

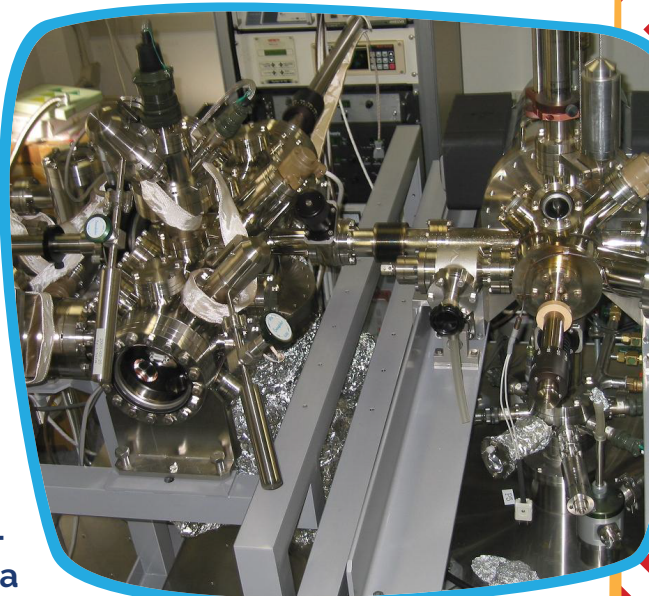
Superbohaterowie dla NAUKI

WIRTUALNE NANOLABORATORIUM

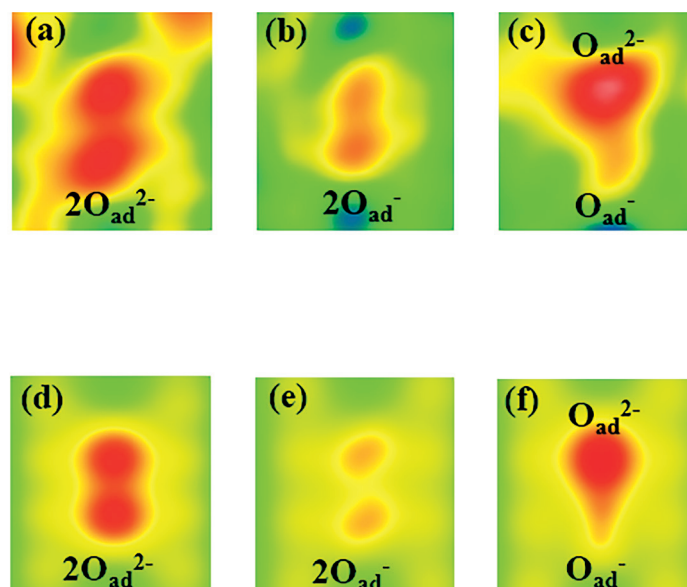


W codziennym życiu otaczają nas różne materiały, w tym metal, plastik, drewno itp. Mierzmy je zwykle w metrach i centymetrach. Istnieje również inny rodzaj inżynierii materiałowej, w której pomiary robi się w tzw. **skalach nanometrycznych**, (1 nm to 10^{-9} m), czyli atomowych. Obecnie skale atomowe są rutynowo dostępne dzięki specjalnym typom mikroskopów, takich jak **mikroskop sił atomowych**, który mierzy siły działające pomiędzy końcówką mikroskopu a próbką. Mikroskop ten może również manipulować ładunkiem poszczególnych atomów i cząsteczek na powierzchni, wstrzykując ładunek z dokładnością do jednego elektronu.

Równolegle do laboratoryjnego eksperymentu w skali atomowej, konieczne jest również wykonywanie symulacji komputerowych zachodzących procesów fizycznych i chemicznych. Ze względu na fakt, że mikroskop działa w skali atomowej, wirtualne nanolaboratorium musi rozwiązać podstawowe równanie świata atomowego, czyli równanie Schrödingera, które opisuje ruch elektronów jako jeden z głównych budulców atomów. Jest to zazwyczaj bardzo skomplikowane i **może być wykonywane tylko przy użyciu superkomputerów z możliwościami na poziomie PFLOPs (miliony trylionów operacji na sekundę)**.



Omówmy przykład takiego eksperymentu laboratoryjnego i jego symulacji. **Rysunek 1** przedstawia obrazy eksperymentalne wytwarzane przez mikroskop sił atomowych. Przedstawiono atomy tlenu, które zostały osadzone na powierzchni TiO_2 , gdzie mogą tworzyć pary atomowe. Na tej powierzchni korzystne jest, aby atomy tlenu przyjmowały dwa elektrony, tj. tworzyły parę podwójnie naładowanych atomów, $\text{O}_{\text{ad}}^{2-} - \text{O}_{\text{ad}}^{2-}$, **Rysunek 1** (a), które mają niższą energię niż pojedynczo naładowane atomy, $\text{O}_{\text{ad}}^- - \text{O}_{\text{ad}}^-$, **Rysunek 2** (d).



Rysunek 1.

Atomy tlenu w różnych stanach naładowania na powierzchni TiO_2 .

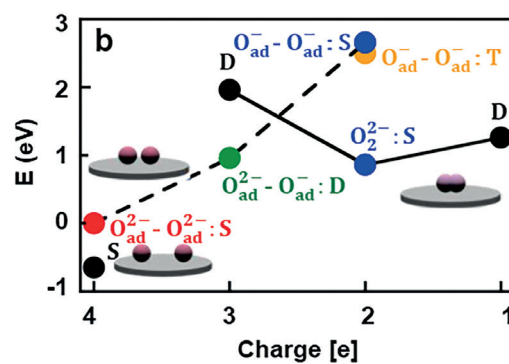
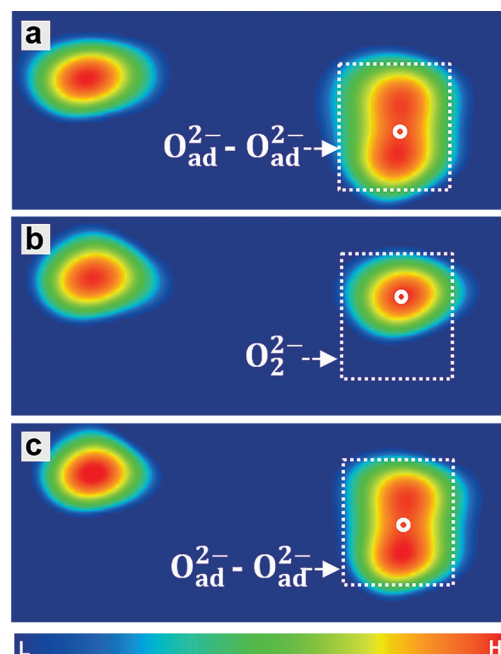
Obrazy uzyskane eksperymentalnie z mikroskopu sił atomowych (a-c) i z wykorzystaniem symulacji komputerowych (d-f).

Energie te są wynikiem modelowania komputerowego i ich eksperymentalne oznaczenie nie jest łatwe. **Mikroskop siły atomowej może być używany do manipulowania ładunkami atomów tlenu i tworzenia innych sztucznych par atomów**, takich jak pojedynczo naładowane atomy tlenu, $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$, **Rysunek 1 (b)**, lub ich kombinacje $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$, **Rysunek 1 (c)**, które mają znacznie wyższe energie, **Rysunek 2 (d)**.

Modelowanie komputerowe pozwala też na zweryfikowanie tej interpretacji poprzez bezpośrednią symulację obrazów różnie naładowanych atomów tlenu w mikroskopie sił atomowych, **Rysunek 1 (d - f)** i porównanie ich do eksperymentu, **Rysunek 1 (a-c)**. Jak pokazano na **Rysunek 2**, **wraz z modyfikowaniem ładunku, mikroskop siły atomowej może również manipulować, tj. tworzyć i zakłócać wiązania chemiczne pomiędzy atomami na powierzchni**. Jeśli mikroskop usunie dwa elektrony z pary podwójnie naładowanych atomów, $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$, zmusi je (odwracalnie) do utworzenia wiązania chemicznego i połączenia się w cząsteczkę nadtlenu, O_2^{2-} , **Rysunek 2 (c)**. Fakt, że interpretacja ta jest poprawna, może być ponownie zweryfikowany przez symulacje komputerowe, **Rysunek 2 (d)**. Jeśli użyjemy mikroskopu do usunięcia dwóch elektronów z pary $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$ i utworzenia pary $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$, jest to korzystne energetycznie dla tej pary atomów, aby przekształcić się w cząsteczkę nadtlenu, **Rysunek 2 (d)**. I odwrotnie, poprzez wstrzyknięcie dwóch elektronów do cząsteczki nadtlenu, powstaje cząsteczka O_2^{4-} , która jest niestabilna i natychmiast przekształca się w parę $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$. Takie manipulacje otwierają drogę do reakcji chemicznych w pełni kontrolowanych przez manipulację ładunkiem za pomocą mikroskopu siły atomowej.

Prof. Ivan Štich

Instytut Fizyki
Słowackiej Akademii Nauk
Bratysława



Rysunek 2.

Odwracalna manipulacja naładowanymi atomami tlenu w cząsteczkę nadtlenu (a-c).

Energia obliczona przy użyciu symulacji komputerowych (d).

Strzałki pokazują odwracalne procesy manipulacyjne, które powodują reakcję atomów w cząsteczkę.

Chcesz dowiedzieć się
WIĘCEJ?

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

SŁOWACJA

Centrum Obliczeniowe
Centrum Operacyjnego
Słowackiej Akademii Nauk
www.vs.sav.sk

Projekt Superheroes 4 Science jest
wspierany przez Fundusz Wyszehradzki.

www.visegradfund.org

• Visegrad Fund