

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ КЛАСТЕРОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТА

Краснова А.К., Чичигина О.А.

Россия, 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы 1, стр. 62

Рассматривается движение кластеров, состоящих из большого числа атомов, на поверхности графита. Диффузия таких кластеров имеет аномально высокие скорости [1], и можно предположить, что это связано со свойствами графитовой подложки, так как на другой подложке коэффициенты диффузии значительно меньше.

Мы моделируем диффузию кластеров с помощью бильярдов с движущимися границами и проводим численный анализ подобной системы. Бильярд — динамическая система, которая описывает движение материальной точки в некоторой ограниченной области многообразия с условием упругого отражения от границы по закону "угол падения равен углу отражения". В бильярдах с подвижными стенками существует эффект, состоящий в неограниченном росте кинетической энергии частицы, называемый ускорением Ферми [2].

Ускорения Ферми в бильярдах с открытым горизонтом вызывает супердиффузию, т.е. средний квадрат смещения в такой системе квадратично возрастает со временем [3]. Этот результат был подтвержден численно. Вычисления производилось на языке Fortran. Получено численное соответствие ускорения Ферми аналитическому значению. Показано, что зависимость коэффициента диффузии от геометрических и динамических параметров соответствует аналитической формуле. Был получен график зависимости среднего квадрата смещения частицы от времени, подтверждающий наличие супердиффузии. Анализ производился путем усреднения движения отдельных частиц по 500 испытаниям.

Мы используем приближение Махта-Цванциг в котором время корреляции является малой величиной по сравнению со средним временем выхода. Было показано, что средняя длина траектории частицы до момента ее выхода из ячейки имеет экспоненциальное распределение. Найдены средние длины траекторий частиц при различных радиусах рассеивателей. Мы сравнили значения, полученные численно, с теоретическими.

Таким образом, механизм возникновения супердиффузии в результате ускорения Ферми может быть применен для объяснения экспериментальных данных по диффузии наночастиц на поверхности графита.

Литература.

1. *L.J.Lewis, P. Jensen, N. Combe, J.-L. Barrat* Diffusion of gold nanoclusters on graphite // *Phys. Rev. B.*, v. 61, 16084, 2000
2. *Лоскутов А.Ю., Рябов А.Б., Краснова А.К., Чичигина О.А.* Бильярды с возмущаемыми границами и некоторые их свойства // *Нелинейная динамика*, Т.7, 2010, С. 1-32
3. *Лоскутов А.Ю., Краснова А.К., Чичигина О.А.* Супердиффузия в бильярдах подвижными стенками как результат ускорения Ферми // *Актуальные проблемы статистической радиофизики*, Т.7, 2008, С.3