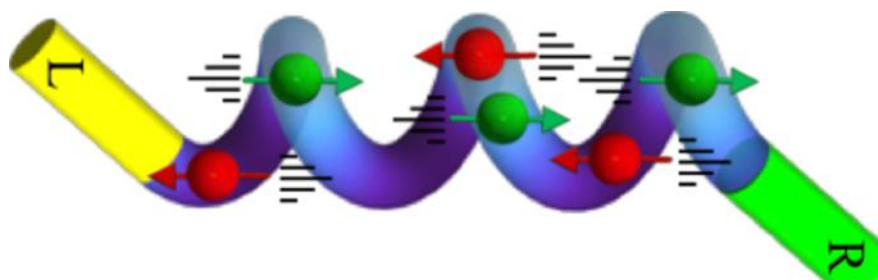


Monday 2 May 2022

Kvantový transport a spinový moment sily s helikálnymi molekulami

Školiteľ: Dr. Richard Korytár

Ústav: Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University



E-mail: korytar@karlov.mff.cuni.cz

Abstrakt: Nedávne merania ukázali zaujímavú skutočnosť: keď sa elektróny pohybujú po helikálnej molekule (šróbovica, ako napríklad DNA), tak polarizujú svoj spin [1]. Tento jav sa nazýva chiralitou indukovaná spinová selektivita (CISS) a ponúka nový spôsob, ako vytvoriť spinový filter alebo realizovať spinovú pamäť či logiku [2]. Úlohou tohto projektu je teoreticky popísať transport elektrónov cez potenciál helikálneho tvaru.

Postup: Na začiatok budeme problém modelovať klasicky, t.j. ako pohyb častice po skrutkovici. Úlohou bude sledovať reakciu skrutkovice na pohyb častice. V ďalšej fáze projektu (Bc. - Mgr.) prejdeme ku kvantovému popisu, ktorý nám umožní zaviesť do problému spin elektrónu. Pomocou teórie rozptylu spočítame spinový prúd. Hamiltonián a metódy budú ako v článku [3]. Ďalej nás bude zaujímať vplyv magnetickej prímesi a možnosť manipulácie jej momentu pomocou elektrického prúdu.

Metódy: Hamiltonián v krivočiarych súradniciach, diagonalizácia malých matíc: analyticky alebo numericky. Python, knižnice Numpy, Matplotlib. LaTeX.

[1] R. Naaman, D. H. Waldeck, Chiral-induced spin selectivity effect. *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 2178–2187 (2012)

[2] R. Naaman, Y. Paltiel, D. H. Waldeck, *Nat. Rev. Chem.* 2019, **3**, 250

[3] K. Michaeli, R. Naaman, *J. Phys. Chem. C* 2019, **123**, 17043–17048