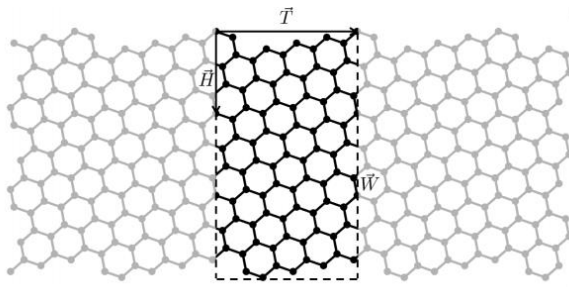


Teoria stanów brzegowych wstęp grafenowych

przypomnijmy:

każdą, periodyczną wstęgę grafenową można jednoznacznie zdefiniować przez podanie:

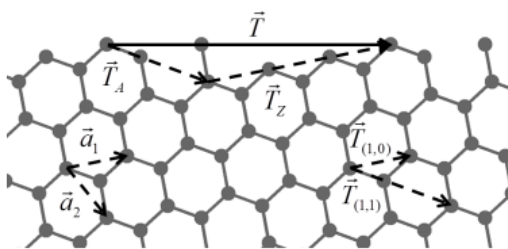
- - wektora translacji $\vec{T} = (n, m) = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$, definiującego długość komórki elementarnej wstęgi
- - wektora szerokości wstęgi $|\vec{W}| = N |\vec{H}|$, gdzie H to najkrótszy wektor (węzeł - węzeł tej samej podsieci) prostopadły do T , w ogólności N nie musi być całkowite
- - szczegółów (kształtu) brzegu(ów)



$T \times W$ – komórka elementarna wstęgi,

Ale każdy brzeg w komórce elementarnej można złożyć z

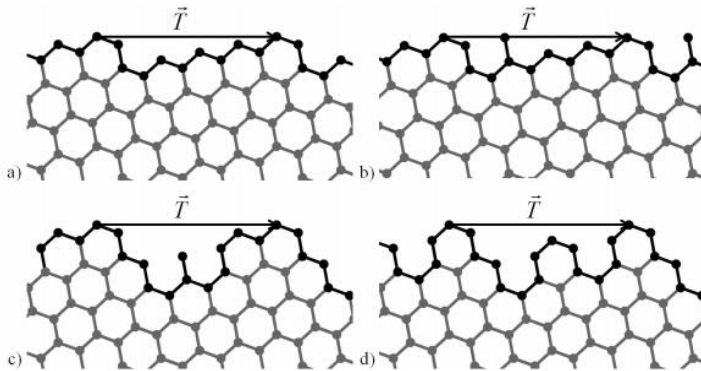
- części fotelowej, oraz
- części zygzakowatej,



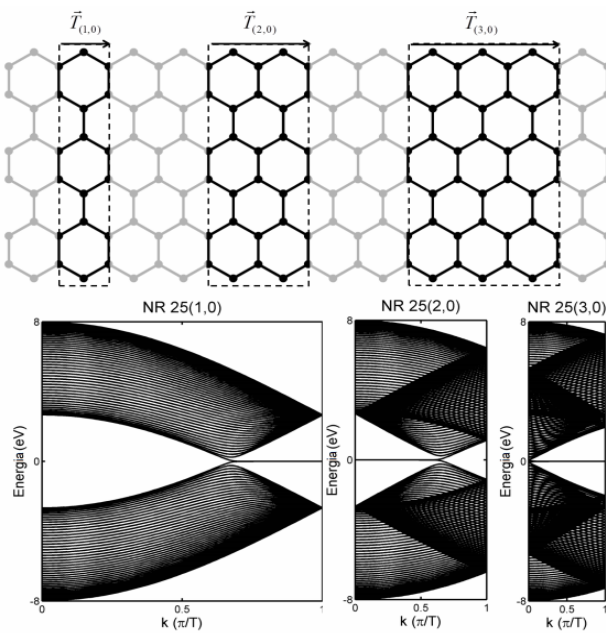
$$\vec{T}_Z = (n - m)\vec{T}_{(1,0)} = (n - m)\vec{a}_1. \quad \vec{T}_A = m\vec{T}_{(1,1)} = m(\vec{a}_1 + \vec{a}_2),$$

- wstęgi o brzegach fotelowych nie posiadają stanów brzegowych
- wstęgi zygzak posiadają stany zlokalizowane na brzegu

brzezi można podzielić na *minimalne* i *modyfikowane* (dekorowane), przykłady:

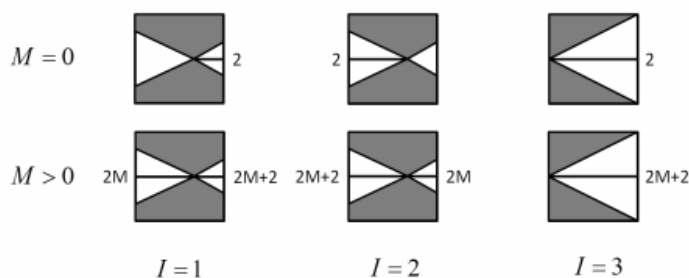


zygzakowa część brzezi *minimalnego* jest długości $(n-m)$ to widmo stanów o $E=E_F$ musi być takie samo jak widmo wstęp z brzegiem zygzak o wektorze translacji $T=(n-m,0)$

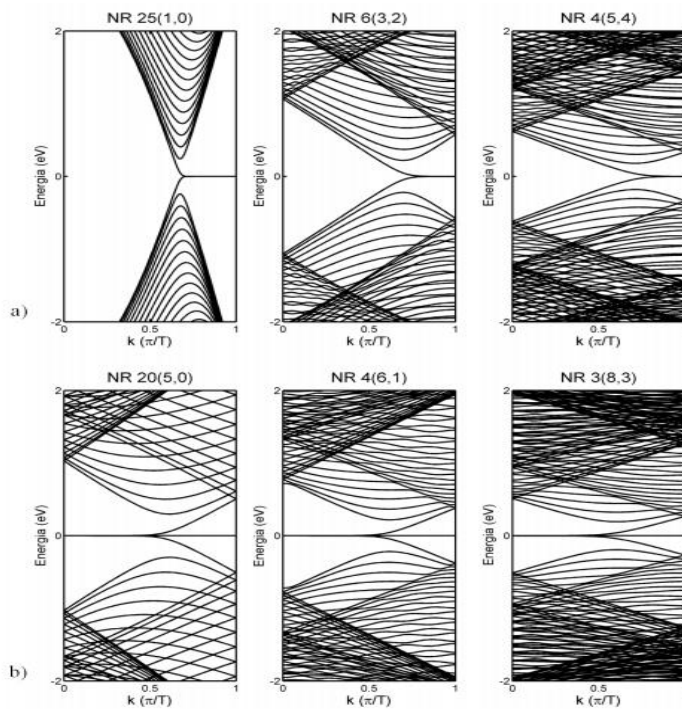


Krotność $(n-m)$ -składania wyznacza degenerację pasma brzegowego

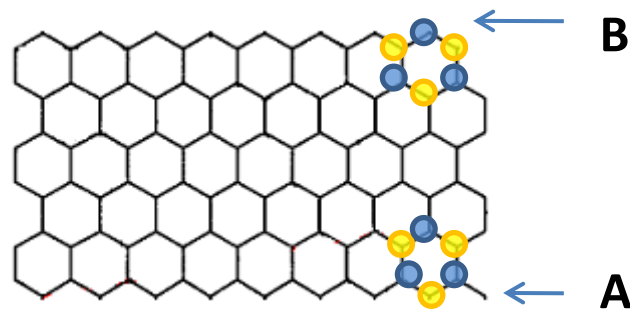
$$n - m = I + 3M$$



kilka przykładów



pamiętamy: lokalizacja na górnym i dolnym brzegu dotyczy różnych podsieci



dodatkowo:

$E=0$ wymusza lokalizację funkcji falowej na jednej tylko podsieci

Brzegi modyfikowane i diagramy hybrydacyjne

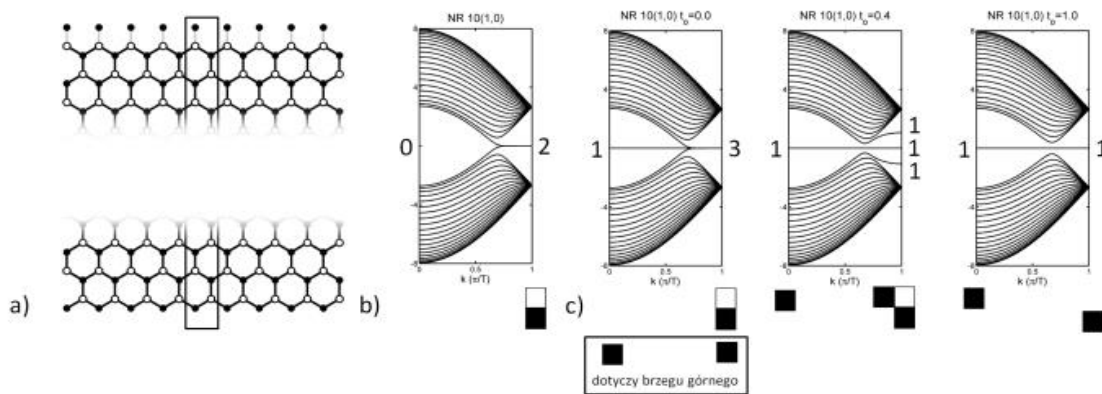
Zasady diagramatyczne:

- each $E=0$ band is marked as \square or \blacksquare depending on the sublattice at which it localizes
- boxes are drawn in two rows corresponding to two edges (sides) of the GNR
- a pair of empty and filled boxes at one edge represents a pair of interacting $E=0$ bands,

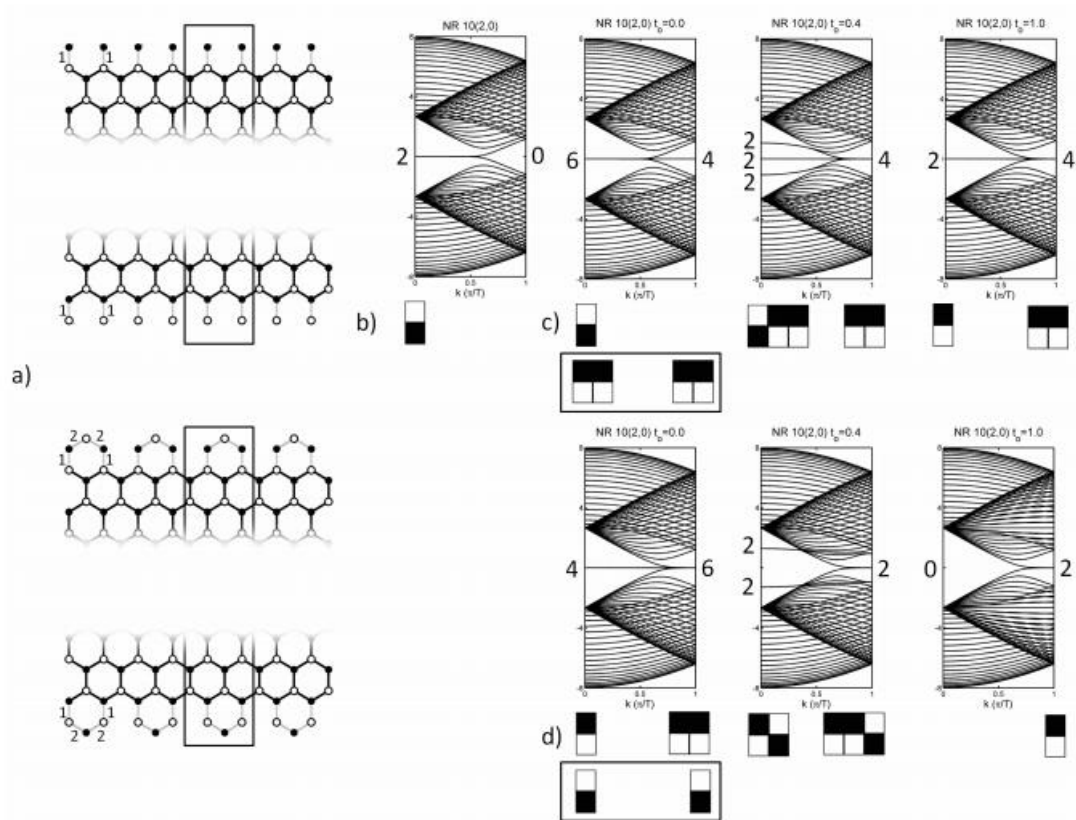
which hybridize and split – such two boxes annihilate

- the boxes, which didn't annihilate, uniquely determine the edge and sublattice, at which the remaining $E=0$ bands localize; they also determine their degeneracy

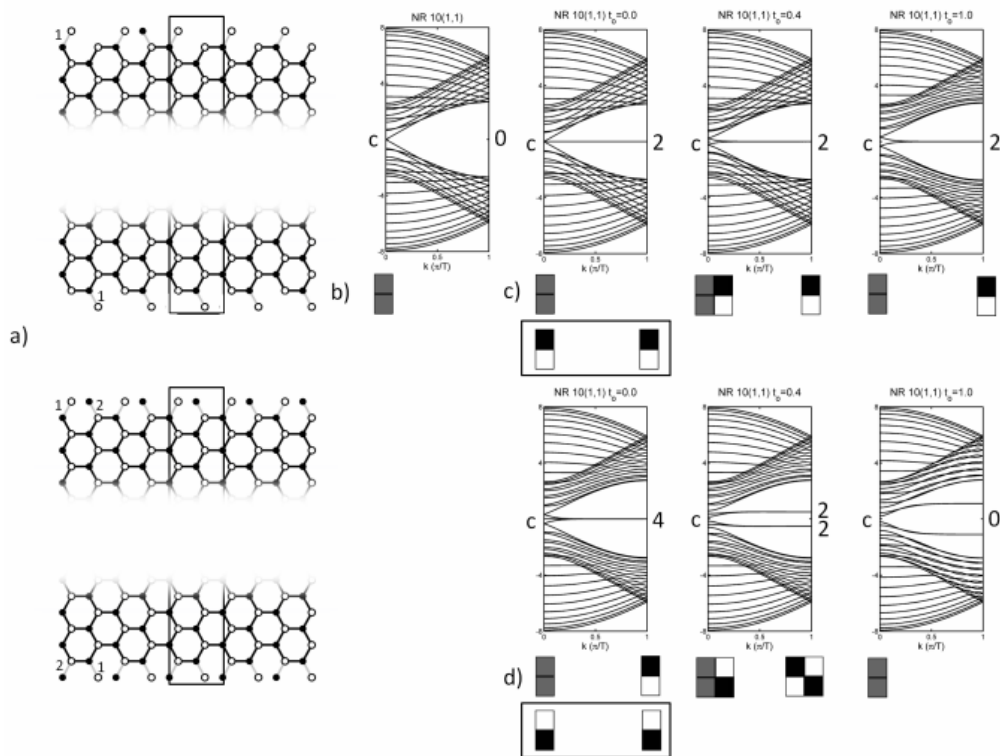
1. brzeg Klaina



2. wstęga z brzegiem zatokowym



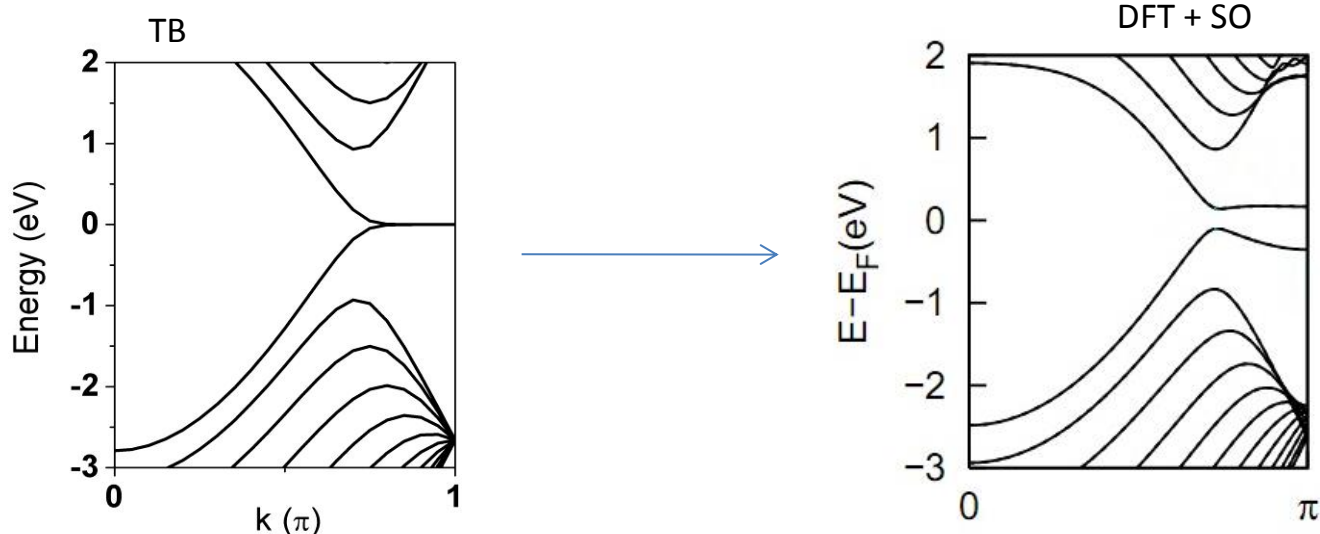
3. modyfikacje brzegu fotelowego



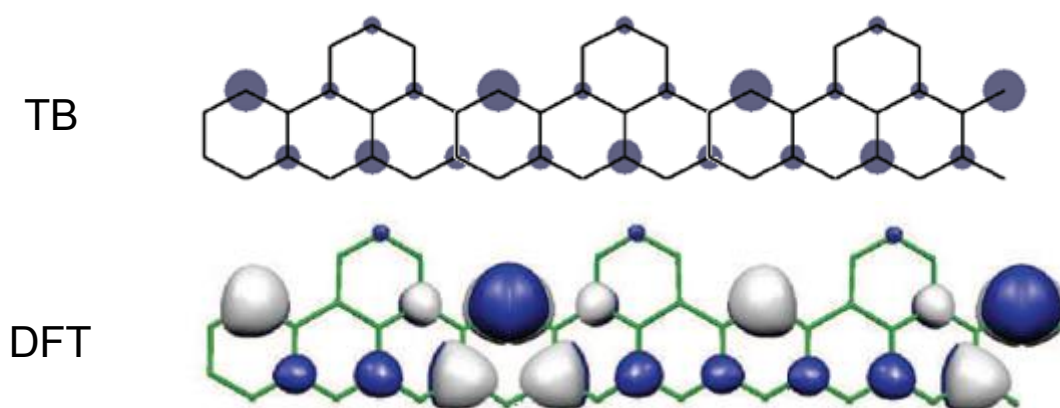
wyjście poza przybliżenie jednoelektrodowe:

beyond the one-electron approximation

zigzag (1,0) GNR, W=6



both, the TB and DFT calculations show localization of EB at one sublattice only



Kropki kwantowe

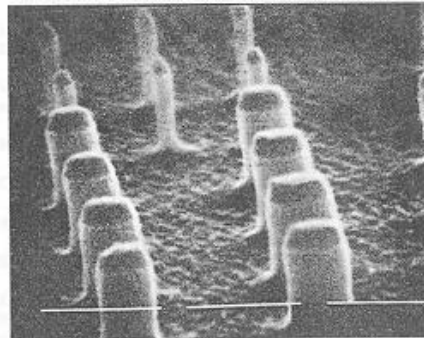
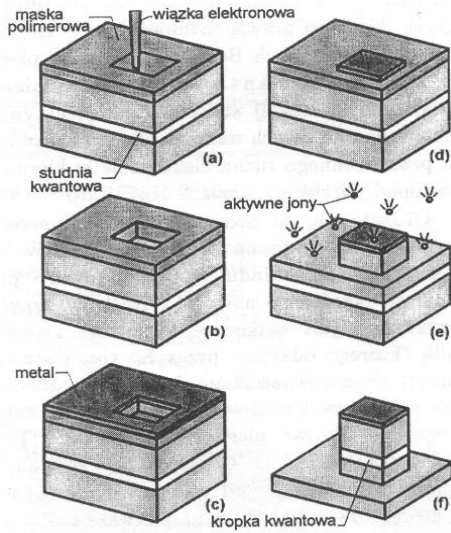
wstęp

półprzewodnikowe kropki kwantowe

= układy złożone z jednego lub więcej półprzewodników, w których symetria translacyjna została zaburzona (intencjonalnie) w 3 kierunkach

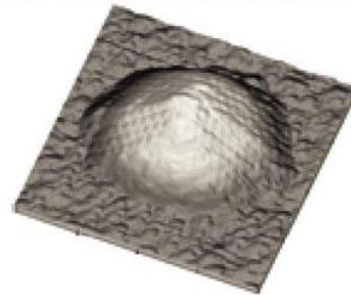
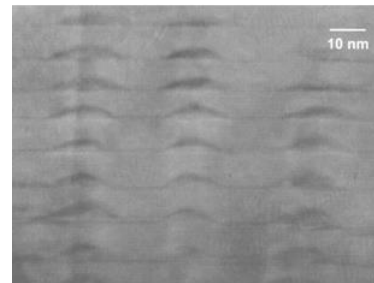
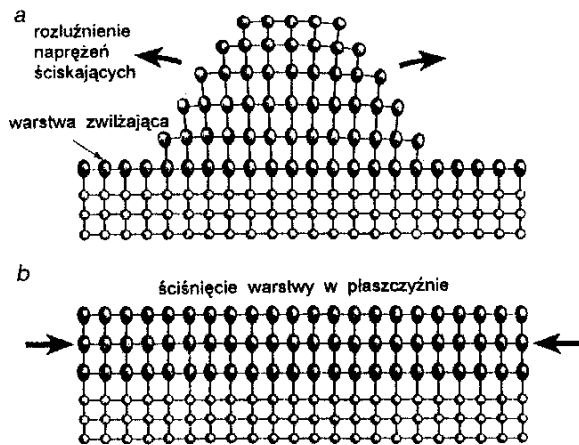
przestrzennych, prowadząc do całkowitej (lub częściowej) dyskretyzacji pasm energetycznych

- litograficzne,

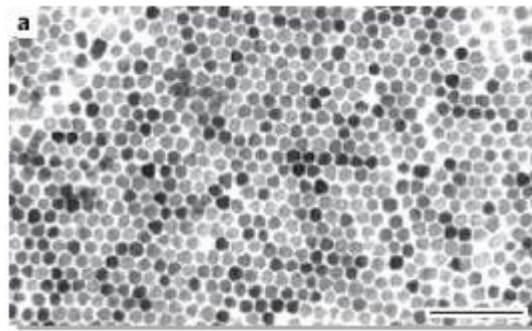
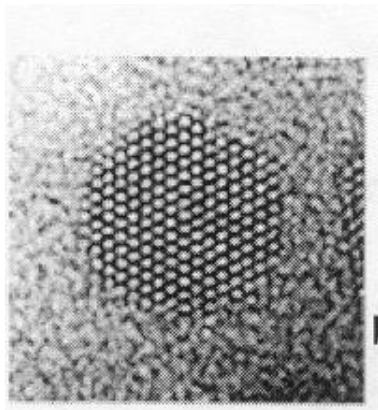


Rys. 1. Proces wytrawiania kropki kwantowej [18].

- samo-organizujące się,

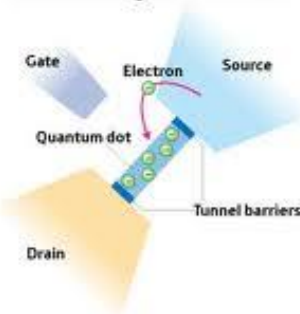


- koloidalne,

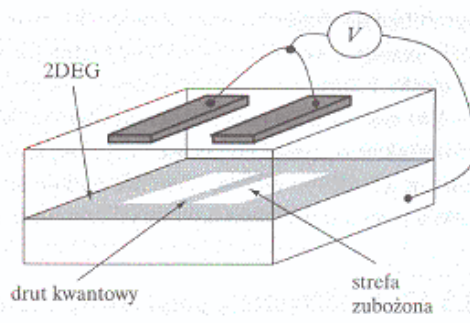
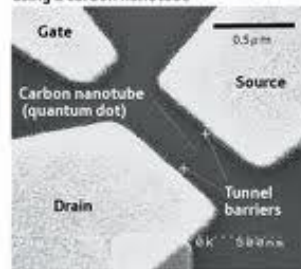


- definiowane elektrycznie,

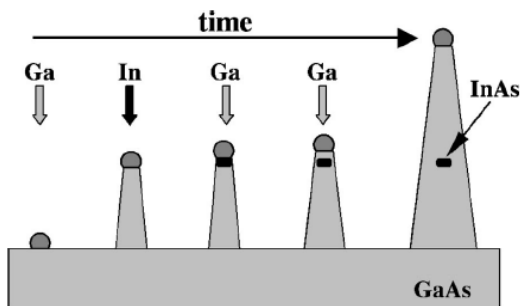
Structure of a single-electron transistor



Single-electron transistor fabricated using a carbon nanotube



- w nanodrutach VLS



nazywane *sztucznymi atomami* – dyskretyzacja widm energii i optycznych

metody opisu:

- modele studni kwantowych (*masy efektywnej*)
- metoda **kp**
- metody pseudopotencjałów
- **metody ciasnego wiązania (TB)**

Dla półprzewodników AIIIVI lub AIIIBV metoda TB wymaga przynajmniej uwzględnienia orbitali s , p_x , p_y , p_z , a często także dodatkowo s^* i 5-ciu orbitali d , i dalej konieczne jest uwzględnienie spinu (łącznie od 10-ciu do 20 spinorbitali);

dla nanokryształów zbudowanych z kilku tysięcy atomów (rozmiary ~kilku – dziesiątek nanometrów) wymiary macierzy TB są $\sim 10^4$ - 10^5

dla QD samo rosnących, trzeba uwzględnić długozasięgowe naprężenia, wpływ warstw zwilżających (2D), efekty piezoelektryczne....

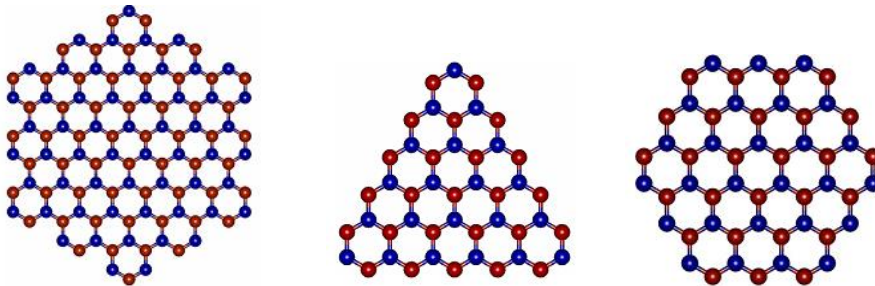
niekiedy trzeba brać pod uwagę otoczenie półprzewodnikowe QD zawierające miliony atomów... nietrywialne

zastosowania

- lasery na QD
- dyskretny transport jedno-elektronowy,
- bramki qubitowe
- markery bio-medyczne
- nanoanteny
- anty-kropki ...

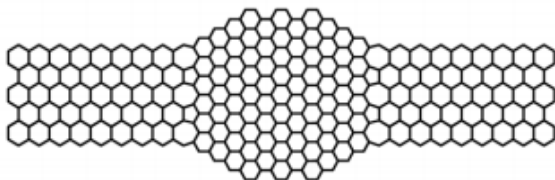
Termin QD w przypadku struktur grafenowych i nanorurkowych odnosi się do

- płatków grafenowych,

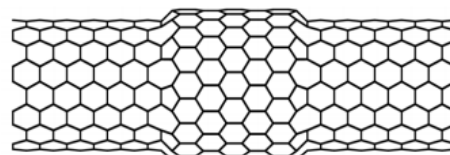


- struktur typu

(a)



(b)



przyłącza (metaliczne ze względu na transport)

w QD typu (b) dyskretne poziomy energetyczne wynikają z kwantyzacji pasm środkowego fragmentu.

mogą być:

- ściśle zlokalizowane (bariery przerwy energii i bariery symetrii)
- rezonansowe = zlokalizowane, ale leżące energetycznie na tle pasm

dla $(12,0)/N(6,6)/(12,0)$ QD lokalizacja tylko „barierą symetrii”
 $(12,0)/N(6,6)/(12,0)$

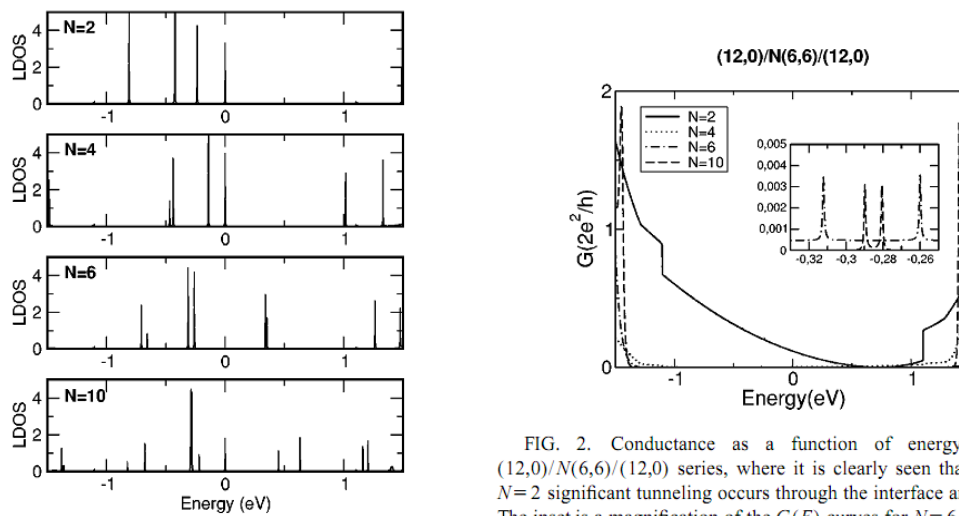
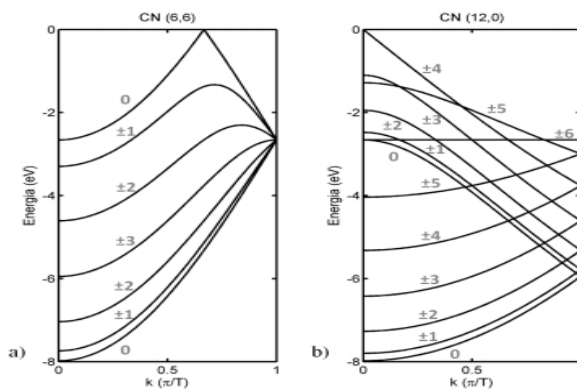


FIG. 1. Local density of states at the interfaces of several $(12,0)/N(6,6)/(12,0)$ structures.

FIG. 2. Conductance as a function of energy for the $(12,0)/N(6,6)/(12,0)$ series, where it is clearly seen that only for $N=2$ significant tunneling occurs through the interface around E_F . The inset is a magnification of the $G(E)$ curves for $N=6, 10$, which shows the small conductance peaks due to the presence of interface states.

przypomnijmy, że:



rozszerzenie na supersieci

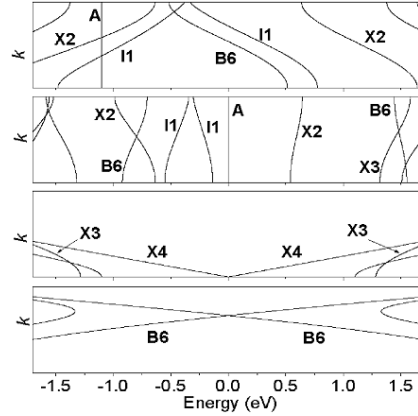


Fig. 2. From top to bottom: miniband structure of 1(6,6)/1(12,0) SL; miniband structure of 2(6,6)/2(12,0) SL; band structure of (12,0) CN; band structure of (6,6) CN. Only bands around E_F are shown. B marks minibands originating from the (6,6) tube, X marks minibands originating from the (12,0) tube, I marks interface minibands, and A marks dispersionless bands. The number n added to the letters means invariance under $2\pi/n$ rotation.

dla $(8,2)/N(5,5)/(8,2)$ QD brak barier – stany mają charakter rezonansowy (szersze energetycznie)

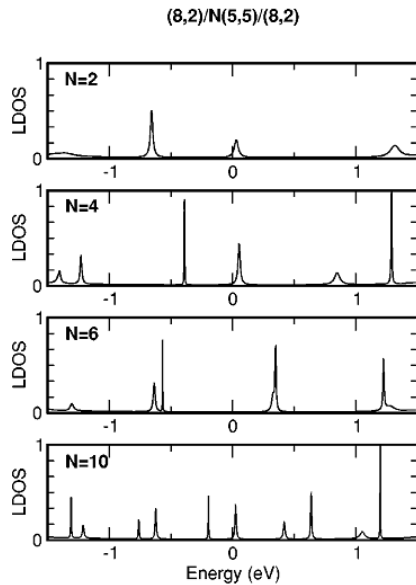


FIG. 3. Local density of states at the interfaces of several $(8,2)/N(5,5)/(8,2)$ structures.

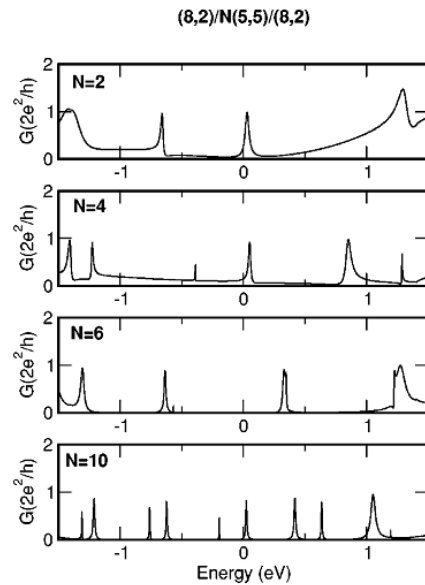


FIG. 4. Conductance as a function of energy for the $(8,2)/N(5,5)/(8,2)$ series.

Płatki grafenowe

w skończonych układach grafenowych (bezdefektowych) liczba stanów o energii $E=0$ (w rachunku TB) równa jest

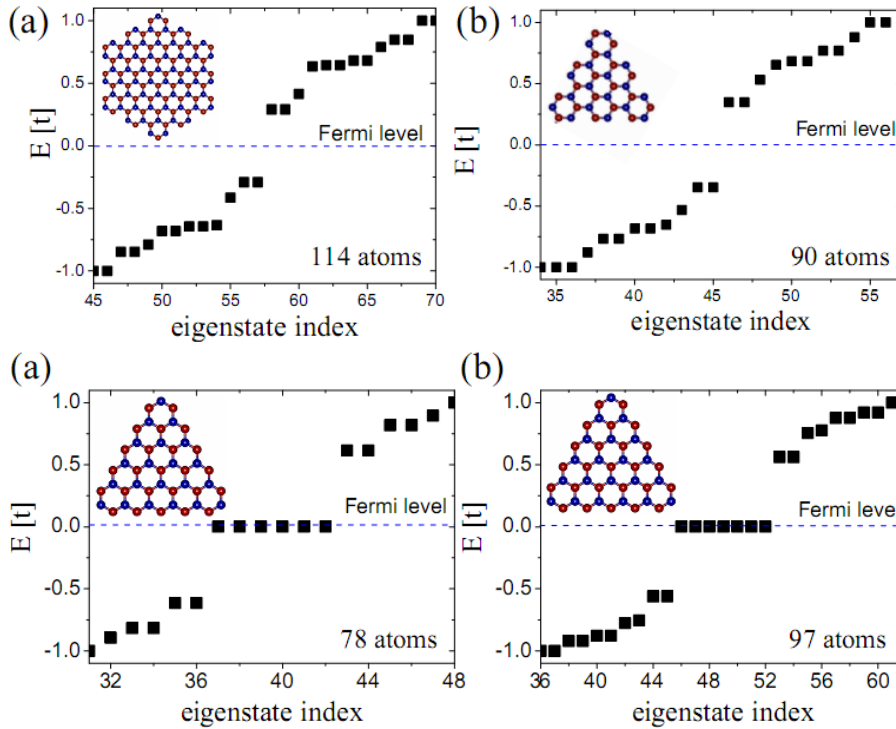
$$N_{E=0} = |N_A - N_B|$$

N_A, N_B - liczba węzłów podsieci A i B - **podsielowy *imbalsans***

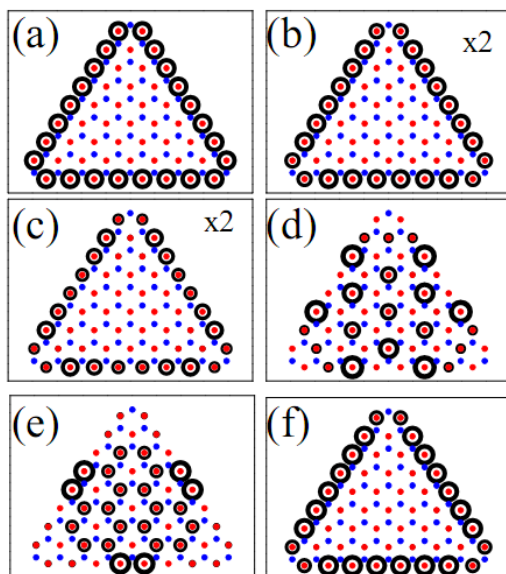
... związek ze stanami brzegowymi.... lokalny imbalance,

dotyczy to także struktur typu anty-kropek

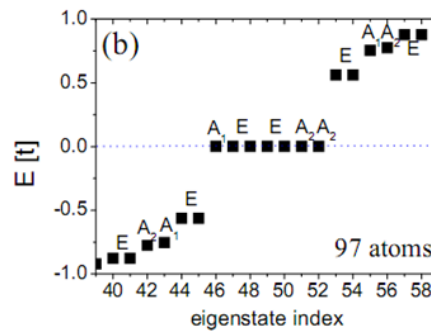
przykłady



kwadrat funkcji falowych $E=0$ dla trójkątnej QD o 97 atomach z klasyfikacją ze względu na nieredukowalne reprezentacje grupy C_{3v}



	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0



Wyjście poza przybliżenie jednoelektrodowe

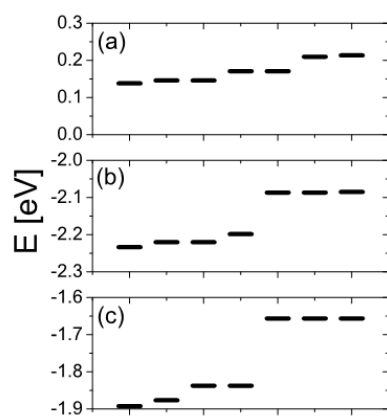


Figure 4.8: Hartree-Fock energy levels corresponding to the degenerate shell for calculations with (a) only the on-site term U (Hubbard model), (b) the on-site term U + direct long-range interaction (extended Hubbard model), and (c) all interactions. A separation of three corner states with higher energies is related to direct long range Coulomb interaction terms.