

В. С. Игруппло, А. А. Яновский (Ставрополь, СГУ). Математическое моделирование некоторых ориентационных процессов на наноповерхностях.

Одной из основных задач в нанотехнологиях, является оптимизация методов манипулирования отдельными атомами и молекулами. Эта задача может быть решена при помощи механосинтеза — сборки наносистем и их компонентов из отдельных атомов. В связи с этим особую актуальность приобретает математическое моделирование ориентационных процессов на наноповерхностях.

Предположим, что конец иглы кантилевера атомно-силового микроскопа [1] и молекула-диполь располагаются в одной плоскости плоскости подложки. Конец иглы рассматриваем как диполь, причем он ориентирован отрицательным зарядом по отношению к молекуле (см. рис.). Задача состоит в переориентации диполя путем его поворота относительно оси, проходящей через центр масс, с тем чтобы диполь оказался параллельным оси x .

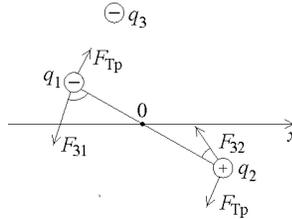


Рис.

По закону Кулона, заряд q_3 конца иглы взаимодействует с q_1 и q_2 с силами:

$$F_{3i} = q_3 q_i / (4\pi\epsilon_0 r_{3i}^2),$$

где r_{3i} — расстояния между q_3 и q_i соответственно $i = 1, 2, .$

Моменты сил \mathbf{F}_{31} и \mathbf{F}_{32} стремятся развернуть диполь против часовой стрелки вокруг неподвижной оси, проходящей через точку O — середину отрезка l , соединяющего заряды диполя [2]:

$$\mathbf{M} = \frac{l}{2} \mathbf{F} \sin \alpha, \quad M_{31} = \frac{pq_3}{2r_{31}^2} \sin \alpha, \quad M_{32} = \frac{pq_3}{2r_{32}^2} \sin \gamma,$$

где $p = ql$ — дипольный момент.

Помимо указанных сил, необходимо учесть взаимодействие нашего диполя с дипольными молекулами, уже лежащими на наноповерхности. Для усредненного учета этого взаимодействия введем своеобразную «силу трения» $F_{Тр}$, возникающую при повороте молекулы. Момент этой силы, относительно точки O есть $\mathbf{M}_{Тр} = -l\mathbf{F}_{Тр}$; знак минус указывает на то, что $\mathbf{M}_{Тр}$ направлен в сторону противоположную \mathbf{M}_{31} и \mathbf{M}_{32} .

Из уравнения динамики вращательного движения следует условие равномерности вращения диполя:

$$\sum \mathbf{M} = \mathbf{M}_{31} + \mathbf{M}_{32} + \mathbf{M}_{Тр} = \mathbf{0},$$

т. е.

$$\frac{pq_3}{2r_{31}^2} \sin \alpha + \frac{pq_3}{2r_{32}^2} \sin \gamma - lF_{Тр} = 0.$$

Так как в процессе поворота диполя будет меняться относительное расположение зарядов, то будут изменяться и моменты \mathbf{M}_{31} , \mathbf{M}_{32} , что значительно усложняет задачу. Это затруднение можно преодолеть, если изменение силы компенсировать изменением плеча, т. е. добиться чтобы: $M_{31} + M_{32} = \text{const}$ и $lF_{Тр} = \text{const}$, $\frac{pq_3}{2r_{31}^2} \sin \alpha + \frac{pq_3}{2r_{32}^2} \sin \gamma = \text{const}$ и $F_{Тр} = \text{const}$.

Окончательно получаем условие равномерного поворота молекулы:

$$\frac{\sin \alpha}{r_{31}^2} + \frac{\sin \gamma}{r_{32}^2} = \text{const}.$$

Важно отметить, что после поворота молекула будет находиться в устойчивом положении, только когда заряд на конце иглы и ближайший к нему заряд диполя будут разноименными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Моисеев Ю. Н., Мостепаненко В. М.* Экспериментальное и теоретическое исследование сил и пространственного разрешения в АСМ. — Ж. техн. физ., 1990, т. 60, № 1, с. 141–148.
2. *Ландау Л. Д., Лившиц Е. М.* Курс теоретической физики. Т. 8. Электродинамика сплошных сред. М.: Физматлит, 2003, 656 с.