

TARTU ÜLIKOOL
LOODUS- JA TÄPPISTEADUSTE VALDKOND

Tehnoloogiainstituut

Ats Aasmaa

**VORONOI TESSELATSIOONI ABIL PINNA REKONSTRUEERIMISMEETODI
MOODUSTAMINE JA SELLEL BASEERUVAD ELEKTRIVÄLJAARVUTUSED
VASE NÄITEL**

Bakalaureusetöö füüsikas (12 EAP)

Juhendaja: PhD Vahur Zadin

Tartu 2016

Voronoi tesselatsiooni abil pinna rekonstrueerimise meetodi moodustamine ning sellel baseeruvad elektriväljaarvutused vase näitel

Käesoleva bakalaureusetöö eesmärk oli välja töötada atomaarsetest andmetest pinda rekonstrueeriv meetod, mille omadused oleksid paremad võrreldes eelnevate trianguleerimise põhimõtet kasutavate meetoditega. Seetõttu arendati antud töö raames välja Voronoi tesselatsiooni põhine pinna rekonstrueerimise meetod ning tehti sellel baseeruvates simulatsioonides elektriväljaarvutused.

Moodustatud meetodi hindamiseks leiti iga pinna korral sellele vastav elektriväli. Elektriväljavõimendus saadi Voronoi tesselatsiooni kasutava meetodi korral suurem kui trianguleeritud juhul. Lisaks võrreldi antud töös ka silumismeetodite mõjude erinevusi pindadele – nii erinevate silumisiteratsioonide kui ka α -parameetrite korral, millest tuleneb, et parameetrid mõjutavad pinna elektriväljavõimendust vähemal määral kui iteratsioonide arv. Lõpus saadi kinnitus ka välja töötatud meetodi kõlblikkusest pindade ajalise evolutsiooni uurimisel.

Märksõnad: *Voronoi tesselatsioon, lõplike elementide meetod, silumismeetodid, pinna rekonstrueerimine*

CERCS teaduslade kood: P250 Tahke aine: struktuur, termilised ja mehaanilised omadused, kristallograafia, phase equilibria

Developing surface reconstruction method based on Voronoi diagrams and conducting electric field calculations with copper.

The aim of the current thesis was to develop a surface reconstruction method whose properties would be better than previously used triangulation based method's characteristics. Therefore during the current bachelor thesis the author developed surface reconstruction method based on Voronoi tessellation and conducted electric field calculations in simulation models on every reconstructed surface.

Electric field calculations were carried out to validate the created surface reconstruction method. Electric field enhancement was higher with the Voronoi tessellation method than results received with the triangulated method. Also different smoothing methods' effects on the surface were investigated. The number of smoothing iterations and parameters were modified which indicated that electric field enhancement is less sensitive to smoothing parameters than the number of iterations. It was confirmed that the Voronoi surface reconstruction method is also suitable for analyzing the evolution of surfaces.

Keywords: Voronoi tessellation, finite element method, smoothing methods, surface reconstruction

CERCS research field code: P250 Condensed matter: structure, thermal and mechanical properties, crystallography, phase equilibria.

Sisukord

1. Sissejuhatus.....	6
1.1 Teema olulisus.....	6
1.2 Töö eesmärk	8
1.3 Autori panus	9
2. Teoreetiline ülevaade	10
2.1 Delaunay triangulatsioon.....	10
2.2 Voronoi tesselatsioon	11
2.3 Lõplike elementide meetod	12
2.3.1 Võrk.....	13
2.4 Kimocs.....	14
2.5 Elektriväli	15
2.6 Aatomitega seotud laengu jaotus elektrivälja rakendamisel.....	16
2.7 Atomistlike pindade rekonstueerimine elektrivälja arvutusteks.....	17
2.7.1 Hybrid Electrodynamics – Molecular Dynamics Method (HELMOD)	17
2.7.2 Trianguleerimise põhimõtet kasutav meetod.....	17
2.7.3 Aatomsondeerimistomograafia (atom probe tomography) pinna rekonstruktsioon	18
3. Metoodika.....	19
3.1 Simuleeritud süsteem	19
3.2 Pinna rekonstrueerimise meetod.....	19
3.2.1 Voronoi rakkude kasutamine.....	20
3.2.2 Delaunay triangulatsiooni rakendamine	21
3.2.3 Võrgu tegemine	21
3.3 Pinna silumine	22
3.3.1 Laplace'i silumismeetod.....	22
3.3.2 Laplace'i HC silumismeetod	23
3.3.3 Lowpass.....	24
3.3.4 Silumismeetodite rakendamine	24
3.4 Kasutatud tarkvara.....	25
4. Tulemused ja analüüs	26
4.1 Voronoi tesselatsiooni kasutav meetod	26
4.2 Aatomit ümbritseva Voronoi raku pindala leidmine	28
4.3 Loodud Voronoi meetodi abil pinna rekonstrueerimine.....	30
4.4 Võrdlus eelmise meetodiga	31
4.5 Silumise mõju pinnale ja elektrivälja arvutustele.....	34
4.5.1 Iteratsioonide mõju.....	34

4.5.2	Silumisparameetri mõju.....	39
4.6	Voronoi tesselatsiooni põhine pinna rekonstrueerimine ajalise evolutsiooni korral	42
4.7	Aatomi karakteristikliku pindala leidmine	44
5.	Kokkuvõte	45
6.	Tänuavaldused.....	47
Viited	48

1. Sissejuhatus

1.1 Teema olulisus

Praegusel hetkel viiakse kõige suurema energiaga füüsikaeksperimente läbi maailma võimsaimas osakeste kiirendis Suures Hadronite Põrgutis (inglise keeles *Large Hadron Collider*), mis asub Genfis, Šveitsis [1]. Ometigi on sealsetes katsetes palju probleeme, mis hõlmavad endas energiakadusid, taustmüra tugevust ning palju muud. Üldise eesmärgiga suurendada antud katsete täpsuseid ja energiat, teevad üle 70 instituudi rohkem kui 30 erinevast riigist mitmepoolset omavahelist koostööd, et luua kõrgete raadiosageduslike elektriväljade abil mitme-TeV elektron-positron põrguti, mida nimetatakse Kompaktseks Linearpõrgutiks (*Compact Linear Collider*, CLIC) [2]. Osakeste interaktsioon TeV-skaalal võib omada osakeste füüsikas vastuseid paljudele küsimustele, sealhulgas nii tumeaine kui ka standardmudeli kohta [3]. Realistliku plaani kohaselt võiks CLIC tööd alustada 2032.-2033. aastal [2].

CLIC projekti eesmärgiks on saavutada raadiosageduslik kiirendav elektrivälja tugevusega $100 \frac{MV}{m}$ sagedusel $12 GHz$ [4]. Selle saavutamiseks on tarvis ületada nii majanduslikke, füüsikalisi kui ka insenerialaseid takistusi. Niivõrd suure projekti puhul oleks iga vajaliku eksperimendi ja testi läbiviimine aja- ja ressursikulukas, mis pikemaajaliselt muudaks nende teostamise ebamõistlikuks. Tänu arvutusvõimsuse kasvule on võimalik ka pidevalt läbi viia ja täiendada simulatsioone, mis aitavad antud projekti puhul säästa aega ja raha. Seetõttu on oluline, et teostatavad simulatsioonid oleksid füüsikaliselt korrektsed, kuna neile baseeruvad paljud CLIC-projektis realselt ehitatavad seadmed.

Kompaktsesse Linearkiirendisse planeeritud seadmetes kasutatakse kõrgeid elektrivälju [3]. Elektrilised läbilöögid toimuvad isegi vaakumisarnastes tingimustes elektrivälja piisavalt suurte väärtuste korral - nii ka osakeste kiirendis [3]. Sellest tulenevalt kaotab kiirendav raadiosageduslik väli oma efektiivsust liiga tihti toimuvate elektriliste läbilöövide tõttu, sest kiirendava komponendi pind kahjustub. Vaakumlahendus toimub läbi kolme faasi: läbilöök, „säde“ ja kaarlahendus [5]. Vaakumis toimuvad läbilöögid on põhjustatud järsust üleminekust isoleerivast olekust kõrge juhtivusega olekusse. Kõrge juhtivus lubab aga allikast tuleneval voolul ja sealt ka energial hajuda. Seetõttu on läbilöök tihti järsk ja destrukttiivne ning mõnikord lausa katastroofiline – näiteks välg on läbilöök atmosfäärist [6].

Läbilöögifaas sisaldab endas nähtust, mis lõhub elektrilise isolatsiooni. „Säde“ põhjustab voolutugevuse tõusu vaakumvahes. Kaarlahendus on juba protsessi lõpufaas, mis toimub

madala pinge ja stabiilse voolutugevuse juures [5]. Vaakumlahenduses toimuvad fenomenid viivad katoodil mikroskoopilises ruumiosas energiatiheduse kasvule, mille tulemuseks on antud mikroruumala osas paikneva materjali plahvatamine [5].

Kõige olulisemad ja praktiliselt ka huvipakkuvad osad vaakumis toimuvast laengu väljavoolu protsessist on esimesed kaks faasi. Elektriliste läbilöökide tundmaõppimine on oluline aatomite aurustumise vähendamiseks kiirendi seintel töö ajal, näiteks nii elektronide ja ioonide kiirendites kui ka mikrolainete seadmetes [5].

Plaanitavas Kompaktses Linearkiirendis kasutatakse kiirendavates osades vaske, mis käitub kõrges elektriväljas eelmainitud protsesside kohaselt. Üheks levinumaks seletuseks läbilöökide tekkimisele on mikroskoopiliste väljaemitterite esinemine pinnal. Seetõttu on oluline uurida vase ja selle pinna käitumist kõrge elektrivälja mõjul, et saada täpselt aru, kuidas toimub sellisel juhul materjali pinnal emitterite formeerumine. Üks selline võimalus on koostada simulatsioonimudelid. Varasemalt on töös [7] tehtud simulatsioone molekulaardünaamika abil emitterite lagunemist põhjustavate erinevate võimalike nähtuste kohta, kus näidati, et suur hulk aatomeid võib eksisteerivatest emitteritest aurustuda. Artiklis [8] on autorid välja toonud, et pinnale paigutatud vase aatomid tasanduvad pinna evolutsiooni käigus pinnaenergia minimeerimise omaduse tõttu monokihi paksuseks. Lisaks näidati artiklis [9] emitterite stabiilsuse sõltuvust tema mõõtmetest ning Joule'i-Lenzi seadusest tingitud soojenemisest – emissioonivoolud võivad märgatavalt muuta pinnast eenduvate teravike geometriat. Rakendatud jõud ning elektriväli peavad molekulaardünaamika simulatsioonides mõistlike arvutusaegade saamiseks olema liialdatud, mis teeb keeruliseks simulatsiooni- ja eksperimentaaltulemuste omavahelise võrdlemise [9]. Seetõttu kasutatakse lõplike elementide meetodit, mis suudab isegi nanoskaalas toimuvatest protsessidest anda vähemalt üldise arusaama ning võrreldes molekulaardünaamika simulatsioonidega pakub suuremat arvutuskiirust.

Varasemalt on uuritud pinna muutusi plastse deformatsiooni tõttu nii molekulaardünaamika kui ka lõplike elementide meetodiga [10][11]. Samuti on uuritud ka dünaamiliste efektide ja elektrivoolude mõju, mis viis suurendatud väljavõimendustegurini [12].

Simulatsioonides toimuvad nii pinna rekonstrueerimised kui ka sellel baseeruvad elektriväljaarvutused. See tähendab, et protsessil, kuidas pinda rekonstrueeritakse, on tähtis osa simulatsioonimudelite koostamisel.

Eelnevalt on välja töötatud erinevad meetodid nii pinna rekonstrueerimiseks kui ka mudelid kõrges elektriväljas aatomeid kirjeldavate omaduste leidmiseks. Paraku on iga pinna rekonstruktsioonimeetodi puhul esinenud takerdused – enamasti mittefüüsikalised arvutustulemused, mis on tekkinud kasutatud meetodite eripärast. Sellest tulenevalt on oluline, et pinna rekonstrueerimise meetod oleks vaba iseärasustest, mis mõjutaksid liigselt arvutustulemusi.

Käesolevas töös moodustatakse Voronoi tesselatsiooni abil uus pinna rekonstrueerimise meetod ning uuritakse selle abil saadud pindu süsteemis, mis modelleerib planeeritud CLIC kiirendis olevates osades kasutatud vase käitumist kõrgete elektriväljade mõjul. Voronoi tesselatsioonil põhinevad pinna rekonstrueerimised on justnimelt vajalikud atomistlike meetodite – molekulaardünaamika ja kineetilise Monte Carlo meetodite – ning pideva keha meetodite – lõplike elementide meetod ja lõplike vahede meetod – omavaheliseks ühendamiseks.

1.2 Töö eesmärk

Eelnevate pinna rekonstruktsiooni meetoditele baseerunud elektrivälja arvutustulemused olid tundlikud üksikute aatomite ja kristallvõre tahkudel tekkivate pinna rekonstrueerimise ebatäpsuste mõjule – rekonstrueeritud pind läbis aatomite keskpunkte ning moodustas seetõttu nimetatud asukohtades materjali pinna geomeetrilise esituse, mis muudab elektriväljade arvutamise täpsuse raskesti kontrollitavaks. Seetõttu on antud töö eesmärgiks arendada edasi kasutatavat pinna rekonstrueerimise meetodit ning moodustada Voronoi tesselatsiooni baasil pinna rekonstrueerimise meetod, mis võimaldaks täpsemaid elektriväljaarvutusi.

Samuti on töö eesmärgiks näidata nii võrgu ehituse kui arvutusliku täpsuse paranemist simuleeritavas süsteemis võrreldes eelnevalt välja töötatud meetoditega

Töö üldist eesmärki on võimalik jaotada alameesmärkideks:

- Voronoi tesselatsiooni abil pinna rekonstrueerimismetodi välja töötamine.
- Välja töötatud meetodi võrdlemine varasemalt loodud pinna rekonstrueerimismetoditega.
- Elektriväljaarvutuste võrdlemine varasemate tulemustega.

- Pinnalaengute arvutamine.
- Pinna silumise mõju uurimine rekonstrueeritud pinnale.

Eelkõige on eesmärk selgitada välja Voronoi tesselatsiooni mõju pinna rekonstrueerimisele ja arvutatud elektriväljale ning seeläbi anda hinnang moodustatud pinna rekonstrueerimise meetodi sobilikkusest.

1.3 Autori panus

Esialgne pinna rekonstrueerimist sooritav meetod oli tehtud Vahur Zadin'i ja Robert Aare poolt. Selles meetodis kasutati pindade rekonstrueerimiseks trianguleerimise põhimõtet, mille tulemusel saadi pind, mida seejärel siluti. Autor lahendas Voronoi tesselatsiooni implementeerimisega eelnevalt tekkinud probleemid ning seejärel uuris, kuidas moodustatud pinna rekonstrueerimise meetodi rakendamine mõjutab simulatsioonides arvutatavaid elektriväljatugevuse tulemusi vase näitel.

2. Teoreetiline ülevaade

2.1 Delaunay triangulatsioon

Triangulatsioonid ning eriti Delaunay triangulatsioonid on uuritud arvutuslikus geomeetrias juba pikka aega [13]. Samuti on Delaunay triangulatsiooni arvutamine üle n punktiga hulga S klassikaline arvutusliku geomeetria probleem [14].

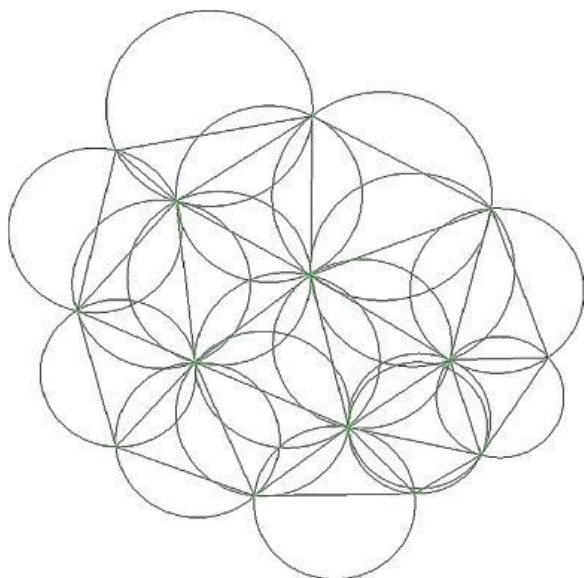
Definitsioon: Antud hulga S , mille punktid on d -dimensionaalses ruumis, Delaunay triangulatsioon $\mathcal{DT}(S)$ on defineeritud järgmise omaduse kaudu: hulga S $d + 1$ punkti on Delaunay tetraeedri tipud siis ja ainult siis kui sfäär, mis läbib neid punkte, ei sisalda mitte ühtegi hulga S punkte [14].

Definitsiooni järgi ei ole seega olemas Delaunay triangulatsiooni ühel ja samal sirgel asuvate punktide jaoks. Samuti tuleb välja ka Delaunay kriteerium, mis on tuntud ka tühja ümberringjoone kriteeriumi nime all: üheski triangulatsioonikolmnurga ümberringjoone sees ei tohi olla muid punkte peale kolmnurga tippude. Kahedimensionaalses ruumis on Delaunay tessellatsioon tavaline kolmnurkade jada. Kolmedimensionaalsel juhul on tegemist ruumi täitva ühisosata ebaregulaarsete tetraeedritega ning seda võib lihtsustada eriliselt kolmedimensionaalseks triangulatsiooniks [15].

Delaunay triangulatsioon on samuti geomeetriselt duaalne Voronoi tessellatsiooniga, mida kasutatakse ka väga paljudes rakendusteadustes. Sealjuures ka polükristalliliste materjalide uurimisel, näiteks nende materjalide mudeli loomisel [15].

Delaunay triangulatsiooni tingimustest tuleneb, et moodustuvad kolmnurgad on „hea“ kujuga, mis tähendab, et need pole liiga kitsad ega ka laiad [16]. Kolmnurgad suuremate sisemiste nurkadega on eelistatud kolmnurkadele väiksemate sisemurkadega.

Suvaline triangulatsioon \mathcal{T} on Delaunay triangulatsioon juhul kui iga simpleksite paari puhul kehtib tühja sfääri kriteerium, mis kehtib ka globaalselt [17]. Simpleksid on ühedimensionaalsel juhul jooned, kahedimensionaalsel juhul kolmnurgad ning kolmedimensionaalsel juhul tetraeedrid.



Joonis 2.1. 14 punkti Delaunay triangulatsioon [16].

2.2 Voronoi tesselatsioon

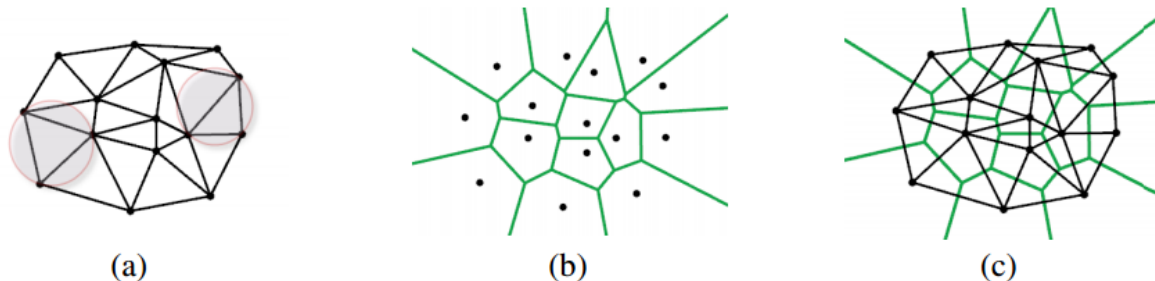
Kahedimensionaalsel juhul on suvalise punktihulga Voronoi tesselatsioon antud ulatuses Ω , mille puhul $p_i \in \Omega \subset \mathfrak{R}^2$, moodustub alamhulkade $V(p_i)$ omavahelisel liitmisel. Punkti p_i nimetatakse generaatoriks ning V_i on punkti p_i rakk. Voronoi tesselatsiooni iga rakk konstrueeritakse poolsfääride kokkupuutepunktidest [18].

$$V_i = \{p \in \mathfrak{R}^2 : |p_i, p| < |p_j, p|, \forall j \neq i\}, \quad (1)$$

kus $|\cdot, \cdot|$ tähistab eukleidilist kaugust [1]. Definiitsiooni järgi moodustavad kõik Voronoi rakud kumera hulknurga. Ilma ühegi lisapiiranguta ulatub Voronoi tesselatsioon üle kogu ruumi, $\cup_i V_i \equiv \mathfrak{R}^2$. Antud juhul võivad mõned Voronoi rakud olla lõpmatud [18]. Kahedimensionaalne Voronoi tesselatsioon on triviaalselt üldistatav kolmedimensionaalsele juhule.

Tahkiste füüsikas tuntakse Voronoi tesselatsiooni Wigner–Seitz'i jaotusena. Kolmedimensionaalses ruumis võivad Voronoi rakkude kujud minna geomeetriselt väga keeruliseks [18]. Voronoi rakk koosneb sellele vastavatest verteksitest ehk raku keskpunkti ümbritsevatest punktidest.

Voronoi jaotus on tihedalt seotud Delaunay tesselatsooniga. Kahedimensionaalses ruumis on tegemist triangulatsiooniga. Delaunay triangulatsiooni kolmnurgad komplekteeritakse, kui kolme ühendatud punkti $\Delta(p_i, p_j, p_k)$ ümberringjoone sees ei asu ühtegi teist punkti [18].



Joonis 2.2. (a) Antud punktihulga Delaunay triangulatsioon, (b) sama punktihulga Voronoi tesselatsoon ning (c) Delaunay ja Voronoi tesselatsooni omavaheline duaalsus.

Delaunay jaotuse olemasolul on väga lihtne konstrueerida Voronoi tesselatsooni. Samuti iga Voronoi raku generaatorpunkt vastab Delaunay kolmnurga ümberringjoone keskpunktile (joonis 2.3 1c). Sealjuures asuvad kolmnurkade küljed vastava Voronoi raku küljega risti. Läbi nende lihtsate seoste on saab Voronoi raku formeerida kolmnurkade abil, mis sisaldavad generaatorpunkte ühiste sõlmpunktidenä [18].

Mainitud kahe tesselatsooni sõltuvus on arvutuslikult kasulik eelkõige Voronoi jaotuse konstrueerimiseks Delaunay jaotuse abil.

2.3 Lõplike elementide meetod

Lõplike elementide meetodi (LEM) põhiidee on, et uuritava objekti mingit omadust väljendavat pidevat funktsiooni võib aproksimeerida (lähendada) diskreetse mudeliga, mis koosneb tükiti pidevatest funktsioonidest. Need funktsioonid on määratud igaüks mingis alampiirkonnas, mille arv peab olema lõplik [19].

LEM'i rakendamise põhiskeem on lühidalt järgmine:

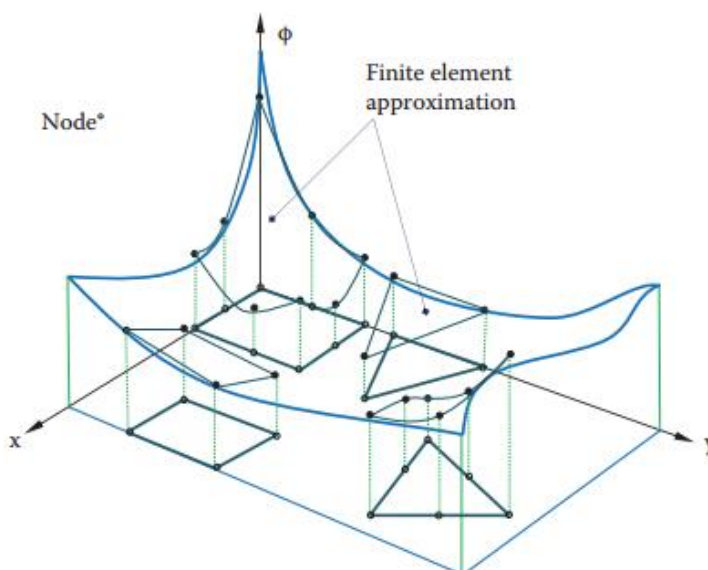
1. Uuritava objekti vaadeldavas piirkonnas (määramispiirkonnas) fikseeritakse lõplik arv punkte. Neid punkte nimetatakse sõlmpunktideks ehk lihtsalt sõlmedeks [19].
2. Arvutatava funktsiooni väärtused nendes sõlmedes loetakse tundmatuteks [19].

3. Kogu määramispiirkond jaotatakse lõplikuks arvuks alampiirkondadeks, mida nimetatakse elementideks. Naaberelementidel peavad olema ühised sõlmpunktid. Kõikide elementide kogusumma peab määramispiirkonna täpselt kokku andma [19].
4. Pidev arvutatav funktsioon aproksimeeritakse igas elemendis polünoomiga, mis defineeritakse funktsiooni väärtuste alusel sõlmpunktides. Igas elemendis võetakse erinev polünoom, kuid need valitakse nii, et funktsiooni pidevuse tingimused elementide rajajoontel (-pindaladel) oleksid täidetud. Seda polünoomi nimetatakse elemendi funktsiooniks. Nendest elemendi funktsioonidest moodustub tükiti pidevate funktsioonide hulk, mis hõlmab kogu määramispiirkonna [19].
5. Lineaarvõrrandite süsteemi tuletamine antud objekti iseloomustava funktsionaali minimeerimise kaudu [19].
6. Selle süsteemi lahendamine sõlmväärtuste suhtes [19].
7. Kõigi vajalike suuruste lõplik arvutamine igas elemendis [19].

2.3.1 Võrk

Lõplike elementide meetodi võrguks on mingisuguse hulga jaotamine alamhulkadeks, mida kutsutakse elementideks, nii et iga hulga punkt on leitav ühest elemendist. Kogu hulk tuleb katta elementide poolt ilma üksteisepoolse ülekatteteta. Samuti peavad rahuldatud olema ka ühilduvustingimused lõplike elementide puhul ka äärtel [16].

Kahedimensionaalsed hulgad saab diskretiseerida kolmnurkseteks, nelinurkseteks või nende elementide seguks.



Joonis 2.3. Pind aproksimeeritud lõplike elementide meetodil [16].

Fundamentaalne erinevus kahedimensionaalse ja kolmedimensionaalse hulga vahel on, et 2D äärtes saab alati teha võrku ilma sõlmede lisamiseta. 3D-juhul esineb aga geometriaid, mille puhul see ei ole võimalik. Lisaks ei eksisteeri mingit süstemaatilist meetodit otsustamiseks, kuhu need sõlmed tuleks lisada, analüütilised lahendid puuduvad, mis viib ka heuristilise loomuga iteratiivsete algoritmide arendamiseni spetsiifiliste juhtumite puhul [16].

2.4 Kimocs

Kimocs [20] on välja arendatud kineetiline Monte Carlo meetod (KMC) pinnaevolutsiooni uurimiseks aatomskaalas. Iga KMC sammuga võib üks aatom hüppata kristallvõre täitmata naaberpositsioonile. Aatomite üleminekuprotsessid on termiliselt aktiveeritud ning nende üleminekusagedused on antud Arrheniuse valemiga:

$$\Gamma = \nu * \exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right), \quad (2)$$

kus ν on protsessi katsete sagedus, k_B Boltzmanni konstant, T süsteemi temperatuur ning E_m aatomi ühest võre punktis teise ülemineku energiabarjäär (aktiveerumise energia) [20].

Kimocs'is on kõik aatomite üleminekuprotsessid karakteriseeritud esimeste lähimate (1nn) naabrite ja teiseste lähimate (2nn) naabrite järgi alg- ja lõppasukohas. Vastavalt tähistatud algolekus a ja b ning lõppolekus c ning d . Seega on migratsioonienergia määratud nelja indeksi kaudu: $E_m(a, b, c, d)$.

Samuti on *Kimocs*'is võimalikud kolm erinevat kristalli orientatsiooni: $\{100\}$, $\{110\}$ ja $\{111\}$. Ääritingimused võivad olla perioodilised kõigis kolmes suunas. Mitteperioodiliste ääritingimuste korral eemaldatakse kõik ülemise piirini ulatuvad aatomid, kuid alumise äärel olevad loetakse sisemisteks aatomiteks ning on fikseeritud.

Ajaline inkrement iga KMC sammu korral arvutatakse vastavalt algoritmile :

$$\Delta t = \frac{-\log(u)}{\sum_i \Gamma_i}, \quad (3)$$

kus summa võetakse üle kõigi võimalike sündmuste i iga simulatsiooni sammu juures, kus $u \in (0,1]$ on suvaline arv [20].

2.5 Elektriväli

Käesolevas töös loodavale pinna rekonstrueerimise meetodile hinnangu andmiseks on vajalik sooritada atomistlikule struktuurile leitud pinnale vastavad elektriväljarvutused. Loodud tingimustele kohase elektrivälja leidmiseks saab kasutada Laplace'i võrrandit:

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}) = 0, \quad (4)$$

kus $\phi_v(\vec{r})$ on elektrostaatiline potentsiaal.

Sellele võrrandile saadakse lahendused, kaasates süsteemi ette antud ääritingimused:

1. Vase juhtivuse tõttu on tal pinna kohal konstantne elektrivälja potentsiaal, mistõttu arvestatakse Dirichlet' ääritingimust, mille järgi:

$$\phi_v(\vec{r}) = 0, \quad (5)$$

kus $\phi_v(\vec{r})$ on vaakumi potentsiaal.

2. Pinnale rakendatud väline elektriväli on konstantne simulatsioonikasti ülemisel piiril, vase pinnast kaugel. See viib tingimuseni, kus:

$$\vec{E} = -\nabla \phi_v(\vec{r}) = \vec{E}_0, \quad (6)$$

kus \vec{E} on elektriväli ning \vec{E}_0 rakendatud elektriväli.

3. Simulatsioonikasti külgede tõttu on veel üks ääritingimus:

$$\vec{n} \cdot \vec{E} = 0, \quad (7)$$

kus \vec{n} tähistab pinna normaalvektorit. See tähendab, et elektriväli on simulatsioonikasti äärtes sellega paralleelne.

Elektrivälja potentsiaali leidmiseks antud ääritingimuste jaoks tuleb lahendada Laplace'i võrrandi lõplike elementide meetodiga. Leitud potentsiaali tulemustest arvutatakse elektriväli igas punktis rekonstrueeritud pinna kohal:

$$\vec{E} = -\nabla\phi \quad (8)$$

Väljavõimendustegur leitakse valemiga:

$$\beta_{võimendus} = \frac{\vec{E}}{E_0} \quad (9)$$

2.6 Aatomitega seotud laengu jaotus elektrivälja rakendamisel

Välise elektrivälja rakendamisel materjalile toimub materjali pinnal elektrilaengute jaotuse modifitseerimine selliselt, et uuritavas (metallist) kehas väline elektriväli puuduks. Kui elektrivälja jaotus uuritavas süsteemis on vastavalt võrranditele (4)-(8) leitud, saab pindlaengu tiheduse arvutada kasutades võrrandit :

$$\sigma = \varepsilon_0 |\vec{E}|, \quad (10)$$

kus ε_0 on vaakumi dielektriline konstant. Samas, pindlaengu tihedus on kasutatav ainult pidevates süsteemides, nagu LEM-i rakendamisega keskmistatud mudel. Atomistlike (diskreetsete) süsteemide simuleerimiseks ning igale aatomile mõjuvate jõudude arvutamiseks on tarvis leida, arvutatud pindlaengu tiheduse põhjal, konkreetse aatomiga seotud laeng. Aatomiga seotud lisalaengu saamiseks kasutatakse valemit:

$$q_j = \sum_{i=0}^{N_j} \Delta q_j^i \quad (11)$$

kus q_j tähistab j aatomi laengut, mis leitakse punkti j ümbritsevate osalaengute Δq_j^i summana ning N_j tähistab võrgu punktide arvu [21]. Vastavad osalaengud Δq_j^i leitakse valemiga:

$$\Delta q_j^i = \varepsilon_0 E_{xyz}^i A_{xyz}^j \quad (12)$$

E_{xyz}^i mõjuva elektriväljale vastav komponent võrgu punktis i ning A_{xyz}^j aatomi vastava külje karakteristiklik pindala. Sealjuures on mõjuv elektrivälja komponent ning külje pindala omavahel risti [21].

2.7 Atomistlike pindade rekonstueerimine elektrivälja arvutusteks

2.7.1 Hybrid Electrodynamics – Molecular Dynamics Method (HELMOD)

Stefan Parviainen on Helsingi Ülikoolis välja töötanud hübriidse elektrodünaamika – molekulaardünaamika (HELMOD) mudeli, mis baseerub klassikalisele molekulaardünaamika koodile PARCAS [21]. Lisaks tavalistele aatomivahelistele interaktsioonidele arvestab HELMOD ka rakendatud välise elektrivälja mõju metalli pinnale. See mudel arvutab mittedatadel pindadel lokaalse elektrivälja, mis on tugevam võrreldes rakendatud elektriväljaga. Samuti arvutab välja poolt indutseeritud osalaengud pinna-aatomitel. Sealjuures arvestab mudel ka elektronemissioonist tulenevat takistuslikku soojenemist ning elektroonset soojusjuhtivust, mida samuti tavalistes molekulaardünaamika simulatsioonides ei arvestata. Mudeli abil on võimalik simuleerida dünaamilist pinnaevolutsiooni [22].

Elektrivälja, voolu ning temperatuuri jaotuse leidmiseks kasutab HELMOD lõplike vahede meetodit. Kuna HELMODi mudelis koosneb pind diskreetsetest aatomitest, siis on selle geomeetria ka märgatvalt robustsem kui lõplike elementide meetodi abil tehtud sile geomeetria. Mida väiksemad on geomeetriad, seda suuremad on mainitud erinevused.

2.7.2 Trianguleerimise põhimõtet kasutav meetod

Robert Aare et. al. lõid esialgse pinna rekonstrueerimise meetodi, mis võtab sisendiks *Kimocs*'i väljundfaili, kus on defineeritud olulised andmed: aatomite tüübid – nende kuuluvus aatomstruktuuris – ja koordinaadid. Tegemist on meetodiga, kus *TetGen* tarkvara kasutades luuakse atomistliku struktuuri alusel ruumvõrk. Selle meetodi puhul koostatakse algse punktipilvest elementide süsteem, mis säilitab samas ka andmed pinna asukohast selles süsteemis – tehakse võrk. Antud juhul asuvad ruumvõrgu sõlmpunktid algse punktipilve aatomkoordinaatides. Moodustatud ruumvõrgule lisatakse ka vaakumisosas asuv võrk, mis saadakse punktide ja sealjuures ka elementide lisamisel vaakumisse. Saadud ruumvõrgus

defineeritakse materjali ja vaakumi piirpind koos sinna kuuluvate pinnaelementidega, mis moodustavad pinnavõrgu. Sel meetodil on ka puudus – kuna sõlmpunktid asuvad aatomkoordinaatides, siis see tähendab, et pinnast välja ulatuvate aatomite kohale tekivad teravad nurgad, mille läheduses tulevad anomaalsed tulemused. Teravates nurkades muutuvad elektriväljaarvutused lõplike elementide meetodi tõttu ebatäpseks. Antud töös tutvustatakse Voronoi tessellatsiooni kasutatavat meetodit kõrvaldada mainitud probleeme.

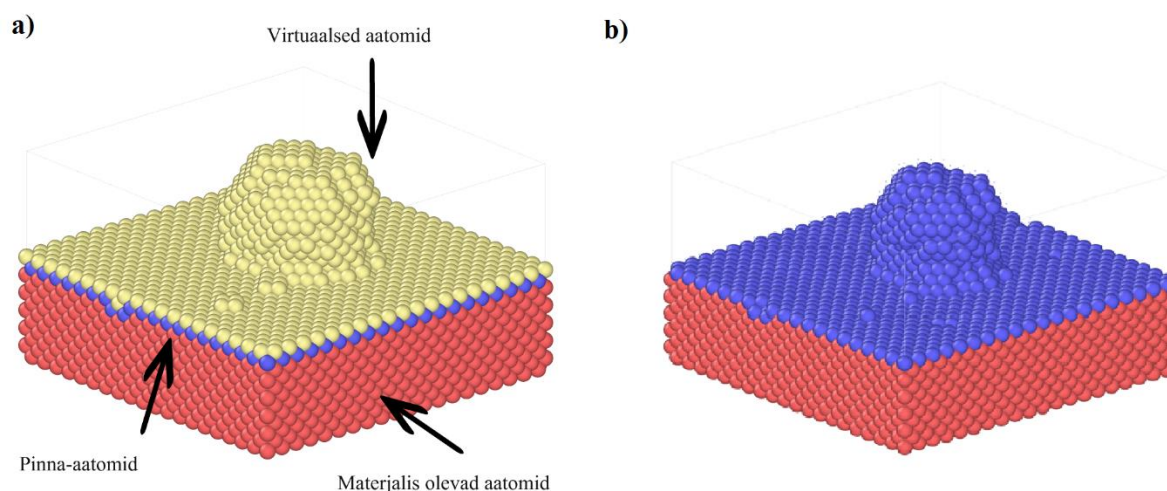
2.7.3 Aatomsondeerimistomograafia (atom probe tomography) pinna rekonstruktsioon

Christian Oberdorfer et al. [18] komplekteerisid täismõõdulise simulatsiooniprotsessi mõistmaks paremini aatomsondeerimise tomograafia iseärasusi ja eksperimentaalseid tulemusi. Loodud meetodi raames tehakse ka pinna rekonstruktsioon. Selle meetodi puhul kasutatakse pinna rekonstruktsiooni tegemiseks tavalist kuupvõre. Samuti võetakse kuubikujuliseks ka uuritava emitteri aatomid. Oberdorfer et al. kasutavad pinna rekonstruktsiooni tegemiseks sarnaselt käesoleva tööga Voronoi tessellatsiooni. Antud meetodis on välja toodud, et tulemuslikud arvutused, sealhulgas ka elektriväljaarvutused, sooritatakse kui igale Voronoi võrgu generaatorpunktile vastab struktuuri aatomi asukoht. Seega on sel juhul iga aatomi mõõtmed defineeritud temaga seotud Voronoi raku kaudu. Mainitud omavaheline sõltuvus muudab emitteri struktuuri piirangutevabaks [18].

3. Metoodika

3.1 Simuleeritud süsteem

Arvutuste tegemiseks on esmalt vaja sisendfaili, mis tehakse kineetilise Monte Carlo meetodit kasutava *Kimocs*'i abil. Sealt saadakse kätte vajalikud andmed aatomite koordinaatide ja nende tüüpide kohta – saadakse atomistlik pind, mis on katsetatava meetodi sisendiks. Elektrilisi läbilööke vase pinnal seostatakse tasapinnast eenduvate struktuuridega ehk emitteritega. Seetõttu on huvipakkuvad nii tasane pind kui ka pinnast välja ulatuvad struktuurid – praegusel juhul „seenja“ kujuga emitteri struktuuri. Lisaks tehakse igale rekonstrueeritud pinnale ka nende geometriatele vastavad elektriväljaarvutused.



Joonis 3.1. (a) „Seenja“ kujuga andme pilvest loetav atomistlik struktuur, (b) Antud töös huvitav pind ehk vaid pinna-aatomid ja materjalis olevad aatomid.

3.2 Pinna rekonstrueerimise meetod

Antud meetod loodi põhjusel, et lihtsustada pinna rekonstrueerimist ning pinnavõrgu loomist, mille abil oleks võimalik saada paremaid tulemusi elektriväljaarvutustes. Optimeerimist aitab teha *TetGen*’i tarkvara.

Kõigepealt loetakse sisse andmefail, kus on defineeritud nii aatomite struktuur kui ka nende tüüp analüüsitava pinnas. Saadakse kätte aatomite koordinaadid ja nende kuuluvus. Aatomitüübid on: pinna-aatomid, materjali siseaatomid ning virtuaalsed aatomid. Vaid pinnal

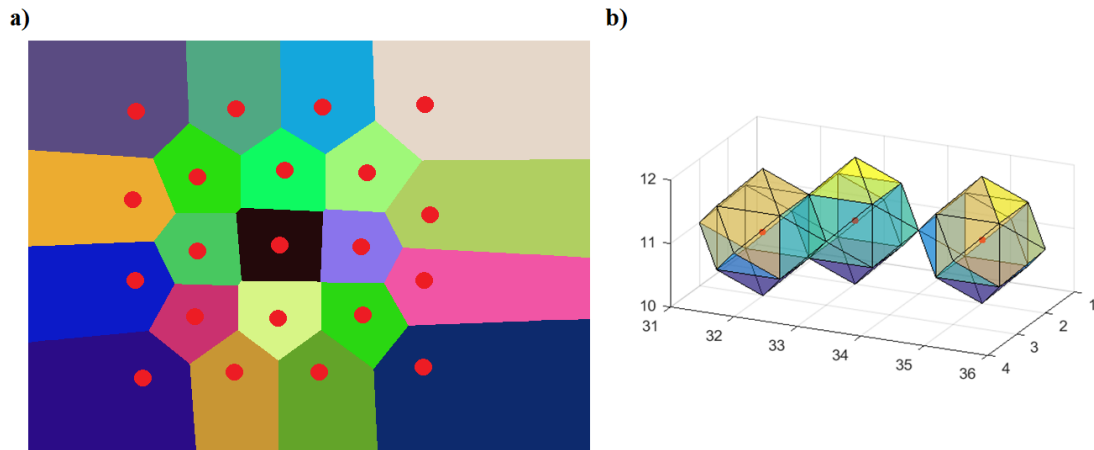
ja materjalis paiknevad aatomid on pinna rekonstrueerimise mõttes huvipakkuvad. Nagu eelnevalt on teada, saavad Voronoi tesselatsiooni tegemisel äärekoordinaadid lõpmatu suure väärtuse – seetõttu eksisteerib ka pinnapealne kiht aatomeid. Seetõttu tuleb teha Voronoi tesselatsioon kasutades kõiki aatomeid. Seejärel tähistades meid mittehuvitavad aatomid välja.

3.2.1 Voronoi rakkude kasutamine

Kõikidest aatomitest koosneva andmehulga põhjal Voronoi tesselatsiooni tegemiseks kasutatakse MATLAB-i funktsiooni *voronoin* ja saadakse seeläbi kätte 2 andmehulka. Üks hulk on Voronoi verteksite koordinaadid ning teine hulk näitab millistest punktides vastav Voronoi rakk koosneb. Kui sellest eelnevate meetodite puhul asusid sõlmpunktides aatomkoordinaadid, mis viis arvutuslike ebatäpsusteni, siis praegusel juhul asuvad seal Voronoi rakkude koordinaadid. Seega on iga Voronoi raku keskpunktis vastava sisse loetud punktipilve aatomite koordinaadid (Joonis 3.2).

Kuna Voronoi meetodi kasutamine tekitab igas suunas definitsiooni järgi punkte, mille koordinaadid ulatuvad lõpmatusse (antud juhul liiga kaugemale), siis need punktid võrdsustame hilisema modifitseerimise lihtsustamiseks nulliga. Nagu eelnevast järeldub, ei paku virtuaalsed aatomid otsest huvi, kuna neid reaalselt ei eksisteeri. Seetõttu ka neid aatomeid ei kasutata pinna rekonstrueerimisel – vajalikud aatomid saab kätte jättes lihtsa indekseerimisega välja pinna kohal olevad aatomid. Seejärel on võimalik üldise tingimusena tuvastada kõik ääreverteksid ning neid mitte kasutada Voronoi pinda defineeriva objektina. Sellega oleme kätte saanud pinna-aatomite ja materjali osa aatomite Voronoi verteksid.

Seejärel leitakse Voronoi verteksite ja rakkude triangulatsioon. Arvutusliku osa kiirendamiseks eraldame globaalse triangulatsiooni jaoks mälu ette ära.



Joonis 3.2. (a) 2D Voronoi tesselatsioon, kus punased punktid on sisendpunktid ning samas ka Voronoi raku keskpunktid. (b) analüüsitavas pinnas konstrueeritud üksikud 3D-Voronoi rakud, kus punane täpp näitab Voronoi raku keskkoha, kuid samuti antud Voronoi raku aatomi asukohta.

3.2.2 Delaunay triangulatsiooni rakendamine

Igasuguste punktipilvedest pinna loomiseks on vajalik leida triangulatsioon, milles on antud informatsioon punktide omavahelise ühendamise kohta. Seda on vaja ka Voronoi punktide puhul, et saaksime koostada Voronoi tesselatsiooni abil pinna rekonstruktsiooni. Eelnevalt on teada, et Delaunay triangulatsioon ja Voronoi tesselatsioon on duaalsed. Kasutades MATLAB-i funktsiooni *delaunay* saadakse kätte loogika tetraeedrite põhise punktide omavahelise ühendamise kohta ning kui see vastavusse seada Voronoi rakkudega, mis ei asu vaakumis, siis omandatakse vajalik informatsioon Voronoi verteksite ja rakkude omavahelise ühendamise kohta – saab luua pinna.

3.2.3 Võrgu tegemine

Pinnavõrgu tegemine toimub spetsiaalse algoritmi abil, mis annab simuleeritavale mudelile lõplikud omadused. Esmalt leitakse eelnevalt loodud triangulatsioonist põhja- ja küljelemendid – nii on võimalik eristada materjali ja vaakumi piirpinda. Pärast seda luuakse eelnevalt defineeritud pinna kohale juurde andmepunkte, mida kutsutakse vaakumpunktideks. Järgnevalt leitakse ette antud punktihulka ümbritsev pind, mis koosneb aatomite ja vaakumisse

lisatud punktide asukohtadest. Selleks kasutatakse MATLAB'is defineeritud funktsiooni *convhull*, mis loob ka pinnapunktidele triangulatsiooni. Seejärel kustutatakse kogu mudelis ära pinnaelemendid, välja arvatud materjali-vaakumi piirpind. Järgmisena kombineeritakse omavahel simulatsioonikasti ääred ja materjali-vaakumi piirpind. Eemaldatakse dubleeritud ning isoleeritud punktid. Seejärel leitakse *TetGen* tarkvara kasutades pinnavõrk. Pinna võrguelemendid ei kattu, isegi mitte osaliselt, sest ümbritsev pind ning pinna võrk on leitud samast punktihulgast.

Seega on tehtud Voronoi meetodit rakendades aatomkoordinaatide abil ruumvõrk, millele lisatakse ka vaakumisse konstrueeritud ruumvõrk, mis on tehtud sinna juurde tekitatud punktide ja elementide abil. Samuti kirjeldatakse eraldi materjali-vaakumi piirpind, mis on saadud kõikide simulatsioonis leitud pindade lahutamisel kogu geomeetriast.

3.3 Pinna silumine

Peale lõpliku võrgu tegemist võib osutada vajalikuks saadud pinna silumine. Seetõttu uuritakse silumise mõju pinnale ja ka elektriväljadele. Käesolevas töös on kasutatud pinna silumiseks kolme erinevat filtrit: *laplacian*, *laplacianhc* ning *lowpass*.

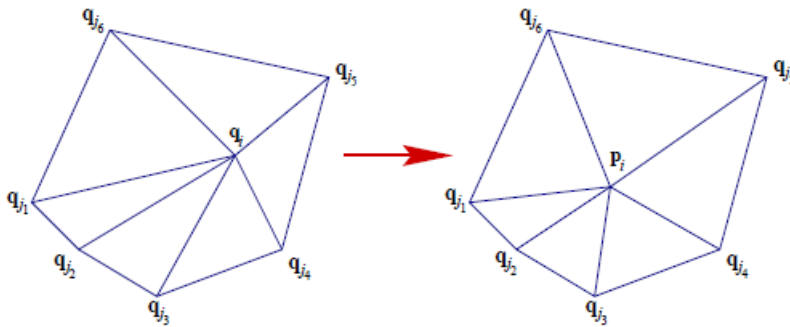
3.3.1 Laplace'i silumismeetod

Laplace'i silumisfilter põhineb lihtsal algoritmil: verteksi i p_i positsioon asendatakse naaberverteksite keskmise positsiooniga. Seega saadakse:

$$p_i := \begin{cases} \frac{1}{|naaber(i)|} \sum_{j \in naaber(i)} q_j & i \in V_{muudetav} \\ q_i & i \in V_{fikseeritud} \end{cases} \quad (13)$$

Kus p_i tähistab verteksi i uut positsiooni, q_i algset positsiooni ning q_j naabepunktide positsioone ning $V_{muudetav}$ ja $V_{fikseeritud}$ vastavalt muudetavate ja fikseeritud vertekseid [23]. *ISOTOMESH* tööriistakomplekti *Smoothsurf* meetodis leitakse antud Laplace'i silumisalgoritmi kasutamisel uued punktide positsioonid, võttes arvesse kasutaja poolt ette antud silumisparameetrit α , mille abil leitakse algse punkti osakaal uue punkti asukohast, kasutades lihtsat arvutust $1 - \alpha$, millega korrutatakse algse punkti asukohta. Seejärel

arvutatakse naaberpunktide osakaal, mille puhul korrutatakse naabrite asukohtade keskmist parameetriga α .



Joonis 3.3. Laplace'i silumisalgoritmi visualiseeritud põhimõte [23].

Laplace'i silumine on polügonvõrkudele mõeldud algoritm [24].

3.3.2 Laplace'i HC silumismeetod

Laplace'i HC filtri idee on lükata Laplace'i meetodiga modifitseeritud punkte p_i tagasi nende algsete ja eelmiste kohtade, vastavalt o_i ja q_i poole, keskmiste erinevuste võrra. Seda kirjeldavad valemid:

$$b_i = p_i - (\alpha o_i + (1 - \alpha)q_i), \quad (14)$$

$$d_i = -\frac{1}{|naaber(i)|} \sum_{j \in naaber(i)} b_j, \quad (15)$$

kus b_i tähistab punktide uusi asukohti, p_i Laplace'i silumisfiltriga modifitseeritud punktide asukohti, o_i algsete punktide asukohti, q_i eelmiste punktide asukohti, d_i on i punkti naabrite asukoha keskmine erinevus ning b_j naabri j asukohamuutus [23].

elemendid. Seda silmas pidades uurime silumise iteratsioonide ja silumisparameetrite mõju rekonstrueeritud pinnale.

Smoothsurf meetod pinna silumiseks tahab sisenditeks saada pinnavõrgu punktide koordinaate, parameetrit muutmatute punktide kohta, infot võrgu naabrite kohta, silumisiteratsioonide arvu, silumisparameetrit α , silumismeetod ning Laplace'i HC meetodi kasutamise korral ka teist silumisparameetrit β . Neist sisenditest on 4 kasutajast sõltuvad – mõlemad silumisparameetrid, -iteratsioonid ja -meetod. Silumisiteratsioonidest sõltub mitu korda ta ühe tsükli jooksul punkte modifitseerib. Silumisparameetri valik on sisuliselt vaba, kuid tuleb arvestada, et liigsete iteratsioonide korral kaotab Voronoi rakkude kasutamine mõtte. Silumismeetoditeks on valida ülalmainitud Laplace'i, Laplace'i HC või *lowpass* filtrid.

3.4 Kasutatud tarkvara

Antud töös ääre- ja simulatsioonitingimusi arvestavad arvutused on sooritatud tarkvaraga COMSOL Multiphysics 4.4. Elektrivälja leidmiseks vajaliku Laplace'i võrrandi lahendamiseks on kasutatud antud tarkvara *Electrostatics* moodulit.

Käesoleva töö kõige olulisema osa – Voronoi tessellatsioonipõhise pinna rekonstruktsiooni meetodi töötas autor välja kasutades tarkvara MATLAB R2015a. Samuti luuakse MATLAB-i kasutades elektriväljaarvutusteks vajalik ruumvõrk.

Atomistliku struktuuri esitamiseks joonistel on kasutatud vabavaralist visualisierimistarkvara Ovito.

4. Tulemused ja analüüs

4.1 Voronoi tesselatsiooni kasutatav meetod

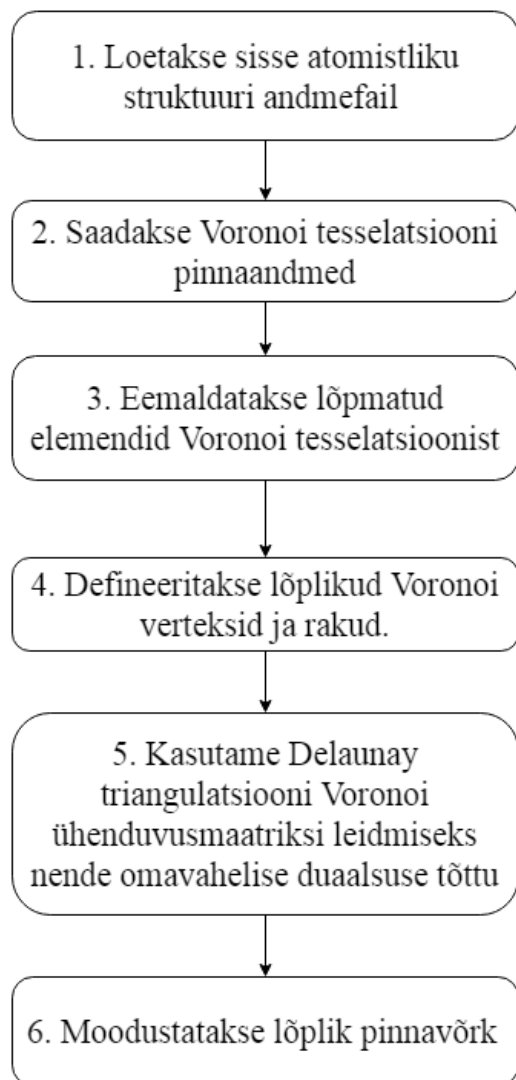
Käesoleva töö raames töötas autor edukalt välja Voronoi tesselatsiooni kasutava pinna rekonstrueerimise meetodi, mida saab rakendada erineva geomeetrilise struktuuriga punktipilvede uurimiseks. Lihtsustamaks arusaamist tehtud meetodist, tuuakse välja koostatud koodi struktuur koos selgitustega.

1. Loodud Voronoi meetodi puhul loetakse esmalt sisse andmefail, kus on defineeritud punktipilve struktuur – aatomite koordinaadid ning nende tüüp – tehakse maatriksid aatomite indeksite jaoks ning vastavate koordinaatide jaoks.

2. Voronoi meetodi rakendamine algab Voronoi muutujate defineerimisega: $[v, c] = \text{voronoi}(surface.atom_coord)$ – sellega kirjeldatakse Voronoi verteksite koordinaadid maatriksis v ning Voronoi rakkude punktid maatriksis c .

3. Seejärel modifitseeritakse verteksite koordinaate, sest esialgses Voronoi pinnas leiduvad punktid, mille asukoht on lõpmatuses või siis hoopis väärtuseta – $v(isinf(v)==1)=0$ annab igale punktile, mis asub lõpmatuses, väärtuse null, sest need punktid pole oma asukoha tõttu olulised; $v(isnan(v)==1)=0$ annab kõikidele punktidele, millele pole antud koordinaate, samuti väärtuse null, sest väärtuseta punktid pole olulised.

Järgnevalt leitakse $surface_atoms=find(surface.atom_index\sim=3)$ abil aatomite indeksid, mis asuvad kas materjalis või siis pinnal, kuna vaid need on huvipakkuvad – virtuaalsed vaakumis paiknevad aatomid (indeksiga 3) ei ole vajalikud pinna rekonstrueerimisel.



Joonis 4.1. Voronoi pinna rekonstrueerimise meetodi plokk skeem.

Allpool tuuakse välja lühikese *for* tsükli, millega eemaldatakse mittesoovitav punkt, mis on koordinaatide alguspunkt koordinaatidega (0,0,0), Voronoi rakkude kooslusest:

```
for s = 1:numel(c)
    if c{s,1}(1) == 1;
        c{s,1}(1)=[];
    end
end
end
```

Toodud tsükli pikkus sõltub Voronoi rakkude arvust, mis on defineeritud maatriksis *c*. *If* lause kontrollib, kas antud Voronoi rakus kasutatakse mittesoovitavat punkti – kui jah, siis see punkt elimineeritakse antud rakust.

4. Edasi lisatakse saadud Voronoi rakud ja verteksid pinda kirjeldavate elementide hulka. Selleks on kasutatud käskluseid *surface.voronoi_vertex=v surface.voronoi_cell=c*.

5. Järgmise sammuna on vajalik teha Voronoi rakkude ühenduvusmaatriks – selle abil on võimalik rekonstrueerida koos Voronoi punktide ja verteksitega pinna. Enne seda tuleb aga arvutada välja Delaunay tetraeedrite põhine triangulatsioon. Arvutuste kiirendamiseks eraldame käsuga *global_tri=zeros(length(c)*20,4)* mälu triangulatsioonimaatriksi tegemiseks. Lisaks defineeritakse muutujad *startindex=1* ja *endindex=1*, et lisada leitavad uued elemendid triangulatsioonis õigele kohale. Triangulatsiooni leidmiseks on jälle vaja *for* tsükli, mille pikkus on määratud pinda defineerivate aatomite arvuga:

```
for i=1:length(surface_atoms)
    vor_tri=delaunay(v(c{surface_atoms(i)},1),v(c{surface_atoms(i)},2),v(c{surface_atoms(i)},3));
    k=c{surface_atoms(i)}(vor_tri);
    startindex=endindex;
    endindex=startindex+length(k(:,1));
    global_tri(startindex:endindex-1,:)=k(1:end,:);
end
```

Käsuga:

```
vor_tri=delaunay(v(c{surface_atoms(i)},1),v(c{surface_atoms(i)},2),v(c{surface_atoms(i)},3));
```

saadakse Voronoi koordinaatidele tetraeedritepõhise triangulatsiooni, mille modifitseerime Voronoi rakkude triangulatsiooniks käsuga $k=c\{surface_atoms(i)\}(vor_tri)$. Välja toodud koodi järgnevatel ridadel modifitseeritakse $startindex=endindex$; ja $endindex=startindex+length(k(:,1))$; uued algus maatriksi alguse ja lõppindeksid. Selle tsükli viimase sammuna lisatakse saadud Voronoi raku triangulatsioonimaatriks kogu maatriksisse.

Kuna saadud triangulatsioonimaatriksis on elemente, mis võrduvad nulliga ning mida ei kasutata pinna rekonstrueerimisel, siis eemaldatakse need käsuga $global_tri(find(global_tri(:,1))==0,:)=[]$.

Lõpuosas leitakse kõikidele Voronoi rakkudele ka topoloogilisi ja geomeetrilisi omadusi andev ühenduvusmaatriks funktsiooni $TriRep$ abiga $TR=TriRep(global_tri,v(:,1),v(:,2),v(:,3))$.

6. Viimase sammuna leitakse ka saadud pinda kirjeldava ühenduvusmaatriksi abil ruumvõrk, milleks kasutatakse käsku $[surface.b_tri,surface.b_nodes]=freeBoundary(TR)$.

4.2 Aatomit ümbritseva Voronoi raku pindala leidmine

Lisaks käesolevas töös välja töötatud pinna rekonstrueerimise meetodile, sooritati ka aatomit ümbritsevate Voronoi rakkude baasil ka aatomite karakteristiklike pindalade arvutamine, mille läbi on võimalik leida iga aatomi laengut ning sellest tulenevalt ka mõjuvat jõudu.

Karakteristlike pindalade arvutamise puhul on esimesed protsessid samad, mis joonisel (4.1) toodud plokk-skeemi punkitde 1.-4. korral. Seejärel eraldatakse arvutuskiiruse tõstmiseks mälu ette loodavatele hulkadele.

```
allareas=zeros(length(c),1);
```

```
surface_vertex_marker=zeros(length(v),1);
```

Seal defineeritakse kõigepealt hulk *allareas*, kuhu lisatakse vajaliku aatomi karakteristiklikud pindalad ning hulk *surface_vertex_marker*, mille abil tuvastatakse iga Voronoi verteksi asumist pinnal. Järgnevalt tuleb *for* tsükkel, kus leitakse uuritavaid Voronoi vertekseid ümbritsev naabrite arv.

```

for j=1:length(surface_atoms);
    surface_vertex_marker(c{surface_atoms(j)})=surface_vertex_marker(c{surface_atoms(j)})+1;
end

```

Sellele järgneb pinnal asuvate Voronoi verteksite indeksite leidmine parameetri *surface_vertexes_index* ning seejärel nende defineerimine suuruses *surface_vertexes*:

```

surface_vertexes_index=find(surface_vertex_marker<5&surface_vertex_marker>0);
surface_vertexes=surface_vertex_marker.*0;
surface_vertexes(surface_vertexes_index)=1;

```

Pindalade leidmine toimub alljärgnevas *for* tsükklis, millel omakorda on veel alamtsükkel pinnal asuvate Voronoi rakkude pindalade leidmiseks.

```

for i=1:length(surface_atoms)
    p=convhull(v(c{surface_atoms(i)},1),v(c{surface_atoms(i)},2),v(c{surface_atoms(i)},3));
    nodes=c{surface_atoms(i)}(p);
    vectorone=v(nodes(:,1),:)-v(nodes(:,2),:);
    vectortwo=v(nodes(:,1),:)-v(nodes(:,3),:);
    vectoronetwo=cross(vectorone,vectortwo);
    surface_area=sqrt(vectoronetwo(:,1).^2+vectoronetwo(:,2).^2+vectoronetwo(:,3).^2)/2;
    atomarea=0;

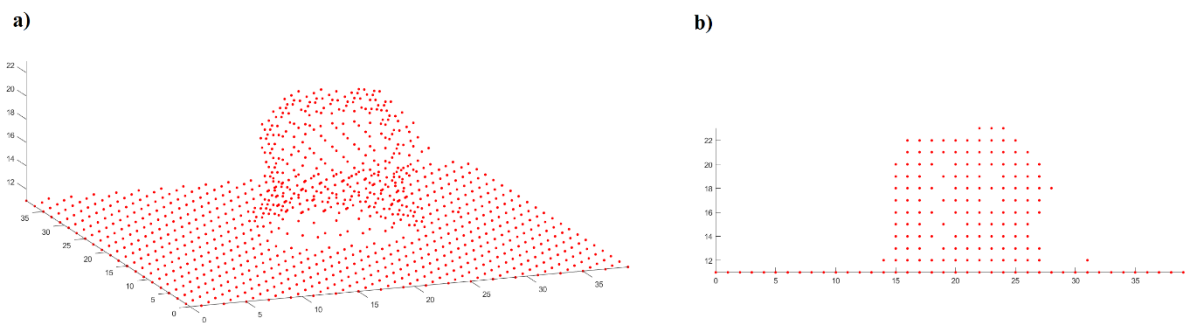
    for j=1:length(surface_area)
        m=surface_area(j);
        if surface_vertexes(nodes(j,1))==1||surface_vertexes(nodes(j,2))||...
            ...surface_vertexes(nodes(j,3))
            atomarea=atomarea+m;
        end
    end
    allareas(surface_atoms(i))=atomarea;
end

```

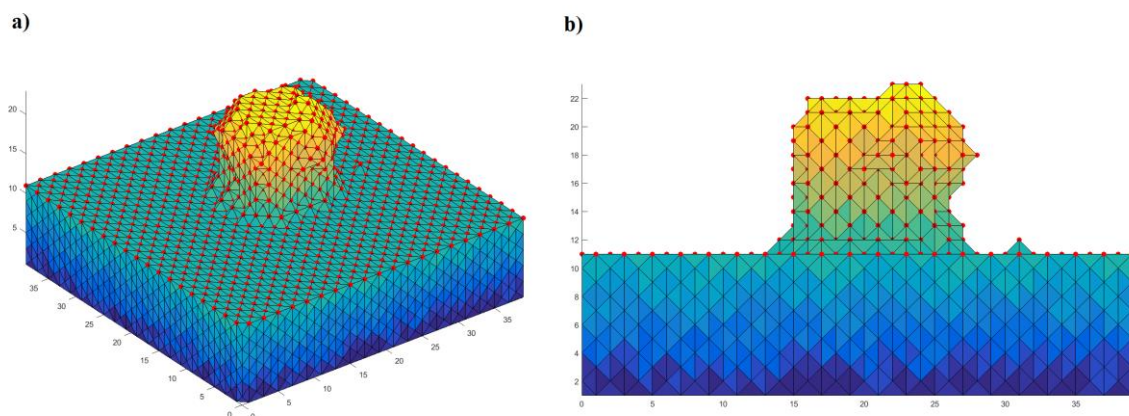
Viimase sammuna pindalade leidmisel lisatakse leitud karakteristikud pindalad käsuga $[surface.voronoi_surfacearea]=allareas$; edasiste protsesside jaoks rekonstrueeritud pinda kirjeldava osana pinnaandmete hulka.

4.3 Loodud Voronoi meetodi abil pinna rekonstrueerimine

Käesolevas töös komplekteeritud Voronoi tessellatsioonil baseeruvat pinna rekonstrueerimise meetodit kasutati ka erinevate geomeetriliste struktuuridega aatompilvede rekonstrueerimiseks. Võrdlemaks, millise pinna moodustab antud töös tehtud meetod, siis on alljärgnevalt välja toodud pinna-aatomite struktuur – täpsemalt nende koordinaadid. Seejärel leitakse antud pinnale nii endise meetodiga trianguleeritud pind kui ka autori välja töötatud meetodi põhine pind.

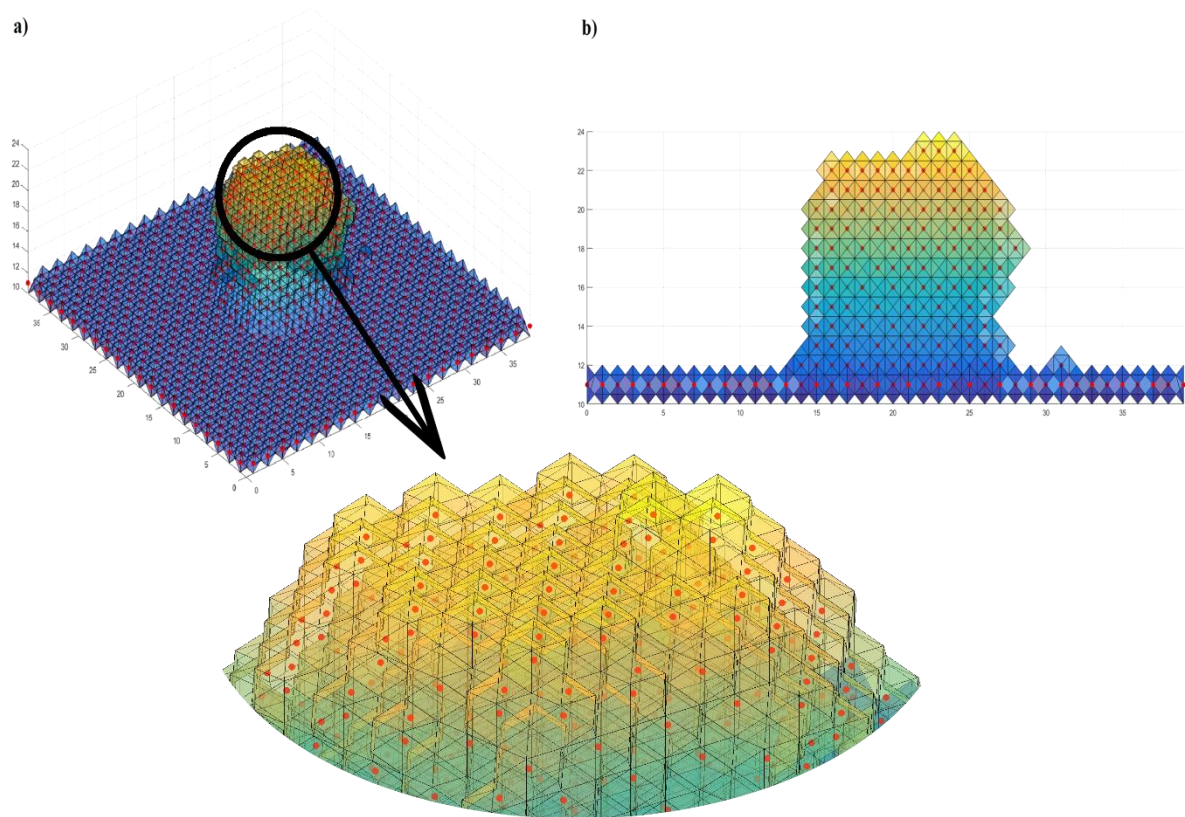


Joonis 4.2. (a) Joonisel on kujutatud lihtsustamiseks punaste punktidenäidatuna vaid seenja geomeetria pinna-aatomite asukohad, (b) pinna-aatomite asukohad profiilis.



Joonis 4.3. (a) Eeltoodud aatomikoordinaate arvesse võttes on välja toodud eelmise pinnarekonstrueerimise meetodiga trianguleeritud pind koos võrguga ning pinna-aatomite

koordinaatidega, (b) eelmise meetodiga trianguleeritud pind profiilis. Värvigamma tähistab kõrgust nullnivoost.



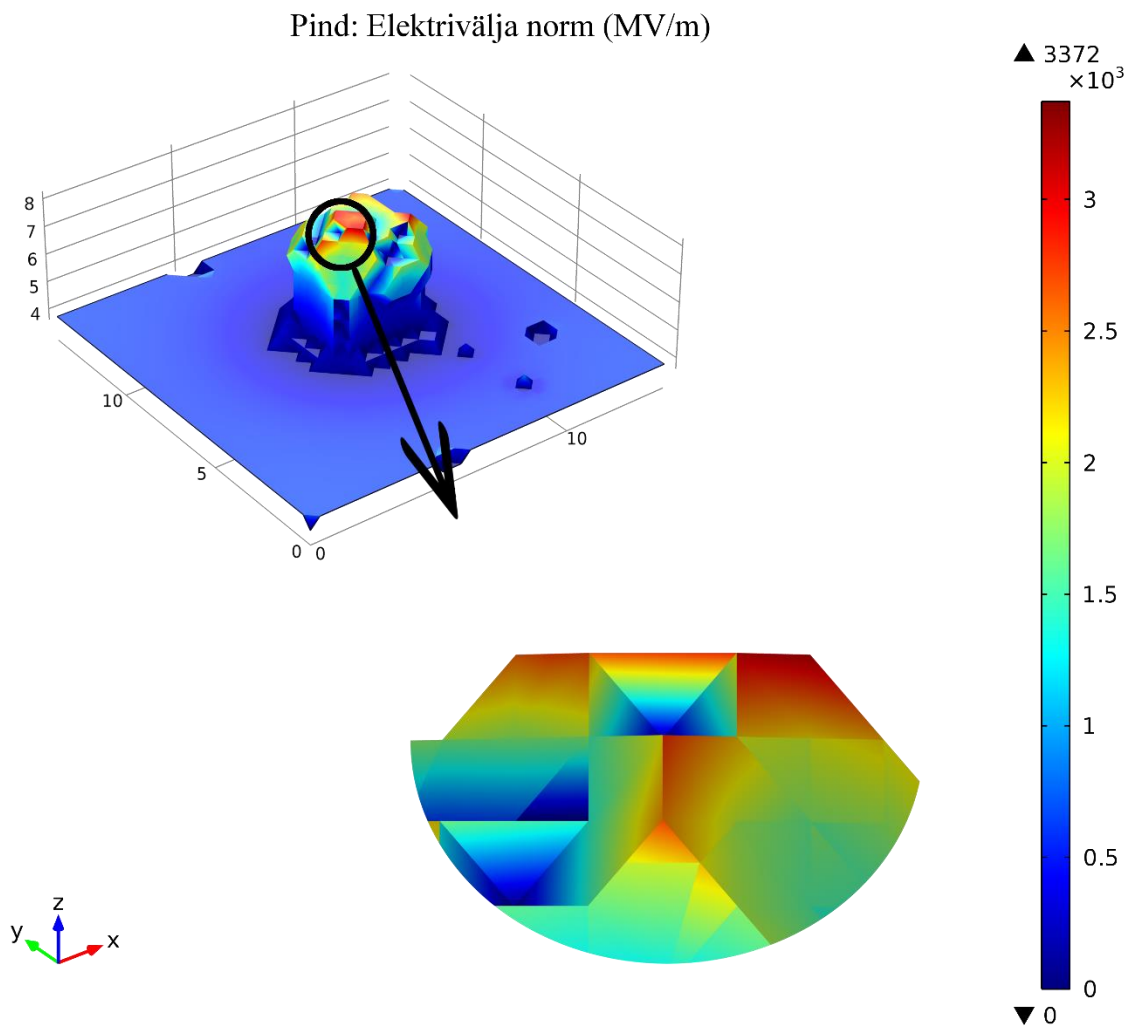
Joonis 4.4. a) „Seenja“ struktuuri Voronoi tesselatsiooni kasutatav pinna rekonstruktsioon, kus on küll halvasti näha ka moodustatud võrk, Voronoi rakkude keskel asuvad aatomite koordinaadid, b) moodustatud pind ja võrk profiilis, koos pinna-aatomitega.

Ülaltoodud joonistelt on selgelt näha Voronoi tesselatsioonil põhineval pinna rekonstrueerimisel ja trianguleeritud pindade rekonstrueerimisel tekkivad erinevused – kui trianguleeritud pinnavõrgu juhul asuvad sõlmpunktides aatomite koordinaadid, siis Voronoi pinna rekonstruktsioonis on sõlmpunktides Voronoi rakkude punktid ehk Voronoi verteksid ning aatomikoordinaadid asuvad Voronoi rakkude keskel.

4.4 Võrdlus eelmise meetodiga

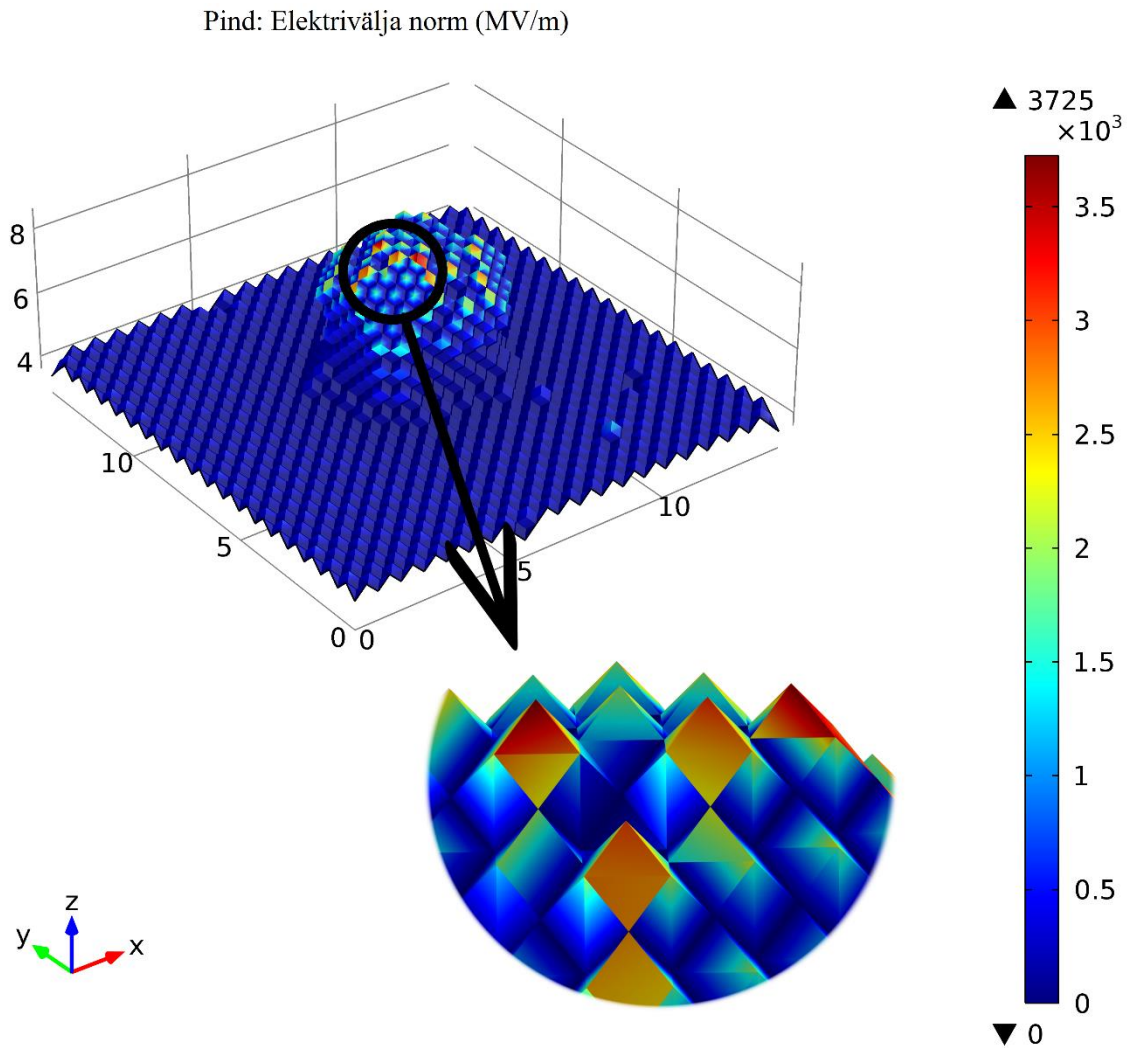
Hindamaks antud töös välja töötatud ning eelnevat trianguleerimise põhimõtet kasutatavat pinna rekonstrueerimise meetodit, võrreldakse rekonstrueeritud pindade elektriväljatugevuse võimendusi juhul kui pinnale on rakendatud elektrivälja tugevusega $800 \frac{MV}{m}$. Simulatsioonides

on materjalina kasutatud vaske, mis on ka planeeritava CLIC kiirendi üks kiirendava osa kasutatavaid materjale.



Joonis 4.5. Eelmise meetodiga tehtud trianguleeritud pind koos värvigammaga, mis näitab elektriväljatugevust. Antud juhul on maksimaalne elektrivälja võimendus 4,21.

Jooniselt (4.5) on selgelt näha eelmise meetodi miinus, milleks on elektriväljaarvutuste puhul selle jaotumine teravatesse tippudesse, mis on ka aatomite asukohtadeks. Sellisel juhul tulevad arvutused ebatäpsed, kuna aatomiga interakteeruv elektriväli rakendub aatomi tuumale, mitte tuuma ümbritsevatele elektronidele. Lisaks seostub aatomi elektriväli üheselt võrguelemendi teravas tipus asuva elektrivälja väärtusega, mis on aga alati võrguelementide suurustest sõltuv väärtus. Sellisel juhul võrgu koonduvus pole võimalik.



Joonis 4.6. Voronoi meetodiga rekonstrueeritud esialgne pind, millele on tehtud ka elektriväljaarvutused, silumist pole rakendatud. Antud juhul on maksimaalne väljavõimendustegur 4,656.

Kui vaadata Voronoi meetodit, siis näeme samuti, et tekivad teravad tipud. Kuid siinkohal peab arvestama eelmainitud Voronoi tessellatsiooni eripära – teravates tippudes ei asu mitte aatomite koordinaadid vaid need on Voronoi verteksid. Aatomite asukohad on Voronoi rakkude keskpunktides ning aatomiga seotud elektriväljana arvestatakse keskmist elektrivälja üle aatomi Voronoi raku tahkudel, mis kokkuvõttes annab paremaid arvutustulemusi.

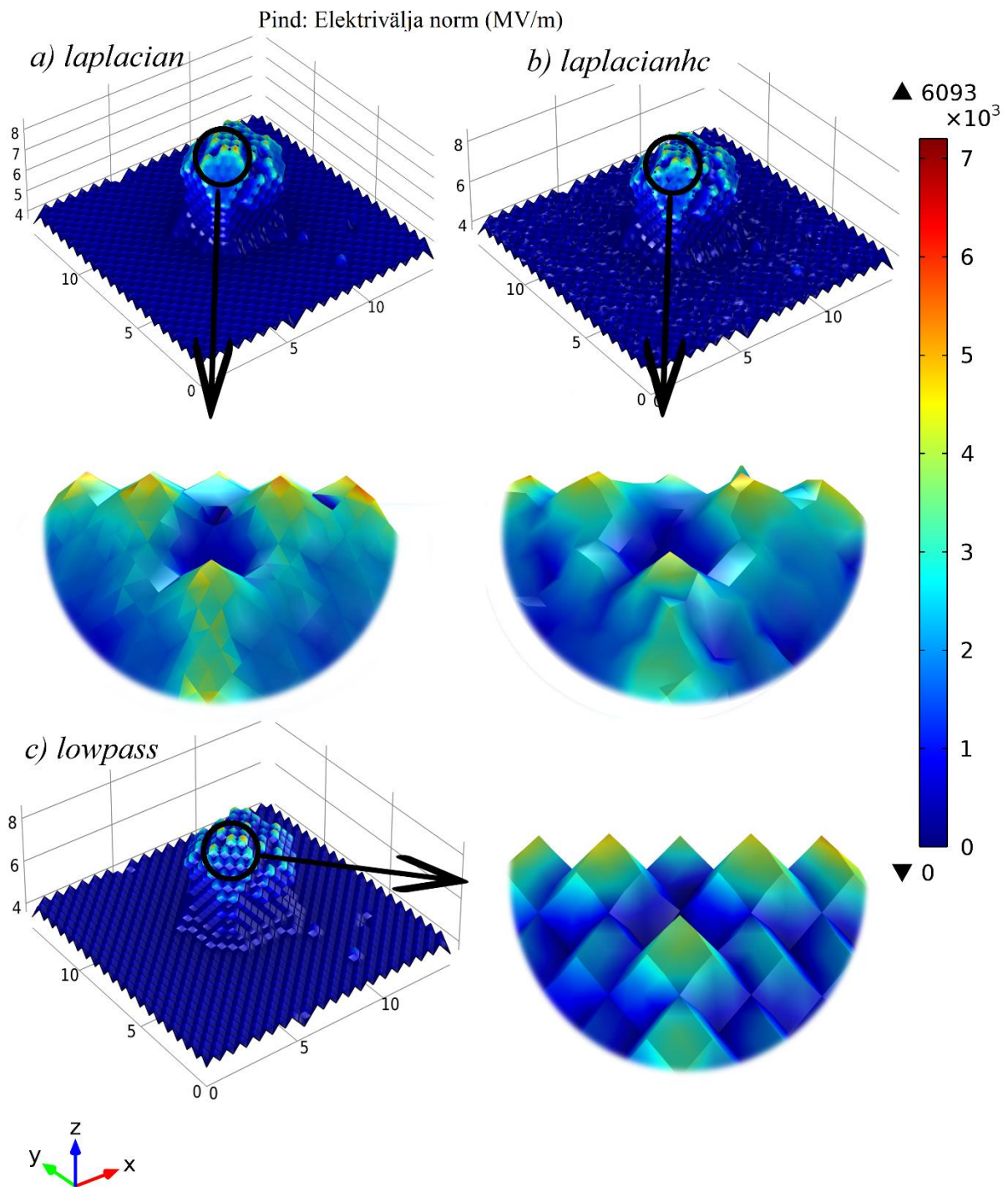
4.5 Silumise mõju pinnale ja elektrivälja arvutustele

Siinkohal toome välja rekonstrueeritud pinna silumise mõju elektrivälja arvutustele sõltuvalt muudetud parameetritest. Modifitseeritavateks parameetriteks *smoothsurf* funktsioonis on näiteks silumise iteratsioonide arv ning spetsiaalne silumisparameeter. Pinna silumise mõju analüüsimiseks uurime iga sooritatud silumisiteratsiooni korral maksimaalset väljavõimendustegurit. Silumist on teostatud Laplace'i, Laplace'i HC ning *lowpass* filtritega.

4.5.1 Iteratsioonide mõju

Silumise iteratsioonide mõju arvestamiseks erinevate meetodite puhul on leitud iga meetodi iteratsioonile vastav pind, millele omakorda seatakse vastavusse tema maksimaalne väljavõimendustegur. Antud juhul on Voronoi meetodil rekonstrueeritud 30 erinevat pinda, millele on rakendatud ühte kolmest silumismeetodist. Pindadele vastavad iteratsioonid on samuti vahemikus 1-50, kõikide silumismeetodite puhul on kasutatud silumisparameetrit 0.5, Laplace'i HC meetodi puhul on ka teine silumisparameeter võetud 0,5.

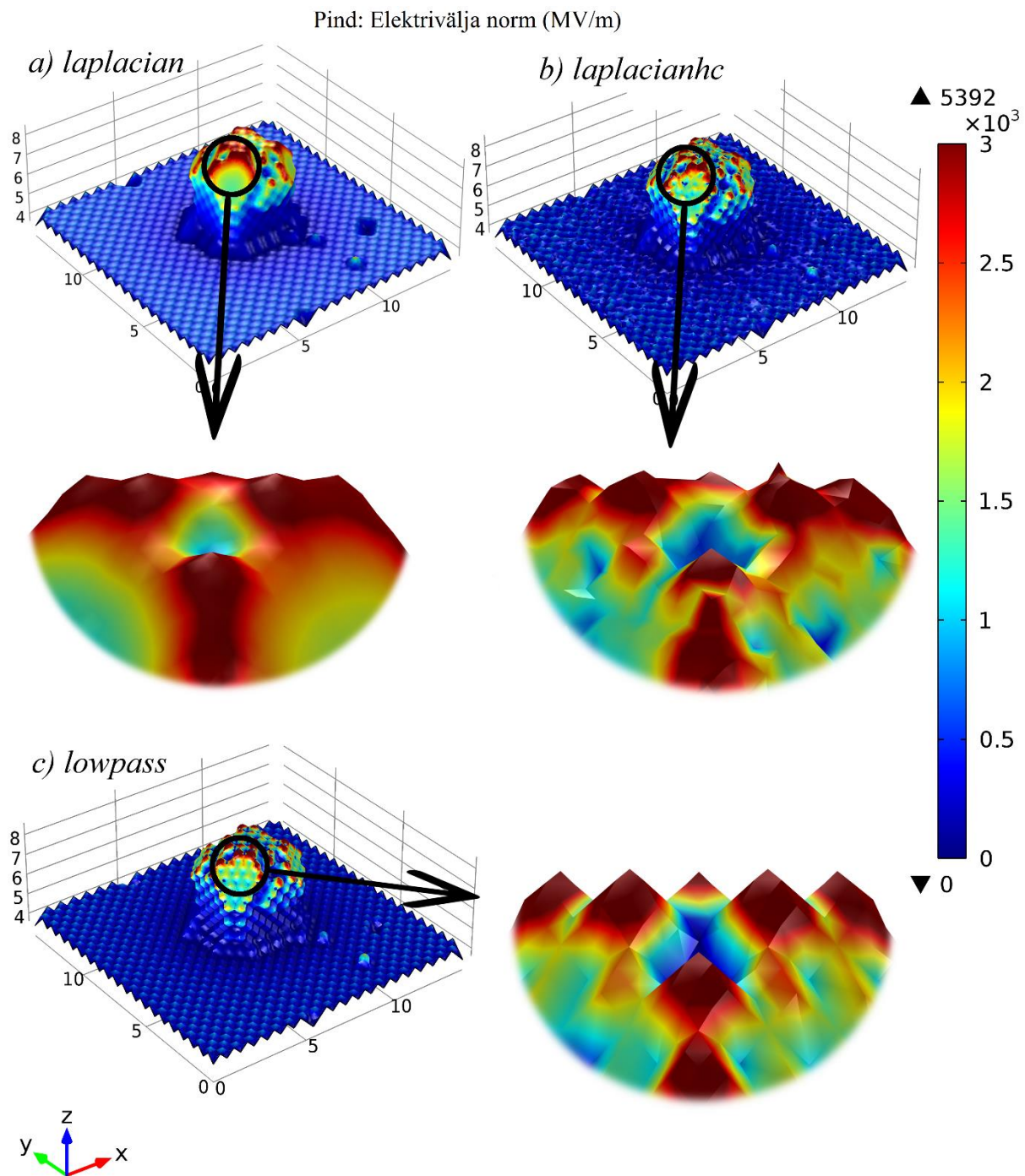
Pindadel toimuvate muutuste paremaks visualiseerimiseks tuuakse alljärgnevatel joonistel saadud pinnad 5, 12 ja 20 iteratsiooni rakendamisel kasutatud silumismeetodi ja elektriväljaga.



Joonis 4.7. Välja on toodud 5 silumisiteratsiooni mõju algele Voronoi rakkudest koosnevale pinnale. Tasub tähele panna, et värviskaalas on maksimaalseks väärtuseks võetud $7,2 \frac{MV}{m}$. Ülemise numbrina on ära toodud nende kolme pinna maksimaalne elektrivälja tugevus.

Kui võrrelda 5 silumisiteratsiooni mõju visuaalselt, siis esialgu on märgata, et silumisfiltrid mõjutavad pinnastruktuuri erinevalt – kui Laplace'i filter silub pinda ühtlasemaks ning on märgata ka pinnavõrgu tihenemist – võrreldes peatükis 4.2 välja toodud võrgu struktuuriga – siis Laplace'i HC filter teeb jällegi ebaühtlasemaks, kuna üritab igat

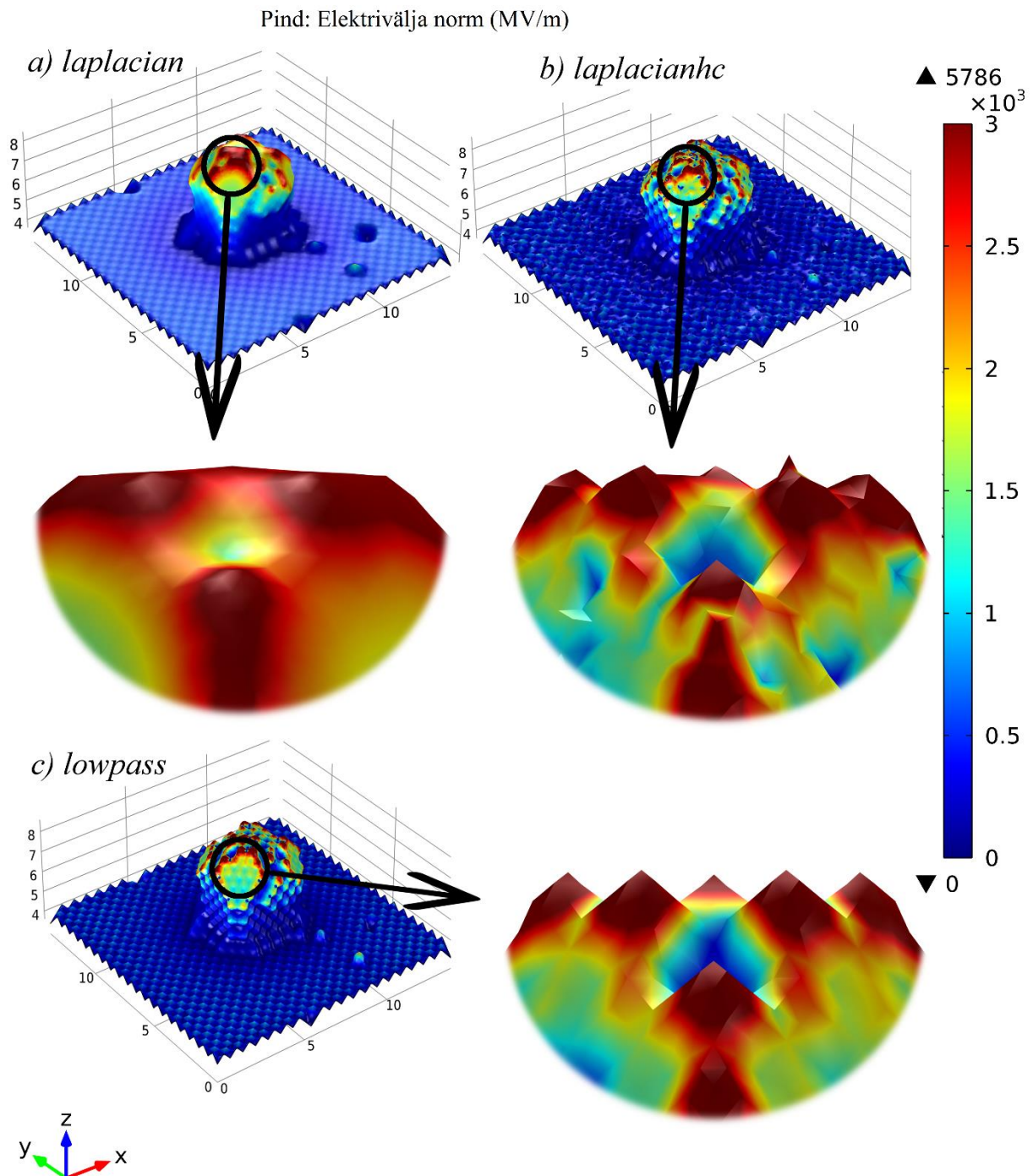
individuaalsed Voronoi rakku viia algsele asendisse ning *lowpass* filtri kasutamisel on märgata vähe muutusi, küll aga mõned kõverused.



Joonis 4.8. 12 silumisiteratsiooni mõju pinnale ja värviskaalal toodud ka mõju elektriväljale erinevate meetodite korral, antud juhul on rõhutatud silumise mõju pinna erinevatele geomeetrilistele asukohtadele, võttes graafiku värviskaala maksimaalseks suuruseks $3 \frac{MV}{m}$, samas kui antud kolme pinna peale on suurim elektriväli $5,4 \frac{MV}{m}$.

12 silumisiteratsiooni korral jätkub sama trend – Laplace'i filter silub pinda järjest siledamaks ja järele on jäänud vaid väiksemad pinnakonarused. Laplace'i HC filtri kasutamisel

tekib samas anomaalseid kohti, mida saab seletada sellega, et punkte üritatakse muuta individuaalse Voronoi raku raames, lükates neid algsete positsioonide poole tagasi, kuid pinnageomeetria suhtes ei pruugi see anda paremaid tulemusi. *Lowpass* filter muudab jätkuvalt pinda minimaalselt ning esinevad ka veel teravad nurgad.



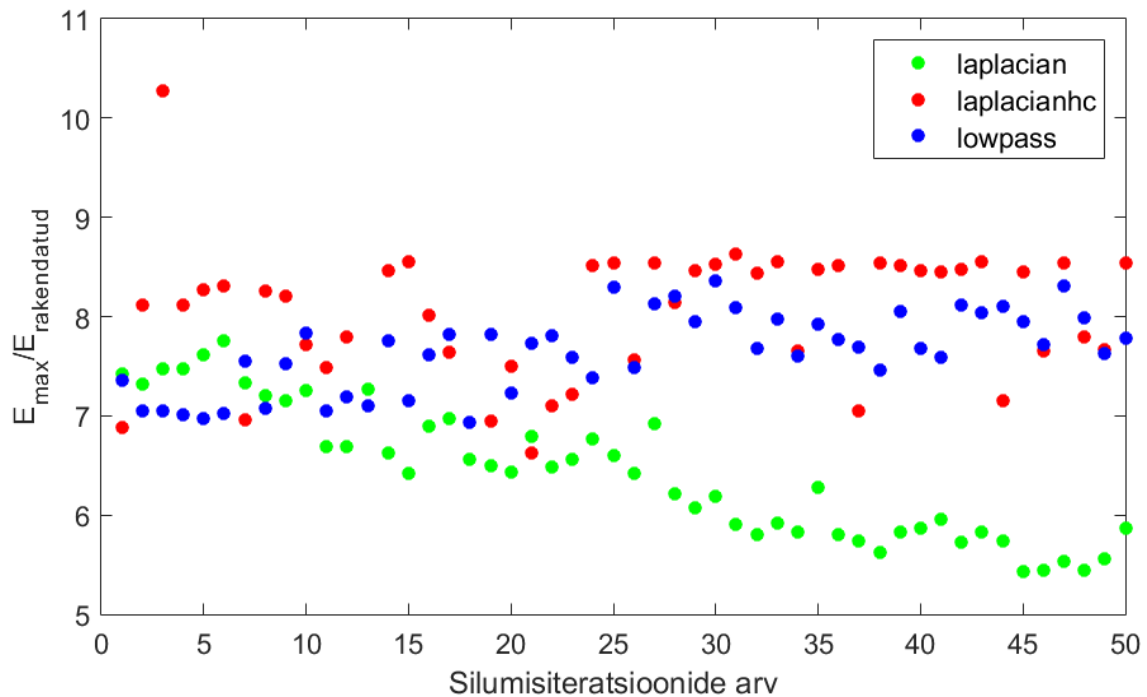
Joonis 4.9. 20. silumisiteratsiooni mõju pinnale.

20 silumisiteratsiooni puhul on selgelt näha, et pinna lähedal on Laplace'i filter muutnud pinna peaaegu ilma teravate nurkadeta geomeetriaks, kuid kogu pinda vaadates on veel Voronoi

rakkude alged tuvastatavad. Samas kui nii Laplace'i HC kui ka *lowpass* silumisfiltrite puhul on jätkuvalt võimalik aimata algset pinna geometriat.

Nagu on joonistelt (4.7-4.9) näha, siis avaldab silumine rekonstrueeritud pinnale märgatavat mõju. Kui esialgse pinna korral ja ka Laplace'i filtri 5, 12, ja 20 silumisiteratsiooni korral on Voronoi rakud veel eristatavad, siis suuremate iteratsioonide korral ei ole võimalik neid enam eristada. Lisaks on joonistelt tuvastatav ka eelmainitud silumismeetodite eripära – simulatsioonikasti äärtes asuvad punktid jäävad muutmata, sest need on defineeritud paigalpüsivatena.

Hindamaks silumise mõju elektrivälja arvutustele, toome välja graafiku iga pinna maksimaalse elektriväljavõimenduse sõltuvuse vastavast iteratsioonist:



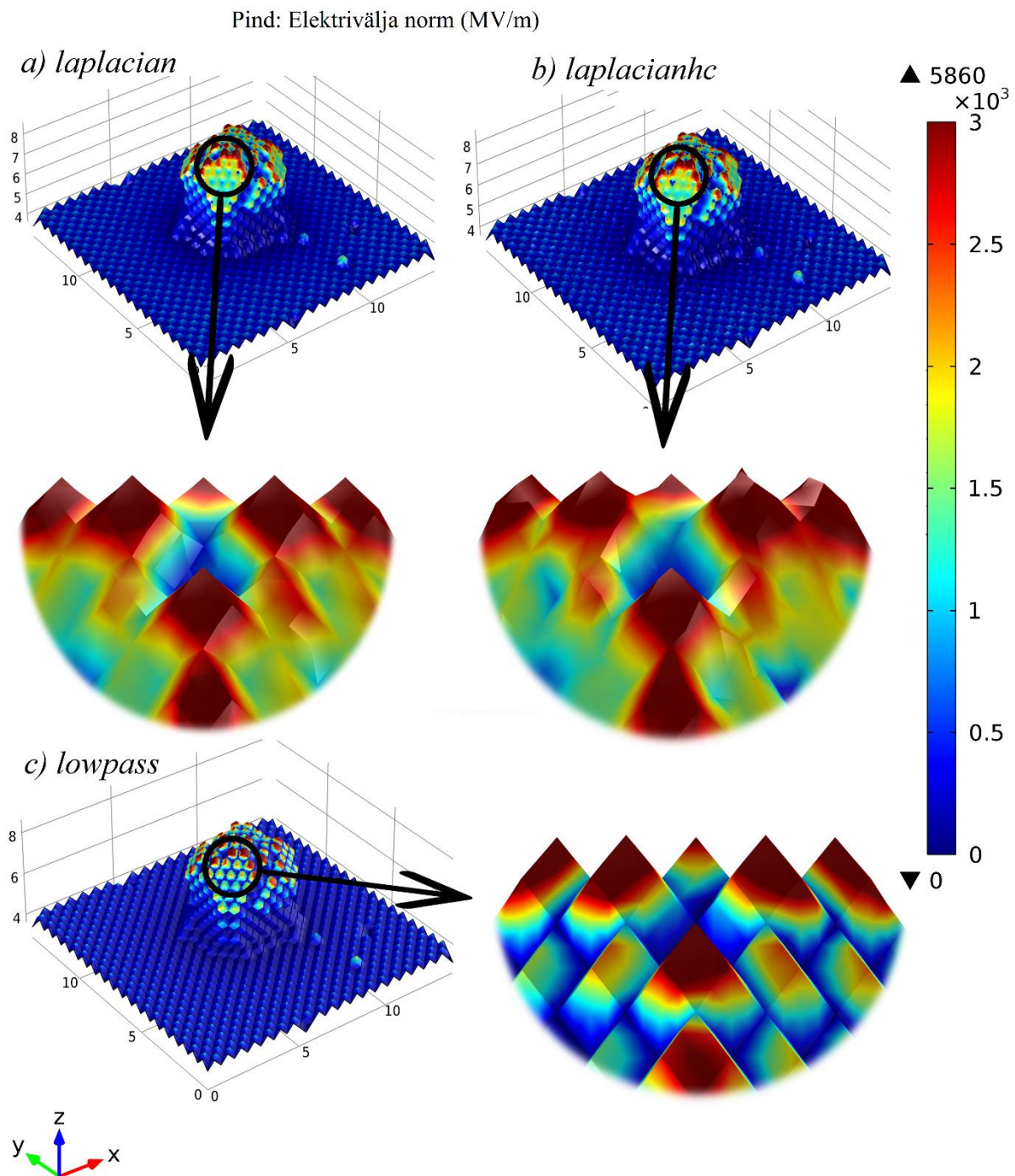
Graafik 4.10. Toodud graafik maksimaalse väljavõimendusteguri sõltuvusest silumisiteratsioonidest 1-50 töös kasutatud iga silumisfiltrite kohta.

Selgelt on graafikult eristatavad filtrite Laplace'i HC ning *lowpass* filtrite mittelineaarsus ning eelnevalt rekonstrueeritud pinnas tehtud joonistelt (4.7-4.9) tuvastatavad teravikud, mis näitab, et teatud silumisiteratsioonide korral jäävad ehitatud võrku sisse teravad nurgad. Nagu on eelnevalt ka mainitud, siis nendes teravates nurkades tulevadki anomaalsed tulemused. Graafikult on aga selgelt näha Laplace'i filtri silumise mõju – enamasti silumisiteratsioonide kasvades väheneb ka maksimaalne väljavõimendustegur – peaaegu, et lineaarselt. Selle

põhjuseks on asjaolu, et Laplace'i filter põhjustab silutava pinna kokkutõmbumist. See on tuntud probleem ning aktsepteeritav filtri suhtelise arvutusliku lihtsuse tõttu. Suurte iteratsioonide korral väheneb väljavõimendus juba märkimisväärselt, mis näitab, et algset geometriat on silutud juba suurel määral. Samas jääb *lowpass* meetodi kasutamisel üldjuhul elektrivälja võimendus vahemikku 6,9-8,3 ning on märgata keskmise kasvu iteratsioonide arvu kasvuga, kuid erinevalt teistest meetoditest pole sel juhul eristatav üksikute tulemuste suur tõus või langus. Laplace'i HC meetodi puhul on tulemuste vahemikud suuremad ning neid saab liigitada kaheks: 1) iteratsioonide 1-23 korral on elektrivälja võimendus raskesti ennustatav 2) iteratsioonide 24-50 korral on elektriväljatugevuse võimendus stabiilsem sõltumata vähem iteratsioonide arvust.

4.5.2 Silumisparameetri mõju

Lisaks iteratsioonide arvule oli modifitseeritavaks suuruseks ka silumisparameetrid. Alljärgnevalt on välja toodud pinnad, kus on kasutatud kahte erinevat silumisparameetrit: 0,3 ja 0,6. Joonisel (4.13) välja toodud maksimaalne väljavõimendus muudeti Laplace'i ja *lowpass* filtrite puhul α -parameetrit vahemikus 0,1-1,0 sammuga 0,1 ning Laplace'i HC filtri puhul lisaks kasutatud β -parameetrit muudeti vahemikus 0,1-0,8 sammuga 0,1.

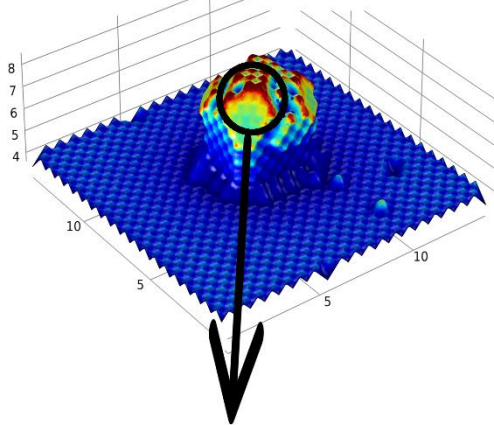


Joonis 4.11. Silumise mõju pindadele parameetrite 0,3 korral.

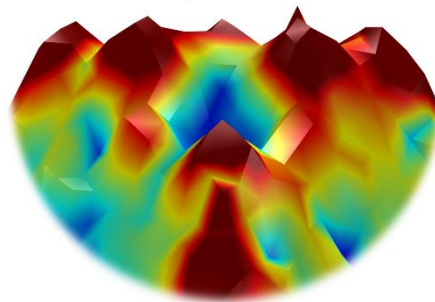
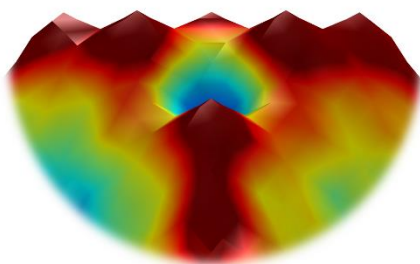
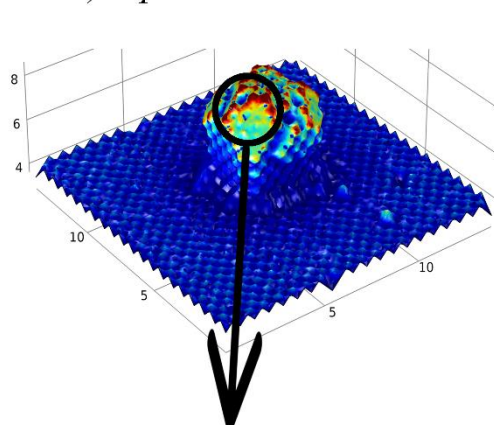
Esialgsest pinnast on Laplace'i filtri korral märgata vähe erinevusi – jooniselt (4.11) on õrnalt näha pinnavõrgu tihenemist, mida saab eristada pinnaelementide muutuvate värvide järgi. Laplace'i HC filtri puhul näeme küll teatud sarnasusi Laplace'i filtri silumise tulemusega, kuid mõned põhimõttelised erinevused vastavate silumismetodite arvutuslikus osas põhjustavad ka lahknevusi pinnageomeetrias. *Lowpass* mõju on eristatav vaid värvigamma ehk elektrivälja tugevuse erinevuste kaudu – seda saab seletada tihenenud pinnavõrguga.

Pind: Elektrivälja norm (MV/m)

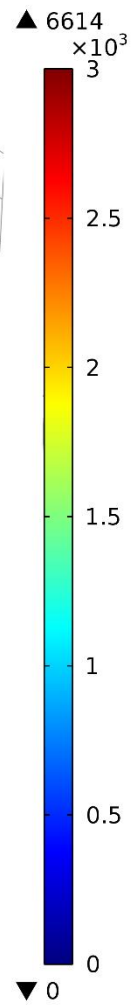
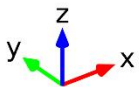
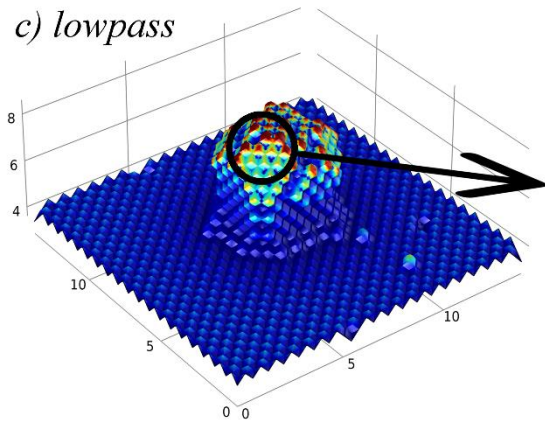
a) *laplacian*



b) *laplacianhc*

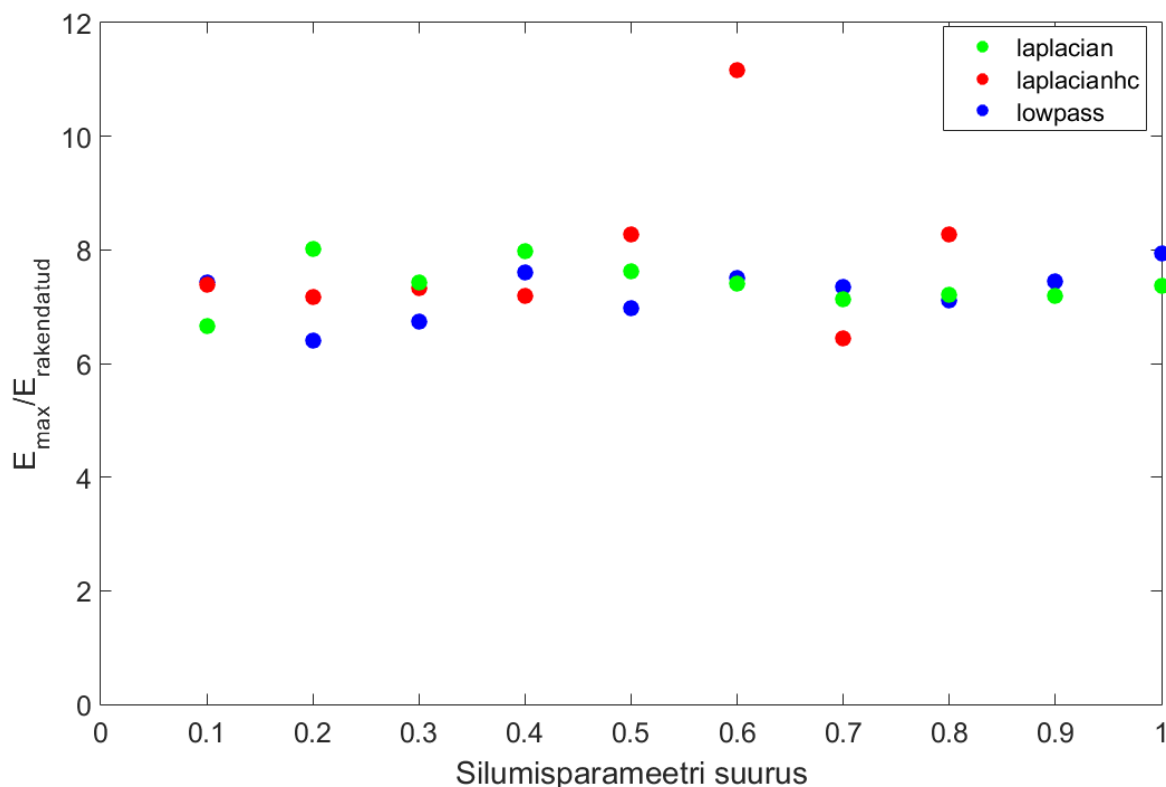


c) *lowpass*



Joonis 4.12. Silumise mõju pindadele silumisparameetritega 0,6.

Täpselt samuti nagu oli iteratsioonide mõju rekonstrueeritud pinnale, on ka silumisparameetrite puhul visuaalselt näha pindade muutumist siledamaks ja teravikevabamaks. Samamoodi nagu liiga suurte silumisiteratsioonide korral kaotab ka suurte parameetrite kasutamisel Voronoi jaotus oma mõtte.

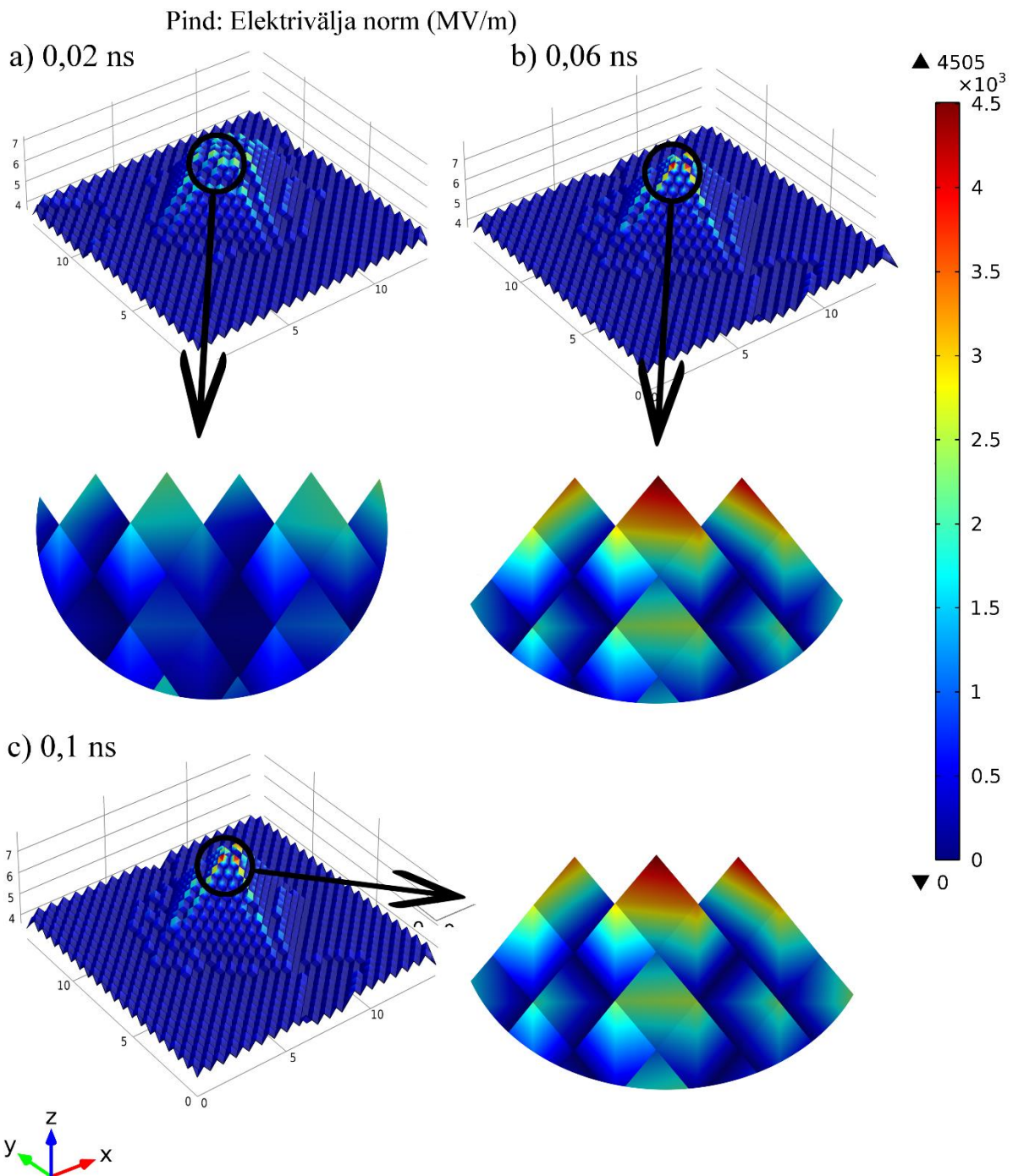


Graafik 4.13. Maksimaalse elektrivälja võimenduse sõltuvus silumisparameetrist.

Nagu graafikult on näha, siis maksimaalse elektrivälja võimenduse sõltuvus silumisparameetrist jääb Laplace'i meetodi puhul vahemikku 6,65-8,01, Laplace'i HC korral on näha ka ühte eristuvat, üle 10-kordset elektrivälja võimenduse suurust, seetõttu on ka vahemik 6,43-11,16. *Lowpass* meetodi rakendamisel jääb elektrivälja võimendus vahemikku 6,39-7,94, mis on tingitud antud meetodi iseloomust muuta Voronoi raku punkte võimalikult vähe.

4.6 Voronoi tesselatsiooni põhine pinna rekonstrueerimine ajalise evolutsiooni korral

Kimocs'iga on võimalik leida pinna ajalist evolutsiooni. Seega on hea võimalus loodud meetodi valideerimiseks ka pinna rekonstrueerimine ajalise evolutsiooni korral ning nendele vastavate elektriväljatugevuse võimenduste leidmine. Antud juhul on leitud eelnevalt kasutatud „seenja“ kujuga geomeetriaile vastavad evolutsioonilised pinnad 0,02 ns, 0,06 ning 0,1 ns möödudes ning neile rakendatud välja töötatud pinna rekonstrueerimise meetodit.

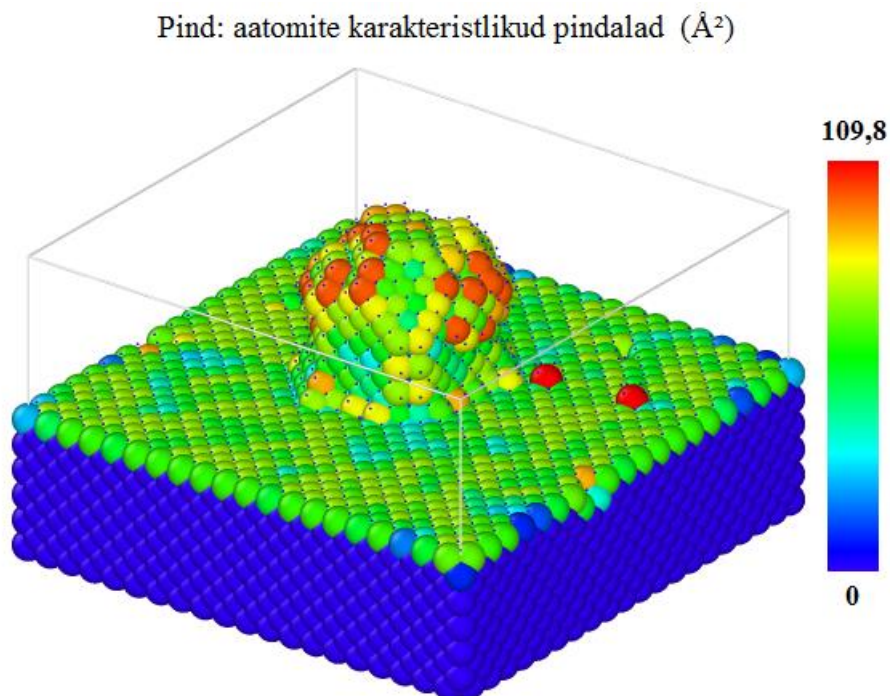


Joonis 4.14. Töös moodustatud Voronoi tesselatsiooni põhise pinna rekonstrueerimise mudeli rakendamine „seenja“ pinna ajalise evolutsiooni korral. Vastavad elektrivälja võimendused: a) 3,37 b) 5,63 c) 5,63.

Nagu on näha, siis loodud Voronoi meetod töötab edukalt ajalise evolutsiooni läbinud pindade rekonstrueerimisel. Eeltoodud jooniselt (4.14) on võimalik välja lugeda, et võrreldes esialgse pinnaga (joonis 4.6) väljavõimendus langeb, kuid seejärel tõuseb ning tõenäoliselt stabiliseerub peale 0,06 ns, kuna geomeetiline struktuur 0,1 ns juhul pole muutunud eelnevaga.

4.7 Aatomi karakteristikliku pindala leidmine

Aatomit kirjeldav karakteristiklik pindala on leitud kasutades töös välja töötatud pindalade leidmise meetodit, mis põhineb aatomit ümbritseva Voronoi raku pindala leidmisele.



Joonis 4.15. Voronoi tesselatsioonil põhinev esialgse rekonstrueeritud pinnal leiduvate aatomite karakteristiklikud pindalad pinna-aatomite lõikes.

Kui võrrelda karakteristiklike pindalaid näiteks eelpool välja toodud joonistega, siis näeme selget sarnasust – pindalad on suured seal, kus on ka suur väljavõimendus. See on loogiline, kuna pind on kõige suurem nende aatomite puhul, mis on avatud välisele elektriväljale.

5. Kokkuvõte

Tänapäeval on väga paljudes seadmetes kasutusel kõrged elektriväljad, mille tõttu esinevad neis elektrilised läbilöögid, mis tihti mõjutavad negatiivselt seadmete tööd. Kuigi vaakumläbilööke on uuritud juba pikka aega, puudub jätkuvalt täielik selgus läbilööke põhjustavatest mehhanismidest, mistõttu töötatakse järjepidevalt välja meetodeid selliste nähtuste uurimiseks. Eriti oluline on elektriliste läbilöövide kontrolli alla saamine CERN-is planeeritavas Kompaktses Lineaarpoõrgutis. Praegusel hetkel on üks uurimisvõimalus teha vajalikele tingimustele vastavaid simulatsioone, mis peaksid väljundina andma realistliku tulemuse. Varasemalt vase käitumist uurivates mudelites on olulisel kohal olnud pinna rekonstrueerimine, mis mõjutab ka simulatsioonides saadavaid arvutustulemusi. Seetõttu on oluline, et pinna rekonstrueerimise meetod oleks võimalikult tõetruu ning ei moonutaks simulatsioonidest saadavat infot.

Töö käigus moodustati uus Voronoi tesselatsioonile tuginev pinna rekonstrueerimise meetod. Kui varasema rekonstrueerimise käigus komplekteeriti pind nii, et pinnavõrgu sõlmpunktides asusid aatomite koordinaadid, siis antud töös välja töötatud meetodi puhul asuvad sõlmpunktides Voronoi verteksid – aatomite asukohad on iga Voronoi raku keskpunktis. See muudab saadavad arvutustulemused aktsepteeritavamaks ning paremini tõlgendatavaks, võimaldab arvutada aatomiga seonduva elektrilise laengu ning rakendada meetodit nii kineetilise Monte Carlo kui ka molekulaardünaamika simulatsioonide tarbeks.

Lisaks eelmainitud meetodi väljatöötamisele, valideeriti seda rekonstrueeritud pindadele elektriväljaarvutuste tegemisega, mille käigus uuriti ka silumise mõju. Samuti on välja toodud ka eelneva meetodi rekonstrueeritud pinna võrdlus Voronoi tesselatsiooni kasutatavaga – väljavõimendus tuli küll uue meetodiga suurem, kuid kvaliteedi osas on pindade vahetamine vastupidine.

Silumismeetodite *laplacian*, *laplacianhc* ja *lowpass* omavaheline võrdlus andis silumisiteratsioonide kontekstis tulemuse, kus *laplacian* meetodi kasutamisel iteratsioonide kasvuga alaneb ka elektrivälja võimendus peaaegu lineaarselt kahe ühiku võrra. Samas kui *lowpass* meetodi graafik oli pigem tõusev ning *laplacianhc* puhul tekkisid üksikud anomaalsed juhud, kuid üldjoontes jäi väljavõimendus samasse suurusjärku. Silumisparameetrite modifitseerimisel eristus selgelt *laplacianhc* meetodi puhul β -parameetriga 0,6 arvutatud

elektriväljavõimendus, mis võrreldes teiste tulemustega kaldus selgest siinuslainet meenutavast trendist kõrvale.

Viimaks näidati komplekteeritud meetodi toimimist ka pinna ajalise evolutsiooni korral, mis omakorda tähendab, et puuduvad nüansid, mis takistaksid moodustatud pinna rekonstrueerimise meetodi kasutamist ka ajaliste pinna evolutsioonide uurimiseks ning aatomite pindalad on suured kohtades, kus esineb ka kõrge väljavõimendus.

6. Tänuavaldused

Esmalt tänan oma juhendajat Vahur Zadin'it, kes andis head nõu nii töö koostamiseks kui ka sisulise osa lahendamiseks ja läbiviimiseks. Samuti olen tänulik kõigile arukate materjalide ja seadmete labori liikmetele, kes olid alati abivalmis ja motiveeritud pidama teemakohaseid arutelusid. Viimasena soovin tänada loomulikult oma perekonda, sõpru ja lähedasi, kes on olnud toetavaks jõuks bakalaureusetöö tegemise ja akadeemiliste õpingute vältel.

Viited

- [1] CERN, “The Large Hadron Collider,” 2016.
- [2] A. Levy and for the Clic. Collaboration, “CLICdp Overview: Overview of physics potential at CLIC,” no. Fig 1, p. 19, 2015.
- [3] CERN, “A Multi-TeV Linear Collider Based on CLIC Technology,” 2012.
- [4] T. Higo, “Progress of X-Band Accelerating Structures,” in *Proceedings, 25th International Linear Accelerator Conference, LINAC2010*, 2011, p. FR104.
- [5] G. A. Mesyats, *Pulsed Power*. Springer, 2004.
- [6] G. Werner, “Probing and modeling voltage breakdown in vacuum,” Cornell University, 2004.
- [7] Z. Insepov, J. H. Norem, and A. Hassanein, “New mechanism of cluster-field evaporation in rf breakdown,” *Phys. Rev. Spec. Top. - Accel. Beams*, vol. 7, no. 12, p. 122001, Dec. 2004.
- [8] J. Frantz, M. Rusanen, K. Nordlund, and I. T. Koponen, “Evolution of Cu nanoclusters on Cu(100),” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 16, no. 17, pp. 2995–3003, May 2004.
- [9] S. Parviainen, F. Djurabekova, H. Timko, and K. Nordlund, “Electronic processes in molecular dynamics simulations of nanoscale metal tips under electric fields,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 50, no. 7, pp. 2075–2079, May 2011.
- [10] V. Zadin, A. Pohjonen, A. Aabloo, K. Nordlund, and F. Djurabekova, “Electrostatic-elastoplastic simulations of copper surface under high electric fields,” *Phys. Rev. Spec. Top. - Accel. Beams*, vol. 17, no. 10, p. 103501, Oct. 2014.
- [11] S. Vigonski, F. Djurabekova, M. Veske, A. Aabloo, and V. Zadin, “Molecular dynamics simulations of near-surface Fe precipitates in Cu under high electric fields,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 23, no. 2, p. 025009, Mar. 2015.
- [12] K. Eimre, S. Parviainen, A. Aabloo, F. Djurabekova, and V. Zadin, “Application of the general thermal field model to simulate the behaviour of nanoscale Cu field emitters,” *J. Appl. Phys.*, vol. 118, no. 3, p. 033303, Jul. 2015.

- [13] P.-L. George and H. Borouchaki, *Delaunay Triangulation and Meshing: Application to Finite Elements*. Paris: HERMES, 1998.
- [14] O. Devillers, “On Deletion in Delaunay Triangulation,” Nancy, 1998.
- [15] D. F. Watson, “Computing the n-dimensional Delaunay tessellation with application to Voronoi polytopes,” *Comput. J.*, vol. 24, no. 2, pp. 167–172, Feb. 1981.
- [16] D. S.H. Lo, *Finite Element Mesh Generation*. CRC Press, 2015.
- [17] K. S. ja S. N. C. A. Okabe, B. Boots, “Spatial tessellations: concepts and applications of voronoi diagrams,” *Comput. Geosci.*, vol. 19, no. 8, pp. 1209–1210, 1992.
- [18] C. Oberdorfer, S. M. Eich, and G. Schmitz, “A full-scale simulation approach for atom probe tomography,” *Ultramicroscopy*, vol. 128, pp. 55–67, 2013.
- [19] J. Kirs and G. Arjassov, *Sissejuhatus Lõplike Elementide Meetodisse*. Tallinn: TTÜ kirjastus, 1999.
- [20] V. Jansson, E. Baibuz, and F. Djurabekova, “Long-term stability of Cu surface nanotips,” Aug. 2015.
- [21] F. Djurabekova, S. Parviainen, A. Pohjonen, and K. Nordlund, “Atomistic modeling of metal surfaces under electric fields: direct coupling of electric fields to a molecular dynamics algorithm,” *Phys. Rev. E. Stat. Nonlin. Soft Matter Phys.*, vol. 83, no. 2 Pt 2, p. 026704, Feb. 2011.
- [22] Helsinki Institute of Physics, “Computer simulations of accelerator materials for CLIC studies,” 2016. [Online]. Available: <http://research.hip.fi/hwp/acctech/accelerator-technology/m-a-t/projects/clic/>. [Accessed: 28-Apr-2016].
- [23] J. Vollmer, R. Mencl, and H. Muller, “Improved Laplacian Smoothing of Noisy Surface Meshes,” *Comput. Graph. Forum*, vol. 18, no. 3, pp. 131–138, Sep. 1999.
- [24] O. Sorkine, D. Cohen-Or, Y. Lipman, M. Alexa, C. Rössl, and H.-P. Seidel, “Laplacian surface editing,” in *Proceedings of the 2004 Eurographics/ACM SIGGRAPH symposium on Geometry processing - SGP '04*, 2004, p. 175.

- [25] Q. Fang, “iso2mesh: a 3D surface and volumetric mesh generator for MATLAB/Octave,” 2015. [Online]. Available: <http://iso2mesh.sourceforge.net/cgi-bin/index.cgi>. [Accessed: 19-May-2016].

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja lõputöö üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, Ats Aasmaa,

annan Tartu Ülikoolile tasuta loa (lihtlitsentsi) enda loodud teose

„Voronoi tesselatsiooni abil pinna rekonstrueerimise meetodi moodustamine ning sellel baseeruvad elektriväljaarvutused vase näitel“,

mille juhendaja on Vahur Zadin,

- 1.1. reprodutseerimiseks säilitamise ja üldsusele kättesaadavaks tegemise eesmärgil, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace-is lisamise eesmärgil kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni;
- 1.2. üldsusele kättesaadavaks tegemiseks Tartu Ülikooli veebikeskkonna kaudu, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace'i kaudu kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni.
2. olen teadlik, et punktis 1 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.
3. kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei rikuta teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse seadusest tulenevaid õiguseid.

Tartus/Tallinnas/Narvas/Pärnus/Viljandis, **27.05.2016**