

УДК: 619:615.9:661.183**ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ТРИВИМІРНОЇ КОМП'ЮТЕРНОЇ ВІЗУАЛІЗАЦІЇ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ НАНОСТРУКТУР**

Маніта І.Ю., ст. викл.

Болтянська Н.І., к.т.н.,

Таврійський державний агротехнологічний університет імені Дмитра Моторного, м. Мелітополь, Україна

Успіхи у вивченні будови речовини розкрили перед дослідниками новий світ – світ найдрібніших частинок. В останні десятиліття в науковій лексиці з'являється ряд нових слів з префіксом «нано»: наноструктура, нанотехнологія, наноматеріал, і т. п. У більшості випадків нові назви дано давно відомим об'єктам і явищам. Але є об'єкти, яких практично не було в арсеналі дослідників і без яких сьогодні вже неможливо уявити сучасний розвиток. Такі об'єкти називають наносвітом, на відміну від світу великих тіл, наносвіт недоступний безпосередньому спостереженню, і для вивчення його потрібні особливі, тонкі методи [1-3].

Однак справжній перехід до використання наночасток стався не раніше початку двадцятого століття. Це пов'язано з тим, що вчені ще не могли спостерігати частинки такого розміру, так як вони лежать нижче меж можливості розв'язання світлового мікроскопа. Вперше об'єкти наносвіту виявили в 1931 році німецькі фізики Макс Кнолл і Ернст Руска – творці першого електронного мікроскопа. Тільки після цього людство змогло приступити до вивчення об'єктів мікронних і нанометрових розмірів [4,5].

Після відкриття наносвіту вчені встановили, що молекули в природі можуть дуже сильно відрізнятися один від одного, що і забезпечує таке розмаїття матерії в світі. Прості молекули складаються з двох-трьох атомів, однак, існують і такі, які мають в своєму складі тисячі атомів, з'єднаних один з одним в складній послідовності (наприклад, молекула каучуку складається приблизно з 75 тисяч атомів вуглецю і 100 000 атомів водню). Форма молекул може бути так само найрізноманітнішою: одні з них представляють собою довгі нитки, інші – закручені спіралі, а треті згорнуті в клубочок, що нагадує футбольний м'яч [5,6]. Існує багато різних способів класифікації нанооб'єктів. В.В. Єр'омін класифікує нанооб'єкти підрозділяючи на два великі класи – суцільні («зовнішні») і пористі («внутрішні») (рис. 1.) [7].

Одні з найбільш активно досліджуваних структур – нанокластери. Вони складаються з атомів металів або відносно простих молекул. Серед інших нанооб'єктів найбільш повно вивчені нанотрубки. Так називають протяжні циліндричні структури, що мають розміри кількох нанометрів.

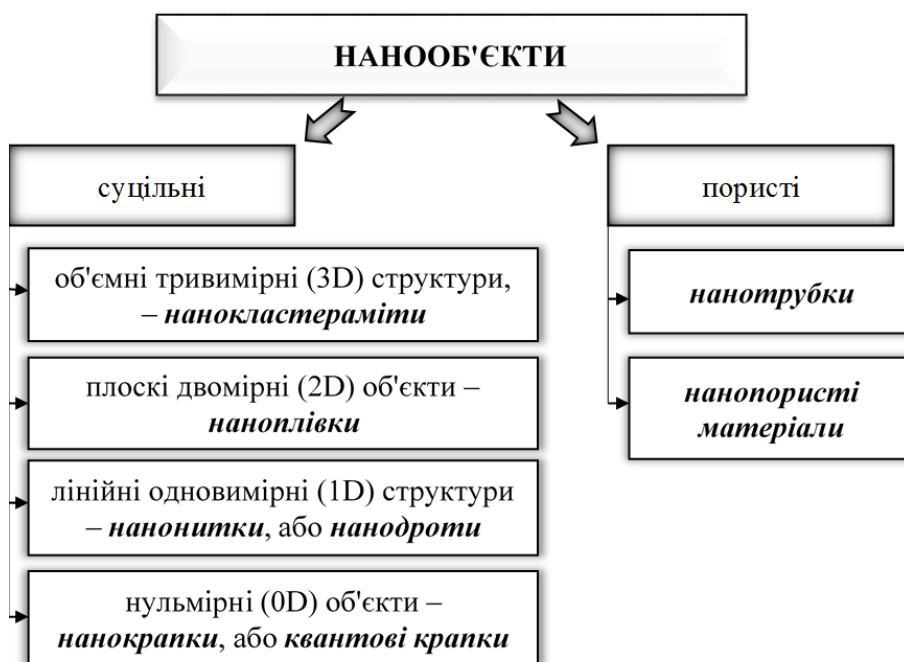


Рис. 1 Класифікація нанооб'єктів

Прикладом одновимірних нанооб'єктів служать нанонитки, або нанодроти – протяжні наноструктури з перетином менше 10 нм. Прикладом двовимірних нанооб'єктів служать наноплівки. Завдяки дуже малій товщині (всього в одну або дві молекули) вони пропускають світло і непомітні для ока. Якщо в наночастинок спостерігається яскраво виражене упорядковане розташування атомів (або іонів), то такі наночастишки називають нанокристалітами. Поодинокі нанокристали напівпровідників розміром до 10-50 нм називають квантовими точками. Їх вважають нульмірними нанооб'єктами. Такі нанооб'єкти містять від ста до ста тисяч атомів. Як правило, наночастишки мають сфероїдальну форму [8,9].

Складність проведення фізичного експерименту з нанорозмірними об'єктами визначається наступними факторами:

- Колосальна різниця в масштабах між об'єктами звичного світу і об'єктами атомарного масштабу робить надзвичайно скрутними експериментальні дослідження в області нанооб'єктів. Інформація, що отримується в експериментах з атомарним дозволом має все більш непрямий характер, а самі експерименти часто не дозволяють отримати достатню кількість інформації про складні нанорозмірні системи, що складаються з великої кількості різних частин, що взаємодіють один з одним складним чином.

- Складність з тимчасовим дозволом експериментів. Процеси, що відбуваються на рівні нанооб'єктів, зазвичай мають характерні часи від фемтосекунд до наносекунд. Детальне стеження за процесами, що протікають за такі часи, зазвичай неможливо в силу того, що експериментальні пристрої так само складаються з атомів і молекул, і їх тимчасовий дозвіл обмежено тими ж тимчасовими масштабами.

- Інтерпретація експериментальних результатів. Наноструктури відносяться до «проміжного» діапазону розмірів, на якому визначальне значення має атомарна структура об'єктів, але самі об'єкти вже складаються з великої кількості атомів. Цей фактор часто не дозволяє добре зрозуміти поведінку наноструктур, ускладнюючи побудова простих феноменологічних моделей.

Як зазначається, коли постановка прямого експерименту або розробка простої моделі скрутна або неможлива (астрофізика, дослідження процесів в надрах планет при надвисоких температурах і тисках), незамінним методом дослідження і проектування є комп'ютерне моделювання. При цьому замість інформативних високорівневих феноменологічних моделей, розроблених під конкретну задачу, використовуються більш універсальні принципи (наприклад, фундаментальні закони квантової механіки). За рахунок цього складність завдання дуже зростає, проте, перевага обчислювальної потужності комп'ютерів над можливостями людини часто дозволяє вирішити завдання, принципово нерозв'язні на аналітичному рівні.

Детальне моделювання атомарної структури і еволюції нанооб'єктів дозволяє досліднику простежити практично за всіма аспектами поведінки модельної системи з будь-яким потрібним йому просторовим і тимчасовим дозволом (за умови наявності достатніх обчислювальних ресурсів) – від макроскопічних параметрів на кшталт загальної форми частинки і до локальних характеристик окремих атомів. При цьому той факт, що моделювання ґрунтується на базових фізичних законах, дозволяє виявити нові особливості поведінки модельної системи, які, по самій побудові, в високорівневих теоріях повинні вводитися на основі вже наявних знань. В цьому відношенні моделювання вельми схоже з реальним фізичним експериментом, і в багатьох випадках дослідник, який проводить моделювання на комп'ютері, відчуває себе подібно експериментатору, що працює зі складним вимірювальним приладом. Крім того, комп'ютерне моделювання виявляється незамінним інструментом при вирішенні «інженерних» завдань, метою яких є оптимізація тих чи інших наноструктур і наноматеріалів під заданий додаток. При цьому велику вигоду можна отримати за допомогою «віртуального прототипування», розраховуючи характеристики об'єктів-кандидатів без необхідності їх реального синтезу, що часом є занадто дорогим завданням, щоб відбір можна було зробити на підставі реальних вимірів. Таким чином, найзручнішим способом зрозуміти, що відбувається на рівнях нанорозмірних об'єктів, вважається наукова і науково-популярна візуалізація процесів, що відбуваються на цих рівнях. Завдяки динамічній, тривимірній і інтерактивній візуалізації стає легше працювати з інформацією, одержуваною про об'єкт наносвіту. Моделювання таких складних об'єктів необхідно вченим для повного дослідження властивостей таких об'єктів.

Саме тому дуже ефективним способом дослідження, моделювання і демонстрації процесів в наносвіті є тривимірна комп'ютерна візуалізація. Іншими словами, це створення віртуальних наносвітів, які в точності повторюють всі відомі людині фізичні процеси, але в штучному комп'ютерному середовищі. Об'єкти наносвіту ідеальні для моделювання та їх візуалізації за допомогою графічних програм. Графічна інтерпретація наноструктур складається з ряду операцій, які можуть проводитися в двох незалежних напрямках. Перше – це художній напрям, що включає обробку фотографій в середовищі двовимірного реєстрового або векторного графічного редакторів для візуалізації наносвіту та подання художніх композицій на його основі.

Другим напрямком є тонке технічне дослідження по створенню тривимірних образів на основі ряду послідовних двовимірних зображень наноструктур. Де в результаті формується твердотільний образ елементів, що входять до складу наноструктур, в середовищі стандартного графічного тривимірного редактора, за допомогою якого здійснюється процес моделювання. Тривимірне представлення об'єктів розширює можливості матеріалознавчого аналізу. Для підвищення достовірності результатів проводиться зіставлення отриманих тривимірних образів з інформацією про ті самі наноструктури, отримані іншими, наприклад, контактними методами.

Моделювання дозволяє в найдрібніших деталях передбачити і простежити за атомарною структурою і динамікою наночастинок і наноматеріалів, досліджувати процеси хімічного каталізу на нанорівні, вивчати електронну структуру і транспортні властивості молекулярних електронних пристроїв. Фактично, на сьогоднішній день, саме нанотехнології і суміжні області є основними споживачами машинного часу у всіх світових суперкомп'ютерних центрах широкої спеціалізації.

Доступність обчислювальної техніки петафлопсного масштабу поступово дозволяє дослідникам переходити від моделювання «по аналогії» на прикладах простих модельних систем до цілком реалістичних розрахунків на розмірних і часових масштабах, які дійсно мають значення при роботі з моделями нанооб'єктів. З іншого боку, велика важливість методів комп'ютерного моделювання стимулює надзвичайно активну розробку нових паралельних обчислювальних алгоритмів, необхідних для використання таких великих потужностей.

За останні 15 років програмне забезпечення помітно еволюціонувало в плані потужності і простоти звернення, графічний інтерфейс став наближений до користувача. Якщо раніше чисельне моделювання було неможливе без залучення професійних обчислювачів і програмістів, то пакети, які з'явилися зараз дозволяють вченим самостійно будувати комп'ютерні моделі. До цього варто додати створення потужних засобів візуалізації. Сучасна комп'ютерна графіка і анімація дозволя-

ють розрахувати і намалювати на екрані монітора сцени з життя наносвіту. Застосування методів комп'ютерного моделювання наночастинок зарекомендувало себе як найважливіший дослідний інструмент наносвіту. Комп'ютерні моделі нанооб'єктів простіше і зручніше досліджувати, коли реальні експерименти утруднені через фізичних перешкод.

Список використаних джерел

1. Болтянська Н.І. Підвищення довговічності вузлів тертя мобільної сільськогосподарської техніки застосуванням нанотехнологій. Вісник ХНТУСГ. 2012. Вип.128. С. 132-137.

2. Болтянський О.В. Використання нанотехнологій при безрозбірному сервісі автотракторної техніки. Праці ТДАТУ. 2011. Вип.11. Т.2. С. 97-102.

3. Komar A. S. Processing of poultry manure for fertilization by granulation. Abstracts of the 5th International Scientific and Practical Conference "Innovative Technologies for Growing, Storage and Processing of Horticulture and Crop Production". 2019. Uman. 18-20.

4. Boltyanska N. I. Mechanization of technological processes in animal husbandry: textbook. manual. Melitopol: Color Print. 2012. 720 p.

5. Boltyanskaya N.I. The dependence of the competitiveness of the pig industry from it-chnology parameters of productivity of the animals. Bulletin of Kharkov national University-University of agriculture after Petro Vasilenko. Kharkov. 2017. Vol. 18. 81-89.

6. Boltyanskaya N.I. The system of factors of effective application resurser-Gauci technologies in dairy cattle in the enterprise. Scientific Bulletin Tauride state agrotechnological University. Electronic scientific specialized edition. Melitopol. 2016. Vol. 6. 55-64.

7. Skliar A., Boltyanskyi B., Boltyanska N., Research of the cereal materials micronizer for fodder components preparation in animal husbandry. Modern Development Paths of Agricultural Production. Springer Nature Switzerland AG. 2019. P. 249-258.

8. Zabolotko O.O. Performance indicators of farm equipment. Proceedings of the IV International Scientific and Technical Conference «Kramar Readings» 2017. P. 155–158.

9. Komar A. S. Development of the design of a press-granulator for the processing of bird manure. Coll. scientific-works of Intern. Research Practice Conf. "Topical issues of development of agrarian science in Ukraine". Nizhin, 2019. Pp. 84–91.

10. Boltianska N., Sklar R., Podashevskaya H. Directions of automation of technological processes in the agricultural complex of Ukraine. Сб. научн. ст. МИНСК: БГАТУ, 2020. С. 519-522.