

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Znaczenie urządzeń mikroelektronicznych we współczesnym świecie jest niekwestionowane, a ich wszechobecność jest głównie wynikiem ogromnego sukcesu w ich miniaturyzacji oraz masowej produkcji. Jednakże dalsze zmniejszanie rozmiarów komponentów elektronicznych tradycyjnej elektroniki półprzewodnikowej staje się coraz bardziej problematyczne z powodu fundamentalnych ograniczeń fizyki. Elektronika molekularna stanowi atrakcyjną alternatywę wobec obecnie stosowanych urządzeń elektronicznych, umożliwiając w szczególności kolejny postęp w ich miniaturyzacji. Wzrost zainteresowania zastosowaniem molekuł organicznych jako podstawowych elementów elektronicznych — takich jak przełączniki, diody, elementy pamięci czy tranzystory — rodzi potrzebę pełnego zrozumienia procesów zachodzących w złączach molekularnych. Interdyscyplinarne badania w tej dziedzinie są intensywnie rozwijane zarówno od strony doświadczalnej, jak i teoretycznej. Wciąż jednak szereg zjawisk związanych z transportem elektronowym przez organiczne elementy półprzewodnikowe wymaga lepszego poznania od strony teoretycznej. Z tego powodu zastosowanie adekwatnych metod teoretycznego opisu tych zjawisk jest kluczowe dla dalszego rozwoju elektroniki molekularnej.

Doświadczalne badania właściwości transportowych układów molekularnych są najczęściej prowadzone w temperaturze pokojowej przy zastosowaniu technik zbliżonych do skaningowej mikroskopii tunelowej. W trakcie pojedynczego pomiaru (a takich pomiarów wykonuje się dziesiątki tysięcy), geometria złącza ewoluuje wskutek drgań termicznych molekuly, podczas których nieustannie zmieniają się, w niekontrolowany sposób, długości wiązań w molekule, kąty między nimi czy też kontakt molekuly z elektrodami. Zmiana każdego z tych parametrów strukturalnych ma wpływ na charakterystyki elektryczne układu, a w konsekwencji też na przewodność całego złącza. Wynik pojedynczego pomiaru jest zatem uśredniony po wielu różnych konformacjach aktywnego elementu molekularnego, a właściwości transportowe złącza są dalej uśredniane po całej serii pomiarów. Z kolei badania teoretyczne transportu elektronowego w złączach molekularnych, wykorzystujące zaawansowane metody *ab-initio* fizyki fazy skondensowanej i chemii kwantowej, bazują na obliczeniach widm transmisyjnych dla ustalonej geometrii złącza, odpowiadającej zwykle stanowi podstawowemu układowi w temperaturze zera bezwzględnego. Taka metodologia nie pozwala zatem uwzględnić zmian właściwości transportowych złącza wywołanych temperaturą. Wspomniane rozbieżności między warunkami eksperymentalnymi i modelowymi, łącznie z ograniczeniami samych używanych metod teoretycznych, powodują zwykle znaczące różnice ilościowe w przewodnościach złączy wyznaczonych eksperymentalnie a wynikami symulacji komputerowych.

Celem naukowym naszego projektu jest urealnienie opisu teoretycznego poprzez opracowanie i wdrożenie nowej procedury uwzględniającej ewolucję struktury atomowej złącza molekularnego pod wpływem temperatury. Będzie to polegało na implementacji trzech komplementarnych metod w jedno spójne metodologicznie podejście. Metodą dynamiki molekularnej *ab-initio* przeprowadzone zostaną, dla wybranych temperatur układu, długoczasowe symulacje ewolucji strukturalnej złącza. Następnie metodami statystyki matematycznej i eksploracji danych przeanalizowane zostaną wszystkie osiągnięte w danej temperaturze konfiguracje złącza w taki sposób, by pogrupować je w tzw. skupienia o podobnych charakterystykach strukturalnych. Dzięki temu czasochłonne obliczenia właściwości transportowych wykonane zostaną tylko dla wybranych geometrii złącza, reprezentatywnych dla każdego skupienia, a następnie odpowiednio uśrednione po różnych konfiguracjach dla uzyskania makroskopowej, porównywalnej z doświadczeniem przewodności złącza. Wypracowana w ramach projektu metoda rachunkowa zostanie wdrożona, w celu weryfikacji jej poprawności i uniwersalności, dla złączy zbudowanych z najczęściej badanych doświadczalnie molekuł organicznych — uwzględnione zostaną m.in. alkany oraz bifenyle w różnych połączeniach i w obecności dodatkowych grup funkcyjnych — ale znajdzie zastosowanie do opisu szerszej klasy układów molekularnych.

Zastosowanie proponowanej metody zbliży modelowanie złączy molekularnych do warunków eksperymentu, co pozwoli otrzymać lepszą zgodność wyników obliczeń z danymi doświadczalnymi. Z kolei wiedza na temat tego, jakie parametry strukturalne molekuly mają największy wpływ na transport elektronowy układu, umożliwi skuteczniejsze otrzymywanie złączy, które posiadają nie tylko określone właściwości transportowe, ale również odpowiednio dużą stabilność termodynamiczną. Znajomość termicznej ewolucji geometrii złączy na poziomie atomowym pozwoli na pełniejsze zrozumienie związku pomiędzy architekturą złączy a ich właściwościami transportowymi. Podsumowując, projekt przyczyni się do rozwoju elektroniki molekularnej poprzez dostarczenie nowych narzędzi badawczych wspierających proces projektowania złączy molekularnych o pożądanym charakterystykach.