

3DED-QCR: TRÓJWYMIAROWA DYFRAKCJA ELEKTRONÓW SPOTYKA SIĘ Z KRYSTALOGRAFIĄ KWANTOWĄ

Paulina M. Dominiak, Lukáš Palatinus

CEL PROJEKTU

Celem projektu jest usprawnienie procesu wyznaczania struktur krystalicznych nano-kryształów. Znajomość struktury krystalicznej badanego materiału jest bardzo ważna dla zrozumienia jego właściwości. Aby uzyskać struktury krystaliczne z bardzo małych monokryształów (mniejszych niż jeden mikrometr), należy zastosować metodę zwaną trójwymiarową dyfrakcją elektronów (3D ED). Analiza danych dotyczących dyfrakcji elektronów jest jednak skomplikowana i wciąż stwarza szereg wyzwań. Jedną z nich jest możliwość uwzględnienia w analizie efektu oddziaływań między atomami w strukturze kryształu. Ta część analizy struktury krystalicznej należy do obszaru krystalografii kwantowej. Celem tego projektu jest połączenie świata 3D ED i krystalografii kwantowej oraz umożliwienie dostępu do kwantowo-krystalograficznej informacji uzyskanej z bardzo małych kryształów.

POWODY PODJĘCIA TEJ TEMATYKI BADAWCZEJ

Krystalografia kwantowa dostarcza wielu informacji o materiałach, których używamy w życiu codziennym, od stopów metali i materiałów ceramicznych po farmaceutyki i biocząsteczki. Pozwala nam zrozumieć, jak i dlaczego materiały mają takie właściwości. Pozwala również na określenie struktury kryształu z większą dokładnością. Eksperymentalne określenie tych właściwości jest kluczowe dla walidacji obliczeń teoretycznych i jest niezbędne w przypadkach, gdy teoria nadal nie dostarcza wiarygodnych wyników. Chcemy, aby te informacje były dostępne dla materiałów, dla których dotychczas nie były dostępne.

OPIS BADAŃ

Projekt będzie realizowany we współpracy między grupami na Uniwersytecie Warszawskim oraz w Instytucie Fizyki Czeskiej Akademii Nauk w Pradze. Grupa warszawska ma bogate doświadczenie w krystalografii kwantowej, natomiast grupa z Pragi ma wiedzę na temat dokładnej analizy struktury metodą 3D ED. Pierwszym krokiem w badaniach będzie zebranie bardzo wysokiej jakości danych dyfrakcyjnych i porównanie ich z obliczeniami teoretycznymi. Po potwierdzeniu dobrej zgodności przystąpimy do modyfikacji oprogramowania potrzebnego do wyodrębnienia informacji chemicznych, aby działało z danymi z dyfrakcji elektronów. Przetestowane zostaną dwa modele - tak zwany TAAM (transferable aspherical atom model), w którym oddziaływania międzyatomowe są określane za pomocą obliczeń teoretycznych i wykorzystywane do udoskonalenia opisu danych eksperymentalnych oraz metoda udokładniania multipolowego, która umożliwia niezależne określenie interakcji międzyatomowych wyłącznie z danych eksperymentalnych.

NAJWAŻNIEJSZE SPODZIEWANE EFEKTY

Kluczowym wynikiem będzie zestaw metod i narzędzi programistycznych do wykonywania kwantowo-krystalograficznego wyznaczania struktury z danych z dyfrakcji elektronów. Narzędzia te zostaną udostępnione innym naukowcom, aby umożliwić im uzyskanie lepszych wyników w swoich badaniach. Planujemy również zastosować opracowane metody do ciekawych problemów naukowych.