http://physicsweb.org/article/news/10/3/20
2006/03/29

ساختار ِ سه‌بُعدی یِ نانوذرات

یک گروه فیزیک‌پیشه در ایالات ِ متحد روش ِ جدید ی بار آورده اند برا یِ تعیین ِ ساختار ِ سه‌بُعدی یِ یک نانوذره با استفاده از داده‌ها یِ پراشِ‌نوترون یا پرتویِ X ِ یک‌بُعدی. این کار تا کنون ممکن نبوده است. این روش که آن را سایمُن بیلینج [1]، پاوُل جوهاس [2]، و هم‌کاران ِشان از دانش‌گاه ِ ایالتی یِ میشیگان [3] بار آورده اند به این ترتیب است که یک رده‌بندی از ساختارها یِ ممکن هست که مرتباً روزآمد می‌شود. به این شکل که با ادامه یِ محاسبه نام‌زدها یِ به‌تر برا یِ ساختار بالا می‌آیند و نام‌زدها یِ نامناسب سقوط می‌کنند. اسم ِ این روش را، از رو یِ اسم ِ لیگ ِ باش‌گاه‌ها یِ فوت‌بال ِ اسپانیا (لا لیگا [4]) الگریتم ِ لیگا گذاشته اند [5].

چون نانوذره‌ها نظم ِ بلوری یِ بلندبرد ندارند، تعیین ِ ساختار ِشان با استفاده از روش‌ها یِ سنتی یِ بلورشناسی دشوار است. اما با این الگریتم ِ جدید، پژوهش‌گران می‌توانند با استفاده از داده‌ها یِ پراشِ‌نوترون یا پرتویِ X ِ یک‌بُعدی (چیز ی که به طور ِ معمول با روش‌ها یِ استاندارد ِ پراشِ‌نوترون و پرتویِ X برا یِ نمونه‌ها یِ پودری یِ نانوذرت به دست می‌آید) ساختار ِ سه‌بُعدی یِ نانوذرات را تعیین کنند.

رسیدن به این هدف پرچالش بوده است، چون بازسازی یِ یک نانوذره یِ سه‌بُعدی (شامل ِ حدوداً 100 اتم) از رو یِ 10 مجموعه یِ داده مسئله ای دشوار از نظر ِ محاسباتی است. علت آن است که الگریتم‌ها یِ سنتی یِ تهیه یِ تصویر ِ سه‌بُعدی از ذرات (مثل ِ روش ِ مُنت کارلُ) برا یِ خوش‌ها یِ بسیارکوچک ِ اتمی کار نمی‌کنند. به همین خاطر گروه ِ میشیگان تصمیم گرفت یک ره‌یافت ِ ساختنِ‌خوشه را بیازماید. در این ره‌یافت ساختارها یِ امتحانی یِ پیش‌نهاد می‌شوند و برا یِ این ساختارها داده شبیه‌سازی می‌کنند. بیلینج می‌گوید: "این که یک ساختار ِ پیش‌نهادی چه قدر خوب است، از این‌جا تعیین

می‌شود که ویژه‌گی‌ها یِ پراشِ‌نوترون و پرتویِ X ـِ یک‌بُعدی یَش تا چه حد با داده‌ها یِ حاصل از شبیه‌سازی می‌خوانَد.“

این پژوهش‌گران، با استفاده از الگریتم ـِشان ساختار ـِ یک ملکول ـِ C_{60} را از رو یِ تابعِ‌توزیع ـِ دونقطه‌ای یَش به دست آوردند. این تابع با پراش ـِ نوترون به دست آمده بود. داده‌ها یِ تابعِ‌توزیع ـِ دونقطه‌ای برا یِ نانوخوشه‌ها یی که فقط یک نوع اتم دارند، شامل ـِ یک فهرست ـِ ساده از فاصله‌ها یِ بین ـِ زوجِ‌اتم‌ها یِ خوشه است، اما اطلاعات ـِ مستقیم ی درباره یِ آرایش ـِ این اتم‌ها ندارد. در الگریتم ـِ لیگا یک ره‌یافت ـِ سعی‌وخطا به کار می‌رود که با استفاده از فقط فهرست ـِ فاصله به عنوان ـِ ورودی، ساختار بازسازی می‌شود.

بیلینج می‌گوید: ” در الگریتم ـِ ما رقابت ی بین ـِ خوشه‌ها به کار می‌رود که شبیه ـِ رقابت در یک لیگ ـِ فوت‌بال است. خوشه‌ها یِ خوب بالا می‌روند و با خرید ـِ بازی‌کن (اتم) رشد می‌کنند. خوشه‌ها یِ ضعیف سقوط می‌کنند و بدترین بازی‌کن ـِشان را می‌فروشند و بعد در دسته یِ پایین‌تر رقابت می‌کنند. خوشه ای که برنده یِ بالاترین دسته شود (قهرمان ـِ لیگ) خوشه یِ درست است. ما به این روش الگریتم ـِ لیگا می‌گوییم، چون لیگا خوش‌آهنگ‌تر از لیگ است.“

اولین کاربردها یِ این روش برا یِ نانومواد ـِ معدنی خواهد بود. بیلینج می‌گوید: ” این روش را می‌شود برا یِ مطالعه یِ ملکول‌ها و خوشه‌ها در محلول هم به کار برد. شاید با استفاده از داده‌ها یِ شیمیایی و قیدها یِ دیگر، بشود با این روش سیستم‌ها یِ کاملاً پیچیده را هم بررسی کرد، اما هنوز نمی‌دانیم این روش تا کجا کار خواهد کرد.“

این گروه دارد الکریتم ـِ لیگا را تعمیم می‌دهد، چنان که بشود با آن سیستم‌ها یِ با بیش از یک عنصر و خوشه‌ها یِ بزرگ‌تر را هم بررسی کرد، با این تصویر که این روش برا یِ سیستم‌ها یِ واقعی یِ موردِعلاقه در فیزیک و شیمی کاربرد داشته باشد.

[1] Simon Billinge

[2] Pavol Juhas

[3] Michigan State University

[4] La Liga

[5] Nature **440** 655