

УДК 541.1+539.2

**ЭЛЕКТРОННО-ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ДЛЯ НАНОКЛАСТЕРОВ SiC И ДРУГИХ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИХ СИСТЕМ****А.В. Лузанов\***

Метод электронных индексов кривизны в топологическом приближении хюккелевского типа [J. Mol. Struct. (Theochem), 333, 279 (1995)] привлечен для анализа специфических структурных различий в политипах карбида кремния. Показано, что практически независимо от размера нанокластера политипу 3C-SiC свойственна существенно меньшая электронная кривизна, чем гексагональным политипам 2H-SiC и 4H-SiC. Сравнение с результатами для кривизны в более простых (плоских) нанографеновых структурах позволило с определенной уверенностью судить о существенно более "линейном" движении электронов в кубическом политипе по сравнению с другими политипами. Это факт привлекается для правдоподобного качественного объяснения сравнительно малой энергетической щели в 3C-SiC. В статье также констатируется (без строгого доказательства) эффект полной локализации атомных кривизн на границе плоской альтернантной сопряженной молекулы.

**Ключевые слова:** топологическая матрица, мера сложности, индексы кривизны, политипы SiC, гексагональность, нанографеновые молекулы.

**Введение**

Один из важнейших материалов, карбид кремния (SiC), находит в последнее время новые, почти фантастические области приложений, прежде всего, в современной наноэлектронике в ее напряженных поисках материалов и устройств для будущих квантовых компьютеров. Подобно наноалмазам с азот-вакансионными (NV) центрами окраски, синтезированным нанокластерам карборунда (нано-SiC) с парамагнитными дефектами предсказывают важную роль в теории и практике кубитов (квантовых битов информации) [1,2]. Настоящее исследование в значительной мере является продолжением нашего изучения в [3-6] углеродсодержащих нанокластеров. Но и сам по себе нано-SiC – очень интересный и намного более сложный объект, чем наноалмаз. В отличие от алмаза, кристаллизующегося в основном в кубической сингонии, карборунд существует в огромном количестве - более 250 форм (см. стр. 92 в [7]), точнее политипов, с заметно отличающимися физическими свойствами [7,8]. Наиболее важные политипы SiC относятся к кристаллам с кубической (3C-SiC) и с гексагональной (2H-SiC и т.д.) элементарными ячейками. Данные политипы и будут предметом настоящей статьи. Напомним, что в используемой (по Рамселлу) номенклатуре символ C означает кубическую решетку, а H –гексагональную.

Но прежде чем конкретизировать задачу, заметим, что нанокластеры политипов SiC - весьма трудоемкая задача даже для полуэмпирического изучения. Чтобы сколь-нибудь адекватно выбрать, скажем, нанокластер для политипа 6H-SiC, необходимо достаточно много (десятки, а лучше сотни раз) повторить в пространстве его элементарную ячейку с базисом, содержащую в рассматриваемом случае 12 атомов (по 6 атомов C и Si). Это означает необходимость работы с системами из сотен и тысяч атомов. Трудно представить неэмпирические методы высокого уровня, которые были бы реально доступны для подобных задач. Например, даже хартри-фоксовский расчет нанокластера  $Si_{500}C_{500}$  с оптимизацией геометрии, скажем, в скромном базисе 6-31G(d), предполагает едва ли одолимое (для большинства доступных компьютеров) многократное использование 17000 орбиталей. Полуэмпирические всевалентные схемы для той же системы уже более досягаемы (см., например, [9]), но все же предполагают использование мощных компьютерных рабочих станций. При таких условиях мы вынуждены довольствоваться крайне упрощенными подходами, и топологический подход – один из возможных способов выявить какие-то закономерности хотя бы на грубом качественном уровне.

Таким образом, в качестве первого шага, не претендующего на квантовохимический уровень описания, в настоящей статье мы рассмотрим относительно несложную характеристику таких систем геометрико-топологическими методами. Более конкретно, мы применяем технику элек-

\* НТК «Институт монокристаллов» НАН Украины

тронно-топологических индексов, введенных в [10] и легко получаемых для тысячеатомных структур с помощью минимальных вычислительных средств (даже ноутбуков). При этом оказывается, что среди индексов из [10] наиболее подходящим, описывающим как 3-мерные, так и 2-мерные системы, является электронный индекс кривизны. Чтобы лучше понять его свойства, мы также приводим ряд результатов, интересных самих по себе, для типичных сопряженных систем и молекул графенового типа. Ранее индексы кривизны в сложных структурах нами не изучались, и настоящей работой этот пробел устраняется.

### Электронно-топологические индексы

Следуя [10] (см. также [11,12]), введем средние дифференциально-геометрические индексы электронной длины  $\bar{l}$  и кривизны  $\bar{K}$ . Для больших задач удобно оперировать «удельными» значениями, отнесенными к числу атомов  $N$  задачи. Таким образом, вместо выражений (22) и (23) в [10]), мы вводим следующие определения средних значений длины

$$\bar{l} = \text{Tr}|\mathbf{P}|/N \quad (1)$$

и кривизны

$$\bar{K} = \text{Tr}|\mathbf{P} \wedge \dot{\mathbf{P}}|^{1/2}/N, \quad (2)$$

где использованы одноэлектронный оператор импульса  $\mathbf{P}$  и его производная по времени  $\dot{\mathbf{P}}$ . Операторный след  $\text{Tr}$  в (1) и (2) понимается обычным матричным образом. Знак модуля в тех же выражениях также интерпретируется в матричном смысле. Термин «топология» здесь означает, что при построении необходимых матриц в качестве гамильтониана берется топологическая матрица,  $h_{\text{top}}$ , молекулы со знаком минус (прямой аналог топологической матрицы  $\pi$ -электронного метода Хюккеля). Таким образом,  $h_{\text{top}}$  с точностью до знака - это матрица смежности соответствующего молекулярного графа, а именно, все ненулевые элементы  $h_{\text{top}}$  равны  $-1$ , притом только для химически связанных пар атомов. Тогда матрицы компонент импульса и их временные производные легко вычисляются по матрице координат (подробнее см. [13]). Кроме того, для нахождения операторного модуля и дробных степеней матриц можно использовать итерационные методы, обходящие решение задачи на собственные значения [14]. Отметим также, что называя индексы (1) и (2) средними величинами, мы подразумеваем и усреднение по всем многоэлектронным состояниям, которые строятся из подходящих детерминантов Слэтера, включающих и всевозможные (многократно) возбужденные состояния. Этим обстоятельством и объясняется наличие в (1) и (2) операции матричного следа (см. Приложение А в [13]). Очевидно, что получаемые таким образом индексы характеризуют систему безотносительно к какому-либо ее электронному состоянию. В каком-то смысле подобный топологический подход осуществляет специфическую реализацию классической идеи Бутлерова о некоем взаимном влиянии атомов в молекуле. Стоит еще напомнить, что  $\bar{l}$  дает простейшую характеристику молекулярной сложности (для изолированных атомов  $\bar{l} = 0$ ) [10,11]. Но в большей мере, чем  $\bar{l}$ , электронно-топологическую сложность молекулы отражает индекс  $\bar{K}$  - прежде всего в отношении непрямолинейного характера электронных «путей» в молекуле. Для линейных молекул автоматически  $\bar{K} = 0$ .

### Характеризация нано-SiC

Теперь конкретизируем нанокластеры карборунда, для которых в данной работе реализуется геометрико-топологический подход из [10]. В принципе, метод получения первичных нанокластеров столь же элементарен, как и тот, что применялся нами для наноалмазов. Подобная процедура является известной и привычной в молекулярно-динамическом моделировании свойств твердых тел и нанокластеров, в моделях радиационных повреждений (см., например, в [15,16]) и др. Выбираются стандартные базисные векторы примитивной ячейки с базисом (см., например, [17]) и задаются подходящие координаты атомов в ячейке. Задача упрощается тем, что для SiC вся необходимая информация содержится в не потерявшей своего значения книге по полиморфизму [18] (см., в частности, главу 5).

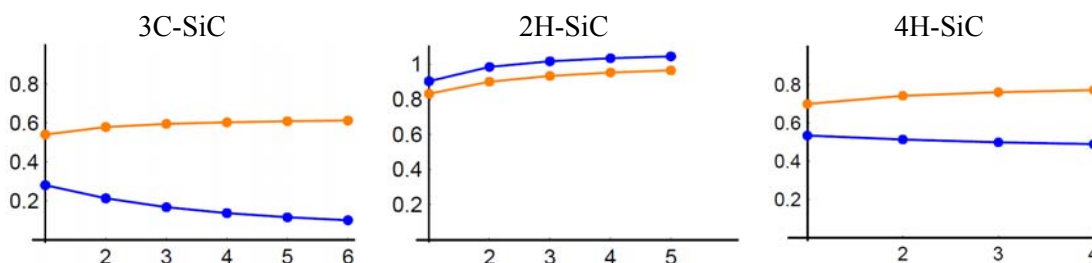
Мы ограничимся изучением самых простых, но и наиболее исследуемых политипов - 3С-SiC (решетка сфалерита), 2Н-SiC (решетка вюрцита) и 4Н-SiC. Для более сложных политипов, которые здесь не изучаются, стоит обратиться к [19] и современным кристаллографическим базам данных (они указаны в [17]). Для 4Н-SiC и 6Н-SiC уточненные параметры решетки содержатся в [20]. Располагая набором всех требуемых кристаллографических векторов, нетрудно проделать трансляционное размножение точек ячейки. В нашей работе это осуществлялось программно в рамках среды МАТЕМАТИКА 5.2 [21]. Заполнив таким образом достаточно большую часть пространства, мы получаем грубую начальную структуру нанокластеров (initial SiC), которые также нами изучались. Для дальнейшей работы из initial SiC вырезается приемлемый по размерам максимально симметричный кластер. Получаемые системы визуализировались средствами той же вычислительной среды. В иллюстративных целях мы приводим явные картинки только для относительно небольших структур, хотя ниже многие данные относятся к нанокластерам с тысячами атомов. В более последовательных алгоритмах генерации нанокластеров скорее следует применять ячейки Вигнера-Зейтца (многогранники Вороного) или же расширенные ячейки, но они и более трудны в программировании.

Приступим теперь к конкретным результатам. Выясним сначала, каковы различия между упомянутыми политипами в терминах определенных выше электронных индексов длины и кривизны. С этой целью рассматриваются сначала системы, названные выше initial SiC. На Рис. 1 приведены соответствующие графические зависимости значений удельных индексов  $\bar{l}$  и  $\bar{K}$  как функций длины кластера. Прилагательное "удельный" будет как правило далее опускаться. Условная величина длины – это число  $n$  в значении  $2n+1$  трансляций вдоль каждого из трех направлений. Полное число трехмерных трансляций, которыми формируется initial SiC, равно  $(2n+1)^3$ , а число атомов в нем  $N = \nu_{\text{cell}}(2n+1)^3$ , где  $\nu_{\text{cell}}$  - число атомов в примитивной ячейке. Например, в политипе 4Н-SiC, где  $\nu_{\text{cell}}=8$ , значению  $n=4$  на графике отвечало расчету с  $N=5832$ .

Рассматривая полученные графики, обнаруживаем, что электронная длина мало зависит от политипа, и как прежде в [22], она оказывается в целом не очень информативной характеристикой. Напротив, электронная кривизна четко разделяет политипы:

$$\bar{K}[3\text{C-SiC}] < \bar{K}[4\text{H-SiC}] < \bar{K}[2\text{H-SiC}] \quad (3)$$

Небезынтересно то, что тот же ряд образует так называемая степень гексагональности (в %): 0 в 3С-SiC, 50 в 4Н-SiC и 100 в 2Н-SiC (гексагональность определяется долей гексагональных позиций, заполненных в элементарной ячейке). Ряд физических свойств, например, энергетическая щель  $\Delta\varepsilon$  также выстраивается в последовательности (3) [18,23]; см. также статью [24], откуда для того же ряда, что и в (3), извлекаем следующие значения  $\Delta\varepsilon$  (в эВ): 2.39, 3.26, 3.33. Хотя в [24], предлагается некоторое объяснение, природа зависимости свойств политипов от их гексагональности остается невыясненной. Необходимы дальнейшие исследования более сложных политипов, чтобы можно было понять все эти особенности в терминах кривизны. Более определенный вывод мы сделаем в последнем разделе статьи.

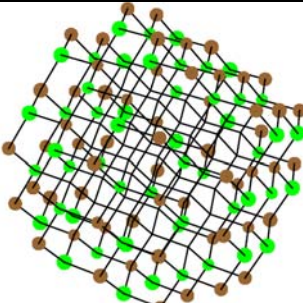
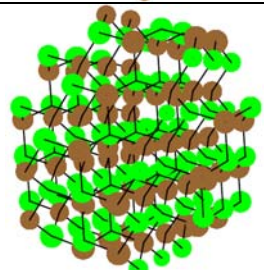
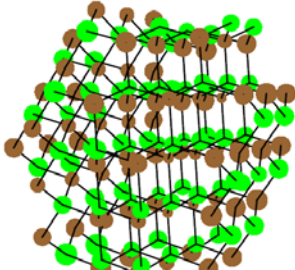


**Рисунок 1.** Зависимости от условной длины нанокластера  $n$  (см. текст) значений индексов электронной длины (более светлые кривые; даны on-line оранжевым цветом) и электронной кривизны (более темные кривые; даны on-line синим цветом) для нанокластеров политипов 3С-SiC, 2Н-SiC и 4Н-SiC.

Другой интересный момент – мера участия краевых (поверхностных) атомов в общую кривизну. С этой целью изучены сначала малые кластеры (Табл. 1). В таблице приведены значения

$\bar{K}$  вместе с диаграммой атомных индексов кривизны  $K_A$  для всех атомов  $A$ . Индексы  $K_A$  - это просто диагональные матричные элементы оператора кривизны  $|\mathbf{P} \wedge \dot{\mathbf{P}}|^{1/2}$  в формальном базисе АО, в котором вычисляются все геометрико-топологические индексы. При этом  $\bar{K} = \sum_A K_A / N$ .

**Таблица 1.** Распределение  $\{K_A\}$  полной кривизны по атомам в  $N$ -атомных кластерах, удельный индекс  $\bar{K}$ , локализационный индекс PR2 для всего кластера и удельный индекс кривизны ( $\bar{K}_{\text{board}}$ ) на границе.

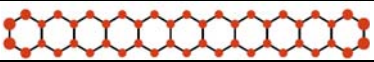
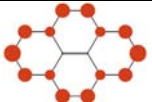
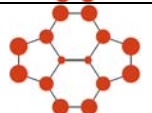
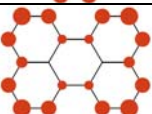
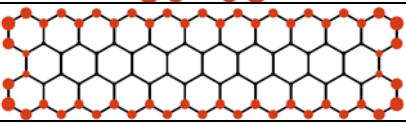
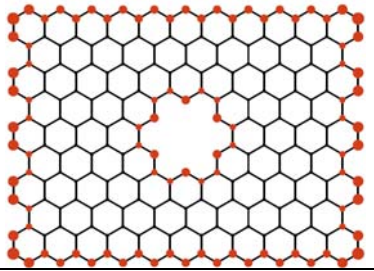
System ( $N$ )	$\{K_A\}$	$\bar{K}$	PR2	$\bar{K}_{\text{board}}$	$\bar{K}_{\text{board}} / \bar{K}$
3C-SiC (147)		0.236	94.	0.326	1.38
2H-SiC (143)		1.083	131.	0.953	0.88
4H-SiC (143)		0.572	114.	0.589	1.03

Дополнительную информацию для  $\{K_A\}$  дает индекс PR2. Этот индекс представляет собой эффективное число атомов, которые вносят наиболее существенный вклад в кривизну (общее определение PR2 и другие детали см. в Приложении). И представленные картинки, и относительно малое (по сравнению с  $N$ ) значение PR2 в 3C-SiC, указывают на эту систему как имеющую наиболее локализованное распределение кривизны. Интересно и то, что ряд (3) имеет место не для PR2, а для  $1/\text{PR2}$ . Аналогичные в качественном отношении результаты дает исследование кластеров с числом атомов, на порядок большим. В частности, для отношения  $\bar{K}_{\text{board}} / \bar{K}$  в кластерах 3C-SiC ( $N=1911$ ), 2H-SiC ( $N=1903$ ), и 4H-SiC ( $N=1911$ ) получены соответственно значения 2.98, 0.96, 1.19, которые также антибатны степени гексагональности. Из этих данных следует возрастающая роль поверхностных атомов политипа 3C-SiC в формировании общей кривизны.

### Электронная кривизна в ароматических и нанографеновых структурах

Природу самого индекса кривизны можно частично прояснить, анализируя  $\bar{K}$  в сопряженных молекулах и в нанографенах, тоже находящихся на гребне моды прикладного и теоретического материаловедения [25]. При этом мы обнаруживаем необычный эффект фактически полной локализации атомной кривизны на границе типичного (неальтернантного, вообще говоря) углеводорода с сопряженными связями. Если рассматривать простые полиароматические молекулы линейного типа (полиацены, полифенацены, полифенилы и т.д.), то эта особенность останется незаметной, так как в линейной полиароматике все атомы принадлежат границе углеродного остова. Но переходя к чуть более сложным системам, например, к пирену, перилену или, скажем, к перфорированной графеновой молекуле из [3] (последняя структура в Табл. 2), мы неожиданно обнаруживаем, что в ароматических альтернантных системах все атомы, кроме граничных, имеют нулевые значения атомных кривизн с машинной точностью! Простой пример пирацилена (третья система в Табл. 2) демонстрирует важность альтернантности для проявления подобного эффекта – наличие в пирацилене нечетных (5-членных) циклов приводит уже к ненулевым, хотя и малым, кривизнам на той центральной связи, аналог которой в родственном пирене (предыдущий пример в таблице) не имеет никакой локальной кривизны.

**Таблица 2.** Электронная кривизна  $\bar{K}$ , ее локализационный индекс PR2 и распределение  $\{K_A\}$  кривизны по атомам в полиароматических и графеновых молекулах.

$N$	$\bar{K}$	PR2	$\{K_A\}$
46	1.878	31.1	
16	2.089	10.9	
14	2.470	11.	
20	2.054	12.5	
92	1.097	35.2	
224	0.746	56.5	

Можно также констатировать, что нарушение копланарности и эффекты дальнего действия (выход за пределы хюккелевской топологической модели) неизбежно ведут к появлению ненулевых внутренних кривизн. В то же время природу эффекта можно попытаться понять и в том смысле, что в топологическом приближении для альтернантных систем движение электронов происходит по связи равномерно (альтернантность!), а следовательно, линейно, и такие движения, естественно, не дают вклада в кривизну. На самой границе молекулы линейный характер электронных путей неким образом прерывается, как на границе всякой поверхности прерывается внутренний потенциал системы (вспомним происхождение локальных таммовских состоя-

ний поверхностного типа). Все это согласуется с появлением ненулевой кривизны лишь близи края.

### Заключительные замечания

Подводя итоги, мы можем утверждать, что электроно-топологическая кривизна, введенная в [10] как мера сложности молекулы, достаточно просто, хотя и весьма модельно, отражает своего рода электронную геометрию нанокластеров различной природы. В данной статье рассматриваемая кривизна нашла конкретное применение для нанокластеров карборунда с его многообразием структурных политипов. Выяснилось, что кубическому политипу 3C-SiC отвечает наименьший удельный индекс кривизны, и эта выделенность кластеров 3C-SiC, как и корреляция со степенью гексагональности, практически не зависят от размера исследованных кластеров.

На дополнительную интерпретацию наводят результаты по атомной кривизне и их сравнение с альтернантными нанографеновыми молекулами, где мы обнаруживаем, что атомные кривизны «локализуются» исключительно по краям сопряженной системы. Из анализа нанографенов получен довольно естественный вывод о неком линейном (в геометрическом смысле) характере движения электронов в них, причем прямолинейность нарушается лишь вблизи границы, обрывающей внутреннее поле молекулы или нанокристалла. В пространственных наноструктурах политипов карборунда (тоже альтернантных систем) ситуация сложнее (раздел 3), но и там, основываясь на расчетах, мы можем говорить о существенно более линейном, а потому более свободном (в среднем) характере движения электронов в кубической форме 3C-SiC, чем в гексагональных формах. По этой причине кажется вполне натуральной и меньшая энергетическая щель как раз в 3C-SiC. В то же время применяемые индексы в основном учитывают только топологию систем и игнорируют различие между атомами Si и C. Поэтому точнее было бы утверждать, что уменьшение электронно-топологической кривизны дает только предпосылку (при прочих равных условиях) для ослабления жесткости (локализации) атомных электронов, так или иначе принадлежащих атомам.

Безусловно, именно наличие менее электроотрицательных, по сравнению с C, атомов Si – фундаментальное обстоятельство, влияющее на величину щели. Но и электронно-топологическая кривизна на свой манер облегчает движение квазичастиц – такой правдоподобный вывод можно сделать на основе анализа кривизны в нанокластерах карборунда с различной степенью гексагональности. В заключение добавим, что более широкое изучение политипов SiC поможет подтвердить, как мы надеемся, основной вывод работы о полезности исследуемого типа кривизны для непритязательного качественного анализа сложных многоатомных кластеров.

### Благодарность

Данная работа выполнена в рамках совместного украино-белорусского проекта фонда фундаментальных исследований в Украине (грант Ф73/107-2016). В немалой степени она и дань памяти проф. И. В. Кривошею, по инициативе которого изучались дифференциально-геометрические модели химической динамики [26,27]. С тех пор прошло 35 лет, но и в дальнейшем в наших работах [10-13,22,28]) то и дело всплывала любимая парадигма Игоря Васильевича – кривизна.

### Приложение

Для анализа данных, которые так или иначе могут быть сведены к неким вероятностным распределениям, давно используется так называемое отношение участия – participation ratio (PR). В физике твердого тела оно чаще всего применяется при изучении андерсоновской локализации электронов в неупорядоченных системах [29,30]. Индекс PR как мера локализации, а скорее, делокализации, впервые был предложен в [31] для интерпретации нормальных колебаний в кристаллах. Аналогичная величина (под названием «число коллективности») независимо была введена в нашей работе [32] по анализу амплитуд конфигурационного взаимодействия возбужденных состояний.



В общем случае заданная последовательность чисел  $w = \{w_k\}_{1 \leq k \leq \dim}$  рассматривается как вероятностный набор неотрицательных весов, где  $\dim$  - число компонент в наборе, и предполагается нормировка весов на 1. Тогда PR-индекс для  $w$  имеет вид:

$$PR = 1 / \sum_{k=1}^{\dim} w_k^2 \quad (4)$$

Формула (4) интерпретируется как число наиболее важных компонент, формирующих последовательность  $w$ . Из работы [33] известен также более жесткий PR-индекс, который будет обозначаться как PR2 и задаваться в виде

$$PR2 = [\sum_k (w_k)^2]^2 / \sum_k (w_k)^4 \quad (5)$$

Обычно PR2 обеспечивает более резкую оценку эффективного числа компонент. Этот индекс также использовался нами [34,35]. Индексы (4) и (5) имеет смысл сравнивать с полным числом компонент  $\dim$ . В настоящей работе индекс PR2 применен в анализе наборов атомных кривизн  $\{K_A\}$ . Последние перед использованием выражения (5) нужно лишь перенормировать на 1 простой заменой вида  $K_A \rightarrow K_A / (N\bar{K})$ .

### Литература

1. D. J. Christle, A. L. Falk, P. Andrich, P. V. Klimov, J. Hassan, N. T. Son, E. Janzén, T. Ohshima, and D. D. Awschalom, *Nature Materials* 14, 160 (2015).
2. H. Seo, A. L. Falk, P. V. Klimov, K. C. Miao, G. Galli, and D. D. Awschalom, *Nature Communications* 7, 12935 (2016).
3. A. V. Luzanov, *J. Struct. Chem.* 55,799 (2014).
4. A. V. Luzanov, *Funct. Mater.* 21, 437 (2014).
5. A. V. Luzanov, *Funct. Mater.* 22, 514 (2015).
6. A. V. Luzanov and O. A. Zhikol, *Funct. Mater.* 23, 63 (2016).
7. Z. C. Feng, *SiC Power Materials - Devices and Applications*, (Springer, Berlin, 2004).
8. S. Rohrer, *Structure and Bonding in Crystalline Materials* (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
9. Е. А. Беленков, Э. Н. Агалямова, *Вестник ЧелГУ. Физика. № 24 (162), вып. 5, 13 (2009).*
10. A. V. Luzanov and E. N. Babich, *Theochem.* 333, 279 (1995).
11. A. V. Luzanov and D. Nerukh, *Funct. Mater.* 12, 15 (2005).
12. A. V. Luzanov and D. Nerukh, *J. Math. Chem.* 41, 417 (2007).
13. A. V. Luzanov and E. N. Babich, *Struct. Chem.* 3, 175 (1992).
14. J. Higham, *Functions of Matrices: Theory and Computation* (SIAM, Philadelphia, PA, 2008).
15. Л. П. Абагян, А. Е. Глушков, Е. А. Гомин, М. А. Калугин, Л. В. Майоров, М. С. Юдкевич, Программа MCU-3 для расчета методом Монте-Карло нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов (Российский научный центр «Курчатовский институт», М., 1994).
16. С. В. Звонарев, В. С. Кортюв, Т. В. Штанг, *Моделирование структуры и свойств наносистем* (Изд-во Урал. ун-та, Екатеринбург 2014).
17. R. A. Evarestov, *Quantum chemistry of solids: LCAO treatment of crystals and nanostructures* (Springer, Heidelberg, 2012).
18. А. Р. Верма, П. Кришна, *Полиморфизм и политипизм в кристаллах* (Мир, М., 1969).
19. *International Tables for Crystallography, A* (Springer, Berlin, New York, 2005).
20. A. Bauer, P. Reischauer, J. Kräusslich, N. Schell, W. Matz, and K. Goetz, *Acta Cryst. A* 57, 60 (2001).
21. MATHEMATICA-5, Wolfram Research Champaign, IL.
22. А. В. Лузанов, *Вестник ХГУ. Химия*, 14 (37), 14 (2006).
23. J. Fan and P. K. Chu, *Silicon Carbide Nanostructures: Fabrication, Structure, and Properties* (Springer, Berlin, 2014).
24. W. H. Backes, P. A. Bobbert, and W. van Haeringen, *Phys. Rev. B* 49,7564 (1994).
25. E.L. Wolf, *Graphene: A New Paradigm in Condensed Matter and Device Physics* (Oxford University Press, Oxford, 2013).
26. И. В. Кривошей, А. В. Лузанов, *Ж. структ. хим.* 23, 3 (1983).

27. И. В. Кривошей, Ж. структ. хим. 24, 123 (1983).
28. А. В. Лузанов, Вестник ХГУ. Химия 15 (38), 178 (2007).
29. J. T. Edwards and D. J. Thouless, J. Phys. C. 5, 807 (1972); D. J. Thouless, Phys. Rep. 13, 93 (1974).
30. F. Evers and A. D. Mirlin, Rev. Mod. Phys. 80, 1355 (2008).
31. R. J. Bell, P. Dean, and D. C. Hibbins-Butler, J. Phys. C. 3, 2111, 63 (1970).
32. А. В. Лузанов, В. Э. Уманский, Теор. и эксперим. химия 13, 217 (1977)
33. N. C. Murphy, R. Wortis, and W. A. Atkinson, Phys Rev B 83, 184206 (2011).
34. A. V. Luzanov, Funct. Mater. 23, 599 (2016).
35. A. V. Luzanov, in: Practical Aspects of Comput. Chemistry IV, edited by J. Leszczynski and M. K. Shukla (Springer US, Boston, MA, 2016), pp. 151-206.

### References

1. D. J. Christle, A. L. Falk, P. Andrich, P. V. Klimov, J. Hassan, N. T. Son, E. Janzén, T. Ohshima, and D. D. Awschalom, Nature Materials 14, 160 (2015).
2. H. Seo, A. L. Falk, P. V. Klimov, K. C. Miao, G. Galli, and D. D. Awschalom, Nature Communications 7, 12935 (2016).
3. A. V. Luzanov, J. Struct. Chem. 55, 799 (2014).
4. A. V. Luzanov, Funct. Mater. 21, 437 (2014).
5. A. V. Luzanov, Funct. Mater. 22, 514 (2015).
6. A. V. Luzanov and O. A. Zhikol, Funct. Mater. 23, 63 (2016).
7. Z. C. Feng, SiC Power Materials - Devices and Applications, (Springer, Berlin, 2004).
8. S. Rohrer, Structure and Bonding in Crystalline Materials (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
9. E. A. Belenkov, E. N. Agalyamova, Vestnik CHelGU. Fizika. № 24 (162), vy'p. 5, 13 (2009).
10. A. V. Luzanov and D. Nerukh, Funct. Mater. 12, 15 (2005).
11. A. V. Luzanov and E. N. Babich, Theochem. 333, 279 (1995).
12. A. V. Luzanov and D. Nerukh, J. Math. Chem. 41, 417 (2007).
13. A. V. Luzanov and E. N. Babich, Struct. Chem. 3, 175 (1992).
14. J. Higham, Functions of Matrices: Theory and Computation (SIAM, Philadelphia, PA, 2008).
15. L. P. Abagyan, A. E. Glushkov, E. A. Gomin, M. A. Kalugin, L. V. Mayorov, M. S. Yudkevich, Programma MCU-3 dlya rascheta metodom Monte-Karlo neytronno-fizicheskikh harakteristik yaderny'h reaktorov (Rossiyskiy nauchny'y centr «Kurchatovskiy institut», M., 1994).
16. S. V. Zvonarev, V. S. Kortov, T. V. Shtang, Modelirovanie struktury' i svoystv nanosistem (Izd-vo Ural. un-ta, Ekaterinburg 2014).
17. R. A. Evarestov, Quantum chemistry of solids: LCAO treatment of crystals and nanostructures (Springer, Heidelberg, 2012).
18. A. R. Verma and P. Krishna, Polymorphism and Polytypism in Crystals (Wiley, New York 1966).
19. International Tables for Crystallography, A (Springer, Berlin, New York, 2005).
20. A. Bauer, P. Reischauer, J. Kräusslich, N. Schell, W. Matz, and K. Goetz, Acta Cryst. A 57, 60 (2001).
21. MATHEMATICA-5, Wolfram Research Champaign, IL.
22. A. V. Luzanov, Vestnik HGU. Ximiya, 14 (37), 14 (2006).
23. J. Fan and P. K. Chu, Silicon Carbide Nanostructures: Fabrication, Structure, and Properties (Springer, Berlin, 2014).
24. W. H. Backes, P. A. Bobbert, and W. van Haeringen, Phys. Rev. B 49, 7564 (1994).
25. E.L. Wolf, Graphene: A New Paradigm in Condensed Matter and Device Physics (Oxford University Press, Oxford, 2013).
26. I. V. Krivoshei, A. V. Luzanov, J. Struct. Chem. 23, 489 (1983).
27. I. V. Krivoshei, J. Struct. Chem. 24, 926 (1984).
28. А. В. Лузанов, Vestnik HGU. Ximiya 15 (38), 178 (2007).
29. J. T. Edwards and D. J. Thouless, J. Phys. C. 5, 807 (1972); D. J. Thouless, Phys. Rep. 13, 93 (1974).
30. F. Evers and A. D. Mirlin, Rev. Mod. Phys. 80, 1355 (2008).
31. R. J. Bell, P. Dean, and D. C. Hibbins-Butler, J. Phys. C. 3, 2111, 63 (1970).



32. A. V. Luzanov, V. E. Umanski, *Theor Experim Chem.* 13, 162 (1977).
33. N. C. Murphy, R. Wortis, and W. A. Atkinson, *Phys Rev B* 83: 184206 (2011).
34. A. V. Luzanov, *Funct. Mater.* 23, 599 (2016).
35. A. V. Luzanov, in: *Practical Aspects of Comput. Chemistry IV*, edited by J. Leszczynski and M. K. Shukla (Springer US, Boston, MA, 2016), pp. 151-206.

*Поступила до редакції 10 січня 2017 р.*

А.В. Лузанов, Електронно-топологічні індекси у нанокластерах SiC та інших вуглецьмістких системах.

Для аналізу специфічних структурних відмінностей політипів карбіду сіліція залучено метод електронних індексів кривини [J. Mol. Struct. (Theochem), 333, 279 (1995)] у топологічному наближенні за хюккелівським типом. Виявлено, що практично незалежно від розміру нанокластера політипові 3C-SiC притаманна суттєво менша електронна кривина, ніж гексагональним політипам 2H-SiC и 4H-SiC. Порівняння з результатами для кривини у простіших (пласких) нанографенових молекулах дозволило з певністю визначити більш «лінійний» характер руху електронів у кубічному політипові порівняно з рештою політипів. Цей факт залучається до правдоподібного якісного пояснення порівняно малої енергетичної щільності у 3C-SiC. У статті також фіксується (поки що без строгого доведення) цікавий ефект повної локалізації атомних кривин на границі плоскої альтернантної супряженої молекули.

**Ключові слова:** топологічна матриця, міра складності, індекси кривини, політипи SiC, гексагональність, нанографенові молекули.

A.V. Luzanov, Electron-topological indexes for SiC nanoclusters and other carbon-containing systems.

The aim of this work is to provide an analysis of specific structural differences in the carborundum polytypes. To this end the previously given technique of electronic curvature indexes [J. Mol. Struct. (Theochem), 333, 279 (1995)] is invoked. It is shown that practically independent of the cluster size the electronic curvature is essentially smaller in the 3C-SiC polytype than in the hexagonal polytypes. By comparison between SiC nanoclusters and more simple (plane) nanographene molecules we were able to conjecture with more certainty about what is a peculiarity electron behaviour in the clusters considered. In particular, we found that the electron movement in the 3C-SiC is more 'linear', in a geometrical sense, than in other polytypes. This fact is brought into play for a qualitative plausible explanation of comparatively small energy gap in 3C-SiC. Our study also states that there is a full localization of the atomic curvatures at the board of any plane alternant conjugated system, but this interesting effect remains strictly unproven.

**Keywords:** topological matrix, complexity measure, curvature indexes, SiC polytypes, hexagonality, nanographene molecules.

Kharkov University Bulletin. Chemical Series. Issue 28 (51), 2017