

Symulatory kwantowe na supersieciach Moiré

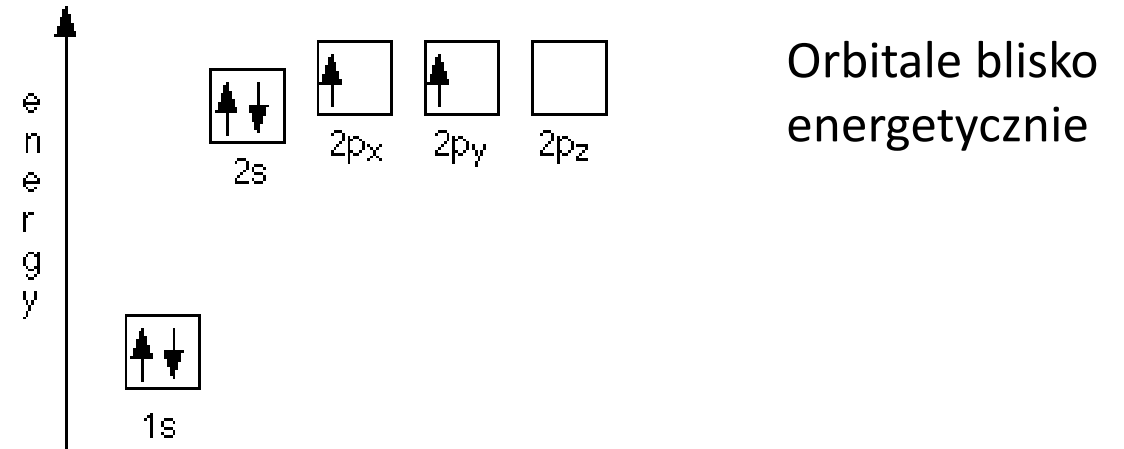
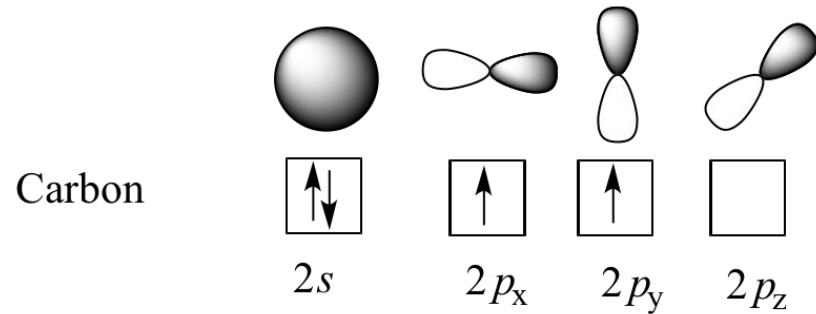
Plan wykładu

- Świat materiałów dwuwymiarowych
 - Węgiel i grafen
 - Monowarstwy atomowe
 - Heterostruktury
 - Spektroskopia
- Supersieci Moire
 - Poskręcane dwuwarstwa grafenu (TBG)
 - TBG vs HTSC
- Symulatory kwantowe
 - Złożoność obliczeniowa problemów kwantowo-mechanicznych
 - metody przybliżone

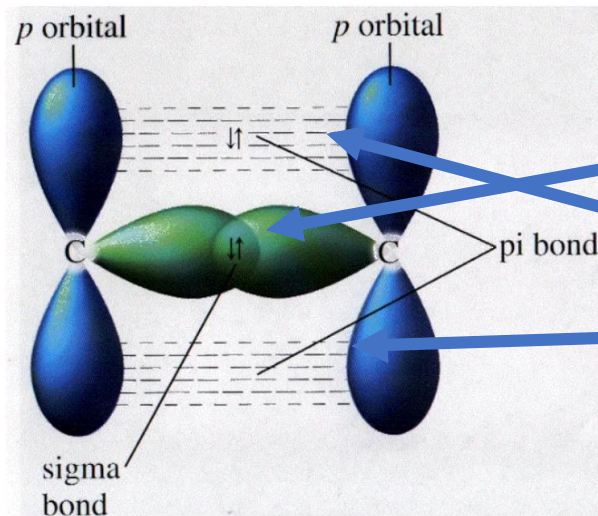
Wiązania chemiczne - orbitale zhybrydowane

Węgiel (carbon)

Orbitale atomowe na powłoce walencyjnej



Wiązania węgiel - węgiel

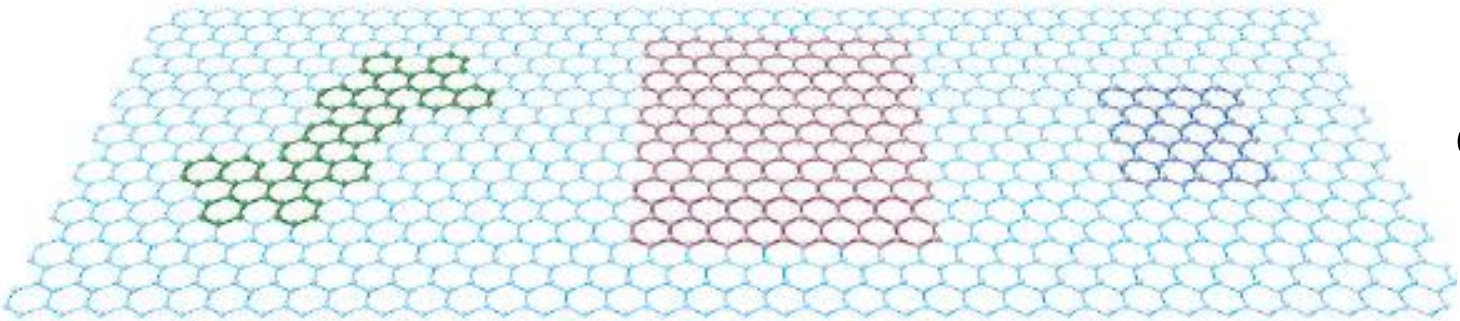


Wiązanie sigma (własności mechaniczne)

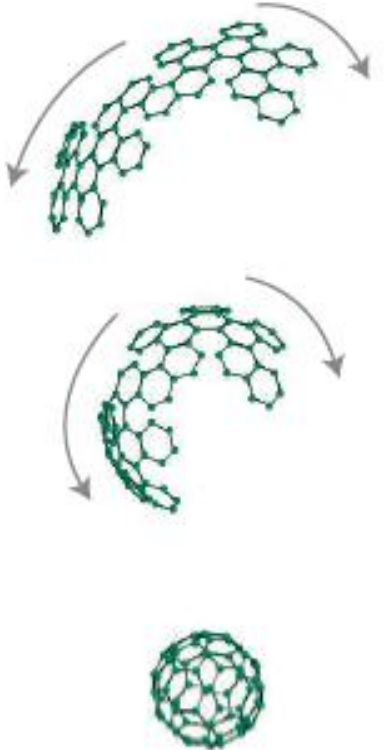
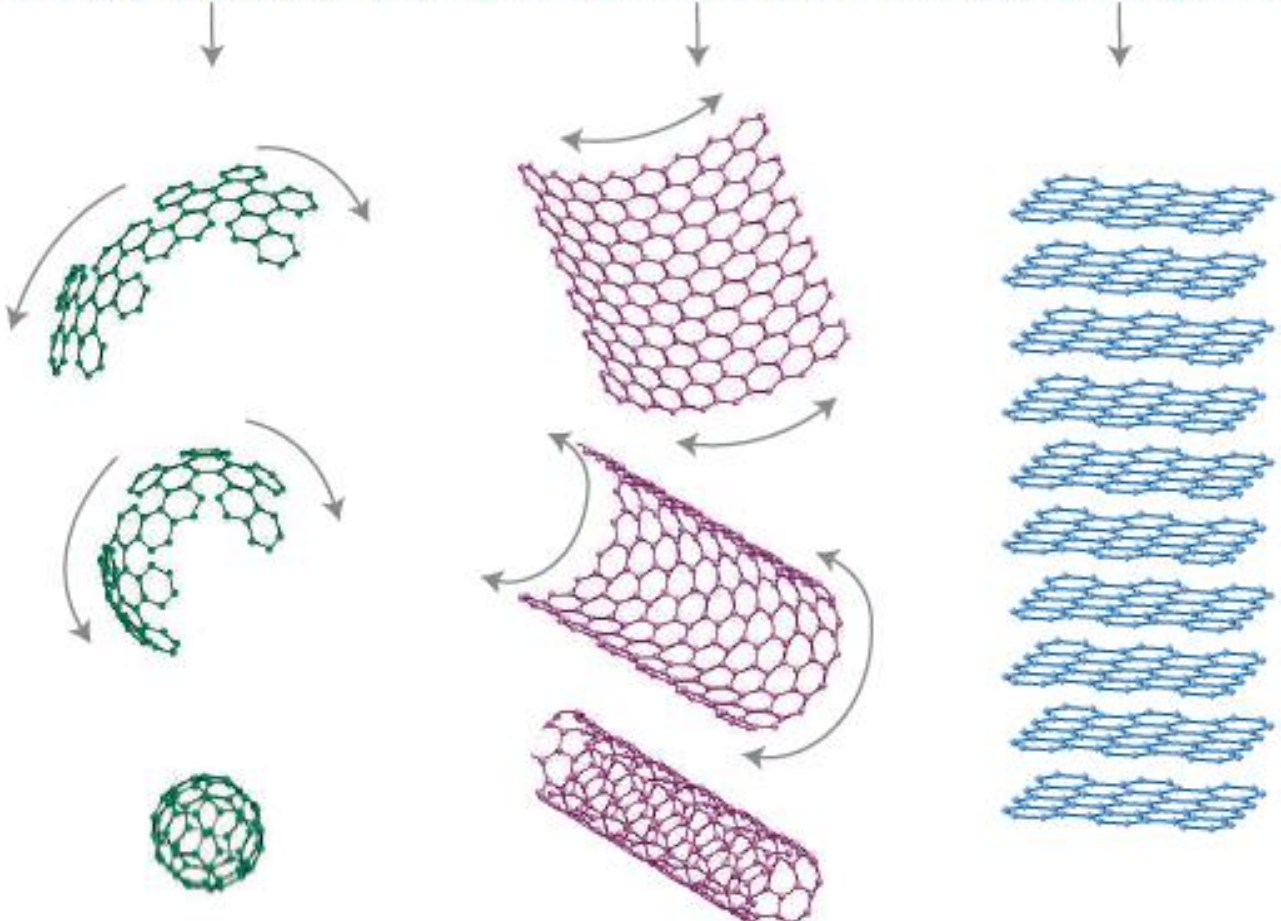
Wiązania pi (własności elektronowe)

<https://cjarquin.medium.com/100-nano-stories-sigma-pi-bonds-3c2f08848ee5>

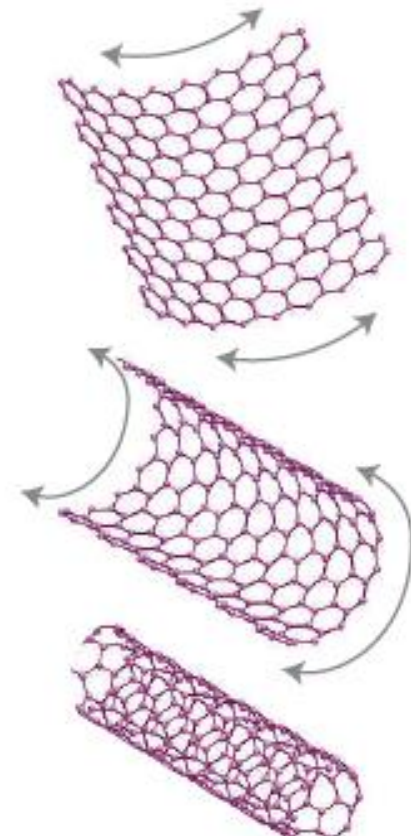
Odmiany węgla



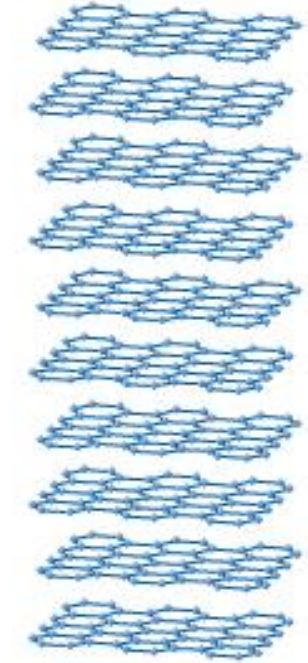
Grafen



fulereny



nanorurki

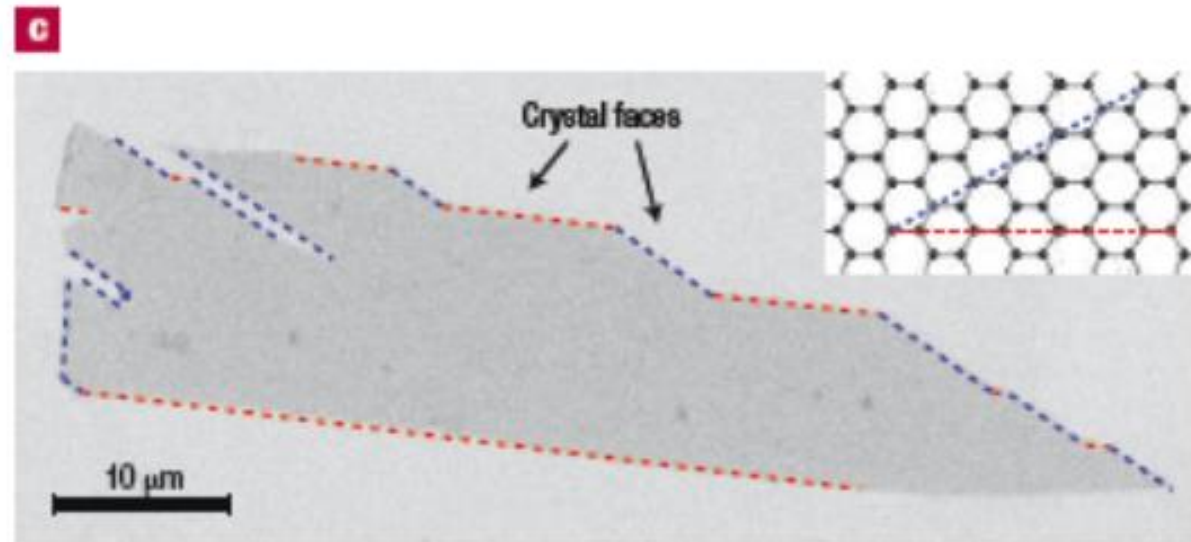
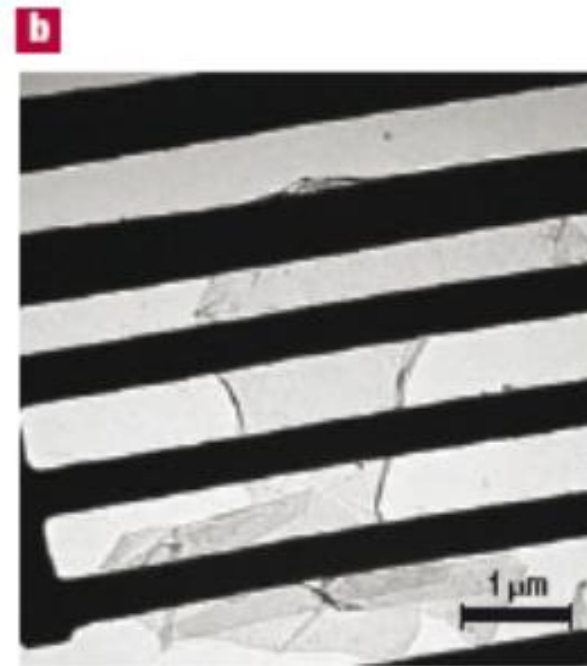
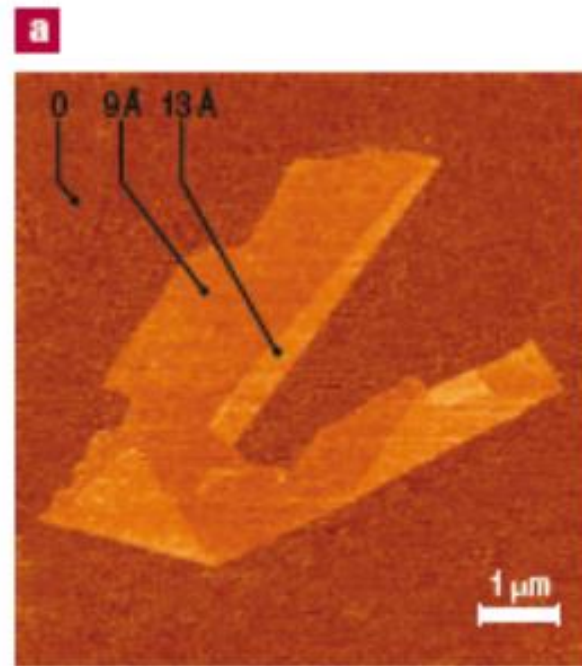
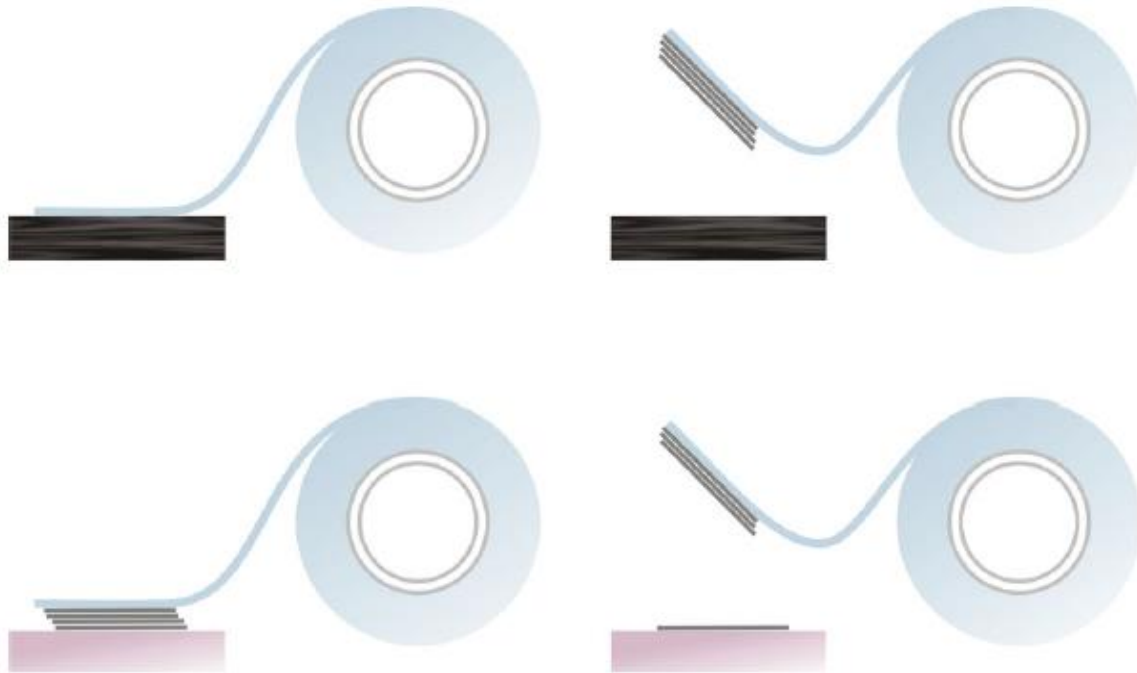


grafit

Geim and Novoselov,
Nature 2007

Grafen

Otrzymywanie:
metoda mechanicznego odrywania otrzymywania



Nagroda Nobla 2010

Odkrycie (i zidentyfikowanie) grafenu



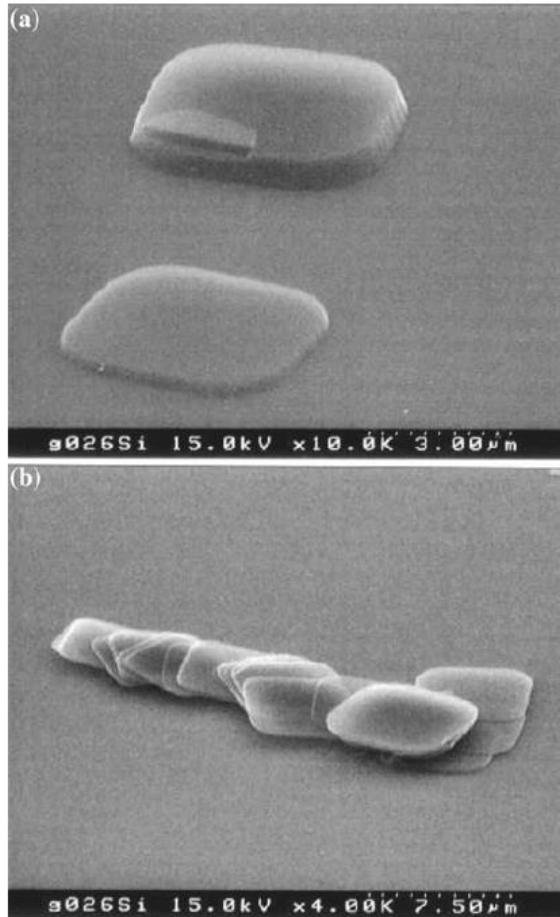
Andre Geim



Konstantin Novoselov

Grafit i grafen pod różnymi mikroskopami

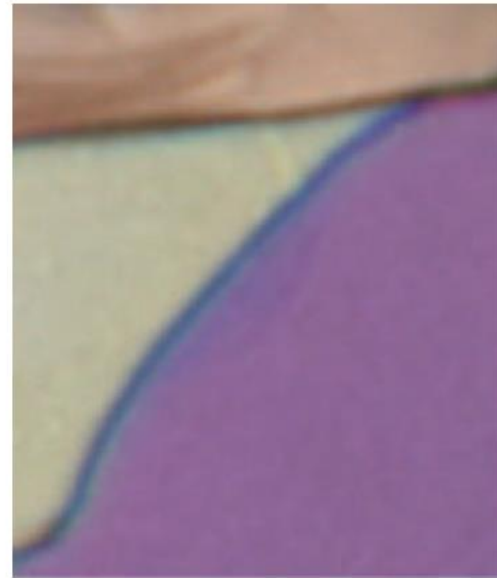
SEM



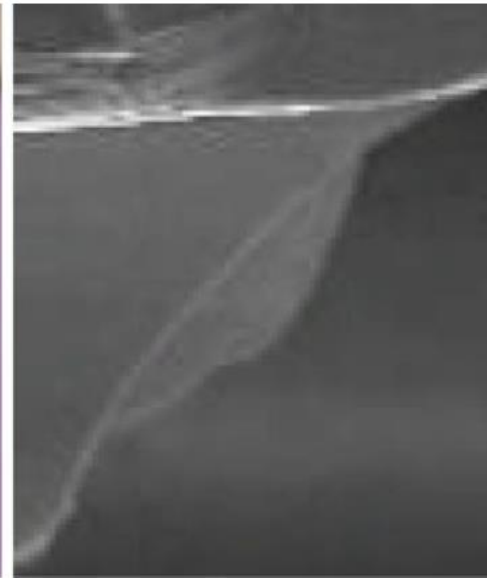
SEM images of thin graphite plates on the Si(001) substrate. Reprinted from [35]

Lu, Yu, Huang, Ruoff,
Nanotechnology 10, 269 (1999)

OM



SEM



Images of a thin graphitic flake in optical (*left*) and scanning electron (*right*) microscopes.

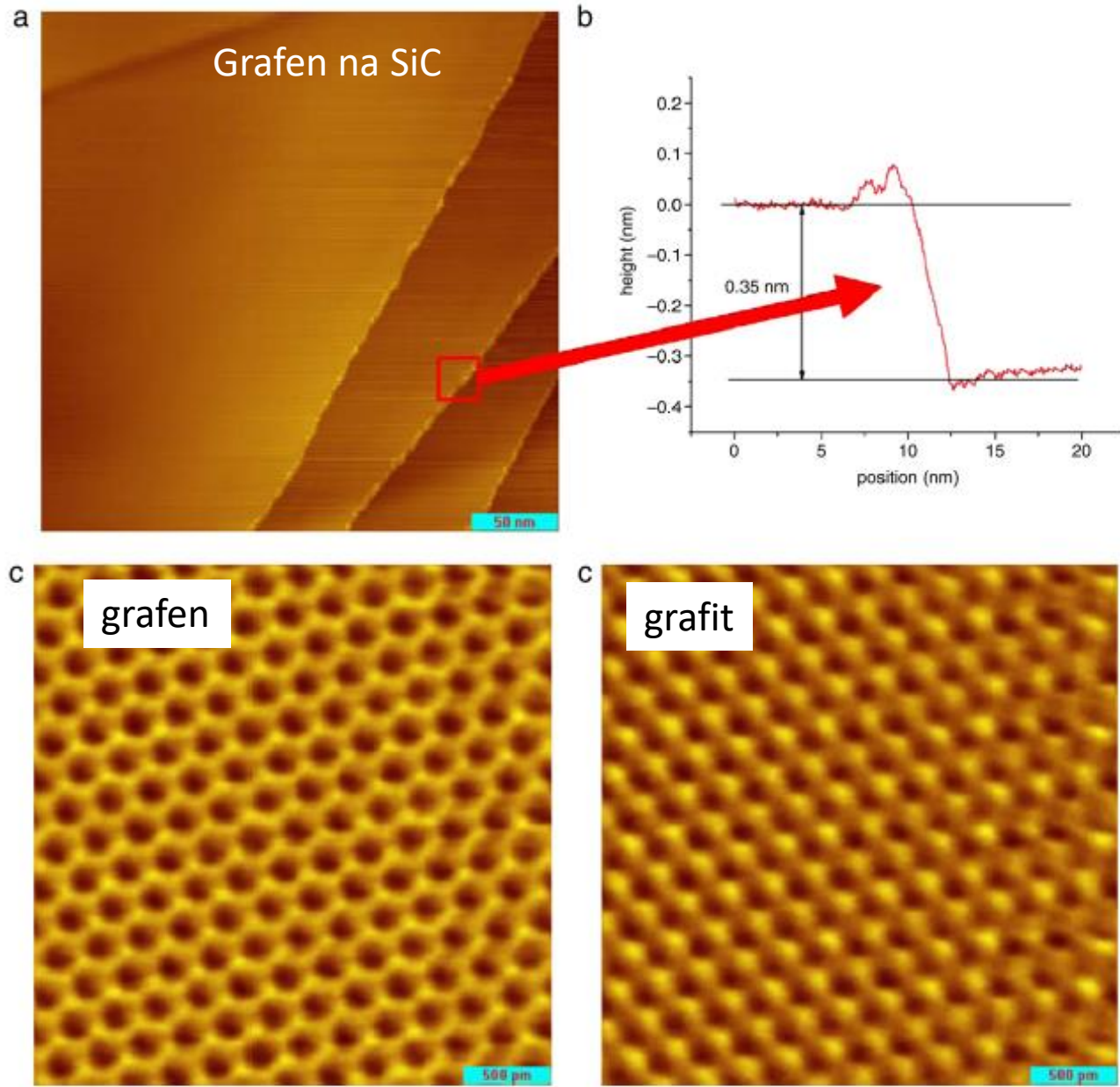
Novoselov, et al.,
Science 306, 666 (2004)

AFM

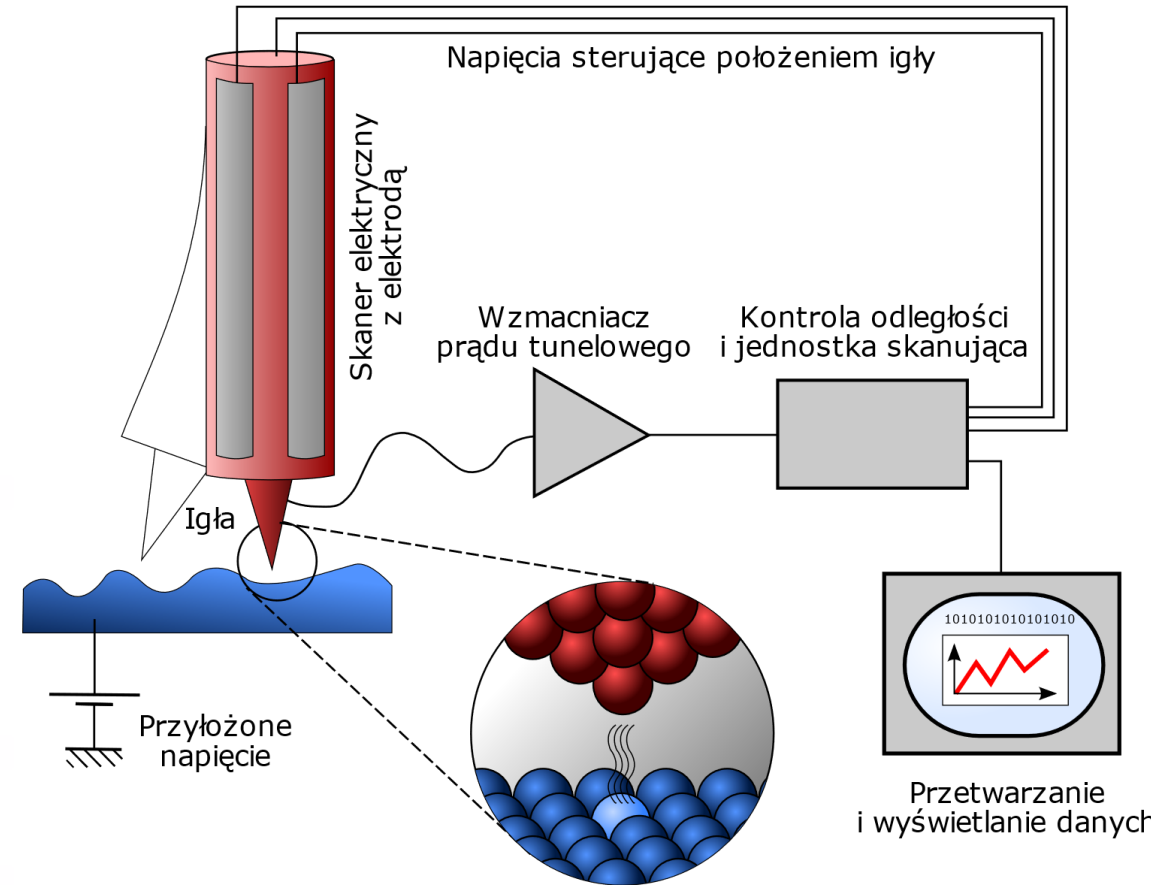


Novoselov, et al.,
Science 306, 666 (2004)

Grafit i grafen pod różnymi mikroskopami



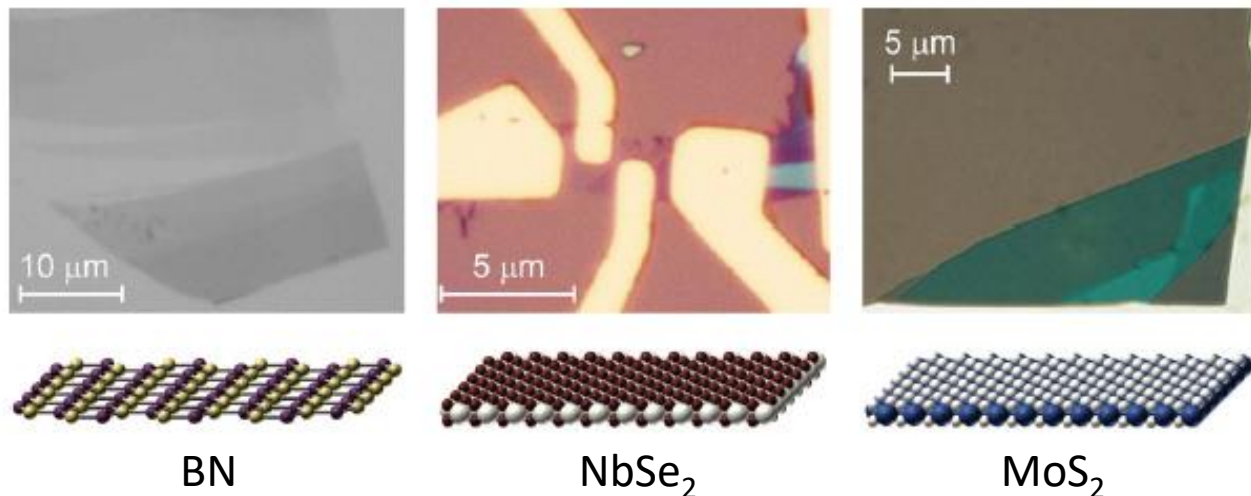
Tunelowy Mikroskop skaningowy (scanning tunneling microscope STM)



<https://home.agh.edu.pl/~kmr/instrukcje/afm.pdf>

Fig. 1. Graphene flake on graphite. (a) Topography of three-layer flake, (b) Height profile showing separation of atomic layers. (bottom) Atomic resolution topography of (c) decoupled graphene layer showing honeycomb structure and (d) graphite.

Inne materiały 2D, heterostruktury



Heterostruktury z monowarstw atomowych:

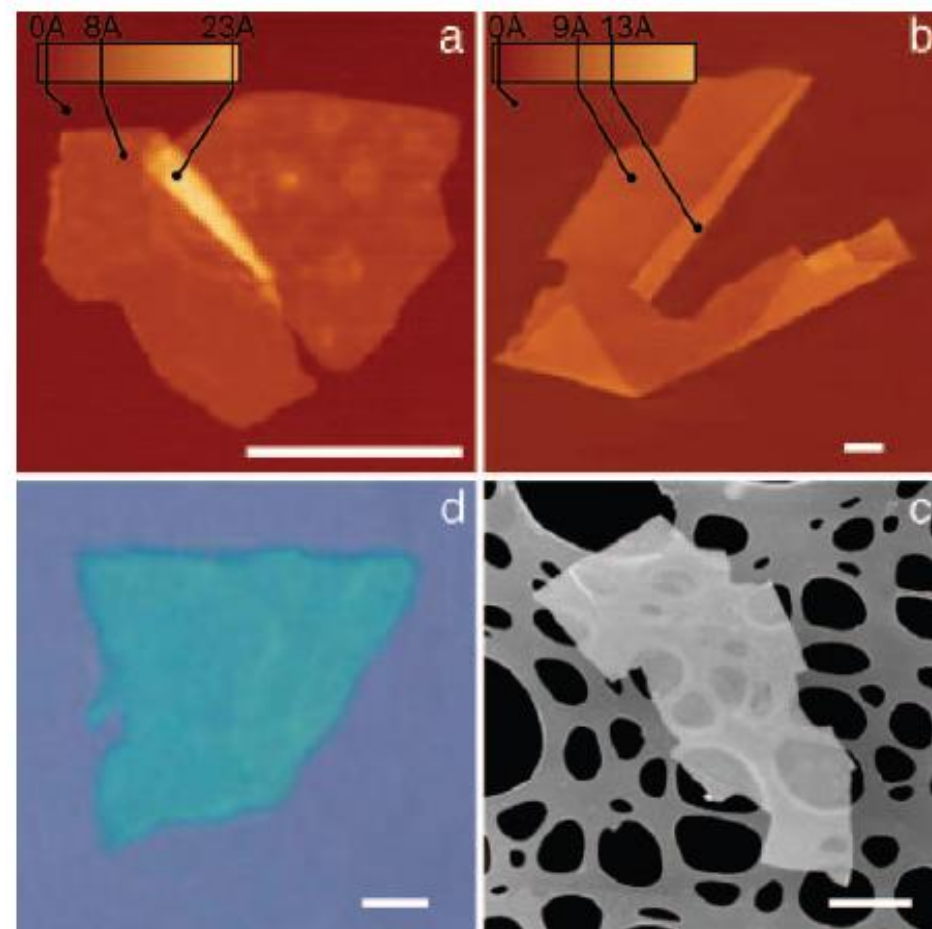
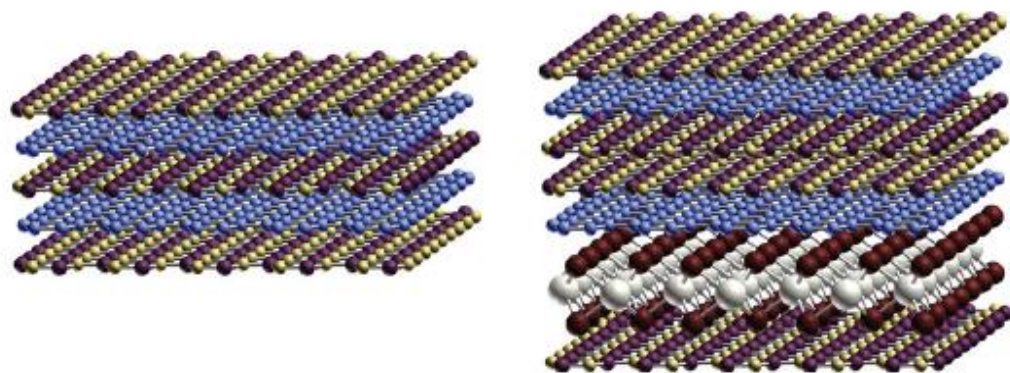
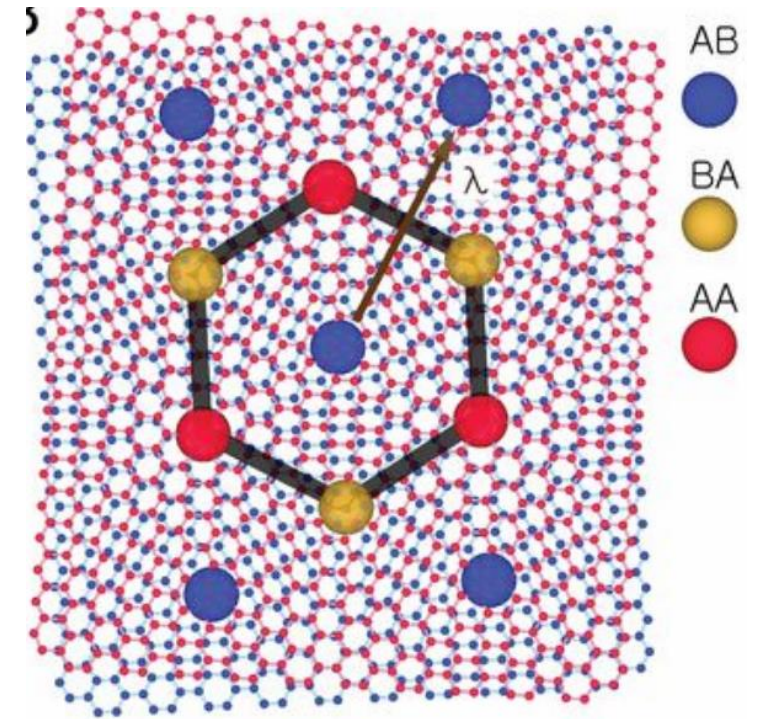
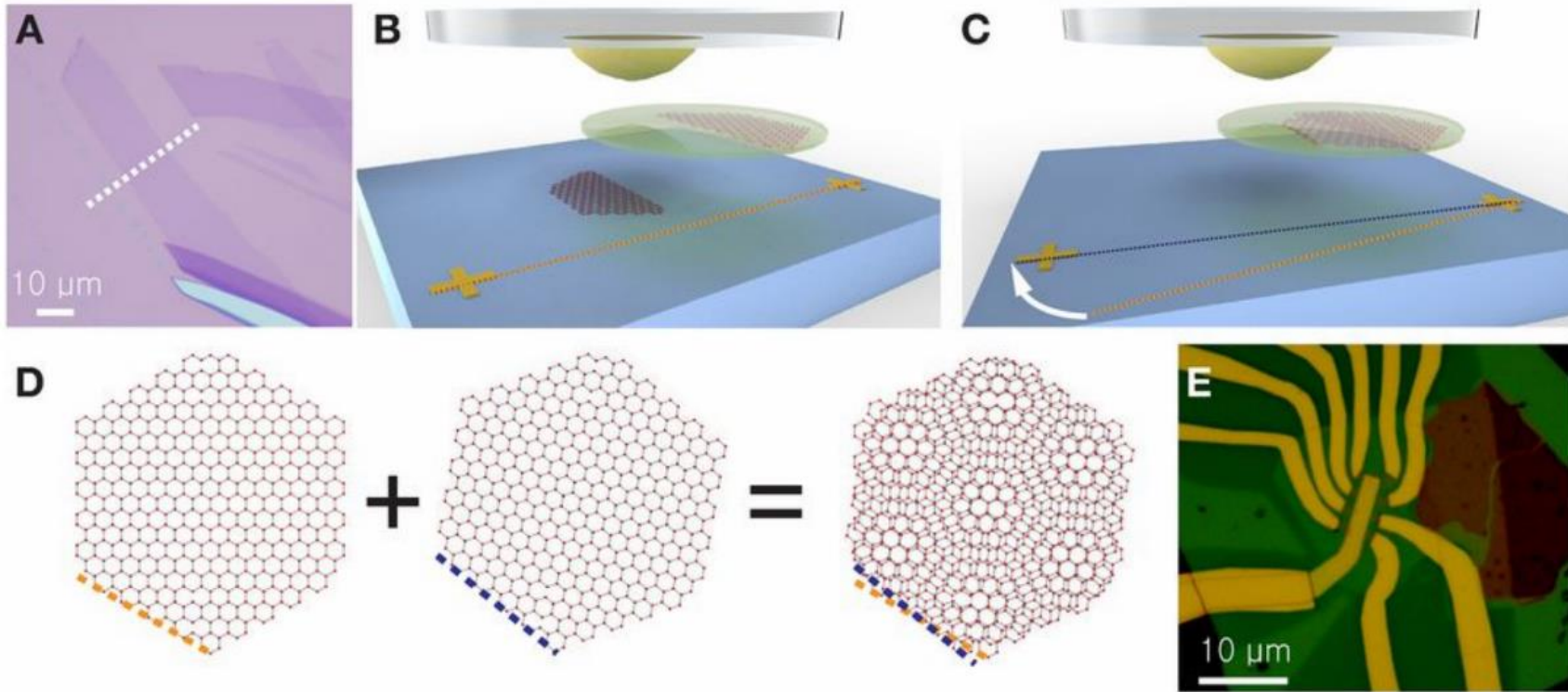


Fig. 1. 2D crystal matter. Single-layer crystallites of NbSe₂ (a), graphite (b), Bi₂Sr₂CaCu₂O_x (c), and MoS₂ (d) visualized by AFM (a and b), by scanning electron microscopy (c), and in an optical microscope (d). (All scale bars: 1 μm.) The 2D crystallites are on top of an oxidized Si wafer (300 nm of thermal SiO₂) (a, b, and d) and on top of a holey carbon film (c). Note that 2D crystallites were often raised by an extra few angstroms above the supporting surface, probably because of a layer of absorbed water. In such cases, the pleated and folded regions seen on many AFM images and having the differential height matching the interlayer distance in the corresponding 3D crystals help to distinguish between double-layer crystals and true single sheets such as those shown here.

Poskręcana dwuwarstwa grafenu
(twisted bilayer graphene)

Supersieci – poskręcane dwuwarstwy (twisted bilayer)



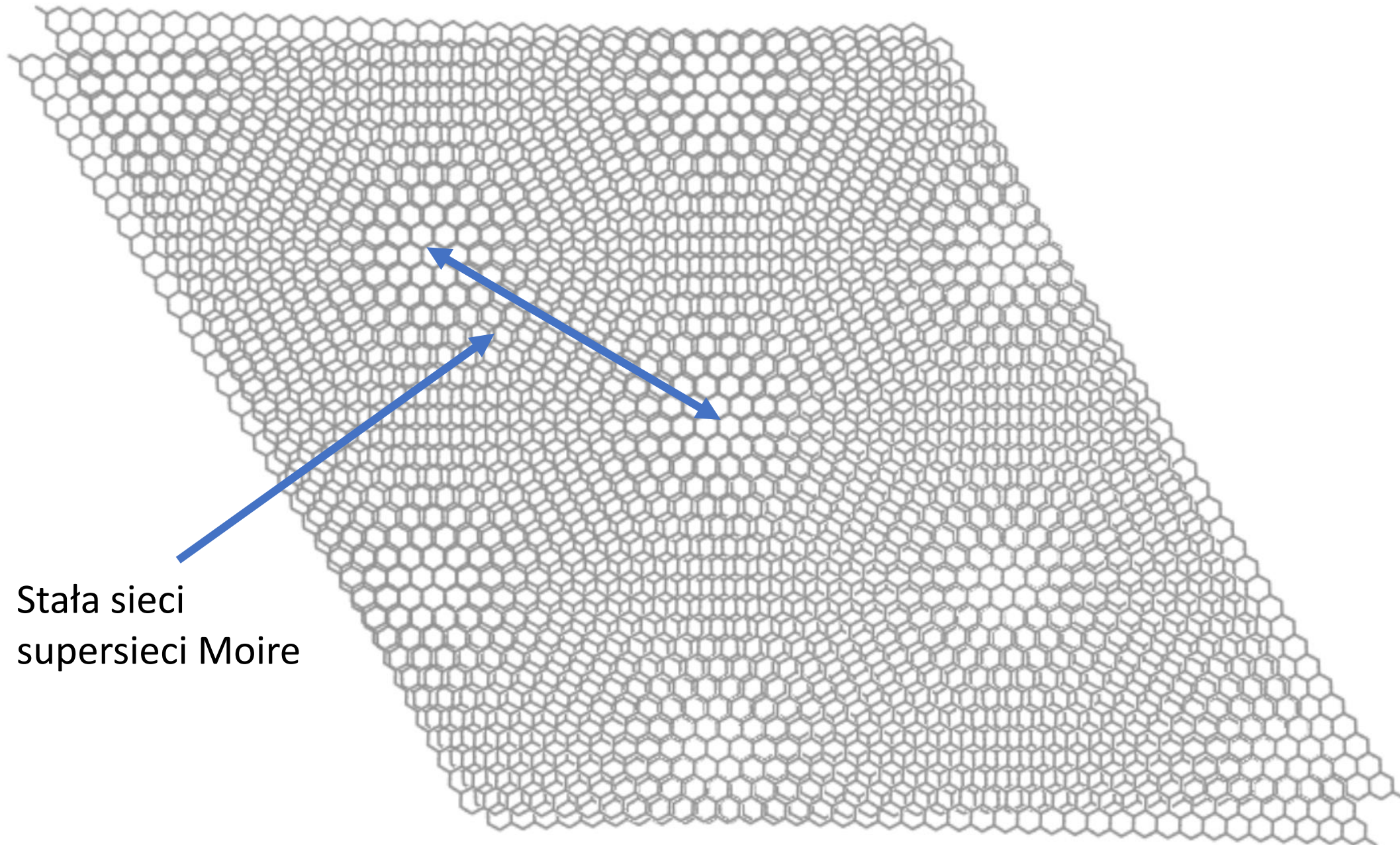
Duża komórka elementarna

Dlaczego supersieci?

- Duża komórka elementarna – silniejszy efekt pola magnetycznego
- Modelowanie układów skorelowanych: **Symulatory kwantowe**

Wzór Moire

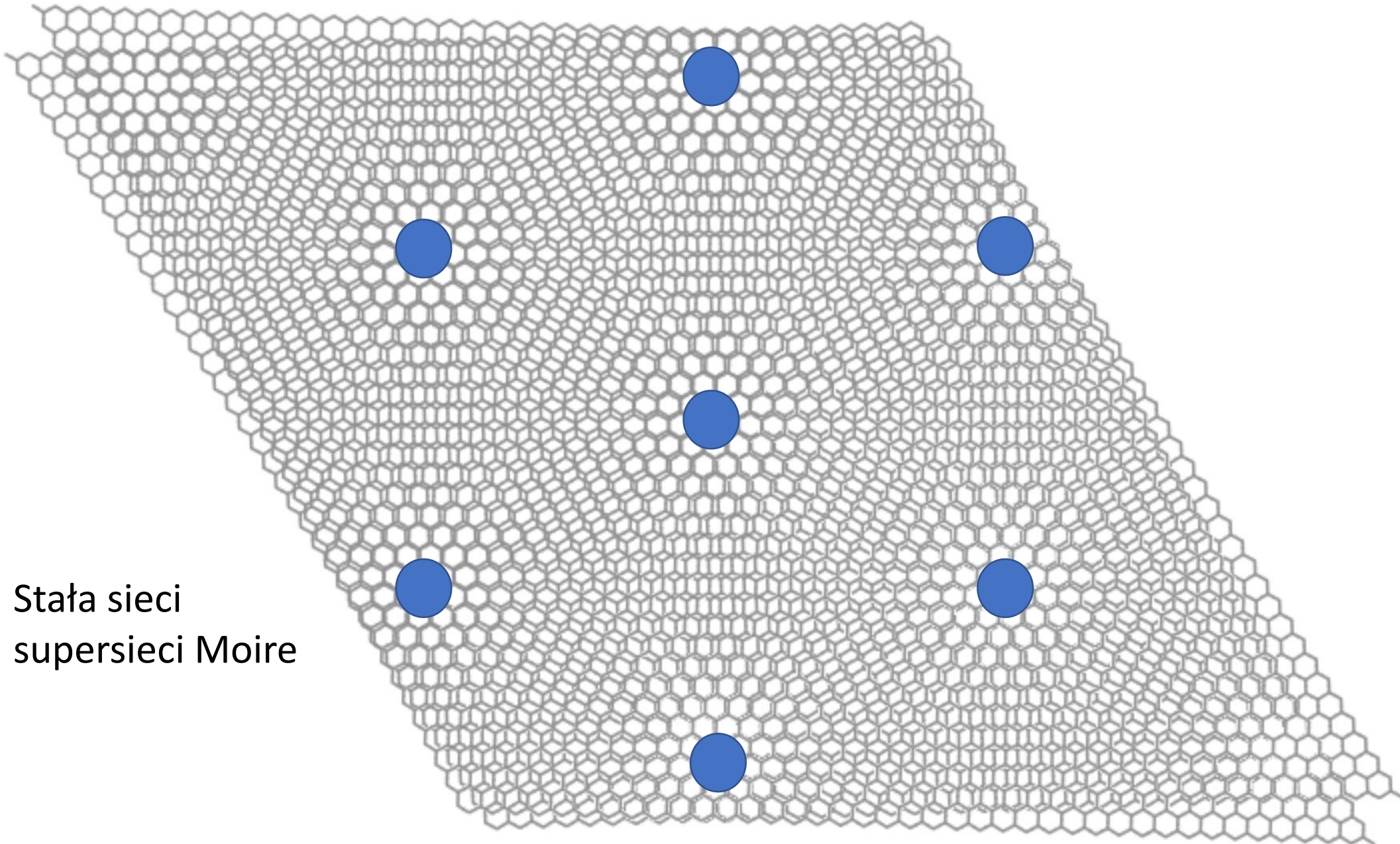
$$\theta = 4^\circ$$



Stała sieci
supersieci Moire

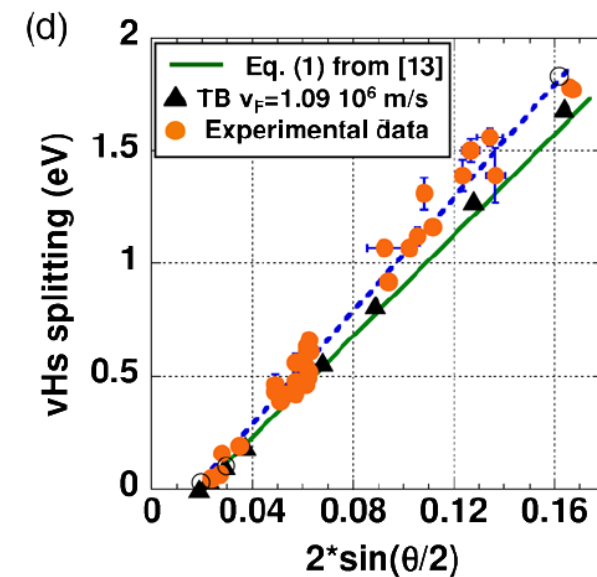
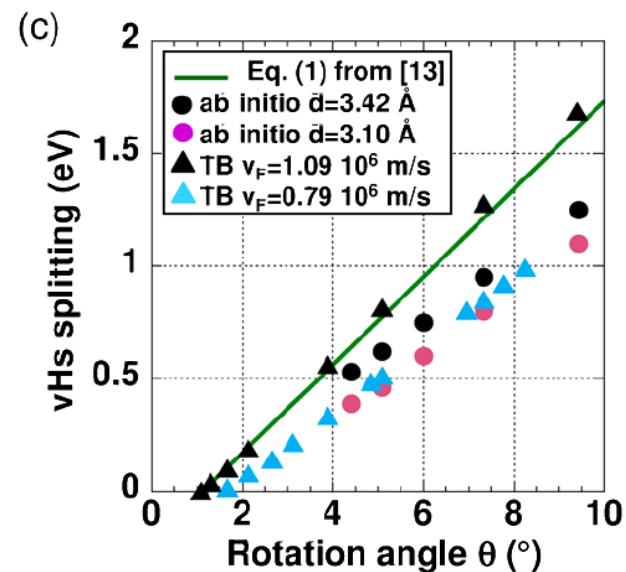
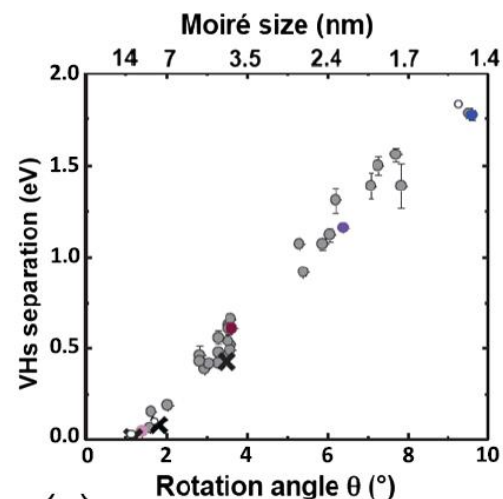
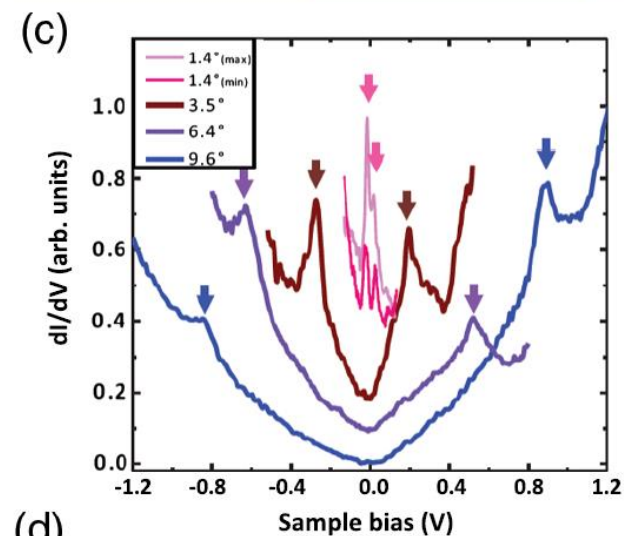
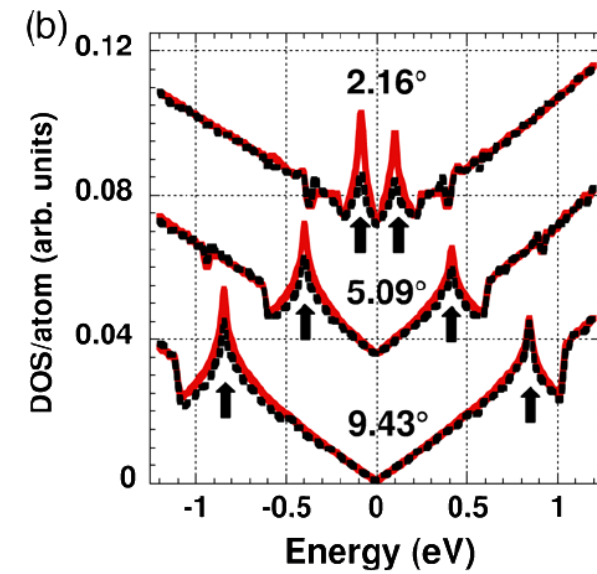
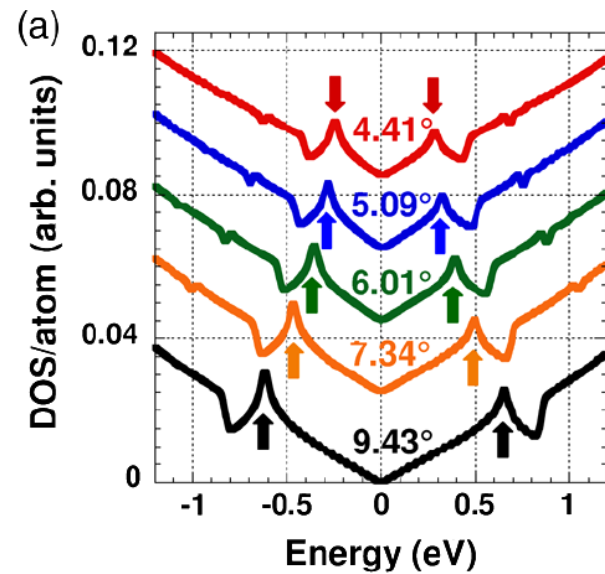
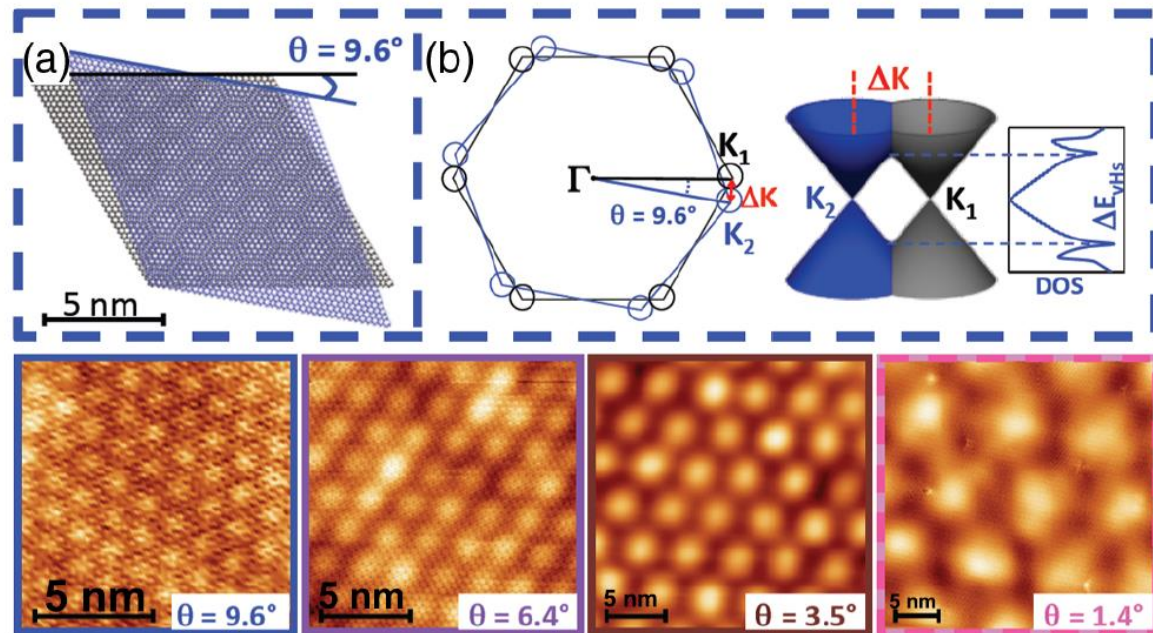
Wzór Moire

$$\theta = 4^\circ$$



Stała sieci
supersieci Moire

Oszacowanie kąta obrotu z gęstości stanów (STM)



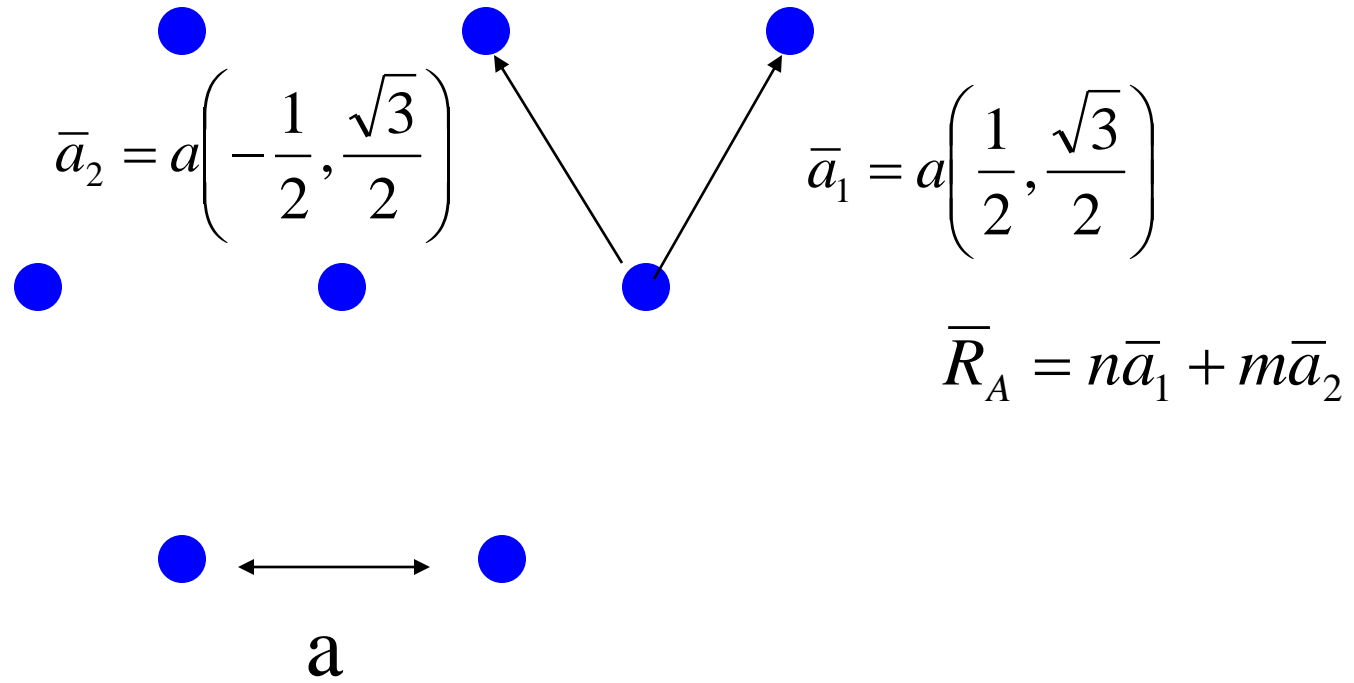
(d)

$$\Delta E_{\text{vHs}} = 2\hbar v_F \Gamma K \sin(\theta/2) - 2t_\theta,$$

Poskręcane dwuwarstwy - modelowanie

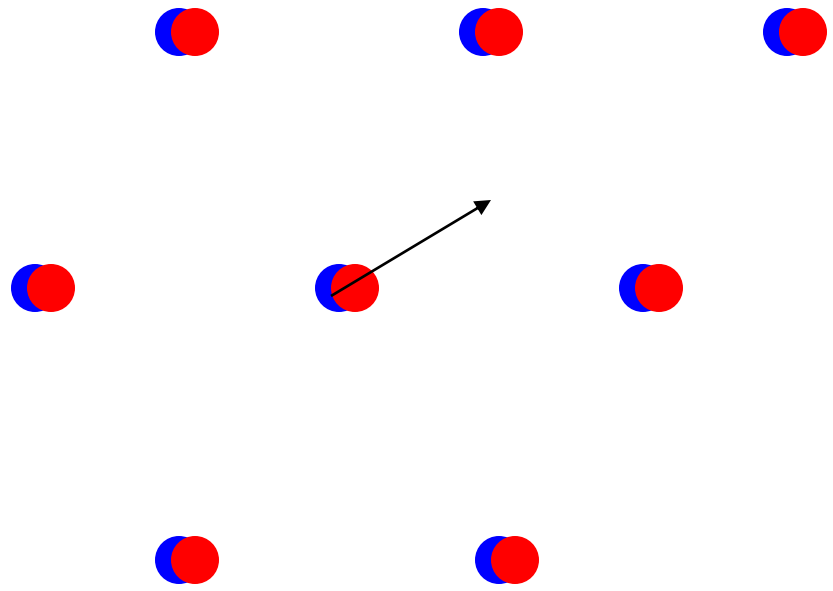
Modelowanie grafenu

Podsieć A



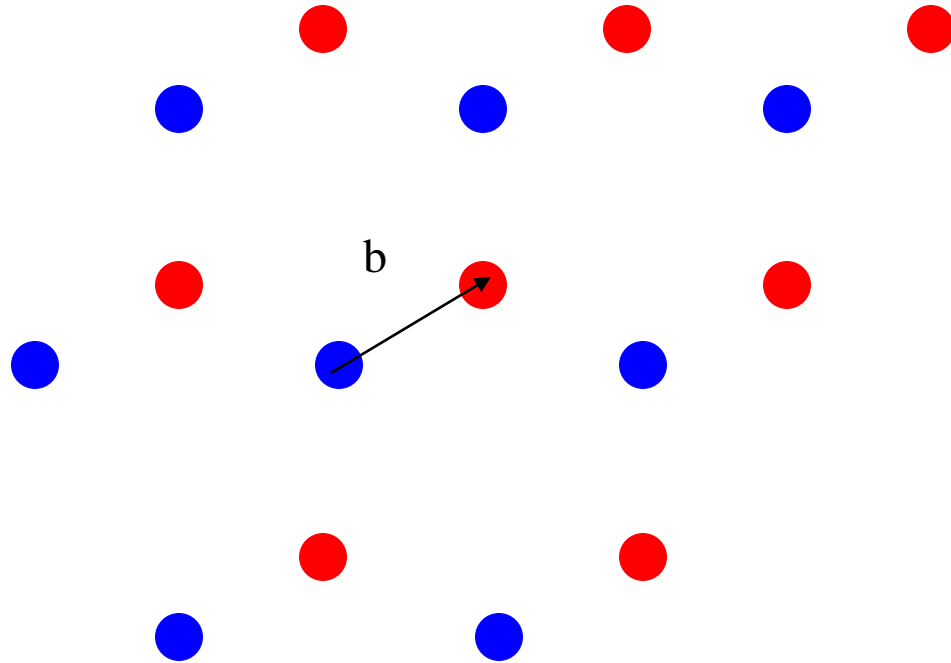
Modelowanie grafenu

Podsieć A, podsieć B



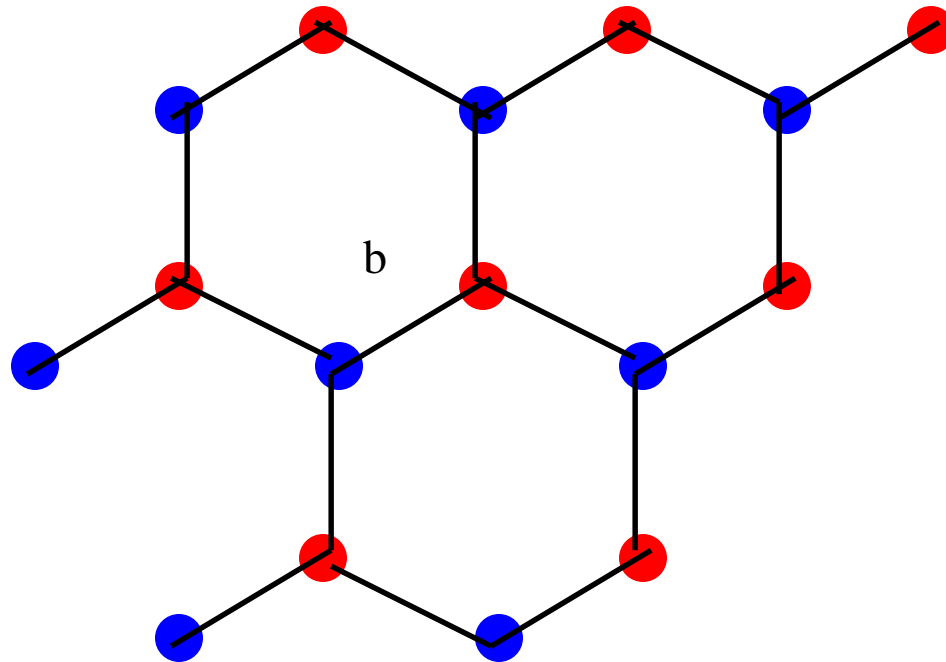
Modelowanie grafenu

Podsieć A, podsieć B



Modelowanie grafenu

Podsieć A, podsieć B

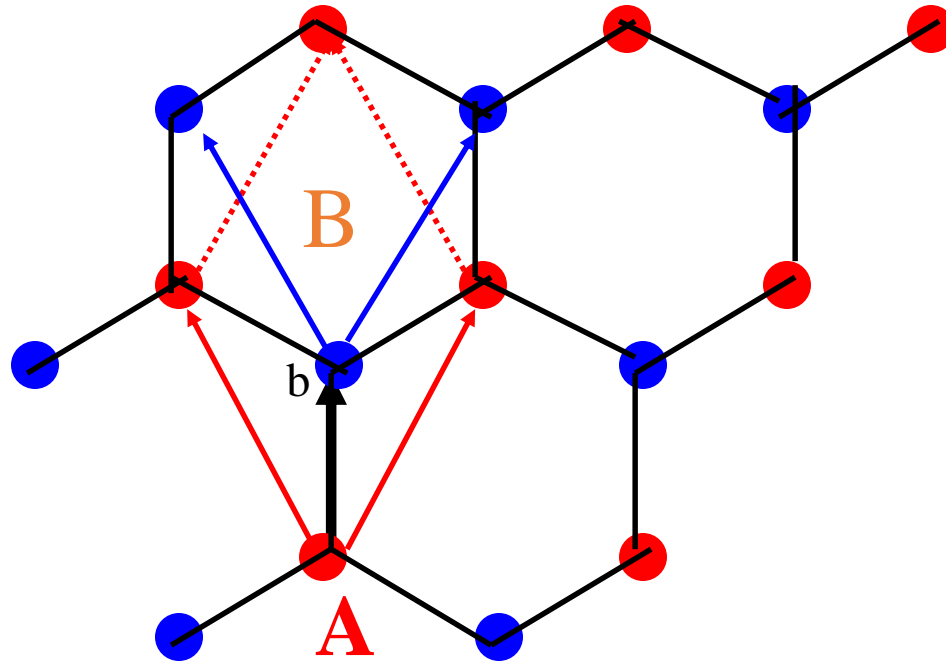


Widać pierścienie benzenu

Modelowanie grafenu

Podsieć A, podsieć B

Komórka elementarna składa się z dwóch atomów, A i B



Podsieć A

$$\bar{R}_A = n\bar{a}_1 + m\bar{a}_2$$

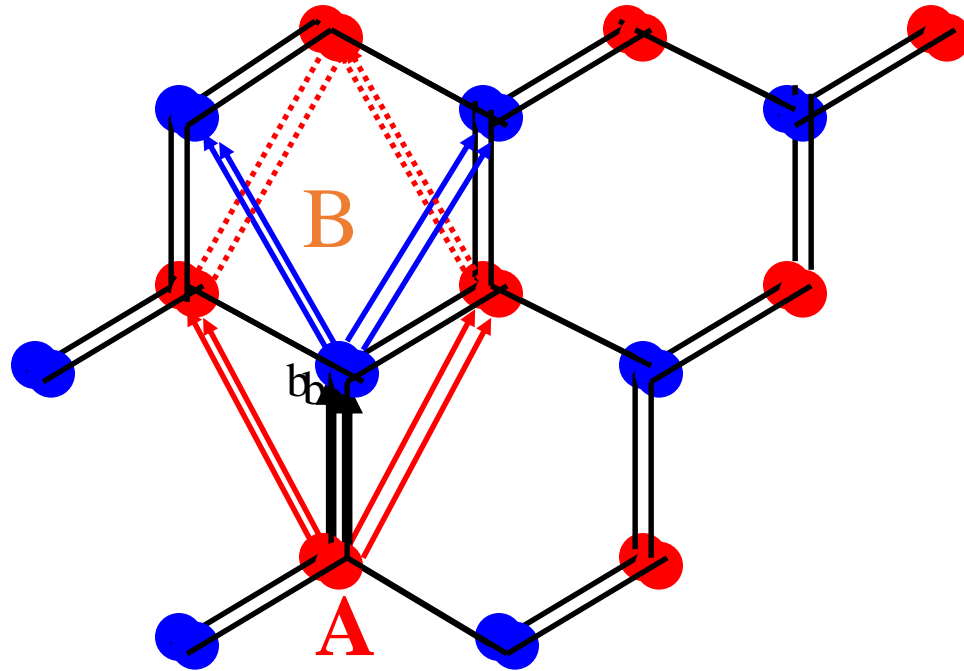
Podsieć B

$$\bar{R}_B + \bar{b} = n\bar{a}_1 + m\bar{a}_2 + \bar{b}$$

Modelowanie poskręcanej dwuwarstwy

Podsieć A, podsieć B

Komórka elementarna składa się z dwóch atomów, A i B



Podsieć A

$$\bar{R}_A = n\bar{a}_1 + m\bar{a}_2$$

Podsieć B

$$\bar{R}_B + \bar{b} = n\bar{a}_1 + m\bar{a}_2 + \bar{b}$$

Modelowanie poskręcanej dwuwarstwy

Podsieć A, podsieć B

Obracamy jedną z sieci macierzą obrotu

W 2 wymiarach [\[edytuj | edytuj kod \]](#)

W dwóch wymiarach każda macierz obrotu ma postać

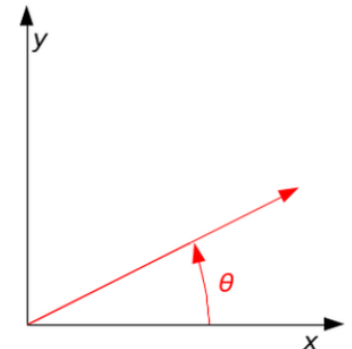
$$R(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Macierz ta obraca wektory kolumnowe następująco

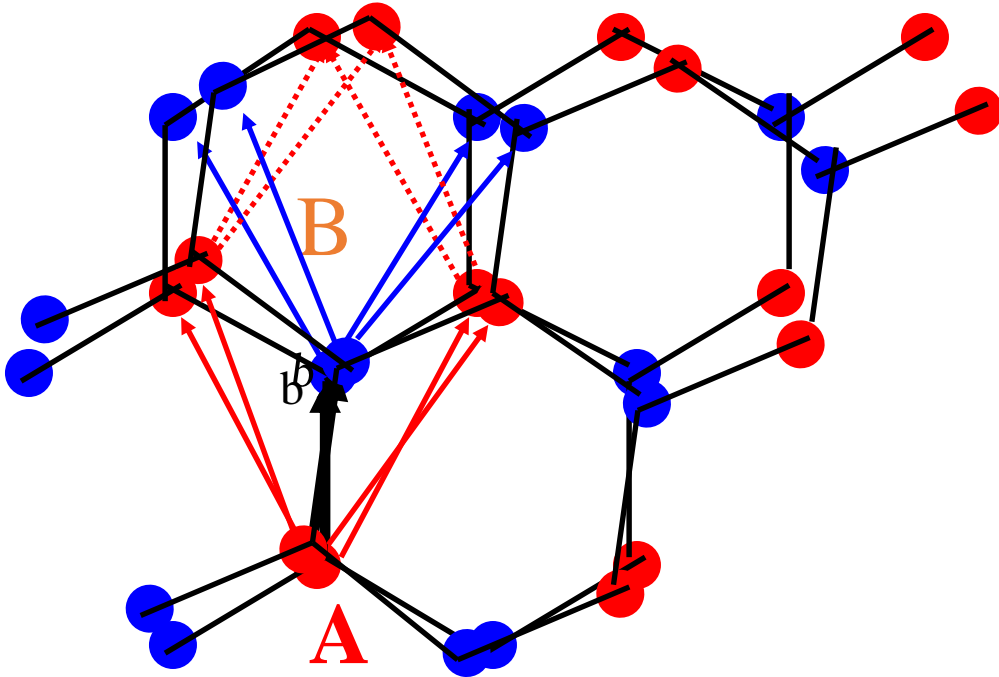
$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}.$$

Tak więc współrzędne (x', y') punktu (x, y) po obrocie mają wartości

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \theta - y \sin \theta, \\ y' &= x \sin \theta + y \cos \theta. \end{aligned}$$

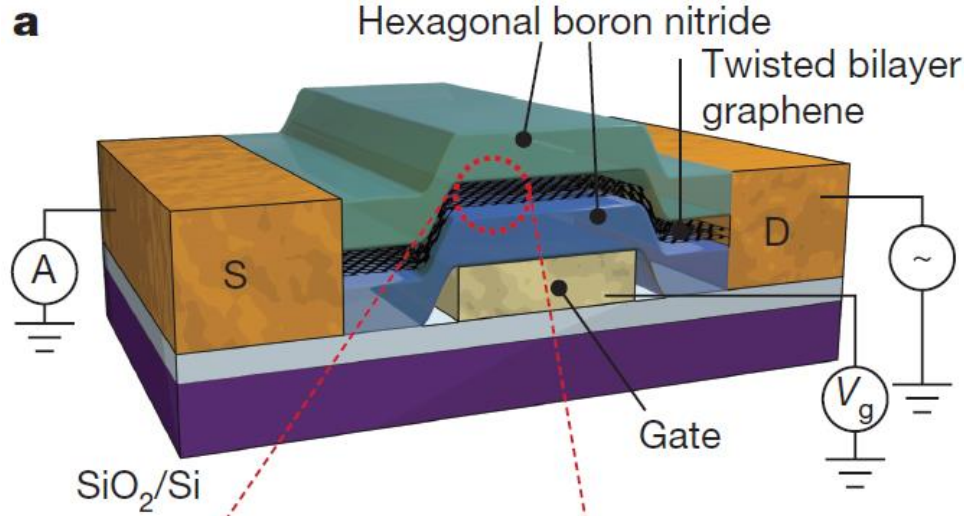
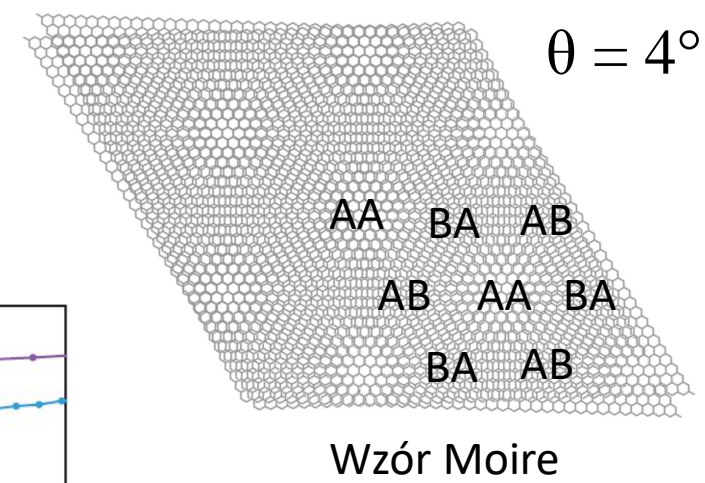


Zadanie 1. Wygeneruj położenia węzłów sieci poskręcanych dwóch warstw grafenu i narysuj je dla różnych kątów aby zobaczyć sieć Moire

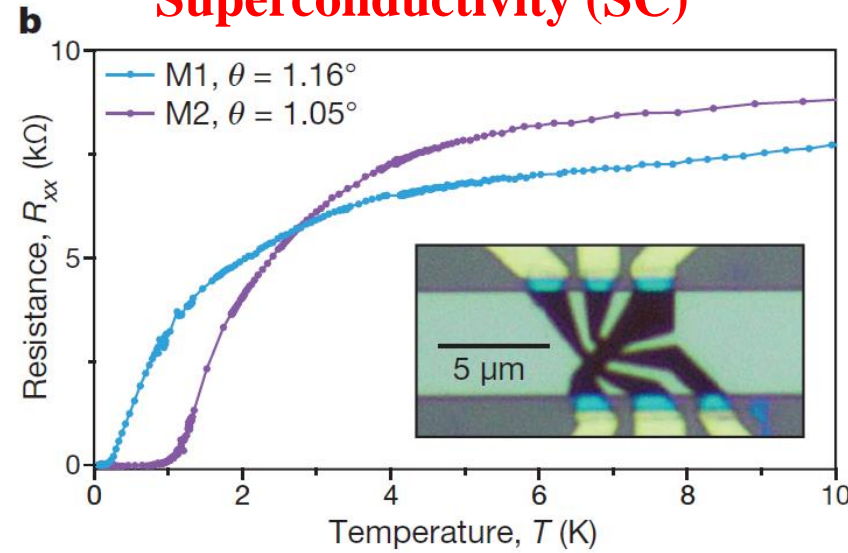


Symulatory kwantowe

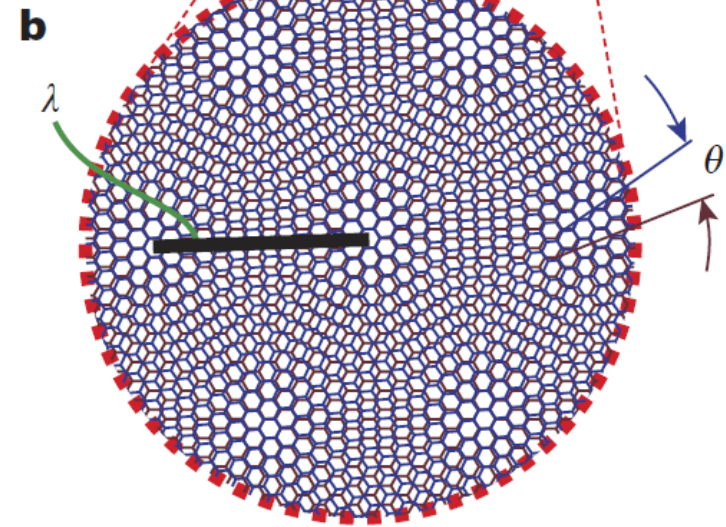
Poskręcana dwuwarstwa grafenu (twisted bilayer graphene)



Superconductivity (SC)

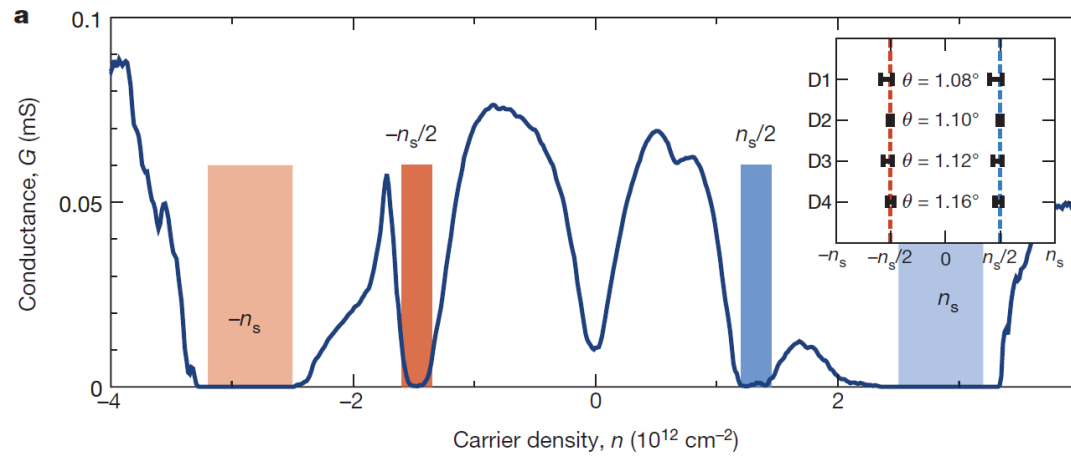


Cao et al. Nature 2018



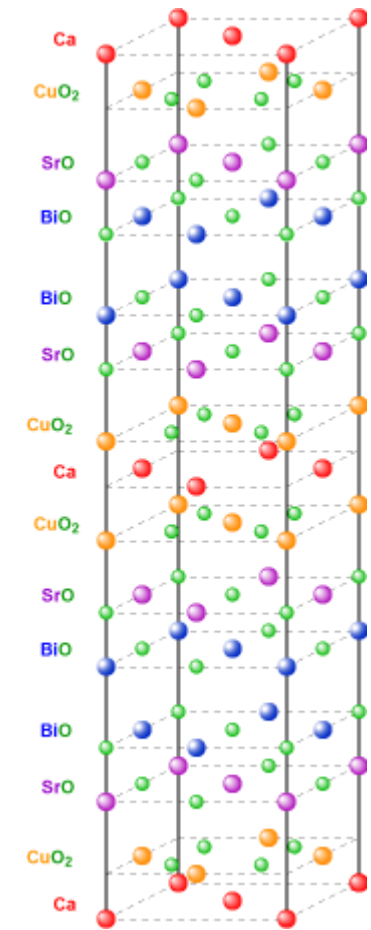
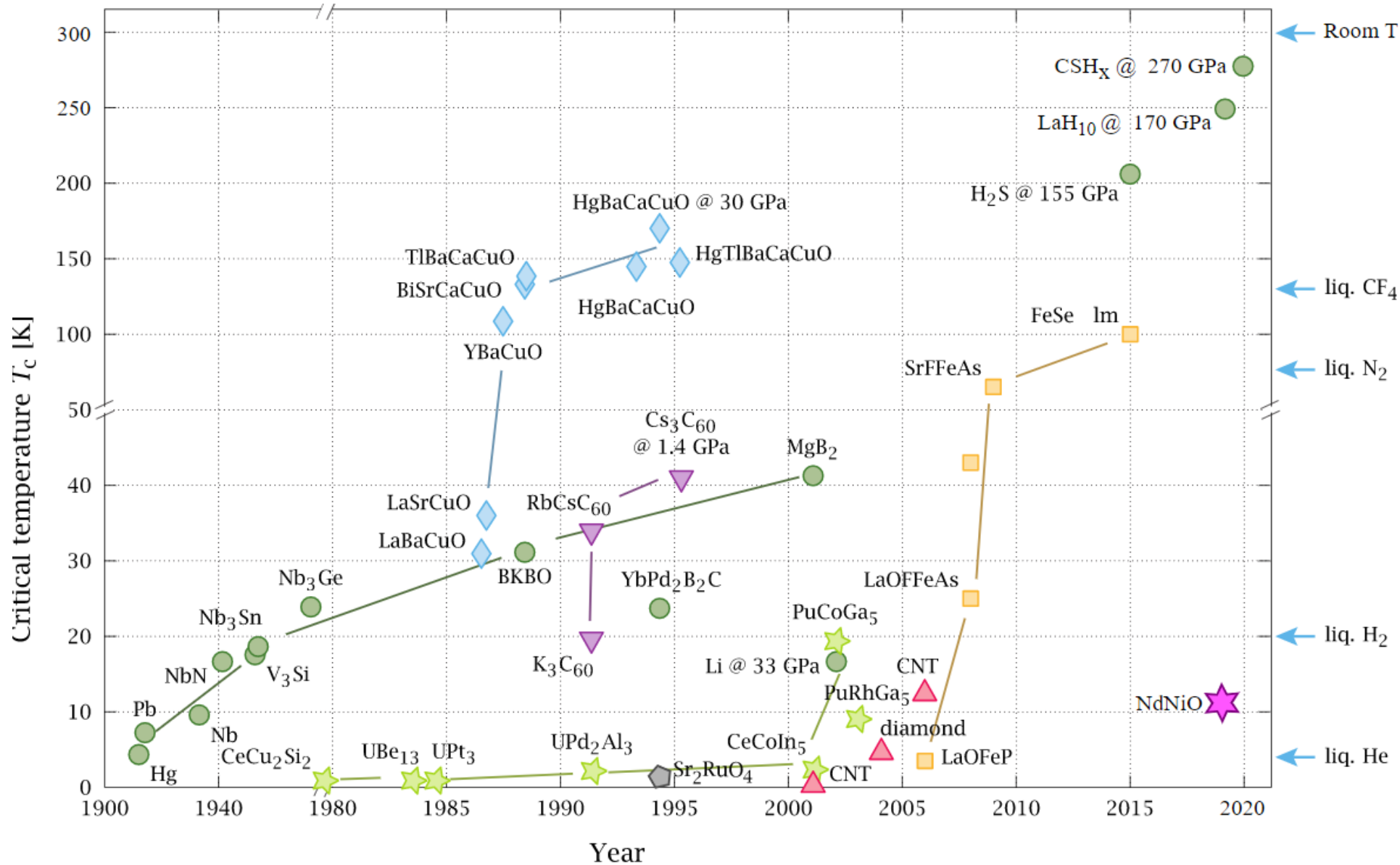
Cao et al. Nature 2018

Correlated states (CS)

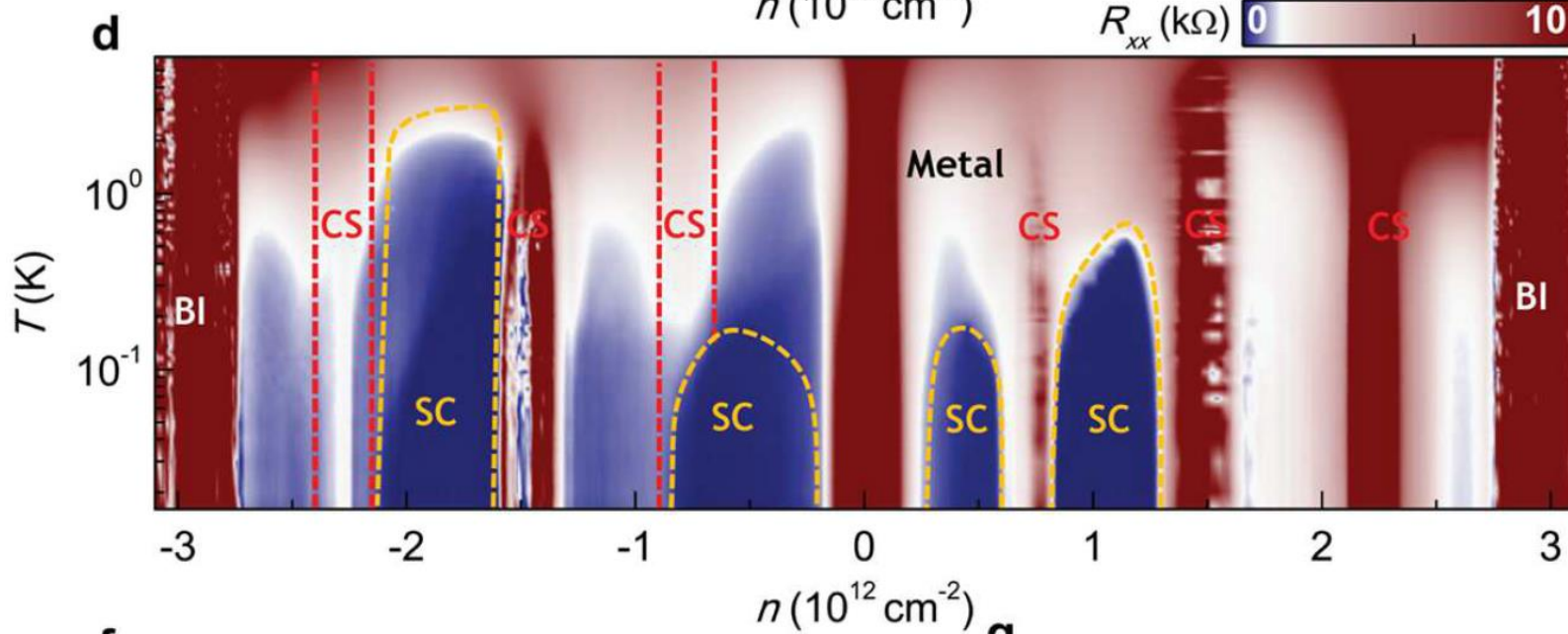
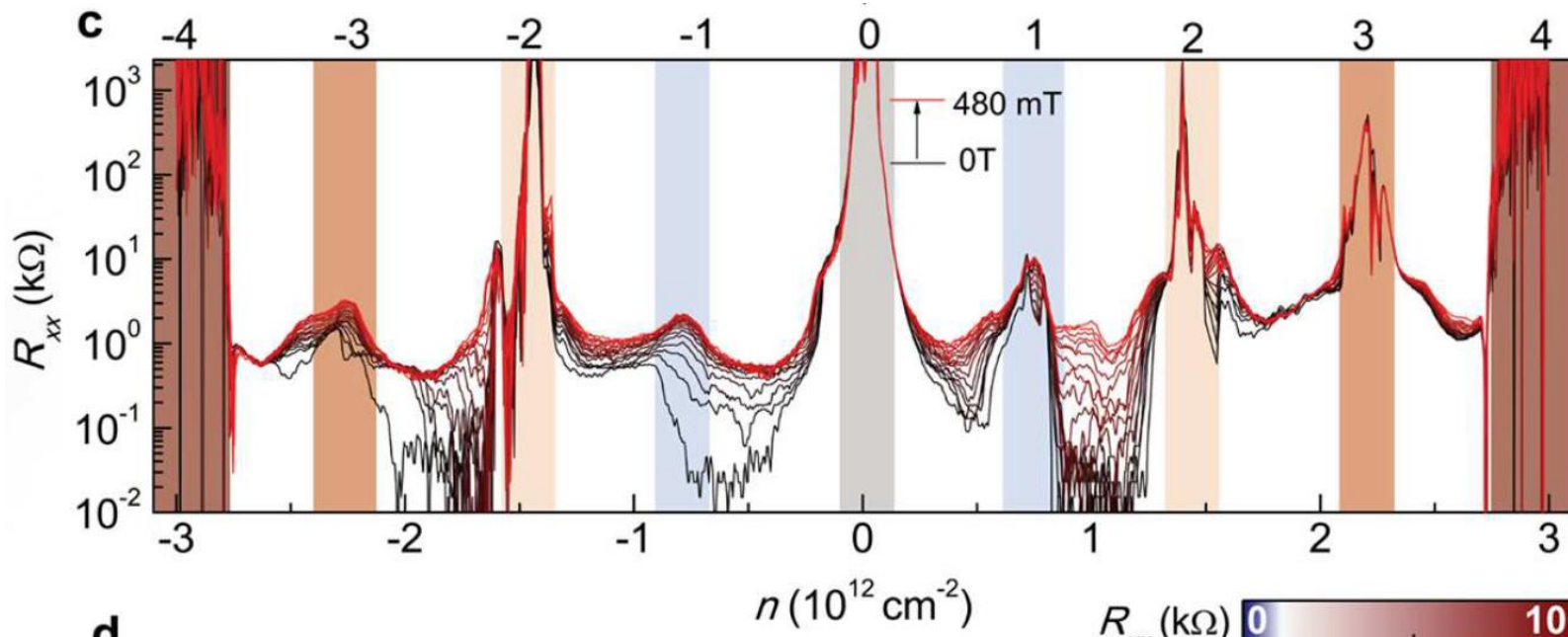
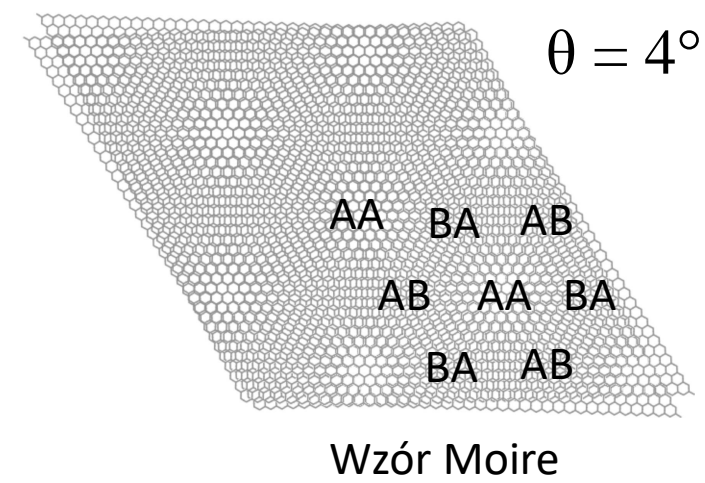


HTSC – high-temperature superconductivity

Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe



Poskręcane dwuwarstwa grafenu (twisted bilayer graphene)

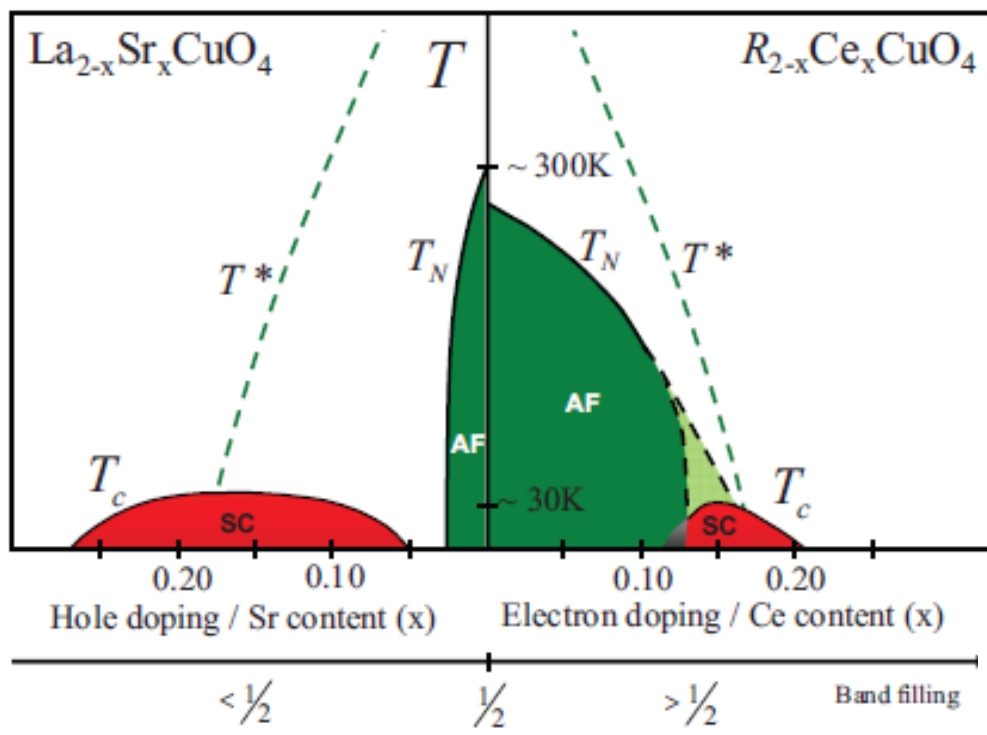
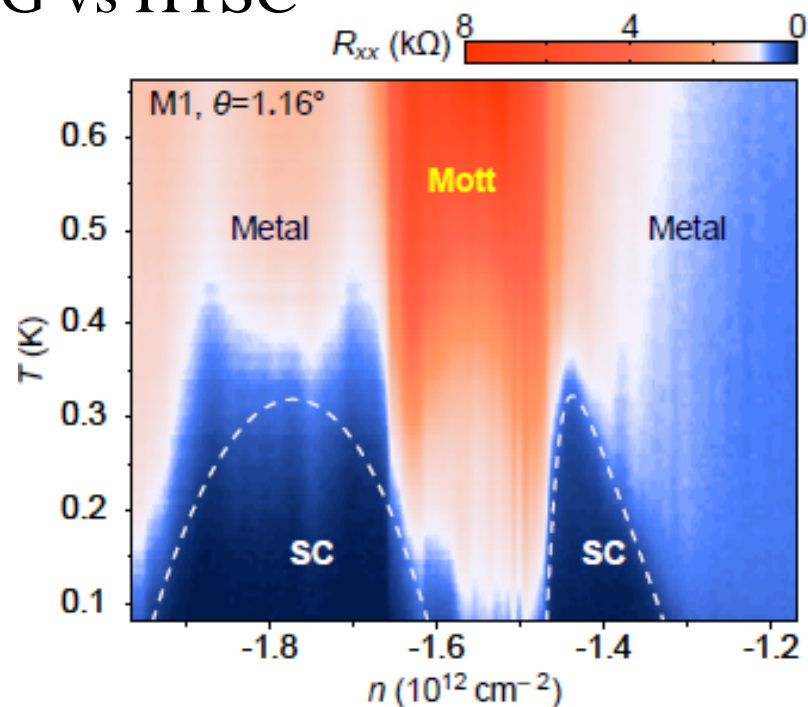


Lepsze próbki

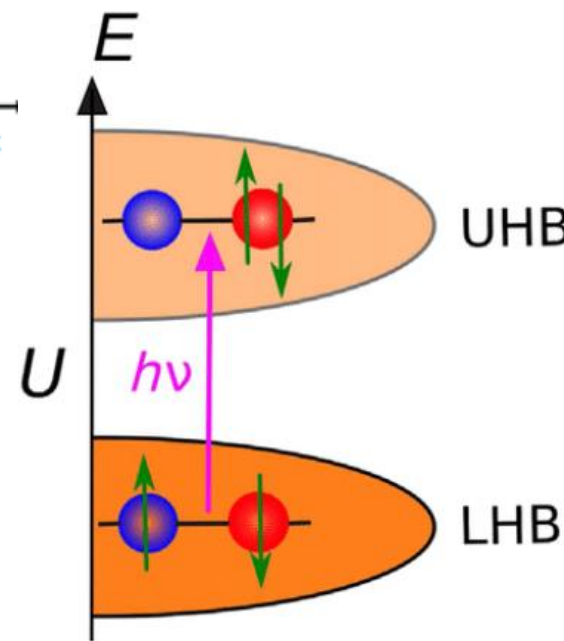
- Correlated states (CS)
- Superconductivity (SC)

TBG vs HTSC

HTSC – high-temperature superconductivity
 TBG – twisted bilayer graphene



Izolator Motta



Correlated insulator
 Cao et al.
 Nature 2018

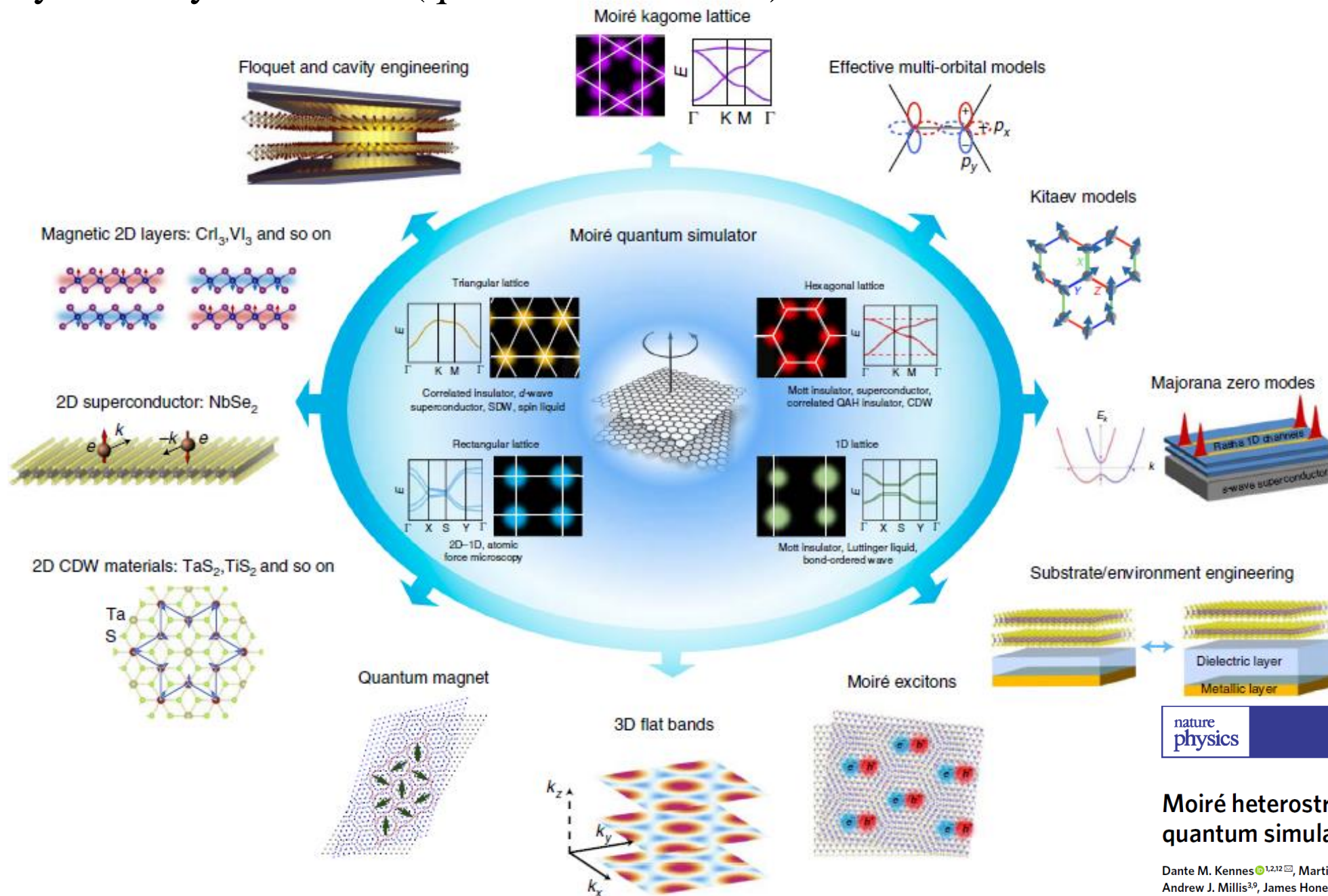


Correlated insulator
 N.P. Armitage et al.
 Rev. Mod. Phys. 2010

Magic Angle
 A New Twist on
 by Pablo Jarillo-Herrero
 and Senthil Todadri

Symulatory kwantowe (quantum simulators)

2021

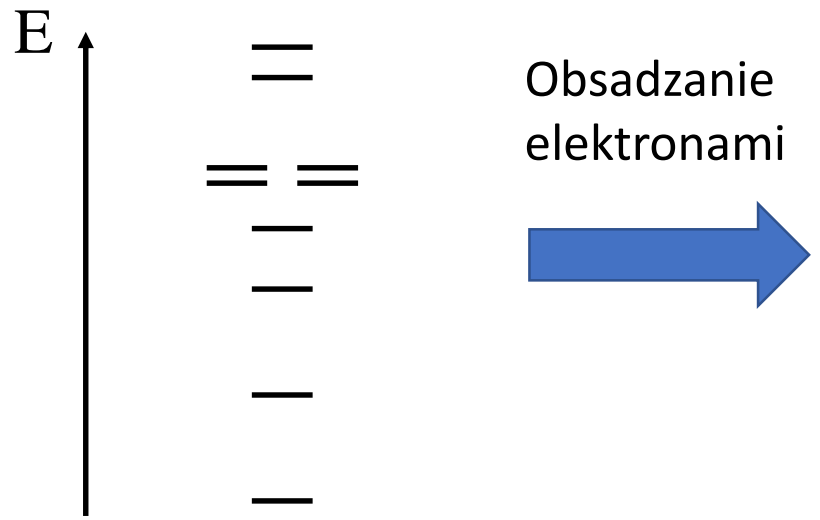


Moiré heterostructures as a condensed-matter quantum simulator

Dante M. Kennes^{1,2,12}, Martin Claassen^{3,4,12}, Lede Xian^{2,5,12}, Antoine Georges^{3,6,7,8}, Andrew J. Millis^{3,9}, James Hone¹⁰, Cory R. Dean⁹, D. N. Basov⁹, Abhay N. Pasupathy⁹ and Angel Rubio^{2,3,11}

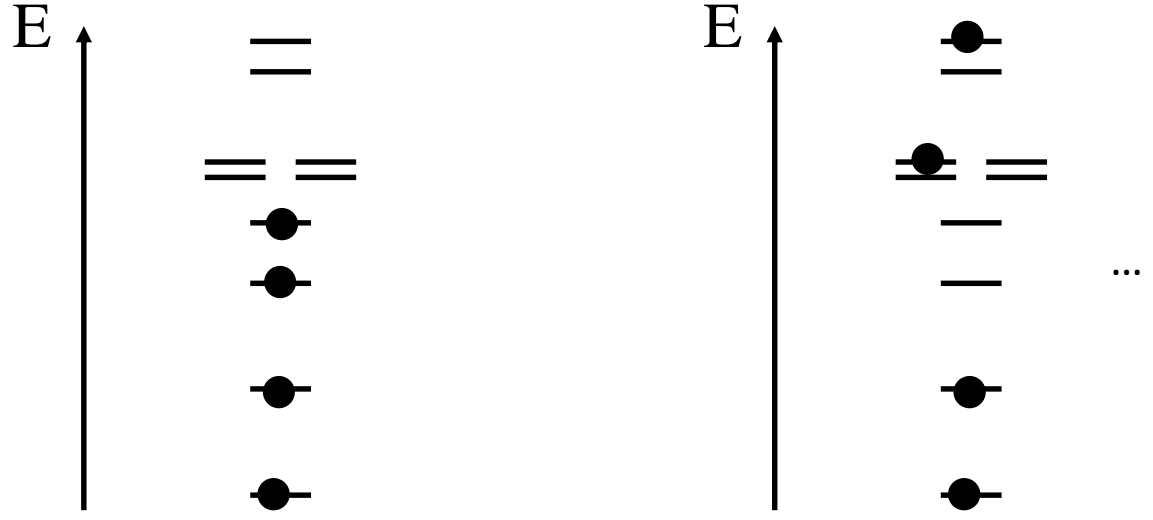
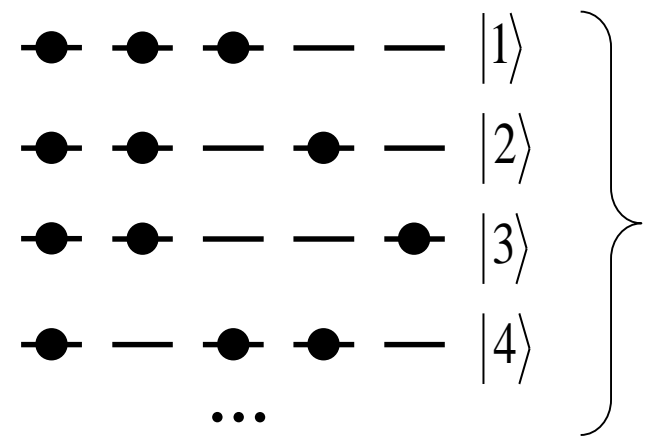
Skala złożoności obliczeniowej problemów kwantowo-mechanicznych

Stany energetyczne



Obsadzanie elektronami

Różne możliwe konfiguracje rozmieszczenia cząstek po stanach

Mechanika kwantowa - układ złożone (układy wielu cząstek)

Metoda dokładnej diagonalizacji (exact diagonalization)

Jaki jest rozmiar problemu?

Rozmieszczamy N_{up} i N_{dn} cząstek na N_{st} stanach.

Całkowita liczba konfiguracji:

$$\binom{N_{st}}{N_{dn}} \cdot \binom{N_{st}}{N_{up}} = \frac{N_{st}!}{(N_{st} - N_{dn})! N_{dn}!} \cdot \frac{N_{st}!}{(N_{st} - N_{up})! N_{up}!} = N_{CONF}^{dn} * N_{CONF}^{up} = N$$

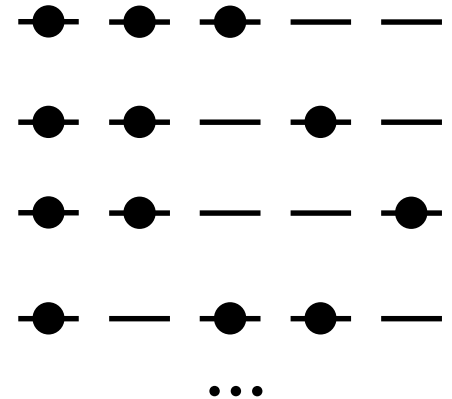
Założmy, że mamy $N_{dn}=10$ i $N_{up}=10$, rozmieszczonych na $N_{st}=20$ stanach:

$$N_{CONF}^{dn} = \binom{N_{st} = 20}{N_{dn} = 10} = \frac{20!}{(20-10)!10!} = 184756$$

Całkowita liczba konfiguracji:

$$N = N_{CONF}^{dn} * N_{CONF}^{up} = 34134779536 \approx 3.4 * 10^{10}$$

Konfiguracje:



Trzeba znaleźć stan podstawowy macierzy Hamiltonianu o rozmiarach $10^{10} \times 10^{10}$

Musimy wyznaczyć 10^{10} współczynników

$$\psi_{GS} = \sum_s A_s^{GS} |s\rangle$$

Porównanie metod przybliżonych

	Size	Układy silnie oddziałujące	Stany wzbudzone
Metoda średniego pola (Hartree-Fock) (model ciasnego wiązania)	> 10000 atomów	✗	✗
Teoria funkcjonału gęstości	~ 10000 atomów	✗	✗
Dokładna diagonalizacja	~ 20 cząstek	✓	✓
Kwantowe Monte-Carlo	~ 100 cząstek	✓	✗
Grupa renormalizacji macierzy gęstości	> 100 cząstek	✓	✗ *
Sieci tensorowe	> 100 cząstek	✓	✗ *

* Głównie dla układów 1D

Modelowanie gęstości elektronowych na supersieciach Moire

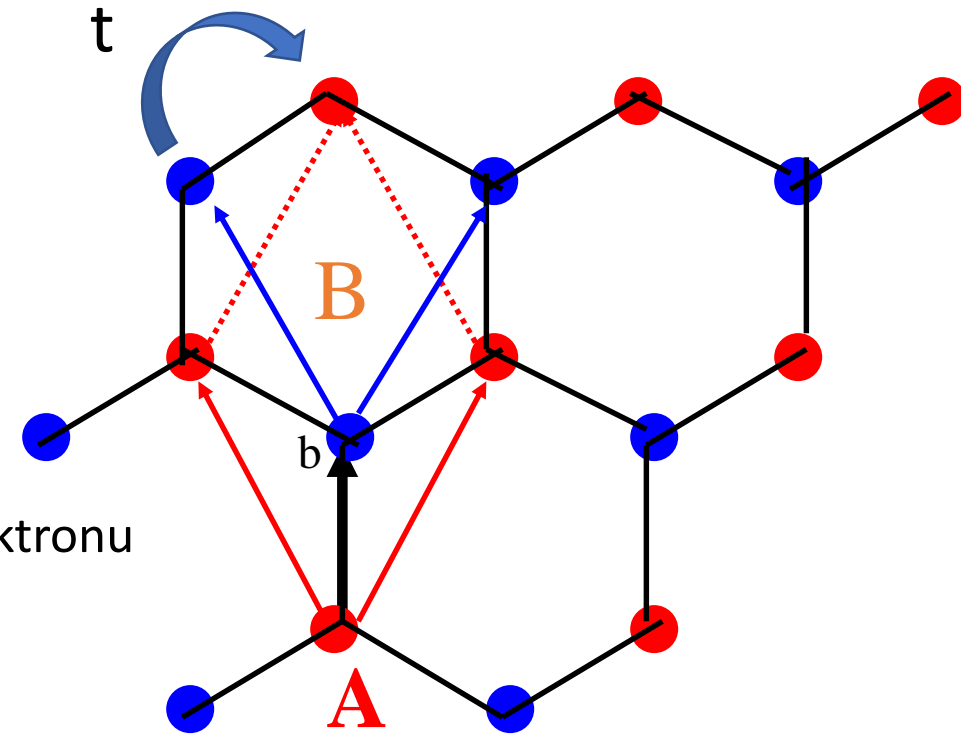
Model ciasnego wiązania

Elektron na danym węźle może zyskać energię przeskakując na sąsiedni węzeł. Parametryzujemy to wielkością t , którą wyraża się w jednostkach energii: elektronowoltach.

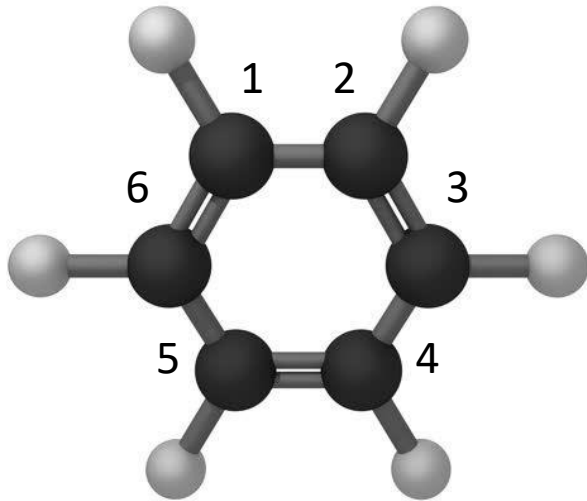
Dla grafenu

$$t = -3.0 \text{ eV} \quad \text{Przeskok między najbliższymi sąsiadami.}$$

Rozwiązujemy problem kwantowo-mechaniczny dla pojedynczego elektronu skaczącego po węzłach sieci poskręcanej dwuwarstwy grafenowej



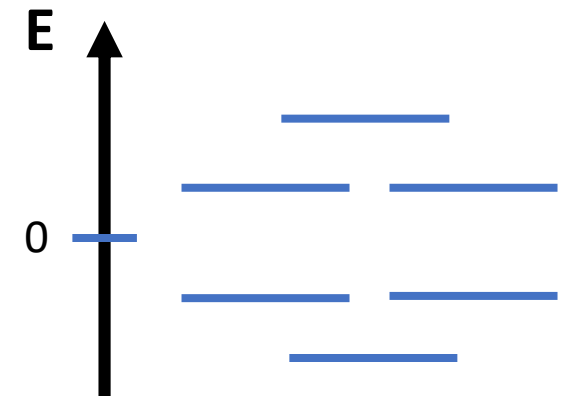
Prosty przykład modelu ciasnego wiązania: benzen



$$H = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & 0 & t \\ t & 0 & t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & t \\ t & 0 & 0 & 0 & t & 0 \end{pmatrix}$$



Widmo energetyczne:



BENZENE

Model ciasnego wiązania

Dla grafenu

$t = -3.0 \text{ eV}$ Przeskok między najbliższymi sąsiadami.

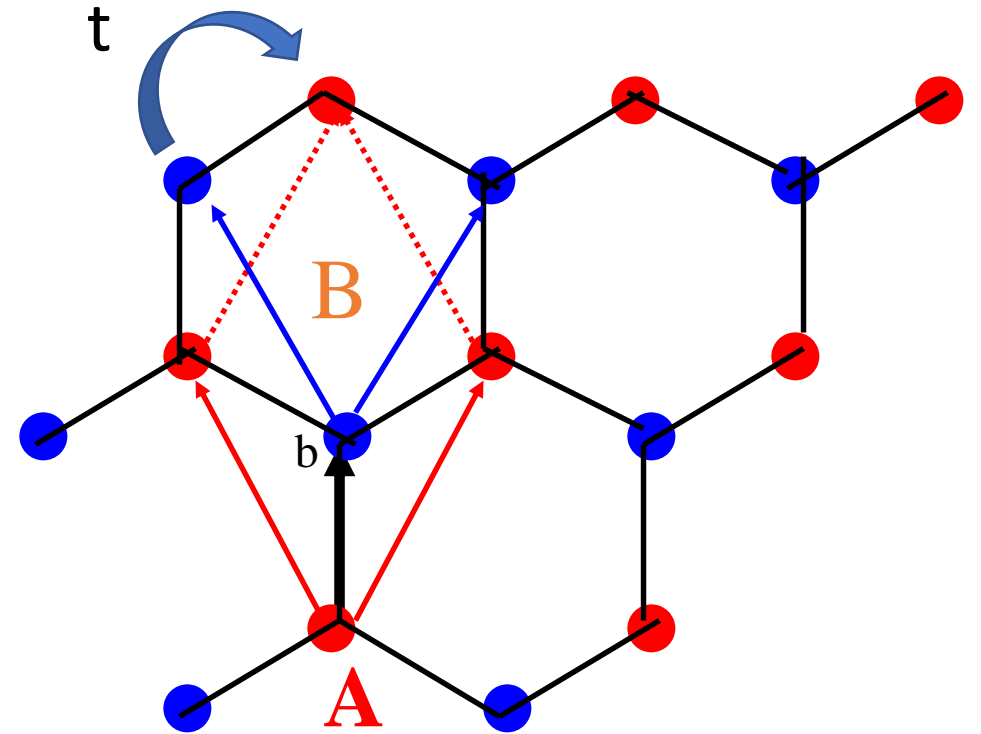
Pomiędzy warstwami poskręcanymi warstw

$$t_{\perp} = -0.4$$

Dla poskręcanych warstw

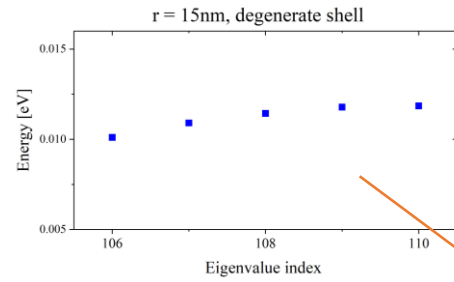
$$t_{ij} = t e^{-(d_{ij}-a)}$$

Potrzebujemy macierz odległości między węzłami sieci: d_{ij}

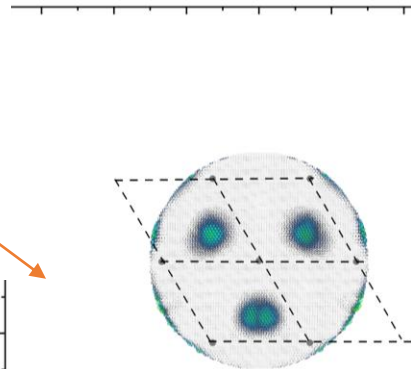


Zadanie 2. Wygeneruj macierz Hamiltonianu ciasnego wiązania dla poskręcanych warstw grafenowych. Znajdź stany energetyczne zlokalizowane na węzłach sieci Moire.

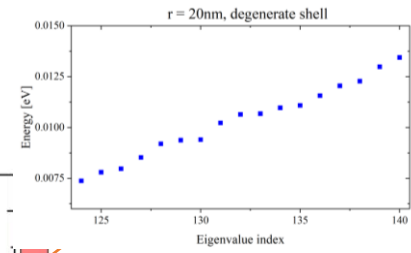
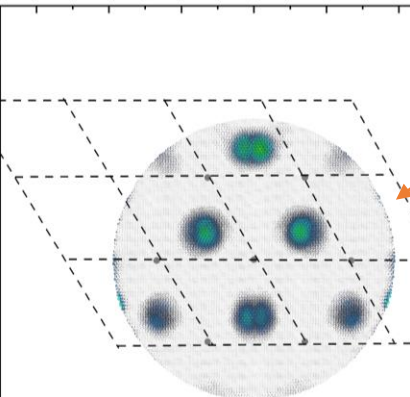
Gęstości elektronowe



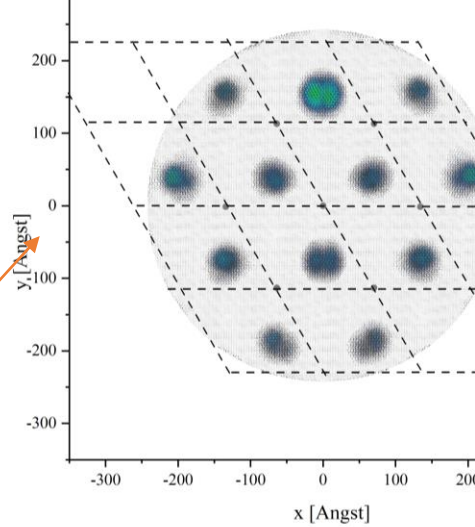
$|\psi|^2$ sum over 106-110 $r = 15\text{nm}$



$|\psi|^2$ sum over 124-140 $r = 20\text{nm}$



$|\psi|^2$ sum over 190-230 $r = 25\text{nm}$



$|\psi|^2$ sum over selected states $r = 30\text{nm}$

