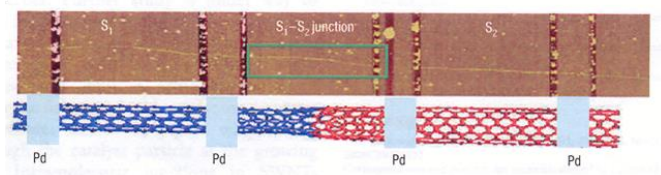
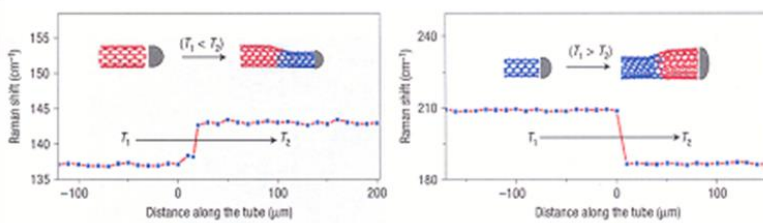
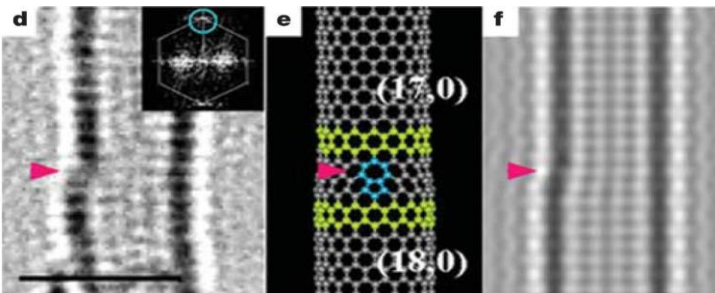
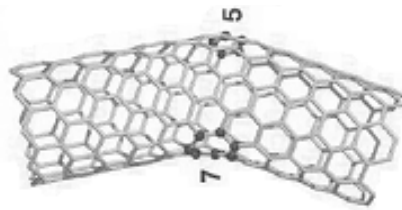
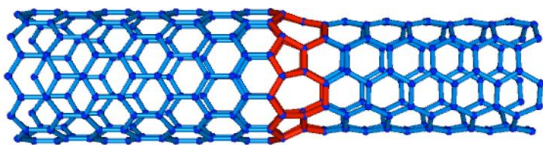
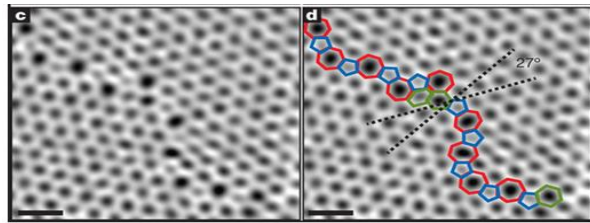
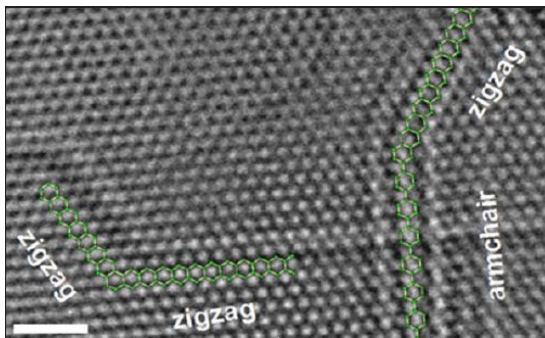
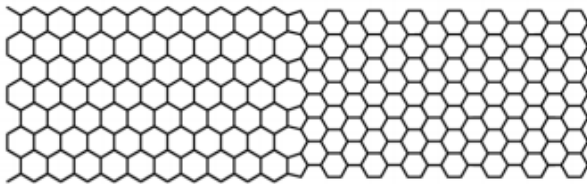


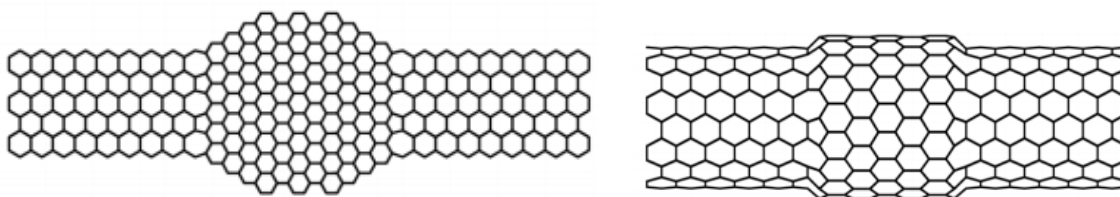
# Układy złączowe

złącza można tworzyć przez wprowadzanie defektów topologicznych 5,7 czasami 8;

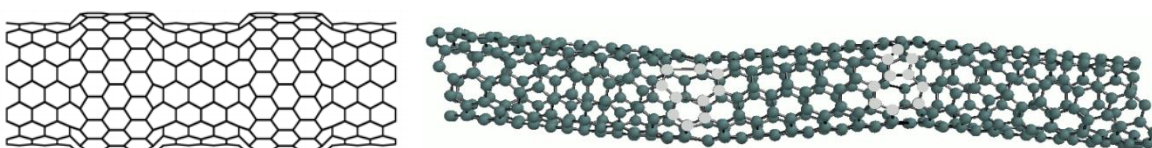
## 1. Pojedyncze złącza



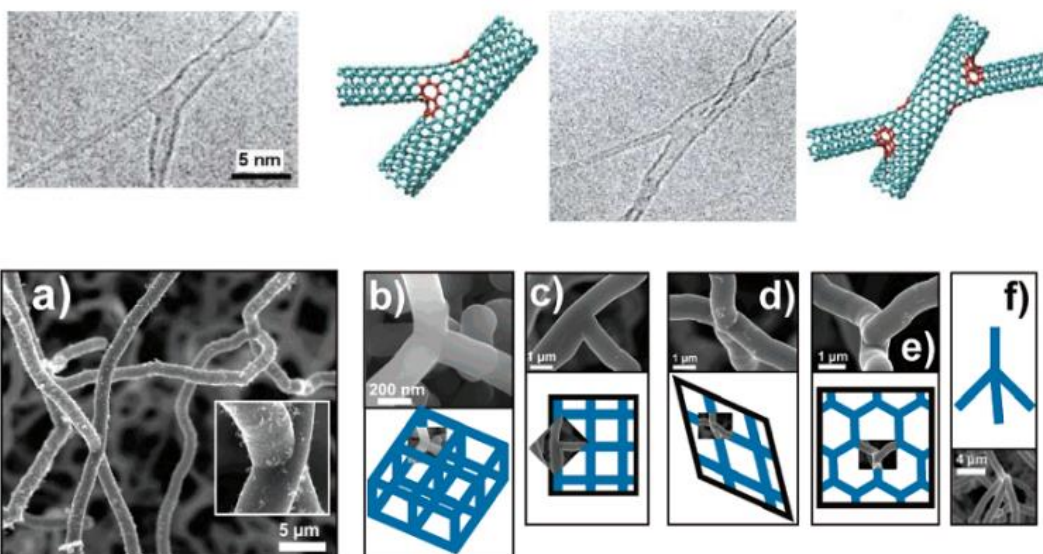
## 2. Kropki kwantowe



## 3. Supersieci

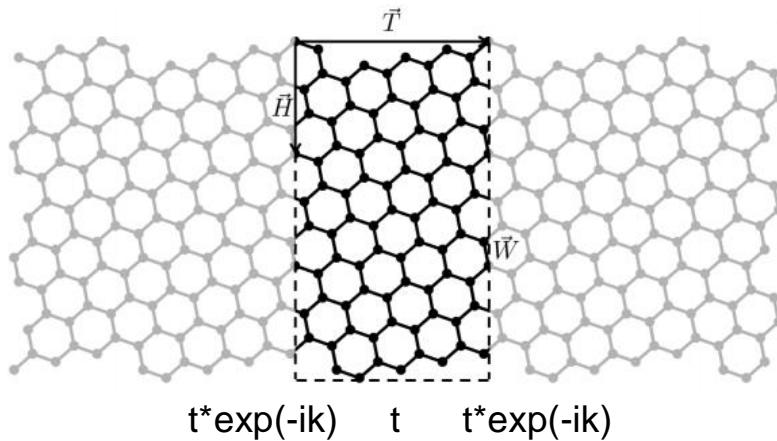


## 4. Rozgałęzienia 2D i 3D



Supersieci mogą być traktowane jak układy periodyczne – większa komórka elementarna (podobnie jak dla wstęg periodycznych)

W formalizmie TB trzeba odpowiednio łączyć węzły brzegowe – na złączach między komórkami elementarnymi



dla złącz i QD trzeba stosować rachunek funkcji Greena

### Formalizm funkcji Greena

dla skończonego układu fizycznego opisywanego hamiltonianem  $H$  lub macierzą  $\mathbf{H}$ , problem własny  $(E - H)\Psi = 0$  można zastąpić

$$(E - H)G = I, \quad G = (E - H)^{-1}$$

W reprezentacji położeniowej dla jednocząstkowego problemu

$$(E - H(\vec{r}))G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

bieguny  $G$  wyznaczają widmo  $H$  w sensie  $[(E + i\eta)I + H]G(E) = I$

z rozkładu spektralnego  $G$  
$$G(r, r') = \sum_n \frac{\langle r | n \rangle \langle n | r' \rangle}{E + i\eta - E_n}$$

dostajemy, że gęstość stanów,

która dla skończonego, dyskretnego układu jest 
$$N(E) = \sum_n \delta(E - E_n),$$

wynosi:

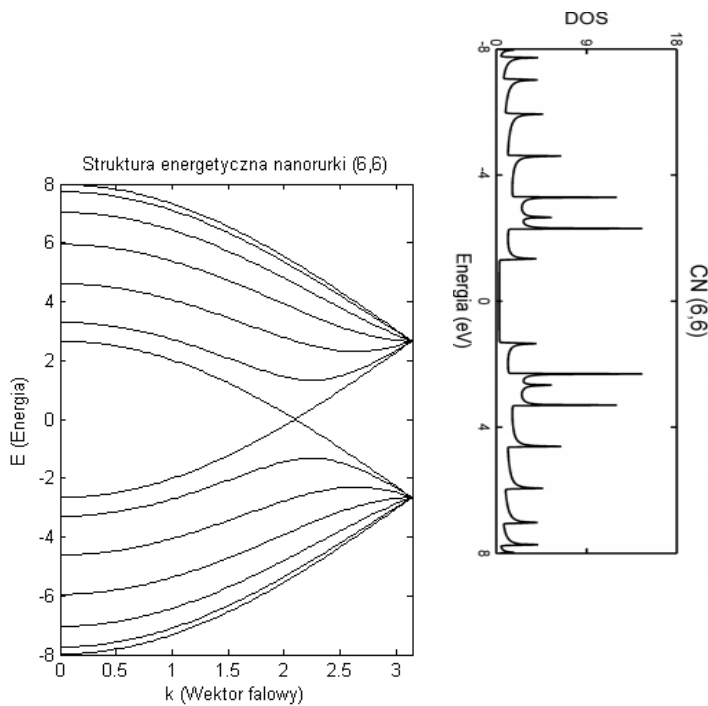
$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(E + i0^+)$$

dla macierzowej reprezentacji  $\mathbf{H}$

$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr} \mathbf{G}(E + i0^+) = \text{DOS}$$

dla nieskończonego układu periodycznego sytuacja jest bardziej skomplikowana, macierz  $\mathbf{H}$  formalnie jest nieskończona;

srowadzenie do jednej komórki elementarnej wprowadza  $k$ , a DOS można przybliżyć jako *histogram* zliczający liczbę stanów numerowanych ( $k$ ) w zmiernych do zera przedziałach  $\Delta E$



osobliwości – van Hove'a (1D);

można to obejść definiując

$$G(E) = \left[ E + i\eta - H_{00} - H_{01}T - H_{01}^\dagger \bar{T} \right]^{-1}$$

gdzie  $H_{00}$  to macierz  $H$  w kom. elementarnej a  $H_{01}$  to macierz połączeń do sąsiedniej komórki, a  $T$  – to macierze przejścia (*transfer matrix*)

W powyższym wzorze  $T$  oraz  $\bar{T}$  są tzw. macierzami przejścia, które można zapisać następująco:

$$\begin{aligned} T &= t_0 + \tilde{t}_0 t_1 + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 t_2 + \dots + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 \tilde{t}_2 \dots t_n, \\ \bar{T} &= \tilde{t}_0 + t_0 \tilde{t}_1 + t_0 t_1 \tilde{t}_2 + \dots + t_0 t_1 t_2 \dots \tilde{t}_n, \end{aligned} \quad (3.3)$$

gdzie macierze  $t_i$  oraz  $\tilde{t}_i$  wyznacza się iteracyjnie za pomocą wzoru:

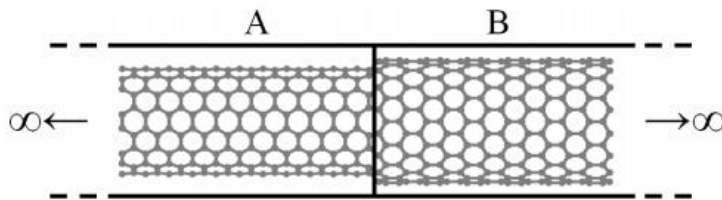
$$\begin{aligned} t_i &= (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^2, \\ \tilde{t}_i &= (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} \tilde{t}_{i-1}^2, \end{aligned} \quad (3.4)$$

przy czym:

$$\begin{aligned} t_0 &= (E + i\eta - H_{00})^{-1} H_{01}^\dagger, \\ \tilde{t}_0 &= (E + i\eta - H_{00})^{-1} H_{01}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

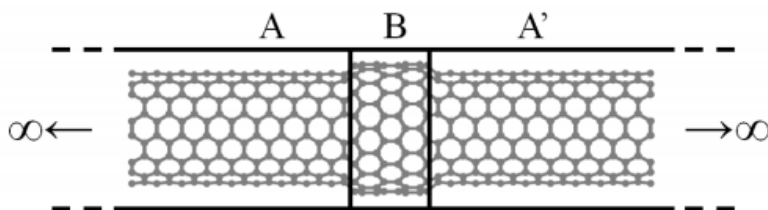
a iterację powtarza się dopóki elementy  $t_i$  oraz  $\tilde{t}_i$  nie są wystarczająco małe (tzn. do uzyskania zbieżności).

### Dla pojedynczego złącza



$$G_I = \begin{pmatrix} G_A & G_{AB} \\ G_{BA} & G_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E + i\eta - H_{00}^A - H_{01}^{A\dagger} \bar{T} & -H_{AB} \\ -H_{BA} & E + i\eta - H_{00}^B - H_{01}^B T \end{pmatrix}^{-1}$$

a  
dla podwójnego złącza = QD



$$G = \begin{pmatrix} G_A & G_{AB} & G_{ABA'} \\ G_{BA} & G_B & G_{BA'} \\ G_{ABA'} & G_{A'B} & G_{A'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_A & H_{AB} & 0 \\ H_{BA} & g_B & H_{BA'} \\ 0 & H_{A'B} & g_{A'} \end{pmatrix}^{-1}$$

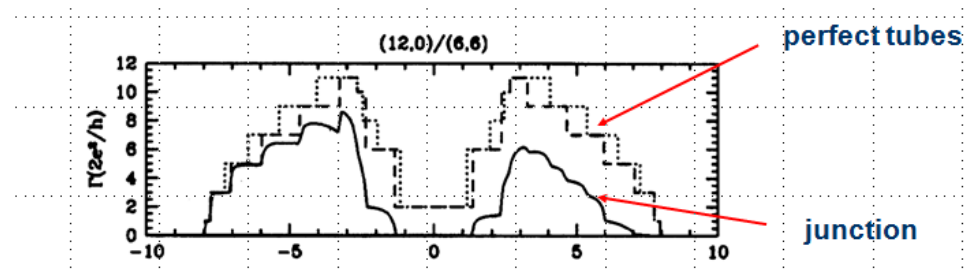
$$G_{QD} = [E + i\eta - H_B - \Sigma_A - \Sigma_{A'}]^{-1}$$

Gdzie  $\Sigma_A = H_{AB}^\dagger g_A H_{AB}$  oraz  $\Sigma_{A'} = H_{BA'} g_{A'} H_{BA'}^\dagger$

W ostatnich dwóch przypadkach, DOS  $\rightarrow$  LDOS ...

najważniejszy rezultat dotyczący złącza metalicznych nanorurek  
L.Chico, et.al., PRL 1996

(przewodność można zdefiniować w oparciu o G)



## Bariera symetrii

Nanorurki chiralne: w grupie symetrii jest podgrupa cykliczna czystych obrotów, dla  $(n,n)$  i  $(n,0)$  jest to grupa  $C_n$

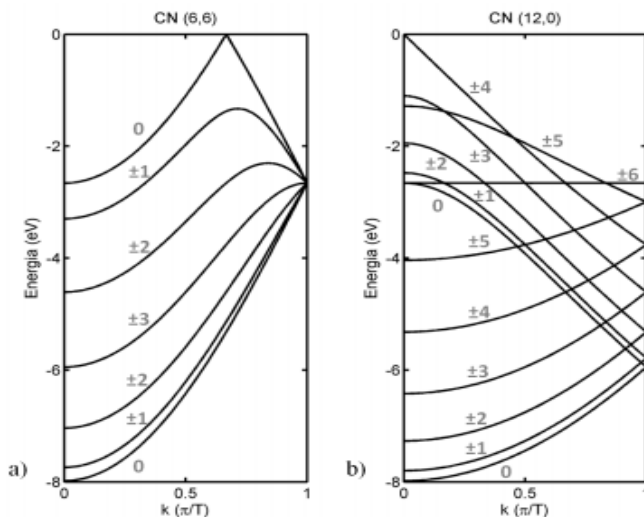
wszystkie stany (pasma) można sklasyfikować względem nieredukowalnych reprezentacji grupy  $C_n$

$T$  - operator dyskretnego obrotu o kąt  $\Delta\varphi = \frac{2\pi}{n}$

$$T_{\Delta\varphi} \psi = e^{im\Delta\varphi} \psi, \quad |m| \leq n/2, \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$e^{im\Delta\varphi}$  - charakter nieredukowalnej (jednowymiarowej) reprezentacji abelowej grupy  $C_n$

Np.



(analogicznie dla  $E > E_F$ )

zauważmy, że (12,0) ma „dwukrotnie” wyższą symetrię niż (6,6),  
 odpowiednio: złącze (12,0)/(6,6) będzie miało symetrię „tylko”  $C_6$   
 i symetria pasm (12,0) zostaje na złączu obniżona do

$$m' = n - m \text{ dla } m \geq n/2 \text{ i } m' = -n - m \text{ dla } m \leq -n/2$$

wszystkie stany układu złączowego (rozproszeniowe) lub zlokalizowane  
 muszą mieć symetrię  $C_6$ ,

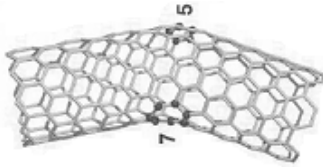
gdyż  $n$  par defektów 5/7 na złączu ma symetrię  $C_6$

jeśli dla wybranej energii  $E$ , pasma po obu stronach złącza nie mają  
 wspólnej symetrii - odpowiada to wzbronionej (przerwie) przewodności

np. redukcja  $m=4$  dla (12,0) do  $m'=2$  [czyli funkcja falowa po obrocie  
 o  $2\pi/6$  nabiera fazy a po drugiej stronie (6,0) pasmo z  $m=0$  – w pełni  
 symetryczne - bez fazy;

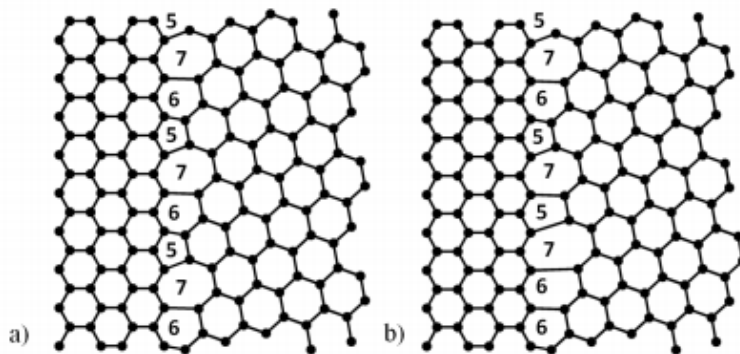
układy inne niż (2n,0)/(n,n) można tworzyć przez różne rozłożenie  
 defektów 5,7 na złączu;

jeśli złącze nie posiada symetrii obrotowej to nie istnieją żadne bariery symetrii, np.

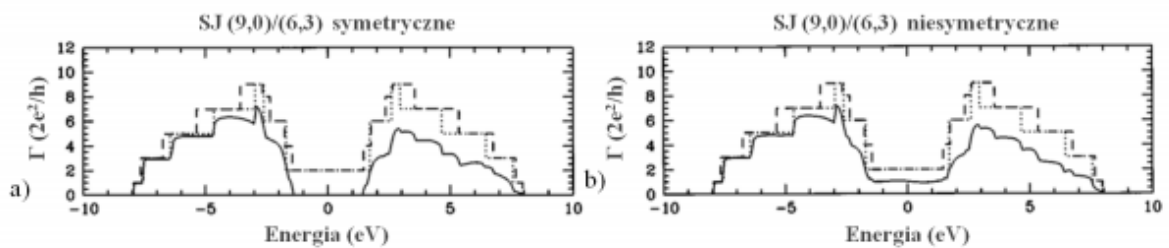


inny: (9,0) / (6,3) , dwa rodzaje: złącze symetryczne i niesymetryczne

rozwinęte:



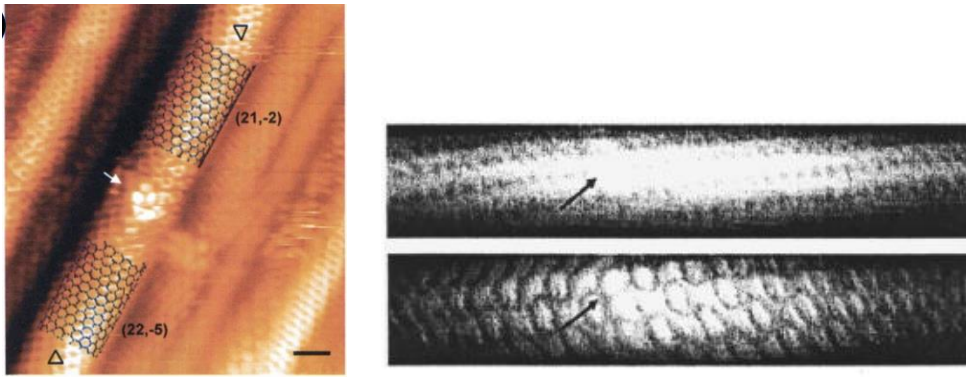
przewodność



dodatkowo, dla złącz CN metal / półprzewodnik zawsze istnieje zwykła bariera energetyczna

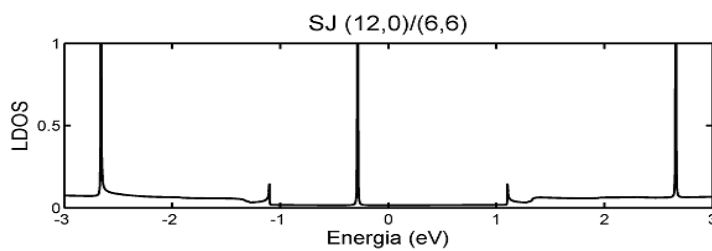
## Stany złączowe nanorurek węglowych





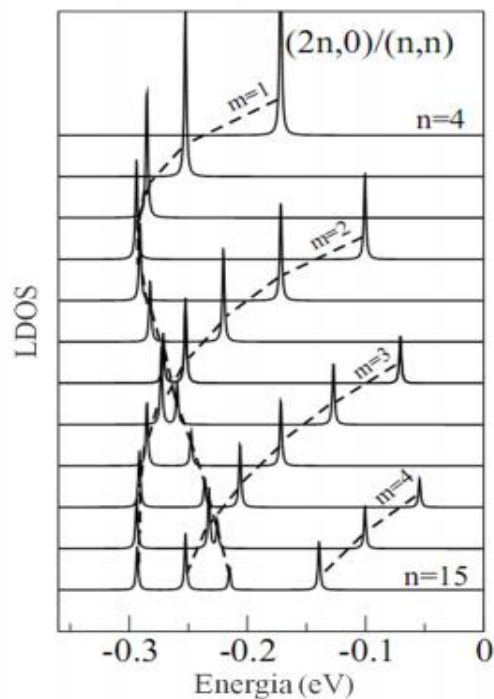
Występowanie i pochodzenie stanów zlokalizowanych na złączach

- defekty 5/7 ? **NIE**



Rysunek 3.9. Lokalna gęstość stanów na złączu układu (12,0)/(6,6).

Rozważmy przypadek  $(2n,0)/(n,n)$ : analiza obliczeń LDOS na złączu daje

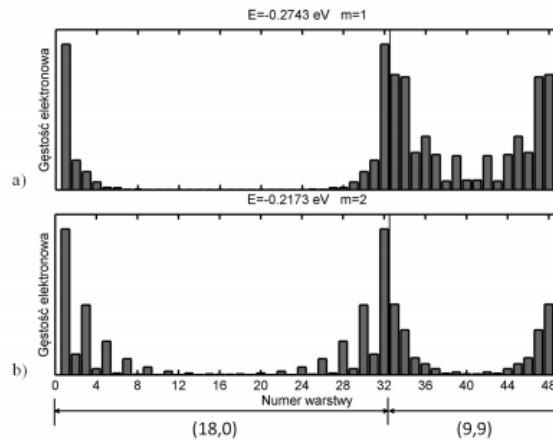


Liczbę stanów zlokalizowanych na złączu można określić jako

$$q = \left[ \frac{n-1}{3} \right]$$

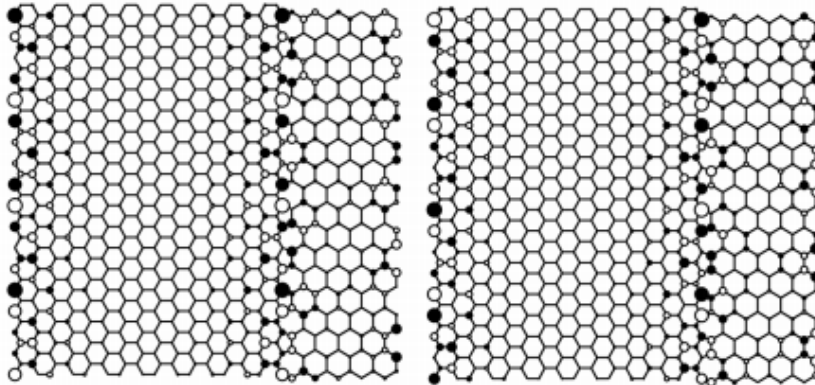
ich symetrie są  $m = \pm (1, 2, \dots, q)$

ich funkcje można „zobaczyć”, np. w przypadku supersieci

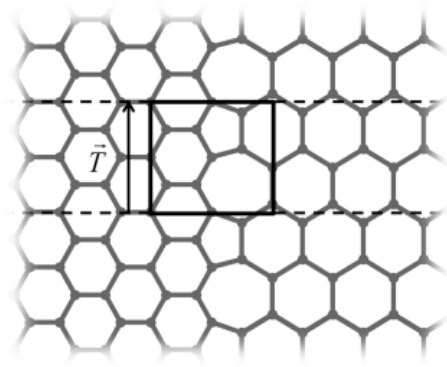


**Rysunek 3.34.** Porównanie rozkładu gęstości elektronowych na kolejnych warstwach komórki elementarnej dla stanów złączowych supersieci 8(18,0)/8(9,9) o symetriach  $m = 1$  oraz  $m = 2$ .

lub dla przypadków 8(18,0)/4(9,9) i 8(18,0)/5(9,9)

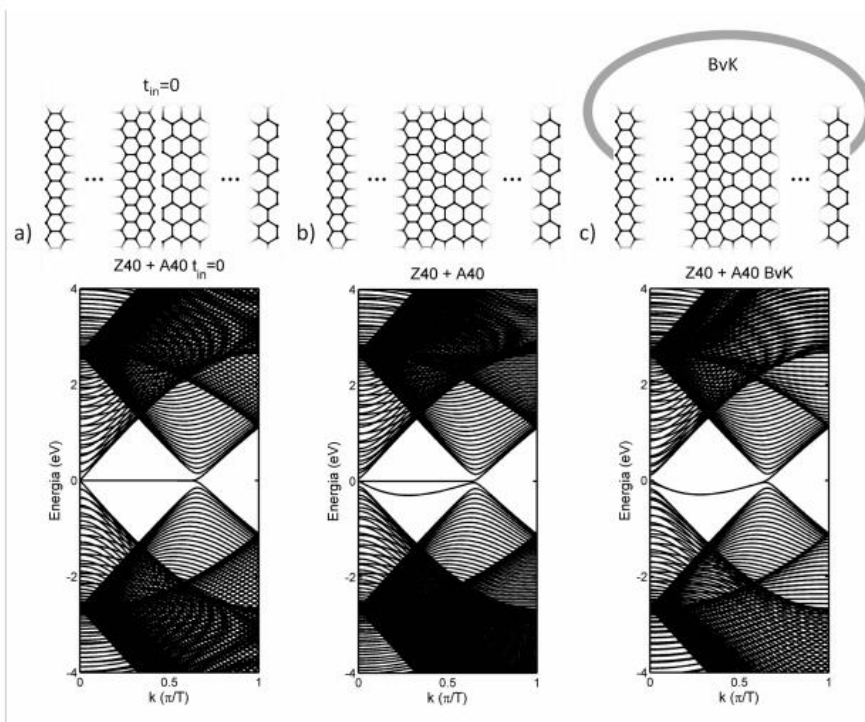


**trzeba zrozumieć czym jest złącze półpłaszczyzn grafenowych:  
fotel-zygzak**



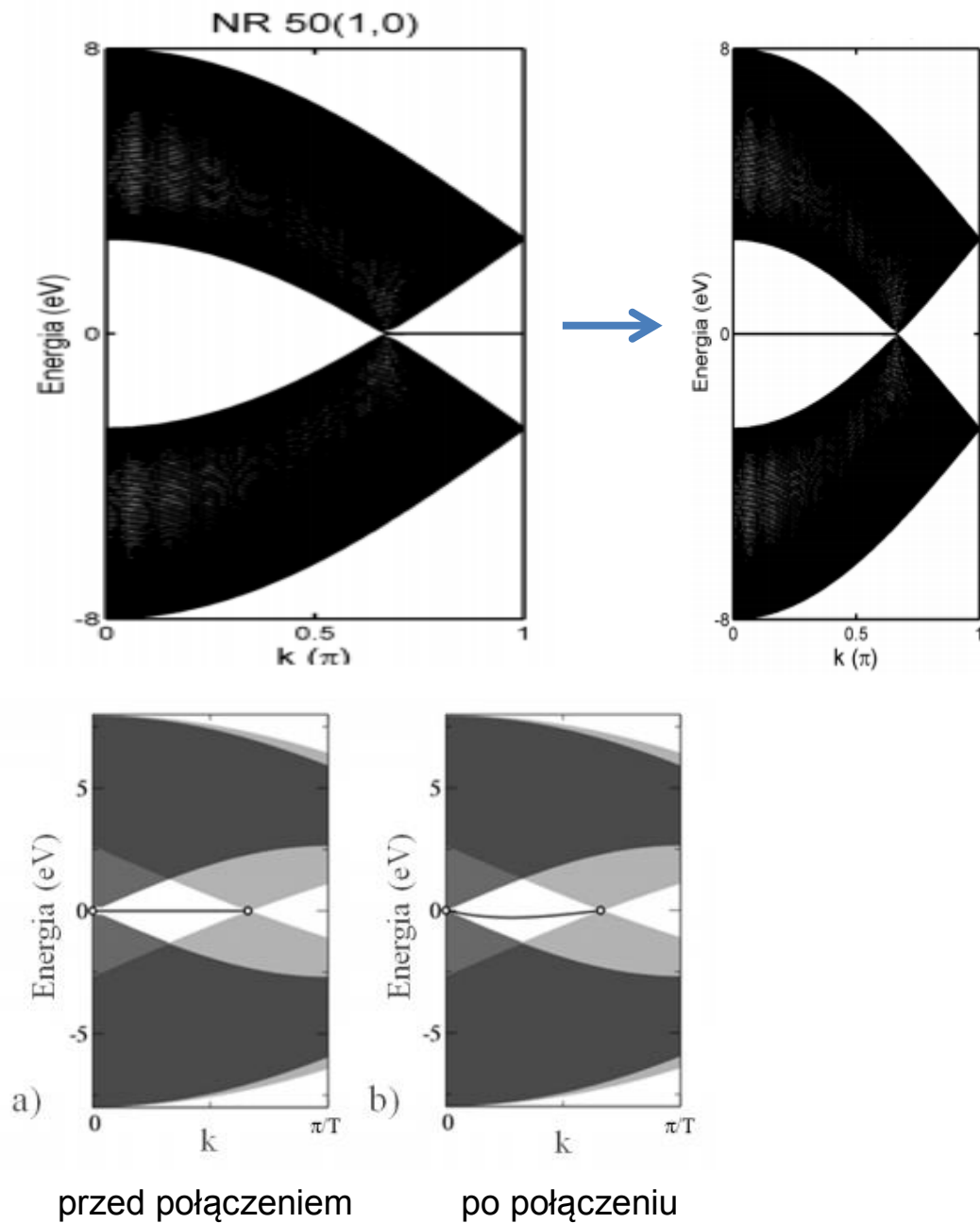
**Rysunek 3.35.** Schemat dwóch półpłaszczyzn grafenowych o brzegu zygzakowatym i fotelowym, czyli złącza typu  $N(2n,0)/M(n,n)$  o nieskończonej szerokości ( $n = \infty$ ). Na rysunku zaznaczono wektor translacji.

wyniki obliczeń dla złącza



**Rysunek 3.36.** Schemat i widmo układu dwóch szerokich wstęg grafenowych: zygzakowatej  $40(2,0)$  (ozn. Z40) i fotelowej  $40(1,1)$  (ozn. A40) nie połączonych ze sobą (a), połączonych za pomocą ciągu defektów topologicznych  $5/7$  (b) i z dodatkowymi okresowymi warunkami brzegowymi (w kierunku prostopadłym do złącza w  $k_{\perp} = 0$ ) (c).

komórka elementarna złącza jest  $2x$  dłuższa od komórki elementarnej  $(1,0)$ , zatem strefa Brillouina będzie  $2x$  węższa, widmo  $(1,0)$  należy zatem „złożyć” dwukrotnie i „dodać” do widma  $(1,1)$  (*foldng*)



na złączu półpłaszczyzn grafenowych lub wstęp grafenowych powstaje pasmo, którego źródłem jest pasmo brzegowe zygzak

ugięcie spowodowane wnikiem „*tunelowaniem*” do wstęgi fotelowej

zwijanie złącza → złącze nanorurek  $(2n,0)/(n,n)$  ;

$n$  – wyznacza „dyskretyzację” pasma złączowego -> dyskretne stany na złączach nanorurek

warunek dyskretyzacji to nałożenie periodycznych (BvK) war. brzegowych :

$$knd = 2\pi r,$$

$r$  - liczba całkowita – ta sama co  $m$  ,

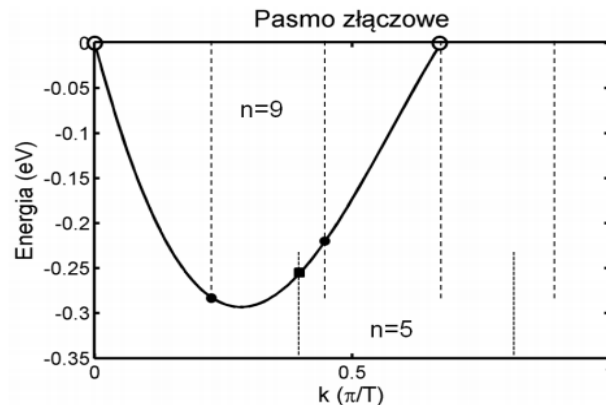
Rozpatrujemy dodatnie wartości wektora falowego ( $0 \leq k \leq \frac{\pi}{d}$ ), przez co dozwolone wartości całkowite  $m$  spełniają warunek:  $0 \leq m \leq \frac{n}{2}$ . Regułę kwantyzacji dla wektora  $k$  związaną z nałożeniem periodycznych warunków brzegowych można więc zapisać, jako:

$$k = \frac{2\pi}{nd}m. \quad (3.31)$$

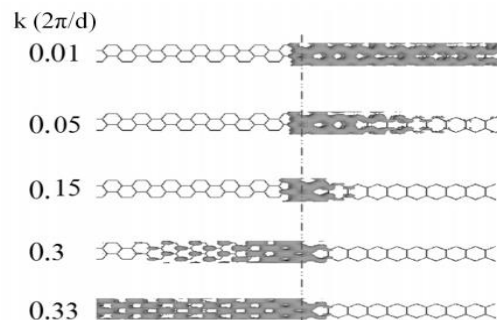
Poszukując wartości  $k$  odpowiadających stanom złączowym układów  $(2n, 0)/(n, n)$  ograniczamy się do przedziału pasma złączowego, czyli:

$$0 < k < \frac{2\pi}{3d}. \quad (3.32)$$

zbliżenie pasma złączowego i wyznaczanie energii zlokalizowanych stanów złączowych z warunku (3.31)



**Rysunek 3.38.** Graficzne przykłady wyznaczania wartości wektora  $k$  i odpowiadających im energii stanów złączowych układów nanorurek  $(2n, 0)/(n, n)$  dla  $n = 5$  i  $n = 9$ .



**Rysunek 3.39.** Gęstości elektronowe nieskończonego złącza dla różnych wartości wektora  $k$ .