

УДК 548.1

ИТЕРАЦИОННЫЙ МОДУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН ДВУМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР

Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М., Попов В.П.

Южно-Российский государственный технический университет, Новочеркасский политехнический институт, e-mail: valtalanov@mail.ru

В данной работе предложена эволюционная модель формирования двумерных структур. Определены алгоритмы формирования структур в априори структурированном двумерном пространстве путем заполнения его в соответствии с определенными эволюционными правилами.

Ключевые слова: итерационный модулярный дизайн, двумерные наноструктуры, наномир

ITERATIVE MODULAR DESIGN TWO-DIMENSIONAL NANOSTRUCTURES

Ivanov V.V., Shabelskaja N.P., Talanov V. M., Popov V.P.

The South Russian state engineering university, Novocherkassk polytechnic institute, e-mail: valtalanov@mail.ru

In the yielded job the developmental model of creation of two-dimensional frames is tendered. Algorithms of creation of frames in a priori reticulated two-dimensional room by its filling-up according to certain developmental regulations are determined.

Keywords: iterative modular design, two-dimensional nanostructureS, a nanoworld

Словари определяют информацию как «сведения об окружающем мире и протекающих в нем процессах» [1]. 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 [2, 3]. 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 наномире – здесь агрегирование структурных единиц происходит по программам [4, 5]. Структура, таким образом, регистрирует информацию и выступает как память пути образования нанообъекта. Рост структуры происходит по ветвящимся путям в конфигурационном пространстве.

В данной работе эти общие положения конкретизированы в предложенной эволюционной модели формирования двумерных структур.

В качестве основы для получения локальной структуры может быть выбран один из типов универсальных оптимумов, в частности, полигоны или полиэдры. В их верши-

нах 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} [6, 7]:

$$R_{loc} = L_{\{P\},im}(\{P\}_i, T_{im}),$$

а процедура размножения подобных локальных структур – эволюционным законом T_k [7]:

$$R_{\{P\}im} = R_{loc}(T_k).$$

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 $\{P\} = \{Pg\}$ или $\{Ph\}$ – символ типа изогона – «ядра» локальной структуры: или полигон вида $\{n\}$ или полиэдр типа призмы $\{n44\}$; 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 $[0, 1, 2, \dots]$ – 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» [7–9].

Цикл работы генератора (1) (одна генерация ветвлений «ядер») определяет параметр идентичности структуры дальнего порядка в направлении ветвления, а количество этих циклов – протяженность упоря-

доченной 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 индексов ветвления $i_v \leq (2 + r - n)$, $i_r \leq (n + v - 2)$ и $i_g \leq n$. В процессе размножения локальных структур $R_{\text{лок}}$ допускается сращивание соседних ветвей структуры между собой за счет вторичных изогонов-«ядер», обуславливающее образование $R_{\text{p,im}}$ -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 [4].

Для полигонных и полиэдрических структур параметр ветвления «ядра» i (совместно с параметром $k = i - 1$) определяет метрическую размерность структуры дальнего порядка $R_{\text{p,im}}$ и форму ячейки. Параметр m определяет размеры этой ячейки в единицах размерного параметра «ядра» в направлении его ветвления. Для полу-

чения 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 [7–9]:

$$R_{\{Pg\}nm} = L_{\{Pg\},nm} (\{Pg\}_n, (\Gamma_{nm}, \Gamma_{n-1})),$$

$$R_{\{Ph\}(n/2)m} = L_{\{Ph\},(n/2)m} (\{Ph\}_{n/2}, (\Gamma_{(n/2)m}, \Gamma_{(n/2)-1})).$$

Таким образом, дизайн в соответствии с геометрико-топологическим способом вывода вероятных двумерных структур отражает рост и эволюцию структуры из заданного изогона-модуля (полигона или полиэдра). В зависимости от условий образования и размножения исходной локальной структуры, а также пересечения ближайших ветвей роста $R_{\text{p,im}}$ -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 соответствуют двумерным базовым структурам, которые характеризуются кристаллографически эквивалентными позициями для атомов.

Таблица 1

Двумерные однослойные базовые структуры (сетки Кеплера, обозначения Шлефли) и соответствующие им варианты $R_{\text{p,im}}$ -структур

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

В случае генерирования двумерных однослойных структур (табл. 1) в качестве вершин элементов-полигонов можно рассматривать атомы. При генерировании двумерных двухслойных базовых структур (табл. 2) в качестве геометрических центров элементов рассматриваются гео-

метрические центры соответствующих полиэдров. Для всех вариантов полученных совокупностей атомов в виде полигонных или полиэдрических слоев проанализировано условие топологической идентичности вершин в кристаллохимическом смысле.

Таблица 2

Двумерные двухслойные базовые структуры (полиэдрические слои) и соответствующие им варианты $R_{\{Pg\}im}$ -структур

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

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. Установлено, что только структуры с минимальными значениями параметра m состоят из полигонов с топологически идентичными вершинами.

Двумерные полигонные структуры получены данным методом из набора возмож-

ных $R_{\{Pg\}im}$ -структур при значениях индексов $i = p$ и $m = 0$ или 1 (см. табл. 1). Однако только часть структурных представителей этого набора соответствуют одиннадцати полигонным структурам с топологически идентичными вершинами полигонов (сеткам Кеплера). 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 (см. табл. 1, структуры 2–4, 6, 7, 9–11).

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

Таким образом, предложены информационные генетические коды $L_{\{P\}im}(\{P\}_i(T_{im}, T_k))$ для двумерных полигонных и полиэдрических структур. Методом итерацион-

ного модулярного дизайна получены серии структур с топологически идентичными элементами, представители которых могут рассматриваться как структурные элементы структур кристаллов. Разработана модель и определены алгоритмы формирования структур в априори структурированном двумерном пространстве путем заполнения его в соответствии с определенными эволюционными правилами.

Список литературы

1. Словарь русского языка / под ред. А.П. Евгеньевой. – М.: Русский язык, 1981. – 674 с.
2. Лен Ж.М. Супрамолекулярная химия: концепции и перспективы. – Новосибирск: Наука, 1998. – 334 с.
3. Алесковский В.Б. Информация как фактор самоорганизации и организации вещества // Журн. общей химии. – 2002. – Т.72, №4. – С. 611–616.
4. Таланов В.М., Ерейская Г.П., Юзюк Ю.И. Введение в химию и физику наноструктур и наноструктурированных материалов – М.: Изд-во «Академия естествознания», 2008. – 389 с.
5. Таланов В.М., Ерейская Г.П. Методы синтеза наноструктур и наноструктурированных материалов. – Новочеркасск: ЮРГТУ (НПИ), 2011. – 284 с.
6. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
7. Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М. Информация и структура в наномире: модулярный дизайн двумерных полигонных и полиэдрических наноструктур // Современные наукоемкие технологии. – 2010. – №10. – С. 176–179.
8. Иванов В.В., Таланов В.М. Модулярное строение наноструктур: Информационные коды и комбинаторный дизайн // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2010. – Т.1, №1. – С. 72–107.
9. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. Информация и структура в наномире: модулярный дизайн двумерных наноструктур и фрактальных решеток // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2011. – Т.2, №3. – С. 121–134.