

## **МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ БАЛІСТИЧНИХ СТРИБКІВ НА ФОРМУ КРИСТАЛІЧНИХ НАНОЧАСТИНОК МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО**

Напівпровідні оксиди є перспективними для розвитку та створення розумних та функціональних матеріалів, пристроїв та систем. Оксиди мають дві унікальні структурні особливості: змішані валентності катіонів та регульований дефіцит кисню, які є основою для створення та зміни властивостей нових матеріалів [1-5]. Синтез наноструктур функціональних оксидів, з контрольованою структурою та морфологією є критичним для наукових та технологічних застосувань. Використовуючи нові технології, відносно нещодавно було синтезовано нанопояски, нанодроти та нанодискети напівпровідних оксидів [2].

Одним із методів утворення наноструктур є гідротермічний підхід, який широко застосовується для досягнення високої продуктивності та подальших застосувань [3]. Цей метод показує виняткові переваги у створенні наноструктур за допомогою зміни динаміки реакцій, яку важко отримати за допомогою інших методів. Мікроструктура може бути сильно змінена внутрішніми чинниками, такими як температура, кислотність, тиск та час. Останні дослідження показують, що механічне перемішування може суттєво порушити динаміку гідротермальної реакції, що призводить до зміни наноструктур, оскільки порушується рівновага хімічної реакції. Механічне перемішування впливає на ріст нанокристалів та остаточну морфологію і створює новий шлях до гідротермального синтезу нанопоясків [4].

У даній роботі проведено цикл комп'ютерних експериментів для моделювання впливу зовнішніх факторів на форму кристалічних наночастинок на основі решіткового методу Монте-Карло. Алгоритм Монте-Карло був модифікований введенням балістичних стохастичних стрибків. Встановлено, що інтенсивність балістичних стрибків істотно впливає на розчинність і форму кристалічних наночастинок.

### **Список використаних джерел і літератури:**

1. Xianhong Ruita. Ambient dissolution–recrystallization towards large-scale preparation of V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> nanobelts for high-energy battery applications / R. Xianhong, T. Yuxin, O. Malyi, A. Gusak, Y. Zhang // *Journal of Nano Energy*. – 2016. – V. 22. – P. 583-593.
2. Xudong Wang. Nanowire and nanobelt arrays of zinc oxide from synthesis to properties and to novel devices / X. Wang, J. Song, Z. Lin Wang // *Journal of Materials Chemistry*. – 2007. – V. 8. – P. 711-720.
3. Yuxin Tang. Mechanical Force-Driven Growth of Elongated Bending TiO<sub>2</sub>-based Nanotubular Materials for Ultrafast Rechargeable Lithium Ion Batteries / Y. Tang, Y. Zhang, J. Deng, J. Wei // *Advanced Materials*. – 2014. – V. 26. – P. 6111-6118.
4. Z. L. Wang. Nanobelts, Nanowires, and Nanodiskettes of Semiconducting Oxides – From Materials to Nanodevices / Z. L. Wang // *Advanced Materials*. – 2003. – V. 15. – P. 432-436.
5. Zheng Wei Pan. Nanobelts of Semiconducting Oxides / Z. Wei Pan, Z. Rong Dai, Z. Lin Wang // *Science*. – 2001. – V. 291. – P. 1947-1949.

**Науковий керівник:** к.ф.-м.н., доцент Пасічний М. О.

*Пасічна В. М.*

*Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького*

## **ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДІВ МОНТЕ-КАРЛО, СЕРЕДНЬОПОЛЬОВОГО І ФЕНОМЕНОЛОГІЧНОГО ДО ПРОБЛЕМ НУКЛЕАЦІЇ ТА РЕАКЦІЙНОЇ ДИФУЗІЇ**

**Актуальність.** Основою багатьох важливих технологічних процесів є розпад та упорядкування сплавів. Ці процеси спостерігаються під час старіння сплавів; зміцнення сплавів дрібнодисперсними включеннями, які слугують стопорами для розповсюдження тріщин; з'єднання матеріалів за допомогою впорядкованих фаз. Існує багато теорій нуклеації, починаючи

із Гіббса, Фольмера, Френкеля, Зельдовича, Тернбола, і не так багато детальних комп'ютерних кінетичних моделей нуклеаційних стадій цих процесів. Особливу роль у з'ясуванні можливої та дійсної картини нуклеації грають атомістичні моделі – Монте-Карло та середнього поля. На наш погляд вони є більш «чесними» у порівнянні із загально прийнятим розв'язком рівнянь Фоккера-Планка у просторі розмірів. Тому наша поставлена задача є безумовно актуальною.

**Мета.** Дослідити кінетику гомогенної нуклеації при розпаді бінарного твердого розчину, а також кінетику росту впорядкованих фаз під час реакційної дифузії та окремо під впливом поля градієнта концентрації.

**Завдання.**

1. Розглянути бінарний сплав, що має тенденцію до розпаду та побудувати методом Монте-Карло залежності часу інкубаційного часу від двох різних параметрів пересичення. Визначити який з параметрів пересичення краще підходить для опису нуклеації у бінарному твердому розчині.

2. Порівняти результати, що стосуються дослідження кінетики нуклеації у бінарному твердому розчині, отримані за класичною теорією нуклеації (CNT) та методом SKMF.

3. Перейти до бінарних сплавів, що мають тенденцію до упорядкування. Дослідити та порівняти методом Монте-Карло кінетику росту впорядкованих фаз L12 та L10 під час реакційної дифузії в інкрементальній парі та одночасному рості фаз, побудувавши залежність квадрату ширини впорядкованої фази від часу (перевірка параболічного закону дифузії).

4. Дослідити методом Монте-Карло вплив градієнта концентрації на час формування проміжних впорядкованих фаз L10 та B2, побудувавши залежність часу формування впорядкованої фази від квадрату градієнта концентрації.

**Методика дослідження.** Основним методом дослідження був Монте-Карло метод (алгоритм Метрополіса). Але отримані цим методом результати порівнювалися з результатами класичної теорії нуклеації (CNT) та SKMF.

**Метод Монте-Карло.** Загальною характеристикою методу Монте-Карло є багаторазове застосування послідовності математичних та логічних операцій відповідно до певного імовірнісного алгоритму. Цей метод є ефективним при дослідженні процесів у твердих тілах на атомному рівні. Його основу складає випадковий вибір дозволених траєкторій системи у фазовому просторі. Положення системи у фазовому просторі змінюється завдяки розігрування випадкового числа. У дифузійних задачах це досягається зміщенням атомів у реальному просторі.

Згідно алгоритму Метрополіса атомістичного методу Монте-Карло – ймовірність стрибка атома з положення  $i$  в положення  $j$ , визначається залежністю:

$$P_{i \rightarrow j} = \begin{cases} 1, & (\Delta E \leq 0); \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right), & (\Delta E > 0). \end{cases} \quad (1)$$

де  $\Delta E = E_j - E_i$ ,  $E_i$  та  $E_j$  – енергії системи до та після стрибка, відповідно,  $k$  – стала Больцмана,  $T$  – температура системи.

**Метод SKMF.** Stochastic Kinetic Mean-Field (SKMF) метод був запропонований у [7, 2] і в подальшому розвинений у [4-6, 1, 2]. Це нелінійна самоузгоджена атомістична версія методу середнього поля зі шумом, винайдена внаслідок розвитку детерміністичного підходу середнього поля Мартіна. Основні кінетичні рівняння в SKMF сформульовані самостійно для ймовірностей зайнятості кожного вузла атомом сорту A, з частотами залежно від конфігурації енергії у наближенні середнього поля, і з шумом мікропотоків (або шумом частот) між сусідніми вузлами:

$$\frac{dC_i}{dt} = - \sum_{j=1}^Z \left[ C_i (1 - C_j) (\Gamma_{i,j}^{mean-field} + \delta \Gamma_{i,j}^{Lang}) - C_j (1 - C_i) (\Gamma_{j,i}^{mean-field} + \delta \Gamma_{j,i}^{Lang}) \right] \quad (2)$$

де

$$\Gamma_{i,j}^{mean-field} = \Gamma_0 \exp\left(-\frac{\overline{E}_{i,j}}{kT}\right) \quad (3)$$

$$\overline{E}_{i,j} = (M - E_{mix}) \sum_{l=1}^{Z=12} C_l + (M + E_{mix}) \sum_{n=1}^{Z=12} C_n \quad (4)$$

$V_{\alpha,\beta} (\alpha, \beta = A, B)$  парна енергія взаємодії з  $Z = 12$  найближчими сусідами;

$M = (V_{AA} - V_{BB})/2$  – параметр асиметрії;  $E_{mix} = V_{AB} - (V_{AA} + V_{BB})/2$  – енергія змішування;

$\Gamma_0 = \nu_0 \exp\left(\frac{-E^s + Z(V_{AB} + V_{BB})}{kT}\right)$  ( $\nu_0$  – частота спроб;  $E^s$  – сідлова точка енергії, взята в

КМФ константою для всіх стрибків);  $\delta \Gamma_{i,j}^{Lang}$  – шум частоти стрибків;

$\delta \Gamma_{i,j}^{Lang} = \Gamma_0 \frac{A_n}{\sqrt{\Gamma_0 dt}} \sqrt{3} (2random - 1)$  де  $A_n$  безрозмірна амплітуда шуму;  $\Gamma_0 dt$  –

безрозмірний крок по часу.

**Загальна характеристика роботи.** Вперше здійснено порівняння застосування трьох методів (CNT, SKMF та Монте-Карло) для прогнозування залежності інкубаційного часу швидкості зародкоутворення від пересичення.

Досліджено методом Монте-Карло ріст і конкуренцію проміжних впорядкованих фаз з ГЦК решіткою при врахуванні взаємодії в двох координаційних сферах. При цьому була побудована діаграма стану відповідної системи, яка демонструє вузькі концентраційні інтервали існування проміжних фаз, що було раніше проблемою при моделюванні з урахуванням взаємодії в одній координаційній сфері.

Досліджено вплив градієнта концентрації на час формування впорядкованих фаз B2 та L10.

#### Список використаних джерел і літератури:

1. Gusak, A. M., Zaporozhets, T. V., Lyashenko, Y. O., Kornienko, S. V., Pasichnyy, M. O., & Shirinyan, A. S. (2010). Diffusion-controlled Solid State Reactions: In Alloys, Thin Films and Nanosystems. John Wiley & Sons.
2. Turnbull, D., & Fisher, J. C. (1949). Rate of nucleation in condensed systems. The Journal of chemical physics, 17(1), 71-73.
3. Erdélyi, Z., Pasichnyy, M., Bezpachuk, V., Tomán, J. J., Gajdics, B., & Gusak, A. M. (2016). Stochastic kinetic mean field model. Computer Physics Communications, 204, 31-37.
4. Bezpachuk, V., Abdank-Kozubski, R., Pasichnyy, M., & Gusak, A. (2018). Tracer Diffusion and Ordering in FCC Structures-Stochastic Kinetic Mean-Field Method vs. Kinetic Monte Carlo. In Defect and Diffusion Forum (Vol. 383, pp. 59-65). Trans Tech Publications.
5. Gusak, A., & Zaporozhets, T. (2018). Martin's Kinetic Mean-Field Model Revisited—Frequency Noise Approach versus Monte Carlo. Металлофізика и новейшие технологии.
6. Gajdics, B., Tomán, J. J., Zapolsky, H., Erdélyi, Z., & Demange, G. (2019). A multiscale procedure based on the stochastic kinetic mean field and the phase-field models for coarsening. Journal of Applied Physics, 126(6), 065106.
7. Storozhuk, N. V., Sopiga, K. V., & Gusak, A. M. (2013). Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion. Philosophical Magazine, 93(16), 1999-2012.

**Науковий керівник:** д.ф.-м.н., професор Гусак А.М.