

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ КОЛЕБАНИЙ В АТОМНЫХ ЦЕПОЧКАХ

Н.М. Калиновская, И.И. Мельников, Терешко И.В.

В данной статье рассматриваются результаты работы авторов в области моделирования нелинейных колебаний в атомных цепочках. Приведен графический материал, наглядно показывающий результаты моделирования, проведенного с использованием разработанной авторами компьютерной программы.

Ключевые слова: нелинейные колебания, нанокластер, атомная цепочка

Известно, что нанометровый диапазон размеров (1 – 100 нм) привлекает внимание специалистов различных областей: физик, химии, медицины, техники и т.д. и выделяется в междисциплинарную область науки – нанотехнологию [1]. Это обеспечивает значительный прогресс в способах получения и исследования нанокластеров, наноструктур и наноустройств. В частности, активно развивается метод, основанный на использовании свойств материалов и учете их коллективных эффектов при развитии процессов самоорганизации [2, 3].

Целесообразно при этом четко различать изолированные молекулярные или атомные нанокластеры и наноструктуры, объединяющие нанокластеры со слабым, либо сильным межкластерным взаимодействием. Первый тип, как правило, относится к жидким средам: вода, коллоидные растворы, эмульсии [4]. Второй тип формируется в твердотельных материалах [5].

Авторами была разработана компьютерная модель процессов самоорганизации в нелинейных и молекулярных цепочках [6]. В качестве объекта исследования были выбраны атомные цепочки водорода, молекулярные цепочки воды и атомные цепочки воды. В модели применялись методы молекулярной динамики. Все типы взаимодействия относятся к низкоэнергетическим, так как главная задача при этом – не разорвать атомную или молекулярную цепочку, а создать условия в ней для возбуждения нелинейных колебаний атомов и молекул после прекращения внешнего облучения.

Для начала рассмотрим атомную цепочку, состоящую из пяти атомов водорода, нелинейно связанных между собой. Первый атом цепочки водорода получает импульс от внешнего облучения, который заставляет атом двигаться со скоростью 400 м/с вдоль цепочки. В результате в цепочке возникают долгоживущие нелинейные колебания. После затухания колебаний структура цепочки изменится, так как атомы цепочки сворачиваются в нанокластер (рис. 1).



Рис. 1. Образование нанокластера

На графике ниже видно, как изменились координаты первых трех атомов водорода в результате долгоживущих нелинейных колебаний (рис. 2).

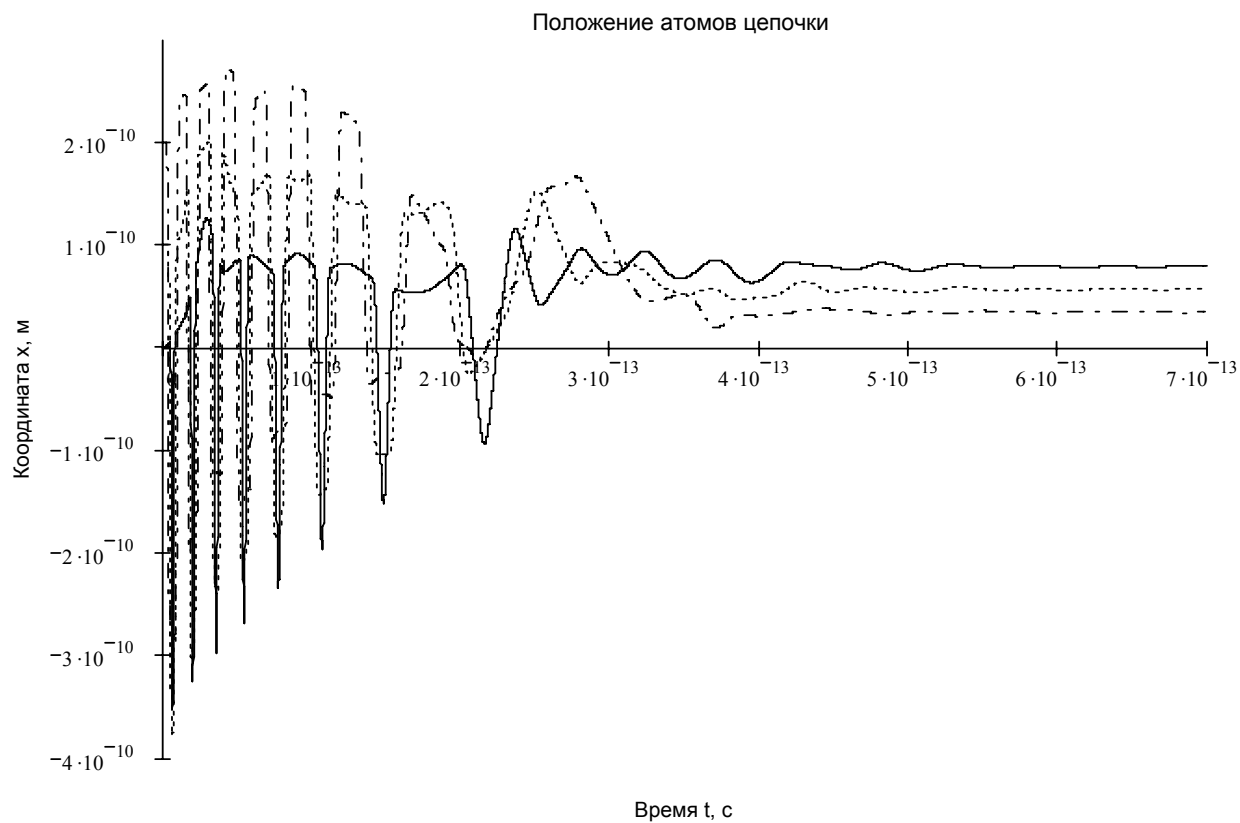


Рис. 2. График зависимости координаты атомов от времени

На графике четко видно, что конечное положение всех атомов не совпадает с их исходным положением до облучения.

На рисунке 3 представлена упрощенная модель цепочки, состоящей из двух молекул воды, причем отдельные атомы и молекулы связаны между собой нелинейно.

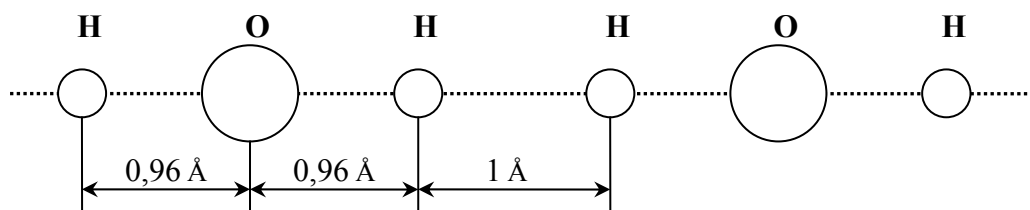


Рис. 3. Модель цепочки, состоящая из двух молекул воды

Аналогично первому эксперименту первый атом водорода получает импульс, величину которого авторы варьируют. На рисунке 4 представлена связь смещения атомов цепочки и скорости первоначального воздействия на первый атом цепочки. При этом отметим, что это воздействие относится к классу низкоэнергетического.

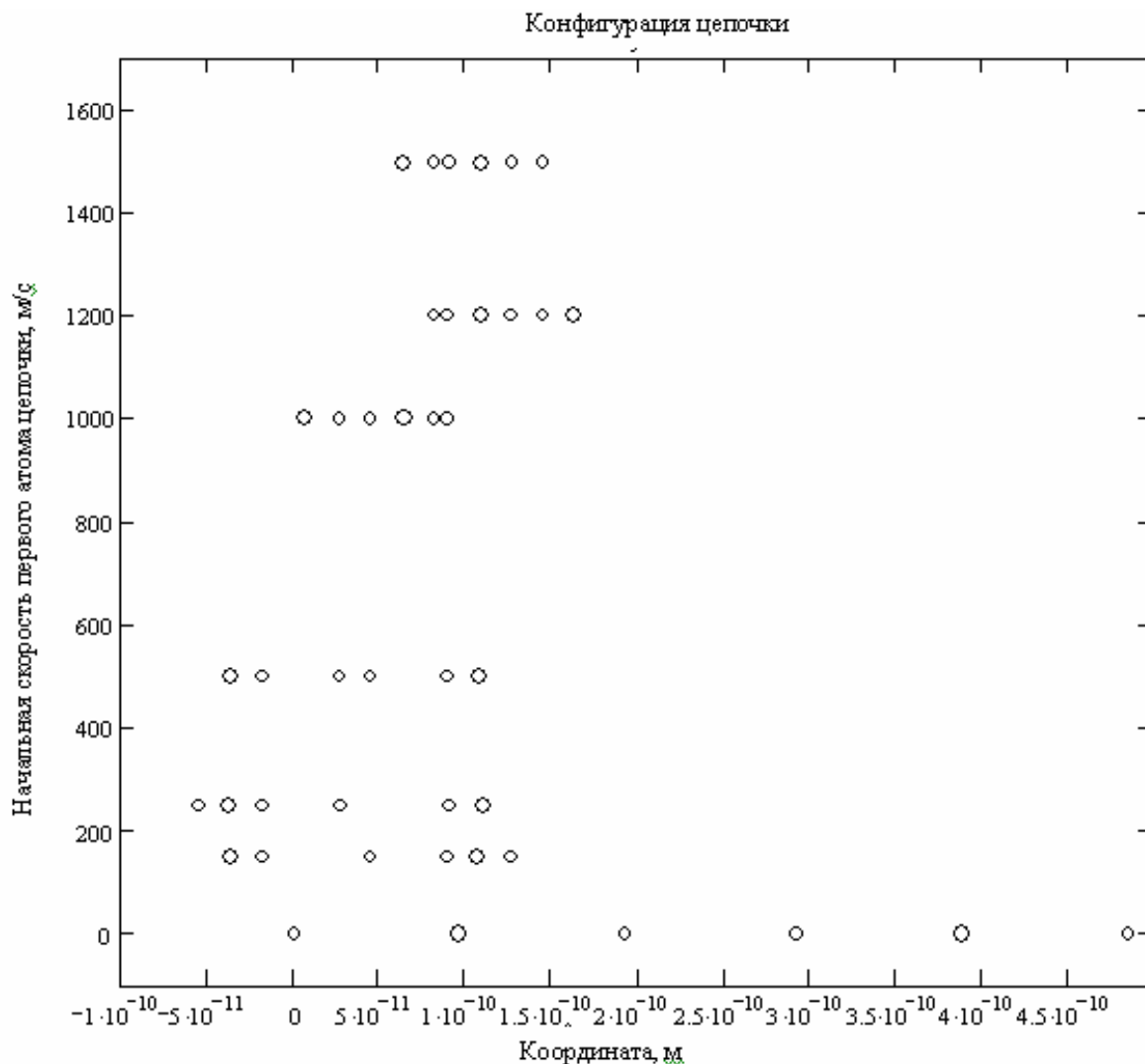


Рис. 4. Связь между смещением атомов цепочки воды и скоростью первого атома цепочки после низкоэнергетического воздействия

Кружками большого размера отмечены атомы кислорода, кружками малого размера – атомы водорода. Из рисунка 4 видно, что цепочка сворачивается в нанокластер при всех значениях начальных скоростей первого атома воды. Размер нанокластера нелинейно зависит от величины заданной скорости.

Следует подчеркнуть, что данная модель не учитывает эффективный диаметр и тепловые колебания атомов, фактически оперируя положениями точек равновесия атомов, а не реальными их положениями.

Литература

1. *Ivanov V., Kotov Yu., Samatov O. et al.* Synthesis and Dynamic Compaction of Ceramic Nanopowers bt Techniques on Electric Pulsed Power. // J. Nanostructured Materials.–1995.-N6
2. *Матюхин С.И.* Ионная имплантация: Новые возможности известного метода. // Известия Орловского государственного технического университета.-2003.-N 1-2.–С. 59
3. *J.F. Ziegler, J.P Biersack., and U. Littmark.* The Stopping and Range of Ions in Solids, Vol. 1, Pergamon, New York, 1985.
4. *Haberland H.* Clusters of atoms and molecules. // Heidelberg: Springer, 1994, p. 205-243.
5. *Gusev A.I., Rempel A.A.*. Nanocrystalline materials // М.: Fizmatlit.-2000.
6. *Калиновская Н.М., Мельников И.И.* Формирование наноструктур, моделирование нелинейных колебаний в атомных цепочках, подвергнутых воздействию низкоэнергетического ионного облучения. // Материалы 43-ей студенческой научно-технической конференции, Могилев, 22-26 мая 2007 г. / Белорусско-Российский университет. – Могилев, 2007.

Калиновская Наталья Михайловна

Студентка электротехнического факультета
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(29) 546-58-50
E-mail: natasha_kln@mail.ru

Мельников Игорь Игоревич

Студент электротехнического факультета
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(29) 542-16-65
E-mail: mel_igor@mail.ru

Терешко Ирина Васильевна

Доцент кафедры физики
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: (8-044) 747-46-05
E-mail: Iter41@mail.ru