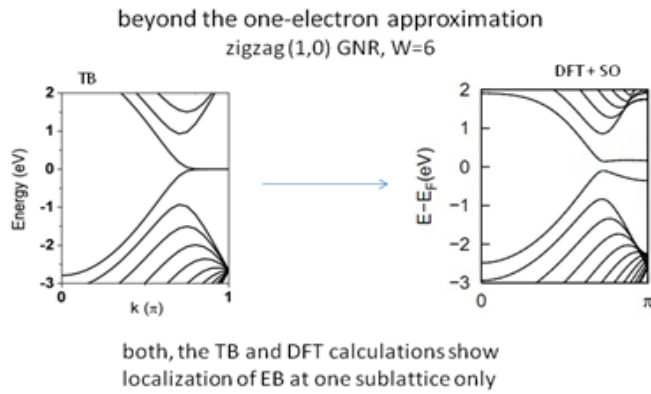


Właściwości magnetyczne

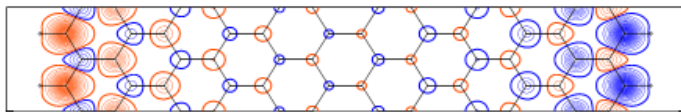
(a) wstęgi typu zygzak i Kleina

zarówno model Hubbarda jak i obliczenia DFT pokazują zniesienie degeneracji spinowej płaskiego pasma o energii E_F



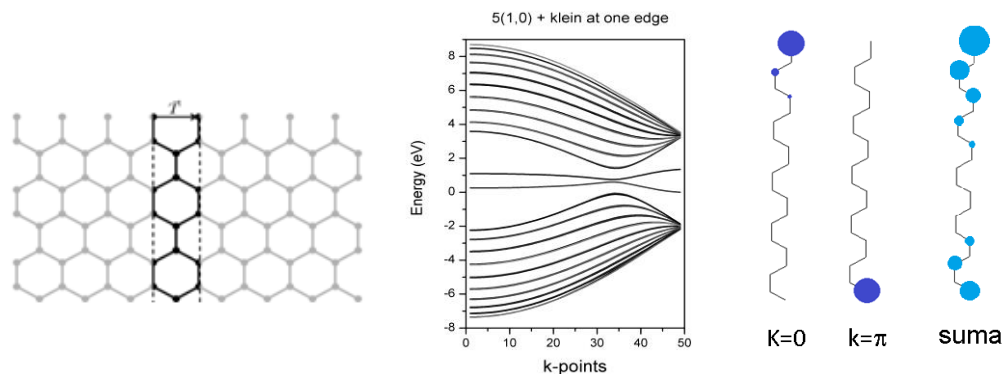
ponieważ obydwa brzegi są identyczne to rozszczepienie spinowe dla obu pasm o $E=0$ jest takie samo; w rezultacie pozostaje degeneracja spinowa

wstęga wykazuje właściwości anty-ferromagnetyczne (tylko na π -elektr.)



wstęga z jednym brzegiem Kleina jest *spontanicznie* ferromagnetyczna

tutaj degeneracja spinowa jedyne pasmo o $E=0$ jest zniesiona (pamiętamy, że w TB pasmo to jest niezdegenerowane)



Uwaga: imbalance ($|N_A - N_B| = 1$) podsieciowy w komórce element. wstęgi

twierdzenie Lieb'a o spinie stanu podstawowego układów podsieciowo niezbalansowanych

(b) QD

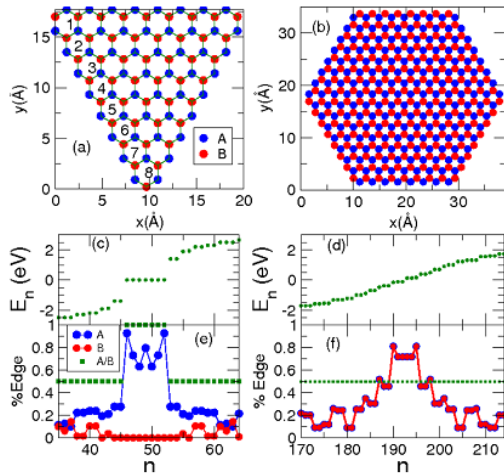


FIG. 1 (color online). (a) and (b) Atomic structure of the triangular and hexagonal graphene islands. (c),(d) Single-particle spectra for the $N = 8$ triangle (left) and hexagon (right). (e),(f) Sublattice resolved edge content and sublattice polarization.

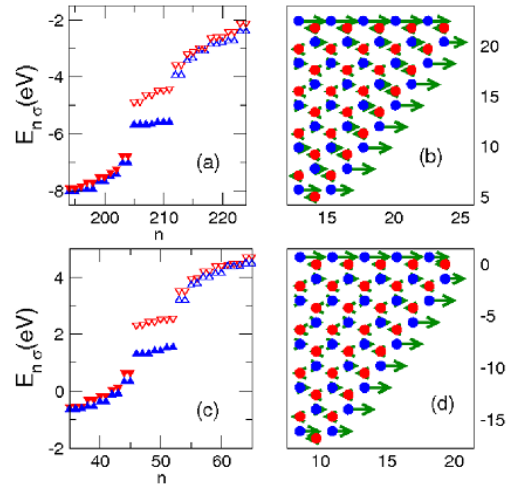
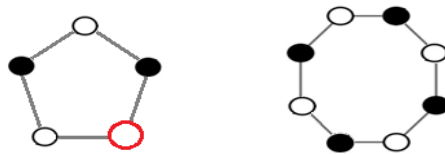


FIG. 2 (color online). Left column: self-consistent energy spectra for a graphene triangular island with $N = 8$ [Fig. 1(a)]. Closed (empty) symbols correspond to full (empty) single-particle states. Right column: local magnetization close to 1 of the corners of the triangle. Upper row: DFT calculations. Lower row: mean-field calculations with the Hubbard model. Magnetization arrows are plotted horizontally for the sake of clarity.

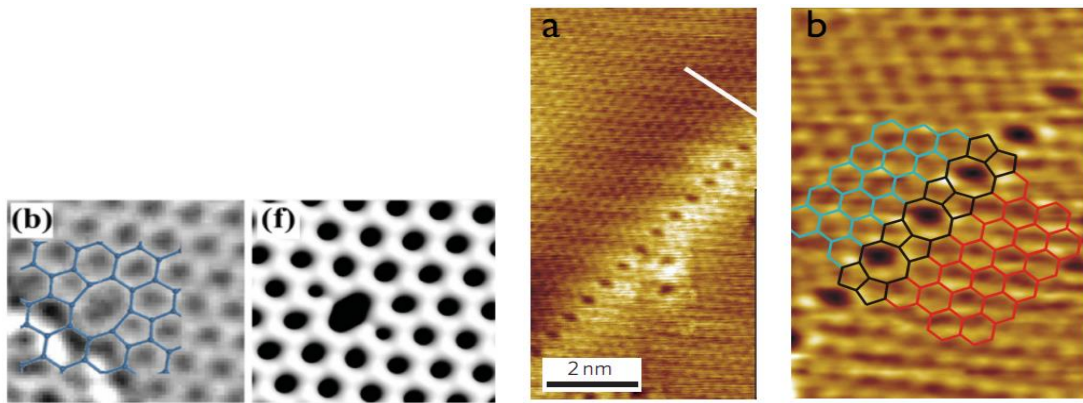
(c) Linie defektów topologicznych

Uwaga: defekty topologiczne 5-7 na ogół nie pozwalają na istnienie stanów lub płaskich pasm o $E=E_F$, gdyż silnie mieszają podsięci grafenowe, a lokalizacja na jednej tylko podsięci jest generalnym warunkiem ich istnienia

ale defekty ośmiokątne nie mieszają podsięci

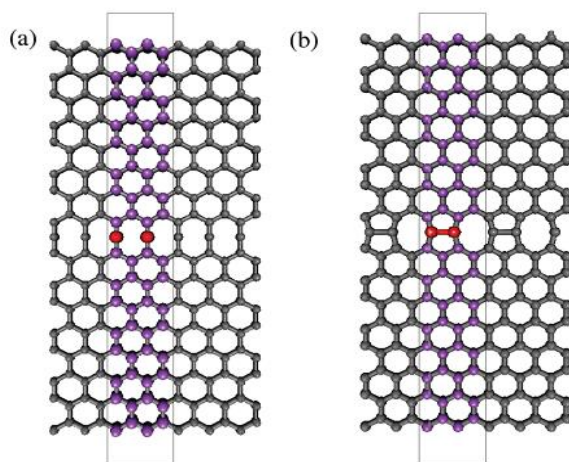


defekty ośmiokątne występują w tzw. *dwuwakansach* lub w rekonstruowanych złączach wstęp zygzak-zygzak (2010)



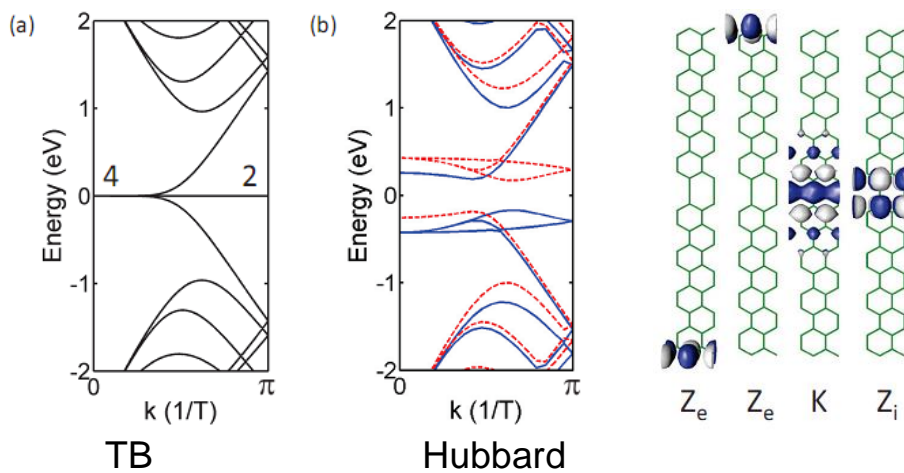
J. Lahiri et. al., Nature nanotech. 5, 2010

zbadajmy:



wstęgi rozciągają się horyzontalnie

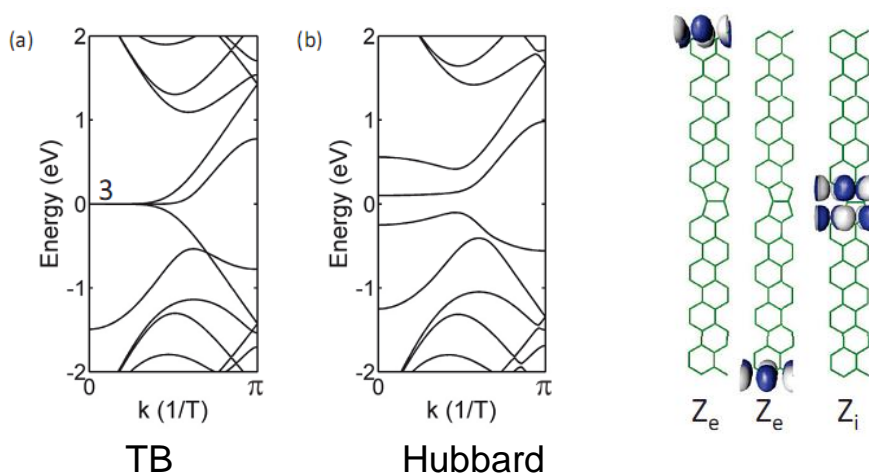
linia ośmiokątna



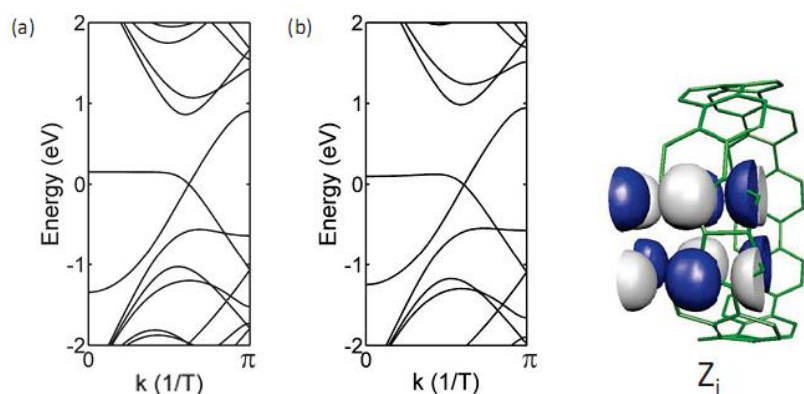
spontaniczne namagnesowanie = $2\mu_B$ / kom.elemnt.

zgodne z imbalance podsieciowym = 2

linia defektów 8-2x5



lokalizacja na ośmiokątach pozostaje po zwinięciu wstęgi w nanorurkę



(d) nanorurki w polu magnetycznym

1. Swobodny elektron w polu magnetycznym

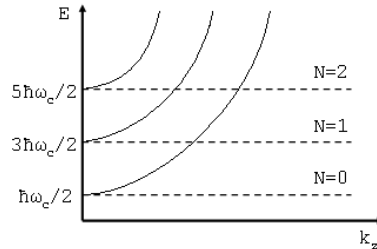
klasycznie siła Lorentza $\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B}$, rozwiązanie równań ruchu – ruch po okręgu z częstotliwością cyklotronową $\omega_c = \frac{eB}{m}$

hamiltonian $\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[-i\hbar\nabla + e\vec{A} \right]^2$, $\nabla\vec{A} = 0$ oraz $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$

cechowanie Landaua $\vec{A} = (0, Bx, 0)$, $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \left(-i\frac{\partial}{\partial y} - \frac{eBx}{\hbar} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]$

rozwiązania zagadnienia własnego dla H

$$E_N(k_z) = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$



Rys. 4.1. Poziomy energetyczne E_N w zależności od wartości k_z .

cechowanie symetryczne, $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$, $\vec{A} = \left(-\frac{1}{2} B y, \frac{1}{2} B x, 0 \right)$, dla $\mathbf{B}=(0,0,B)$

hamiltonian $\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{e}{m} (-i\hbar \nabla \cdot \vec{A}) + \frac{e^2 A^2}{2m}$,

we współrzędnych cylindrycznych (ρ, φ, z) :

$$\frac{e^2 A^2}{2m} = \frac{e^2}{2m} \frac{1}{4} B^2 (x^2 + y^2) = \frac{e^2}{8m} B^2 \rho^2, \quad l_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{e}{m} (-i\hbar \nabla \cdot \vec{A}) = \frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A} = \frac{e}{2m} \vec{p} \cdot (\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot \vec{l} = \frac{e}{2m} B l_z$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{ie\hbar}{2m} B \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2}{8m} B^2 \rho^2$$

2. Model pierścienia jedno-wymiarowego $r = \rho$ i $z = 0$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Bigg|_{\substack{r=\rho=\text{const} \\ z=0}} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{ie\hbar}{2m} B \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2}{8m} B^2 \rho^2$$

rozwiązanie zagadnienia własnego hamiltonianu można uprościć, dokonując podstawienia w hamiltonianie we współrzędnych symetrycznych bez pola magnetycznego:

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{ie\pi B \rho^2}{h} = \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

gdzie Φ jest wartością strumienia magnetycznego, danego wzorem:

$$\Phi = \pi B \rho^2 .$$

Wartość strumienia magnetycznego można wyrażać za pomocą wielkości ν , określającej ilość jednostek strumienia $\Phi_0 = \frac{h}{e}$:

$$\Phi = \nu \frac{e}{h} = \nu \Phi_0 .$$

Nowa postać hamiltonianu:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i\nu \right)^2$$

rozwiązaniem są funkcje postaci:

$$\chi = e^{im_l \varphi}$$

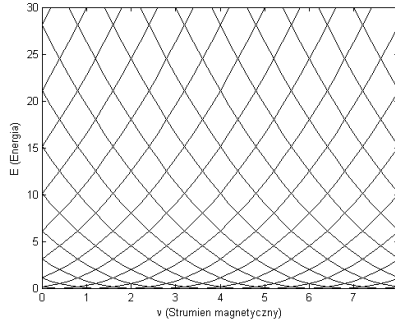
a odpowiadają jej wartości energii:

$$E_{m_l} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^2} (m_l + \nu)^2$$

gdzie m_l jest liczbą kwantową związaną z orbitalnym momentem pędu l

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(l-1)$$

wykres zależności energii E_{m_l} od wartości strumienia magnetycznego w jednost. ν



funkcje własną hamiltonianu bez pola mają postać:

$$\chi = e^{i(m_l + \nu)\varphi}$$

to oznacza, że obecność potencjału wektorowego \vec{A} dodaje do funkcji falowej czynnik fazowy postaci

$$e^{-i\nu\varphi} = e^{-i\frac{\Phi}{\Phi_0}\varphi} = e^{-iB\pi R^2\frac{e}{h}\varphi} = e^{-i2\pi AR\frac{e}{h}\varphi} = e^{-i\frac{e}{h}AR\varphi}$$

gdzie φ jest kątem związanym z przebyta drogą;

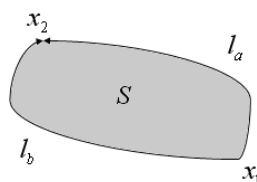
dla ruchu po okręgu $AR\varphi$ to nic innego jak całka z potencjału wektorowego po drodze łuku o kącie φ , zatem

$$e^{-i\frac{e}{h}\int_{R\varphi}\vec{A}d\vec{l}}$$

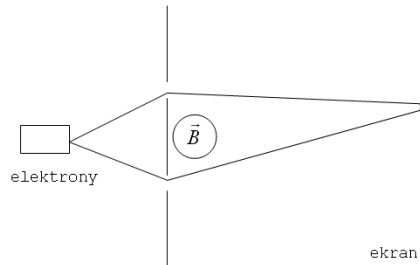
Dygresja: ponieważ w ogólności elektron może pokonywać drogę od jednego punktu do drugiego po dowolnej drodze (a nie tylko po okręgu), czynnik fazowy związany z polem magnetycznym w funkcji falowej wynosi:

$$e^{-i\frac{e}{h}\int_{l_a, l_b}\vec{A}d\vec{l}} = e^{-i\frac{e}{h}\int_S\vec{B}d\vec{S}} = e^{-i\frac{e}{h}\Phi}$$

gdzie Φ jest strumieniem magnetycznym związanym z powierzchnią S ograniczoną przez różne drogi od punktu x_1 do x_2



dodanie fazy do funkcji falowej związane jest z istnieniem potencjału wektorowego i następuje również wtedy, gdy linie pola magnetycznego **nie przecinają** bezpośrednio drogi elektronu. Efekt ten nazywa się efektem Aharonova–Bohma, można go zaobserwować w doświadczeniu jako przesunięcie prążków interferencyjnych zależne od natężenia i kierunku pola magnetycznego \vec{B} .



Podstawienie Peierlsa

W stałym polu B funkcja falowa na drodze L nabiera fazy

$$e^{-i\frac{e}{\hbar}\int_L \vec{A} d\vec{l}} = e^{-i\frac{e}{\hbar}G_R}, \text{ gdzie } G_R \text{ to „droga” od węzła } R \text{ do punktu } r$$

zatem funkcja TB

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{r} + i\frac{e}{\hbar}G_{\vec{R}}} \chi(\vec{r} - \vec{R})$$

działanie

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(\vec{k}, \vec{r}) &= \left[\frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V \right] \psi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \left[\frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V \right] e^{i\frac{e}{\hbar}G_{\vec{R}}} \chi(\vec{r} - \vec{R}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{r} + i\frac{e}{\hbar}G_{\vec{R}}} \left[\frac{1}{2m} (\vec{p} - e(\vec{A} - \nabla G_{\vec{R}}))^2 + V \right] \chi(\vec{r} - \vec{R}) \end{aligned}$$

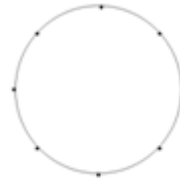
zakładając, że pole zmienia się wolno w porównaniu z $\chi(\vec{r} - \vec{R})$ oraz, że χ jest zlokalizowana głównie w punktach $\vec{r} = \vec{R}$, otrzymamy:

$$\hat{H}\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{r} + i\frac{e}{\hbar}G_{\vec{R}}} \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V \right] \chi(\vec{r} - \vec{R})$$

zatem elementy macierzowe w metodzie TB nabierają fazy

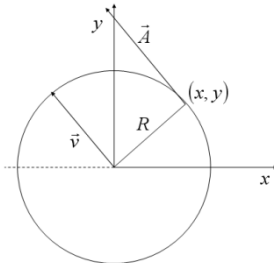
$$t \rightarrow te^{-i\frac{e}{h}(G_R - G_{R'})}, \text{ gdzie } G_{\bar{R}} - G_{\bar{R}'} = \int_{\bar{R}}^{\bar{R}'} A(\xi) d\xi$$

która niestety w ogólności zależy od drogi



rozważmy najpierw atomowy pierścień 1D ;

w cechowaniu symetrycznym $\vec{A} = \frac{1}{2} B(-y, x, 0)$, i $B = B_z$



A jest prostopadłe do R i $|A| = \text{stałe na okręgu}$,

strumień pola przechodzący przez pierścień wynosi:

$$\Phi = \int_S \vec{B} d\vec{s} = \oint_L \vec{A} d\vec{l} = AL$$

całka w czynniku fazowym między kolejnymi węzłami wynosi więc:

$$\int_i^{i+1} \vec{A} d\vec{l} = \int_i^{i+1} AR d\varphi = \frac{\Phi}{L} R\varphi$$

gdzie przez φ to stały kąt zawarty pomiędzy sąsiednimi $\varphi = \int_i^{i+1} d\varphi$

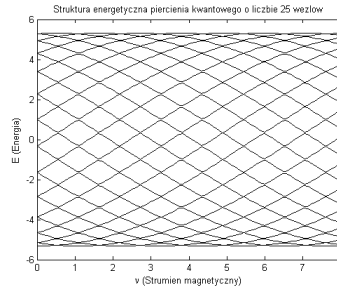
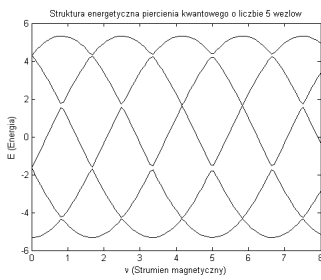
czynnik fazowy upraszcza się do postaci:

$$e^{i\frac{e}{h} \int_i^{i+1} \vec{A} d\vec{l}} = e^{-\frac{2\pi ie}{h} \frac{\Phi}{L} R\varphi} = e^{-\frac{2\pi ie}{h} \frac{v\Phi_0}{2\pi R} R\varphi} = e^{-i v \varphi}$$

dla przykładowego pierścienia o 6-ciu węzłach macierz TB

$$H = \begin{bmatrix} 0 & te^{-i\nu\varphi} & 0 & 0 & 0 & te^{i\nu\varphi} \\ te^{i\nu\varphi} & 0 & te^{-i\nu\varphi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & te^{i\nu\varphi} & 0 & te^{-i\nu\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & te^{i\nu\varphi} & 0 & te^{-i\nu\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & te^{i\nu\varphi} & 0 & te^{-i\nu\varphi} \\ te^{-i\nu\varphi} & 0 & 0 & 0 & te^{i\nu\varphi} & 0 \end{bmatrix}$$

a widma energii (dla 5-ciu i 25 węzłów)



zauważmy podobieństwo do przypadku ciągłego.

W przypadku nanorurek achiralnych liczy się tylko droga kątowna od węzła do węzła i prostopadła do osi nanorurki

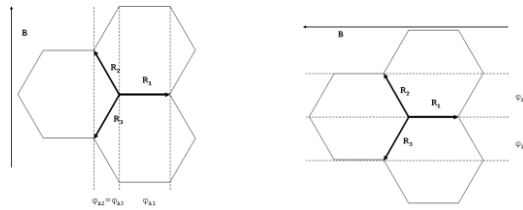


tabela kątów do najbliższych sąsiadów

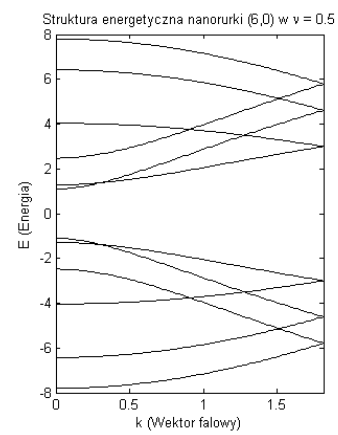
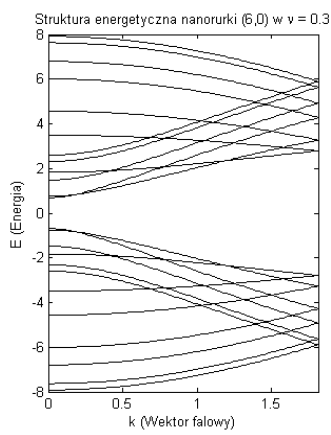
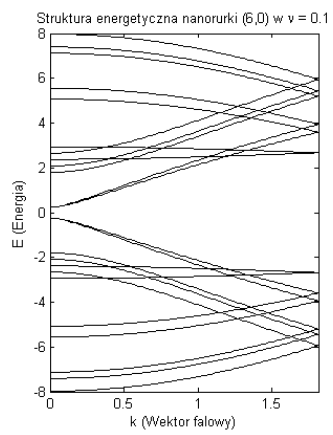
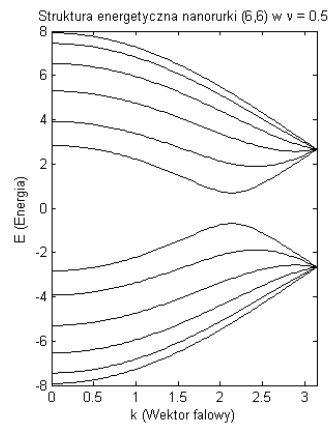
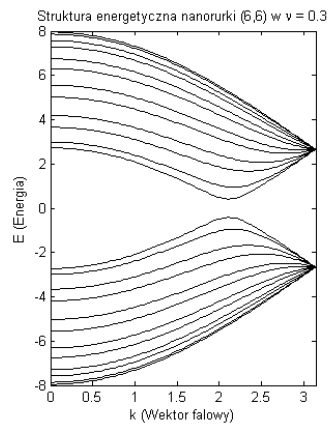
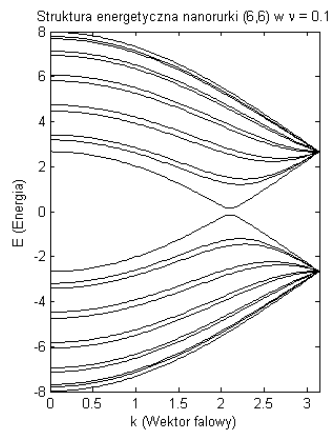
| Fotelowe (n,n) | |
|-------------------|----------------------------------|
| \mathbf{R}_1 | $\varphi_{A1} = \frac{2\pi}{3n}$ |
| \mathbf{R}_2 | $\varphi_{A2} = -\frac{\pi}{3n}$ |
| \mathbf{R}_3 | $\varphi_{A3} = -\frac{\pi}{3n}$ |
| Zygzakowate (n,0) | |
| \mathbf{R}_1 | $\varphi_{Z1} = 0$ |
| \mathbf{R}_2 | $\varphi_{Z2} = \frac{\pi}{n}$ |
| \mathbf{R}_3 | $\varphi_{Z3} = -\frac{\pi}{n}$ |

ostatecznie dla fotelowych

$$E_q^A(\vec{k}) = \pm t \left[1 + 4 \cos\left(\frac{(q-\nu)\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) \right]^{1/2}$$

a dla zygzakowatych

$$E_q^Z(\vec{k}) = \pm t \left[1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}ka}{2}\right) \cos\left(\frac{(q-\nu)\pi}{n}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{(q-\nu)\pi}{n}\right) \right]^{1/2}$$



pole magnetyczne otwiera i zamyka przerwę energetyczną....