

Μελέτη ηλεκτρονικής δομής υπερατόμων (superatoms), Cu, Al, Ga. Γενικότερες διαπιστώσεις για την δομή και τις ιδιότητές τους.

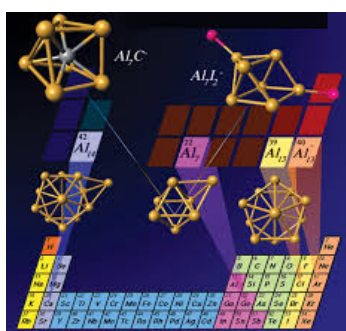
Ζαμπετάκη Μιράντα-Ερασμία

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Ηράκλειο Κρήτης

Η συνεχής αναζήτηση, νέων υλικών με συγκεκριμένες ιδιότητες, οδήγησε την επιστήμη υλικών στην ανακάλυψη των υπερατόμων. Ένα σύμπλεγμα δύο ή περισσότερων διαφορετικών στοιχείων, τα οποία σχηματίζουν μια σταθερή δομή με συγκεκριμένο αριθμό, τον αποκαλούμενο και "μαγικό" αριθμό ατόμων, τα οποία "μιμούνται" ένα συγκεκριμένο στοιχείο του περιοδικού πίνακα. Λόγω της εγγενούς σταθερότητάς τους και των πιθανών εφαρμογών τους στη νανοτεχνολογία, τα υπεράτομα έχουν γίνει αντικείμενο μελέτης τις τελευταίες δεκαετίες.

Αναλύοντας περαιτέρω την ηλεκτρονική δομή αυτών των συσσωματωμάτων και χρησιμοποιώντας το μοντέλο των ηλεκτρονικών κελυφών, οδηγούμαστε σε μια πιο γενικότερη διαπίστωση ως αναφορά την σταθερότητα που παρουσιάζουν τα υλικά αυτά.

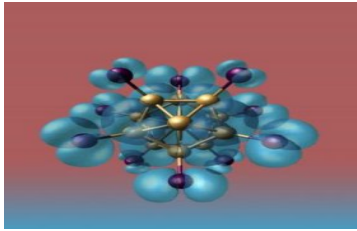
Μελέτες με υπεράτομα, Χρυσού $Au_{102}(SC_7O_2H_5)_{44}$, Αλουμινίου $Al_{50}(C_5(CH_3)_5)_{12}$ και Γαλλίου $Ga_{23}(N(Si(CH_3)_3)_2)_{11}$ δίνουν μια εικόνα για το πως τροποποιούνται οι ιδιότητες του υλικού καθώς αυτό αλλάζει από απλό συσσωμάτωμα σε υπεράτομο όταν ικανοποιείται ο συγκεκριμένος "μαγικός" αριθμός.



Εικόνα 2.

Διαφορετικά συσσωματώματα αλουμινίου παρουσιάζουν συμπεριφορά παρόμοια με εκείνη συγκεκριμένων ατομικών τύπων, όπως αλογόνων και αλκαλικών γαιών. Εικόνα: S. Khanna

Εξετάζεται η αλληλεπίδραση προσδέματος-πυρήνα και αποδεικνύεται ότι δεν μπορεί να μην λαμβάνεται υπόψιν τόσο από θεωρητικής άποψης, αλλά και εξαιτίας των επιπτώσεων που παρατηρούνται και στις πειραματικές μετρήσεις.



εικόνα 2. καλλιτεχνική απόδοση ενός υπερατόμου αλουμινίου ιωδίου
D.E. Bergeron

Βιβλιογραφία

[1] Superatoms: Electronic and Geometric Effects on Reactivity
Arthur C. Reber and Shiv N. Khanna

[2] Electronic structure of Gold, Aluminum and Gallium Superatom Complexes

O. Lopez-Acevedo* 1 , P. A. Clayborne1 , and H. Häkkinen1.

[3].Super atoms mimicking elements

Tomas van Dijk

[4] <https://www.economist.com/node/3556089>

[5] <https://arxiv.org/pdf/1104.4859.pdf>