

Interakce elektronu s vibrujícími molekulami: aplikace v molekulární elektronice

Ivan A. Pshenichnyuk

Doktorská disertační práce

Říjen 2010

Abstrakt

V této práci studujeme interakci elektrického proudu procházejícího molekulárním můstkem s vibračními stupni volnosti tohoto můstku. Porovnááme dva různé teoretické přístupy, které umožňují počítat procházející proud a další charakteristiky můstku. První z metod je založena na teorii rozptylu a Landauerově formuli a druhá na Wangsnessove-Blochově-Redfieldově přístupu mistrovských rovnic. Navrhujeme rovněž sadu původních modelů pro anharmonický vibrační mód a asymetrické připojení k vodičům. Diskutujeme vliv anharmonicity a různých druhů asymetrie můstku na vodivostní charakteristiku. Jako příklad jevu, který může být pozorován jen nad rámeček harmonické aproximace, ukazujeme přítomnost tzv. "motorového efektu", t.j. silné závislosti momentu hybnosti molekuly na připojeném napětí. Diskutujeme hlavní proměnné ovlivňující možnost pozorování tohoto efektu, jako jsou výška potenciálové bariéry a symetrie můstku.