

**О МАГИЧЕСКИХ ЧИСЛАХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОКЛАСТЕРОВ:
МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

© 2016 г. Д.И. РЫБАКОВ, В.М. САМСОНОВ, С.А. ВАСИЛЬЕВ

Тверской государственный университет
e-mail: vsa812@yandex.ru

Понятие магических чисел первоначально было введено в ядерной физике для значений массового числа атомного ядра, отвечающих их наибольшей устойчивости. В физике кластеров магическими числами (МЧ) называют значения числа содержащихся в них атомов N , отвечающие наиболее устойчивым частицам. Эти числа можно обнаружить с помощью метода масс спектроскопии: им будут отвечать максимумы интенсивности. В [1] представлен масс-спектр нанокластеров Pb, из которого видно, что кластеры из 7 и 10 атомов более вероятны, чем другие и, следовательно, более стабильные. Вместе с тем, согласно рисунку, представленному в [1], нанокластеры Pb, состоящие из 5 и 14 атомов, должны быть наименее стабильными. Согласно [1], различают электронные и структурные МЧ. Их наличие отвечает рассмотрению кластера как суператома в рамках «модели желе». Вместе с тем, в [1] отмечается, что в большинстве случаев стабильность наночастиц определяется атомной структурой, в связи с чем соответствующие МЧ называются структурными.

Для нанокластеров Ag МЧ исследовались по данным молекулярной динамики в работе [2], а позднее в диссертации А.Н. Сиренко [3], выполненной под руководством Д.К. Белащенко.

Изначально понятие МЧ для нанокластеров ассоциировалось с рядом МЧ (рядом Кини [4]).

$$N = \frac{10n^3 + 15n^2 + 11n}{3} + 1,$$

где n – число слоев (оболочек). Полагая $n = 1, 2, \dots$, получим ряд магических чисел $N = 13, 55, 147, 309, 561, 923, 1415, 2057 \dots$. В основе модели Кини – кластеры с атомами, расположенными в вершинах правильных тел Платона. Для нанокластеров ГЦК-металлов многогранником Платона является кубооктаэдр. Таким образом, для $n = 1$ м.

Ранее в [5] нами уже обсуждалась проблема магических чисел для свободных нанокластеров. Наши молекулярно-динамические результаты, полученные с использованием потенциала сильной связи [6] были сравнены с результатами А.Н. Сиренко [3], который использовал потенциал погруженного атома. Были обнаружены согласующиеся с рядом Кини магические числа 13 и 55, а также 19 и 53, отвечающие геометрическим фигурам с высокой симметрией.

Однако применение изолированных нанокластеров в качестве элементов наноразмерных электрических схем технически невозможно, в связи с этим была поставлена задача нахождения магических чисел в силовом поле подложки и выявление определяющих их закономерностей.

Для нахождения магических чисел нанокластеров серебра, находящихся в силовом поле подложки свободный нанокластер размещался на атомарно гладкой поверхности, отвечающей грани (100) идеальной ГЦК-структуры серебра. Выбор данной подложки обусловлен простотой моделирования и, как нами было установлено в пред-

варительных компьютерных эксперимента, отсутствием принципиального различия в поведении нанокластеров на подложках, отвечающих грани (100) других металлов.

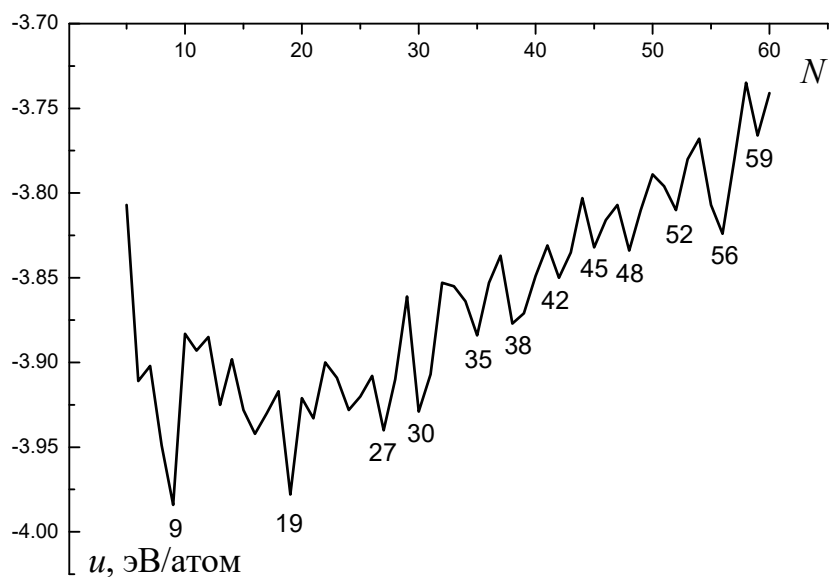


Рис. 1. Размерная зависимость потенциальной части удельной внутренней энергии нанокластеров Ag, находящихся в силовом поле подложки.

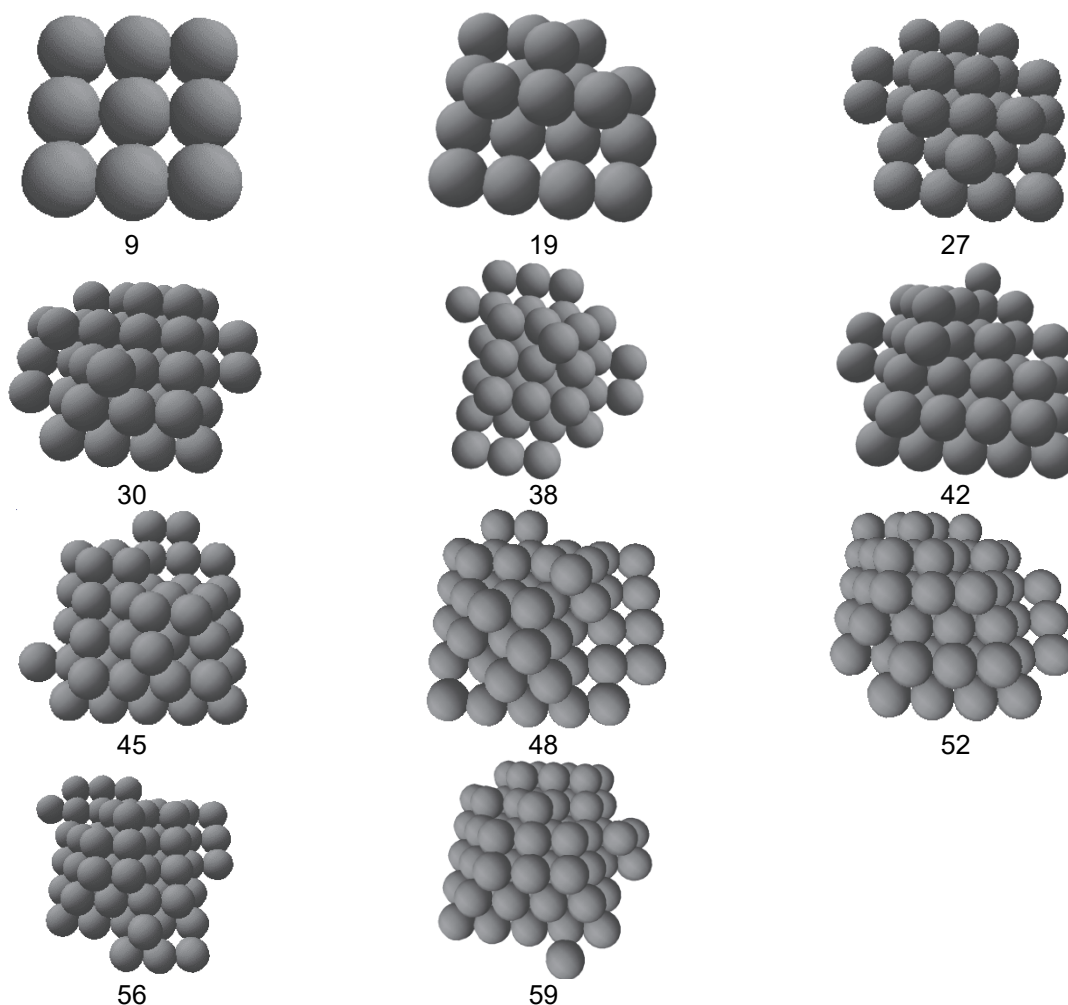


Рис. 2. Вид сверху на конфигурации нанокластеров Ag, находящихся на поверхности Ag (грань (100)). Цифры под рисунками отвечают числу атомов, содержащихся в нанокластерах.

Так же, как и в случае свободной частицы [5], изначально нанокластер брался при достаточно высокой температуре, после чего он охлаждался до 1К и релаксировал при данной температуре. Полученные результаты представлены на рис. 1. Как видно из рисунка, поведение размерной зависимости потенциальной части удельной внутренней энергии u существенно отличается от случая свободных наночастиц. Во-первых, стоит отметить возрастание u с увеличением числа атомов N . Во-вторых, изменение числа атомов всего на единицу приводит к заметному скачку u .

На рис. 2 представлены конфигурации нанокластеров, отвечающие обнаруженным магическим числам. Хорошо видно, что они отвечают двумерным квадратным структурам. Значительное увеличение u при появлении третьего слоя атомов в нанокластере объясняется значительным увеличением площади поверхности, и, соответственно, поверхностных сил. Квадратная форма, очевидно, обусловлена кубической структурой подложки.

Учитывая все выше сказанное, можно сделать следующие выводы:

1. Магические числа для островков на твердой поверхности отличаются от магических чисел для свободных нанокластеров Ag;
2. Наиболее стабильными являются нанокластеры имеющие квадратную форму и минимальное число атомных слоев.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пул. Ч., Оуэнс Ф. Мирматериаловитехнологий. Нанотехнологии. – М.: Техносфера, 2004. – 324 с.
2. Кузьмин В.И., Тытик Д.Л., Белащенко Д.К., Сиренко А.Н. Строение кластеров серебра с магическими числами атомов по данным молекулярной динамики. // Коллоидный журнал. – 2008. Т.70. №3. С.316-329.
3. Сиренко А.Н. «Молекулярно-динамическое исследование структурных превращений и свойств металлических кластеров». Дисс. канд. физ.-мат. наук; Москва, 2013.
4. Chini P. Synthesis of large anionic carbonyl clusters as models for small metallic crystallites. // Gazzetta Chimica Italiana. – 1979. V. 109. P. 225-240.
5. Васильев С.А., Рыбаков Д.И., Самсонов В.М. Структурные магические числа для нанокластеров переходных металлов: атомистическое моделирование. // Материалы международной научно-технической конференции «INTERMATIC–2014» – 2014. Ч. 1. С. 26-28.
6. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. // Phys. Rev. B. - 1993. V. 48. № 1. P. 22-33.