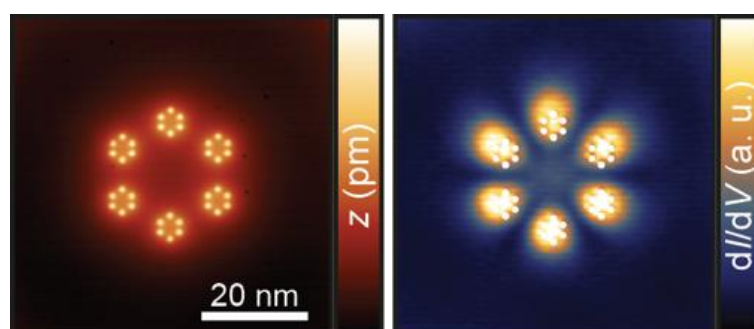


Symulacje kwantowe na powierzchni. Jak zrozumieć oddziaływania elektronów?

Emil Sierda

Institute for Molecules and Materials, Radboud University, Nijmegen, The Netherlands

Projektowanie materiałów o pożądanym właściwościach fizycznych i chemicznych wymaga dokładnego zrozumienia oddziałujących układów kwantowych. Aby zapewnić przewidywalność, obiecującą drogą jest utworzenie platformy bottom-up, gdzie właściwości elektroniczne oddziałujących atomów można emulować w przestrajalny sposób. W tym wystąpieniu zaprezentuję symulator kwantowy oparty na właściwościach fizycznych ciała stałego i atomach cezu zaadsorbowanych na powierzchni półprzewodnika - antymonku indu. Układ ten charakteryzuje się dwuwymiarowym gazem elektronowym który jest odseparowany od pasm elektronowych podłoża. Poprzez precyzyjne pozycjonowanie atomów cezu za pomocą manipulacji atomowej w skaningowej mikroskopii tunelowej (STM) stworzyliśmy pułapki elektronowe, które naśladują sztuczne atomy. Takie sztuczne atomy charakteryzują się zlokalizowanymi stanami elektronowymi, które są przewidziane na podstawie obliczeń ab initio i potwierdzone za pomocą skaningowej spektroskopii tunelowej (STS). Sztuczne atomy służą jako podstawowe elementy konstrukcyjne sztucznych struktur molekularnych z orbitalami molekularnymi, które są zobrazowane na mapach przestrzennych przewodnictwa tunelowego. Dwa oddziałujące sztuczne atomy tworzą stany wiążące i antywiązące, większa ich ilość skutkuje utworzeniem orbitali molekularnych o różnych symetriach: orbitale σ oraz π , a zmiana ich ułożenia przestrzennego prowadzi do utworzenia zhybrydowanych orbitali (np. sp_2). W oparciu o te właściwości oraz różne ułożenie atomów na powierzchni, możliwe jest emulowanie struktury elektronowej znanych planarnych molekuł organicznych, w tym molekuł antyaromatycznych. [1] W innym zakresie, gdzie atomy cezu są znacznie bliżej siebie, symulator kwantowy można również wykorzystać do badania oddziaływań elektron-elektron. Sztuczne atomy złożone z gęściej upakowanych atomów cezu wykazują efekty charakterystyczne dla skorelowanych stanów wieloelektronowych, które można rozszerzyć na bardziej złożone stany kwantowe w oparciu o dowolne dwuwymiarowe sieci krystaliczne.



Obraz STM pokazujący sztuczne atomy ułożone w strukturę heksagonu oraz rozkład przestrzenny jednego z orbitali molekularnych uzyskanych w eksperymencie.