

PACS numbers: 61.43.Bn, 61.46.+w, 61.48.-c, 61.50.Ah, 61.50.Ks, 71.15.Mb, 81.05.Zx

Новый метод моделирования геометрии наноструктур

Е. А. Андреев

*Институт физики НАН Украины,
просп. Науки, 46
03680, ГСП, Киев-28, Украина*

Предложен новый метод восстановления и прогнозирования геометрических взаимоотношений между атомами в произвольных атомных ансамблях. Основная идея метода основывается на гипотезе о том, что рассчитанные квантово-химическими методами поверхности нулевого градиента электронной плотности наиболее адекватно описывают «форму атома» в конденсированном веществе и с достаточной точностью могут быть аппроксимированы выпуклыми многогранниками определённой топологии. Непрерывное заполнение пространства феноменологически найденным набором примитивных полиэдров типа Вороного–Дирихле (атомных доменов) позволяет правильно восстанавливать трёхмерную структуру произвольных молекул, наноструктур, решёток металлов. Заполнение приповерхностных областей полиэдрами из этого же базового набора даёт возможность предсказывать характер взаимодействия произвольных атомных ансамблей между собой.

Запропоновано нову методу відновлення та прогнозування геометричних взаємозв'язків між атомами в довільних атомових ансамблях. Основна ідея методи ґрунтується на гіпотезі про те, що розраховані квантово-хімічними методами поверхні нульового градієнту електронної густини найбільш адекватно описують «форму атома» в конденсованій речовині та з достатньою точністю можуть бути апроксимовані опуклими багатогранниками певної топології. Неперервне заповнення простору феноменологічно знайденим набором примітивних поліедрів типу Вороного–Діріхле (атомових доменів) уможливило правильно відновлювати тривимірну структуру довільних молекул, наноструктур, ґратниць металів. Заповнення приповерхневих областей поліедрами з цього ж базового набору уможливило передбачити характер взаємодії довільних атомових ансамблів між собою.

A new method for predicting and recovery of the geometric relationships between atoms in arbitrary atomic ensembles is proposed. The basic idea of the method is based on the hypothesis that surfaces of zero gradient of the elec-

tron density calculated using quantum-chemical methods most adequately describe the ‘shape of the atom’ in condensed matter and can be approximated by convex polyhedrons of certain topology with sufficient accuracy. Continuous space filling with a set of Voronoi–Dirichlet-type primitive polyhedrons (atomic domain) found using a phenomenological method enables to restore correctly arbitrary three-dimensional structure of molecules, nanostructures, metal lattices. Filling of the near-surface areas by the polyhedrons of the same basic set gives a chance to predict the character of interaction between arbitrary atomic ensembles.

Ключевые слова: атомный домен, непрерывность, структура кристаллов, метод Вороного–Дирихле.

(Получено 6 декабря 2013 г.; после доработки — 20 декабря 2013 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Для изучения структуры некристаллических систем часто применяются разнообразные геометрические методы, в частности, подходы типа полиэдрального моделирования Вороного–Дирихле (ВД) [1]. К сожалению, они не применимы для малоразмерных наносистем и тем более одиночных молекул. Напомним, что полиэдром ВД (или атомным доменом) произвольного атома называется выпуклый многогранник, ограниченный плоскостями, которые проведены перпендикулярно через середины отрезков, связывающих соседние атомы. По этой причине построить полиэдр ВД для поверхностных атомов невозможно. В аperiodических структурах часто имеются пустоты, которые также нарушают алгоритм построения полиэдров. В слоистых же структурах (например, графит) типы и параметры полиэдров на границах слоёв значительно отличаются от усреднённых значений.

Геометрические закономерности расположения атомов в кластерных соединениях (особенно в областях пустот) отмечают очень многие исследователи [2]. В частности, пустоты нередко имеют форму низкоразмерных фуллеренов типа C_{20} , C_{24} , C_{28} и т.д. Все это наводит на мысль, что как полиэдральное расположение атомов, так и топология самих полиэдров [3] далеко не случайны.

Поэтому идея нахождения общего подхода к описанию пространственного размещения атомов в конденсированном веществе на основе простых геометрических фигур (геометрических примитивов) представляется весьма продуктивной и методологически ценной по следующим соображениям.

Хорошо известно, что межатомная электронная плотность (ЭП) и её градиент $\nabla\rho(x, y, z)$ — фундаментальные характеристики, которые поддаются расчёту и экспериментально измеряются. Совокупность точек с $\nabla\rho(x, y, z) = 0$ задаёт трёхмерную поверхность нулево-

го потока, и с её помощью также можно характеризовать размер и форму атома в веществе.

Современные прецизионные рентгеноструктурные данные и результаты хорошо апробированных квантово-химических расчётов [4] распределения ЭП между атомами показывают:

а) области пространства, ближайшие к отдельному атому (они также называются атомными доменами или бассейнами), сильно отличаются от сферы и напоминают выпуклые многогранники разной формы;

б) в пространстве между атомами существуют особые «критические точки», где электронная плотность имеет экстремальные значения. Эти точки совпадают либо с местом контакта 4-х атомных доменов, либо лежат на поверхности раздела атомных бассейнов.

Понятно, что квантово-механические объекты нельзя характеризовать такими чисто геометрическими понятиями, как линия или плоскость. Тем не менее, АД как модельный объект может оказаться весьма полезным при геометрическом обосновании начальных условий квантово-химических расчётов.

2. БАЗОВАЯ ИДЕЯ

В настоящей работе рассматривается возможность отождествить геометрию поверхностей нулевого градиента ЭП (поверхностей атомных бассейнов) с топологией АД типа Вороного–Делоне и попробовать заполнить пространство атомной решётки таким образом, чтобы:

- а) каждый атом находился в центре АД;
- б) АД соединялись между собой непрерывным образом;
- в) число контактирующих АД было не более 4;
- г) пустоты в структуре и приповерхностное пространство также заполнялись АД;
- д) число типов АД ограничивалось пространственными комбинациями соединённых равновеликих граней с числом сторон 4, 5 и 6.

Поиск закономерностей взаимного расположения атомов в веществе сводится к задаче выбора типа полиэдра и ориентации его для каждого атома таким образом, чтобы контактирующие полиэдры соприкасались между собой конгруэнтными гранями. Упрощение, которое используется в модели, заключается в замене трудно рассчитываемой поверхности нулевого градиента электронной плотности простым пересечением плоскостей.

От подходов типа Вороного–Дирихле модель отличается тем, что учитывает неэквивалентность взаимодействующих атомов — плоскость АД проходит в общем случае не через середину линии, соединяющей центры соседних атомов.

Поэтому для решения задач, когда известно взаимное расположение атомов и геометрия межатомного пространства, предложена модификация метода Вороного–Дирихле. Суть её в том, что исполь-



Рис. 1. Набор доменов, потенциально пригодных для восстановления трёхмерной архитектуры ячеистого пространства произвольной наносистемы в модели «Атомные соты».

зуется набор полиэдров ВД с 4-, 5- и 6-угольными гранями 21 типа (рис. 1).

Почему именно 21? Строго говоря, этот вопрос ещё ждёт ответа. В литературе известны математические обоснования существования максимального количества многогранников того или иного типа [5]. К сожалению, их результаты не удалось применить для нашего набора начальных условий. Поэтому использовался метод комбинаторного перебора с учётом ограничений на типы граней, равенство длин рёбер и максимальный объём многогранника.

Первое, на что обращаем внимание, — это выбор длины ребра АД (или длины стороны плоской грани). Наиболее естественным на атомном масштабе принять, что длина ребра равна одной атомной единице или боровскому радиусу ($R_B = 0,5296 \text{ \AA}$). Как показал анализ экспериментальных данных, этот параметр фактически задаётся абсолютными размерами домена атома водорода и межатомным расстоянием в молекуле H_2 .

Второе: из всего множества возможных решений «неправильных» многогранников выбираем только такие, у которых степень напряжённости (сумма среднеквадратичных отклонений длин рёбер от эталона) меньше заданного предела.

И третье: для неправильных многогранников производим нормировку размеров таким образом, чтобы сумма длин всех рёбер (периметр) равнялась эталонной длине, умноженной на число рёбер.

Из числа известных правильных многогранников выбраны всего четыре. Это куб, шестигранная призма, усечённый тетраэдр и додекаэдрон. Условие непрерывности заполнения пространства, а это одно из условий Плато для устойчивой пены [5], накладывает ограничения на использование этих регулярных многогранников в общей архитектуре ячеистого пространства.

Действительно, заполнение пространства кубами или гексаго-

нальными призмами — это самое простое решение с точки зрения геометрии. Однако в этом случае нарушается условие Плато о том, что в каждом узле должно сходиться 4 и только 4 ребра. Поэтому эти домены могут использоваться только как промежуточные в комбинации с другими типами доменов.

3. ВЫБОР ТОПОЛОГИИ БАЗОВЫХ ДОМЕНОВ

Додекаэдрон — наиболее подходящая фигура (из регулярных многогранников) для заполнения пространства. Однако при моноэлементном заполнении додекаэдронами некоторая часть объёма остаётся незаполненной. Поэтому он также должен использоваться в комбинации с другими типами.

Усечённый тетраэдр — единственный домен с треугольной гранью. Вопрос об использовании треугольных граней открыт, поскольку общая теория пены говорит о неустойчивости такой структуры. Однако минералогия и молекулярная биология дают нам немало примеров существования таких форм.

Поскольку модель предполагается использовать для описания реальных атомных ансамблей, геометрия базовых доменов для неё выбиралась в соответствии с известной геометрией низкоразмерных фуллеренов с числом атомов углерода 24, 26, 28, 30, 32, 36, 40. Ограничения на максимальный объём домена определялись радиусом вписанной в него сферы, который в свою очередь задавался максимальным ковалентным радиусом атома Cs.

Поскольку все типы перечисленных многогранников не являются правильными, конкретные значения длин рёбер (координаты узлов) задавались тремя условиями.

1. Средняя длина ребра в домене (длина периметра, делённая на число рёбер) в точности равна боровскому радиусу R_B (1 а.е. = $R_B = 0,529 \text{ \AA}$);

2. Среднеквадратичное отклонение длин рёбер от R_B минимально;

3. Узлы каждой грани лежат в одной плоскости.

Выполнение всех вышеперечисленных условий и соображений дало набор из 21 «идеальных» АД, которые в принципе пригодны для непрерывного заполнения пространства в атомных ансамблях. Сразу следует указать, что понятие «идеальный» АД коррелирует с понятием «изолированный одиночный атом» и используется как «мягкая» заготовка при дискретизации пространства в реальных системах.

На рисунке 1 показан внешний вид перечисленных элементов, классифицированных по количеству и типу граней, в них содержащихся. Принцип наименования таков: сначала указан тип грани (по количеству сторон) — $q = 4$, $p = 5$, $h = 6$, затем количество граней этого типа в домене. Например, $q2p8h12$ означает домен, у которого две

квадратные грани, восемь пентагональных и двенадцать гексагональных граней. Для двух типов $p12h8$ и $p12h10$ возможны по две геометрически разные конфигурации (геометрическая изомерия). Для их идентификации использованы кавычки («).

4. ВЗАИМООТНОШЕНИЕ АТОМОВ И АТОМНЫХ ДОМЕНОВ

Для того чтобы установить работоспособность предлагаемого подхода, необходимо в рамках постулированных правил и принципов проверить модель на простейших атомных системах. Перечислим их ещё раз:

- сочленять домены друг с другом будем конгруэнтными гранями;
- каждый из 92 атомов химических элементов поместим точно в центр соответствующего домена.
- поскольку грани имеют свои оси симметрии (4, 5, 6), осевая ориентация для простейших двухатомных систем не определена. Важно, чтобы узлы и ребра граней совпадали. Это и есть реализация принципа непрерывного заполнения.

Рассмотрим простейшую двухатомную систему — молекулярный водород. Ковалентный радиус известен, расстояние между ядрами — 0,741 Å. Поскольку атомы тождественны, логично предположить, что занимаемые ими домены также одинаковы. Чтобы выяснить, какой домен и при какой ориентации при контакте друг с другом обеспечивает нужное расстояние, для каждого домена из базового набора вычисляются расстояния от центра домен

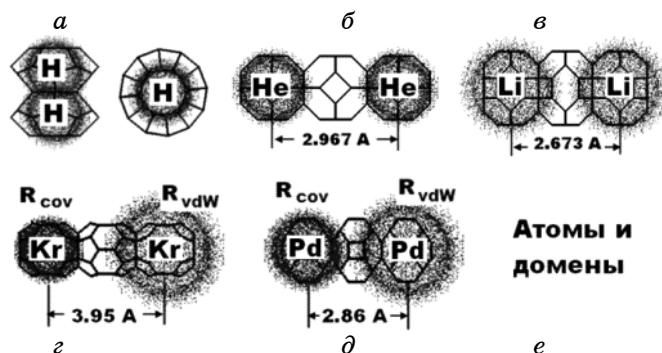


Рис. 2. Примеры вложений атомов димерных комплексов в домены, обеспечивающие необходимое расстояние между центрами. Атомы схематично изображены роём точек, внешний размер которого равен ковалентному или Ван-дер-Ваальсовому радиусу: *a* — изображение молекулы H_2 в доменах $p12h2$ (вид сбоку и сверху); *b* — димер из атомов гелия в крайних доменах типа $q6h8$; *c* — димер $Li-Li$ в доменах $q6h12$.

тров его граней. Компьютерный анализ возможных конфигураций выдал единственное решение — при сочленении двух доменов типа $p12h2$ гексагональными гранями расстояние между центрами доменов оказывается равным $0,741 \text{ \AA}$ с точностью $\cong 0,1\%$. Такое совпадение даёт основание считать, что в случае молекулярного водорода атомы находятся в домене $p12h2$.

Укажем, что предыдущее и все последующие изображения, а также компьютерные расчёты выполнены в среде Maple-15. На рисунке 2, *a* показаны домены $p12h2$ с вложенными внутрь атомами водорода, с символично отображённым распределением электронной плотности в виде роя точек.

Анализ следующего двухатомного комплекса He_2 ($R_{\text{cov}} = 0,32 \text{ \AA}$, $R_{\text{vdw}} = 1,4 \text{ \AA}$, $\text{Dist}_{\text{He-He}} = 2,967 \text{ \AA}$) показывает отсутствие решения на множестве контактирующих пар одинаковых АД. И только введение промежуточного третьего домена успешно согласует геометрические атомные и доменные параметры (рис. 2, *б*).

Разница между модельными и экспериментальными дистанциями, как и в случае молекулярного водорода, не превысила $0,1\%$. Такое совпадение при столь простых начальных предположениях естественно вызывает законные вопросы. Насколько универсальна процедура, напоминающая детский конструктор? Чтобы ответить на этот вопрос, мы обратились к экспериментальным данным по расстояниям между атомами в димерах типа А–А [5–7]. Рассмотрим димер Li-Li .

Процедура компьютерного поиска выдаёт структуру из трёх доменов типа $q6h12$, контактирующих между собой экваториальными гексагональными гранями. Атомы лития расположены в центрах крайних доменов, центральный же пустой. Расстояние между центрами атомов совпадает с табличными значениями с точностью до $0,001 \text{ \AA}$. Внешний вид комплекса показан на рис. 2, *в*.

5. ДВУХАТОМНЫЕ КОМПЛЕКСЫ

Справедливо ли столь идеальное совпадение и для более тяжёлых атомов? Не всегда. На рисунках 2, *г*, *д* показано геометрическое взаиморасположение димеров криптона и палладия. Как и в случаях лёгких атомов, димер Pd идеально вписывается в конструкцию из доменов типа $q6h12$, однако домены контактируют уже четырёхугольными гранями. Правда, чтобы обеспечить совпадение предсказаний модели с экспериментальными данными, домен $p12h8$ нужно было «растянуть» на $5,2\%$. Когда мы проверили работоспособность модели для известных двухатомных комплексов, оказалось, что примерно в половине случаев необходимо домены слегка деформировать путём сжатия или растяжения. Как правило, величина деформации находится в пределах $\pm 1-3\%$. Кстати, для димера

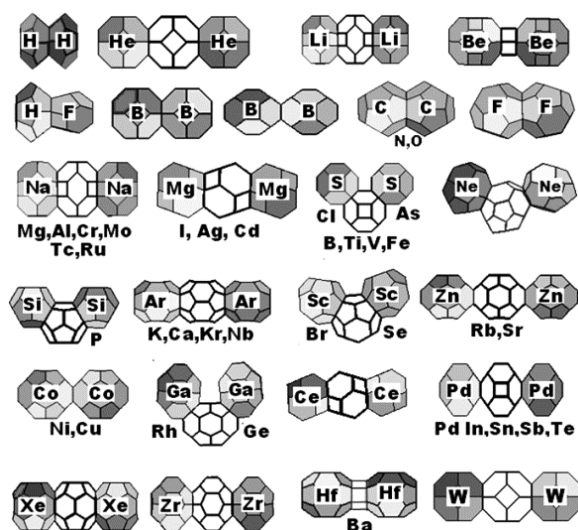


Рис. 3. Доменная архитектура двухатомных комплексов, построенная по данным межатомных расстояний, взятых из работ [8–11].

криптона она имеет максимальное значение.

Поскольку число разных атомов превышает число базовых доменов, в домене одного типа могут находиться разные атомы. «Предпочтение домена» конкретного атома задаётся несколькими факторами:

- условием непрерывности заполнения пространства;
- структурой электронных орбиталей (внутренней симметрией волновой функции атома);
- размером атома;
- типом (симметрией) домена. И, наконец, наверно главное — типом симметрии внешней электронной оболочки, которая для ряда атомов может меняться в зависимости от внешнего окружения.

Доменная архитектура более чем 50 димеров показана на рис. 3. Как видим, одинаковые атомы расположены в разных АД и наоборот, разные атомы — в однотипных доменах. Например, Na, Mg, Al, Cr, Mo, Tc и Ru «предпочитают» домен $q6h12$. Атомы бора, титана, ванадия и железа в бинарных системах находятся внутри доменов $q6h8$.

Таким образом, модель заполнения «пустого» межатомного пространства доменами с образованием непрерывной структуры даёт количественное объяснение межатомных расстояний в димерных комплексах.

После апробации на двухатомных системах подход был применён для полиэдрального описания массива одиночных молекул, некоторых кристаллов, малоразмерных наносистем. Поскольку струк-

тура простых органических и неорганических молекул восстанавливалась достаточно просто, было интересно применить полиэдральную модель для построения трёхмерной структуры сильнонапряжённых молекул.

6. МОЛЕКУЛЫ И РЕШЁТКИ

В работе [3] большое количество типов органических молекул сведено к 26 типам молекулярных графов. Как правило, это — молекулы с необычной структурой типа тетраэдров, кубанов и пропелланов, для которых модель молекулярных графов более адекватна по сравнению с другими. Оказалось, что молекулярные графы также воспроизводятся с точным соблюдением межатомных углов и расстояний (см. рис. 4), что подчёркивает универсальность модели. Интересно, что степень напряжения молекул, описываемых данными графами, коррелирует с величиной деформации полиэдров, включённых в эту трёхмерную структуру.

Возможность непрерывного заполнения пространства кристал-

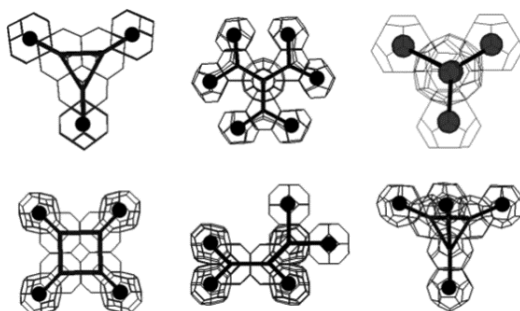


Рис. 4. Примеры воспроизведения полиэдральной моделью 5 из 26 типов молекулярных графов Бейдера [4].

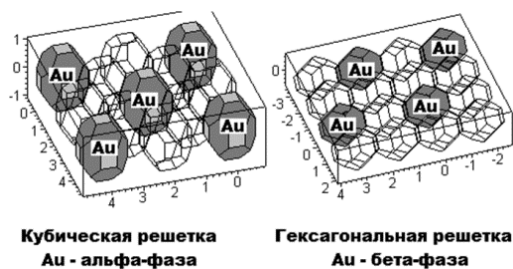


Рис. 5. Воспроизведение полиэдральной структуры решётки металлического золота. Слева — домены типа $q6h12$, характерные для α -фазы. Справа — домены типа $q6h8$, характерные для гексагональной β -фазы.

лических решёток металлов демонстрируется на примере двух фаз Au (гексагональная и кубическая). На рисунке 5 показаны поверхностные слои обеих фаз золота. Обращаем внимание, что различные фазы отличаются типом доменов, формирующих топологию пространства внутри металла, а ковалентный радиус золота лучше вписывается в домен $qbh8$, характерный для гексагональной решётки β -фазы. Для полного совпадения параметров модельной и экспериментальной решёток домены деформированы в пределах нескольких процентов по-разному вдоль осей OZ и OX .

Столь простое и наглядное изображение структуры кристаллической поверхности позволяет сразу предсказать характер взаимодействия произвольного атома с поверхностью. Понятно, что если атом может находиться в доменах с наличием 4- и 6-угольных граней, он будет в топологическом согласии (concordance) с поверхностью Au, и взаимодействие может быть достаточно сильным. Кроме того, топология полиэдров однозначно указывает на места возможного связывания, что должно облегчить и ускорить общепринятые квантово-химические расчёты.

7. СЛОИСТЫЕ СТРУКТУРЫ

В случаях, когда интересующий нас атом (или поверхность многоатомного ансамбля) топологически не совпадает с поверхностью кристаллической решётки, мы должны из имеющегося базового набора подобрать такую комбинацию полиэдров и такое их взаимное расположение, чтобы обеспечить согласованность гранёных по-

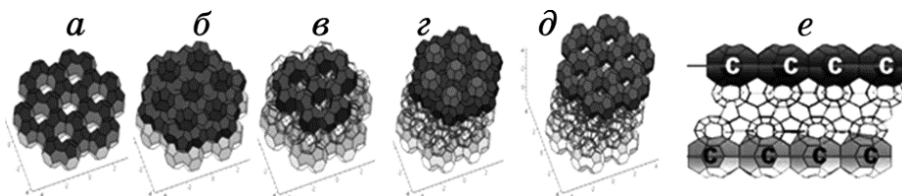


Рис. 6. Последовательное заполнение межслойного пространства полиэдрами при воспроизведении решётки графита «из первых принципов»: *a*) — гексагональная решётка атомов углерода, упакованная в полиэдры типа $p12h3$; *b*), *c*) — прилежащие (верхний и нижний) непосредственно к атомам углерода слои пустых доменов двух типов. Все грани контактирующих слоёв конгруэнтно сопряжены друг с другом без зазоров; *e*) — промежуточный (сопрягающий) слой пустых доменов обеспечивает непрерывность заполнения пространства без нарушения топологии контактирующих доменов; *d*) — верхний слой атомов углерода, сдвинутый относительно нижнего точно на табличные значения; *e*) — вид двух графитовых слоёв сбоку. Пространство между слоями непрерывно заполнено пустыми доменами.

верхностей обоих объектов.

Этот случай демонстрируется на примере реконструкции геометрии структуры графита при взаимодействии графеновых слоёв между собой. Последовательность действий при решении этой задачи такова.

Шаг 1: заполняем доменами классическую гексагональную структуру углеродного слоя (рис. 6, а). Решение простое и абсолютно однозначное — это совокупность АД типа $p12h3$, соединённых между собой гексагональными гранями. В этом случае и углы и дистанции между атомами, без какой либо подгонки, соответствуют табличным значениям. Но топология поверхности такова, что сочленив слои друг с другом невозможно. Поэтому (шаг 2) сверху и снизу от углеродных атомов заполняем пространство одинаковыми промежуточными слоями пустых АД двух типов (рис. 6, б, в). Затем (шаг 3) формируем промежуточный (согласующий) слой также из пустых АД (рис. 6, в). И уже он точно спрягает приповерхностные слои (рис. 6, з). В результате мы имеем трёхмерную архитектуру из АД на (рис. 6, д), которая описывает реальную решётку графита (рис. 6, е) с межплоскостными расстояниями и их сдвигом относительно друг друга.

Приведённые выше примеры использования полиэдральной модели в столь разных разделах структурной химии и кристаллографии позволяют надеяться, что она применима для описания трёхмерной архитектуры произвольных наносистем. Естественно, что полный ответ на границы использования модели может дать только

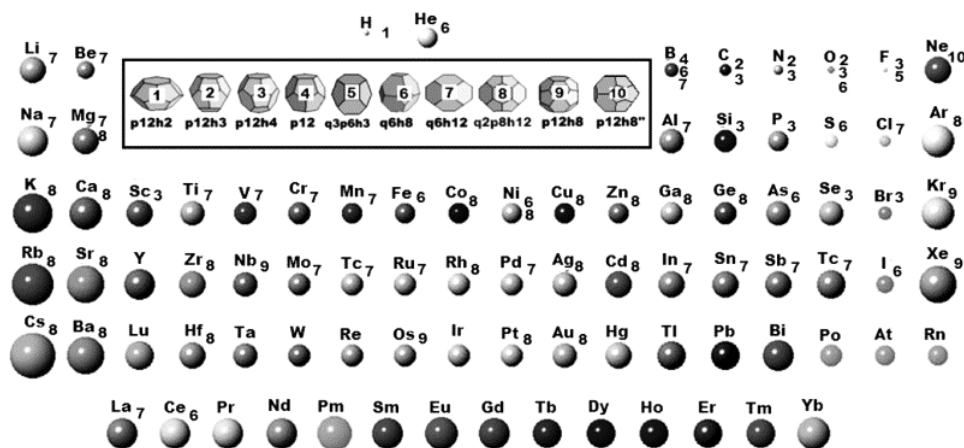


Рис. 7. Поиск взаимоотношений между атомами и типами атомных доменов, в которых атомы могут находиться в различных соединениях или решётках. В центре показан набор из 10 доменов, которые характерны для двухатомных комплексов из одинаковых атомов. Цифры справа от символа химического элемента указывают на тип домена, в котором может находиться конкретный атом.

практика. Пока же небольшой накопленный опыт позволяет начать работу по выяснению типов полиэдров, которые могут занимать известные химические элементы. На рисунке 7 показана часть периодической таблицы элементов, где у символов проставлены номера доменов, где может находиться тот или иной атом.

В центре вверху изображена топология доменов с их номерами. Как видим, из набора 21 базовых доменов практика отобрала пока только 10. Представляется, что реально существующие более сложные и напряжённые молекулы потребуют, возможно, использования дополнительных полиэдров. Решению этой задачи будет посвящена дальнейшая работа с привлечением специализированных разделов математики.

8. ОБСУЖДЕНИЕ

1. Попытка упростить анализ трёхмерной структуры различных атомных ансамблей с помощью понятия атомных доменов или атомных бассейнов, где аттрактором является атомное ядро, дала несколько неожиданные результаты. Не столь часто используемая характеристика распределения межатомной ЭП, такая как градиент и его векторное поле, оказалась весьма успешной для модельного представления «формы атома» в конденсированном состоянии.

Расчитанная квантово-химическими методами поверхность нулевого градиента ЭП естественным образом ограничивает область влияния атома в системе и формирует её некоторый пространственный образ. С другой стороны, методы полиэдрального моделирования (Вороного–Делоне и др.) также оперируют с похожими геометрическими формами. Использование двух, казалось бы, противоположных представлений, приводит к одинаковым результатам вычисления межатомных дистанций.

2. Набор абстрактных геометрических примитивов, сконструированных по достаточно простым алгоритмам, приобрёл физический смысл при введении в его основной геометрический параметр такой фундаментальной величины как атомная единица длины или, так называемый, классический радиус электронной орбиты в атоме водорода. Конечно, пока рано говорить о какой-либо взаимосвязи физики и геометрии, тем не менее, пища для размышлений имеется.

3. Небольшое количество базовых полиэдров, способных объяснить геометрические характеристики разнообразных двухатомных комплексов, говорит о том, что набор внутренних симметрий атомов также достаточно ограничен. По крайней мере, это относится к бинарным атом-атомным взаимодействиям. Отсюда следует практически важный вопрос — насколько необходим учёт многоэлектронных волновых функций в стандартных квантово-механических расчётах?

9. ВЫВОДЫ

Предложена и апробирована идея аппроксимации реальных поверхностей нулевого градиента электронной плотности одиночных атомов в конденсированном веществе деформируемыми полиэдрами Вороного–Делоне.

При выборе абсолютной длины рёбер всех полиэдров равной 1 а.е. (боровскому радиусу) комбинаторика сочленений многогранников конгруэнтными гранями обеспечивает:

- а) непрерывное заполнение пространства;
- б) совпадение экспериментально наблюдаемых дистанций между атомами при их помещении в центры полиэдров;
- в) предложенный метод полиэдрального моделирования обладает описательными и предсказательными свойствами.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. V. A. Blatov, A. P. Shevchenko, and V. N. Serezhkin, *Acta Cryst.*, **A51**: 909 (1995).
2. А. В. Шевельков, *Соросовский образовательный журнал*, **8**, № 2: 44 (2004).
3. Е. А. Андреев, *Тезисы II Международной научной конференции «Наноструктурные материалы–2010»* (Киев, Украина: 2010), с. 34.
4. Р. Бейдер, *Атомы в молекулах. Квантовая теория* (Москва: Мир: 2001).
5. S. Hilgenfeldt, A. M. Kraynik, D. A. Reinelt, and J. M. Sullivan, *Europhysics Letters*, **67**, No. 3: 484 (2004).
6. J. Lopez Cacheiro, B. Fernandez, D. Marchesan, S. Coriani, and A. Rizzo, *Mol. Phys.*, **102**, No. 1: 39 (2004).
7. T. P. Haley and S. M. Cybulski, *J. Chem. Phys.*, **119**, No. 11: 54875496 (2003).
8. *Cambridge Structural Database System. Version 5.27* (Cambridge Crystallographic Data Centre: 2006).
- 8 К. Т. Tang and J. P. Toennies, *J. Chem. Phys.*, **118**: 497 (2003).
9. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B*, **69**: 195113 (2004).
10. В. Н. Сережкин, Д. В. Пушкин, *Кристаллохимические радиусы и координационные числа атомов* (2004).
11. С. С. Бацанов, *Структурная химия. Факты и зависимости* (Москва: 2000).

REFERENCES

1. V. A. Blatov, A. P. Shevchenko, and V. N. Serezhkin, *Acta Cryst.*, **A51**: 909 (1995).
2. A. V. Shevel'kov, *Sorosovskiy Obrazovatel'nyy Zhurnal*, **8**, No. 2: 44 (2004).
3. E. A. Andreev, *Tezisy II Mezhdunarodnoy Nauchnoy Konferencii 'Nanostrukturnye Materialy–2010'* (Kiev, Ukraine: 2010), p. 34 (in Russian).
4. R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules. A Quantum Theory* (Moscow: Mir: 2001) (Russian translation).
5. S. Hilgenfeldt, A. M. Kraynik, D. A. Reinelt, and J. M. Sullivan, *Europhysics*

- Letters*, **67**, No. 3: 484 (2004).
6. J. Lopez Cacheiro, B. Fernandez, D. Marchesan, S. Coriani, and A. Rizzo, *Mol. Phys.*, **102**, No. 1: 39 (2004).
 7. T. P. Haley and S. M. Cybulski, *J. Chem. Phys.*, **119**, No. 11: 54875496 (2003).
 8. *Cambridge Structural Database System. Version 5.27* (Cambridge Crystallographic Data Centre: 2006).
 8. K. T. Tang and J. P. Toennies, *J. Chem. Phys.*, **118**: 497 (2003).
 9. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B*, **69**: 195113 (2004).
 10. V. N. Serezhkin and D. V. Pushkin, *Kristalokhimicheskie Radiusy i Koordinacionnye Chisla Atomov* (2004) (in Russian).
 11. S. S. Batsanov, *Strukturnaya Khimiya. Fakty i Zavisimosti* (Moskva: 2000) (in Russian).