

<http://physicsweb.org/article/news/8/9/4>

2004/09/07

خوشه‌ها ی جادویی ی جدید

یک گروه فیزیک‌پیشه ی نظری در ایتالیا و فرانسه، با استفاده از شبیه‌سازی ی کامپیوتری خانواده ی جدیدی از خوشه‌ها ی جادویی یافته‌اند. این خوشه‌ها (که شامل یک هسته ی نیکل یا مس اند که اتم‌ها ی نقره آن را دربر گرفته‌اند) سطح - بالایی از پای‌داری ی ساختاری، ترمودینامیکی، و الکترونی دارند. ساختارها ی نقره- مس مغناطیسی هم هستند [1].

نانوخوشه‌ها ی دوفلزی را در کاربردها ی گوناگون ی (از کاتالیزگر گرفته تا کاربردها ی اپتیکی) به کار می‌برند، و ویژه‌گی‌ها ی آن‌ها به هم اندازه و هم ترکیب شان بسته‌گی دارد. خوشه‌ها یی که تعداد - اتم‌ها یشان یک عدد - جادویی است، در بسیاری از کاربردها برتری دارند، چون از خوشه‌ها ی دیگر پای‌دارتر اند.

اخیراً فیزیک‌پیشه‌ها نوع - جدیدی نانوخوشه ی نقره- نیکل کشف کرده‌اند که یک لایه ی خوش‌تعریف - نقره و یک هسته ی نیکل دارد. ریکاردُ فراندُ [2] و هم‌کاران اش از جنوا، میلان، گتسانُ، تُریسته، و مریسی، به‌طور - نظری نشان داده‌اند یک خانواده ی کامل - جدید - خوشه‌ها ی پلی‌بیست‌وجهی (پی‌آی‌اچ) [3] - هسته- لایه هست. پلی‌بیست‌وجهی‌ها را با پکاندن - بیست‌وجهی‌ها یی می‌سازند که هر یک سیزده اتم دارند.

فراندُ و هم‌کاران اش، با استفاده از یک الگوریتم - ژنتیکی ساختارها یی را جست‌وجو کردند که انرژی ی کمینه (و در نتیجه پای‌داری ی بیشینه) داشتند. این جست‌وجو بین - خوشه‌ها یی با اندازه‌ها ی جادویی انجام شد. این فیزیک‌پیشه‌ها با پلی‌بیست‌وجهی یی شروع کردند که N_1 اتم - نقره و N_2 اتم - مس یا نیکل داشت و m تا از اتم‌ها ییش درونی بودند. چنین ساختاری را با $(N_1, N_2)\text{pIh}^m$ نمایش می‌دهند. آن‌ها دریافتند اگر تعداد - کل - اتم‌ها 38 باشد، پای‌دارترین - خوشه‌ها $(30, 8)\text{pIh}^8$ ، $(31, 7)\text{pIh}^7$ ، و $(32, 6)\text{pIh}^6$ اند.

برای خوشه‌ها ی با 34 اتم، پای‌دارترین ساختار $pIh^{7(27,7)}$ بود. به گفته ی این گروه، پای‌داری ی این خوشه‌ها ناشی از اختلاف - اندازه ی اتم‌ها ی سازنده با هم (اتم‌ها ی نقره خیل ی بزرگ‌تر اند)، و تمایل - فلزها به تشکیل - پی‌وندها ی کوتاه با اتم‌ها ی بیرونی و پی‌وندها ی بلند با اتم‌ها ی درونی است. تمایل - اتم‌ها ی نقره به جداشدن از اتم‌ها ی دیگر و آمدن به سطح هم مهم است. فراند و هم‌کاران - ش بنا دارند خوشه‌ها ی مشابه ی از جنس - عنصرها ی دیگر را هم جست‌وجو کنند و ویژه‌گی‌ها ی کاتالیزگری، اپتیکی، و مغناطیسی یشان را بررسی کنند.

[1] Physical Review Letters **93** 105503

[2] Riccardo Ferrando

[3] pIh