

## МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ КОЛЕБАНИЙ В ВОДОРОДНО-КИСЛОРОДНЫХ АТОМНЫХ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЦЕПОЧКАХ ВОДЫ

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

В данной статье рассматриваются результаты работы авторов в области моделирования нелинейных колебаний в водородно-кислородных 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]. 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 (см. рисунок 1а), молекулярные цепочки воды (см. рисунок 1б) и атомные цепочки воды (см. рисунок 1в, 1г).

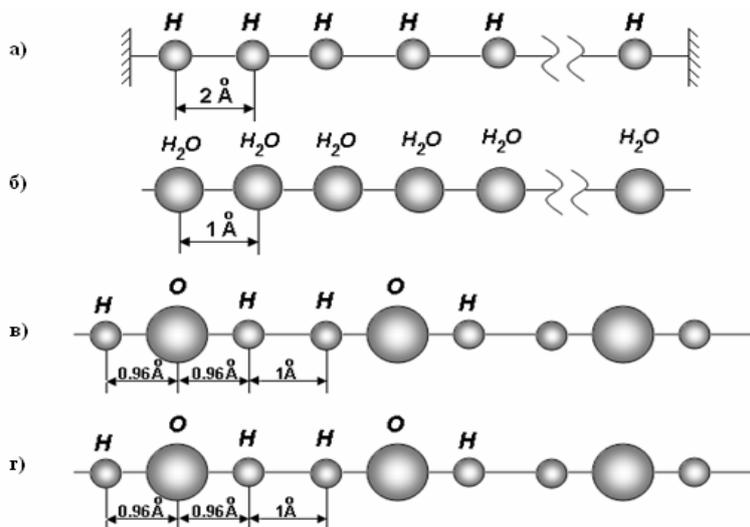


Рис. 1 Схемы цепочек, используемые для моделирования:  
а) цепочка, состоящая из атомов водорода;  
б) цепочка, состоящая из молекул воды;  
в) цепочка, состоящая из атомов водорода и кислорода;  
г) цепочка, состоящая из атомов водорода и кислорода (молекул воды)

Вычислительный эксперимент был произведен с помощью метода молекулярной динамики. Потенциалы Морзе (1) и Борна-Майера (2) были выбраны в качестве потенциалов атомного и молекулярного взаимодействия [7]:

Потенциал Морзе представлен в виде:

$$U(r) = J \cdot (\exp(-2\alpha(r - r_0)) - 2 \cdot \exp(-\alpha(r - r_0))), \quad (1)$$

где  $J$  и  $\alpha$  – параметр энергии диссоциации пары атомов и степень ангармонизма потенциальной энергии, соответственно,  $\Delta r = (r - r_0)$  – смещение из состояния равновесия.

Потенциал Борна-Майера представлен в виде:

$$U(r) = T \cdot e^{-\frac{r}{a}}, \quad (2)$$

где  $T$  – энергетический параметр,  $a$  – длина экранирования,  $r$  – расстояния между ядрами атомов.

Разложив потенциалы в ряд Тейлора и воспользовавшись известными соотношениями, мы получили:

$$F = -\frac{dU(r)}{dr} = -K\Delta r + A\Delta r^2 - B\Delta r^3 + C\Delta r^4 - D\Delta r^5. \quad (3)$$

Для потенциала Морзе:

$$K = 2\alpha^2 J, \quad A = 3\alpha^3 J, \quad B = 2.3\alpha^4 J, \quad C = 1.25\alpha^5 J, \quad D = 1.1\alpha^6 J, \quad (4)$$

где  $K, A, B, C, D$  – коэффициенты упругости, квадратичной и кубической нелинейностей, а также коэффициенты нелинейностей четвертого и пятого порядка, соответственно.

Для потенциала Борна-Майера

$$K = \frac{T}{a^2}, \quad A = \frac{T}{2 \cdot a^2}, \quad B = \frac{T}{6 \cdot a^4}, \quad C = \frac{T}{24 \cdot a^5}, \quad D = \frac{T}{120 \cdot a^6}. \quad (5)$$

Значения коэффициентов нелинейности, рассчитанные для потенциалов Борна-Майера и Морзе, представлены в таблице 1.

**Таблица 1. Значение коэффициентов для потенциалов Борна-Майера и Морзе**

Коэффициент	Потенциал Борна-Майера	Потенциал Морзе
K, Н/м	$9,341 \cdot 10^4$	$1,140 \cdot 10^4$
A, Н/м <sup>2</sup>	$1,951 \cdot 10^{15}$	$8,244 \cdot 10^{14}$
B, Н/м <sup>3</sup>	$2,716 \cdot 10^{25}$	$3,046 \cdot 10^{25}$
C, Н/м <sup>4</sup>	$2,836 \cdot 10^{35}$	$7,980 \cdot 10^{35}$
D, Н/м <sup>5</sup>	$2,370 \cdot 10^{45}$	$3,385 \cdot 10^{46}$

При моделировании процессов самоорганизации однородной атомной цепочки, состоящей из 50 атомов водорода (см. рисунок 1а), рассматривались два случая воздействия на цепочку: одиночный удар и плазменное воздействие. При этом для цепочки выбирались жесткие граничные условия. Использовался потенциал Морзе. В случае одиночного удара, первый атом цепочки получал удар со скоростью 500 м/с (полученная энергия  $10^{-3}$  эВ) вдоль оси X. При моделировании плазменного

воздействия ударам подвергались следующие атомы №1 ( $V = 538$  м/с), №10 ( $V = 1682$  м/с) и №30 ( $V = 1237$  м/с), что соответствует низкоэнергетическому воздействию. Показано, что в цепочке активно развиваются нелинейные колебания атомов, которые приводят к самоорганизации цепочки и, как следствие, смещению атомов цепочки и стабилизации их в новых положениях. На рисунке 2 представлены смещения всех атомов цепочки после плазменного воздействия в новые стабилизированные состояния, которые можно интерпретировать как образование новых долгоживущих метастабильных групп (нанокластеров) (атомы 1-29 и 30-50). По оси  $Y$  отложено смещение атомов, по оси  $X$  – номер атома в нелинейной цепочке.

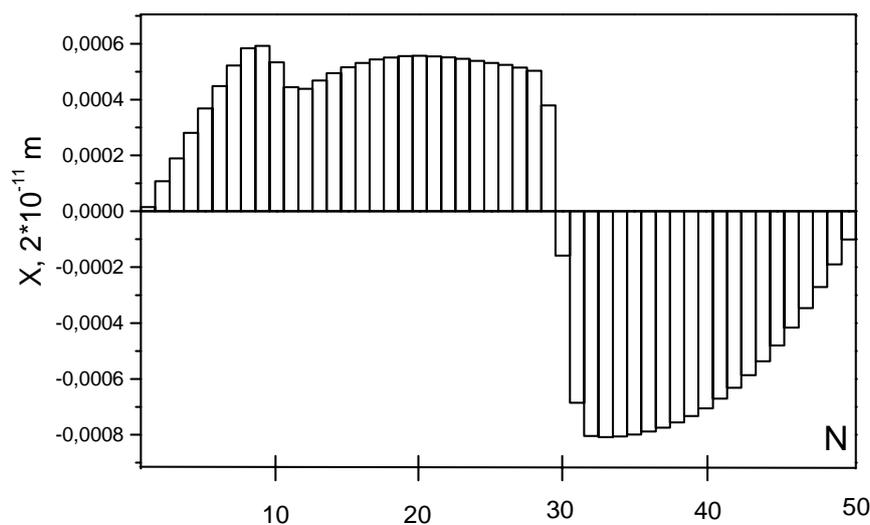


Рис. 2 Смещение 50 атомов возбужденной нелинейной цепочки вдоль оси  $X$

При этом отмечены следующие особенности:

- 1) время стабилизации на 3-4 порядка превышает время релаксации стандартных атомных колебаний;
- 2) смещение атомов цепочки в случае плазменной обработки на порядок больше, чем при одиночном ударе, следовательно, плазменное воздействие ведет к более активному процессу самоорганизации и перестройке цепочки;
- 3) возможность нанокластеризации однородной атомной цепочки.

Следующим объектом исследований были молекулярные цепочки, состоящие из молекул воды (см. рисунок 1б). При этом были выбраны периодические граничные условия. Воздействию со скоростью 500 м/с (энергия, полученная молекулой, равна 0,01 эВ) подвергалась первая молекула. Показано, что в такой цепочке также активно развиваются нелинейные колебания атомов, которые приводят к смещению атомов цепочки и стабилизации их в новых положениях. На рисунке 3 представлена фазовая диаграмма первой молекулы из данной молекулярной цепочки. Ее начальное положение соответствует нулевой координате (линия AA) и нулевой скорости на фазовой плоскости. Видно, что ее аттрактор представляет собой смещенное от первоначального положения состояние (линия BB). Это состояние достигается путем многочисленных нелинейных колебаний. Аналогичные результаты могут быть представлены для всех молекул цепочки. Стабилизацию их в новых положениях можно охарактеризовать как молекулярную память.

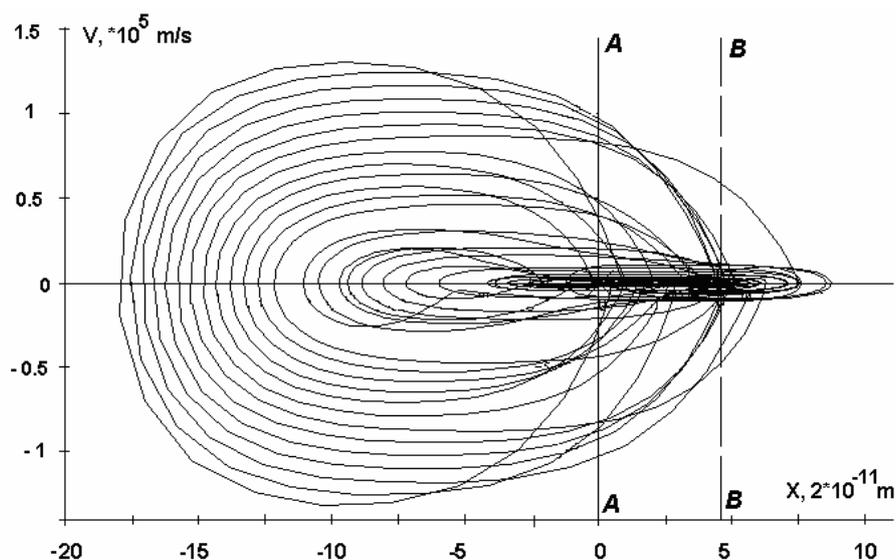


Рис. 3 Фазовая диаграмма для первой молекулы из молекулярной цепочки после прекращения внешнего воздействия

Далее при моделировании использовалась атомная цепочка молекулы воды, приведенная на *рисунке 1в*.

Количество молекул воды варьировалось от 2 до 8 (6 – 24 атомов). Также изменялась скорость, получаемая при одиночном ударе первым атомом от 100 до 1600 м/с (энергия  $10^{-5}$  –  $10^{-2}$  эВ). Во всех случаях смещение всех атомов цепочки настолько значительно, что ведет к сжатию цепочки (что также можно назвать коллапсом цепочки) или формированию высокоэнергетических нанокластеров. Причем длина сколлапсированной цепочки зависит от энергии внешнего воздействия, и существует структура с минимальной длиной цепочки при определенной энергии воздействия. Для случая цепочки, состоящей из 2 молекул воды, минимальная длина цепочки наблюдается при скорости внешнего воздействия 1000-1500 м/с. Для цепочки, состоящей из 4 атомов, минимальная длина сколлапсированной цепочки наблюдается при скорости внешнего воздействия 100 м/с, а для цепочки из 8 молекул воды – 1200 м/с.

Следует подчеркнуть, что такая кластеризация также образуется в результате развития нелинейных колебаний в атомной цепочке воды. Такая же сколлапсированная нанокластеризация образуется в результате развития нелинейных колебаний в атомной цепочке воды, которая наиболее приближена к реальной ситуации и учитывает наличие водородных связей (см. *рисунок 1г*). Компьютерное моделирование проводилось в этом варианте для прямого (вдоль оси X цепочки) и косого (имеющего составляющие вдоль оси X и оси Y) ионного удара. Использовались потенциалы Морзе и Борна-Майера.

На *рисунке 4* представлены начальные и конечные стабилизированные состояния атомных цепочек (после прямого низкоэнергетического ионного воздействия на первый атом кислорода) с использованием потенциала Борна-Майера (см. *рисунок 4а*) и потенциала Морзе (см. *рисунок 4б*). На правых рисунках приведены увеличенные в масштабе изображения нанокластеров.

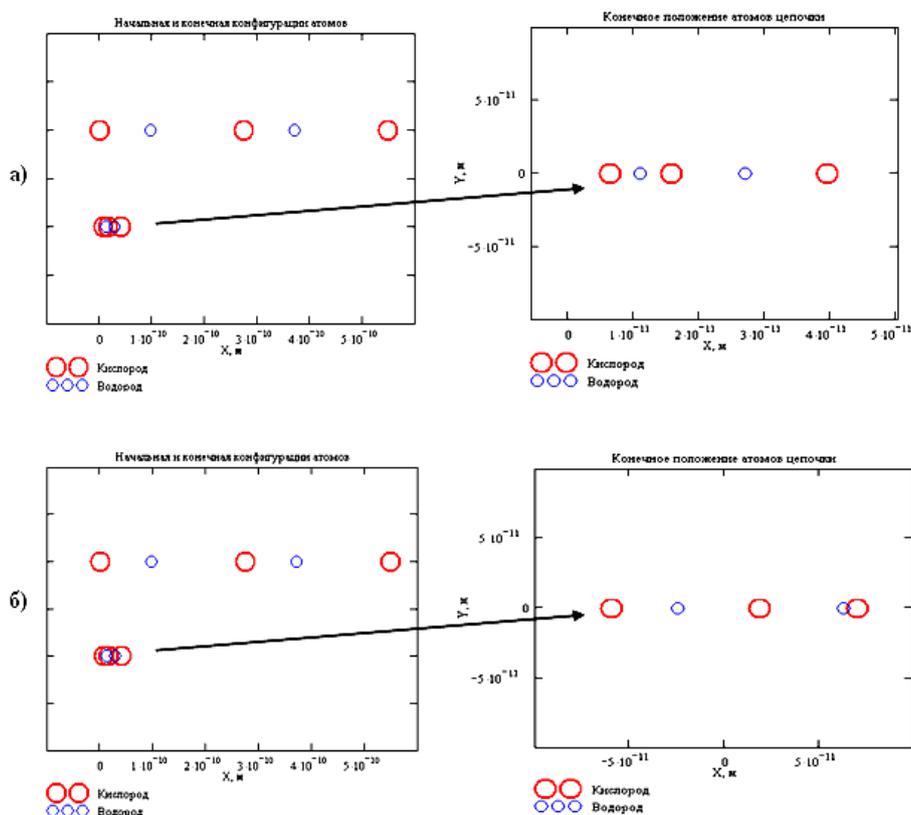


Рис. 4 Начальные и конечные положения атомов молекулы воды: а) потенциал Борна-Майера; б) потенциал Морзе

При этом отмечены следующие особенности.

- 1) Во всех случаях независимо от выбора потенциала межатомного взаимодействия в нелинейных атомных цепочках наблюдается после низкоэнергетического внешнего воздействия значительное сжатие цепочек (что также можно назвать коллапсом цепочки) или формированием высокоэнергетических нанокластеров.
- 2) Длина сколлапсированной цепочки зависит от выбора потенциала межатомного взаимодействия при одинаковой энергии внешнего воздействия. Потенциал Борна-Майера приводит к более жесткому коллапсу, чем потенциал Морзе.

#### 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.
7. *W. Eckstein.* Computer Simulation of Ion-Solids Interaction. Springer, Verlag, Berlin, Heidellberg, New York, 1991.

**Калиновская Наталья Михайловна**

Студентка электротехнического факультета  
Белорусско-Российский университет, г. Могилев  
Тел.: +375(29)546-58-50  
E-mail: [natasha\\_kln@mail.ru](mailto: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](mailto:mel_igor@mail.ru)

**Терешко Ирина Васильевна**

Доцент кафедры физики  
Белорусско-Российский университет, г. Могилев  
Тел.: (8-044)7474605  
E-mail: [Iter41@mail.ru](mailto:Iter41@mail.ru)