

# **Теоритическая Документация к Программе:**

## **Островки Кластеров**

### ***1. Постановка задачи***

Данная демонстрация показывает модельное взаимодействия хаотически движущихся частиц, которые слипаются при столкновении. Для частиц используется броуновское движение. Случайным образом выбирается направление и скорость скачка частицы в определённый момент времени. При столкновении скорость частиц становится равной нулю и образуется островок из слипшихся частиц. Далее может увеличиваться при столкновении с ним других частиц. Цель данной программы- продемонстрировать некоторые закономерности появления островков, а также продемонстрировать модель реальной задачи.

### ***2. Теоретические сведения***

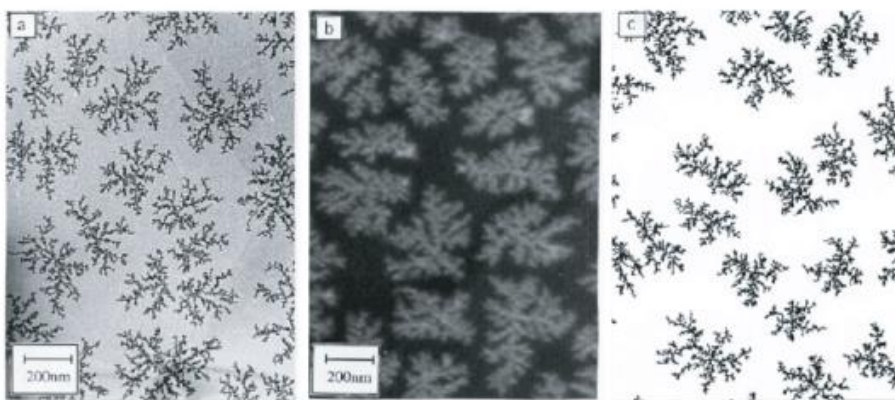
Островки из нанокластеров исследовались и исследуются учёными во многих институтах по всему миру. Рассматриваются металлические кластеры и их взаимодействие на углеродных поверхностях. Одной из таких поверхностей является графит. Такой широкий интерес вызван тем, что в зависимости от различных параметров системы, на таких поверхностях появляются различные формы структур. Понимание закономерностей между параметрами и структурами может дать представление о связи между микро и макромиром. Исследование поведения наночастиц может быть очень полезно в областях катализа, магнетизма, электроники и тд.

Важной областью применения моделей кластеров может стать исследование хаотического движения легких частиц на поверхности массивных по сравнению с ними чешуек. При этом сами чешуйки тоже участвуют в тепловом движении и могут играть роль массивных рассеивателей. Производство тонких пленок с заданной структурой является основой современных нанотехнологий.

Взаимодействие между отдельными атомами и поверхностью очень сложно, и на него трудно влиять. Если же на поверхность напылять уже сформированные кластеры, атомы которых соединяются друг с другом еще до попадания на поверхность, можно добиться большей гибкости в создании наноструктур. Во-первых, кластер, состоящий из большого числа атомов, можно рассматривать как классический объект, поэтому легче предсказать, как он будет вести себя на поверхности. Во-вторых, можно варьировать структуры, образующиеся на поверхности, меняя размер и поток исходных кластеров. Попадая на подложку, кластеры начинают диффундировать на поверхности и соединяться друг с другом, образуя островки.



Источники кластеров, основаны на лазерной абляции. Под действием лазерных импульсов, атомы испаряются с поверхности мишени. Синхронно с лазерным импульсом в источник импульсно подается гелий под высоким давлением, чтобы образовались кластеры. Окончательное формирование и стабилизация кластеров происходит при сверхзвуковом расширении на выходе из источника в вакуумной камере. Различные условия в источнике (тип лазера, интенсивность импульса, давление в газовом импульсе, геометрия выпускного отверстия) позволяют хорошо контролировать процесс производства кластеров. На выходе из источника установлен масс-спектрометр с высоким разрешением времени пролета. Нейтральные кластеры подвергаются фотоионизации, а ионы уже анализируются масс-спектрометром. Распределение кластеров по размерам (массам) имеет вид узкого гауссовского распределения. Это достигается в результате сильно неравновесного охлаждения, при котором образуются кластеры одного размера, такого, что энергия взаимодействия атомов в кластере минимальна в результате образования структуры с нужной степенью симметрии.



Поток кластеров одинаков во всех точках поверхности и равен  $10^{10}$ -  $10^{11}$  кластеров/(см<sup>2</sup> с). С момента попадания кластеров на поверхность начинается процесс диффузии. Диффузия несомненно играет центральную роль в производстве тонких пленок и самоорганизующихся структур, основанном на помещении кластеров на поверхность.

Технические возможности не позволяют следить за движением отдельных кластеров, поэтому в экспериментах о коэффициенте диффузии судят по косвенным данным, например, по изменению размеров островков. Экспериментально доказано, что кластеры золота и сурьмы диффундируют на поверхности графита удивительно быстро, несмотря на большой размер. То же самое можно сказать о платине и серебре.

### **3. Принцип работы модели**

На пустом поле появляются частицы, моделирующие кластеры. Они появляются в случайном месте и двигаются по модели броуновского движения, делая малые скачки в случайном направлении. При встрече они слипаются и останавливаются. Далее к ним присоединяются новые кластеры, и островок растёт.

Количество новых кластеров, их скорость (диффузию системы) можно менять. В зависимости от всех регулируемых параметров на поле будут расти разные структуры.

### **4. Принцип работы программы**

Программа использует структуру данных, позволяющую быстро подсчитать движение кластеров. В основе структуры лежит разделение поля на равные квадраты, что позволяет рассматривать столкновения только очень близко стоящих кластеров.

Новые кластеры появляются равномерно в любой точке пространства. Для моделирования броуновского движения используется встроенный генератор нормально распределенной случайной величины - он генерирует два смещения по двум осям, с математическим ожиданием ноль и со средним отклонением равным одному из параметров, заданных пользователем. Таким образом, среднее отклонение задает диффузию системы.

Пользователь так же задает размер кластеров и скорость их появления.

Из-за ограничений по скорости симуляции, чтобы получить более полный результат необходимо продолжать симуляцию более 10 минут, поэтому реализован механизм сохранения и загрузки структуры кластеров на поле. Созданы файлы, демонстрирующие несколько конечных ситуаций при разных начальных параметрах.

В программе также присутствует специальный режим, в котором слипание происходит только при столкновении с уже остановленными кластерами, что позволяет продемонстрировать разрастание острова.

### **5. Наблюдаемые эффекты**

При работе модели возникают два разных эффекта - при маленьком потоке новых нанокластеров и высокой диффузии системы кластеры успевают присоединиться к уже стоящим островам, прежде чем появятся другие нанокластеры, способные образовать

новые острова. Поэтому в результате структура выглядит как небольшое количество огромных островов.

При маленькой диффузии же, независимо от потока новых нанокластеров, возникает множество маленьких островов, поскольку нанокластеры не уходят далеко от места появления, и в результате структура выглядит как большое количество небольших островов.

#### **6. *Как пользоваться программой***

Описан в файле readme.txt