



Courants à haute polarisation de spin dans des jonctions à molécule unique

Spécialité Physique des matériaux

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil [SPEC/GMT](#)

Candidature avant le 26-04-2019

Durée 5 mois

Poursuite possible en thèse non

Contact [SMOGUNOV Alexander](#)
0169083032
alexander.smogunov@cea.fr

Résumé

Le stage est dédié à l'étude théorique du transport électronique polarisé en spin dans les nanojonctions constituées d'une molécule unique connectée à deux électrodes ferromagnétiques. Un accent particulier serait mis sur la possibilité d'optimiser et de piloter le degré de polarisation de spin du courant électrique et des propriétés de magnétorésistance.

Sujet détaillé

Le stage est dédié à l'étude théorique du transport électronique polarisé en spin dans les nanojonctions constituées d'une molécule unique connectée à deux électrodes ferromagnétiques. Un accent particulier serait mis sur la possibilité d'optimiser et de piloter le degré de polarisation de spin du courant électrique et des propriétés de magnétorésistance – des concepts très importants en spintronique moléculaire [1] – par un choix judicieux de molécules ou par différents facteurs externes tels que la température (du fait de l'interaction entre électrons et vibrations moléculaires), un champ électrique (grille électrostatique) ou la tension mécanique sur la molécule exercée par des électrodes. Des méthodes ab initio de DFT (Théorie de la Fonctionnelle de la Densité) en combinaison avec des calculs modèles, basés sur la description quantique du transport électronique, vont être utilisés pendant le stage en s'appuyant sur des codes de calcul développés dans le groupe.

[1] A. R. Rocha et al., "Towards molecular spintronics", Nature Mater. 4, 335(2005); S. Sanvito, "Molecular spintronics", Chem. Soc. Rev. 40, 3336 (2011).

Mots clés

Transport électronique; spintronique moléculaire; structure électronique

Compétences

Mécanique quantique; Théorie de la Fonctionnelle de la Densité; Modèle des liaisons fortes; Fonctions de Green hors équilibre

Logiciels

Fortran; Quantum-ESPRESSO; gmgrace, avogadro, xcrysden, gnuplot

Highly spin-polarized electron transport in single molecule nanojunctions

Summary

We will study theoretically spin-polarized electronic transport in molecular nanojunctions made of a single molecule connecting two ferromagnetic electrodes. The particular stress will be made on the possibility to optimize and to control the degree of spin-polarization of electric current and magnetoresistance properties of a junction.

Full description

We will study theoretically spin-polarized electronic transport in molecular nanojunctions made of a single molecule connecting two ferromagnetic electrodes. The particular stress will be made on the possibility to optimize and to control the degree of spin-polarization of electric current and magnetoresistance properties of a junction – very important in the field of molecular spintronics [1] – by a clever choice of a molecule itself or by some external factors such as a temperature (via interaction of electrons with molecule vibrations), an electric field (a gate), or a mechanical strain exerted on the molecule by electrodes. The combination of ab initio DFT (Density Functional Theory) electronic structure methods and model calculations, based on quantum-mechanical description of electron transport, will be used during the project employing the codes developed in the group.

[1] A. R. Rocha et al., “Towards molecular spintronics”, *Nature Mater.* 4, 335(2005); S. Sanvito, “Molecular spintronics”, *Chem. Soc. Rev.* 40, 3336 (2011).

Keywords

Electron transport; molecular spintronics; electronic structure

Skills

Quantum mechanics; Density Functional Theory; Tight-binding models; Non-equilibrium Green's functions

Softwares

Fortran; Quantum-ESPRESSO; gmgrace, avogadro, xcrysden, gnuplot