

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA
V BRATISLAVE

Fakulta elektrotechniky a informatiky

Ing. Miroslava Zemanová Diešková

Autoreferát dizertačnej práce

**ELEKTRÓNOVÁ ŠTRUKTÚRA A
TRANSPORTNÉ VLASTNOSTI
NANOKONTAKTOV**

na získanie akademického titulu

doktor (*philosophia doctor*, PhD.)

v doktorandskom štúdijskom programe

4.3.1. Fyzika kondenzovaných látok a akustika

Bratislava 2013

Dizertačná práca bola vypracovaná v dennej forme doktorandského štúdia na Ústave jadrového a fyzikálneho inžinierstva, Fakulta elektrotechniky a informatiky STU v Bratislave.

Predkladateľ: Ing. Miroslava Zemanová Diešková
Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Slovenská technická univerzita v Bratislave
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Školiteľ : doc. Ing. Peter Bokes, PhD.
Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Slovenská technická univerzita v Bratislave
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Oponenti: doc. Ing. Roman Martoňák, DrSc.
Katedra experimentálnej fyziky
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
Univerzita Komenského v Bratislave
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava 4

RNDr. René Derian, PhD.
Fyzikálny ústav SAV
Slovenská akadémia vied
Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava, SR

Autoreferát bol rozoslaný dňa: 28.1.2013

Obhajoba dizertačnej práce sa koná dňa 20.2.2013 o 13.00 hod. v miestnosti A616 na Ústave jadrového a fyzikálneho inžinierstva Fakulty elektrotechniky a informatiky STU v Bratislave, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava pred komisiou pre obhajobu dizertačnej práce v odbore doktorandského štúdia 4.3.1. Fyzika kondenzovaných látok a akustika.

doc. RNDr. Gabriel Juhás, PhD.
Dekan FEI STU Bratislava
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Abstract

Computational study from first principles of local electronic and transport properties of nanojunctions is performed. Firstly ultrathin interfaces based on Al/ AlO_x are investigated. Two independent *ab initio* methods are used to obtain conductance of different widths of Al/ AlO_x /Al tunnel junctions. Reliability of analytical model of interface is analyzed. Secondly the gold/dithioazobenzene/gold molecular junction is studied. Main focus is concerned on conductance of the dithioazobenzene opto-mechanical switch in the two stable *cis* and *trans* junction conformations. In contradiction of previous theoretical results it is found the conductance of both conformations to be broadly similar, therefore the nano-device is not suitable for molecular switch based on conductance change.

Obsah

1	Úvod	5
2	Použité metódy	7
2.1	Modelovanie pomocou teórie hustotového funkcionálu	7
2.2	Výpočet transportných vlastností pomocou maximálne lokali- zovaných Wannierovych funkcií	8
2.3	Výpočet transportných vlastností pomocou metódy rozptylo- vej matice	9
2.4	Tunelovanie cez potenciálovú bariéru	11
3	Súhrn výsledkov	12
3.1	Ultratenké rozhrania na báze Al/AlO _x /Al	12
3.2	Molekulové spoje na báze azobenzén-zlato	17

Ciele dizertačnej práce

Cieľom práce je simulácia transportu elektrónov cez niekoľko konkrétnych nanokontaktov pomocou metodiky *ab initio*. Metodika takýchto simulácií je založená na kombinácii metód funkcionálu hustoty s následným výpočtom vhodných Wannierových funkcií umožňujúcich použitie Landauerovho vzťahu pre vodivosť nanokontaktov.

Predmetom výskumnej práce sú dve skupiny nanokontaktov:

1. ultratenké rozhranie Al/AlO_x/Al, štúdium jeho atomárnej a elektrónovej štruktúry a analýza kvality modelovania I-V charakteristík takéhoto rozhrania pomocou zjednodušených kvázi 1D modelov,
2. elektrónový transport cez *cis* a *trans* konformáciu molekúl diaminbenzénu (DAB) uchytených medzi zlatými elektródami a posúdenie možností využitia nanospoja ako elektronického spínaču.

1 Úvod

V posledných desiatich rokoch sa zvýšil záujem o elektronické prvky na úrovni atómov a molekúl, s čím súvisí aj skúmanie a predpovedanie ich transportných vlastností. Transport zohráva hlavnú rolu vo funkčnosti všetkých elektronických prvkov, avšak v prípade štruktúr, ktorých rozmery v smere transportu sú úmerné niekoľkým nanometrom, si už nevystačíme s klasickou teóriou transportu, ale na rad prichádza kvantová teória elektrónového transportu. V tomto smere zohral významnú rolu Landauerov prístup k tejto problematike. Landauerova formula predstavuje fundamentálny výsledok v teórii elektronického transportu, ktorá hovorí o tom, že pri nulovej teplote vodivosť G v priblížení neinteragujúcich elektrónov závisí od rozptylových vlastností tejto oblasti [1]. Inými slovami, vodivosť G je priamo úmerná kvantovo mechanickej pravdepodobnosti tunelovania elektrónov s Fermiho energiou cez uvažovanú oblasť, ktorú nazývame taktiež transmisnou funkciou $\mathcal{T}(E_F)$,

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathcal{T}(E_F). \quad (1)$$

Energia E_F zodpovedá Fermiho energii, teda energii najvyššie obsadených stavov v oblasti.

Ultratenké rozhrania tvoria súčasť mnohých elektronických prvkov ako sú Josephsonove spoje, GMR senzory či tranzistory. Na to, aby bolo možné určiť ich transportné vlastnosti, je nutné na začiatku definovať tieto rozhrania z pohľadu geometrického usporiadania. Jednou z možností je využiť už

spomínané *ab initio* simulácie na porovnanie s doterajšími experimentami. Transportné vlastnosti možno určiť z prvých princípov v kombinácii s Landauerovým formalizmom, ale taktiež metódami, pri ktorých používame rôzne priblíženia.

Elektronické prvky pozostávajúce z jednej molekuly sa považujú za sľubného nástupcu polovodičovej elektroniky. Reprezentatívnym príkladom takéhoto elektronického prvku je organická molekula premostujúca zlaté hroty, na ktoré je ukotvená tiolátovými väzbami (t.j. síra-zlato). Na základe dobrej predikcie správania sa takýchto molekulových spojov možno realizovať funkčné elektronické prvky ako napríklad molekulárne spínače. Ich funkčnosť je podmienená existenciou diametrálne odlišných vlastností molekuly v rôznych stavoch. Ako sľubný kandidát sa javí fotosenzitívna molekula azobenzénu (AB, $C_{12}H_{10}N_2$), ktorá má v základnom stave dve stabilné konformácie - *cis* a *trans*. Vďaka veľmi odlišnému priestorovému usporiadaniu dvoch izomérov, ktoré sa dajú optomechanicky spínať z jednej konformácie na druhú, je predpoklad, že aj ich transportné vlastnosti sa budú veľmi líšiť. Niektoré doterajšie práce [3][4] uvádzajú rozdiel vo vodivosti až dva rády, čo by z tejto molekuly robilo dokonalý molekulárny spínač.

Prvá časť práce je venovaná ultratenkým rozhraniám na báze Al/AlO_x . Venuje sa skúmaniu základného stavu pomocou teória hustotového funkcionálu (DFT) [2] niekoľkých možných geometrií rozhrania $Al/AlO_x/Al$, ktoré bolo motivované faktom, že v prípade AlO_x je problém dosiahnuť usporiadané ultratenké rozhrania pri ich technologickom raste, čo spôsobuje veľkú variabilitu hrúbok takýchto štruktúr. Taktiež boli identifikované stavebné jednotky oxidu, ktoré tvoria dva základné typy nami určených rozhraní, tzv. *antisymetrické* a *symetrické* [5]. Taktiež sa zaoberá výpočtom transportných vlastností pomocou maximálne lokalizovaných Wannierových funkcií a metódy rozptylovej matice v báze rovinných vĺn, ktoré sú porovnané s predikciou vodivosti pomocou modelu potenciálovej bariéry. Overili sme relevantnosť modelu pre rôzne hrúbky *antisymetrického* rozhrania. Ukázalo sa, že uvažovaním efektívnej hmotnosti v oxide a menších hrúbok efektívnej bariéry v rámci modelu, dostávame veľmi dobrú zhodu s *ab initio* vodivosťami. Taktiež bola určená teplotná závislosť vodivosti, kde sme dospeli k záveru, že efekt teploty na vodivosť je zanedbateľný pri rôznych typoch $Al/AlO_x/Al$ tunelových spojov.

Druhá časť práce sa zaoberá molekulárnymi spojmi na báze azobenzénu (DAB), kontaktovaných medzi zlaté elektródy. Na určovanie transportných vlastností sme chceli využiť predošlé skúsenosti, ktoré sme získali pri výpočtoch na ultratenkých rozhraniach pomocou už spomínanej metódy založenej na báze maximálne lokalizovaných Wannierových funkcií, kde elektródy obsahovali len objemový hliník. Avšak v prípade reálnych elektród, tvorených

objemovým zlatom a hrotmi, ktoré sú tvorené množstvom povrchových atómov, je určenie počiatočných polôh Wannierových centier oveľa komplikovanejšie a časovo veľmi náročné. Preto veľká časť práce bola venovaná práve hľadaniu modelových elektród. Prvou bola 1D zlatá retiazka a ďalšou zlatý drôtik. Tie však zle vystihovali objemový charakter elektród, preto sme zvolili na transportný výpočet inú metódu, založenú na riešení rozptylovej matice v báze rovinných vln. To nám umožnilo počítať transport na realistických elektródach. Kvalitu transportného výpočtu tejto novej metódy sme overili na systéme Al/AlO_x/Al. Následne boli spočítané vodivosti *cis* a *trans* konformácie, ktoré však boli v rozpore s doterajšími uverejnenými výsledkami, vodivosti oboch izomérov sa rádovo nelíšia a ani pridaním metylénovej skupiny medzi hrot a molekuly DAB sa tento fakt nemení. Preto je vylúčené využitie tejto molekuly ako spínača založeného na rozdieli vodivosti.

2 Použité metódy

2.1 Modelovanie pomocou teórie hustotového funkcionálu

Teória hustotového funkcionálu (DFT) vychádza z predpokladu, že všetky vlastnosti systému sú jednoznačne určené hustotou elektrónov v základnom stave $n_0(\mathbf{r})$, ktorá minimalizuje *funkcionál* energie $E[n]$. Ďalším krokom je Kohn-Shamova konštrukcia, ktorá hovorí, že môžeme nájsť takú elektrónovú hustotu základného stavu neinteragujúcich častíc, ktorá odpovedá elektrónovej hustote základného stavu nášeho mnohočasticového interagujúceho systému [14], pričom všetky mnohočasticové efekty sú zahrnuté vo *výmennokorelačnom funkcionáli hustoty*. Potom základný stav a energia interagujúceho systému je určená s presnosťou na aproximáciu *výmennokorelačného funkcionálu* $E_{XC}[n]$. Pri modelovaní sa zostavia Kohn-Shamove rovnice (2)¹[7], ktoré predstavujú súbor navzájom zviazaných nelineárnych rovníc.

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + v_{KS}[n](\mathbf{r}) \right] \varphi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}). \quad (2)$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i^{OCC} |\varphi(\mathbf{r})|^2. \quad (3)$$

Potenciál $v_{KS}[n]$, tzv Kohn-Shamov potenciál, je tvorený vonkajším potenciálom v_{ext} (napr. pôsobenie jadier), klasickým Hartreeho potenciálom

¹V rovniciach sú uvážené atómové jednotky, tj $\hbar = m_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1$

$v_{Hartree}[n]$ a výmenno-korelačným potenciálom $v_{XC}[n]$, ktorý je definovaný ako funkcionálna derivácia výmenno-korelačnej energie E_{XC} (4) .

$$v_{XC}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{XC}}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (4)$$

Riešenie sa hľadá selfkonzistentne pomocou iterácií, pričom sa vyčísluje elektrónová hustota, ktorá je daná pomocou Kohn-Shamových vlnových funkcií (3). Po dosiahnutí podmienky konvergenzie (napr. v prípade energie, keď je rozdiel energií daného a predchádzajúceho kroku menší ako hodnota energie konvergenčného kritéria) sa selfkonzistentný cyklus zastaví a vyčíslí sa celková energia (5)

$$E_{tot} = \sum_i^{OCC} \epsilon_i - \int d^3r \left[\frac{1}{2} v_{Hartree}(\mathbf{r}) + v_{XC}(\mathbf{r}) \right] n(\mathbf{r}) + E_{XC}. \quad (5)$$

2.2 Výpočet transportných vlastností pomocou maximálne lokalizovaných Wannierových funkcií

Vodivosť (1) sa dá vypočítať, ak poznáme Greenove funkcie. Transmisnú funkciu môžeme vyjadriť pomocou Greenových funkcií centrálnej oblasti a pomocou väzieb medzi centrálnou oblasťou a elektródami Γ_L a Γ_R , teda

$$\mathcal{T}(\omega) = Tr[\Gamma_L \mathbf{G}_C^r \Gamma_R \mathbf{G}_C^a]. \quad (6)$$

$\mathbf{G}_C^{\{r,a\}}$ sú retardované a advansované Greenove funkcie centrálnej oblasti.

Jej výpočet závisí od elektrónových stavov vyjadrených pomocou reprezentácie lokalizovaných orbitálov v priamom priestore. Blochove orbitály, ktoré sú delokalizované, sa musia pretransformovať na lokalizované funkcie tak, aby sa vytvorila riedka matica Hamiltoniánu. Jednou z možností, ktorá je zároveň veľmi prirodzená, je použiť bázu maximálne lokalizovaných Wannierových funkcií (WF)[18], pretože táto báza pokrýva rovnaký Hilbertov priestor ako vlastné funkcie Hamiltoniánu, čo zároveň umožňuje premostiť elektrónovú štruktúru získanú riešením rozptylového problému v báze rovinových vln a výpočet Greenovej funkcie pre prípad koherentného transportu.

Vo všeobecnosti môže unitárna transformácia miešať rôzne pásy. Najvšeobecnejšou operáciou, ktorá transformuje Blochove orbitály $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ na WF je operácia daná vzťahom

$$|\mathbf{R}n\rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \sum_{m=1}^N U_{mn}^{(\mathbf{k})} |\Psi_{n\mathbf{k}}\rangle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{k}, \quad (7)$$

kde $U_{mn}^{(\mathbf{k})}$ je unitárna transformácia s dimenziou N .

V našom prípade nás zaujímajú transformácie blochových vlastných stavov na WF s čo najmenšou priestorovou distribúciou, t.j. treba vytvoriť maximálne lokalizované WF podľa algoritmu, ktorý navrhli Marzari a Vanderbilt [18]. Definuje sa operátor šírky Ω ako lokalizačné kritérium

$$\Omega = \sum_n \left[\langle \mathbf{0}n | r^2 | \mathbf{0}n \rangle - \langle \mathbf{0}n | \mathbf{r} | \mathbf{0}n \rangle^2 \right] = \sum_n \left[\langle r^2 \rangle_n - \langle \mathbf{r} \rangle_n^2 \right], \quad (8)$$

kde n je vybraná skupina pásov, cez ktorú sa sumuje. Šírka Ω závisí od voľby unitárnych matíc $U^{(\mathbf{k})}$, a teda optimálne $U^{(\mathbf{k})}$ spĺňa stacionárnu podmienku

$$\delta\Omega_{\mathbf{k}} = 0. \quad (9)$$

Výsledné matice $U^{(\mathbf{k}, ML)}$, ktoré transformujú $\Psi_{n\mathbf{k}}^{FP}(\mathbf{r})$, získané z prvých princípov (FP - First Principles), do maximálne lokalizovaných WF $w_n^{ML}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$:

$$\begin{aligned} \Psi_{n\mathbf{k}}^{ML}(\mathbf{r}) &= \sum_{m=1}^N U_{mn}^{(\mathbf{k})ML} \Psi_{n\mathbf{k}}^{FP}(\mathbf{r}), \\ w_n^{ML}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \Psi_{n\mathbf{k}}^{ML}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (10)$$

Výhodou tejto metódy je, že nato, aby sme určili Ω a odvodili unitárne matice $U^{(\mathbf{k})}$, stačí poznať prekrivovú maticu medzi periodickou časťou blochových stavov v susedných $\mathbf{k}$ bodoch

$$M_{mn}^{(\mathbf{k}, \mathbf{b})} = \langle u_{m\mathbf{k}} | u_{m\mathbf{k}+\mathbf{b}} \rangle = \langle \Psi_{m\mathbf{k}} | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}} | \Psi_{m\mathbf{k}+\mathbf{b}} \rangle, \quad (11)$$

kde $\mathbf{b}$ je vektor, spájajúci susedné $\mathbf{k}$ body v Brillouinovej zóne (BZ), o ktorej predpokladáme, že bola rovnomerne diskretizovaná.

2.3 Výpočet transportných vlastností pomocou metódy rozptylovej matice

Ďalšou z možností je uvažovať priamo Blochove stavy, ktoré sú propagované cez rozptylovú oblasť. Metóda spočíva v balistickom transporte elektrónov v self-konzistentnom potenciáli s danou reflexnou amplitúdou a amplitúdou prechodu v centrálnej oblasti. V rovine kolmej na smer transportu sa systém periodicky opakuje a v tejto rovine rozptylové stavy, ktoré sú propagované pri energii E majú blochovský tvar a označujeme ich ako $\mathbf{k}_\perp$. Pre každý stav $\mathbf{k}_\perp$ možno problém riešiť samostatne.

Metóda spočíva v riešení Kohn-Shamových rovníc s využitím nelokálneho separovateľného pseudopotenciálu, ktorý zaviedli Kleinman a Bylander[25]. Pseudopotenciál má semi-lokálny tvar

$$V_{PS} = V_{loc} + \hat{V}_{NL}, \quad (12)$$

kde V_{loc} je efektívny lokálny potenciál a $\hat{V}_{NL}$ je nelokálna časť pseudopotenciálu, pričom

$$\hat{V}_{NL} = \sum_{Imn} D_{mn}^I |\beta_m^I\rangle \langle \beta_n^I|, \quad (13)$$

je vytvorený súborom projekčných funkcií β_m^I , ktoré sú lokalizované v sfére s polomerom r_c a stredom na danom atóme I . Koefficienty D_{mn}^I charakterizujú pseudopotenciál. Kohn-Shamove rovnice majú potom tvar

$$E\Psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_{loc} \right] \Psi(\mathbf{r}) + \sum_{Imn} D_{mn}^I \langle \beta_n^I | \Psi \rangle \beta_m^I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_I). \quad (14)$$

Nato, aby bolo možné určiť balistickú vodivosť v lineárnom režime, potrebujeme poznať celkovú transmisiiu, pre ktorú platí

$$\mathcal{T} = \sum_{ij} |T_{ij}|^2 = \text{Tr}[\mathbf{T}^+ \mathbf{T}], \quad (15)$$

pričom $\mathbf{T}$ je matica normalizovaných amplitúd prechodu $T_{ij} = \sqrt{I_i/I_j} t_{ij}$ a I_j je prúd Blochových stavov ψ_j v smere z , pre ktorý platí

$$\begin{aligned} I_j = & \text{Im} \left[\int_S \psi_j^*(\mathbf{r}_\perp, z_0) \frac{\partial \psi_j(\mathbf{r}_\perp, z_0)}{\partial z} \Big|_{z=z_0} d^2 \mathbf{r}_\perp - \right. \\ & \left. - \sum_{Imn} D_{mn}^I \langle \beta_n^I | \psi_j \rangle \int_{-\infty}^{z_0} dz \int_S \beta_m^I(\mathbf{r} - \mathbf{R}_I) \psi_j^*(\mathbf{r} d^2 \mathbf{r})_\perp \right], \end{aligned} \quad (16)$$

V báze vlastných kanálov (eigenchannels) je matica $\mathbf{T}^+ \mathbf{T}$ diagonálna a ak T_i nazveme vlastnými hodnotami, tak pre vodivosť platí, že je súčtom nezávislých príspevkov vodivosti každého kanálu, teda

$$G = G_0 \sum_i T_i, \quad (17)$$

pričom G_0 je jedno kvantum vodivosti.

2.4 Tunelovanie cez potenciálovú bariéru

Uvažujme model potenciálovej bariéry popisujúci izolant vsadený medzi kovové elektródy, naľavo a napravo od izolátora sa elektróny správajú ako voľné kvázičastice s energiou

$$E = E_z + E_t = \frac{k^2}{2} + \frac{q^2}{2}, \quad (18)$$

k je pozdĺžna zložka vlnového vektora kolmá na rozhranie a q je priečna zložka kolmá na smer transportu z . Prúdová hustota spôsobená nekonečne malým priložným napätím, pozostáva z príspevkov od elektrónov obsadzujúcich stavy v okolí Fermiho energie, ktorým odpovedá vlnový vektor $k > z$. Potom celková hustota prúdu v smere napäťového spádu [27] je daná ako

$$j = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dE_z \int_0^\infty q dq \int_0^{2\pi} d\phi T(E_z) [f_l(E_z, q) - f_r(E_z, q)]. \quad (19)$$

Prejdením z integrovania cez priečnu zložku vlnového vektora na integrovanie cez energiu ($q dq = dE_t$) a uvážením parabolického disperzného zákona dostávame [36][37]

$$j = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dE_z T(E_z) \int_0^\infty dE_t [f_l(E_z, E_t) - f_r(E_z, E_t)], \quad (20)$$

kde $f_l(E_z, E_t)$ a $f_r(E_z, E_t)$ predstavujú Fermiho-Diracovu distribučnú funkciu, ktorú možno uvažovať pri veľmi nízkych teplotách ako skokovú funkciu, a teda potom pre prúdovú hustotu dostávame v priblížení lineárnej odozvy

$$j = \frac{V}{2\pi^2} \int_0^{E_F} dE_z T(E_z). \quad (21)$$

Vodivosť na plochu rozhrania pri takýchto podmienkach je potom

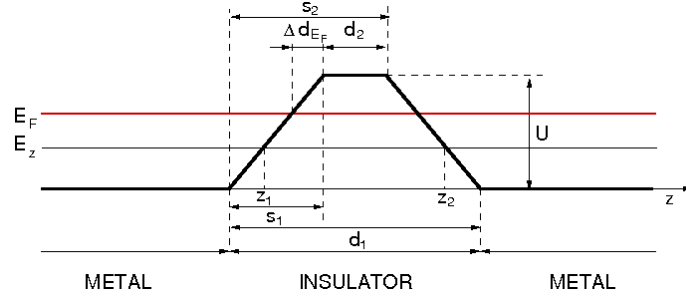
$$g = G/A = \frac{I}{AV} = \frac{j}{V} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{E_F} dE_z T(E_z), \quad (22)$$

kde I je prúd a A je plocha rozhrania.

Na dobré popísanie ultratenkých rozhraní, je nevyhnutné zahrnúť do modelu bariéry prechodovú oblasť s_1 medzi kovom a izolantom, z čoho vyplýva lichobežníkový tvar bariéry a efektívnu hmotnosť m^* v izolante. Dá sa tak tiež odvodiť jednoduchý analytický vzťah pre vodivosť na plochu rozhrania. Ak uvažíme WKB aproximáciu, potom transmisný koeficient má tvar

$$T(E_z) = \exp(-F(E_z)) \quad (23)$$

$$F(E_z) = 2 \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{2m^*[U(z) - E_z]} dz, \quad (24)$$



Obrázok 1: Lichobežníkový model tunelovacej bariéry so šírkou dielektrickej vrstvy d_1 , kde sklon nábehovej hrany, a teda aj d_2 , závisí od typu rozhrania.

kde $U(z)$ je absolútna výška bariéry v danom mieste a rozdiel $z_2 - z_1$ udáva šírku baréry, s ktorou exponenciálne klesá pravdepodobnosť tunelovania. Najväčšie príspevky k integrálu (22) pochádzajú od stavov v blízkosti Fermiho energie, potom možno exponent rozvinúť do lineárnej formy a spodnú hranicu energie posunúť do $-\infty$. Dostávame jednoduchý analytický vzťah pre vodivosť na plochu rozhrania

$$g \approx -\frac{e^{-F(E_F)}}{2\pi^2 F'(E_F)}. \quad (25)$$

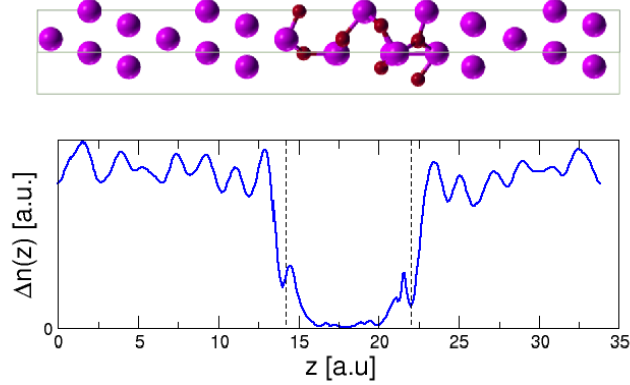
3 Súhrn výsledkov

3.1 Ultratenké rozhrania na báze Al/ AlO_x /Al

Pre štúdium transportu budeme uvažovať dva typy rozhrania - *antisymetrické* (A) a *symetrické* (S2)[5]. Za *antisymetrické* budeme považovať rozhranie, ktoré obsahuje vrstvu chemisorbovaného kyslíka (O2). Štruktúra tohto rozhrania bola motivovaná ultratenkým oxidovaným povrchom Al/ AlO_x . V prípade *antisymetrického* rozhrania uvažujeme dve, tri alebo štyri vrstvy kyslíka v oxide (A2, A3, A4).

Hrúbka rozhrania určená z geometrie (d^g) je definovaná ako vzdialenosť medzi poslednou vrstvou objemového hliníka v substráte a prvou vrstvou hliníka v rozhraní, ktorá už nemá objemový charakter. Hrúbka rozhrania je uvedená v tabuľke (1).

Hrúbku rozhrania ($d^{\Delta n}$) však možno určiť aj z elektrónovej hustoty rozptylových stavov $\Delta n(z)$ (DOS-Density of States) v blízkosti Fermiho energie stredovanej cez plochu rozhrania (obr. (2)), získanej z nášho GS *ab initio* výpočtu. K dramatickému poklesu a nárastu hustoty dochádza práve na hraniciach medzi kovom a oxidom. Podobne, ako v prípade určovania polohy



Obrázok 2: Rozhranie A4 a jemu odpovedajúca elektrónová hustota v okolí Fermiho energie. Prerušované čiary znázorňujú polohy hraníc kov-izolant.

rozhranie	A2	A3	A4	S2
$d^g[\text{\AA}]$	4,5	6,1	8,6	6,1
$d^{\Delta n}[\text{\AA}]$	4,5	5,5	7,8	N/A

Tabuľka 1: Hrúbky jednotlivých rozhraní určených z geometrie (d^g) alebo z elektrónovej hustoty stavov v blízkosti Fermiho energie ($d^{\Delta n}$).

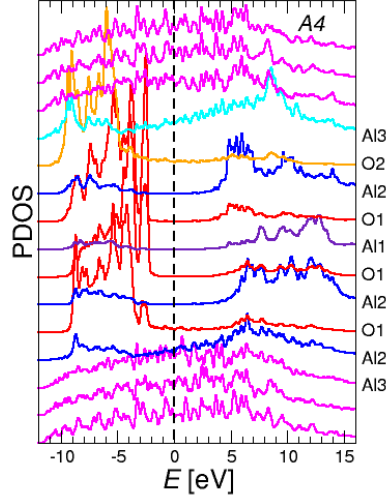
kovového povrchu v rozhraniach kov-vákuum, možno určiť polohu rozhrania kov-izolant [59]. Polohu ľavej hranice definujeme ako

$$z_L = \int_{-\infty}^{z_I} z \frac{d\Delta n(z)}{dz} dz / \int_{-\infty}^{z_I} \frac{d\Delta n(z)}{dz} dz, \quad (26)$$

kde z_I je poloha stredu v izolante. Obdobne možno nájsť aj polohu pravej hranice z_R pri zmene integračných hraníc. Potom platí pre hrúbku rozhrania $d^{\Delta n} = z_R - z_L$.

Určili sme projektovanú hustotu stavov (PDOS) pre jednotlivé štruktúry (viď. obr. (3)). Vo všetkých štyroch prípadoch pozorujeme typické hlboké lokalizované stavy na kyslíkoch (červené krivky) a objemový charakter hliníkov v hornej a spodnej časti štruktúr (purpurové krivky). Taktiež pozorujeme, že Fermiho energia sa nachádza v zakázanom páse. Šírku zakázaného pásu môžeme odhadnúť na základe rozdielu polohy počiatku valenčného pásu pod Fermiho energiou a polohy nábehu stavov Al1, Al2 a O1 (modrá, červená a fialová krivka).

Na základe PDOS dokážeme odhadnúť aj posun Fermiho energie od stredu zakázaného pásu ΔE_F . Zaujímavý je fakt, že nami určená šírka zakázaného pásu je v dobrej zhode s experimentálnymi údajmi Al/Al₂O₃ rozhraní



Obrázok 3: Projektovaná hustota stavov A4 štruktúry, obsahujúca štyri vrstvy kyslíka v oxide.

$E_g = 6,4$ eV aj napriek tomu, že DFT má problém pri jej dobrom určení [15]. Šírka zakázaného pásu a posun Fermiho energie našich štruktúr sú uvedené v tabuľke (2).

rozhranie	A2	A3	A4	S2
E_g [eV]	7,0	6,5	6,5	7,0
ΔE_F [eV]	1,5	-0,25	-1,0	-1,0

Tabuľka 2: Hodnoty šírky zakázaného pásu E_g a posunu Fermiho energie ΔE_F jednotlivých rozhraní určených z PDOS.

Pokiaľ šírka zakázaného pásu všetkých štruktúr je zhruba rovnaká, tak Fermiho energia sa posúva so šírkou rozhrania z kladných hodnôt (režim tunelovania elektrónov) k záporným hodnotám (režim tunelovania dier). Rozdiel medzi dnom vodivostného pásu a Fermiho energie určený z experimentu odpovedá hodnote $E_C - E_F = 2,9 \pm 0,2$ eV [60], čo je hodnota asi o 1 eV menšia ako v prípade našej A4 a S2 štruktúry, ale na druhej strane hodnota je v dobrej zhode so štruktúrami A2 a A3, z čoho môžeme usudzovať väčšiu citlivosť tejto veličiny na geometrické usporiadanie daného systému.

Porovnaním vodivosti získanej pomocou balíku `WanT` a `PWCOND` dostávame

	A2	A3	A4	S2
PWCOND	0,055	0,0085	0,00122	0,0967
WanT	0,0334	0,00365	0,00112	0,0336

Tabuľka 3: Porovnanie vodivosti získanej pomocou balíku WanT a PWCOND. Vodivosť je udávaná v násobkoch $2e^2/h \times A_z$, kde $A_z = 74,23a_B^2$ a predstavuje plochu rozhrania.

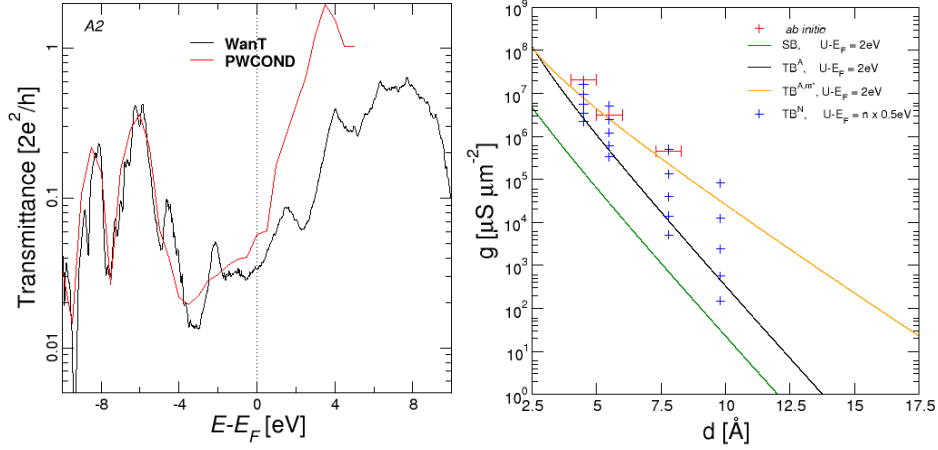
rádovo tie isté výsledky, avšak v prípade vodivosti z WanTu je vodivosť systematicky podhodnotená ako vidieť na transmisných spektrách v blízkosti E_F všetkých štyroch štruktúr.

Transmisné spektrá sa dobre zhodujú v prípade hlbších energetických stavov (obr. (4)), ale už pod Fermiho energiou sa začínajú rozchádzať. Toto je spôsobené zlou kvalitou nájdených Wannierových centier, ktoré nedostatočne dobre popisujú elektrónovú štruktúru.

Avšak pre naše účely porovnania *ab initio* vodivostí s vodivosťami získanými pomocou jednoduchého modelu nie sú tieto rozdiely kritické. Hodnoty vodivosti pre jednotlivé štruktúry sú uvedené v tabuľke (3). V prípade porovnania *ab initio* výpočtov vodivosti a hodnôt získaných pomocou jednoduchého modelu budeme v ďalšom uvažovať už len *antisymetrické* usporiadanie rozhrania (A2, A3, A4).

Na obr. (4) je znázornený graf vodivosti na plochu rozhrania v závislosti od hrúbky rozhrania $d^{\Delta n}$ v prípade *antisymetrickej* štruktúry (tab. 1), ktoré sme porovnali s hodnotami získanými pomocou jednoduchých modelov bariéry (štvorcová a lichobežníková). Vymedzenie chyby pri *ab initio* vodivosti odpovedá prechodu medzi kovom a izolantom, ktorú môžeme identifikovať z hustoty elektrónových stavov na plochu rozhrania $\Delta n(z)$ (obr. (2)), ako $\Delta d \approx 2 \text{ \AA}$. Odpovedá vzdialenosti, na ktorej sa $\Delta n(z)$ prudko mení.

Ako prvý uvažujeme model lichobežníkovej potenciálovej bariéry (obr. 1), kde $d_2 = d^{\Delta n} - \Delta d$. Uvažovali sme efektívnu hmotnosť v izolante rovnú jednej, pričom vodivosť bola určená numerickým integrovaním vzťahu (22) a numericky bola spočítaná aj exaktná transmisia pratriaca lichobežníkovej bariére. Vodivosť je znázornená ako modré krížiky v grafe (obr. (2), TB^N), výška bariéry $U - E_F = n \times 0,5 \text{ eV}$, $n = 1, 2, 3, 4, 5$ narastá zhora na dol. Čierna krivka odpovedá vodivosti spočítanej pomocou približného analytického vzťahu (25) (TB^A), pri výške bariéry $U - E_F = 2 \text{ eV}$. Porovnaním s numerickým výpočtom, je vodivosť vo veľmi dobrej zhode, preto nie je nevyhnutné robiť numerický výpočet integrálu, ale je postačujúce použiť na určenie vodivosti jednoduchý analytický vzťah a získať prakticky tie isté hodnoty.



Obrázok 4: **Vľavo:** transmisné spektrum A2 geometrie získané pomocou dvoch nezávislých metód, implementovaných vo výpočtovom balíku PWCOND a WanT. Dobrú zhodu vidíme po energii -4 eV . Nad touto energiou sa transmisné spektrá začínajú rozchádzať; **Vpravo:** Porovnanie vodivosti z *ab initio* výpočtu a z jednoduchých modelov. Červené krížiky odpovedajú *ab initio* výpočtu vodivosti; modré krížiky vodivosti z modelu lichobežníkovej bariéry, získanej numerickým integrovaním pre rôzne výšky bariéry, ktorej výška narastá zhora nadol, efektívna hmotnosť $m^* = 1$; čierna krivka odpovedá vodivosti z analytického vzťahu pre lichobežníkový model bariéry, efektívna hmotnosť $m^* = 1$; oranžová krivka ak je navyše uvažovaná $m^* = 0.35$; zelená krivka odpovedá vodivosti z modelu jednoduchej štvorcovej bariéry, efektívna hmotnosť $m^* = 1$.

Vidíme, že v prípade výšky bariéry $U - E_F \approx 0,5\text{ eV}$ je *ab initio* výpočet a model v zhode, čo je však v rozpore s odhadom, kde výšku bariéry môžeme určiť z PDOS ako rozdiel Fermiho energie a energie najbližších stavov v oxide (napr. v prípade A4 valenčný pás v oxide obr. (3)), tú očakávame $U - E_F \sim 2\text{ eV}$.

Zelená krivka odpovedá vodivosti spočítanej použitím modelu jednoduchej štvorcovej bariéry (SB) výšky 2 eV a efektívnej hmotnosti elektrónov v izolante rovnakej. Krivka sa nachádza pod všetkými hodnotami. Uvážením pomerne malej prechodovej oblasti Δd , ktorá je zásadným parametrom v lichobežníkovom modeli, spôsobí posun modelových hodnôt vodivosti smerom k *ab initio* hodnotám.

Ak v analytickom vzťahu (25) navyše uvažíme efektívnu hmotnosť elektró-

nov v oxide, dojde k ďalšiemu posunu analytickej krivky (TB^{A,m^*}) správnym smerom k *ab initio* výpočtom vodivosti. Efektívna hmotnosť $m^* = 0,35$ bola určená fitovaním pásovej štruktúry oxidu [62]. Ako vidieť, jednoduchý analytický vzťah pri voľbe efektívnych parametrov bariéry určených výlučne z *ab initio* elektrónovej štruktúry dáva veľmi dobrú zhodu s výpočtom vodivosti z prvých princípov.

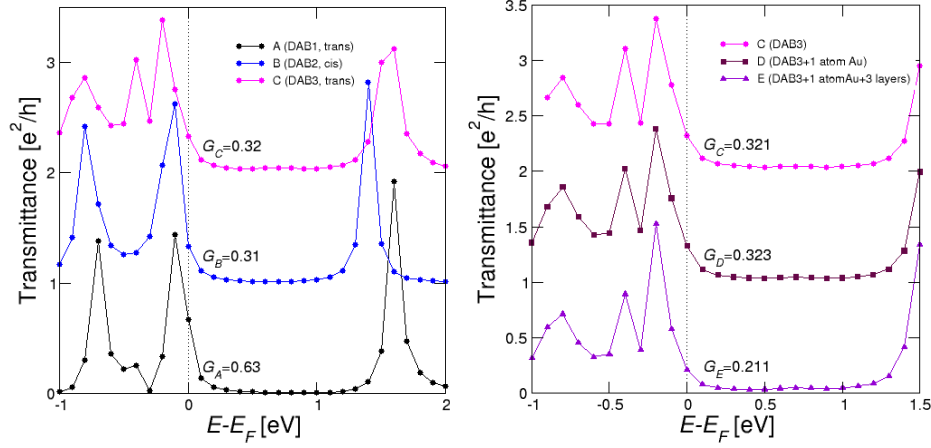
Pomocou *ab initio* výpočtov sme schopní rátať reálne šírky rozhraní, avšak hodnoty vodivosti sa s experimentami zväčša rozchádzajú, experimenty daným šírkam rozhrania prisudzujú zvyčajne menšiu vodivosť [35][63]. Predpokladáme, že je to dané zlým určením hrúbky rozhrania, ktoré sa získava použitím Simmonsovoho modelu. Ten v sebe zahŕňa množstvo efektívnych parametrov, ktoré síce dokážu dobre "napasovať-fit na experimentálne dáta, ale na druhej strane sa naskytá otázka významu takéhoto modelu. V prospech nami navrhnutého modelu hovoria nedávne experimenty Junga [64], kde šírku rozhrania určovali priamo. Ich vodivosť pre danú hrúbku je v dobrej zhode s našimi hodnotami, získanými z modelu TB^{A,m^*} [62].

3.2 Molekulové spoje na báze azobenzén-zlato

Použitím výpočtového balíka PWCOND, ktorý využíva na výpočet transportných vlastností metódu rozptylovej matice, bolo možné uvažovať systémy obsahujúce realistické zlaté elektródy a hroty s väčším množstvom atómov, ktoré boli motivované predchádzajúcimi opto-mechanickými výpočtami pre DAB[72]. Vybrané boli tri geometrie z vratného mechanického cyklického spínania.

Podľa PDOS v blízkosti Fermiho energie môžeme predpokladať, ako sa bude meniť vodivosť pre tri rôzne geometrie. Na rozdiel od *trans* (DAB1, DAB2) v prípade *cis* izoméru (DAB2) pozorujeme rozštiepenie HOMO hladiny na atómoch dusíka (obr. 6).

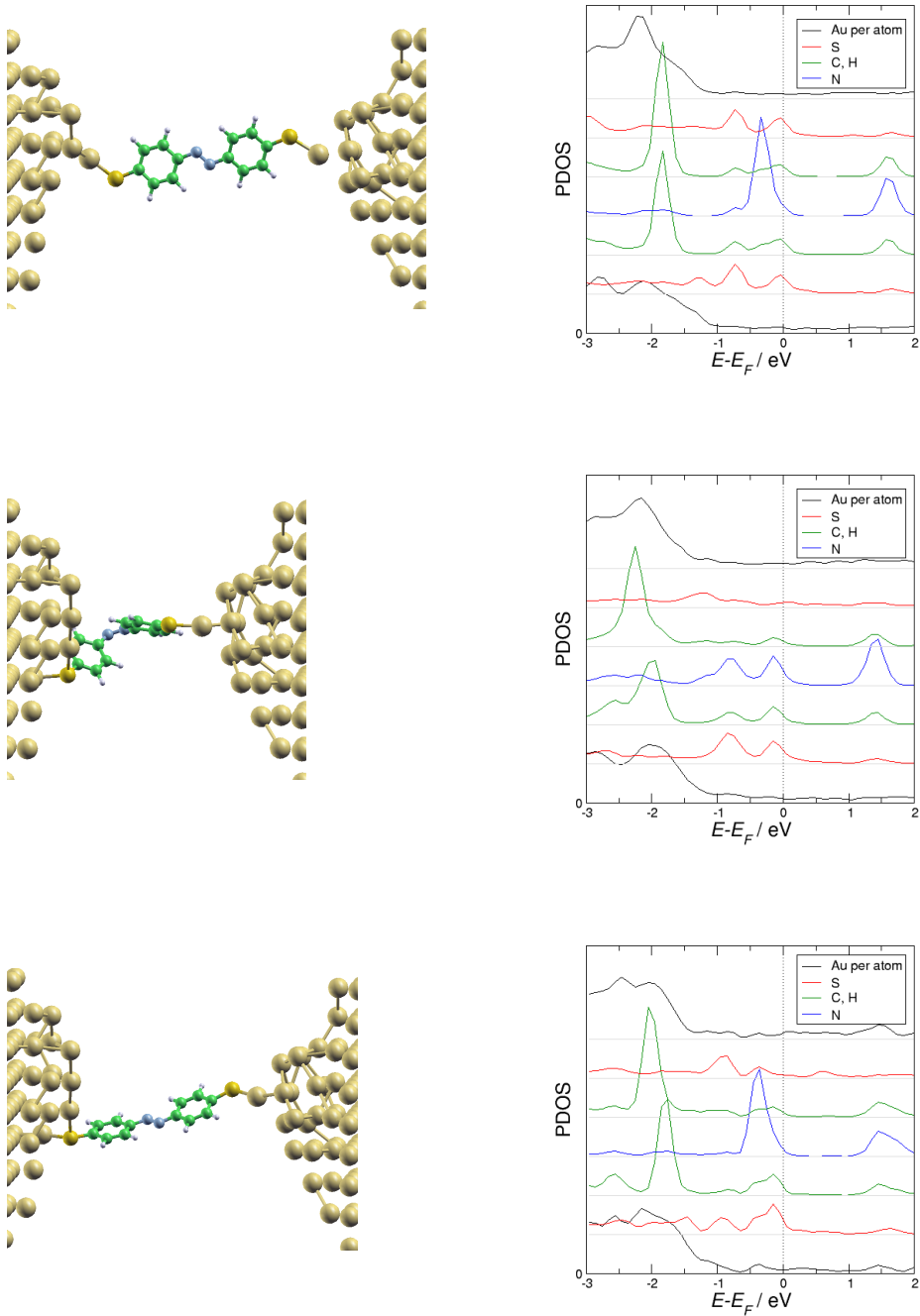
Avšak vo všetkých troch prípadoch poloha Fermiho energie vzhľadom na polohu HOMO hladiny je podobná, nachádza sa v hornej časti HOMO píku. Tento fakt je v súlade s tendenciou, že vzdialenosť medzi HOMO hladinou organických π -konjugovaných tiolátov na zlate a Fermiho energiou kovového povrchu je fixovaná [77]. Tento charakter je zachovaný v prípade všetkých troch štruktúr, preto možno predpokladať, že zostane zachovaný v celom procese naťahovania a stláčania elektród, a teda aj výsledná vodivosť bude nemenná. Skutočne hodnota vodivosti vo všetkých troch prípadoch je rádovo rovnaká, pohybuje sa v desatinách e^2/h (obr. 5).



Obrázok 5: **Vľavo:** Transmisia v prípade troch štruktúr DAB1 (A), DAB2 (B) a DAB3 (C) a im prislúchajúce hodnoty vodivosti (G_A , G_B , G_C), ktoré odpovedajú hodnote transmisie na Fermiho energii ($E-E_F = 0$ eV); **Vpravo:** Stabilita transmisie pre štruktúru DAB3, v prípade pridania atómu zlata do oblasti kontaktu (D) a ďalších troch vrstiev zlata do elektródy (E) v porovnaní s DAB3 (C).

Overili sme taktiež vplyv elektródy na transportné vlastnosti spoja. Pridaním troch vrstiev zlata do elektródy a atómu zlata do oblasti kontaktu v jednej vybranej geometrii sa vodivosť mení len zanedbateľne (obr. 5), čo len potvrdzuje fakt, že mechanické spínanie neovplyvňuje vodivosť molekuly.

Toto je však v rozpore s vyššie uvedenými výsledkami Zhanga *a kol.* [3][4]. Podľa ich výsledkov, *trans* izomér má vodivosť o dva rády vyššiu ako *cis*, avšak ich geometrie obsahovali na oboch koncoch DAB molekuly ešte CH_2 skupinu. Overili sme preto vplyv prítomnosti metylénu na jednom alebo oboch koncoch molekuly DAB na transmisiiu, čím sme dostali ekvivalentné geometrie TAB a CAB ako uvažovali Zhang *a kol.* v [3][4].



Obrázok 6: Geometrické usporiadanie a PDOS pre DAB1 (*trans*, prvý riadok), DAB2 (*cis*, druhý riadok) a DAB3 (*trans*, tretí riadok) geometrie kontaktovaných molekúl.

Referencie

- [1] R. Landauer, Philisophical Magazine **21**, 863 (1970).
- [2] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, and J. D. Joannopoulos, Rev. of Modern Phys., Vol. **64**, No. **4** (1992).
- [3] C. Zhang, M.-H. Du, H.-P. Cheng, X.-G. Zhang, A. E. Roitberg, J. L. Krause, Phys. Rev. Lett **92**, 158301 (2004).
- [4] C. Zhang, X. He, H.-P. Cheng, X.-Q. Xue, M. A. Ratner, X.-G. Zhang, P. Krstic, Phys. Rev. B **73**, 125445 (2006).
- [5] M. Diešková, M. Konôpka, and P. Bokes, Surf. Science **601**, 4134-437 (2007).
- [6] R. L. Martin, *Electronic structure: basic theory and practical methods*, Cambridge University Press, Cambridge (2004).
- [7] F. Nogueira, A. Castro, and M. A. L. Marques, *A Tutorial on Density Functional Theory*, in Lecture Notes in Physics: A Primer in Density Functional Theory, Springer (2002).
- [8] M. Brandbyge, J-L. Mozos, P. Ordejón, J. Taylor, And K. Stokbro, Phys. Rev. B , **65**, 165401 (2002).
- [9] H. J. Choi, J. Ihm, Phys. Rev. B , **59**, 2267 (1999).
- [10] A. Smogulov, A. Dal Corso, E. Tosatti, arXiv:cond-mat/0405433v1 [cond-mat.mtrl.sci] 19 May 2004.
- [11] D. H. Lee and J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. B **23**, 4988 (1981).
- [12] D. H. Lee and J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. B **23**, 4997 (1981).
- [13] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, 1133 (1965).
- [14] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, 864 (1964).
- [15] J. P. Perdew, S. Kurth, *A Tutorial on Density Functional Theory*, in Lecture Notes in Physics: Density Functionals for Non-relativistic Coulomb Systems, in the New Century, Springer (2002).
- [16] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **78**, 1396, (1997).

- [17] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865–3868, (1996).
- [18] N. Marzari, D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **56**, 12847 (1997).
- [19] N. Marzari and I. Souza and D. Vanderbilt, Psi-K newsletter **57**, 129 (2003).
- [20] I. Souza, N. Marzari, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **65**, 035109 (2002).
- [21] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic System*, Cambridge University Press, New York (1995).
- [22] D. S. Fisher and P. A. Lee, Phys. Rev. B 23, 6851 (1981).
- [23] <http://www.wannier-transport.org>.
- [24] A. Calzolari, N. Marzari, I. Souza, and M Buongiorno Nardelli, Phys. Rev. B , **69**, 035108 (2004).
- [25] L. Kleinman and D. M. Bylander, Phys. Rev. Lett. **48**, 1425 (1982).
- [26] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, S Pinthas, Phys. Rev B **31**, 10 (1985).
- [27] R. Stratton, Phys. Chem. Solids 23, 1177 (1962);
- [28] R. Holm, J. Appl. Phys **22**, 5 (1951).
- [29] A. Sommerfeld, H. Bethe, *Handbuch der Physik von Geiger und Scheel*, Springer, Berlin (1933).
- [30] J. C. Fisher, I. Giaever, J. Appl. Phys **32**, 172 (1961).
- [31] I. Giaever, Rev. Mod. Phys, **46**, 2 (1974).
- [32] L. Esaki, Proceeding of the IEEE, **62**, 6 (1974).
- [33] B. D. Josephson, Rev. Mod. Phys, **46**, 2 (1974).
- [34] J. G. Simmons, J. Appl. Phys **34**, 6 (1963).
- [35] K. Gloos, P. J. Koppinen, and J. P. Pekola, J. Phys.:Condens. Matter **15**, 1733 (2003).

- [36] D. K. Ferry, S. M. Goodnick and J. Bird *Transport in nanostructures - second edition*, Cambridge University Press, New York (2009).
- [37] M. Moško a A. Mošková, učebný text *Úvod do mezoskopické fyziky*, Elektrotechnický ústav SAV.
- [38] W. A. Harrison, Phys. Rev **123**, 85 (1961).
- [39] A. Messiah, *Quantum Mechanics - vol.I*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam (1961).
- [40] L. S. Dorneles, D. M. Schaefer, M. Carara, and L. F. Schelp, Appl. Phys. Lett.**82**, 17 (2003).
- [41] X. C. Ma, Q. Q. Shu, S. Meng, W. G Ma, Thin Solid Films **436**, 292-297 (2003).
- [42] Kundu M, Miyata N, and Ichikawa M, Appl. Phys. Lett. **78**, 1517 (2001).
- [43] P. J. Feiblman, Phys. Rev. B , **76**, 235405 (2007).
- [44] S. Seller, A. Gerlach, S. Kowarik, F. Schreiber, H. Dosch, S. Meyer, J. Pflaum, and G. Ulbrich, arXiv:0711 501v1 [cond-mat.mtrl.sci] 30 Nov (2007).
- [45] N. A. Court,A. J. Ferguson, and R. G. Clark, arXiv:0706.41501v1 [cond-mat.mtrl.sci] 30 Nov (2007).
- [46] J. Sun, Y.-Ch. Sun, Chinese Journal of Chemistry, **22**, 661-667 (2004).
- [47] E. Tan, P. G. Mather, A .C. Perrella, J .C. Read, and R. A. Buhran, Phys. Rev. B , **71**, 161401 (2005).
- [48] W. H. Rippard, A. C. Perrella, F. J. Albert, and R. A. Buhrman, Phys. Rev. Lett. **88**, 046805 (2002).
- [49] D. R Jennison, A. Bogicevic, Surface Science **464**, 108 (2000).
- [50] G. Kresse, M. Schmid, E. Napetsching, M. Shishkin, L. Köhler, P.Varga, Science **308**, 1440-1442 (2005).
- [51] M. Schmid, G. Kresse, A. Buchsbaum, E. Napetsching, S. Gridschneider, M. Reichling, and P. Varga, Phys. Rev. Lett **99**, 196104 (2007).
- [52] J. Taylor, H. Guo, and J.Wang, Phys. Rev. B. **63**, 121104 (2001).

- [53] D. Walrond, V. Timoshevskii, Y. Hu, K. Xia, and H. Guo, Phys. Rev. Lett. **97**, 226802 (2006).
- [54] Y.F. Zhukovskii, P.W.M. Jacobs, M. Causá, J. of Phys. and Chem. of Solids **64**, 1317 (2003).
- [55] D. R. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press LLC (2004).
- [56] <http://www.quantum-espresso.org>.
- [57] D. Vanderbilt, Soft Self-Consistent Pseudopotentials in a Generalized Eigenvalue Formalism, *Phys. Rev. B* **41** (11), 7892 (1990).
- [58] D. R. Jennison, C. Verdozzi, P. A. Schultz, and M. P. Sears, Phys. Rev. B **59**, R15605 (1999).
- [59] A. Liebsch, it Electronic Excitations at Metal Surfaces, Plenum Press, New York (1997).
- [60] N. V. Nguyen, O. A. Kirilov, W. Jiang, W. Wang, J. S. Suehle, P. D. Ye, Y. Xuan, N. Goel, K.-W. Choi, W. Tsai, S. Sayan, Appl. Phys. Lett. **93**, 082105 (2008).
- [61] <http://people.sissa.it/~smogunov/PWCOND/pwcond.html>.
- [62] M. Zemanová Diešková, A. Ferretti, P. Bokes, Tunneling through Al/ AlO_x /Al Junctions: Analytical Models and First Principles Simulations, zaslaný článok do Phys. Rev. B. (2013).
- [63] W. F. Brinkman, R. C. Dynes, J. M. Rowell, J. Appl. Phys. **41**, 1915 (1970).
- [64] H. Jung, Y. Kim, K. Jung, H. Im, Y. A. Pashkin, O. Astafiev, Y. Nakamura, H. Lee, Y. Miyamoto, J. S. Tsai, Phys. Rev. B. **80**, 125413 (2009).
- [65] M. A. Reed, Proceedings of the IEEE, **87**, 652 (1999).
- [66] Michael Zwolak and Massimiliano Di Ventra, *Molecular Electronics*, in Nanoscale Science and Technology edited by M. Di Ventra, S. Evoy, and J. R. Heflin, Kluwer Academic/Plenum Publishers (2004).
- [67] T. Hugel, N. B. Holland, A. Cattani, L. Moroder, M. Seitz, H. E. Gaub, Science, **296**, 1103 (2002).

- [68] R. Turanský, M. Konôpka, N. L. Doltsinis, I. Štich, D. Marx Phys. Chem. Chem. Phys. **12**, 13922 (2010).
- [69] M. A. Reed, C. Zhou,, C. J. Muller, T. P. Burgin, J. M. Tour, Science, **278**, 252 (1997).
- [70] B.-Y. Choi, S.-J. Kahng, S. Kim, H. Kim, H. W. Kim, Y. J. Song, J. Ihm, Y. Kuk, Phys. Rev. Lett. **96**, 156106 (2006).
- [71] M. Konôpka, R. Rousseau, I. Štich, D. Marx, Phys. Rev. Lett. **100**, 115503 (2008).
- [72] M. Konôpka, R. Turanský, N. L. Doltsinis, D. Marx, I. Štich, *Organometallic Nanojunctions Probed by Different Chemistries: Thermo-, Photo-, and Mechano-Chemistry*, in Advances in Solid State Physics, Springer Berlin Heidelberg (2009).
- [73] M. Konôpka, R. Turanský, N. L. Doltsinis, D. Marx, I. Štich, *Azobenzene-Metal Junction as a Mechanically and Opto-Mechanically Driven Switch* in High Performance Computing, in Science and Engineering '08. - Berlin, Springer Verlag London (2008).
- [74] M. Di Ventra, S. T. Pantelides, N. D. Lang, Phys. Rev. Lett **84**, 979 (2000).
- [75] P. Damle, A. W. Ghosh, S. Datta, Chemical Physics **281**, 171 (2002).
- [76] R. Turanský, *Mechanické Vlastnosti Organometalických Nanoprechodov*, dizertačná práca, FEI STU, Bratislava (2009).
- [77] G. Heimel, L. Romaner, J.-L. Bredas, E. Zojer, Phys. Rev. Lett **96**, 196806 (2006).
- [78] A. Danilov, S. Kubatkin, S. Kafanov, P. Hedegård N. Stuhr-Hansen, K. Moth-Poulsen, and T. Bjørnholm, Nano Letters **8**, 1 (2008).

Zoznam publikácií

- Diešková, Miroslava - Konôpka, Martin - Bokes, Peter: Atomic and Electronic Structure of Ultra-thin Al/AlOx/Al Interfaces. In: Surface Science. - ISSN 0039-6028. - Vol. 601 (2007), s. 4134-4137
- Diešková, Miroslava – Bokes, Peter: Identification of the Structural units of the Ultrathin Al/AlOx/Al Thin films and Interfaces. In: ELI-TECH 2008: Proceedings. Bratislava, 20.5.2008. - ISBN 978-80-227-2878-2 (CD-ROM)
- Diešková, Miroslava: Transport Properties of Ultrathin Al/AlOx/Al Interfaces. In: Science and Supercomputing in Europe: Report 2008. - Bologna: Cineca, 2009. - ISBN 978-88-86037-22-8. - S. 503-507
- Diešková, Miroslava – Bokes, Peter: Transport Properties of Ultrathin Interfaces Based on Al/AlOx/Al. In: 17th conference of Slovak Physicist: Proceedings. Bratislava, 16.-19.9.2009. - Bratislava: Slovak Physical Society, 2009. - ISBN 978-80-969124-7-6. - S. 127-128
- Diešková, Miroslava – Bokes, Peter: Conduction of Tunnel Junctions from Simple Models and First Principles. In: APCOM 2010. Applied Physics of Condensed Matter: Proceedings of the 16th International Conference. Malá Lučivná, Slovak Republic, 16.-18.6.2010. - Bratislava: Nakladateľstvo STU, 2010. - ISBN 978-80-227-3307-6. - S. 96-99
- Zemanová Diešková, Miroslava - Bokes, Peter: Determination of Transport Properties of Nanostructures from First Principles. In: 17th Conference of Czech and Slovak Physicists: Žilina, Slovak Republic, 5.-8.9.2011. - Bratislava: Slovak Physical Society, 2012. - ISBN 978-80-970625-4-5. - S.31-32
- Bokes, Peter - Zemanová Diešková, Miroslava: Simulations of the Transport of Electrons Through Molecular and Atomic Nanodevices. In: APCOM 2012. Applied Physics of Condensed Matter: Proceedings of the 18th International Conference. Štrbské Pleso, Slovak Republic, June 20-22, 2012. - Bratislava: STU v Bratislave, 2012. - ISBN 978-80-227-3720-3. - S.322-327