

基于两态稳定性原子级存储方式的分子动力学模拟

贾建援, 樊康旗, 王洪喜, 朱应敏

(西安电子科技大学 机电工程学院 陕西 西安 710071)

摘要: 采用 Morse 型势函数对体心立方晶体表面层及近表面层原子的行为进行了分子动力学模拟. 模拟结果表明, 在体心(次表层)原子操纵前后, 体心立方晶体的顶角原子位置只有微小变化, 其晶格结构基本保持不变且处于稳定平衡状态. 即体心立方晶体具有两态稳定性, 该特性为实现原子级的数据存储提供了可行性. 同时, 对数据存储时可能出现的多原子双稳态组合问题进行了分子动力学模拟, 发现在多原子双稳态组合情况下, 晶体的结构在操纵其相邻晶格的体心原子时仍保持稳定. 提出了一种实现原子级存储的新方式, 只需在两个稳定平衡态间激发用于存储数据的体心原子, 可以提高数据存储的成功率, 保证可重复性和稳定性.

关键词: 分子动力学模拟, 原子级存储, 体心立方晶体, 原子操纵

中图分类号: TN405 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-240X(2005)05-0729-04

The molecular dynamics simulation of an atomic-scale memory based on the double steady-states

JIA Jian-yuan, FAN Kang-qi, WANG Hong-xi, ZHU Ying-min

(School of Electro-Mechanical Engineering, Xidian Univ., Xi'an 710071, China)

Abstract: Molecular dynamics simulations were performed to study the atomic behaves in the surface and deeper layers of body-centered cubic(bcc) crystal, with the Morse potential denoting the interactions among the atoms. Results indicate that the bcc crystal remains stable before and after the central atom is manipulated. That is, the bcc crystal possesses the property of double steady states, which is capable of representing '0' and '1'. At the same time, many-atomed combination of double steady states was investigated by the molecular dynamics simulations method. In the case of the many-atomed combination of double steady states, the bcc crystal still remains stable when manipulating other central atoms. Based on the facts given above, a novel way to achieve atomic-scale memory is put forward, which has the advantages of higher availability, better repetitiousness and stability.

Key Words: molecular dynamics simulation, atomic-scale memory, bcc crystal, atom manipulation

早在 1959 年, 著名物理学家、诺贝尔奖获得者 Richard Feynman 曾预言^[1]: “如果用原子书写的话, 那么世界上所有的文字都可以容纳在一块边长为百分之一到百分之二英寸的立方体材料中”. 1981 年, IBM 公司苏黎世研究所的物理学家 G. Binnig 和 H. Rohrer^[2]发明了扫描隧道显微镜 (STM), 观察到了 Si(111) 表面清晰的原子结构. STM 的发明使人们可以清晰地观察并且操纵物质表面上的单个原子, 为实现原子级的数据存储提供了技术手段. 目前, 构造原子级结构的单原子操纵技术主要包括 3 部分^[3]: 单原子的移动、提取和放置.

分子动力学模拟是研究复杂的微观系统的有力工具, 这一技术既能得到微观粒子的运动轨迹, 还能像做实验一样作各种观察. 笔者应用分子动力学模拟方法证实了体心立方晶体双稳态的存在性, 并基于该双稳态性质提出了一种新的原子级存储方式, 由于该方式只需要在两个稳定平衡态间激发用于存储数据的体心原子, 从而可以提高数据存储的成功率、保证可重复性和稳定性.

1 分子动力学模拟

1.1 分子动力学模型的建立

模拟中,计算原胞的大小取为 $5C \times 5C \times 2C$ (C 为晶格常数)如图1所示.为分析方便,笛卡尔坐标系原点取在计算原胞次表面的中心原子处,面内向右取为 X 向,垂直各面向上取为 Z 向.将计算原胞中的原子编号为 $A(k, i, j)$,原子序号为

$$N = 36 \cdot (k - 1) - 11 \cdot k' + l \cdot (i - 1) + j, \quad (1)$$

$$\begin{cases} k' = 0, & k = 1, 2, 4, \\ k' = k - 2, & k = 3, 5, \end{cases} \quad \begin{cases} l = 6, & k = 1, 3, 5, \\ l = 5, & k = 2, 4, \end{cases}$$

式中 i, j, k 分别为原子所处的行号、列号和面号. k 表示从表面层沿 $-z$ 向编号.在各面内, i 和 j 分别由后向前、由左向右编号.

1.2 分子动力学模拟计算

自然界中有相当多的金属如Li, Na, K, Rb, Cs, Fe等,具有体心立方晶体(bcc)晶格结构^[4],其结构和表面层原子的行为具有相似性.不失一般性,笔者选取Fe为研究对象.

所有模拟过程均采用平衡态分子动力学方法及正则系统(NVT).采用Leap-frog^[5]方法求解原子的经典运动方程,每步计算都对体系中原子的速度进行标定,以保持体系的温度恒定,相当于体系始终与一个大热源接触.边界条件为:在 x ([100])和 y ([010])方向采用二维周期性边界条件,使原子数在水平面上成为无限;在 z ([001])方向让表面层原子自由,使模拟表面对应于真空下的清洁表面, $-z$ 方向仍采用周期性边界条件,但计算原胞底层以下($k \geq 5$)原子固定在原来的晶格位置上不动.时间步长取 $\Delta t = 1$ fs.体系温度 $T = 300$ K.铁原子间的相互作用势为Matsui和Anderson给出的Morse型势^[6]:

$$\Phi_{i,j}(r_{i,j}) = A[\exp(-2B(r_{i,j} - r_0)) - 2\exp(-B(r_{i,j} - r_0))] \quad (2)$$

式中 A, B 和 r_0 为势参数, $r_{i,j}$ 为原子 i, j 间的距离.通过对 α, γ 和 ε 相铁及液相铁有关实验数据综合分析, Matsui和Anderson给出的最优化值是: $A = 30.1$ kJ/mol, $B = 18$ nm⁻¹, $r_0 = 0.2626$ nm.

1.3 Morse型势函数有效性的补充考核

张岱宇等^[7]通过对比采用第一原理计算与采用式(2)计算零温体心立方晶体相铁的结合能,发现这两者的计算结果吻合,指出Matsui和Anderson给出的Morse型势可以很好地描述铁原子间的有效相互作用.

笔者采用该Morse型势函数研究了铁晶体表面层原子的弛豫问题.结果显示表层原子发生内向($-z$)弛豫,大小为0.0046 nm,约为1.6028% C .该结果与已有研究成果(1.5%^[8])基本相符,进一步证明了Matsui和Anderson给出的Morse型势可以很好地反映铁原子间的相互作用.

2 模拟结果与分析

2.1 单原子双稳态的存在性

在单原子操纵情况下,无论采取何种手段,如果只操纵一个晶格的体心原子 $A(2, 3, 3)$,将其沿 Z 向移动 C ,周围的晶格保持在自然状态.经6000步模拟达到平衡后,体系趋于稳定.

为了定量分析模拟结果,引入各层原子 Z 向位置曲线,见图2.从表面层到第4层,原子在 Z 向偏离原平衡位置的绝对值依次减小,最大值为0.0248 nm.由于被操纵原子 $A(2, 3, 3)$ 与 $A(4, 3, 3)$ 间距的增大,其间引力减小, $A(4, 3, 3)$ 沿 $-Z$ 向有相对较大的弛豫0.0132 nm.由图2(a)可明显看出,第4层原子 Z 向坐标曲线中有一下凹点($A(4, 3, 3)$),该下凹点与第2层原子 Z 向坐标曲线的向上凸点($A(2, 3, 3)$)相对应.

由二维周期性边界条件可知各原子在 X, Y 向所受合力为零,所以各原子在 X 和 Y 向的位置偏离量应为零.但是由于计算中的截断误差导致产生偏离原平衡位置的微小位移,该偏离量小于0.5% C .

所以,在单原子操纵情况下,该体系的构型不发生畸变并保持稳定平衡,即体心立方晶体在单原子操纵

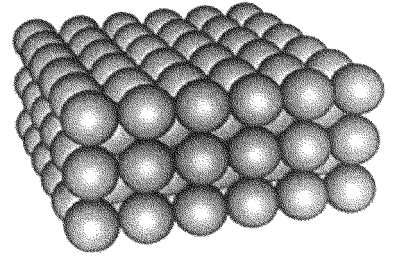


图1 计算原胞立体图

情况下具有双态稳定性.

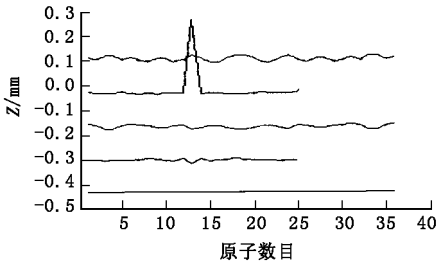


图 2 单原子操纵各层原子 Z 向位置曲线

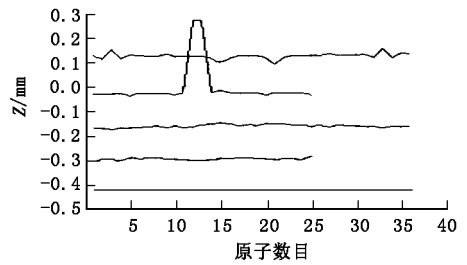


图 3 两相邻原子操纵各层原子 Z 向位置曲线

2.2 多原子双稳态组合的存在性

选取具有代表性的几种多原子双稳态组合,通过对这几种典型情况的模拟得到一般性的结论.在多原子双稳态组合情况下,除被操纵原子外,其他原子均保持在自然状态,取模拟 6 000 步达到平衡时原子的瞬时位置数据作统计分析.

2.2.1 两相邻原子双稳态组合的存在性

操纵两个相邻晶格的体心原子 $A(2,3,2)$ 和 $A(2,3,3)$,使其沿 Z 向移动 C ,各层原子 Z 向位置曲线见图 3.

2.2.2 三原子双稳态组合的存在性

操纵 3 个晶格的体心原子 $A(2,3,2)$ $A(2,3,3)$ 和 $A(2,3,4)$,使其沿 Z 向移动 C ,各层原子 Z 向位置曲线见图 4.

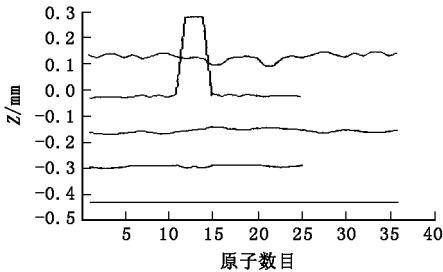


图 4 三原子操纵各层原子 Z 向位置曲线

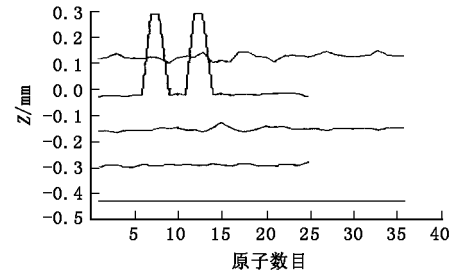


图 5 四原子操纵各层原子 Z 向位置曲线

2.2.3 四原子双稳态组合的存在性

操纵 4 个晶格的体心原子 $A(2,3,2)$ $A(2,3,3)$ $A(2,4,2)$ 和 $A(2,4,3)$,使其沿 Z 向移动 C ,各层原子 Z 向位置曲线见图 5.

2.2.4 多原子双稳态组合的存在性分析

- 1)由图 3 4 和 5 可看出,在典型的多原子双稳态组合情况下,有相应数目的体心原子稳定存在于表面层上方的平衡位置处,其与表面层的间距 $d \in [0.1288 \text{ nm}, 0.1956 \text{ nm}]$,即这 3 种多原子双稳态组合的稳定性存在;
- 2)随着操纵原子数的增加,各原子在 X 和 Y 向偏离原有平衡位置的偏离量有所增加,但不超过 $C\%$;
- 3)随原子序号的增加,原子在 X Y 向的位置偏离量趋于收敛,这表明越向内层,原子在 X Y 向的偏离量越小.

2.3 多原子双稳态组合存在性的拓展分析

多原子双稳态组合的情况繁多,以一个体心原子(目标原子)及其周围体心原子的操纵情况为例来研究.由 Morse 势可得原子 i, j 间的作用力为

$$F_{i,j} = d\Phi(r_{i,j})/dr_{i,j} = 2AB[\exp(-B(r_{i,j} - r_0)) - \exp(-2B(r_{i,j} - r_0))] \quad (3)$$

由于次近邻以外的体心原子与目标原子间的距离 $d \geq 2C$,所以其对所研究原子的作用力为

$$F_{r_{i,j} \geq 2C} \leq 0.052288 \cdot F_{r_{i,j} = 21/2C} \quad (4)$$

所以,次近邻以外的体心原子对其的影响可忽略不计.同时,在体心原子操纵前后,顶角原子的位置只有微小变化,所以顶角原子在体心原子操纵前后对目标原子作用力的变化也可忽略不计.

一个目标原子在同一面内的各向共有 8 个最近邻体心原子,其组合操纵情况共有 2^8 种.但是,当体心原子

未被操纵到表面层上方时,体心立方晶体的稳定性总是自然存在的,所以只需研究目标原子在操纵后的稳定情况.由前面的分子动力学模拟可知目标原子总可以在表面层上方的某个位置稳定存在,但是其在 X 和 Y 向的坐标偏离量随周围体心原子的操纵情况不同而有所变化.如图 6 所示(其中●和○分别表示目标原子和已操纵到表面层上方平衡位置的体心原子),以目标原子为坐标原点,当只有某一象限内的体心原子操纵到表面层上方的平衡位置时,由于其他体心原子对其作用力的合力最大,目标原子在 X 和 Y 向的位置偏离量最大,结构畸变最严重.笔者进一步模拟了图 6 所示的九原子操纵情况,结果如图 7 所示,目标原子 $A(2, 4, 2)$ 在 X 向(图 7(b))和 Y 向(由晶体的结构对称性可知与 X 向相同)的位置偏离量为 $0.83751C\%$.随着在 $+X$, $+Y$ 和第一象限被操纵体心原子数的增加,被操纵体心原子与目标原子的间距也增大.由式(3)(4)可知,目标原子在 X 和 Y 向的位置偏离只有微小增加,不会明显破坏体系的构型和稳定性.

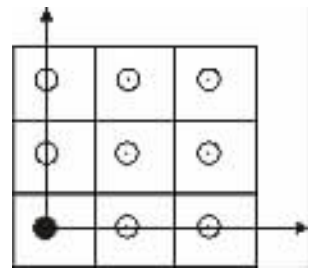
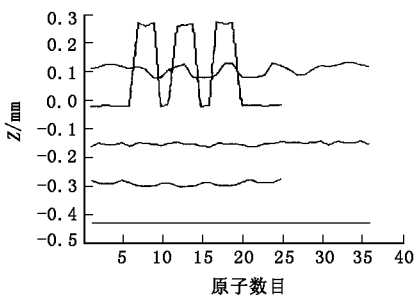
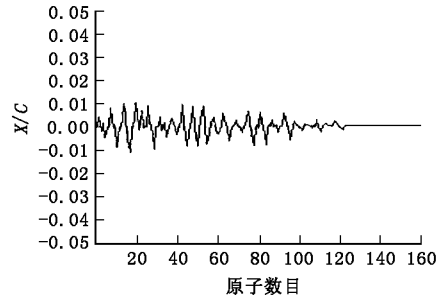


图 6 九原子双稳态组合平面图



(a) 九原子操纵各层原子 Z 向位置曲线



(b) 九原子操纵各层原子 X 向位置曲线

图 7 九原子操纵原子各向位置曲线

所以,所有的多原子双稳态组合的稳定性存在,其稳定性不受其他体心原子操纵情况的影响.

3 结 论

Matsui 和 Anderson 给出的 Morse 型势函数在描述铁的表面层及近表面层原子的行为时具有相当的准确性.通过对铁晶体的分子动力学模拟表明:

- 1) 体心立方晶体的体心原子在表面层的上方具有一个稳定平衡位置,在体心原子操纵前后,体系的结构可看作不变,各原子在 X 和 Y 向的位置偏离可忽略不计;
- 2) 体心立方晶体具有两态稳定性,分别为体心原子位于体心和位于表面层上方的平衡位置处;
- 3) 铁晶体的体心原子位于表面层上方的平衡位置时,其与表面层的间距 $d \in [0.1288 \text{ nm}, 0.1956 \text{ nm}]$;
- 4) 扫描隧道显微镜^[9,10]可以分辨出体心立方晶体体心原子的两个不同位置,如果用体心原子位于表面层上下的两个不同稳定平衡位置分别表示二进制的 '1' 与 '0' (或者 '0' 与 '1') 就可以实现原子级的数据存储;
- 5) 由于利用体心立方晶体的两态稳定性实现原子级的数据存储只需在两个稳定平衡态间激发用于存储数据的原子,从而可以提高数据存储的成功率,保证可重复性和稳定性.

参考文献:

- [1] Feynman R. There's Plenty of Room at the Bottom[J]. Microelectromechanical Systems, 1992, 1(1): 60-66.
- [2] Binnig G, Rohrer H. Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy[J]. Phys Rev Lett, 1982, 49(1): 49-57.
- [3] 黄德欢, 王庆康, 庞乾骏, 等. 扫描隧道显微镜单原子操纵技术及其物理机制[J]. 上海交通大学学报, 2001, 35(2): 157-167.
- [4] 黄 昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1988. 1-41.
- [5] 温诗铸. 纳米摩擦学[M]. 北京: 清华大学出版社, 1998. 65-68.

