

Projekt zakłada badania nad własnościami dwuwymiarowych nanostruktur wytworzonych na bazie silicenu - krzemowego odpowiednika grafenu. W silicenie (w przeciwieństwie do grafenu) możliwe jest sterowanie uwięzieniem i spinowym stopniem swobody z wykorzystaniem zewnętrznych pól elektrycznych. Materiał charakteryzuje (nieobecna w grafenie) domieszka wiązania sp^3 do dominującego sp^2 , które pojawia się w związku z pionowym przesunięciem podsieci w ramach komórki elementarnej. Przesunięcie podsieci wprowadza oddziaływanie spin-orbita dla nośników, które podlega kontroli zewnętrznego pola i umożliwia generowanie prądów całkowicie spinowo spolaryzowanych. Ponadto, przesunięcie podsieci znosi ich równowagę, co umożliwia otwarcie przerwy energetycznej powyżej rozszczepienia spin-orbita i pozwala na uwięzienie elektrostatyczne nośników.

Prowadzone w ramach projektu badania teoretyczne obejmą zjawiska transportowe w układach otwartych (nanowstęgi, kontakty punktowe, wnęki rezonansowe, pierścienie). Do rozwiązania problemu użyjemy Hamiltonianu ciasnego wiązania, który pozwala na proste i realistyczne modelowanie oddziaływań, odkształceń powierzchni, modulowanego przestrzennie pola elektrycznego i niejednorodności pola magnetycznego. Wadą metody jest duży koszt obliczeniowy, związany z atomistycznym opisem próbek o rozmiarach rzędu mikrometrów. Zadania badawcze przewidziane do realizacji wykorzystają jednak serwer Prometheus (ACK Cyfronet AGH), jedną z najsilniejszych jednostek obliczeniowych na świecie umożliwiającą obliczenia masywno-równoległe. Do rozwiązania problemu rozproszeniowego użyta zostanie metoda kwantowej granicy przewodzącej - umożliwiająca efektywne rachunki z uwzględnieniem rozpraszania międzypasmowego oraz pól elektrycznych i magnetycznych o dowolnym rozkładzie przestrzennym z uwzględnieniem sprzężeń spinowo-dolinowo-orbitalnych.