

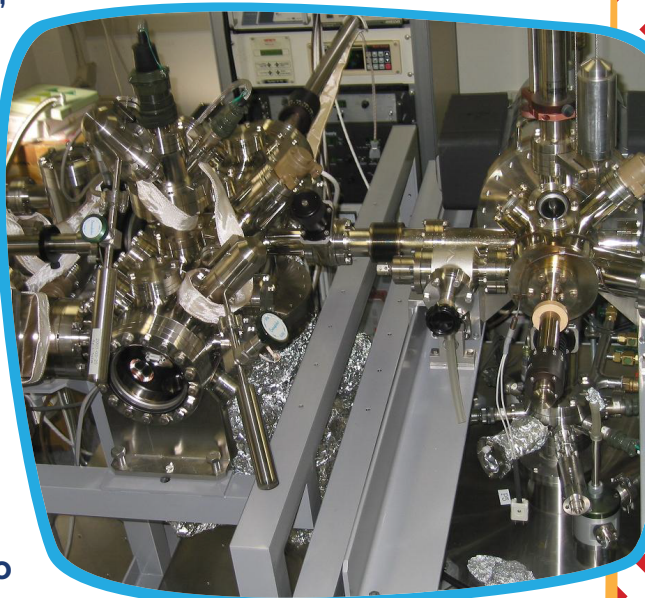
SUPERHRDINOVÉ VĚDY



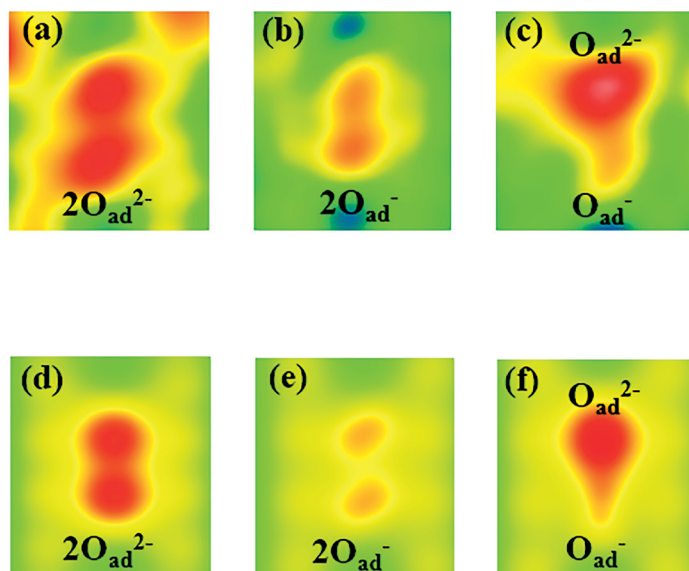
VIRTUÁLNÍ NANOLABORATOŘ

V našem každodenním životě jsme obklopeni mnoha různými materiály – kovy, plasty, dřevem a dalšími. Pouhým okem jsme schopni tyto materiály prozkoumat v řádu centimetrů až metrů. Vývoj materiálů se ale děje na atomární úrovni, které říkáme také **nanometrická úroveň** – pohybující se v řádu 10^{-9} m. V dnešní době se na atomární úroveň můžeme podívat pomocí speciálních mikroskopů, jako jsou například **atomové silové mikroskopy**, které měří síly mezi špičkou mikroskopu a vzorkem. Tento mikroskop může rovněž měnit náboj jednotlivých atomů a molekul na povrchu zkoumaného materiálu s přesností na jeden elektron.

Současně s laboratorními experimenty na atomární úrovni je nezbytné provádět i počítačové simulace. Ty často odhalí, jaké fyzikální a chemické procesy v materiálu probíhají. Vzhledem k tomu, že mikroskop funguje na atomární úrovni, musí také virtuální nanolaboratoř řešit základní rovnice atomového světa, jako je Schrödingerova rovnice, která popisuje pohyb elektronů – jeden ze základních stavebních kamenů atomů. Jejich řešení je velice komplikované a **může být provedeno pouze za pomoci superpočítačů s výkonem v řádu petaflopů (miliony bilionů výpočetních operací za sekundu)**.



Podívejme se na jeden takový laboratorní experiment a jeho simulace. **Obr. 1** ukazuje experimentální snímky pořízené za pomoci atomového silového mikroskopu. Jsou na něm atomy kyslíku, které byly naneseny na povrch TiO_2 , kde vytvořily atomové páry. Na tomto povrchu je pro kyslík výhodné přijmout dva elektrony, což znamená, že vytvoří dvojnásobně nabitý pár atomů $\text{O}_{\text{ad}}^{2-} - \text{O}_{\text{ad}}^{2-}$, **obr. 1** (a), které mají nižší energii než atomy s jednonásobným nábojem, $\text{O}_{\text{ad}}^- - \text{O}_{\text{ad}}^-$, **obr. 2** (d).



Obr. 1.

Atomy kyslíku v různých nábojových stavech na povrchu TiO_2 .

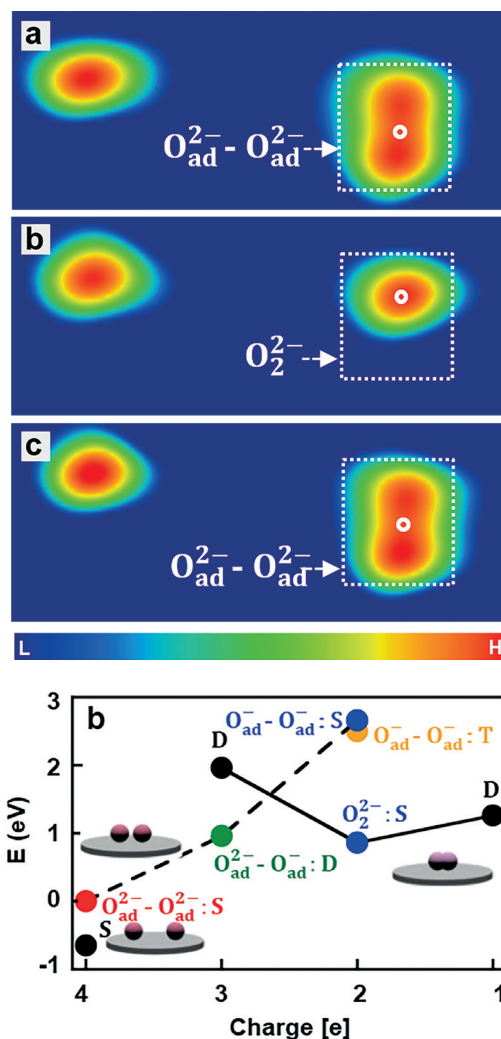
Snímky získané experimentálně z atomového silového mikroskopu (a-c) a pomocí počítačových simulací (d-f).

Tyto energie byly objeveny pomocí počítačového modelování a zjistit je experimentálně není vůbec jednoduché. Atomový silový mikroskop může být použit i ke změnám nábojů atomů kyslíku a k vytvoření jiných umělých atomových párů, jako jsou jednonásobně nabité atomy kyslíku, $O_{ad}^{-} - O_{ad}^{-}$, obr. 1 (b), nebo jejich kombinace $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{-}$, obr. 1 (c). Obě tyto verze mají mnohem vyšší energie, obr. 2 (d).

Počítačové modelování nám rovněž umožňuje ověřit tuto interpretaci prostřednictvím přímé simulace snímků různě nabitých atomů kyslíku v atomovém silovém mikroskopu, obr. 1 (d–f), a porovnat je s experimentem, obr. 1 (a–c). Jak je znázorněno na obr. 2, spolu s modifikací náboje může atomový silový mikroskop také manipulovat, tj. vytvářet a narušovat chemické vazby mezi atomy na povrchu. Pokud mikroskop odstraní dva elektrony z dvojice dvojnásobně nabitých atomů, $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$, nutí je (reverzibilně) vytvořit chemickou vazbu a sloučit se do molekuly peroxidu, O_2^{2-} , obr. 2 (c). Skutečnost, že tato interpretace je správná, může být opět ověřena počítačovými simulacemi, obr. 2 (d). Pokud použijeme mikroskop k odstranění dvou elektronů z dvojice $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$ a vytvoříme pár $O_{ad}^{-} - O_{ad}^{-}$, je pro tuto dvojici atomů energeticky výhodné transformovat se na molekulu peroxidu, obr. 2 (d). Naopak přidáním dvou elektronů do molekuly peroxidu se vytvoří molekula O_2^{4-} , která je nestabilní a okamžitě se transformuje na pár $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$. Takové manipulace otevírají cestu k chemickým reakcím plně řízeným atomovým silovým mikroskopem.

Prof. Ivan Štich

Fyzikální ústav
Slovenské akademie věd
Bratislava



Obr. 2.

Reverzibilní manipulace nabitých atomů kyslíku do molekuly peroxidu (a–c). Energie vypočítané pomocí počítačových simulací (d).

Šipky ukazují reverzibilní manipulační procesy, které vedou k reakci atomů na molekulu.

SLOVENSKO

Výpočetní středisko
Centra společných činností
Slovenské akademie věd
www.vs.sav.sk

Chcete se dozvědět více?

superheroes4science.eu
facebook.com/superheroes4science
instagram.com/superheroes4science

Projekt Superheroes 4 Science je podpořen
Mezinárodním visegrádským fondem.

www.visegradfund.org

Visegrad Fund