



Politechnika Wrocławska

Własności magnetyczne grafenowych kropek kwantowych

Paweł Potasz

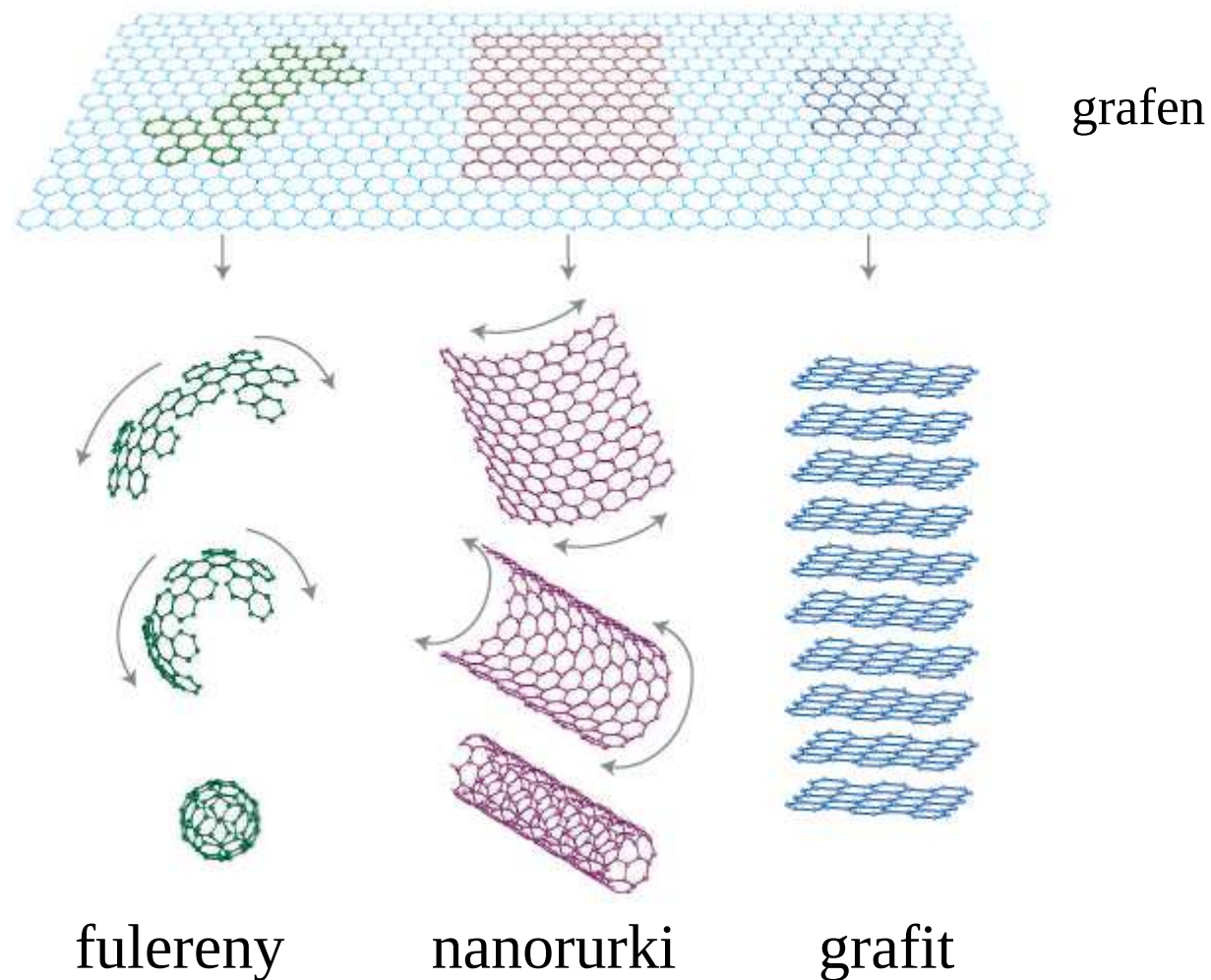
Grant nr 203

Instytut Fizyki, Politechniki Wrocławskiej
11 Lutego 2014





Odmiany alotropowe węgla





Własności

elektronowe:

- mała liczba defektów
- wysoka ruchliwość nośników
($\sim 200000 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, dla krzemu $1400 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)
- mała wartość stałej sprzężenia spin-orbita

} wysoka jakość
cząstki
relatywistyczne
węgiel

termiczne:

- wysoka przewodność cieplna
($\sim 5000 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, dla miedzi $\sim 401 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$)

wysoka jakość

mechaniczne:

- wysoka elastyczność i wytrzymałość
($\sim 42 \text{ N/m}$, dla stali $\sim 0.40 \text{ N/m}$)

silne wiązanie
 sp^2



Zastosowania

- przezroczyste elektrody
- wyświetlacze dotykowe
- czujniki gazu
- mikrochipy elektroniczne
- przewodzące sztuczne tworzywa
- baterie elektryczne
- qubity oparte na grafenie
- magazyny cząsteczek wodoru

Wassei, Kaner, Materials Today (2010)

Geim, Nature Nanotechnology (2010)

Schedin, et. al. Nature Materials (2007)

Wilson, Physics Today, January (2006)

Geim, Novoselov, Nat. Mater. (2007)

Stankovich et al., Nature (2006)

Trauzettel, et. al. Nature Phys. (2007)

Sofo, et. al. Phys. Rev. B (2007)

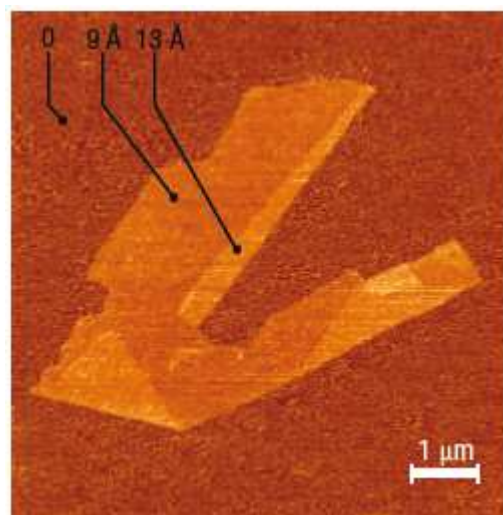


Politechnika Wroclawska

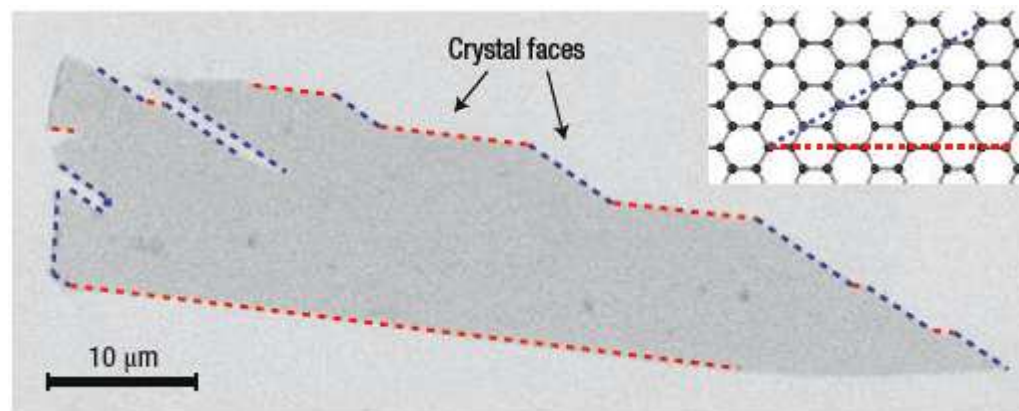
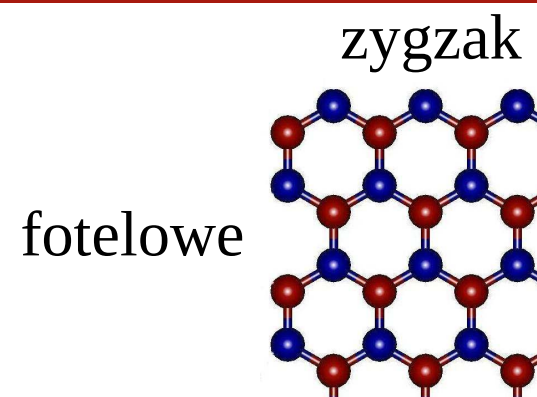
Nanostruktury grafenowe



Krawędzie w grafenie



AFM



SEM

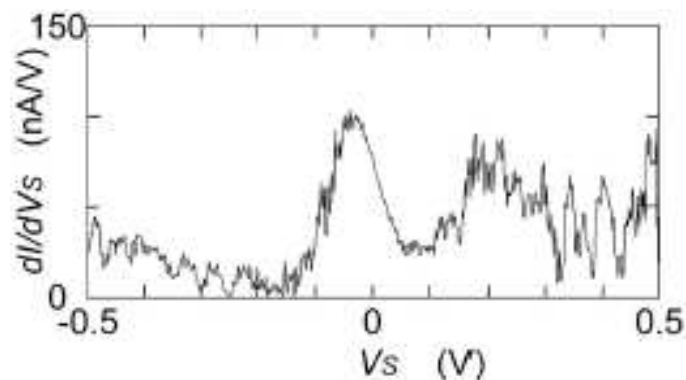
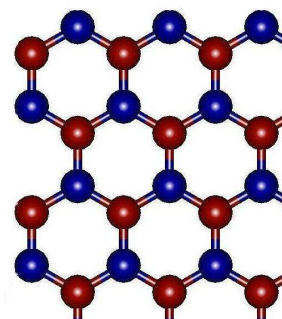
Novoselov,..., Geim, Proc. Natl Acad. Sci. (2005)



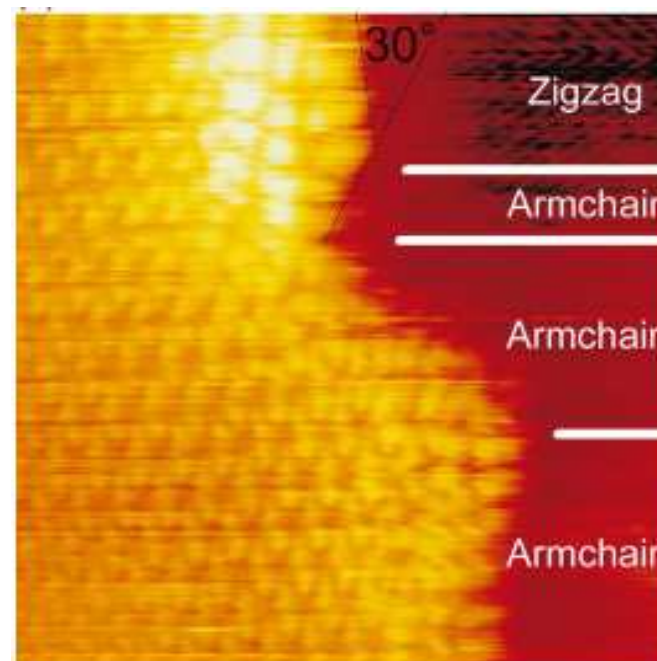
Krawędzie w grafenie

fotelowe

zygzak



Prąd przepływający
przez krawędź zygzak



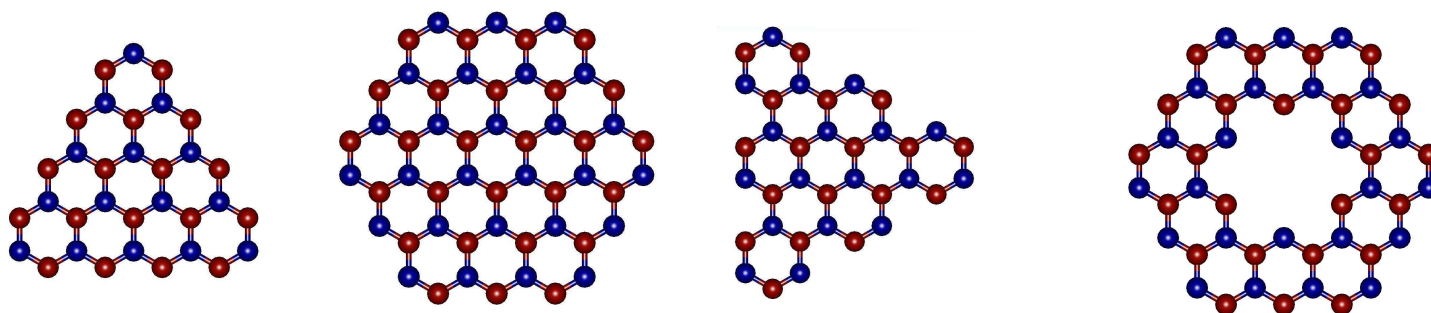
Yousuke Kobayashi

PHYSICAL REVIEW B 71, 193406 (2005)

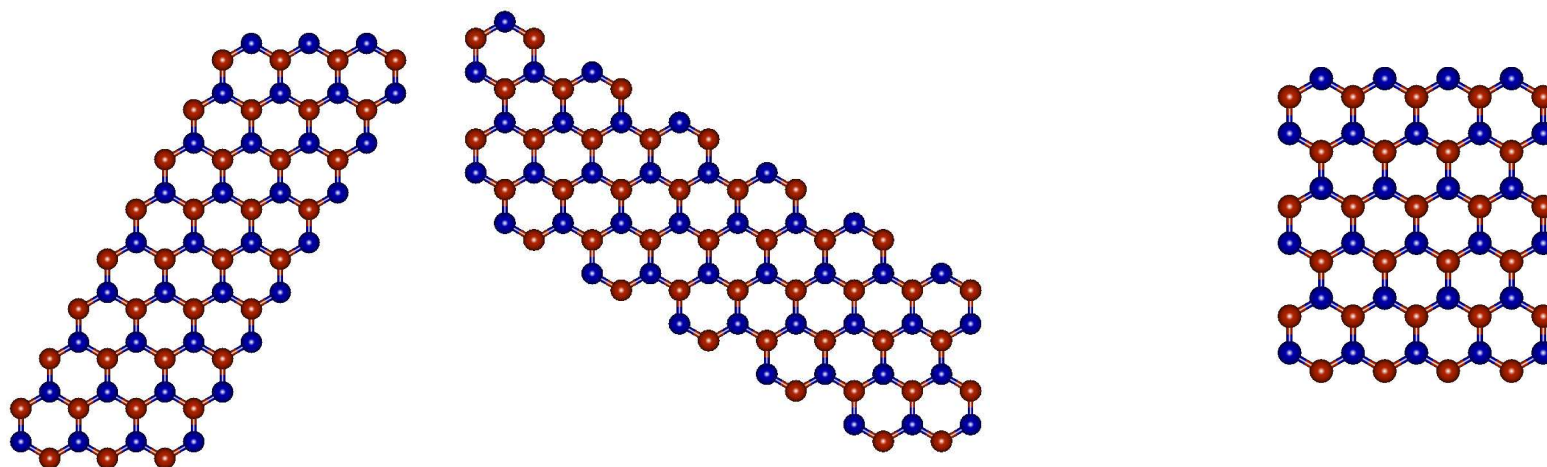


Nanostruktury grafenowe

Kropki kwantowe

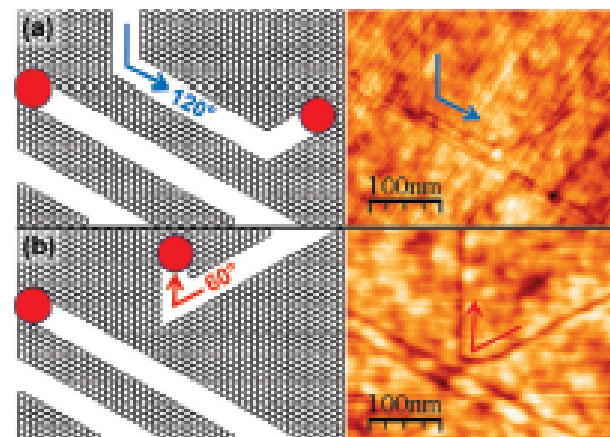
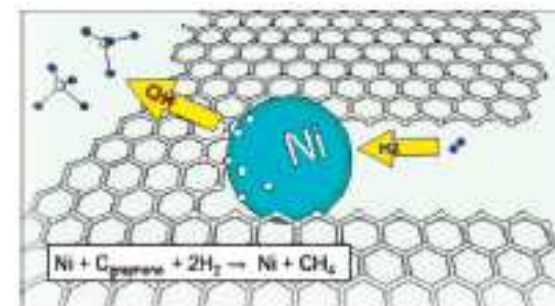
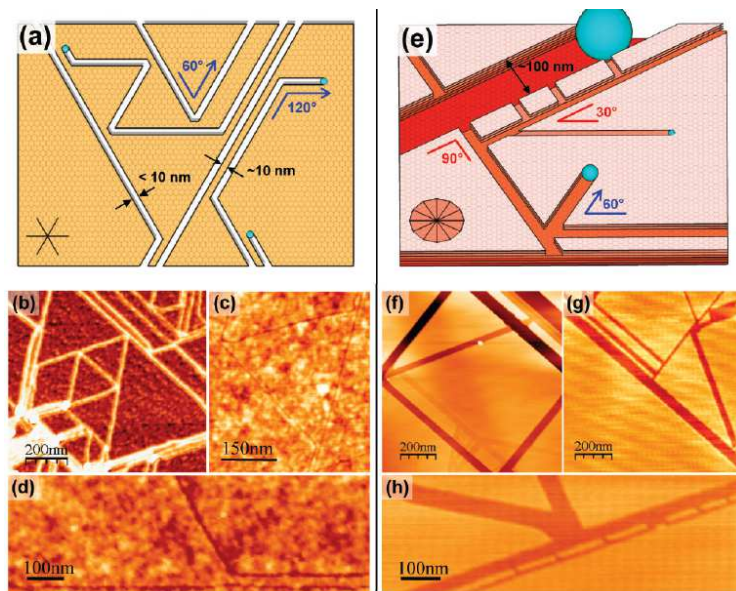


Wstążki grafenowe





Metody wytwarzania nanostruktur grafenowych



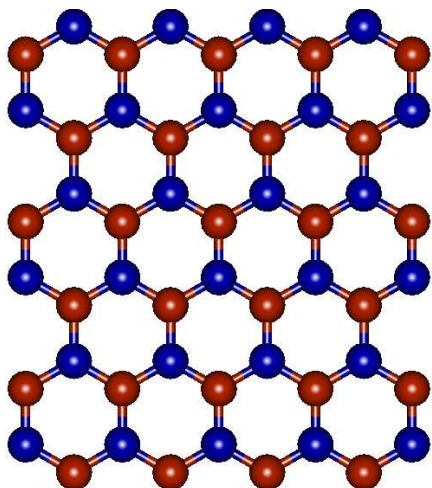
Nano Lett. 2009

Pablo Jarillo-Herrero
group (MIT)

Top - down

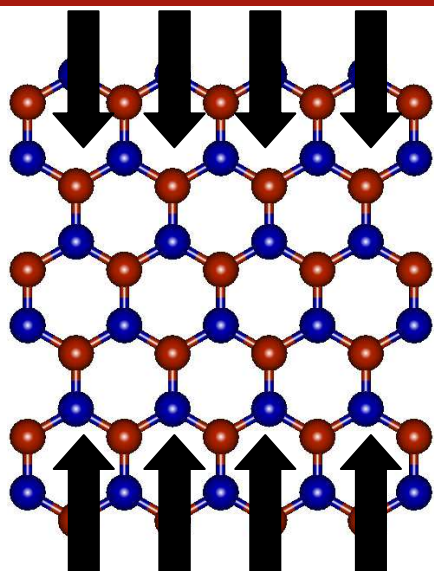


Dlaczego grafenowe kropki kwantowe?





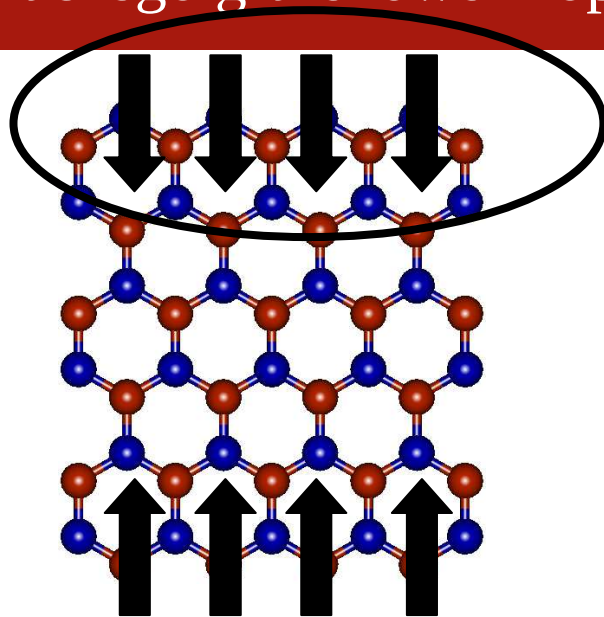
Dlaczego grafenowe kropki kwantowe?



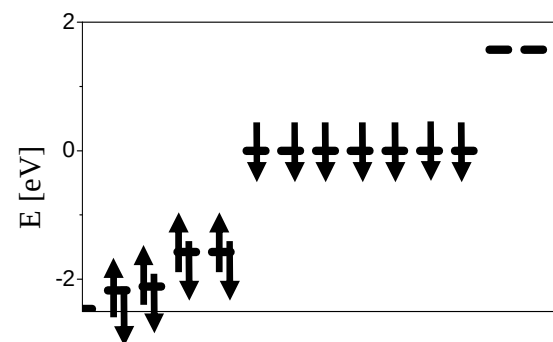
Antyferromagnetyzm



Dlaczego grafenowe kropki kwantowe?



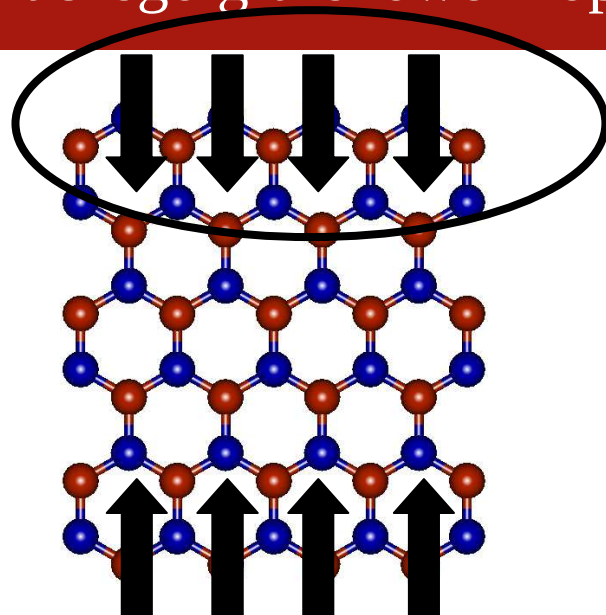
Antyferromagnetyzm



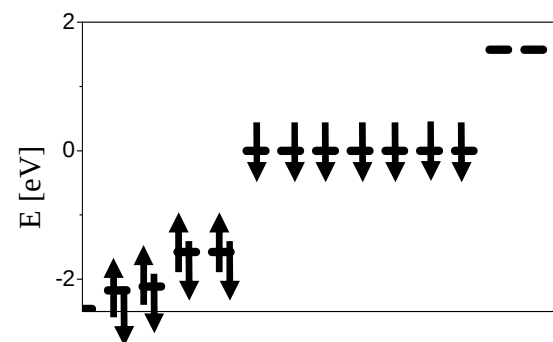
Moment Magnetyczny



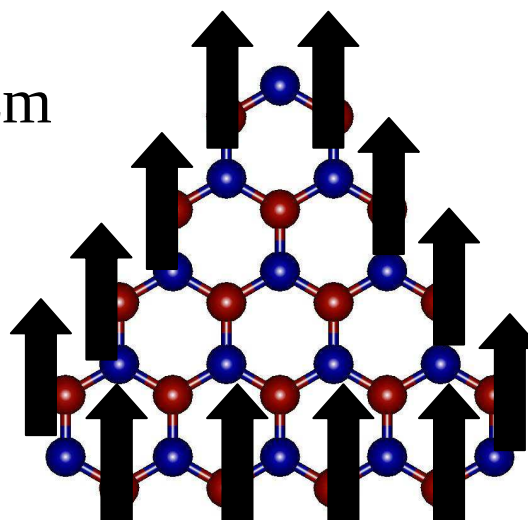
Dlaczego grafenowe kropki kwantowe?



Antyferromagnetyzm



Moment Magnetyczny



Ferromagnetyzm



Analiza własności magnetycznych nanostruktur grafenowych

Wpływ nieporządku na zwyrodniałe pasmo energetyczne

Model ciasnego wiązania

$$H_{TB} = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j - t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} c_i^\dagger c_j + \left(\sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i \right)$$
$$t = 2.84 \text{ eV}, \quad t_2 = 0.1 \text{ eV}$$

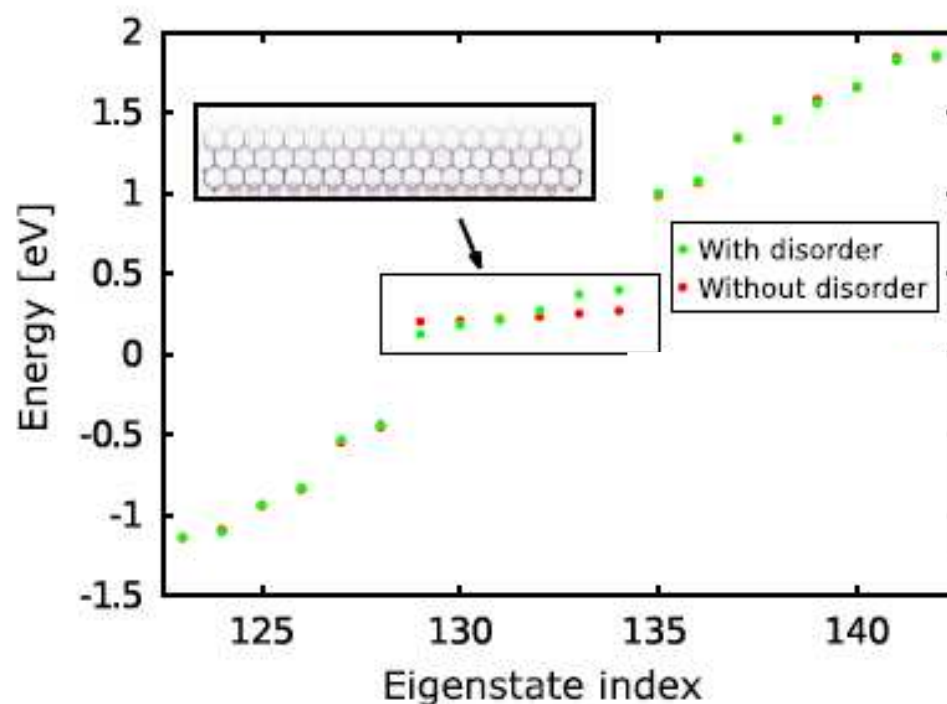
Model nieporządku Andersona

$$\epsilon_i \in [-W/2, W/2]$$



Analiza własności magnetycznych nanostruktur grafenowych

Wpływ nieporządku na zwyrodniałe pasmo energetyczne



Model ciasnego wiązania

$$H_{TB} = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j - t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} c_i^\dagger c_j + \left(\sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i \right)$$

$t = 2.84 \text{ eV}, \quad t_2 = 0.1 \text{ eV}$

Model nieporządku Andersona

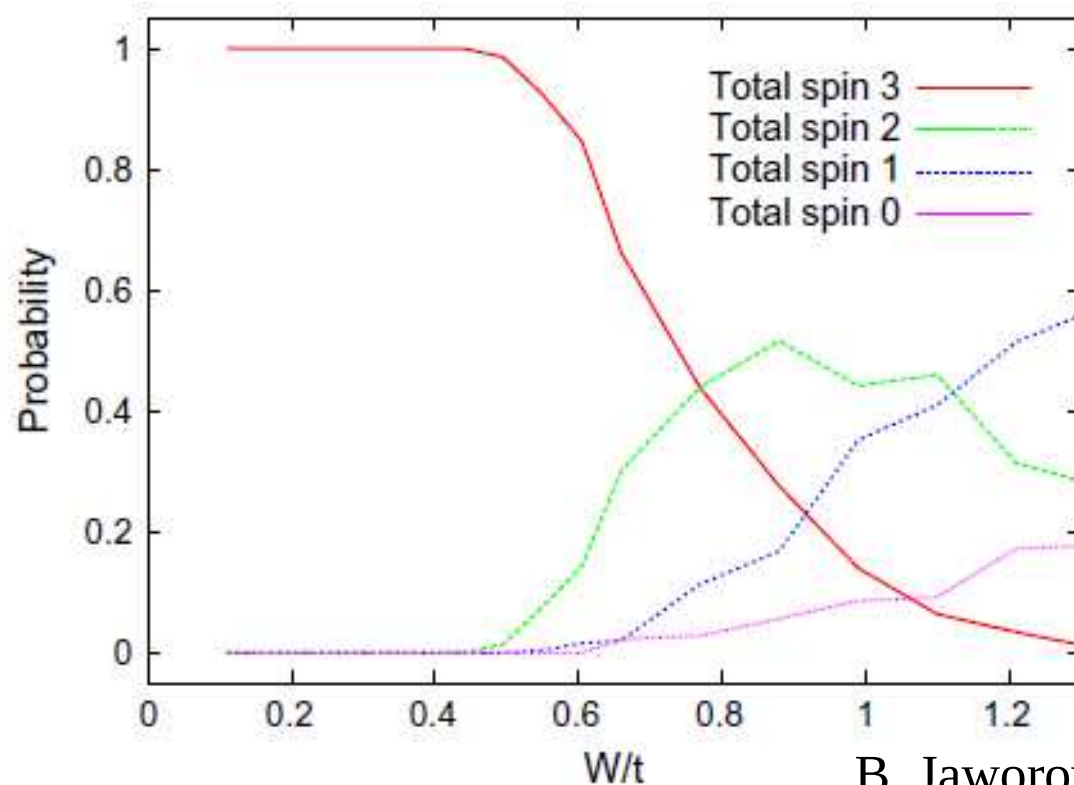
$$\epsilon_i \in [-W/2, W/2]$$

B. Jaworowski, P. Potasz, A. Wójs,
Superlattices and Microstructures (2013).



Analiza własności magnetycznych nanostruktur grafenowych

Wpływ nieporządku na moment magnetyczny



Model Hubbarda

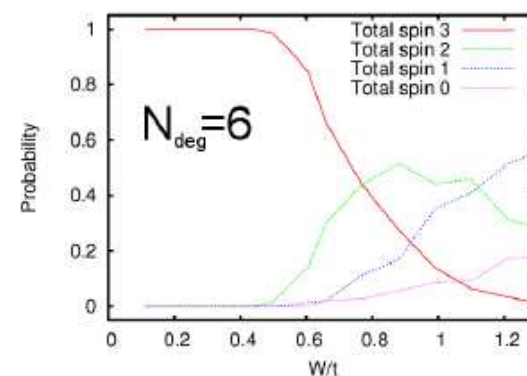
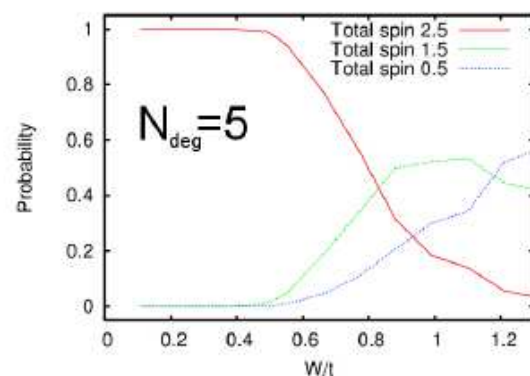
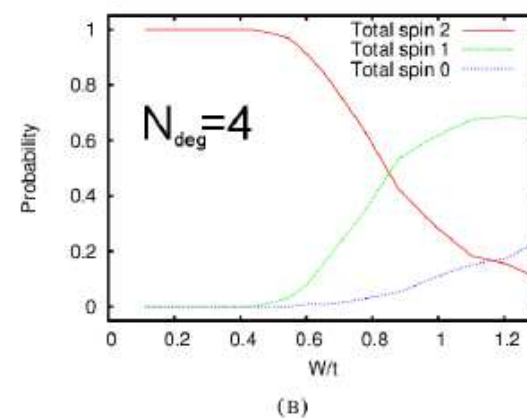
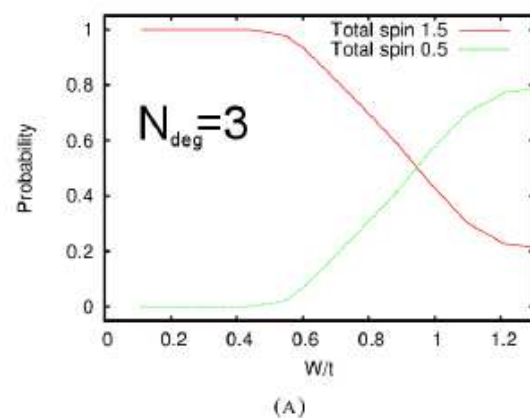
$$H_{MF} = H_{TB} + U \sum_i (\langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow})$$

B. Jaworowski, P. Potasz, A. Wójs,
Superlattices and Microstructures (2013).



Analiza własności magnetycznych nanostruktur grafenowych

Wpływ nieporządku na moment magnetyczny





Analiza własności magnetycznych nanostruktur grafenowych

Metoda wariacyjnego kwantowego Monte Carlo

$$E_{\text{VMC}} = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\bar{R}}{\int |\psi|^2 d\bar{R}} = \frac{\int |\psi|^2 \left(\frac{\hat{H} \psi}{\psi} \right) d\bar{R}}{\int |\psi|^2 d\bar{R}}$$



Dla trójkąta 22 atomy:

	HF	B3LYP	X3LYP	PW91	PBE	TPSS	B3PW91	VMC	DMC
s=1	-839.959	-845.574	-845.171	-845.280	-844.530	-845.747	-845.244	-843.349 ± 0.012	-845.231
s=0	-839.906	-845.545	-845.140	-845.258	-844.507	-845.722	-845.213	-843.265 ± 0.011	-845.181
gap	0.053	0.030	0.030	0.022	0.022	0.024	0.030	0.084±0.015	0.050

(Przy użyciu oprogramowania CASINO)



Politechnika Wroclawska

Dziękuję za uwagę.