

Rezumat pentru raport anual Program Nucleu (maxim 2 pagini format A4, Times New Roman 12, la un rand)

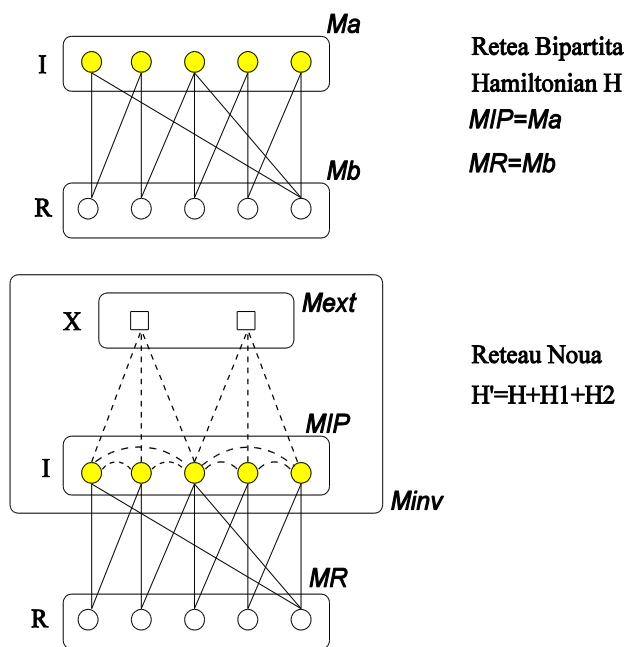
Titlu Faza: Studii spectrale si analiza fenomenelor de interferenta cuantica in sisteme bipartite.

Obiective: Studiul zerourilor functiilor Green si ale conductantelor electrice in retele de electroni si molecule.

Rezultate estimate initial: Dezvoltarea de metode pentru calcularea interferentelor distructive si ale zerourilor conductantei electrice in sisteme bipartite.

Rezultate obtinute: In lucrare am studiat existenta punctelor de interferenta si anulara conductantelor electrice la $E=0$ in retele care sunt descrise de Hamiltonieni fara interactie in aproximatia tight-binding. Sistemele studiate sunt molecule sau sisteme de doturi cuantice (molecule artificiale).

Metoda Punctelor de Interferenta



1. Mai întâi am definit punctele de interferenta M_{ip} la o energie data E in termenii elementelor de matrice ale functiei Green. Prin definitie existenta unui set de interferenta M_{ip} ne spune ca elementele de matrice ale functiei Green $G_{ij}(E) = 0$ la orice i, j din multimea M_{ip} . Exemplul de baza este acela al unei retele bipartite cu un Hamiltonian nesingular care are un set de puncte de interferenta la $E = 0$, care poate contine numai punctele uneia dintre cele doua subretele A sau B. In acest caz, propagarea unui electron cu energie zero intre doua puncte apartinand aceleiasi subretele, sau intoarcerea in punctul de pornire, se anuleaza din cauza termenilor de semn opus din dezvoltarea spectrala. Referindu-ne la transportul de electroni, cunoasterea unui set de puncte de interferenta ne ajuta sa identificam zerourile conductantei electrice cand firele de transport sunt

conectate la punctele din multimea M_{ip} si implicit ne ajuta sa aflam interferentele distructive din retea electronica. In acest fel prezentul studiu vine in completarea altor metode grafice existente folosite pentru a calcula zerourile conductantei electrice.

2. Cu ajutorul metodei prezentate putem construi noi molecule cu seturi cunoscute de puncte de interferenta. Vom porni de la un exemplu de baza al unui retele bipartite pentru care am ales un set de interferenta M_{ip} . Un lucru important, punctele ramase sunt numite puncte rigide R. Adaugam noi termeni care modifica retea initiala astfel incat nici o schimbare nu afecteaza nici unul dintre punctele rigide R. Vom obtine noi retele, care corespund unor noi molecule, care au acelasi set de puncte de interferenta M_{ip} .

3. Folosind metoda punctelor de interferenta, putem obtine seturile de interferenta si zerouri ale conductantelor pentru diferite retele si molecule. Aceeasi molecula poate avea mai multe seturi de interferenta cu diferite puncte de rigide cum este spre exemplu molecula de fulvena sau grafena. Zeroul unei conductante care provine dintr-un set dat M_{ip} ar putea fi modificat numai prin perturbarea punctele rigide. In acest fel suntem capabili sa intelegem zerourile conductantelor si proprietatile lor de invarianta pentru o anumita clasa de matrici simetrice.

Concluzii si perspective: Exista molecule (radialena, fulvena, molecule cu grafuri hexagonale sau retele precum grafena) pentru care toate zerourile conductantelor la $E = 0$ pote fi calculate folosind metoda punctele de interferenta (MPI) prezentata in aceasta lucrare. Dar exista si alte molecule (molecule biciclice, cum ar fi azulena) care au zerouri care nu pot fi obtinute cu MPI. Acest lucru poate fi studiat in viitor pentru a avansa in intelegerea interferentele distructive care apar in propagarea coerenta a electronilor prin molecule sau alte modele discrete.