



BABEŞ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM, FIZIKA KAR
KOLOZSVÁR, ROMÁNIA

NANOCŐVEK SZÁRADÁSÁNAK SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓJA

HORVÁTH EMŐKE-ÁGNES

FIZIKA-INFORMATIKA SZAK, 4. ÉVFOLYAM

ETDK DOLGOZAT

11. ERDÉLYI TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA,

KOLOZSVÁR, 2008. MÁJUS 23-24.

TUDOMÁNYOS IRÁNYÍTÓK:

DR. JÁRAI-SZABÓ FERENC (ADJUNKTUS, BBTE, FIZIKA KAR, ELMÉLETI FIZIKA TANSZÉK)

DR. NÉDA ZOLTÁN (EGYETEMI TANÁR, BBTE, FIZIKA KAR, ELMÉLETI FIZIKA TANSZÉK)

2008. MÁJUS

Tartalomjegyzék

Kivonat	3
1. Bevezetés	4
2. Rugó-tömb típusú modellek	6
2.1. Földrengések modellezése	7
2.2. Száradás során kialakuló törésmintázatok modellezése	8
3. Nanocsövek száradásának modellezése	11
3.1. Kísérleti eredmények	11
3.2. Az elméleti modell	12
3.3. A paraméterek	15
3.4. Eredmények	16
4. Következtetések	19
Irodalomjegyzék	20

Kivonat

A dolgozat a rugó-tömb modelles család egyik alkalmazásával foglalkozik. Számítógépes modell segítségével vizsgáljuk a nanocsövek száradása során kialakuló mintázatokat. Kísérletileg vízben előállíthatók szabályos (erdőszerű) nanocsőmátrixok, melyek a folyadék elpárolgása során cellás struktúrákat alakítanak ki. A valóságban háromdimenziós önszerveződési folyamat tanulmányozására egy kétdimenziós modellt alkottunk. A nanocsövek alsó, rögzített végeit rögzített, míg a felső, szabad végeit elmozdítható tömbökkel helyettesítettük. A két típusú tömböt elszakíthatatlan rugóval kötöttük össze, ami a nanocső rugalmasan hajlítható törzsét modellezte. A nanocsövek tetejének megfelelő tömböket speciális rugókkal kötöttük össze, ezzel modellezve a csövekre ható kapilláris erők átlagos viselkedését. Modellünkkel tanulmányozzuk a kísérletileg kontrollálható paraméterek hatását a kialakuló mintázatokra. Különböző paramétertartományokra visszkapjuk a kísérletileg észlelt tipikus mintázatokat.

1.

Bevezetés

Napjainkban egyre nagyobb igény mutatkozik a miniatürizált eszközök iránt. Ez kevesebb nyersanyag-felhasználást, könnyebb tárolást és a kis méret miatt eddig hozzáférhetetlen területek elérését biztosítja. Ilyen elvárásoknak tökéletesen megfelelnek a nanostruktúrák, melyek majdnem minden területen a jövő mérnöki tudományát jelentik.

A nanostruktúrák előállításának egyik módja az alulról történő (*bottom up*) építkezés. Ebben az esetben a nanostruktúrákat olyan stabil építőelemekből állítják elő, mint a molekulák, kolloid részecskék, nanogömbök vagy akár a nanocsövek. A mai technológiákkal ezek a méretben, alakban és belső struktúrában szinte azonos építőelemek könnyen előállíthatók.

A nanostruktúrák ily módon történő előállításának egyik akadálya, hogy a nanoméretű tartományokban fontos szerepet játszó adhéziós és kohéziós erők miatt a „nanovilág nagyon ragacsos”. Ezt úgy kell értenünk, hogy ha bármilyen eszközzel megpróbáljuk összerakni a nanoszerkezeteket, az építőelemek inkább az eszközünkhez ragadnak, mintsem oda kerülnének, ahova szeretnénk. Éppen ezért olyan nanostruktúrákat kell terveznünk, melyek közvetlen emberi beavatkozás nélkül, önszerveződő módon alakulnak ki.

Az önszerveződés többféle mechanizmus alapján valósulhat meg. Ilyen célra leggyakrabban Wan der Waals típusú erőket, geometriai megszorításokat, mágneses kölcsönhatásokat, hődiffúziót vagy kapilláris erőket használnak.

Munkánk során egy ilyen önszerveződő nanostruktúra kialakulásának modellezését tűztük ki célul. Nevezetesen, egy olyan rendszert szimuláltunk, ahol nanocső

építőelemekből, kapilláris erők jelenlétében cellás struktúrák jönnek létre. A folyamat leírására egy rugó-tömb típusú modellt dolgoztunk ki, majd ennek segítségével vizsgáltuk a kísérletileg kontrollálható paraméterek hatását a kialakuló mintázatokra. Különböző paramétertartományokra visszakaptuk a kísérletileg észlelt tipikus mintázatokot.

A következő fejezetben egy rövid áttekintést nyújtunk a rugó-tömb típusú modellekről és azok néhány ismert alkalmazási lehetőségéről. Ezt követően kitérünk a nanocsőstruktúrák kísérleti előállításának módjára, valamint a tipikus struktúrákra, melyek kialakulnak. Ezután ismertetjük a folyamat leírására kidolgozott modellünket, annak fontosabb paramétereit és végül a számítógépes szimulációk során kapott eredményeinket.

2.

Rugó-tömb típusú modellek

Induljunk ki abból az egyszerű esetből, amikor egy testet egy rugó segítségével húzunk. Ilyenkor semmi meglepő dolog nem történik. A rugó egy ideig nyúlik, majd amikor a rugóban fellépő rugalmas erő nagyobb lesz a test és a felület közti tapadási súrlódási erő maximális értékénél, a test megcsúszik, és később egyenes vonalban, egyenletesen mozog.

Bonyolultabb viselkedést kapunk, ha nem egyetlen testtel van dolgunk. Képzeljünk el azt az esetet, amikor több testet helyezünk el egymás mellé, ezeket rugóval kötjük össze. Ezen túlmenően, minden testre egy másik rugót is kötünk, amit egy a testek fölött levő laphoz rögzítünk. A feladat most az, hogy leírjuk, hogyan viselkedik ez a rendszerünk, ha ezt a testek fölötti lapot egyenletes sebességgel húzni kezdjük valamilyen irányban. Egy ideig a testek nyugalomban maradnak, csak az őket a lappal összekötő rugók nyúlnak meg. Majd hirtelen az egyik test megcsúszik. Ez a megcsúszás viszont lavina-szerű jelenséget idéz elő a rendszerben, ugyanis magával rántja a közvetlen szomszédait, azok az ő szomszédait és így tovább. Az itt leírt folyamat tipikus példa egy kritikusan önszerveződő folyamatra és tartalmazza a rugó-tömb modellek leglényegesebb összetevőit és tipikus viselkedését.

Az első rugó-tömb típusú modellt Burrige és Knopff 1967-ben tette közzé [1]. Azóta a modellt a legkülönbözőbb tudományterületeken alkalmazzák. Az alapmodell alkotóelemei a tömbök és az ezeket összekötő rugók. A modellezni kívánt rendszer tulajdonságaitól függően a tömbök különböző alakúak lehetnek, különböző elrendezésekben helyezkedhetnek el, és különböző módon köthetők össze rugókkal. Erre tevődik rá a rendszer adottságaira alapozó dinamika. A rugó-tömb modell kri-

tikusan önszerveződő rendszerek esetén alkalmas olyan lavinaszerű dinamikák modellezésére, melyek mintázatképző folyamatokat eredményeznek.

Széleskörű felhasználásai a földrengések modellezésétől ferromágneses anyagok mágnesezési folyamatának, száradó granuláris anyagok töredezéseinek, valamint nanogömbrendszerek mintázatképződéseinek a leírásáig terjednek.

A továbbiakban kitérek az eredeti, földrengések vizsgálatára alkalmas modellre. Tárgyalom annak helyességét, és megemlítem tudománytörténeti relevanciáját. Ezután következik a száradó anyagokra specifikált rugó-tömb modell. Kiemelt fontosságú a nanogömbrendszerek száradás során kialakuló törésmintázatainak vizsgálata, mivel – amint azt a későbbiekben látni fogjuk – a nanocsőrendszerek modellezése visszavezethető egy a nanogömbök esetén használt, kétdimenziós rugó-tömb modellre.

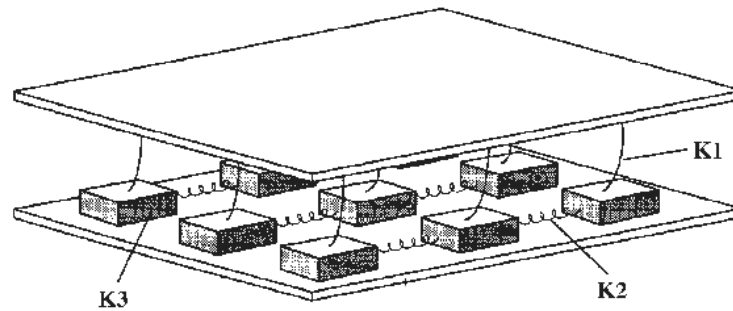
2.1. Földrengések modellezése

A földrengések jelentős része a tektonikus lemezek találkozásának közelében pattan ki. Ennek oka, hogy az egyik tektonikus lemez a másik alá bukik. Lefele haladás közben a felgyülemelő feszültségek a második lemez hirtelen megcsúszását eredményezik. Ha a dinamikát sematikusan kívánjuk ábrázolni, a két tektonikus lapot a 2.1 ábra mintájára képzelhetjük el, ahol az egyik lemezt az alsó sík, míg a másik lemezt a rajta lévő, rugókkal összekötött tömbök jelképezik. Az alsó lemez elmozdulásának függvényében, ha elegendő feszültség gyülemlik fel a rendszerben, a tömbök hirtelen, lavinaszerűen megcsúszhatnak.

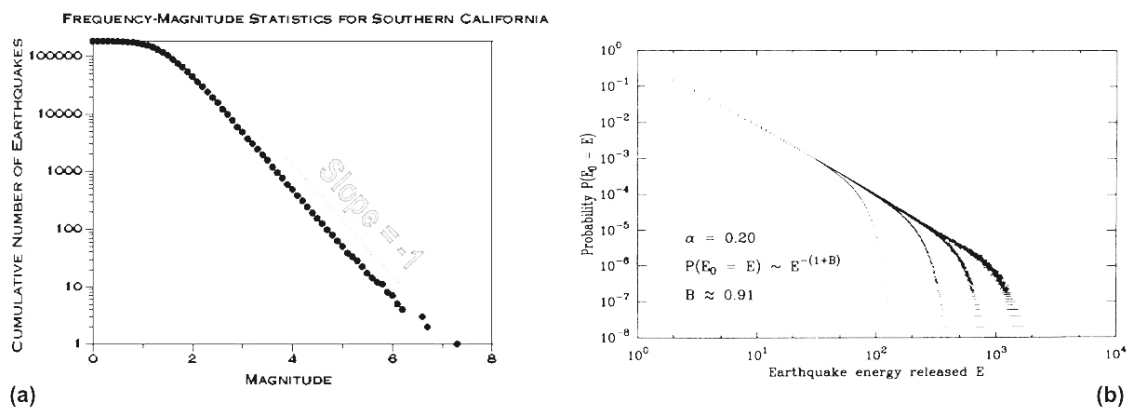
A modell tudománytörténeti jelentősége abból adódik, hogy ennek révén vált először lehetségessé a földrengések nagyság szerinti eloszlását megadó Gutenberg–Richter-törvény igazolása. A Richter skálán egy földrengés m nagysága közvetetten a mechanikai rezgésekben felszabadított E energiát jellemzi. A pontos definíció szerint $\lg(E) = 11.8 + 1.5m$. A törvény kimondja, hogy ezen a skálán az m erősségű földrengések előfordulási gyakorisága az

$$f(m) = A10^{bm}, \quad (2.1)$$

hatványfüggvénnyel adható meg, ahol A egy arányossági tényező. A b kitevő az



2.1. ábra. Egy földrengés mechanizmusa rugó-tömb sémával ábrázolva [7].

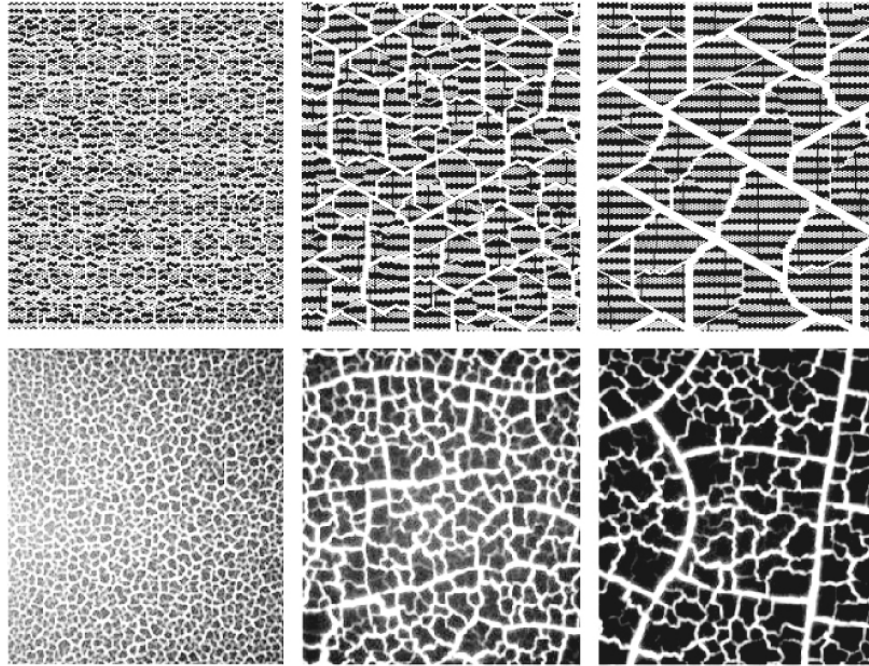


2.2. ábra. A Gutenberg-Richter törvény (a) [2] és a Burridge-Knopoff modellel kapott eredmények (b) [3].

energia-előfordulási gyakoriság kummulatív eloszlásfüggvényének log-log skálán való ábrázolásából -1-nek adódik (2.2a ábra). A 2.2b ábra a modellel kapott eloszlásfüggvényt vázolja. A két grafikon hasonlósága igazolja Burridge és Knopoff elképzelését.

2.2. Száradás során kialakuló törésmintázatok modellezése

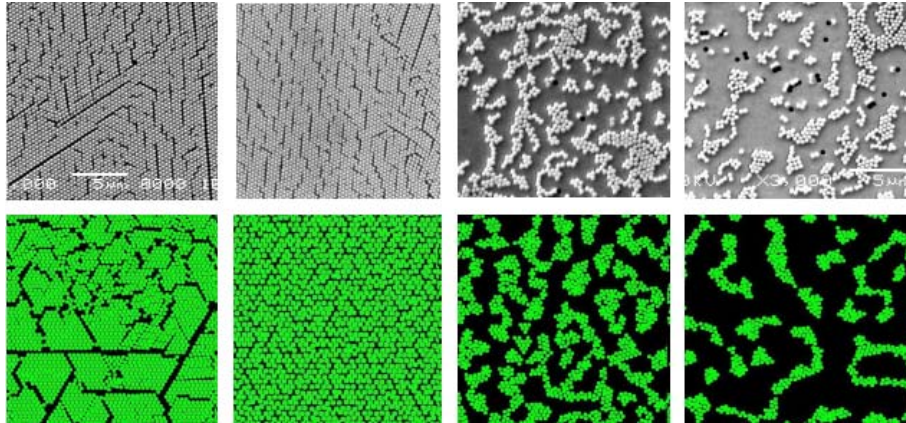
A rugó-tömb modellek sikeresen alkalmazhatók kváziszztatikus töredezési folyamatok, mint például sár, agyag, festékréteg, só sivatag, aszfalt, hó vagy jég töredezésének elméleti tanulmányozására. A vékony rétegű nedves granuláris anyagok száradása elképzelhető a modell analógiáján: az adott felületen az anyagrészecs-



2.3. ábra. Száradás során kialakuló törésmintázatok granuláris anyagokban. Az alsó sorban kísérleti, míg a felső sorban számítógép-szimulációs eredmények láthatók balról jobbra növekvő rétegvastagságok esetén [4].

kékek tömbök felelnek meg, a közöttük található folyadékhidaknak pedig a rugók. Száradáskor (ami a rugóállandók növelésével modellezhető) a részecskék a növekvő feszültség hatására tömörülnek, a rugók elszakadása révén töréscentrumok nukleálódnak, majd továbbhaladnak. A rugó-tömb modell alkalmas tehát a jelenség megragadására. A 2.3 ábra a granuláris anyagok száradás során kialakuló mintázatait mutatja [4]. Összehasonlításként láthatók rajta mind kísérleti, mind pedig számítógép-szimulációs eredmények.

Ehhez hasonlóan modellezhető az egyrétegű nanogömb-szuszpenziók száradása során kialakuló mintázatképződés [5]. Ekkor a tanulmányozott rendszer egy polisztirén nanogömbökből készített szuszpenzió, amit szilikon felületen szárítanak. A nanogömböket tömbök jelképezik, a közöttük fellépő kölcsönhatásokat pedig rugók. A száradáskor bekövetkező feszültségnövekedést a rugóállandók lépésenkénti növelése szimulálja. A tömbök egy rögzített rugóállandó érték mellett egyensúlyi konfigurációba rendeződnek. Ezt az önszerveződő folyamatot szabályozó erők: a rugók hosszával arányos kapilláris erő, az enyhén negatívan töltött tömbök közötti elektro-



2.4. ábra. Száradás során kialakuló törésmintázatok nanogömb rendszerekben. A felső sorban kísérleti, míg az alsó sorban számítógép-szimulációs eredmények láthatók [5].

szatikus taszítás, a merev taszítás, valamint a súrlódási erő. A szimuláció abból áll, hogy a feszültségnövelés-relaxáció lépéspárost egymás után többször ismétlik. Az így kialakuló mintázatokat a 2.4 ábra szemlélteti, összevetésben a kísérletileg kapott mintázatokkal.

Megjegyzendő, hogy ezeknek a szimulációknak - akár csak a következőkben bemutatásra kerülő nanocsövek száradására kidolgozott modellnek - nincs valós megfeleltetéseket megengedő idejük. Ehelyett dinamikájukat a különböző időintervallumoknak megfelelő relaxációs lépés jellemzi.

Az itt bemutatott jellegzetes példák arra engednek következtetni, hogy a modellcsalád alkalmas a száradási jelenségek megragadására. Ez motivált minket abban, hogy ezt az utat válasszuk a száradás során önszerveződő nanocsőrendszerek elméleti, számítógépes vizsgálatára.

3.

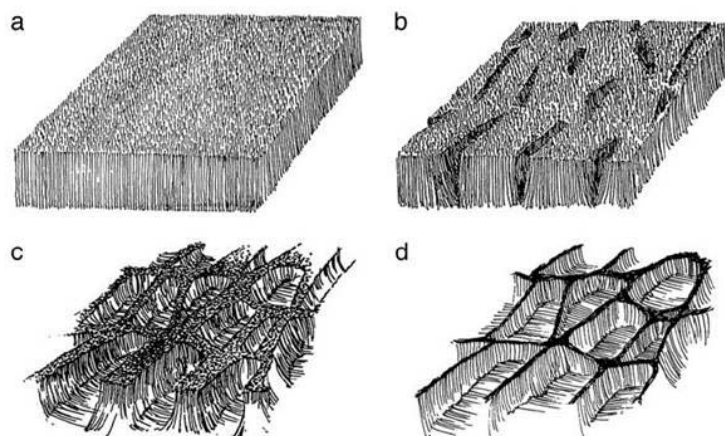
Nanocsövek száradásának modellezése

Kísérletileg vízben előállíthatók szabályos, erdőszerű elrendezésű nanocsőmátrixok, melyek ezután, a folyadék elpárolgása következtében cellás, sejtszerű struktúrákat alakítanak ki [8]. Ezeknek a szimulálására alkalmas modell elképzelhető a nanögömb-szuszpenziók száradására használt modell kibővítésével. Fontos itt megjegyeznünk, hogy habár a jelenség egy háromdimenziós önszerveződési folyamat, a modellünket megpróbáljuk kétdimenziósra redukálni.

A továbbiakban röviden ismertetem az előállítási kísérlet menetét és fontosabb eredményeit. Ezután a tényleges nanocsőrendszerből kiindulva felépítünk egy egyszerű háromdimenziós modellt, amit átalakítok egy azzal ekvivalens kétdimenziósra, melyben már alkalmazható a nanögömb-rendszerek esetére kidolgozott dinamika. Végül pedig azonosítom a kísérletekkel és a szimulációval egyaránt megkapott, egymástól nagyon eltérő struktúrák kialakulásáért felelős paramétereket.

3.1. Kísérleti eredmények

A modellezés tárgyát képező, kezdetben kefeszerű elrendezésben elhelyezkedő (lásd 3.1 (a) ábra), majd a száradást követően cellás szerkezetet kialakító nanocsőrendszereknek a kísérleti előállítását számos gyakorlati alkalmazás tette szükségessé. A [8] által ismertetett módon előállított nanocsőrendszerek használhatók rugalmas membránként nanoszűrés során, sokkalhárító szerkezeti erősítésként, vagy akár bio-



3.1. ábra. A nanocső rendszer száradásának folyamata [8].

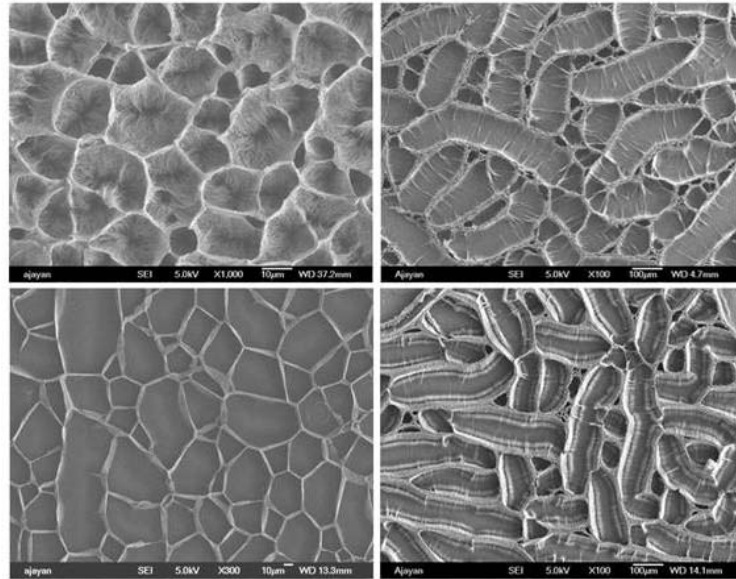
lógiai anyagok tárolócellájaként.

A függőleges állású nanocső mátrixokat ferrocén és xilén bomlásán alapuló kémiai gőzlecsapódással növesztették szilikon felületre. Az így felsorakoztatott nanocsőveket oxigénplazmában oxidálták, majd nedvesítették különböző folyadékokkal (vízzel is). Az oxidáció során nem sérült a nanocsőmátrix szerkezete. A folyadék párolgásakor ellenben a nanocsővek önszerveződésével kialakultak belőlük a cellák falai. A száradás folyamatát sematikusán szemlélteti a 3.1 ábra. Látható ahogyan a kezdeti állapotból (a) a törések nukleálódnak (b), és addig szélekednek (c), amíg kialakul a cellás szerkezet (d).

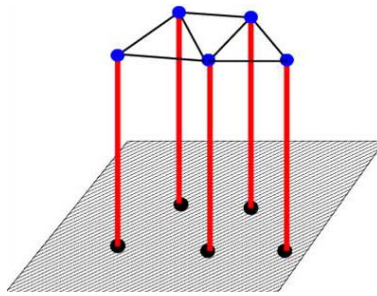
A kísérletileg kapott stuktúrák STM felvételei a 3.2 ábrán láthatók. Szembetűnő, hogy a bal oldali képeken a cellák gömbölyűbbek, mint a jobb oldalon levő képek esetében. Ezeknél inkább a hosszúkás alakú cellák jellemzőek. A szimulációk egyik végcélja pontosan ezen minőségileg eltérő cella alakok megjelenésének reprodukálása, illetve megmagyarázása.

3.2. Az elméleti modell

Az elméleti modellt sematikusán a 3.3 és a 3.4 ábrákon vázoltuk. Először a 3.3 ábrán látható, a valósághoz nagyon közel álló háromdimenziós modellt mutatjuk be. Ebben a nanocsőveket alsó végüknél rögzített felxibilis rudacs-kákkal, míg a csövek között fellépő kapilláris hatásokat rugókkal modelleztük. A folyadék párolgását - a



3.2. ábra. A száradás következtében kialakuló struktúra [6].

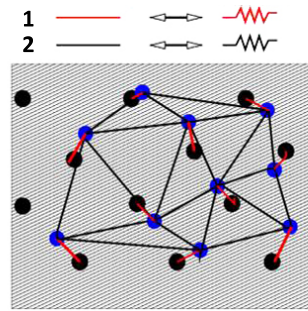


3.3. ábra. A háromdimenziós modell sematikus rajza.

nanogömbök száradásának mintájára - a rugóállandók megnövelésével szimuláltuk.

A háromdimenziós modell egyszerűen alakítható kétdimenzióssá, amennyiben az utóbbinak megfeleltetjük az előbbi háromdimenziós modell felülnézetét. A 3.4 ábrán látható módon a nanocső alsó rögzített végét egy rögzített, míg a felső szabad végét egy elmozdítható tömbbel helyettesítjük. A két típusú tömböt egy elszakíthatatlan rugóval kötjük össze. Ez modellezi a nanocső rugalmasan elhajlítható „törzsét”, amit az ábrán 1-es rugóval jelölünk. A nanocsövek tetejét modellező felső tömböket 2-es típusú rugókkal kötjük össze, ezekkel modellezve a csövekre ható kapilláris erőket.

Az ilyen módon előkészített rendszer magába foglalja a fizikai feladatnak megfelelő követelményeket. Elsősorban az 1-es típusú rugókkal modellezett nanocsövek



3.4. ábra. A kétdimenziós modell sematikus rajza.

rugalmasan hajlíthatók. Másodsorban a párolgás valós problémáját a 2-es típusú rugók rugóállandóinak lépésenkénti növelése szimulálja.

Mivel ezeket a rugókat jellemzi egy egységes szakadási érték, ha a rugóerő meghaladja ezt az adott értéket, az adott rugó elszakad, vagyis eltávolítjuk a rendszerből.

A nanocsövek tetején levő tömbök dinamikája lényegében egy viszkózus közegben zajló túlcillapított mozgás lesz. Ezt az egyszerűsített dinamikát sikeresen alkalmazták korábban a szemcsés anyagok száradásának modellezésekor [4, 5], valamint ezt használtuk az üvegtörés modellezésekor [9]. A módszer lényege, hogy az egyensúlyi állapot megkeresésekor a tömböket minden szimulációs lépésben elmozdítjuk a rájuk ható erővel arányosan:

$$d\mathbf{r} = \frac{1}{\nu} \mathbf{F}(\mathbf{r}) dt. \quad (3.1)$$

Ezt a módszert felhasználva a modellben kikerüljük a dinamika második alaptörvényének alkalmazását. Az megkívánta volna egy másodrendű differenciálegyenlet ismételt megoldását. A felkínálkozó numerikus módszerek algoritmikai értelemben vett bonyolultsága, valamint az általuk használt tárhely nagyobb, mint a túlcillapított dinamika esetében. Ezen kívül, tekintettel arra, hogy a feladat szempontjából csakis a rendszer egyensúlyi állapota érdekel, elégséges ennek az egyszerűbb dinamikának a használata.

A szimuláció során először inicializáljuk a rendszert. Ez annyit jelent, hogy a valóságnak megfelelően, a nanocsövek alapjait és felső végeit is egy háromszögrács pontjaira helyezzük majd a nanocsövek tetejét véletlenszerű irányokban, véletlenszerű, de a rendszer geometriájának megfelelő kis távolságokkal kimozdítjuk. Az inicializálás után, a rendszer dinamikájának modellezésekor sokszor ismételünk egymás után két fázist: az elsőben egy kellően kis értékkel megnöveljük a 2-es típusú

rugók rugóállandóját, a másodikban pedig az adott rugóállandó érték mellett relaxálni hagyjuk a rendszert.

A relaxációs lépéseket addig ismételjük, amíg egy egyensúlyi konfigurációhoz jutunk. Mivel a tökéletesen relaxált rendszer elérése gyakorlatilag lehetetlen, közelítést alkalmazunk. Ha az adott szimulációs lépésben előforduló legnagyobb elmozdulás kisebb egy toleranciaértéknél, melynek tipikus értéke 10^{-6} - 10^{-9} , akkor a rendszert relaxálnak tekintjük.

A szimuláció megkívánná a végesméret-effektus kezelését. A nanogömbök száradására kimutatható [5], hogy a szimulált rendszer központi részének viselkedése nem függ a használt határfeltételektől. Ez a megállapítás érvényes a nanocsövek esetében is, hiszen a két szimulációban ugyanazok a kis hatótávolságú erők alakítják a dinamikát.

Az eddigiekben egy olyan elméleti modellt építettünk fel a nanocsövek száradásának szimulálására, ami a rugó-tömb modellcsalád alkalmazásait gyarapítja. A nanocsövek végeinek elmozdítható és rögzített tömbök felelnek meg, az elmozdítható tömbök közötti kölcsönhatást pedig rugók modellezik. A lényeges különbség az alapmodellel szemben nem a rögzített tömbök meglétében áll, hanem abban hogy a nanocsövek esetében nincs sűrűlódás, hanem ehelyett az 1-es típusú rugók biztosítanak egy csillapító hatást.

3.3. A paraméterek

A bemutatott modellnek számos paramétere van. A nanocsövek alját, illetve tetejét jelképező tömböket a kétdimenziós modellben azonos méretűeknek és kör alakúaknak tekintjük. Sugarukat egységnyinek vesszük, ezzel definiálva a rendszerben a hosszúság egységét.

Miután rögzítettük a szimulációs felület méretét (S), adott térkitöltéssel elhelyezzük rajta a tömböket. Ez a térkitöltés határozza meg az inicializálásnál használt háromszöggrács rácsállandóját. Nyilvánvalóan, mivel ez a sűrűség érték a nanocsövekre vonatkozik, a felületre kiosztjuk először a térkitöltésnek megfelelő mennyiségű rögzített tömböt, majd ugyanannyi elmozdítható tömböt is.

A mozgatható tömbök esetében az elmozdulás mértékét szabályozza a viszkozitás, ami nem más, mint az (3.1) kifejezés arányossági tényezője.

A rendszerbeli rugókra vonatkozóan k_1 -ben rögzítjük a nanocsövek „törzsét” modellező 1-es típusú rugók rugóállandóját, k_2 -ben a kapilláris erőket modellező 2-es típusú rugók rugóállandóját, illetve dk -ban a párolgás szimulálását megvalósító rugóállandó-növekményt. Míg az 1-es típusú rugók szakíthatatlanok, a 2-es típusúakra értelmezünk egy maximális rugóerőt, vagyis a szakadási határértéket (F_f). Ezt az értéket egységnyinek tekintjük, ez képezi a szimulációk során az erőegységet.

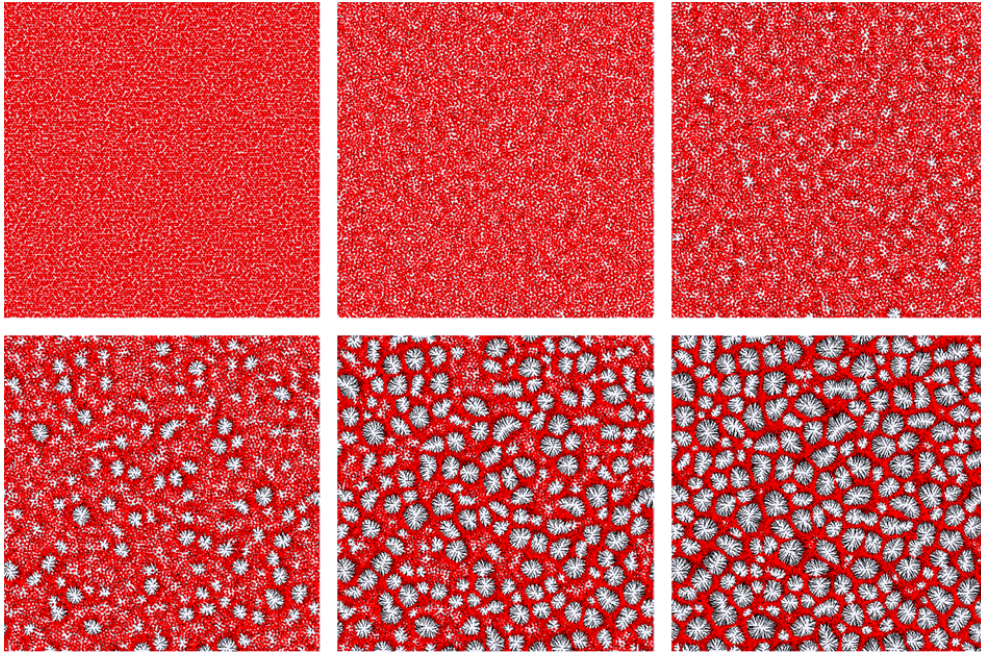
A felsorolt paraméterek változtatásával megvizsgáltuk, hogy a rendszer hogyan viselkedik ezek hatására. A különböző futtatások alapján kijelenthetjük, hogy a minőségileg különböző mintázatok kialakulásáért a sűrűség és az 1-es típusú rugók k_1 rugóállandója felelős. A többi paraméter ebből a szempontból kevésbé fontos, így ezek értékeit jól megfontoltan rögzítettük. A 2-es típusú rugók k_2 rugóállandója a dk -val való növelések során nagy skálát fed le, így gyakorlatilag szükségtelen nagyobb figyelmet tulajdonítani neki. Maga a dk növekmény „finomságával” mindössze a száradás folyamatának a köztes lépéseire hat ki. Ha dk -t elég kicsinek választjuk, akkor nem befolyásolja a kialakuló mintázatokat. Továbbá a viszkozitást (η) úgy állítottuk be, hogy elkerüljük a rendszerben az irreális oszcillációkat. Végül a rugók F_f szakadási határértéke visszaskálázható a k_2 rugóállandóra, ezért elegendő azt változtatni a párolgás során.

3.4. Eredmények

A rugó-tömb modell alapötletét adaptálva a mi feladatunkra, a rugókkal a kapilláris erőket modelleztük. Ugyanezt az eljárást sikerrel alkalmazták korábban a száradás során kialakuló törésmintázatok modellezésére [4, 5].

A szimulációk elvégzésével nyomon követhető a nanocsőrendszer időbeli fejlődése. A kísérletekkel egyező dinamikát (3.1 ábra) reprodukálják a szimulációk is: a kezdetben homogén szerkezetben törések jelennek meg, ezek mentén fokozatosan távolodnak egymástól a nanocsövek, „falakba” tömörülnek, mígnem kialakítják a cellás struktúrát.

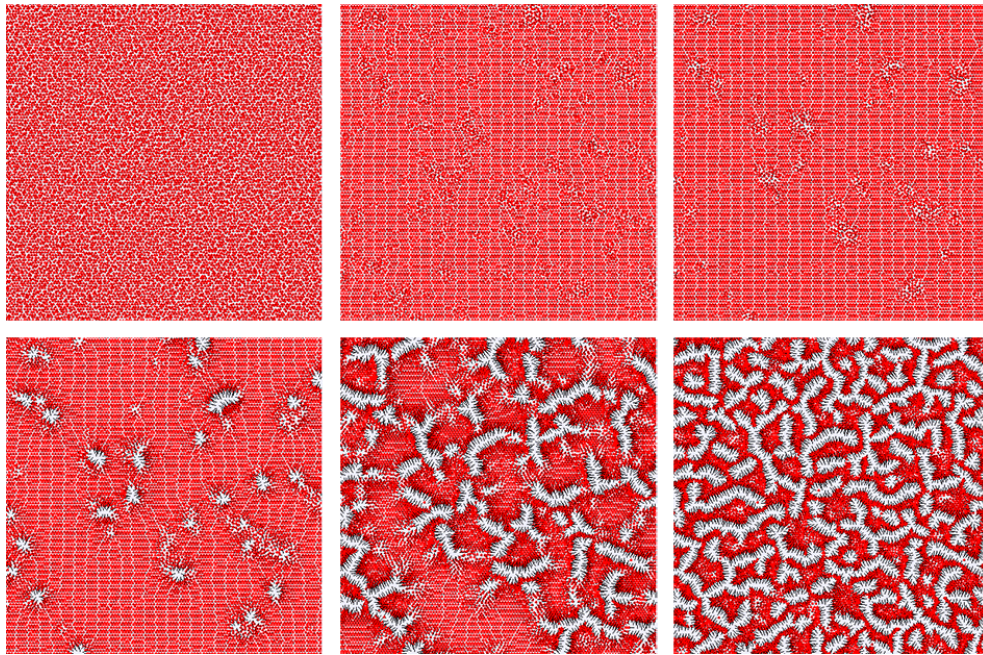
A 3.5, illetve a 3.6 ábrákon két különböző paraméterlistára láthatunk egy-egy ilyen képsorozatot. A két ábracsoporton látható, egymástól eltérő végső struktúrákat két paraméter változtatása okozza, nevezetesen a nanocsövek sűrűsége és a k_1 rugóállandó értéke. Ez arra enged következtetni, hogy a különböző mintázatok ki-



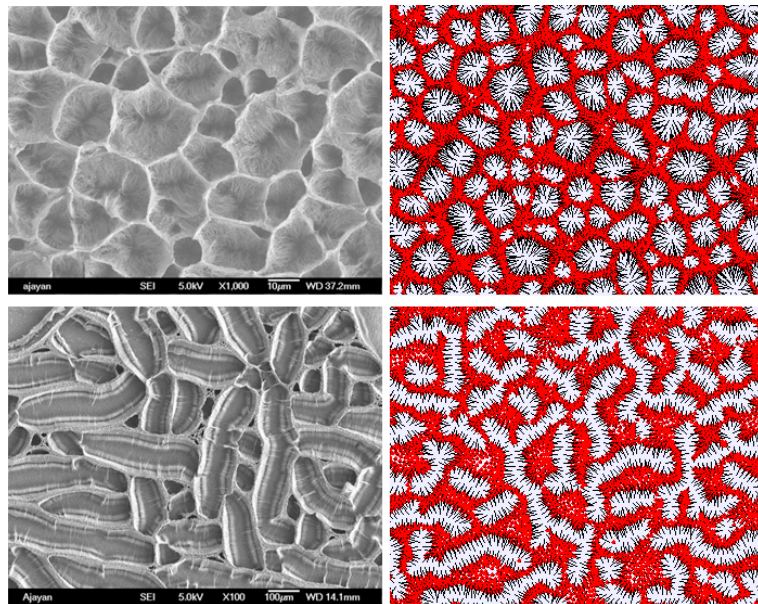
3.5. ábra. A szimuláció eredményei az $S = 800 \times 800$, $\rho = 0.25$, $k_1 = 0.01$, $k_2 = 0.1$, $dk = 0.001$, $\eta = 0.001$, $F_f = 1$ paraméterszetre.

alakulását a nanocsövek sűrűsége, illetve azok hosszúsága (ami a k_1 rugóállandóval hozható összefüggésbe) fogja befolyásolni. A sűrűbb és rövidebb nanocsőrendszerben ovális, a gyérebb és hosszabb nanocsövek felhasználásával pedig hosszúkas cellák alakulnak ki.

Amint a 3.7 ábra mutatja, az előbbieken ismertetett szimulációs eredmények jó egyezéssel visszaadják a kísérletek eredményeként kapott minőségileg eltérő mintázatokat.



3.6. ábra. A szimuláció eredményei az $S = 800 \times 800$, $\rho = 0.2$, $k_1 = 0.075$, $k_2 = 0.1$, $dk = 0.001$, $\eta = 0.05$, $F_f = 1$ paraméterszetre.



3.7. ábra. A kísérleti és a szimulációs eredmények összevetése.

4.

Következtetések

Munkánk során egy rugó-tömb típusú modellt dolgoztunk ki a nanocsövek száradásának szimulációjára. Ez egy nano szinten végbemenő önszerveződő folyamat, mely lehetőséget ad gyakorlati szempontból fontos nanostruktúrák könnyű és olcsó előállítására. A modell számítógépes környezetben viszonylag könnyen implementálható, és elfogadható szimulációs időn belül a kísérletiekkel egyező eredményeket szolgáltat.

A lényeges paraméterek száma két olyan paraméterre redukálható, amely a minőségileg különböző mintázatok megjelenéséért felelős. Ezek a nanocsövek sűrűsége illetve a csövek hosszúságával kapcsolatban álló rugóállandó nagysága. Ezek, a szimulációkban a végső struktúra szempontjából fontosnak kitüntetett paraméterek kísérletileg is beállíthatók.

Fontosnak tartjuk kiemelni, hogy modellünk sikeresen reprodukálja a kísérletek eredményeként kapott minőségileg eltérő mintázatokat. Szimulációinkban a sűrűbb és rövidebb nanocsőrendszerekben ovális, a gyérebb és hosszabb nanocsövek felhasználásával pedig hosszúkás cellák alakulnak ki.

A háromdimenziós önszerveződési folyamat rugó-tömb modellezése egy újabb példa a modellcsalád széleskörű alkalmazási lehetőségeire.

Irodalomjegyzék

- [1] R. Burridge, L. Knopoff, Bull. Seism. Soc. Am **57**, 341 (1967)
- [2] B. Gutenberg and C. F. Richter, Ann. Geophys. **9**, 1 (1956)
- [3] Z. Olami, H. J. S. Feder, K. Christensen, Phys. Rev. Lett. **68**, 1244 (1992)
- [4] K.-t. Leung, Z. Néda, Phys. Rev. Lett. **85**, 662 (2000)
- [5] F. Járai-Szabó, S. Aştilean, Z. Néda, Chem. Phys. Lett. **408**, 241 (2005)
- [6] F. Járai-Szabó, et al., J. Optoel. Adv. Mat. **8**, 1083 (2006)
- [7] N. Winslow, www.econ.iastate.edu/classes/econ308/tesfatsion/SandpileCA.Winslow97.htm (1997)
- [8] N. Chakrapani, et al., Proc. Nat. Acad. Sci **101**, 4009 (2004)
- [9] E. Horváth, F. Járai-Szabó, Z. Néda, ETDK dolgozat (2007)