

Teoretické modelovanie elektrónového transportu v nanokontaktach pomocou vlnových balíkov

P. Bokes, M. Konôpka, M. Diešková (Katedra fyziky, FEI STU, Bratislava)

peter.bokes@stuba.sk

Nanoelektronika využíva polovodičové štruktúry s rozmermi niekoľkých nanometrov alebo jednotlivé molekuly či atómy ako stavebné jednotky elektronických obvodov. Funkčnosť takýchto nanosúčiastok je determinovaná ich lokálnou elektrónovou štruktúrou a jej modifikáciou v dôsledku ich väzieb na okolie. Metodika schopná predikcie volt-ampérových charakteristík nanosúčiastok musí kombinovať oba tieto aspekty v korektnom popise otvoreného kvantovo-mechanického systému. V súčasnosti existuje viacero prístupov na riešenie takýchto problémov, napr. formalizmus nerovnovážnych Greenových funkcií kombinovaný s teóriou funkcionálu hustoty (NEGF+DFT) alebo, v režime dostatočne malého aplikovaného napätia, prístup využívajúci teóriu lineárnej odozvy [1]. Oba tieto prístupy sú natoľko matematicky komplikované, že fyzikálna predstava o transporte elektrónov sa v nich stráca. V prednáške popíšem prístup k modelovaniu elektrónového transportu v nanokontaktach pomocou špeciálne zvolených vlnových balíkov, tzv. stroboskopických vlnových balíkov [2], ktoré umožňujú nie len matematicky presnú formuláciu nerovnovážneho kvantovo-mechanického problému, no zároveň poskytujú aj jednoduchý fyzikálny náhľad na študovanú problematiku. Ako príklady uvediem transport cez rezonančnú nanoštruktúru alebo neelastický transport elektrónov interagujúcich s fonónmi.

[1] Matthieu J. Verstraete, P. Bokes, R. W. Godby, J. Chem. Phys. 130, 124715 (2009).

[2] P. Bokes, F. Corsetti, and R. W. Godby, Phys. Rev. Lett. 101, 046402 (2008).