



Саратовский национальный
исследовательский государственный
университет имени Н. Г. Чернышевского



Факультет компьютерных наук
и информационных технологий

VIII Международная научная конференция
"КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ"
памяти А.М.Богомолова

Компьютерное моделирование диэлектрической проницаемости композитных наноструктур на основе кремния



САРАТОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени Гагарина Ю. А.

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

Актуальность работы

- В настоящее время одно из актуальных научных направлений связано с анализом влияния внешних воздействий на нанокompозитные среды.
- Неоднородные материалы, в частности нанокompозиты, используют во многих областях человеческой деятельности, например, в микро и наноэлектронике особое применение находят структуры на кремнии и углеороде.
- Нанокompозитные среды вызывают интерес исследователей благодаря свойствам, которые могут сильно отличаться от входящих компонент.
- В этой связи важное значение приобретает математическое моделирование физических процессов, протекающих в объекте исследования.

Цель работы

Математическое моделирование и исследование влияния характеристик «core-shell» включений в составе нанокомпозитной среды на диэлектрические свойства в оптическом диапазоне

Задачи

1. Исследовать математические модели взаимодействия электромагнитного излучения с нанокompозитными средами.
2. Разработать новую математическую модель взаимодействия электромагнитного излучения с нанокompозитными средами, состоящими из многослойных наночастиц.
3. Провести анализ численных методов решения полиномиальных уравнений с комплексными переменными.
4. Разработать метод подбора состава нанокompозитного материала с требуемыми диэлектрическими характеристиками на основе генетического алгоритма.
5. Создать программный комплекс, позволяющий на основе информации о нанокompозитной среде и внешних воздействиях получить числовые данные результата моделирования взаимодействия электромагнитного излучения с нанокompозитными средами.
6. Реализовать базу данных свойств материалов как одного из модулей программного комплекса.

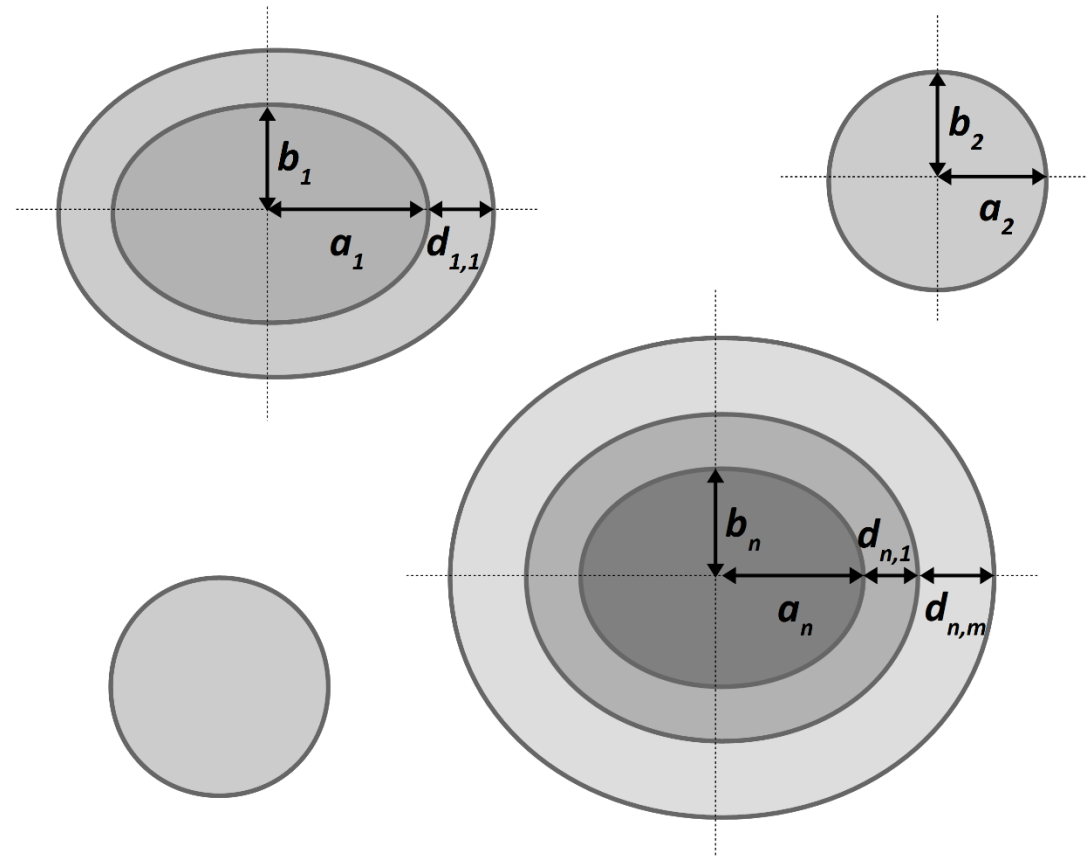
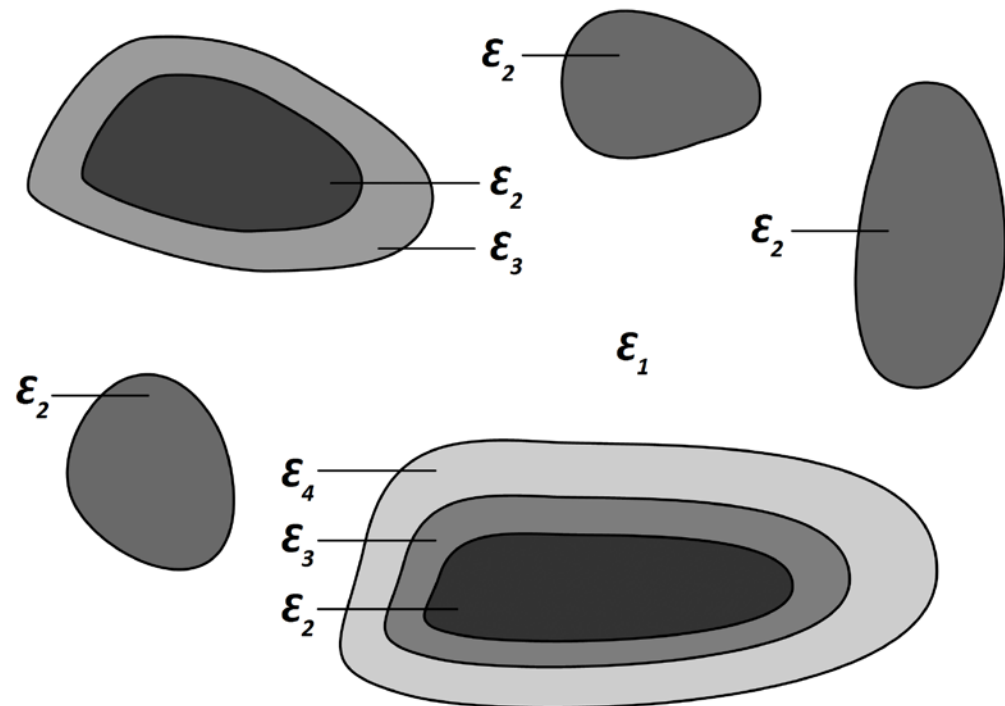
Научная новизна

- Математическая модель взаимодействия электромагнитного излучения с нанокompозитными средами, состоящими из многослойных наночастиц в форме приближенной к сфероидальной, на основе приближения Максвелла-Гарнетта и теории эффективной среды.
- Разработан программно-алгоритмический комплекс моделирования процессов взаимодействия электромагнитного излучения с нанокompозитными средами

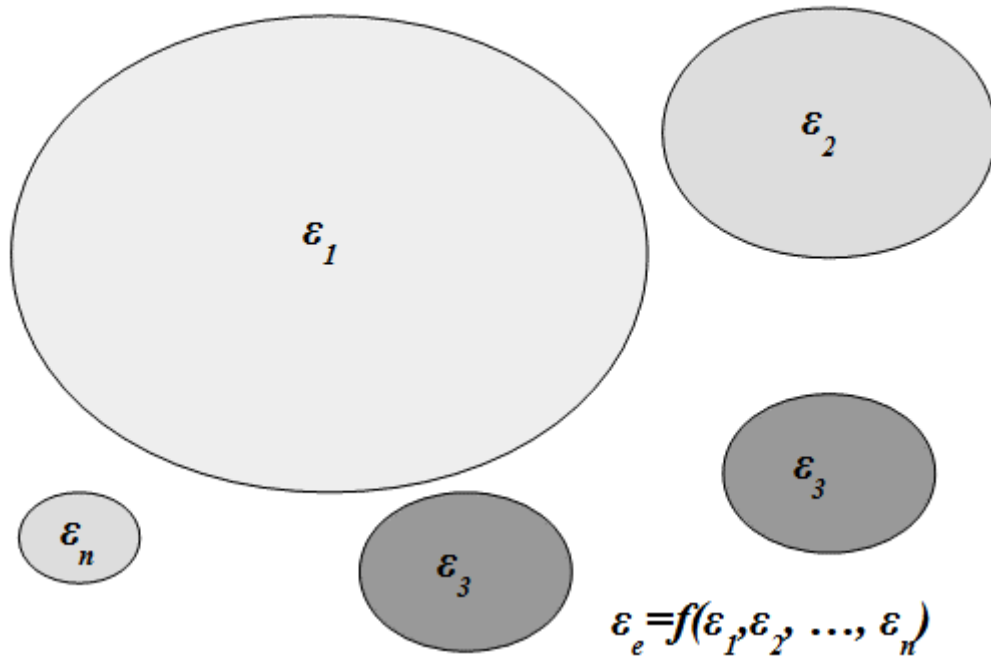
Обзор

- Анализ взаимодействия электромагнитного поля с нанокompозитной средой, компоненты которой отличаются геометрическими и материальными свойствами
- Нанокompозитную среду возможно рассматривать как новую однородную среду с эффективными параметрами - "теория эффективной среды"
- Классифицируют по соотношению компонент: матричные и статистические
- Для разбавленных систем достаточно часто используют уравнения Клаузиуса-Моссоти-Лоренц-Лоренца, Максвелла, Максвелла-Гарнетта, Лихтенекера и др.
- К статистическим системам применяются модели Бруггемана, Оделевского и др.

Физическая модель



Математическая модель

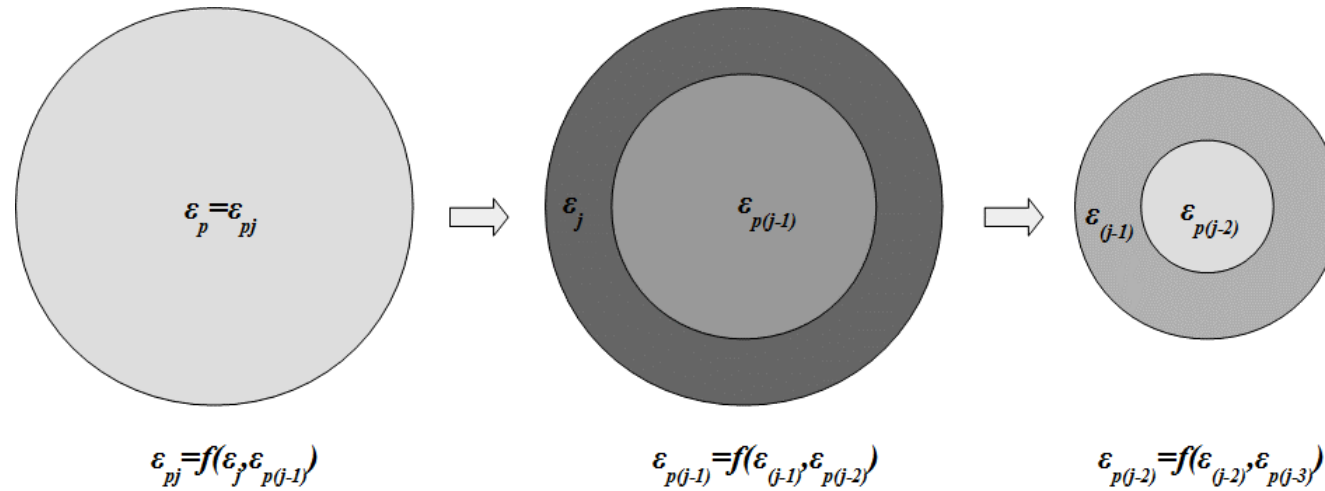


$$\sum_{i=1}^n v_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_e}{\varepsilon_e + \rho_i (\varepsilon_i - \varepsilon_e)} = 0,$$

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

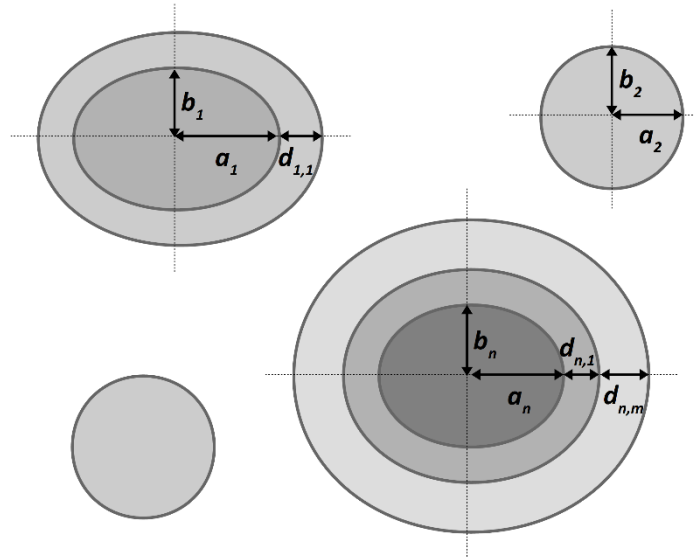
$$\rho_{\parallel} + 2\rho_{\perp} = 1, \quad \xi = a/b,$$

Математическая модель



$$\varepsilon_{pj} = \begin{cases} \varepsilon_j \left[1 + \frac{\varepsilon_j - \varepsilon_{p(j-1)}}{\varepsilon_j - \rho(2 - v_j)(\varepsilon_j - \varepsilon_{p(j-1)})} \right], & 1 < j \leq m, \\ \varepsilon_j, & j = 1. \end{cases}$$

Математическая модель



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

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

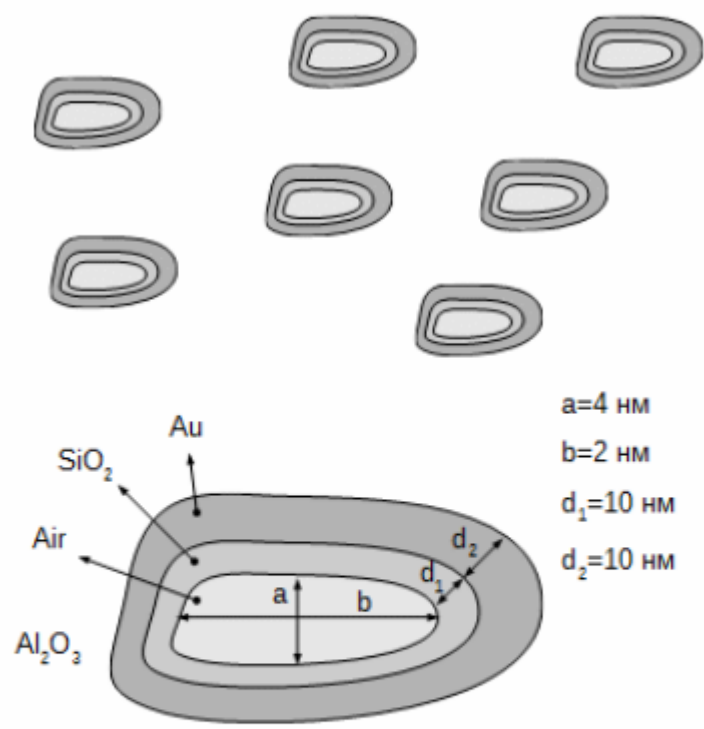


Рисунок 5. Модель матричной нанокompозитной среды с ориентированными “core-shell” включениями

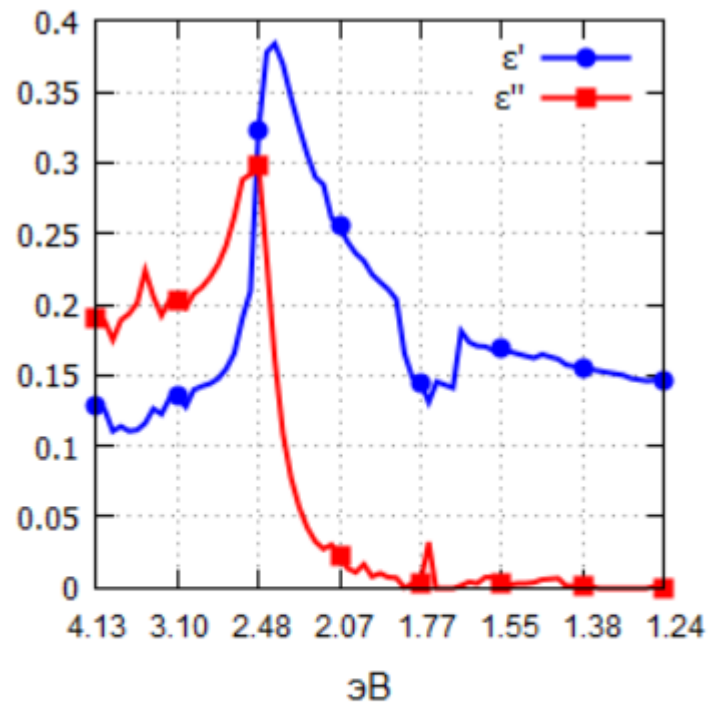


Рисунок 6. Частотные зависимости ϵ' и ϵ'' матричного композита с ориентированными “core-shell” включениями

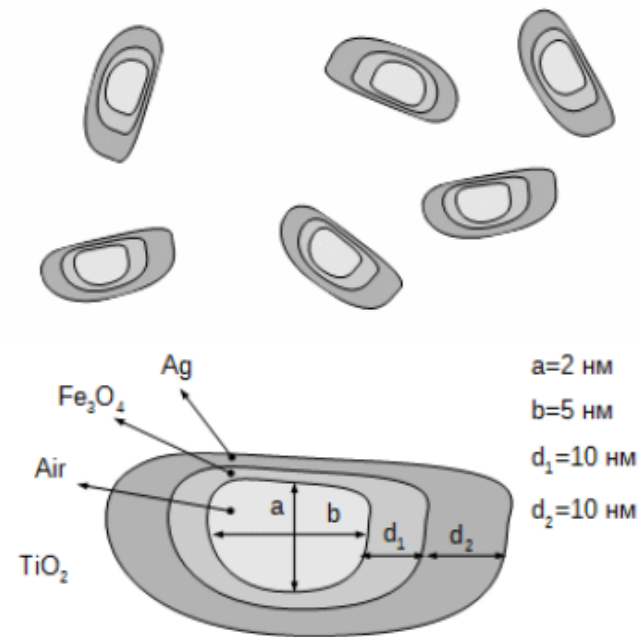


Рисунок 7. Модель матричной нанокompозитной среды с хаотически ориентированными “core-shell” включениями

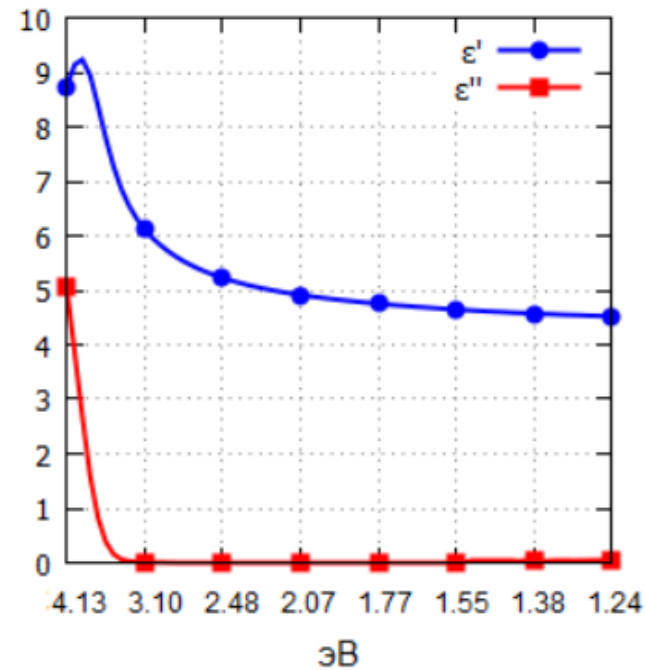


Рисунок 8. Частотные зависимости ϵ' и ϵ'' матричного композита с хаотически ориентированными “core-shell” включениями

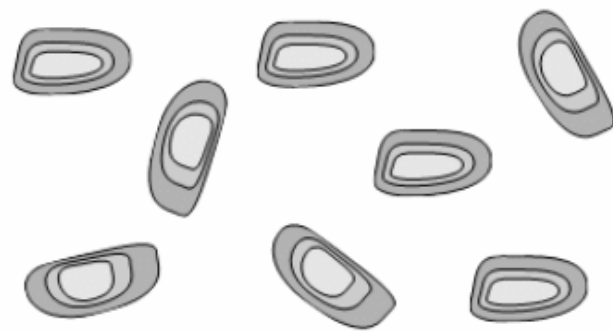


Рисунок 9. Модель матричной нанокompозитной среды с двумя видами “core-shell” включений

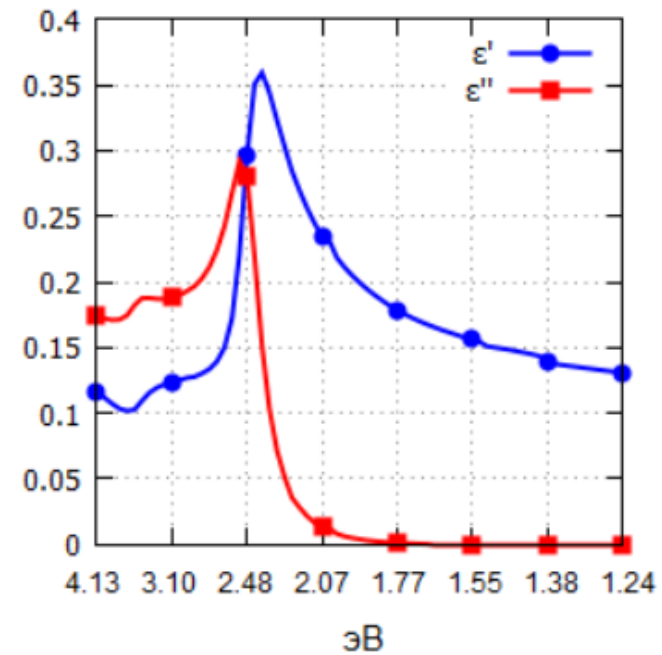
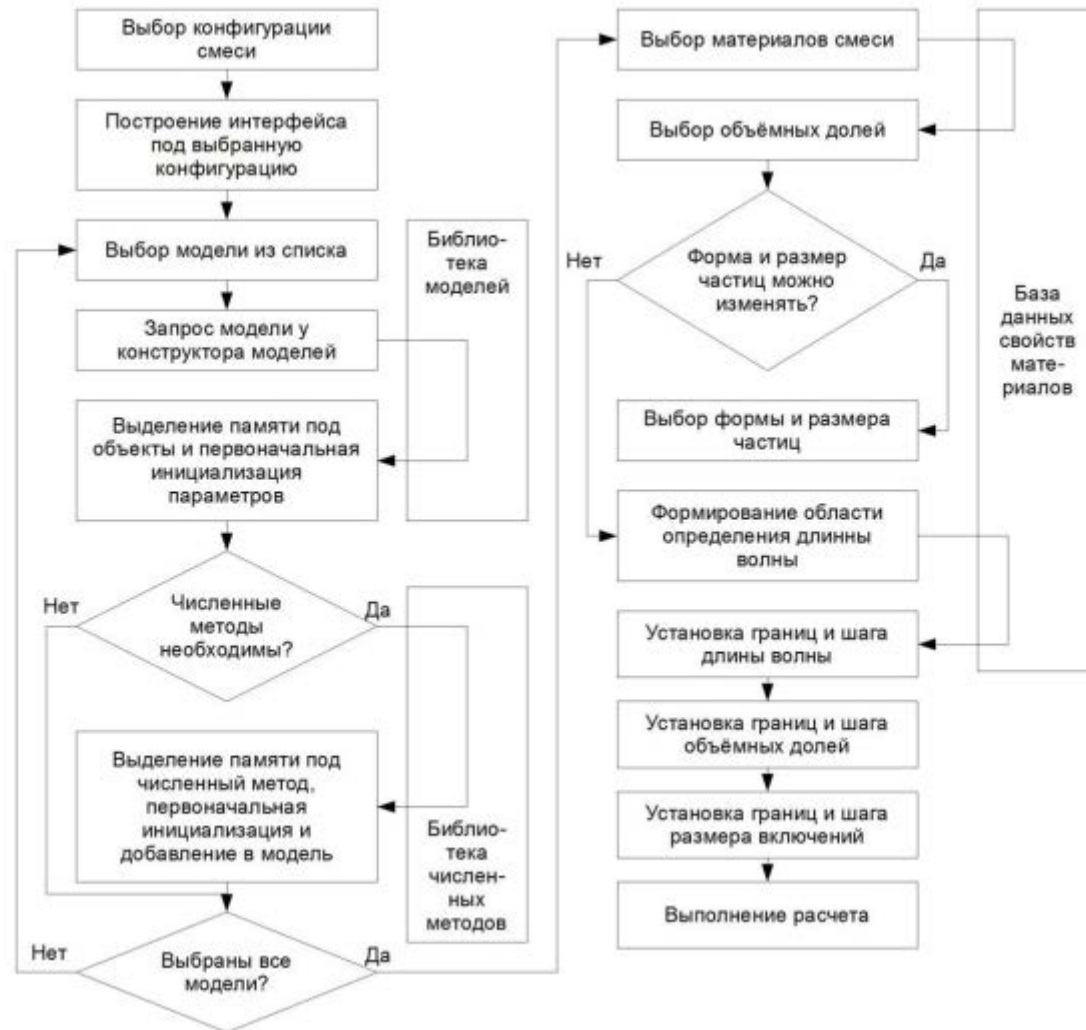


Рисунок 10. Частотные зависимости ϵ' и ϵ'' матричного композита с двумя видами “core-shell” включений

Программный комплекс



Программный комплекс

Свойства композитных сред

Файл Настройки Помощь

Модель

Слоистая система



Внешнее поле

Направлено параллельно слоям

Направлено нормально слоям

Длина волны внешнего поля

500



Смесь

Объёмная доля первого компонента

0,3



Первый компонент

PS



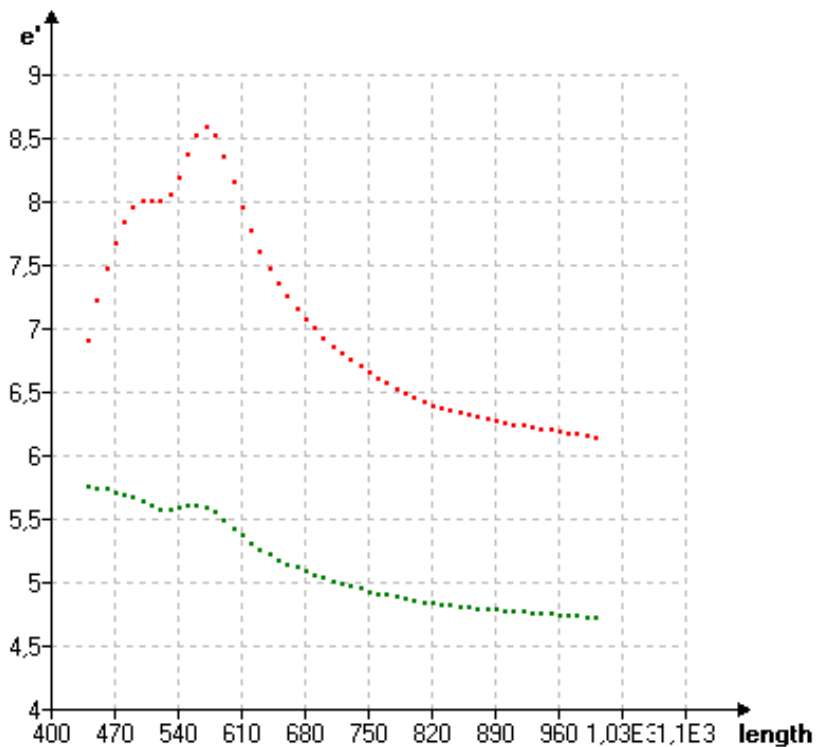
Второй компонент

Fe2O3 Query-o

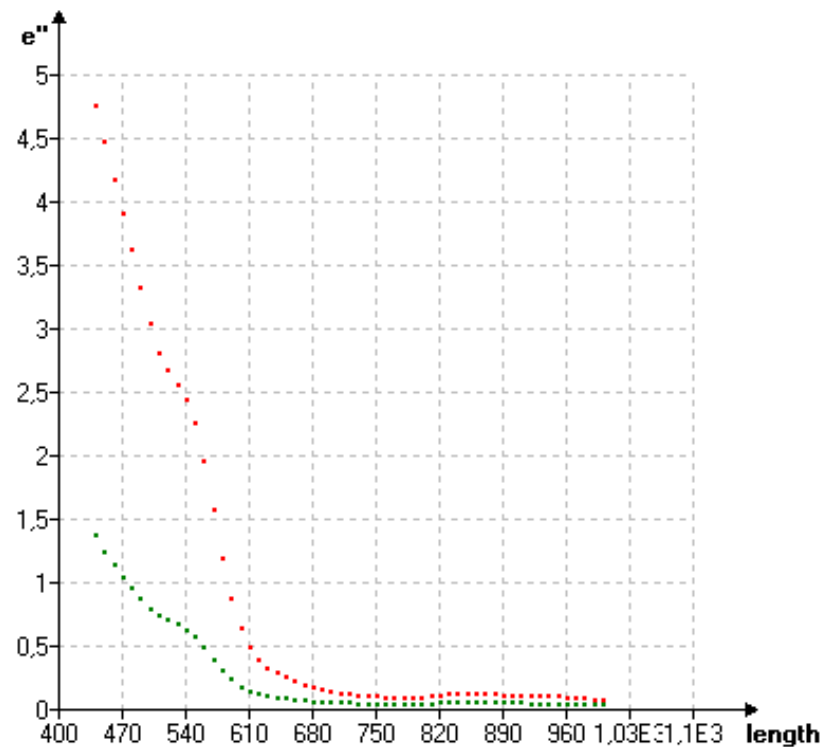


Длина волны

Объёмная доля



■ Параллельное соединение слоёв
■ Последовательное соединениe слоёв



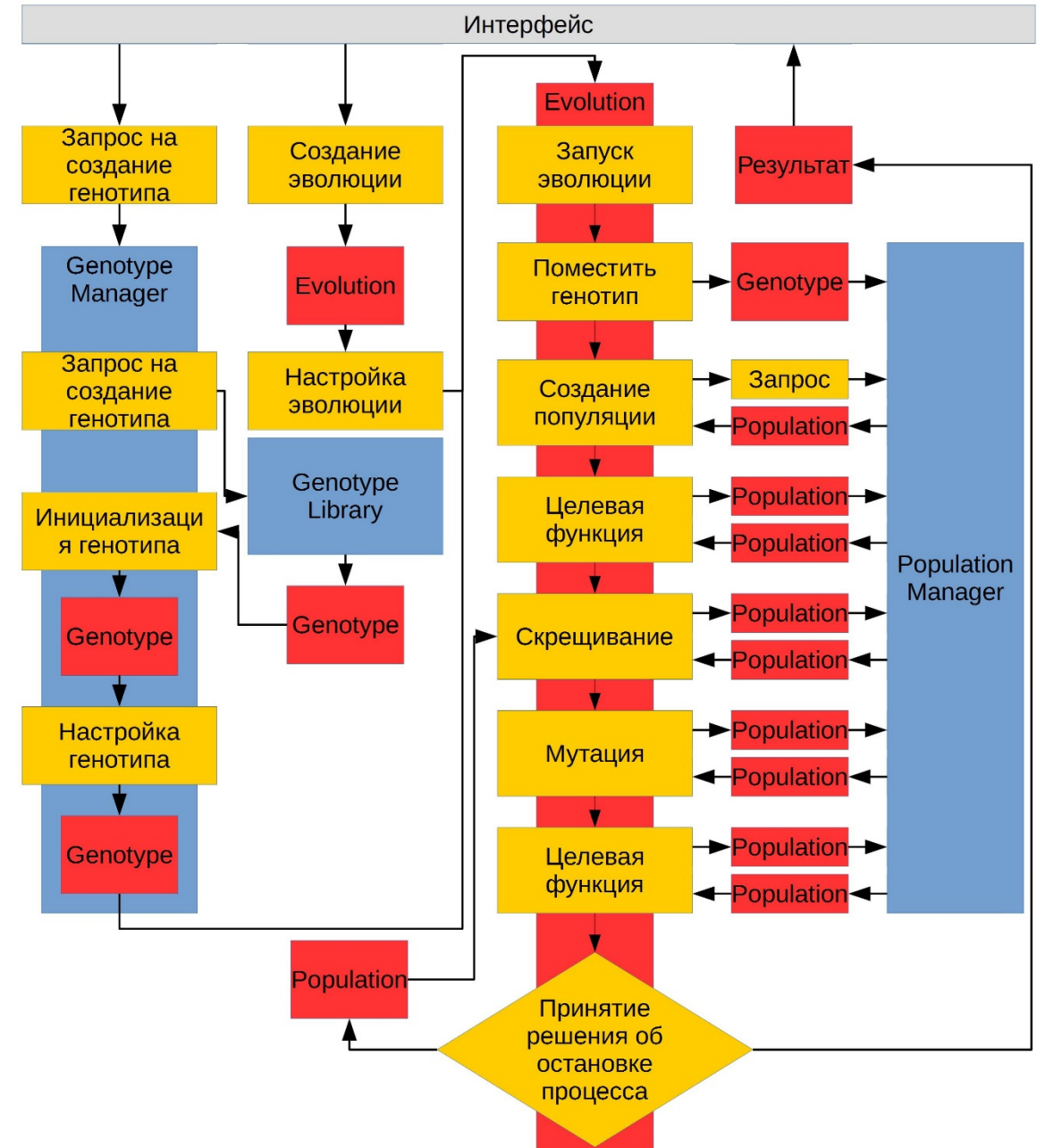
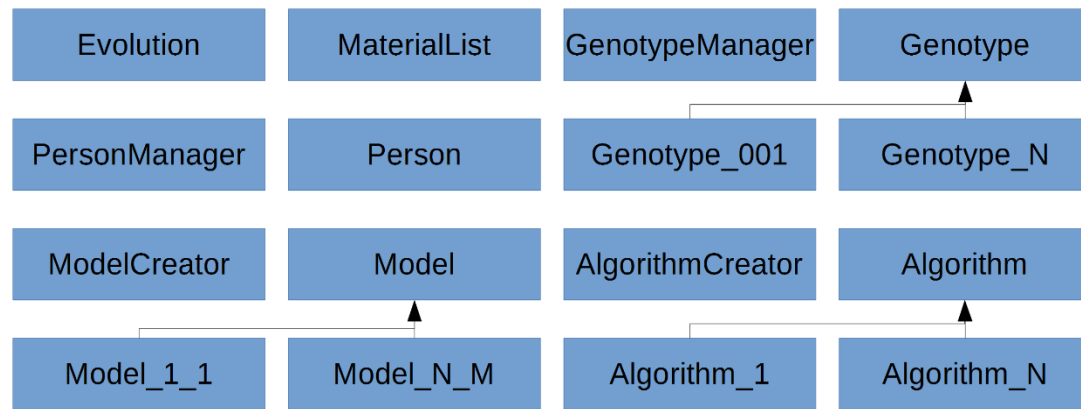
■ Параллельное соединение слоёв
■ Последовательное соединениe слоёв

Генетический алгоритм



- В качестве особи выступает вариант композитного материала
- Фенотип характеризует приспособленность особи
- Множество особей с близким генотипом образуют популяцию

Генетический алгоритм



Список основных публикаций

Публикации в изданиях, рекомендованных перечнем ВАК Минобрнауки РФ

1. **Романчук С.П.** Математическое моделирование структур и процессов взаимодействия электромагнитного излучения с Core-Shell нанообъектами / Романчук С.П., Терин Д.В., Кац А.М., Клинаев Ю.В. // Вестник Саратовского государственного технического университета. - 2011. - № 4 (60), выпуск 2. - С.98 - 102.
2. **Романчук С.П.** Математическое моделирование средств анализа и контроля сред, содержащих сферические наночастицы / Романчук С.П., Клинаев Ю.В., Терин Д.В. // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. - 2012. - № 12. - С. 92.
3. **Романчук С.П.** Исследование численных схем одновременного поиска корней полиномов с комплексными коэффициентами применительно к моделям эффективной среды / Романчук С.П., Терин Д.В., Шатурная О.С. // Вестник Саратовского государственного технического университета. - 2013. - № 4 (73). - С. 181-188. 19
4. **Романчук С.П.** Синергетика математических моделей для анализа композиционных материалов /Корчагин С.А., Терин Д.В., Романчук С.П. // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика . - 2015. - Т. 23, № 3. - С. 55-65.
5. **Романчук С.П.** Вычислительный эксперимент с моделями фрактальных нанокompозитных структур /Корчагин С.А., Клинаев Ю.В., Терин Д.В., Романчук С.П. // Вестник Саратовского государственного технического университета . - 2015. - № 3 (80). - С. 31-38.
6. **Романчук С.П.** Моделирование электродинамических свойств композитных сред /Корчагин С.А., Клинаев Ю.В., Терин Д.В., Романчук С.П. // Вестник Саратовского государственного технического университета . - 2015. - № 3 (80). - С. 46-53.
7. **Романчук С.П.** Математическое моделирование и многокритериальный анализ нелинейных свойств гетерогенных сред /Романчук С.П., Клинаев Ю.В., Терин Д.В., Корчагин С.А. // Вестник Саратовского государственного технического университета . - 2015. - № 4 (81). - С. 46-50.

Список основных публикаций

Свидетельства о регистрации

8. Свидетельство № 2014615533 Российская Федерация. Программный комплекс "Математическое моделирование и многокритериальный анализ нелинейных свойств композиционных материалов на основе моделей эффективной среды": Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / **Романчук С.П.**, Терин Д.В. ; заявитель ; патентообладатель Романчук Сергей Петрович, Терин Денис Владимирович. - № 2014612918/69; заявл. 02 апреля 2014 г.; опубл. 28.05.2014, Бюл. - 1с.
9. Свидетельство № 2015613134 Российская Федерация. Программный комплекс "Автоматизированная система для хранения и обработки данных о свойствах материалов" : свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / А.О. Пишкинас, Д.В. Терин, **С.П. Романчук**, заявитель и правообладатель Пишкинас Алексей Олегович, Терин Денис Владимирович, Романчук Сергей Петрович. - № 2015610203/69; заявл. 12.01.2015; зарегистр. 05.03.2015. - [1] с.
10. Свидетельство № 2018612039 Российская Федерация. Программный комплекс "Подбор структуры и состава нанокompозитного матричного материала со сферическими включениями" : свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / Д.В. Терин, **С.П. Романчук**, заявитель и правообладатель Терин Денис Владимирович, Романчук Сергей Петрович. - № 2017663089; заявл. 15.12.2017; зарегистр. 09.02.2018. - [1] с.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

Романчук Сергей Петрович

+7 917 316 01 88

romanchuk_sergey@bk.ru