

ко высоки, что их экспериментальное определение становится проблематичным.

#### Список литературы

1. Жидкие металлы. Материалы третьей международной конференции по жидким металлам. Под ред. Р. Эванса и Д. Гринвуда. Пер. с англ. М., Metallurgia, 1980, 392 с.
2. Blairs S. // J Colloid and interface Sci. – 1978. – V. 67. №3. P. 548.
3. Ниженко В.И., Флока Л.И. Поверхностное натяжение жидких металлов и сплавов. Справочник. – М.: Metallurgia, 1981. – 208 с.
4. Энциклопедия неорганических материалов. – Киев: 1977, Т.1. – 840 с.; Т. 2. – 816 с.

### ИНФОРМАЦИЯ И СТРУКТУРА В НАНОМИРЕ: МОДУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН ДВУМЕРНЫХ ПОЛИГОННЫХ И ПОЛИЭДРИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР

**В.В. Иванов, Н.П. Шабельская,**

**В.М. Таланов**

*Южно-Российский государственный  
технический университет  
Новочеркасск, Россия*

Словари определяют информацию как “сведения об окружающем мире и протекающих в нем процессах”. Информация выступает как знание о структурах. В химии язык, на котором записано устройство структуры вещества, частично известен и включает в себя законы Д.И. Менделеева, Е.С. Федорова, стереохимии и кристаллохимии. Но сами вещества при своем взаимодействии пользуются более простым “конфигурационным” языком, включающим программы их связывания (программы комплементарности) в более крупные агрегаты.

Комплементарность структурных единиц вещества закодирована содержащейся в них информацией (зарядом, полярностью, размерами, нуклеофильностью и т.д.). При этом существенно, что рост кристаллов является дискретным процессом и осуществляется практически единичным путем (вероятность строго определенного наращивания структуры в конфигурационном пространстве системы взаимодействующих атомов близка к единице). Иное дело в наном мире – здесь агрегирование структурных единиц происходит по программам. Структура, таким образом, регистрирует информацию и выступает как память пути образования нанобъекта. Рост структуры происходит по ветвящимся путям в конфигурационном пространстве. В данном сообщении эти общие положения конкретизированы в предложенной эволюционной модели формирования двумерных наноструктур.

В качестве основы для получения локальной структуры может быть выбран один из типов универсальных оптимумов, в частности, полигоны или полиэдры. В их вершинах могут располагаться атомы, комплексные частицы или определенные локальные совокупности атомов нескольких сортов – молекулы. Процедура создания локальной структуры  $R_{loc}$  из этих универсальных оптимумов  $\{P\}$  определяется законом  $T_{im} : R_{loc} = L_{\{P\},im}(\{P\}_i, T_{im})$ , а процедура размножения подобных локальных структур – эволюционным законом  $T_k : R_{\{P\}im} = R_{loc}(T_k)$ . В общем случае процесс получения совокупностей атомов, которые соответствуют образующимся структурам с дальним порядком, может быть записан следующим образом:  $R = L_{\{P\},im}(\{P\}_i, (T_{im}, T_k))$ , где:  $\{P\} = \{P_g \text{ или } P_h\}$  – символ типа изогона – «ядра» локальной структуры: или полигон ( $P_g$ ) вида  $\{n\}$  или полиэдр ( $P_h$ )

типа {n44};  $i$  – индекс ветвления «ядра», который определяется типом изогона и способом ветвления (посредством вершин  $i_v$ , ребер (сторон)  $i_r$  или граней  $i_g$  изогона);  $m$  [0, 1, 2, ...] – целочисленный индекс, характеризующий размерный параметр локальной структуры и численно равный количеству изогонов-«звеньев» между «ядрами» в ветви структуры, при этом относительное «межъядерное» расстояние в единицах размерного параметра изогона в направлении ветвления равно  $(m + 1)$ ;  $k \leq (i - 1)$  – индекс ветвления вторичных «ядер».

Цикл работы генератора (1) (одна генерация ветвлений «ядер») определяет параметр идентичности структуры дальнего порядка в направлении ветвления, а количество этих циклов – протяженность упорядоченной структуры. Тип промежуточных между «ядрами» изогонов-«звеньев» определяется типом «ядер», а индексы их ветвления считаются следующими:  $i_v = i_r = i_g = 1$ . Для «ядер» в виде полигонов {n} имеем  $v = r = n$ , а возможные значения индексов ветвления  $i_v = i_r \leq n$ . Для полиэдров-«ядер» {n44} в соответствии с формулой Эйлера имеем  $n = g = r - v + 2$ , а возможные значения ин-

дексов ветвления  $i_v \leq (2 + r - n)$ ,  $i_r \leq (n + v - 2)$  и  $i_g \leq n$ . В процессе размножения локальных структур  $R_{lok}$  допускается сращивание соседних ветвей структуры между собой за счет вторичных изогонов-«ядер», обуславливающее образование  $R_{(P)im}$ -структур, элементы которых полностью или частично заполняют предоставленное им пространство. В случае ограничения роста ветвей другими ветвями этой же структуры образуются фрактальные структуры – кластеры или дендримеры.

Для полигонных и полиэдрических структур параметр ветвления «ядра»  $i$  (совместно с параметром  $k = i-1$ ) определяет метрическую размерность структуры дальнего порядка  $R_{(P)im}$  и форму ячейки. Параметр  $m$  определяет размеры этой ячейки в единицах размерного параметра «ядра» в направлении его ветвления. Для получения полигонных структур в качестве исходных элементов рассматривали только полигоны с  $n = 3, 4, 6, 8$  и  $12$ , а для получения полиэдрических структур - полиэдры призматического вида {n44}. Закон генерирования структур с помощью этих элементов определим следующим образом:

$$R_{\{Pg\}nm} = L_{\{Pg\},nm} (\{Pg\}_n, (T_{nm}, T_{n-1})), R_{\{Ph\}(n/2)m} = L_{\{Ph\},(n/2)m} (\{Ph\}_{n/2}, (T_{(n/2)m}, T_{(n/2)-1})).$$

В случае генерирования двумерных однослойных структур в качестве вершин элементов-полигонов можно рассматривать атомы. При генерировании двумерных двухслойных базовых структур в качестве геометрических центров элементов рассматриваются геометрические центры соответствующих полиэдров. Для всех вариантов полученных совокупностей атомов в виде полигонных или полиэдрических слоев перфорированного и не перфорированного типа проанализировано условие топологиче-

ской идентичности вершин в кристаллохимическом смысле.

Динамика образования простых  $R_{\{Pg\}im}$ -структур (т.е. из полигонов {3}, {4} и {6}) и особенности их эволюции в процессе роста характеризуют их топологические характеристики. Очевидно, что только структуры с минимальными значениями параметра  $m$  состоят из полигонов с топологически идентичными вершинами.

Двумерные полигонные структуры получены данным методом из набора возможных  $R_{\{Pg\}im}$ -структур при значениях индексов  $i = n$  и  $m = 0$  или  $1$  (табл.1). Однако только часть структурных представителей этого набора соответствуют одиннадцати полигонам структурам с топологически идентичными вершинами полигонов (двумерным сеткам Шлефли). В

частности, двумерным сеткам 33336, 488 и 666 соответствуют только структуры  $R_{\{3\}32}$ ,  $R_{\{8\}40}$  и  $R_{\{6\}30}$ . Кроме того, большинство гетерополигонных структур могут быть получены только в том случае, если в качестве «ядра»  $R_{\{Pg\}im}$ -структуры выбраны объединения двух разных типов полигонов (табл. 1, структуры 2 – 4, 6, 7, 9 - 11).

**Таблица 1**

**Двумерные однослойные базовые структуры (двумерные сетки Шлефли) и соответствующие им варианты  $R_{\{Pg\}im}$ -структур**

Базовая структура	Характеристики полигона-«ядра»		Характеристика $R_{\{Pg\}im}$ -структуры	
	Символ	Симметрия	Обозначение	Топология полигонов
333333	{3}	3m	$R_{\{3\}30}$	3(6)
			$R_{\{3\}31}$	3(5)
33336	{3}	3m	$R_{\{3\}32}$	3(4)
	$\{6\} \cup 6\{3\}$	6mm	$R_{\{6\} \cup 6\{3\}60}$	3(3), 6(1)
33344	$\{4\} \cup 2\{3\}$	mm2	$R_{\{4\} \cup 2\{3\}40}$	4(2), 3(3)
33434	$\{3\} \cup \{3\}$	mm2	$R_{\{3\} \cup \{3\}40}$	3(3)
444	{4}	4mm	$R_{\{4\}40}$	4(4)
			$R_{\{4\}41}$	4(3)
			$R_{\{4\}40}$	4(2)
3636	{3}	3m	$R_{\{3\}30}, R_{\{3\}31}$	3(2)
	{6}	6mm	$R_{\{6\}60}$	6(2)
	$\{6\} \cup 3\{3\}$	3m	$R_{\{6\} \cup 3\{3\}30}$	6(2), 3(2)
3464	$\{4\} \cup \{3\}$	m	$R_{\{4\} \cup \{3\}20}$	4(2), 3(1)
	$\{6\} \cup 3\{4\}$	3m	$R_{\{6\} \cup 3\{4\}30}$	6(1), 4(2)
666	{6}	6mm	$R_{\{6\}30}$	6(3)
488	{8}	8mm	$R_{\{8\}40}$	8(2)
	$\{8\} \cup \{4\}$	4mm	$R_{\{8\} \cup \{4\}40}$	8(2), 4(1)
46.12	$\{6\} \cup \{4\}$	m	$R_{\{6\} \cup \{4\}30}$	6(1), 4(1)
	$\{12\} \cup 3\{6\}$	3m	$R_{\{12\} \cup 3\{6\}30}$	12(1), 6(1)
	$\{12\} \cup 3\{4\}$	3m	$R_{\{12\} \cup 3\{4\}30}$	12(1), 4(1)
3.12.12	{12}	12mm	$R_{\{12\}60}$	12(2)
	$\{12\} \cup 3\{3\}$	3m	$R_{\{12\} \cup 3\{3\}30}$	12(2), 3(1)

Отметим, что для большинства полигонных структур возможны два или более вариантов их образования. Данная многовариантность может быть обусловлена особенностями роста и эволюции структуры из заданного полигона или гетерополигонного модуля. Эти особенности являются результатом наличия как минимум двух типов ветвления «ядер»: ветвление с помощью вершин  $i_v$  или ветвление с помощью сторон  $i_r$  полигона (табл.1), а также поливари-

антностью ветвления вторичных «ядер»  $R_{\{Pg\}im}$ -структур при пересечении в них соседних ветвей.

Полиэдрические слои, соответствующие двумерным двухслойным базовым структурам, получены из 11 двумерных полигонных структур. Все они могут быть представлены как результат размножения локальных  $R_{\{Ph\}im}$ -структур, образованных из полиэдров призматического вида  $\{n44\}$  или их возможных объе-

динений (табл.2), по аналогии с полигонными структурами (табл.1). Исключение представляет октаэдрический слой, представленный из тетраэдров {333}, из октаэдров {3333} или их возможного объединения  $(4\{333\} \cup 3\{3333\})$  (табл. 2).

Таблица 2

**Двумерные двухслойные базовые структуры (полиэдрические слои) и соответствующие им варианты  $R_{(Ph)im}$  –структур**

Комбинации полиэдров-изогонов	Характеристика полиэдра-«ядра»		Характеристика $R_{(Ph)im}$ –структуры	
	Символ	Симметрия	Обозначение	Топология полиэдров
4{333} + 3{3333}	{333}	43m	$R_{\{333\}30}$	4(4)
	{3333}	m3m	$R_{\{3333\}60}, R_{\{3333\}30}$	6(3)
6{344}	{344}	3m	$R_{\{344\}30}$	6(6)
			$R_{\{344\}31}$	6(5)
4{344} + {644}	{344}	3m	$R_{\{344\}32}$	6(4)
	$\{644\} \cup 6\{344\}$	6/mmm	$R_{(\{644\} \cup 6\{344\})60}$	6(3), 12(1)
3{344} + 2{444}	$\{444\} \cup 2\{344\}$	mmm	$R_{(\{444\} \cup 2\{344\})40}$	8(2), 6(3)
3{344} + 2{444}	$\{344\} \cup \{344\}$	mmm	$R_{(\{344\} \cup \{344\})40}$	6(3)
4{444}	{444}	m3m	$R_{\{444\}40}$	8(4)
			$R_{\{444\}41}$	8(3)
			$R_{\{444\}40}$	8(2)
2{344} + 2{644}	{344}	3m	$R_{\{344\}30}, R_{\{344\}31}$	6(2)
	{644}	6/mmm	$R_{\{644\}60}$	12(2)
	$\{644\} \cup 3\{344\}$	3m	$R_{(\{644\} \cup 3\{344\})30}$	12(2), 6(2)
{344} + 2{444} + {644}	$\{444\} \cup \{344\}$	mm2	$R_{(\{444\} \cup \{344\})20}$	8(2), 6(1)
	$\{644\} \cup 3\{444\}$	3m	$R_{(\{644\} \cup 3\{444\})30}$	12(1), 8(2)
3{644}	{644}	6/mmm	$R_{\{644\}30}$	12(3)
{444} + 2{844}	{844}	8/mmm	$R_{\{844\}40}$	16(2)
	$\{844\} \cup \{444\}$	mm2	$R_{(\{844\} \cup \{444\})40}$	16(2), 8(1)
{444} + {644} + {12.44}	$\{644\} \cup \{444\}$	mm2	$R_{(\{644\} \cup \{444\})30}$	12(1), 8(1)
	$\{12.44\} \cup 3\{644\}$	3m	$R_{(\{12.44\} \cup 3\{644\})30}$	24(1), 12(1)
	$\{12.44\} \cup 3\{444\}$	3m	$R_{(\{12.44\} \cup 3\{444\})30}$	24(1), 8(1)
{344} + 2{12.44}	{12.44}	12/mmm	$R_{\{12.44\}60}$	24(2)
	$\{12.44\} \cup 3\{344\}$	3m	$R_{(\{12.44\} \cup 3\{344\})30}$	24(2), 6(1)

Таким образом, дизайн в соответствии с геометрико-топологическим способом вывода вероятных двумерных структур отражает рост и эволюцию структуры из заданного изогон-модуля (полигона или полиэдра). В зависимости от условий образования и размножения исходной локальной структуры, а также пересечения ближайших ветвей роста  $R_{(P)im}$ -структуры, имеем более широкое многообразие соответствующих им вероятных двумерных структур. При этом не все они являются структурами с топологически идентичными вершинами изогонов, а, следовательно, не все соот-

ветствуют двумерным базовым структурам, которые характеризуются кристаллографически эквивалентными позициями для атомов. Следует отметить, что геометрико-топологический подход к выводу вероятных двумерных структур является более алгоритмизированным, чем кристаллохимический, и практически аналогичен работе соответствующих клеточных автоматов.