

УДК 539.26; 539.27; 519.6

Численное моделирование дифрактометрии наноструктурного состава углеродных материалов

А.Б. Кукушкин^{1,2}, В.С. Неверов¹, В.В. Волошинов³

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

² Московский физико-технический институт (государственный университет)

³ Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича Российской академии наук

Представлен краткий обзор работ по теоретическому исследованию потенциальных возможностей диагностики наноматериалов на основе углеродных графено-подобных (sp^2) структур. Проведенное численное моделирование использует современные методы распределенных вычислений и включает разработку веб-сервисов для удаленного доступа к сервису обработки экспериментальных данных рентгеновской и нейтронной дифрактометрии широкого круга таких материалов. Обзор включает следующие результаты:

- восстановление (по данным рентгеновской дифракции) топологического состава углеродных наноструктур в диапазоне размеров $\sim 0.1-10$ нм в углеводородных пленках из токамака Т-10 путем решения обратной задачи методом оптимизационной идентификации [1];

- создание прототипа веб-сервиса для решения вышеуказанной оптимизационной задачи, который основан на реализации разработанного алгоритма в распределенной системе RESTful-веб-сервисов на основе программного инструментария Everest, everest.distcomp.org (ранее - MathCloud) [2];

- разработка и верификация расчетной модели, приближенно описывающей вклад графено-подобной структуры стенки нанобъектов в кривые рентгеновского рассеяния и значительно упрощающей вычисление рентгеновских и нейтронных дифрактограмм широкого класса углеродных наноструктур [3];

- исследование влияния кластеризации молекул на интерпретацию дифрактограмм углеводородных пленок из токамака Т-10 с помощью суперкомпьютерного моделирования упаковки углеродных наноструктур и углеводородных молекул в аморфном материале [4];

- разработка метода восстановления (по нейтронным или рентгеновским дифрактограммам) структурных свойств аморфного sp^2 углерода в приложении к аморфному фуллерену и продуктам его вакуумного отжига; метод основан на решении оптимизационной задачи в диапазоне модуля вектора рассеяния от нескольких единиц до нескольких десятков обратных нанометров [5].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 15-07-07901-а и № 13-07-00987-а.

Литература

1. *Kukushkin A.B., Neverov V.S., Marusov N.L., Semenov I.B., Kolbasov B.N., Voloshinov V.V., Afanasiev A.P., Tarasov A.S., Stankevich V.G., Svechnikov N.Yu., Veligzhanin A.A., Zubavichus Ya.V., and Chernozatonskii L.A.* Few-nanometer-wide carbon toroids in the hydrocarbon films deposited in tokamak T-10 // *Chem. Phys. Lett.* – 2011. – V. 506. – P. 265-268.
2. *Волошинов В.В., Неверов В.С.* Обработка данных рентгеновской дифрактометрии наноматериалов в распределенной среде REST-сервисов // *Информационные технологии и вычислительные системы* – 2011. – № 4. – С. 10-20.
3. *Chernozatonskii L.A., Neverov V.S., Kukushkin A.B.* A calculation model for X-ray diffraction by curved-graphene nanoparticles // *Phys. B: Condens. Matter* – 2012. – V. 407. – P. 3467-3471.
4. *Neverov V.S., Voloshinov V.V., Kukushkin A.B., Tarasov A.S.* Influence of Molecular Clustering on the Interpretation of Diffractograms of Hydrocarbon Films from Tokamak T-10 // *Physics of Atomic Nuclei.* – 2015. – V. 78, N 10. – P. 38–45.
5. *Neverov V.S., Borisova P.A., Kukushkin A.B., Voloshinov V.V.* A method for diffraction-based identification of amorphous sp² carbon materials // *Journal of Non-Crystalline Solids* – 2015. – V. 427. – P. 166–174.