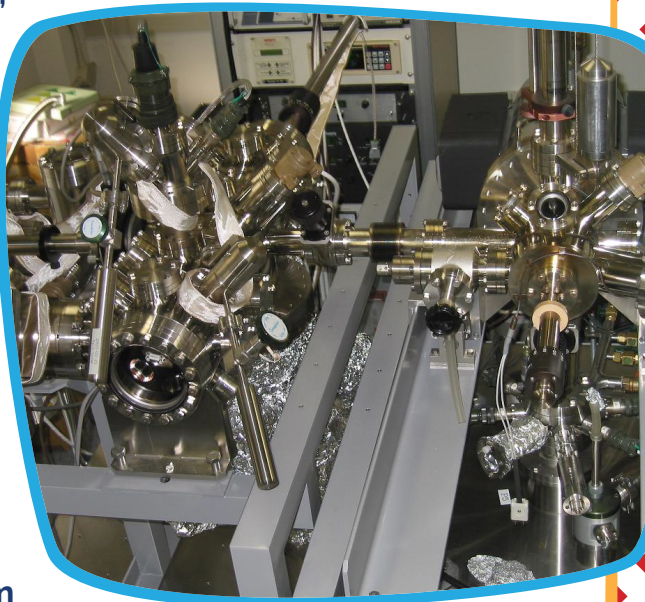


SUPERHRDINOVIA VEDY

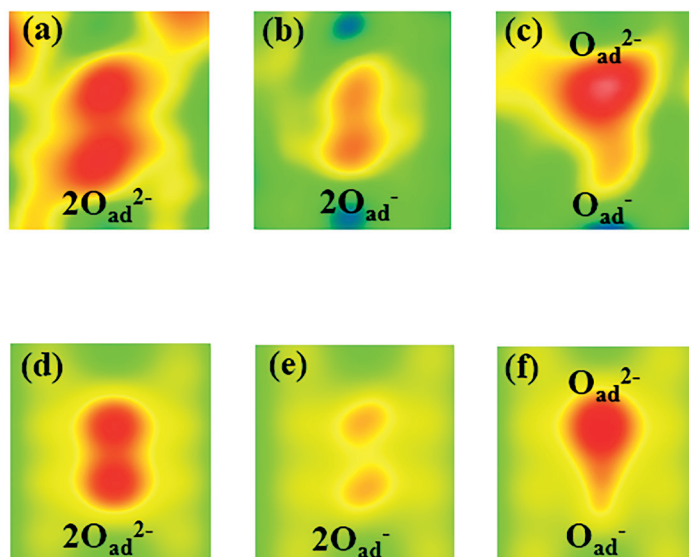


VIRTUÁLNE NANOLABORATÓRIUM

V našom každodennom živote nás obklopujú rôzne materiály, kovy, plasty, drevo, atď. Tieto materiály vnímame na dĺžkach obvykle od centimetrov po metre. Existuje aj iný typ materiálového inžinierstva, nanotechnológie, ktoré sa odohrávajú na oveľa menších, tzv. **nanometrových škálach**, 10^{-9} m, t.j. na atomárnych škálach. Atomárne škály sú dnes pomerne rutinne dostupné použitím niektorých mikroskopov, akým je aj **atomárny silový mikroskop**, ktorý meria silu medzi hrotom mikroskopu a vzorkou. Pri naložení elektrického napätia je tento mikroskop možné použiť aj na manipuláciu náboja individuálnych atómov a molekúl na povrchu s jedoelektrónovou presnosťou. Paralelne s laboratórnymi manipuláciami na atomárnej úrovni je obvykle nutné previesť aj počítačové simulácie, nakoľko často až tieto odhalia fyzikálne a chemické procesy, ktoré v experimente prebehli. Vzhľadom na atomárnu škálu na ktorej mikroskop pôsobí takéto virtuálne nanolaboratórium musí obvykle riešiť fundamentálne rovnice atomárneho sveta, t.j. tzv. Schrödingerovu rovnicu, ktorá popisuje správanie sa elektrónov ako jedného z hlavných stavebných kameňov atómu. Toto je obvykle veľmi komplikované a **zvládnu to len superpočítače s kapacitou PFLOPov** (tisíc triliónov operácií za sekundu).



Ukážeme si príklad jedného takéhoto laboratórneho experimentu a jeho modelovania. Na **Obr. 1** sú experimentálne obrazy atómov kyslíka z atomárneho silového mikroskopu deponované na povrchu TiO_2 , ktoré na ňom môžu vytvárať páry atómov. Na tomto povrchu je pre atómy kyslíka výhodné prijať 2 elektróny, t.j. vytvoriť pár dvojnásobne nabitých atómov $\text{O}_{\text{ad}}^{2-}$ - $\text{O}_{\text{ad}}^{2-}$, **Obr. 1** (a), ktoré majú nižšiu energiu ako jednonásobne nabité atómy, O_{ad}^{-} - O_{ad}^{-} , **Obr. 2** (d).



Obr. 1.

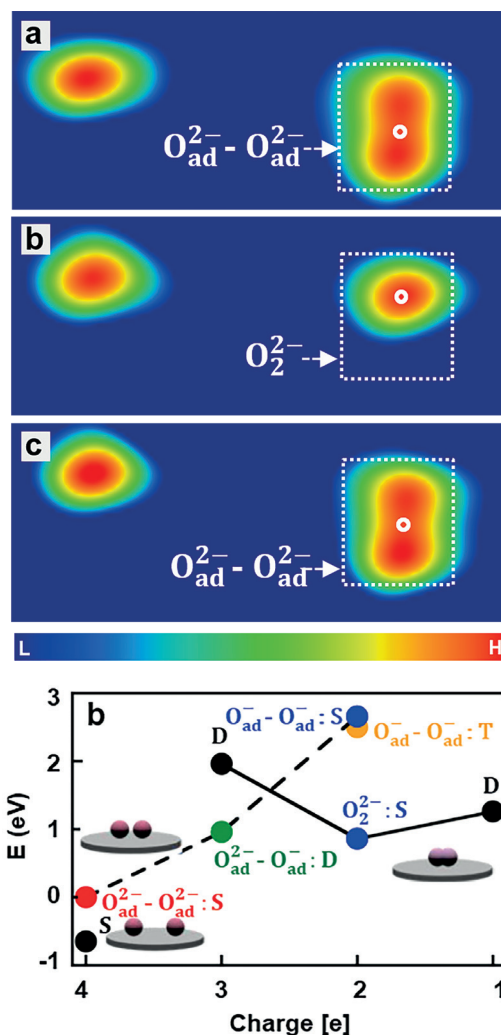
Atómy kyslíka v rôznych nábojových stavoch na povrchu TiO_2 .

(a-c) obrazy získané experimentálne z atomárneho silového mikroskopu a pomocou počítačových simulácií (d-f).

Tieto energie sú výsledkom počítačového modelovania a zistiť ich priamo experimentálne nie je jednoduché. **Atomárny silový mikroskop môže manipulovať náboje atómov kyslíka a umelo vytvoriť inak nabité páry**, napr. jednonásobne nabité, $O_{ad}^- - O_{ad}^-$, Obr. 1 (b), alebo ich kombináciu, $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^-$, Obr. 1 (c), ktoré majú výrazne vyššie energie, Obr. 2 (d). Počítačové modelovanie umožňuje priame overenie tejto interpretácie aj priamou simuláciou obrazu rôzne nabitých atómov kyslíka v atomárnom silovom mikroskope, Obr. 1 (d-f) a porovnaním s experimentom, Obr. 1 (a-c). Ako je ukázané na Obr. 2, **atomárny silový mikroskop okrem náboja dokáže manipulovať, t.j. vytvárať a rušiť, aj chemické väzby medzi atómami na povrchoch**. Ak mikroskop z dvojice atómov $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$ odoberie dva elektróny, prinúti tieto dva atómy vytvoriť chemickú väzbu a zrea-govať na peroxid, O_2^{2-} , pričom táto reakcia je reverzibilná, Obr. 2 (c). To, že táto interpretácia je správna, je možné opäť overiť počítačovými simuláciami, Obr. 2 (d). Ak mikroskopom z páru atómov $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$ odobratím dvoch elektrónov vytvoríme pár $O_{ad}^- - O_{ad}^-$, je pre neho energeticky výhodnejšie vytvoriť molekulu peroxidu, Obr. 2 (d). Naopak, pridaním dvoch elektrónov do molekuly peroxidu vytvoríme molekulu O_2^{4-} , ktorá je nestabilná a okamžite sa transformuje na $O_{ad}^{2-} - O_{ad}^{2-}$, pričom tieto manipulácie sú reverzibilné. Tieto manipulácie otvárajú cestu k chemickým reakciám plne riadenými manipuláciou náboja pomocou atomárneho silového mikroskopu.

Prof. Ivan Štich

Fyzikálny ústav
Slovenskej akadémie vied
Bratislava



Obr. 2.

Reverzibilná manipulácia nabitých atómov kyslíka do molekuly peroxidu (a-c).

Energie spočítané pomocou počítačových simulácií (d).

Šípky označujú reverzibilné manipulačné procesy vedúce k reakcii atómov kyslíka na molekulu.

Chcete sa dozvedieť viac?

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

Projekt Superheroes 4 Science je podporovaný Vyšehradským fondom.
www.visegradfund.org

Visegrad Fund

Výpočtové stredisko
Centra spoločných činností
Slovenskej akadémie vied
www.vs.sav.sk