

УДК 004.942

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ДЕНДРИТНОЙ НАНОПЛЕНКИ

Бухаров Д.Н., молодой ученый

Сен-Пьер Э. Э. С., студент гр. НТ-118, III курс

Халимов Н. А., студент гр. НТ-118, III курс

Научный руководитель: Кучерик А.О., д.ф-м.н., профессор

Владимирский государственный университет им. А. Г. и Н. Г. Столетовых
ВлГУ

г. Владимир

Дендритные нанопленки актуальны в сфере разработок инновационных материалов для нужд современной нанoeлектроники и нанoфотоники. Одним из простых и удобных методов их получения сегодня становится лазерная наномодификация.

Таким методом были получены приведенные на рис. 1 образцы силумина с частицами карбида бора, обладающие дендритной кластерной поверхностью, характерной для диффузионных процессов. В качестве источника излучения применялся YAG:Nd-лазер с волоконной доставкой излучения, форма импульса была гауссова, длительность импульсов варьировалась в интервале от 2 до 20 мс, а энергия в импульсе составляла значение от 1 до 5 Дж, диаметр пучка излучения выбирался равным 800 мкм.

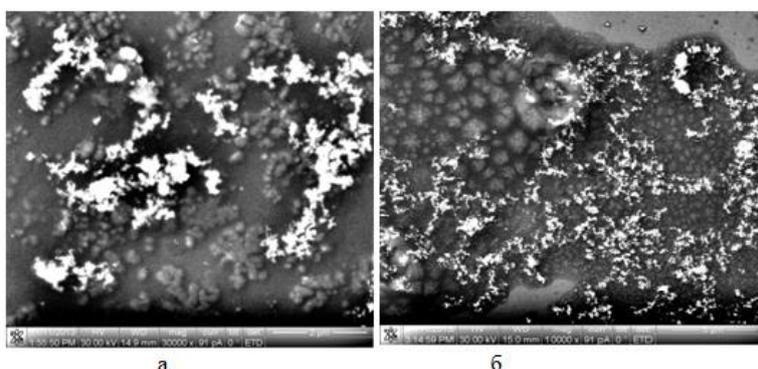


Рис. 1. АСМ кластерной поверхности при энергии импульса: 1 Дж (а), 5 Дж(б)

Сформированные на поверхности наноструктуры обладали дендритной формой, достаточно близкой к фрактальной, с размерностями D от 1.68 до 2.02, определёнными методом boxcounting [1]. Структура покрывалась ячейками размера ε . Подсчитывалось количество ячеек, которые оказались

содержащими фрагмент исследуемого объекта $N(\varepsilon)$ и далее ε уменьшалось, таки образом, что:

$$D = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log \varepsilon}.$$

В связи с этим для прогнозирования свойств образцов с указанной выше структурой применимо моделирование в приближении диффузионо-ограниченной агрегации (DLA)[2] (рис. 2). Динамика системы описывалась в рамках клеточного автомата с окрестностью фон Неймана [3] (рис. 3). Учет термодинамических факторов, формирующих моделируемую, структуру производился в рамках вероятности прилипания (s), которая представляла собой нормированный коэффициент диффузии из $(0; 1]$.

Алгоритм формирования DLA-подобной фрактальной структуры состоял из следующих шагов: 1) на квадратной двумерной решётке задавалась структура-зародыш; 2) вдали от уже сформированного кластера или зародыша в области зарождения (R_p) генерировалась новая частица; 3) она совершала случайные блуждания; 4) если частица подходила к занятому элементу расчетной области, в соответствии с окрестностью фон Неймана, то она с заданной вероятностью s прилипала; 5) если частица уходила за границу внешней сферы (R_e), то уничтожалась; 6) повтор, с шага 3 до тех пор, пока частица не прилипнет с заданной вероятностью или не уничтожится, после чего производился шаг 2.



Рис.3. Схема DLA для двумерного случая Рис.4. Окрестность фон Неймана

На рис. 4 приведены модельные изображения дендритов в приближении DLA при $s=0.01$ (а) и $s=0.1$ (б) и разного количества начальных затравочных структур N из которых очевидно сильное влияние величины s на форму итогового изображения. Очевидно, что при уменьшении этого параметра генерируются структуры с более гладкими границами и большей площадью и протяженностью.

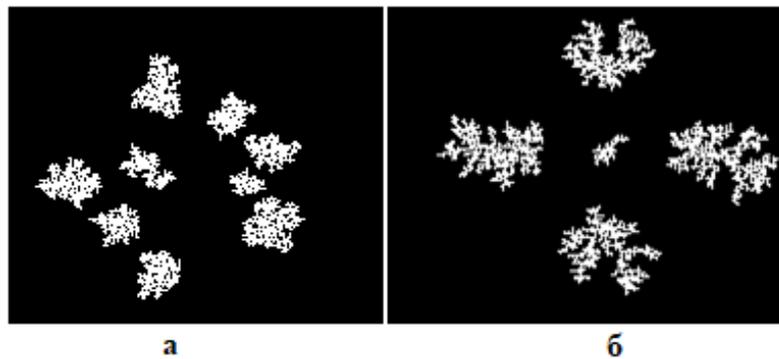


Рис 4. Модели дендритов в приближении DLA для затравочных структур в виде точек при $N=10$ $s=0.01$ (а), $N=5$ $s=0.1$ (б)

Для оценки адекватности предложенной модели производилось соотношение фрактальных размерностей экспериментальных и модельных структур. Оценка фрактальной размерности проводилась методом концентрических окрестностей [4]. На структуру наносились концентрические окружности радиуса r и подсчитывалось отношение площади смоделированной структуры покрываемой окружностью ($N(r)$) к общей площади каждого круга ($A(r)$):

$$D = 2 + \frac{\ln(N(r)/A(r))}{\ln(r)}.$$

Так, например, для модельных изображений при $s=0.01$ она составляла значение 1.83. Такие значения показывают удовлетворительную степень совпадения результатов моделирования и эксперимента.

Таким образом, предложенный подход может быть применим и полезен для прогнозирования и оценки геометрических свойств дендритных нанопленок.

Список литературы:

1. Гарафутдинов, Р.В. Адаптивный метод клеточного покрытия для оценивания фрактальной размерности финансовых временных рядов [Текст] / Р.В. Гарафутдинов, С.А. Ахуньянова // Прикладная математика и вопросы управления. — 2020. — № 3. — С. 185-218.
2. Bukharov, D.N. Mathematical modeling of the structure and optical properties of the fractal island metal nanofilm [Text] / D.N. Bukharov, S.M. Arakelyan, A.O. Kucherik, O.A. Novikova, V.D. Samyshkin // Journal of Physics: Conference Series. — 2020. — 1439.012050. 10.1088/1742-6596/1439/1/012050.
3. Бухаров, Д. Н., Моделирование электропроводности металлических островковых нанопленок на основе клеточного автомата. [Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2019» [Электронный ресурс] / Д. Н. Бухаров, А.О. Кучерик, А.В. Осипов, И.О. Скрябин, О. А. Новикова — М.: МАКС Пресс, 2019.

4. Ампилова, Н. Б. Алгоритмы фрактального анализа изображений//Компьютерные инструменты в образовании/ Н. Б. Ампилова. – 2012. –№ 2. – С. 19-24.