

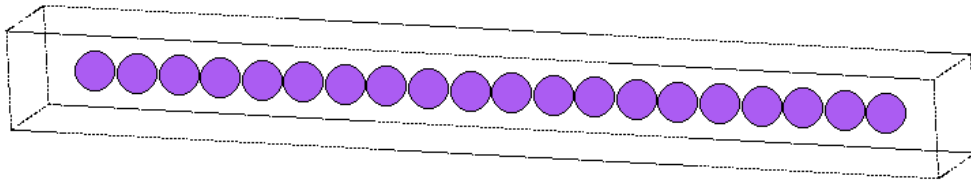
Προσομοίωση ενεργειακών επιπέδων σε νανοκαλώδιο

Γ. Βαϊλάκης*,
Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Φυσικής

Με την μεγάλη εξέλιξη της υπολογιστικής δύναμης, τις τελευταίες δεκαετίες, δίνεται η δυνατότητα εξερεύνησης ολοένα και πιο απαιτητικών υπολογιστικά προβλημάτων. Με τη βοήθεια προσομοιώσεων, εξετάζονται σταδιακά όλο και πιο περίπλοκα μοντέλα και παρέχεται μια καλύτερη σκοπιά σε κατευθύνσεις που δεν μπορούν να κινηθούν άλλες μη υπολογιστικές τεχνικές.

Σκοπός αυτής της παρουσίασης είναι να μελετήσουμε το απλούστερο μοντέλο ενός νανοκαλωδίου, αυτό μιας μονοατομικής γραμμικής αλυσίδας (βλ. Σχ. 1). Στην κατεύθυνση αυτής της μελέτης, χρησιμοποιείται το μοντέλο του μονοδιάστατου απειρόβαθου πηγαδιού (ή μονοδιάστατου «κουτιού») [1]. Τα άτομα της γραμμικής αλυσίδας συντελούν το μονοδιάστατο απειρόβαθο πηγάδι, εύρους ίσου με το μήκος της αλυσίδας, με τα ηλεκτρόνια σθένους των ατόμων να αποτελούν τα «σωματίδια» που περιορίζονται εντός του.

Η προσομοίωση αυτή γίνεται με την βοήθεια των πακέτων ASE (Atomic Simulation Environment) [2] και GPAW [3]. Οι ιδιοτιμές και οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας του νανοκαλωδίου συγκρίνονται με αυτές του απειρόβαθου πηγαδιού σε μια προσπάθεια κατανόησης τόσο των ομοιοτήτων όσο και των αποκλίσεων από το χρησιμοποιούμενο μοντέλο.



Σχήμα 1: Μια γραμμική αλυσίδα είκοσι ατόμων Νατρίου σχεδιασμένη με το ASE.

Βιβλιογραφία

- [1] Κεφ. 5, "Κβαντομηχανική Ι", Σ. Τραχανά, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (2011)
- [2] Technical University of Denmark, Department of Physics, 2017.
<https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>
- [3] Technical University of Denmark, Department of Physics, 2017.
<https://wiki.fysik.dtu.dk/gpaw/>
- [4] N. P. Dasgupta, J. Sun, Ch. Liu, S. Brittman, S. C. Andrews, J. Lim, H. Gao, R. Yan and P. Yang, 2014. 25th Anniversary Article: Semiconductor Nanowires – Synthesis, Characterization, and Applications. *Adv. Mater.*, 26, 2137–2184

* ph3946@edu.physics.uoc.gr