

С.Г.Тиходеев

Механизмы вращения единичной молекулы ацетилена на поверхности меди Cu(001) при помощи СТМ

Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Физический факультет МГУ

В последние десятилетия были разработаны способы управления единичными адсорбированными молекулами с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ). Речь идет, по-существу, о химии единичных молекул и нанотехнологиях предельного разрешения. Пионерские эксперименты были выполнены в 1990-2002 годах: это перемещение и пересадка атомов ксенона с подложки на иглу СТМ и обратно [1,2], вращение димеров сурьмы на поверхности кремния [3], диссоциация молекул кислорода на Pt(111) [4], вращение ацетилена на Cu(001) [5], перемещение CO на Pd(111) [6].

Физические механизмы, ответственные за молекулярные манипуляции при помощи СТМ, были поняты достаточно быстро [7] – за исключением лишь вращения ацетилена [5], механизмы которого долгое время оставались непонятными.

Мы провели расчеты методами функционала плотности и диаграммной техники Келдыша, идентифицировали колебательные моды адсорбированной молекулы ацетилена, ответственные за вращение и их ангармоническое взаимодействие, объяснили обнаруженное в [5] существование двух порогов вращения по

приложенному к игле СТМ напряжению, а также механизмы линейного и нелинейного по туннельному току вращения ацетилена на Cu(001) [8]. Кроме того, мы смогли наглядно объяснить изотоп эффекты при вращении, возникающие вследствие замены водорода в молекуле ацетилена на дейтерий, $C_2H_2 \rightarrow C_2D_2$ [9].

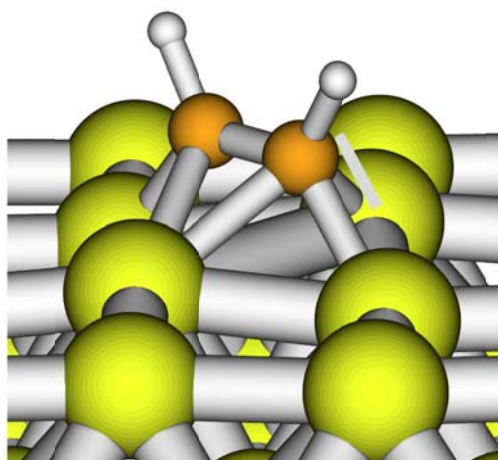


Рис. Схематическое изображение молекулы ацетилена, адсорбированной на поверхности Cu(001).

1. D. M. Eigler & E. K. Schweizer, *Nature* **344**, 524 (1990).
2. D. M. Eigler, C. P. Lutz, and W. E. Rudge, *Nature* **352**, 600 (1991).
3. Y. W. Mo, *Science* **261**, 886 (1993).
4. B. C. Stipe et al., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4410 (1997).
5. B. C. Stipe, M. A. Rezaei, and W. Ho, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1263 (1998).
6. T. Komeda et al., *Science* **295**, 2055 (2002).
7. См., например, обзор H. Ueba, S. G. Tikhodeev, and B. N. J. Persson, в книге "Current-Driven Phenomena in Nanoelectronics", ed. T. Seideman (Pan Stanford Publishing Pte. Ltd., 2011) Ch. 2, pp. 26–89.
8. Y. E. Shchadilova, S. G. Tikhodeev, M. Paulsson, and H. Ueba, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 186102 (2013).
9. Y. E. Shchadilova, S. G. Tikhodeev, M. Paulsson, and H. Ueba, arXiv:1312.7113.