

Obrazowanie i modelowanie organicznych układów molekularnych

Wojciech Kamiński

*Instytut Fizyki Doświadczalnej, Uniwersytet Wrocławski,
plac Maksą Borna 9, 50-204 Wrocław*

Elektronika molekularna stanowi atrakcyjną alternatywę wobec obecnie stosowanych urządzeń elektronicznych, umożliwiając w szczególności kolejny postęp w ich miniaturyzacji. Wzrost zainteresowania zastosowaniem molekuł organicznych jako podstawowych elementów elektronicznych — takich jak przełączniki, diody, elementy pamięci czy tranzystory — rodzi potrzebę pełnego zrozumienia podstawowych procesów zachodzących w układach molekularnych.

W referacie zostaną zaprezentowane zastosowania skaningowej mikroskopii tunelowej (STM) oraz mikroskopii sił atomowych (AFM) do obrazowania i charakteryzacji molekuł organicznych zaadsorbowanych na powierzchniach metali i półprzewodników. W szczególności przedstawiona zostanie procedura wykorzystująca jednocześnie obrazowanie metodami STM i AFM, która pozwala na jednoznaczne rozróżnienie zaadsorbowanych molekuł od defektów powierzchniowych [1,2]. Metoda ta pozwala nie tylko na samą identyfikację molekuł, ale również na precyzyjne określenie ich konfiguracji oraz miejsca adsorpcji. Poprawność zaproponowanej techniki pomiarów została potwierdzona teoretycznie: uzyskano dobrą zgodność wynikami obliczeń *ab initio*.

Coraz powszechniej eksperymentom z układami molekularnymi towarzyszą komplementarne badania teoretyczne obejmujące obliczenia z pierwszych zasad w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT). Pozwalają one nie tylko określić związek pomiędzy optymalną konfiguracją atomową a strukturą elektronową układów molekularnych, ale również umożliwiają modelowanie dynamicznych procesów zachodzących w tych układach. W końcowej części wykładu przedstawione będą przykłady badań wyjaśniających powstawanie superstruktur metalo-organicznych (CuPc–Ag) na powierzchni Ag(100) [3] oraz mechanizmy translacyjno-rotacyjnej dyfuzji molekuł organicznych CoPc na powierzchni Ag(100) [4].

[1] Z. Majzik, W. Kamiński, A.J. Weymouth et al., *J. Phys. Chem. C* **115**, 21791 (2011).

[2] Z. Majzik, B. Drevniok, W. Kamiński et al., *ACS Nano* **7**, 2686 (2013).

[3] G. Antczak, W. Kamiński, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. C* **119**, 1442 (2015).

[4] G. Antczak, W. Kamiński, A. Sabik et al., *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 14920 (2015).