

УДК 51-72:519.688

Романчук С.П., Корчагин С.А., Терин Д.В.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ВКЛЮЧЕНИЯМИ ТИПА CORE-SHELL

Представлен программный комплекс моделирования электродинамических свойств нанокomпозиционных материалов с включениями типа core-shell, позволяющий проводить исследования в области проектирования новых функциональных материалов. Основой модели служит теория эффективной среды, адаптированная для композиционных материалов с включениями типа core-shell. Результаты позволяют делать экспресс анализ электродинамических свойств на основе известной структуры и состава материала. Показана возможность подбора компонент и строения нанокomпозиционного материала с заданными характеристиками применяя генетический алгоритм.

Введение. Проектирование нанокomпозиционных материалов с заданными характеристиками является стратегическим направлением современной науки. Это связано с востребованностью в новых материалах секторов высокотехнологического производства. Последние годы проектирование материалов привлекает особый интерес и становится предметом исследований отечественных и зарубежных Форсайт-проектов [1]. Результаты исследований демонстрируют возрастающую необходимость экспресс анализа свойств нанокomпозиционных материалов для совершенствования методов проектирования и производства.

Специализированное программное обеспечение является необходимым инструментом в области

моделирования электродинамических свойств материалов. При разработке программ для проектирования нанокомпозитов, важной задачей является выбор, адаптация, разработка и реализация в программном коде математических моделей, описывающих взаимодействие электромагнитного излучения с наноконпозиционными средами.

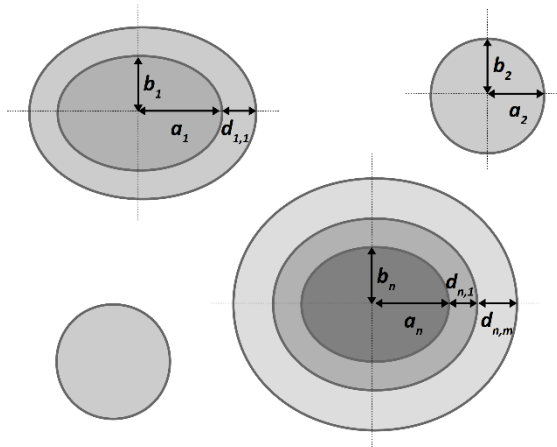


Рисунок 1. Модель наноконпозита из смеси аппроксимированных по форме многослойных частиц

Модель. В настоящее время интерес исследователей вызывают наноконпозиционные смеси в состав которых входят core-shell и core-multishell частицы [2,3]. Многослойная морфология частиц позволяет защитить компоненты от агрессивной среды и задать частице требуемые свойства.

Эффективные свойства смесей со сферическими частицами описаны моделями Максвелла-Гарнетта и Бругемана для матричных и статистических смесей, соответственно [4,5]. Модифицированная формула (1) для

n-компонентных смесей, где частицы покрыты m-количеством оболочек (рис. 1).

$$\sum_{i=1}^n v_i \frac{B(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_e) + A\varepsilon_{ij}}{B\rho_i(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_e) + B\varepsilon_e + A\rho_i\varepsilon_{ij}} = 0, \quad (1)$$

где $A = \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ip(j-1)}$, $B = \varepsilon_{ij} - \rho_i(2 - v_{ij})(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ip(j-1)})$,
 $1 \leq j \leq m_i$.

Для учета анизотропии смеси используется фактор деполяризации [6].

$$\rho_{\perp} = \frac{1}{1 - \xi^2} \left[1 - \xi \frac{\arcsin(\sqrt{1 - \xi^2})}{\sqrt{1 - \xi^2}} \right] \quad (2)$$

$$\rho_{\parallel} + 2\rho_{\perp} = 1, \quad \xi = a/b$$

где a, b – длина полярной и экваториальной осей сфероида соответственно.

Объектом исследования является пористый кремний, полученный методом металл-стимулированного химического травления, который основан на замещении кремния при восстановлении ионов серебра на поверхности кремниевой подложки с использованием Ag в водном растворе AgNO₃ [7]. Для проведения численного эксперимента выбрана модель нанокomпозиционного материала с core-multishell включениями. Многослойная частица состоит из ядра покрытого двумя оболочками. Ядро частицы (Ag) - вытянутый вдоль оси вращения сфероид, с соотношением главных осей a/b = 0,2, первая оболочка (Si), вторая оболочка (SiO₂). Продемонстрирована зависимость изменения свойств (n, k) нанокomпозита от изменения ширины внешней оболочки частицы (Рис. 2).

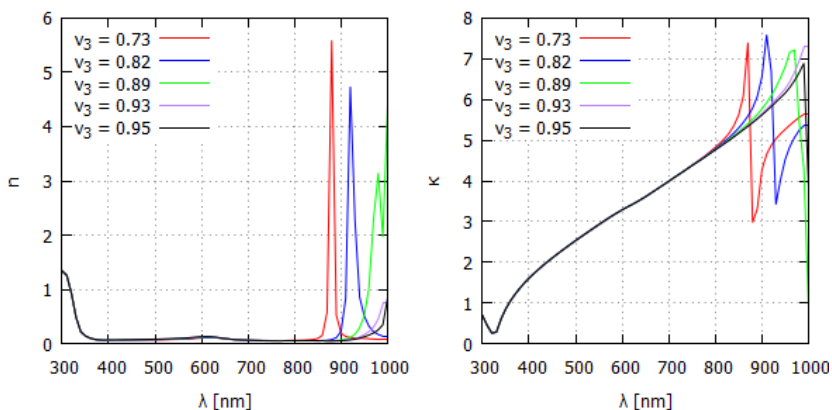


Рисунок 2. Коэффициенты поглощения и отражения нанокompозита при различной ширине внешней оболочки многослойной частицы

Программный комплекс. Главным предназначением разработанного программного комплекса «Математическое моделирование и многокритериальный анализ нелинейных свойств композиционных материалов на основе моделей эффективной среды» [8] является прогнозирование эффективных свойств нанокompозиционных сред основываясь на заданных характеристиках материала и внешних условиях среды. Приложение позволяет проводить экспресс анализ электродинамических свойств нанокompозиционных материалов. Программный комплекс имеет модульную архитектуру, что позволяет масштабировать разработку на новые прикладные задачи.

Генетический алгоритм. Эвристические алгоритмы, в частности генетический, позволяет осуществлять подбор морфологии нанокompозита с требуемыми свойствами, учитывая нелинейную зависимость свойств материалов от состава, приводит к существенному сокращению времени

на проектирование материалов. Генетический алгоритм является методом оптимизации, основанном на имитации естественного отбора, ориентирован на поиск субоптимального решения [9].

Заключение. Возрастающий интерес к проектированию новых функциональных материалов, что демонстрируют исследования разных лет, предъявляет новые требования к инструментарию исследователей в этой области. Разработанный программный комплекс экспресс анализа свойств материалов позволяет проводить численный эксперимент моделирования свойств нанокпозиционных материалов. Применение адаптированного для прикладной задачи генетического алгоритма, реализованного в программном коде, позволяет выполнять подбор структуры нанокпозиционного материала с требуемыми свойствами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-07-00752.

Литература

1. Вишнеvский К.О., Карасев И.О. Прогнозирование развития новых материалов с использованием методов Форсайта // ФОРСАЙТ. 2010. Т. 4. № 2. С. 58–67
2. M.B. Gongalsky, A.P. Sviridov, Yu.I. Bezsudnova, L.A. Osminkina. Biodegradation model of porous silicon nanoparticles // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. 2020. Volume 190
3. Романчук С.П., Терин Д.В., Кац А.М., Клинаев Ю.В. Математическое моделирование структур и процессов взаимодействия электромагнитного излучения с core-shell нанообъектами// Вестник Саратовского государственного технического университета. 2011. Т. 4. № 2 (60). С. 98-102.

4. Maxwell-Garnett J. C. // Philos. Trans. R. Soc. London. 1904. P. 203, 385.
5. Bruggeman D A G Ann. Phys. (Leipzig) 24 636 (1935).
6. Головань Л.А., Тимошенко В.Ю., Кашкаров П.К. Оптические свойства нанокompозитов на основе пористых систем // Успехи физических наук. 2007. Т. 177 № 6. С. 619-638.
7. Belobrovaya O.Ya., Galushka V. V., Karagaychev A. L., Polyanskaya V. P., Sidorov V. I., Terin D. V. Nanostructured Porous Silicon Layers Formation at Low Doses of γ -Radiation [Белобровая О. Я., Галушка В. В., Карагайчев А. Л., Полянская В. П., Сидоров В. И., Терин Д. В. Формирование слоев наноструктурированного пористого кремния при облучении малыми дозами γ -радиации] // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2019. Т. 19, вып. 4. С. 312-316. DOI: <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2019-19-4-312-316>
8. Программный комплекс «Математическое моделирование и многокритериальный анализ нелинейных свойств композиционных материалов на основе моделей эффективной среды»: Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014615533 РФ / С.П. Романчук, Д.В. Терин; заявитель и патентообладатель Романчук Сергей Петрович, Терин Денис Владимирович. № 2014612918/69; заявл. 02.04.2014; зарегистр. 28.05.2014. [1] с.
9. Романчук С.П., Корчагин С.А., Терин Д.В. Моделирование характеристик нанокompозиционного материала со сферическими включениями при использовании генетического алгоритма// Математическое моделирование и численные методы. 2018. № 2(18). С. 20-31.