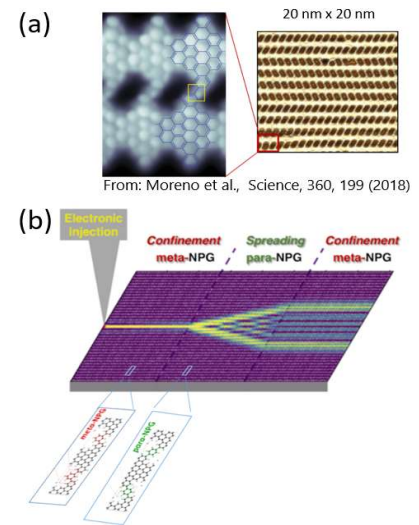


Center for Nanostructured Graphene - Highlights in 2019

Nano-porøs Grafen: Kovalent kulstofkredsløb til kvantetransport

I et 2018 science-papir (fig. 1a) blev "bottom-up" fabrikation og elektronisk funktion af såkaldt "Nano-porøs Grafen" (NPG) demonstreret for første gang. NPG kan forstås som parallelle grafen nanobånd ("ribbons") forbundet med molekulære broer. I princippet er det muligt at ændre de molekulære byggesten og dermed variere den elektroniske struktur og funktionalitet af de to-dimensionelle kovalente netværk. Efter dette arbejde har vi anvendt tætthed funktional teori beregninger for at undersøge, hvordan de elektroniske egenskaber af lignende NPG's kan ændres ved at variere de molekulære broer. Specielt har vi har konstateret, at selv en mindre strukturel ændring af broen kan ændre dens elektroniske "gennemsigtighed", og derved koblingen imellem de parallelle ribbons. Efterfølgende har vi anvendt vores hjemmebyggede multiskala transportmetode til at studere elektronstrømmen på 100 nm længdeskala. Som et hovedresultat har vi vist, hvordan NPG'er bestående af sektioner af mindre (meta) eller mere (para) gennemsigtige broer sammen med elektronisk gating kan anvendes til at styre den rumlige fordeling af den elektroniske strøm fra en punktkilde (fig. 1b). På denne måde kan vi forestille os at bygge to-dimensionelle kovalente kulstof kredsløb og udnytte kvante interferens effekter. Og af disse forudsigelser er i øjeblikket ved at blive undersøgt af forsøgsgrupperne

G. Calogero, I. Alcón, N. Papior, A.-P. Jauho, M. Brandbyge (2019) *Quantum interference engineering of nanoporous graphene for carbon nanocircuitry*, J. Am. Chem. Soc. **141**, 33, 13081, doi: 10.1021/jacs.9b04649



Figur 1. Multi-skala kvantetransport simulering af punkt-injiceret elektronisk strøm i en NPG struktur bestående af forskellige molekulære byggesten (meta / para). Det påvises, hvordan elektron strømmen udviser kvanteinterferensmønstre, som i sidste ende kan designs af den molekulære struktur og kontrolleres af elektronisk gating.

Litografisk modificering af grafens båndgap med 10 nm mønstre

Muligheden for at programmere grafens båndstruktur med nanoskala mønstre, var den forudsigtelse der satte CNG i gang. Forskere fra CNG har i de sidste ti år kæmpet med førende grupper i verden om at blive de første der viser at det kan gøres i praksis, hvilket har vist sig at være overraskende vanskeligt. Problemet er at uorden nemt opstår i de kanter man skærer i grafen, hvilket forstyrrer elektrontransporten voldsomt. I 2019 viste vi ved hjælp af det avancerede litografiske udstyr på DTU Nanolab og ved en særligt udviklet ætseproces, kan lave mønstre med detaljer helt ned til 10 nanometer, uden at elektronernes transportegenskaber ødelægges: bevægeligheden af elektronerne er 3 størrelsesordener bedre end ved normal fremstilling. Tværtimod lykkes det for første gang at få kvantitativ overensstemmelse mellem eksperimenter og de teoretiske beregninger (se Fig. 2), hvilket er et bevis for at det er lykket at ændre båndstrukturen på en forudsigtelig og præcis måde. Vi opdagede også at de nyopdagede og stærkt-hypede Moire-effekter, som opstår når to 2D materialer kommer i kontakt med en lille indbyrdes vinkel og frembringer et supergitter, overlever den ekstreme litografiske proces. Dette lover godt for fremtidens nanoelektronik baseret på grafen og andre 2D materialer. Arbejdet blev publiceret i Nature Nanotechnology, og blev af mange medier fremhævet som et gennembrud for grafen elektronik.

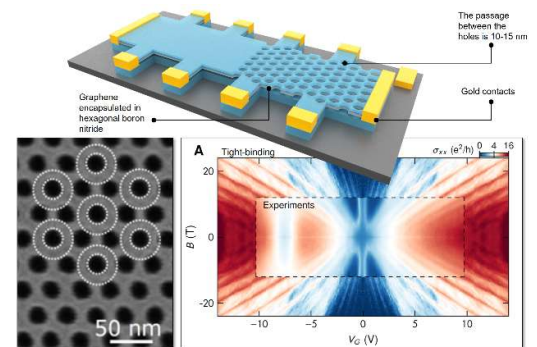


Figure 2. Grafen indkapslet i hexagonal bor nitrid, og mønstret med 25 nm (diameter) huller med blot 10 nanometer imellem. Ledningsevnen som funktion af gate spænding og magnet felt, viser et energi-gab, og en række andre detaljer, i kvantitativ overensstemmelse med både numeriske og analytiske forudsigelser.

B. Jessen, L. Gammelgaard, M. R. Thomsen, D. M. A. Mackenzie, J. D. Thomsen, E. Duegaard, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. J. Booth, T. G. Pedersen, Antti-Pekka Jauho, P. Bøggild, Nat. Nanotech, 14 (2019) 340-346, *Lithographic band structure engineering of graphene*