

УДК 004.942

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОВОЛОКОН

Бухаров Д.Н., молодой ученый

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

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

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

г. Владимир

Инновационные углеродные материалы на основе нановолокон находят широкое применение и перспективу как новая элементная база для современной электроники и для водородной энергетики [1].

Одним из удобных методов синтеза углеродных нановолокон является воздействие лазерным излучением в присутствии электрического поля. Таким методом, описанным в работе [2], были получены углеродные нановолокна, осажденные на металлическую пластину (рис.1). Структура синтезированных образцов свидетельствует о управляемости морфологическими свойствами через параметры эксперимента: лазерное излучение и напряженность электрического поля. Так на рис.1 приведен образец структуры нановолокон при различном напряжении.

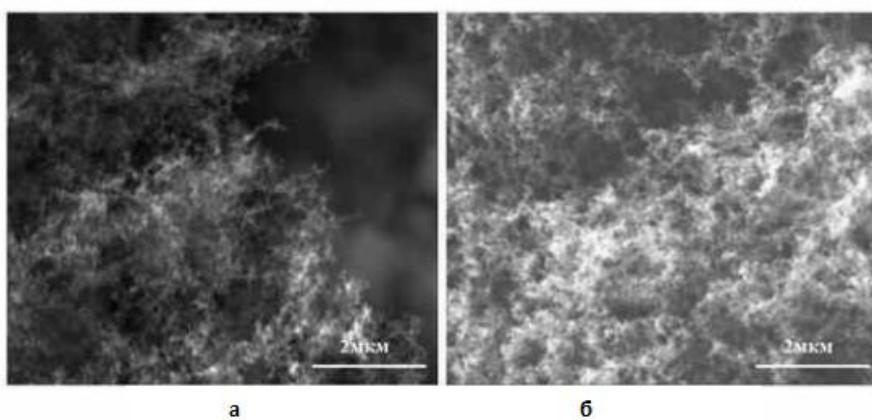


Рис. 1. Образцы нановолокнистой углеродной структуры в случае ,
электрического напряжения: 1 кВ (а), 0.8 кВ (б)

Полученные образцы исследовались методами СЗМ и КР-спектроскопии. Для исследования морфологических свойств проводился фрактальный анализ размерностей РМ изображений нановолокон, проведенный методом boxcounting [3]. В зависимости от времени осаждения и мощности источника излучения. Например, она плавно увеличивалась от 1.45 до 1.9 в случае лазера

мощностью 30 Вт, от 1.6 до 1.96 в случае мощности 50 Вт, от 1.75 до 1.98 для источника с мощностью 100 Вт.

Удобной моделью, позволяющей генерировать структуры с фрактальными размерностями из указанных выше отрезков, позволяющей учитывать тепловые процессы является модель диффузионно-ограниченной агрегации (DLA)[4]. Модель волокна в приближении DLA была реализована как клеточный автомат с окрестностью Мура [5]. Влияние термодинамических характеристик среды учитывалось в коэффициенте вероятности прилипания (p), который представлялся нормированным коэффициентом диффузии из (0; 1].

Алгоритм построения модели волокна в DLA-приближении формировался из нижеследующих этапов: 1) на этапе инициализации в расчетной области с наложенной равномерной сеткой, генерировалась стартовая структура, состоящая из системы частиц-зародышей, расположенных на нижней границе, а также задавался размер волокна (максимальное число частиц в расчетной области); 2) на верхней границе расчетной области генерировалось заданное количество частиц; 3) они совершали случайные смещения вниз и в стороны с одинаковой или различной вероятностью; 4) в случае их приближения к занятой ячейке расчетной области в рамках окрестности Мура, реализовывалась их агрегация к занятой ячейке иначе движение продолжалось; 5) повторение шагов 2-4. Критерием остановки итерационного процесса было достижение волокна требуемого размера, когда количество частиц в расчетной области достигало заданного значения или достижение нанонити верхней границы.

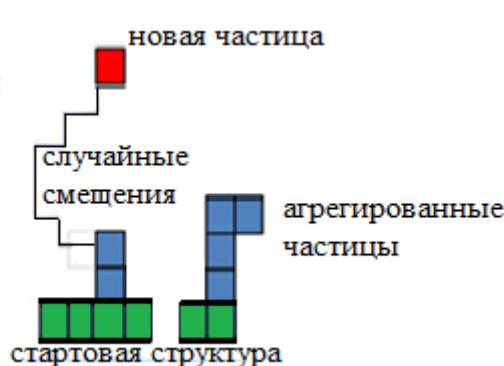
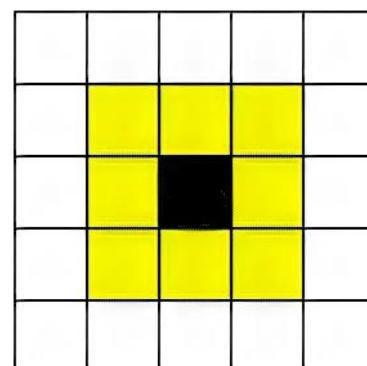


Рис.2. Схема модели DLA волокна Рис.3. Окрестность Мура



На рис. 4 приведены модельные изображения нанонитей в приближении DLA в расчетной области размером 300*300 отн.ед для 30000 частиц. На рис. 4а – случай равновероятного смещения блуждающих частиц при постоянном значении $p=1$. На рис. 4б представлена модель системы нанонитей для малых боковых смещений блуждающих частиц при равномерном уменьшении вероятности прилипания начиная с 1 до 0.01. На рис. 4в сгенерирована система нанонитей для малых боковых смещений блуждающих частиц при

равномерном уменьшении вероятности прилипания начиная с 0.5 до 0.01. Случай малых боковых смещений блуждающих частиц позволил на качественном уровне учесть действие электрического поля, когда рост структуры реализуется преимущественно по линиям поля. Указанный выше характер изменения вероятности прилипания соответствовал случаю остыивания системы, аналогичному экспериментальному. В обоих случаях процесс генерации остановился вследствие достижения нанонити верхней границы расчетной области. Сравнивая рис. 4а и 4б, 4в можно заключить, что вероятности случайных боковых смещений влияют на форму нанонити. Так в случае малых вероятностей боковых смещений нанонити генерируются более вытянутые по вертикали с меньшей величиной и количеством боковых ответвлений.

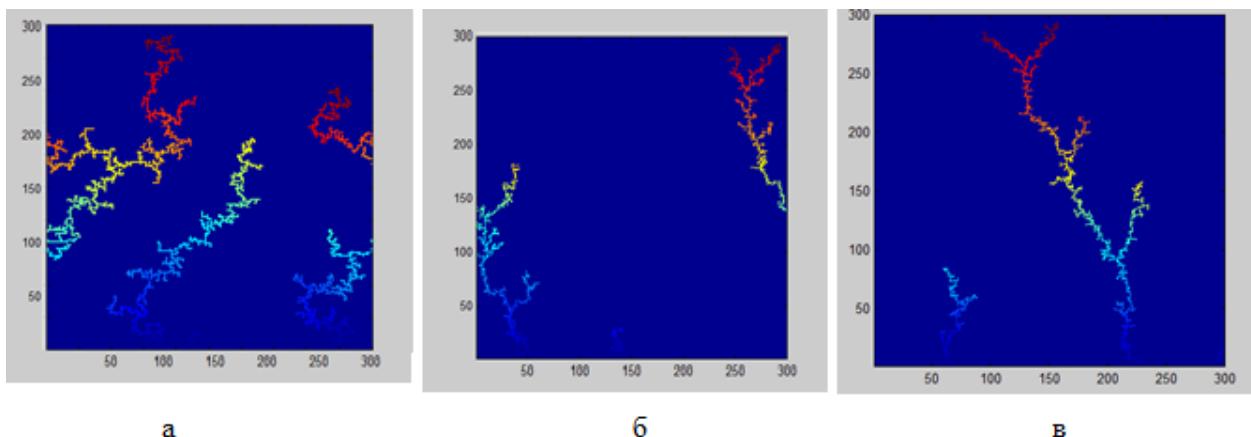


Рис 4. Модели системы нанонитей в приближении DLA:
равновероятные смещения блуждающих частиц при постоянном значении
 $p=1$ (а), малые боковые смещения блуждающих частиц: равномерное
уменьшение p от 1 до 0.01(б), равномерное уменьшение p от 0.5 до 0.01(б)

Переход к абсолютным единицам позволил провести соотношение модельных и экспериментальных результатов в смысле оценки длин моделируемых структур. Задав длину стороны ячейки в 10 нм, получим максимальную длину в пределах 3000 -3900 нм для случая равновероятных смещений. Это может соответствовать генерации нанонитей в случае слабого электрического поля. Рамочные ограничения максимальной длины от 3000 до 3400 нм в случае малых боковых смещений могут соответствовать генерации нанонитей в случае более сильного электрического поля. Такие значения качественно верно отражают результаты экспериментальных измерений, что показывает удовлетворительную степень адекватности предложенной модели.

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

Список литературы:

1. Нечаев, Ю.С. О природе, кинетике и предельных значениях сорбции водорода углеродными наноструктурами [Текст]/ Ю.С. Нечаев//УФН. — 2006. — Т. 176, № 6. — С. 581–610.
2. Прудников, А. М. и др. Особенности формирования и модификация наноструктурных пленок нитрида углерода [Текст]/ А. М. Прудников, А. И. Линник, Р. В. Шалаев, В. В. Румянцев, А. О. Кучерик, А. П. Алоджанц, С. М. Аракелян// Наносистемы: физика, химия, математика. — 2012 . — Т.3, №6. — С. 134–145
3. Ампилова, Н. Б. Алгоритмы фрактального анализа изображений//Компьютерные инструменты в образовании [Текст]/ Н. Б. Ампилова. – 2012. –№ 2. – С. 19-24.
4. 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.
5. Беланков, А. Б., Столбов, В. Ю. Применение клеточных автоматов для моделирования микроструктуры материала при кристаллизации [Текст]// А. Б. Беланков, В. Ю. Столбов//Сиб. журн. индустр. матем.— 2005.— Т. 8, №2.—С. 12–19