



XV Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa
”Stulecie Nadprzewodnictwa”
Kazimierz Dolny, 9-13 października 2011 r.

Obliczenia Monte Carlo dla adatomów w grafenie - oddziaływanie dalekozasięgowe, uporządkowanie i separacja fazowa

MARCIN KURPAS

Zakład Fizyki Teoretycznej, Uniwersytet Śląski w Katowicach

Ze względu na swoje niezwykle właściwości, w ostatnich latach grafen jest jednym z najintensywniej badanych materiałów. Duża ruchliwość elektronów, zerowa masa efektywna i długa droga swobodna (nawet w temperaturze pokojowej) stawiają ten materiał jako następcę krzemu w elektronice przyszłości.

Ostatnie badania pokazują [1,2], że domieszkowany grafen, na skutek oddziaływania domieszek z elektronami, staje się półprzewodnikiem nawet dla niskiej koncentracji domieszek. Przy niewielkiej liczbie domieszek nie należy spodziewać się bezpośredniego oddziaływania pomiędzy nimi. Natomiast obecność ruchliwych elektronów, które oddziałują z domieszkami prowadzi do efektywnego, dalekozasięgowego oddziaływania międzydomieszkowego. Oddziaływanie to z kolei może prowadzić do porządkowania się domieszek lub tworzenia separacji fazowej, czyli stanu w którym obszary o dużej koncentracji domieszek sąsiadują z obszarami bez domieszek. W szczególności okazuje się, że efektywne oddziaływanie pomiędzy domieszkami zależy od tego, czy znajdują się one w tej samej, czy w różnych podsieciach [1,2]. Ponieważ dynamika domieszek jest zaniedbywalna w porównaniu z ruchliwością elektronów, a bezpośrednie oddziaływanie występuje jedynie pomiędzy elektronami i domieszkami (zaniedbując korelacje elektronowe), domieszkowany grafen można opisać modelem Falicova-Kimballa [3] na sieci heksagonalnej. W pracy model ten badany jest metodą Monte Carlo w oparciu o zmodyfikowany algorytm Metropolis, pozwalający na prowadzenie klasycznych symulacji dla układu w którym występują zarówno klasyczne, jak i kwantowe stopnie swobody [4]. Badamy wpływ domieszkowania grafenu na jego własności elektronowe, w szczególności analizujemy jak zmienia się gęstość stanów, parametr porządku i konfiguracja domieszek wraz ze zmianą ich koncentracji, temperatury oraz potencjału oddziaływania elektron-domieszka. Pokazujemy, że dla małej koncentracji jony obsadzają równomiernie obie podsieci, podczas gdy powyżej pewnej krytycznej wartości zajmują tylko jedną podsieć. Analogiczna analiza przeprowadzona jest także dla domieszek w sieci Kagome.

- [1] A.V. Shytov, D.A. Abanin, L.S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 016806 (2009).
- [2] V.V. Cheianov, O. Syljuasen, B.L. Altshuler and V.I. Fal'ko, *Europhys. Lett.* **89**, 56003 (2010).
- [3] L.M. Falicov and L.C. Kimball, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 997 (1969).
- [4] M.M. Maška and K. Czajka, *Phys. Rev. B* **74**, 035109 (2006).