

Wszyscy doświadczamy czasem stresu, każdy na swój unikalny sposób. Atomy też! Nie są one prostymi sferami, jak powszechnie się uważa. Za pomocą promieni rentgenowskich możemy ujawnić ich skomplikowane kształty oraz najbardziej prawdopodobne miejsca, występowania ich elektronów. Osiąga się to poprzez analizę funkcji znanej jako gęstość elektronowa.

Poprzez kilka operacji rachunku różniczkowego na gęstości elektronowej możemy określić granice atomów, ujawniając ich kształt, rozmiar, a nawet ładunek w przypadku jonów. Naszym celem jest głębsze zrozumienie zachowania atomów, szczególnie w warunkach ekstremalnego ciśnienia. W tym zagadnieniu tkwi sedno naszego projektu.

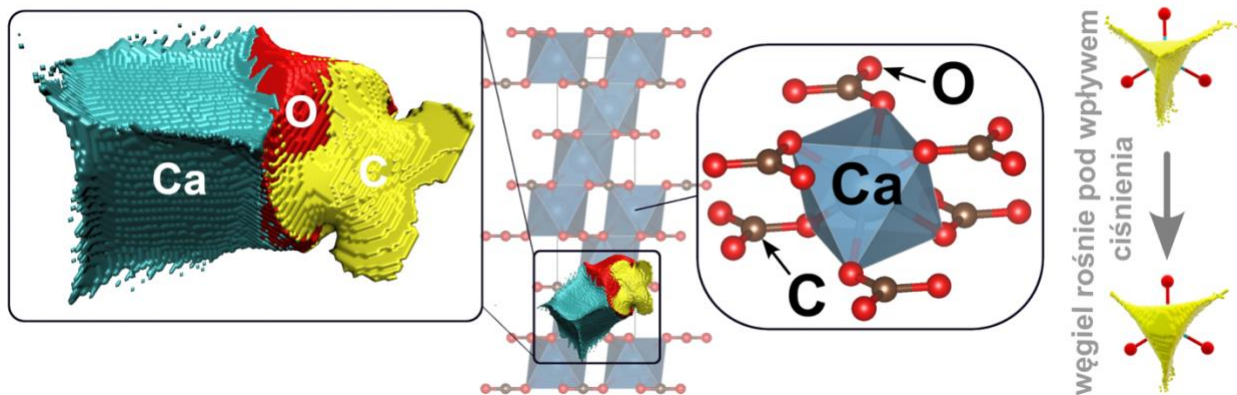
Naszym celem jest wygenerowanie ogromnego ciśnienia na minerałach występujących we wnętrzu Ziemi, badając, jak atomy zmieniają kształt i wymieniają ładunki w takich warunkach. Aby to osiągnąć, używamy celek z diamentowymi kowadłami zdolnych do generowania ciśnień sięgających setek tysięcy atmosfer w których umieszczamy badany kryształ minerału.

Jednym z niezwykłych odkryć, którego niedawno dokonaliśmy jest rozszerzanie, wzrost atomów poddanych wysokiemu ciśnieniu. To nieoczekiwane zjawisko wynika z przepływu ładunku elektronów między atomami. Zaobserwowaliśmy ten efekt w atomach węgla w kalcycie (CaCO_3), minerale powszechnie występującym w formacjach wapiennych. Kolejnym krokiem jest rozszerzenie badań na kolejne grupy minerałów, takich jak oliwiny, perowskity i apatyty, aby uzyskać kompleksowe zrozumienie tego intrygującego zjawiska.

Perowskit (CaTiO_3) to minerał o fascynującej strukturze krystalicznej, który ma ogromny potencjał w technologii. Jego syntetyczne, zmodyfikowane pod względem składu chemicznego są badane pod kątem wykorzystania w energii odnawialnej, szczególnie w produkcji efektywnych i tanich ogniw słonecznych. Dzięki swoim unikalnym właściwościom optycznym i elektrycznym, perowskity mogą zrewolucjonizować sposób pozyskiwania energii słonecznej.

Apatyt to grupa minerałów fosforanowych, które są niezwykle ważne dla życia na Ziemi. Jest głównym składnikiem kości i zębów wszystkich kręgowców. Jego wzór chemiczny to $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F},\text{Cl},\text{OH})$.

Oliwiny to przeważnie zielone minerały występujące w płaszczu Ziemi i w meteorytach ($(\text{Mg},\text{Fe})_2\text{SiO}_4$). Są także używane jako kamienie szlachetne. Nasze badania skupią się także na minerałach, które już zostały przekształcone w wyniku szoku ciśnieniowego, takich jak ringwoodyt w meteorytach, przeobrażony na skutek impaktu. Ringwoodyt to wysokociśnieniowy polimorf oliwiny, powszechny minerał w płaszczu Ziemi. Powstaje on w warunkach ekstremalnego ciśnienia i temperatury, typowych dla głębokiego wnętrza Ziemi.



Rysunek 1. Fragment kryształu kalcytu przedstawiający dwie reprezentacje atomów. Morfologia atomów (po lewej). Klasyczna reprezentacja wielościanów, z atomami przedstawionymi jako kule (po środku). Przykład powiększania się węgla wraz ze wzrostem ciśnienia od 8.5 do 11.3 kbar (po prawej).