

НАВЕДЕННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ МЕЖДУ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИМИ ЧАСТИЦАМИ НА НАНОУРОВНЕ

Леонид И. Гречихин ^а, Светлана Д. Латушкина ^б,
Виктория М. Комаровская ^в

^а Белорусская государственная академия авиации, Минск,
Республика Беларусь, e-mail: Gretchihin@yandex.ru

^б Физико-технический институт НАН Беларуси, Минск,
Республика Беларусь, e-mail: phti@tut.by

^в Белорусский национальный технический университет,
Минск, Республика Беларусь, e-mail: maratovna81@tut.by

DOI: 10.5937/vojtehg63-7721

ОБЛАСТЬ: материаловедение на нанорурне
ВИД СТАТЬИ: оригинальная научная статья
ЯЗЫК СТАТЬИ: русский

Краткое содержание:

Обосновано наличие потенциального барьера на границе раздела взаимодействующих частиц. Формирование потенциального барьера в зоне контакта существенно увеличивает энергию связи бинарного взаимодействия. Показано, какую совокупность разных взаимодействий необходимо учитывать при установлении энергии бинарной связи.

Ключевые слова: бинарное взаимодействие, потенциальный барьер, энергия связи.

Введение

Развитие современного материаловедения основано на последних достижениях нанотехнологий. Это создание новых композиционных материалов на нанорурне, обоснование нанотрибологии и др. Совершенствование нанотехнологий основано на четком описании всех возможных связей между атомами, молекулами, кластерами с анализом разных агрегатных состояний. Во всех этих случаях решающую роль выполняют бинарные взаимодействия. Бинарное взаимодействие является основным механизмом в процессе формирования простых и сложных молекул, а также разных кластерных структур. В настоящее время разработано большое количество квантово-механических методов расчета

энергий связи в сложных молекулярных структурах. Чтобы получить хорошее совпадение с экспериментальными данными, используют разные аппроксимации. При этом применяют сложный потенциал взаимодействия или усложняют вид волновой функции, что в конечном итоге не позволяет применять разработанные модели для анализа широкого класса взаимодействующих частиц. Даже для более простых взаимодействующих частиц, как атомы водорода при образовании молекулы водорода получали хорошее совпадение энергии диссоциации путем конструирования волновой функции с большим количеством поправок.

Молекула водорода интенсивно изучалась в 30-е годы прошлого столетия. Обзор этих работ дан в работе (Гомбаш, 1952). Приведем итоговую таблицу, взятую из этой работы (Табл. 1).

Таблица 1 – Методы расчета и результаты определения равновесного расстояния, энергии диссоциации и эффективного заряда молекулы водорода

Tabela 1 – Metode proračuna i rezultati određivanja izjednačenog rastojanja, energije disocijacije i efektivnog punjenja molekula vodonika

Table 1 – Calculation methods and the results of determining equalized distance, dissociation energy and efficient hydrogen molecule charge

Метод	R_e , Å	D , эВ	Z'
1. Гайтлера-Лондона	0,80	3,2	-
2. Гунда-Милликена	0,73	3,47	1,193
3. Хиллерааса	-	3,6	-
4. Ванга	0,76	3,76	1,166
5. Вейнбаума (1)	0,77	4,0	1,193
Вейнбаума (2)	0,77	4,1	1,190
6. Розена с учетом поляризации	0,75	4,02	1,19
7. Джемса и Кулиджа			
С учетом 5-ти членов		4,507	
С учетом 11-ти членов		4,685	
С учетом 13-ти членов	0,74	4,698	
С учетом поправок	0,74	4,722 ± 0,013	
Экспериментальное значение	0,7395	4,73 ± 0,04	

В методе Гайтлера-Лондона использовалась обычная теория возмущений в квантовой механике для определения ковалентной связи без учета взаимодействия электронов и возникновения ионной связи вследствие поляризации молекулы водорода. Поэтому было получено малое значение энергии диссоциации.

Слэтер учел взаимодействие спинов электронов и получил практически мало отличающееся значение от того, что было получено Гайтлером и Лондоном.

В методе Гунда-Милликена учтено, что уравнение Шредингера распадается на два уравнения для двух электронов. При этом каждый электрон находится в основном состоянии ионизированной мо-

лекулы водорода. В этом методе не учтено взаимодействие электронов и поляризация электронных орбит обоих электронов. Поэтому также получено малое значение энергии диссоциации.

В методе Хиллерааса в результирующей волновой функции учтены все возможные возбужденные состояния молекулы водорода, что также не представляет особого интереса.

В методе Ванга была применена результирующая волновая функция с учетом перестановки электронов. Получено несколько лучшее значение, но по-прежнему заметно отличается от экспериментально полученной величины.

В методе Розена дополнительно была учтена поляризация вследствие обобщения валентных электронов исходных атомов водорода. Учет явления поляризации был произведен вследствие пребывания обоих электронов у одного из ядер атомов водорода без четкого определения вероятности возникновения такого состояния. Кроме этого эффект взаимодействия электронов учтен только при их расталкивании без притяжения вследствие обмена.

В методе Вейнбаума учтено, что молекула водорода может пребывать в гомеоплярном и гетерополярном состояниях. Коэффициент связи в волновой функции между этими состояниями рассматривался как вариационный параметр, который должен находиться между 0 и 1. В частности он был определен как 0,256. Такая достаточно грубая вариационная теория не дала желаемого результата.

В методе Джемса и Кулиджа волновая функция представлялась в виде ряда с вариационными коэффициентами. В результате, используя 13 членов в общей волновой функции, было получено значение, совпадающее с экспериментально измеренным. На этом была поставлена точка и больше к молекуле водорода не возвращались.

Во всех методах эффективный заряд ядер атомов водорода Z рассматривался как вариационный параметр, который определялся из минимума энергии взаимодействия. Этот параметр оказался больше единице, а это противоречит закону сохранения заряда.

Вариационная математическая модель Джемса и Кулиджа не отражает физическое состояние молекулы водорода. Чтобы результирующая волновая функция для двух валентных электронов состояла из 13 членов, это просто не возможно. Сам же вариационный метод является больше математической, чем физической моделью. В этой связи возникла **цель**: создать адекватную квантово-механическую модель с учетом взаимной поляризации при обмене электронами, которая позволила бы получать правильный результат без применения вариационного метода и обосновывать двухчастичную квантовую механику анализа формирования разных простых и сложных молекулярных систем, а также кластерных образований в разных агрегатных состояниях

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

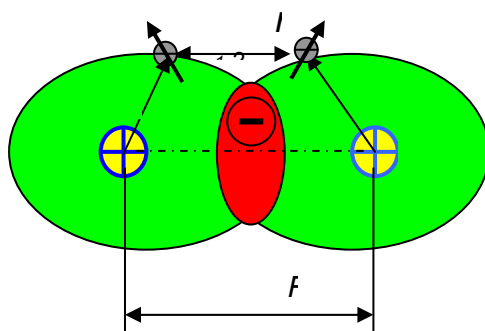
- правильно представлять волновую функцию двухчастичной квантово-механической модели;
- уточнить метод Гайтлера-Лондона применительно к двухчастичной квантово-механической модели;
- разработать четкую теорию возникновения ионной связи;
- обосновать причину возникновения отрицательного потенциального барьера вследствие обмена валентными электронами;
- произвести расчет энергии диссоциации молекулы водорода и сравнить с экспериментальными данными;
- наметить пути совершенствования модели с целью ее применения к более сложным квантово-механическим системам.

Последовательно рассмотрим поставленные задачи.

Волновая функция двухчастичной квантово-механической системы

Схематично бинарное взаимодействие двух независимых частиц А и В, а также наиболее вероятная траектория движения валентных электронов приведены на фиг. 1. Результирующая волновая функция бинарного взаимодействия с учетом обмена валентными электронами, которая определяет силы притяжения, а это симметричная волновая функция, которая представляется следующим образом:

$$\Phi_{a,b} = \Psi_{a,1}\Psi_{b,2} + \Psi_{a,2}\Psi_{b,1}. \quad (1)$$



Фигура 1 – Схема бинарного взаимодействия
Slika 1 – Šema binarne interakcije
Figure 1 – Binary interaction scheme

Здесь волновые функции применительно к отдельным электронам сложной атомной или молекулярной системе представляются в виде

$$\Psi_{A(B)} = \left(\frac{Z^*}{\pi n^*} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{Z^*}{n^*} r_{a(b)} \right] \quad (2)$$

где Z^* и n^* - соответственно эффективный заряд и эффективное главное квантовое число для валентных электронов взаимодействующих частиц A и B . Применительно к молекуле водорода $Z^* = 1$ и $n^* = 1$. Для атомов водорода радиусы $r_a = r_b = 0,529 \text{ \AA}$, а межъядерное расстояние $R_{a,b} = R_e = 0,7395 \text{ \AA}$. Эти данные получены из анализа спектра излучения молекулы водорода и являются достаточно надежными.

Применяя волновую функцию (2) произведем расчет ковалентной связи атомов в самом простом случае, когда образуется молекула водорода.

Двухчастичная квантово-механическая модель

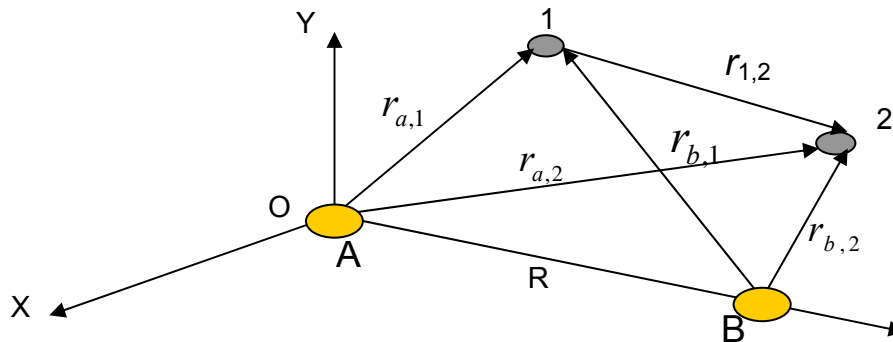
Для волновой функции (1) стационарное уравнение Шредингера в нерелятивистском приближении принимает вид:

$$\hat{H}' \Phi_{a,b} = E_{a,b} \Phi_{a,b}, \quad (3)$$

где \hat{H}' - возмущающий член общего гамильтониана двух взаимодействующих центров A и B ; $E_{a,b}$ - энергия бинарного взаимодействия.

Возмущающий член общего гамильтониана в координатах Хиллера-аса представляется в виде следующего оператора:

$$\hat{H}' = -\frac{1}{r_{a,2}} - \frac{1}{r_{b,1}} + \frac{1}{r_{1,2}} + \frac{1}{R_{a,b}}. \quad (4)$$



Фигура 2 – Общая схема взаимодействия одной пары электронов частиц A и B в бинарном приближении

Slika 2 – Šema interakcije jednog para čestica elektrona A i B u binarnom približavanju
Figure 2 – Scheme of the interaction of one pair of electron particles A and B in binary bonding

Здесь $R_{a,b}$ – расстояние между ядрами взаимодействующих частиц A и B.

На фиг. 2 приведена схема бинарного взаимодействия и соответствующие обозначения.

Решая уравнение (3) для симметричной волновой функции, выраженной в соответствии с (1) и с учетом (4), получаем для бинарного взаимодействия:

$$W_{св}^{бин} = \frac{H_{1,1} + H_{1,2}}{1 + S}. \quad (5)$$

В свою очередь

$H_{1,1} = \iint \Psi_a^*(r_{a,1}) \Psi_b^*(r_{b,2}) \hat{H}' \Psi_a(r_{a,1}) \Psi_b(r_{b,2}) d\xi_1 d\xi_2$ – кулоновский интеграл;

$H_{1,2} = \iint \Psi_a^*(r_{a,2}) \Psi_b^*(r_{b,1}) \hat{H}' \Psi_a(r_{a,2}) \Psi_b(r_{b,1}) d\xi_1 d\xi_2$ – обменный интеграл и

$S = \iint \Psi_a^*(r_{a,1}) \Psi_b^*(r_{b,2}) \Psi_a(r_{a,2}) \Psi_b(r_{b,1}) d\xi_1 d\xi_2$ – интеграл перекрытия.

При вычислениях интегралов кулоновского и обменного, а также интеграла перекрытия использовались биполярные интегралы, значения которых приведены в работе (Гомбаш П. 1952).

Энергию отталкивания электронов

$$\iint \Psi_a^*(r_{a,1}) \Psi_b^*(r_{b,2}) \frac{1}{r_{1,2}} \Psi_a(r_{a,2}) \Psi_b(r_{b,1}) d\xi_1 d\xi_2, \quad (6)$$

легко вычислить, если обратное расстояние $1/r_{1,2}$ разложить в ряд по обратным степеням расстояния между взаимодействующими центрами:

$$\frac{1}{r_{1,2}} = \frac{1}{|\vec{R} - (\vec{r}_a - \vec{r}_b)|} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} r_{a,1}^{\lambda} R_{a,b}^{-(\lambda+1)} P_{\lambda}(\cos \theta), \quad (7)$$

где $P_{\lambda}(\cos \theta)$ – шаровая функция Лежандра. Поскольку $|\vec{R}_{a,b}|$ достаточно велико, то в (7) можно ограничиться двумя членами разложения, т.е., вторым приближением.

Выражение (5) позволяет получать ковалентную связь до равновесного расстояния между взаимодействующими частицами. При расстояниях, меньших равновесного, для описания бинарного взаимодействия используют разные аппроксимации. Наиболее хорошее совпадение при малых значениях расстояний между ядрами атомарных частиц позволяет получать аппроксимация Леннарда - Джонса вида:

$$U(r) = -\frac{a}{r^6} + \frac{b}{r^{12}}, \quad (8)$$

Постоянные a и b в потенциале Леннарда - Джонса определяются по значению энергии связи и равенству нулю первой производной от выражения (8) на равновесном расстоянии, т.е.,

$$a = 2E_{св} R_{a,b}^6; \quad b = E_{св} R_{a,b}^{12}. \quad (9)$$

Конкретный расчет ковалентной энергии связи атомов в молекуле водорода приведен в табл. 2. Полученное значение ковалентной связи совпадает с выполненными расчетами по методу Гайтлера-Лондона (табл. 1). Это вполне понятно, так как расчет ковалентной связи производился в соответствии с этим методом.

Таблица 2 – Величина ковалентной, ионной и наведенной связи при обменном взаимодействии, эВ

Табела 2 – Vrednost kovalentne, jonske i indukovane veze pri uzajamnoj interakciji eV
Table 2 – Value of the covalent, ionic and induction bonding at the mutual interaction eV

Молекула	Параметры					
	$R_{a,b}, \text{Å}$	$E_{ков.}$	$E_{ион.}$	$E_{взаим}$	$E_{св.,рез.}$	$E_{св.,экс.}$
H ₂	0,7395	3,19	0,598	0,911	4,70	4,73±0,04

Интеграл перекрытия S следует рассматривать, как вероятность перехода валентного электрона от одной взаимодействующей частицы к другой.

Ионная связь

Ионная связь определяется вероятностью пребывания обоих валентных электронов вблизи одного из частиц. В этом случае возникает поляризация молекулы, которая учитывалась Розеном. Величину ионной связи Лайнус Полинг (Полинг Л., Полинг П. 1978.) предложил определять чисто эмпирически по величине относительной электроотрицательности, полагая для фтора электроотрицательность равной 4. Для некоторых молекул такой подход давал правильный результат. Например, для молекулы водорода электроотрицательность равна нулю, а, следовательно, и ионная связь равна нулю. На самом деле пребывание двух электронов вблизи одного из атомов вполне реальное событие и ионная связь не должна быть равна нулю.

Следующий шаг в этом направлении был сделан в работе (Коллсон Ч. 1965). Доля ионной связи определялась по величине дипольного электрического момента результирующего силового центра молекулы. В случае молекулы водорода дипольный электрический момент отсутствует. Поэтому ионная связь равна нулю, а это не так.

Определить долю ионной связи можно более простым способом, а именно по времени пребывания валентных электронов вблизи взаимодействующих частиц. Время пребывания валентного электрона вблизи одного из ядер равно:

$$\tau = \frac{2\pi r_n}{v_n}, \quad (10)$$

где r_n и v_n – соответственно радиус n -й орбиты вращения валентного электрона и его скорость вращения на этой орбите. Оба эти параметра определяются из закона сохранения момента импульса. В соответствии с моделью атома по Бору-Зоммерфельду скорость движения валентного электрона в заданном энергетическом состоянии ϵ_k из закона сохранения момента импульса и равенства центробежной и центростремительной сил выражается следующим образом:

$$v_k = \begin{cases} \frac{Z^* e^2}{2\epsilon_0 h n^*} & \text{при } l = 0; \\ \frac{Z^* e^2}{2\epsilon_0 h \sqrt{l(l+1)}} & \text{при } l \geq 1; \end{cases}, \quad (11)$$

где n^* – эффективное главное квантовое число; e – заряд электрона; h – постоянная Планка; ϵ_0 – диэлектрическая

проницаемость вакуума, Z^* – эффективный заряд ядра атома. Квантово-механическая зависимость от азимутального квантового числа l в виде корня квадратного $\sqrt{l(l+1)}$ связана с тем, что электрон в состоянии с $l \geq 1$ в перигее проникает внутрь электронного остова и эффективный заряд ядра возрастает. В свою очередь

$$n^* = \sqrt{\frac{E_H}{\theta_i - \varepsilon_k}}; \quad Z^* = \gamma - S/2, \quad (12)$$

где E_H – энергия ионизации атома водорода, θ_i – энергия ионизации взаимодействующих атомов; ε_k – рассматриваемое энергетическое состояние; S – интеграл перекрытия и $\gamma = 4\pi\varepsilon_0 \langle r \rangle \theta_i / e^2$ – эффективный заряд изолированного нейтрального атома, определяемый по значению энергии ионизации θ_i и среднего значения радиуса атома $\langle r \rangle$.

Если τ_1 и τ_2 время пребывания валентного электрона соответственно вблизи первой и второй взаимодействующих частиц, то вероятность нахождения валентного электрона вблизи первой частицы:

$$P_1 = \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} \left(1 - \frac{\tau_2}{\tau_1 + \tau_2} \right), \quad (13)$$

а вблизи второй частицы:

$$P_2 = \frac{\tau_2}{\tau_1 + \tau_2} \left(1 - \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} \right). \quad (14)$$

Как в первом, так и во втором случаях возникает ионная связь. В результате вероятность возникновения доли ионной связи равна сумме этих вероятностей:

$$\Theta = P_1 + P_2. \quad (15)$$

Все одинаковые частицы в соответствии с (13) – (15), не зависимо от их строения, на близких расстояниях при бинарном взаимодействии с вероятностью 0,5 могут пребывать друг относительно друга в виде отрицательных ионов. Однако при этом следует учитывать вероятность обмена валентными электронами в процессе взаимодействия, которая определяется величиной интеграла перекрытия. По-

этому следует рассматривать совместную вероятность следующего события: валентный электрон с вероятностью P_1 находится вблизи атома А и не переходит к атому В с вероятностью $1 - S$, а валентный электрон с вероятностью P_2 пребывает вблизи атома В и переходит к атому А с вероятностью S . Учитывая идентичность атомов и неразличимость электронов, ионная связь для молекулы водорода

$$E_{\text{ион.}} = \frac{2P_1P_2S(1-S)e^2}{4\pi\epsilon_0R_{a,b}}. \quad (16)$$

Конкретный расчет, выполненный по (16) для молекулы водорода, приведен в табл. 2. Результирующее значение совместно с ковалентной связью дает значение 3,79 эВ. Результат получается близким к значению, которое было получено Розеном (табл. 1).

Наведенная энергия связи¹⁾

Кроме этого следует учитывать следующее обстоятельство. Электрон, переходя от одного атома к другому, частично отражается и задерживается на границе раздела взаимодействующих атомов. Вероятность такого события равна произведению $P_1(1-S)$. Одновременно и второй электрон, отражается от границы раздела с вероятностью $P_2(1-S)$. Возникшее облако электронной плотности на границе раздела создает отрицательный барьер, который взаимодействует с ионным остовом первой и второй частиц. В результате возникает дополнительная энергия связи

$$E_{\text{взаим.}} = \frac{2P_1P_2(1-S)^2e^2}{4\pi\epsilon_00,5R_{a,b}}(1-D) \quad (17)$$

где D – коэффициент прозрачности потенциального барьера.

Расчет по (17) приведен в табл. 2. Результирующая энергия связи является энергией диссоциации и совпадает с экспериментальным значением. Возникает вопрос, как разработанную модель описания бинарного взаимодействия применить не только к молекуле водорода, но и к другим более сложным молекулярным и атомным системам.

¹⁾ Этот вид связи был уточнен авторами и позволил создать физическую модель формирования бинарного взаимодействия, а на примере молекулы водорода показать эффективность предложенной модели.

Описания сложных молекулярных систем

Двухчастичная квантовая механика применительно к сложным молекулярным системам разработана и описана в работах (Гречихин Л. И. 2004) и (Гречихин Л. И. 2008), а для конденсированных систем впервые применена в работе (Гречихин Л. И., Василенко А. Г., Спиридонов Н. В. и др. 1990). В основу предложенной физической модели положены следующие принципы:

1. В каждом бинарном взаимодействии учитываются ковалентные связи:

а) валентных электронов первой кратности ионизации друг с другом; б) электронов второй кратности ионизации с валентным электроном первой кратности ионизации, электронов третьей кратности ионизации с первой и второй кратностью ионизации и с) электронов второй и третьей кратности ионизации друг с другом и т.д.

Волновые функции взаимодействующих частиц определяются по формулам (1) и (2). Для расстояний меньше равновесного для атомов применяется аппроксимация Леннарда-Джонсона, а для молекулярных систем – аппроксимация Морза.

2. Доля ионной связи для взаимодействующих частиц определяется по времени пребывания валентного электрона вблизи каждой частицы в бинарном взаимодействии с учетом их обобщения.

3. Учитывается образование отрицательного потенциального барьера между взаимодействующими частицами, который в ряде случаев в основном определяет энергию бинарной связи.

4. Расчет электрон-дипольной и диполь-дипольной связей выполняется с учетом присутствия встроенных электрических моментов в частицах ионного остова.

Полученные результаты определения энергий бинарной связи с учетом образования отрицательного потенциального барьера между взаимодействующими частицами позволили не только правильно обосновать формирование сложных молекулярных систем, но и получить структуру многих кластерных образований в разных агрегатных состояниях. Для нанопленок установлено новое агрегатное состояние в виде плотно упакованной структуры без наличия межкластерных пустот (Гречихин Л. И. 2012).

Выводы

Проведенные исследования формирования бинарной связи позволили на примере молекулы водорода, как достаточно известной структуры, установить наличие отрицательного потенциального барьера на границе раздела взаимодействующих частиц. Наличие такого

потенциального барьера существенно увеличивает энергию связи бинарного взаимодействия. Показано, как правильно учитывать долю ионной связи. Разработанная двухчастичная квантовая механика успешно применена для получения энергий связи бинарного взаимодействия многих сложных молекулярных систем и позволила правильно описать кластерную структуру разных конденсированных сред.

Литература / Literature

Гомбаш, П. 1952. Проблема многих частиц в квантовой механике. (Теория и методы решения). Москва: Мир., стр.279. (Gombas, P.1952. Theory and method solution of many particle problems in Quantum mechanics. Mir, p.270).

Гречихин, Л.И. 2004. *Физика наночастиц и нанотехнологий. Общие основы, механические, тепловые и эмиссионные свойства.* Минск.: УП "Технопринт", стр.399. (Gretchikhin, L.I. 2004. Physics of nanoparticles and nanotechnologicals. General foundations, mechanical, thermal and emission properties. Mn.: UP "Technoprint", p.399).

Гречихин, Л.И. 2008. *Наночастицы и нанотехнологии.* Минск: ИООО «Право и экономика», стр.406. (Gretchikhin, L.I. 2008. Nanoparticles and nanotechnologicals. Mn.: ИООО "Law and Economics", p.406).

Гречихин, Л.И., Василенко, А.Г., Спиридонов, Н.В., & и др., 1990. Повышение адгезионной связи оплавленных лазерным излучением газотермических покрытий. *Физика и химия обработки материалов*, 3, стр.76-81. (Gretchikhin, L.I., Vasilenko, A.G., Spiridonov, N.V. and others. 1999. Increase of adhesives connection gas-thermal surface ways and means of the laser radiation. /Physics and Chemistry process, 3, pp.76-81).

Гречихин, Л.И. 2012. Плотнупакованное состояние – основа нанотехнологий. У: Машиностроение и техносфера XXI века //Сб. трудов XIX международной научно-технической конференции в г. Севастополе 17-22 сентября 2012 г. в 3-х томах. Донецк: ДонНТУ., стр.195-197 (Gretchikhin, L.I., 2012. The thickness condition – basis of nanotechnologicals. In: Mechanical engineering and technical region XXI century //Proceedings of XIX International Scientific Technical Conference in Sevastopol 17-22 September 2012 j. in 3 volumes. Donetsk: DonNTU. V. 1, pp.195-197).

Коулсон, Ч. 1965. *Валентность.* Москва: Мир., стр.426. (Coulson, C. 1965. Valence. M.: "Mir", p.426).

Полинг, Л., & Полинг, П. 1978. *Химия.* Москва.: Мир., стр.683. (Poling, L., & Poling, P.1978. Chemistry. M.: Mir, p.683).

INDUKOVANI POTENCIJAL IZMEĐU INTERAKTIVNIH ČESTICA U NANO NIVOIMA

Leonid I. Grečihin^a, *Svetlana D. Latuškina*^b, *Viktorija M. Komarovskaja*^c

^a Beloruska državna vazduhoplovna akademija, Minsk, Republika Belorusija,

^b Fakultet fizike i tehničkih nauka NAN Belorusije, Minsk, Republika Belorusija,

^c Beloruski nacionalni tehnički univerzitet, Minsk, Republika Belorusija

OBLAST: nanomaterijali

VRSTA ČLANKA: originalni naučni članak

JEZIK ČLANKA: ruski

Sažetak:

U članku je objašnjena pojava stvaranja potencijalne barijere na pragovima razdvajanja čestica u interakciji. Stvaranje potencijalne barijere u kontaktnoj zoni znatno povećava vezanu energiju binarne interakcije. U radu su navedene različite vrste interakcija relevantne za stvaranje energije binarne veze.

Ključne reči: *binarna interakcija, potencijalna barijera, vezana energija.*

INDUCED POTENTIAL BETWEEN INTERACTING PARTICLES
AT NANOLEVELS

Leonid I. Gretchikhin^a, Svetlana D. Latushkina^b, Viktoriya M. Kamarouskaya^c

^a Belarusian State Academy of Aviation, Minsk, Republic of Belarus,

^b Physico-Technical Institute, National Academy of Sciences, Minsk,
Republic of Belarus

^c Belarusian National Technical University, Minsk, Republic of Belarus

FIELD: Nanomaterials

ARTICLE TYPE: Original Scientific Paper

ARTICLE LANGUAGE: Russian

Summary:

One has substantiated the existence of a potential barrier at the interface of interacting particles. The formation of the potential barrier in the contact area significantly increases the binding energy of the binary interaction. It has been shown which sets of different interactions should be taken into account when establishing the energy of binary binding.

Key words: *binary interaction, potential barrier, binding energy.*

Datum prijema članka / Paper received on / Дата получения работы: 12. 02. 2015.

Datum dostavljanja ispravki rukopisa / Manuscript corrections submitted on / Дата получения исправленной версии работы: 14. 03. 2015.

Datum konačnog prihvatanja članka za objavljivanje / Paper accepted for publishing on / Дата окончательного согласования работы: 16. 03. 2015.