

## Quantentransport durch einzelne Moleküle

### Deutsche Kurzfassung

Auf dem jungen Forschungsgebiet der Molekularen Elektronik hat sich die Kopplung zwischen elektronischen Freiheitsgraden und Molekülschwingungen als ein Hauptunterschied zwischen dem Elektronentransport durch Einzelmoleküle und dem Transport durch konventionelle Nanostrukturen (wie z.B. Quantenpunkte) herauskristallisiert. In der vorliegenden Arbeit werden die Auswirkungen dieser Elektron-Phonon-Kopplung untersucht, und es wird gezeigt, dass diese, hinausgehend über die wohlbekannten Vibrations-Seitenbänder in Strom-Spannungscharakteristiken, neuartige Kollektiveffekte im Transport verursacht.

Ursprung der Elektron-Phonon-Kopplung ist die Abhängigkeit der räumlichen Struktur des Moleküls von dessen Ladungszustand. Die primären Konsequenzen der Kopplung sind: (i) Das Tunneln der Elektronen durch das Molekül zieht im Allgemeinen die An- bzw. Abregung von Molekülschwingungen mit sich (Franck-Condon-Physik). (ii) Aufgrund der Wechselwirkung gewinnt das System Energie, die sich in einer Reduktion der molekularen Ladungsenergie niederschlägt (polaron shift). Anhand der Berechnung von Strom-Spannungscharakteristiken, Rauschspektren, thermoelektrischen Response-Funktionen sowie der Simulation des Zeitablaufs von Tunnelereignissen mit Monte-Carlo-Methoden gelingt es uns zu zeigen, dass die Auswirkungen der Elektron-Phonon-Kopplung eine Vielzahl faszinierender Transportregimes bedingen.

Das bemerkenswerteste Resultat der Franck-Condon-Physik (i) äußert sich bei starker Elektron-Phonon-Kopplung, welche durch große Verschiebungen der molekularen Potentialflächen für verschiedene Ladungszustände gekennzeichnet ist. In diesem Fall verursacht der Überlappmangel zwischen Vibrationszuständen eine signifikante Stromunterdrückung bei niedrigen Spannungen, die sog. Franck-Condon-Blockade. Im Blockaderegime spielt die Vibrationsrelaxation eine entscheidende Rolle im Hinblick auf den zugrundeliegenden Transportmechanismus: Während starke Relaxation zum konventionellen Transfer einzelner Elektronen führt, verursacht die Nichtgleichgewichts-Situation bei schwacher Relaxation den Transport in Form einer Hierarchie selbstähnlicher Elektronenlawinen. Es zeigt sich, dass dieser überraschende Transportmechanismus charakteristische Auswirkungen auf das Stromrauschen und die Zählstatistik (full counting statistics) hat, die als Erkennungsmerkmale bei der experimentellen Verifikation dieses Regimes dienen können.

Interessanterweise eröffnet der polaron shift (ii) in Analogie zur Formation von Cooperpaaren, die in Festkörpern durch Elektron-Phonon-Wechselwirkung vermittelt wird, die Möglichkeit einer effektiv attraktiven on-site Wechselwirkung im Transport durch Einzelmoleküle. Dieses Negative- $U$ -Szenario führt zu Transportcharakteristiken, die sich tiefgreifend von der üblichen Coulombblockade-Physik unterscheiden. Insbesondere lässt sich zeigen, dass der Transport in diesem Fall durch das Tunneln von Elektronpaaren dominiert wird. Dies hat einen unkonventionellen Leitwertpeak, Stromgleichrichtung und ein durch

die Gatespannung kontrollierbares Schaltverhalten zur Folge. Mit Hilfe einer exakten kanonischen Transformation kann eine eins-zu-eins-Abbildung zwischen dem Negativen- $U$ -Modell und dem gewöhnlichen Anderson-Modell hergestellt werden. Dieses Hilfsmittel gestattet eine analytische Untersuchung des Ladungs-Kondo-Effektes, der durch die Entartung zweier Ladungszustände mit geradzahlicher Besetzung verursacht wird.

# Curriculum Vitae

DIPL.-PHYS. JENS KOCH

---

## Contact and personal information

### HOME

Fehrbelliner Str. 36  
D-10119 Berlin, Germany

### OFFICE

Institute for Theoretical Physics  
Freie Universität Berlin  
Arnimallee 14  
D-14195 Berlin, Germany

date of birth: March 26, 1979

place of birth: Bremen, Germany

citizenship: German

phone: +49-30-838-51422

fax: +49-30-838-57422

email: Jens.Koch@physik.fu-berlin.de

homepage: <http://www.physik.fu-berlin.de/~kochj>

## Education

Doctorate

(*in progress*)

Freie Universität Berlin, Physics (anticipated completion: July 2006). Thesis: *Quantum transport through single-molecule devices*. Thesis adviser: Prof. Felix von Oppen

Master of Science

(“Diplom”), Freie Universität Berlin<sup>1</sup> and University of Washington, Physics with a minor in Mathematics (11/07/2003, grade: A – excellent). Thesis: *Topological quantum numbers and high precision measurements*. Thesis advisers: Prof. David J. Thouless, Prof. Felix von Oppen

Bachelor of Science

(“Vordiplom”), Universität Kaiserslautern, Physics with a minor in Computer Science (08/24/2000, grade<sup>2</sup>: 1.2)

High School Diploma

(“Abitur”), CJD Christophorusschule Braunschweig (06/26/1998, grade<sup>2</sup>: 1.0)

---

<sup>1</sup>University awarding the degree

<sup>2</sup>The German grade scale is reversed compared to the U.S. scale. It ranges from 1.0 to 4.0, with 1.0 being the highest and 4.0 the lowest grade.