

## ***Zjawiska transportu w nanostrukturach grafenowych. Obliczenia modelowe i z pierwszych zasad.***

**Miejsce realizacji:** Instytut Fizyki Molekularnej PAN  
Zakład Teorii Nanostruktur  
<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=9>

**Kontakt:** dr hab. Maciej Zwierzycki  
tel.: 61 86-95-128, email: [maciej.zwierzycki@ifmpan.poznan.pl](mailto:maciej.zwierzycki@ifmpan.poznan.pl)

### **Wprowadzenie**

Grafen, odkryta w 2004 roku dwuwymiarowa forma alotropowa węgla, budzi w ostatnich latach olbrzymie zainteresowanie zarówno w kontekście badań podstawowych jak i potencjalnych zastosowań. Wyrazem związanych z grafenem nadziei jest Nagroda Nobla z fizyki, przyznana odkrywcom, A. Geimowi i K. Novoselowowi w roku 2010. Unikalne własności grafenu, w tym niezwykle wysoka ruchliwość nośników prądu elektrycznego, wynikają z faktu, że elektrony w pobliżu poziomu Fermiego zachowują się efektywnie jak bezmasowe cząstki relatywistyczne (neutrino) jednak ich prędkość jest 300 razy mniejsza od prędkości światła. Niesie to ze sobą intrygującą możliwość obserwacji efektów relatywistycznych (np. paradoksu Kleina) w relatywnie prostych doświadczeniach. Przewidywane zastosowania grafenu obejmują m.inn. ultraszybkie tranzystory i inne elementy elektroniczne.

### **Cel naukowy i proponowane metody badawcze.**

W ramach proponowanej pracy doktorskiej prowadzone będą teoretyczne badania własności transportowych nanostruktur grafenowych. Obliczenia prowadzone przez doktoranta będą zmierzały do określenia wpływu jakości na własności transportowe (przewodnictwo) mają źródła rozpraszania nośników takie jak: defekty sieci krystalicznej, obecność domieszek, krawędzie płatka grafenowego czy też jego pofałdowanie. Szczególna uwaga poświęcona zostanie relacji między przewodnictwem a strukturą elektronową układu, szczególnie w przypadku uwzględnienia obecności metalicznej elektrody. Obliczenia prowadzone będą zarówno na poziomie modelowych hamiltonianów jak i przy użyciu metod *ab initio* (z pierwszych zasad).

Podczas studiów doktorant zapozna się z zagadnieniami z zakresu teorii zjawisk transportu jak również metodami obliczania struktury elektronowej. Ponieważ znaczna część pracy polegać będzie na prowadzeniu obliczeń numerycznych, konieczna będzie umiejętność programowania (lub szybkie jej nabycie) podstawowym zakresie.