Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 10

ТВЕРЬ 2018

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. – Вып. 10. – 708 с.

ISBN 978-5-7609-1395-1

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1395-1

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2018

© Тверской государственной
университет, 2018

УДК 535.66, 535.392

ОПИСАНИЕ РОСТА ФРАКТАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ НА ПОВЕРХНОСТИ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ МЕТОДОМ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

А.А. Бурцев, О.Я. Бутковский

*ФГБОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра
Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
600000, Владимир, ул. Горького, 87
murrkiss2009@yandex.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.187

Аннотация: В работе представлены эксперименты по кристаллизации из расплава с анализом морфологии возникающих кристаллических структур, показаны примеры возникновения сложных дендритных образований. В зависимости от энергии воздействующего излучения и длительности нагрева возникают разные виды морфологии (разные типы кристаллов). С помощью методов клеточных автоматов получены модели распределения центров кристаллизации и роста отдельного кластера под действием диффузии. Проанализирована связь между получаемой морфологией и параметрами моделей.

Ключевые слова: лазерный нагрев, модификация поверхности металлов, кристаллизация, фрактал, дендритные кристаллы, диффузионно-локальное осаждение, клеточный автомат.

1. Введение

Модификация поверхности с помощью воздействия лазерного излучения уже давно занимает важное место в науке и технологиях. Данный метод обладает высокой гибкостью, поскольку лазерным лучом можно управлять во времени и в пространстве, а также точно дозировать и регулировать энергию излучения. Использование лазеров с различной длиной волны определяет широкий круг исследуемых и модифицируемых материалов, как и различные методики для одного материала.

Целью настоящей работы являлось анализ экспериментальных данных образования фрактальных кластеров разных типов в результате кристаллизации из расплава нержавеющей стали после воздействия импульсного лазерного излучения. Данные эксперимента анализировались с помощью математических моделей на основе клеточных автоматов.

2. Техника эксперимента

Эксперименты проводились на установке с импульсным Nd:YAG лазером CLV-50 ($\lambda = 1,06$ мкм), предназначенным для точечной сварки различных металлов и сплавов толщиной до 2 мм в ручном и автоматическом режиме. Образцы нержавеющей стали (марки AISI 304 и AISI 201) толщиной 1 мм подвергались обработке лазерным импульсом с различными значениями энергии E и длительности импульсов τ , но при одинаковой плотности мощности при диаметре пятна $d = 1,6$ мм, которые

затем исследовались с помощью растровой электронной (РЭМ) и атомно-силовой микроскопии (АСМ).

На полученных образцах наблюдается испарение поверхностного слоя материала в центре области воздействия, а в периферийной части наблюдается образование фрактальных кристаллов (дендритов) [1, 2], это обусловлено пространственным распределением энергии лазерного импульса (форма Гаусса) и соответствующим распределением температуры.

На рис. 1 приведен вид кристаллов, образовавшихся на поверхности стали AISI 304 (рис. 1 а) и AISI 201 (рис. 1 б) в двух экспериментах: в первом случае параметры импульса энергия/длительность были равны 8 Дж/8 мс, во втором 10 Дж/10 мс. При этом получаются одинаковые виды кристаллов.

Рис. 1. Дендритные кристаллы в периферии области воздействия при параметрах импульса 8 Дж/8 мс (а) и 10 Дж/10 мс (б). Масштаб приведенных РЭМ-изображений – 3 мкм.

На рис. 2 приведены образцы морфологии при повышении энергии и длительности (сталь AISI 201). Экспериментальные результаты показывают, что при более длительном нагреве на периферийных областях возникает большее количество устойчивых центров кристаллизации: тем больше центров, чем больше энергия и длительность импульса при неизменной плотности мощности. При этом фрактальная структура свидетельствует о неравномерном характере распределении температуры при фазовом переходе. Образовавшиеся кристаллы отличаются по форме: на самом краю области воздействия заметны «игольчатые» образования

синтетическими мирами, поведение которых большей частью определяется простыми локально действующими правилами. В этих мирах пространство представляет собой равномерную сетку, каждая ячейка которой (клетка) содержит информацию о своем состоянии. Время – дискретно. Законы такого мира представляют собой небольшое количество правил, основные из которых описываются таблицей переходов, по которой клетка вычисляет свое новое состояние на каждом такте (минимальный отрезок времени) на основе своего состояния и состояний ее соседей. Каждая клетка может находиться в двух состояниях – живом или мертвом, т. е. пустом. На состояние любой клетки оказывают влияние состояние соседних клеток. Во времени эти состояния дискретно в соответствии с некоторыми правилами (генетическими законами), состоящими из 2 пунктов:

1) Выживание или гибель. Если живая клетка имеет меньше 2 или более 3 соседей в окрестности из 8 клеток, то в следующем поколении она умирает (моделирование реальных условий – недостатка питания или перенаселенности), в противном случае она выживает;

2) Рождение. В пустой клетке появляется живая клетка, если у исходной клетки ровно 3 соседа.

Гибель и рождение всех организмов происходит одновременно. Иногда колония клеток постепенно вымирает, однако произойти это может не сразу, а лишь после того, как сменится очень много поколений. Чаще всего исходные конфигурации либо переходят в устойчивые и перестают изменяться, либо навсегда переходят в колебательный режим. При этом, конфигурации, не обладавшие в начале игры симметрией, обнаруживают тенденцию к переходу в симметричные формы [4]. Обретенные свойства симметрии в процессе эволюции не утрачиваются, а симметрия конфигурации может лишь обогащаться. Рассматриваемая задача была реализована в среде MATLAB.

По представленному выше алгоритму игры «Жизнь» были произведены расчеты конфигураций кластеров. Расчетная область выбиралась размером 100·100 отн.ед., а заселенные клетки заполнялись случайным образом. Различные конфигурации системы кластеров возможно получить, варьируя параметры заселенности (percentage), которая играет роль расплава, оставшегося в зоне воздействия после нагрева импульсом лазерного излучения, и представлена в процентном соотношении от расчетной области, и числа эпох (epoch), которые можно сопоставить времени остывания и кристаллизации. Данное описание соответствует модели роста дендрита из переохлажденного расплава (безразделительное затвердевание с полным захватом примеси) [5].

Как видно из приведенных результатов моделирования с

увеличением заселенности увеличивается количество образовавшихся простых кластеров (см. рис. 3-5). Кроме того, при увеличении количества эпох имеет место быть картина образования устойчивых замкнутых структур, состоящих из большего числа частиц (устойчивые центры кристаллизации).

Рис. 3. Результаты моделирования для параметров: percentage = 20 , epochs = 10 .

Рис. 4. Результаты моделирования для параметров percentage = 30 , epochs = 100 : а – вид области в эпоху № 6, б – вид области в эпоху № 100.

Для роста отдельного кристалла использовалась компьютерная модель агрегации дендритов, ограниченной диффузией при варьируемой начальной концентрации частиц (DLA), в рамках двумерного клеточного автомата с использованием окрестности Мура. Рассматриваемая модель является логическим продолжением модели Виттена-Сандера, в которой невозможно варьировать концентрацию исходных частиц, и фрактальная

размерность полученных кластеров всегда принимает значение 1,71, а также модели Чарлза Беннетта, в которой концентрация частиц является переменной величиной, но используется окрестность Марголуса [6]. Ограниченное диффузией агрегирование возникает, когда случайно перемещающиеся частицы налипают на начальный зародыш, представленный фиксированным объектом, и постепенно наращивают его.

Рис. 5. Результаты моделирования для параметров percentage = 10, epochs = 10.

Рис. 6. Модельные изображения фрактальных структур кластера при величине вероятности прилипания: а – 0,01, б – 0,05, в – 0,5, г – 0,98.

В противоположность уравнению диффузии моделирование

клеточными автоматами не упускает такие важные физические детали, как непроницаемость тел и конечная скорость распространения информации. Достоинством такого моделирования является отсутствие необходимости применения дифференциальных уравнений, которые не всегда могут быть решены с достаточной точностью. Недостатком дифференциальных уравнений также является то, что они могут описывать лишь изменение полной концентрации частиц, в то время как моделирование движения отдельных частиц с их помощью невозможно. При использовании клеточных автоматов такие затруднения не встречаются.

Структура смоделированных фрактальных кластеров существенно зависит от величины вероятности прилипания (см. рис. 6). Чем выше вероятность прилипания, тем более разветвленной образуется фрактальная структура, что подтверждается величинами фрактальной размерности [2, 7].

Оба метода моделирования могут применяться для анализа и моделирования задачи образования структур из расплава (раствора) в случае поверхностной кристаллизации. Игра «Жизнь» достаточно хорошо описывает зарождение и распределение устойчивых центров кристаллизации в рассматриваемой области. Метод диффузионной агрегации учитывает тонкости реальных физических процессов и является перспективным для анализа формирования отдельного кристалла. Также данный метод и его модификации возможно использовать при рассмотрении процесса преобразования дендрита в сферолит или кристалла из капли расплава.

4. Заключение

В работе были рассмотрены эксперименты по получению сложных кристаллических структур из расплава стали под действием лазерного излучения. Указано, что при различных условиях (время нагрева) возникает различная морфология (разные типы кристаллов – от стохастических дендритов до сферолитов). При анализе результатов математического моделирования обнаружено качественное совпадение результатов моделей с экспериментальными данными. В частности, показано, что для распределения устойчивых центров кристаллизации можно использовать классический клеточный автомат Дж. Конвея «Жизнь». Для роста кристалла под действием термодиффузии эффективно применяется метод диффузионного осаждения.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-07-00943-а) и в рамках базовой части государственного задания ВлГУ (проект № 3.7530.2018/8.9 БЧ).

Библиографический список:

1. **Антонов, Д.Н.** Распределение дендритов, получаемых на поверхности стали в результате воздействия лазерного излучения / Д.Н. Антонов, А.А. Бурцев, О.Я. Бутковский // Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86. – Вып. 1. – С. 110-115.
2. **Бурцев, А.А.** Исследование процесса образования фрактального кристалла. / А.А. Бурцев, О.Я. Бутковский, А.В. Сагитова и др. // XII Всероссийская конференция молодых ученых «Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика», Саратов, 4-6 сентября 2018 г.: тезисы докладов. – Саратов: Изд-во «Техно-Декор», 2017. – С. 22-24.
3. **Gardner, M.** The fantastical combinations of John Conway's new solitaire game «Life» / M. Gardner // Scientific American. – 1970. – V. 223. – № 4. – P. 120-123.
4. **Alstrøm, P.** Self-organized criticality in the «game of Life» / P. Alstrøm, J. Leão // Physical Review E. – 1994. – V. 49. – I. 4. – P. R2507-R2508.
5. **Харанжевский, Е.В.** Физика лазеров, лазерные технологии и методы математического моделирования лазерного воздействия на вещество / Е.В. Харанжевский, М.Д. Кривилёв, П.К. Галенко. – Ижевск: Изд-во «Удмуртский университет», 2011. – 187 с.
6. **Безносюк, С.А.** Компьютерное моделирование самоорганизации фрактальных кластерных нанодендритов / С.А. Безносюк, Я.В. Лерх, Т.М. Жуковская // Ползуновский вестник. – 2005. – № 4-1. – С. 143-151.
7. **Witten, T.A.** Diffusion limited aggregation / T.A. Witten, L.M. Sander // Physical Review B. – 1983. – V. 27. – I. 9. – P. 5686-5697.

References:

1. **Antonov, D.N.** Raspredelenie dendritov, poluchaemyh na poverhnosti stali v rezul'tate vozdejstviya lazernogo izlucheniya / D.N. Antonov, A.A. Burcev, O.Ya. Butkovskii // Zhurnal tekhnicheskoy fiziki. – 2016. – V. 86. – I. 1. – P. 110-115.
2. **Burcev, A.A.** Issledovanie processa obrazovaniya fraktal'nogo kristalla. / A.A. Burcev, O.Ya. Butkovskii, A.V. Sagitova i dr. // XII Vserossiyskaya konferenciya molodyh uchenykh «Nanoelektronika, nanofotonika i nelinejnaya fizika», Saratov, 4-6 sentyabrya 2018 g.: tezisy dokladov. – Saratov: Izd-vo «Tekhno-Dekor», 2017. – P. 22-24.
3. **Gardner, M.** The fantastical combinations of John Conway's new solitaire game «Life» / M. Gardner // Scientific American. – 1970. – V. 223. – № 4. – P. 120-123.
4. **Alstrøm, P.** Self-organized criticality in the «game of Life» / P. Alstrøm, J. Leão // Physical Review E. – 1994. – V. 49. – I. 4. – P. R2507-R2508.
5. **Haranzhevskij, E.V.** Fizika lazerov, lazernye tekhnologii i metody matematicheskogo modelirovaniya lazernogo vozdejstviya na veshchestvo / E.V. Haranzhevskij, M.D. Krivilyov, P.K. Galenko. – Izhevsk: Izd-vo «Udmurtskij universitet», 2011. – 187 p.
6. **Beznosyuk, S.A.** Komp'yuternoe modelirovanie samoorganizacii fraktal'nyh klasternykh nanodendritov / S.A. Beznosyuk, Ya.V. Lerh, T.M. Zhukovskaya // Polzunovskij vestnik. – 2005. – no. 4-1. – P. 143-151.
7. **Witten, T.A.** Diffusion limited aggregation / T.A. Witten, L.M. Sander // Physical Review B. – 1983. – V. 27. – I. 9. – P. 5686-5697.

**MODELING FRACTAL CRYSTALS FORMING ON THE SURFACE OF STAINLESS
STEEL BY CELLULAR AUTOMATA**

A.A. Burtsev, O.Ya. Butkovskii

Vladimir State University named after Alexander and Nikolay Stoletovs

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.187

Abstract: In this paper experiments on crystallization from melts and results of analysis of the morphology of formed crystal structures are discussed. Some examples of forming complex dendritic formations are shown. Different types of the crystal morphology arise in dependence on the duration of heating and the energy of the acting radiation. Models of the distribution of crystallization centers and the growth of an individual cluster under the diffusion process were modelled by the methods of cellular automata. The relationship between the morphology and the model parameters is analyzed.

Keywords: *laser heating, metal surface modification, crystallization, fractal, dendritic crystals, diffusion-limited aggregation, cellular automata.*

Бурцев Антон Андреевич – аспирант кафедры физики и прикладной математики Института прикладной математики, физики и информатики ФГБОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»

Бутковский Олег Ярославович – д.ф.-м.н., профессор кафедры физики и прикладной математики Института прикладной математики, физики и информатики ФГБОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»

Anton A. Burtsev – postgraduate student, Department of Physics and Applied Mathematics, Vladimir State University named after Alexander and Nikolay Stoletovs

Oleg Ya. Butkovskii – Dr. Sc., Professor, Department of Physics and Applied Mathematics, Vladimir State University named after Alexander and Nikolay Stoletovs