

Нанокластеры

Авторы работы:

Куделя Виталий Викторович
Тавыриков Юрий Евгеньевич

Руководитель проекта:

Шутова Ольга Анатольевна

Теоретическая справка

Под понятием кластер (англ. cluster – пучок, рой, скопление) понимают объединение нескольких однородных элементов, которое может рассматриваться как самостоятельная единица, обладающая определенными свойствами. Нанокластеры (размером порядка десятков нанометров) находят широкое применение, например, в органическом синтезе используют высокую каталитическую активность нанокластеров переходных металлов.

Нанокластеры и нанокристаллы представляют собой наноразмерные комплексы атомов или молекул. Основное различие между ними заключается в характере расположения образующих их атомов или молекул, а также химических связей между ними.

Нанокластеры по степени упорядоченности структуры подразделяются на упорядоченные, иначе называемые магическими, и неупорядоченные. В магических нанокластерах атомы или молекулы расположены в определенном порядке и довольно сильно связаны между собой. Благодаря этому обеспечивается сравнительно высокая устойчивость магических нанокластеров, их невосприимчивость к внешним воздействиям. Магические нанокластеры по своей устойчивости подобны нанокластерам. Вместе с тем в магических нанокластерах атомы или молекулы в своем расположении не образуют кристаллическую решетку, типичную для нанокристаллов.

Неупорядоченные нанокластеры характеризуются отсутствием порядка в расположении атомов или молекул и слабыми химическими связями. Этим они существенно отличаются как от магических нанокластеров, так и от нанокристаллов. Вместе с тем неупорядоченные нанокластеры играют особую роль в процессах образования нанокристаллов.

Фрактал - математическое множество, обладающее свойством самоподобия, то есть однородности в различных шкалах измерения (любая часть фрактала подобна всему множеству целиком). В математике под фракталами понимают множества точек в евклидовом пространстве, имеющие дробную метрическую размерность (в смысле Минковского или Хаусдорфа), либо метрическую размерность, отличную от топологической, поэтому их следует от-

личать от прочих геометрических фигур, ограниченных конечным числом звеньев. Фракталы являются как раз такими объектами: с одной стороны — сложные (содержащие бесконечно много элементов), с другой стороны — построенные по очень простым законам. Благодаря этому свойству, фракталы обнаруживают много общего со многими природными объектами. Но фрактал выгодно отличается от природного объекта тем, что фрактал имеет строгое математическое определение и поддаётся строгому описанию и анализу. Поэтому теория фракталов позволяет предсказать скорость роста корневых систем растений, трудозатраты на осушение болот, зависимость массы соломы от высоты побегов и многое другое.

Первые примеры самоподобных множеств с необычными свойствами появились в XIX веке в результате изучения непрерывных недифференцируемых функций (например, функция Больцано, функция Вейерштрасса, множество Кантора). Термин «фрактал» введён Бенуа Мандельбротом в 1975 году и получил широкую известность с выходом в 1977 году его книги «Фрактальная геометрия природы». Особую популярность фракталы обрели с развитием компьютерных технологий, позволивших эффектно визуализировать эти структуры.

Фракталом может называться предмет, обладающий, по крайней мере, одним из указанных ниже свойств:

- Обладает нетривиальной структурой на всех масштабах. В этом отличие от регулярных фигур (таких как окружность, эллипс, график гладкой функции): если мы рассмотрим небольшой фрагмент регулярной фигуры в очень крупном масштабе, то он будет похож на фрагмент прямой. Для фрактала увеличение масштаба не ведёт к упрощению структуры, то есть на всех шкалах мы увидим одинаково сложную картину.
- Является самоподобным или приближённо самоподобным.
- Обладает дробной метрической размерностью или метрической размерностью, превосходящей топологическую.

Многие объекты в природе обладают свойствами фрактала, например: побережья, облака, кроны деревьев, снежинки, кровеносная система, система альвеол человека или животных.

Для подсчёта фрактальной размерности необходима мера. Мера служит для измерения объектов. Главное свойство — мера аддитивна. Для одномерных объектов мера пропорциональна размеру. Для не одномерных тел, мера вычисляется по некоторым правилам, которые подбираются так, чтобы мера сохраняла аддитивность. Размерность и позволяет связать меру и размер.

Обозначим размерность — D , меру — M , размер — L . Тогда формула, связывающая эти три величины будет иметь вид: $M = LD$. Если фигуру уменьшить в N раз (отмасштабировать), то она будет укладываться в исходной ND раз. Верно и обратное: если при уменьшении размера фигуры в N раз, оказалось, что она укладывается в исходной n раз (то есть мера её уменьшилась в n раз), то размерность можно вычислить по формуле: $D = \frac{\ln n}{\ln N}$.

Дробная размерность. Итерации начинаются с одного отрезка. На каждом шаге итерации количество отрезков удваивается. Каждый порождает два новых: один в 0.88 раз меньше (или, вернее больше) родителя, второй — в 0.41 раз. В пределе получается некоторое множество. Вернёмся к первому шагу итераций, на котором мы получили два отрезка, и посмотрим, какая часть фрактала образована из каждого из них: Если принять, что размер полного фрактала 1, то размер первой части (полученной из большего отрезка) будет 0.88, а размер второй (полученной из меньшего) — 0.41. Та формула, которой мы располагаем, уже не годится, так как мы имеем не один, а два коэффициента масштабирования. Мера аддитивна, то есть мера полного фрактала, равна сумме мер его частей: $M_0 = M_1 + M_2$.

И сам фрактал, и его части имеют одинаковую размерность (D) и мы можем выразить меры, через размеры: $L_0 D = L_1 D + L_2 D$.

А размеры известны. То есть для размерности нашего фрактала мы можем написать уравнение: $1 = 0.88D + 0.41D \Rightarrow D \approx 1.7835828288192$. Таким образом, если фрактал образован из N подобных элементов, с коэффициентами подобия k_1, k_2, \dots, k_N , то его размерность можно найти из уравнения: $1 = k_1 D + k_2 D + \dots + k_N D$. По этой формуле уже можно рассчитать размерность многих итерационных систем. Если все коэффициенты равны, то формула имеет следующий вид:

$$1 = kD + kD + \dots + kD = N * kD \Rightarrow 1/N = kD$$

$$D = -\frac{\ln N}{\ln k}$$

Последнее выражение есть простая формула для вычисления размерности.

Список литературы:

- Б. Мандельброт Фрактальная геометрия природы, 2002
- Е. Федер Фракталы, 1991
- М. И. Вишик Фрактальная размерность множеств, 1998
- <https://ru.wikipedia.org/wiki/Фрактал>
- <http://habrahabr.ru/post/208368/>