Physica B, 404, 4354-4358, 2009; 1.056
- [Rurali] Riccardo Rurali, Bálint Aradi, Thomas Frauenheim, and Ádám Gali: *Donor levels in Si nanowires determined by hybrid-functional calculations*, Phys. Rev. B, vol. 79, 115303, 2009; 3.475
- [Umeda] T. Umeda, J. Isoya, N. Morishita, T. Ohshima, E. Janzén, and A. Gali: *Dicarbon antisite defect in n-type 4H-SiC*, Phys. Rev. B, vol. 79, 115211, 2009; 3.475
- [Gali-PRB-09] Adam Gali: *Theory of the neutral nitrogen-vacancy center in diamond and its application to the realization of a qubit*, Phys. Rev. B, vol. 79, 235210, 2009; 3.475
- [Gali-PRL-2] Adam Gali and Efthimios Kaxiras: *Comment on "Ab Initio Electronic and Optical Properties of the (N-V)- Center in Diamond"*, Phys. Rev. Lett., vol. 102, 149703, 2009; 7.328
- [Janzen-MSF] E. Janzén, A. Gali, P. Carlsson, A. Gällström, B. Magnusson, N. T. Son: *The Silicon Vacancy in SiC*, Mater. Sci. Forum, vol. 615-617, 347-352, 2009
- [Gali-MSF-09] A. Gali, T. Umeda, E. Janzén, N. Morishita, T. Ohshima, J. Isoya: *Identification of the Negative Di-Carbon Antisite Defect in n-Type 4H-SiC*, Mater. Sci. Forum, vol. 615-617, 361-364, 2009
- [Son-MSF-09] N. T. Son, J. Isoya, N. Morishita, T. Ohshima, H. Itoh, A. Gali, Erik Janzén: *Defects Introduced by Electron-Irradiation at Low Temperatures in SiC*, Mater. Sci. Forum, vol. 615-617, 377-380, 2009
- [Gali-PRB-09-2] Gali A: *Identification of individual [sup 13]C isotopes of nitrogen-vacancy center in diamond by combining the polarization studies of nuclear spins and first-principles calculations*, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 80:(24) p. 241204(R), 2009; 3.475
- [Son-PRB] Son NT, Janzen E, Isoya J, Morishita N, Hanaya H, Takizawa H, Ohshima T, Gali A: *Identification of a Frenkel-pair defect in electron-irradiated 3C SiC*, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 80:(12) p. 125201, 2009; 3.475
- [Szabo-PRB] Szabo A, Gali A: *Effect of oxygen on single-wall silicon carbide nanotubes studied by first-principles calculations*, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 80:(7) p. 075425, 2009; 3.475
- [Voros-PRB] Voros M, Gali A: *Optical absorption of diamond nanocrystals from ab initio density-functional calculations*, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 80:(16) p. 161411(R), 2009; 3.475
- [Gali-MRS] Ádám Gali, Michel Bockstedte, Ngyen Tien Son, Erik Janzén: *Point Defects in SiC: Point Defects in SiC*, Silicon Carbide 2008 - Materials, Processing and Devices, (Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Volume 1069, Warrendale, PA, 2008), 1069-D03-01, 2008
- [Deak-MSEB] Peter Deák, Bálint Aradi, Thomas Frauenheim, and Adam Gali: *Challenges for ab initio*

defect modeling, Materials Science and Engineering B, vol. 154-155, 187-192, 2008; 1.577
[Bockstedte-PSS] Michel Bockstedte, Adam Gali, Alexander Mattausch, Oleg Pankratov, and John W. Steeds: *Identification of intrinsic defects in SiC: Towards an understanding of defect aggregates by combining theoretical and experimental approaches*, Physica Status Solidi (b) vol. 245, 1281, 2008; 1.166
[Hornos-PRB] Hornos T, Son NT, Janzen E, Gali A: *Theoretical study of small silicon clusters in 4H-SiC*, PHYSICAL REVIEW B CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS 76:(16) p. 165209., 2007; 3.172