Constantinos Simserides
Department of Physics, National and Kapodistrian University of Athens

Charge motion in bio-organic nanowires

We study nanowires. Their length is of the order of nm. Their width varies. We examine systems ranging from atom-thick wires, such as cumulenic and polyynic carbynes (linear atom-thick carbon sequences ending at one or two or three hydrogen atoms and cyclic carbynes that do not have hydrogens), dicyanopolyynes (linear atom-thick nitrogen, carbons, nitrogen sequences), polycyclic aromatic hydrocarbons, conjugated polyenes, and small molecules such as the amino acid phenylalanine, up to DNA sequences (which have a width of approximately 2 nm). We are interested in electronic structure, charge transfer and transport, optical properties etc. We use methods based on tight binding (TB) and methods based on density functional theory (DFT). In particular, the TB models that we use extend from coarse-grained models up to atomic-level models with many orbitals at each atom. All have advantages and disadvantages. For example, concerning charge transfer, RT-TDDFT (real-time time-dependent DFT) is particularly time-consuming, so TB-based techniques are very useful. We study mainly coherent processes that dominate at short times and distances and at low temperatures, but the study of thermal, incoherent processes is also possible with TB-based methods.

Κωνσταντίνος Σιμσερίδης
Τμήμα Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Κίνηση φορτίου σε βιοοργανικά νανοσύρματα

Μελετάμε νανοσύρματα. Το μήκος τους είναι της τάξεως των nm. Το εύρος τους ποικίλλει. Εξετάζουμε από ατομικώς λεπτά σύρματα όπως οι κουμουλενικές και οι πολυυνικές καρβύνες (γραμμικές ατομικώς λεπτές ακολουθίες ατόμων άνθρακα, οι οποίες καταλήγουν σε ένα ή δύο ή τρία άτομα υδρογόνου και κυκλικές καρβύνες, οι οποίες δεν έχουν υδρογόνα), δικυανοπολυύνια (γραμμικές ατομικώς λεπτές ακολουθίες αζώτου, ανθράκων, αζώτου), πολυκυκλικούς αρωματικούς υδρογονάνθρακες, συζυγιακά πολυένια, μικρά μόρια όπως το αμινοξύ φαινυλαλανίνη, κ.ο.κ., έως ακολουθίες DNA (οι οποίες έχουν εύρος περίπου 2 nm). Ενδιαφερόμαστε για την ηλεκτρονική δομή, τη μεταβίβαση (transfer) και μεταφορά (transport) φορτίου, τις οπτικές ιδιότητες κ.λπ. Χρησιμοποιούμε μεθόδους βασισμένες στην ισχυρή δέσμευση (tight binding, TB) και μεθόδους βασισμένες στη θεωρία συναρτησιακού πυκνότητας (density functional theory, DFT). Ειδικότερα, τα από εμάς χρησιμοποιούμενα πρότυπα TB εκτείνονται από αδρομερή πρότυπα έως ατομικά πρότυπα με πολλά τροχιακά ανά άτομο. Όλα έχουν πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα. Επί παραδείγματι, στη μεταβίβαση φορτίου, η RT-TDDFT (real-time time-dependent DFT) είναι εξαιρετικά χρονοβόρα, οπότε οι βασισμένες στην TB τεχνικές έχουν μεγάλη χρησιμότητα. Μελετάμε κυρίως συνεκτικές διεργασίες, οι οποίες κυριαρχούν σε μικρούς χρόνους και αποστάσεις καθώς και σε χαμηλές θερμοκρασίες. Αλλά η μελέτη θερμικών, δηλαδή μη συνεκτικών διεργασιών, είναι επίσης δυνατή με μεθόδους βασισμένες στην TB.