

Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu **ESF-EC-0007-07****Manipulácia nanočastíc pomocou techník atomárnej silovej mikroskopie**Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Ivan Štich, DrSc.**Príjemca **FU SAV****Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený**

1. FÚ SAV, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava 45
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Physikalisches Institut and Center for Nanotechnology (CeNTech), Westfälische Wilhelms-Universität Muenster, Germany
2. Department of Physics, University of Basel, Klingelbergstrasse 82, 4056 Basel, Switzerland
3. Centre for Nanometer-Scale Science and Advanced Materials (NANOSAM), Jagiellonian University, Reymonta 4, 30-059 Krakow, Poland

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. J. Brndiar, R. Turanský, D. Dietzel, A. Schirmeisen and I. Štich, Understanding frictional duality and bi-duality: Sb-nanoparticles on HOPG, Nanotechnology 22, 085704 (2011)
2. Ján Brndiar, R. Turanský, and I. Štich, Simulation of frictional behavior of Sb nanoparticles on HOPG: Frictional duality and biduality, PHYSICAL REVIEW B 84, 085449 (2011)
3. B. Such, T. Glatzel, S. Kawai, E. Meyer, R. Turanský, J. Brndiar, and I. Štich, Interplay of the tip-sample junction stability and image contrast reversal on a Cu(111) surface revealed by the 3D force field, Nanotechnology 23, 045705 (2012)

4. J. Brndiar, R. Turanský, and I. Štich, Computational Insights into Nanotribology, Prijaté v Proceedings of the 6th Africa Materials Research Society (2012), Cambridge University Press
5. pre ostatné 2 odoslané/1 pripravovanú publikácie vid' záverečnú správu

Uplatnenie výsledkov projektu

Jedná sa o výsledky základného výskumu, napr. väčšina výsledkov sa týka UHV podmienok, a preto ich primárny význam je najmä v budovaní poznatkovej základne vedomostnej ekonomiky v oblasti nanotechnológií. Jedna časť výsledkov je z oblasti nanotribológie, ktorá je dôležitá v oblasti mechaniky na nanoškále, NEMS, MEMS, atď. Druhá časť výsledkov sa týka NC AFM mikroskopie a jej využitia pre zobrazovanie a manipuláciu na nanoškále. Dosiahli sme jeden praktický výsledok, ktorý zaručuje identifikáciu a modifikáciu asperity na hrote kontrolovaným spôsobom pred aj počas manipulácie. Informácia o nanoasperite, ktorou je hrot terminovaný je totiž nevyhnutná pre aplikácie v nanotechnológií, kontrolovanej manipulácii atómov a molekúl na povrchoch, budovaní nanozariadení, atď. Ukazuje sa však, že zatiaľ neexistuje robustný protokol, ktorý by zaručoval požadovanú termináciu hrotu. Navrhli sme preto protokol, tzv. „chemical fingerprinting“, ktorý zaručuje identifikáciu a modifikáciu asperity na hrote kontrolovaným spôsobom pred aj počas manipulácie. Na tento účel sme použili systém kyslíkom terminovaného povrchu Cu(110)c(6×2).

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Do projektu NANOPARMA FÚ SAV a skupina prof. Šticha zabezpečovala počítačové simulácie laboratórnych experimentov v oblasti atomárnej silovej mikroskopie (AFM). Simulovali sa dva režimy: (a) kontaktný mód (nanotribológia) a (b) bezkontaktný mód (zobrazovanie a nanomanipulácia). V (a) sme objasnili na atomárnej škále podstatu troch separovaných frikčných režimov pre nanočastice antimónu manipulované na HOPG ((1) zanedbateľné trenie, (2) normálne trenie- sila trenia rastie lineárne s kontaktnou plochou nanočastice a (3) trenie za ambientných podmienok- sila trenia rastie lineárne s kontaktnou plochou nanočastice pričom sila trenia je o rád väčšia). Simulácie ukázali, že počet frikčných vetiev môže byť aj menší ako 3. Detailne sme sa tiež zaoberali popisom van der Waalsovských rozhraní metódami teórie hustotového funkcionálu s približným popisom disperzných interakcií. V (b) sme študovali mechanizmus inervzie kontrastu v NC AFM povrchu Cu(111) a ukázali sme, že tento jav súvisí s neobvyklou stabilitou nanoprechodu hrot-vzorka v medi na rozdiel napr. od zlata alebo hliníku. Detailne sme študovali zobrazovanie systému kyslíkom terminovaného povrchu Cu(111)c(6×2) a ukázali, že obraz vzniká presne opačným spôsobom, než ako to bolo predpokladané len na základe experimentu. S použitím tohto systému sme navrhli nový protokol, tzv. „chemical fingerprinting“, ktorý zaručuje identifikáciu a modifikáciu asperity na hrote kontrolovaným spôsobom pred aj počas manipulácie. Táto informácia a schopnosť modifikácie je kľúčová pre použitie NC AFM mikroskopie v nanotechnológiách.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

In the project NANOPARMA Institute of Physics and the group of Prof. Štich were in charge of computer simulations of laboratory experiments in the field of Atomic Force Microscopy. Two regimes have been simulated: (a) contact mode (nanotribology) and (b) noncontact mode (imaging and manipulation). in (a) we have clarified on atomic scale the mechanism of three clearly separated friction branches in antimony nanoparticles manipulated on HOPG ((1) vanishing friction, (2) normal frictions with friction force scaling linearly with the contact area of the nanoparticle, and (3) ambient conditions- friction scales linearly with contact area but with

friction forces an order of magnitude larger). Simulations have shown that the number of friction branches may also be smaller than 3. We have also studied in detail description of van der Waals interfaces using DFT methods with with approximate treatment of dispersion forces. In (b) we have studied mechanism of the contrast reversal in NC AFM imaging of Cu(111) surface. We have shown that this effect arises due to the unusual stability of the apex-substrate nanojunction in copper, an effect absent from e.g. gold or aluminum. We have also studied NC AFM imaging of the oxygen terminated Cu(111)c(6x2) surface and showed that the mechanism of image formation is completely opposite to what was concluded from the experimental evidence only. Using this system we have proposed a new protocol, the so-called "chemical fingerprinting", which guarantees identification and a controlled modification of the tip apex before and during manipulation. This information and ability of modification is crucial for use of NC AFM microscopy in nanotechnologies.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

Štatutárny zástupca príjemcu

V

V

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu