

Szuperhősök a tudomány SZOLGÁLATÁBAN



A GRAFÉN KVANTUM HULLÁMAI

Amikor egy frissen vasalt asztalterítőt ráterítesz az asztalra, úgy tűnik tökéletesen lapos és sima. Azonban az atomok mikro-világában a dolgok másképpen működnek. A vékony membránok, melyek az asztalterítőhöz hasonlóak, önmagukban fodrozódnak mindaddig, amíg elég vékonyak.

Ennek megértéséhez fordulunk a fizikához, amely a mikrovilágot tanulmányozza. Tekintsük a legvékonyabb anyagot, amit el tudunk képzelni. Mivel minden anyag atomokból áll, az anyag legalacsonyabb vastagsága egy atom. Az első kutatók, akik ilyen anyagot előállítottak, A. Geim és K. Novoselov fizikusok voltak, akik ragasztószalagot használtak, hogy egy atomnyi vékony réteget válasszanak le a grafitceruza-bélről. Grafén rétegnek nevezték, és így elkészítették az első kétdimenziós anyagmintát. Kétdimenziós, mivel vastagsága sokkal kisebb, mint a szélessége és hossza. Felfedezésükért, amelyért 2010-ben fizikai Nobel-díjat kaptak, új korszakot indítottak el a fizika és technológia területén. A grafén az elektronika iparban nagyon ígéretesnek tekinthető, szokatlan elektromos tulajdonságai miatt.

A grafén más kivételes tulajdonságokkal is rendelkezik, például nagy mechanikai szilárdságával és hővezető képességével. A grafén ma már nem az

egyetlen kétdimenziós anyag, sok más is van, és ezek listája folyamatosan bővül. Ezenkívül különböző kétdimenziós anyagok egymásra helyezhetők, amivel új, érdekes tulajdonságú anyagok hozhatók létre és amelyeknek igen széles az alkalmazási területe.

A fizikából tudjuk, hogy az atomok folyamatosan mozognak, magasabb hőmérsékleten gyorsabban és alacsonyabb hőmérsékleten lassabban mozognak. Emiatt a grafén és más kétdimenziós anyagok nem lehetnek teljesen laposak és simák. Még akkor sem, ha a hőmozgás teljesen leáll (abszolút nullára hűtve, 0 fokos Kelvinre), az atomok továbbra sem maradnának ugyanabban a helyzetben. Ez a kvantum mechanika miatt van, amely azt mondja, hogy még a legalacsonyabb hőmérsékleten is az atomok valamilyen mozgást végeznek, amit **nullponti mozgásnak** nevezünk. Ez a nullponti mozgás is hullámokat hoz létre a grafénen, és nem lehet megállítani. A fizikusok szeretnék megismerni a grafén kvantum-hullámok tu-



SZLOVÁKIA

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

lajdonságait. Ezeket azonban nagyon nehéz kiszámítani, mivel a kvantum-hullámok bonyolultabbak, mint a termikusak. És ez az a pont, ahol az **AUREL** szuperszámítógép közbelép a segítségünkre.

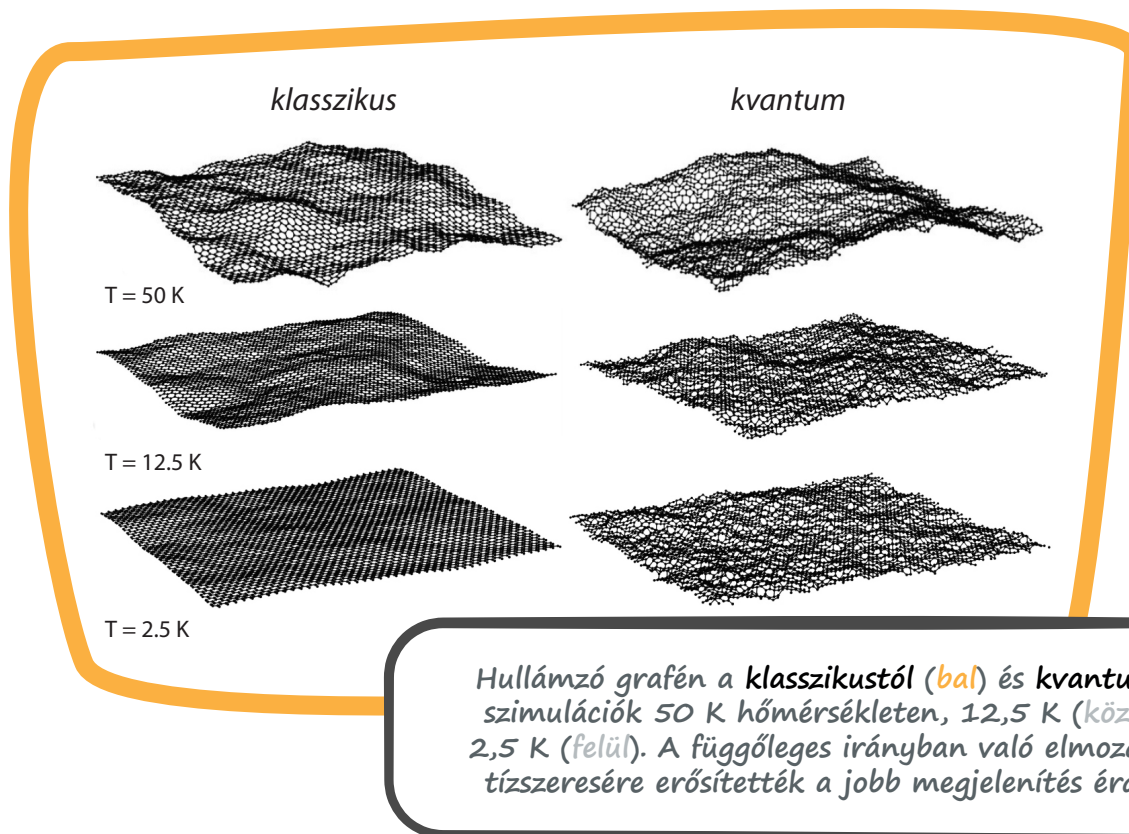
2013-ban Juraj Hasik, a Pozsonyi Comenius Egyetem Matematika, Fizika és Informatika Kara Elméleti Fizika Tanszékének hallgatója, Roman Martonák professzor irányítása mellett kezdett el foglalkozni ezzel a problémával. Kódot írt, amely matematikailag szimulálja a grafén kvantum-hullámait. A kvantum világ azonban bonyolult, és a számításnak nagyszámú matematikai műveletet kell végrehajtania. Ha egy hagyományos személyi számítógépen indítanánk ezt el, éveket venne igénybe. Annak köszönhetően, hogy Aurel ún. párhuzamos számítógép, egyszerre nagyszámú (tíz, száz, sőt akár ezer) számítás is elvégezhető egyidőben. Egy komoly számítási problémát érdemes kisebb részekre bontani, amelyek egyidőben külön-külön megoldhatók és így a teljes számítás sokkal gyorsabb lesz. Egy ilyen program megírása természetesen nem könnyű, de megéri az erőfeszítést. Juraj Hasik

folytatta kutatásait azt követően, hogy csatlakozott egy Phd (doktori) programhoz a trieszti International School for Advanced Studies-nál, Olaszországban, ahol Erio Tosatti professzorral dolgozott.

Mit árult el nekünk **AUREL** a grafénben lévő kvantum hullámokról? Kiderült, hogy teljesen különböznek a klasszikus hullámoktól. Hosszabb távolságon gyengébbek, és így a grafén sík marad. Rövidebb távolságon viszont erősebbek, így a grafén durvább. Egyszerűen a kvantum grafén alacsonyabb hőmérsékleten kisimultabb és durvább, mint a klasszikus grafén. Ezt a munkát a *Physical Review B* (04/04/2018) újságban publikálták, ahol a szerkesztők javaslatára külön ki is volt emelve a tanulmány.

Roman Martonák professzor

Kísérleti Fizika Tanszék
Matematika, Fizika és Informatika Kar
Pozsonyi Comenius Egyetem
SZLOVÁKIA



Szeretnél többet tudni?

superheroes4science.eu

facebook.com/superheroes4science

instagram.com/superheroes4science

A Superheroes 4 Science projekt
a Visegrádi Alap támogatásával jött létre.

www.visegradfund.org

Visegrad Fund