

Contractor: INCDFM
Cod fiscal : RO9068280

anexa la procesul verbal de avizare interna nr.

De acord,
DIRECTOR GENERAL
Dr. Ionut Enculescu

Avizat,
DIRECTOR DE PROGRAM
Dr. Lucian Pintilie

RAPORT DE ACTIVITATE AL FAZEI

Contractul nr.: 10N/10.03.2016

Proiectul PN16480101: Fenomene si procese fizico-chimice in sisteme nanometrice complexe, suprafete si interfete

Faza nr. 4 : Proprietati topologice ale fosforenei manifestate in regim de transport cuantic.

Termen: 15.07.2016

1. Obiectivul proiectului:

Prezentul proiect isi propune sa desfasoare studii aprofundate privind fenomenele fizico-chimice care au loc in sisteme nanometrice complexe, pe suprafete sau la interfete, cu focalizare pe materiale functionale care au potential aplicativ in domenii industriale de inalta tehnologie, energetica, spatiu si securitate, protectia mediului si prevenirea poluarii, precum si in stiintele vietii.

2. Rezultate preconizate pentru atingerea obiectivului:

Principale tinte pe care ne propunem sa le atingem prin implementarea proiectului :

- intelegerea proceselor fizice in materiale si structurile lor, prin modelare si prin studiul proprietatilor feroelectrice, magnetice, optice si fotoelectrice ale acestora; in acelasi scop ne propunem sa studiem rolul structurii cristaline, efectele de dimensiune, rolul suprafetelor/interfetelor;
- modelarea dinamicii purtatorilor de sarcina in sisteme mezoscopice, in scopul modelarii tranzitiei de la fotoluminescenta la fotocurent si in scopul controlului optic si electric al starilor excitonice si biexcitonice si relevarea unui proces optic neliniar ca rezultat al interactiei exciton-foton;
- investigarea proprietatilor materialelor cuantice cu proprietati topologice particulare;

- studiul proceselor catalitice si fotocatalitice, al transferului de sarcina si al reactiilor chimice, cu aplicatii in materiale pentru energie, biomedicina si protectia mediului.

3. Obiectivul fazei:

Proprietati spectral ale fosforenei in sisteme confinate de tip banda si plaqheta nanometrica.

Transport electronic in camp magnetic intens si evidentierea fenomenului de superradianta.

4. Rezultate preconizate pentru atingerea obiectivului fazei:

Faza a vizat in primul rand elucidarea unor proprietati ale spectrului de benzi electronice ale fosforenei si analiza fenomenelor de conductie in banda plata, cu identificarea efectului invaziv al contactelor de masura in configuratie Hall. In plus am pus in evidenta efecte superradiative in banda cusi-plata a fosforenei.

5. Rezumatul fazei:

Scopul fazei consta in studierea proprietatilor mezoscopice ale retelei de fosforena in camp magnetic perpedicular. Am demonstrat ca ruperea bipartitismului da nastere asimetriei electron-gol in spectrul energetic. Deasemenea proprietatile topologice ale starilor de margine in ribbonului zig-zag de fosforena au fost analizate din perspectiva degenerarii, localizarii si dispersiei in camp magnetic. Transport cuantic a fost analizat prin simulare unui dispozitiv Hall cu patru terminale si utilizand formalismul Landauer-Büttiker am scos in evidenta comportamentul disipativ al starilor de margine topologice.

Modelul electronilor strans legati in retea de fosforena

Spre deosebire de grafena care este o retea hexagonala plana, fosforena, datorita hibridizarii sp^3 are o structura diferita dupa cum se poate observa in figura 1.

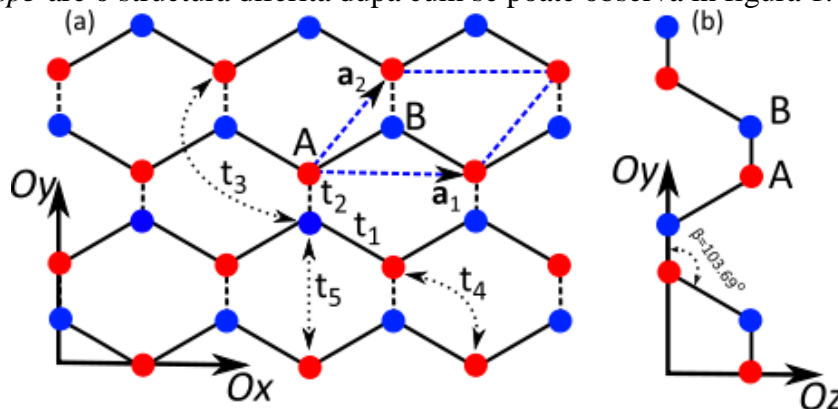


Figura 1: (a) Reprezentare schematica a retelei de fosforena. A (rosu) si B(albastru) indexeaza cei doi atomi din celula unitate, t_1, t_2, t_3, t_4, t_5 reprezinta elementele de hopping ce conecteaza siturile retelei, iar linia albastra punctata reprezinta celula unitate unde \vec{a}_1 si \vec{a}_2 sunt vectorii unitate. (b) Proiectia retelei pe planul yz.

In modelul electronilor strans legati, rețeaua de fosforena este descrisă de cicinci elemente de hopping (t_1, t_2, t_3, t_4, t_5) [1], care influențează semnificativ spectrul energetic în comparație cu grafena sau alte rețele bidimensionale. Hamiltonianul fosforenei în aproximația electronilor strans legați ca să fi următorul:

$$H^0 = \sum_{n,m} \epsilon_a a_{n,m}^\dagger a_{n,m} + \epsilon_b b_{n,m}^\dagger b_{n,m} + t_1 (a_{n+1,m}^\dagger b_{n,m} + a_{n,m}^\dagger b_{n,m}) + t_2 a_{n,m+1}^\dagger b_{n,m} + t_3 (a_{n,m+2}^\dagger b_{n,m} + a_{n-1,m+2}^\dagger b_{n,m}) + t_5 a_{n+1,m-1}^\dagger b_{n,m} + H.c.,$$

$$H^4 = \sum_{n,m} t_4 (a_{n,m+1}^\dagger a_{n,m} + a_{n-1,m+1}^\dagger a_{n,m}) + t_4 (b_{n,m+1}^\dagger b_{n,m} + b_{n-1,m+1}^\dagger b_{n,m}) + H.c.$$

Hamiltonianul total care descrie rețeaua va fi $H = H^0 + H^4$, unde ϵ_a și ϵ_b sunt energiile atomice ale siturilor A respectiv B și $t_1 = -1.22eV$, $t_2 = 3.665eV$, $t_3 = -0.205eV$, $t_4 = -0.105eV$ și $t_5 = -0.055eV$. Am ales să separăm Hamiltonianul total în H^0 și H^4 , deoarece elementul de hopping t_4 conectează siturile de același fel (A-A și B-B) ceea ce duce la distrugerea bipartitismului, iar ca primă consecință la ruperea simetriei electron-gol. Pentru a studia proprietățile spectrale ale Hamiltonianului total, care descrie comportarea electronilor în rețeaua de fosforena trebuie să transformăm Fourier în lungul ambelor direcții O_x și O_y și astfel obținem Hamiltonianul în spațiul reciproc. Spectrul rețelei de fosforena se poate observa în figura 2, el prezentând o puternică anisotropie și deasemenea asimetrie electron-gol.

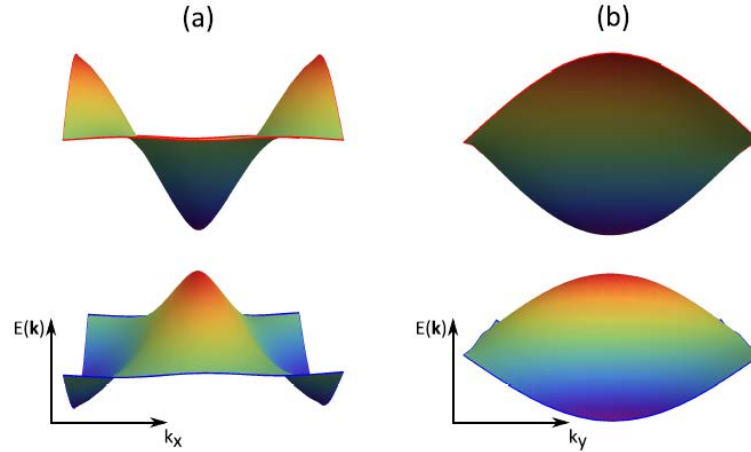


Figura 2: Spectrul de dispersie al rețelei de fosforena cu condiții periodice. Anisotropia spectrului se manifestă în jurul punctului Γ : (a) spectrul în lungul axei k_x arată un comportament Dirac (lege de dispersie liniară) și (b) spectrul în lungul axei k_y arată un comportament Schrödinger.

Simetria electron-gol a spectrului energetic este asigurată atâta timp cât există un operator P care să anticomute cu Hamiltonianul, $[H, P]_+ = 0$. Dacă E este o valoare proprie a Hamiltonianului, atunci $H\psi_E = E\psi_E$ și dacă $-E$ aparține deasemenea spectrului energetic, atunci funcția proprie corespunzătoare este $\tilde{\psi}_{-E} = P\psi_E$. În cazul fosforenei operatorul P este de forma:

$$P = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} - b_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}}$$

Operatorul de mai sus anticomuta cu Hamiltonianul $H_{\vec{k}}^0$, ceea ce dovedeste ca spectrul lui $H_{\vec{k}}^0$ este simetric in jurul energiei de zero, dar P nu anticomuta cu tot Hamiltonianul fosforenei, $H_{\vec{k}}^0 + H_{\vec{k}}^4$, rezultatul fiind proportional cu t_4 . In concluzie spectrul fosforenei este simetric in jurul valorii de zero daca neglijam elementul de hopping t_4 .

Proprietati spectrale ale ribbonului de fosforena in camp magnetic

In Hamiltonianul de mai sus ($H = H^0 + H^4$), impunem doua margini paralele cu lanturile zig-zag la $m = 1$ si M , iar in lungul axei O_x punem contitii periodice. Transformata Fourier in lungul directiei O_x genereaza un Hamiltonian care descrie comportamentul electronilor intr-o geometrie de tip ribbon:

$$H^0(k_x) = \sum_{m=1}^M \epsilon_a a_{k_x, m}^{\dagger} a_{k_x, m} + \epsilon_b b_{k_x, m}^{\dagger} b_{k_x, m} + t_1 (e^{i(\phi_1 - k_x)} + e^{-i\phi_1}) a_{k_x, m}^{\dagger} b_{k_x, m} \\ + \sum_{m=1}^{M-1} t_2 a_{k_x, m+1}^{\dagger} b_{k_x, m} + \sum_{m=1}^{M-2} t_3 (e^{i\phi_3} + e^{-i(\phi_3 - k_x)}) a_{k_x, m+2}^{\dagger} b_{k_x, m} \\ + \sum_{m=1}^{M-1} t_5 e^{ik_x} a_{k_x, m-1}^{\dagger} b_{k_x, m} + H.c.,$$

$$H^4(k_x) = t_4 \sum_{m=1}^{M-1} (e^{i\phi_{4B}} + e^{-i(\phi_{4B} - k_x)}) b_{k_x, m+1}^{\dagger} b_{k_x, m} \\ + (e^{i\phi_{4A}} + e^{-i(\phi_{4A} - k_x)}) a_{k_x, m+1}^{\dagger} a_{k_x, m} + H.c.,$$

unde $\phi_1, \phi_3, \phi_{4A}, \phi_{4B}$ sunt fazele Peierls pe care anumite elemente de hopping le castiga in prezenta campului magnetic perpendicular. Pentru a obtine spectrul electronic trebuie sa diagonalizam Hamiltonianul de mai sus pentru orice valuare a impulsului k_x cuprinsa intre $[-\pi, \pi]$, figura 3.

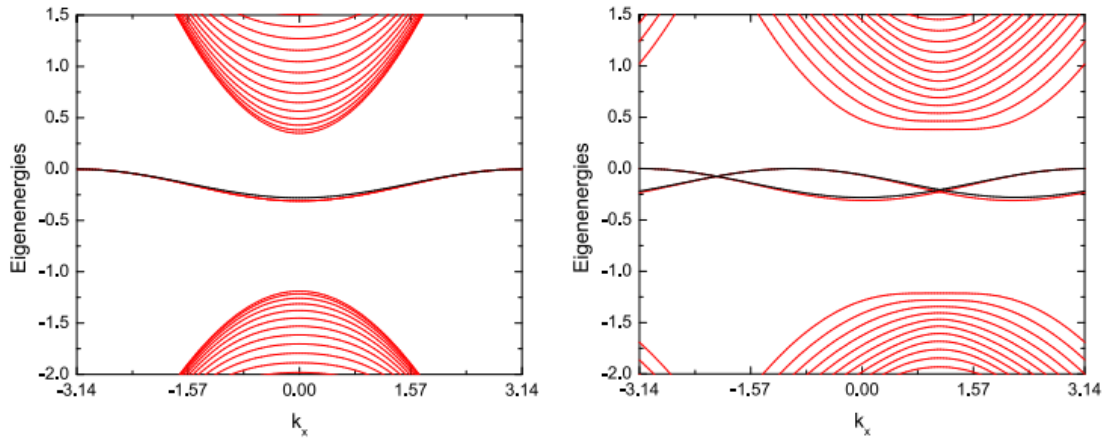


Figura 3: Spectrul energetic al ribbonului zig-zag de fosforena. Ridicarea de degenerare a benzii quasi-plate in camp magnetic poate fi remarcata prin compararea celor doua spectre: in partea stanga campul magnetic este zero, iar in partea dreapta $\phi = 0.01(h/e)$. Liniile rosii reprezinta valorile numerice, iar liniile negre reprezinta valorile analitice.

Pentru a obtine valorile analitice ale valorilor proprii in zona energiilor benzii cuasi-plate consideram $t_3 = t_5 = 0$, $\epsilon_a = \epsilon_b = 0$ si profitam de avantajul localizarii functiei de unda la cele doua margini ale ribbonului ($m = 1$ si $m = M$). Obtinem astfel valorile:

$$E^1(k_x, \phi) \cong \bar{t}_{4A}(1, \phi)(-\bar{t}_1(1)^*/t_2)|\xi_{k_x,1}^A|^2 + c. c,$$

$$E^2(k_x, \phi) \cong \bar{t}_{4B}(M-1, \phi)(-\bar{t}_1(M)/t_2)|\xi_{k_x,M}^B|^2 + c. c,$$

unde $\bar{t}_1(m) = t_1(e^{i(\phi_1(m)-k_x)} + e^{-i\phi_1(m)})$, $\bar{t}_{4A}(m) = t_4(e^{i\phi_{4A}(m)} + e^{-i(\phi_{4A}(m)-k_x)})$, asemanator se poate scrie si relatia pentru $\bar{t}_{4B}(m)$, iar $\xi_{k_x,1}^A$ si $\xi_{k_x,M}^B$ sunt coeficientii functiilor de unda. In figura 3 am comparat spectrul benzii cuasi-plate in absenta (stanga) si in prezenta (dreapta) campului magnetic perpendicular. Elementul de hopping t_4 genereaza dispersia benzii, iar campul magnetic ridica degenerarea. Curbele rosii reprezinta valorile numerice calculate luand in considerare toate cele 5 elemente de hopping, in timp ce curbele negre reprezinta valorile analitice de mai sus. Fitul dintre cele doua curbe este unul destul de bun si putem concludiona ca t_3 si t_5 au o influenta neglijabila in domeniul energiilor benzii cuasi-plate.

Efectul Hall cuantic intreg in fosforena

Pentru a investiga proprietatile in camp magnetic perpendicular simulam un dispozitiv Hall prin atasarea de fire la sistem, fiecare fir este atasat de marginea zig-zag a fosforenei. Am ales sa atasam fire doar pe marginea zig-zag deoarece aceasta configuratie este singura care poate pune in evidenta proprietatile de transport ale starilor topologice [2, 3], localizate in lungul marginilor zig-zag.

In ceea ce priveste efectul Hall cuantic trebuie remarcat platoul $G_H = 0$, care corespunde gapului central, figura 4.

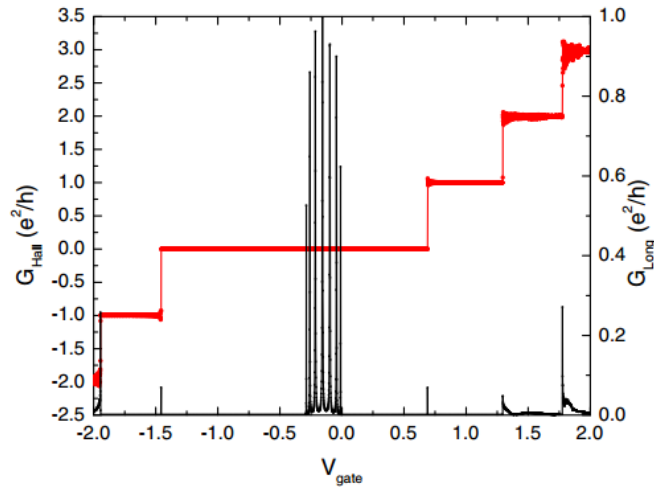


Figura 4: Calculul numeric al conductantei Hall (rosu) si al conductantei longitudinale (negru) in regim Hall cuantic ca functie de V_{gate} . Conductanta longitudinala prezinta o serie de peakuri in domeniul energiilor benzii cuasi-plate. Numarul de situri este 107×40 , fluxul magnetic $\phi = 0.1(h/e)$ si energia Fermi pe fire $E_F = 0$.

Platourile din effectul Hall cuantic sunt asemanatoare cu cele masurate in gazul de electroni bidimensionali, adica merg in pasi de $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ in unitati de e^2/h . Deoarece spectrul fosforenei este asimetric, dupa cum am vazut din calculul de benzi, se observa ca lungimea palierelor Hall este diferita in functie de regiunea din spectru unde se afla, pozitiva sau negativa. Platourile Hall sunt generate de prezenta in spectru a starilor de margine chirale, iar starile de margine topologice din banda cuasi-plata au un caracter non-chiral deoarece ele nu contribuie la effectul Hall cuantic, conductanta lor fiind $G_H = 0$. In ceea ce priveste conductanta longitudinala aceasta are un comportament ne-disipativ in domeniul energiilor platourilor Hall ($G_L = 0$), iar in domeniul energiilor benzii cuasi-plata $[-0.3, 0]$ prezinta o serie de peakuri (comportament disipativ). Caracterul disipativ al starilor de margine non-chirale a fost intalnit si in contextul energiilor de zero in grafena [4]. Din analiza Hamiltonianului efectiv si a coeficientilor de transmisie am pus in evidenta, variind cuplajul dintre proba si fire, un regim superradiativ in domeniul energiilor benzii cuasi-plata.

Concluzii

Am demonstrat analitic ruperea de simetrie electron-gol si am pus in evidenta rolul jucat de elementul de hopping t_4 , in modelul electronilor strans legati, singurul care violeaza bipartitismul retelei.

In cazul ribbonului zig-zag am demonstrat analitic degenerarea starilor de margine topologice localizate pe margini opuse si am aratat ca degenerarea este ridicata de catre campul magnetic perpendicular.

Prin simularea unui dispozitiv Hall am scos in evidenta comportamentul ne-chiral al starilor de margine topologice, iar seria de peakuri din conductanta longitudinala releva caracterul disipativ al acestor stari.

Bibliografie

- [1] A. N. Rudenko and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B 89 201408(R) (2014).
- [2] M. Ezawa, New J. Phys. 16, 115004 (2014).
- [3] B. Ostahie and A. Aldea Phys. Rev. B 93 075408 (2016).
- [4] D. A. Abanin, K. S. Novoselov, U. Zeitler, P. A. Lee, A. K. Geim, and L. S. Levitov Phys. Rev. Lett. 98, 196806 (2007).

6. Rezultate, stadiul realizării obiectivului fazei, concluzii și propuneri pentru continuarea proiectului

Obiectivele propuse au fost realizate si concretizate in lucrarea ” Phosphorene confined systems in magnetic field, quantum transport, and superradiance in the quasiflat band” autori B. Ostahie si A. Aldea, publicata in Physical Review (SUA, 2016). Tematica este de mare actualitate in fizica starii condensate in perspectiva evidentierii proprietatilor

topologice. Din punctul de vedere al acestor proprietati de mare interes este aplicare tehnicilor de Hamiltonian ne-Hermitic pentru intelegerea efectului Hall cuantic, precum si influenta defectelor si efectele dezordinii asupra starilor topologice in prezenta/absenta campurilor magnetice.

Responsabil proiect

Dr. Sorina Lazanu

Responsabil faza

Drd. Bogdan Ostahie

Dr. Alexandru Aldea