

Simulaatio yhdistää teorian ja kokeen

■ Pekka Koskinen

Nanotiede on ensisijaisesti kokeellinen tiede, mutta kokeiden tulkitsemiseksi täytyy simuloida teoriaa; simuloinnin rooli teorian ja kokeiden yhdistäjänä ei ole aina helppo.

Viime vuosisadan alkupuolella mekaniikan lait saivat päivytyksen. Uusi fysikaalinen teoria, kvanttimekaniikka, kuvasi menestyksekkäämin luontoa pienissä systeemeissä, kuten atomeissa. Teoria osoittautui niin menestyksekkääksi, että tähän päivään saakka mikään koe, mittasi se sitten raudan lämpölaajenemista tai vesimolekyylin ominaisuuksia, ei ole ollut ristiriidassa teorian kanssa. Jo vuonna 1929 kvanttimekaniikan kehittäjiin lukeutuva Paul Dirac totesikin, että kemia osattaisiin läpikotaisin mikäli teorian yhtälöt osattaisiin yleisesti ratkaista. Mutta kun ei osata, ei vieläkään.

Lähes kaikki aineen ominaisuudet johtuvat nimittäin elektroneista; elektronit tekevät yhtälöt tosi työläiksi ratkaista. Ainoaksi vaihtoehdoksi on jäänyt yhtälöiden numeerinen simuloiminen tietokoneella, kullekin systeemille erikseen – laskut on aloitettava alusta, vaikka vain yksi atomi olisi eri paikassa. Usein simuloinnilla ymmärretäänkin yhtälöiden ratkaisemista siten, että tietokoneen laskuteholla on tutkimuksessa avainasema.

Etenkin kun puhutaan ensimmäisen periaatteen simuloinneista, tarkoitetaan yhtälöiden ratkaisemista Diracin tapaan – lainaamatta mitään tietoa teorian ulkopuolelta. Tällöin teoriaa ja simulaatiota käytetään jopa toistensa synonyymeinä; hieman selvennettyinä simulaatio on kuin käsi, jonka teoria on itselleen kasvattanut kurotellessaan lähemmäksi kokeessa mitattavaa todellista systeemiä. Simulaatio pyrkii siten yhdistämään kokeen ja teorian, jotka muutoin

ovat liian etäällä toisistaan. Numeerinen ratkaisu ei kuitenkaan koskaan ole täydellinen, sillä simuloinneissa täytyy tehdä kompromisseja. Tällöin puhutaan teorian eri tasoista. Tämä voi olla harhaanjohtavaa, sillä teorioita sinänsä on vain yksi, kvanttimekaniikka-yhtälöt on vain eri tasoilla ratkaistu eri tavoin. Korkealla tasolla saadaan tarkkoja lukuja hitaasti, matalalla tasolla epätarkempia lukuja nopeasti.

Luotettavia ensimmäisen periaatteen laskuja tarvitaan ennustettaessa aineelle uusia ominaisuuksia. Tilanne on tämä erityisesti nanotieteessä. Kun uusista ilmiöistä on opittu kokeiden ja simulaatioiden avulla tarpeeksi, niitä siirrytään tarkastelemaan opittujen mallien avulla – rautatiekiskon lämpölaajeneminen lasketaan tietenkin lyhyellä kaavalla, ei ensimmäisen periaatteen simuloinneilla.

Nanotieteessä tilanne on siten hieman toinen kuin esimerkiksi hiukkasfysiikassa ja kosmologiassa, joissa teorioita ja lähtökohtia on aidosti useita. Kysymyksetkin, kuten aineen alkuperän selvittäminen tai ajan synty alkuräjähdyksessä, ovat syvällisiä. Siinä kun hiukkasfysiikka etsii alkeishiukkasten perusteoriaa, nanotiede etsii uusia käytännön sovelluksia käyttämällä vakiintunutta teoriaa.

Mikäs nanotieteessä sitten muka on ongelmana? Teorian yhtälöt tunnetaan, ja koska ne ovat oikein, simulaation tulisi vain yksinkertaisesti vahvistaa koetulokset. Niinpä niin, mutta kysymys kuuluukin: minkä simulaation?

Aina ei tiedetä, mitä mitataan

Klassisen mekaniikan vertaaminen kokeeseen on helppoa. Newtonin ensimmäisen lain mukaan kappale jatkaa suoraviivaista liikettä mikäli siihen vaikuttavien voimien summa on

nolla. Jos kokeilet teoriaa liu'uttamalla leikkiautoa lattialla, huomaat vauhdin hidastuessa (jos autossa ei ole vieteriä) että ainakin ilmanvastus ja kitka täytyy kokeen ymmärtämiseksi ottaa huomioon. Mielikuva kokeesta on helppo muodostaa. Valitettavasti lähes kaikki silmin nähtävä on nähty ja käsin kokeiltava on kokeiltu. Nanotieteessä kaikki on niin pientä että emme voi suoraan nähdä mitään. On luotettava mittalaitteisiin.

Oikean mielikuvan saaminen siihen, mitä elektroneille ja atomeille kokeessa ”oikeasti” tapahtuu, on vaikeaa. Otetaanpa esimerkki nanotieteeseen lukeutuvasta molekyyielektronikasta: haluan mitata sähkövastuksen äärimmäisen pienelle johdinpätkälle, eli systeemille, jossa on yksi ainut molekyyli kytkettynä vastakkaisista päistään metallielektrodeihin, ja sitä kautta paristoon. Systeemiä ei voi nykyisillä menetelmillä kuvata riittävän tarkasti. Mistä tiedän, miten molekyyli on kytkettyyn elektrodeihin? Mistä tiedän, että elektrodit eivät kosketa toisaan, että niiden välissä todella on molekyyli tai että molekyyli pysyy siellä mittauksen ajan? Mistä tiedän, että mittaan virtaa edes oikean molekyylin läpi – entä jos mukana on epäpuhtauksia jotka pilaavat kaiken? Ovatkohan edes ne elektrodit siellä? Tässä esimerkissä sähkövirta saattaa riippua jopa yksittäisen atomin paikasta, joten kokeesta ei ole mitään hyötyä, ellen tiedä mitä mittaan. Kokeellisessa luonnontieteessä mittausepäätarkkuuksia on ollut aina, mutta nanotieteessä epävarmuus siitä, mitä oikeastaan mitataan, on oleellisessa asemassa.

Yhteistuumin homma sujuu

Teorian ja kokeen roolit nanotieteessä muistuttavat avioparin yhteiselämää: miehellä on teoria, mutta vaimo määrää mitä käytännössä tapahtuu. Kun teoria ja koe riitelevät, molemmat ovat kyllä oikeassa – ne vain puhuvat eri asioista; simulaatio laskee ominaisuuksia systeemille,

jota koe ei mittaa. Joskus toisaalta teoria sooloi-lee ja ennustaa simulaation avulla uusia ilmiöitä, joita kokeillaan vasta myöhemmin. Teorian eri tasoista ja niissä olevista laskuvirheistä väitellään paljon, mutta eikö ole tärkeämpää laskea oikeaa systeemiä matalan tason teorialla kuin täysin väärää systeemiä korkean tason teorialla?

Menestyksekkään yhteiselön peruskaava on silti yksinkertainen: simuloidaan niin kauan, että löydetään sellainen systeemi ja teorian taso, että koe voidaan ymmärtää mahdollisimman aukottomasti. Kuulostaa suoraviivaiselta, mutta tie on usein hyvinkin mutkikas. Kukaan nimitäin ei halua julkaista simulaatiota, joka ei selitä tai ennusta mitään. Kokeita yritetään selittää parhain päin omien simulaatioiden avulla, joskus valikoituja koetuloksia ”unohtaen”. Lisäksi kokeilijat usein havainnollistavat julkaisuja kuvilla siten, kun heidän – usein perusteltu – fysikaalinen intuiotensa mitatusta systeemistä sanoo. Joskus todellinen systeemi voi kuitenkin olla erilainen, ja hetkellisestä mielikuvasta saattaa tulla vuosien myötä vaikeasti kitkettävä uskomus. Väärien mielikuvien perusteella saattaa tuhlaantua vuosikausia aivan väärien systeemien simuloimiseen.

Tämä ei ole marginaalista tuhlausta, sillä laskennallinen nanotiede kuluttaa Suomen super-tietokoneresursseista yli kolmanneksen. Yhtälöiden ratkaisemiseksi nämä resurssit ovat kylä tarpeen, mutta suurin haaste on silti osata valita oikeat systeemit simuloitaviksi. Kokeelliset menetelmät onneksi kehittyvät siten, että mittaamalla nähdään entistä tarkemmin, mitä kokeet oikeasti mittaavat. Silti nanotiede, kuten avioparin yhteiselämä, kehittyvät parhaiten teorian ja kokeen yhteistyöllä, toinen toistaan tukien.

Kirjoittaja on Jyväskylän yliopiston Nanotieteen keskuksen tutkija. Artikkelin perustuu lukiolaisille syksyllä 2008 pidettyyn laskennallisen tutkimuksen esittelyyn.