

Grafén

Richard Pinčák

Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice

1. júna 2016

Košice, Slovensko, 2016



A. VÝSKUMNÉ TÉMY SMERU, M.Pudlák,R.Pinčák

A1. Domáce projekty

- 2/0069/10 Elektrónové vlastnosti nanoštruktúr,2010-2012, M.Pudlák,R.Pinčák
- 2/0037/13 Elektrónové vlastnosti karbónových nanočastíc,2013-2015,M.Pudlák,R.Pinčák

A2. Medzinárodné projekty: nie



- **Kapitola v knihe**

1. Carbon Nanotubes: Synthesis and Properties (Nova Science, 2012, ISBN: 978-1-62081-914-2) Chapter 10, R. Pincak, M. Pudlak: Electronic Properties of Single and Double Wall Carbon Nanotubes

IF > 1.5	2015	2014	2013	2012	SUMA
Počet A publikácií CC	4	2	3	1	10
Prvý autor je z daného smeru	3	2	3	1	9
Počet Nekar. publikácií	2	0	2	2	6

- Podané patenty: nie
- Schválené patenty: nie



Citácie za akreditačné obdobie

	2014	2013	2012	2011	SUMA
Celkový počet citácií WOS	14	11	10	7	42

- Celkový počet citácií WOS prác publikovaných v atestačnom období 2012-2015

	SUMA
Celkový počet citácií WOS	8



- ① M.Pudlak, R.Pincak: Edge states of graphene bilayer strip
Eur.Phys.J B 86 (2013) 107
- ② R. Pincak, J. Smotlacha, Analogies in electronic properties of
graphene wormhole and perturbed nanocylinder, Eur. Phys. J. B
(2013) 86: 480
- ③ R.Pincak, J.Smotlacha, M.Pudlak: Calculation of the electronic
structure near the tip of the graphitic nanocone, Physica B 441
(2014) 58
- ④ R.Pincak, J.Smotlacha, M.Pudlak: Spin-orbit interaction in the
graphitic nanocone, Eur.Phys.J B 88 (2015) 17
- ⑤ M.Pudlak, K.N.Pichugin, R.G.Nazmitdinov: Cooperative
phenomenon in a rippled graphene: Chiral spin guide, Phys.Rev.B 92
(2015) 205422

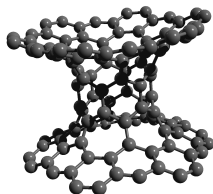


- Electronic structure and boundary conditions in the graphitic nanocone, Saratov Fall Meeting (oral presentation, 21.-25.9.2015)
- Electronic structure of graphitic nanocone influenced by spin-orbit coupling and boundary effects, 4th International Symposium on Energy Challenges and Mechanics - working on small scales, Aberdeen (oral presentation, 11.-13.8.2015)
- Green function approach of the spin-orbital interaction in the graphitic nanocone, Mathematical Modeling and Computational Physics, Stara Lesna (oral presentation, 13.-17.7.2015)
- Spin orbit effects in armchair carbon nanotubes, UIB Palma, 15.10.2014(invited lecture) Spain
- Topological defects in graphene nanostructures, International Conference and Exhibition on Mesoscopic and Condensed Matter Physics, Boston (22.-24.6.2015, invited lecture)



- Spin-Orbital and Pi-Orbital Interactions in the Graphitic Nanocone, Graphene 2015, Bilbao (poster presentation, 10.-13.3.2015)
- Spin-Orbital and Pi-Orbital Interactions in the Graphitic Nanocone, International Conference on Scanning Probe Microscopy on Soft and Polymeric Materials, Toronto (**invited lecture** 2.-5.9.2014)
- Electronic Properties of Graphene Wormhole, XXIIst International Conference on Integrable Systems and Quantum Symmetries, Prague (oral presentation, 23.-29.6.2014)
- Electronic Properties of Carbon Nanoparticles, XXIst International Conference on Integrable Systems and Quantum Symmetries, Prague (oral presentation, 12.-16.6.2013)
- Application of greens function approach to electronic structure of carbon nanocylinders, Mathematical Challenge of Quantum Transport in Nanosystems, Sankt Petersburg (12.-15.3.2013)



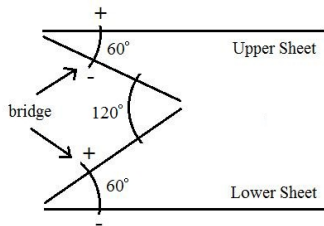


V spolupráci s:

- Dr. Alireza Sepehri, Faculty of Physics, Shahid Bahonar University, P.O. Box 76175, Kerman, Iran
- Dr. Ahmed Farag Ali, Department of Physics, Faculty of Science, Benha University Benha 13518, Qaliubiya, Egypt
- Dr. Gonzalo Olmo Alba, Departamento de Física Teórica and IFIC, Centro Mixto Universidad, Spain. Universidade Federal da Paraíba, 58051-900 João Pessoa, Paraíba, Brazil



Schéma geometrie wromholu v grafénovom bilayeri



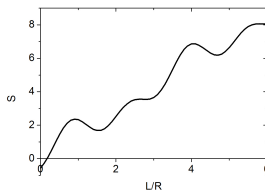
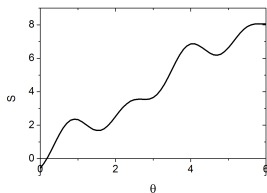
Vodivosť: (Definícia účinku z teórie strún)

$$S_{co-Atom} = \int dt Tr(\Sigma_{M,N,L=0}^P \langle [X^M, X^N, X^L], [X^M, X^N, X^L] \rangle) \quad (1)$$

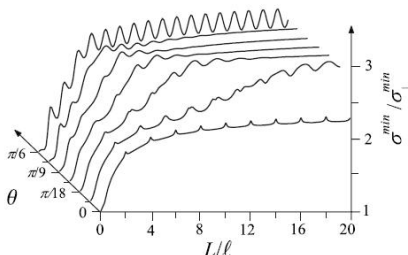
kde $X^M = X_{\alpha}^M T^{\alpha}$. Grafénová červia diera vzniká ako dôsledok nerovnosti medzi pozitívnou krivosťou fermiónov s antiparalelnými spinmi a negatívnou krivosťou fermiónov s paralelnými spinmi. Predpokladáme, že anti-gravitácia medzi paralelnými spinmi je hlavným dôvodom pre vznik Pauliho vylučovacieho princípu.



Simulovaná vodivost' - PRB 79, 073401 (2009)



R-polomer šestuholníka grafénu, L-vzdialenosť medzi dvoma elektrónmi,
 θ uhol medzi dvoma elektrónmi, Dvojvrstvový grafén s vonkajším poľom



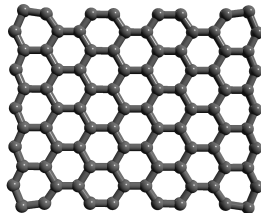
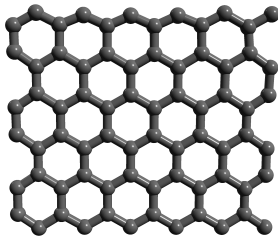
Grafénové červie diery-záver

- 1 Bol navrhnutý model skúmania vodivostných vlastností dvojvrstvového grafénu a grafénu s defektami.
- 2 Bola nájdená spojitosť medzi celkovou krivosťou systému a spinmi voľných elektrónov.
- 3 Pre symetrický grafén je počet väzieb medzi identickými fermiónmi rovný počtu väzieb na antisymetrické fermióny, celková krivosť je nulová a vodivosť mizne.
- 4 Získaný zodpovedajúci účinok pre vodivosť v symetrickom graféne bez defektov je nulový.
- 5 Vplyvom defektov v hornej či dolnej vrstve grafénu sa tieto vrstvy dostávajú bližšie k sebe a interakciou paralelne a antiparalelne orientovaných spinov vzniká väzba medzi elektrónmi uhlíka a vytvára sa nová cesta pre voľne elektróny cez wormhol.
- 6 V závislosti na tvare defektu, počet väzieb na antisymetrické spiny narastá a pozoruje sa nárast vodivosti.
- 7 Zodpovedajúci účinok pre vodivosť v graféne s defektami je nenulový.



2. Nanoribóny po vplyvom magnetického poľa

- tieto nanoštruktúry majú vysokú variabilitu - ich vlastnosti možno ovplyvniť zmenami šírky a štruktúry okraja
- rozlišujeme 2 základné typy ktoré sa líšia elektrickými vlastnosťami: zigzag (vodič) a armchair (polovodič)



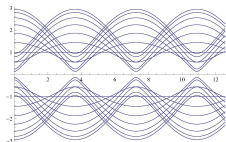
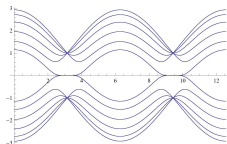
V spolupráci s:

- J. Smotlacha, V.A.Osipov, Rashid G. Nazmitdinov, BLTP, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow region, Russia

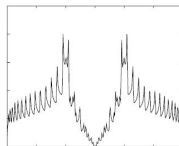
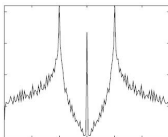


Nanoribóny po vplyvom magnetického poľa

- počítame elektrónové spektrum; to v okolí nuly vytvára buď lokalizovaný stav v prípade vodičov, alebo gap v prípade polovodičov; šírku medzery je možné prípadne ovplyvniť rôznymi prímiesami

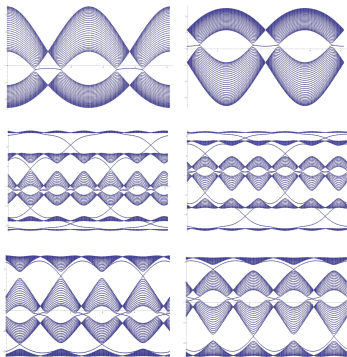


- u hustoty stavov týmto spôsobom vzniká v okolí nulovej energie buď výrazný pík, alebo oblasť s malým výskytom elektrónov



Nanoribóny po vplyvom magnetického poľa

- v prítomnosti magnetického poľa graf elektrónového spektra zachováva tvar, ale rôzne mení veľkosť:

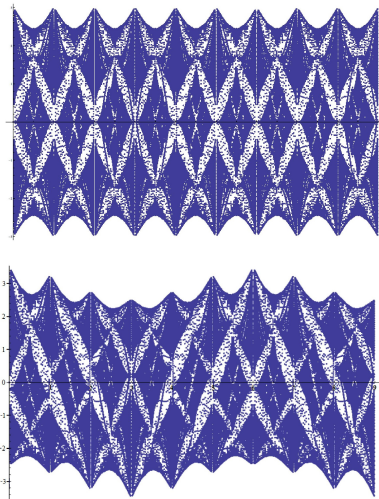


Obr. : Elektrónové spektrum pre zigzag nanoribbón pre rôzne hodnoty magnetického poľa danej magnetickým tokom: zhora nadol: $f = 0$ a $f = 3$, $f = 1/3$ a $f = 8/3$, $f = 1/2$ a $f = 5/2$.

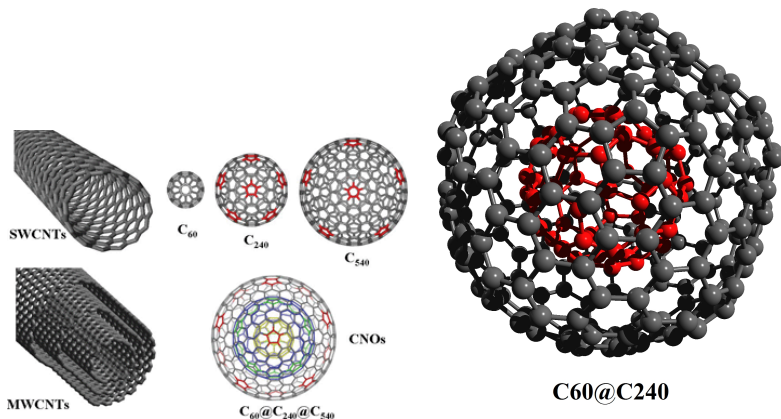


Nanoribbóny pod vplyvom magnetického poľa

V závislosti na magnetickom poli a interakcii prvých a druhých najblžších susedov sa môže tvar spektra značne meniť:



3. Onióny-viacvrstvé fullerényy



V spolupráci s:

- O. E. Glukhova, A. S. Kolesnikova, M. M. Slepchenkov, V. V. Shunaev Department of Physics, Saratov State University, Astrakhanskaya street 83, Saratov, 410012, Russia



Geometrické parametre fullerénov

Fullerene	Polomer [Å]	Priemerná dĺžka väzby [Å]
C20	2.06	1.47
C60	3.4	1.445
C240	7.2	1.415
C540	10.1	1.435
C28	2.53	1.46
C32	2.65	1.51
C36	2.37	1.45
C80	3.94	1.44

Medzivrstvová interakcia je určená hlavne pomocou VDW interakcií. Vzhľadom k icosahedralnej symetrii vonkajších Fullerénov, sú 3 potencionalne jamky, kde by mohli byť umiestnené vnútorné fullerény.



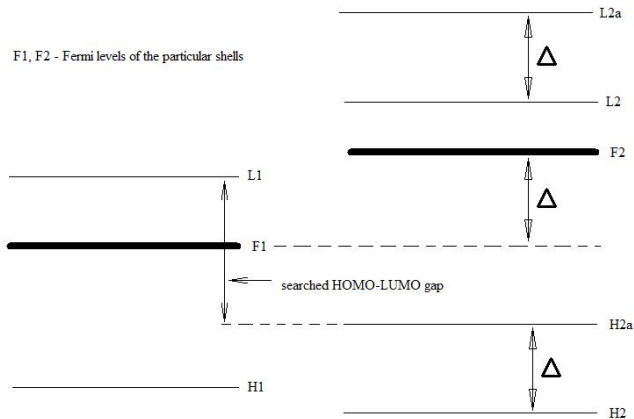
Medzivrstvová interakcia Oniónov

	E1 [eV]	E2 [eV]	E3 [eV]
C20@C240	-0.7862	-0.7836	-0.7845
C60@C540	-1.209	-1.194	-1.16

Fullerene type	C60	C240	C540	C60@C540	C60@C240	C20@C240
$E_{Homo-Lumol}$	2.03	1.25	0.90	0.90	1.25	0.078



Homo-Lumo gap pre Onióny



Δ - posun spôsobený medzivrstvovou interakciou



Nové práce zaslané a vyndené v roku 2016

- ① Alireza Sepehri and Richard Pincak, Modeling the electron transport in nanostructures by using the concept of Blons in M-theory, zaslané do International Journal of Theoretical Physics, Impact Factor cc 1.25
- ② Alireza Sepehri, Anirudh Pradhan, Richard Pincak, A. Beesham, Emergence of anti-F(R)-gravity in Type-IV Bouncing cosmology as due to M0-brane, zaslané do Classical and Quantum Gravity, Impact Factor cc 3.2
- ③ R. Pincak, Alireza Sepehri, Gonzalo J. Olmo, Induced conductivity by the graphene wormhole in the bilayer strip, zaslané do Nuclear Physics B, Impact Factor cc 3.93
- ④ J. Smotlacha, R. Pincak, Electronic Properties of Carbon Nanostructures, kapitola v knihe "2D Materials", Intech open science, ISBN 978-953-51-4813-5

