

Grafen

Dichalkogenki metali przejściowych

Alina Mreńca-Kolasińska

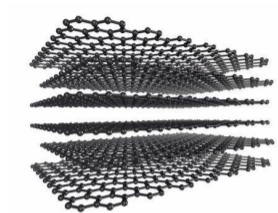
13 lutego 2022, ostatnia aktualizacja 18 listopada 2024

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

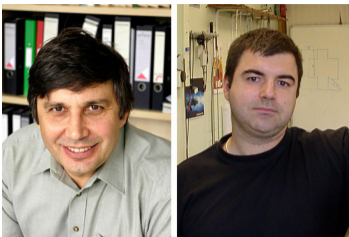


grafit.¹

- 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](#)

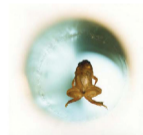
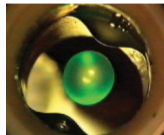
¹www.quora.com

Izolacja grafenu



Andre Geim, Konstantin Novoselov; University of Manchester.²

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



Lewitująca woda i żaba w polu magnetycznym ^a

^a[A.K.Geim Nobel Lecture: Random walk to graphene.](#)

²www.csmonitor.com

Plan

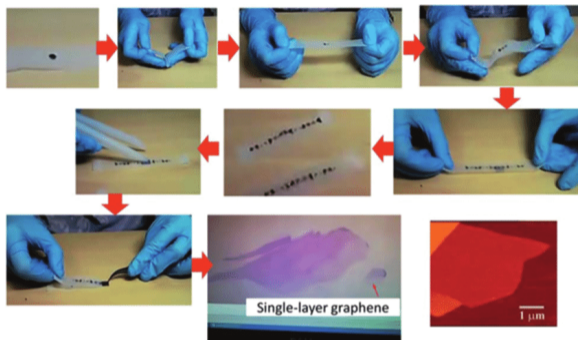
1 Grafen

- 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) ³.
- 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.

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

Eksfoliacja w domu ⁴

- Tworzymy warstwę grafitu



- Przykładamy taśmę klejącą do grafitu i delikatnie odklejamy. Kilka warstw grafitu jest na taśmie.



- Kilkakrotnie zginiemy taśmę rozprowadzając grafit w coraz cieńsze warstwy

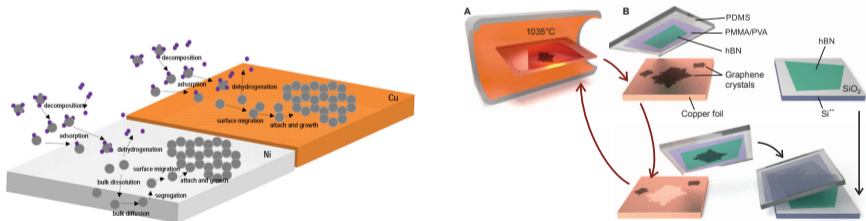


- Po kilku powtórzeniach powstaje cienka warstwa.

⁴www.wikihow.com/Make-Graphene

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

- Do komory reakcyjnej wprowadzane są gazowe prekursory.
- Na ogrzonym podłożu zachodzą ich reakcje i rozkład na atomy / cząsteczki pożądanego materiału.
- Przypadek grafenu⁵
 - Osadzanie na powierzchni miedzi,
 - Źródłem atomów węgla może być metan (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 podłożo (np. SiO_2 , hBN (heksagonalny azotek boru)), np. przy pomocy polimeru lub nawet bezpośrednio hBN.⁶



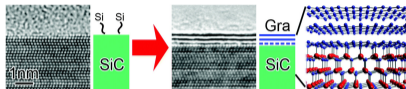
⁵Muñoz, R. and Gómez-Aleixandre, C., Review of CVD Synthesis of Graphene. Chem. Vap. Deposition, 19, 297 (2013).

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

Inne metody

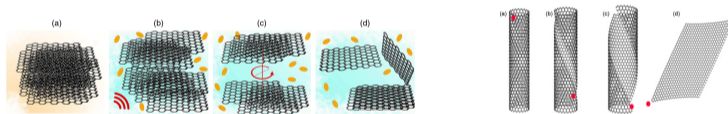
- Wzrost epitaksjalny na SiC (węgliku krzemu)

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



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

- Grafity lub tlenek grafenu w roztworze, pod wpływem reakcji chemicznych i „rozbijania” ultradźwiękami, rozwarstwia się.⁸



- Rozpinięcie nanorurek węglowych⁹,

- i wiele innych

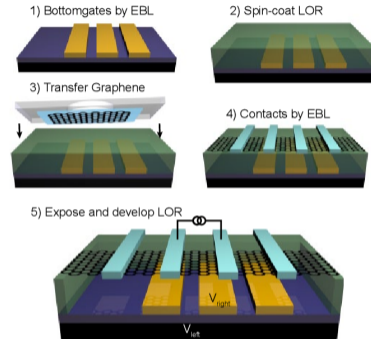
⁷Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 3501 (2014).

⁸J. of Nanophotonics, 10(1), 012525 (2016).

⁹Applied Catalysis A: General 371, 22 (2009)

Zawieszony grafen ¹⁰

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



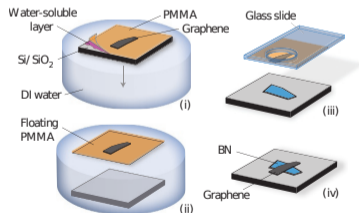
Etapy wytwarzania zawieszzonego grafenu. ^a

^aP. Rickhaus et al., Nat. Commun. 4, 2342 (2013).

¹⁰N. Tombros et al., J. Appl. Phys., 109 (9) (2011).

Grafen między warstwami hBN ¹¹

- 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 SiO₂.



Etapy enkapsulacji grafenu w hBN

- (i) eksfoliacja grafenu na SiO₂ z warstwą PMMA i rozpuszczalnego w wodzie polimeru
- (ii) rozpuszczenie polimeru i wyłowienie PMMA z grafenem
- (iii) przeniesienie grafenu na hBN
- (iv) rozpuszczenie PMMA

¹¹C. R. Dean et al., Nat. Nano. 5, 722 (2010).

Plan

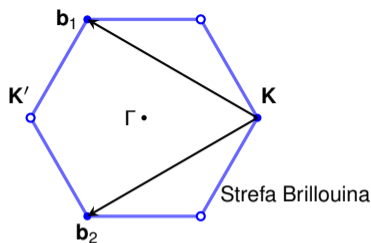
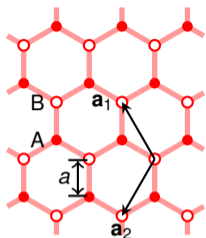
1 Grafen

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

2 Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

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

$$\boldsymbol{\tau}_A = (0, 0), \quad \boldsymbol{\tau}_B = a(0, 1).$$

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

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

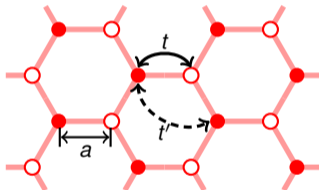
Struktura pasmowa

- Struktura pasmowa grafenu¹²

$$E(\mathbf{k}) = \pm |g(\mathbf{k})|t - f(\mathbf{k})t' \quad (1)$$

$$f(\mathbf{k}) = 2 [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))],$$

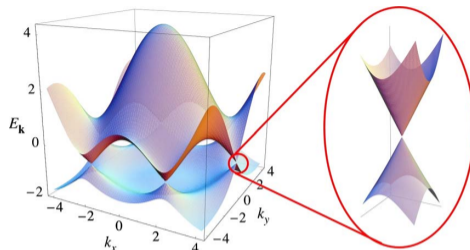
$$g(\mathbf{k}) = 1 + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2).$$



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

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

Rozwinięcie wokół punktów \mathbf{K}



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

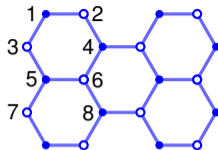
$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx \pm \frac{3}{2} t a |\mathbf{q}| + \mathcal{O}((q/K)^2).$$

- $\frac{3}{2} t a = \hbar v_F$, v_F – prędkość Fermiego w grafenie, 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 własności
 - 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

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

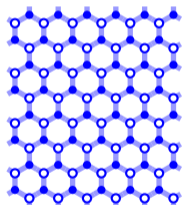
Skalowany model ciasnego wiązania¹³

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

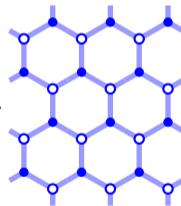
$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx \pm \frac{3}{2} ta|\mathbf{q}|.$$

- Trik:

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



$$\xrightarrow{t_s = t/s_f, a_s = as_f}$$

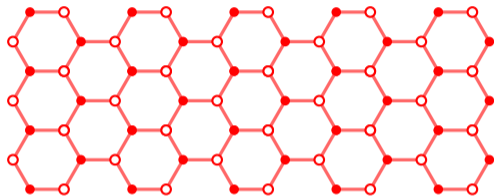


Warunki stosowalności:

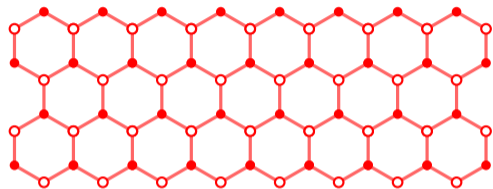
- Przybliżenie liniowe działa: $s_f \ll \frac{3t\pi}{|E_{max}|}$, dla $|E_{max}| \lesssim 0.4 \text{ eV}$, $s_f \ll 66$.
- W polu magnetycznym: $s_f \ll \frac{\sqrt{\hbar/eB}}{a} \approx \frac{180}{\sqrt{B}}$

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

Wstęgi grafenowe



armchair

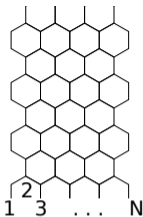


zigzag

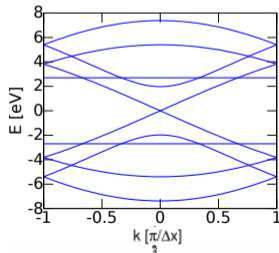
- Wstęga armchair: metaliczna lub półprzewodnikowa
- Wstęga zigzag: metaliczna

Wstęgi grafenowe – relacja dyspersji

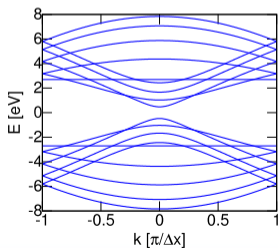
armchair



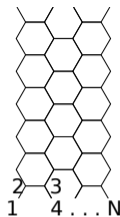
$N=3k-1$,
metallic



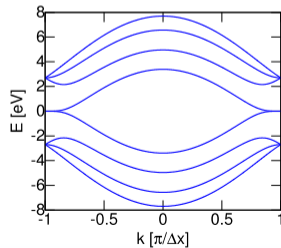
$N=3k, 3k+1$
semiconducting



zigzag



all N : metallic



Plan

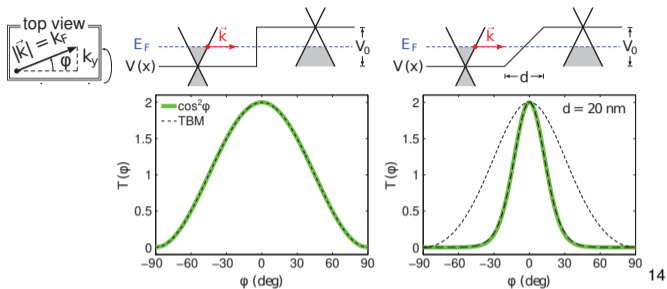
1 Grafen

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

2 Dichalkogenki metali przejściowych

- Przykładowe sposoby wytwarzania
- Przykładowe zastosowania

Tunelowanie Kleina



- 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).
- Elektrony i dziury w grafenie 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).

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

Stany węzowe

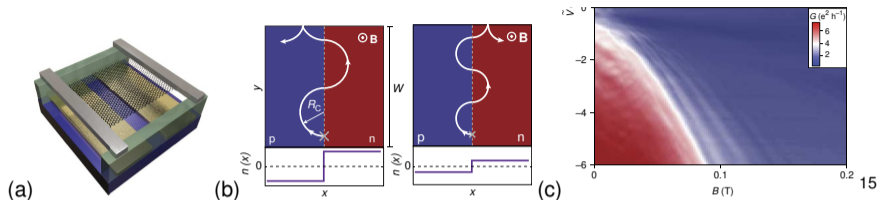
- Elektrony po stronie n złącza p-n, dziury po stronie p (zatem ładunek zmienia znak).
- Układ znajduje się w zewnętrznym polu magnetycznym $\mathbf{B} = (0, 0, B)$
- Tunelujące przez złącze fermiony oddziałują z polem magnetycznym. Klasycznie siła Lorentza

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

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



Stany węzowe



(a) Próbkę: 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.

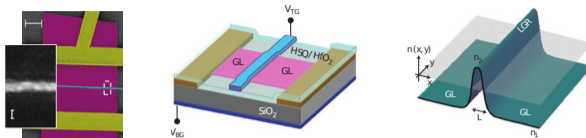
- Promień cyklotronowy orbity zależy od energii i B :

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

- n to gęstość ładunku (wyrażona w 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 .

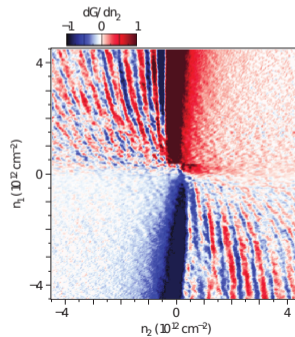
¹⁵Rickhaus, P. et al., Nat. Commun. 6, 6470 (2015). <https://doi.org/10.1038/ncomms7470>.

Oscylacje Fabry-Pérot

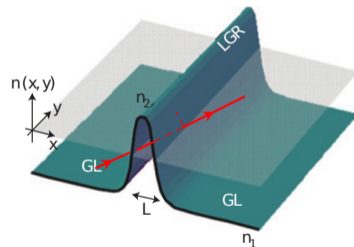
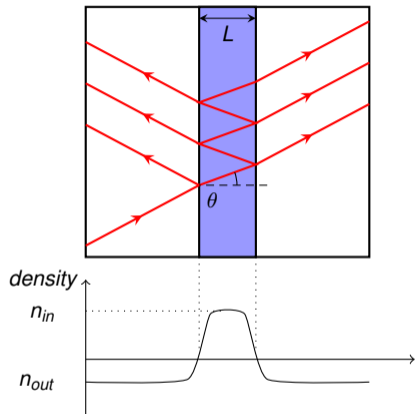


Schematy urządzenia i profil gęstości elektronowej

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

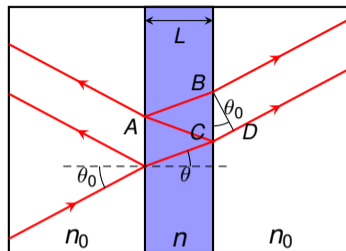


Interferometr Fabry-Pérot



Wielokrotne odbicie światła pomiędzy zwierciadłami

Interferencja Fabry-Pérot



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

Różnica faz:

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) 2n \frac{L}{\cos(\theta)} - \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_0 L_0 =$$

... $n \sin(\theta) = n_0 \sin(\theta_0)$ (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:

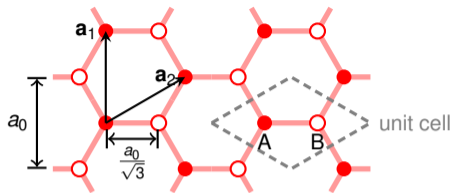
```
def mlg(p):
    def rect(pos):
        x, y = pos
        return x < p.L and x > -p.L+0.1 and y < p.W and y > -p.W

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

    ...
```

Grafen i Kwant

Przykład generowania wstęgi o brzegu typu armchair



Sieć grafenu wraz z zaznaczonymi wektorami sieci i atomami bazy.

def mlg(p):

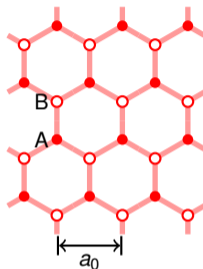
```
...
a0 = nm_au(0.25)
sin_30 = np.sin(30*np.pi/180)
cos_30 = np.cos(30*np.pi/180)

graphene = kwant.lattice.general([(0, a0), (cos_30*a0, sin_30*a0)], # wektory sieci
                                [(0, 0), (a0/np.sqrt(3), 0)], # atomy A, B bazy
                                norbs=1)
a, b = graphene.sublattices

sys = kwant.Builder()
```

Grafen i Kwant

Przykład generowania sieci grafenu:

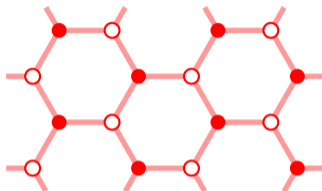


```
a0 = nm_au(0.25)
graphene = kwant.lattice.honeycomb(a0, norbs=1)
a, b = graphene.sublattices
```

Prościej, ale zawsze poziomy brzeg ma typ zigzag

Grafen i Kwant

Całki przeskoku

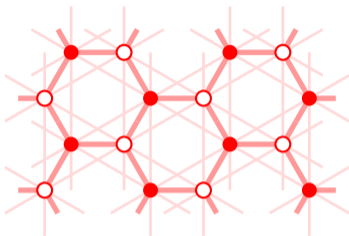


```
def nn_hopping(site1 , site2 , p):  
    return p.t0  
  
sys[graphene.neighbors()] = nn_hopping
```

► Inny sposób

Grafen i Kwant

Całki przeskoku

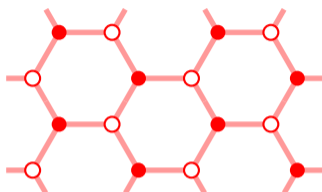


```
def nn_hopping(site1 , site2 , p):  
    return p.t0  
  
sys[graphene.neighbors()] = nn_hopping  
sys[graphene.neighbors(2)] = p.t1
```

► Inny sposób

Grafen i Kwant

Całki przeskoku

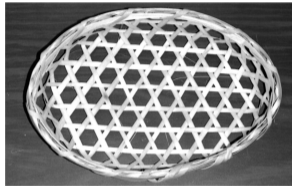


```
def nn_hopping(site1 , site2 , p):  
    return p.t0
```

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

► Inny sposób

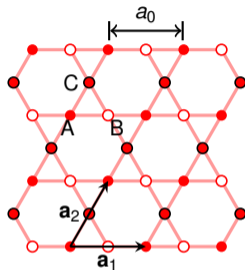
Kafelkowanie trójheksagonalne (ang. *trihexagonal tiling*), tzw. sieć kagome)



Kosz ze wzorem kagome ¹⁶

Kwant: sieć kagome

Przykład generowania sieci kagome:



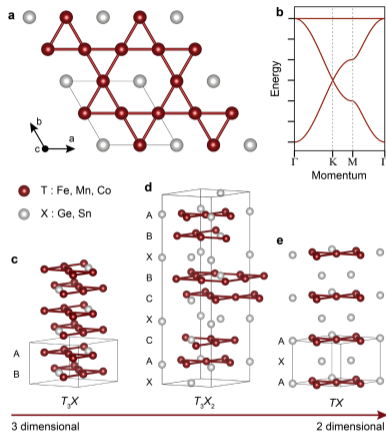
```
a0 = 1
```

```
kagome = kwant.lattice.kagome(a0, norbs=1)
```

```
a, b, c = kagome.sublattices
```

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

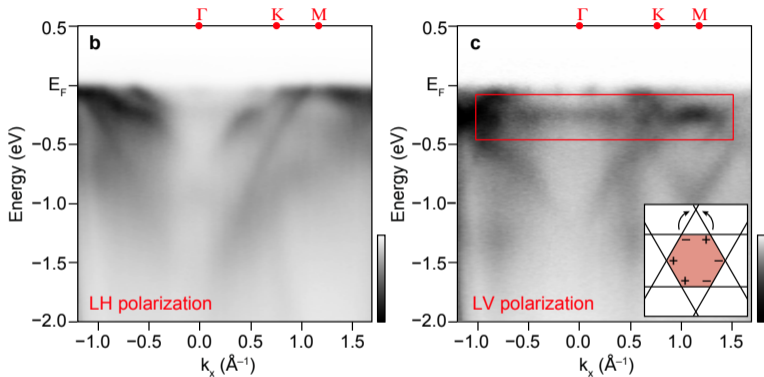
Przykład: kagome metal FeSn



(e) FeSn; komórka elementarna oznaczona liniami. ¹⁷

¹⁷ 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

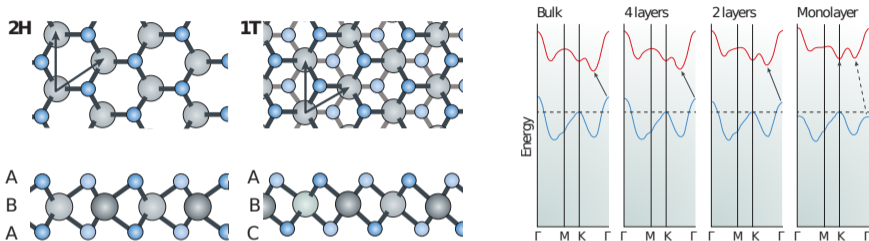
- 1 Grafen
 - Przykładowe sposoby wytwarzania
 - Struktura grafenu
 - Metoda ciasnego wiązania dla grafenu
 - Przykładowe własności
 - Stosowanie Kwanta
- 2 Dichalkogenki metali przejściowych
 - Przykładowe sposoby wytwarzania
 - Przykładowe zastosowania

Podstawowe informacje

Ogólny wzór: $M X_2$

- M – metal
- X – chłokogen (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 MoS₂ staje się prosta.

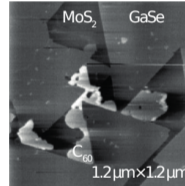
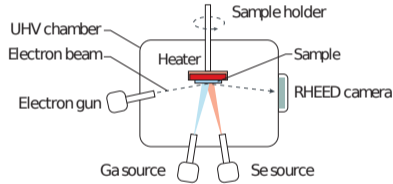
Plan

- 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

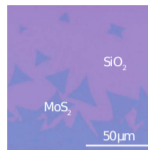
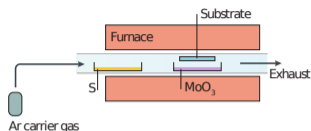


MBE: pierwiatki czystych materiałów są napyłane w wysokiej próżni. Przykład GaSe na podłożu MoS₂.

Metody wytwarzania c.d.

- Chemiczne osadzanie z fazy gazowej

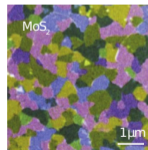
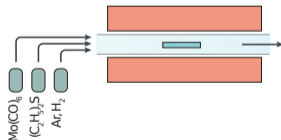
Chemical vapour deposition



CVD: nie wymaga ultrawysokiej próżni. Przykład: MoO₃ i S w wysokiej temperaturze reagują – powstaje MoS₂ na podłożu SiO₂. Powstają domeny o różnej orientacji.

- Epitaksja z fazy gazowej z użyciem związków metaloorganicznych

Metal-organic chemical vapour deposition

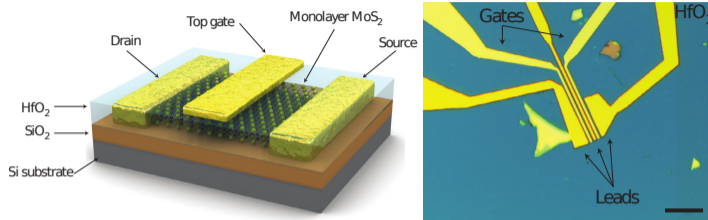


MOCVD: MoS₂

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

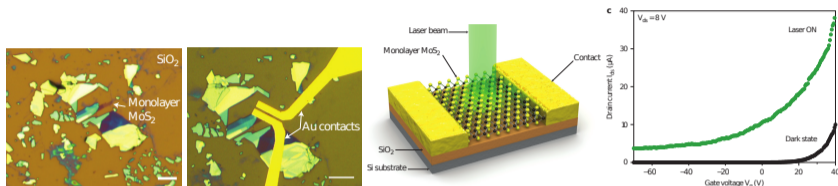
Tranzystor polowy¹⁸



- Brak przerwy energetycznej grafenu uniemożliwia wykorzystanie w tranzystorach
- Próbką: monowarstwa MoS₂ (eksfoliacja) kontrolowana przez bramki
- 2 tranzystory połączone szeregowo. HfO₂ (tlenek hafnu(IV)) poprawia mobilność elektronów
- Kanał MoS₂ o grubości 6.5 Å (cienka i elastyczna elektronika)
 - stosunek prądu w stanie ON do prądu w stanie OFF osiąga $I_{on}/I_{off} \gtrsim 1 \times 10^8$

¹⁸B. Radisavljevic, *et al*, Nature Nanotechnology **6**, 147 (2011).

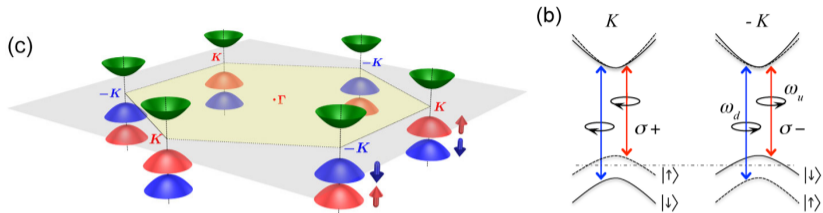
Fototranzystor¹⁹



- Monowarstwa MoS₂: 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)

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

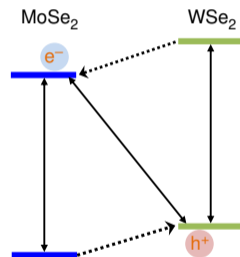
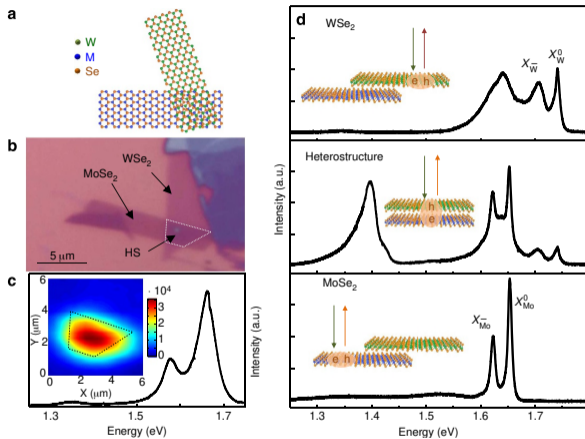
Sprzężenie spin-orbita ²⁰



- 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 przeciwne 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

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

Ekscytony ²¹



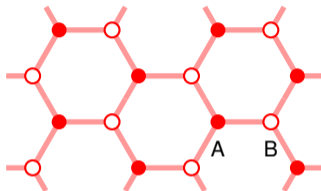
● Ekscytony międzywarstwowe

²¹Rivera, P. et al. Nat. Commun. **6**, 6242 (2015).

Grafen i Kwant

► Powrót

Całki przeskoku

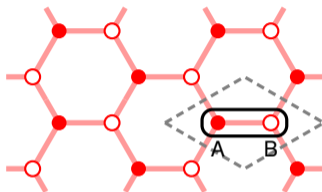


```
hopping = kwant.builder.HoppingKind((lattice_vector_1, lattice_vector_2),  
                                     target_lattice, source_lattice)
```

- 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

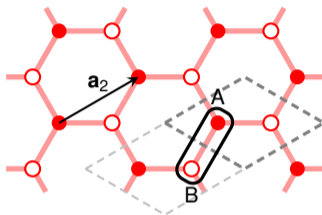


```
def nn_hopping(site1 , site2 , p):  
    return p.t0
```

```
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



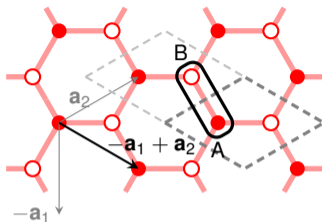
```
def nn_hopping(site1, site2, p):  
    return p.t0
```

```
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
```