

Анотація

На науково-дослідну практику студента 2 курсу магістерського рівня,
групи ОФ-71мп, ФМФ, НТУУ «КПІ ім. І.Сікорського»

Заводовського Михайла Юрійовича

На тему: «**Моделювання динаміки розпаду вістря вольфрамівих голок**»

Керівник професор Горшков В.М.

У роботі представлена комп'ютерна модель розпаду вістря вольфрамівих голок на краплі. Для реалізації програми розглянуто дифузійні процеси. Розроблена тривимірна модель дифузійного росту наночастинок, внутрішня будова яких відповідає ОЦК гратці. Врахована динаміка поверхневих частинок кластера, які з різним ступенем ймовірності можуть змінювати своє положення при переході в сусідні вакансії решітки або відриватися від поверхні.

Отримані результати демонструють базові принципи контролю форми зростаючих наночастинок з початкового ядра малих розмірів. Показано, що для однієї і тієї ж кристалічної решітки можна отримувати наночастки різних форм; утворення навіть правильних багатогранників відбувається в нерівноважному режимі; еволюція форми кластера може бути контрольована за допомогою зміни температури системи і концентрації вільних атомів в середовищі, що оточує зростаючий кластер. Також отримана залежність розпаду вольфрамівих голок на краплі від їх довжини. Так, наприклад, для холодного режиму розпад відбувся лише для тих голок, кут вістря яких є максимально гострим.

Summary

In scientific research practice of a student of 2nd course of the master's degree,

group OF-71mp, FMF, NTUU "KPI named by I. Sikorsky"

Zavodovsky Mikhail Yuryevich

On the theme: "**Modeling of the dynamics of decay of the tip of tungsten needles**"

The leader is professor Gorshkov V.M.

The paper presents a computer model of the decay of the tip of the tungsten needles in a drop. To realize the program, diffusion processes are considered. The three-dimensional model of diffusion growth of nanoparticles, the internal structure of which corresponds to crystalline lattices of different types, has been developed. The dynamics of the surface particles of the cluster, which with varying degrees of probability can change its position in the transition to adjacent lattice vacancies or to break away from the surface, is taken into account.

The results obtained demonstrate the basic principles of controlling the shape of growing nanoparticles from the initial nucleus of small size. It is shown that for the same crystal lattice it is possible to obtain nanoparticles of different forms; the formation of even regular polyhedra occurs in a nonequilibrium regime; the evolution of the shape of the cluster can be controlled by changing the temperature of the system and the concentration of free atoms in an environment surrounding the growing cluster. Also, the dependence of the disintegration of tungsten needles on the drop from their length is obtained. So, for example, for cold mode, decay occurred only for those needles, whose corner of the tip is as sharp as possible.