



تأثيرات الحجب الكهروستاتيكي وجهود القطبيات المتعددة من الرتب العالية على
طاقة التماسك ومعامل ينج الكتلي للجسيمات النانوية المعدنية

Higher Order Multipole Potentials and Electrostatic Screening Effects on Cohesive Energy and Bulk Modulus of Metallic Nanoparticles T. Barakat

الخلاصة

أدخلت تأثيرات الحجب الكهروستاتيكي وجهود ثنائي القطب المتعدد من الرتب العالية لتدمج مع روابط التدلي على تركيب الجسيمات النانوية المعدنية وتعديل حدود طاقة جهد كولوم على التوالي. دالة طاقة التفاعل الكلية لأي جسيمات نانوية معدنية تمثل بدلالة جهد جسمين أو ثلاثة أجسام. جزء الجسمين يوصف بجهد تفاعل ثنائي قطب – ثنائي قطب، وجزء الثلاثة أجسام يوصف بثنائي قطب – ثلاثي (-triple dipole (DDD) وبدلالة ثنائي قطب – ثنائي قطب – رباعي الأقطاب (dipole-dipole-quadrupole (DDQ)). لوحظ ان اعتماد طاقة التماسك ومعامل يونج الكتلي على الحجم يتناقص مع تناقص الحجم، هذه النتيجة متوافقة بشكل جيد مع القيم العملية لجسيمات M_0 و W النانوية.



1. مقدمة

حاليا، من المعروف بشكل أساسي انه في حالة تناقص حجم المواد إلى المقياس النانوي، تظهر خواص فيزيائية وكيميائية جديدة على مثل هذه الأنظمة. الخواص الأكثر تأثيرا لهذه المواد على المقياس النانوي تنتج بسبب تركيز الرابطة للذرات ذات البنية low-coordinated عند السطح. طبقا لطاقة التماسك ومعامل يونج الكتلي (bulk modulus) وتركيز ودرجة حرارة الذوبان وخواص أخرى لوحظت انها تحيد عن خواص المادة في الحالة الكتلية وتصبح خواصها معتمدة على الحجم والتركيب [1-3]. وعليه، فانه لتطويع المزيد من تطبيقات الجسيمات النانوية، فان معرفة الحجم والتركيب والقوى الذرية المتبادلة أو الجهود بين الذرات على المقياس النانوي تعتبر أمرا حيويا. ولهذا فإننا مهتمون بدراسة عميقة أكثر لاعتماد طاقة التماسك على الحجم ومعامل يونج الكتلي واستقرار التركيب للجسيمات النانوية المعدنية.

في هذه الورقة العلمية افترضنا ان جسيمات نانوية بهندسيات ابتدائية غير مسترخية بأحجام نانوية تكونت من تراكيب بلورية كبيرة من النوع BCC أو FCC باستخدام أقطار كروية مختلفة. هذه الجسيمات النانوية تفضل كما هو متوقع ان تكون في صورة تراكيب مكعبة مكثفة، ونظرا لكبر النسبة بين السطح إلى الحجم للذرات فانها تكون روابط متدللية (dangling bonds) وتكون توتر سطحي كبير. لهذا فان جهود قطبيات متعددة من الرتب العالية تعتبر جوهرية لوصف كلا من الذرات الداخلية والخارجية لهذه الهندسيات المختلفة. لهذا السبب، في هذا البحث العلمي فان طاقة التفاعل الكلية للجسيمات النانوية ممثلة بدلالة جهود جسمين أو ثلاثة أجسام. يوصف الجزء المتعلق بجهد الجسمين بدلالة تفاعل ثنائي قطب - ثنائي قطب والجزء المتعلق بالثلاثة أجسام يوصف بدلالة ثنائي قطب - ثلاثي (DDD) وثنائي قطب - ثنائي قطب - ورباعي الأقطاب (DDQ) [4-5].

علاوة على ذلك فان كل جسيم نانوي متولد يعتبر مثل شحنة نقطية اختبارية كروية الشكل مغمورة في البلورة الكتلية. تركيز الإلكترونات بجوار هذا الجسيم النانوي سوف يكون مشوشا بطريقة تجعل المجال الكهربائي للجسيم النانوي يتلاشى بالتوزيع المستحث لتركيز الإلكترونات، وعليه يفترض ان ذرات الجسيم النانوي تكون محجوبة بالغاز الإلكترونات للبلورة الكتلية. ونتيجة لذلك، فان طاقة جهد مثل كولوم يجب ان تعدل بدلالة دالة طاقة الجهد [6].

في النهاية، تعتمد الدراسة الحالية على بحثين حديثين لنا حيث قمنا بعرض نموذج اعتماد معاملات الجهد على الحجم (نموذج SDPP) لشرح انخفاض طاقة التماسك للجسيمات النانوية [7-9].



تتكون هذه الورقة العلمية على النحو التالي: في الجزء 2 مناقشة لعوامل جهد تفاعل ثنائي القطب – ثنائي القطب، ونموذج وطريقة الحساب للتنبؤ باعتماد طاقة التماسك على الحجم ومعامل يونج الكتلي لجسيمات Mo و W النانوية. في الجزء 3 نعرض النتائج النظرية لهذا البحث بالمقارنة مع النتائج العملية ومن ثم نستخلص النتائج بناء على هذه النتائج وعلى إمكانية التوسع في هذه الدراسة.

2. النموذج وطريقة الحوسبة

في الأعوام القليلة الماضية وجهت العديد من المحاولات للتنبؤ بأكثر التراكيب استقرارا للجسيمات النانوية المختلفة. حسابات ab-initio من المبادئ الأولية هي الطريقة الأكثر انتشارا. على كل حال، بالرغم من توفر الحواسيب المتقدمة إلا أنه لا تزال غير عملية داخل اطار عمل ab initio للسيطرة على هذه الأنظمة المحتوية على أكثر من بضعة عشرات من الذرات، وأيضا من الصعب ان تكشف اعتماد طاقة تماسك الجسيمات النانوية على الحجم باستخدام طرق عملية مباشرة. وعليه فان الخيار الأنسب لدالة طاقة الجهد (potential energy function (PEF)) وطريقة مرضية مثل SDPP هي طريقة لا مفر منها لحوسبة علوم النانو [7-9].

في نموذج SDPP افترضنا انه اذا لم يكون هناك قوة خارجية تؤثر على الجسيم النانوي فانه توجد PEF هي $\phi_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ لذرات N كدالة في مواقعها، ويمكن ان تتوسع لتشمل سلسلة جهود أجسام متعددة تحتوي على جهود جسيمين او ثلاثة أجسام [10]:

$$\phi_N = \frac{1}{2!} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N u(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \frac{1}{3!} \sum_i^N \sum_{\substack{j \\ i \neq j}}^N \sum_{\substack{k \\ i \neq j \neq k}}^N u(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots, \quad (1)$$



حيث $u_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ و $u_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$ تشير إلى تفاعل جسمين وثلاثة أجسام على التوالي. هذا ما يعرف باسم توسعة أو مفكوك أجسام كثيرة many-body expansion لـ ϕ_N ، و ϕ_N هي كمية يمكن قياسها، والتي تصف طاقة الترتيب الكلي (طاقة التماسك) للنظام، ويعتقد عادة ان المتسلسلة تتقارب بسرعة ولهذا فان العزوم من الرتب العالية يمكن إهمالها.

الجزء المتعلق بالجسمين في المعادلة (1) ممثلة بجهد تفاعل ثنائي قطب – ثنائي قطب [11]:

$$u(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \varepsilon \left[\frac{n}{m-n} \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^m - \frac{m}{m-n} \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right],$$
$$r_{ij} = |r_i - r_j|, \quad (2)$$

حيث r_0 تشير إلى المسافة الفاصلة في حالة اتزان بين مركزي أي ذرتين، و، ε هي طاقة جسمين عند $r_{ij}=r_0$. المتغيرين m و n هما مركبات حدود التنافر والتجاذب على التوالي. لتحديد المعاملات (ε, r_0, m, n) تم إجراء منحنى ملائمة غير خطي بطريقة المربعات الأقل (least-squares). لإجراء عملية الملائمة استخدمنا طاقة ربط متغيرة من dimers من Mo_2 و W_2 تم حسابها عند مسافات ذرية بينية مختلفة بطريقة ab initio [12]. منحنيات طاقة الجهد المقدره بطريقة ab initio ودوال جهد تفاعل ثنائي قطب – ثنائي قطب المستخدمة في الملائمة لكل من Mo_2 و W_2 موضحة في الشكلين 1 و 2. معاملات ملائمة جهد تفاعل ثنائي القطب – ثنائي القطب لـ Mo_2 هي $(\varepsilon = 4.511 \text{ eV}, r_0 = 1.95 \text{ \AA}, m = 8, n = 4)$ في حين ان معاملات ملائمة جهد تفاعل ثنائي القطب – ثنائي القطب لـ W_2 هي $(\varepsilon = 4.511 \text{ eV}, r_0 = 2.056 \text{ \AA}, m = 8, n = 4)$. في هذه المعاملات الطاقة بوحدة الالكتران فولت والمسافة بوحدة الانجستروم.

بوضوح، من المعروف جيدا، انه اذا كانت PEF للنظام تشمل فقط على جهد الجزء المتعلق بجسمين، فان مثل PEF لا تستقر في التراكيب المفتوحة، ولا توفر الترتيب الذري المناسب للتركيب ثلاثية الوحدات (trimers). لهذا فان حدود الثلاثة أجسام يجب ان تشمل، والتي تشكل مشاركة مهمة في التركيب الذي يحتوي على روابط متدلية وعلى استقرار الجسيمات النانوية المختلفة، والتي يعبر عنها بالشكل التالي:



$$u(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = \sum_{\ell} Z_{\ell} G_{\ell}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k), \quad (3)$$

حيث يشمل الجمع كل تفاعلات القطبية المتعددة الثلاثية القادمة من مفوك الرتبة الثالثة لطاقات تفاعل الذرات الثلاثة، والتي تساهم بطاقة موجبة. المعاملات Z_{ℓ} هي ثوابت التفاعل لحدود تفاعل القطبية المتعددة الثلاثية وهي التي سوف نجدها.

تم الحصول على أشكال دوال التفاعلات القطبية المتعددة $G_{\ell}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$ بواسطة Bell [4] و Doren و Zucker [5]. علاوة على انه تبين ان المساهمة الأكثر أهمية هي من حد ثنائي القطب الثلاثية (DDD) والمساهمة التي تليها من حد القطب الرباعي - ثنائي قطب - ثنائي قطب (DDQ)، والتي تكون معطاه لأنظمة القشرة المغلقة مثل:

$$G_{DDD}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = \frac{1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k}{r_{ij}^3 r_{ik}^3 r_{jk}^3}, \quad (4)$$

$$G_{DDQ}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = \frac{9 \cos \theta_k - 25 \cos 3\theta_k + 6 \cos(\theta_i - \theta_j)(3 + 5 \cos 2\theta_k)}{16 r_{ij}^3 r_{jk}^4 r_{ki}^4}, \quad (5)$$

حيث $\theta_i, \theta_j, \theta_k$ هي الزوايا والجوانب المتكونة بالجسيمات الثلاثة i و j و k على التوالي.

بدمج المعادلات من (1) إلى (5) وباستخدام ملاءمة معاملات جهد ثنائي القطب - ثنائي القطب، فإنه يمكن كتابة طاقة التماسك الفعالة لكل ذرة ϕ_a^* لأي جسيم نانوي بتركيب داخلي في شكل مكعب على النحو التالي:

$$\phi_a^* = \frac{1}{2} A_8 r^{*8} - A_4 r^{*4} + Z_1^* T_{DDDD} r^{*9} + Z_2^* T_{DDQ} r^{*11}, \quad (6)$$

حيث $\phi_a^* = \phi_N / (N\epsilon)$ و $Z_1^* = Z_1 / (\epsilon r_0^9)$ ، $Z_2^* = Z_2 / (\epsilon r_0^{11})$ ، و $r^* = r_0 / d$. d تمثل مسافة اقرب جار لأي تركيب. $A_8, A_4, T_{DDDD}, T_{DDQ}$ هي مجاميع الشبكة البلورية وتعطى على النحو التالي:



$$A_8 = \frac{1}{N} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{g}{a_{ij}} \right)^8, \quad A_4 = \frac{1}{N} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{g}{a_{ij}} \right)^4, \quad (7)$$

$$T_{DDD} = \frac{1}{6N} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \sum_{k \neq i, j}^N \frac{(1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k)}{((a_{ij}/g)(a_{ik}/g)(a_{jk}/g))^3}, \quad (8)$$

$$T_{DDQ} = \frac{1}{6N} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \sum_{k \neq i, j}^N \frac{(9 \cos \theta_k - 25 \cos 3\theta_k + 6 \cos(\theta_i - \theta_j)(3 + 5 \cos 2\theta_k))}{(a_{ij}/g)^3 (a_{jk}/g)^4 (a_{ki}/g)^4}, \quad (9)$$

حيث g هي ثابت هندسي يعتمد على التركيب الداخلي للجسيم النانوي، و a_{ij} هي أعداد.

من الواضح ان معاملات الجهد $A_8, A_4, T_{DDD}, T_{DDQ}$ مرتبطة مع حجم الجسيم Z ، ومرتبطة مع التركيب الداخلي للجسيم النانوي من خلال g وتعتمد بقوة على طاقة الجهد. وهذا يعني ان تغير طاقة الجهد يعني تغير مدى الجهد.

على الجانب الآخر شرط الاستقرار الذي يضمن ترتيب ادنى طاقة لأي جسيمات نانوية عند درجة حرارة $T=0^\circ K$ يمكن الحصول عليها باعتبار $\partial \phi_a^* / \partial V = 0$:

$$\begin{aligned} & 8A_8 r^{*8} - 8A_4 r^{*4} + 18Z_1^* T_{DDD} r^{*9} \\ & + 22Z_2^* T_{DDQ} r^{*11} = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

هذا لان الحجم الذري V مرتبط مع d من خلال $V = N_0 g d^3$ حيث N_0 تشير إلى عدد افوجادرو و r^* مرتبطة مع d من خلال $r^* = (V_0/V)^{1/3} = r_0/d$ حيث V_0 تشير إلى حجم الاتزان. وعليه فان تغير r^* يعني تغير الحجم للجسيم النانوي.



في النهاية، معامل ينح الكتلي $B_m = V(\partial^2 \phi_N / \partial V^2)$ ، والمرتبط مع الانضغاط للجسيم النانوي على النحو التالي:

$$B_m^* = \frac{88}{18} A_8 r^{*8} - \frac{56}{18} A_4 r^{*4} + \frac{216}{18} Z_1^* T_{DDDR} r^{*9} + \frac{308}{18} Z_2^* T_{DDQ} r^{*11}, \quad (11)$$

حيث $B_m^* = VB_m / N\varepsilon$.

بتعريف أول حدين في المعادلة (6) على أنه $\phi_2^*(r^*)$ والحد الثالث والحد الأخير على أنه $\phi_{31}^*(r^*, Z_1^*)$ و $\phi_{32}^*(r^*, Z_2^*)$ على التوالي. بالمثل، بتعريف أول حدين في المعادلة (11) على أنه $B_2^*(r^*)$ والحدين الثالث والأخير على أنهما $B_{31}^*(r^*, Z_1^*)$ و $B_{32}^*(r^*, Z_2^*)$ على التوالي. عندها يمكن التعبير عن المعادلتين (6) و (11) على النحو التالي:

$$\phi_a^* = \phi_2^*(r^*) + \phi_{31}^*(r^*, Z_1^*) + \phi_{32}^*(r^*, Z_2^*), \quad (12)$$

$$B_m^* = B_2^*(r^*) + B_{31}^*(r^*, Z_1^*) + B_{32}^*(r^*, Z_2^*). \quad (13)$$

بالرغم من أن الحدود للثلاثة أجسام في المعادلتين (4) و (5) اشتقت من أنظمة ذرية ذات قشرة مغلقة [4-5] إلا أن القيم ϕ_a^* ، r^* ، B_m^* على التوالي تم حسابها من المعادلات (6) و (10) و (11) من المتوقع أن تكون متفقة بشكل جيد مع القيم المرصودة للعناصر الذرية ذات القشرة المغلقة. على كل حال، للعناصر الأخرى مثل Mo و W في حالتنا قد يكون من غير الممكن في عملية الملائمة إعادة إنتاج (reproduce) قيم الحالة الكتلية المرصودة، بسبب الاختلافات في التركيب الإلكتروني. ولهذا فإن ظاهرة طول الحجب الكهروستاتيكي يجب أن تؤخذ في الاعتبار. وبذلك فإن يفترض $\exp(ar^*)$ كتأثير الحجب للحدود المعتمدة على r^* والصيغ المعدلة لـ ϕ_a^* و B_m^* لأي تركيب نانوي هي على النحو التالي:



$$\phi_s^* = \exp(\alpha r^*)[\phi_2^*(r^*) + \phi_{31}^*(r^*, Z_1^*) + \phi_{32}^*(r^*, Z_2^*)], \quad (14)$$

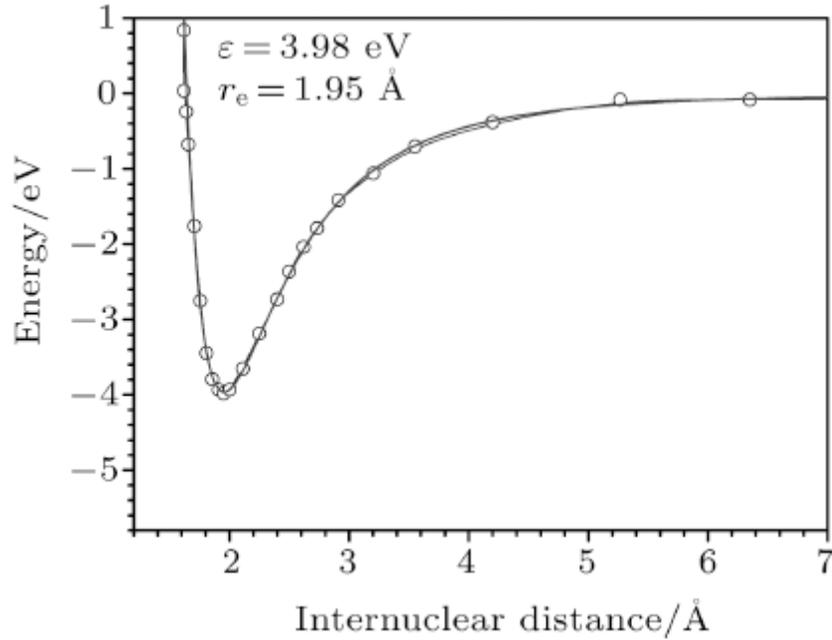
$$B_s^* = \exp(\alpha r^*)[B_2^*(r^*) + B_{31}^*(r^*, Z_1^*) + B_{32}^*(r^*, Z_2^*)], \quad (15)$$

حيث α هي ثابت الحجب. بوضوح عند إجراء عملية الملائمة فان المعادلتين (14) و(15) يجب الآن ان تحقق طاقة التماسك ومعامل ينج الكتلي للمواد في الحالة الكتلية.

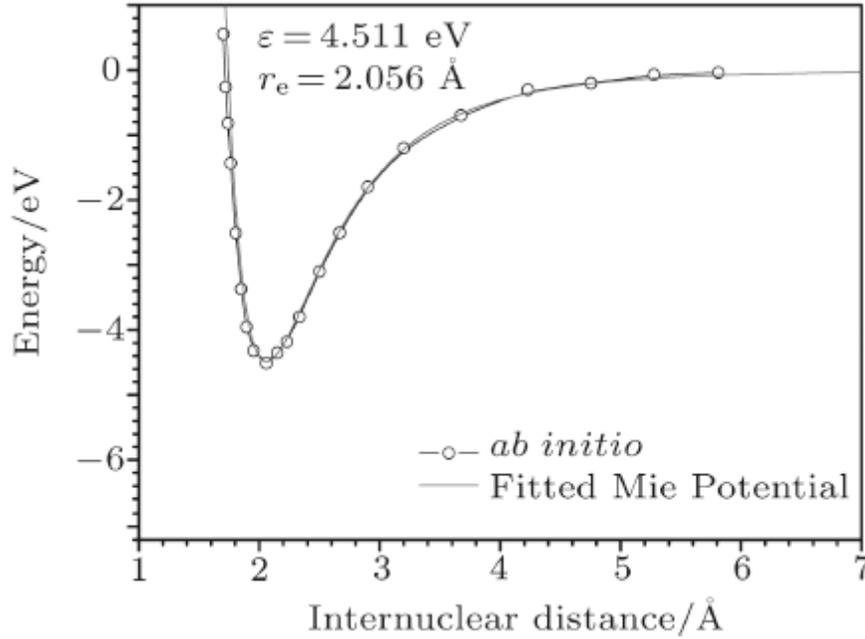
3. النتائج النظرية والمقارنة والمناقشة

أجريت الحسابات على كميات ليس لها وحدة باستخدام المعادلات المختزلة (10) و(14) و(15). أولاً تم الحصول على ثابت الحجب α ومعاملات الطاقة (Z_1^*, Z_2^*) وتبين انها تعطي احسن ملائمة للبيانات العملية للتراكيب الكتلية لـ Mo و W . في عملية الملائمة استخدمت القيم التالية كمعاملات إدخال لمادة Mo في صورتها الكتلية وهي: $r_0=1.95\text{\AA}$ ، و $\varepsilon=3.98\text{ eV}$ وقد أخذت من الشكل 1 لهذا البحث، وقد أشير لهما على انها فاصل الاتزان بين مركزي أي ذرتين وطاقة الجسمين عند $r_{ij}=r_0$ على التوالي. $d=2.72\text{\AA}$ [6]، وهي مسافة اقرب جار، $\phi_N/(N)=-6.2\text{ eV/atom}$ [6]، و $B_m/(N)=230\text{ GPA}=1.438\text{ eV/\AA}^3$ [6]، و $V=N_0gd^3$ ، حيث $g=0.7698$ هي المعامل الهندسي للتراكيب BCC. طبقاً لـ $r^*=r_0/d=0.715$ ، و $\phi_s^*=\phi_N/(N\varepsilon)=-1.557$ ، و $B_s^*=VB_m/(N\varepsilon)=5.58$. على الجانب الآخر، معاملات الجهد للتراكيب من النوع BCC في الحالة الكتلية استخدمت في هذه المرحلة وأخذت من المرجعين [14] و[15]: $A_4=22.640$ ، $A_8=10.360$ ، $T_{DDQ}=15.010$ ، $T_{DDD}=14.770$ ، قيم الملائمة هي $\alpha=-1.002$ ، و $Z_1^*=2.823$ ، و $Z_2^*=0.60$. في حين ان المعاملات المدخلة لـ W في الحالة الكتلية هي $r_0=2.056\text{\AA}$ ، و $\varepsilon=4.511\text{ eV}$ وقد أخذت من الشكل 2 في هذا البحث. $D=2.73\text{\AA}$ [6]، و $d=2.73\text{\AA}$ [6]، و $\phi_N/(N)=-8.55\text{ eV/atom}$ [6]، و $B_m/(N)=310\text{ GPA}=1.934\text{ eV/\AA}^3$ [13]. وبناء عليه فان $r^*=r_0/d=0.753$ ، و $\phi_s^*=\phi_N/(N\varepsilon)=-1.895$ ، و $B_s^*=VB_m/(N\varepsilon)=6.70$ ، وقيم الملائمة هي $Z_2^*=0.60$ ، و $Z_1^*=2.036$ ، و $\alpha=-1.052$.

بناء على ذلك في المدى النانوي معاملات الجهد $A_8, A_4, T_{DDD}, T_{DDQ}$ كلها تعتمد على حجم الجسيم من خلال N وأجريت الدراسة لجسيمات النانوية بالتراكيب BCC و FCC باستخدام أقطار كروية مختلفة $1 \leq R_{cut} \leq 10$. لكل قيمة لـ R_{cut} يتولد جسيم نانوي جديد مع حجم جديد. تم حساب التغيرات لـ A_8, A_4, T_{DDD} مع حجم الجسيم ومع تراكيب مختلفة وهذه الحسابات مدرجة في المرجع [8]، بينما في هذا البحث التغير في T_{DDQ} مع حجم الجسيم ومع تراكيب مختلفة تم الحصول عليه.



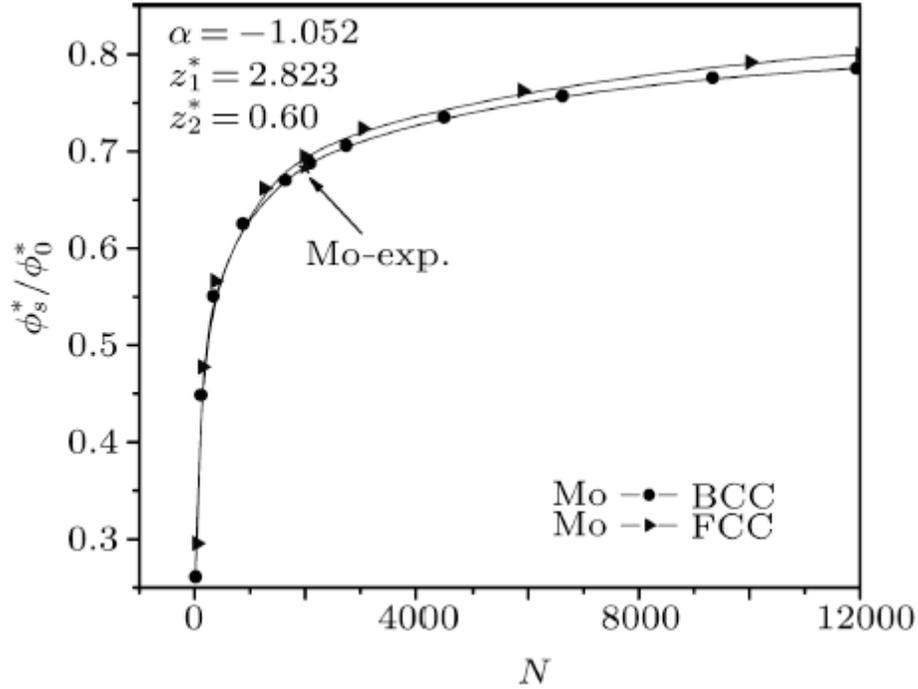
الشكل 1 منحنى طاقة الجهد لـ Mo_2 ثنائي وحدات (dimer). الدوائر هي ab initio [12] والخط المتصل هي ملائمة جهد ثنائي القطب - ثنائي القطب.



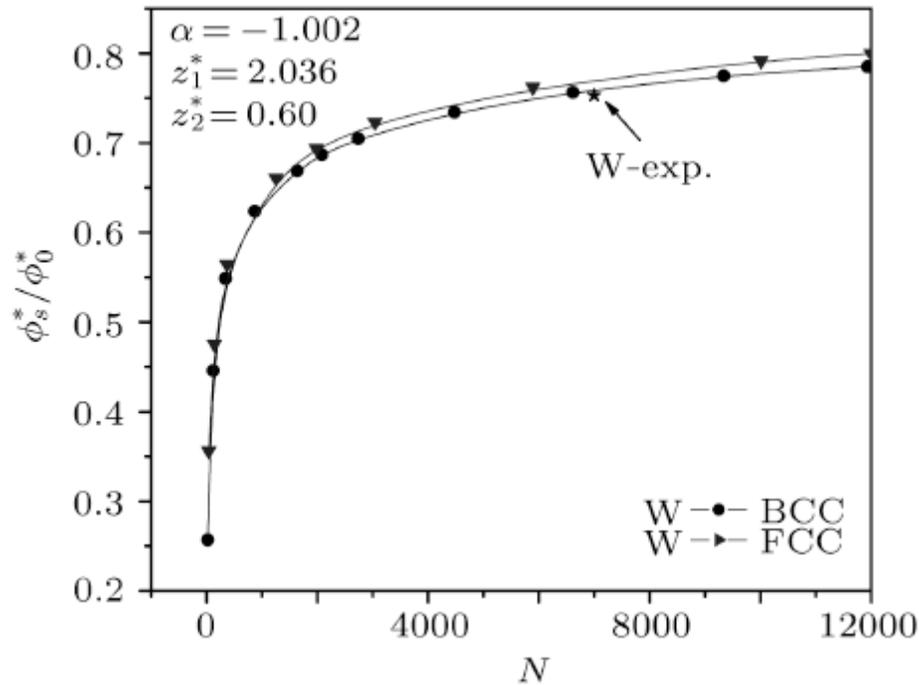
الشكل 2 منحى طاقة الجهد لـ W_2 ثنائي وحدات (dimer). الدوائر هي *ab initio* [12] والخط المتصل هي ملائمة جهد ثنائي القطب - ثنائي القطب.

لكل جسيم Mo متولد في التركيب البلوري الداخلي BCC و FCC تم احتساب r^* من شرط الاستقرار عند $Z_1^*=2.823$ و $Z_2^*=0.6$ ، بينما جسيمات W النانوية تم احتساب r^* من شرط الاستقرار عند $Z_1^*=2.036$ و $Z_2^*=2.036$ على التوالي. افترض الجذر التربيعي الحقيقي الموجب للمعادلة (10) كحل مقبول. ثم تم احتساب ϕ_s^* و B_s^* لجسيمات Mo النانوية مع تراكيب مختلفة كدالة في N عند $\alpha=-1.052$ ، بينما تم احتساب ϕ_s^* و B_s^* لجسيمات W النانوية بتراكيب مختلفة كدالة في N عند $\alpha=-1.002$.

بشكل نموذجي لجعل اعتماد طاقة التماسك على الحجم خالية من المعامل ε قمنا بحساب طاقة التماسك النسبية لأي جسيم نانوي بالنسبة لطاقة التماسك المناظرة للمادة في الحالة الكتلية أي ان ϕ_s^*/ϕ_0^* ، حيث اشرنا الى طاقة التماسك النسبية في الحالة الكتلية بـ ϕ_0^* . لقد أفادت البحوث العلمية بان طاقة التماسك لجسيمات Mo النانوية في حجم $N=2000$ هي -4.25 eV/atom [6]، في حين ان طاقة التماسك لـ Mo في الحالة الكتلية هي -6.2 eV/atom [6]. على الجانب الآخر لجسيمات W النانوية في الحجم $N=7000$ تكون طاقة تماسكها هي -6.42 eV/atom [15]، في حين ان طاقة التماسك لـ W في الحالة الكتلية هي -8.55 eV/atom [6].



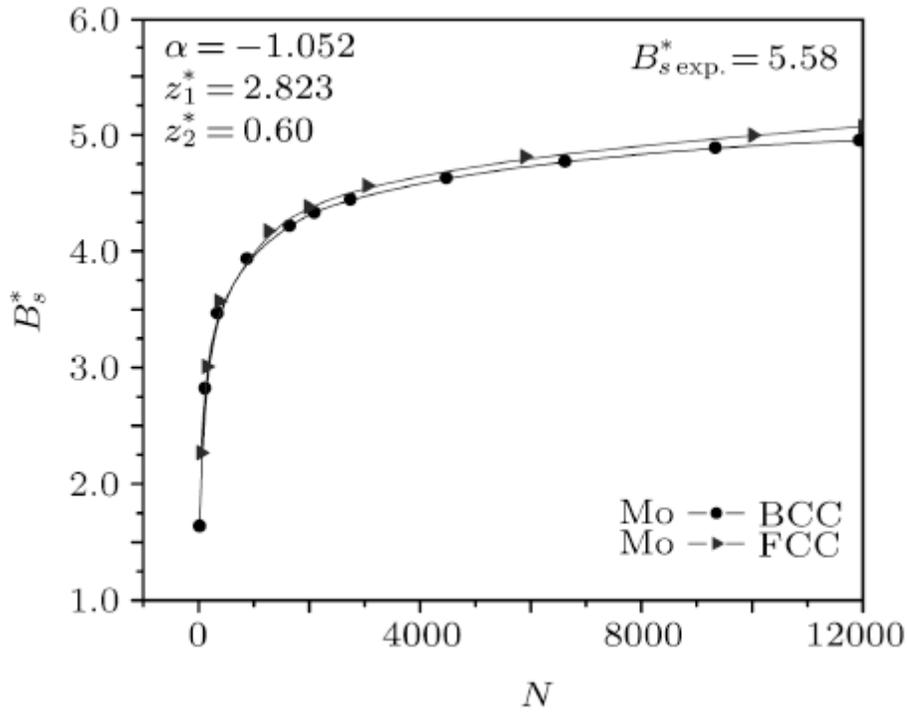
الشكل 3. اعتماد طاقة التماسك النسبية على حجم الجسيم لتركيب بلوري BCC و FCC لجسيمات Mo النانوية. تشير رموز النجمة إلى القيم العلمية [15].



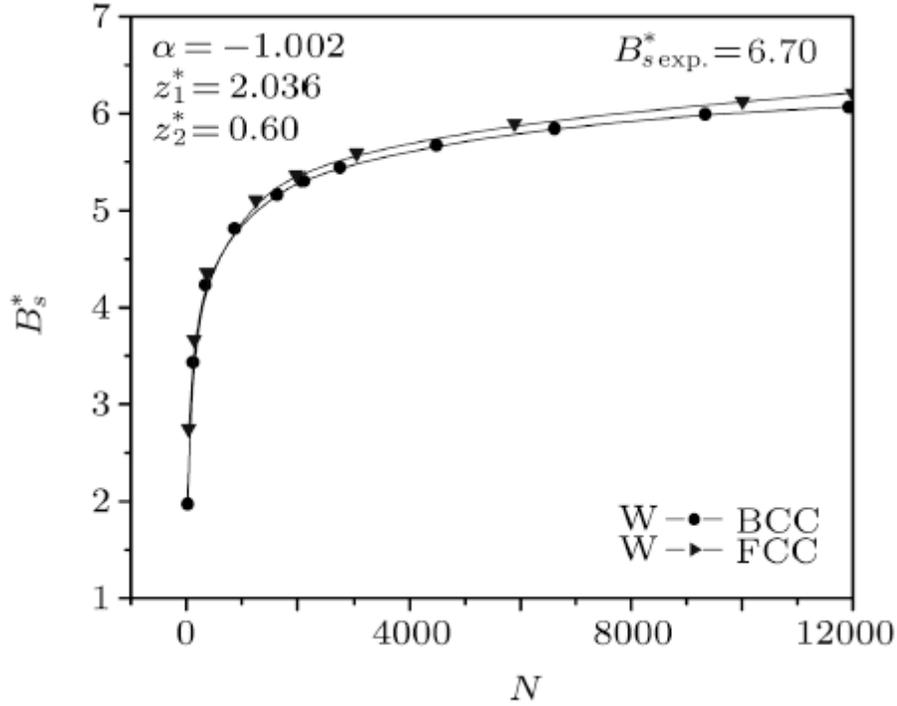
الشكل 4. اعتماد طاقة التماسك النسبية على حجم الجسيم لتركيب بلوري BCC و FCC لجسيمات W النانوية. تشير رموز النجمة إلى القيم العلمية [15].



نتائج نموذج SDPP لطاقة التماسك النسبية ومعامل ينج الكتلي لجسيمات Mo و W النانوية مع أحجام مختلفة وتراكيب مختلفة موضحة في الأشكال 3-6. في هذه الأشكال الخطوط المتصلة تشير إلى النتائج المحسوبة بواسطة المعادلات (14) و(15) ورموز النجم تشير إلى القيم العملية لجسيمات Mo و W النانوية [15].



الشكل 5. اعتماد معامل ينج الكتلي على حجم الجسيم لتكوين بلوري BCC و FCC لجسيمات Mo النانوية.

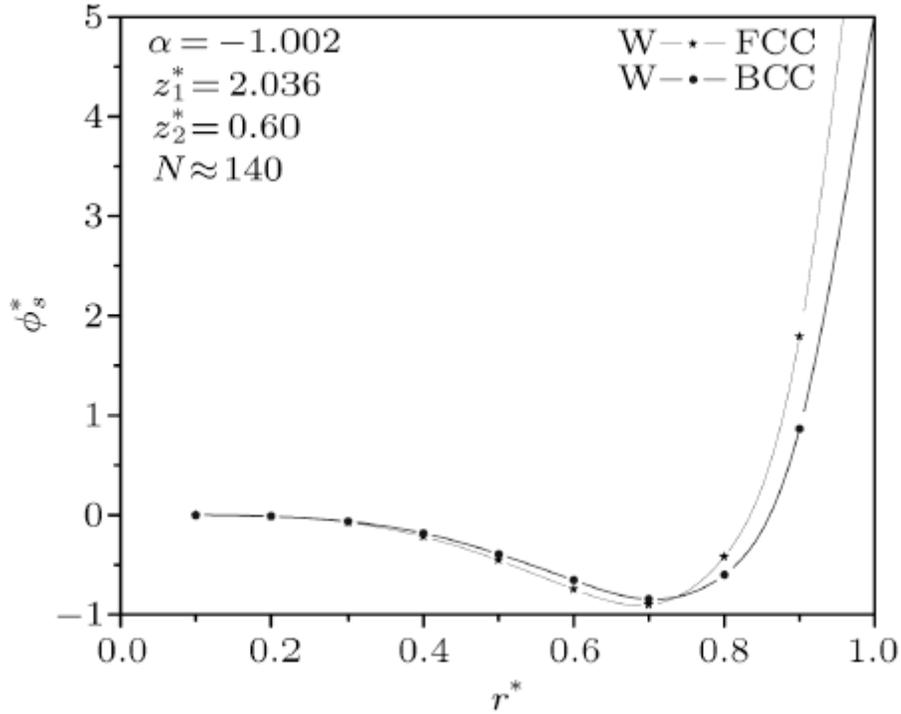


الشكل 6. اعتماد معامل ينج الكتلي على حجم الجسيم لتركيب بلوري BCC و FCC لجسيمات W النانوية.

من الأشكال نلاحظ ازدياد طاقة التماسك النسبية ومعامل ينج الكتلي للجسيمات النانوية عندما يزداد حجم الجسيمات، ويصل إلى قيم المناظرة للحالة المعدنية الكتلية عندما تكون N كبيرة جداً، وهذا يعكس عدم الاستقرار لكل الجسيمات النانوية الحرة بالمقارنة مع الحالة المعدنية الكتلية. على كل حال لكل الجسيمات النانوية المغمورة في مصفوفة، فإن الحالة قد تكون مختلفة وسوف نناقش هذه الحالة في بحث آخر منفصل. بصفة عامة، لوحظ أن طاقة التماسك للجسيمات النانوية تزداد أو تتناقص بالاعتماد على درجة التماسك بين الجسيمات النانوية والمصفوفة [16-17].

كذلك لاحظنا من الشكلين 3 و 4 أن التراكيب ذات كثافة تكديس عالية هي التراكيب المفضلة في المدة $15 < N < 2000$ ذرة، وهذا يعني أن الجسيمات النانوية تتعرض لتحول في الطور التركيبي من BCC إلى FCC. ولفهم تحولات الطور فإن علاقة أقل طاقة تماسك لكل ذرة مقابل حجم ذري عشوائي $r^* = (V_0/V)^{1/3}$ لجسيمات W النانوية بحجم 140 ذرة تقريباً في التراكيب البلورية BCC و FCC موضحة في الشكل 7.

من هذا الشكل لاحظنا ان التركيب FCC بتكدس عالي الكثافة هو المفضل عند $r^*=0.7$ والذي هو الحجم الذري عند الاتزان الحقيقي في هذا النموذج لجسيمات W النانوية عند حجم 140 ذرة تقريبا، وهذا يدعم فكرة ان الجسيمات النانوية تميل في الاغلب لتقليل مساحتها السطحية لتقلل الطاقة السطحية [18].



الشكل 7. تغير طاقة التماسك لكل ذرة مقابل الحجم الذري r^* لجسيمات W النانوية لحجم 140 ذرة تقريبا في التراكيب البلورية FCC و BCC.

في الختام، النتائج التي حصلنا عليها في هذه الدراسة تعتبر كدليل إضافي على ان تأثيرات الحجب وقوة الأجسام المتعددة مهمة لشرح الخواص التركيبية للجسيمات النانوية. كذلك النتائج المتوقعة متفقة مع القيم العملية المناظرة وتفتوح ان جهد الجسمين ثنائي القطب - ثنائي القطب بالإضافة إلى جهد الثلاثة أجسام والتي تشمل حدود ثنائي القطب - الثلاثي والقطب الرباعي - ثنائي القطب - ثنائي القطب يمكن اعتبارها مرشح ممكن لدراسة خواص العديد من الجسيمات النانوية المعدنية باعتبار نموذج اعتماد الحجم على معاملات الجهد.

تمت الترجمة في المركز العلمي للترجمة

7-3-2012

www.trgma.com