

А. И. Деревянко, Сяо Цзефан

МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ ФРАКТАЛЬНЫХ НАНОПЛЕНОК

Введение. Интерес к фрактальным наноразмерным пленкам связан с их физическими свойствами, которые существенно отличаются для твердых тел с кристаллической или аморфной структурой. Для получения нанопленок металла традиционно используется метод CVD (химическое парофазное осаждение вещества) в котором исходное вещество испаряется в отдельной камере, переносится через газовую среду и осаждается на подложку [1]. Под синтезом кластеров в газовой среде понимаются процессы, при которых кластер формируется из газовой фазы до своего размещения на некоторой поверхности.

Постановка задачи. Одной из типичных задач молекулярной динамики в неравновесных условиях при осаждении наноматериалов по CVD-технологии из газовой фазы методом активирования излучением газоразрядных электронных пушек является моделирование процесса диссоциации двухатомной молекулы [2]. Примером классической динамической модели межмолекулярных взаимодействий в этом случае служит модель, заданная в гамильтоновой форме.

$$H = \frac{p^2}{2m} + E(r), \quad (1)$$

где m – масса молекулы, E – потенциал межатомного взаимодействия, r и p – векторы обобщенных координат и обобщенных импульсов, образующие обобщенный вектор состояния x .

Решение задачи. Рассмотрим межатомное взаимодействие в виде потенциала Морзе

$$E = D(1 - \exp(-a\Delta r))^2, \quad (2)$$

где D и a – константы, $\Delta r = r - r_0$ – смещение атома относительно положения равновесия.

Уравнение рассматриваемой системы в форме Лагранжа будет иметь вид

$$m\ddot{r} = 2aD(\exp(-2a\Delta r) - \exp(-a\Delta r)). \quad (3)$$

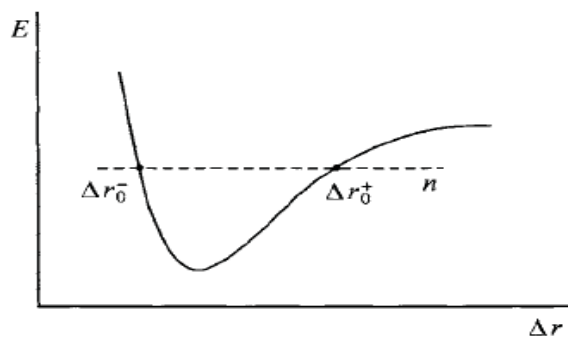


Рисунок 1 – Потенциал Морзе (горизонтальная линия n определяет уровень межатомного взаимодействия, а Δr_0^+ и Δr_0^- – экстремальные смещения относительно положения равновесия).

Уровень межатомного взаимодействия n для потенциала Морзе может быть представлен в виде

$$H_n = \frac{1}{2}(p^2 + q^2), \quad (4)$$

где (p, q) – обобщенные координаты.

Предположим, что $p=0$, тогда смещение Δr достигает экстремальных значений Δr_0^+ и Δr_0^- . Их отношения с q , как показано ниже, будут определяться значениями D и a для потенциала Морзе в терминах спектроскопии.

Отношение Δr_0 и q определяется

$$\Delta r_0 = a^{-1} \ln((1 - (1 - \lambda^2)^{1/2} \operatorname{sgn})), \quad (5)$$

где при $q < 0$ $\operatorname{sgn}=1$ и $\Delta r_0 = \Delta r_0^-$, а при $q > 0$ $\operatorname{sgn}=-1$ и $\Delta r_0 = \Delta r_0^+$.

Из выражения (5) имеем

$$(1 - \exp(-a\Delta r_0))^2 = 1 - \lambda^2. \quad (6)$$

Это значит, что значение потенциала Морзе на уровне n равно

$$E_n = D(1 - \lambda^2). \quad (7)$$

Между тем, при значении $p=0$ (экстремальное значение смещения Δr) следует, что $q^2=2n$ т.е. выполняется условие

$$\lambda = 1 - \frac{(2n+1)}{k}, \quad (8)$$

где k параметр.

Теперь рассмотрим состояние с уровнем взаимодействия n . Из выражения (8) следует

$$D(1 - \lambda^2) = \left(\frac{4D}{k}\right)\left(n + \frac{1}{2}\right) - \left(\frac{4D}{k^2}\right)\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (9)$$

Заметим, что $D(1-\lambda^2)$ является потенциалом для экстремального смещения, при котором $p=0$ и, таким образом, кинетическая энергия так же равна нулю. Следовательно, $D(1-\lambda^2)$ будет значением полной энергии в состоянии n . При этом целые значения $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ являются квантовыми числами, а $D(1-\lambda_n^2)$ - уровнями энергии. Правая часть выражения (9) показывает, что (9) это осциллятор с нелинейным коэффициентом второго порядка $-4D/k^2$ и линейным коэффициентом $4D/k$, определяющим частоту гармонических колебаний.

Таким образом, колебания в модели двухатомной молекулы с межатомным взаимодействием в виде потенциала Морзе является системой второго порядка ангармоничности.

В спектроскопии обычно обозначают уровни энергии E_n межатомного взаимодействия как

$$E_n = \omega(n + 1/2) + X(n + 1/2)^2 \quad (10)$$

Следовательно, для потенциала Морзе

$$\omega = 4D/k, \quad X = -4D/k^2 \quad (11)$$

Или

$$k = \omega/(-X), \quad D = (\omega/2)^2/(-X) \quad (12)$$

Таким образом получены выражения связывающие параметры Морзе D и K с спектроскопическими параметрами X и ω .

Энергетическое пространство между двумя ближайшими соседними уровнями энергии уменьшается при увеличении значения n . Когда это пространство равно нулю межатомные связи разрываются и молекула диссоциирует. Такая ситуация связана с возникновением в системе хаотических колебаний.

Обозначим квантовое число n_0 для случая диссоциации. Тогда

$$E_{n_0+1} - E_{n_0} = 0. \quad (13)$$

Из выражения (13) с учетом (10)-(11) имеем

$$\omega + X(2n_0 + 2) = 0 \quad (14)$$

или

$$n_0 = 1/2(\omega/(-X))^{-1} \approx k/2 \quad (15)$$

Следовательно k , есть удвоенное квантовое число диссоциации, которое может быть получено из спектроскопических параметров X и ω .

Окончательно отметим, что

$$a = \omega \sqrt{\frac{\mu}{2D}} = \sqrt{-2X\mu} \quad (16)$$

где μ приведенная масса двухатомной молекулы.

Подставив значение

$$n_0 = \frac{1}{2}(\frac{\omega}{-X})^{-1} \quad (17)$$

в выражение (13) можно определить энергию диссоциации

$$E_0 = \frac{(\omega^2 - X^2)}{(-4X)} D \quad (18)$$

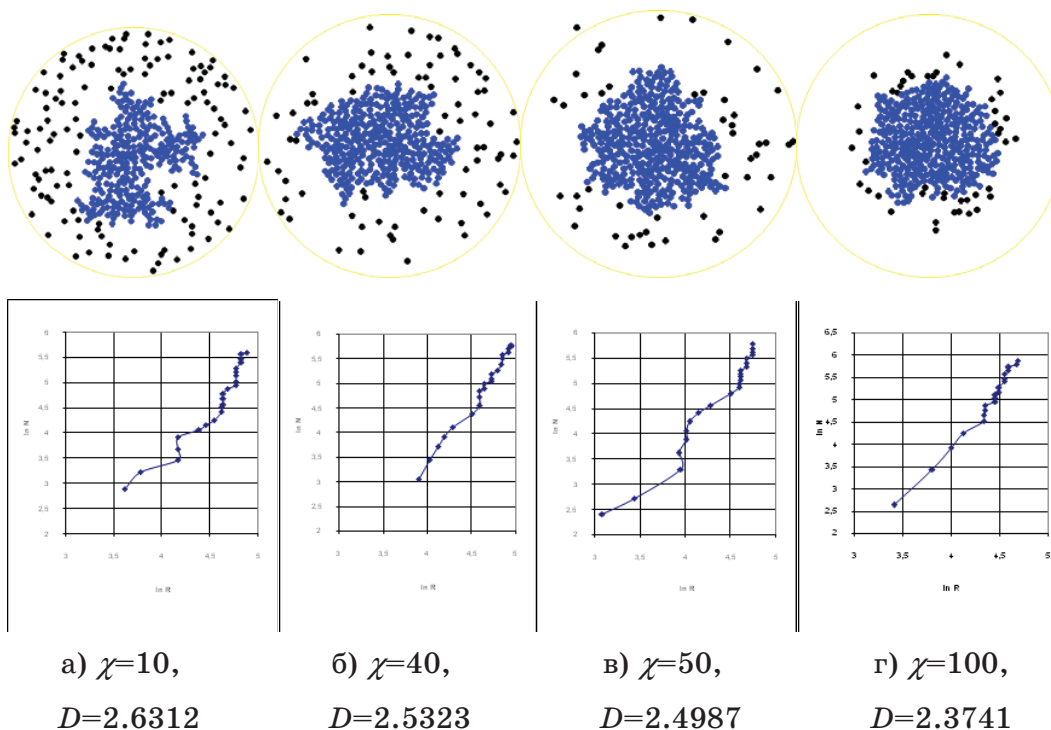


Рисунок 2 – Влияние коэффициента диффузии χ на фрактальную размерность кластера D

Выводы. В разработанную программу моделирования процесса формирования кластеров [3] была введена процедура, учитывающая уровень диссоциации кластерного образования. Это дало возможность сделать процесс формирования кластера обратимым, т.е. многократно повторять процессы плавления и затвердевания. Генерируемые в этом случае последовательности кластеров имели визуальную различную

форму, однако, значения их фрактальной размерности совпали, что связано с одинаковыми условиями их формирования [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: Наука, 2006. 592 с.
2. Wu G. Nonlinearity and chaos in molecular vibration. Amsterdam. Elsevier, 2005, P.375.
3. Mikhalyov A. I., Gasik M. I., Vlasova T. E., Projdak Yu. S. Computer Modeling of Grain's Growth at Sintering Nano-Materials// 6-th International Symposium of Croatian Metallurgical Society Materials and Metallurgy. – Metallurgy. –Vol. 43. N 3, 2004. - P. 214.
4. Дервянко А.И., Ватченко Е.Н., Квятковский А.Е. Модель формирования фрактальной структуры// «Интеллектуальные системы принятия решений и проблемы вычислительного интеллекта». Евпатория. 2007. с.27-32.