

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Daniel Perniš

### **Teorie rozptylu v řetězcích s těsnou vazbou a aplikace na nanoelektromagnety**

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

Studijní program: Fyzika, obecná fyzika

2010

Rád by som poďakoval doc. RNDr. Martinovi Čížkovi, Ph.D. za obrovskú trpezlivosť pri vedení práce, ochotu pri odpovedaní na moje otázky a zapožičanie literatúry. Chcem poďakovať aj mojim rodičom za podporu pri štúdiu. Vďaka patrí aj všetkým, ktorí sa podieľali na korektúrach.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 6. 8. 2010

Daniel Perniš

# Obsah

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Úvod</b>  | <b>5</b>  |
| <b>2</b> | <b>Teoretické zázemie</b>  | <b>7</b>  |
| 2.1      | Hilbertov priestor a Hamiltonián . . . . .   | 8         |
| 2.2      | Greenov operátor . . . . .   | 9         |
| 2.3      | Prechodová funkcia a prúd . . . . .  | 10        |
| <b>3</b> | <b>Model a výpočet</b>   | <b>14</b> |
| 3.1      | Model . . . . .  | 14        |
| 3.2      | Výpočet . . . . .  | 16        |
| 3.2.1    | Integračné medze . . . . .   | 17        |
| 3.2.2    | Prechodová funkcia . . . . .   | 18        |
| <b>4</b> | <b>Výsledky</b>  | <b>19</b> |
| 4.1      | Tvar voltampérovej charakteristiky a súvislosť s prechodovou<br>funkciou . . . . . | 19        |
| 4.2      | Vplyv amplitúdy preskoku medzi závitmi na vodivosť . . . . .                       | 21        |
| 4.3      | Závislosť výsledkov na dĺžke molekuly . . . . .                                    | 24        |
| <b>5</b> | <b>Záver</b>   | <b>26</b> |
|          | <b>Literatúra</b>  | <b>27</b> |

Název práce: Teorie rozptylu v řetízích s těsnou vazbou a aplikace na nano-elektromagnety

Autor: Daniel Perniš

Katedra (ústav): Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

e-mail vedoucího: cizek@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt: V predloženej práci študujeme voltampérové charakteristiky molekularného mostíka, ktorý je tvorený molekulou helicénu. Používame Landauerov formalizmus, ktorý vedenie prúdu molekulou popisuje ako prechod elektrónu potenciálovou bariérou. Pravdepodobnosť prechodu elektrónu molekulou určujeme pomocou kvantovej teórie rozptylu. Venujeme sa výpočtu tejto pravdepodobnosti pri použití tesnoväzobného modelu. Molekulu helicénu a jej kontakt s vodičmi modelujeme pomocou tesnej väzby. Voltampérové charakteristiky počítame pomocou vlastného programu a študujeme ich závislosť na parametroch modelu. Študujeme diferenciálnu vodivosť v závislosti na parametri, ktorý modeluje vedenie prúdu v pozdĺžnom smere.

Klíčová slova: molekulárny mostík, helicén, voltampérová charakteristika

Title: Scattering theory in chains with tight-binding interaction and application on nanoelectromagnets

Author: Daniel Perniš

Department: Department of Theoretical Physics

Supervisor: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

Supervisor's e-mail address: cizek@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstract: In the present thesis we study current–voltage characteristics of molecular junction containing helicene molecule. We use the Landauer formalism, which describes current conduction as tunneling through a potential barrier. Probability of the tunneling is given by quantum scattering theory. We present derivation of this probability for a tight-binding model. Helicene molecule and contacts are modeled using tight-binding approximation. Current–voltage characteristics are obtained using our own program and their dependence on various parameters is studied. In particular, we study differential conductance depending on parameter modeling conduction in longitudinal direction.

Keywords: molecular junction, helicene, current–voltage characteristic

# Kapitola 1

## Úvod

Výpočtová sila počítačov od osemdesiatych rokov minulého storočia exponenciálne rastie. Tento nárast je spôsobený predovšetkým stúpajúcim počtom elektronických súčiastok umiestnených na čipe a s tým súvisiacou miniaturizáciou týchto súčiastok. Je zrejmé, že táto miniaturizácia nemôže pokračovať donekonečna – skôr či neskôr narazíme na bariéru v podobe rozmeru atómov. Fyzikálne princípy, na základe ktorých pracujú súčasné polovodičové súčiastky, dokonca prestávajú fungovať už oveľa skôr, ako sa táto úroveň dosiahne [1]. Pri snahe o zmenšovanie súčiastok tak treba vziať do úvahy teóriu platnú v mikrosвете – kvantovú fyziku. Ďalšou komplikáciou je, že súčasná litografická technológia neumožňuje vyrábať súčiastky s atomárnou presnosťou. Túto presnosť sme však schopní pomerne ekonomicky dosiahnuť chemickou syntézou [1].

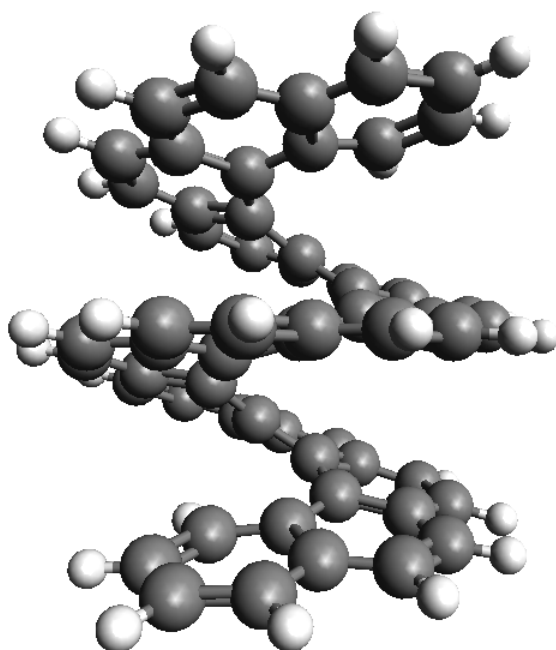
*Molekulárna elektronika* je aktívna oblasť fyziky, ktorá sa zaoberá použitím molekúl so špeciálne navrhnutými vlastnosťami ako súčiastok v elektrickom obvode [1]. Pre návrh molekulárnych obvodov je dôležité študovať jednotlivé molekulárne súčiastky. V súčasnosti je experimentálne možné naviazať jedinú molekulu na makroskopické vodiče<sup>1</sup> a merať vedenie prúdu takouto súčiastkou.

V tejto práci sa zaoberáme výpočtom vedenia prúdu triedou molekúl, ktoré nazývame helicény. Jeden z týchto helicénov je znázornený na obrázku 1.1. V oblasti syntézy helicénov momentálne prebieha aktívny výskum, napríklad aj na pôde Ústavu organickej chémie a biochémie Akadémie vied Českej republiky [2].

V tejto práci budeme pre popis molekulového mostíku používať Landauev formalizmus. Ten sa opiera o myšlienku, že na vedenie prúdu molekulou môžeme nahliadať ako na prechod elektrónu potenciálovou bariérou. Pravdepodobnosť tohto prechodu sa dá určiť pomocou kvantovej teórie rozptylu. Tento

---

<sup>1</sup>Toto usporiadanie sa zvykne nazývať *molekulárny mostík*.



Obr. 1.1: Molekula helicénu  $C_{58}H_{32}$  zložená zo 14 benzénových jadier. Uhlíkové atómy sú znázornené čiernou farbou, vodíkové atómy bielou farbou.

teoretický aparát zhrnieme v kapitole 2. V kapitole 3 sa budeme venovať už konkrétne helicénom. Ukážeme, ako chemická štruktúra helicénov umožňuje zjednodušiť konštrukciu Hamiltoniánu, ako zahrnúť vplyv elektród pomocou tzv. self-energie a spomenieme problémy súvisiace s numerickým výpočtom. Výsledné voltampérové charakteristiky budeme diskutovať v kapitole 4.

# Kapitola 2

## Teoretické zázemie

Mechanizmus vedenia prúdu mostíkom medzi dvoma vodičmi popisuje Datta [3] na strane 7 pomocou jednoduchého príkladu. Priemerný počet elektrónov v hladine s energiou  $E$  je v rovnováhe daný *Fermiho rozdeľovacou funkciou*

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(\beta E)}, \quad (2.1)$$

kde  $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$  je inverzná teplota. Typický vodič má spojité spektrum energetických hladín. Ak medzi dvoma takýmito vodičmi  $A$  a  $B$  udržiavame napätie  $U > 0$ , znížia sa energetické hladiny v jednom vodiči vzhľadom na hladiny v druhom vodiči o hodnotu  $eU$ , kde  $e$  je náboj elektrónu. Každý vodič tak má v rovnováhe vlastný *chemický potenciál*  $\mu$  a platí<sup>1</sup>

$$\mu_B - \mu_A = eU. \quad (2.2)$$

Fermiho funkcia vodiča sa teda po aplikovaní napätia zmení na  $f(E - \mu)$ .

Vložme medzi tieto vodiče mostík a predpokladajme, že mostík disponuje jedinou energetickou hladinou s energiou  $\varepsilon$ . Pri nulovom napätí sa ustáli rovnováha a obidva vodiče aj s mostíkom majú rovnaký chemický potenciál. Ak teraz zvýšime napätie, narušíme rovnováhu. Cieľom vodiča  $A$ , resp.  $B$  je, aby v mostíku bolo  $f_A(\varepsilon)$ , resp.  $f_B(\varepsilon)$  elektrónov. Ak predpokladáme  $\varepsilon \in \langle \mu_A, \mu_B \rangle$ , resp.  $\varepsilon$  vzdialené niekoľko  $\beta^{-1}$  od tohto intervalu,  $f_A(\varepsilon)$  a  $f_B(\varepsilon)$  sa podstatne líšia. Jeden z vodičov teda neustále do mostíku pridáva elektróny a druhý ich z neho odoberá, takže mostíkom tečie v nerovnovážnom, ale stacionárnom stave prúd  $I$  úmerný rozdielu  $\Delta f \equiv f_A(\varepsilon) - f_B(\varepsilon)$ . Konštanta úmernosti súvisí s pravdepodobnosťami, že elektrón prejde mostíkom z vodiča  $A$  do vodiča  $B$  a naopak. V podkapitole 2.3 ukážeme, ako vypočítať prúd tečúci mostíkom aj v zložitejších prípadoch.

---

<sup>1</sup>Príslušnosť veličín k vodiču  $A$ , resp.  $B$  budeme v priebehu práce značiť zodpovedajúcim indexom.

## 2.1 Hilbertov priestor a Hamiltonián

Skôr, než uvedieme vzťah pre výpočet prúdu tečúceho mostíkom, je vhodné diskutovať Hilbertov priestor  $\mathcal{H}$  študovaného systému. Elektrónu sa v kvantovej teórii štandardne priraduje priestor  $\mathcal{L}_2(\mathbb{R}^3)$ . Pre numerický výpočet je často výhodné pracovať v konečne dimenzionálnom priestore. Uvedme niekoľko metód, ktorými možno postupovať:

- **Diskretizácia priestoru**

Pre jednoduchosť uvažujme jednorozmerný priestor, vo vyšších rozmeroch je situácia analogická. Bázu  $\mathcal{H}$  skonštruujeme reštrikciou súradnicovej bázy  $\{|x\rangle\}$ ,  $x \in \mathbb{R}$  na bázu  $\{|aj\rangle\}$ , kde  $a > 0$  je mriežková konštanta a  $j \in \mathbb{Z}$ . Navyše často uvažujeme len konečnú časť priestoru, takže aj  $\mathcal{H}$  má konečnú bázu.

Maticové elementy  $H_{ij} \equiv \langle ai | \hat{H} | aj \rangle$  typického Hamiltoniánu  $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\hat{\mathbf{x}})$  dostaneme jeho prepisom do  $x$ -reprezentácie. Derivácie podľa priestorovej súradnice, ktoré pochádzajú z operátora  $\hat{\mathbf{p}}$ , sa potom vyjadria pomocou metódy konečných rozdielov. Dostaneme tak maticové elementy

$$H_{ij} = \begin{cases} V_i + 2t & \text{ak } i = j \\ -t & \text{ak } i \text{ a } j \text{ sú najbližší susedia} \\ 0 & \text{inak,} \end{cases} \quad (2.3)$$

kde  $V_i \equiv V(ai)$  a  $t \equiv \hbar^2/2ma$ . Odvodenie môžeme nájsť napríklad v [4] alebo v [5], strana 142–143.

- **LCAO<sup>2</sup>**

Hilbertovým priestorom je lineárna kombinácia atómových orbitálov

$$\mathcal{H} = \text{Span}(|\psi_{ij}\rangle), \quad (2.4)$$

kde  $|\psi_{ij}\rangle$  je  $j$ -tý atómový orbitál  $i$ -teho atómu. Pod atómovým orbitálom rozumieme viazaný stav elektrónu pre samostatný atóm.

- **Tesnoväzobné priblíženie<sup>3</sup>**

Samotná LCAO metóda nám dáva Hilbertov priestor, ale nehovorí nič o Hamiltoniáne. Ten môžeme skonštruovať napríklad pomocou modelu tesnej väzby (pozri [6], strana 176).

---

<sup>2</sup>Linear Combination of Atomic Orbitals.

<sup>3</sup>V angličtine *tight-binding approximation*.



Uvažujme najprv Hamiltonián izolovaného atómu  $\hat{H}_{\text{at}}$  umiestneného v bode  $R$  a jeho vlastné stavy  $\hat{H}_{\text{at}} |R, n\rangle = E_n |R, n\rangle$ . Predpokladajme, že vlastné stavy sú *dobře lokalizované*, teda že platí

$$|\langle R', n' | R, n \rangle| \ll 1 \quad \text{pre } R \neq R' \quad (2.5)$$

a označme  $\psi_n(R - x) \equiv \langle x | R, n \rangle$ . Celkový Hamiltonián  $\hat{H}$  bude súčtom atomárnych Hamiltoniánov a operátora  $\hat{C}$ , ktorý vystihuje interakcie medzi jednotlivými atómami. Maticové elementy  $\hat{H}$  v báze  $\{|R, n\rangle\}$  sú teda

$$\begin{aligned} \langle R', n' | \hat{H} | R, n \rangle &= \\ &= E_n \delta(R - R') \delta_{nn'} + \int \psi_{n'}^*(R' - x) C(x) \psi_n(R - x) dx. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Prvý člen vznikne v dôsledku vzťahu (2.5), druhý člen nazývame *amplitúda preskoku* [7]. Pre  $R$  dostatočne vzdialené od  $R'$  ho môžeme pri dobre lokalizovaných potenciáloch zanedbať. Často sa obmedzujeme iba na preskoky medzi susednými atómami.

Stojí za zmienku, že diskretizovaná Schrödingerova rovnica a tesnoväzobný model majú isté spoločné črty. Boykin a Klimeck [4] uvádzajú jednoduchý jednodimenzionálny príklad. Tesnoväzobný model 1D reťazky rovnakých atómov a diskretizácia priestoru s nulovým potenciálom vedú na rovnakú sústavu rovníc. Použitím Blochovho teóremu a periodickej okrajovej podmienky sa im podarilo dostať disperznú reláciu  $E(k) = 2t(1 - \cos(ka))$ , zatiaľ čo spojitá Schrödingerova rovnica dáva známú disperznú reláciu  $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Tieto disperzné relácie sú v zhode len v limite  $k \rightarrow 0$ .

Ďalej je vhodné celý Hilbertov priestor  $\mathcal{H}$  rozdeliť na podpriestory<sup>4</sup>  $\mathcal{H}_m$  a  $\mathcal{H}_v$  tak, že  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_m \oplus \mathcal{H}_v$ . Aj samotná báza sa tak rozpadá na disjunktné podmnožiny zodpovedajúce mostíku a vodičom, pričom báza  $\mathcal{H}_m$  je konečná a obsahuje výrazne menej prvkov ako báza  $\mathcal{H}_v$ .

## 2.2 Greenov operátor

Pravdepodobnosť prechodu elektrónu z jedného vodiča do druhého môžeme určiť pomocou teórie rozptylu. Touto teóriou sa budeme zaoberať v nasledujúcej podkapitole. Ešte predtým sa však venujme Greenovmu operátoru  $\hat{G}$ , ktorý budeme neskôr využívať. Tento operátor definujeme v súlade s [8], strana 129

$$\hat{G}(E) \equiv (E - \hat{H})^{-1}, \quad (2.7)$$

<sup>4</sup>Dolný index  $m$ , resp.  $v$  označuje mostík, resp. vodič.

kde  $\hat{H}$  je Hamiltonián. Je zvykom definovať *retardovaný* Greenov operátor<sup>5</sup>  $\hat{G}^R(E) \equiv \hat{G}(E + i\varepsilon)$  zodpovedajúci okrajovej podmienke prichádzajúcej vlny. Podobne sa definuje *advancovaný* Greenov operátor  $\hat{G}^A(E) \equiv \hat{G}(E - i\varepsilon)$ . Platí identita  $\hat{G}^R = (\hat{G}^A)^\dagger$ . V ďalšom texte budeme vynechávať horný index  $R$  a budeme pod  $\hat{G}$  vždy rozumieť retardovaný Greenov operátor.

Ak teraz skonštruujeme v zhode s predchádzajúcou podkapitolou Hilbertov priestor so spočítateľnou bázou  $\{|\varphi_i\rangle\}$ , môžeme stotožniť  $\langle\varphi_i|\hat{G}|\varphi_j\rangle$  s prvkami matice (všeobecne nekonečnej) a namiesto operátorovej rovnice tak dostaneme maticovú rovnicu

$$G = (E + i\varepsilon - H)^{-1}. \quad (2.8)$$

Datta [5] na strane 146 ukazuje, že ak rozdelíme  $G$  na podmatice zodpovedajúce podpriestorom  $\mathcal{H}_v, \mathcal{H}_m$

$$\begin{pmatrix} G_v & G_{vm} \\ G_{mv} & G_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E + i\varepsilon - H_v & -\tau \\ -\tau^\dagger & E + i\varepsilon - H_m \end{pmatrix}^{-1}, \quad (2.9)$$

dostaneme pre Greenovu funkciu mostíku  $G_m$  vzťah

$$G_m = [E - H_m - \Sigma(E)]^{-1}, \quad (2.10)$$

kde

$$\Sigma(E) \equiv \tau^\dagger [E + i\varepsilon - H_v]^{-1} \tau \quad (2.11)$$

je *self-energia*. Často sa zapisuje v tvare  $\Sigma = \Delta - \frac{i}{2}\Gamma$ , kde  $\Delta, \Gamma$  sú hermitovské matice.

Matica invertovaná v (2.10) má konečné rozmery. Tento príjemný fakt je ale vykúpený výpočtom self-energie, v ktorom opäť vystupuje inverzia veľkej, potenciálne nekonečne rozmernej matice. Self-energia sa napriek tomu pre niektoré modely vodičov dá spočítať analyticky, niekoľko príkladov uvádza napríklad Prachař [7].

Zovšeobecnenie na viacero vodičov je priamočiare, každý vodič do vzťahu (2.10) prispeje svojou vlastnou self-energiou, teda pre dva vodiče  $A$  a  $B$  je  $\Sigma = \Sigma_A + \Sigma_B$ .

## 2.3 Prechodová funkcia a prúd

Teória rozptylu pracuje s Hamiltoniánom v tvare  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , kde  $\hat{H}_0$  je Hamiltonián *voľnej častice*<sup>6</sup> a  $\hat{V}$  je potenciál [8]. Predpokladajme, že častica

<sup>5</sup>Používame obvyklú konvenciu: vo výrazoch obsahujúcich  $\varepsilon$  automaticky rozumieme limitu  $\varepsilon \rightarrow 0+$ .

<sup>6</sup>Pojem voľná častica nemusí nutne znamenať časticu v nulovom potenciáli.

je v čase  $t = -\infty$  v stave  $|\psi_{\text{in}}\rangle$ <sup>7</sup> a nie je ovplyvnená potenciálom (hovoríme o *asymptoticky voľnom stave*). Tento stav sa v čase vyvíja, až je nakoniec v  $t = \infty$  častica opäť v asymptoticky voľnom stave  $|\psi_{\text{out}}\rangle = \hat{S}|\psi_{\text{in}}\rangle$ . Teória rozptylu dáva návod ako spočítať pravdepodobnosť  $w$ , že častica prejde zo stavu  $|\psi_{\text{in}}\rangle$  do iného koncového stavu  $|\psi'_{\text{out}}\rangle$

$$w = |\langle \psi'_{\text{out}} | \psi_{\text{out}} \rangle|^2 = \left| \langle \psi'_{\text{out}} | \hat{S} | \psi_{\text{in}} \rangle \right|^2, \quad (2.12)$$

kde  $\hat{S}$  je operátor rozptylu. Jeho maticové elementy sa zvyčajne zapisujú v tvare

$$\langle j | \hat{S} | k \rangle = \langle j | k \rangle - 2\pi i \delta(E_j - E_k) \langle j | \hat{T} | k \rangle, \quad (2.13)$$

kde  $E_j$ , resp.  $E_k$  je energia stavu  $|j\rangle$ , resp.  $|k\rangle$  a  $\hat{T}$  je  $T$ -matica daná napríklad vzťahom (pozri [8], strana 134)

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \hat{G} \hat{V}. \quad (2.14)$$

Aplikujme túto teóriu na vedenie prúdu mostíkom. Elektrón vo vodičoch budeme považovať za voľnú časticu, úlohu rozptylového potenciálu zastáva mostík. Bázové vektory podpriestorov  $\mathcal{H}_v^{(A)}$ ,  $\mathcal{H}_v^{(B)}$ ,  $\mathcal{H}_m$  značíme  $|A\rangle$ ,  $|B\rangle$ ,  $|n\rangle$ , prípadne  $|n'\rangle$ . Relácie úplnosti majú tvar

$$1 = \sum_A |A\rangle \langle A| + \sum_B |B\rangle \langle B| + \sum_n |n\rangle \langle n|. \quad (2.15)$$

Jediné nenulové maticové elementy potenciálu  $\hat{V}$  sú

$$\begin{aligned} \langle A | \hat{V} | n \rangle &= (\tau_A)_{An} \\ \langle B | \hat{V} | n \rangle &= (\tau_B)_{Bn} \\ \langle n' | \hat{V} | n \rangle &= (H_m)_{n'n}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Venujme sa na chvíľu antihermitovskej časti self-energie  $\Gamma = i(\Sigma - \Sigma^\dagger)$ . Pre jej maticové elementy platí

$$\Gamma(E)_{nn'} = \langle n | \hat{V}^\dagger \left[ i(E + i\varepsilon - \hat{H}_0)^{-1} - i(E - i\varepsilon - \hat{H}_0)^{-1} \right] \hat{V} | n' \rangle. \quad (2.17)$$

Vložme do tohto vzťahu relácie úplnosti (2.15) a využime známy vzťah z teórie distribúcií

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mp i\pi \delta(x) + \text{v.p.} \frac{1}{x}. \quad (2.18)$$

---

<sup>7</sup>Stav popisujeme v Diracovej reprezentácii.

Hodnoty v.p.  $\frac{1}{x}$  sa navzájom odčítajú a pre maticové elementy  $\Gamma$  dostávame s využitím (2.16)

$$\Gamma(E)_{nn'} = \Gamma_A(E)_{nn'} + \Gamma_B(E)_{nn'}, \quad (2.19)$$

kde sme označili

$$\begin{aligned} \Gamma_X(E)_{nn'} &= 2\pi \sum_X \delta(E - E_X) \langle n | \hat{V}^\dagger | X \rangle \langle X | \hat{V} | n' \rangle = \\ &= 2\pi \sum_X \delta(E - E_X) (\tau_X^\dagger)_{nX} (\tau_X)_{Xn'}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Teraz odvodíme vzťah pre *prechodovú funkciu*<sup>8</sup>  $\bar{T}_{AB}(E)$ . Táto funkcia udáva pravdepodobnosť, že elektrón prejde z vodiča  $A$  do vodiča  $B$ , vysčítanú cez všetky kanály s energiou  $E$ . Spočítajme najprv pravdepodobnosť prechodu z počiatočného stavu  $|A\rangle$  do koncového stavu  $|B\rangle$

$$\begin{aligned} w_{AB} &= (2\pi)^2 \left| \langle A | \hat{T} | B \rangle \right|^2 \\ &= (2\pi)^2 \sum_{n,n'} \left| \langle A | \hat{V} | n \rangle \langle n | \hat{G} | n' \rangle \langle n' | \hat{V} | B \rangle \right|^2 \\ &= (2\pi)^2 \sum_{n,n'} \left| (\tau_A)_{An} (G_m)_{nn'} (\tau_B^\dagger)_{n'B} \right|^2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Najprv sme dosadili (2.13) do (2.12) s uvážením  $\langle A | B \rangle = 0$ . Vynechanie  $\delta$ -funkcie súvisí s tým, že vlastné stavy energie v prípade nekonečného vodiča nie sú normalizovateľné a správny prístup vyžaduje študovanie vlnového balíka namiesto monochromatickej vlny. Tento prístup nakoniec vedie k zmiznutiu  $\delta$ -funkcie, podobne ako pri odvodení vzťahu pre diferenciálny účinný prierez v Taylorovej knihe [8], strana 51. V ďalšom kroku sme vložili relácie úplnosti (2.15) a využili nulovosť všetkých maticových elementov  $\hat{V}$  okrem (2.16). Teraz nám už zostáva len vysčítať pravdepodobnosti  $w_{AB}$  pre stavy s vhodnými energiami. Použitím rovnosti  $|a|^2 = aa^*$ , definície stopy a jej cyklickej vlastnosti a vzťahu (2.20) dostaneme

$$\bar{T}_{AB}(E) = \sum_{A,B} \delta(E - E_A) \delta(E - E_B) w_{AB} = \text{Tr} (\Gamma_A G_m \Gamma_B G_m^\dagger). \quad (2.22)$$

K rovnakému vzťahu dospieva odlišným postupom Datta [5] na strane 148.

<sup>8</sup>V angličtine *transmission function*.

Prúd  $I$  tečúci medzi vodičmi  $A$  a  $B$  je daný *Landauerovou formulou* (pozri [3], strana 235) platnou pre *koherentný transport*<sup>9</sup>

$$I = 2 (\text{za spin}) \times \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{T}_{AB}(E) [f_A(E) - f_B(E)] dE. \quad (2.23)$$

Tento vzťah môžeme interpretovať tak, že celkový prúd je súčtom čiastkových prúdov zodpovedajúcich kanálom s rôznou energiou. Pritom energie vyberáme z okna daného prekrytím obsadených stavov v jednom vodiči a voľných stavov v druhom vodiči [1].

---

<sup>9</sup>Transport, pri ktorom nedochádza k neelastickým zrážkam.

# Kapitola 3

## Model a výpočet

V tejto práci sa venujeme výpočtu voltampérových charakteristík molekuly helicénu, ktorá je umiestnená medzi dvoma makroskopickými vodičmi. Helicén je polyaromatická uhľovodíková zlúčenina tvorená benzénovými jadrami, ktoré vytvárajú závitnicu tak, že sú na seba naviazané v *ortho*-polohe (pozri obrázok 1.1). Elektrónová konfigurácia samostatného atómu uhlíka v základnom stave je  $1s^2 2s^2 2p^2$ . V zlúčeninách sa však táto konfigurácia mení, energetický rozdiel medzi  $2s$  a  $2p$  orbitálmi je menší než väzbová energia a dochádza k *hybridizácii orbitálov*, čiže k miešaniu  $2s$  a  $2p$  orbitálov v snahe zväčšiť väzbovú energiu [9]. V benzénových jadrách dochádza k  $sp^2$  hybridizácii. Tri z valenčných elektrónov sa tak podieľajú na tvorbe silných  $\sigma$ -väzieb a štvrtý  $\pi$ -elektrón je typicky menej viazaný a môže sa pohybovať po molekule.

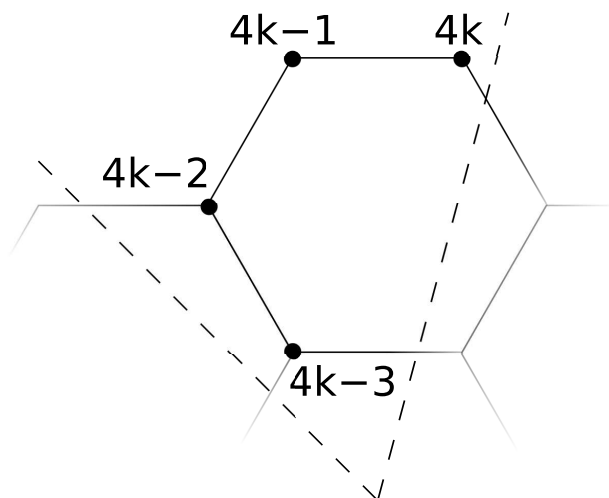
### 3.1 Model

Pre účely nasledujúcej diskusie je vhodné si očíslovať jednotlivé uhlíkové atómy v molekule helicénu. Molekulu obsahujúcu  $N$  benzénových jadier si môžeme predstavovať zloženú z  $N$  *segmentov*, z ktorých každý obsahuje 4 atómy uhlíka a sú nasledované ukončovacím segmentom, ktorý obsahuje iba 2 atómy uhlíka. Na obrázku 3.1 je znázornený  $k$ -tý segment s očíslovanými atómami. Ukončovací segment je totožný, ale neobsahuje atómy  $4N + 3$  a  $4N + 4$ .

Keďže elektrické vlastnosti helicénu sú dané predovšetkým  $\pi$ -elektrónmi, za Hilbertov priestor budeme brať lineárnu kombináciu  $\pi$ -orbitálov<sup>1</sup>. Hamiltonián skonštruujeme použitím tesnoväzobného modelu. Diagonálny člen označme  $\epsilon$ . Budeme uvažovať preskoky elektrónov medzi atómami uhlíka, ktoré sú spojené  $\sigma$ -väzbou, amplitúdu preskoku označme  $t$ . Zavedme ešte amplitúdu preskoku  $t'$ , ktorá modeluje vedenie prúdu v pozdĺžnom smere, teda preskoky medzi

---

<sup>1</sup>Podobne postupuje aj Hückelova metóda používaná v kvantovej chémii.



Obr. 3.1: Očíslovanie uhlíkových atómov helicénu. Prerušovanou čiarou je vymedzený  $k$ -tý segment, body označujú 4 atómy uhlíka v tomto segmente.

atómami uhlíka vzdialenými 6 segmentov<sup>2</sup>. Takto dospejeme k výslednému Hamiltoniánu

$$H_{ij} = \begin{cases} \epsilon & \text{ak } i = j \\ t & \text{ak platí jedno z nasledujúcich tvrdení } (k \in \mathbb{N}): \\ & i = 4k - 3 \quad \wedge \quad j - i \in \{-4, 1, 4\} \\ & i = 4k - 2 \quad \wedge \quad j - i \in \{-2, -1, 1\} \\ & i = 4k - 1 \quad \wedge \quad j - i \in \{-1, 1\} \\ & i = 4k \quad \wedge \quad j - i \in \{-1, 2\} \\ t' & \text{ak } |i - j| = 24 \\ 0 & \text{inak.} \end{cases} \quad (3.1)$$

V experimentálnom zapojení sa často používa pomocná elektróda, ktorú obvykle nazývame *brána* (anglicky *gate*). Privedením napätia  $U_G$  na túto elektródu môžeme posúvať energetické hladiny v molekule. V Hamiltoniáne (3.1) tak môžeme položiť  $\epsilon \equiv 0$  a zostanú nám dva voľné parametre  $t$  a  $t'$ . V ďalšom texte budeme pokladať  $t$  za jednotku energie. Typickému  $t \approx 2,5$  eV zodpovedá pre izbové teploty  $\beta \approx 100/t$ .

V priebehu experimentu nám použitie brány umožňuje bez újmy na vše-

<sup>2</sup>Presnejší model by musel vziať do úvahy geometriu molekuly.

obecnosti splniť vzťah (2.2) tak, že položíme<sup>3</sup>

$$\begin{aligned}\mu_{A,B} &= E_0 \mp \frac{1}{2}eU \\ E_0 &\equiv \frac{1}{2}(E_{\text{LUMO}} + E_{\text{HOMO}}).\end{aligned}\tag{3.2}$$

Self-energiu určíme opäť pomocou tesnoväzobného modelu. Najprv si všimnime, že prvky matice  $\tau_{ij}$  v definičnom vzťahu pre self-energiu (2.11) sú takmer všetky nulové. Jediné nenulové prvky zodpovedajú preskokom medzi niekoľkými koncovými atómami helicénu a atómami vodičov. V našom modeli budeme predpokladať, že ide o atómy  $i \in J_A$ , resp.  $J_B$  v prípade kontaktu s vodičom  $A$ , resp.  $B$ , kde  $J_A \equiv \{1, 2, 3, 4\}$ ,  $J_B \equiv \{4N + 2, 4N + 1, 4N, 4N - 3\}$ . Po vykonaní maticového násobenia v (2.11) zistíme, že prvky self-energie sú nulové okrem prípadu  $i = j \wedge i \in J_A$ , resp.  $J_B$ . Ďalej budeme predpokladať, že hermitovská časť self-energie  $\Delta$  je nulová a antihermitovská časť  $-\frac{i}{2}\Gamma$  je konštantná, nezávislá na energii<sup>4</sup>. Pre náš model teda budeme používať matice

$$(\Gamma_{A,B})_{ij} = \begin{cases} \gamma_{A,B} & \text{ak } i = j \wedge i \in J_{A,B} \\ 0 & \text{inak,} \end{cases}\tag{3.3}$$

kde  $\gamma_A, \gamma_B$  sú jediné parametre, ktoré popisujú kontakt molekuly s vodičmi.

## 3.2 Výpočet

Na výpočet používame vlastný program v jazyku Fortran a numerické algoritmy prevzaté z [10]. Algoritmy pre  $LU$ -dekompozíciu s čiastočným pivotovaním boli modifikované, aby pracovali aj s komplexnými maticami.

Program na začiatku načíta vstupné dáta (pozri tabuľku 3.1). Pri inicializácii vytvorí matice pre Hamiltonián  $H$  a self-energie  $\Sigma_A, \Sigma_B$  podľa vzťahov (3.1) a (3.3). Ďalej spočíta spektrum Hamiltoniánu Jacobiho metódou a usporiada ho pomocou heapsortu. Zo zotriedeného spektra určí  $E_0$  podľa vzťahu (3.2). Následne predpočíta prechodovú funkciu – detaily výpočtu uvidíme v podkapitole 3.2.2. Nakoniec program spočíta voltampérovú charakteristiku mostíku pre  $U < U_{\text{max}}$  s vzorkovacou periódou  $U_{\text{step}}$ . Využíva pri tom Landauerovu formulu (2.23), Simpsonovu numerickú integráciu a integračné medze, ktorých určenie budeme diskutovať v podkapitole 3.2.1.

<sup>3</sup>Anglické skratky LUMO, resp. HOMO značia *Lowest Unoccupied Molecular Orbital*, resp. *Highest Occupied Molecular Orbital*, čiže najnižší neobsadený a najvyšší obsadený molekulárny orbitál. Symboly  $E_{\text{LUMO}}, E_{\text{HOMO}}$  značia energie týchto orbitálov.

<sup>4</sup>Tento prístup sa v angličtine nazýva *Wide Band Approximation*.



| Symbol               | Význam   |
|----------------------|--|
| $N$                  | počet segmentov  |
| $t'$                 | parameter Hamiltoniánu                                     |
| $\gamma_A, \gamma_B$ | parametre self-energie                                     |
| $U_{\max}$           | rozsah VA charakteristiky                                  |
| $U_{\text{step}}$    | vzorkovacia perióda VA charakteristiky                     |
| $T_N$                | počet vzoriek použitých na vzorkovanie prechodovej funkcie |

Tabuľka 3.1: Vstupné dáta programu.

### 3.2.1 Integračné medze

Integrácia vo vzťahu pre prúd (2.23) prebieha cez celú reálnu osu. Vďaka obmedzenosti prechodovej funkcie však stačí integrovať len cez interval  $\langle E_{\min}, E_{\max} \rangle$ , na ktorom je  $|\Delta f| \geq p$ , kde prah  $p \in (0, \Delta f(E_0))$  je vopred zvolené malé číslo (pozri obrázok 3.2). Potrebujeme teda riešiť rovnicu  $p = \Delta f(E)$  pre  $E$ . Naivná implementácia môže viesť veľmi rýchlo k pretečeniu alebo k nedefinovaným hodnotám, preto budeme postupovať opatrne.

Predpokladajme najprv  $E_0 = 0$ . Zavedením substitúcie  $a \equiv \beta E$ ,  $b \equiv \frac{1}{2}\beta eU$  prejde riešená rovnica na tvar

$$p = \frac{1}{1 + e^a e^{-b}} - \frac{1}{1 + e^a e^b}. \quad (3.4)$$

Pokúsme sa upraviť túto rovnicu tak, aby neobsahovala výrazy  $e^b$ , ktoré môžu viesť k pretečeniu. Po vynásobení nenulovým výrazom  $(1 + e^a e^b)(1 + e^a e^{-b})e^{-b}$  dostaneme kvadratickú rovnicu pre  $e^a$

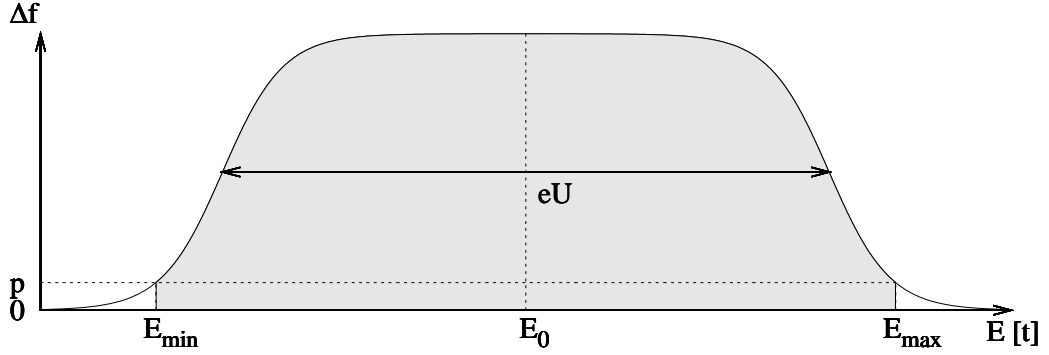
$$pe^{-b}e^{2a} + Be^a + pe^{-b} = 0, \quad (3.5)$$

kde sme označili  $B \equiv pe^{-2b} + e^{-2b} + p - 1$ ,  $B \leq 0 \quad \forall b > 0 \forall p \in (0, \Delta f(0))$ . Riešením tejto rovnice a návratom k substitúcii získame vzťah pre medze

$$E_{\min, \max} = \frac{1}{\beta} \left[ \ln \left( -B \pm \sqrt{B^2 - 4p^2 e^{-2b}} \right) - \ln(2p) + b \right]. \quad (3.6)$$

Keďže  $\Delta f$  je párna, platí  $E_{\min} = -E_{\max}$ . To nám umožňuje vybrať si znamienko vo vzťahu (3.6). Logaritmus pre argumenty blížiacie sa k nule rýchlo preteká, preto zvolíme numericky stabilnejšiu vetvu s kladným znamienkom. Zámenou  $E \rightarrow E - E_0$  dostaneme výsledný vzťah pre integračné medze

$$E_{\min, \max} = E_0 \pm \frac{1}{\beta} \left[ \ln \left( -B + \sqrt{B^2 - 4p^2 e^{-2b}} \right) - \ln(2p) + b \right]. \quad (3.7)$$



Obr. 3.2: Graf funkcie  $\Delta f$  pre  $eU = 5t$ ,  $\beta = 4/t$ . V skutočnosti je inverzná teplota  $\beta$  väčšia a prah  $p$  menší.

### 3.2.2 Prechodová funkcia

Spočítať prechodovú funkciu je časovo pomerne náročná záležitosť. Pri výpočte potrebujeme invertovať maticu s rozmermi  $\dim H \times \dim H$ , čo pri použití  $LU$ -dekompozície predstavuje časovú zložitosť  $\mathcal{O}(N^3)$ , keďže  $\dim H = 4N + 2$ . Matice týchto rozmerov sa následne násobia s rovnakou časovou zložitosťou.

Keďže prechodová funkcia nezávisí na napätí, môžeme ju ešte pred integráciou predpočítať v diskretných hodnotách energie a neskôr potrebné hodnoty lineárne interpolovať. Prechodovú funkciu vzorkujeme ekvidištantne na intervale  $\langle E_{\min}, E_{\max} \rangle$ , používame  $T_N$  vzoriek.

Vďaka špeciálnemu tvaru matic  $\Gamma_A, \Gamma_B$  môžeme výpočet  $\text{Tr}(\Gamma_A G_m \Gamma_B G_m^\dagger)$  pre  $N > 1$  ešte urýchliť. Ak rozdelíme matice vystupujúce v súčine na bloky<sup>5</sup>

$$\Gamma_A = \begin{pmatrix} \Gamma'_A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \Gamma_B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma'_B \end{pmatrix}, G = \begin{pmatrix} G_1 & G_2 & G_3 \\ G_4 & G_5 & G_6 \\ G_7 & G_8 & G_9 \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

jednoducho dostaneme výsledok

$$\text{Tr}(\Gamma_A G_m \Gamma_B G_m^\dagger) = \text{Tr}(\Gamma'_A G_3 \Gamma'_B G_3^\dagger). \quad (3.9)$$

Násobenie 6-rozmerných matic už prebieha v konštantnom čase.

---

<sup>5</sup> $\dim \Gamma'_A = \dim \Gamma'_B = 6$

# Kapitola 4

## Výsledky

V tejto kapitole uvidíme výsledky numerických výpočtov voltampérových charakteristík helicénov. Používame typicky  $U_{\max} = 3t/e$ ,  $T_N = 1000$ , čo vedie k diskretizačnej chybe počítaných integrálov až 10% pre nízke prúdy. Táto chyba však s rastúcim prúdom rýchlo klesne na približne 2%. Pre výpočty v oblasti nízkych prúdov preto používame väčšie hodnoty  $T_N$ . V priebehu kapitoly používame symbol  $\gamma$  bez indexu v prípade  $\gamma_A = \gamma_B$ .

### 4.1 Tvar voltampérovej charakteristiky a súvislosť s prechodovou funkciou

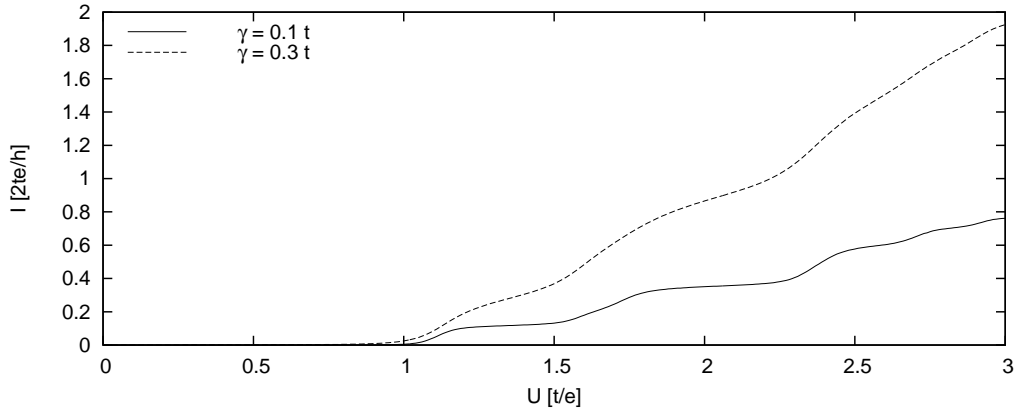
Na obrázku 4.1 je ukážka spočítanej VA-charakteristiky. Závislosť vykazuje pre nízke  $\gamma$  charakteristické skoky, s rastúcim  $\gamma$  sa tieto skoky vytrácajú. Príčinu tohto javu dobre pochopíme z tvaru prechodovej funkcie na obrázku 4.2. Rastúce napätie znamená zväčšovanie integračného okna vo vzťahu (2.23) a skoky zodpovedajú píkom v prechodovej funkcii. Píky sú lokalizované okolo vlastných hodnôt Hamiltoniánu molekuly a ich šírka rastie s parametrom  $\gamma$ . Ďalej vidíme, že veľkosť málo vodivej oblasti na začiatku charakteristiky je priamo daná rozdielom energií  $E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ .

Ľahko zistíme, že pre jednorozmerný Hilbertov priestor mostíku s jedinou vlastnou energiou  $\epsilon$  prejde vzťah (2.22) na

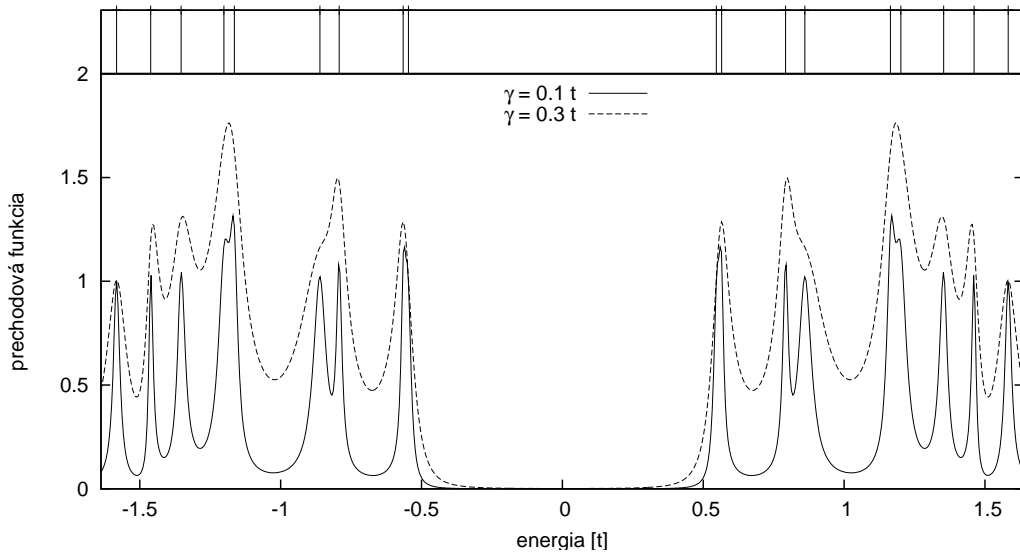
$$\bar{T}_{AB}(E) = \frac{4\gamma_A\gamma_B}{4(E - \epsilon)^2 + (\gamma_A + \gamma_B)^2}. \quad (4.1)$$

Prechodová funkcia má teda v tomto prípade tvar Lorentzovej krivky. Polohu píku udáva  $\epsilon$  a šírka je  $(\gamma_A + \gamma_B)/2$ . Očakávame, že podobná situácia nastane aj v zložitejších prípadoch. Prechodová funkcia bude obsahovať viac píkov, pretože molekula bude disponovať viacerými energetickými hladinami a  $\gamma_A, \gamma_B$

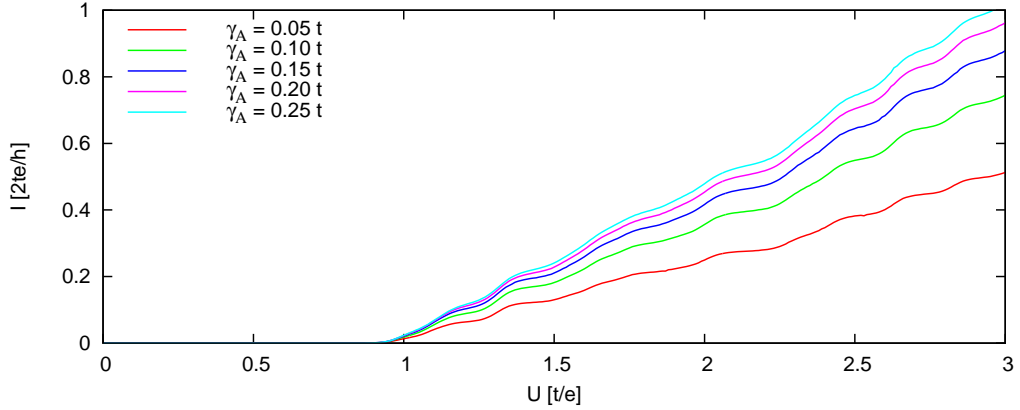
budú znovu ovplyvňovať šírky týchto píkov. V Landauerovej formule sa tak bude s rastúcimi  $\gamma_A, \gamma_B$  zväčšovať integrand a tým aj celkový prúd tečúci molekulou. Môžeme sa o tom presvedčiť na obrázku 4.1 alebo na obrázku 4.3, kde sme znázornili VA-charakteristiku pre  $\gamma_A \neq \gamma_B$ .



Obr. 4.1: Voltampérová charakteristika pre rôzne  $\gamma$  a  $N = 6$ ,  $t'/t = 0$ .



Obr. 4.2: Závislosť prechodovej funkcie na energii pre rôzne  $\gamma$  a  $N = 6$ ,  $t'/t = 0$ . V hornej časti grafu sú znázornené vlastné hodnoty Hamiltoniánu.



Obr. 4.3: Voltampérová charakteristika pre vybrané hodnoty  $\gamma_A$  a  $N = 16$ ,  $t'/t = 0$ ,  $\gamma_B = 0, 1t$ .

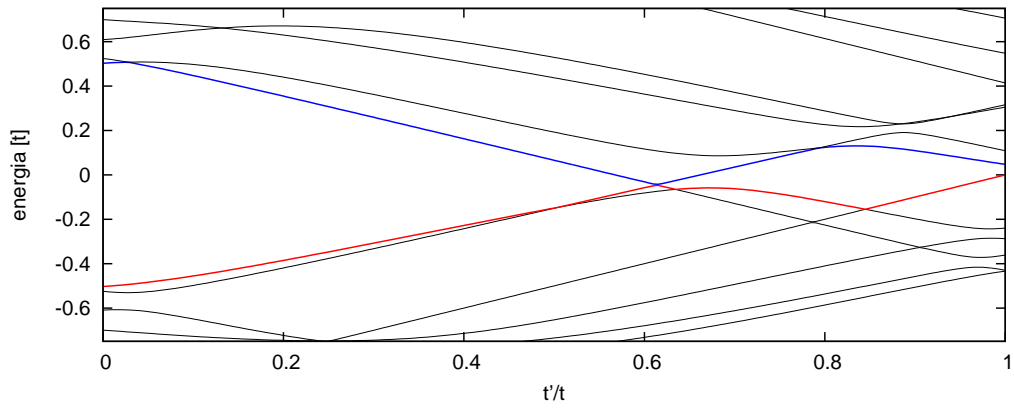
## 4.2 Vplyv amplitúdy preskoku medzi závitmi na vodivosť

Experimentálne sa často študuje diferenciálna vodivosť pri nulovom napätí

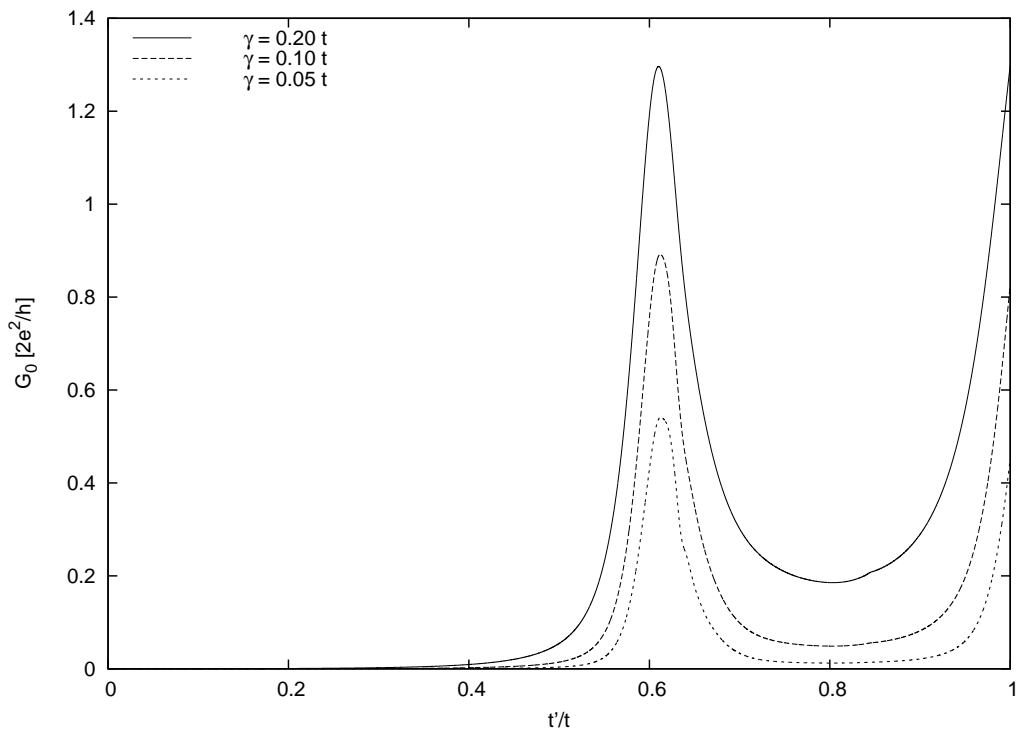
$$G_0 \equiv \left. \frac{dI}{dU} \right|_{U=0}. \quad (4.2)$$

Pre jej výpočet sme zvolili parametre  $U_{\max} = 0,03t/e$ ,  $U_{\text{step}} = 0,001t/e$ ,  $T_N = 100$ . Takto získané VA charakteristiky sme následne fitovali lineárnou závislosťou pomocou funkcie *fit* programu *gnuplot*. Táto funkcia interne používa Marquardt-Levenbergov algoritmus.

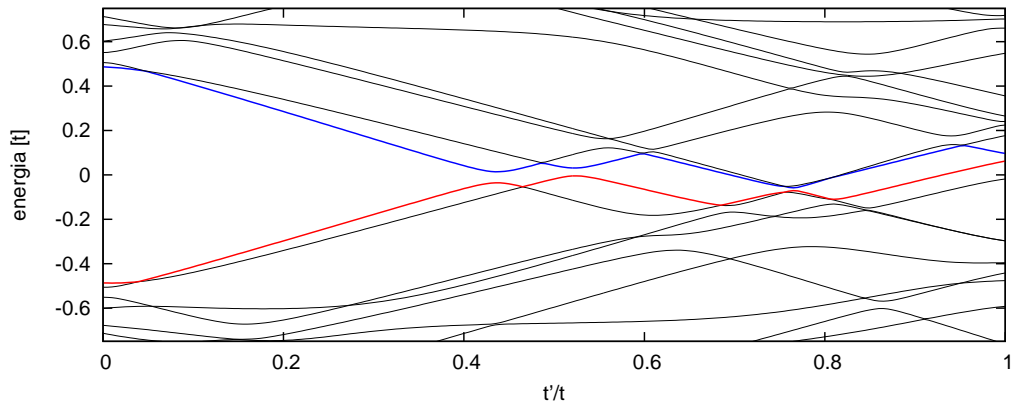
Pre  $N \geq 6$  má zmysel študovať závislosť diferenciálnej vodivosti na  $t'$ . Táto závislosť je pre vybrané hodnoty ostatných parametrov znázornená na obrázkoch 4.5 a 4.7. Píky v diferenciálnej vodivosti sú zrejme spôsobené zmenšením rozdielu  $E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ . Na obrázkoch 4.4 a 4.6 vidíme, že poloha píku naozaj zodpovedá minimu tohto rozdielu. Poloha píkov nie je ovplyvnená parametrom  $\gamma$ , čo je v súlade s použitým WBA priblížením – nulová hermitovská časť self-energie znamená, že prítomnosť vodičov neovplyvňuje polohu energetických hladín v molekule. Vplyv vodičov sa však, ako sme už diskutovali, prejavuje v rozšírení píkov prechodovej funkcie. Tomu zodpovedá aj rozšírenie píkov v diferenciálnej vodivosti.



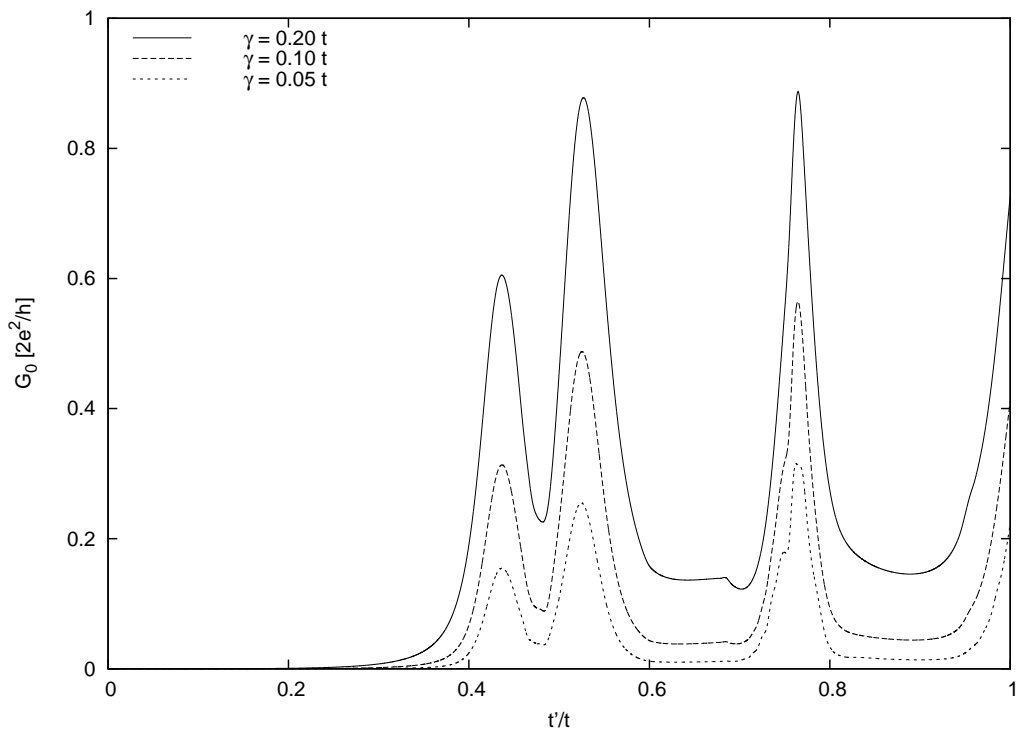
Obr. 4.4: Energetické hladiny helixu v závislosti na  $t'$  pre  $N = 10$ . Modrou farbou je vyznačená hladina  $E_{\text{LUMO}}$ , červenou farbou  $E_{\text{HOMO}}$ .



Obr. 4.5: Závislosť diferenciálnej vodivosti na  $t'$  pre  $N = 10$  a rôzne hodnoty  $\gamma$ .



Obr. 4.6: Energetické hladiny helicíny v závislosti na  $t'$  pre  $N = 14$ . Modrou farbou je vyznačená hladina  $E_{\text{LUMO}}$ , červenou farbou  $E_{\text{HOMO}}$ .



Obr. 4.7: Závislosť diferenciálnej vodivosti na  $t'$  pre  $N = 14$  a rôzne hodnoty  $\gamma$ .

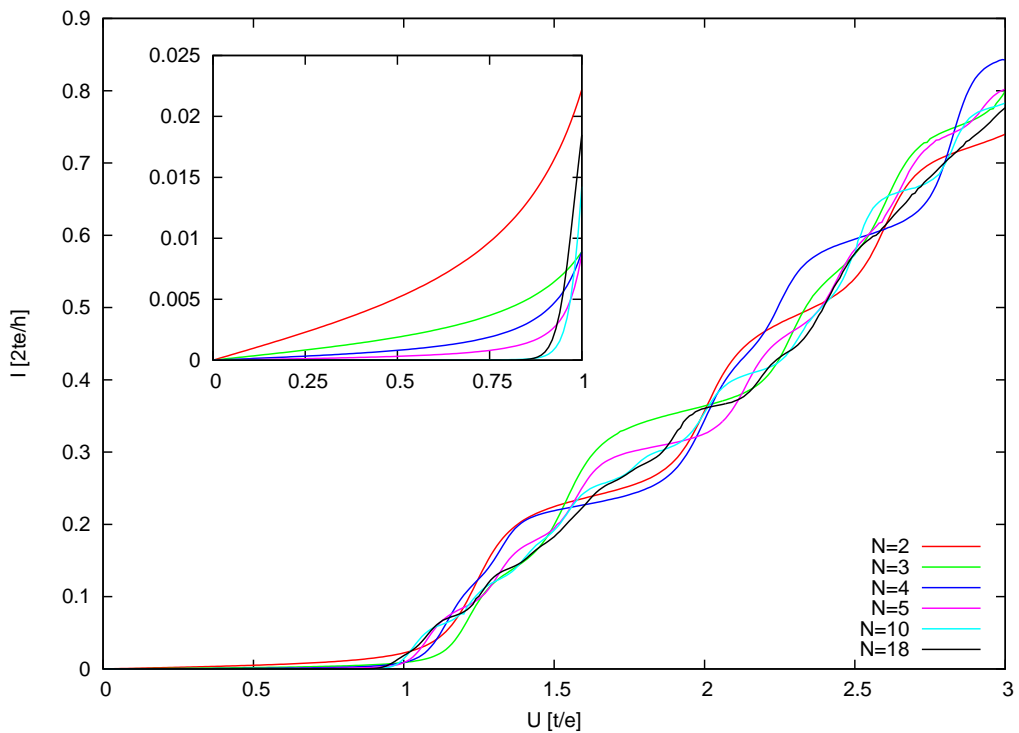
### 4.3 Závislosť výsledkov na dĺžke molekuly

Na obrázku 4.8 vidíme ukážku voltampérových charakteristík pre vybrané hodnoty  $N$  a  $t'/t = 0, \gamma = 0, 1t$ . Charakteristiky sú si podobné, ale odlišujú sa v detailoch skokov. To je pochopiteľné, pretože rôzne dlhé molekuly majú rôzne energetické hladiny. Zaujímavé je, že rozmer málo vodivej oblasti charakteristiky je pre všetky skúmané  $N$  približne rovnaký. Detailné charakteristiky pri nízkych napätiach naznačujú, že diferenciálna vodivosť s rastúcim  $N$  rýchlo klesá. Z obrázku 4.9 vidíme, že tento pokles je pre  $t'/t = 0$  exponenciálny.

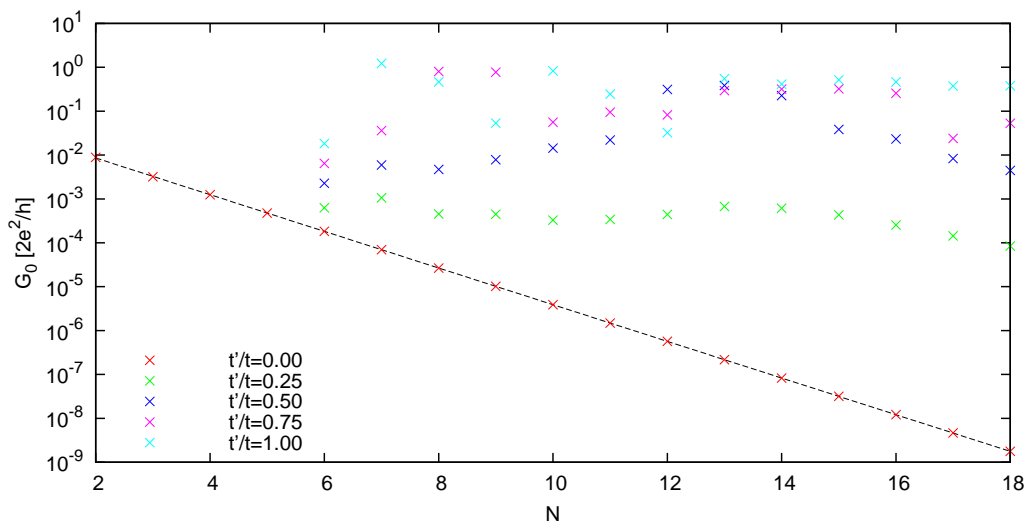
Tento výsledok sa dá pochopiť z analógie medzi molekulou a potenciálovou bariérou. Formánek [11] na strane 217 uvádza, že koeficient prieniku častice pravouhlou potenciálovou bariérou klesá exponenciálne so šírkou bariéry. V našom prípade šírka bariéry zodpovedá dĺžka molekuly, čiže počet segmentov helicénu. Ďalej vo vzťahu (2.23) vidíme súvis diferenciálnej vodivosti pri nulovom napätí a prechodovej funkcie, ktorá zodpovedá koeficientu prieniku. Rozdiel  $E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$  zase súvisí s výškou bariéry. Vedenie prúdu helicénom je teda v hrubých rysoch podobné prechodu častice pravouhlou potenciálovou bariérou.

Na obrázku 4.9 ďalej vidíme, že pre nenulový parameter  $t'$  a  $N \geq 6$  už exponenciálny pokles nenastáva. To je ale pochopiteľné, pretože nenulové  $t'$  modeluje vedenie prúdu v pozdĺžnom smere a tak efektívne znižuje šírku bariéry.





Obr. 4.8: Voltampérové charakteristiky pre vybrané  $N$  a  $t'/t = 0, \gamma = 0, 1t$ . Detail znázorňuje oblasť nízkych napätí.



Obr. 4.9: Závislosť diferenciálnej vodivosti na  $N$  pre vybrané hodnoty  $t'/t$  a  $\gamma = 0, 1t$ . Graf je v logaritmickej škále. Body grafu zodpovedajúce  $t'/t = 0$  sú preložené priamkou. Body pre  $N < 6$  splývajú.

# Kapitola 5

## Záver

Zhrnuli sme Landauerov formalizmus používaný pre popis vedenia prúdu molekulovým mostíkom. Podrobnejšie sme sa venovali odvodeniu prechodovej funkcie pomocou teórie rozptylu pre tesnoväzobné priblíženie. Na základe tohto teoretického aparátu sme vytvorili model a program pre numerický výpočet voltampérových charakteristík mostíku tvoreného molekulou helicénu.

Skúmali sme závislosť vypočítaných voltampérových charakteristík na parametroch modelu. Demonštrovali sme známu súvislosť medzi skokmi vo voltampérovej charakteristike a píkmami v prechodovej funkcii. Rozdiel medzi energiou najnižšieho neobsadeného a najvyššieho obsadeného molekulárneho orbitálu spôsobuje vo voltampérovej charakteristike pri malých napätiach oblasť nízkej vodivosti, ktorej veľkosť je priamo daná týmto rozdielom.

Študovali sme diferenciálnu vodivosť pri nulovom napätí v závislosti na rôznych parametroch. Ak neuvažujeme vedenie prúdu v pozdĺžnom smere, diferenciálna vodivosť exponenciálne klesá s dĺžkou helicénu, podobne ako koeficient prieniku elektrónu pravouhlou potenciálovou bariérou klesá s jej šírkou. Zistili sme, že diferenciálna vodivosť vykazuje píky v závislosti na parametri, ktorým modelujeme vedenie prúdu helicénom v pozdĺžnom smere. Súvislosť medzi týmto parametrom a natiahnutím molekuly helicénu by mohla byť z hľadiska molekulárnej elektroniky užitočná.

# Literatúra

- [1] Čížek, M.: *Molekulární elektronika a rezonanční elektronový rozptyl*, Čs. čas. fyz. **55** (2005), 164.
- [2] Stará, I. G., Starý, I., Kollárovič, A., Teplý, F., Šaman, D., Fiedler, P.: *Synthesis of Helicene Scaffolds via [2+2+2] Cycloisomerization of Aromatic Triynes*, Collect. Czech. Chem. Commun. **68** (2003), 917–930.
- [3] Datta, S.: *Quantum transport: atom to transistor*, Cambridge University Press, 2005.
- [4] Boykin, T. B., Klimeck G.: *The discretized Schrödinger equation and simple models for semiconductor quantum wells*, Eur. J. Phys. **25** (2004), 503–514.
- [5] Datta, S.: *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge University Press, 1995.
- [6] Ashcroft, N. W., Mermin, N. D.: *Solid state physics*, Saunders College, 1976.
- [7] Prachař, J.: *Model těsné vazby a jeho aplikace na molekulární elektroniku a transport v mezoskopických systémech*, Bakalárska práca na Matematicko-fyzikálnej fakulte Karlovej univerzity v Prahe, 2006.
- [8] Taylor, J. R.: *Scattering theory: the quantum theory on nonrelativistic collisions*, Wiley, 1972
- [9] Saito, R., Dresselhaus, G., Dresselhaus, M. S.: *Physical properties of carbon nanotubes*, World Scientific Publishing Company, 1998.
- [10] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, V. T., Flannery, B. P.: *Numerical recipes in Fortran 90: the art of parallel scientific computing*, Cambridge University Press, 1996.
- [11] Formánek, J.: *Úvod do kvantové teorie*, Academia, 2004