

Computational studies on advanced materials with applications to nanoelectronic and optoelectronic devices

George Alexandru Nemnes

REZUMAT

Lucrarea prezintă principalele realizări științifice ale autorului privind metode computaționale cu aplicații în știința materialelor și a dispozitivelor nanoelectronice și optoelectronice. Temele abordate privesc transportul de sarcină și spin în dispozitive nanoelectronice, metode de tip *ab initio* pentru investigarea structurii electronice în materiale și dispozitive noi, metode numerice pentru descrierea sistemelor de particule în interacție în ne-echilibru utilizând statistica fracționară de excluziune (FES), simulări în cadrul dispozitivelor optoelectronice și tehnici de învățare automatizată (*machine learning*, ML) pentru predicția proprietăților electronice în materiale noi.

Scalarea continuă a dispozitivelor de circuit a adus în atenție necesitatea utilizării unor abordări noi pentru a lua în considerare în mod consistent efectele cuantice, care devin din ce în ce mai importante în acest context. În cazul tranzistorilor cu efect de câmp, pentru un control mai bun asupra canalului, au fost propuse diverse geometrii. Urmând aceasta direcție, utilizând metoda matricii R, a fost analizat transportul de sarcină într-un tranzistor cu efect de câmp având la bază un nanofir cilindric, care indică un raport semnificativ pentru curenți în modurile ON/OFF de funcționare ale tranzistorului. Formalismul de împrăștiere a fost pe mai departe extins pentru a include transport de spin și transport dependent de timp și a fost utilizat în continuare în structuri în care transportul de spin este controlat prin interacții spin-orbită de tip Rashba și Dresselhaus sau câmpuri magnetice. Au fost puse în evidență problemele legate de împrăștierea spinului, chiar și în condiții ideale, și au fost propuse metode pentru a reduce aceste efecte nedorite. Au fost analizate efecte termoelectrice, în mod deosebit în regim ne-liniar de temperatură, observându-se o schimbare de semn a tensiunii termoelectrice. Mai recent, a fost propus un dispozitiv nanoelectronic care implementează o poartă logică cuantică reconfigurabilă, care poate fi utilizată în contextul arhitecturilor programabile.

Pentru investigarea unor noi materiale și nanostructuri au fost utilizate calcule de tip *ab initio* folosind teoria funcționalei de densitate (DFT). Printre

studii se numără investigarea proprietăților de vibrație și termice ale nanofirelor de AlN, a proprietăților electronice ale grafenelor poroase halogenate, a proprietăților magnetice în cazul structurilor de nitrură de bor hexagonală cu substituții de Mn, investigații privind proprietăți electronice și termice ale alotropilor carbonului bi-dimensionali, proprietăți electronice ale sistemelor de tip grafenă bi-strat dopate în câmp electric extern, precum și inducerea unui gap energetic în grafenă depusă pe un substrat feroelectric de HfO_2 . Utilizând o abordare atomistică, bazată pe funcții Green de ne-echilibru, transportul coerent de sarcină și spin a fost investigat în diferite structuri. În sisteme de tip nanopanglică de grafenă cu impurități corespunzătoare metalelor de tranziție au fost evidențiate efecte de tip filtru de spin. Comutarea curenților de spin într-o joncțiune Y realizată din grafenă a fost demonstrată prin aplicarea unui câmp electric în planul grafenei. Au fost propuse aplicații în regim terahertz prin utilizarea de joncțiuni moleculare având drept element activ molecula de ferrocene și, de asemenea, moleculele fotocromice din clasa fulgide au fost analizate pentru comutare optică.

Metode computaționale bazate pe abordări de tip Monte Carlo au fost dezvoltate pentru studiul sistemelor de particule în interacție, utilizând FES. Au fost determinate ratele de tranziție corespunzătoare realizării distribuțiilor FES, cu ajutorul cărora se poate introduce o descriere semiclassicală locală a gazelor cuantice cu particule în interacție, cu posibilitatea extinderii la aplicații de transport, prin redefinirea speciilor.

O direcție mai recentă privește dezvoltarea tehnicilor de tip ML pentru aplicații în cadrul științei materialelor. Utilizând calcule DFT în combinație cu tehnici de tip ML se pot dezvolta metode noi pentru design-ul materialelor. În acest context, selectarea candidaților promițători în vederea realizării sau optimizării unor proprietăți de material, care pot fi ulterior testați din punct de vedere experimental, poate conduce la o eficientizare a procesului de căutare, și, în același timp, la o reducere a costului computațional în comparație cu o investigație exhaustivă.

În final, teza prezintă colaborările recente ale autorului și perspectivele pentru activitățile de cercetare și didactice viitoare.