

Szybki postęp w miniaturyzacji urządzeń elektronicznych nieuchronnie przybliży obecną technologię do pewnej granicy, kiedy to manipulacja pojedynczymi molekułami, atomami czy też spinami będzie stanowiła podstawę przetwarzania i przechowywania informacji. Jakkolwiek odległa wydaje się to perspektywa, pełne zrozumienie fizyki w skali nanometrycznej z całą pewnością odegra tutaj kluczową rolę. Teoretyczne badania własności transportowych układów nanoskopowych, takich jak molekuly, kropki kwantowe czy też nanodrut, ze względu na silne korelacje elektronowe, nie są badaniami łatwymi, a stosowane metody są bardzo często oparte na szeregu przybliżeń. Sprawia to, że stosunkowo niewiele jest wyników, które można uznać za wzorcowe, i które da się bezpośrednio porównać z eksperymentem. Celem niniejszego projektu jest właśnie dostarczenie bardzo dokładnych rezultatów i nowych przewidywań dla problemów, które nie zostały dotąd przebadane. Jednym z takich otwartych problemów jest niewątpliwie ilościowe obliczenie charakterystyk transportowych nanostruktur w warunkach nierównowagowych oraz wyznaczenie dynamiki ze ścisłym uwzględnieniem oddziaływań. Do rozwiązania tego problemu w ramach projektu rozwinięte i zaadaptowane zostaną zaawansowane metody numeryczne w oparciu o techniki grupy renormalizacji, które będą następnie zastosowane do zbadania własności transportowych skorelowanych układów nanoskopowych, ze szczególnym uwzględnieniem zjawisk nierównowagowych oraz dynamicznych.

Rozpatrywane nanostruktury wykazują szereg zjawisk, nieobserwowanych w układach masywnych, a wynikających z kwantowej natury nośników i korelacji elektronowych. W odpowiednio niskich temperaturach, układy takie mogą wykazywać efekt Kondo, który objawia się uniwersalnym wzrostem przewodności układu. W przypadku, gdy molekula bądź kropka kwantowa jest dołączona do większej liczby niezależnych kanałów przewodnictwa, układ może wykazywać egzotyczne stany Kondo oraz kwantowe zjawiska krytyczne. W ramach projektu wyznaczone zostaną nierównowagowe charakterystyki transportowe układów molekularnych, obejmujących między innymi molekularne magnetyki oraz ich sztuczne odpowiedniki. Ponadto, dla układów molekul i kropek kwantowych zbadana zostanie nierównowagowa przewodność cieplna oraz współczynnik Seebecka, a także spinowy współczynnik Seebecka w przypadku złącz ferromagnetycznych. Kolejnym celem projektu jest przeprowadzenie analizy zależności czasowych transportu w przypadku zjawisk włączeniowych typu *quantum quench*. W tym kontekście wyznaczona zostanie czasowa zależność lokalnej gęstości stanów, co pozwoli przebadać powstawanie i ewolucję rezonansu Kondo. W pierwszym etapie badania takie zostaną przeprowadzone dla złącz molekularnych, a następnie analiza dynamiki transportu obejmie układy hybrydowe zawierające elektrody nadprzewodzące. Pozwoli to na określenie czasowej zależności konkurencji pomiędzy różnymi typami korelacji, obejmującymi parowanie elektronów, odbicie Andreeva oraz ekranowanie Kondo. Równie istotnym elementem projektu będzie przeprowadzenie analizy zależnego od czasu transportu dla złożonych układów nanoskopowych wykazujących egzotyczne stany Kondo, będące przykładami cieczy nielandauowskiej, oraz kwantowe zjawiska krytyczne.

Zagadnienia sformułowane w projekcie należą do nowatorskich trendów badań prowadzonych w ramach nanoelektroniki, spintroniki kwantowej, a także kwantowej kalorytroniki. Są to niewątpliwie dziedziny intensywnie rozwijane w wielu czołowych ośrodkach naukowych na świecie, nie tylko ze względu na fundamentalne zagadnienia natury czysto poznawczej, ale także w związku z możliwościami aplikacyjnymi chociażby w technologiach przechowywania i przetwarzania informacji, informatyce kwantowej, nanoelektronice, a także w kwantowej termoelektryce. W ramach projektu rozwinięte zostaną nowoczesne metody numeryczne do dokładnych obliczeń szeregu własności transportowych skorelowanych nanostruktur, takich jak molekuly i ich sztuczne odpowiedniki dołączone do zewnętrznych elektrod. Pozwoli to na uzyskanie wzorcowych rezultatów i przewidywań dotyczących dynamiki i nierównowagowo transportu przez układy nanoskopowe, które da się bezpośrednio porównać z eksperymentem. Można oczekiwać, że wyniki projektu z jednej strony przyczynią się do głębszego zrozumienia fizyki układów nanoskopowych, a z drugiej strony będą stymulowały dalsze badania eksperymentalne.