

К. В. В н у к о в а, Л. А. У в а р о в а (Москва, ГОУ ВПО МГТУ «СТАНКИН»). Компьютерное моделирование физических кластеров.

Одним из важных вопросов в задачах области нанотехнологий [1] является сравнение вычислительных экспериментов с макроскопическими результатами, а также рассмотрение вопроса о применимости континуальных уравнений в физике кластеров. Во многом успех этого направления обусловлен развитием технологии получения кластеров с заданным числом частиц и технологией создания кластеров заданной структуры, что в свою очередь приводит к становлению новых фундаментальных задач для прикладной математики. Современный анализ и исследование систем, содержащих относительно небольшое число частиц, например, таких как: аэрозоли, тонкие плёнки, белковые глобулы, а так же систем, находящихся в критическом состоянии требует разработки и совершенствования существующих методов и подходов, поскольку переход к нанометровому масштабу включает не только внешние и внутренние межмолекулярные и межатомные взаимодействия, но и ставит проблему учета внутренней структуры, энергетических и обменных взаимодействий самих частиц.

В настоящей работе рассматривается анализ, сравнение и область применения основных фундаментальных методов математического моделирования [2], [3], использующихся для решения поставленной задачи это совокупность методов Монте-Карло (МК), в основе которых лежит разыгрывание случайным образом новых конфигураций многочастичной системы, что позволяет определять и оптимально находить наиболее устойчивые конфигурации атомов кластера. Вторым методом является квантово-химический подход (КХП), в основе которого лежит расчёт и анализ траекторий движения частиц путем численного интегрирования системы дифференциальных уравнений движения Ньютона с использованием конечно-разностных схем с известными начальными и граничными условиями. Мы так же используем метод функционала плотности (МФП), который является одним из новых подходов, для изучать электронной структуры атомов и молекул кластера, вычисляя полную энергию электронов и их общую функцию плотности распределения. В отличие от первых двух методов, в МФП атомы, входящие в состав рассматриваемой системы, считаются неподвижными, где электростатический потенциал V является внешним для электронов. Их стационарное состояние описывается волновой функцией $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$, которая является решением уравнения Шрёдингера

$$H_\psi = \left[\sum_i^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_i^N V(\vec{r}_i) + \sum_{i < j} U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right] \psi = E\psi,$$

где H — гамильтониан электронной подсистемы, N — количество электронов.

Метод функционала плотности в значительной степени решает проблему расчета систем, включающих большое число частиц, поскольку становится возможным сведение задачи о системе многих тел с потенциалом электрон-электронного взаимодействия U к одночастичной задаче, в которой слагаемое U отсутствует. Однако сложности с расчетом дисперсионного взаимодействия в рамках теории функционала плотности делают данный метод малоприменимым для систем, в которых дисперсионные силы являются преобладающими, например, при рассмотрении взаимодействия между атомами благородных газов или систем, в которых дисперсионные силы имеют тот же порядок, что и другие взаимодействия, в частности, в органических молекулах.

Необходимо отметить, что точность численного решения и устойчивость полученных результатов зависят как от учета свойств и характеристик рассматриваемой системы, так и применяемых численных методов. Как правило, МК и КХП ограничиваются использованием определенных видов потенциалов взаимодействий, как

функций, зависящих от координат и эмпирически определенных параметров потенциалов, что часто не позволяет учитывать ряд физико-химических свойств, приводящих к структурным изменениям кластера, соответственно возможны неточные оценки распределенных параметров системы и неточность получаемых результатов. Однако, замена многоэлектронной волновой функции на электронную плотность в МФП, позволяет учесть плотность распределения зарядов в атомах кластера, и соответственно, корректнее описывать заданную систему.

Так, проведенные вычислительные эксперименты показали, что равновесное состояние для кластера натрия в методе МК достигается при 75 и более частицах, для кремния при 41 и для железа при 40 частицах и более частицах соответственно. Однако при использовании КХП для кластера натрия равновесное состояние было получено при 40 частицах, а при использовании МФП при 24 частицах.

Видно, что устойчивые состояния с различным числом атомов кластера зависят от использования того или иного подхода. Так, в МФП результаты являются более точными, однако для первоначального анализа сложной системы использование МК и КХП является более целесообразным при определении соответствующих термодинамических характеристик.

Таким образом, при небольшом числе частиц предпочтительней использовать МФП, поскольку равновесное состояние достигается для меньшего числа атомов системы, что является фундаментальным результатом и разрешает вопрос об использовании континуальных моделей для наносистем. Соответственно, при проектировании и конструировании наноустройств становится возможным оптимально подобрать необходимые физико-химические и конфигурационные параметры системы, используя комбинацию современных методов моделирования в зависимости от размерности задачи, интересующих характеристик и критических параметров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Суздалев И. П.* Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов М.: КомКнига, 2006.
2. *Leach A. R.* Molecular Modeling. Principles and Applications. 2nd ed. Harlow: Pearson Education, 2001.
3. *Parr R. G., Yang W.* Dencity-Functional Theory of Atoms and Molecules. N. Y.: Oxford Univ. Press, 1989.