

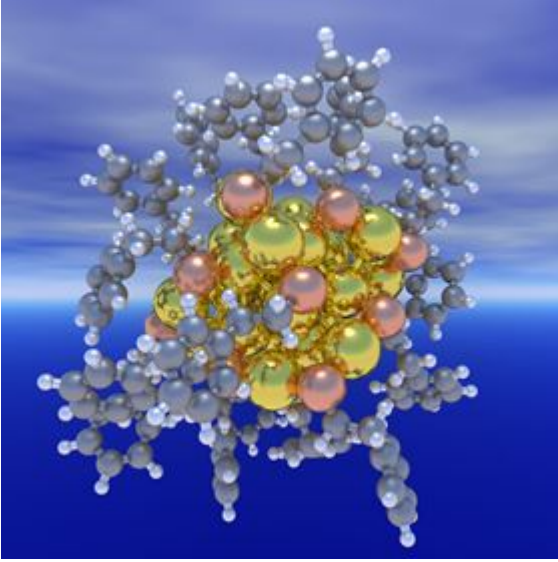
Metal nanoparçacıkların olağanüstü özellikleri hem atom hem de makro seviyeden farklı olduğu için pek çok uygulama için merak uyandırmaktadır. Fakat böyle nanoparçacıklar ya da nanoküme onlarca yıldır laboratuvarında üretilmelerine rağmen, bu işlemin tam olarak nasıl gerçekleştiği gizemli bir şey olarak kalmıştır.

Şimdi, Pittsburgh Üniversitesi'nden araştırmacılar, metal nanoküme oluşumunun şifresini bulmuş olabileceklerini ve tamamının çekirdek ile kabuk arasındaki enerji dengesine bağlı

olduğunu düşünüyorlar. [Taylor and Mpourmpakis, Nature Communications (2017) 8:15988, doi: 10.1038/ncomms15988].

Kolloidal Au nanoküpleri, fiziksel ve kimyasal özelliklerini belirleyen farklı boyutlarda ve şekillerde sentezlenebilir. İşlem, eşzamanlı olarak bir dış kabuk oluşurken, metal atomlarını bir çekirdek oluşturmak için bir araya toplayan ligand moleküllerine dayanıyor. Fakat belirli boyutların sadece bazı kümeleri termal olarak kararlıdır. - 'büyülü sayı' nanoküpleri olarak adlandırılır.

Araştırmacı Giannis Mpourmpakis, 'Metal nanoküplerin deneysel sentezi üzerine geniş çapta araştırma olmasına rağmen, metal nanoküplerin belirli boyutlarda oluşturulmasının gerçekten mantıklı bir açıklaması olmadığını' söyledi.



Şekil 1. 18 Tiyolat ligandı ile dengeye getirilmiş Au₂₅ nanokümesi

Bazı küpelenmelerin kararlı olmasının ve diğerlerinin kararsız olmasının nedenini açıklamak için iki teori önerilmiştir. 'Böl ve koru' ve 'süper atom' teorileri farklı temel varsayımlar üzerine dayanır ve birkaç yüz atoma kadar bazı kümeler için çalışırken, olası tüm kararlı nanoküpleri tahmin edemezler. Sonuç olarak, Araştırmacı Mpourmpakis ve meslektaş Michael G. Taylor nanoküme tahminlerinin aslında sentezlenenlerden farklı olduğunu belirtiyor. Şimdi iki araştırmacı da, metal çekirdeğin ve ligand kabuğunun enerjisine dayanan daha başarılı bir nanoküme oluşumu modeli umduklarını ileri sürdüler.

'Termodinamik kararlılık' teorisi ile, çekirdeğin kohezyon enerjisi çekirdek-kabuk bağlanma enerjisiyle dengelenirse. sadece nanoküplerin kararlı olacağını ve dolayısıyla sentezlenmesinin mümkün olacağı ileri sürüldü.

Mpourmpakis 'Katkımızın yeniliği, deneysel olarak sentezlenebilir nanoküme için, nanoküme metal çekirdeğinin ortalama bağ kuvveti ile ligandların metal çekirdeğe bağlanma gücü arasında ince bir denge olmak zorunda olduğunu ortaya koyduk.' diye açıkladı.

Teori, sadece tiellenmiş Au nanokümelerinin kararlı ve deneysel olarak elde edilebilceğini değil, aynı zamanda diğer metal-ligand kombinasyonlarını da öngörebilir. Ayrıca, model çekirdeğin ve kabuğun enerjisine dayandığı için, tahminler nanoküme boyutuna ve şekline de bağlanabilir.

Mpourmpakis 'Bu atomların etkileşim enerjisini nanokümelerin yapısal karakteristiğiyle ilişkilendirerek, laboratuvarında deneysel olarak sentezlenebilen önceden keşfedilmemiş nanokümelere bilgisayarla tasarlayabiliriz.' dedi

Araştırmacılar, 'Bu tür "tasarımcı" nanokümelere, biyoetiketli bireysel hücreleri ya da ilaç taşıyıcı sistemi gerçekleştirmek için ve katalitik reaksiyonları kolaylaştırmak için kullanılabilir.' dedi. Bulgular, yarıiletken nanokristaller ve kuantum noktaları gibi diğer nanomalzemelerin üretimini anlamaya da ayrıca yardımcı olabilir.

Mpourmpakis 'Şu anda bimetallik nanokümelere için uygulanabilir olan benzer teorileri geliştiriyoruz ve buna ilaveten nanopartiküllerin diğer sınıflarına, bir sistemin tanıtılması üzerine odaklanarak nanoparçacıkların kararlılığını test etmek ve deneysel araştırmalara öncülük etmek ve laboratuvarında deneme yanılma denemelerinden kaçınmaya çalışıyoruz' dedi.

Sydney Üniversitesi'nden Asaph Widmer-Cooper 'yeni termodinamik modelin bir dizi atom tipi için çalıştığını, bunun yanısıra bilinen süper atom teorisi tarafından özellikle kararlı olarak tahmin edilmeyen birkaç kümeyi kapsayan boyutları 18 ila 133 Au atomu arasında değişen Au-tiyolat kümelerinin kararlılığını doğru bir şekilde tahmin edebiliyordu.' diye belirtti.

'Bu merak uyandırıcı bir model ve çok daha büyük nanoparçacıklar ve tiyolatlar dışındaki ligandlar için ne kadar iyi çalıştığını görmek ilginç olacak' dedi.

Bu makale orijinal olarak Nano Today (2017)'de yayınlandı. [doi: 10.1016 / j.nantod.2017.08.002]

Kaynak : materialstoday.com

Yorumlar