



# *Магические числа*

*Кластеры магические* — это кластеры определённых «магических» размеров, которые благодаря своей специфической структуре обладают повышенной стабильностью по сравнению с кластерами других размеров.

Отличительной чертой кластера являются его размер. Под *размером кластера* принято понимать число атомов, образующих кластер. Кластеры могут иметь размеры от единиц до сотен атомов, а формирующийся ансамбль кластеров обычно характеризуется достаточно широким распределением по размерам.

В некоторых системах кластеры, имеющие особые размеры, обладают повышенной стабильностью, в результате чего таких кластеров формируется существенно больше, чем кластеров других размеров. Такие кластеры часто называют *магическими*, т. к. число атомов в них не произвольное, а точно равно некоторому «магическому» числу.

Классическим примером магических кластеров может служить семейство фуллеренов, включающее  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{84}$ .

В магических нанокластерах атомы или молекулы расположены в определённом порядке и довольно сильно связаны между собой. Благодаря этому обеспечивается сравнительно высокая устойчивость магических нанокластеров, их невосприимчивость к внешним воздействиям.

Магические нанокластеры по своей устойчивости подобны нанокластерам. Вместе с тем в магических нанокластерах атомы или молекулы в своём расположении не образуют кристаллическую решётку, типичную для нанокристаллов.

Особенность упорядоченных или магических нанокластеров состоит в том, что для них характерны не произвольные, а строго определённые, энергетически наиболее выгодные – так называемые магические числа атомов или молекул. Как следствие, для них характерна немонотонная зависимость их свойств от размеров, т.е. от числа образующих их атомов или молекул.



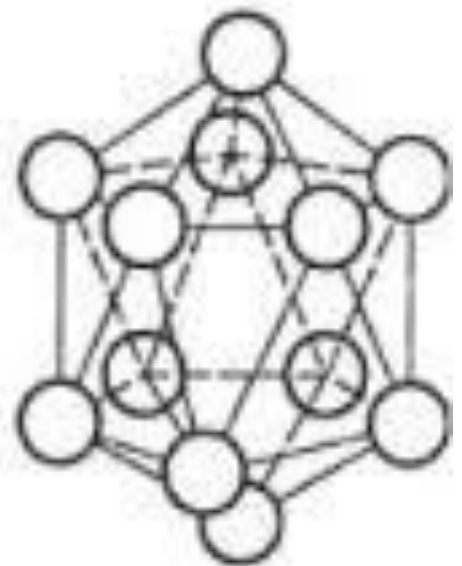
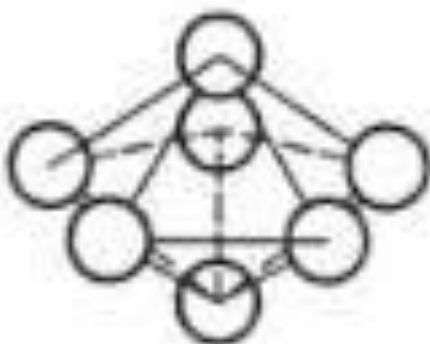
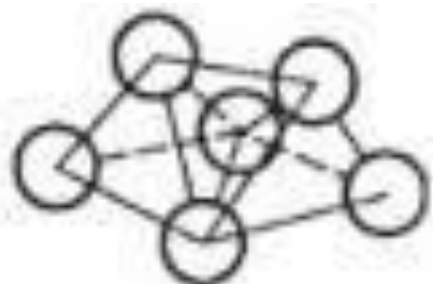
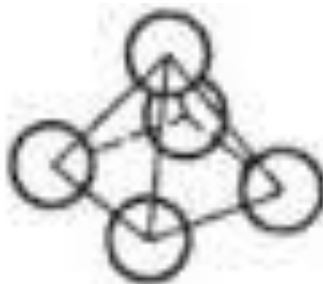
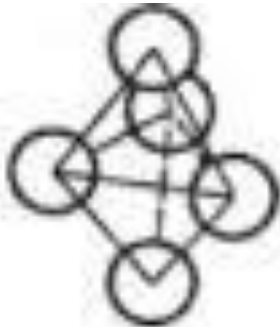
Повышенная стабильность, присущая магическим кластерам, обусловлена жёсткостью их атомной или молекулярной конфигурации, которая удовлетворяет требованиям плотной упаковки и соответствует завершённым геометрическим формам определённых типов.

Расчёты показывают, что в принципе возможно существование различных конфигураций из плотно упакованных атомов, причём, все эти конфигурации представляют собой различные сочетания группировок из трёх атомов, в которых атомы расположены на равных расстояниях друг от друга и образуют равносторонний треугольник.

Простейшей из таких конфигураций, соответствующей наименьшему нанокластеру, состоящему из четырёх атомов, является тетраэдр (а), который входит в качестве составной части в другие, более сложные конфигурации.

Нанокластеры могут иметь кристаллографическую симметрию, для которой характерны оси симметрии 5-го порядка. Это принципиально отличает их от кристаллов, структура которых характеризуется наличием кристаллической решётки и может иметь только оси симметрии 1-го, 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков.

В частности, наименьший устойчивый нанокластер с одной осью симметрии 5-го порядка содержит семь атомов и имеет форму пентагональной бипирамиды (e), следующая устойчивая конфигурация с шестью осями симметрии 5-го порядка – нанокластер в форме икосаэдра из 13 атомов (з).



Набор магических чисел, соответствующих наиболее устойчивым ядрам нанокластеров, может быть следующим: 13, 55, 147, 561, 1415, 2057, 2869 и т.д.

Минимальное по размерам ядро содержит 13 атомов: один атом в центре и 12 – в первом слое.

Магические нанокластеры могут формироваться при различных условиях, как в объёме конденсирующейся среды, так и на поверхности подложки, которая может оказывать определённое влияние на характер формирования нанокластеров.



# *Применение нанокластеров*

1. В органическом синтезе используют высокую каталитическую активность нанокластеров переходных металлов.
2. Оптические и электронные свойства кластеров полупроводниковых материалов, распределённых в органической или силикатной матрице используются в области физики и химии низкоразмерных систем и нелинейной оптики.

# Вопросы для самоконтроля

1. Что принято понимать под размером кластера?
2. Что может служить классическим примером магических кластеров?
3. Указать набор магических чисел, соответствующих наиболее устойчивым ядрам нанокластеров.
4. Сколько атомов содержит минимальное по размерам ядро магического кластера?