

## ΔΙΑΛΕΞΗ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΜΙΚΡΟΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗΣ/ ΕΚΕΦΕ "ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ"

Παρασκευή, 17 Νοεμβρίου 2006, ώρα 13:00, **Αίθουσα Διαλέξεων Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής**

**Τίτλος: "Θεωρητική νανοτεχνολογία: Ηλεκτρικές, Θερμικές και Οπτικές ιδιότητες στη νανοκλίμακα."**

**Ομιλητής: Δρ. Νίκος Παπανικολάου, ερευνητής ΙΜΗΛ/ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος**

### **Περίληψη :**

Οι σημερινή τεχνολογία δίνει τη δυνατότητα κατασκευής και χειρισμού των υλικών ακόμα και στο ατομικό επίπεδο. Η πλήρης κατανόηση και χρήση των νέων ιδιοτήτων των νανοδομών απαιτεί μια αξιόπιστη θεωρητική περιγραφή που μπορεί να μειώσει το κόστος ανάπτυξης νέων υλικών ενώ οι σημερινές θεωρητικές μέθοδοι είναι αρκετά ακριβείς ώστε να μας επιτρέπουν το σχεδιασμό νέων υλικών με χρήσιμα χαρακτηριστικά. Θα συζητήσουμε παραδείγματα από τρεις διαφορετικές περιοχές. Πρώτα μελετήσαμε την ηλεκτρική αγωγιμότητα σε μεταλλικές νανοεπαφές με υπολογισμούς ηλεκτρονικής δομής από πρώτες αρχές με σκοπό την κατανόηση αντίστοιχων διατάξεων μοριακών ηλεκτρονικών. Ενδιαφέρον παρουσιάζει η επίδραση της γεωμετρίας των ατόμων στην επαφή αλλά και ο ρόλος των ηλεκτροδίων. Εκτός από την ηλεκτρική αγωγιμότητα η θερμική αγωγιμότητα στη νανοκλίμακα παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον. Ένα από τα μεγαλύτερα προβλήματα στη σημερινή βιομηχανία ηλεκτρονικών είναι η απαγωγή θερμότητας. Επιπλέον νέα, νανοδομημένα υλικά, έχουν ενδιαφέρουσες θερμοηλεκτρικές ιδιότητες. Θα παρουσιάσουμε ένα κώδικα κλασικής μοριακής δυναμικής που δημιουργήθηκε πρόσφατα και χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας νανοσυρμάτων SiC, όπου η θερμότητα μεταφέρεται κυρίως μέσω ταλαντώσεων πλέγματος. Τέλος θα συζητήσουμε οπτικές ιδιότητες μεταλλικών νανοδομών που έχουν προσελκύσει μεγάλο ενδιαφέρον τα τελευταία χρόνια με προοπτικές για χρήση σε αισθητήρες αλλά και για εντοπισμό και κυματοδότηση του φωτός στη νανοκλίμακα. Θα παρουσιάσουμε κάποια αποτελέσματα από την επίλυση των εξισώσεων του Maxwell με μια μέθοδο πολλαπλής σκέδασης H/M κυμάτων και θα συζητήσουμε προτάσεις για εφαρμογές.