



Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk

adres: ul. Kasprzaka 44/52
01-224 Warszawa
tel.: +48 22 3432000
fax/tel.: +48 22 3433333, 6325276
email: ichf@ichf.edu.pl
WWW: <http://www.ichf.edu.pl/>

Warszawa, 5 czerwca 2013

Planety-olbrzymy pomogą szybciej badać własności powierzchni materiałów

Nowy, szybki i dokładny algorytm z Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie, bazujący na matematyce zjawisk zachodzących podczas oddziaływania światła z atmosferami planet gazowych, to ważny krok ku lepszemu poznaniu własności fizycznych i chemicznych powierzchni materiałów badanych w warunkach laboratoryjnych.

Do najjaśniejszych obiektów nocnego nieba należą gazowe olbrzymy Układu Słonecznego: Jowisz i Saturn. Widzimy je, ponieważ światło naszej gwiazdy oddziałuje z ich gęstymi atmosferami. Matematyczny opis tego, co dzieje się ze światłem w atmosferze gazowej planety, wyprowadził w 1950 roku Subramanyan Chandrasekhar, słynny indyjski astrofizyk i matematyk. W liczącym dwieście stron wyprowadzeniu pojawiła się pewna skomplikowana funkcja, która obecnie znajduje zastosowanie m.in. przy badaniu fizycznych i chemicznych własności powierzchni materiałów. Wyznaczanie bardzo dokładnych wartości funkcji Chandrasekhara nadal jest wyzwaniem. W Instytucie Chemii Fizycznej PAN (IChF PAN) w Warszawie udało się znaleźć metodę obliczania wartości tej funkcji z dokładnością do kilkunastu miejsc po przecinku. Nowy algorytm, łączący różne metody obliczeniowe, jest przy tym znacznie szybszy od dotychczasowych.

Gdy światło wpada w atmosferę gazowej planety, rozprasza się w niej na różne sposoby (elastycznie i nieelastycznie). Dodatkowo fale świetlne o pewnych długościach są selektywnie pochłaniane przez pierwiastki i związki chemiczne zawarte w atmosferze. „Zwykle wydaje się nam, że światło gwiazdy po prostu odbija się od planety jak od lustra. To nie jest prawda. W atmosferze planety dochodzi do wielu zjawisk związanych z transportem promieniowania”, mówi prof. dr hab. Aleksander Jabłoński z IChF PAN.

Prawa fizyczne związane z oddziaływaniem światła z atmosferą gazowego olbrzyma można wykorzystać także do opisu emisji elektronów wskutek oświetlenia próbek materiałów wiązką promieniowania rentgenowskiego. Fotelektrony o określonej energii, opuszczające powierzchnię próbki, są emitowane jedynie z obszaru kilku warstw atomowych. Elektrony emitowane głębiej tracą energię wskutek oddziaływań z atomami ciała stałego. Analiza energii i intensywności sygnału fotelektronów pozwala oceniać własności powierzchni badanego materiału.

„Za pomocą powierzchniowo czułych metod spektroskopowych możemy określać cechy najbardziej zewnętrznych warstw materiałów, ich skład czy też stan chemiczny. Ta wiedza jest

szczególnie ważna w inżynierii materiałowej, mikroelektronice i różnych nanotechnologiach, a także w tak istotnych procesach jak kataliza czy wszechobecna korozja”, wyjaśnia prof. Jabłoński.

Prof. Jabłoński od lat przygotowuje bazy danych dla amerykańskiego Narodowego Instytutu Technologii i Standardyzacji (National Institute of Standards and Technology, NIST). Zawierają one pewne parametry niezbędne w obliczeniach związanych z badaniem własności spektroskopowych powierzchni. Jedną z tych baz była w całości wyznaczona z użyciem matematyki zbliżonej do formalizmu pierwotnie zaproponowanego przez Chandrasekhara do opisu zjawisk astronomicznych.

Obliczenia potrzebne do opracowania wyników badań spektroskopowych powierzchni wymagają wielokrotnego wyznaczania wartości funkcji Chandrasekhara z możliwie dużą dokładnością. Problem tkwi w tym, że choć funkcja Chandrasekhara opisuje stosunkowo proste zjawisko fizyczne, sama jest dość skomplikowanym wyrażeniem matematycznym. Istnieje wiele metod obliczania wartości tej funkcji z niezbyt dużą dokładnością, zbliżoną do 1-2%. W niektórych zastosowaniach związanych z transportem elektronu w powierzchniowych warstwach materiałów pojawia się jednak konieczność wyznaczania wartości funkcji Chandrasekhara z precyzją nawet do 11-15 miejsc po przecinku.

„W ostatnich latach udało mi się opracować algorytm, który pozwala otrzymać tak dużą dokładność, a przy tym działa nawet kilkadziesiąt razy szybciej od dotychczasowych”, mówi prof. Jabłoński. Wzrost szybkości wykonywania algorytmu jest równie ważny jak wzrost dokładności. Związane jest to z faktem, że w programach modelujących transport elektronów na powierzchni materiału funkcję Chandrasekhara trzeba liczyć tysiące, a nawet dziesiątki tysięcy razy.

Kod programu realizującego nowy algorytm wyznaczania wartości funkcji Chandrasekhara został udostępniony w czasopiśmie „Computer Physics Communications”.

Warto podkreślić, że funkcja Chandrasekhara odgrywa ważną rolę nie tylko w astronomii czy fizykochemii powierzchni. Znalazła zastosowanie także w energetyce jądrowej, gdzie używa się jej m.in. do analizowania rozpraszania neutronów w osłonach reaktorów atomowych.

Materiał prasowy przygotowany w ramach grantu NOBLESSE z działania „Potencjał badawczy” 7. Programu Ramowego Unii Europejskiej.

Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (<http://www.ichf.edu.pl/>) został powołany w 1955 roku jako jeden z pierwszych instytutów chemicznych PAN. Profil naukowy Instytutu jest silnie powiązany z najnowszymi światowymi kierunkami rozwoju chemii fizycznej i fizyki chemicznej. Badania naukowe są prowadzone w 9 zakładach naukowych. Działający w ramach Instytutu Zakład Doświadczalny CHEMIPAN wdraża, produkuje i komercjalizuje specjalistyczne związki chemiczne do zastosowań m.in. w rolnictwie i farmacji. Instytut publikuje około 200 oryginalnych prac badawczych rocznie.

KONTAKTY DO NAUKOWCÓW:

prof. dr hab. **Aleksander Jabłoński**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk
tel. +48 22 3433331
email: jablo@ichf.edu.pl

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://www.ichf.edu.pl/>
Strona Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/press/>
Serwis prasowy Instytutu Chemii Fizycznej PAN.

MATERIAŁY GRAFICZNE:

IChF130605b_fot01s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2013/06/IChF130605b_fot01.jpg

Do opisu zjawisk zachodzących podczas spektroskopowych badań powierzchni materiałów używa się funkcji znalezionej przez S. Chandrasekhara przy analizie oddziaływania światła z atmosferami planet – gazowych olbrzymów. W Instytucie Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie opracowano nowy algorytm wyznaczania wartości tej funkcji, znacznie dokładniejszy i kilkudziesięciokrotnie szybszy od dotychczasowych. Po lewej Saturn z przechodzącym na jego tle Tytanem, zdjęcie z misji Cassini. Po prawej zdjęcie powierzchni węgla aktywowanego NORIT ze skaningowego mikroskopu elektronowego FEI Nova NanoSEM 450 (pow. 5000x, kolory sztuczne). (Źródło: NASA/JPL-Caltech/Space Science Institute, IChF PAN)

IChF130605b_fot02s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2013/06/IChF130605b_fot02.jpg

Oddziaływanie światła z atmosferą planety nie jest tak proste jak odbicie od lustra. W atmosferze dochodzi do wielu zjawisk związanych z transportem energii. Używana do ich opisu funkcja Chandrasekhara znalazła zastosowanie także w spektroskopii powierzchni materiałów. (Źródło: IChF PAN/jch)