## Научный отчет по проекту Российского Фонда Фундаментальных Исследований (РФФИ)

Номер проекта 05-08-65507

**Название проекта** Моделирование электродинамической агрегации нанопыли в макроскопические фрактальные каркасные структуры

Руководитель проекта Кукушкин Александр Борисович

Коды классификатора, соответствующие содержанию фактически проделанной работы  $08\text{-}205\ 08\text{-}206\ 02\text{-}600$ 

#### Краткая аннотация

Развита ранее предложенная нами модель многочастичной электродинамической (магнитной и электрической) агрегации наночастиц в электрических разрядах, основанная на предположении о возможности приобретения стационарного магнитного дипольного момента нанотрубчатыми частицами. Путем численного моделирования динамики пучка изначально линейных филаментов электрического тока, составленных суммарно из ~1000 одномерных (протяженных) магнитных диполей, обладающих продольной электрической проводимостью и экранированным электрическим зарядом, найдены условия самосборки коаксиальных вложенных каркасных трубчатых структур. Аналитически предсказан приближенный скейлинг для характерных размеров трубчатых структур, подтвержденный результатами численного моделирования. Детально прослежены следующие динамические процессы: (1) уменьшение пространственной размерности в указанной системе - от начальной квазиоднородной трехмерной до квазистационарной двумерной цилиндрической, (2) самосборка каркасной структуры из филаментов внутри сформировавшейся двумерной структуры (цилиндрического слоя) вследствие магнитной агрегации нескомпенсированных магнитных потоков у части диполей в составе исходно линейных филаментов. Показана уникальная роль совокупности вышеуказанных электродинамических свойств (нано)блоков в указанных процессах. Созданный численный код самосгласованно моделирует важный этап самосборки каркасной структуры - от квазиоднородного ансамбля линейных филаментов к каркасной трубчатой структуре, а решенная задача является существенным шагом на пути к полномасштабной демонстрации возможности электродинамического механизма образования фракталов с базовым блоком трубчатой топологии (такие структуры были ранее нами предсказаны и обнаружены в широком диапазоне пространственных размеров в лабораторных электроразрядах, аномальных погодных явлениях и космических объектах).

The formerly developed model of multi-body electrodynamic (magnetic and electrical) aggregation of nanoparticles in electric discharges, based on the assumption of static dipole magnetic moment acquired by the nanotubular particles, is extended. Numerical modeling of dynamics of initially linear filaments of electric current, composed of ~ 1000 one-dimensional (i.e. lengthy) magnetic dipoles which possess longitudinal electric conductivity and screened electric charge, enabled us to find the conditions for self-assembling of coaxial nested skeletal tubular structures. The analytically predicted scaling law for characteristic size of tubularity is confirmed with numerical modeling results. The following dynamical processes are traced in detail: (1) reduction of spatial dimensionality in the above system – from initial quasi-uniform three-dimensional to quasi-stationary two-dimensional cylindrical, (2) self-assembling of skeletal structure from the filaments inside the originated two-dimensional structure (cylindrical layer) due to magnetic aggregation of uncompensated magnetic flux in a fraction of the dipoles in the initially linear filaments. The unique role of the set of the above-mentioned electrodynamic properties of the (nano)blocks in the above processes is shown. The elaborated numerical code self-consistently models the significant stage of

skeletal structure self-assembling - from quasi-uniform ensemble of linear filaments to skeletal tubular structure, and the solution to the above problem is an important step towards full-scale demonstration of the possibility of electrodynamic mechanism of formation of fractals with basic block of tubular topology (we formerly predicted and identified such structures in a wide range of length scales in laboratory electric discharges, severe weather phenomena and space).

### Объявленные ранее (в исходной заявке) цели проекта на 2006 год

Решение обратной задачи по восстановлению магнитных и электрических свойств наноблока, допускающих самосборку фрактальных каркасных структур в условиях, характерных для электрического пробоя в вакууме в присутствии уже готовых наноблоков. Это позволит в дальнейшем приступить к главным задачам проекта - поиску оптимальных условий самосборки каркасных структур из нанопыли в лабораторных экспериментах и нахождению возможных путей лабораторной наработки нового, "каркасного" типа наноматериала.

#### Степень выполнения поставленных в проекте задач

Задачи на 2006 год в целом выполнены: с помощью ранее (2005 г.) созданного и апробированного численного кода [7,6] для моделирования многочастичной динамики магнитной и электрической агрегации наночастиц найдены условия самосборки коаксиальных вложенных каркасных трубчатых структур в системе изначально линейных филаментов электрического тока, составленных из одномерных (протяженных) магнитных диполей, обладающих продольной электрической проводимостью и экранированным электрическим зарядом. Результаты численного моделирования дают решение обратной задачи по восстановлению магнитных и электрических свойств наноблока, допускающих самосборку фрактальных каркасных структур в условиях, характерных для электрического пробоя — в случае возникновения филаментов электрического тока. Решенная задача является не окончательным, но существенным шагом на пути к конечной цели проекта - (а) полномасштабной (т.е. с начальной стадии пробоя, еще до образования первичных филаментов) демонстрации возможности электродинамического механизма образования фракталов с базовым блоком трубчатой топологии и (б) формулировке пути лабораторной наработки нового типа наноматериала.

#### Полученные за отчетный период важнейшие результаты

- 1. Найдены условия самосборки коаксиальных вложенных каркасных трубчатых структур из пучка изначально линейных филаментов электрического тока, составленных суммарно из ~500 одномерных (протяженных) магнитных диполей, обладающих продольной электрической проводимостью и экранированным электрическим зарядом. Численное моделирование динамики указанной системы для различных наборов основных параметров (величин магнитных диполей, величин находящихся на них электрических зарядов и радиуса их экранирования, величин протекающих по ним продольных электрических токов, доли диполей с нескомпенсированным магнитным потоком) позволило найти оптимальные условия самосборки (значения указанных параметров и характер начального расположения диполей) [1-3].
- 2. Аналитически предсказан приближенный скейлинг для характерных размеров трубчатых структур в вышеуказанной системе, который был подтвержден результатами численного моделирования и тем самым позволил значительно сократить процесс поиска оптимальных условий самосборки [1]. Процесс поиска оптимальных параметров показал уникальную роль совокупности вышеуказанных электродинамических свойств (нано)блоков в процессах самосборки прежде всего, в установлении квазистационарного баланса результирующего притяжения (магнито-дипольного и пондеромоторного) и электрического отталкивания [1-3].
- 3. Детально прослежены следующие динамические процессы, качественно предсказанные аналитически:

- (а) уменьшение пространственной размерности в указанной системе от начальной квазиоднородной трехмерной до квазистационарной двумерной цилиндрической [1-3],
- (б) самосборка каркасной структуры из филаментов внутри сформировавшейся двумерной структуры (цилиндрического слоя) вследствие магнитной агрегации нескомпенсированных магнитных потоков у части диполей в составе исходно линейных филаментов [1].
- 4. С учетом результатов проведенного численного моделирования предложен возможный качественный сценарий образования нано- и субмикрометровых размеров трубчатых тороидальных структур, обнаруженных в недавних экспериментах по импульсному лазерному воздействию на углеродистые (в частности, фуллерено-содержащие) мишени [1,3].
- 5. Продолжен анализа существующих баз данных, содержащих информацию о тонкой структуре каркасов ("скелетов") в пылевых осадках в лабораторных сильноточных электроразрядах (токамаке) [4] и в космических объектах (пылевых облаках) [5]. Обнаружено присутствие каркасных структур в базе данных фотографических изображений, полученных в микроволновом диапазоне, по программе «Dustfullsky».

#### Степень новизны полученных результатов

Впервые предложена и развита модель для описания нового типа наноматериала – каркасных структур, составленных из наноблоков с магнитными и электрическими свойствами, проявление которых углеродными нанотрубками либо хорошо известно (напр. высокая электропроводность и высокая термическая полевая эмиссия), либо косвенно вытекает из ряда тонких экспериментов, требующих, впрочем, более детального подтверждения (речь идет о превращении нанотрубки в магнитный диполь путем захвата ею магнитного потока и его удержания со слабой диссипацией энергии захваченного магнитного поля). Впервые проведено численное моделирование важного этапа самосборки каркасной структуры - от квазиоднородного трехмерного ансамбля линейных филаментов электрического тока к каркасной трубчатой структуре - и найдены условия самосборки коаксиальных вложенных каркасных трубчатых структур.

#### Сопоставление полученных результатов с мировым уровнем

В литературе пока отсутствуют аналогичные модели каркасного наноматериала. Это, повидимому, обусловлено тем, что развиваемый нами подход пришел в физику конденсированных сред и физику наноматериалов из физики плазмы и физики сильноточных характерна доминантная электрических разрядов, ДЛЯ которых быстрых электродинамических процессов и сильных внешних полей. самой конденсированных сред идет интенсивный поиск в направлении, которое является родственным для настоящего проекта и (как минимум, косвенно) поддерживающим одно из основных предположений развиваемой нами модели – это поиск магнитного углерода (см. только что вышедшую коллективную монографию T.L. Makarova, F. Palacio (Eds.), Carbon Based Magnetism: An Overview of the Magnetism of Metal Free Carbon-based Compounds and Materials. Elsevier, 2006.)

#### Методы и подходы, использованные в ходе выполнения проекта

Проведенное численное моделирование многочастичной динамики наноблоков исследует важный этап самосборки каркасной трубчатой структуры. Постановка такой задачи является совершенно новой. При этом использованы положения, которые были положены нами в основу гипотез, предсказавших существование фрактальных каркасных структур определенной топологии – прежде всего трубчатых, последовательно повторяющих себя на разных пространственных масштабах (о степени успешности этих предсказаний см. нашу статью Phys. Lett. А 306 (2002) 175-183). Наиболее важным из указанных положений является наличие специфических магнитных свойств у наноблоков, что позволяет углеродной нанотрубке стать сильным магнитным диполем. Среда из протяженных сильных

магнитных диполей, обладающих к тому же высокой электропроводностью, является, по нашему убеждению, новым перспективным «стройматериалом» для нанотехнологий.

Количество научных работ, опубликованных в ходе выполнения проекта - 7 Количество научных работ, подготовленных в ходе выполнения проекта и принятых к печати в 2006 г. - 5

Адреса (полностью) ресурсов в Интернете, подготовленных авторами по данному проекту http://uni-skeletons.narod.ru

# Библиографический список всех публикаций по проекту <u>за весь период</u> выполнения проекта, предшествующий данному отчету

- [1] A.B. Kukushkin, K.V. Cherepanov. Self-assembling of tubular skeletons from electric current filaments composed of magnetized thin rods. **Phys. Lett. A** (2007) (текст доступен на интернет-сайте журнала doi:10.1016/j.physleta.2006.12.007).
- [2] A.B. Kukushkin. Electrodynamic Aggregation of Nanodust as a Source of Long-Lived Filaments in Laboratory Electric Discharges and Space. **IEEE Transactions on Plasma Science**, 14th Special Issue Space & Cosmic Plasmas (8/2007) (accepted for publication, editorial MS# TPS1612).
- [3] Kukushkin A.B., Cherepanov K.V., A Model of Magnetic Aggregation of Nanodust in Electric Discharges. **Proc. 33rd EPS Conf. Plasma Phys. Contr. Fusion** (Rome, Italy, 19-23 June 2006), ECA Vol. 30I (2006), http://eps2006.frascati.enea.it/papers/pdf/O2\_024.pdf
- [4] B.N. Kolbasov, A.B. Kukushkin, V.A. Rantsev-Kartinov, P.V. Romanov, Skeletal structures in the film deposits in tokamak T-10 as a prototype of new nanomaterial. **Proc. V Int. Conf. Plasma Physics and Plasma Technology** (Minsk, Belarus, 18-22 Sept. 2006), Contributed papers, v. II, pp. 661-664.
- [5] Rantsev-Kartinov V.A., Skeletal structures in the images of cosmic dust clouds. **Proc. 33rd EPS Conf. Plasma Phys. Contr. Fusion** (Rome, Italy, 19-23 June 2006), ECA Vol. 30I (2006), P-4.053, http://eps2006.frascati.enea.it/papers/pdf/P4\_053.pdf.
- [6] A.B. Kukushkin, V.A. Rantsev-Kartinov. Evidences for and the models of self-similar skeletal structures in fusion devices, severe weather phenomena and space. Proc. 6<sup>th</sup> Symposium «Current Trends in International Fusion Research: A Review», Washington, D.C., USA, 2005 (to be published, now online in **Preprint ArXiv**: physics/0512245 (2005), 17 pp. http://www.arxiv.org/ftp/physics/papers/0512/0512245.pdf).
- [7] A.B. Kukushkin, K.V. Cherepanov, Simple model of skeletal matter composed of magnetized electrically conducting thin rods. **Preprint ArXiv**: physics/0512234 (2005), 13 pp., http://www.arxiv.org/pdf/physics/0512234.