



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

David Novák

Kvantový transport v nanoskopických systémech

Katedra fyziky kondenzovaných látek

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Vladislav Pokorný, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Fyzika

Praha 2023

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Děkuji vedoucímu této práce Mgr. Vladislavu Pokornému, Ph.D. za ochotu a konzultace mé bakalářské práce.

Název práce: Kvantový transport v nanoskopických systémech

Autor: David Novák

Katedra: Katedra fyziky kondenzovaných látek

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Vladislav Pokorný, Ph.D., Oddělení teorie kondenzovaných látek, Fyzikální ústav AVČR, v.v.i.

Abstrakt: Molekulární elektronika je v současné době rychle se vyvíjející vědní obor, který využívá experimentálních i teoretických metod. Jejich kombinace je v mnoha případech nevyhnutelná. Tato práce poskytne čtenáři přehled o experimentálních metodách ke zkoumání nanospojů a teoretickém popisu transportu v nich. Grafen je pro jeho vlastnosti nadějným kandidátem v nahrazení nebo vylepšení křemíkové elektroniky. Z toho důvodu jsou naše zkoumané systémy deriváty grafenu. Programovací balík Kwant dokáže simulovat kvantový transport v nanoskopických systémech. Pro jeho jednoduchost použití a nízké nároky na výpočetní techniku je ideálním prostředím pro simulaci. Kvantový transport v grafenových nanopáskách jsme pomocí zmíněného balíku nasimulovali a získali jejich elektronické vlastnosti.

Klíčová slova: kvantový transport, počítačové simulace, molekulární elektronika, Kwant

Title: Quantum transport in nanoscopic systems

Author: David Novák

Department: Department of Condensed Matter Physics

Supervisor: Mgr. Vladislav Pokorný, Ph.D., Department of Condensed Matter Theory, FZU - Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences

Abstract: Molecular electronics is currently a rapidly evolving field of science that uses both experimental and theoretical methods. Their combination is in many cases unavoidable. This paper will provide the reader with an overview of the experimental methods to investigate nanojunctions and the theoretical description of transport in them. Graphene is a promising candidate in replacing or improving silicon electronics because of its properties. For this reason, our examined systems are derivatives of graphene. The Kwant programming package can simulate quantum transport in nanoscopic systems. Its simplicity of use and low computational requirements make it an ideal environment for simulation. We have simulated quantum transport in graphene nanoribbons using this package and obtained their electronic properties.

Keywords: quantum transport, computer simulations, molecular electronics, Kwant

Obsah

Seznam použitých zkratk	2
Úvod	3
1 Experimentální metody molekulární elektroniky	5
1.1 Řádkovací tunelový mikroskop (STM)	5
1.2 Mikroskop atomových sil (AFM)	6
1.3 Mechanicky kontrolovatelné zlomené spoje (MCBJ)	7
2 Kvantový transport	9
2.1 Rozptylový mechanismus	9
2.2 Landauerova formule	10
3 Alotropy uhlíku	12
3.1 Diamant	12
3.2 Grafit	12
3.3 Grafen	13
3.4 Grafenové nanopásy	15
3.5 Další alotropy uhlíku	15
4 Balík Kwant	17
4.1 Těsno-vazebný model	17
4.2 Výpočet pásové struktury	19
4.3 Simulace obecného modelu	19
5 Výsledky: Elektronová struktura grafenových plátků	23
5.1 Varianta zigzag	23
5.2 Varianta armchair	26
5.2.1 Pravidlo 3M-1	27
5.3 Limitní případy pásků	30
5.4 Grafenové nanopásy s vakancí	32
6 Diskuze výsledků	35
Závěr	37
Seznam použité literatury	38
Seznam obrázků	41
A Přílohy	43
A.1 Pásová struktura grafenu	43
A.2 Počítačové kódy pro simulaci kvantového transportu	47
A.2.1 Skript obecného modelu	47
A.2.2 Skript uhlíkových nanopásků	48

Seznam použitých zkratek

ME - Molecular Electronics - Molekulární elektronika

STM - Scanning Tunnelling Microscope - Skenovací tunelový mikroskop

AFM - Atomic Force Microscope - Mikroskop atomových sil

MCBJ - Mechanically Controllable Break Junctions - Mechanicky kontrolovatelné zlomené spoje

DFT - Density Functional Theory - Teorie funkcionalu hustoty

Úvod

Elektronika je odvětví fyziky, které se zabývá studiem elektronických součástek a řízením toků elektronů. Elektronickou součástkou rozumíme základní samostatné zařízení určené k ovlivňování elektronového toku nebo pole, ve kterém se elektrony pohybují. Přínos elektroniky ve formě domácích spotřebičů, počítačů, telekomunikační techniky, lékařských přístrojů a mnoha dalších je nedílnou součástí každodenního života.

Molekulární elektronika (ME) se odlišuje především velikostí elektronických součástek, ve kterých jsou použity atomy a molekuly jako základní stavební bloky. Tento přístup byl motivován snahou dále zmenšovat elektronické součástky, které jsou obvykle na bázi křemíku. Místo snahy zmenšit již existující součástky se ME ale vydala jinou cestou. Uplatňuje se „bottom up“ přístup, kde se z jednotlivých atomů vytváří elektronické součástky a z nich se následně skládají komplexnější přístroje.

ME je velmi mladým a aktivním oborem vědy na pomezí fyziky, chemie a technologie, který se neustále posouvá vpřed. Vývoj lze rozdělit na dva hlavní proudy. První je vědecký, který má za cíl odhalit základní vlastnosti látek a pomocí metod teoretické fyziky a experimentů lépe porozumět jejich fundamentální struktuře a jevům, kterými jsou ovlivňovány. Mezi nejznámější studované jevy patří Coulombova blokáda, Kondův efekt, kvantová interference a dekoherence. Druhý přístup je technologicky zaměřen a jde o vytváření nových součástek nanoskopických rozměrů pro praktické využití. Oba tyto proudy jsou pevně provázané a není možné dělat pokroky v jednom bez uvážení výsledků toho druhého.

Výzkumem v oblasti ME bychom mohli vyvinout rychlejší a energeticky méně náročné počítače, lepší senzory nebo i efektivnější solární panely. Pokrok v ME přinese rozvoj dalších odvětví, mezi která patří například medicína, energetický průmysl a materiálové vědy.

Mezi největší současné nevýhody ME patří nízká stabilita molekulárních spojů za vysokých teplot a jejich výroba je náročná a z toho důvodu drahá a nevhodná pro komerční použití. Dalším výzkumem v tomto odvětví bude možné některé nevýhody redukovat nebo odhalit vlastnosti dosud neprozkoumaných látek. Proto je cílem naší práce čtenáře seznámit s teoretickým formalismem používaným k popisu kvantového transportu a se základními experimentálními technikami, které se používají ke studiu ME. Chceme tím připravit základ pro další výzkum v tomto odvětví.

Jedním ze základních pilířů ME jsou experimentální techniky a techniky výroby nanoskopických zařízení, mezi které patří skenovací tunelovací mikroskopie, mikroskopie atomových sil, mechanicky kontrolovatelné zlomené spoje a elektromigrační a elektrochemické metody. Bez nich by vývoj nebyl možný. Výroba vzorků a jejich experimentální zkoumání jsou časově i finančně náročné. Znalosti teoretických kvantově-mechanických metod, mezi které patří popis pomocí těsnovazebných modelů, teorie funkcionálu hustoty a metoda Greenových funkcí, nám umožňují studovat tyto systémy v kontrolovaných podmínkách a reprodukovatelným způsobem pomocí počítačových simulací. Oba tyto přístupy, experimentální a teoretický, se navzájem doplňují a jejich úplný přehled najdeme např. v knize [1].

V první a druhé kapitole této práce popíšeme některé základní experimentální a výpočetní techniky. V třetí kapitole si přiblížíme vlastnosti alotropů uhlíku včetně grafenu. Ve čtvrté kapitole si představíme výpočetní balík Kwant pro simulaci kvantového transportu, který pak v páté kapitole využijeme na výpočet pásové struktury grafenových pláteků. Výsledky výpočtů jsou diskutovány v kapitole 6.

1. Experimentální metody molekulární elektroniky

Atomy mají řádově rozměr 10^{-10} m. To je za hranicí rozlišovací schopnosti optických mikroskopů. Existují ale jiné mikroskopy, které dokážou „vidět“ jednotlivé atomy nebo s nimi i na atomární úrovni interagovat a manipulovat.

Molekulární elektronika pracuje právě s jednotlivými atomy a molekulami jako se základními stavebními bloky. Bez dobrých experimentálních metod ke zkoumání, nebo bez možnosti vytváření atomových spojů by byla ME velmi limitována.

V této kapitole se seznámíme se základním principem několika skenovacích metod používaných v ME a shrneme jejich výhody a nevýhody při použití. Mezi nejdůležitější patří řádkovací tunelový mikroskop (STM) a mikroskop atomových sil (AFM). Dále rozebereme tvorbu molekulárních spojů pomocí metody nazývané mechanicky kontrolovatelné zlomené spoje (MCBJ).

1.1 Řádkovací tunelový mikroskop (STM)

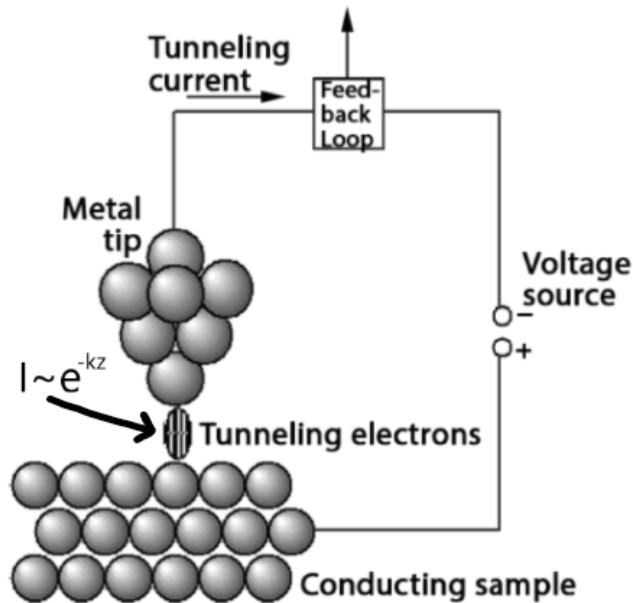
Jeden z nejpoužívanějších mikroskopů pro studium atomových kontaktů je STM. Byl vynalezen roku 1981 Gerdem Binnigem a Heinrichem Rohrerem, kteří za něj získali v roce 1986 Nobelovu cenu. Od jeho vzniku bylo vytvořeno několik modifikací, ale funkční princip zůstává stejný. Ostrý hrot zakončený jediným atomem je přiblížen k vodivému povrchu zkoumaného materiálu. Pomocí tunelovacího proudu, který prochází špičkou hrotu, se měří vzdálenost od povrchu. Díky exponenciální závislosti elektrického proudu na vzdálenosti, je možné pozorovat jednotlivé atomy a mezery mezi nimi. Schéma STM je vyobrazeno na obrázku 1.1, obrázek 1.2 ukazuje příklad snímku získaného pomocí STM.

Důležitou součástí mikroskopu jsou piezoelektrické trubice, které mění výšku hrotu nad povrchem s přesností na úrovni Ångströmu (10^{-10} m). Při posunu v rovině $x - y$ se mění tunelovací proud a tuto změnu můžeme vyrovnávat změnou výšky hrotu. Potom mikroskop pracuje v režimu konstantního proudu. Alternativně lze zafixovat výšku nad povrchem a skenovat povrch v závislosti na změně proudu. Druhou metodou získáme informaci o povrchu rychleji, jelikož změna výšky hrotu pro udržení konstantního proudu je časově náročnější. Držení konstantní výšky nad povrchem lze použít pouze pro povrchy s minimálními nerovnostmi, jinak by mohlo dojít k zničení hrotu při srážce s větší nerovností na povrchu.

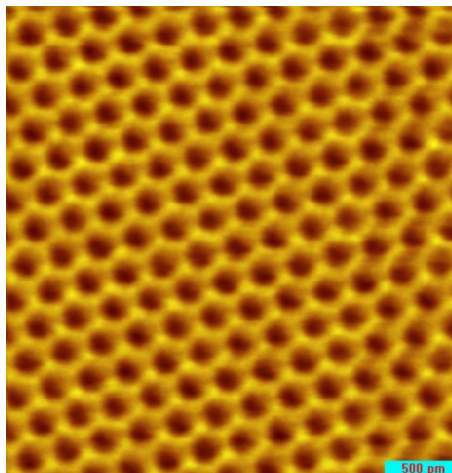
Při přibližování hrotu k povrchu může dojít ke skokové změně proudu. To značí vytvoření chemické vazby mezi hrotem a povrchem. Tím jsme schopni měřit konduktanci jedno-atomových kontaktů. Touto metodou lze tvořit a zkoumat například heterojunkce dvou různých materiálů.

Pomocí STM dokážeme nejen zmapovat povrch vodivých materiálů, ale také ho měnit. Vhodnou volbou napětí lze „chytnout“ atom na špičku hrotu a přiložením hrotu k povrchu a změnou napětí můžeme atom umístit do námi požadovaného místa [2].

Omezená stabilita vůči změně externích parametrů, jako jsou teplota nebo



Obrázek 1.1: Schéma řádkovacího tunelového mikroskopu. Upraveno z [3].



Obrázek 1.2: Snímek grafenu získaný pomocí STM. Převzato z [4].

magnetické pole, patří mezi největší nevýhody STM. Přesnost měření je především dána schopností odstínění mechanických vibrací a hluku. Z toho důvodu bývá mikroskop zvukotěsně izolován a umístěn v měkkém pružinovém závěsu. Další nevýhodou, kterou se podařilo překonat je měření za nízkých teplot. Díky ultravysokému vakuu může mikroskop pracovat i pod teplotou 1K.

1.2 Mikroskop atomových sil (AFM)

Podobný způsob zkoumání povrchů jako STM používá mikroskop atomových sil. Oproti měření tunelového proudu v závislosti na vzdálenosti, AFM měří posun ohybného nosníku, na kterém je hrot mikroskopu umístěn. Na hrot působí van der Waalovy síly, které ho vyvádí z rovnovážné polohy. V závislosti na směru působení síly, mikroskop pracuje ve dvou režimech.

Kontaktní režim je charakterizován působením odpuzivých sil. Obdobně jako STM má tento způsob dvě varianty. První je držet výšku hrotu nad vzorkem konstantní a pohybovat se v rovině $x - y$. Při této metodě hrozí zničení hrotu při větší nerovnosti na povrchu. Druhou variantou je držet konstantní prohnutí nosníku posouváním celého nosníku s hrotem. Tato varianta je časově náročnější. Odrazem laseru od nosníku lze určit změnu síly a tedy i vzdálenost hrotu od vzorku.

Druhý režim se nazývá bezkontaktní a pracuje v oblasti přitažlivých sil. Rozkmitáním nosníku na charakteristickou frekvenci měříme povrch vzorku. Při mapování roviny $x - y$ se bude měnit síla, která má za následek změnu frekvence a amplitudy kmitání. Změnou parametru v mikroskopu jsme schopni kmitání vracet do původního stavu. Z hodnoty parametru v různých místech na povrchu lze určit topografii vzorku.

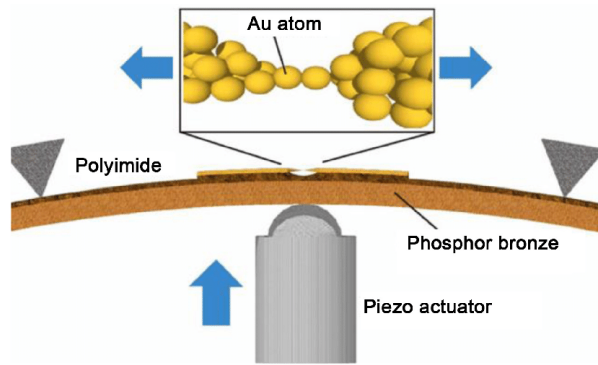
Mikroskopy STM a AFM lze kombinovat, pro současné měření tunelového proudu a síly potřebné k rozbití vazby. Pro takové měření je potřeba kovový povrch. AFM má oproti STM výhodu, že je schopný přímo mapovat povrchy izolantů. Pro měření proudu mezi povrchem a hrotem pomocí STM je potřeba na nevodivý vzorek nanést tenkou vrstvu kovu.

Práce s STM a AFM byla při počátku jejich výroby vhodná pouze pro měření ve vysokém vakuu. Nedávné studie ukázaly, že je možné oba tyto mikroskopy použít i za běžných podmínek [5], [6]. Obě tyto metody mají společnou nevýhodu. Jejich rychlost skenování povrchu je pomalá. Tento problém lze částečně odstranit pomocí technik rozebraných v článcích od Schittera a kol. [7] a Crofta a Devasia [8].

1.3 Mechanicky kontrolovatelné zlomené spoje (MCBJ)

Dosud jsme se bavili především o možnostech zkoumání povrchů. Nyní se podíváme na tvorbu jednotlivých spojů atomárních rozměrů. Mezi jednu z nejznámějších technik patří MCBJ. Tato metoda byla poprvé použita ještě před vznikem STM. Při počátku vývoje této techniky byly používány tři varianty. První spočívala v nanesení tenké vrstvy kovu na elektrický izolant. Na kovu se oxidací vytvoří tenká nevodivá vrstva. Na tu je nanesena ještě jedna vrstva kovu. Mezi vrstvami kovu se může spontánně vytvořit kontakt, nebo jeho vznik je výsledkem mechanického působení. Druhá metoda spočívá v přiblížení kovového hrotu k ploché elektrodě pomocí jemných mechanických posunů. Poslední varianta spočívá v postupném přibližování dvou hran elektrod, kde pomocí vzájemných posuvů vzniká kontakt na mnoha místech a oproti předchozí variantě hraje znečištění kovu menší roli. Podrobně jsou tyto metody popsány v článku od Naidyuka a Yansona [9].

Nynější metody MCBJ využívají podobný princip, který je na obrázku 1.3. Piezoelektrický válec tlačí na vzorek, který je ohýbán pomocí dvou protivah. Cílem je spojit dva kovové hroty, aby vytvořili tenký kontakt. Pomocí piezo efektu lze dělat velmi jemná posunutí válce. Elektrody jsou umísťovány na dvě vrstvy. Vrchní vrstva je obětní vrstva, u které dochází k deformaci při posunu válce. Druhá bývá z kovu, který má dobré elastické vlastnosti například ocel nebo bronz.



Obrázek 1.3: Schéma vytváření jedno-atomárních zlatých spojů pomocí MCBJ. Převzato z [10].

Mezi dvě nejpoužívanější varianty patří notched wire MCBJ (varianta s drátkem se zářezy) a litografické MCBJ. Obě si ve stručnosti rozebereme.

Notched wire MCBJ je jednodušší na přípravu. Tenký kovový drát s průměrem 0.1 mm je přilepen na mechanismus popsany výše. Vytvořením zářezu v místě ohybu zúžíme tloušťku drátu a následným ohybem lze kontrolovat vytváření a zanikání atomárních spojů.

Litografická varianta MCBJ používá k vytvoření tenký kovový film s šířkou cca 2 μm . Ten je v jednom místě zúžen na šířku desítek nanometrů. Drát je umístěn na nevodivou vrstvu, která se v místě zúžení odstraní izotropním iontovým leptáním. Vložení připraveného vzorku do ohýbacího mechanismu získáme atomární spoj.

2. Kvantový transport

Existuje mnoho metod popisu transportu náboje a jejich užití závisí na konkrétních podmínkách a účelech studia. Početní náročnost každého z modelů je také různá, proto je třeba vybírat modely podle efektivity a jejich přesnosti. Mezi nejznámější a nejpoužívanější modely patří metoda Greenových funkcí, Wigner-Boltzmannova rovnice, nebo, pro balistický transport, Landauer-Büttikerův formalismus.

Na kvantový transport lze nahlížet ze dvou úhlů. První pohled je mikroskopický a zabývá se pohybem elektronů v systému. Jejich chování v látce proto musí odpovídat chování v našem modelu k správné simulaci prostředí. Druhý úhel pohledu je makroskopický a zabývá se celkovým systémem. Pomocí něj jsme schopni určit fyzikální veličiny. Jejich kombinací získáme transportní vlastnosti systému.

Těsno-vazebné modely jsou efektivním způsobem pro popis pohybu elektronů. Zadáním elektrostatického potenciálu jednotlivých atomů a pravděpodobnosti přeskočení elektronu mezi nimi jsme schopni zadefinovat systém pro simulaci transportu mezi dvěma rezervoáry částic.

Balistický transport se typicky vyznačuje delší volnou dráhou elektronů, než je délka systému L . Díky tomu lze předpokládat zachování momentu hybnosti elektronu. V ideálním případě nedochází k zpětnému rozptylu elektronů vůbec a to má za následek stoprocentní pravděpodobnost průchodu elektronů. Konduktanci v takových případech nelze počítat klasicky, jelikož elektron nepocituje žádný odpor. Pro získání konečné konduktance (převrácené hodnoty odporu) musíme uvažovat kvantové jevy.

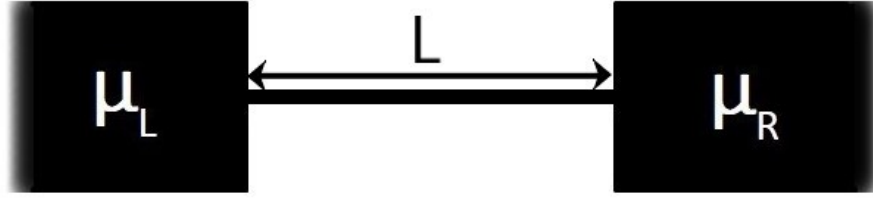
Kvantový charakter balistického transportu byl poprvé pozorován díky kvantovým bodovým kontaktům (quantum point contact) v práci Barta van Weese a kol. [11]. Nazval tak konstrukci, ve které dochází ke skokovým změnám proudu při měnícím se napětí na kontaktech, které jsou spojeny úzkým vodivým páskem, jehož šířka je srovnatelná s vlnovou délkou elektronů na Fermiho energii. V důsledku toho budeme pozorovat v úzkých grafenových páskách skokovou změnu konduktance, jak si ukážeme v kapitole (4.3).

Landauer-Büttikerův formalismus je vhodný pro výpočet elektrických vlastností systémů v koherentním režimu, tedy pro nízké teploty a kratší vzdálenosti než je koherentní délka elektronu. Pomocí toho formalismu jsme schopni určit konduktanci nebo hustotu proudu v systému.

2.1 Rozptylový mechanismus

Při popisu transportu v nanoskopických spojích pomocí rozptylového mechanismu hraje klíčovou roli kvantová koherence. Ve fyzice je koherence důležitá pro superpozici vln jednotlivých částic. K dekoherenci dochází interakcí systému s okolím nebo při neelastických srážkách.

Pro kvantové počítání je nutné, aby nedocházelo k fázové dekoherenci. Délka fázové koherence L_ϕ určuje vzdálenost, kterou může částice projít bez ztráty fázové koherence. Tedy u vzorků s délkou L menší než L_ϕ dochází k zachování informace o fázi.



Obrázek 2.1: Model jednodimenzionálního transportu, kde μ_L a μ_R jsou elektrochemické potenciály levého a pravého rezervoáru a L je délka spoje.

Landauerův formalismus je vhodný pro systémy, kde lze ignorovat vliv neelastických interakcí. Poté lze na transport nahlížet jako na rozptyl částice na bariéře a konduktanci získáme pomocí pravděpodobnosti transmise. Součtem příspěvků transmise od jednotlivých vodivostních módů T_i získáme výslednou konduktanci G . Matematicky lze tuto skutečnost zapsat vztahem

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n=1}^N T_n, \quad (2.1)$$

kde e je velikost náboje elektronu, h je Planckova konstanta a N udává počet vodivostních módů. Vztah 2.1 lze považovat za nejjednodušší zápis Landauerovy formule, protože udává konduktanci za nulové teploty, kdy má Fermi-Diracovo rozdělení skokový charakter.

Jedno-elektronový přístup předpokládá zachování fázové koherence a k neelastickému rozptylu dochází pouze v elektrickém rezervoáru. Tento přístup je použit v Landauer-Büttikerově formalismu transportu, který lze použít k výpočtu elektronických vlastností systému s libovolnou geometrií. Omezením se na systém pouze s dvěma vodiči lze získat Landauerovu formuli [12].

2.2 Landauerova formule

Formule poprvé vznikla přibližně v roce 1950 a její odvození si ukážeme pro jednodimenzionální případ jako je na obrázku (2.1). Popisujeme systém dvou rezervoárů elektronů s konstantními elektrochemickými potenciály, které jsou spojeny jednodimenzionálním kvantovým drátem o délce L .

Vycházíme z rovnice kontinuity, která udává hustotu proudu částic

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^*(x) \frac{d\Psi}{dx} - \Psi(x) \frac{d\Psi^*}{dx} \right], \quad (2.2)$$

kde Ψ je vlnová funkce elektronu, m značí hmotnost elektronu a $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ je redukovaná Planckova konstanta.

Elektron se v drátu pohybuje ve formě rovinné vlny. Normováním přes délku drátu získáme vlnovou funkci šířící se v drátu $\Psi = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, kde k je vlnový vektor elektronu. Při rozptylu na bariéře se část vlny odrazí zpět do rezervoáru s amplitudou odrazu r . Druhá část vlny bariéru překoná s amplitudou transmise t , která udává pravděpodobnost průchodu elektronu bariérou $T = |t|^2$. Vlnová

funkce, která překoná bariéru, bude mít tvar $\Psi = \frac{t}{\sqrt{L}}e^{ikx}$, který dosadíme do vztahu pro hustotu proudu 2.2 a získáme vztah

$$j_k = \frac{e}{L} \frac{k\hbar}{m} T(k), \quad (2.3)$$

kde L je délka spoje, e a m jsou náboj a hmotnost elektronu a T značí pravděpodobnost transmise elektronu skrze bariéru.

Elektrony patří mezi fermiony, které nemohou obsazovat již obsazené stavy. Řídí se totiž Pauliho vylučovacím principem, který lze zahrnout do výpočtu Fermi-Diracovou statistikou. Skutečnou hustotu proudu $j_{L \rightarrow R}$ z levého do pravého rezervoáru získáme vynásobením pravé strany 2.3 faktorem $f_L(E)(1 - f_R(E))$, který představuje průnik obsazených stavů levého rezervoáru $f_L(E)$ a nezaplňených stavů pravého rezervoáru $[1 - f_R(E)]$. $f_X(E)$ značí Fermiho funkci a indexy L a R jsou označení pro levý a pravý rezervoár,

$$f_X(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu_X)}{k_B T}} + 1}. \quad (2.4)$$

V rovnici 2.4 E značí energii stavu a μ je chemický potenciál. \mathcal{T} značí absolutní teplotu a k_B je Boltzmanova konstanta.

Elektrony se mohou šířit s různými vlnovými vektory \vec{k} .¹ Sumou přes všechny vlnové vektory získáme hustotu proudu z levého do pravého rezervoáru,

$$J_{L \rightarrow R} = \sum_k \frac{e}{L} \frac{k\hbar}{m} T(k) f_L(E) [1 - f_R(E)]. \quad (2.5)$$

Pro snazší počítání se suma přes vlnové vektory převede na integrál,

$$\sum_k f(k) \frac{2\pi}{L} \approx \int f(k) dk. \quad (2.6)$$

Z energie volných elektronů $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ získáme vztah $dE = \frac{\hbar^2}{m} k dk$, který použijeme pro nahrazení integrace přes vlnové vektory,

$$J_{L \rightarrow R} = \frac{e}{h} \int_0^\infty T(E) f_L(E) [1 - f_R(E)] dE. \quad (2.7)$$

Hustotu proudu v drátu vyjádříme odečtením hustoty toku z pravého do levého rezervoáru $J_{L \rightarrow R}$ od hustoty toku z levého do pravého $J_{L \leftarrow R}$,

$$J = \frac{e}{h} \int_0^\infty T(E) [f_L(E) - f_R(E)] dE. \quad (2.8)$$

Spinovou degeneraci lze zahrnout faktorem 2 u výsledné hustoty proudu [1].

¹V našem případě je k jednodimenzionální.

3. Alotropy uhlíku

Alotropie je vlastnost, která látce umožňuje se vyskytovat v několika strukturních formách ve stejné fyzikální fázi. Jednotlivé alotropy se liší krystalovou strukturou nebo počtem atomů v molekule. V důsledku toho mohou mít velmi odlišné vlastnosti. Mezi nejznámější alotropní prvky patří fosfor (bílý, červený, černý, atd.), kyslík (dikyslík O_2 , ozon O_3 , tetrakyslík O_4 a superoxid O_2^-) a uhlík.

Alotropy uhlíku použijeme pro simulaci kvantového transportu, a proto se s některými z nich nejprve podrobněji seznámíme. Kromě diamantu a grafitu se uhlík může nacházet v podobě grafenu, uhlíkových nanotrubic nebo fullerenu. Další méně známé alotropy jsou amorfní uhlík a lonsdaleit.

3.1 Diamant

Diamant je nejtvrdší materiál běžně se vyskytující v přírodě. Z toho důvodu se používá pro řezání, průzkumné vrtání a broušení. Mezi další vlastnosti diamantu patří vysoký index lomu a vysoká disperze světla, díky které se uplatňuje ve zlatnictví. Pro svou odolnost a výhodné dielektrické vlastnosti se o něm uvažuje také jako o materiálu pro výkonovou elektroniku, kde má potenciál nahradit součástky z křemíku [13].

Diamant má největší tepelnou konduktanci a nejrychleji se v něm šíří zvuk ze všech látek. Koeficient termální expanze má velmi malý. Diamant chemicky nereaguje s korozivními látkami a patří mezi elektrické izolanty. Energetická mezera mezi valenčním a vodivostním pásem je 5.4 eV, což je více než energie fotonu viditelného světla (1.65 – 3.1 eV). Viditelné světlo tedy nemá dostatečnou energii na excitaci elektronu, a proto je diamant průhledný. Přítomnost nečistot jako je dusík nebo vodík v krystalové mřížce efektivně zmenšuje tuto mezeru a způsobuje, že diamant získá barvu (třeba hnědou nebo modrou).

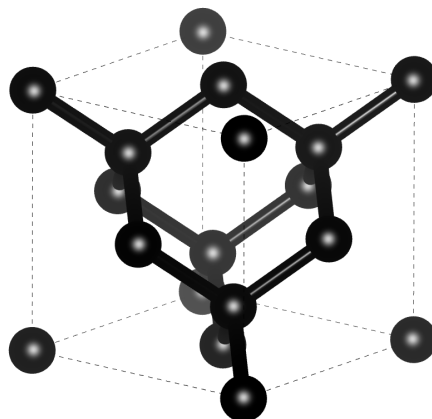
Struktura diamantu je plošně centrovaná kubická mříž patřící do prostorové grupy $Fd\bar{3}m$ č. 227 s osmi uhlíky v primitivní buňce. Uhlíky kubické mříže jsou spojeny kovalentními vazbami s dalšími čtyřmi uhlíky v tetraedrickém uspořádání. Elementární buňka je vyobrazena na obrázku (3.1).

Další formou diamantu jsou diamantové nanočástice neboli nanodiamanty, které lze vytvořit pomocí tzv. detonační syntézy za nepřítomnosti kyslíku. Mají potenciální využití jako senzory slabých magnetických polí, mechanické senzory nebo součástky pro molekulární elektroniku. Pro svoji inertnost se uvažuje o jejich využití i v medicíně jako nosiče léčiv [14].

3.2 Grafit

Druhým nejznámějším a velmi rozšířeným alotropem uhlíku je grafit. Na rozdíl od diamantu je velmi křehký a vede elektrický proud. Také má vysokou teplotu tání a za vysokého tlaku se přetváří v diamant. Za běžných podmínek patří k nejstabilnějším alotropům uhlíku.

S grafitem se velmi často setkáváme ve formě tužek. Mezi další použití patří výroba oceli a baterií. Pro jeho vysokou teplotu tání je vhodný jako žáruvzdorný

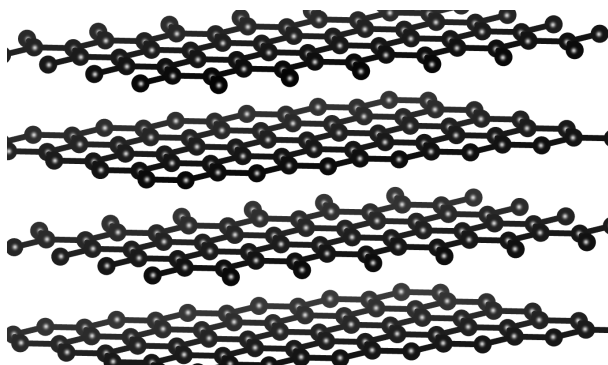


Obrázek 3.1: Elementární buňka diamantu.

materiál.

Grafit se skládá z vrstev grafenu a z toho důvodu často slouží k jeho výrobě oddělováním jednotlivých vrstev. Struktura každé vrstvy je stejná a má tvar hexagonální mřížce. Jednotlivé vrstvy drží spolu slabými van der Walsovými vazbami. Podle skládání vrstev na sebe se dělí na dvě formy, *alpha* a *beta*. První z forem má liché vrstvy přesně nad sebou a vrstva grafenu mezi nimi je posunutá (skládání ABAB), na rozdíl od formy *beta*, která má skládání vrstev ABC, kde žádné tři po sobě jdoucí vrstvy nejsou přímo nad sebou. Druhá ze zmíněných forem je méně stabilní. Mechanickým působením a tepelnou změnou lze měnit formy grafitu. Na obrázku 3.2 je vyobrazena struktura grafenu formy *alpha*.

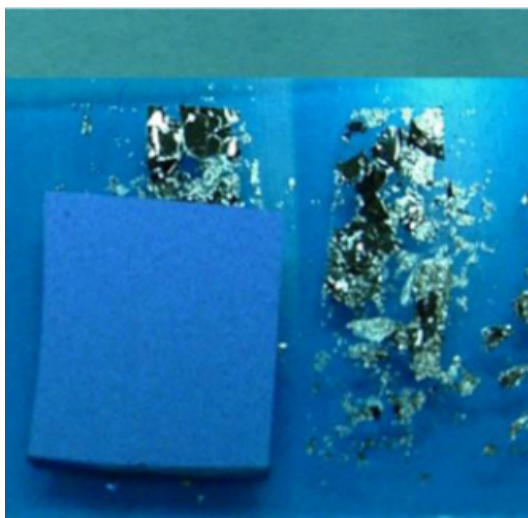
Jednou z možností jak dále měnit vlastnosti grafitu je interkalace, při které se mezi vrstvy grafitu zavedou atomy kovu v malé koncentraci. Mezi nejznámější interkaláty patří KC_8 a CaC_6 , které vykazují za nízkých teplot supravodivé vlastnosti [15].



Obrázek 3.2: Atomová struktura grafitu varianty *alpha*.

3.3 Grafen

Grafen je alotropem uhlíku, který se skládá pouze z jedné vrstvy atomů uspořádané v hexagonální mřížce. Vazby mezi jednotlivými uhlíky jsou velmi pevné a mají délku 0.142 nm. Grafen patří mezi nejtenčí materiály na světě a má velkou pevnost v tahu (130 GPa) a Yongův modul přesahující 1 TPa. Mezi jeho další



Obrázek 3.3: Exfoliace grafenu. Převzato z [4].

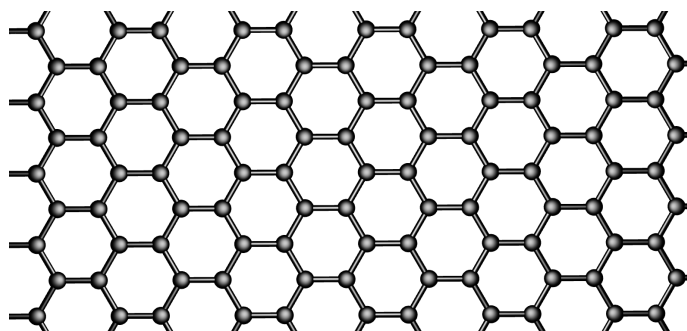
vlastnosti patří vysoká elektrická a tepelná konduktance. Absorbuje viditelné záření o všech vlnových délkách, a proto má černou barvu, i když pro svou extrémně malou tloušťku se jeví jako průhledný. Jeho struktura je vyobrazena na obrázku (3.4).

Izolace grafenu byla po dlouhou dobu velmi náročná. První zmínky o vytvoření jednovrstvé uhlíkové struktury pochází z roku 1961, kdy Hanns-Peter Boehm publikoval článek [16], ve kterém uvádí způsob výroby extrémně tenkých vrstev uhlíku pomocí manipulace oxidu grafitu. V roce 2004 vědci z univerzity v Manchesteru Andre Geim a Konstantin Novoselov objevili novou metodu výroby grafenu [17]. Pomocí lepící pásky opakovaně odloupávali vrstvy grafitu, než se jim podařilo připravit vysoce kvalitní vzorky i jednovrstvého grafenu. Oproti předchozím pokusům izolace grafenu byly vzorky stabilní za normálních podmínek. Objev této metody přinesl jejím objevitelům v roce 2010 Nobelovu cenu za fyziku. Mechanická exfoliace grafitu patří dodnes mezi preferované techniky výroby grafenu (3.3).

Grafen lze pro jeho vlastnosti použít v mnoha odvětvích, mezi které patří podávání léků například při léčbě rakoviny. Díky jeho struktuře mohou být protinádorová léčiva přichycena k jeho mřížce ve vysokém množství pomocí $\pi - \pi$ vazeb. Jedno z použití této vlastnosti je popsáno v článku [18], kde tzv. metodou „flying carpet“ (létajícího koberce) nanесли doxorubicin a protein TRAIL na grafenovou mřížku způsobem, aby při styku s rakovinou tvornou buňkou obě zmíněné protinádorové látky nejefektivněji zapůsobily. Jiné metody využívají nanosení léčiv na grafen a následné uvolnění v nádoru manipulací Ph roztoku [19].

Další využití grafenu je v elektronice a výpočetní a radiofrekvenční technice. Tranzistory vyrobené z grafenových pásků jsou schopny pracovat na vyšších frekvencích a při nižším napětí než běžně využívané křemíkové analogy a mohly by se stát základem pro novou generaci energeticky nenáročných a rychlých elektronik [20, 21]. Uvažuje se také o jejich využití jako biologických senzorů například pro analýzu DNA [22].

Pásovou strukturu grafenu jsme spočítali v příloze A.1, ze které snadno zjistíme, že se valenční pás dotýká vodivostního v tzv. Diracových bodech, což z grafenu dělá polokov. Vytvořením zakázaného pásu energií lze z grafenu vytvo-



Obrázek 3.4: Struktura grafenu.

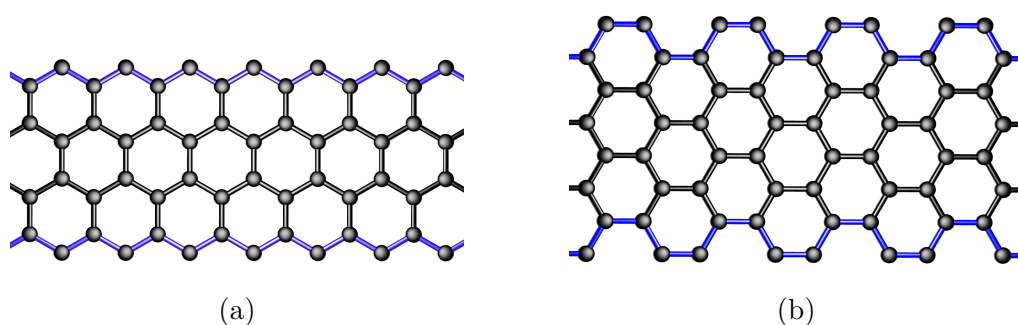
řit polovodič. V článku [23] rozebírají metody výroby polovodičového grafenu a možné využití v kombinaci s jeho elektrickými transportními vlastnostmi.

3.4 Grafenové nanopásky

Grafen má dvoudimenzionální strukturu vyobrazenou na obrázku 3.4. Pokud bychom vzali pomyslné nůžky a rozstříhali ho na proužky, vytvořili bychom grafenové nanopásky. V závislosti na úhlu stříhu bychom získali různé varianty. Mezi dvě hlavní patří tzv. zigzag a armchair. Obě varianty jsou zobrazeny na obrázku 3.5.

Oba zmíněné pásky jsou složeny z uhlíků, mezi kterými jsou stejně dlouhé a stejně pevné vazby. Liší se ale jejich elektrické vlastnosti. Uhlíkový nanopásek zigzag se vždy chová jako kov a tedy jeho Fermiho energie nespadá do pásu zakázaných energií. Varianta armchair se v závislosti na šířce pásku chová jako kov nebo jako polovodič.

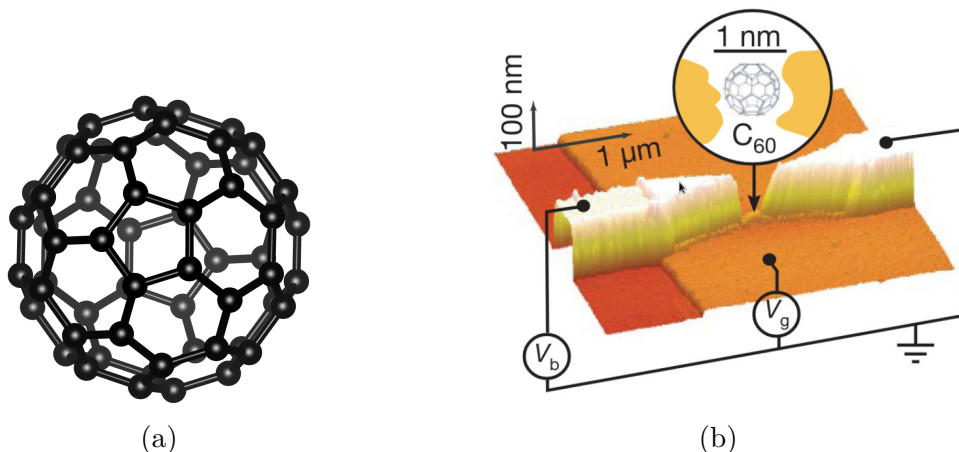
Pomocí simulačního balíku Kwant jsme nasimulovali transport skrze obě varianty uhlíkových nanopásků pro různé délky a šířky. Výsledky simulace si ukážeme v kapitole 5.



Obrázek 3.5: Varianty uhlíkových nanopásků zigzag (a) a armchair (b) s modře vyznačenými okraji.

3.5 Další alotropy uhlíku

Fullereny jsou typem alotropů uhlíku, které často tvoří uzavřené systémy. Mezi nejznámější patří C_{60} , který bývá často asociovaný s fotbalovým míčem.



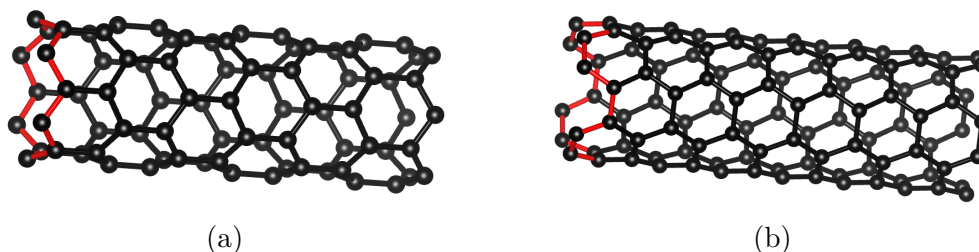
Obrázek 3.6: Struktura fullerenu C_{60} (a) a AFM snímek zlatých vodičů s fullere-
nem jako vodivostním prvkem (b). Převzato z [24].

Jeho struktura je zobrazena na obrázku 3.6a. V článku [24] vytvořili pomocí AFM snímek atomového spoje ze zlatých vodičů vytvořeného pomocí tzv. elektromigrace, mezi které umístili jedinou molekulu fullerenu 3.6b. Tento systém se pak chová jako molekulární tranzistor.

Dalším alotropem uhlíku se zajímavými vlastnostmi pro aplikace v moderní elektronice jsou **uhlíkové nanotrubic**, které mají strukturu grafenu stočeného do válce s poloměrem jednotek až desítek nanometrů a délkou až $100\ \mu\text{m}$. Mohou se skládat z jedné nebo více vrstev a podobně jako grafenové nanopásky mají různé fyzikální vlastnosti v závislosti na úhlu stříhu. Příklady uhlíkových nanotrubic v konfiguraci zigzag a armchair jsou zobrazeny na obrázku 3.7. Existuje ještě chirální varianta nanotrubic, která vznikne stříhem pod obecným úhlem, kterým je také charakterizována.

Amorfní uhlík na rozdíl od předchozích nemá krystalovou mřížku. Oproti grafitu a diamantu se skládá z obou hybridizovaných vazeb sp^2 i sp^3 a v závislosti na jejich poměru má různé vlastnosti.

Lonsdaleit má hexagonální strukturu. Nachází se v meteoritech a na základě simulací by mohl mít větší tvrdost než diamant. Přírodní lonsdaleit má v důsledku nečistot a krystalových poruch tvrdost pouze 7 – 8 Moshovy škály.



Obrázek 3.7: Dvě varianty uhlíkových nanotrubic zigzag (a) a armchair (b) s
červeně vyznačeným koncem.

4. Balík Kwant

Kwant [kwant-project.org] je balík programovacího jazyku Python sloužící simulaci kvantového transportu v nanoskopických systémech napojených na masivní elektrody [25]. Dokáže vypočítat veličiny, mezi které například patří konduktance, rozptylová matice, disperzní relace a vlnová funkce.

Balík Kwant oproti jiným způsobům simulace kvantového transportu vyniká díky vysoké flexibilitě a jednoduchosti použití. Výpočetní rychlost často bývá lepší než u programů napsaných v jazyku Fortran nebo C/C++.

Pro popis systému používá balík Kwant těsno-vazebný model, ve kterém může modelovat mnoho systémů zahrnujících kovy, molekuly, supravodivé materiály, topologické izolátory i součástky z molekulární elektroniky.

Počítání v systémech s těsno-vazebným modelem pro velké systémy bývá početně velmi náročné. Z toho důvodu má balík Kwant „low-level“ reprezentaci, ve které snadno dokáže provést příslušný výpočet s omezenými výpočetními zdroji, třeba stolní PC. Tato reprezentace spočívá v převedení těsno-vazebného modelu, který je reprezentován jako neregulární graf, do podoby řídké matice, kterou lze řešit zabudovanými solvery. Pro každou funkci s danou symetrií včetně vodiče se implicitně předpokládá zachování její symetrie. Díky tomu lze efektivně počítat i systémy s vysokým počtem rozptylových center. Nová verze TKwant [26] dokáže spočítat i systémy s časově závislou vnější poruchou jako jsou napěťové pulzy.

V naší práci jsme použili verzi balíku Kwant 1.4.2, která byla při psaní práce nejaktuálnější. Počítačové kódy byly psány v prostředí Spyder 4.1.5 v programovacím jazyku Python verze 3.8.

4.1 Těsno-vazebný model

Těsno-vazebný model je kvantově mechanický model, který používá k popisu elektronů vlny. Vodiče připojené k systému slouží jako vlnovody, které vedou elektrony z a do systému. V prvním kvantování lze Hamiltonián systému zapsat ve tvaru

$$\hat{H} = \sum_{i,j} H_{i,j} |i\rangle \langle j|, \quad (4.1)$$

ve kterém jsou $H_{i,j}$ členy nekonečné Hermitovské matice a vektory $|i\rangle = |\alpha r\rangle$ reprezentují kombinaci polohy atomu v mřížce r s jeho vnitřními stupni volnosti α jako jsou spin nebo atomový orbital. Takové vyjádření nám umožní zapsat pouze část Hamiltoniánu, která představuje vazbu atomu s polohou r s jeho okolními sousedy r' ,

$$\hat{H}_{r,r'} = \sum_{\alpha,\alpha'} H_{r\alpha,r'\alpha'} |r\alpha\rangle \langle r'\alpha'|. \quad (4.2)$$

Sumou přes všechny polohy atomů získáme Hamiltonián systému, který reprezentuje systémy jako je na obrázku (4.1). Hamiltonián zakreslených poloh atomů je potom $\hat{H}_{r,r}$ a pro spoje $\hat{H}_{r,r'}$, kdy r a r' jsou různé.

K systémům bývá připojeno i několik nekonečně dlouhých vodičů. Díky jejich periodicitě je lze zapsat v konečné reprezentaci. Hamiltonián vodiče připojeného k systému lze zapsat v hermitovské třídiagonální blokové matici

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & V_L & & \\ V_L^\dagger & H_L & V_L & \\ & V_L^\dagger & H_L & V_{LS} \\ & & V_{LS}^\dagger & H_S \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Matice H_S ve vztahu 4.3 je vyjádření Hamiltoniánu systému a H_L je vyjádření Hamiltoniánu jedné buňky vodiče. Matice V_L vzájemně napojují buňky vodičů a V_{LS} napojuje vodič na rozptylový systém. V_L^\dagger a V_{LS}^\dagger značí komplexně sdružené matice s maticemi V_L a V_{LS} .

Vlastní vlnové funkce v j -té buňce vodiče budou mít díky translační invarianci tvar

$$\phi(j) = (\lambda_n)^j \chi_n, \quad (4.4)$$

který splňuje Shrödingerovu rovnici $(H_L + V_L \lambda_n^{-1} + V_L^\dagger \lambda_n) \chi_n = E \chi_n$.

Vlny, pro které platí $|\lambda_n| < 1$, jsou evanescentní a nepřispívají k vedení proudu. Ostatní, které splňují $|\lambda_n| = 1$ lze zapsat pomocí vlnového vektoru ve formě komplexní exponenciály $\lambda_n = e^{ik_n r}$. Ty se dále dělí na příchozí a odchozí. Výsledná vlnová funkce j -té buňky vodiče lze zapsat ve tvaru

$$\psi_n(j) = \phi_n^{in} + \sum_m S_{mn} \phi_m^{out}(j) + \sum_p \tilde{S}_{pn} \phi_p^{ev}(j), \quad (4.5)$$

kde S_{mn} značí rozptylovou matici, potřebnou k výpočtu konduktance. Funkci uvnitř systému označíme

$$\psi_n(0) = \phi_n^S. \quad (4.6)$$

Výpočtem rozptylové matice lze získat konduktanci systému z vodiče a do b pomocí Landauerovy formule

$$G_{ab} = \frac{e^2}{h} \sum_{n \in a, m \in b} |S_{nm}|^2, \quad (4.7)$$

kde sčítáme přes všechny transversální módy vodičů a a b .

Lokální hustotu stavů a hustotu proudu určíme pomocí vlnové funkce v systému 4.6 užitím obecného vztahu

$$\langle c_i^\dagger c_j \rangle = \int \frac{dE}{2\pi} \sum_n f_n(E) [\phi_n^S(i)]^\dagger \phi_n^S(j), \quad (4.8)$$

kde funkce $f_n(E)$ je Fermiho funkce vodiče, ke kterému je kanál n přiřazen a c_i^\dagger a c_j značí kreační a anihilační operátor. Písmena i a j značí různé stupně volnosti systému.

4.2 Výpočet pásové struktury

Pásová struktura udává energetické hladiny v pevných látkách, které mohou elektrony obsadit. Energetické hladiny pásové struktury jsou vyjádřeny v recipročním „ k -prostoru“, který značí prostor vlnových vektorů elektronů. Závislost energie E na vlnovém vektoru \vec{k} , která se označuje disperzní relace, udává pásovou strukturu.

Disperzní relaci získáme z Shrödingerovy rovnice $\hat{H}\psi = E\psi$ použitím vhodné aproximace. Mezi nejčastější aproximace patří omezení se na interakce mezi nejbližšími sousedy. Dosazením vlnové funkce elektronu $\psi(\vec{k})$ závislé na vlnovém vektoru do rovnice získáme požadovanou relaci.

Výsledná disperzní relace je sudá periodická funkce vlnového vektoru \vec{k} . To umožňuje vyjádření pouze v rozsahu tzv. první Brillouinovy zóny. Protože disperzní relace je obecně funkce tří proměnných k_x , k_y a k_z , obvykle se zobrazuje ve formě řezu Brillouinovou zónou podél význačných řezů. Pro dvourozměrné systémy jako je grafen ji lze zobrazit také ve formě jako je na obrázku A.4 v příloze (A.1).

4.3 Simulace obecného modelu

Nyní si jako příklad použití balíku Kwant ukážeme obecnou simulaci kvantového transportu pro kvantový bodový kontakt tvořený tenkým dvoudimenzionálním páskem. Začneme importováním knihovny *kwant* a vytvořením systému a mřížky. Mřížku jsme zvolili hexagonální zadáním mřížkových vektorů a báze. Pro vykreslení grafů použijeme knihovnu *matplotlib*.

```
import kwant
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

sys = kwant.Builder()
lat = kwant.lattice.general([(0.5 * np.sqrt(3), 0.5), (0, 1)],
                           [(0, 0), (1 / np.sqrt(3), 0)])
```

Následně vytvoříme systém, jehož konduktance nás bude zajímat a nastavíme lokální energii na 4 a amplitudu přeskočků mezi nejbližšími sousedy na -1 .

```
def rectangle(position):
    (x, y) = position
    x = max(abs(x) - 2, abs(y))
    return x < 5

sys[lat.shape(rectangle, (0, 0))] = 4
sys[lat.neighbors()] = -1
```

Funkce *lat.shape(rectangle, (0, 0))* vybírá mřížkové body systému, pro jejichž polohu vrátí funkce *rectangle* pravdivostní hodnotu a lze jich dosáhnout z námi zvoleného bodu $(0,0)$ pomocí mřížkových vektorů.

Stejným způsobem nadefinujeme příchozí a odchozí elektrody. Pouze s rozdílem uvedení jejich transverzální symetrie.

```
lead_sym=kwant.TranslationalSymmetry(lat.vec((-2,1)))
lead = kwant.Builder(lead_sym)
lead[lat.shape(rectangle, (0, 0))] = 4
lead[lat.neighbors()] = -1
sys.attach_lead(lead)
sys.attach_lead(lead.reversed())
```

Transverzální symetrii *lead_symmetry* zadáme kombinací mřížových vektorů *lat.vec((-2, 1))* a výsledným vektorem se vodič prodlouží do nekonečna. Opět jsme použili funkci *lat.shape(rectangle, (0,0))*, která vrátí všechny body systému a symetrie vodiče je prodlouží jedním směrem do nekonečna. Nastavíme lokální energii pro jednotlivé mřížkové body a amplitudu přeskočení ve vodičích na 4 a -1. V posledních dvou řádcích připojíme vodič z obou stran k systému. Nyní převedeme celý systém do podoby vhodné pro počítání tzv. low-level reprezentace *sys = sys.finalized()*.

```
sys = sys.finalized()
lead = lead.finalized()

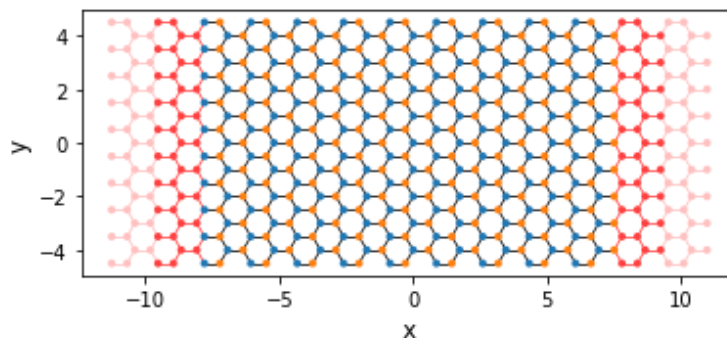
kwant.plot(sys, show = False)
plt.xlabel('x', fontsize = 12)
plt.ylabel('y', fontsize = 12)

kwant.plotter.bands(lead, show = False)
plt.xlabel('Vlnový vektor ' + r'$\mathregular{[a^{-1}]}'$,
           fontsize = 14)
plt.ylabel(r'Energie $[t]$', fontsize = 14)
```

Systém lze zobrazit pomocí funkce *kwant.plot()* pro kontrolu poloh mřížkových atomů a správného připojení vodičů k systému. Pásovou strukturu získáme funkcí *kwant.plotter.bands(lead)* a osy grafů příslušně pojmenujeme pomocí funkce *plt.x/ylabel()*.

Výpočet rozptylové matice můžeme pro několik hodnot energií zobrazit konduktanci systému *kwant.smatrix(sys, en).transmission(0, 1)*.

```
energies = [1 + 1e-2 * i for i in range(50)]
conductances = [kwant.smatrix(sys, en).transmission(0, 1)
                 for en in energies]
conductance_graf = plt.figure('Graf konduktance')
plt.plot(energies, conductances)
plt.xlabel('Energie [t]', fontsize = 14)
plt.ylabel(r"Konduktance [ $\frac{e^2}{h}$ ]", fontsize = 14)
```

Obrázek 4.1: Vykreslení systému s červeně vyznačenými částmi vodiče a oranžově a modře vyznačenými polohami atomů ukázkového systému

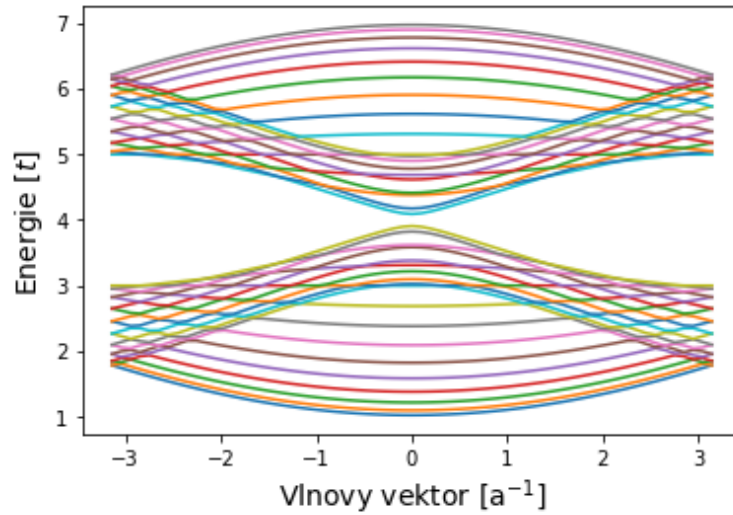
Balík Kwant také dokáže spočítat v každém místě systému lokální hustotu stavů. V našem případě jsme ji spočítali pro energii elektronů rovnu 2. V posledním kroku jsme vykreslili grafy.

```
local_dos = kwant.ldos(sys, energy = 2)
kwant.plotter.map(sys, local_dos, show = False)
plt.xlabel('x', fontsize = 12)
plt.ylabel('y', fontsize = 12)
plt.show()
```

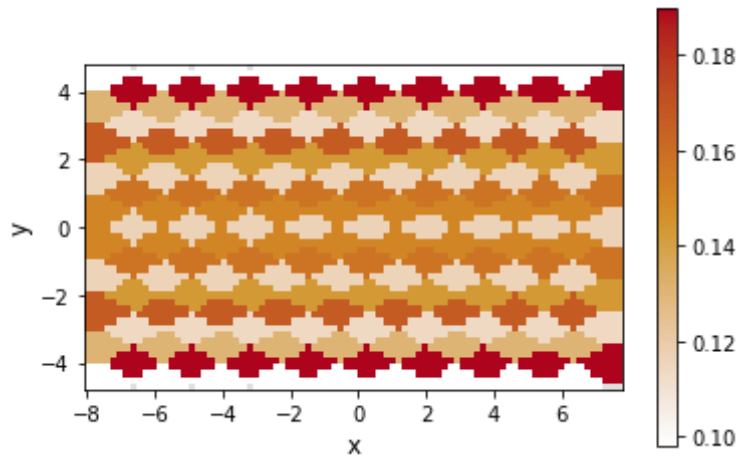
Provedením předchozích kroků získáme čtyři obrázky. Na prvním z nich je zobrazena obdélníková struktura systému s vazbami mezi atomy (4.1). Velikost systému je určena pomocí os v jednotkách mřížkové konstanty. Pásová struktura vodiče je zobrazena na druhém obrázku (4.2). Dále jsme vykreslili hustotu stavů na obrázku 4.3, která je největší podél hran systému.

Poslední obrázek 4.4 udává závislost konduktance na energii elektronů. Pro úzké pásy s šířkou srovnatelnou s vlnovou délkou elektronů budeme pozorovat kvantové chování konduktance, které je typické pro kvantové bodové kontakty. Porovnáním s pásovou strukturou zjistíme, že konduktance skokově vzroste při obsazení další energetické hladiny vodivostního pásu.

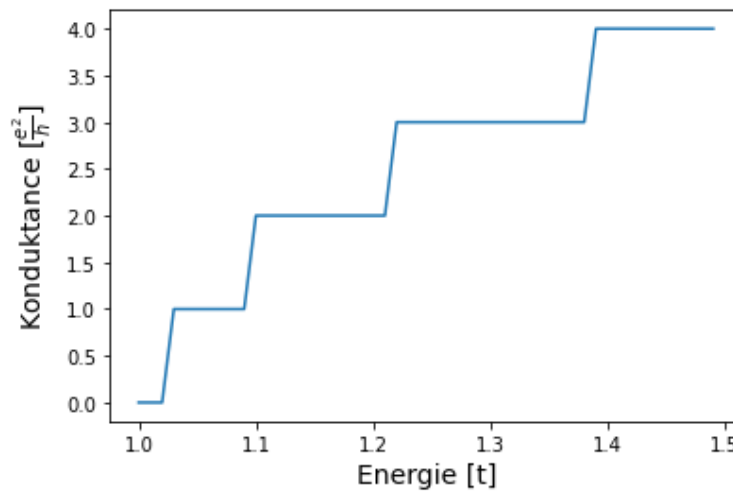
Hotový skript můžeme nalézt v příloze A.2 spolu se skriptem na simulaci kvantového transportu v uhlíkových nanopáskách.



Obrázek 4.2: Pásová struktura systému.



Obrázek 4.3: Lokální hustota stavů je nejvyšší podél hran systému.



Obrázek 4.4: Závislost konduktance systému na energii elektronů. Schodovitý průběh je typický pro kvantové bodové kontakty.

5. Výsledky: Elektronová struktura grafenových pláteků

V této kapitole si ukážeme výsledky našich simulací. Několik systémů s grafenovou strukturou jsme namodelovali pro zjištění a porovnání jejich elektronických vlastností.

Zajímala nás především závislost konduktance na energii elektronu a pásová struktura. Ke každému systému jsme připojili z protilehlých stran vodiče, které mají stejnou strukturu jako systém, pouze jsou protaženy jedním směrem do nekonečna. Výpočtem jejich pásové struktury budeme schopni určit energie elektronů šířících se ve vodiči.

Elektronické vlastnosti uhlíkových nanopásků jsme proměřovali v závislosti na jejich geometrii (zigzag a armchair) a jejich šířce. Délka systému pásovou strukturu neovlivní, protože ji určuje struktura vodiče. Výsledná konduktance závisí na rozptylové matici S . Ta udává příspěvky od transversálních módů šířící se v protějším vodiči procházející skrze systém. Ten má shodnou strukturu jako nekonečný vodič, a proto jeho délka konduktanci neovlivní.

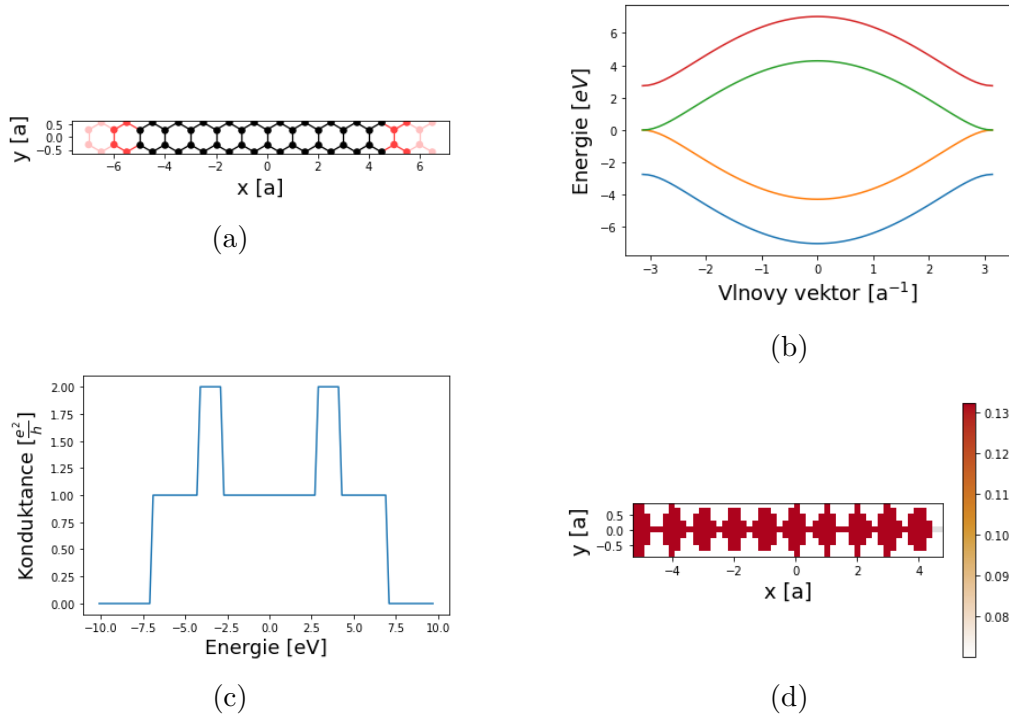
5.1 Varianta zigzag

Variantu zigzag jsme modelovali pomocí mřížkových vektorů $(1,0)$ a $(0,\sqrt{3})$ s bází o čtyřech prvcích $(0, \frac{\pm 1}{2\sqrt{3}})$ a $(0.5, \frac{\pm 1}{\sqrt{3}})$. Cílem výběru takových vektorů bylo napojení vodiče na rozptylový systém bez nutnosti prodlužování systému u neúplných spojů, kdy napojení vodiče nebylo rovnoběžné s hranou systému. Mřížkové vektory jsou na sebe kolmé a vybráním prvního z nich pro symetrii vodiče $lat.vec(\pm 1, 0)$ získáme variantu zigzag uhlíkového nanopásku.

Zbývá pouze nastavit hodnoty potenciálu na jednotlivých atomech a amplitudy přeskočů pro systém a připojené vodiče. V článku [27] Rupali Kundu uvedla parametry těсно-vazebného modelu grafenu pro nejbližší a druhé a třetí nejbližší sousedy. Naše simulace počítá pouze s nejbližšími sousedy, pro které jsou hodnoty parametrů lokální energie $\epsilon_0 = 0$ eV a amplituda transmise $t = -2.74$ eV. Příspěvky vazeb mezi vzdálenějšími atomy jsou řádově stokrát menší. Vazby mezi atomy ve vodiči jsme nastavili stejným způsobem jako vazby systému, z toho důvodu není třeba řešit zvlášť napojení vodiče na systém. Potenciál na atomech v obou vodičích jsme nastavili na hodnotu 0 eV a měnili jsme pouze energii elektronů proudících do systému. Pro námi vybrané elektronické vlastnosti tato volba nebude mít vliv na výsledek. Nastavení potenciálu na jednom vodiči udává počáteční energetickou hladinu a změna potenciálu na druhém vodiči je ekvivalentní změně energie elektronů proudících do systému.

Tvar systému jsme nechali obdélníkový, jako je v ukázkovém skriptu. Pouze jsme změnili škálu a počátek na vertikální ose pro lepší manipulaci s šířkou systému.

Systém i vodič jsme převedli do tvaru vhodného pro počítání (low-level reprezentace) a pomocí nich spočítali pásovou strukturu, závislost konduktance na energii elektronu a lokální hustotu stavů systému. Společně se strukturou systému si výsledky pro pár vzorků ukážeme.



Obrázek 5.1: Struktura systému zigzag páska s šířkou $S = 1$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).

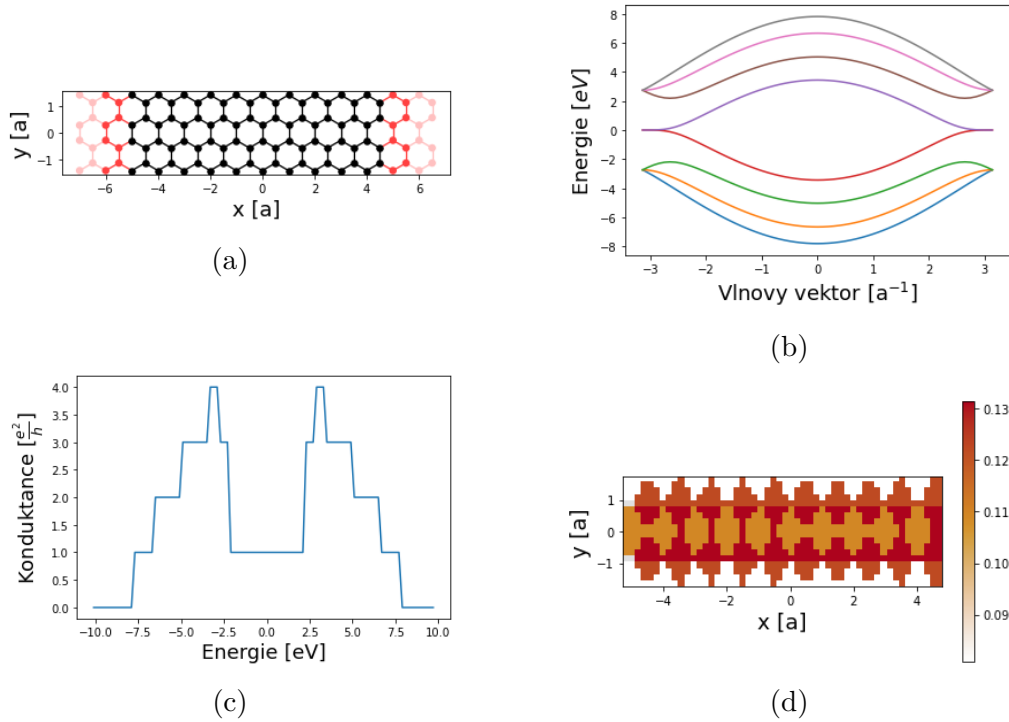
Nejjednodušší případ zigzag páska je systém pouze s jedním řádkem hexagonálních uhlíkových kroužků. Na obrázku 5.1 vidíme pásovou strukturu, konduktanci systému v závislosti na energii a lokální hustotu stavů pro energii elektronů $E = 3$ eV.

Pásová struktura nemá pás zakázaných energií a z toho důvodu se varianta zigzag chová jako kov při vedení elektronů. Fermiho hladinu vypočteme ze vztahu $E_F = \nu_L - \nu_P$. Elektrochemické potenciály ν_L a ν_R v obou vodičích jsme nastavili na nulu, a proto bude Fermiho hladina $E_F = 0$ eV.

Závislost konduktance na energii elektronů je na obrázku (5.1c). Hodnota $G_0 = \frac{2e^2}{h}$ se často označuje kvantum konduktance, které zahrnuje spinovou degeneraci. Konduktanci našeho systému měříme bez spinové degenerace. Proud z levého do pravého rezervoáru teče v našem případě stejným způsobem jako opačným směrem, a z toho důvodu je závislost konduktance na energii elektronů reprezentována sudou funkcí. Pro hodnoty od -7 eV do 7 eV se elektrony mohou pohybovat alespoň v jednom transversálním módu ve shodě s pásovou strukturou, která udává možné energie vodivostních elektronů. Pro hodnoty mezi ± 2.74 eV a přibližně ± 4.2 eV se šíří ve dvou módech, jelikož elektrony s takovými energiemi mohou obsazovat dvě hladiny.

Lokální hustota stavů udává pravděpodobnost nalezení elektronu v libovolném místě systému. Přiložením atomové struktury systému na hustotu stavů zjistíme, že největší hustota se nachází na vnitřních dvou atomech uhlíkového nanopásku.

V chemii se tyto řetízky benzenových jader označují jako aceny (podle počtu jader tetracen, pentacen, hexacen, ...) a pro jejich dobrou konduktanci se o nich

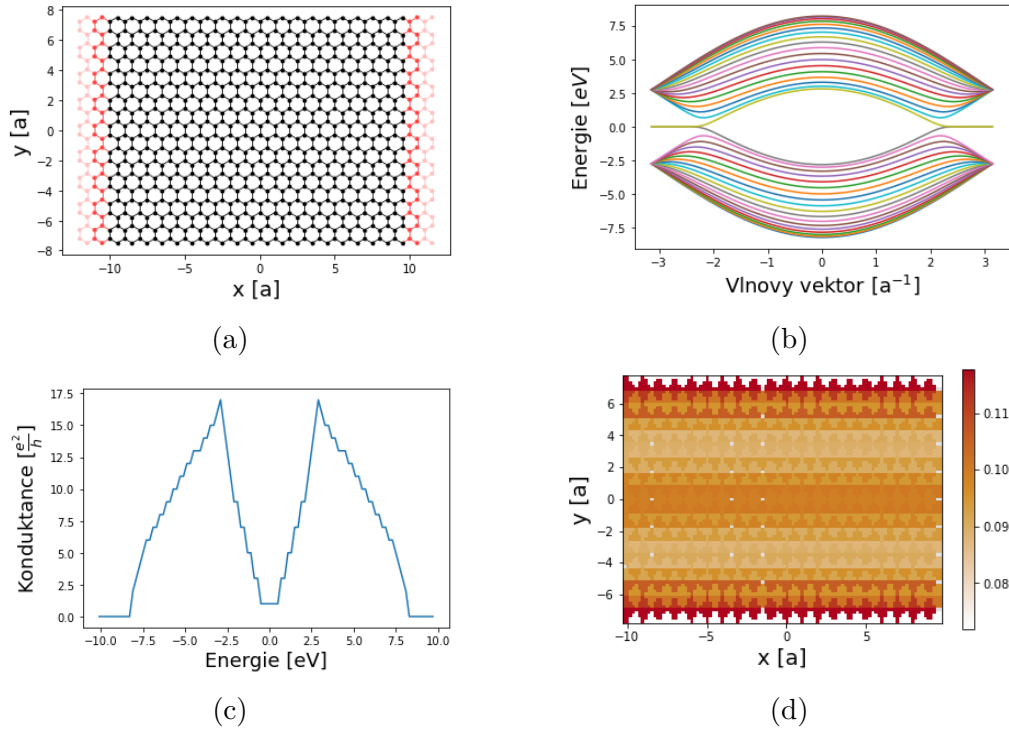


Obrázek 5.2: Struktura systému zigzag pásku s šířkou $S = 3$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).

uvažuje jako o vodičích pro molekulární elektroniku. Tyto molekuly jsou ale velice reaktivní a nestabilní za přítomnosti vzduchu, což je činí nevhodné pro většinu aplikací [28]. Lepší stabilitu vykazují pásy větší šířky, a proto se podíváme na jejich vlastnosti.

Šířku jednotlivých pásků S značíme podle počtu hexagonálních kruhů „nad“ sebou (ve směru osy y). Pro šířku $S = 3$ uhlíkového nanopásku varianty zigzag jsme získali výsledky vyobrazené na obrázku (5.2). Pásová struktura byla rozšířena o několik energetických hladin oproti pásku s šířkou $S = 1$. Systém se ale stále chová jako kov, díky přítomnosti stavu na nulové energii. Konduktance takového pásu je největší pro energie elektronů v okolí $E = 3$ eV, pro kterou jsme také vyobrazili lokální hustotu stavů systému.

Elektronické vlastnosti varianty zigzag si ještě ukážeme pro šířku $S = 17$. Pro lepší přehlednost jsme zvětšili i délku systému, na které výsledky našich výpočtů nezávisí. Energetické hladiny jsou velmi hustě naskládány na sobě a dalším zvětšením šířky by jich pouze přibývalo. Konduktance systému je s rozšiřujícím se systémem také čím dál větší. Rozmezí energií elektronů, které mohou vést elektrický proud, se mírně zvětšuje a zároveň narůstá počet jejich transversálních módů. Pro energie v okolí $E = \pm 2.8$ eV je konduktance největší a dosahuje hodnoty $G = 17 \frac{e^2}{h}$. Systém se ale pořád chová jako kov a stav na nulové energii se s přibývajícím šířkou téměř nemění. Pro energii elektronů $E = 3$ eV jsme vyobrazili lokální hustotu stavů systému, která je největší kolem zigzag hran pásu.



Obrázek 5.3: Struktura systému zigzag pásku s šířkou $S = 17$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).

5.2 Varianta armchair

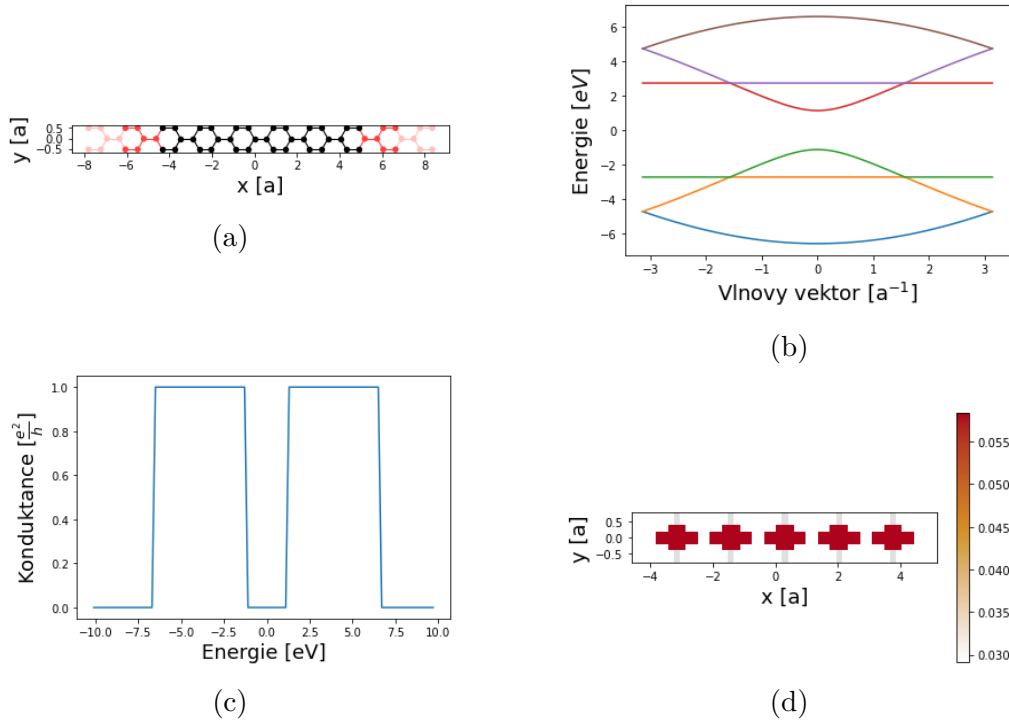
Uhlíkový nanopásek varianty armchair je na obrázku (3.5b). Jeho strukturu jsme vytvořili pomocí mřížových vektorů $(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$ a $(0,1)$ s bází $(0,0)$ a $(\frac{1}{\sqrt{3}}, 0)$. Oproti variantě zigzag mřížové vektory na sebe nejsou kolmé. Z toho důvodu jsme periodické prodloužení vodičů vybrali jako jejich kombinaci $lat.vec(\pm 2, \mp 1)$. V tomhle případě je druhý mřížový vektor kolmý na směr prodloužení vodičů a napojení na obdélníkový systém bude bez problémů.

Lokální energie systému i vodičů jsou opět nulové a přeskoky mezi jednotlivými atomy jsme ponechali na hodnotě $t = -2.74$ eV.

Tvar systému je obdélníkový, ale rozlišuje se na dva případy. V prvním z nich je v každém „sloupci“ stejný počet hexagonálních kroužků a v druhém případě se jeho šířka pravidelně střídá o jeden šestiúhelník. Jejich šířky budeme značit $S = n$ a $S = n + \frac{1}{2}$ pro $n \in \mathbb{N}$, kde n značí počet hexagonálních struktur „nad“ sebou.

Pro porovnání s variantou zigzag si ukážeme pásovou strukturu, závislost konduktance na energii elektronů a lokální hustotu stavů elektronů. Strukturu obou variant si ukážeme i s jejich elektronickými vlastnostmi. Nej užší možný nanopásek varianty armchair bude mít tloušťku $S = 0.5$ a jeho výsledky simulace jsou na obrázku (5.4). V chemii se tato struktura nazývá poly(para-fenylen) a uvažuje se o jeho aplikacích jako organickém polovodiči.

Z pásové struktury 5.4b je vidět, že se varianta armchair při tloušťce $S = 0.5$ opravdu chová jako polovodič, kvůli pásu zakázaných energií. V závislosti na šířce



Obrázek 5.4: Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 0.5$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).

se bude velikost pásu zakázaných energií měnit. Pro některé případy, které si dále ukážeme, může pás vymizet. Zahrnutí vazeb mezi druhými a třetími nejbližšími sousedy může mít také vliv na pás zakázaných energií. Podle teorie funkcionálu hustoty (DFT) se pás zakázaných energií zužuje s rostoucí šířkou pásku S [29].

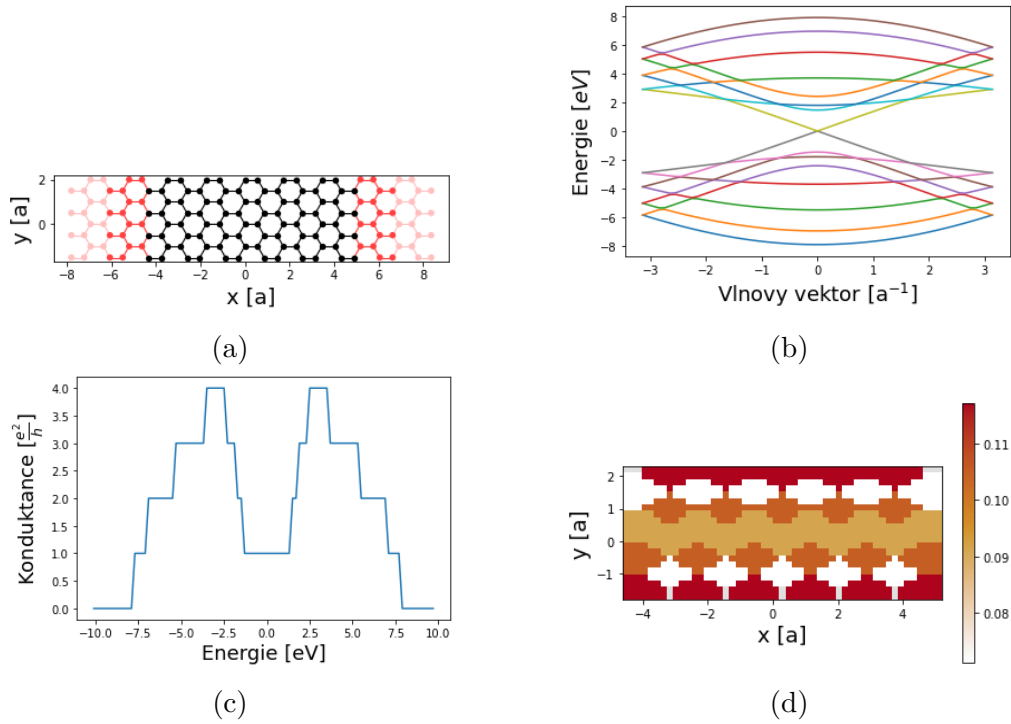
Elektrony, které mohou vést elektrický proud, musejí mít energii přibližně v rozmezí 1 eV až 6.5 eV, viz (5.4c). Oproti pásku zigzag se zde nenachází vodivostní hladiny na nulové energii. Lokální hustota stavů opět vykazuje periodicitu podél systému.

Nyní si ukážeme strukturu a elektronické vlastnosti druhé varianty pásku s šířkou $S = 3$ na obrázku (5.5). Pásová struktura takového pásku nemá pás zakázaných energií, a proto se v naší simulaci chová jako kov. Energie, okolo které konduktance nabývá maxima, je shodná s variantou zigzag $E = 3$ eV.

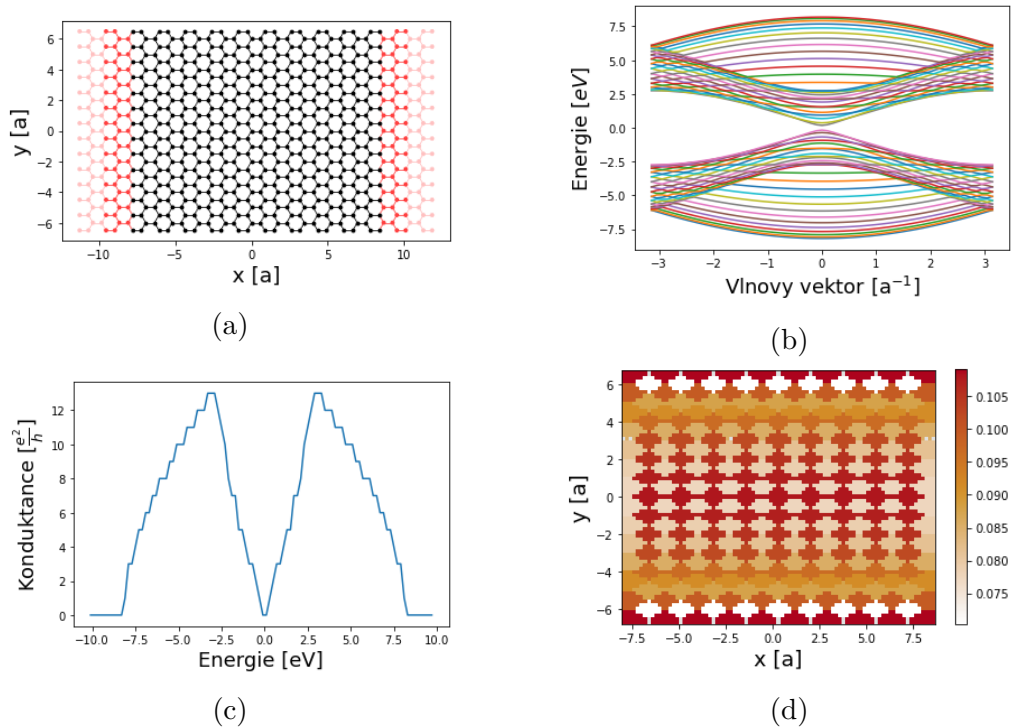
Pro široké pásy o šířce $S = 12.5$ jsme opět zvětšili jejich délku pro lepší přehlednost. Hustota energetických pásů se zvětšuje s rostoucí šířkou a konduktance dosahuje maxima pro energie v okolí hodnoty $E = 3$ eV.

5.2.1 Pravidlo 3M-1

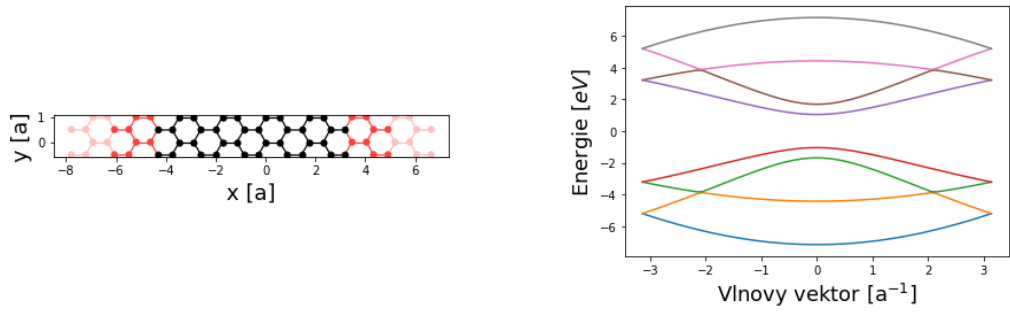
Vidíme, že varianta armchair se někdy chová jako kov a někdy jako polovodič v závislosti na šířce pásku. Pro lepší ukázkou této závislosti si vyobrazíme pásovou strukturu dalších pásků varianty armchair o různých šířkách. Pásovou strukturu jsme si pro šířky $S = 0.5$ a $S = 3$ ukázali na obrázcích 5.4b a 5.5b. Další pásy s šířkami S mezi hodnotami 0.5 až 4.5 si ukážeme na obrázcích 5.7 až 5.11.



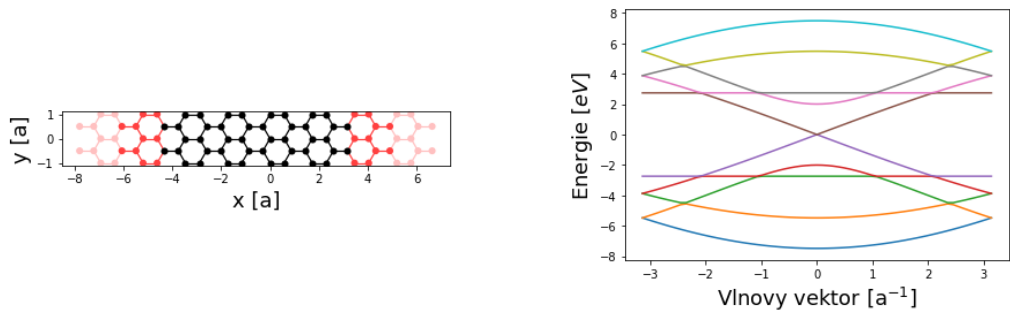
Obrázek 5.5: Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 3$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).



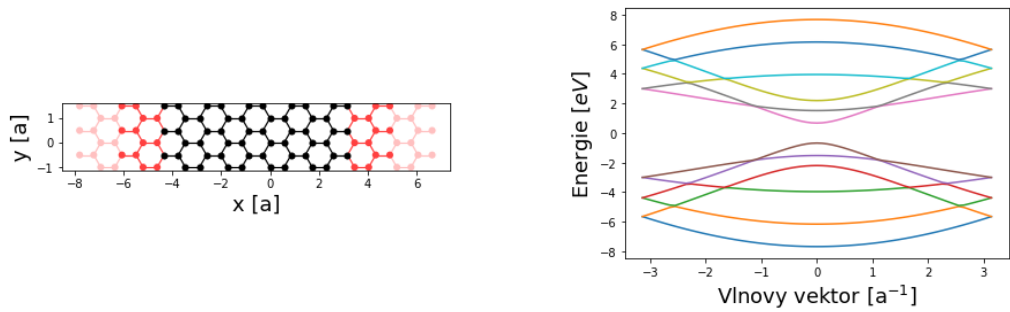
Obrázek 5.6: Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 12.5$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).



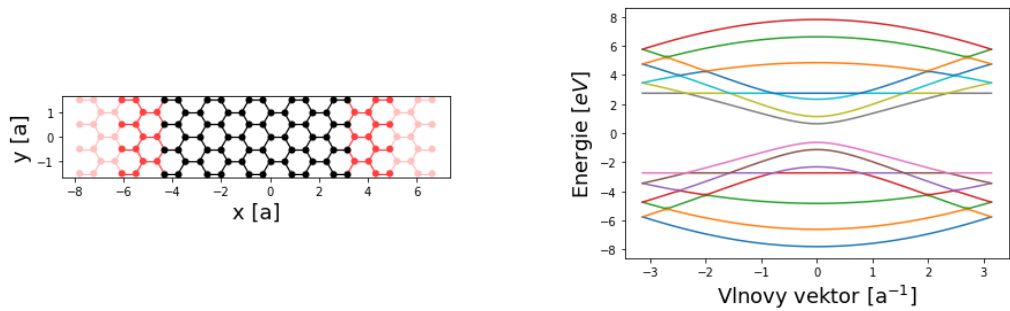
Obrázek 5.7: Struktura armchair pásku s šířkou $S = 1$ (a) a jeho pásová struktura (b).



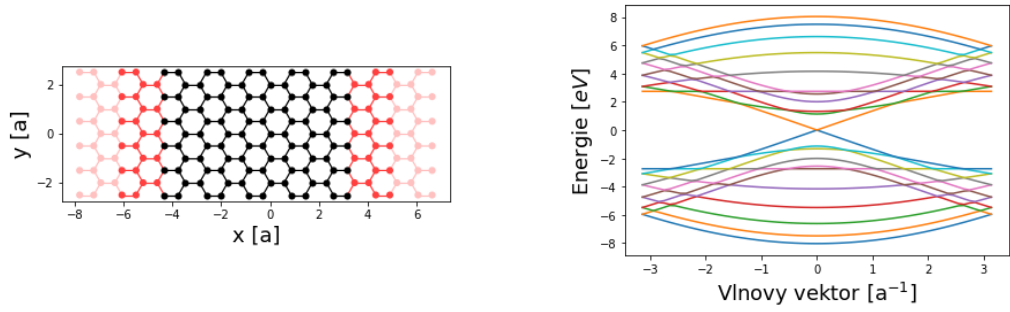
Obrázek 5.8: Struktura armchair pásku s šířkou $S = 1.5$ (a) a jeho pásová struktura (b).



Obrázek 5.9: Struktura armchair pásku s šířkou $S = 2$ (a) a jeho pásová struktura (b).



Obrázek 5.10: Struktura armchair pásku s šířkou $S = 2.5$ (a) a jeho pásová struktura (b).



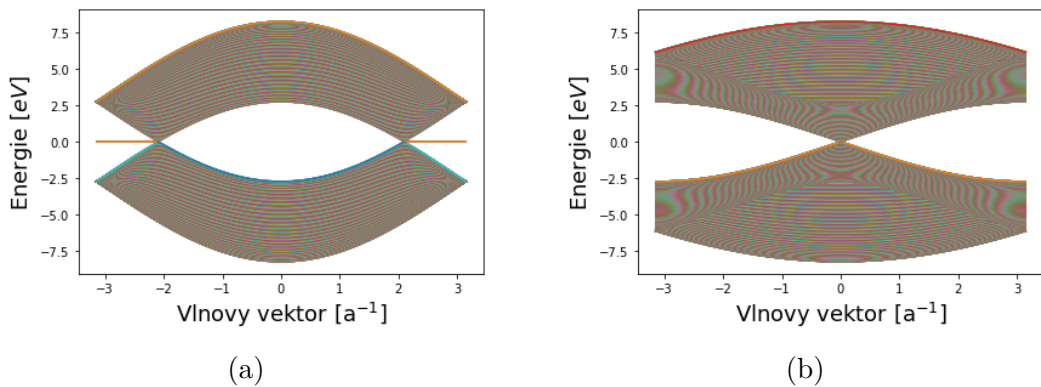
Obrázek 5.11: Struktura armchair pásku s šířkou $S = 4.5$ (a) a jeho pásová struktura (b).

Na obrázcích 5.8, 5.5b a 5.11 se valenční pás dotýká vodivostního a pásy se tedy chovají jako kov. Šířky těchto pásků byly $S = 1.5$, $S = 3$ a $S = 4.5$. Nanopásy armchair s šířkami $S = 1.5N$, kde N je celé číslo, se tedy chovají jako kov a pro jiné šířky mají nenulový pás zakázaných energií, který se s rostoucí šířkou zmenšuje. Taková závislost se v literatuře obvykle označuje jako pravidlo $N = 3M - 1$ kvůli odlišnému zavedení značení šířky pásku. Vykreslení dalších pásových struktur by popsanou periodicitu potvrzovalo. Tuto závislost podrobněji rozebrali Nakadu a kol. v článku ([30]). Analyticky lze toto pravidlo odvodit pomocí metod topologie a teorie grafů, co jde ale za cíle této práce. Podrobné odvození lze nalézt v článku od Hosoya a kol. ([31]).

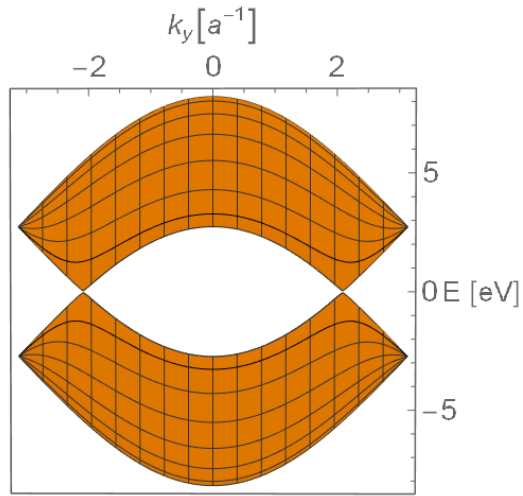
5.3 Limitní případy pásků

Limitní případy systémů, které jsme byli schopni s naší technikou spočítat jsou vyobrazeny na obrázcích 5.12 a 5.14. Pro šířku $S = 300$ jsme pro obě varianty grafenových nanopásků spočetli jejich pásovou strukturu a konduktanci.

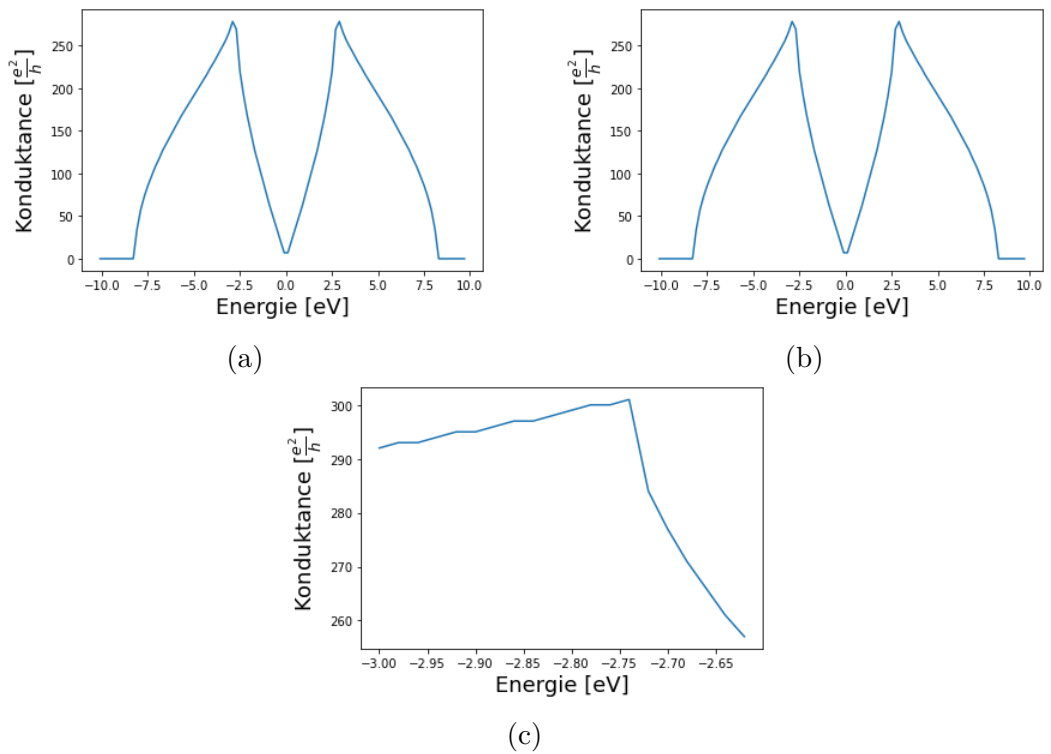
Obrázky 5.12 můžeme porovnat s výpočtem pásově struktury v příloze A.1. Hlavním rozdílem u variant zigzag je existence energetické hladiny způsobená šířením proudu na okraji pásu. Nekonečně široký pásek ($S \rightarrow \infty$) se limitně blíží struktuře grafenu a efektivně nemá okraje, kterými by se mohl proud šířit. Z toho důvodu se v pásově struktuře grafenu nevyskytuje pás na nulové hladině. Varianta



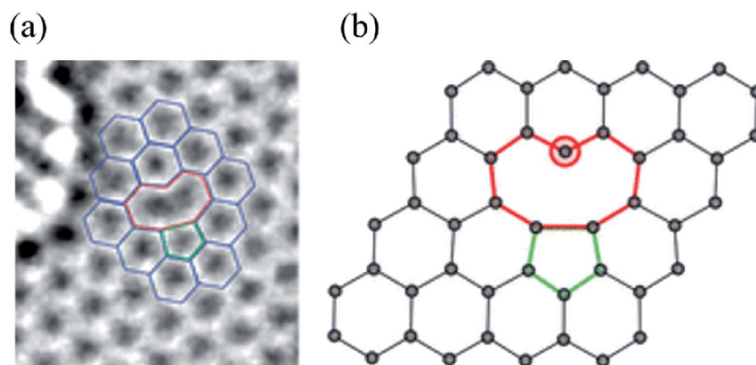
Obrázek 5.12: Pásová struktura nanopásků limitního případu s tloušťkou obou pásků $S = 300$ zigzag (a) a armchair (b).



Obrázek 5.13: Pásová struktura grafenu pro význačný směr představující limitní případ varianty uhlíkové nanopásky zigzag s nekonečnou šířkou.



Obrázek 5.14: Závislost konduktance na energii nanopásky limitního případu s šířkou obou pásek $S = 300$ zigzag (a) a armchair (b). Detail konduktance v okolí amplitudy přeskočku $t = -2.74$ eV pro armchair pásek s šířkou $S = 300$ (c).



Obrázek 5.15: Snímek jednoatomové vakance v grafenu získaný transmisním elektronovým mikroskopem (a) a atomová struktura grafenu s vakancí získaná pomocí DFT (b). Převzato z [33].

armchair žádný okrajový stav nemá. Pásová struktura nekonečného grafenu ve směru zigzag je zobrazena na obrázku (5.13).

Závislost konduktance na energii 5.14 je popsána spojitou funkcí s maximem blížící se bodu $t = \pm 2.74$ eV, jak lze vidět na detailu konduktance (5.14c). Pro široké pásy již nepozorujeme kvantový charakter konduktance.

5.4 Grafenové nanopásky s vakancí

Grafen získaný pomocí mechanické exfoliace je vysoce kvalitní s téměř žádnými poruchami. Metody na výrobu větších grafenových plátek s vysokou čistotou a bez poruch v krystalové mřížce se stále vyvíjejí. V závislosti na procesu výroby grafenu lze stále očekávat defekty v krystalové mřížce [32].

Poruchy v grafenu se dělí na vnitřní a vnější v závislosti na látce způsobující poruchu mřížky. Mezi vnitřní patří vakance uhlíku, čárové defekty, Stone-Walesův defekt a uhlíkový „adatom“¹. Vnější poruchy jsou způsobeny jinými prvky než je uhlík a nejznámějšími případy jsou cizí adatom a atom v substituční poloze. Proto si v této podkapitole ukážeme vliv takovéto poruchy na konduktanci a hustotu stavů systému.

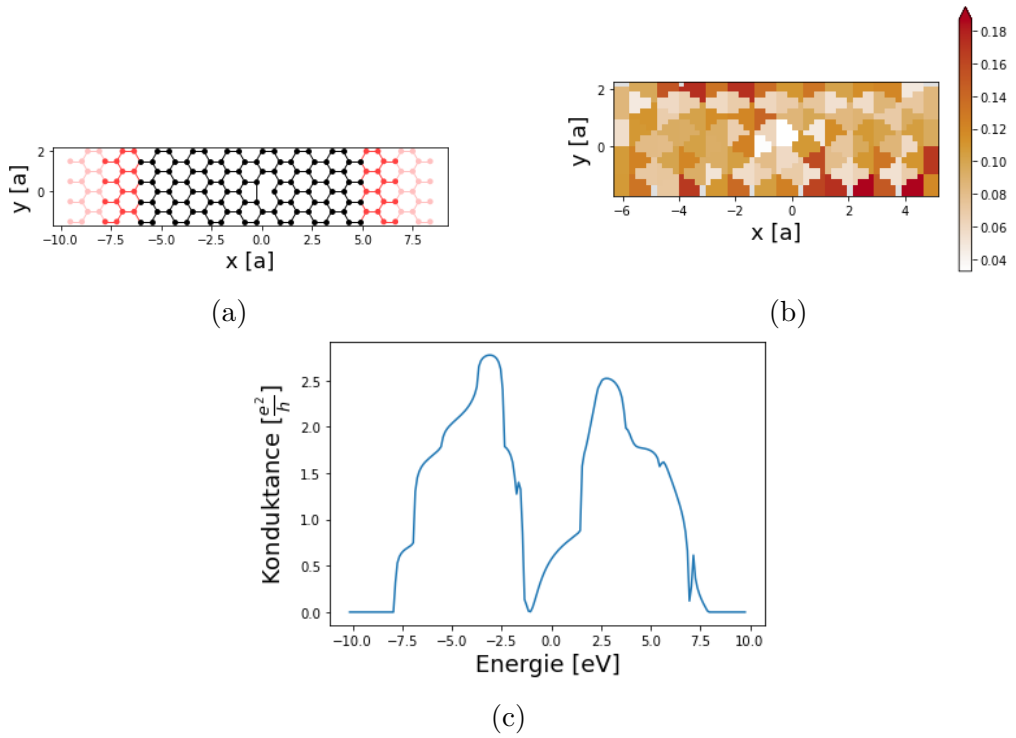
Jednou z nejčastějších poruch grafenové mřížky je jednoatomová vakance. Ta je doprovázena přeuspořádáním atomů kolem poruchy a vytvoření nové vazby mezi dvěma uhlíky. Na obrázku 5.15 lze vidět případ takové poruchy.

V našem modelu jsme předpokládali zachování amplitudy přeskočení mezi ostatními uhlíky okolo vakance a nově vzniklá vazba má stejnou amplitudu $t = -2.74$ eV.

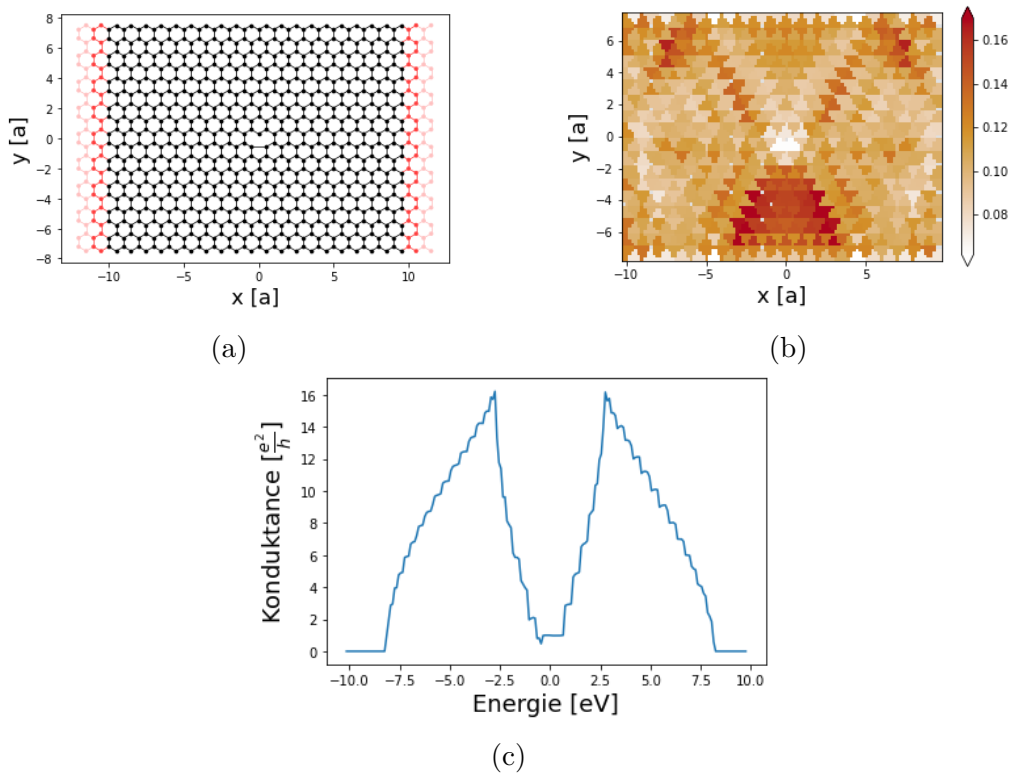
Nejprve jsme provedli simulaci nanopásky varianty armchair s jednou vakancí a šířkou pásky $S = 3$ pro možné porovnání s konduktancí a lokální hustotou stavů na obrázku (5.5). Pásovou strukturu systému jsme znovu neuváděli, protože ji kvant počítá ze struktury vodiče, která není vakancí ovlivněna. Výsledky simulace jsme zobrazili na obrázku (5.16).

Systém s vakancí jsme ještě simulovali pro pásek varianty zigzag s šířkou $S = 17$. Opět jsme vykreslili hustotu stavů a závislost konduktance na energii, viz (5.17).

¹Atom, který leží na povrchu krystalu. Název je zkráceninou „adsorbovaný atom“.



Obrázek 5.16: Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 3$ a jednou vakancí (a), lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (b) a závislost konduktance na energii elektronů (c).



Obrázek 5.17: Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 17$ a jednou vakancí (a), lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (b) a závislost konduktance na energii elektronů (c).

V obou případech systému s vakancí lze vidět narušení symetrie konduktance okolo nulové hodnoty energie. V neporušených systémech jsou atomy uhlíku uspořádány do bipartitní mřížky, jejíž Hamiltonián je symetrický kolem nulové hodnoty energie. Vytvořením nového spoje mezi dvěma atomy stejné báze se již nebude jednat o bipartitní mřížku.

Porovnáním obrázků 5.16c a 5.5c zjistíme, že má vakance velký vliv na výslednou konduktanci v úzkých nanopáskách. Konduktanci širšího pásku s vakancí ovlivnila minimálně, viz 5.17c a 5.3c. Z toho důvodu můžeme usuzovat, že vliv malého množství vakancí na vlastnosti grafenu není velký. Kvantový charakter konduktance byl z části zachován, ale v případě pásku s šířkou $S = 3$ se již nejedná o skoky konduktance v celočíselných násobcích $\frac{e^2}{h}$.

Hustotu stavů ovlivnila jednoatomová vakance zásadně v obou případech. V neporušených systémech pozorujeme téměř periodické chování hustoty stavů 5.5d a u varianty zigzag zvýšenou hustotu na okrajích pásku (5.3d). V systémech s poruchou nepozorujeme podélnou periodičnost ani zvýšenou hustotu stavů na krajích zigzag pásku, viz 5.16b a 5.17b. To je pravděpodobně způsobeno existencí tzv. lokalizovaného stavu na nulové energii (localized zero mode). Podrobné vysvětlení tohoto jevu jde za rozsah této práce a najdeme ho např. v článcích [34] a [35].

6. Diskuze výsledků

Výsledky naší práce jsou pásové struktury, závislosti konduktance na energii a lokální hustoty stavů několika grafenových nanopásků. Pro několik šířek pásků variant zigzag a armchair jsme výsledky zobrazili v kapitole 5. Jejich význam a interpretaci v této kapitole rozebereme a v příloze A.2 poskytneme počítačový kód pro jejich replikovatelnost.

Pásová struktura pásků zigzag má dvě části. První z nich je stav na nulové energii a zodpovídá za vedení proudu po okrajích pásku. To lze dokázat tak, že pro nekonečně široký pásek ($S \rightarrow \infty$), který nemá okraje, tato část pásové struktury vymizí. Druhá část začíná na energii $t = \pm 2.74$ eV a představuje vedení proudu vnitřní částí pásku. Rozšiřováním pásku se bude druhá část zahušťovat, dokud z ní nebude spojitě spektrum. Díky proudu po okrajích pásku se varianta zigzag chová vždy jako kov.

Varianta uhlíkového nanopásku armchair má odlišnou pásovou strukturu. Pro tloušťky $S = 1.5N$, kde N je přirozené číslo, se valenční pás potká s vodivostním na nulové energii a pásek se chová jako kov. Pro ostatní tloušťky se chová jako polovodič, jehož pás zakázaných energií se s rostoucí šířkou zmenšuje, až nakonec vymizí v limitě nekonečně širokého pásku. Tuto závislost jsme ověřili numericky. Její analytické odvození je možné, ale je nad rámec této práce.

Jak jsme již zmínili, oba uhlíkové nanopásky mají odlišné elektronické vlastnosti. Varianta zigzag vede elektrický proud lépe než armchair díky jejím okrajům. K takovému závěru lze dojít na základě vysoké hustoty stavů na okrajích zigzag pásku, kterou lze pozorovat i pro široké pásky viz (5.3b). Okraje nanopásku armchair nepřispívají k vedení proudu zásadním způsobem. Na obrázku 5.6d lze vidět, že je hustota stavů, zodpovídající za velikost proudu, na okrajích i vnitřní části pásku stejná.

Pro různé šířky pásků jsme počítali jejich konduktance v závislosti na energii elektronů. Úzké pásky měly konduktanci skokového charakteru, stejně jako lze pozorovat u kvantových bodových kontaktů. Pro širší pásky byla konduktance více spojitá a poloha jejího maxima konvergovala z nižších resp. vyšších energií k hodnotě -2.74 eV resp. 2.74 eV, což je velikost amplitudy přeskočků t .

V naší práci jsme také ukázali vliv jednoatomové vakance na konduktanci a hustotu stavů. Vakance měla vliv na konduktanci úzkých pásků a u širších se výrazně neprojevovala. Hustotu stavů vakance výrazně ovlivnila i u širokých pásků a nanopásky variant zigzag v takových případech nemají vysokou hustotu stavů na okrajích. Při experimentálním měření mohou mít některé poruchy zásadní vliv na vedení proudu nanopáskem, kdy se mohou vyskytovat jevy, jako je např. supravodivost. Takové případy mohou být námětem na pokračování výzkumu v oblasti grafenových nanopásků.

Zahrnutím druhých a třetích nejbližších sousedů bychom dosáhli přesnějších výsledků. Pásová struktura v blízkosti Diracových K bodů reciprokého prostoru by byla téměř totožná s výsledky pouze nejbližších sousedů [27]. V příloze A.1 jsme také porovnali disperzní relaci získanou pomocí těсно-vazebného modelu a pomocí DFT. Pro energie blízké Fermiho hladině dávají oba popisy stejné chování elektronů, hlavně v okolí Diracových bodů.

Grafen a jeho deriváty, mezi které patří uhlíkové nanopásky a nanotrubičky,

jsou v posledních letech důkladně zkoumány pro jejich elektronické a mechanické vlastnosti. V důsledku toho vzniká řada prací, které jsou ve shodě s našimi výsledky [36-41].

Závěr

V této práci jsme rozebrali výhody a nevýhody molekulární elektroniky spolu s jejími experimentálními a teoretickými metodami. Mezi nejdůležitější experimentální techniky patří skenovací tunelový mikroskop, mikroskop atomových sil a mechanicky kontrolovatelné zlomené spoje. Zmíněné techniky ME jsme stručně rozebrali a vysvětlili jejich funkční principy.

Rozebrali jsme také teoretický popis kvantového transportu v balistickém režimu pomocí Landauerova formalismu a těсно-vazebného modelu. Landauerovu formuli jsme odvodili pro jednodimenzionální případ a použili ji pro určení konduktance systému. Studovaný systém jsme simulovali pomocí těсно-vazebného modelu, jehož zavedení v prvním kvantování jsme podrobně vysvětlili.

Jako příklad systémů důležitých pro molekulární elektroniku jsme uvedli některé alotropy uhlíku, mezi které patří diamant, grafit, grafen a uhlíkové nanotrubičky. Zmínili jsme jejich hlavní vlastnosti a ukázali strukturu několika z nich. Také jsme rozebrali jejich použití v různých odvětvích fyziky a techniky.

V programovacím jazyku Python jsme pomocí balíku Kwant ukázali jak definovat systém pro zkoumání kvantového transportu. Jednotlivé body postupu jsme vysvětlili pro použití v obecné situaci a poskytli jsme hotový skript pro simulaci systému variant zigzag a armchair grafenových nanopásků.

Elektronové vlastnosti dvou variant grafenových nanopásků armchair a zigzag jsme určili pomocí simulace a vypočítali jejich pásovou strukturu, lokální hustotu stavů a závislost konduktance na energii elektronů pro několik šířek pásků. Největší rozdíl byl v jejich pásové struktuře, kdy se varianta zigzag chová pouze jako kov díky existenci povrchového stavu, který vymizí až v limitě nekonečně širokého pásku. Varianta armchair se chová v závislosti na šířce pásku jako kov nebo jako polovodič podle pravidla $3M - 1$, které jsme numericky ověřili. Analytické řešení existuje, ale je nad rámec této práce.

Konduktance systému měla pro malé šířky pásků skokový charakter, který je typický pro kvantové bodové kontakty. Pro systémy bez vakance byla konduktance symetrická okolo nulové hodnoty energie a pro limitně široké pásy byla závislost konduktance na energii popsána spojitou funkcí.

V práci jsme také zmínili časté defekty, které se vyskytují v krystalové mřížce grafenu. Grafenové nanopásky s jednoatomovou vakancí jsme nasimulovali a ukázali jejich závislost konduktance na energii a lokální hustotu stavů, na kterou měla vakance zásadní vliv.

Tato práce má sloužit především jako úvod do problematiky kvantového transportu v nanoskopických systémech. Chtěli jsme tímto způsobem rozšířit velmi rychle se vyvíjející vědní obor a dát o něm čtenáři základní přehled.

Seznam použité literatury

- [1] J. C. Cuevas and E. Scheer. *Molecular Electronics*. World Scientific, 2010.
- [2] S. Daniš. *Atomová fyzika a elektronová struktura látek*. Matfyzpress, 2019.
- [3] Scanning tunneling microscopy. <https://www.nanoscience.com/techniques/scanning-tunneling-microscopy/>. [Online; accessed 20 Apr. 2023].
- [4] Eva Y. A., Guohong L., and Xu D. Electronic properties of graphene: a perspective from scanning tunneling microscopy and magnetotransport. *Reports on Progress in Physics*, 75(5):056501, 2012.
- [5] E. Wutscher and F. Giessibl. Atomic force microscopy at ambient and liquid conditions with stiff sensors and small amplitudes. *The Review of scientific instruments*, 82:093703, 09 2011.
- [6] S. N. Magonov. Surface characterization of materials at ambient conditions by scanning tunneling microscopy (stm) and atomic force microscopy (afm). *Applied Spectroscopy Reviews*, 28(1-2):1–121, 1993.
- [7] G. Schitter, K. J. Astrom, B. E. DeMartini, P. J. Thurner, K. L. Turner, and P. K. Hansma. Design and modeling of a high-speed afm-scanner. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 15(5):906–915, 2007.
- [8] D. Croft and S. Devasia. Vibration compensation for high speed scanning tunneling microscopy. *Review of Scientific Instruments*, 70(12):4600–4605, 1999.
- [9] Yu. G. Naidyuk and I. K. Yanson. Point-contact spectroscopy. *arXiv:physics/0312016*, 2003.
- [10] L. Gasparyan, I. Mazo, V. Simonyan, and F. Gasparyan. DNA sequencing: Current state and prospects of development. *Open Journal of Biophysics*, 09:169–197, 01 2019.
- [11] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Physical Review Letters*, 60:848–850, 1988.
- [12] A. J. Bestwick. *Quantum edge transport in topological insulators*. PhD thesis, Stanford University, 2015.
- [13] D. Araujo, M. Suzuki, F. Lloret, G. Alba, and P. Villar. Diamond for electronics: Materials, processing and devices. *Materials*, 14(22), 2021.
- [14] Y. Wu and T. Weil. Recent developments of nanodiamond quantum sensors for biological applications. *Advanced Science*, 9(19):2200059, 2022.

- [15] N. Emery, C. Hérold, J.-F. Marêché, and P. Lagrange. Synthesis and superconducting properties of cac6. *Science and Technology of Advanced Materials*, 9(4):044102, jan 2009.
- [16] H. P. Boehm, A. Clauss, G. Fischer, and U. Hofmann. Surface properties of extremely thin graphite lamellae. In *Proceedings of the Fifth Conference on Carbon*, pages 73–80. Elsevier, 1962.
- [17] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [18] T. Jiang, W. Sun, Q. Zhu, N. A. Burns, Saad A. K., R. Mo, and Z. Gu. Furin-mediated sequential delivery of anticancer cytokine and small-molecule drug shuttled by graphene. *Advanced Materials*, 27(6):1021–1028, 2015.
- [19] R. Tkacz, R. Oldenbourg, S. B. Mehta, M. Miansari, A. Verma, and M. Majumder. ϕ dependent isotropic to nematic phase transitions in graphene oxide dispersions reveal droplet liquid crystalline phases. *Chemical Communications*, 50:6668–6671, 2014.
- [20] F. Schwierz. Graphene transistors. *Nature Nanotechnology*, 5(7):487–496, 2010.
- [21] B. Vamsi Krsihna, S. Ravi, and M. Durga Prakash. Recent developments in graphene based field effect transistors. *Materials Today: Proceedings*, 45:1524–1528, 2021. International Conference on Advances in Materials Research - 2019.
- [22] A. Béraud, M. Sauvage, C. M. Bazán, M. Tie, A. Bencherif, and D. Bouilly. Graphene field-effect transistors as bioanalytical sensors: design, operation and performance. *Analyst*, 146:403–428, 2021.
- [23] G. Lu, K. Yu, Z. Wen, and J. Chen. Semiconducting graphene: converting graphene from semimetal to semiconductor. *Nanoscale*, 5:1353–1368, 2013.
- [24] N. Roch, S. Florens, V. Bouchiat, W. Wernsdorfer, and F. Balestro. Quantum phase transition in a single-molecule quantum dot. *Nature*, 453(7195):633–637, 2008.
- [25] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16(6):063065, 2014.
- [26] T. Kloss, J. Weston, B. Gaury, B. Rossignol, C. Groth, and X. Waintal. Tkwant: a software package for time-dependent quantum transport. *New Journal of Physics*, 23(2):023025, 2021.
- [27] R. Kundu. Tight binding parameters for graphene. *arXiv:0907.4264*, 2009.
- [28] C. Tönshoff and H. F. Bettinger. Pushing the limits of acene chemistry: The recent surge of large acenes. *Chemistry – A European Journal*, 27(10):3193–3212, 2021.

- [29] V. Barone, O. Hod, and G. E. Scuseria. Electronic structure and stability of semiconducting graphene nanoribbons. *Nano Letters*, 6(12):2748–2754, 2006.
- [30] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. *Physical Review B*, 54:17954–17961, 1996.
- [31] H. Hosoya, H. Kumazaki, K. Chida, M. Ohuchi, and Y.-D. Gao. How do the polycyclic aromatic hydrocarbons approach infinity? *Pure and Applied Chemistry*, 62(3):445–450, 1990.
- [32] S. A. Bhuyan, N. Uddin, M. Islam, F. A. Bipasha, and S. S. Hossain. Synthesis of graphene. *International Nano Letters*, 6(2):65–83, Jun 2016.
- [33] H. Bhatt, M. Kim, and G. Kim. Various defects in graphene: a review. *RSC Advances*, 12:21520–21547, 2022.
- [34] V. M. Pereira, J. M. B. Lopes dos Santos, and A. H. Castro Neto. Modeling disorder in graphene. *Phys. Rev. B*, 77:115109, Mar 2008.
- [35] O. Ovdatt, Y. Don, and E. Akkermans. Vacancies in graphene: Dirac physics and fractional vacuum charges. *Phys. Rev. B*, 102:075109, Aug 2020.
- [36] Y. Del Castillo Hernández. Quantum transport in graphene atomic-sized contacts. Master’s thesis, University of Alicante, 2020.
- [37] S. Pratap, S. Kumar, and R. P. Singh. Certain aspects of quantum transport in zigzag graphene nanoribbons. *Frontiers in Physics*, 10, 2022.
- [38] D. Lerma. *Proximity-induced transport phenomena in graphene-based spintronic devices*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes, 2020.
- [39] Y. Gu, Z. Qiu, and K. Müllen. Nanographenes and graphene nanoribbons as multitalents of present and future materials science. *Journal of the American Chemical Society*, 144(26):11499–11524, 2022.
- [40] H. Guo and J. Wang. Effect of vacancy defects on the vibration frequency of graphene nanoribbons. *Nanomaterials*, 12(5), 2022.
- [41] Deji R., Jyoti R., Akarsh V., B.C. Choudhary, and Ramesh K. S. A theoretical study of hcn adsorption and width effect on co-doped armchair graphene nanoribbon. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1209:113592, 2022.
- [42] N. Biggs. *Cambridge mathematical library: Algebraic graph theory*. Cambridge University Press, Cambridge, England, 2 edition, February 1994.

Seznam obrázků

1.1	Schéma řádkovacího tunelového mikroskopu. Upraveno z [3].	6
1.2	Snímek grafenu získaný pomocí STM. Převzato z [4].	6
1.3	Schéma vytváření jedno-atomárních zlatých spojů pomocí MCBJ. Převzato z [10].	8
2.1	Model jednodimenzionálního transportu, kde μ_L a μ_R jsou elektrochemické potenciály levého a pravého rezervoáru a L je délka spoje.	10
3.1	Elementární buňka diamantu.	13
3.2	Atomová struktura grafitu varianty <i>alpha</i>	13
3.3	Exfoliace grafenu. Převzato z [4].	14
3.4	Struktura grafenu.	15
3.5	Varianty uhlíkových nanopásků zigzag (a) a armchair (b) s modře vyznačenými okraji.	15
3.6	Struktura fullerenu C_{60} (a) a AFM snímek zlatých vodičů s fullerenem jako vodivostním prvkem (b). Převzato z [24].	16
3.7	Dvě varianty uhlíkových nanotrubic zigzag (a) a armchair (b) s červeně vyznačeným koncem.	16
4.1	Vykreslení systému s červeně vyznačenými částmi vodiče a oranžově a modře vyznačenými polohami atomů ukázkového systému .	21
4.2	Pásová struktura systému.	22
4.3	Lokální hustota stavů je nejvyšší podél hran systému.	22
4.4	Závislost konduktance systému na energii elektronů. Schodovitý průběh je typický pro kvantové bodové kontakty.	22
5.1	Struktura systému zigzag pásku s šířkou $S = 1$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).	24
5.2	Struktura systému zigzag pásku s šířkou $S = 3$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).	25
5.3	Struktura systému zigzag pásku s šířkou $S = 17$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).	26
5.4	Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 0.5$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).	27

5.5	Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 3$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).	28
5.6	Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 12.5$ vyznačená černě s červeně vyznačenými částmi vodičů (a), pásová struktura vodiče (b), závislost konduktance na energii elektronů (c) a lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (d).	28
5.7	Struktura armchair pásku s šířkou $S = 1$ (a) a jeho pásová struktura (b).	29
5.8	Struktura armchair pásku s šířkou $S = 1.5$ (a) a jeho pásová struktura (b).	29
5.9	Struktura armchair pásku s šířkou $S = 2$ (a) a jeho pásová struktura (b).	29
5.10	Struktura armchair pásku s šířkou $S = 2.5$ (a) a jeho pásová struktura (b).	29
5.11	Struktura armchair pásku s šířkou $S = 4.5$ (a) a jeho pásová struktura (b).	30
5.12	Pásová struktura nanopásků limitního případu s tloušťkou obou pásků $S = 300$ zigzag (a) a armchair (b).	30
5.13	Pásová struktura grafenu pro význačný směr představující limitní případ varianty uhlíkového nanopásků zigzag s nekonečnou šířkou.	31
5.14	Závislost konduktance na energii nanopásků limitního případu s šířkou obou pásků $S = 300$ zigzag (a) a armchair (b). Detail konduktance v okolí amplitudy přeskočků $t = -2.74$ eV pro armchair pásek s šířkou $S = 300$ (c).	31
5.15	Snímek jednoatomové vakance v grafenu získaný transmisním elektronovým mikroskopem (a) a atomová struktura grafenu s vakancí získaná pomocí DFT (b). Převzato z [33].	32
5.16	Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 3$ a jednou vakancí (a), lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (b) a závislost konduktance na energii elektronů (c).	33
5.17	Struktura systému armchair pásku s šířkou $S = 17$ a jednou vakancí (a), lokální hustota stavů systému pro energii elektronů $E = 3$ eV (b) a závislost konduktance na energii elektronů (c).	33
A.1	Struktura grafenu se znázorněnými mřížkovými vektory a barevně odlišenými prvky báze.	43
A.2	Reciproká mříž s vyznačenou první Brillouinovou zónou.	44
A.3	Disperzní relace podél složek směru vlnového vektoru k_x (a) a k_y (b).	45
A.4	Disperzní relace grafenu v první Brillouinově zóně.	46
A.5	Porovnání výpočtu disperzní relace pomocí DFT a těсно-vazebného modelu (červeně).	46

A. Přílohy

A.1 Pásová struktura grafenu

V této příloze si ukážeme výpočet pásové struktury nekonečně velkého plátku grafenu. Začneme popisem krystalové struktury v reálném prostoru. Grafen se skládá z uhlíků v hexagonálním uspořádání. Uhlík má čtyři valenční elektrony, ze kterých tři tvoří chemickou vazbu a nemají vliv na transportní vlastnosti. My tedy můžeme v našem modelu uvažovat pouze jeden elektron. Mřížka je popsána vektory $\vec{a}_1 = (0, a)$ a $\vec{a}_2 = (\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{a}{2})$ s mřížkovým parametrem $a \approx 2.46 \text{ \AA}$. Společně s bází, která se skládá ze dvou atomů v pozicích $(0, 0)$ a $(\frac{a}{\sqrt{3}}, 0)$, získáme strukturu grafenu shodnou s obrázkem A.1, na kterém jsou barevně odlišeny prvky báze. Vidíme, že se mřížka skládá ze dvou trojúhelníkových podmřížek, přičemž atomy z jedné mají za nejbližší sousedy atomy z druhé podmřížky. Jedná se tedy o bipartitní mřížku.

Pomocí definičního vztahu vytvoříme reciproké vektory \vec{b} k reálným vektorům

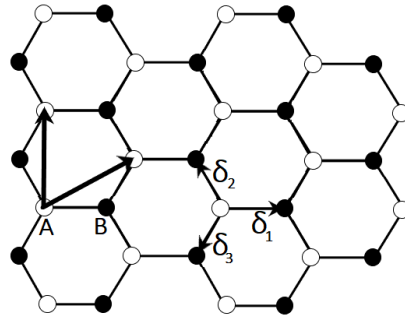
$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (\text{A.1})$$

Získáme čtyři rovnice pro čtyři neznámé $b_{1x}, b_{1y}, b_{2x}, b_{2y}$ a jednoduchou algebrou dostaneme $\vec{b}_1 = (\frac{-2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a})$ a $\vec{b}_2 = (\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}, 0)$. Oba vektory mají stejnou velikost a svírají úhel 120° . Vytvoří tedy trojúhelníkovou mříž, kterou jsme zobrazili na obrázku A.2 spolu s první Brillouinovou zónou.

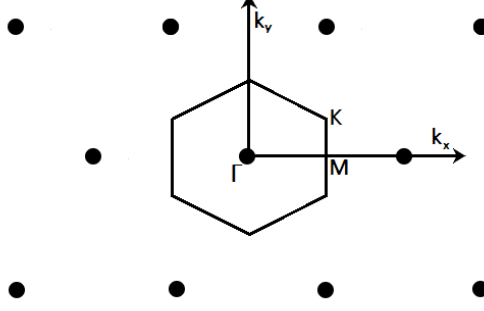
Při konstrukci Hamiltoniánu v prvním kvantování použijeme těсно-vazebný model a omezíme se pouze na nejbližší sousedy. Lze ukázat, že spektrum těсно-vazebného Hamiltoniánu na bipartitní mřížce je vždy symetrické kolem nulové energie, což je i případ grafenu [42]. Příspěvek od jednoho mřížového bodu v poloze \vec{R} k Hamiltoniánu bude

$$H = -t \sum_{\delta} |R + \delta\rangle \langle R|, \quad (\text{A.2})$$

kde $t = 2.74 \text{ eV}$ je amplituda přeskočků a index δ označuje sousední polohy atomů. Řešením Shrödingerovy rovnice $H\psi = E\psi$ pro jeden atom získáme vztah



Obrázek A.1: Struktura grafenu se znázorněnými mřížkovými vektory a barevně odlišenými prvky báze.



Obrázek A.2: Reciproká mříž s vyznačenou první Brillouinovou zónou.

$$-t \sum_{\delta} \psi_{\vec{R}+\vec{\delta}} = E \psi_{\vec{R}}. \quad (\text{A.3})$$

Vydeme z Blochova teorému, který udává řešení vlnové funkce v periodickém potenciálu ve tvaru $\psi(\vec{x} + \vec{T}_n) = \psi(\vec{x})e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}_n}$, kde \vec{T}_n je translační vektor mřížky. Pro rovinné vlny budou funkce $\psi(\vec{x})$ pouze amplitudami, a protože bázi tvoří dva atomy uhlíku, předpokládáme pro každý z nich rozdílné amplitudy. Vlnovou funkci budeme moci zapsat ve tvaru

$$\psi_{\vec{R}}(\vec{r}) = \begin{cases} \psi_A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} & \vec{R} \in A, \\ \psi_B e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} & \vec{R} \in B. \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Ve vztahu A.3 značí vektor $\vec{\delta}$ sousední polohy atomů a bude pro atomy podmřížky A nabývat hodnot $\vec{\delta}_1 = (\frac{a}{\sqrt{3}}, 0)$, $\vec{\delta}_2 = (\frac{-a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2})$, $\vec{\delta}_3 = (\frac{-a}{2\sqrt{3}}, \frac{-a}{2})$. Pro případ poloh atomů podmřížky B dostaneme vektory nejbližších sousedů, které jsou opačné vektorům podmřížky A . Nyní můžeme dosadit do rovnice A.3 pro oba případy a získáme sadu dvou rovnic pro neznáme ψ_A a ψ_B . Po úpravě je lze zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} -t \left[e^{ik_x \frac{a}{\sqrt{3}}} + 2e^{-ik_x \frac{a}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \right] \psi_B &= E \psi_A, \\ -t \left[e^{-ik_x \frac{a}{\sqrt{3}}} + 2e^{ik_x \frac{a}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \right] \psi_A &= E \psi_B. \end{aligned}$$

Netriviální řešení pro amplitudy ψ_A a ψ_B nalezneme převodem do maticového tvaru a položením determinantu matice nule. To nám dá vlastní hodnotu energie E závislou na složkách vlnového vektoru \vec{k} neboli disperzní relaci

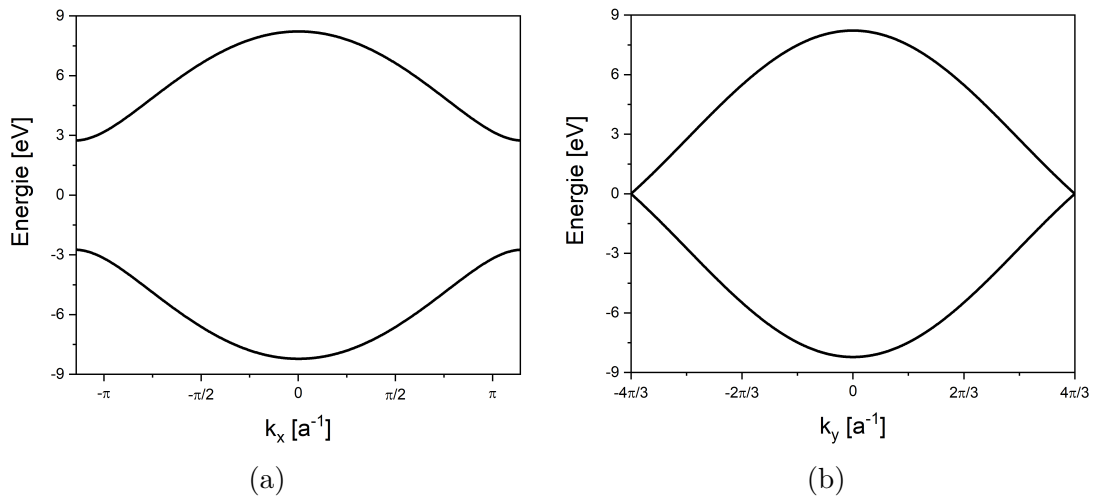
$$E(\vec{k}) = \pm t \left| e^{ik_x \frac{a}{\sqrt{3}}} + 2e^{-ik_x \frac{a}{2\sqrt{3}}} \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \right|, \quad (\text{A.5})$$

kteřou lze dále upravit na tvar bez absolutní hodnoty

$$E(\vec{k}) = \pm t \sqrt{3 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 2 \cos(k_y a)}. \quad (\text{A.6})$$

V rovnici A.5 nebo A.6 se můžeme omezit pouze na jednu složku vlnového vektoru a druhou položit rovnu nule a tím získáme závislosti zobrazené v grafech A.3. Pro x -ovou složku vlnového vektoru se pásy nespojí, ale vznikne energetická mezera na hraně Brillouinovy zóny o velikosti $2t$. Závislost energie E pouze na y -ové složce vlnového vektoru pro $k_x = 0$ má tvar $E = \pm t \left[1 + 2\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \right]$, pro kterou se valenční pás dotkne s vodivostním v tzv. Diracových K bodech. Disperzní relace je na okolí tohoto bodu lineární, podobně jako u řešení relativistické Diracovy rovnice pro bezhmotné fermiony, z čehož pochází tento název.

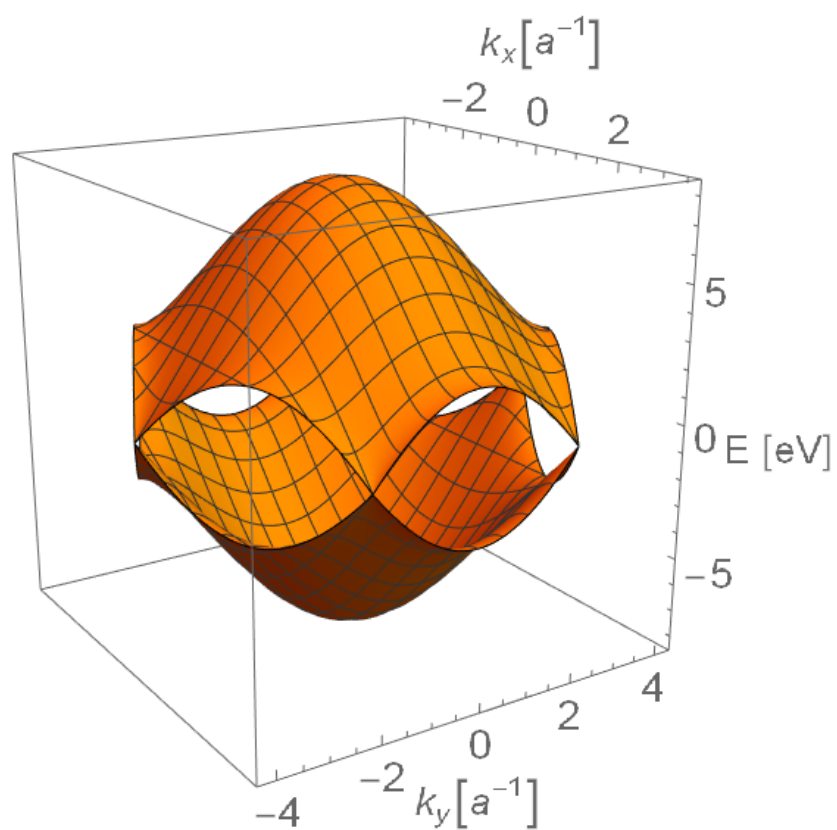
Velikost reciprokého vektoru je $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$. Bod M se nachází v poloviční vzdálenosti dvou mřížkových bodů na x -ové ose. První Brillouinova zóna se tedy nachází v rozmezí $k_x \in \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\right)$ a meze druhé složky dopočítáme pomocí pravoúhlého trojúhelníku ΓMK $k_y \in \left(-\frac{4\pi}{3a}, \frac{4\pi}{3a}\right)$.



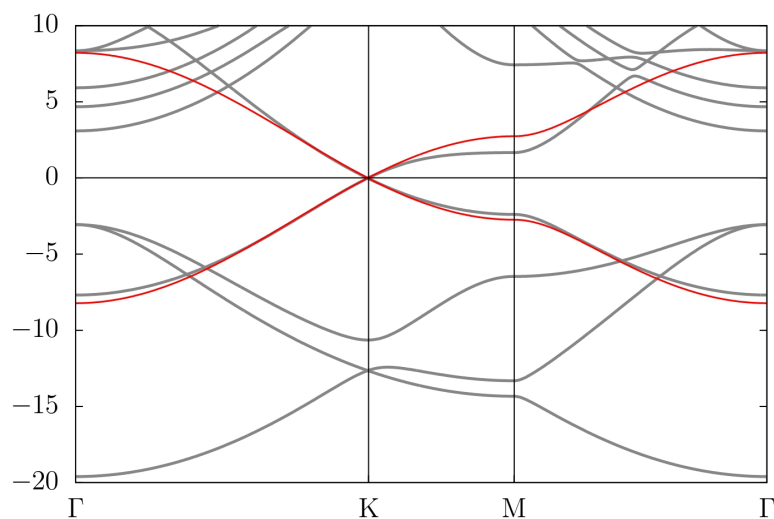
Obrázek A.3: Disperzní relace podél složek směru vlnového vektoru k_x (a) a k_y (b).

Celá disperzní relace v první Brillouinově zóně je zobrazena na obrázku A.4. Valenční pás se v Diracových K bodech dotýká vodivostního, jak je vidět i na obrázku A.3b. Taková disperzní relace odpovídá látkám zvaným polokovy. S kovy mají společný nulový pás zakázaných energií. Jejich disperzní relace je podobná polovodičové v limitních případech nulového pásu zakázaných energií.

Na závěr si ukážeme porovnání pásové struktury grafenu spočítanou pomocí DFT v programu Wien2k (GGA funkcionál, siva) a disperzní relace těсно-vazebného modelu A.5 (červená). Tři spodní pásy z DFT výpočtu odpovídají σ elektronům, které tvoří chemickou vazbu. Těсно-vazebný model pak dobře popisuje chování valenčního a vodivostního (π a π^*) pásu pro malé energie, hlavně na okolí Diracova K bodu. Pásy s parabolickým chováním kolem Γ bodu s energií nad cca 3 eV připomínají chování volných elektronů ve vakuu a jsou artefaktem použité metody (systém je modelován periodicky ve všech směrech).



Obrázek A.4: Disperzní relace grafenu v první Brillouinově zóně.



Obrázek A.5: Porovnání výpočtu disperzní relace pomocí DFT a těsno-vazebného modelu (červeně).

A.2 Počítačové kódy pro simulaci kvantového transportu

V této příloze si ukážeme dva počítačové kódy (skripty). První z nich je vytvořen na základě postupu popsaného v podkapitole 4.3. Druhý slouží k simulaci kvantového transportu v uhlíkových nanopáskách. Změnou několika málo parametrů lze simulovat transport skrze varianty armchair a zigzag pro různé šířky a délky pásků s možností atomové vakance uvnitř systému. Oba skripty vykreslí strukturu systému, pásovou strukturu, závislost konduktance na energii a lokální hustotu stavů. Skripty jsou testovány ve verzi programovacího jazyka Python 3.8 s verzí balíku Kwant 1.4.2. Druhý ze zmíněných skriptů jsme použili pro simulaci systémů v kapitole 5. Oba kódy lze nalézt na úložišti Zenodo na odkazu [doi.org/10.5281/zenodo.7905358].

A.2.1 Skript obecného modelu

```
import kwant
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

sys = kwant.Builder()
lat = kwant.lattice.general([(0.5 * np.sqrt(3), 0.5), (0, 1)],
                           [(0, 0), (1 / np.sqrt(3), 0)])

def rectangle(position):
    (x, y) = position
    x = max(abs(x) - 2, abs(y))
    return x < 5

sys[lat.shape(rectangle, (0, 0))] = 4
sys[lat.neighbors()] = -1

lead_sym=kwant.TranslationalSymmetry(lat.vec((-2,1)))
lead = kwant.Builder(lead_sym)
lead[lat.shape(rectangle, (0, 0))] = 4
lead[lat.neighbors()] = -1
sys.attach_lead(lead)
sys.attach_lead(lead.reversed())

sys = sys.finalized()
lead = lead.finalized()

kwant.plot(sys, show = False)
plt.xlabel('x', fontsize = 12)
plt.ylabel('y', fontsize = 12)

kwant.plotter.bands(lead, show = False)
plt.xlabel('Vlnový vektor ' + r'$\mathregular{[a^{-1}]}\$',
```

```

fontsize = 14)
plt.ylabel(r'Energie  $[t]$ ', fontsize = 14)

energies = [1 + 1e-2 * i for i in range(50)]
conductances = [kwant.smatrix(sys, en).transmission(0, 1)
                 for en in energies]
conductance_graf = plt.figure('Graf konduktance')
plt.plot(energies, conductances)
plt.xlabel('Energie  $[t]$ ', fontsize = 14)
plt.ylabel(r"Konduktance  $[\frac{e^2}{h}]$ ", fontsize = 14)

local_dos = kwant.ldos(sys, energy = 2)
kwant.plotter.map(sys, local_dos, show = False)
plt.xlabel('x', fontsize = 12)
plt.ylabel('y', fontsize = 12)
plt.show()

```

A.2.2 Skript uhlíkových nanopásků

```

import kwant
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

length = 10 # Length of system
width = 3 # Armchair 0.5 1 1.5 2 2.5...
armchair = True # armchair=False -> Zigzag

potential = 0 # On-site potential
hopping = -2.74 # Hopping amplitude

E_0 = -10.1 # Initial energy of conductance's dependence
E_diff = 0.2 # Energy difference in conductance's dependence
N = 100 # Number of energies

pot = 1 # External potential (optional)
w = 2 # Slope of the external potential

if armchair: # Armchair lattice
    lattice_Vectors = [(0.5 * np.sqrt(3), 0.5), (0, 1)]
    basis_Vectors = [(0, 0), (1 / np.sqrt(3), 0)]
else: # Zigzag lattice
    lattice_Vectors = [(1, 0), (0, np.sqrt(3))]
    basis_Vectors = [(0, -1 / (2 * np.sqrt(3))),
                     (0, 1 / (2 * np.sqrt(3))),
                     (0.5, 1 / np.sqrt(3)),
                     (0.5, -1 / np.sqrt(3))]

system = kwant.Builder()

```

```

lattice = kwant.lattice.general(lattice_Vectors, basis_Vectors)

if armchair: # Armchair symmetry
    symmetry1 = lattice.vec((-2, 1))
    symmetry2 = lattice.vec((2, -1))
    lata, latb = lattice.sublattices
else: # Zigzag symmetry
    symmetry1 = lattice.vec((1, 0))
    symmetry2 = lattice.vec((-1, 0))
    lata, latb, latc, latd = lattice.sublattices

def shape(pos):
    (x, y) = pos
    if armchair:
        if (width - 0.5) % 1 == 0:
            x = abs(x) * 2
            y = abs(y) * 2 - 1
        else:
            x = abs(x) * 2
            y = abs(y - 0.25) * 2 - 1
    else:
        if width % 2 == 0:
            x = abs(x) * 2
            y = (abs(y - 0.5) + 0.5) * 4 / np.sqrt(3) - 2
        else:
            x = abs(x) * 2
            y = (abs(y) - 0.1) * 4 / np.sqrt(3) - 1
    return x < length and y < width

# def potential(site):
#     (x, y) = site.pos
#     d = y * np.sqrt(3) / 2 + x * 0.5
#     return pot * np.tanh(d / w)

system[lattice.shape(shape, (0, 0))] = potential
system[lattice.neighbors()] = hopping

for sym in [symmetry1, symmetry2]:
    lead = kwant.Builder(kwant.TranslationalSymmetry(sym))
    lead[lattice.shape(shape, (0, 0))] = potential
    lead[lattice.neighbors()] = hopping
    system.attach_lead(lead)

def vacancy(x = 0, y = 0, lat = 'a'):
    X = int(x) # X position of vacancy
    Y = int(y) # Y position of vacancy

    if armchair and lat == 'a': # Vacancy for armchair

```

```

        del system[lata(X, Y)]
        system[latb(X - 1, Y + 1), latb(X - 1, Y)] = hopping
    elif armchair:
        del system[latb(X, Y)]
        system[lata(X + 1, Y), lata(X + 1, Y - 1)] = hopping

    elif lat == 'a': # Vacancy for zigzag
        del system[lata(X, Y)]
        system[latd(X, Y), latd(X - 1, Y)] = hopping
    elif lat == 'c':
        del system[latc(X, Y)]
        system[latb(X, Y), latb(X + 1, Y)] = hopping
    elif lat == 'd':
        del system[latd(X, Y)]
        system[lata(X, Y), lata(X + 1, Y)] = hopping
    else:
        del system[latb(X, Y)]
        system[latc(X, Y), latc(X - 1, Y)] = hopping

# vacancy() # Examples of vacancy
# vacancy(-1, 0, 'b') # Position of vacancy (-1,0) in lattice b

flead = lead.finalized()
fsystem = system.finalized()

kwant.plot(fsystem, num_lead_cells = 2, site_color = 'black',
show = False)
plt.xlabel('x [a]', fontsize = 18)
plt.ylabel('y [a]', fontsize = 18)

kwant.plotter.bands(flead, show = False)
plt.xlabel('Vlnovy vektor ' + r'$\mathregular{[a^{-1}]}\$',
fontsize = 18)
plt.ylabel(r'Energie $[eV]$', fontsize = 18)

energies = [E_0 + E_diff * i for i in range(N)]
conductances = [kwant.smatrix(fsystem, E).transmission(0, 1)
                 for E in energies]
conductance_graf = plt.figure('Graf konduktance')
plt.plot(energies, conductances)
plt.xlabel('Energie [eV]', fontsize = 18)
plt.ylabel(r"Konduktance [$\frac{e^2}{h}$]", fontsize = 18)

local_dos = kwant.ldos(fsystem, energy = 3)
kwant.plotter.map(fsystem, local_dos, show = False)
plt.xlabel('x [a]', fontsize = 18)
plt.ylabel('y [a]', fontsize = 18)
plt.show()

```