

Was tun wir?

Man geht davon aus, dass in zwanzig Jahren elektronische Bauelemente die Größe einzelner Moleküle erreicht haben werden. Schon jetzt stellt dies eine enorme Herausforderung für die Grundlagenforschung dar:

- Stehen wir am Beginn einer neuen Ära, in der molekulare Computer die Gesetze der Quantenmechanik nutzen?
- Werden wir im Computerdesign grundlegend umdenken müssen?

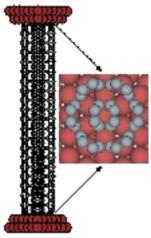
Werden die Computer von morgen weiterhin in der gewohnten Weise aus Transistoren aufgebaut und einfach nur kleiner sein, oder können wir uns davon lösen und Logik in neuer Weise implementieren?

In unserer Gruppe versuchen wir, derartige Herausforderungen konkret anzugehen und offene Fragen der Molekular-Elektronik theoretisch zu behandeln.

Wir sind eine junge, dynamische Arbeitsgruppe, die sowohl von dem großartigen wissenschaftlichen Umfeld der Regensburger Universität, als auch von dem unvergleichlichen Flair der Stadt profitiert.



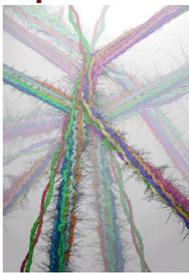
Spin-Transport



Die Möglichkeit von kohärentem spinpolarisiertem Transport in Carbon-Nanotubes birgt ein enormes Anwendungspotential in Spintronics. Wir untersuchen mit Hilfe von Greenschen Funktionen analytisch und numerisch Spintransport in Single- und Double-Wall CNT, die an ferromagnetische Elektroden gekoppelt sind.

Inelastischer Quantentransport

Bei hohen Temperaturen und/oder hohen angelegten Spannungen gewinnt der inelastische Transport immer mehr an Bedeutung. Eine Kombination aus Dichte-Funktional-Theorie mit Keldysh Greenschen Funktionen – unter Einbeziehung von Elektron-Phonon Streuung – ermöglicht dessen Beschreibung. Der Formalismus wird zunächst an Einzelmolekülen getestet und dann auf Oligomer-Ketten und DNA-Moleküle angewandt.

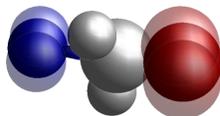


DNA-basierte Elektronik

Die erstaunliche Fähigkeit von DNA zur Selbstorganisation und Reproduktion macht diese nicht nur für Biologen sondern auch für die Ingenieure von morgen zu einer höchst interessanten Substanz. Da die elektrische Leitfähigkeit reiner DNA nicht den Erfordernissen in der Nanoelektronik genügt, untersuchen wir durch Einlagerung von Metallionen modifizierte DNA als möglichen Kandidaten für den Grundstoff selbstorganisierter molekularer Schaltkreise.



Molekulare Vibrationen



Um molekulare Systeme bei Raumtemperatur betreiben zu können ist es wichtig die thermisch erzeugten Vibrationen zu berücksichtigen und zu verstehen. Jedoch vernachlässigen die derzeit gängigen quantenmechanischen Theorien diese Effekte. In der Physikalischen Chemie sind Konzepte der Elektron-Phonon Kopplung für abgeschlossene Systeme entwickelt worden, und es gilt, dieses Know-How auf den Quantentransport in der mesoskopischen Physik für offene Systeme zu übertragen.

Funding

VolkswagenStiftung



Europäische Union

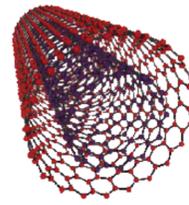


Hans Vielberth Stiftung



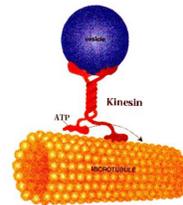
Minerva Stiftung

Carbon-Nanotubes



Carbon-Nanotubes (CNT) weisen einzigartige elektronische Eigenschaften auf, durch die sie für einen Einsatz in molekularen Schaltkreisen prädestiniert erscheinen. Wir untersuchen die Transporteigenschaften mehrwandiger CNT und verschiedenen CNT-Verzweigungen, sowie den Einfluss, den ein zeitabhängiges äußeres elektrisches Feld auf diese Eigenschaften hat.

Molekulare Motoren



Ein grundlegendes Problem in der Untersuchung elektronischer Bauelemente für molekulare Elektronik ist die Frage nach möglichen Strategien um die Bauelemente zu einem Schaltkreis zusammenzufügen. Die Natur löst das Problem, indem sie Stoffe auf molekularer Ebene mithilfe sogenannter molekularer Motoren transportiert.

Wir beschreiben die Dynamik der solcher Systeme in Form von eindimensionalen Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Monte-Carlo Simulationen werden verwendet, um numerische Ergebnisse in der mikroskopischen Beschreibung zu erhalten, und Mean-Field Betrachtungen, um das Problem analytisch in den Griff zu bekommen.

Aktuelle Kollaborationen

Delft University of Technology (NL)

INFM Modena (IT)

Polish Academy of Sciences (PL)

Hebrew University of Jerusalem and Tel Aviv University (IL)



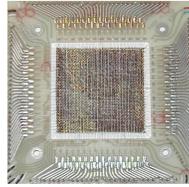
Join us!

In unserer Gruppe freuen wir uns immer über fähige und interessierte Mitarbeiter!

Zu vergeben:

- Diplom-/Masterarbeiten
- Jobs für studentische Hilfskräfte

Numerische Methoden



Für die akkurate Behandlung von Quantentransport in realistischen molekularen Systemen werden zuverlässige Methode benötigt um elektronische Strukturen zu charakterisieren. Wir entwickeln effektive numerische Verfahren, die Dichte-Funktional-Theorie und die Technik der Nichtgleichgewichts-Greens-Funktionen in sich vereinigen.

