

ГЕНЕРАЦИЯ СПИРАЛЬНЫХ И ДЕФЕКТНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО- ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

студент гр. 103711 Григоренко Т.И.

Научный руководитель – к. физ.-мат. наук, доцент Баркалин В.В.

Белорусский национальный технический университет
Минск, Республика Беларусь

Углеродные нанотрубки (УНТ) - своеобразные цилиндрические молекулы диаметром от 0,5 нм и длиной до нескольких мкм. Нанотрубки оказались необыкновенно прочными на растяжение и на изгиб: модуль Юнга в пределах 1,28 - 1,8 ТПа, предел прочности 45 ГПа. Под действием больших механических напряжений нанотрубки не рвутся, а просто перестраивают свою структуру.

Существует два основных типа нанотрубок: одностенные нанотрубки (ОНТ), у которых одна оболочка из атомов углерода, и многостенные нанотрубки (МНТ), состоящие из множества сгруппированных углеродных трубок. Структура ОНТ генерируется сворачиванием графена в цилиндр с соединением его сторон без шва.

Взаимная ориентация гексагональной сетки графена и продольной оси нанотрубки определяет важную структурную характеристику – хиральность, которая иллюстрируется на рис. 1, где показана часть графеновой плоскости и приведены возможные направления ее «сворачивания» при образовании ОНТ.

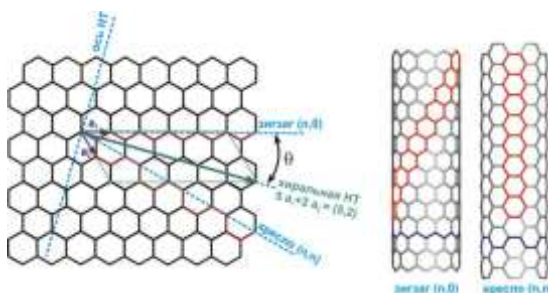


Рис.1 Схема «сворачивания» графитовой плоскости для нанотрубок различных типов

Хиральность трубки обозначается символами (m,n) , указывающими координаты шестиугольника, который в результате «сворачивания» графеновой плоскости должен совпасть с шестиугольником, находящимся в начале координат. Индексы хиральности (m,n) однозначным образом определяют диаметр ОНТ, по экспериментальным данным, варьирующийся от $\sim 0,7$ нм до $\sim 3-4$ нм. Длина однослойной нанотрубки может достигать 4 см.

Спиралеобразно закрученные углеродные нанотрубки (СНТ) (рис.2) являются принципиально новым наноматериалом, обладающим рядом интересных особенностей. Потенциально СНТ могут быть использованы при создании тактильных и магнитных сенсоров нового поколения, а также конструкционного пенопласта, предназначенного для амортизации и диссипации энергии.

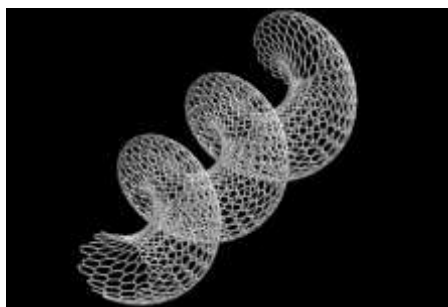


Рис. 2. Генерация СНТ

Для получения СНТ необходимо повернуть ОНТ вокруг оси z по двум направлениям:

$$z = z'$$

$$x = x' + r \cdot \sin\left(\frac{2\pi k(z - z_0)}{h}\right)$$

$$y = y' + r \cdot \cos\left(\frac{2\pi k(z - z_0)}{h}\right)$$

где x', y', z' – координаты атомов ОНТ, r – радиус ОНТ, k – число скручиваний ОНТ, h – длина ОНТ, z_0 – минимальное значение координаты по оси z .

В результате оптимизации методом молекулярной динамики СНТ выпрямляется, поэтому необходимо стабилизировать её структуру путём внедрения локальных дефектов. В качестве дефектов используются дефекты 5-7-7-5, 5-8-5 (рисунок 3, 4). Их можно сформировать в бездефектном графеновом листе путем удаления нескольких атомов слоя и перестройкой межатомных связей. Топологические дефекты графеновых слоев оказывают сильное влияние на электронные, механические и упругие свойства углеродных наноструктур.

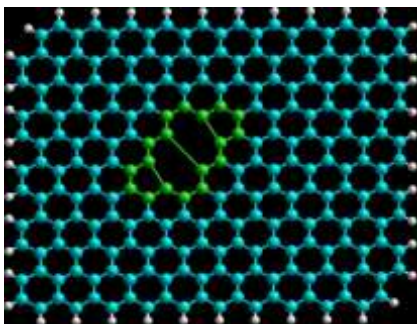


Рис.3. Генерация топологического дефекта 5-7-7-5

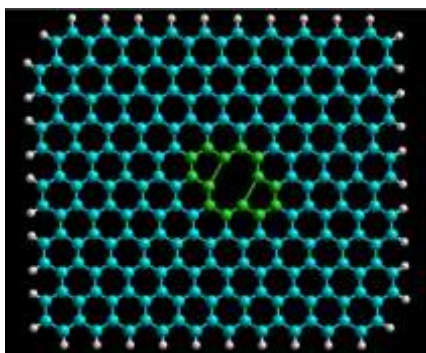


Рис. 4. Генерация топологического дефекта 5-8-5

Второй тип дефектов - линейный - вызывает деформацию графенового слоя вдоль линии. Представителем этого класса дефектов является комбинированный дефект 5-7 (рис. 5). Дефекты линейного типа невозможно вставить в графеновый слой при помощи локальной перестройки связей. При наличии в графеновом листе такого дефекта искаженной оказывается структура всего слоя (рис. 6).

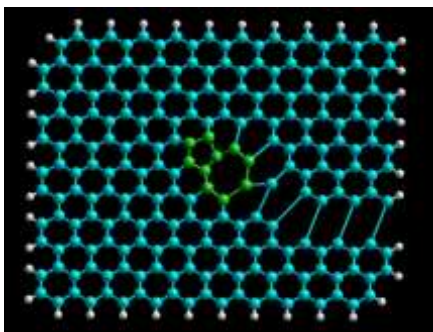


Рис. 5. Генерация топологического дефекта 5-7

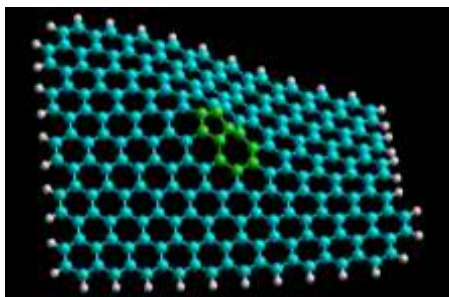


Рис. 6. Дефект 5-7 после оптимизации структуры

Наиболее изученным из комбинированных дефектов является дефект 5-7. При помощи такого дефекта можно осуществлять соединение углеродных нанотрубок различной хиральности и диаметра. Подобные соединения представляют большой интерес в качестве гетеропереходов в наноэлектронике.

Таким образом, в результате моделирования структуры графеновых слоев, содержащих топологические дефекты, установлено, что

топологические дефекты слоя могут быть точечными или линейными. Точечные дефекты деформируют только локальную область слоя и могут быть добавлены в уже сформировавшиеся графеновые слои. Линейные топологические дефекты могут формироваться только в процессе роста слоя.

УДК 53.4

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ПИГМЕНТНОЙ СЕТИ КАК ДЕРМАТОСКОПИЧЕСКОГО КРИТЕРИЯ ДИАГНОСТИКИ РАКА КОЖИ

студенты гр. 107410 Лозовский В.Э., гр.10371 Малахов Т.И.
Научный руководитель—канд. физ.-мат. наук, доцент Баркалин В.В.
Белорусский национальный технический университет
Минск, Республика Беларусь

На консенсусной конференции по дерматоскопии в 2001 г. было выделено три основных признака, отличающих меланому от других доброкачественных пигментных образований кожи: 1) асимметрия пигментации и строения; 2) наличие бело-голубых структур; 3) атипичная пигментная сеть. Эти признаки достаточно просто могут быть оценены методами анализа изображений [1].

В предыдущей работе [2] был описан метод автоматического анализа изображения по первым двум признакам.

Первым этапом для выявления наличия пигментной сети является выделение краёв новообразования. Для этого исходное изображение (рис.1, *a*) подвергается фильтрации с использованием лапласиана гауссиана [3], согласно выражению (1). Дальнейший анализ отклика фильтра (рис.1, *б*) производится с целью отделения незамкнутых областей, которыми могут являться шумы либо незамкнутые граничные участки ячеек сети вблизи периферии пигментной сети новообразования.

$$h(n_1, n_2) = \frac{(n_1^2 + n_2^2 - 2\sigma^2) \cdot h_g(n_1, n_2)}{2\pi \cdot \sigma^6 \cdot \Sigma_{n_1} \cdot \Sigma_{n_2} h_g(n_1, n_2)}, \quad (1)$$