

ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ В АТОМНЫХ ЦЕПОЧКАХ ВОДЫ

И.И. Мельников, Терешко И.В.

В данной статье рассматривается программный модуль, разработанный автором для моделирования процессов самоорганизации в атомных цепочках воды в рамках научно-исследовательской работы по моделированию нелинейных колебаний в атомных цепочках веществ, подверженных низкоэнергетическому ионному облучению.

Ключевые слова: нелинейные колебания, атомная цепочка, потенциал атомного взаимодействия.

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

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 [3]. Второй тип формируется, как правило, в твердотельных материалах [4].

Известны качественные представления о кластерной структуре воды и применении различных способов ее моделирования [5-8]. Среди них все большую часть занимают представления о сложной надмолекулярной структуре воды, а также о формировании в ней гигантских (по сравнению с нанометровым диапазоном) гетерофазных структур. Выделены также структуры кластеров воды, соответствующие локальным минимумам энергии [3]. При этом очень важно понять, что атомы Н-О-Н, а также молекулы внутри кластеров связаны между собой нелинейно, что становится одной из движущих причин для самоорганизации среды и, как следствие, ее глубокой модификации, даже при низкоэнергетическом внешнем воздействии, часто необъяснимой в рамках классической физики.

Основываясь на методе молекулярной динамики, автором был разработан программный модуль по исследованию нелинейных колебаний в атомных цепочках воды, подвергнутых воздействию низкоэнергетического ионного облучения. Для разработки данного модуля использовался математический пакет MATLAB 6.5.

В работе была разработана специальная модель для расчета смещения атомов цепочки под действием внешнего низкоэнергетического ионного облучения (одиночного воздействия на атом цепочки).

Вычислительные эксперименты в данном программном модуле проводятся на основе метода молекулярной динамики. Потенциал Морзе (1) и потенциал Борна-Майера (2) были выбраны в качестве потенциалов атомного взаимодействия [9].

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 α – 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, 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:

$$K = 2\alpha^2 J, \quad (4)$$

$$A = 3\alpha^3 J, \quad (5)$$

$$B = 2.3\alpha^4 J, \quad (6)$$

$$C = 1.25\alpha^5 J, \quad (7)$$

$$D = 1.1\alpha^6 J, \quad (8)$$

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

$$K = \frac{T}{a^2}, \quad (9)$$

$$A = \frac{T}{2 \cdot a^2}, \quad (10)$$

$$B = \frac{T}{6 \cdot a^4}, \quad (11)$$

$$C = \frac{T}{24 \cdot a^5}, \quad (12)$$

$$D = \frac{T}{120 \cdot a^6}. \quad (13)$$

Разработанный программный модуль отображает структуру атомной цепочки воды до и после низкоэнергетического ионного облучения. На *рисунке 1* представлена главная форма приложения.

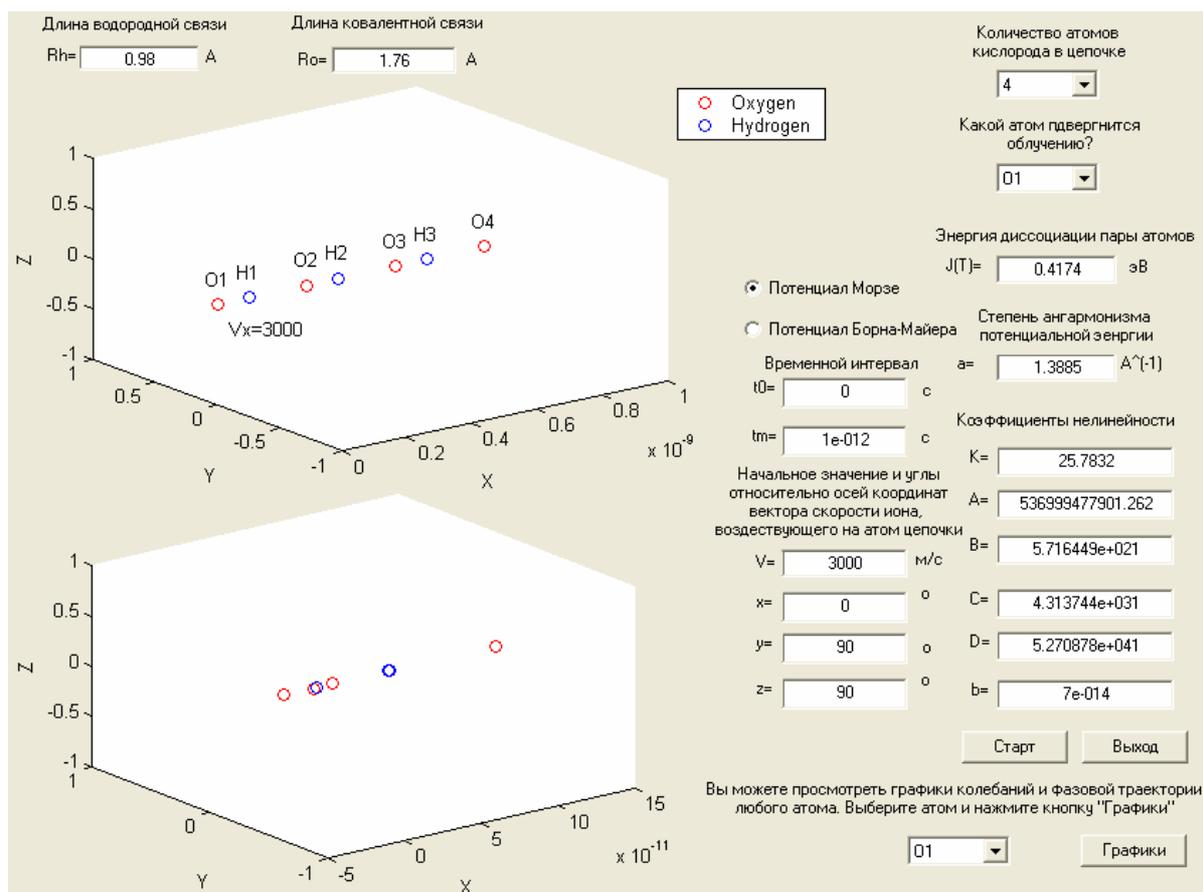


Рис. 1. Главная форма программы

Как видно из рисунка 1, данный программный модуль позволяет варьировать число атомов кислорода в цепочке (от 2 до 6), меняя структуру цепочки, выбирать атом, который подвергнется облучению (одиночному воздействию), задавать скорость и угол удара иона по выбранному атому цепочки, задавать начальный момент времени (момент удара) и конечный момент времени моделирования, менять длину ковалентной и водородной связей между атомами кислорода и водорода.

Программа также позволяет выбирать один из двух типов потенциалов атомного взаимодействия: Морзе или Борна-Майера. Кроме того, программный модуль позволяет менять значение энергии диссоциации пары (для потенциала Морзе) или значение энергетического параметра (для потенциала Борна-Майера), а также значение степени ангармонизма потенциальной энергии (для потенциала Морзе) или значение длины экранирования (для потенциала Борна-Майера), при этом будут автоматически пересчитываться значения каждого из коэффициентов нелинейности. Если пользователь будет менять значение одного или нескольких коэффициентов нелинейности, то будет автоматически корректироваться значение энергии диссоциации пары (для потенциала Морзе) или значение энергетического параметра (для потенциала Борна-Майера). Верхний график на главной форме отражает структуру атомной цепочки до низкоэнергетического ионного воздействия, а нижний график – через некоторое время после низкоэнергетического ионного воздействия. Видно, что происходит самоорганизация цепочки с образованием наноструктур.

Также существует возможность посмотреть графики изменения положения выбранного атома после облучения с течением времени и его фазовую траекторию (рисунки 2).

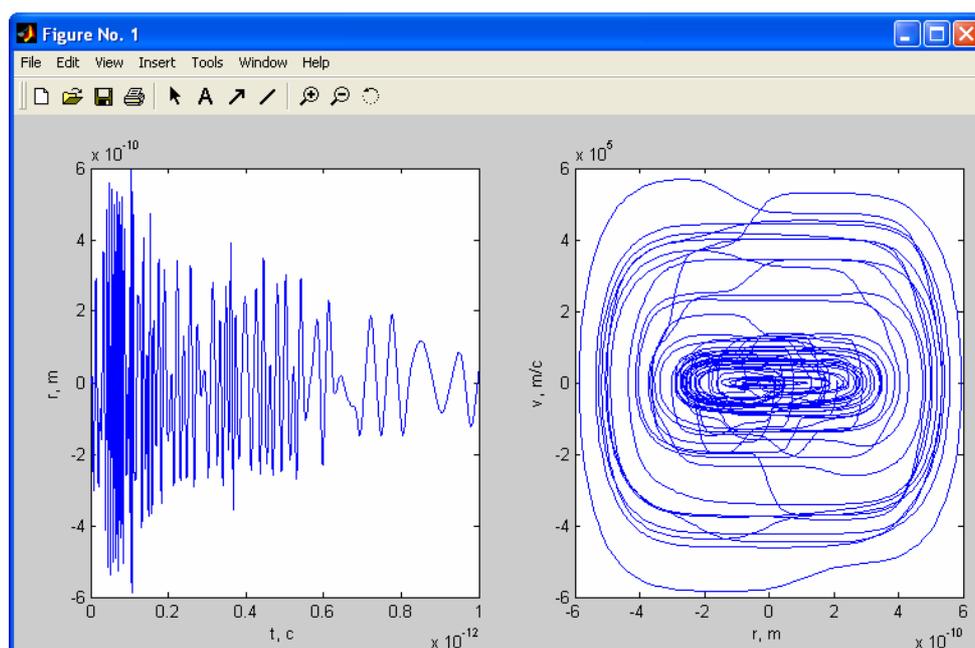


Рис. 2. Смещение первого атома кислорода с течением времени и его фазовая траектория

Данный программный модуль предназначен для упрощения процесса исследования нелинейных колебаний в рамках научно-исследовательской работы автора [10, 11, 12], а также может быть использован в качестве программного средства для проведения лабораторной работы по физике, по теме, связанной с исследованиями нелинейных колебаний в атомных цепочках.

Литература

1. Ratner M. Nanotechnology: A gentle introduction to the next big idea / M. Ratner, D. Ratner. – Indianapolis: Pearson Education Inc, 2003. – 189 p. – ISBN 0-13-101400-5.
2. Терешко И.В. Эффект дальнего действия в материалах при низкоэнергетическом ионном облучении / И.В. Терешко [и др.] // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия физики твердого тела. – Нижний Новгород, 1998. – № 2. – С. 131-139.
3. Дроздов С.В. Особенности строения и энергии малых кластеров воды / С.В. Дроздов, А.А. Востриков // Письма в журнал технической физики. – СПб, 2000. – Т. 26, вып. 9. – С. 81-86.
4. Tereshko I.V. The formation of nanoclusters in metals by the low-energy ion irradiation. Surface and Coatings Technology / I.V. Tereshko [et al] // 14th International Conference on Surface Modification of Materials by Ion Beams (SMMIB). – Mumbai, 2007. – V. 201. – P. 8552-8556.
5. Vostrikov A.A. Ionization of water clusters by surface collision / A.A. Vostrikov, D.Yu. Dubov, M.R. Predtechensky // Chem. Phys. Letters. – ELSEVIER, 1987. – V. 139. – P. 124-128.
6. Zadorozhny A.M. Laboratory and in situ evidence for the presence of ice particles in a PMSE region / A.M. Zadorozhny, A.A. Vostrikov [et al] // Geophys. Res. Letters. – AGU, 1997. – V. 24, p. 841-844.
7. Stillingner F.N. Revised central force potentials for water / F.N. Stillingner, A. Rahman // Chem. Phys. – ELSEVIER, 1978. – V. 68. – P. 666-670.
8. Stillingner F.N. Polarization model for water and its ionic dissociation products / F.N. Stillingner, C.W. David // Chem. Phys. – ELSEVIER, 1978. – V. 69. – P. 1473-1484.
9. Eckstein W. Computer simulation of ion-solids interaction / W. Eckstein. – New-York: Springer-verlag, 1991, - 296 p. – ISBN 3-54-019057-8.
10. Tereshko I.V. Computer Simulation of Nanoclusters in Nonlinear Molecular Chains of Water / I.V. Tereshko [et al] // Proc. IBMM. – Drezden, 2008. – P. 348.
11. Калиновская Н.М. Компьютерное моделирование процессов формирования наноструктур в металлах после низкоэнергетического ионного облучения / Н.М. Калиновская, И.И. Мельников // Сборник трудов 6-ой межрегиональной научно-технической конференции студентов и аспирантов. – Смоленск, 2009. – С. 64-68.
12. Калиновская Н.М. Моделирование нелинейных колебаний в водородно-кислородных атомных и молекулярных цепочках воды / Н.М. Калиновская, И.И. Мельников // Студенческий вестник. – Могилев, 2009. – № 5 – Режим доступа <http://www.bru.mogilev.by/science/vesnik/Papers2009/03.pdf>.

Мельников Игорь Игоревич

Магистрант 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