

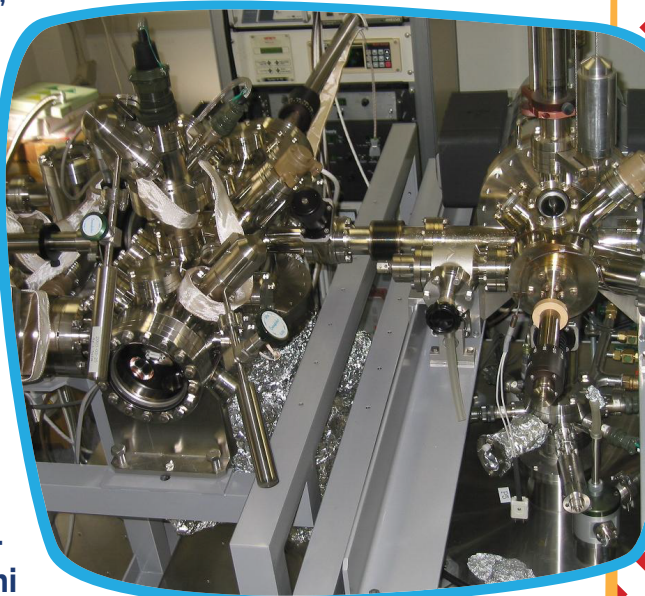
Szuperhősök a tudomány SZOLGÁLATÁBAN



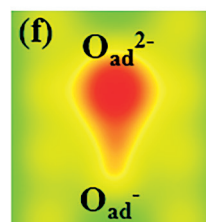
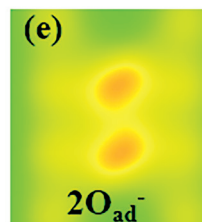
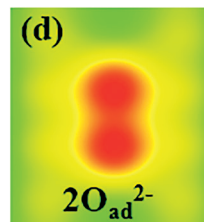
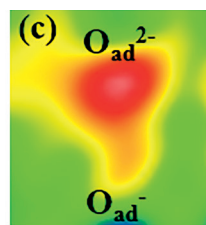
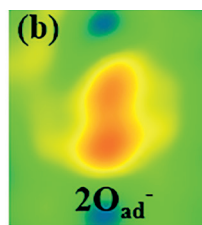
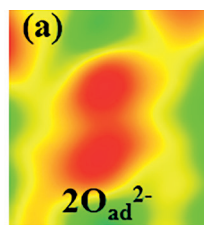
VIRTUÁLIS NANOLABORATÓRIUM

A mindennapi életben sokféle anyag vesz minket körül, legyen az fém, fa, műanyag, stb. Ezeket az anyagokat a centiméterektől a méterig terjedő skálakon mérhetjük le. Létezik egy másik típusú anyaggyártás is, amely a sokkal kisebb, ún. **nanométeres skálát** használja, 10^{-9} m, azaz az atomi mérlegeket. Napjainkban az atomi skálán speciális mikroszkóp segítségével tudunk vizsgálni anyagokat, mint például az **atomi erőmikroszkóppal**, amely a mikroszkóp csúcsa és a minta között ható erőt méri. Ez a mikroszkóp manipulálhatja az egyes atomok és molekulák töltését a felületükön egyetlen elektron pontosságú töltéssel.

Az atomi méretű laboratóriumi kísérletek mellett szükséges számítógépes szimulációk elvégzése is. Ezek a szimulációk gyakran szükségesek a végbement fizikai és kémiai folyamatok feltárásához. Figyelembe véve, hogy a mikroszkóp atomi skálán működik, a virtuális nanolaboratóriumnak meg kell oldania az atomi világ alapvető egyenletét, azaz Schrödinger egyenletét, amely az elektronok mozgását, mint az atomok egyik fő építőkövét írja le. Ez nagyon bonyolult, és **csak a PFLOPs számítások** (azaz több millió billió művelet/másodperc) **elvégzésére alkalmas szuperszámítógépekkel végezhető el.**



Nézzünk meg egy példát egy ilyen típusú laboratóriumi kísérletről és annak szimulációjáról. Az **1. ábra** az atomi erőmikroszkóp által előállított kísérleti képeket ábrázolja. Láthatjuk az oxigénatomokat, amelyek a TiO_2 felületén rakódtak le, ahol atompárokat hozhatnak létre. Ezen a felületen, oxigénatomoknak az a kedvező, ha két elektront fogadnak be, azaz egy pár kettős töltésű atomot, $\text{O}_{\text{ad}}^{2-} - \text{O}_{\text{ad}}^{2-}$, **1. ábra** (a), amelyek alacsonyabb energiájúak, mint az egyedileg feltöltött atomok, $\text{O}_{\text{ad}}^- - \text{O}_{\text{ad}}^-$, **2. ábra** (d).



1. ábra:

Az oxigénatomok különböző töltési állapotokban a TiO_2 felületén.

Az atomi erőmikroszkópból (a-c) kísérleti úton kapott képek és számítógépes szimulációk (d-f).

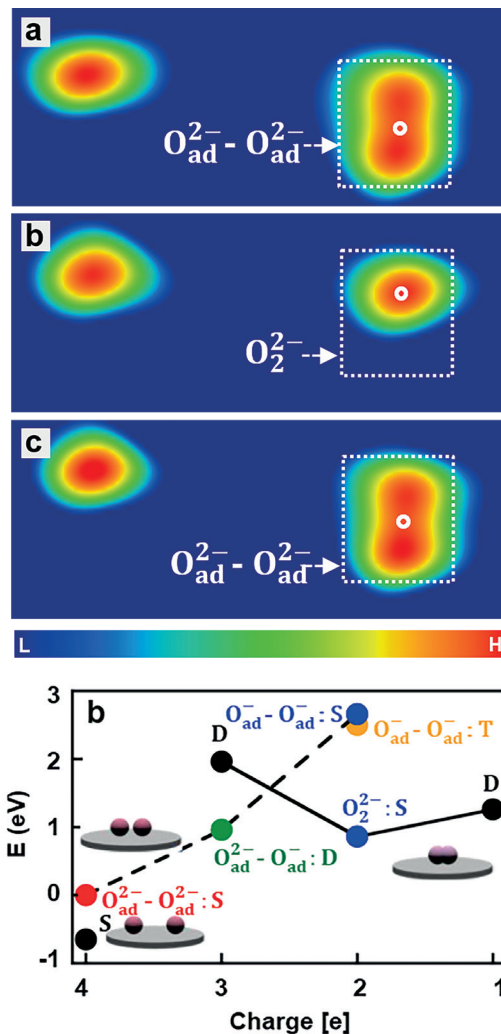
Ezek az energiák a számítógépes modellezés eredményei, kísérleti úton nem könnyű ezeket meghatározni. Az atomi erőmikroszkóp segítségével az oxigénatomok töltéseit manipulálhatjuk, és más mesterséges atompárokat hozhatunk létre, mint például egyedileg feltöltött oxigénatomokat, $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$, 1. ábra (b), vagy az $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$ kombinációjukat, 1. ábra (c), melyek közül mindkettő sokkal nagyobb energiával rendelkezik, 2. ábra (d). A számítógépes modellezés azt is lehetővé teszi számunkra, hogy ezt az értelmezést az atomi erőmikroszkópban lévő, különböző módon feltöltött oxigénatomok képeinek közvetlen szimulációján keresztül ellenőrizzük (1. ábra (d-f)), és hasonlítsuk össze a kísérlettel (1. ábra a). Amint a 2. ábra látható, a töltés módosításával együtt az atomi erőmikroszkóp is képes létrehozni és megszakítani a felületen lévő atomok közötti kémiai kötéseket. Ha a mikroszkóp két elektront távolít el a kettős töltésű atomokból, az $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$, arra kényszeríti őket, hogy (reverzibilisen) kémiai kötést hozzanak létre és egy peroxidmolekulává, O_2^{2-} , 2. ábra (c) alakuljanak át. Az a tény, hogy ez az értelmezés helyes, ugyancsak ellenőrizhető számítógépes szimulációkkal, 2. ábra (d). Ha a mikroszkópot két elektron eltávolítására használjuk az $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$ párból, és létrehozuk az $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$ párt, akkor energetikailag kedvező, ha ez a néhány atompár peroxidmolekulává alakul át, 2. ábra (d). Ezzel ellentétben, ha két elektront juttatunk a peroxidmolekulába, akkor egy O_2^{4-} molekula jön létre, amely instabil, és azonnal átalakul $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$ párrá. Az ilyen manipulációk megnyitják az utat a kémiai reakciókhoz, amelyek teljes mértékben szabályozhatók az atomi erőmikroszkóppal végzett töltéskezeléssel.

Ivan Štich professzor

Fizika Intézet

Szlovák Tudományos Akadémia

Pozsony



2. ábra:

A feltöltött oxigénatomok peroxidmolekulává (a-c) való visszafordítható kezelése.

Számítógépes szimulációkkal számított energiák (d).

A nyilak reverzibilis manipulációs folyamatokat mutatnak, amelyek az atomok molekulává alakuló reakcióját eredményezik.

Szeretnél többet tudni?

superheroes4science.eu

facebook.com/superheroes4science

instagram.com/superheroes4science

SZLOVÁKIA

A Szlovák Tudományos Akadémia
Szolgáltatási és Üzemeltetési Központjának
Számítástechnikai Központja
www.vs.sav.sk

A Superheroes 4 Science projekta
Visegrádi Alap támogatásával jött létre.

www.visegradfund.org

Visegrad Fund