

УДК 62-405.8

**А.И. Бахмацкая, Н.К. Плуготаренко****ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ  
НА РОСТ ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР НАНОКОМПОЗИТНЫХ  
МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

*Цель данного исследования в уточнении модели роста фрактальных структур в тонких пленках нанокompозитных материалов, полученных цитратным золь-гель методом и в определении взаимосвязи значений технологических параметров и образования перколяционных кластеров фрактальной природы. Процессы эволюции и формирования кластерных структур цитратным золь-гель методом рассматриваются как процессы, зависящие от локальных характеристик фракталов. Объект исследования – тонкие пленки на основе полиэтиленгликоля и оксидов меди. Конкретизированы механизмы, происходящие в процессе термообработки и формирования пленок исследуемых материалов, и представлены в виде четырех кинетических стадий. В процессе исследования использовались алгоритмы и методы фрактального анализа, а также механизмы образования кластерных структур: алгоритм «Дракона Хартера–Хатвея», модель Эдена, модель стохастического фрактала, алгоритм Хошена-Копельмана, механизм «кластер-частица», «кластер-кластерный» механизм, модель случайного блуждания, теория перколяции. В программной среде MatLab проведен компьютерный эксперимент по расчету порога перколяции и фрактальной размерности, а также показано влияние изменения условий роста на строение медьсодержащих структур. Результаты исследования позволили оценить влияние изменения условий роста на морфологию и свойства нанокompозитных структур, а также выявить технологические параметры формирования образцов, потенциально обладающих высокой газочувствительностью. Выявлено, что при одном и том же количестве частиц фрактальная размерность исследуемых структур меньше, чем у структур полученных моделированием без учета фактора pH. Определен порог перколяции при образовании фрактальных кластеров, который не зависит от pH среды и общего количества частиц, а зависит только от отношения общего количества частиц к площади заполняемой поверхности.*

*Газочувствительные материалы; фрактальная размерность; перколяционный кластер; золь-гель метод*

**A.I. Bahmatskaya, N.K. Plugotarenko****EFFECT STUDY OF THE TECHNOLOGICAL CONDITIONS ON THE  
GROWTH OF NANOCOMPOSITE MATERIALS FRACTAL STRUCTURES:  
MATHEMATICAL SIMULATION**

*The purpose of this research is a refinement of the model of growth of fractal structures in thin films of nanocomposite materials obtained citrate sol-gel method. The research problem is the definition of the relationship of process parameters and the formation of percolation clusters fractal nature. The process of evolution and the formation of cluster structures citrate sol-gel method are considered as processes that depend on the local characteristics of fractals. The object of the study is based on thin films of the oxides of copper and polyethylene glycol. Mechanisms of heat treatment processes and the formation of the films of the materials were presented in the form of kinetic stages. During the research used algorithms, methods of fractal analysis, mechanisms of formation of cluster structures such as the ability to "Dragon Harter-Hatveya", Eden's model, model of stochastic fractal, algorithm Hoshena-Kopelman, the mechanism of "cluster-particle", the mechanism of "cluster-cluster", random walk model, percolation theory. Computer experiment to calculate the percolation threshold and the fractal dimension was carried out in a software environment MatLab. Effect of changes in growth conditions in the structure of the copper-bearing structures have been shown. Results of the study allowed us to estimate the effect of changing the growth conditions on the morphology and properties of nanocomposite structures, and to identify the potential formation of process parameters of high gas-sensitive samples. It was found that*

*when the same amount of particle fractal dimension of the studied structures smaller than the structure of the simulation without taking into account factors pH. The percolation threshold in the formation of fractal clusters has been identified. It is not dependent on pH and total amount of particles, and depends only on the ratio of total particles to the surface area to be filled.*

*Gas-sensitive materials; the fractal dimension; a percolation cluster; the sol-gel method.*

**Введение.** Для комплексной оценки поверхностного состояния различных структур тонкопленочных материалов необходимо проводить исследования с использованием инструмента не только классических научных методик, но и новейших физических, математических, компьютерных знаний и технологий, которые позволяют моделировать и прогнозировать возможные тенденции в изменении структуры и свойств объектов различной природы [1–4]. Одним из таких инструментов, позволяющих анализировать современное состояние природных систем, является фрактальный анализ [5–11]. Данный метод позволяет оценить характер самоподобия объекта, раскрыть его фрактальные свойства [12].

Системы и материалы, получаемые с помощью золь-гель технологии, являются одним из наиболее благоприятных объектов для наблюдения из экспериментального исследования явлений фрактального агрегирования. Изучение фрактальных свойств материала и нахождение эффективных технологических приёмов управления фрактальной размерностью помогает исследовать природу материала и справиться с задачей прогнозирования свойств соединений на начальном этапе синтеза.

Цель данного исследования в уточнении модели роста фрактальных структур в тонких пленках нанокompозитных материалов, полученных цитратным золь-гель методом и в определении взаимосвязи значений технологических параметров и образования перколяционных кластеров фрактальной природы. Полученные в результате исследования данные позволят оптимизировать технологический процесс синтеза нанокompозитных слоев и получить материалы с газочувствительностью на уровне 1 ppm.

**Постановка задачи.** В работе [13] авторами разработаны модели роста фрактальных структур нанокompозитных материалов для сенсоров газов. В рамках данного исследования были поставлены задачи скорректировать построенные модели с учетом влияния температуры отжига и pH среды на каждой стадии технологического процесса, провести компьютерный эксперимент по расчету порога перколяции и фрактальной размерности в программной среде MatLab, что позволит дать оценку влияния условий роста на строение медьсодержащих структур.

**Методика исследования.** Применение цитратного золь-гель метода предусматривает ряд технологических этапов, таких как формирование исходного раствора, нанесение его на подложку, сушка и отжиг. На этих этапах происходят структурные преобразования материала, от результата которых зависят его дальнейшие свойства [14–17]. Объектом исследования были выбраны тонкие пленки на основе полиэтиленгликоля и оксидов меди. В данной работе конкретизированы механизмы, происходящие в процессе термообработки и формирования пленок нанокompозитных материалов, которые можно представить в виде следующих кинетических стадий:

- 1) гидролиз и образование первоначальных структур на поверхности, аналог которых получен при реализации алгоритма «Дракона Хартера–Хатвея» (до ~150 °C);
- 2) окончательный гидролиз пленкообразующей компоненты, разложение промежуточных продуктов гидролиза и образование фрактальных структур, соответствующих структурам образованным по модели Эдена (до ~200 °C);

- 3) полное удаление растворителя и органических остатков, удаление основной части влаги, разложение неорганических кислот и образование более мелких самоподобных структур (500–400 °С);
- 4) полная дегидратация оксидных пленок и окончательное формирование структур по «кластер-кластерному» механизму (выше 500 °С).

Исследования структуры образцов пленок состава  $\text{CuO}_x$  проводились методом растровой электронной микроскопии (РЭМ).

В процессе исследования использовались алгоритмы, методы фрактального анализа, а также механизмы образования кластерных структур: алгоритм «Драконе Хартера–Хатвея», модель Эдена, модель стохастического фрактала, алгоритм Хошена–Копельмана, механизм «кластер-частица», «кластер-кластерный» механизм, модель случайного блуждания, теория перколяции.

Моделирование образования фрактальных структур проводилось в программной среде MatLab. Эта среда позволяет создавать компактный программный код, имеет широкий выбор готовых функций, оптимизированную для целей моделирования физических процессов структуру данных, большое разнообразие способов построения различных графиков и зависимостей. При компьютерном эксперименте была использована квадратная четырехсвязная решетка, максимальное количество исходных частиц  $10^4$ .

Метод случайного блуждания использовался для организации движения частиц при формировании кластеров. Каждая исходная частица была промаркирована как медьсодержащая или содержащая только органическую основу. Соотношение таких частиц выбиралось исходя из экспериментальных данных. Маркировка была необходима для возможности удаления таких частиц при моделировании процесса термического отжига материала.

Для моделирования процесса агрегации использовались механизмы диффузионно-лимитируемой агрегации и кластер-кластерной агрегации. Первый механизм, реализующий модель Виттена–Сэндера предполагает наличие центра агрегации и свободной частицы, которая совершает броуновское движение из бесконечности и при столкновении с центром агрегации прилипает к нему. После чего из бесконечности начинает двигаться другая частица и при столкновении с первыми двумя прилипает к ним. Процесс повторяется многократно, в результате чего образуется фрактальный агрегат. Второй механизм реализует возможность движения самих кластеров, а не только свободных частиц. Кинетика кластер-кластерного агрегационного механизма удовлетворительно описывается кинетическим уравнением Смолуховского, флуктуациями концентрации при этом можно пренебречь [1].

Теория перколяции является наиболее эффективной для описания вероятности образования кластеров из касающихся друг друга частиц и предсказания, как величины порогов протекания, так и свойств композитов. Применяв эту теорию в совокупности с алгоритмом Хошена–Копельмана удалось выяснить порог перколяции в зависимости от заполнения подложки.

В данном исследовании используется комплексный подход к решению поставленной задачи. Принципиальное отличие предлагаемого подхода – это гибкий выбор методов моделирования в условиях меняющихся механизмов роста структур, а также совместное применение фрактального анализа и перколяционной теории для прогноза газочувствительных свойств пленок.

**Результаты и обсуждение.** В ходе работы был проведен компьютерный эксперимент по расчету порога перколяции и фрактальной размерности медьсодержащих нанокompозитных структур при разных параметрах таких как: число частиц, различные размеры области заполнения и число «мешающих точек», количество которых зависит от pH среды.

При реализации модели диффузионно-лимитирующей агрегации рост самоподобных структур обуславливался реакциями этерификации и поликонденсации на стадии сушки и отжиге при 150 °С. Образуется фрактальная структура случайной природы, представленная на рис. 1. Более темные частицы - это модели частиц меди, а светлые – органическая составляющая.

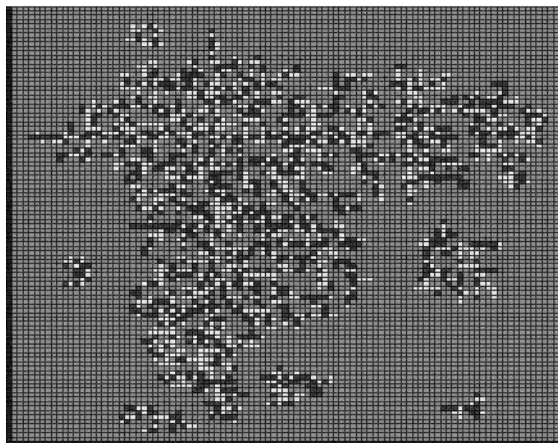


Рис. 1. Фрактальная структура случайной природы

При температуре свыше 200 °С начинает разлагаться органическая составляющая пленки. Играет роль высокое содержание в исходном растворе  $\text{CuCl}_2$  по сравнению с лимонной кислотой. Не все ионы меди имеют возможность встраиваться в хелатные комплексы с лимонной кислотой. На рис. 2 представлена фрактальная структура, после удаления органической составляющей. Таким образом, наблюдается изменение медьсодержащих структур на поверхности подложки при изменении температурного режима.

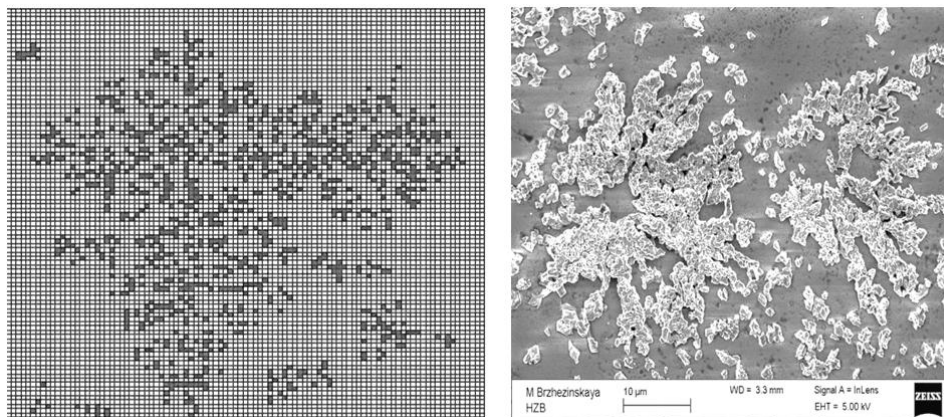


Рис. 2. Фрактальная структура, после удаления органической составляющей

В работе [18] приведена оценка газочувствительности образцов полученных по данной методике и выявлено, что наилучшей газочувствительностью обладают пленки, полученные при температуре отжига 500 °С. Данный температурный режим соответствует четвертой стадии формирования газочувствительного материала, и, следовательно, образованию фрактальных структур.

Существует зависимость поведения некоторых объектов от размерности пространства, в котором они определены. Этот принцип является еще одним подходом к измерению размерности в пространстве, определяемым фракталом [8].

Анализируя чередование участков с различной фрактальной размерностью и тем, как на систему воздействуют внешние и внутренние факторы, можно научиться предсказывать поведение системы. И что самое главное, диагностировать и предсказывать нестабильные состояния [20].

По результатам моделирования, с увеличением числа частиц на единицу поверхности значение фрактальной размерности равномерно возрастает, что может быть связано с увеличением числа частиц, распределенных по площади поверхности. Эксперимент по расчету размерности проводился на четырехсвязной решетке размером  $n*n$ , при  $n=100$ . Зависимость массовой фрактальной размерности от числа частиц приведена на рис. 3. В зависимости от pH среды изменяется механизм роста фракталов. В рамках нашей работы мы учли влияние pH раствора на фрактальную размерность. Выявлено, что при одном и том же количестве частиц размерность меньше, чем у фрактальных структур полученных моделированием без учета фактора pH.

Размерность структур полученных методом моделирования находится в диапазоне размерностей, полученных при исследовании структур полученных экспериментально в [16].

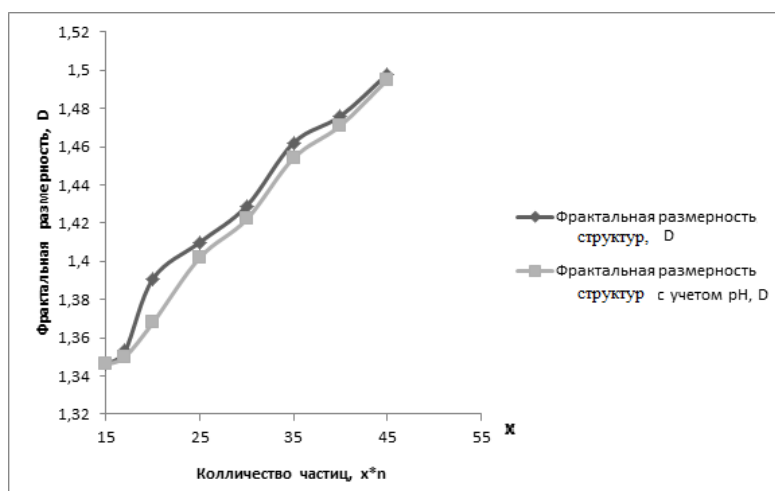


Рис. 3. Зависимость массовой фрактальной размерности от числа частиц

При оценке по методу статистических испытаний вероятность возникновения кластера  $w$ , соединяющего левую и правую стороны квадратной четырехсвязной решетки, т.е. перколяционного кластера, будет зависеть от размера решетки  $n*n$  и количества частиц распределенных по поверхности  $x*n$ . На рис. 4. приведен график зависимости вероятности протекания  $w$  от и количества частиц распределенных по поверхности  $x*n$  и размера решетки  $n*n$ , полученный при анализе серии компьютерных экспериментов. Символами „◆“ – показана зависимость для решетки размером  $n = 50$ , „■“ – для  $n = 100$ , а „▲“ – для  $n = 200$ . Как видно из рис. 5, при количестве частиц равном  $20n$  наступает порог перколяции. Это значит, что  $20n$ -это точка перегиба, именно на этом уровне перколяция наступает в 50% случаев и более, независимо от площади области заполнения.

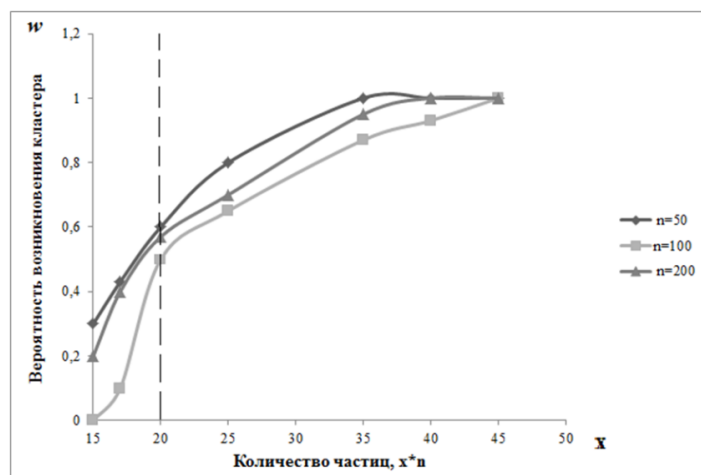


Рис. 4. Зависимость вероятности протекания  $w$  от и количества частиц  $x \cdot n$  и размера решетки  $n \cdot n$

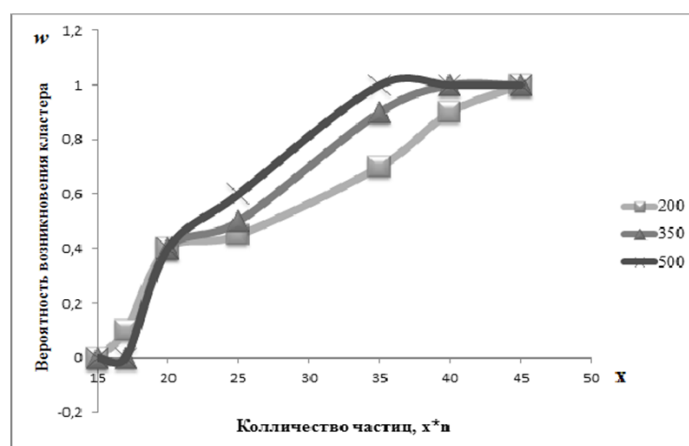


Рис. 5. Зависимость наступления перколяции от концентрации «мешающих точек»

Рассмотренные модели фактически учитывают основные параметры процессов роста, которые определяют фрактальный характер. Для более высокого качества эксперимента требуется конкретизация модельных параметров. Одним из таких параметров является рН. В зависимости от рН среды изменяется механизм роста фракталов. Регулируя модельную кислотность среды, можно задать такое распределение частиц по области заполнения, при котором более вероятен линейный рост, т.е. повышение рН среды ускоряет рост, он начинает происходить по наиболее легкому пути. Таким образом, перколяция наступает при меньшем количестве частиц распределенных по поверхности, так как область заполнения включает ионы, занимающие определенное пространство и тем самым ограничивающие область блуждания, соответственно мешая разрастанию фрактала.

Полученные результаты позволяют говорить о зависимости наступления перколяции, т.е. вероятности образования кластера, от количества частиц при различной концентрации «мешающих точек». Выявленная зависимость представлена на

рис. 5. По данным эксперимента можно сделать вывод, что чем больше количество «мешающих точек», тем раньше наблюдается точка насыщения, т.е. значение со 100 % наступает при меньшем количестве частиц  $x \cdot n$ . После так называемой, точки насыщения вероятность образования перколяционного кластера не зависит от числа частиц и равна 1. Кроме того, из рис. 5 видно, что при количестве  $20n$  наблюдается точка перегиба независимо от числа мешающих росту ионов.

Ранее в работе [21] проведена оценка газочувствительности нанокompозитных медьсодержащих материалов при разных технологических параметрах образцов полученных по данной методике и выявлено, что наилучшей газочувствительностью обладают пленки, полученные при температуре отжига 500 °С и с рН=4 и концентрацией меди 4,3 %.

**Заключение.** В рамках работы проведено уточнение модели роста фрактальных структур тонких пленок медьсодержащих нанокompозитных материалов с учетом влияния рН раствора и температуры отжига. Разработанные алгоритмы роста структур позволили определить зависимости между технологическими факторами и структурой пленки, а также выявить условия образования фрактально-перколяционных структур, перспективных для формирования газочувствительных слоев материала.

Результаты моделирования позволили сделать вывод, что фрактальная размерность исследуемых материалов варьируется в диапазоне от 1,34–1,51. Выявлено, что при одном и том же количестве частиц была получена размерность меньше, чем у фрактальных структур полученных моделированием без учета фактора рН. Это говорит о том, что регулируя модельную кислотность среды, можно задать такое распределение частиц по области заполнения, при котором более вероятен линейный рост, т.е. повышение рН среды ускоряет рост, он начинает происходить по наиболее легкому пути. Результаты моделирования показали, что фрактально-перколяционная структура формируется при 500 °С и диапазоне рН 3–4 и концентрация меди 4–10 мольных %, что коррелирует с ранее полученными экспериментальными данными.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Kononova I.E., Moshnikov V.A., Krishtab M.B., and Pronin I.A.* Fractally Aggregated Micro- and Nanosystems Synthesized from Sols Glass Physics and Chemistry. –2014. – Vol. 40, No. 2. – P. 190-202.
2. *Varadharaja Perumal Srinivasa, Durgajanani Sivalingam, Jeyaprakash Beri Gopalakrishnan and John Bosco Balaguru Rayappan.* Nanostructured Copper Oxide Thin Film for Ethanol Vapor Sensing // Journal of Applied Sciences. –2012. – Vol. 12. – P. 1656-1660.
3. *Zhang Q., Zhang K., Xu D. and al.* CuO nanostructures: Synthesis, characterization, growth mechanisms, fundamental properties, and applications // Progress in Materials Science. –2014. – P. 208-337.
4. *Chapelle A., Oudrhiri-Hassani F., Presmanes L., Barnabü A., Tailhades Ph.* CO<sub>2</sub> sensing properties of semiconducting copper oxide and spinel ferrite nanocomposite thin film // Applied Surface Science. – 2010. – P. 256.
5. *Gaylord R.J., Wellin P.R.* Computer Simulations with Mathematica. – New York: Springer-Verlag, 2005. – 298 p.
6. *Stauffer D., Aharony A.* Introduction to percolation theory. Taylor&Francis. – 2003. – 181 p.
7. *Tiggemann D.* Simulation of percolation on massively-parallel computers // Arxiv.org. – 2008. – P. 1-9.
8. *Аверин И.А., Никулин А.С., Мошников В.А., Печерская Р.М., Пронин И.А.* Чувствительный элемент газового сенсора с наноструктурированным поверхностным рельефом // Датчики и системы. – 2011. – № 2. – С. 24-27.
9. *Малютин В.М., СклярOVA Е.А.* Компьютерное моделирование физических явлений: Учебное пособие. – Томск: Изд-во ТПУ, 2004. – 156 с.

10. Фракталы и теория бифуркации. URL: <http://fractbifur.narod.ru/html/index1.html> (дата обращения: 12.03. 2015).
11. Петров В.В., Плуготаренко Н.К., Бахмацкая А.И. Мультисенсорное газоаналитическое устройство: особенности обработки сигналов // Sensorica-2014. – Санкт-Петербург: Университет ИТМО, 2013. – С. 57.
12. Иванов А.В., Короновский А.А., Минюхин И.М., Яшков И.А. Определение фрактальной размерности овражно-балочной сети города Саратова // Нелинейная динамика в действии. – 2006. – № 2. – С. 64-74.
13. Плуготаренко Н.К., Бахмацкая А.И. Моделирование роста фрактальных структур нанокompозитных материалов для сенсоров газов // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2014. – № 9 (158). – С. 118-124.
14. Лу П., Иванец В. А., Семенистая Т.В., Плуготаренко Н.К. Исследование влияния структуры пленок серебросодержащего ПАН на их газочувствительность с применением теории самоорганизации теории информации и атомно-силовой микроскопии // Нано- и микросистемная техника. – 2012. – № 5. – С. 21-28.
15. Петров В.В., Плуготаренко Н.К., Королев А.Н., Назарова Т.Н. Технология формирования нанокompозитных материалов золь-гель методом. – Таганрог: Изд-во ГТИ ЮФУ, 2011. – 156 с.
16. Петров В.В., Плуготаренко Н.К., Назарова Т.Н., Агеев О.А. Исследование тонких пленок состава  $\text{SiO}_x(\text{SnO}_y)\text{Ag}$  сканирующим зондовым микроскопом // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2004. – № 8 (43). – С. 247.
17. Петров В.В., Плуготаренко Н.К., Королев А.Н., Назарова Т.Н. Технология формирования нанокompозитных материалов золь-гель методом. – Таганрог: Изд-во ГТИ ЮФУ, 2011. – 156 с.
18. Мясоедова Т.Н., Моисеева Т.А., Петров В.В., Кошелева Н.Н. Разработка технологии формирования оксидных материалов для мемристорных структур // Фундаментальные исследования. – 2012. – № 11 (2). – С. 447-449.
19. Максимов А.И., Мошников В.А. и др. Основы золь-гель-технологии нанокompозитов. – 2-е изд. – СПб.: Элмор, 2008. – 225 с.
20. Роко М.К., Уильямса Р.С., Аливисатоса П. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований: пер. с англ. А.В. Хачояна / под ред. Р.А. Андриевского. – М.: Мир, 2002. – 292 с.
21. Моисеева Т. А., Мясоедова Т.Н., Петров В.В., Кошелева Н.Н. Разработка газочувствительного элемента на основе пленок оксидов меди для датчика аммиака // Инженерный Вестник Дона. – 2012. – № 4 (часть 2). URL:<http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4p2y2012/1347> (дата обращения: 25.05.2015).

## REFERENCES

1. Kononova I.E., Moshnikov V.A., Krishtab M.B., and Pronin I.A. Fractally Aggregated Micro- and Nanosystems Synthesized from Sols Glass Physics and Chemistry, 2014, Vol. 40, No. 2, pp. 190-202.
2. Varadharaja Perumal Srinivasa, Durgajanani Sivalingam, Jeyaprasak Beri Gopalakrishnan and John Bosco Balaguru Rayappan. Nanostructured Copper Oxide Thin Film for Ethanol Vapor Sensing, *Journal of Applied Sciences*, 2012, Vol. 12, pp. 1656-1660.
3. Zhang Q., Zhang K., Xu D. and al. CuO nanostructures: Synthesis, characterization, growth mechanisms, fundamental properties, and applications, *Progress in Materials Science*, 2014, pp 208-337.
4. Chapelle A., Oudrhiri-Hassani F., Presmanes L., Barnabü A., Tailhades Ph. CO<sub>2</sub> sensing properties of semiconducting copper oxide and spinel ferrite nanocomposite thin film, *Applied Surface Science*, 2010, pp. 256.
5. Gaylord R.J., Wellin P.R. Computer Simulations with Mathematica. New York: Springer-Verlag, 2005, 298 p.
6. Stauffer D., Aharony A. Introduction to percolation theory. Taylor&Francis, 2003, 181 p.
7. Tiggemann D. Simulation of percolation on massively-parallel computers, *Arxiv.org.*, 2008, pp. 1-9.



8. *Averin I.A., Nikulin A.S., Moshnikov V.A., Pecherskaya R.M., Pronin I.A.* Чувствительный элемент газового сенсора с наноструктурированным поверхностным рельефом [The sensing element of gas sensor with nanostructured surface topography], *Datchiki i sistemy* [Sensors & Systems], 2011, No. 2, pp. 24-27.
9. *Malyutin V.M., Sklyarova E.A.* Компьютерное моделирование физических явлений: Учебное пособие [Computer modeling of physical phenomena: a tutorial]. Tomsk: Izd-vo TPU, 2004, 156 p.
10. *Fraktaly i teoriya bifurkatsii* [Fractals and bifurcation theory]. Available at: <http://fractbifur.narod.ru/html/index1.html> (Accessed 12 March 2015).
11. *Petrov V.V., Plugotarenko N.K., Bakhmatskaya A.I.* Мультисенсорное газоаналитическое устройство: особенности обработки сигналов [Multisensory gas detection device: the features of signal processing], *Sensorica-2014*. Sankt-Peterburg: Universitet ITMO, 2013, pp. 57.
12. *Ivanov A.V., Koronovskiy A.A., Minyukhin I.M., Yashkov I.A.* Определение фрактальной размерности овразно-балочной сети города Саратов [The definition of the fractal dimension of gully network of the city of Saratov], *Nelineynaya dinamika v deystvii* [Nonlinear Dynamics], 2006, No. 2, pp. 64-74.
13. *Plugotarenko N.K., Bakhmatskaya A.I.* Моделирование роста фрактальных структур нанокomпозитных материалов для сенсоров газов [Simulation of the formation fractal structures of nanocomposite materials for gas sensors], *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki* [Izvestiya SFedU. Engineering Sciences], 2014, No. 9 (158), pp. 118-124.
14. *Lu P., Ivanets V. A., Semenistaya T.V., Plugotarenko N.K.* Исследование влияния структуры пленок серебросодержащего PAN на их газочувствительность с применением теории самоорганизации теории информатии и атомно-силовой микроскопии [Study of the influence of the structure of the PAN films of silver on their sensitivity using the theory of self-organization of information theory and atomic force microscopy], *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika* [Nano and Microsystem Technique], 2012, No. 5, pp. 21-28.
15. *Petrov V.V., Plugotarenko N.K., Korolev A.N., Nazarova T.N.* Технология формирования нанокomпозитных материалов зol'-gel' методом [Technology of formation of nanocomposite materials by Sol-gel method]. Taganrog: Izd-vo TTI YuFU, 2011, 156 p.
16. *Petrov V.V., Plugotarenko N.K., Nazarova T.N., Ageev O.A.* Исследование тонких пленок состава SiOX(SnOY)Ag сканирующим зондовым микроскопом [The study of thin films of composition SiOX(SnOY)Ag scanning probe microscope], *Izvestiya TRTU* [Izvestiya TSURE], 2004, No. 8 (43), pp. 247.
17. *Petrov V.V., Plugotarenko N.K., Korolev A.N., Nazarova T.N.* Технология формирования нанокomпозитных материалов зol'-gel' методом [Technology of formation of nanocomposite materials by Sol-gel method]. Taganrog: Izd-vo TTI YuFU, 2011, 156 p.
18. *Myasoedova T.N., Moiseeva T.A., Petrov V.V., Kosheleva N.N.* Разработка технологии формирования оксидных материалов для мемристорных структур [Development of technology of formation of oxide materials for memristor structures], *Fundamental'nye issledovaniya* [Fundamental research], 2012, No. 11 (2), pp. 447-449.
19. *Maksimov A.I., Moshnikov V.A. i dr.* Основы зol'-gel'-технологии нанокomпозитов [Fundamentals of Sol-gel technology of nanocomposites]. 2nd ed. St. Petersburg: Elmor, 2008, 225 p.
20. *Roko M.K., Uil'yamsa R.S., Alivisatos P.* Nanotekhnologiya v blizhayshe desyatiletii. Prognoz napravleniya issledovaniy [Nanotechnology in the next decade. The forecast directions of research]: Translation from English, By ed. R.A. Andrievskogo. Moscow: Mir, 2002, 292 p.
21. *Moiseeva T.A., Myasoedova T.N., Petrov V.V., Kosheleva N.N.* Разработка газочувствительного элемента на основе пленок оксидов меди для датчика аммиака [The development of gas sensitive element on the basis of films of copper oxides for ammonia sensor], *Inzhenernyy Vestnik Dona* [Engineering journal of Don], 2012, No. 4 (Part 2). Available at: <http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4p2y2012/1347> (Accessed 25 May 2015).

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор А.Н. Белов.

**Бахмацкая Александра Игоревна** – Южный федеральный университет; e-mail: a.bachmackaja@gmail.com; 347922, г. Таганрог, ул. Петровская, 17, к. 307; тел.: +79281887518; кафедра техносферной безопасности, экологии и химии; аспирант.

**Плуготаренко Нина Константиновна** – e-mail: plugotarenkonk@sfedu.ru; 347900, г. Таганрог, ул. Петровская, 52-Б, кв. 16; тел.: 89054592199; кафедра техносферной безопасности, экологии и химии; к.т.н.; доцент.

**Bahmatskaya Alexandra Igorevna** – Southern Federal University; e-mail: a.bachmackaja@gmail.com; 17, Pertovskaya street, room 307, Taganrog, 347900, Russia; phone: +79281887518; the department of technospheresafety, ecology and chemistry; postgraduate student.

**Plugotarenko Nina Konstantinovna** – e-mail: plugotarenkonk@sfedu.ru; 52-B, Pertovskaya street, room 16, Taganrog, 347900, Russia; phone: +79054592199; the department of technospheresafety, ecology and chemistry; cand. of eng. sc.; associate professor.

УДК 539.231:547.838.53:004.942:001.53:544.23.022.246

**В.В. Петров, Н.К. Плуготаренко, Т.В. Семенистая, М.М. Фалчари**

### **ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ ПОЛИМЕРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ПЛЕНОК МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ ПАН МЕТОДАМИ ТЕОРИИ САМООРГАНИЗАЦИИ**

*Исследована поверхность образцов пленок на основе медьсодержащего полиакрилонитрила (ПАН), который является проводящим полимером за счет образования системы сопряженных  $\pi$ -связей. Целью исследования является управление технологией получения материалов с точными значениями требуемых характеристик по данным расчетных моделей, как для сенсоров газа, так и для других устройств. Исследование органических полупроводников проводилось с позиции методов самоорганизации. В связи с этим, для возможности применения данных методов, в работе подтверждено наличие самоорганизующих систем в образцах пленок. Рассмотрены процессы образования фрактальных структур при формировании полимерных органических материалов на примере металлосодержащих полиакрилонитрилов (ПАН). Для установления влияния технологических параметров получения пленок металлосодержащего ПАН на газочувствительные свойства, проведены исследования методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) изображения поверхности полученных образцов. Проведен анализ морфологии поверхности методом вложения Такенса. Рассчитана величина корреляционной и фрактальной размерностей образцов пленок. Оценено влияние условий ИК-отжига образцов и концентрации модифицирующей добавки на образование фрактальных структур пленок Си-содержащего ПАН. Математические расчеты показали, что повышение концентрации модифицирующей добавки в пленках приводит к образованию выступов большего размера. Выявлено, что с ростом времени отжига при одинаковых значениях температуры, возрастает размер выступов поверхности пленок. По полученным данным в результате компьютерного эксперимента рассчитаны значения средней взаимной информации (СВИ), и найдена корреляция между значениями коэффициента газочувствительности и СВИ. На основе статистических методов была подтверждена значимость корреляции величины газочувствительности и величины СВИ, оценивающая полученную модель данных величин, как адекватную.*

*ПАН; АСМ; СВИ; теория самоорганизации.*

**V.V. Petrov, N.K. Plugotarenko, T.V. Semenistaya, M.M. Falchari**

### **STUDY OF THE STRUCTURE OF POLYMERIC ORGANIC MATERIALS FILMS WITH A COPPER CONTENT OF PAN BY SELF-ORGANIZATION THEORY**

*In this work surface of Cu-containing films of polyacrylonitrile (PAN) specimen which is conductive polymer at the expense of conjugated  $\pi$ -bond were investigated. Research objective is control of getting technology of precision values required characteristics materials of calculated data models for gas sensor and other devices. Organic semiconductors research was taken by the methods of self-organization. In this case for the possibility of using this methods presence of self-organization systems in films samples was confirmed in this work. The processes of fractal structures formation in the getting of polymeric organic materials by the example of metal-containing polyacrylonitriles (PAN).*