

Teoretická studie stavů náboje v molekulárních nanostrukturách na povrchu.

Aurelio Gallardo

Abstrakt

Je dobře známo, že techniky hrotové rastrovací mikroskopie umožňují zobrazení molekulárních struktur na površích pevných látek. Tyto techniky, vybavené funkcionalizovanými hroty, prokázali možnost dosažení submolekulárního rozlišení. Nicméně interpretace původu tohoto prostorového rozlišení je stále předmětem diskuze.

Tato teze zkoumá původ kontrastu v mezi molekulami, které se často objevují na snímcích rastrovací mikroskopie s vysokým prostorovým rozlišením. Potvrzuje se, že sedlové body potenciálního energetického povrchu jsou původem bočních ohybů rastrovací sondy, které jsou na snímcích detekovány jako ostré hrany připomínající intermolekulární vazby. Tato situace může nastat mezi nekovalentně vázanými atomy v důsledku jejich blízkosti. Tudíž nemohou být interpretovány jako přímé zobrazení slabých intermolekulárních vazeb.

Tato práce také popisuje teoretický postup umožňující přímé pozorování anizotropního rozložení náboje na atomech, jako jsou σ -díry, pomocí Kelvinovy sondy silového mikroskopu se správně funkcionalizovaným hrotem. Simulace prováděné za použití modelu vyvinutého výslovně pro tento projekt prokazují, že snímky získané experimentálně mohou odrážet jak elektrostatiku hrotu, tak i vzorku.

Dále byla v práci charakterizována izomerace organokovových řetízků, řízená napětím vyvolaným interakcí se substrátem, na kterém řetízky leží. Za tímto účelem byly provedeny teoretické ab-initio simulacemi na bázi molekulární dynamiky teorie funkcionálu hustoty, které objasnily klíčové aspekty experimentálně pozorovaného reakčního procesu.