

**Компьютерное моделирование самоорганизации
мобильных квантовых НЭМС атомов Fe, Co, Ni
в нанопоре***С.А. Безносюк, М.С. Гришко, М.С. Жуковский, Т.М. Жуковская*

Алтайский государственный университет (Барнаул, Россия)

**Computer simulation of Fe, Co, Ni atoms mobile quantum
NEMS self-organization in a nanopore***S.A. Beznosyuk, M.S. Grishko, M.S. Zhukovsky, T.M. Zhukovsky*

Altai State University (Barnaul, Russia)

Методом компьютерного моделирования исследованы изотермически-изохорические кинетические процессы самоорганизации мобильных квантовых наноэлектромеханических систем (НЭМС) атомов Fe, Co, Ni в зависимости от типов межатомных электронных связей и в разных кинематических режимах мобильности. Процесс самоорганизации моделируется для закрытых в нанопоре систем атомов методом Монте-Карло. Объектами исследования выступают НЭМС из 50 атомов группы железа (Fe50, Co50, Ni50), случайно с шагом дискретности 0,02 нм, размещенные в начальный момент времени в кубической нанопоре с длиной ребра 10,00 нм. Релаксация НЭМС проведена с учетом полной энергии межатомных связей, рассчитанной методом нелокального функционала плотности, при нормальной температуре $T = 293$ К. Компьютерные эксперименты по методу Монте-Карло показали различную самоорганизацию в режимах мобильности с сильной и слабой коррелированностью смещений НЭМС атомов. В ходе самоорганизации первого типа формируется устойчивый компактный кластер НЭМС атомов с более высокой энергией связи; во втором случае синтезируются фрактальные островковые кластеры с более низкой энергией связи. Выявлены также детали зависимостей кинетики процессов самоорганизации НЭМС атомов от их сорта и типа электронных связей. Показано, что эти два химических фактора вторичны для типа самоорганизации НЭМС по сравнению с изменением кинематического режима корпоративной мобильности атомов группы железа.

Ключевые слова: мобильные квантовые НЭМС, самоорганизация, электронные связи, кинематика, железо, кобальт, никель, метод Монте Карло, компьютерное моделирование.

In the paper, mobility isothermal — isochoric kinetic processes of Fe, Co, Ni atoms mobile quantum NEMS self-organization are investigated with computer simulation. The kinetic processes depend on the type of electronic interatomic bonds in different kinematic modes. Self-organization process is simulated for closed systems of atoms in nanopores by synthetic sampling (the Monte Carlo method). A summary of the problem statement and methods of calculation are presented. The objects of study are the NEMS 50 atoms of the iron group (Fe50, Co50, Ni50), placed randomly with a discreteness step 0.02 nm at initial time in nanopore cubic edge with length of 10.00 nm. NEMS relaxation is performed at normal temperature $T = 293$ K with consideration of the interatomic bonds total energy calculated by the nonlocal density functional. The evolution takes 100,000 steps, which corresponds to the order of one nanosecond duration. Computer experiments on the Monte Carlo method show different modes of self-organization in mobility with strong and weak displacement correlations of atoms NEMS. During the self-organization of the first type, a stable, compact cluster of atoms NEMS with higher binding energy is formed. In the latter case, some fractal islet clusters with lower binding energy are synthesized. Also, atoms NEMS self-organization details of dependencies on their grades and types of electronic bonds are revealed. It is shown that these two chemical factors are subsidiary to a type of NEMS self-organization in comparison with the change of the kinematic regime of Fe group atoms corporate mobility.

Key words: mobile quantum NEMS, self-organizations, electronic bond, kinematics, iron, cobalt, nickel, Monte Carlo method, computer simulation.

Введение. Точечные одиночные субфемтосекундные импульсы излучения или пучков микрочастиц малой мощности предполагается использовать для активации в конденсированном состоянии мобильных квантовых наноэлектромеханических систем (НЭМС) атомов [1, 2]. Эти системы не формируются в вакууме или инертных газах, так как для их устойчивости требуется наличие квантово-полевой континуальной по спектру возбуждений диссипативной электронной среды конденсированного состояния вещества. Только в таких средах возможны механизмы одноэлектронной и двухэлектронной автолокализации на отдельных атомах, группах атомов кинематических волн плотности зарядовой и спиновой поляризации, наделяющих их свойствами мобильных квантовых НЭМС [3, 4]. Энергии возбуждения кинематических волн плотности зарядовой и спиновой поляризации — от 10 до 250 эВ. Они лежат в области ультрафиолета и мягкого рентгена. Если длительность импульса порядка одного периода колебаний, следовательно мощность в одиночном импульсе излучения этого диапазона составит 0.005–2.5 Вт с областью автолокализации мобильных квантовых НЭМС атомов в материале 10.0–0.3 нм соответственно.

В статье изложены результаты компьютерных экспериментов исследования самоорганизации НЭМС атомов железа, кобальта и никеля. Эта задача решается в приближении прыжкового транспорта атомов переходных металлов в двух предельных случаях области автолокализации. В первом случае моделируется мобильность атомов в нанопоре для случая их металлической α -связи внутри предельно интегриро-

ванной квантовой НЭМС с автолокализацией 10 нм. Во втором случае описывается мобильность предельно дезинтегрированной НЭМС с автолокализацией 0.3 нм каждого атома,двигающихся в поле сил межатомных потенциалов контактных обменных β -связей. Эти два типа потенциалов ранее были рассчитаны методом нелокального функционала плотности [5].

Особое внимание уделено компьютерной имитации самоорганизации НЭМС атомов в различных кинематических режимах прыжковой мобильности атомов в ограниченном свободном объеме поры. Суть различия этих режимов подвижности состоит в кинематическом ограничении вариативности смещения изображающей точки НЭМС в конфигурационном пространстве атомов при переходе из предыдущего в последующее положение на шаге эволюции [6]. При свободном смещении возможно неограниченное варьирование положения конфигурационной точки НЭМС. Это кинематический режим внутренне ничем не коррелированной редукции из квантово-запутанного состояния НЭМС атомов с параметром квантовой запутанности $\eta = 0$. В этом режиме все атомы НЭМС мобильны и независимо от остальных могут смещаться в любое положение. Степени квантовой коррелированности η можно упорядочить по возрастанию от нуля до единицы ($\eta = 1$) полностью квантово-коррелированного режима мобильности НЭМС атомов. Адекватным для компьютерной имитации различных режимов мобильности при заданной температуре конденсированной среды является метод Монте-Карло, методические особенности применения которого были рассмотрены в работе [7].

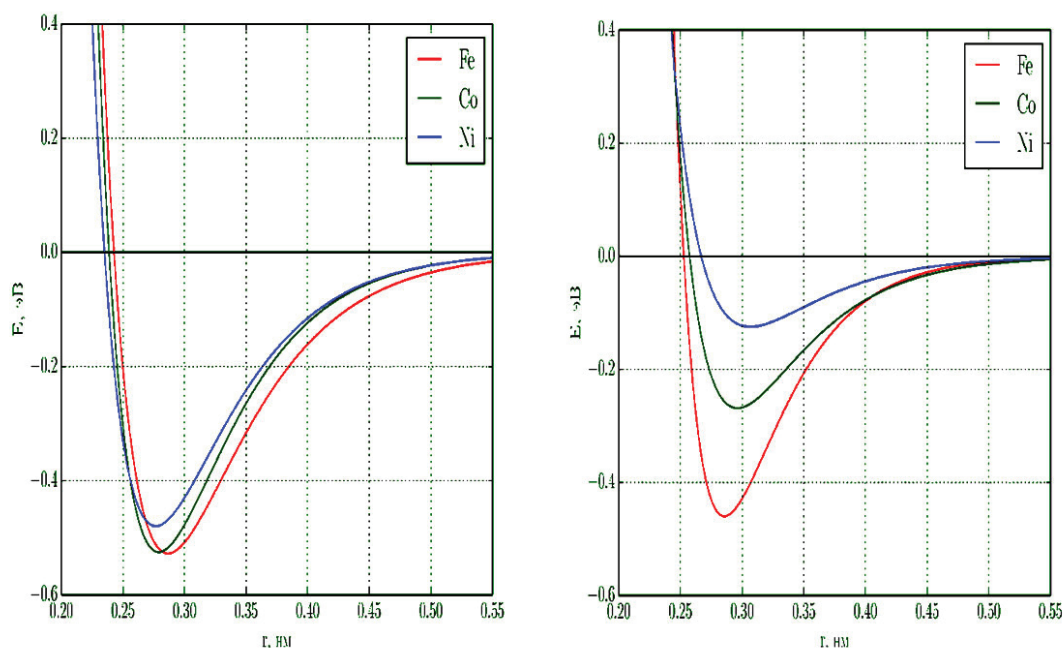


Рис. 1. Кривые потенциалов α -связей (слева) и β -связей (справа) Fe, Co, Ni

Моделирование релаксации НЭМС Fe₅₀, Co₅₀, Ni₅₀ методом Монте-Карло. Кубическая нанопора с длиной ребра 10 нм разбивалась на элементарные ячейки кубической формы с длиной ребра 0,02 нм. В объем поры помещались случайным образом 50 атомов группы железа: Fe₅₀, Co₅₀, Ni₅₀. В компьютерном эксперименте начальное импульсное насыщение энергией исследуемых НЭМС моделируется выбором потенциалов межатомных связей. В первом случае это межатомные потенциалы металлических α-связей, действующих внутри НЭМС с автолокализацией 10 нм. Во втором случае — межатомные потенциалы контактных β-связей атомных НЭМС с автолокализацией 0,3 нм. Вид этих потенциалов представлен на рисунке 1 [5].

Из рисунка 1 следует, что металлические α-связи, сцепляющие каждый с каждым все 50 атома предельно интегрированной НЭМС, имеют более высокую энергию связи и более короткие длины связи, чем контактные β-связи, радиус действия которых обретен отсутствием топологического контакта между НЭМС атомами с автолокализацией 0,3 нм. Разница в силовых характеристиках металлических и контактных связей атомов растет при переходе от железа к никелю.

Подлежащий минимизации методом Монте-Карло функционал энергии НЭМС в случае описания парных взаимодействий потенциалами Морзе имеет вид

$$E = \sum_n N_n \varepsilon_n =$$

$$= \sum_n N_n \cdot \left\{ -D_e + D_e \left[1 - \exp(-\beta(R_n - R_e)) \right]^2 \right\}, \quad (1)$$

где N_n — количество пар атомов, разделенных расстоянием R_n ; $D_e = D_0$, $R_e = R_0$ и $\beta = \beta(\omega_0)$ — подгоночные параметры потенциала Морзе. Они получаются путем аппроксимации потенциалами Морзе кривых потенциалов, приведенных на рисунке 1. В (1) R_n — функция местоположения атомов — аргумент в парной корреляционной функции распределения атомов, D_0 , R_0 , ω_0 — равновесная энергия, длина и частота нулевых колебаний связи, соответственно.

Эволюция исходного состояния НЭМС атомов проводилась методом Монте-Карло при температуре термостата 298 К и полной длине цепи Маркова 10^5 шагов, достаточной для выхода на квазиравновесное состояние в каждом режиме η-коррелированности мобильности атомов. Кинематические ограничения вариативности смещения изображающей точки НЭМС в конфигурационном пространстве атомов при переходе из предыдущего в последующее положение задавались значениями кинематического параметра η-корреляции следующим образом:

$$\eta = 1 - \eta_{\text{mob}} / N, \quad (2)$$

где η_{mob} — число мобильных атомов, N — полное число атомов НЭМС.

Квантовая кинетика, энергия и морфология НЭМС Fe₅₀, Co₅₀, Ni₅₀.

Кинетики релаксации НЭМС Fe₅₀, Co₅₀, Ni₅₀ представлены на рисунках 2–4.

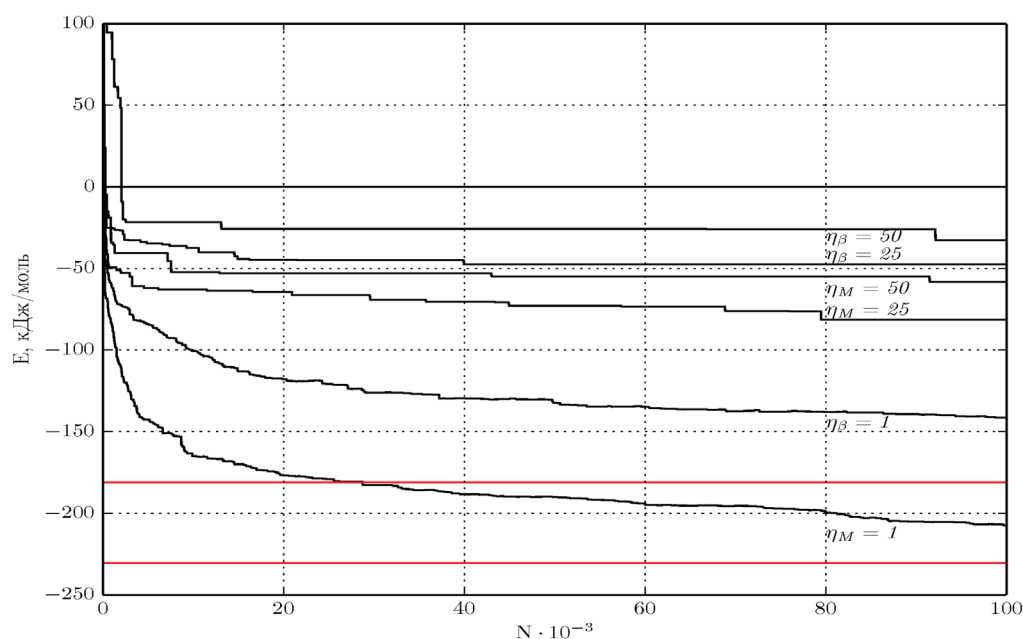


Рис. 2. Кинетики релаксации НЭМС Fe₅₀; $\eta_{\text{mob}} = 1, 25, 50$; α-связи (М) и β-связи

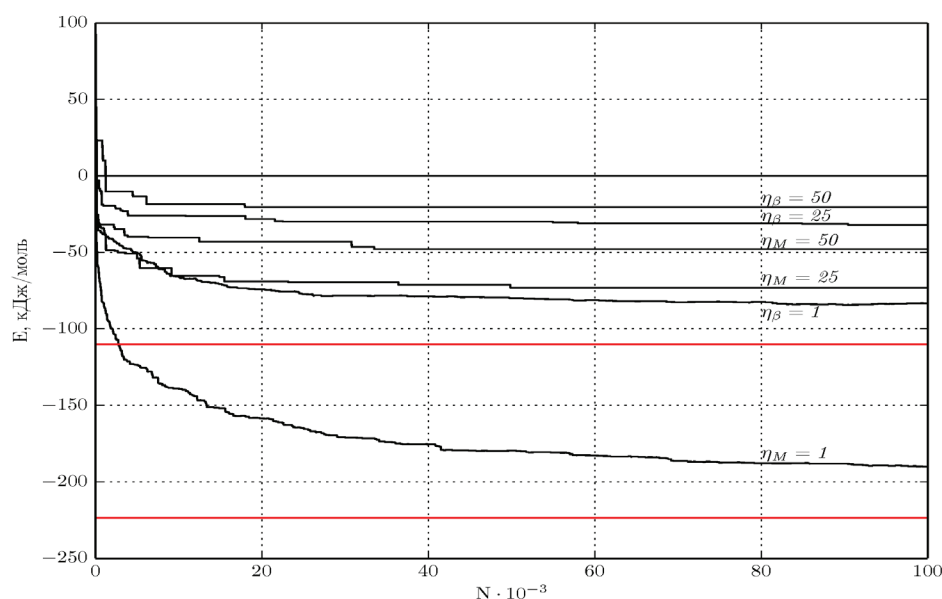


Рис. 3. Кинетики релаксации НЭМС Co_{50} ; $\eta_{\text{mob}} = 1, 25, 50$; α -связи (М) и β -связи

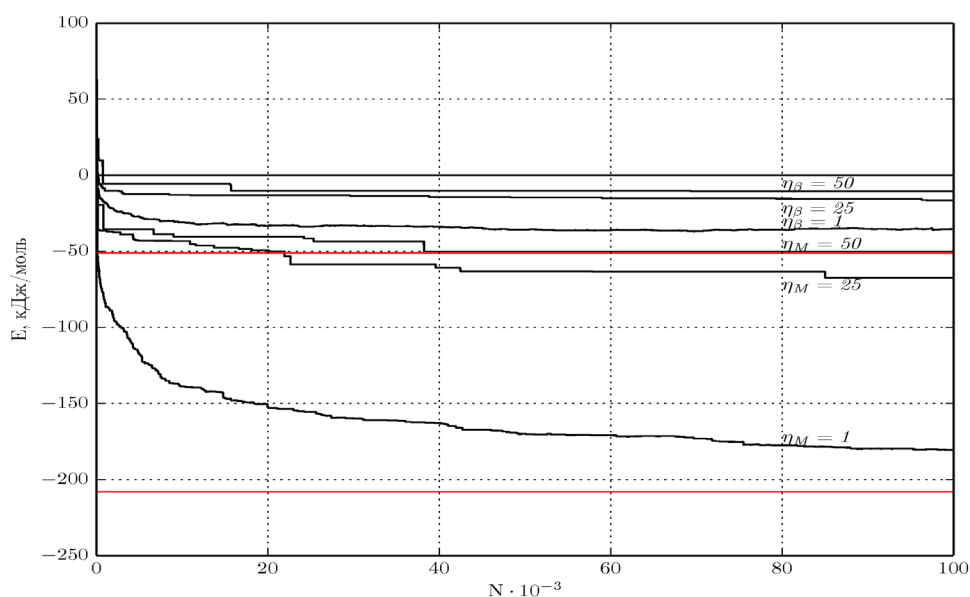


Рис. 4. Кинетики релаксации НЭМС Ni_{50} ; $\eta_{\text{mob}} = 1, 25, 50$; α -связи (М) и β -связи

Кинетика представлена энергетической зависимостью эволюции ансамбля атомов от шага цепи Маркова. На кривых зависимости энергии видны состояния, в которых система находится относительно продолжительное время, что говорит о существовании квазиравновесных форм образующихся наносистем.

Горизонтальными прямыми линиями на графиках 2–4 показаны уровни энергии устойчивого основного состояния при полной квантовой коррелированности $\eta = 1$ ($\eta_{\text{mob}} = 0$). Более низкий по энергии уровень соответствует металлической α -связи

внутри предельно интегрированной НЭМС, а более высокий — контактной β -связи предельно дезинтегрированной НЭМС. На рисунке 5 показаны начальная конфигурация НЭМС и конечная конфигурация для $\eta = 1$ ($\eta_{\text{mob}} = 0$). На рисунках 6–8 представлены морфологии конечных квазистационарных состояний предельно интегрированной квантовой мобильной НЭМС атомов и предельно дезинтегрированной квантовой мобильной НЭМС атомов наносистем Fe_{50} , Co_{50} , Ni_{50} для кинетических кривых, представленных на рисунках 2–4.

$\eta = 1$ ($\eta_{\text{mob}} = 0$).

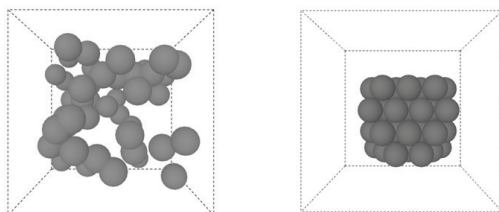


Рис. 5. Морфология НЭМС на начальной и конечной ($\eta = 1$) стадии релаксации

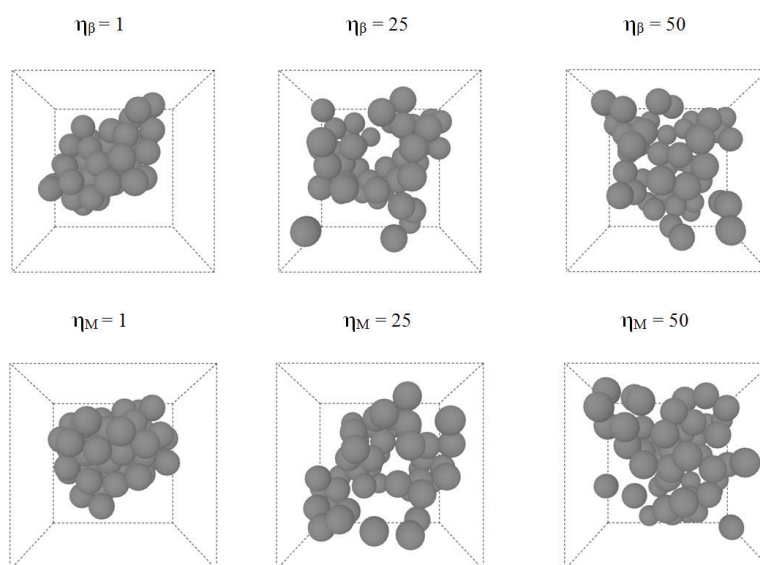


Рис. 6. Морфология НЭМС Fe_{s0} на конечной стадии релаксации с различными η -режимами мобильности для контактных и металлических связей атомов

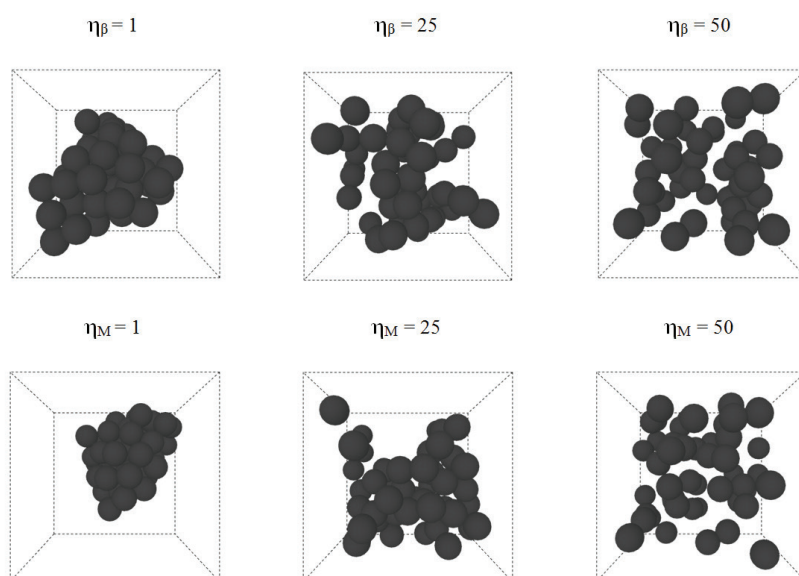


Рис. 7. Морфология НЭМС Co_{s0} на конечной стадии релаксации с различными η -режимами мобильности для контактных и металлических связей атомов

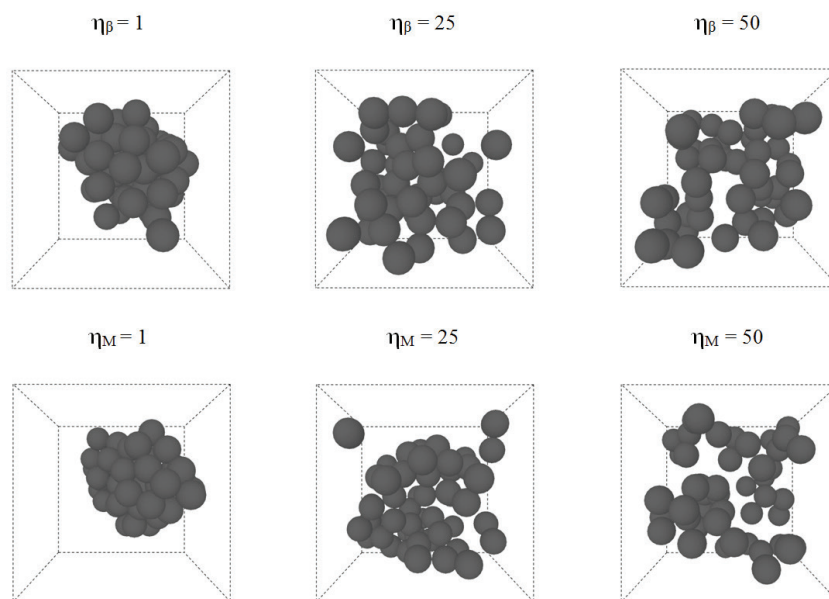


Рис. 8. Морфология НЭМС Ni_{30} на конечной стадии релаксации с различными η -режимами мобильности для контактных и металлических связей атомов

Из рисунков 2–4 следует, что для всех сортов атомов группы железа кинетические кривые энергии предельно интегрированной НЭМС лежат ниже, чем предельно дезинтегрированной НЭМС. При этом для обоих типов НЭМС рост числа η_{mob} мобильных атомов ведет к квазистационарным неравновесным состояниям с более высоким уровнем накопления энергии относительно уровня энергии устойчивого основного состояния с $\eta = 1$; $\eta_{mob} = 0$, изображенного на рисунке 5. На рисунках 6–8 видно, что рост числа η_{mob} мобильных атомов обеспечивает образование более рыхлых систем малых кластеров.

Выводы. Компьютерные эксперименты в рамках метода Монте-Карло показали различный тип самоорганизации в режимах мобильности с сильной и слабой коррелированностью смещений атомов. В ходе самоорганизации первого типа формируется устойчивый компактный кластер НЭМС атомов с более

высокой энергией связи; во втором случае синтезируются фрактальные островковые кластеры с более низкой энергией связи. Выявлено, что детали кинетических зависимостей процессов самоорганизации НЭМС в группе железа слабо связаны с сортом атомов и типом электронных связей, обеспечивающих интегрированность НЭМС. Показано, что эти два химических фактора вторичны для кинетики и конечной морфологии самоорганизации квантовых мобильных НЭМС Fe50, Co50, Ni50 по сравнению с изменением кинематического режима корпоративной мобильности атомов. Обнаружено, что рост числа мобильных атомов обеспечивает образование более рыхлых систем малых кластеров НЭМС независимо от ее интегрированности электронными связями. Сбор атомов в единый компактный НЭМС происходит только при низкой квантовой мобильности атомов независимо от типа электронных связей.

Библиографический список

1. Beznosjuk S.A., Zhukovskii M.S., Potekaev A.I. The Theory of Motion of Quantum Electromechanical Plasmoid Nanobots in a Condensed-State Medium // Russian Physics Journal. — 2013. — Т. 56, №5.
2. Безносюк С.А., Жуковский М.С. Теоретические основы создания наноэлектромеханических систем нанороботов в материалах. — Барнаул, 2013.
3. Beznosjuk S.A., Minaev B.F., Muldakhmetov Z.M. Informative Energetic Structure and Electronic Multistability of Condensed State // Computational and Theoretical Chemistry. — 1991. — Vol. 227.
4. Blencowe M. Quantum Electromechanical Systems // Physics Reports. — 2004. — Vol. 395, №3.

5. Beznosjuk S.A., Dajanov R.D., Kuljanov A.T. Density Functional Calculation of Transition Metal Cluster Energy Surfaces // International Journal of Quantum Chemistry. — 1990. — Vol. 38, №5.

6. Fomin A.S., Zhukovskii M.S., Beznosyuk S.A. Modeling of Nanomaterial Structure Based on Quantum-

sized Mesoparticles // Russian Physics Journal. — 2006. — Vol. 49, №7.

7. Безносюк С.А., Гришко М.С. Компьютерное моделирование методом Монте-Карло процессов формирования кластеров никеля в нанопорах материалов // Перспективные материалы. — 2009. — №7.