

# Grafen Dichalkogenki metali przejściowych

Alina Mreńca-Kolasińska

13 lutego 2022, ostatnia aktualizacja 18 listopada 2024

# Plan

1

## Grafen

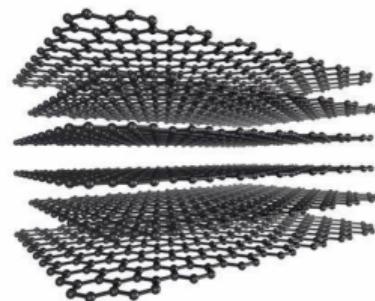
- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Struktura grafenu
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
- Przykładowe własności
- Stosowanie Kwanta

2

## Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

# Od grafitu do grafenu



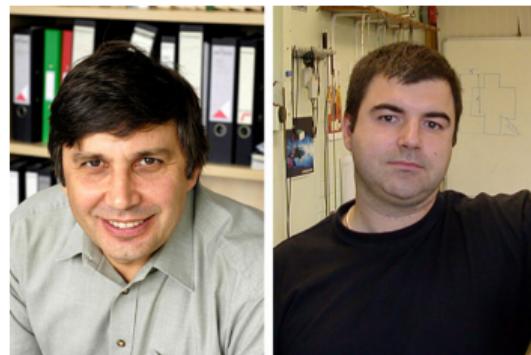
grafit.<sup>1</sup>

- W warstwie: wiązania kowalencyjne (silne)
- Między warstwami: słabe wiązania van der Waalsa
- Grafen: teoretycznie opisany w [P.R.Wallace, \*The Band Theory of Graphite\*, 1947](#)

---

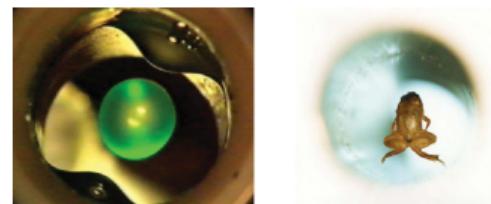
<sup>1</sup>[www.quora.com](http://www.quora.com)

# Izolacja grafenu



Andre Geim, Konstantin Novoselov; University of Manchester.<sup>2</sup>

- Grafen pierwszy raz wyizolowany w 2004
- Nagroda Nobla: 2010
- Geim jest również laureatem „IgNobel Award” (1997).



Lewitująca woda i żaba w polu magnetycznym <sup>a</sup>

---

<sup>a</sup>A.K.Geim Nobel Lecture: Random walk to graphene.

<sup>2</sup>[www.csmonitor.com](http://www.csmonitor.com)

# Plan

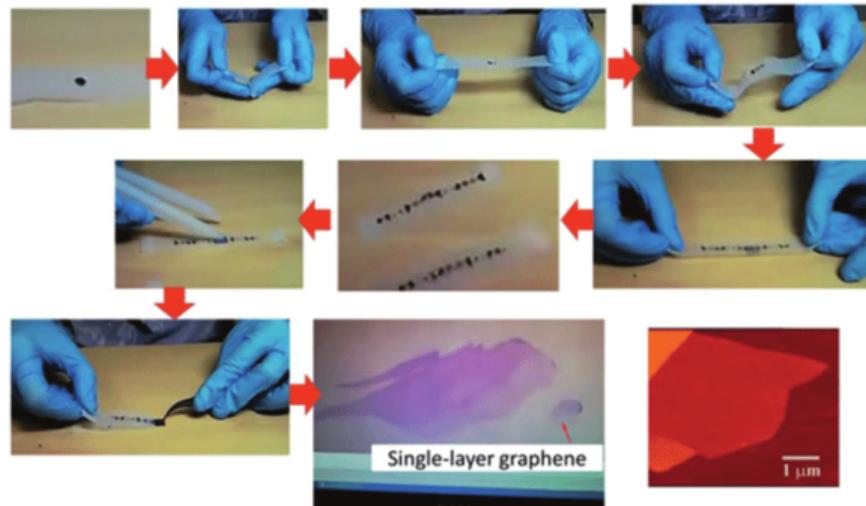
## 1 Grafen

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Struktura grafenu
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
- Przykładowe własności
- Stosowanie Kwanta

## 2 Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

## Eksfoliacja mechaniczna (ang. mechanical exfoliation)



- Inaczej: rozszczepianie mikromechaniczne (ang. micromechanical cleavage)<sup>3</sup>.
- Grafit (Highly oriented pyrolytic graphite, HOPG) umieszczany jest na taśmie klejącej.
- Wielokrotnie zginając taśmę, grafit rozprowadzany jest w coraz cieńsze warstwy.
- Pojedyncze warstwy (grafen) można znaleźć pod mikroskopem, warstwa przenoszona na wafel krzemowy,
- Metoda przydatna do produkcji próbek do badań, ale nie do masowej produkcji.

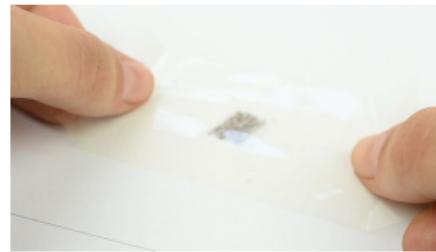
<sup>3</sup>S. Bhoyate et al, Broadening the horizon for supercapacitor research via 2D material systems, Nanoscience: Volume 6, The Royal Society of Chemistry (2020)

# Eksfoliacja w domu<sup>4</sup>

- Tworzymy warstwę grafitu



- Przykładamy taśmę klejącą do grafitu i delikatnie odklejamy. Kilka warstw grafitu jest na taśmie.
- Kilkakrotnie zginamy taśmę rozprowadzając grafit w coraz cieńsze warstwy

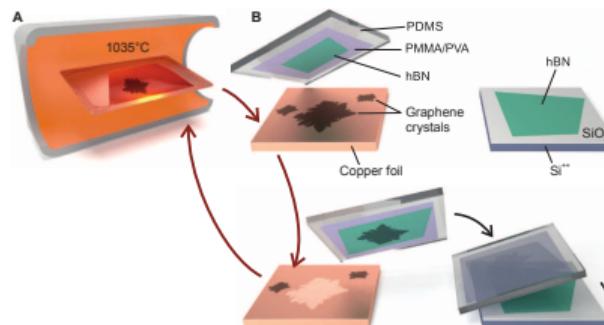
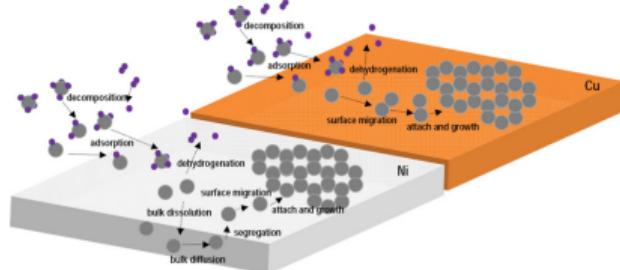


- Po kilku powtórzeniach powstaje cienka warstwa.

<sup>4</sup>[www.wikihow.com/Make-Graphene](http://www.wikihow.com/Make-Graphene)

# Chemiczne osadzanie z fazy gazowej (ang. chemical vapor deposition, CVD)

- Do komory reakcyjnej wprowadzane są gazowe prekursory.
- Na ogrzany podłożu zachodzą ich reakcje i rozkład na atomy / cząsteczki pożadanego materiału.
- Przypadek grafenu<sup>5</sup>
  - Osadzanie na powierzchni miedzi,
  - Źródłem atomów węgla może być metan ( $\text{CH}_4$ ),
  - Gazy nośne ułatwiające osadzanie i reakcje na podłożu (wodór, argon i inne gazy szlachetne.)
  - Wodór wspomaga osadzanie na podłożu Cu przez jego korozję.
  - Grafen jest następnie przenoszony z Cu na inne podłożę (np.  $\text{SiO}_2$ , hBN (heksagonalny azotek boru)), np. przy pomocy polimeru lub nawet bezpośrednio hBN.<sup>6</sup>



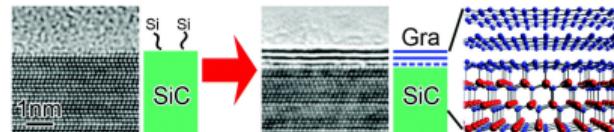
<sup>5</sup>Muñoz, R. and Gómez-Aleixandre, C., Review of CVD Synthesis of Graphene. Chem. Vap. Deposition, 19, 297 (2013).

<sup>6</sup>Banszerus et al., Ultrahigh-mobility graphene devices from chemical vapor deposition on reusable copper. Sci Adv. 1, 6; (2015)

# Inne metody

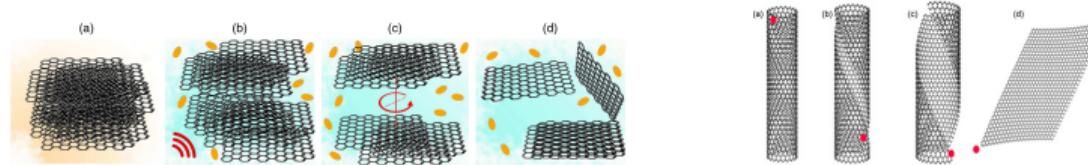
- Wzrost epitaksjalny na SiC (węgliku krzemu)

- Podłoże SiC jest ogrzewane, w wysokiej temperaturze ( $>1100^{\circ}\text{C}$ ) Si ulega desorpcji, powstaje kilka warstw grafenu.<sup>7</sup>



- Eksfoliacja w fazie ciekłej (ang. Liquid-phase exfoliation, LPE)

- Grafit lub tlenek grafenu w roztworze, pod wpływem reakcji chemicznych i „rozbijania” ultradźwiękami, rozwarstwia się.<sup>8</sup>



- Rozpinanie nanorurek węglowych<sup>9</sup>,

- i wiele innych

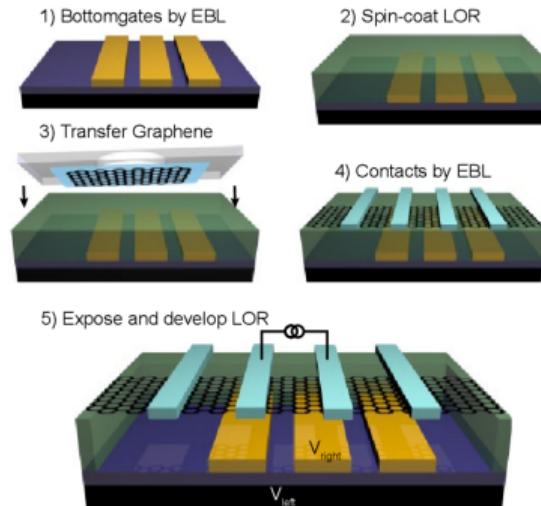
<sup>7</sup>Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 3501 (2014).

<sup>8</sup>J. of Nanophotonics, 10(1), 012525 (2016).

<sup>9</sup>Applied Catalysis A: General 371, 22 (2009)

# Zawieszony grafen<sup>10</sup>

- Grafen jest naniesiony na warstwę organicznego polimeru (LOR – lift-off resist).
- Polimer jest następnie rozpuszczany, elektrody i grafen są nienaruszone.
- Próbki tak wytworzzone cechuje wysoka jakość.
- Jednak grafen jest w dużej odległości od dolnych bramek (indukują gładko zmienny potencjał elektrostatyczny).



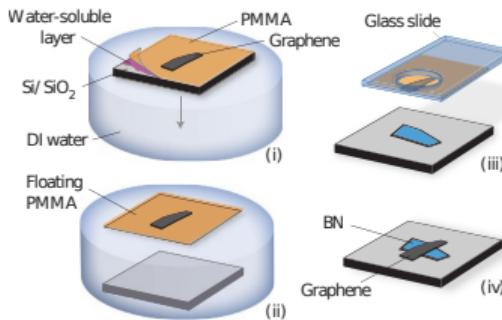
Etapy wytwarzania zawieszonego grafenu.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>P. Rickhaus et al., Nat. Commun. 4, 2342 (2013).

<sup>10</sup>N. Tombros et al., J. Appl. Phys., 109 (9) (2011).

# Grafen między warstwami hBN<sup>11</sup>

- Heksagonalny azotek boru – świetny materiał na podłoże.
  - Duża przerwa energetyczna; obojętny chemicznie; nie modyfikuje relacji dyspersji grafenu.
  - Stała sieci różni się o 1.7% od stałej sieci grafenu.
  - Płaska struktura, zapobiega pofalowaniu naniesionego grafenu.
- Próbki o wysokiej mobilności nośników ładunku
- Pod wieloma względami lepszej jakości próbki niż na podłożu SiO<sub>2</sub>.



## Etapy enkapsulacji grafenu w hBN

- (i) eksfoliacja grafenu na SiO<sub>2</sub> z warstwą PMMA i rozpuszczalnego w wodzie polimeru
- (ii) rozpuszczenie polimeru i wyłowie PMMA z grafenem
- (iii) przeniesienie grafenu na hBN
- (iv) rozpuszczenie PMMA

<sup>11</sup>C. R. Dean et al., Nat. Nano. 5, 722 (2010).

# Plan

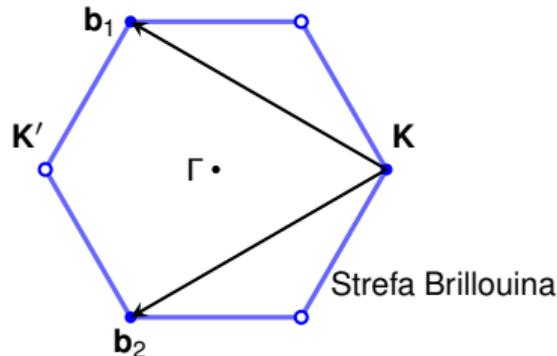
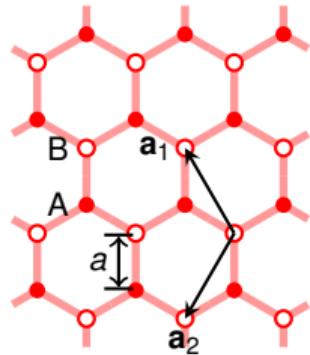
## 1 Grafen

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- **Struktura grafenu**
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
- Przykładowe właściwości
- Stosowanie Kwanta

## 2 Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

# Sieć prosta i odwrotna grafenu



- Wektory sieci prostej

$$\mathbf{a}_1 = a\sqrt{3} \left( -\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = a\sqrt{3} \left( -\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right).$$

- Podsieć A i B

$$\tau_A = (0, 0), \quad \tau_B = a(0, 1).$$

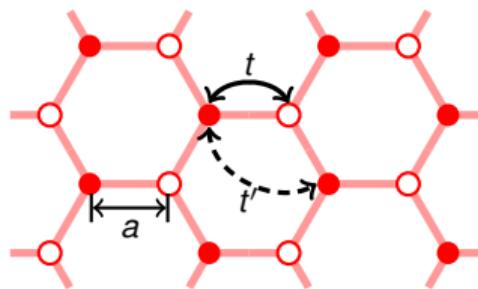
- Wektory sieci odwrotnej (spełniają warunek  $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ ):

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{3a} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{3a} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right).$$

# Struktura pasmowa

- Struktura pasmowa grafenu<sup>12</sup>

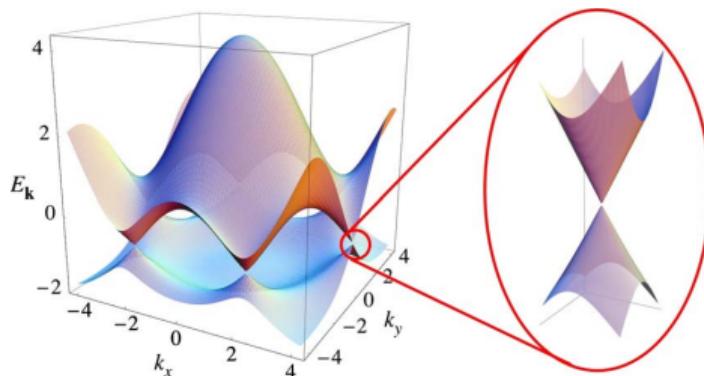
$$E(\mathbf{k}) = \pm |g(\mathbf{k})|t - f(\mathbf{k})t'$$
$$f(\mathbf{k}) = 2 [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))],$$
$$g(\mathbf{k}) = 1 + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2).$$



- $t$  – całka przeskoku (ang. hopping integral) między najbliższymi sąsiadami
- $t'$  – całka przeskoku między drugimi sąsiadami

<sup>12</sup>A. H. Castro Neto et al., Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).

# Rozwinięcie wokół punktów **K**



- W okolicy punktu **K**, relacja dyspersji jest liniowa.
- Rozwinięcie rów. (1) dla małego **q** w okolicy punktu **K**: dla  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$ :

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx \pm \frac{3}{2} t a |\mathbf{q}| + \mathcal{O}((q/K)^2).$$

- $\frac{3}{2} t a = \hbar v_F$ ,  $v_F$  – prędkość Fermiego w grafeniu, ok.  $10^6$  m/s
- Dla porównania: przybliżenie masy efektywnej w półprzewodnikach cechuje kwadratowa zależność od  $q$ :  $E(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$
- Liniowa relacja dyspersji ma wiele ciekawych skutków.

# Plan

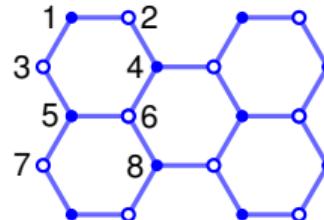
## 1 Grafen

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Struktura grafenu
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu**
- Przykładowe właściwości
- Stosowanie Kwanta

## 2 Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

# Przybliżenie ciasnego wiązania w praktyce



- W praktyce najczęściej uwzględnia się tylko pierwszych najbliższych sąsiadów
  - Uwzględnienie drugich sąsiadów ma znaczenie w obecności naprężenia.
- Hamiltonian w formalizmie drugiej kwantyzacji

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t c_i^\dagger c_j + \sum_j U(\mathbf{r}_j) c_j^\dagger c_j,$$

- Zapis macierzowy

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_1) & -t & -t & 0 & \dots \\ -t & U(\mathbf{r}_2) & 0 & -t & \dots \\ -t & 0 & U(\mathbf{r}_3) & 0 & \dots \\ 0 & -t & 0 & U(\mathbf{r}_4) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

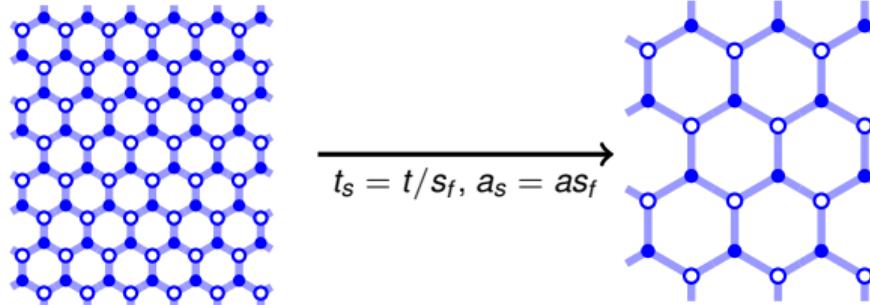
# Skalowany model ciasnego wiązania<sup>13</sup>

- Często interesuje nas przypadek niskich energii (blisko punktu Diraca), np. w transporcie kwantowym.
  - Relacja dyspersji jest liniowa.

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx \pm \frac{3}{2} ta|\mathbf{q}|.$$

- Trik:

$$ta \rightarrow \frac{t}{s_f} s_f a.$$

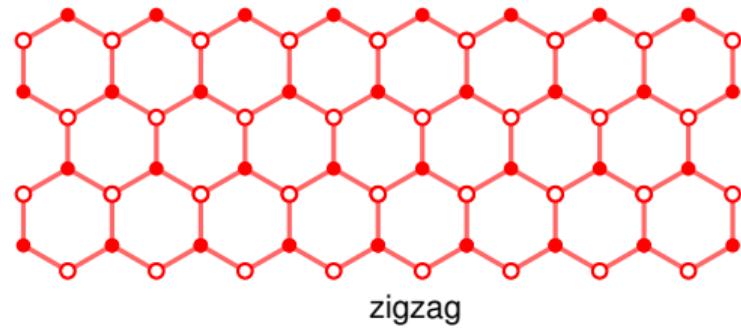
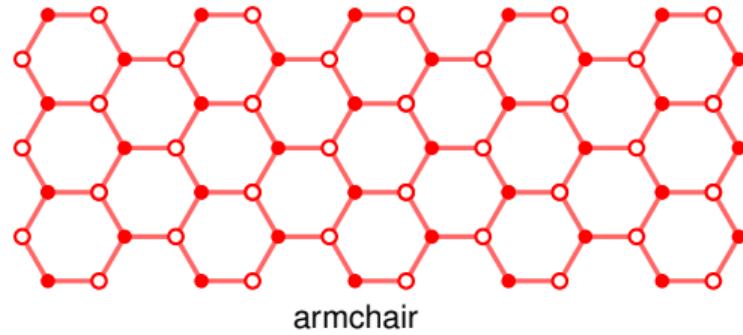


Warunki stosowalności:

- Przybliżenie liniowe działa:  $s_f \ll \frac{3t\pi}{|E_{max}|}$ , dla  $|E_{max}| \lesssim 0.4$  eV,  $s_f \ll 66$ .
- W polu magnetycznym:  $s_f \ll \frac{\sqrt{\hbar/eB}}{a} \approx \frac{180}{\sqrt{B}}$

<sup>13</sup>Liu, M.-H. et al., Phys. Rev. Lett. 114, 036601 (2015).

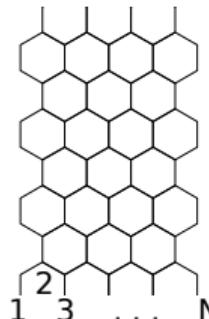
# Wstępki grafenowe



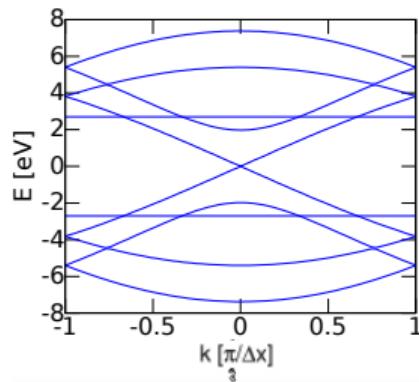
- Wstępka armchair: metaliczna lub półprzewodnikowa
- Wstępka zigzag: metaliczna

# Wstępki grafenowe – relacja dyspersji

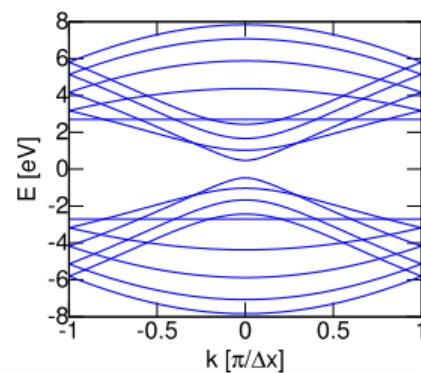
armchair



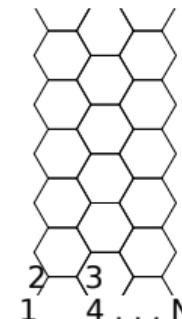
$N=3k-1$ ,  
metallic



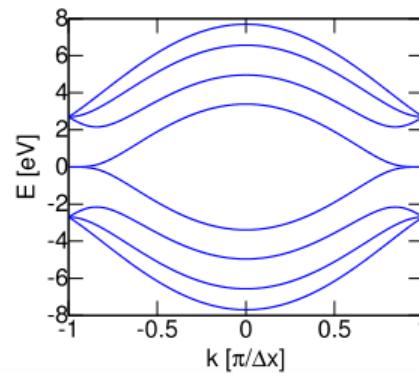
$N=3k, 3k+1$   
semiconducting



zigzag



all  $N$ : metallic



# Plan

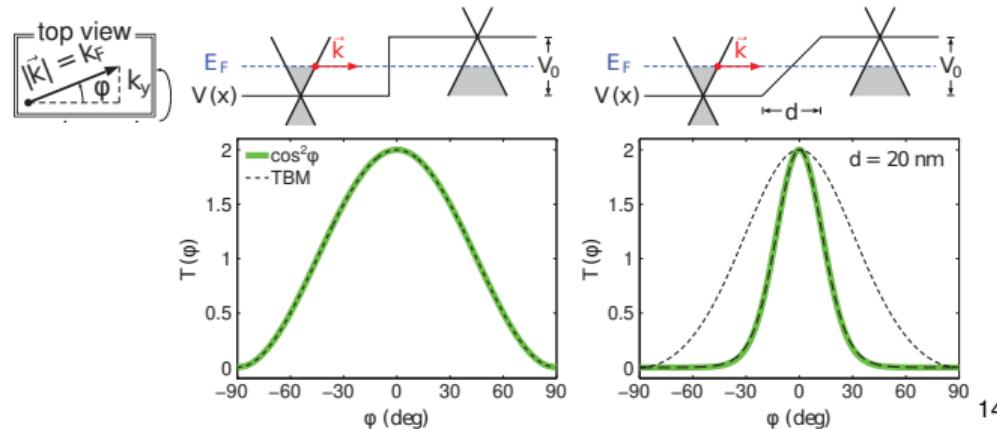
## 1 Grafen

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Struktura grafenu
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
- Przykładowe właściwości**
- Stosowanie Kwanta

## 2 Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

# Tunelowanie Kleina



14

- Hamiltonian dla  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$  można zapisać

$$H = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q},$$

- Analogia do równania Diraca.
  - $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  są macierzami Pauliego (działające na tzw. pseudospin, czyli amplitudę na punktach A, B sieci).
  - Elektryny i dziury w grafeniu są fermionami Diraca.
- 
- Zjawisko tunelowania fermionów Diraca przez skok potencjału
    - Przy kącie padania normalnym do schodka potencjału transmisja z prawdopodobieństwem 100% ( $T(0)=2$  ze względu na spin).

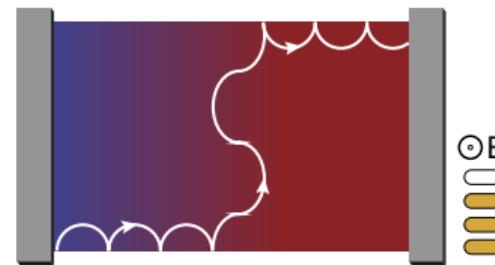
<sup>14</sup>M.-H. Liu et al, Phys. Rev. B 85, 085406 (2012).

## Stany wężowe

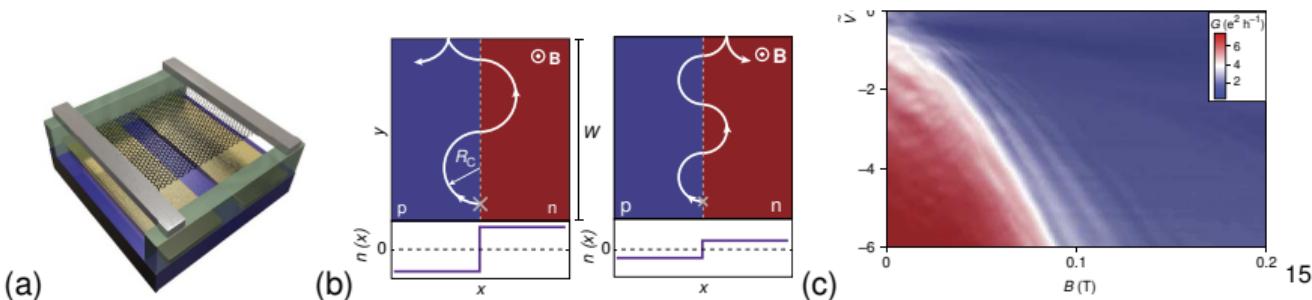
- Elektrony po stronie n złącza p-n, dziury po stronie p (zatem ładunek zmienia znak).
- Układ znajduje się w zewnętrznym polu magnetycznym  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$
- Tunelujące przez złącze fermiony oddziałują z polem magnetycznym. Klasycznie siła Lorentza

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad q = \pm 1, \text{(elektron lub dziura)}$$

- Trajektoria wzdłuż złącza zmienia kierunek przy każdym przekroczeniu granicy n-p



# Stany wężowe



(a) Próbka: zawieszony grafen nad podwójną bramką indukującą złącze n-p. (b) Schematyczne trajektorie dla różnych napięć (a więc i różnych energii i promieni cyklotronowych). (c) Transmisja w funkcji  $B$  i napięcia.

- Promień cyklotronowy orbity zależy od energii i  $B$ :

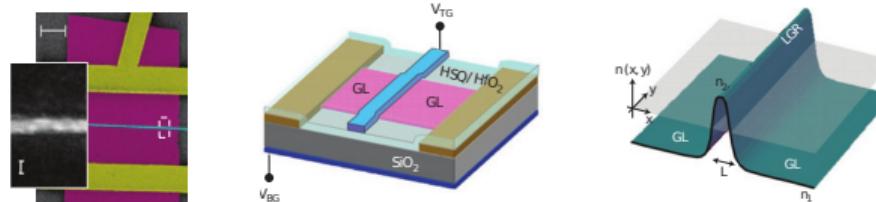
$$R_c = \frac{\hbar k}{eB} = \frac{E}{eB} = \frac{\hbar\sqrt{n\pi}}{eB}$$

- $n$  to gęstość ładunku (wyrażona w  $\text{cm}^{-2}$ ).
- $n$  i energię fermionów  $E$  można kontrolować przez zmianę napięcia na bramce  $\tilde{V}$

- Zależnie od wartości  $B$  i napięcia trajektoria kończy się po stronie  $n$  lub  $p$ .

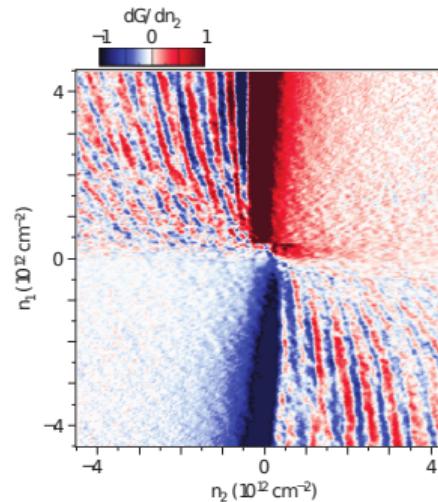
<sup>15</sup>Rickhaus, P. et al., Nat. Commun. 6, 6470 (2015). <https://doi.org/10.1038/ncomms7470>.

# Oscylacje Fabry-Pérota

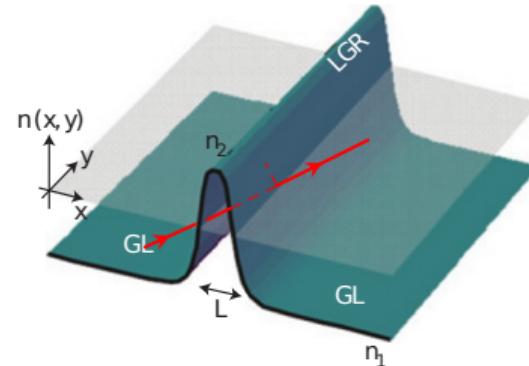
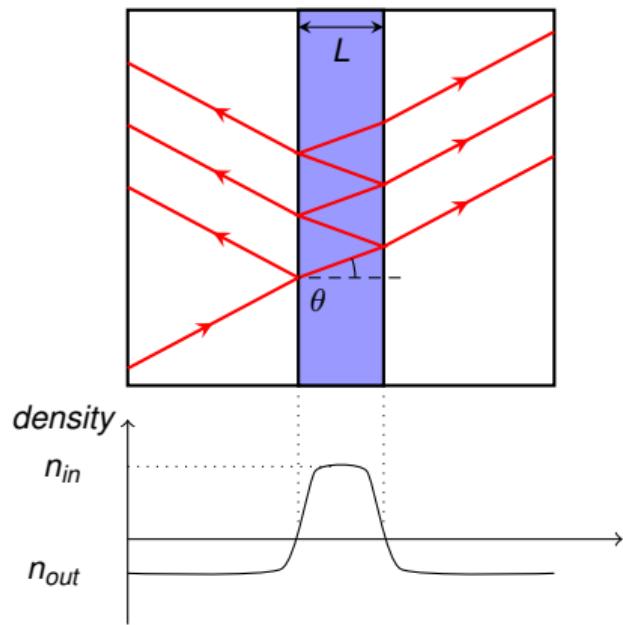


Schematy urządzenia i profil gęstości elektronowej

- Skan przewodności w funkcji napięć na bramce dolnej i wąskiej bramce górnej
- Napięcia na bramkach można przeliczyć na gęstości elektronowe
- Widoczne oscylacje obszarach  $n_1 \cdot n_2 < 0$

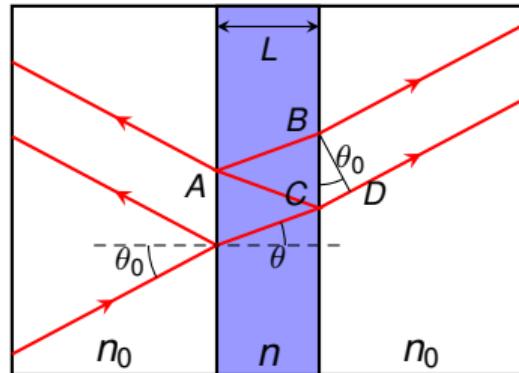


# Interferometr Fabry-Pérota



Wielokrotne odbicie światła pomiędzy zwierciadłami

# Interferencja Fabry-Pérota



Długość ścieżki:  $|AB| = L / \cos(\theta)$ ,  $|CD| = L_0$

Różnica faz:

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) 2n \frac{L}{\cos(\theta)} - \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_0 L_0 = \\ \dots n \sin(\theta) = n_0 \sin(\theta_0) \text{ (Snell's law)}$$

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) 2nL \left( \frac{1}{\cos(\theta)} - \frac{\sin^2(\theta)}{\cos(\theta)} \right) = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) 2nL \cos(\theta) = 2kL \cos(\theta)$$

Transmisja 100% dla  $\theta = 0$ , dla wyższych szybko spada  $\Rightarrow$  różnica faz  $\Delta\Phi \approx 2kL$

# Plan

## 1 Grafen

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Struktura grafenu
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
- Przykładowe własności
- **Stosowanie Kwanta**

## 2 Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

# Grafen i Kwant

```
p = SimpleNamespace(t0=-eV_au(3.0), W=nm_au(12.9), L=nm_au(15))
sys, leads = mlg(p=p)
sys = sys.finalized()
```

Właściwa funkcja:

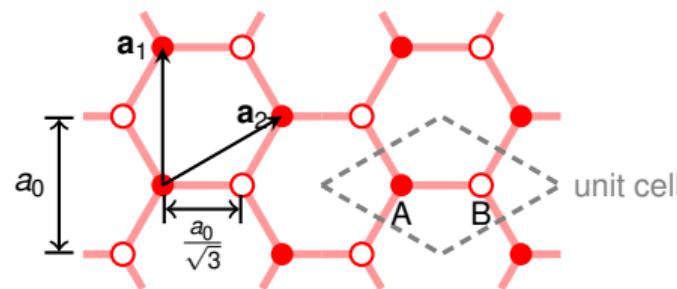
```
def mlg(p):
    def rect(pos):
        x, y = pos
        return x < p.L and x > -p.L+0.1 and y < p.W and y > -p.W

    def onsite( site ) :
        (x, y) = site.pos
        return ...

    ...
```

# Grafen i Kwant

Przykład generowania wstępki o brzegu typu armchair

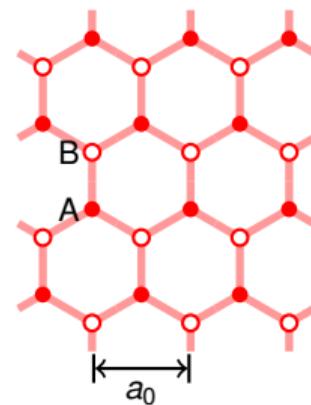


Sieć grafenu wraz z zaznaczonymi wektorami sieci i atomami bazy.

```
def mlg(p):  
    ...  
    a0 = nm_au(0.25)  
    sin_30 = np.sin(30*np.pi/180)  
    cos_30 = np.cos(30*np.pi/180)  
  
    graphene = kwant.lattice.general([(0, a0), (cos_30*a0, sin_30*a0)], # wektory sieci  
                                      [(0, 0), (a0/np.sqrt(3), 0)], norbs=1) # atomy A, B bazy  
    a, b = graphene.sublattices  
  
    sys = kwant.Builder()
```

# Grafen i Kwant

Przykład generowania sieci grafenu:

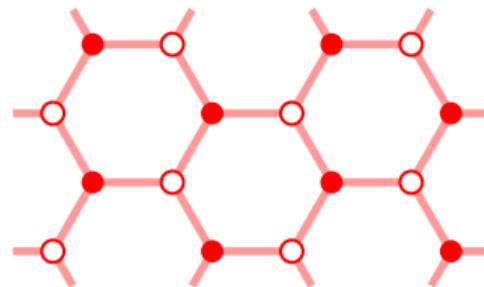


```
a0 = nm_au(0.25)
graphene = kwant.lattice.honeycomb(a0, norbs=1)
a, b = graphene.sublattices
```

Prościej, ale zawsze poziomy brzeg ma typ zigzag

# Grafen i Kwant

## Całki przeskoku



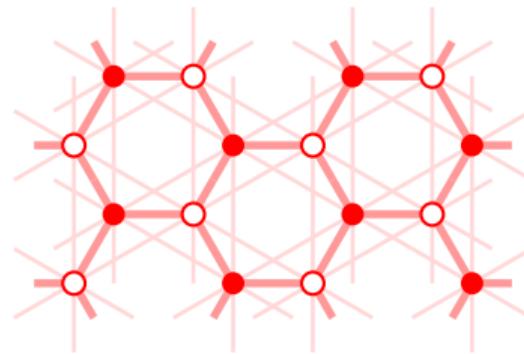
```
def nn_hopping(site1, site2, p):
    return p.t0

sys[graphene.neighbors()] = nn_hopping
```

Inny sposób

# Grafen i Kwant

## Całki przeskoku



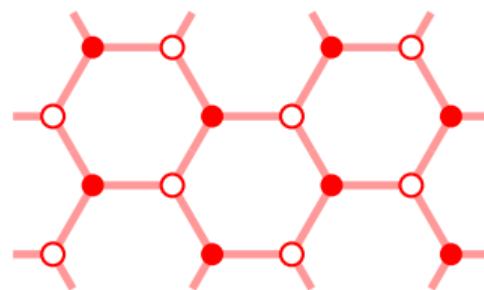
```
def nn_hopping(site1, site2, p):
    return p.t0

sys[graphene.neighbors()] = nn_hopping
sys[graphene.neighbors(2)] = p.t1
```

Inny sposób

# Grafen i Kwant

## Całki przeskoku

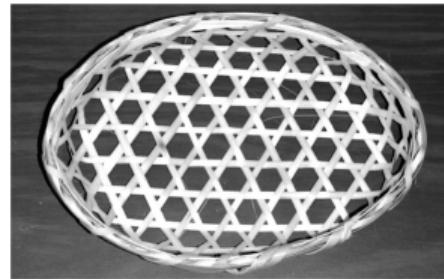


```
def nn_hopping(site1 , site2 , p):
    return p.t0

sys[graphene.neighbors ()] = nn_hopping
sys[graphene.neighbors (2)] = p.t1
sys[graphene.shape(rect , (0 , 0))] = onsite # funkcja opisujaca profil potencjalu
```

Inny sposób

## Kafelkowanie trójheksagonalne (ang. *trihexagonal tiling*), tzw. sieć kagome

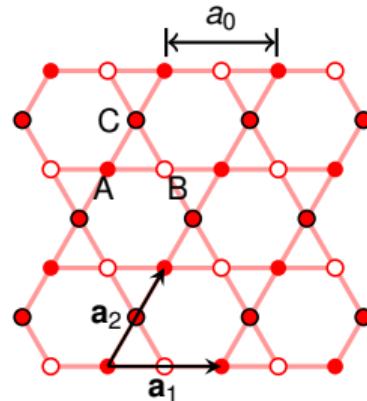


Kosz ze wzorem kagome<sup>16</sup>

<sup>16</sup>Wikipedia

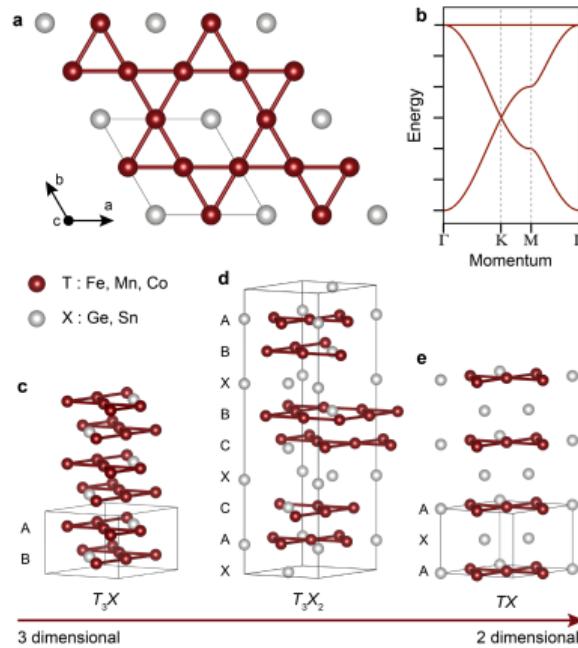
# Kwant: sieć kagome

Przykład generowania sieci kagome:



```
a0 = 1  
kagome = kwant.lattice.kagome(a0, norbs=1)  
a, b, c = kagome.sublattices  
sys[kagome.neighbors()] = nn_hopping
```

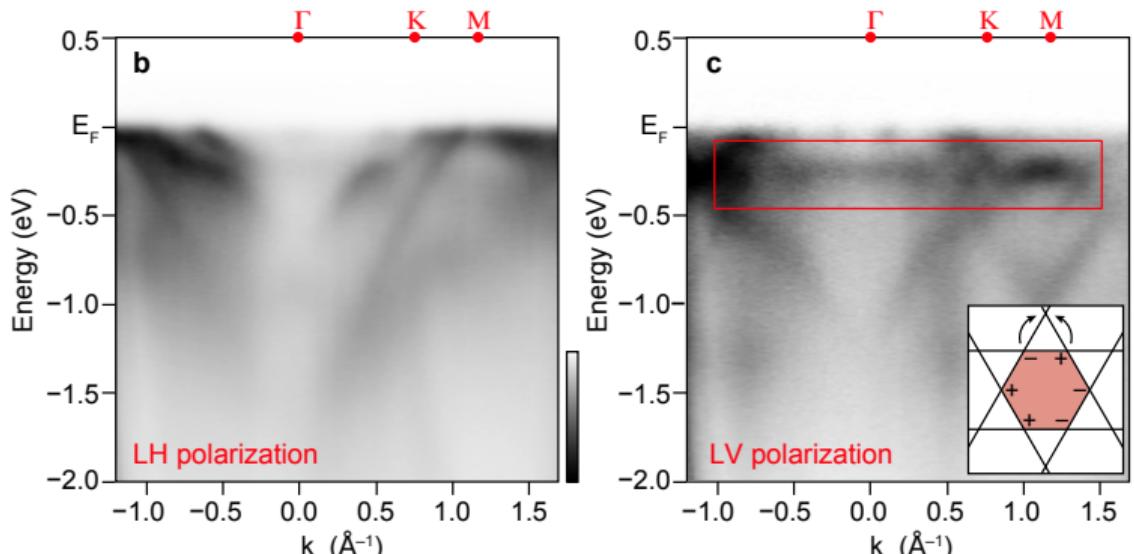
# Przykład: kagome metal FeSn



(e) FeSn; komórka elementarna oznaczona liniami. <sup>17</sup>

<sup>17</sup> Kang, M., et al., *Dirac fermions and flat bands in the ideal kagome metal FeSn*, Nat. Mater. 19, 163–169 (2020).

# Przykład: kagome metal FeSn, struktura pasmowa



(c) Struktura pasmowa z widocznym płaskim pasmem.

# Plan

## 1 Grafen

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Struktura grafenu
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
- Przykładowe własności
- Stosowanie Kwanta

## 2 Dichalkogenki metali przejściowych

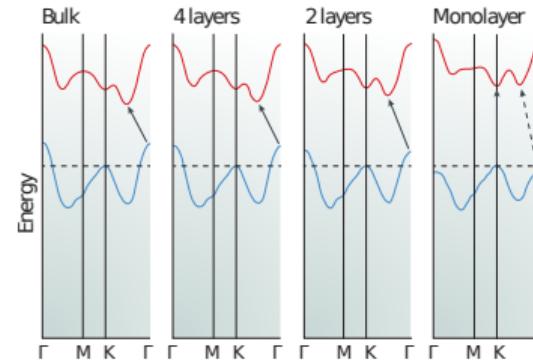
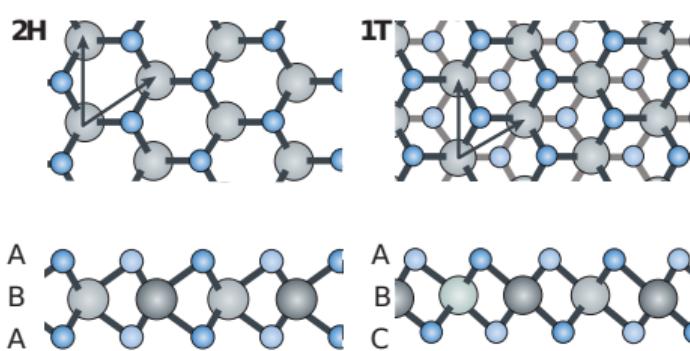
- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

## Podstawowe informacje

Ogólny wzór:  $M X_2$

- M – metal
- X – chalkogen (pierwiastek 16 grupy układu okresowego: tlen, siarka, selen, tellur, polon i liwermor).
- przykłady: M = W, Mo; X = Se, S
- Półprzewodniki o przerwie energetycznej (prostej lub skośnej) rzędu 1 – 2 eV. Zakres światła widzialnego

# Struktura



- Silnie związane warstwy X – M – X, które są słabo związane oddziaływaniami van der Waalsa
- Lity TMDC tworzy ułożenie 2H (1T zależnie od pierwiastków). Pojedyncza warstwa ma strukturę heksagonalną
- Przerwa energetyczna jednowarstwowego MoS<sub>2</sub> staje się prosta.

# Plan

## 1 Grafen

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Struktura grafenu
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
- Przykładowe własności
- Stosowanie Kwanta

## 2

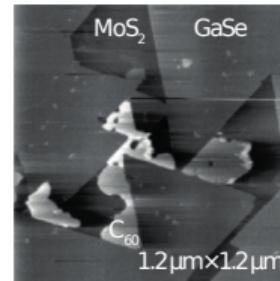
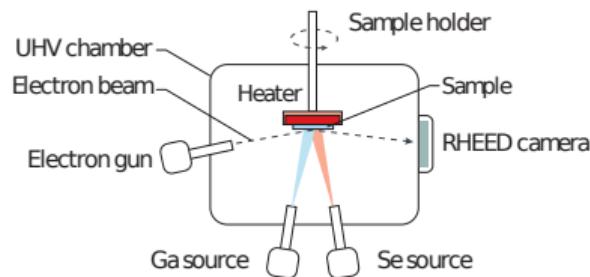
## Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

# Metody wytwarzania

- Eksfoliacja mechaniczna (oddzielanie pojedynczej warstwy z litego materiału)
- Epitaksja z wiązki molekularnej

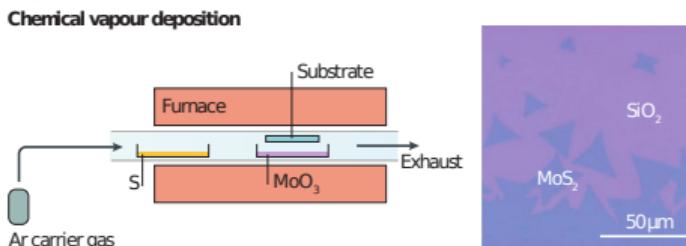
Molecular beam epitaxy



MBE: pierwiastki czystych materiałów są napylane w wysokiej próżni. Przykład GaSe na podłożu MoS<sub>2</sub>.

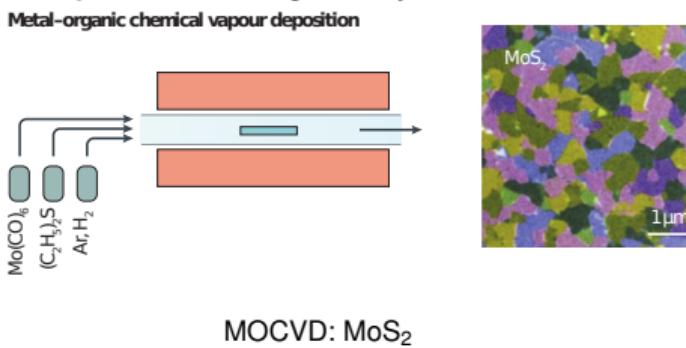
# Metody wytwarzania c.d.

- Chemiczne osadzanie z fazy gazowej



CVD: nie wymaga ultrawysokiej próżni. Przykład: MoO<sub>3</sub> i S w wysokiej temperaturze reagują – powstaje MoS<sub>2</sub> na podłożu SiO<sub>2</sub>. Powstają domeny o różnej orientacji.

- Epitaksja z fazy gazowej z użyciem związków metaloorganicznych



# Plan

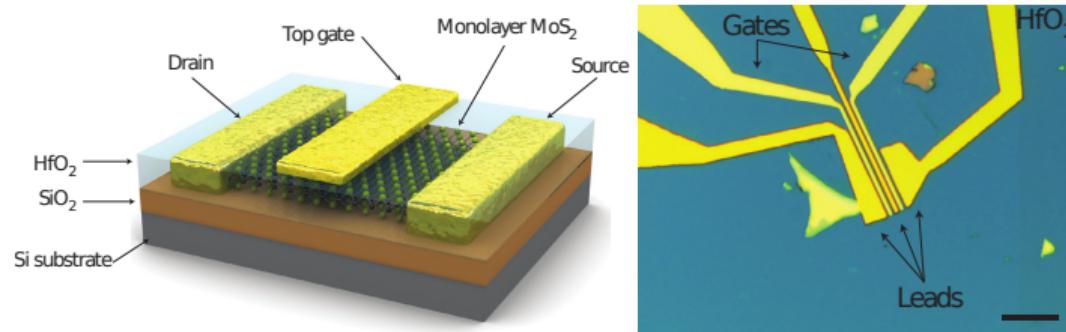
## 1 Grafen

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Struktura grafenu
- Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
- Przykładowe własności
- Stosowanie Kwanta

## 2 Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

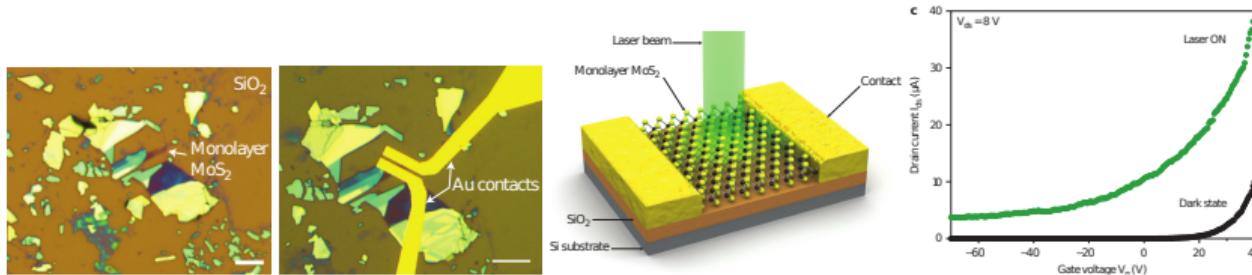
# Tranzystor polowy<sup>18</sup>



- Brak przerwy energetycznej grafenu uniemożliwia wykorzystanie w tranzystorach
- Próbka: monowarstwa  $\text{MoS}_2$  (eksfoliacja) kontrolowana przez bramki
- 2 tranzystory połączone szeregowo.  $\text{HfO}_2$  (tlenek hafnu(IV)) poprawia mobilność elektronów
- Kanał  $\text{MoS}_2$  o grubości 6.5 Å(cienka i elastyczna elektronika)
  - stosunek prądu w stanie ON do prądu w stanie OFF osiąga  $I_{on}/I_{off} \gtrsim 1 \times 10^8$

<sup>18</sup>B. Radisavljevic, et al, Nature Nanotechnology 6, 147 (2011).

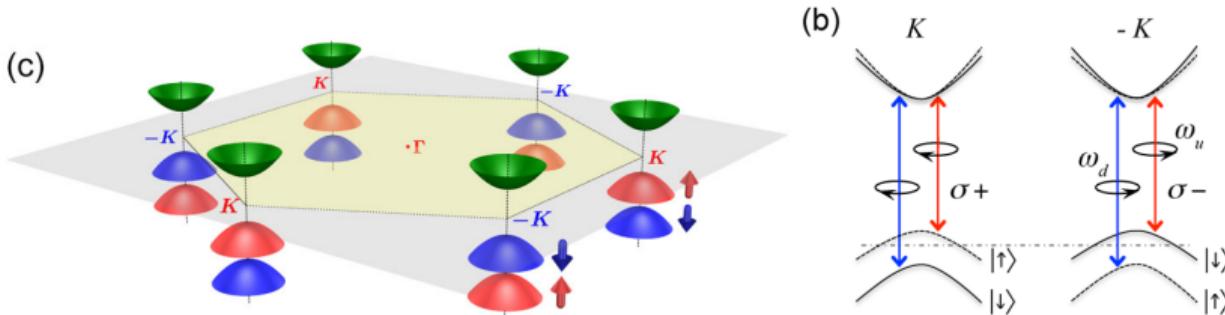
# Fototranzystor<sup>19</sup>



- Monowarstwa MoS<sub>2</sub>: prosta przerwa energetyczna (direct bandgap)
- Materiały o prostej przerwie mają wyższy współczynnik absorpcji światła niż o przerwie skośnej
- Nieoświetlona próbka: zależność typowa dla tranzystora polowego, oświetlona: wzrost prądu w stanie ON i OFF (fotoprąd)

<sup>19</sup>O. Lopez-Sanchez *et al*, Nature Nanotechnology **8**, 497 (2013).

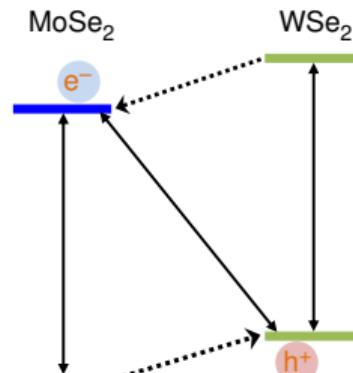
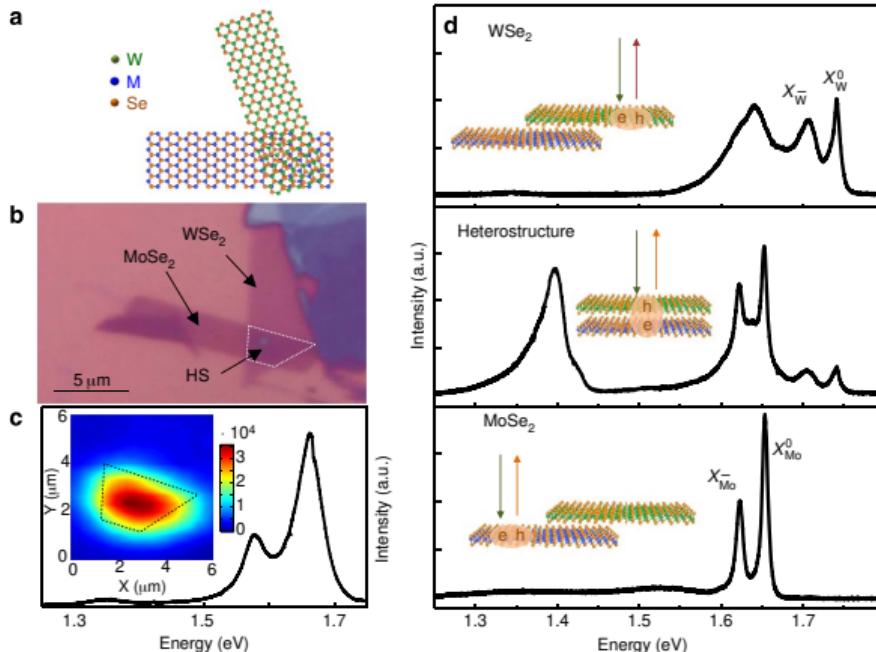
# Sprzężenie spin-orbita <sup>20</sup>



- Silne oddziaływanie spin-orbita dzięki orbitalom d ciężkich metali – rozszczepienie spinowe podpasm
  - Pasmo przewodnictwa – zdegenerowane w punkcie K-K,
  - Pasmo walencyjne – rozszczepienie pasm (większe niż w pasmie przewodnictwa)
  - Rozszczepienie jest przeciwe dla różnych dolin
- Optyczne reguły wyboru: światło spolaryzowane kołowo  $\sigma+$  ( $\sigma-$ ) wzbudza przejścia międzypasmowe w dolinie K(-K).
  - Możliwość generacji prądu dolinowego lub spinowego przez wzbudzenie światłem spolaryzowanym
- Sprzężenie spinu z doliną. Valleytronika

<sup>20</sup>D. Xiao *et al*, Phys. Rev. Lett. **108**, 196802 (2012).

# Ekscytony<sup>21</sup>

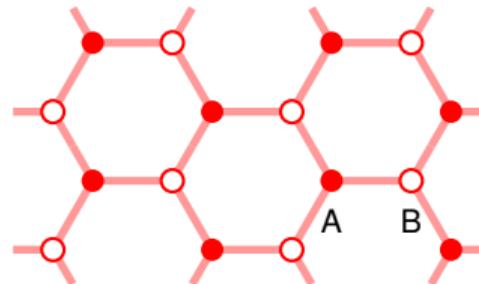


## Ekscytony międzywarstwowe

<sup>21</sup> Rivera, P. et al. Nat. Commun. **6**, 6242 (2015).

Powrót

## Całki przeskoku

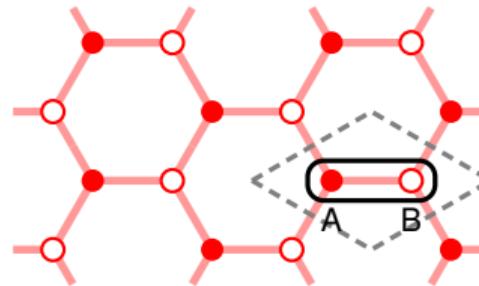


```
hopping = kwant.builder.HoppingKind((lattice_vector_1, lattice_vector_2),  
                                     target_lattice, source_lattice)
```

- Wystarczy podać jeden kierunek przeskoku (np.  $(0, 1)$ , nie trzeba  $(0, -1)$ )
- Builder zapewnia hermitowskość
- W grafenie, dla pierwszych sąsiadów `target_lattice` i `source_lattice`, są na różnych podsieciach

# Grafen i Kwant

Najbliżsi sąsiedzi

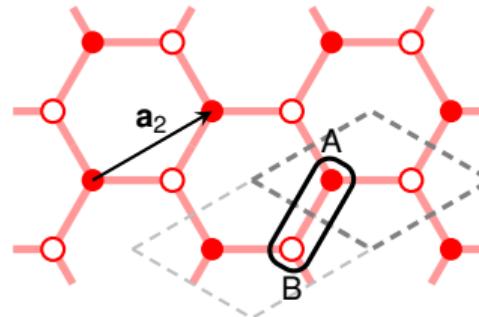


```
def nn_hopping(site1, site2, p):
    return p.t0

hopping = ((0, 0), a, b)      # wzdluz wektora (0, 0): ta sama komorka elementarna
sys[kwant.builder.HoppingKind(*hopping)] = nn_hopping
```

# Grafen i Kwant

Najbliżsi sąsiedzi



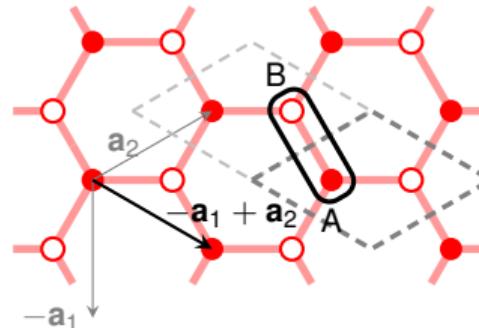
```
def nn_hopping(site1, site2, p):
    return p.t0

hopping = ((0, 0), a, b)
sys[kwant.builder.HoppingKind(*hopping)] = nn_hopping

hopping = ((0, 1), a, b)      # wzdluz wektora a2
sys[kwant.builder.HoppingKind(*hopping)] = nn_hopping
```

# Grafen i Kwant

## Najbliżsi sąsiedzi



```
def nn_hopping(site1, site2, p):
    return p.t0

hopping = ((0, 0), a, b)
sys[kwant.builder.HoppingKind(*hopping)] = nn_hopping

hopping = ((0, 1), a, b)
sys[kwant.builder.HoppingKind(*hopping)] = nn_hopping

hopping = ((-1, 1), a, b) # wzluz wektora -a1+a2
sys[kwant.builder.HoppingKind(*hopping)] = nn_hopping
```