

Симплициально-модульный дизайн Н.А.Бульёноква как основа моделирования металлических кластеров

Д.Л.Тытик (ИФХЭ РАН)

В основе симплициально-модульного дизайна кластеров лежит фундаментальное понятие «модуль» кристаллической структуры [1]. Модуль однозначно выделяется из структуры в виде параллелоэдра, у которого в вершинах, на ребрах или на гранях находятся атомы, соединенные реальными химическими связями. В модуле содержится полная информация о дальнем порядке структуры, стехиометрической формуле, морфологии кристалла и строении его важнейших граней [1,2]. Модуль плотноупакованных кристаллических структур металлов можно также разбить на симплексы в виде правильных и искаженных тетраэдров и октаэдров по реальным химическим связям. Дизайн структур из модулей и симплексов с использованием бинарных операций симметрии ($\bar{1}$, m , 2) гарантирует высокую симметрию локального порядка и всего кластера, а также стабильность структур веществ, вследствие их полной связности.

В основу модульного дизайна положена идея завершения полиэдров модулей и симплексов за счет присоединения минимально возможного числа атомов как необходимого условия стабильности структуры. Полиэдрическое представление модуля позволяет выбрать однозначно место присоединения очередного атома или группы атомов. Важным принципом модульного дизайна является принцип эволюции гомологического ряда наночастиц, когда каждый предыдущий член гомологического ряда наночастиц является ядром последующего члена ряда.

Икосаэдрические металлические кластеры – принципы и алгоритмы формирования стабильных наночастиц методом симплициально-модульного дизайна [3].

Две ветви гексагональных наночастиц (комплексные двойники с тригональной симметрией), одна, начинающаяся с 9-ти атомного нанокристалла и содержащая «плотные» наночастицы (19, 25, 31, 74, 84 и 94 атома) с общей глобальной симметрией C_{3h} . Другая ветвь, ряд наночастиц с той же симметрией и тремя каналами, оси которых перпендикулярны тройной оси, а все атомы лежат на поверхности (19, 28, 39, 49, 55, 65, 75 и 85 атомов).

Особенность структурных моделей наночастиц ОЦК металлов с глобальной симметрией C_{2v} (20, 30, 40... атомов) и с глобальной пентагональной симметрией C_{5h} (37, 42, 47, 57, 82, 92, 107 и 117 атомов). Формирование одномерных полых стержней и сдвойникованных пластинчатых наночастиц.

«Плоские» наночастицы ГЦК металлов с глобальной пентагональной симметрией C_{5h} изометричны в двух измерениях и содержащих канал, вследствие чего все атомы этих наночастиц находятся на поверхности (20, 25, 30, 35, 40, 45, 50 и 60 атомов).

Строение наночастиц металлов позволяет предположить их высокую поверхностную активность, что особенно важно для сорбции и катализа.

Литература

1. Бульёнокв Н.А. Обоснование понятия «кристаллический модуль» в сб. «Вестник Нижегородского Университета им. Н.И. Лобачевского» сер. «Физика тв. тела», вып. 1, с.19-30 (1998).
2. Bulienkov N.A. in «Quasicrystals and Discrete Geometry». The Fields Institute Monographs, 10, p.67-134. Ed. by J. Patera, Amer. Mathem. Soc., Providence, R.I. (1998).
3. Бульёнокв Н.А., Тытик Д.Л. Модульный дизайн икосаэдрических металлических кластеров, Известия РАН, сер. химич., 2001, т.50, №1, с.1-19.