МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРЕНУКЛЕАЦИИ ПЕРИЛЕНА НА Ni (331)

Д.Х. Хусанова1\*), С.З. Мирзаев1) и У.Б. Халилов1,2)

1) Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан

1) Университет Антверпена, Антверпен, Бельгия

\*) e-mail: [dilfuzahusanova75@gmail.com](mailto:dilfuzahusanova75@gmail.com)

Процессы предзародышеобразования кристала перилена на поверхности катализатора до сих пор полностью не изучены. В данном исследовании, мы изучали процессы кластерообразования молекул перилена [1] на поверхности Ni (331) с использованием методов молекулярной динамики.

Рис.1. а) молекула перилена, б) поверхность Ni (331) и в) кластер молекул перилена на поверхности Ni (331)



Характер осаждения молекул перилена на неровной поверхности никеля приводит к формированию структуры, обладающей зигзагообразной симметрией. Полученные данные позволяют предположить, что на начальных этапах формируется кристаллическая структура α- или β-перилена [2]. Данное исследование углубляет понимание каталитического образования периленовых кластеров и направляет манипуляции с органическими кристаллами на основе перилена.

ЛИТЕРАТУРА

1. Husanova, D., et al., Chemical Physics, 2024, 579, 112191.

2. Urbelis, J. H., et al., Crystal Growth & Design, 2014, 14(10), 5244-5251.