

Hauptseminar  
Elektronentransport in Nanostrukturen

# Molekulare Elektronik

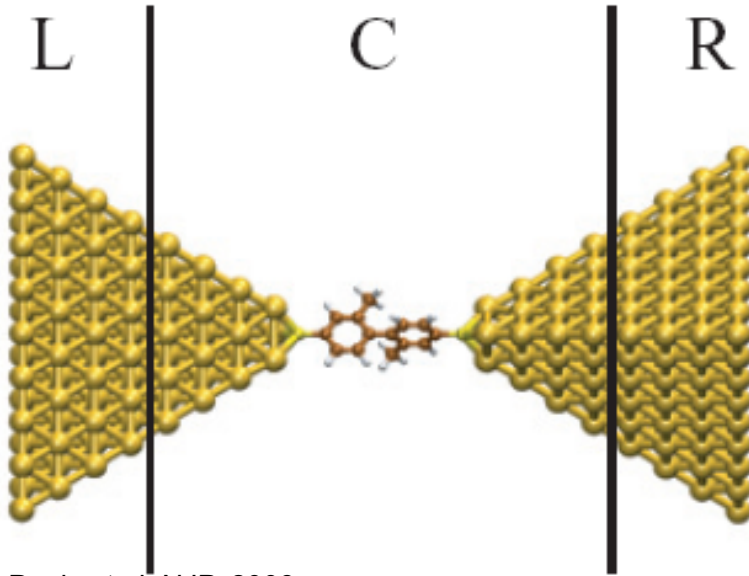
Melanie Stendel

27.01.2009

# Übersicht

1. Landauer-Formalismus
2. Analytisches Modell: homogener Draht
3. Experimentelle Techniken
4. Längenabhängiger Leitwert
  - a) Metallischer Draht
  - b) Moleküle: Alkane
5. Molekulare Elektronik
6. Theoretische Beschreibung

# 1. Landauer-Formalismus



Pauly et al, NJP, 2008

$$H = \begin{pmatrix} H_{LL} & H_{LC} & 0 \\ H_{CL} & H_{CC} & H_{CR} \\ 0 & H_{RC} & H_{RR} \end{pmatrix}$$

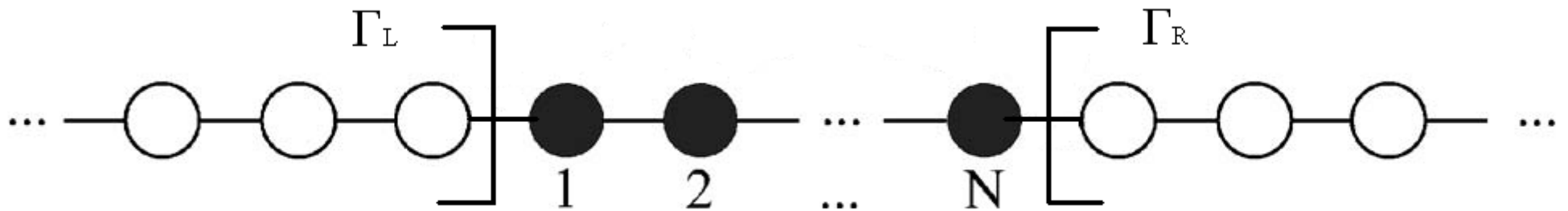
Der Leitwert für tiefe Temperaturen ist gegeben durch

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_F) = G_0 T(E_F)$$

mit der Transmission  $T(E) = \text{Tr}[\Gamma_L G_{CC}^r \Gamma_R G_{CC}^a]$

## 2. Analytisches Modell: homogener Draht

Molekülkette der Länge N



Hamiltonian

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon & -V & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -V & \epsilon & -V & & & \vdots \\ 0 & -V & \epsilon & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & -V & 0 \\ \vdots & & & & \epsilon & -V \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -V & \epsilon \end{pmatrix}$$

Streuraten  $\Gamma_L = \begin{pmatrix} \Gamma_L & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix}$  und  $\Gamma_R = \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \Gamma_R \end{pmatrix}$

Retardierte Green-Funktion  $G^r = \begin{pmatrix} G_{11}^r & G_{12}^r & \dots & G_{1N}^r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{N1}^r & G_{N2}^r & \dots & G_{NN}^r \end{pmatrix}$

Leitwert  $G = \frac{2e^2}{h} T(E_F) = G_0 T(E_F)$

wenn  $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma$

Transmission  $T(E) = \text{Tr}[\Gamma_L G^r \Gamma_R G^a] = \Gamma^2 |G_{1N}^r|^2$

Bestimmung von  $G_{1N}^r$  :  $(E^+ 1 - H - \Sigma_L - \Sigma_R) G^r = 1$

$$\Rightarrow G^r = [E^+ 1 - H - \Sigma_L - \Sigma_R]^{-1} = h^{-1}$$

$$h = \begin{pmatrix} E^+ - \epsilon - \Sigma_L & V & 0 & \dots & \dots & 0 \\ V & E^+ - \epsilon & V & & & \vdots \\ 0 & V & E^+ - \epsilon & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & V & 0 \\ \vdots & & & & E^+ - \epsilon & V \\ 0 & \dots & \dots & 0 & V & E^+ - \epsilon - \Sigma_R \end{pmatrix}$$

$$G_{1N}^r = (h^{-1})_{1N} = \frac{|h(1|N)|}{|h|}$$



$$|h(1|N)| = (-1)^{N+1} V^{N-1} \quad \text{und} \quad |h| = D_N - 2D_{N-1}\Sigma + D_{N-2}\Sigma^2$$

$$D_N = \begin{vmatrix} E^+ - \epsilon & V & 0 & \dots & \dots & 0 \\ V & E^+ - \epsilon & V & & & \vdots \\ 0 & V & E^+ - \epsilon & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & V & 0 \\ \vdots & & & & E^+ - \epsilon & V \\ 0 & \dots & \dots & 0 & V & E^+ - \epsilon \end{vmatrix} = |E^+ 1 - H|$$

$$= \frac{V^N}{2} \frac{1}{f(N, \alpha)}$$

$$f(N, \alpha) = \frac{\sqrt{\alpha^2 - 1}}{(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 1})^{N+1} - (\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 1})^{N+1}}$$

$$G_{1N}^r = (\hbar^{-1})_{1N} = \frac{|\hbar(1|N)|}{|\hbar|}$$

$$G_{1N}^r = (-1)^{N+1} \frac{2}{V} f(N, \alpha) \left[ 1 - \frac{2\Sigma f(N, \alpha)}{Vf(N-1, \alpha)} + \frac{\Sigma^2 f(N, \alpha)}{V^2 f(N-2, \alpha)} \right]^{-1}$$

Mit  $\Sigma = -i \frac{\Gamma}{2}$

$$G_{1N}^r = (-1)^{N+1} \frac{2}{V} f(N, \alpha) \left[ 1 + i \frac{\Gamma f(N, \alpha)}{Vf(N-1, \alpha)} - \frac{\Gamma^2 f(N, \alpha)}{4V^2 f(N-2, \alpha)} \right]^{-1}$$

Transmission  $T(E) = \Gamma^2 |G_{1N}^r|^2$

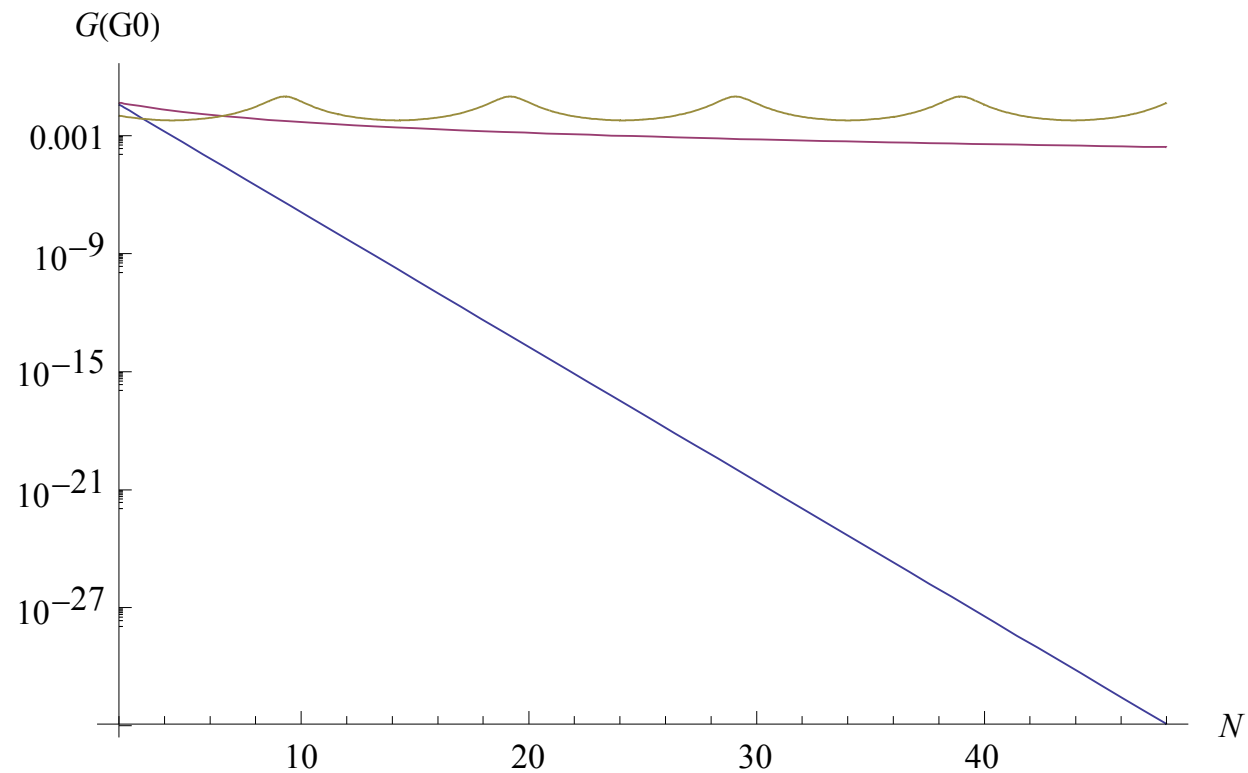
Leitwert  $G = G_0 T(E_F)$

Fallunterscheidung:

$|\alpha| > 1 \rightarrow$  exponentieller Abfall

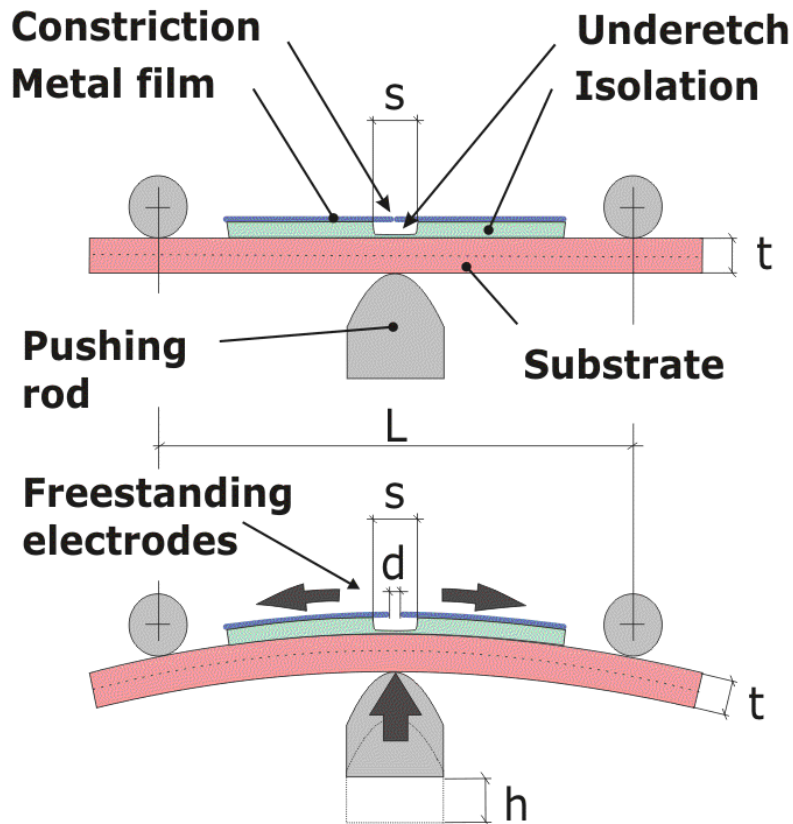
$|\alpha| < 1 \rightarrow$  oszillierendes Verhalten

$|\alpha| \approx 1 \rightarrow$  wie  $\frac{1}{N^2}$

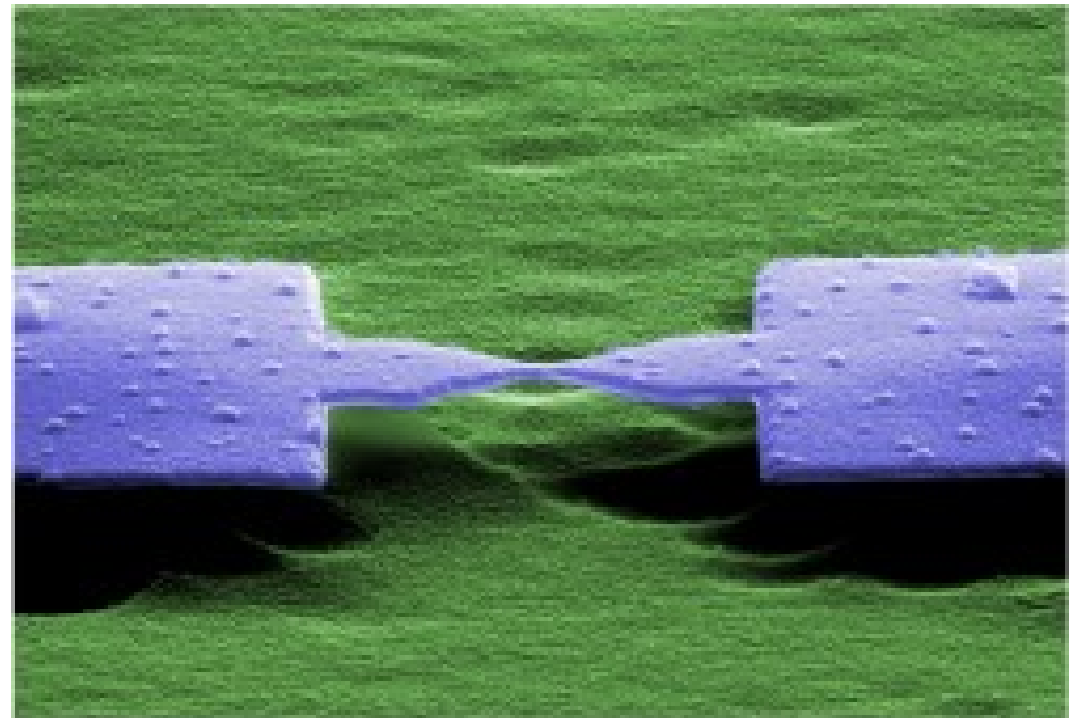
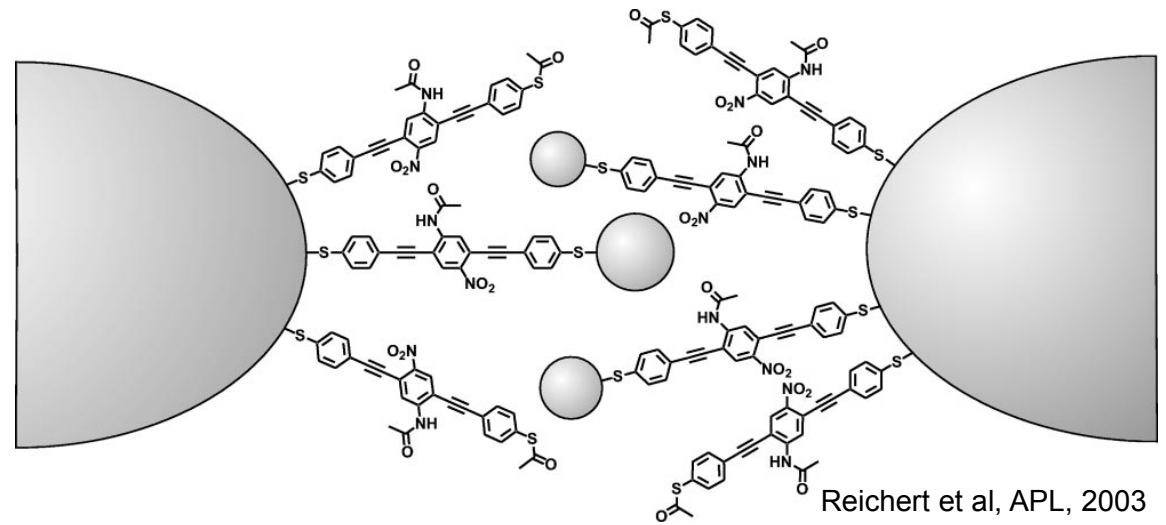


# 3. Experimentelle Techniken

## Bruchkontakte (MCBJ)



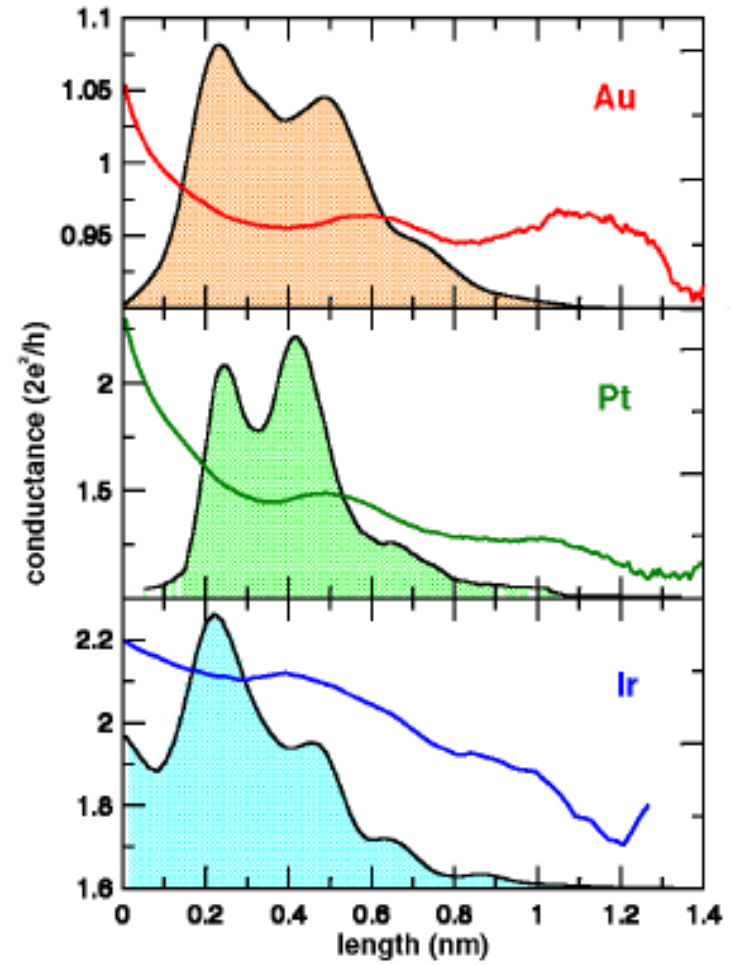
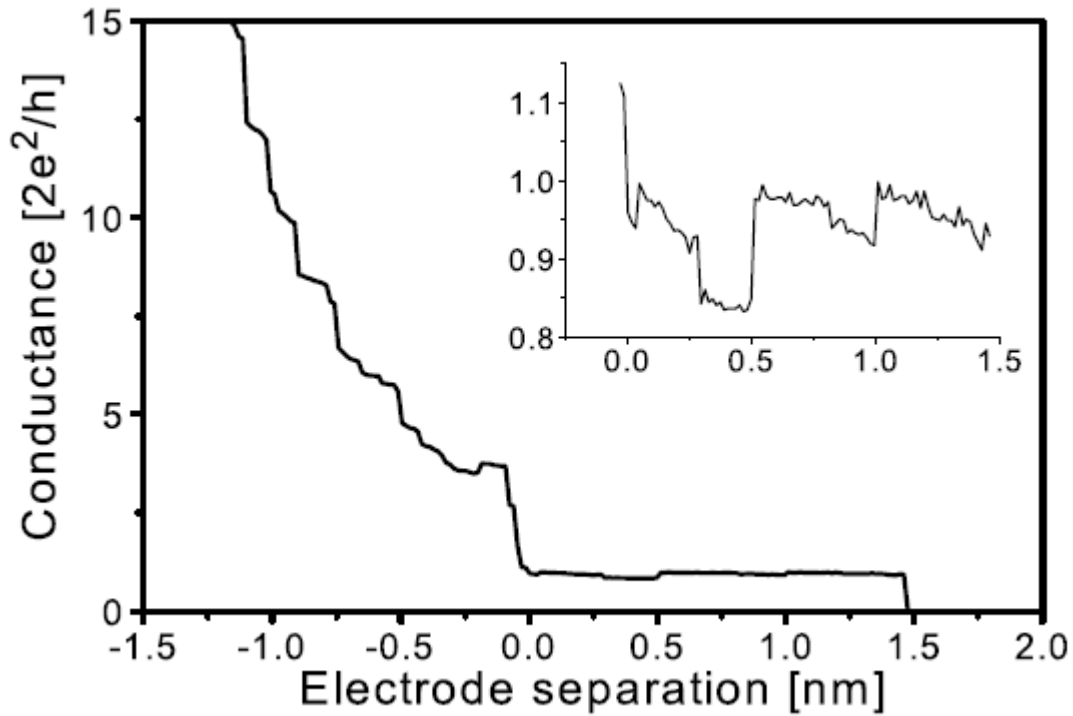
Zurich IBM



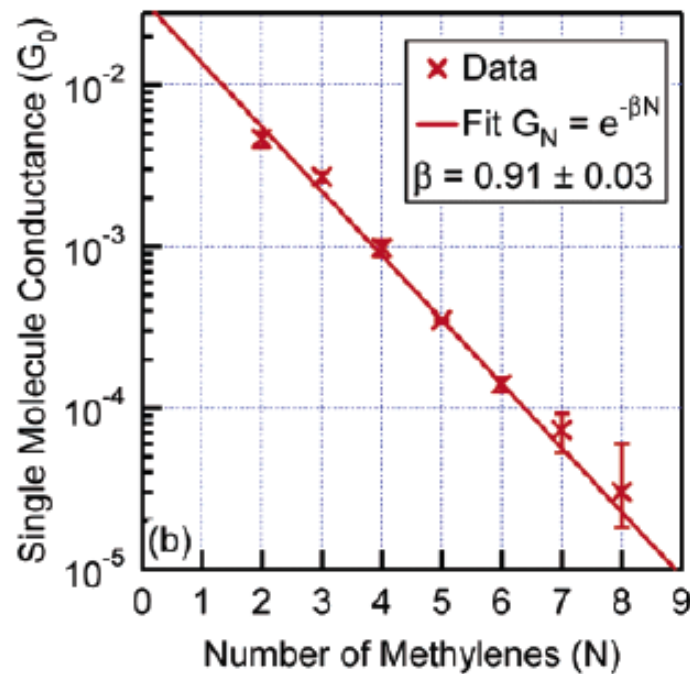
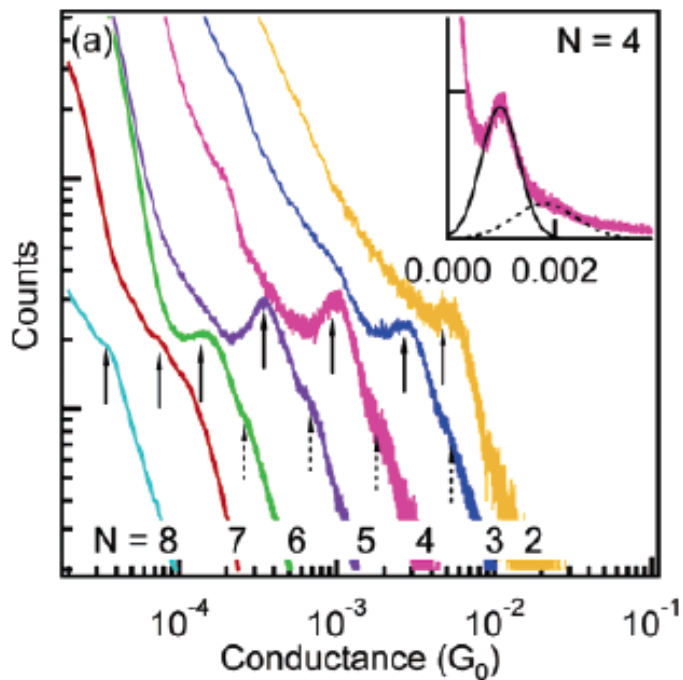
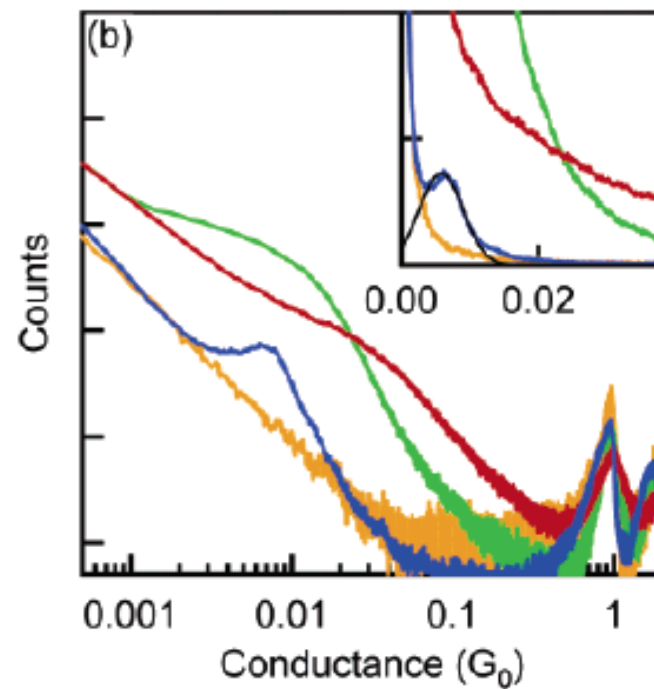
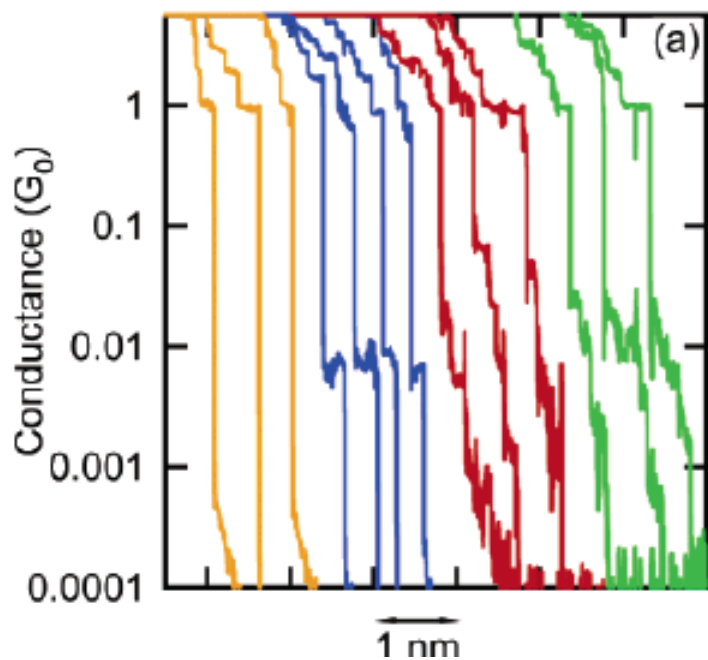
Uni Konstanz

# 4. Längenabhängiger Leitwert

a) Metallischer Draht  
(Paritätsoszillation)

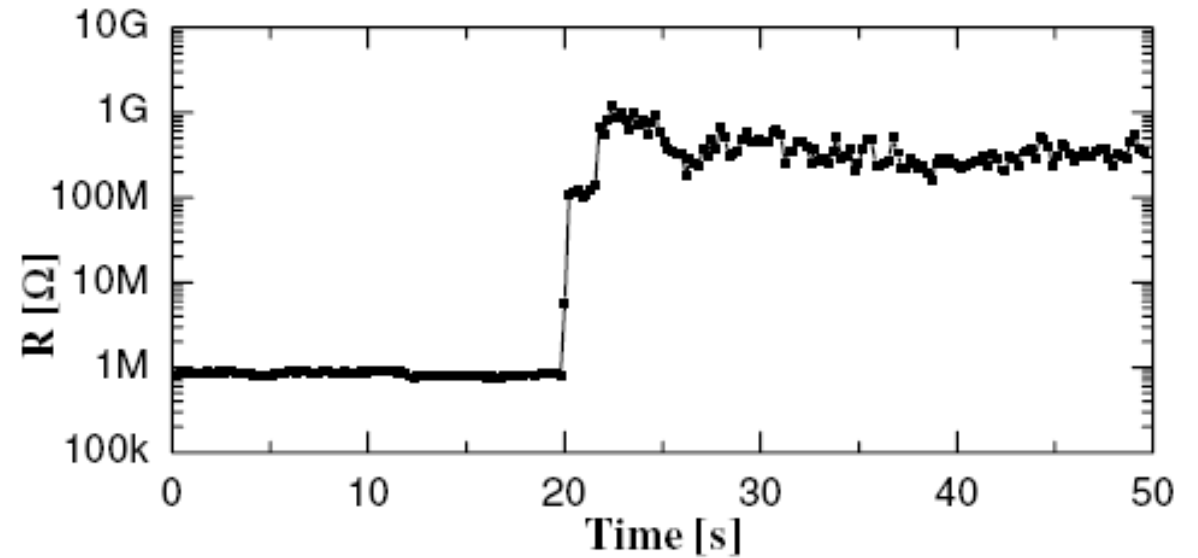


b) Moleküle: Alkane



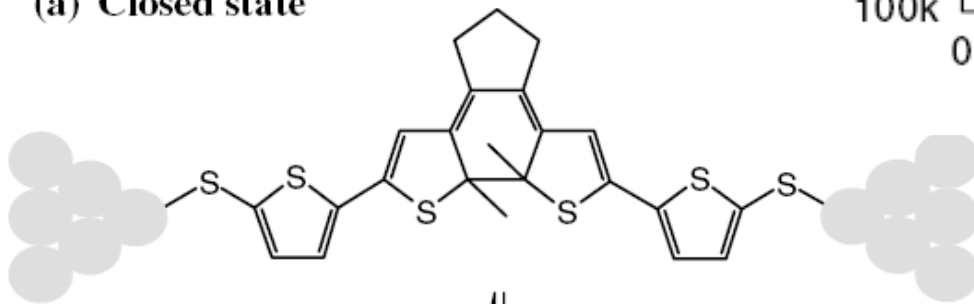
# 5. Molekulare Elektronik

## Optischer Schalter



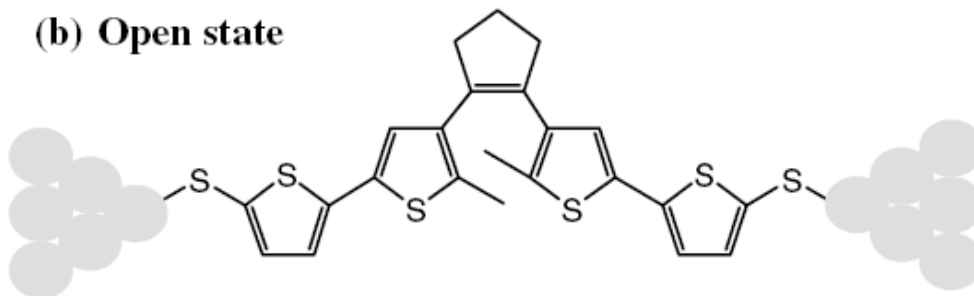
Dublic et al, PRL, 2003

(a) Closed state

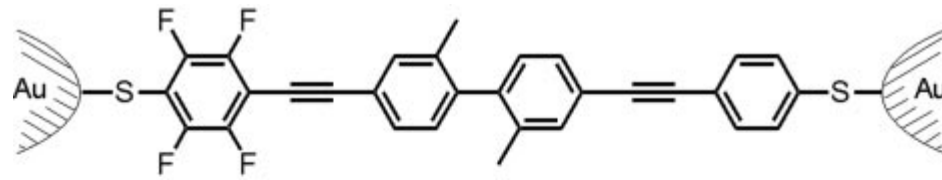


$300 \text{ nm} < \lambda_2 < 400 \text{ nm}$   $\rightleftharpoons$   $500 \text{ nm} < \lambda_1 < 700 \text{ nm}$

(b) Open state

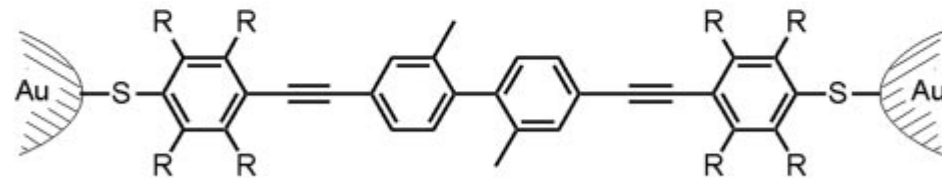


Ein solcher Schalter lässt sich nicht für jede Endgruppe reversibel realisieren.



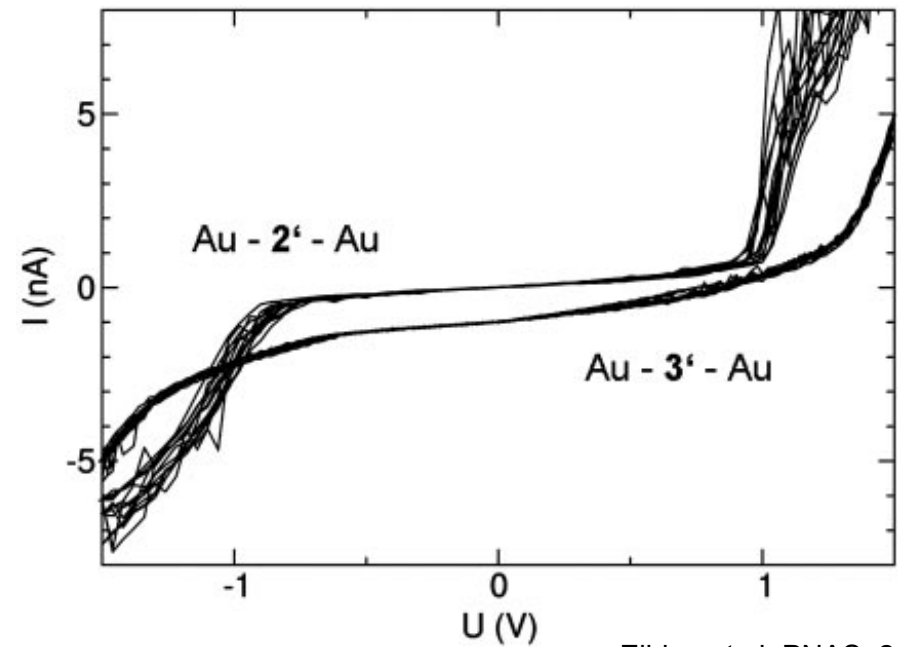
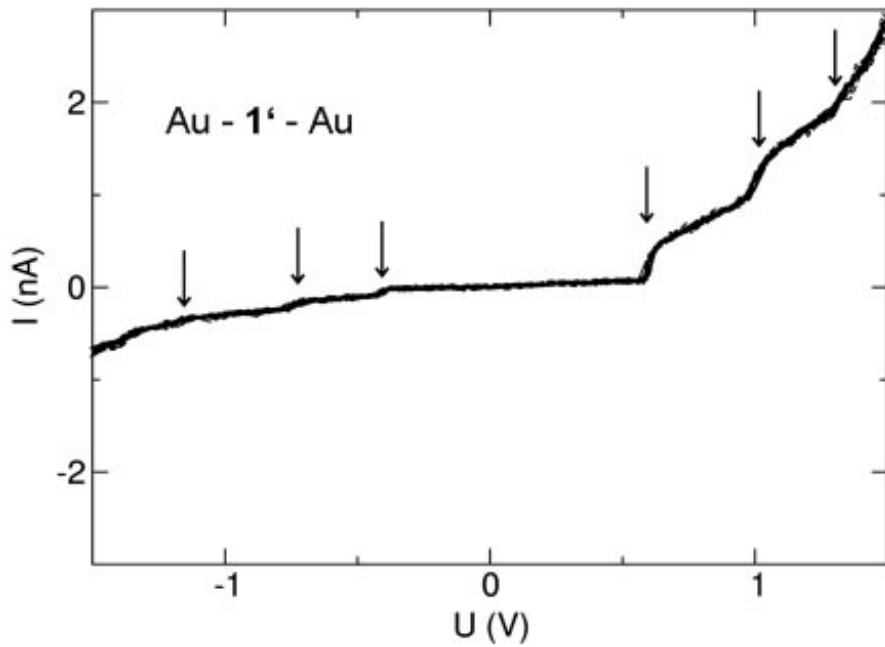
**1'**

## Diode

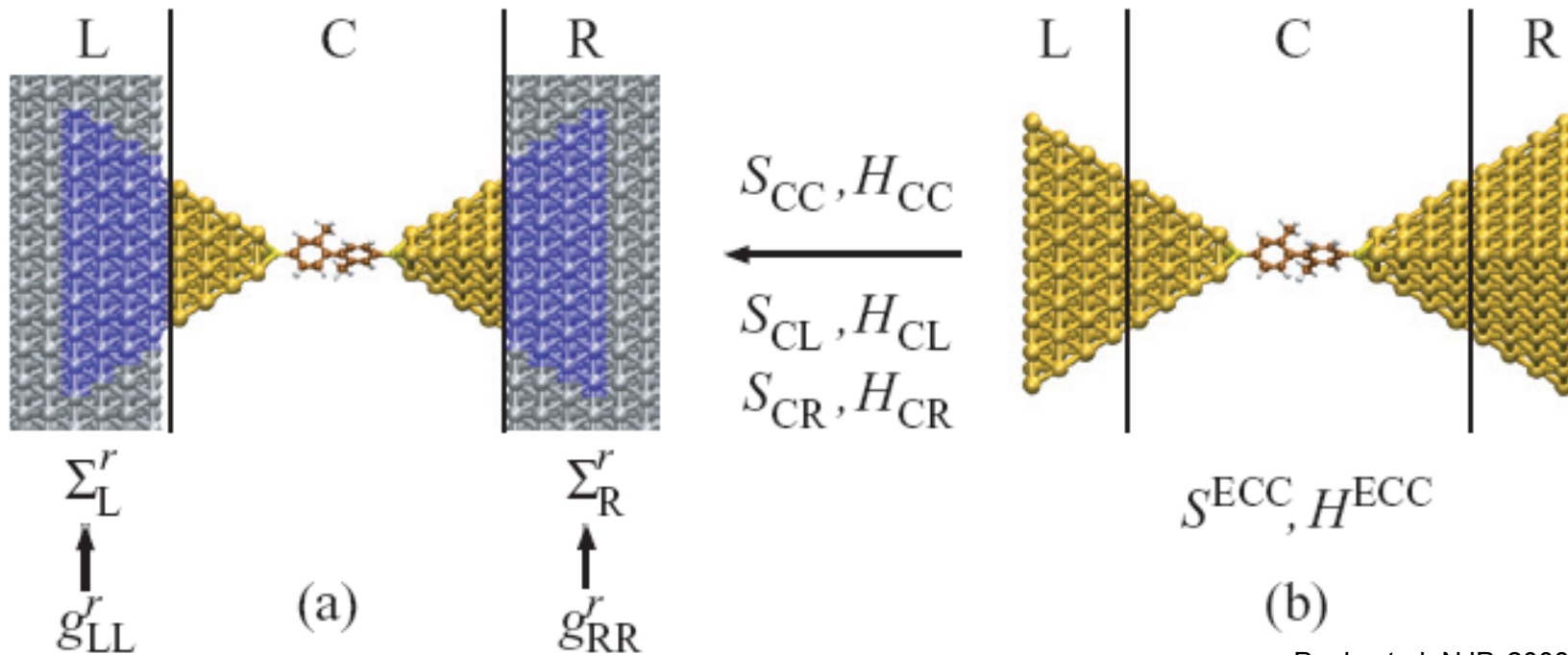


**2'** R = F

**3'** R = H

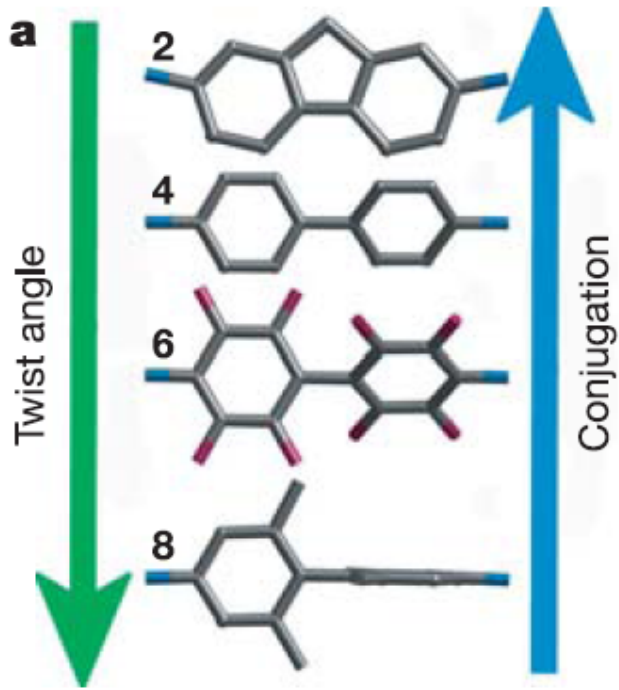


# 6. Theoretische Beschreibung

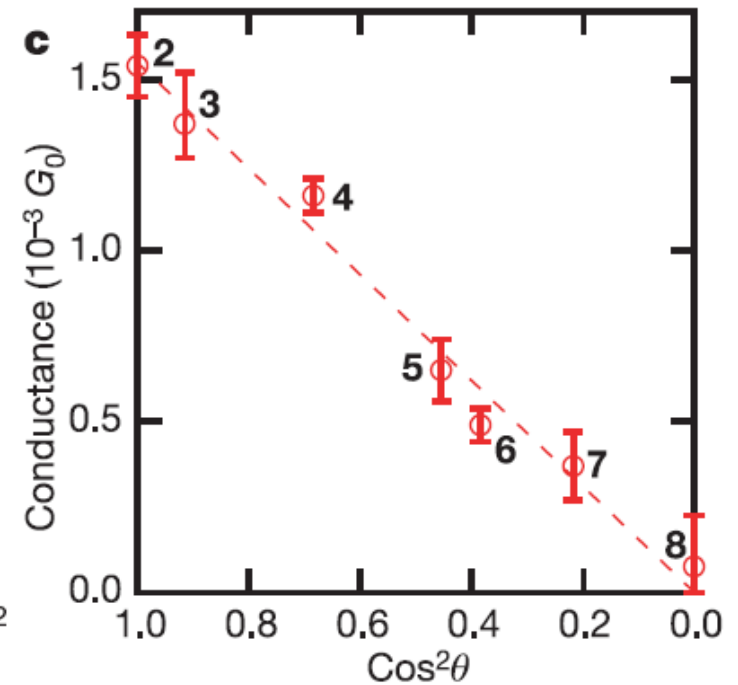
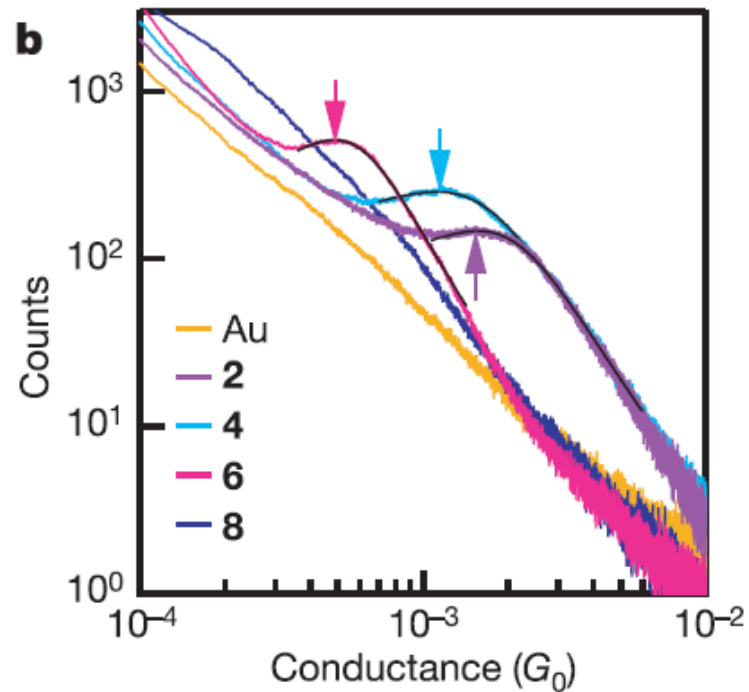


Pauly et al, NJP, 2008

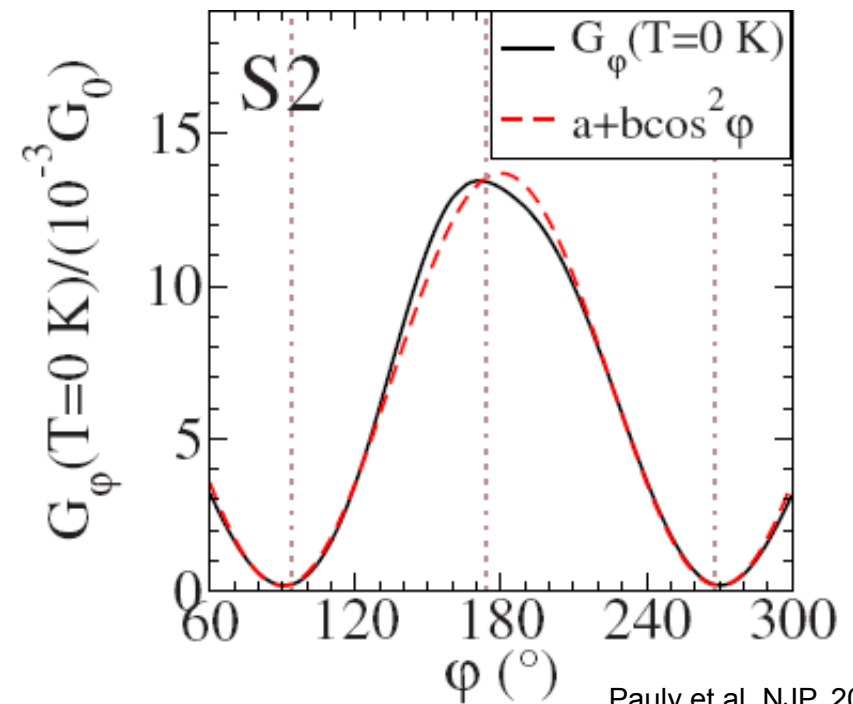
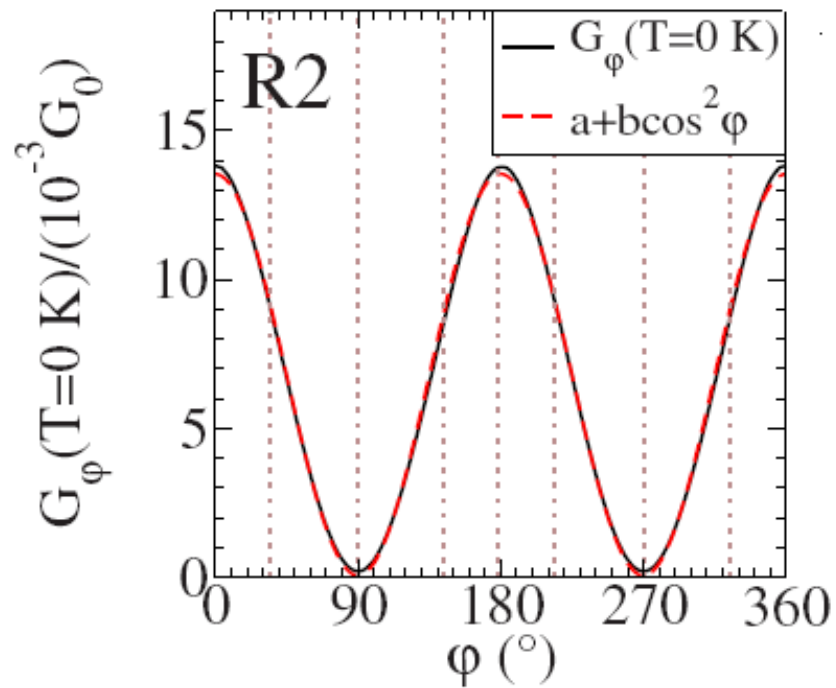
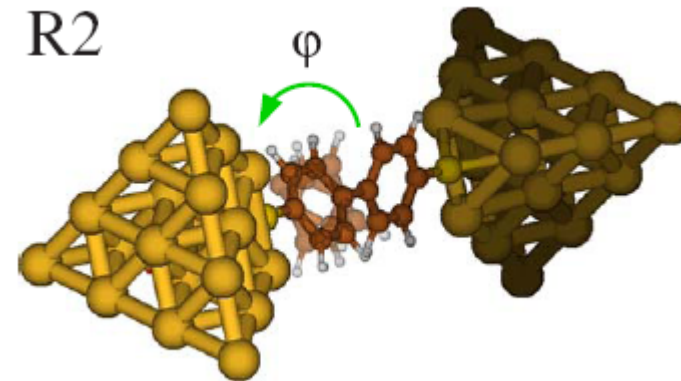
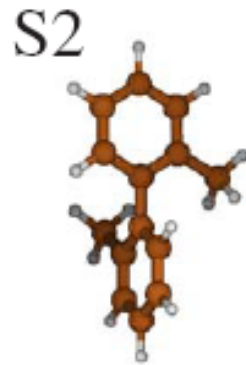
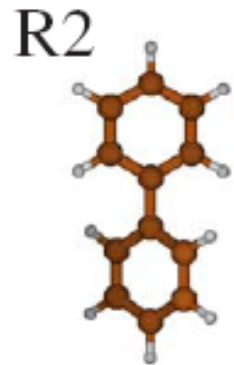
Ziel: Nichtperiodische, unendliche Systeme zu beschreiben.  
 Mit DFT ist der Transport ohne Systemparameter beschreibbar.



Experiment mit 7 verschiedenen Biphenyl-Molekülen mit gleicher Länge aber unterschiedlichen Winkeln zwischen  $0^\circ$  und  $90^\circ$ .



# Theoretische Beschreibung der Winkelabhängigkeit der Biphenyle mit DFT



# Zusammenfassung

- Längenabhängiger Leitwert für Metalle: Paritätsoszillation
- Längenabhängiger Leitwert für Moleküle (Alkane):  
exponentieller Abfall:  $G \sim e^{-\beta N}$
- Aus Molekülketten lassen sich logische Schalter realisieren.
- Unendlich ausgedehnte Systeme lassen sich mit DFT theoretisch beschreiben.
- Ein gewünschter Leitwert kann über die Wahl der Moleküle und Endgruppen realisiert werden.

**Vielen Dank für eure Aufmerksamkeit!**