

МАШИНОСТРОЕНИЕ И АВТОМАТИЗАЦИЯ

УДК 621. 9. 620.186.415

Ю.Г. Кабалдин

ИНФОРМАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ СБОРКИ НАНОСТРУКТУР

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Рассмотрены принципы сборки наноструктур на основе информационной модели межэлектронного обменного взаимодействия атомов. Информационное содержание атомов и нанокластеров характеризует их фрактальная размерность. Информационная модель атомной сборки реализована на примере осаждения наноструктурных покрытий для режущего инструмента.

Ключевые слова: модель атома, атомная сборка, наноструктуры, режущий инструмент.

В настоящее время издан ряд монографий, посвященных технологиям синтеза, классификации и области применения функциональных наноматериалов. Как показывает анализ, получение наноматериалов проводится экспериментальным путем, так как отсутствует научно обоснованная теория наноструктурирования. Анализ состояния проблемы синтеза наноматериалов показывает, что в настоящее время разработка теоретических основ нанотехнологий базируется на фундаментальных положениях квантовой механики, квантовой физики и квантовой химии. Дело в том, что свойства веществ начинают нарушаться при размерах, составляющих десятые доли микрометра. За этой чертой начинается область, подчиняющаяся квантовым законам. В этой области уже не работают законы классических технологий. И с этой точки зрения нанотехнология является квантовой.

Таким образом, человечество вступает в новую область, в которой исчезнет грань между живой и неживой природой. В этой связи нанотехнологию еще называют молекулярным производством. Естественная молекулярная технология, собирая свои частицы по принципу от «нано» к «макро», или «снизу вверх», создала все многообразие живых трехмерных систем (белки, ДНК и т.д.). Само существование живых организмов, чьи формы, функционирование и эволюция определяется взаимодействием наноразмерных структур, является убедительным свидетельством успеха этого технологического процесса. Проблема синтеза новых наноматериалов чрезвычайно сложна и требует междисциплинарного подхода к ее решению [1].

В ряде работ отмечается, что свойства наноструктур определяются размером, формой и расположением всех атомов. *Однако в настоящее время не установлены механизмы формирования таких структур и не ясно, какое число атомов может составлять точно определенную молекулярную структуру. Исследования в области синтеза и применения наноструктурных систем в значительной степени сдерживаются тем, что до сих пор неизвестны механизмы межатомного взаимодействия и объединения атомов таких структур, что не позволяет выработать стратегию получения новых функциональных характеристик.* Можно предположить, что устойчивые размеры наносистем в значительной степени зависят от электронной структуры атомов, структуры его ядра в связи с расположением их в Периодической системе (ПС) Д.И. Менделеева. Следует отметить также, что еще на заре создания квантовой механики был предложен ряд моделей структуры атома. Наиболее при-

знанной и экспериментально подтвержденной на примере водородного атома является квантовая модель, разработанная Н. Бором и развита А. Зоммерфельдом, В. Паули и др. [2]. Однако до сих пор она также подвергается критике.

Большинство химических элементов ПС – это продукт нуклеосинтеза термоядерных реакций, осуществляемых в звездах [2]. Известно, что в процессе первичного нуклеосинтеза образовались элементы до лития. Звездный нуклеосинтез легких ядер (до углерода ^{16}C) происходил в недрах немассивных звезд путем тройной гелиевой реакции. Ядра до железа ^{56}Fe синтезировались за счет слияния более легких ядер в недрах уже массивных звезд, а синтез тяжелых и сверхтяжелых ядер шел путем нейтронного захвата в предсверхновых и при взрывах сверхновых.

Формирование атомов происходило в соответствии с законом кулоновского взаимодействия, т.е. заряд ядра определял число электронов, при этом в нём достигается минимум энергии. Распределение электронов по орбиталиям подчиняется принципу Паули и правилу Хунда. Между электронами и ядром действует кулоновское взаимодействие. Кулоновская потенциальная энергия обладает сферической симметрией, что означает зависимость энергии электрона только от расстояния до ядра (не зависит от угла). На основе симметрии обнаружен спин электрона и разработан принцип запрета Паули: если два электрона заняли орбиталь, то их спины должны быть парными, т.е. спин одного электрона должен быть направлен по часовой стрелке, а спин другого – против часовой стрелки. Поэтому такое свойство электрона, как спин и принцип Паули, имеют и корни симметрии. В этой связи в периодах, например, во втором от Li и далее с ростом числа электронов их симметрия к концу периода изменяется [2].

Известно, что зависимость атомного объема от порядкового номера химических элементов в ПС имеет периодический характер, т.е. у элементов Li, Na, K и т.д. наблюдается резкий рост атомного объема. Эти атомы являются первыми элементами во втором и последующих периодах. Известно также, что число элементов в периодах (начиная со второго) растёт. Каждый период заканчивается нейтральным атомом – это Ne, Ar и т.д. Кроме того, известно, что размер атомов (атомные радиусы) в зависимости от порядкового номера изменяются аналогично атомному объёму [1]. Поэтому можно говорить, что атомы Li, Na, K и т.д. «раздуты, они обладают низким значениями потенциала ионизации, сродством к кислороду и т.д.

Другим свойством ПС является то, что в ней содержатся парные периоды с 8, 8, 18, 18, 32 и 32 элементами, т.е. количество элементов в периодах симметрично возрастает. Поэтому различают малые и большие периоды. В целом структура ПС также основана на подходах симметрии.

В квантовой механике [2] при наличии большого числа взаимодействующих подсистем – атомов или молекул – имеют дело с состояниями, в которых можно определенно указать лишь вероятность P_i обнаружения того или иного состояния подсистемы, описываемого волновой функцией Ψ_i . Это положение составляет основу квантовой механики. Поэтому оно может быть взято за основу при разработке теории структурообразования наносистем. Можно констатировать, что наноматериалы (наносистемы) – это особое квантовое состояние вещества. Достаточно указать, что нанометровые размеры структур выявили ряд новых квантовых свойств (сверхпроводимость, сверхтекучесть и т.д.). Как отмечается в ряде работ, все природные материалы и системы построены из наночастиц. Именно в этом интервале наноразмеров на молекулярном уровне Природа «программирует» основные характеристики веществ, явлений и процессов. Однако, несмотря на то, что в настоящее время достигнуты впечатляющие успехи в этом направлении (достаточно указать на открытие фуллеренов, нанотрубок и т.д.), разработка теоретических основ атомной «сборки» таких материалов в настоящее время еще только начинается. Одним из первых идею организации наноструктур на примере гена ДНК дал Шредингер. Он исключил периодические структуры, так как они содержат малый объём информации, и ввёл понятие «апе-

риодического» кристалла. Это регулярная структура, содержащая значительно больше информации. Можно предположить, что информационные свойства наноструктур будут определять и их функциональные свойства.

Другим существенным отличием квантовой нанотехнологии от классической является также и то обстоятельство, что большое развитие получила вычислительная нанотехнология [3]. Это обусловлено тем, что квантовая природа нанотехнологии требует соответственно квантово-механического способа описания свойств веществ и проходящих с ними процессов и реакций. До последнего времени для атомных систем размером более нескольких ангстрем это было в значительной степени нереальным. В настоящее же время границы области квантовой теории существенно раздвинулись, прежде всего, в области квантового (волнового) хаоса. Так что сегодня квантово-механическому рассмотрению подвластны нанообъекты с размером до нескольких нм, состоящие из нескольких тысяч атомов.

Квантово-механические расчеты при объединении атомов можно проводить на основе волнового уравнения Э. Шрёдингера [3]. В общем случае, волновая функция Ψ может иметь сложную зависимость от времени, в частности, при сближении атомов или молекул. Поэтому решение уравнения Э. Шрёдингера оказывается сложным. Следовательно, необходима разработка новых подходов к теории структурообразования наносистем и квантово-механическим вычислениям.

В связи с изложенным особый интерес представляют исследования наноматериалов, обладающих рядом специфических и функциональных свойств. В частности, особое значение приобретает получение устойчивых металлических наноструктур при атомной сборке. В литературе этому вопросу посвящено ряд работ, в которых приводятся сложные квантово-механические расчеты, например, методом функционала электронной плотности, разработанного П. Хоэнбергом, В. Коном, и Л.Д. Шемом [3].

Однако на данный момент отсутствует общепризнанная теория межатомных взаимодействий при синтезе наносистем. Кратко рассмотрим ряд подходов к решению этой проблемы [1].

Как правило, наносистемы развиваются в несколько этапов. На первом этапе, когда в системе преобладают зарождающиеся и растущие наночастицы, к ней интенсивно подводят вещества и энергию. На втором же этапе, когда в системе доминирует агрегирование и совершенствование агрегатов, подвод веществ и энергии стремятся минимизировать. Наличие в наносистемах параллельных конкурирующих процессов приводит к тому, что изменение свойств системы может приобретать колебательный (периодический) характер.

Таким образом, изменение химических и физических свойств наночастиц металлов, образуемых из атомов, свидетельствует об их определенной периодичности в зависимости от числа атомов в наночастице и способа организации. По аналогии с Периодической таблицей Д. И. Менделеева предпринимаются попытки создать электронные и геометрические таблицы кластеров и наночастиц металлов. Так, для кластеров натрия, содержащих несколько тысяч атомов, также обнаружено явление периодичности в стабильности частиц. При наличии в частице более 1500 атомов Na преобладает геометрическая упаковка в закрытые оболочки, подобные инертным газам.

В ряде работ отмечено [1], что размер частиц, содержащих десятки тысяч атомов, может по-разному влиять на их активность. В первом случае определяющее значение имеет электронная структура каждого кластера, во втором – строение геометрической оболочки частицы. В реальных частицах электронная и геометрическая структуры связаны, и рассмотрение их влияния по отдельности не всегда возможно. С проблемой установления зависимости химических свойств от размера участвующих в реакции частиц тесно связано явление закономерностей образования наномасштабных твердых фаз в процессах кристаллизации. При взаимодействии атомов в газовой, жидкой фазе или при соударении с поверхностью вначале образуются небольшие кластеры, которые могут укрупняться и превра-

щаться в нанокристаллы. В жидкой фазе такие образования сопровождаются кристаллизацией и приводят к формированию твердой фазы [4].

В нанохимии частиц металлов [4], состоящих из небольшого числа атомов, отсутствует четкая граница между фазами и недостаточно развиты представления о том, сколько атомов того или иного элемента необходимо для самопроизвольного возникновения кристаллического зародыша, инициирующего образование наноструктуры.

Получение наночастиц путем объединения атомов позволяет рассматривать единичные атомы как нижнюю границу нанохимии. Верхняя граница определяется количеством атомов в кластере, при котором дальнейшее увеличение размера частицы не ведет к качественным изменениям химических свойств, и они аналогичны свойствам, например, компактного металла. Количество атомов, определяющих верхнюю границу, индивидуально для каждого элемента ПС. Принципиально важно, что структура наночастиц одних и тех же размеров, получаемых путем диспергирования и построения из атомов, может оказаться идентичной [4].

Методы квантово-механических расчетов [3] объединения атомов по Хартри-Фоку на основе одноэлектронных волновых функций Ψ с учетом обобществленного отталкивания электрона от всех остальных электронов, как и расчеты по Слейтеру с использованием констант экранирования заряда ядер остовными электронами, не привели к строгому обоснованию реальной последовательности заполнения электронных оболочек атомов, а следовательно, и к строгому квантово-механическому выводу в ПС. Поэтому необходимы новые подходы к структурообразованию и оценке устойчивости наноструктур в зависимости от числа в них атомов.

Почти двадцатилетнее практическое применение квантово-химических средств к проблемам нанотехнологии привело к естественному отбору «работающих» средств, среди которых первое место занимают программы, основанные на полуэмпирических методах квантовой химии [4]. Среди этих методов следует выделить методы самосогласованного расчета уравнений Хартри-Фока в однодетерминантном приближении, такие как MNDO, NDDO и NDDO-WF. В последние годы разработаны эффективные алгоритмы последовательных и параллельных кодов соответствующих программ, что и обуславливает возможность портретирования реальных объектов.

Несмотря на резко возросшее количество работ по компьютерному моделированию молекулярной динамики в исследованиях, посвященных атомно-структурным перестройкам в нанобразцах при механическом деформировании, все же их имеется сравнительно мало [1].

На наш взгляд, необходим глубокий анализ, прежде всего, структуры атома и в целом ПС Д.И. Менделеева. Как следует из проведенного анализа, в основе методов расчета и оценки устойчивости наносистем оказываются свойства изолированных атомов и межатомное взаимодействие. *Поэтому следует рассмотреть, прежде всего, роль эволюционного пути развития атома как формы организации материи в связи с расположением его в ПС Д.И. Менделеева. Следует отметить, что все квантово-механические расчеты структурообразования кластеров и наносистем не учитывают роль химического взаимодействия атомов при их взаимодействии, рассматриваемых в квантовой химии и базирующихся на работах Гайтлера-Лондона. Американский химик Л. Полинг выдвинул гипотезу, согласно которой химические связи образуются при перекрывании электронных облаков разных атомов. Но и она подвергается критике, так как является статической моделью.*

Как известно [2], энергетическое состояние электронов и изолированного атома определяется набором квантовых чисел. При сближении двух атомов электронная структура каждого из них преобразуется: дискретные уровни энергии сдвигаются, расщепляются и группируются. Часть электронов, находящихся на верхнем уровне может обобществляться, при этом они двигаются по объединенному объему двух атомов. Когда число атомов увеличивается, увеличивается и число обобществленных валентных электронов. Энергетический спектр обобществленных валентных электронов определяется размером и формой кластера и

взаимным расположением в нем атомов. Когда все состояния определенного уровня энергии заполняются электронами, образуется замкнутая электронная оболочка. Кластер представляет собой наиболее компактную систему с наибольшей энергией связи.

Предположение о полной делокализации валентных электронов атомов в кластере вполне согласуется с результатами расчетов, которые показали, что межатомные расстояния, соответствующие равновесным положениям атомов в металлических кластерах, например 3,5-4 ат. ед. для Na - Na, меньше среднего радиуса наружной 3s-оболочки изолированного атома Na (r) = 4,21 ат. ед. Это означает, что 3s-электроны натриевого кластера становятся общими для всех его атомов, так как их волновые функции перекрываются в значительной области. *При этом валентные электроны атомов щелочных металлов можно считать слабосвязанными по сравнению с электронами внутренних оболочек. Так, потенциалы ионизации наружной 3s- и следующей за ней внутренней 2p-оболочек атома Na равны соответственно 5,21 и 47,29 эВ. Таким образом, валентные электроны достаточно хорошо отделены от глубоких электронов и могут быть рассмотрены отдельно от них как частицы, распространяющиеся в потенциальном (электрическом) поле, созданном ядрами и внутренними электронами [1].*

В предельном случае рассматривается так называемая оптимизированная модель «желе» [3], в которой эта функция вообще не задается, а подбирается в соответствии с плотностью электронов при условии абсолютного минимума полной энергии. Для достижения этого условия оказалось необходимым, чтобы в каждой точке кластера электронная и ионная плотности были идентичны. Интересно отметить, что при этом прямое электростатическое взаимодействие между электронами полностью компенсируется электростатическим взаимодействием с положительным зарядом. *Таким образом, в рассмотренных моделях единственной силой, которая удерживает подобный кластер в устойчивом состоянии, является обменное взаимодействие между электронами. Такая модель, описывающая как бы идеальное «желе» положительно заряженного коа, дает нижние границы в определении энергетической структуры металлических кластеров. Она определила исключительно важную роль обменного взаимодействия между обобществленными электронами в стабильности кластеров.*

Однако, как указывалось ранее, положение атома в кластере определяется не только соседними атомами, но и всеми другими атомами, принимающими участие в его образовании, т.е. создается единое квантовое состояние и согласованность между отдельными частями (атомами) кластера. Иначе говоря, единое квантовое состояние с чередующимися минимумами и максимумами волновых функций является остовом, определяющим электронную оболочку кластера. Если перекрытие волновых функций мало, то и взаимодействие электронов слабое. Сильнее всего перекрываются волновые функции валентных электронов, в результате их взаимодействие оказывается высоким. Аналогичные представления развиваются в других работах. Приближение внешних электронов к положительно заряженному атомному ядру, «своему» или «чужому», вызывает уменьшение энергии системы. Сближение электронов с соседними ядрами также понижает потенциальную энергию, как и сближение со «своим» ядром. Кинетическая энергия электронов при этом не увеличивается, так как область распространения электронов не сужается. Поэтому полная энергия системы при сближении атомов уменьшается [2]. Уменьшение энергии системы при более плотной «упаковке» атомов означает появление сил притяжения между атомами. При таком сближении атомов потенциальные ямы поверху сливаются. Если в «области слияния» имеются занятые электронные уровни, то соответствующие электроны «обобществляются» и принадлежат всему кристаллу. Так возникает химическая связь. Следовательно, для появления такой связи нужно, чтобы в атоме присутствовали «слабосвязанные» электроны.

В основе квантовой химии находятся работы Гайтлера – Лондона [3]. Они впервые дали квантово-механическую трактовку химической связи при взаимодействии атомов. Согласно их теории, понятие обмена отражает перераспределение электронной плотности, получаемое в нулевом приближении теории возмущений по межэлектронному взаимодействию

вследствие учета перестановочной симметрии волновой функции молекулы. Суммарное электронное облако при сближении атомов усредняется в пространстве между ядрами, благодаря «наложению» орбиталей, что оказывает стягивающее действие на ядра атомов и тем самым «цементирует» молекулу. Такова картина в синглетном состоянии. В «триплете» уже переплетаются орбитали с различными знаками, что ослабляет плотность электронного облака между ядрами и приводит к отталкиванию атомов. Иными словами, понятие обмена отражает такие важные для понимания природы химической связи явления, как коллективизация (обобществление) электронов и перестройку электронных оболочек взаимодействующих атомов. С образованием новых электронных конфигураций квантовые скачки и коллапс волновых функций не происходят. Важно также отметить, что для объяснения природы химической связи не пришлось вводить никаких новых типов динамических взаимодействий. Между образующими молекулу частицами действуют только известные из классической физики электростатические (кулоновские) силы притяжения и отталкивания. Новизна, привнесенная квантовой механикой, состоит в ином, по сравнению с классикой, она отличается в способе описания движения частиц (о чем мы уже писали выше) и в учете особого вида «несиловых» взаимодействий.

Однако как в квантовой модели обобществления электронов Гайтлера-Лондона, так и в рассмотренной ранее модели «желе» [3] не указывается механизм образования «слабосвязанных» электронов, а также их обобществление, либо отталкивание. Именно это обстоятельство определяет устойчивость молекулы. Действительно, электроны и молекулы не могут при нормальных условиях отдавать или получать энергию в процессах столкновений с другими молекулами. Это, в свою очередь, заставляет думать, что минимальная внутренняя энергия, которую может получить молекула, слишком велика, чтобы быть переданной в процессе столкновений при обычных температурах. Это значит, что энергия должна квантоваться [1]. Поэтому энергия, теряемая электроном при столкновениях, может иметь ряд дискретных значений, если только при этом она меньше энергии ионизации молекулы, т.е. меньше кулоновской прочности связи с ядром. Можно считать установленным экспериментальным фактом, что у любого атома (или молекулы) определенного типа существует некоторое наиболее устойчивое состояние («нормальное состояние»), в котором атом обычно находится. Если же атом поглощает энергию либо от источника света, либо от налетающего электрона, либо каким-нибудь иным образом, то в результате он переходит в «возбужденное состояние». При этом поглощенная энергия образует ряд дискретных значений, которые сгущаются вблизи некоторого определенного значения – энергии ионизации I . Поглощение любой энергии, большей I , оказывается возможным, и в результате электрон может уходить из атома [2].

За начало отсчета энергии атома в основном и возбужденном состояниях обычно принимается энергия системы, состоящей из ионизованного атома и одного удаленного из него электрона, который покоится. Тогда энергия основного состояния и энергии возбужденных состояний получаются отрицательными. Энергия ионизации равна W_0 , а энергия перехода в первое возбужденное состояние, т.е. наименьшая энергия, которую способен поглотить атом в нормальном состоянии, равна $(I_0 - I_1)$.

Таким образом, приведенные рассуждения свидетельствуют о том, что «самосборка» наносистемы может быть достигнута только при взаимодействии «возбужденных» атомов, т.е. находящихся в ридберговском состоянии, чего не учитывают существующие модели сборки наноструктур. При взаимодействии атомов, их можно «возбудить», например, воздействуя сильным магнитным или электрическим полем. В этой связи следует отметить, что в настоящее время при синтезе наноструктур широко используется метод лазерного излучения.

Ридберговские атомы при большой величине главного квантового числа качественно отличаются от тех же атомов в основном состоянии. Они имеют макроскопические размеры, макроскопическое время жизни и экстремально слабую связь электрона в атоме. Слабосвязанный электрон в ридберговском атоме находится далеко от атомного ядра по сравнению с другими электронами, принадлежащими атому. Его поведение слабо зависит от электронного

строения атомного остатка. По существу, единственным параметром, определяющим такое поведение, является электрический заряд остова, в то время как такие характеристики, как орбитальный и спиновый моменты, практически не влияют на свойства слабосвязанного электрона [2].

Таким образом, во всех ридберговских атомах с данным квантовым числом слабосвязанный электрон находится в одном и том же состоянии, которое может рассматриваться как водородоподобное, а следовательно, для его описания правомочно использовать модель водородоподобного атома. Уместно отметить, что ридберговскими состояниями обладают практически все существующие в природе атомы и молекулы, если иметь в виду их высоковозбужденную часть спектра [2]. Этот вывод, по-видимому, может быть использован при расчете межатомного взаимодействия в наноструктурах [1].

Как уже отмечалось, расчет полной энергии электронов при объединении их атомов можно проводить на основе уравнения Э.Шрёдингера. Параметр E в нем определяет дискретные значения энергии в уровнях, т.е. в потенциальной яме. Расстояние между уровнями и энергия самого нижнего уровня зависит от локализации частицы (электрона). Расстояние между уровнями зависит от массы частицы, в частности, с ее ростом уровни сближаются. В общем случае волновая функция Ψ может иметь сложную зависимость от времени, в частности, при сближении атомов или молекул. Решение волновой функции оказывается сложным. Следует также отметить, что в приведенной выше модели обобществление слабосвязанных электронов проведено на примере Na, т.е. щелочного металла с низким потенциалом ионизации. Однако известно [2], что их состояние близко к хаотическому или ридберговскому состоянию.

В настоящее время нет аргументовных объяснений, каким образом тождественные частицы (электроны) взаимно запрещают друг другу занять одно и то же квантовое состояние на орбиталях атома. Речь идёт о законе запрета Паули. Следует отметить, что закон запрета Паули является краеугольным камнем при построении оболочечной модели атома. Сказанное обуславливает необходимость разработки новой модели структуры атома. Как известно, согласно антикаллапсирующему принципу Паули, на орбитали не может быть двух электронов с одинаковым квантовым состоянием (энергией – E). Поэтому электронную структуру атома можно представить как ансамбль волн де-Бройля с различными ν частотами, величина которых будет характеризоваться E ($E = h\nu$, где h – постоянная Планка). При этом электроны и ядра атомов обладают информацией. Потому можно предположить, что между электронами и ядрами атомов постоянно происходит обмен информацией. При взаимодействии атомов также будут происходить как резонансные процессы, так и обменные, включая нелокальный обмен информацией и взаимодействие, благодаря спиновым эффектам.

Возникает также вопрос, какими должны быть формы электронных структур у молекул или кластеров? Действительно ли законы Природы запрещают те или иные формы структур? По-видимому, важным элементом в динамике атомов и в понимании механизма образования кластеров оказывается фрактальный характер развития микромира и процессы самоорганизации. Наноструктуры фрактальны.

Структуру атома с ядром и вращающимися электронами (планетарная модель Резерфорда и Бора) следует рассматривать исходя из законов сохранения энергии. Дискретное (квантовое) движение электронов – это антиколлапсирующие явление, не позволяющее электрону упасть на ядро атома, что вызвало бы его редукцию. В результате информация об эволюции атома также исчезла бы. Ядерные силы превосходят в 10 миллиардов раз электромагнитные силы между ядром и электронами. Поэтому ядро и электронные оболочки в атоме следует рассматривать как подсистемы в связи с большим различием в силах взаимодействия. Количество электронов определяется зарядом ядра. По-видимому, структурной организации атома предшествовало хаотическое состояние системы «ядро–электроны». Дуализм электрона [2], т.е. его способность быть частицей и волной одновременно, близок к

явлению турбулентности: с одной стороны, она характеризуется хаотическим движением частиц, а с другой – проявляет свойства к структурной упорядоченности (вихрям), как результат самоорганизации с образованием структур различного порядка. В этой связи электроны в атоме находятся как в хаотическом состоянии (электронное облако), так и в организованном путем вращения по «разрешенным» орбитам, формируя оболочечную структуру. При формировании единого квантового состояния атома в процессе эволюции происходил рост степени заполнения электронных оболочек, и, прежде всего, валентными электронами на основе принципа минимума энергии. Воспроизводство самоподобных валентных электронных структур химических элементов в периодах ПС обусловлено самосохранением материи, энергии и квантовым характером развития микромира.

Анализ электронного строения атомов в связи с их расположением в ПС свидетельствует о том, что оно определено фундаментальными законами Природы (законами симметрии, сохранения энергии и т.д.). Поэтому как электроны, так и ядра атомов обладают информацией, т.е. памятью.

Нами указывалось, что решающую роль в формировании электронной структуры молекул и кластеров играет коллективное (когерентное) взаимодействие валентных электронов атомов в результате перекрытия волновых функций. *Коллективные эффекты являются характерной чертой поведения синергетических систем [1]. В связи с этим кластер следует рассматривать как диссипативную структуру, которая является результатом самоорганизации при структурных переходах и должна обладать фрактальными свойствами. Одно из важнейших свойств фракталов – они обладают информационными свойствами. По определению Б. Мандельброта, фрактал – структура, состоящая из частей, подобных целому.*

Как следует из изложенного, квантовое состояние системы – это самосогласованность ее отдельных частей (ядре и электронов). Согласно принципу неопределённости Гейзенберга [2], ни одна частица вещества не может иметь конкретное положение относительно других. Например, в атоме слабые (кулоновские) силы связи электронов с ядром позволяют им занимать различные пространственные положения (иметь различные траектории по Р.Фишеру) и суперпозиции. Нуклоны в ядре, напротив, имеют сильные связи. Поэтому согласованность и точно подобранные квантовые силы поддерживают устойчивость атома, его размер, а следовательно, и фрактальную размерность. Таким образом, фракталы – отражение квантовых свойств микромира, его эволюции и самоподобия.

Квантовый характер образования кластера – это также проявление коллективных свойств атомов при их объединении, поэтому устойчивость и самоподобие кластера можно выразить количественной характеристикой – фрактальной размерностью как диссипативной структуры. Образование диссипативной структуры – это неравновесный фазовый переход. Согласно Г. Хакену [5], при этом система сохраняет память (информацию), передающуюся в процессе структурных перестроек (эволюции). Указывалось, что электроны и ядро атома хранят информацию о происшедшей эволюции, т.е. квантовое состояние атома обладает памятью (информацией). Дело в том, что, согласно квантовой теории, электрон находится в состоянии суперпозиции, т.е. обладает мультистабильностью (имеет несколько устойчивых состояний и может быть осуществлён выбор одного из них) и способностью к запоминанию. Поэтому фрактальная размерность кластера также несёт информацию о его квантовом состоянии при его формировании и является как бы его информатором при структурных перестройках атомов в наносистему.

Синергетический анализ структуры атома позволил сформулировать также гипотезу о физической сущности эволюционной волновой функции электрона, которая заключается в том, чтобы в волновом виде передавать информацию (память) об эволюции, хранящуюся в электроне в виде дискретных энергетических состояниях. Иначе говоря, память об эволюции электрона закодирована в его энергетическом потенциале, информация о котором передаётся волнами де Бройля. Некоторая часть информации может передаваться

излучением фотонов. Важно отметить, что формой хранения информации об эволюции атома может являться его фрактальная размерность и фазовое пространство квантового состояния. Следовательно, квантовое состояние наносистемы характеризует не только энергия, но и конфигурация всей системы, её информация и фрактальность фазового пространства, которое может быть охарактеризовано фрактальной размерностью.

Таким образом, на основе принципов синергетики и квантового характера взаимодействия атомов при структурных перестройках можно сформулировать информационно-резонансную модель структурообразования наносистем (молекул, кластеров и т.д.). Суть её заключается в следующем. При объединении атомов и обобществлении валентных электронов происходит перекрытие волновых функций электронов атомов, в результате они обмениваются информацией и новые структуры (молекула, кластер) увеличивают информацию квантового состояния молекулы. Далее она передаётся следующей структуре при дальнейших переходах (т. е. уже при росте кластера), которые осуществляются с уменьшением энергии в наносистеме, переходом её в новое квантовое состояние, что обеспечивает дальнейший рост информации новой структуры и её устойчивость. При этом фрактальная размерность образующихся новых структур, а следовательно, информация в них возрастает. Параметром порядка выступает электрическое поле ядер и электронов, находящихся на внутренних оболочках, оно же и является информатором, подающим сигнал (информацию) для коллективного взаимодействия (обобществления) валентных электронов. Кластер формируется совместными усилиями всех атомов в результате обмена информацией между подсистемами (атомами, молекулами). Следует, однако, отметить, что при объединении атомов с различным квантовым состоянием, а также редукции (коллапсе) их волновых функций информация может теряться, и устойчивость наносистем снижается. Таким образом, в соответствие с квантовой теорией, наноструктуры следует рассматривать как спектр связанных квантовых состояний атомов, устойчивость которых характеризуется энергетическим уровнем и формой организации (фрактальной размерностью). Поэтому «магические числа» – это устойчивые состояния наноструктур.

Разработанный механизм межатомного и межэлектронного взаимодействия, позволил разработать модель образования фрактального нанорельефа нитридных покрытий [6–8] для режущего инструмента, формируемых при высокотемпературном осаждении на поверхность режущей пластины потока атомов на основе роста структур путём сборки из одиночных «возбужденных» атомов, диффундирующих по её поверхности. Причиной появления сложной фрактальной структуры покрытий, осаждаемых ионно-плазменным или магнетронным напылением, является периодическое образование устойчивых кластеров, где фрактальная граница получается в результате бесконечной борьбы за все уменьшающиеся участки самосборки «возбужденных» атомов. Фрактал достраивает сам себя в размерах до устойчивого состояния.

В связи с изложенным можно предполагать, что функциональные свойства наносистем (сверхпроводимость, твердость, прочность и т.д.) будут, на наш взгляд, в значительной степени определяться квантовым состоянием как изолированных атомов, так и новым квантовым состоянием наносистемы в целом.

Библиографический список

1. Кабалдин, Ю.Г. Синергетика. Информационные модели самосборки наносистем и наноструктурирования материалов при внешнем механическом воздействии / Ю.Г. Кабалдин. – Комсомольск-на-Амуре, КнАГТУ, 2007. – 186 с.
2. Боум, А. Квантовая механика: основы и приложения / А. Боум. – М.: Мир, 1990. – 720 с.
3. Степанов, Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия / Н.Ф. Степанов. – М.: Мир, 2001. – 519 с.
4. Сумм, Б.Д. Коллоидно-химические аспекты нанохимии – от Фарадея до Пригожина / Б.Д. Сумм, Н.И. Иванова // Вестник Московского университета. Сер. 2. Химия. 2001. Т. 42. № 5. С. 300–305.

5. **Хакен, Г.** Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным явлениям / Г. Хакен. – М.: Мир, 1991. – 240 с.
6. **Кабалдин, Ю.Г.** Структура, прочность и износостойкость композиционных материалов / Ю.Г. Кабалдин. – Владивосток: Дальнаука, 1996. – 183 с.
7. Повышение работоспособности режущего инструмента осаждением наноструктурных покрытий / Ю.Г. Кабалдин [и др.] // Вестник машиностроения. 2010. №3. С. 41–48.
8. **Кабалдин, Ю.Г.** Оптимизация составов и функциональных свойств наноструктурных покрытий для режущего инструмента методом функционала электронной плотности / Ю.Г. Кабалдин, С.В. Серый // Вестник машиностроения. 2011. № 5. С. 32–36.

*Дата поступления
в редакцию 25.06.2013*

Yu. G.Kabaldin

INFORMATION MODEL BUILD NANOSTRUCTURES

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alexeev

Objective: To develop a model of the atomic assembly of nanostructured states of tool materials, using the principles of quantum mechanics.

Methods: The principles of the assembly of nanostructures based on information model of the electron-electron exchange interaction between atoms. The information content of atoms and nanoclusters characterize their fractal dimension. Computer model of the atomic assembly is implemented by the example of deposition of nanostructured coatings for cutting tools.

Key words: atomic model, atomic assembly, nanostructures, cutting tool.