

QUANTUM TOPOLOGY AND COMPUTER SIMULATION OF CONFINED HYDROGEN ATOM INSIDE SPHERICAL-FORM GAP

S.A.Beznosyuk*, D.A.Mezentsev, M.S.Zhukovsky, T.M.Zhukovsky

Department of Physical Chemistry, Altai State University,
66, Dimitrov St., 656099, Barnaul, Russian Federation
Department of General Physics, Altai State Technical University,
46, Lenin St., 656099, Barnaul, Russian Federation

1.Introduction

It is well known that nanotechnology is based on such fundamental phenomena as strict confinement and transport of quantum-mechanical blocks of atoms inside the low-dimensional structures of the condensed state [1*]. With this end in view, in a present communication we argue justification that nanostructural behavior must be studied by using only some specific many-body confinement interparticle potentials. These potentials are different from those, which were calculated for investigations of near equilibrium properties of ideal crystals and infinite molecules. Computer simulations of self-assembling confinement of H-atom in nanostructures illustrate theory. Using of exact computer modeling some theoretical tests of quantum topological types of hydrogen atom confinement mechanics are made.

2.Results and discussion

By way of the quantum topological density approach and the approximating density functional method we have elaborated some exact variation approach to computer simulation of the confinement density of hydrogen atom. Those have been calculated for compact hydrogen atom confined inside spherical-form space block. We have shown that such kind of density have been described with finite wave functions.

2.1 B-splines with degenerated nodes

There are many possibilities for the "basis" functions choices. But, for the numerical simulation of the systems, witch localized on compact carriers the finite-elements function is natural choice. The B-splines are relevant to such function's class. Introducing B-splines with degenerated nodes is

natural method witch allow us correctly describe electron density distribution near atomic nuclei - casp points.

2.2 Single-particle electronic state

We have to find electron density distribution, satisfying the minimum of system energy requirements in external electrostatic field, localized on compact carrier:

$$E = \int |\varphi|^2 - \int V_{nucl} |\varphi|^2 + E_{bnd} \quad (1)$$

φ - single-particle electronic state

E_{bnd} - energy contribution, stipulated by the system boundary.

For resolving task (1) we use algorithm described in [2]. Denoting "basis" functions as $b_\alpha(\vec{r})$, we expand single-particle wave functions through:

$$\varphi = \sum_\alpha b_\alpha(\vec{r}) C_\alpha \quad (2)$$

$$O_{\alpha,\beta} = \int b_\alpha^*(\vec{r}) b_\beta(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3)$$

$$G_{\alpha,\beta} = \int \nabla b_\alpha^*(\vec{r}) \nabla b_\beta(\vec{r}) d\vec{r} \quad (4)$$

Using (4) the kinetic energy expression can be transformed into following form:

$$T = \int |\nabla \varphi|^2 = (C^* G C) \quad (5)$$

$$V_{\alpha,\beta} = \int b_\alpha^*(\vec{r}) V_{nucl}(\vec{r}) b_\beta(\vec{r}) d\vec{r} \quad (6)$$

Using (6) the expression of potential electrons energy in the nuclear field can be transformed in the following form:

$$U = \int V_{nucl} |\varphi|^2 = (C^* V C) \quad (7)$$

Summing all the contribution, we can obtain the following expression for the total energy of electron in state φ :

*Corresponding author: Tel. +7 3852 228537, Fax +7 3852 222875, E-mail: Beznosyuk@chemwood.dcn-asu.ru

$$E = (C^*GC) - (C^*VC) \quad (8)$$

C^* - Hermitian-conjugated matrix to matrix C .

In open compact carrier the kinetic energy of the system with uniform electron density distribution take zero value, impulse and impulse dispersion take zero value too. Therefore such state prohibited by Heizenberg indefinite principle, because each real state must satisfy for the following:

$$\nabla p_x \nabla x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (9)$$

Using (9) we can estimate single electron kinetic energy with uniform density distribution n , localized on the open spherical carrier with radius R . Skipping elementary transformation we can easy obtain the expression for E_{bnd} :

$$E_{bnd} = 5\pi Rn + \frac{40}{9}\pi Rn \quad (10)$$

A general class of trial functions $n(x)$ of electron density distributions has cusp-singularity on a nucleus and kink-boundary form on external borders of a sphere-confining atom of hydrogen. The numerical variation of the ground state energy of compact hydrogen atom on the set of ck-functions has shown presence of two equilibrium stable ground states. Both of them are close on energy to minus one Rydberg. One of them is realized at infinite meaning of R -parameter of the sphere-support and corresponds to the ground state of the well-known infinite free atom of hydrogen. Other ground state corresponds to compact atom of hydrogen at $R = 3.1a_0$. This ground state describes the confined atom of hydrogen inside the condensed state of matter. An activation energy barrier separates both ground states from each other.

3. Conclusion

The existence of two equilibrium stable ground states is very important for new sight on explanation of quantum mechanical mechanism of transportation of hydrogen atoms inside crystal grain, intercrystalline boundaries, amorphous substances and low-dimensional nanostructures. In all cases the finite forms of interparticle potentials are some

results from modifications of electron density distribution inside confined block of hydrogen atom, which is strictly positioning and regular moving under influence of definite conditions of the confinement. On the other hand, we come to the important conclusion about the special role of atoms of hydrogen in realization of the phenomena of self-organizing in smart materials. Namely, the spontaneous transitions between equilibrium stable ground states of H-atom differing by the form and volumes of the compact support should in themselves cause spontaneous nanostructural transformations. Therefore atoms of hydrogen have major importance for processes of self-organizing in water, biological substance and other accumulators of hydrogen.

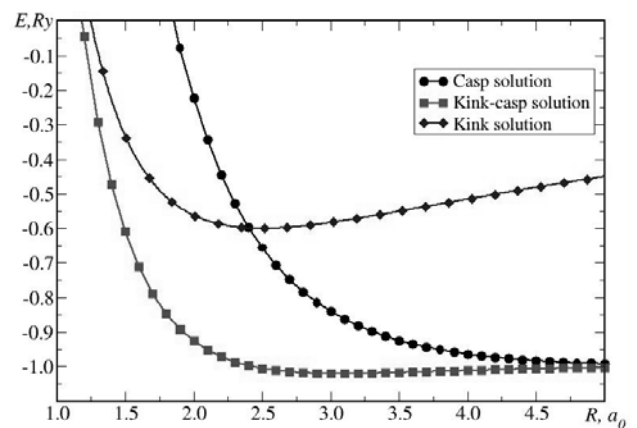


Fig. 1. Energy of electron in hydrogen atom for different models of electron density distribution.

References

1. Beznosyuk S.A., Beznosyuk M.S., Mezentsev D.A. Electron swarming in nanostructures. Computational Material Science 1999;14:209-214.
2. Sohrab Ismail-Beigi and T.A. Arias, New Algebraic Formulation of Density Functional Calculation, Comp. Phys. Comm., vol. 128, pp. 1-45 (June 2000).

КВАНТОВАЯ ТОПОЛОГИЯ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМА ВОДОРОДА, ЛОКАЛИЗОВАННОГО НА КОМПАКТНОМ НОСИТЕЛЕ

С.А.Безносок, Д.А.Мезенцев, М.С.Жуковский, Т.М.Жуковская

Кафедра Физической Химии, Алтайский Государственный Университет,
Ул.Димитрова 66, 656099, Барнаул, Россия
Кафедра Общей Физики, Алтайский Государственный Технический Университет,
Пр-кт.Ленина 46, 656099, Барнаул, Россия

1. Введение

Хорошо известно, что нанотехнология основывается на таких фундаментальных явлениях как ограниченность в пространстве и транспорт квантово-механических атомных блоков внутри низко-размерных структур конденсированного состояния [1]. С этой точки зрения мы обсуждаем предположение что поведение наноструктур должно изучаться используя только определенные многочастичные ограниченные потенциалы. Эти потенциалы отличны от тех, которые были рассчитаны для исследований близких к равновесным свойствам идеальных кристаллов и неограниченных молекул. Компьютерное моделирование ограниченного атома водорода иллюстрирует теорию. Используя компьютерное моделирование, были выполнены расчеты различных квантовых топологий ограниченного атома водорода.

2. Результаты и обсуждение

Используя приближение квантовой топологии плотности и аппроксимирующий метод электронной плотности, мы разработали точное вариационное приближение в компьютерном моделировании электронной плотности ограниченного атома водорода. Метод был применен для моделирования компактного атома водорода ограниченного внутри сферы. Мы показали, что такой тип плотности описывается конечными волновыми функциями.

2.1 В-сплайны с вырожденным набором узлов

Существует множество способов выбора функций разложения для построения волновой функции. Но для численного моделирования

системы, которая локализована на конечном носителе, естественным выбором являются функции конечных элементов. В-сплайны относятся к классу таких функций. Введение В-сплайнов с вырожденным набором узлов позволяет нам корректно описать поведение электронной плотности вблизи атомного ядра – точки каспа электронной плотности.

2.2 Одночастичное электронное состояние

Нам необходимо найти распределение электронной плотности, удовлетворяющее требованию минимум энергии системы во внешнем электростатическом поле, локализованной на компактном носителе:

$$E = \int |\varphi|^2 - \int V_{nuc} |\varphi|^2 + E_{bnd} \quad (1)$$

φ - одночастичное электронное состояние

E_{bnd} - вклад в энергию, соответствующий границе системы.

Для решения задачи (1) мы используем алгоритм, описанный в [2]. Обозначая функции разложения как $b_\alpha(\vec{r})$, мы можем представить одночастичную функцию как:

$$\varphi = \sum_\alpha b_\alpha(\vec{r}) C_\alpha \quad (2)$$

Нам понадобятся ряд вспомогательных выражений

$$O_{\alpha,\beta} = \int b_\alpha^*(\vec{r}) b_\beta(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3)$$

$$G_{\alpha,\beta} = \int \nabla b_\alpha^*(\vec{r}) \nabla b_\beta(\vec{r}) d\vec{r} \quad (4)$$

Используя (4) выражение для кинетической энергии может быть записано как:

$$T = \int |\nabla \varphi|^2 = (C^* G C) \quad (5)$$

$$V_{\alpha,\beta} = \int b_{\alpha}^*(\vec{r})V_{nuc1}(\vec{r})b_{\beta}(\vec{r})d\vec{r} \quad (6)$$

Используя (6) выражение для потенциальной энергии может быть записано в следующей форме:

$$U = \int V_{nuc1}|\varphi|^2 = (C^*VC) \quad (7)$$

Суммируя все вклады, мы можем получить следующее выражение для полной энергии электрона, находящегося в состоянии φ :

$$E = (C^*GC) - (C^*VC) \quad (8)$$

C^* - матрица, эрмитова-сопряженная к матрице C .

На открытом компактном носителе система с однородным распределением электронной плотности обладает нулевой кинетической энергией, импульс и дисперсия импульса также принимает нулевые значения. Следовательно, такое состояние запрещено принципом неопределенности Гейзенберга:

$$\nabla p_x \nabla x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (9)$$

Используя (9) мы можем оценить кинетическую энергию электрона, находящегося в состоянии с однородным распределением плотности n , локализованного на открытом сферическом носителе радиуса R . Пропуская элементарные преобразования можно легко получить выражение для E_{bnd} :

$$E_{bnd} = 5\pi Rn + \frac{40}{9}\pi Rn \quad (10)$$

Общий класс пробных функций распределения электронной плотности имеет касп-сингулярность в точке ядра и кинковое распределение плотности на границе атома. Численное решение вариационной задачи о поиске основного состояния при использовании кинк-касповых функций показало наличие двух равновесных основных состояний. Оба состояния близки к энергии $-1Ry$. Одно из них соответствует основному состоянию неограниченного атома. Другое основное состояние соответствует компактному атому при радиусе $R = 3.1a_0$. Это состояние описывает ограниченный атом водорода внутри вещества в конденсированной фазе. Оба состояния отделяются активационным барьером.

3. Заключение

Существование двух равновесных, стабильных основных состояний очень важно для объяснения квантово-механических механизмов транспорта атомов водорода внутри кристаллических зерен, аморфном веществе и мало-размерных наноструктурах. Во всех случаях конечная форма межчастичных потенциалов является подобным же результатом изменения электронной плотности внутри ограниченного атома водорода, который строго позиционируется и регулируется влиянием определенных условий конфайнмента. Другими словами, мы пришли к важному заключению об особой роли атомов водорода в осуществлении явления самоорганизации в “разумных” материалах. А именно, спонтанный переход между равновесными состояниями атома водорода отличающимися по форме и объему компактного носителя должны вызывать спонтанные наноструктурные переходы. Поэтому атомы водорода имеет большое значение для процессов само-организации в воде, биологических организмах и других аккумулирующих водород объектах.

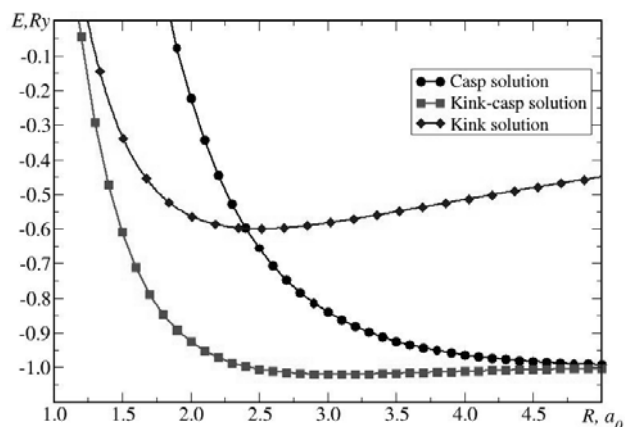


Рис. 1 Энергия электрона в атоме водорода для различных моделей распределения электронной плотности.

Литература

1. Beznosyuk S.A., Beznosyuk M.S., Mezentsev D.A. Electron swarming in nanostructures. Computational Material Science 1999;14:209-214.
2. Sohrab Ismail-Beigi and T.A. Arias, New Algebraic Formulation of Density Functional Calculation, Comp. Phys. Comm., vol. 128, pp. 1-45 (June 2000).