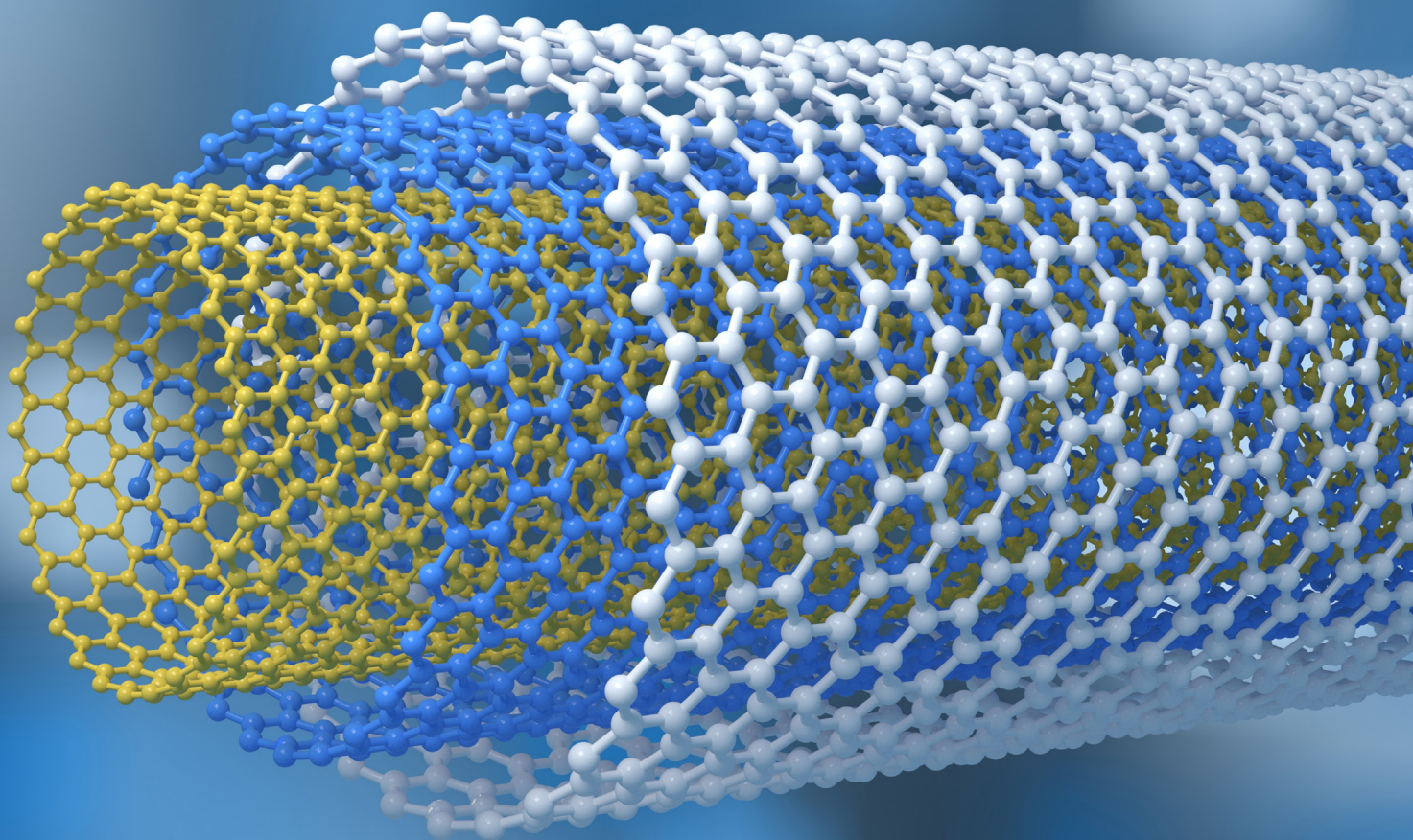


Ιστορίες επιτυχίας στις Επιστήμες της Χημείας & των Υλικών



THE PARTNERSHIP FOR ADVANCED COMPUTING IN EUROPE



Από την πέτρα στον χαλκό και τον σίδηρο μέχρι το πλαστικό και το πυρίτιο του σήμερα - τα υλικά που χρησιμοποιούμε και αναπτύσσουμε όχι μόνο καθορίζουν περιόδους της ανθρώπινης ιστορίας, αλλά και τα τεχνολογικά όρια και τις δυνατότητές μας. Οι ερευνητές των επιστημών της χημείας και των υλικών στοχεύουν στη διεύρυνση αυτών των δυνατοτήτων. Με αυτόν τον τρόπο, οι προσομοιώσεις αιχμής που εκτελούνται σε υπερυπολογιστές, που ανήκουν στην Ευρωπαϊκή κοινότητα PRACE, τους βοηθούν να ανακαλύψουν και να σχεδιάσουν νέα, συναρπαστικά υλικά για το μέλλον μας. Παρουσιάζουμε τρία έργα που ακολουθούν διαφορετικούς τρόπους για να διερευνήσουμε υλικά που είναι πιθανό να αυξήσουν τις δυνατότητές μας στην ηλεκτρονική σε ένα νέο επίπεδο.

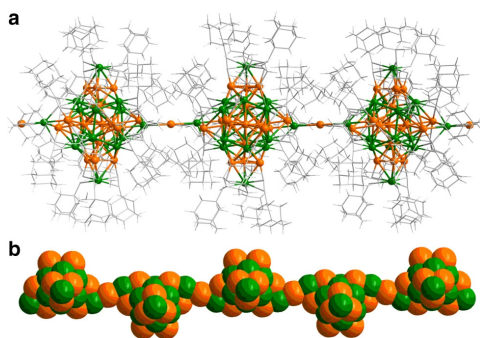


www.prace-ri.eu

Ιστορίες επιτυχίας στις Επιστήμες της Χημείας & των Υλικών

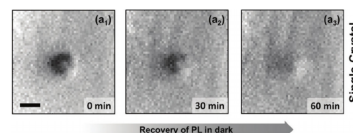
Για τη φύση της αυτό-οργάνωσης

Είτε πρόκειται για αμινοξέα που σχηματίζουν πρωτεΐνες είτε για νουκλεοτίδια που συγκεντρώνονται σε DNA: Η ζωή συμβαίνει μέσω της αυτό-οργάνωσης μορίων. «Μερικές φορές αυτό συμβαίνει και στην επιστήμη των υλικών», λέει ο Hannu Häkkinen, καθηγητής υπολογιστικής νανοεπιστήμης στο Πανεπιστήμιο Jyväskylä της Φινλανδίας. Μαζί με συναδέλφους του από το Πανεπιστήμιο Xiamen της Κίνας, η ομάδα του διερεύνησε έναν μοναδικό τύπο συσσωματωμάτων χρυσού-αργύρου που αποτελούνται από 34 άτομα, τα οποία μπορούν να αυτό-οργανωθούν, μέσω συγκεκριμένων αντιδράσεων, σε σταθερές «πολυμερικές» αλυσίδες απλώς με την προσθήκη ενός συγκεκριμένου οργανικού διαλύτη στο μείγμα. "Τέτοιες αντιδράσεις αυτό-οργάνωσης προσφέρουν την ευκαιρία να χρησιμοποιηθούν καλά καθορισμένα δομικά στοιχεία για το σχεδιασμό νανοϋλικών με ρυθμιζόμενες ιδιότητες", λέει ο Häkkinen. Χρησιμοποιώντας τους πόρους από το PRACE, ο ίδιος και η ομάδα του μοντελοποίησαν τη δομή του νέου νανοϋλικού και μελέτησαν τις ηλεκτρικές του ιδιότητες. Τα αποτελέσματα έδωσαν πληροφορίες για τον βασικό ρόλο του διαλύτη στην διαδικασία της αυτό-οργάνωσης. "Τα μόρια του διαλύτη προστατεύουν τα αντιδραστικά άτομα χρυσού και αργύρου από το περιβάλλον, έτσι ώστε οι συστάδες να γίνουν δομικά στοιχεία που μπορούν να ελεγχθούν", εξηγεί ο Häkkinen. Οι υπολογισμοί επιβεβαίωσαν επίσης ένα μάλλον ασυνήθιστο χαρακτηριστικό του υλικού: Είναι ηλεκτρικός αγωγός στην κατεύθυνση κατά μήκος των ινών αλλά μονωτής στις άλλες δύο κατευθύνσεις. Στο μέλλον, οι υπολογιστικές μέθοδοι θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για να διαφοροποιήσουν τη σύνθεση των συστάδων και του διαλύτη για τη διερεύνηση άλλων υποσχόμενων νέων συναρμολογήσεων.



Πώς να βελτιώσετε την ανοχή στους Περοβσκίτες

Οι Περοβσκίτες είναι ιδιόμορφα υλικά: Λόγω ενός ιδιαίτερου χαρακτηριστικού των τροχιακών ηλεκτρονίων τους, είναι έντονα ανεκτικοί σε πιθανές ατέλειες των υλικών, ο οποίος είναι ο κύριος λόγος για τον οποίο θεωρούνται τόσο πολλά υποσχόμενα υλικά για μελλοντικές ηλεκτρονικές συσκευές. «Ωστόσο, η ανοχή στις ατέλειες δεν είναι συνεπής σε όλο το υλικό», λέει η Simone Meloni, Επίκουρη Καθηγήτρια στο Πανεπιστήμιο της Ferrara. Προφανώς, τα όρια μεταξύ κρυσταλλικών κόκκων σε κατασκευασμένους περοβσκίτες παίζουν καθοριστικό ρόλο σε αυτό. Για καλύτερη κατανόηση αυτού του φαινομένου, η Meloni και οι συνεργάτες της πραγματοποίησαν προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής χρησιμοποιώντας έναν αρχετυπικό περοβσκίτη (MAPbI3). Έδειξαν ότι πιθανές ατέλειες, όπως το κενό ενός ιόντος, όντως παγιδεύονται σε ενεργειακά ελάχιστα που συμβαίνουν στα όρια των κόκκων. Η συνέπεια αυτής της συμπεριφοράς έγινε ορατή σε εργαστηριακά πειράματα. Ενώ ένα δείγμα αποτελούμενο από έναν μονό κρύσταλλο ανέκαμψε γρήγορα από μια διάσπαση μέσω ατελειών που προκαλούνται από το φως, το άλλο δείγμα, μια πολυκρυσταλλική μεμβράνη που περιέχει πολλά όρια κόκκων, σχεδόν δεν ανακτήθηκε καθόλου. Οι γνώσεις αυτές υποδεικνύουν το πλεονέκτημα της κατασκευής υμενίων περοβσκίτη με λίγους κρυσταλλικούς κόκκους - για την ασφαλή αποφυγή της δυσμενούς επίδρασης των ορίων κόκκων.



Εξερευνώντας το τοπίο των δισδιάστατων υλικών

Τα τελευταία χρόνια, τα δισδιάστατα (2D) υλικά όπως το γραφénιο έχουν προσελκύσει μεγάλο ενδιαφέρον λόγω των εξαιρετικών οπτικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων τους. Ωστόσο, μόνο μερικές δεκάδες 2D υλικά έχουν ερευνηθεί πειραματικά μέχρι τώρα. Τώρα, μια ομάδα με επικεφαλής τον Nicola Marzari, καθηγητή επιστήμης υλικών στο EPFL στην Ελβετία, έχει αυξήσει αποφασιστικά τον αριθμό των υποψηφίων προς μελέτη. Έχουν εξετάσει περισσότερες από 100.000 ανόργανες ενώσεις σε υπολογισμούς υψηλής απόδοσης, επιδιώκοντας να προβλέψουν ποιες θα μπορούσαν να παραχθούν στο εργαστήριο μάλλον εύκολα με απολέπιση από το χύμα τρισδιάστατο μητρικό υλικό. Σε μια πρώτη εκτέλεση, οι ερευνητές εντόπισαν περίπου 1.000 εύκολα ευέλικτα υλικά. Τώρα, σε μια δεύτερη εκτέλεση χρησιμοποιώντας πόρους PRACE, έχουν διπλασιάσει αυτόν τον αριθμό. "Με αυτό, η κοινότητα έχει ξαφνικά ένα ευρύ χαρτοφυλάκιο 2D υλικών για να δουλέψει", λέει ο Marzari. Η ομάδα προέβλεψε επίσης τις ηλεκτρονικές ιδιότητες ενός αριθμού αυτών των 2D υλικών και βρήκε αρκετούς τοπολογικούς μονωτήρες, δηλαδή υλικά που είναι μονωτικά στο εσωτερικό τους αλλά διαθέτουν αγωγίμα άκρα. Η ρυθμιζόμενη ηλεκτρική τους αντίσταση θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για τη δημιουργία ενός νέου τύπου ηλεκτρονικών εξαρτημάτων. Ένα άλλο αστρικό υλικό που ερεύνησε η ομάδα του Marzari είναι ο υπεραγωγός W2N3, για τον οποίο προέβλεψαν μια ρεκόρ υψηλής κρίσιμης υπεραγωγίμης θερμοκρασίας 22 Kelvin σε πίεση περιβάλλοντος - συνθήκες που μπορούν να επιτευχθούν με τη χρήση υγρού υδρογόνου αντί για το ακριβό ήλιο. "Αυτό είναι ένα πολύ συναρπαστικό εύρημα", λέει ο Marzari. Είναι πεπεισμένος ότι, μελλοντικά, οι υπολογιστικές μέθοδοι θα επιταχύνουν περαιτέρω τον εντοπισμό συναρπαστικών 2D υλικών.

