

Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem
Přírodovědecká fakulta

Diplomová práce

**INOVACE MODELŮ
KOMPOZITNÍCH STRUKTUR**

Daniel Máslo

studijní program: Fyzika

studijní obor: Počítačové modelování ve vědě a technice

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Martin Švec, Ph.D.

2010

Tento list nepřijde do vazby, místo něj se vloží list se zadáním, poskytnutý klientem.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně a použil jen pramenů, které cituji a uvádím v přiloženém seznamu literatury.

Byl jsem seznámen s tím, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., ve znění zákona č. 81/2005 Sb., autorský zákon, zejména se skutečností, že Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona, a s tím, že pokud dojde k užití této práce mnou nebo bude poskytnuta licence o užití jinému subjektu, je Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem oprávněna ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které na vytvoření díla vynaložila, a to podle okolností až do jejich skutečné výše.

V Ústí nad Labem dne:

podpis:

Poděkování

Děkuji svému vedoucímu diplomové práce, RNDr. Martinu Švecovi Ph.D., za trpělivost a za poskytnutí experimentálních dat.

Abstrakt

Název práce: *Inovace modelů kompozitních struktur*

Autor: *Daniel Máslo*

Katedra: *Přírodovědecká*

Vedoucí diplomové práce: *RNDr. Martin Švec, Ph.D., PřF UJEP*

Abstrakt:

Počítačové modelování kompozitních struktur má široké uplatnění např. při zkoumání jejich transportních vlastností. Doposud byly převážně zkoumány struktury s kulovými objekty, zejména pro svou jednoduchou implementaci. Tato práce se zaměřuje na modelování kompozitních struktur s objekty obecných tvarů a na jejich morfologickou analýzu. Struktury jsou generovány pod i nad perkolacním prahem. Díky morfologické analýze a teorii perkolace je možné mnohem lépe studovat transportní jevy uvnitř kompozitní struktury.

Klíčová slova:

Kompozitní vrstvy, Morfologie, Nekonečný shluk, Perkolacní práh, Obecné tvary

Abstract

Title: *Innovation of composite film models*

Author: *Daniel Máslo*

Department: *Scientific*

Supervisor: *RNDr. Martin Švec, Ph.D., PřF UJEP*

Abstract:

Computer modelling of composite structures have wide application in the examination of their transport properties. So far structures of spherical objects have been mainly studied, particularly for their simple implementation. This work focuses on methods of creating composite structures with objects of various shapes and their morphological analysis. Structures are generated under and above the percolation threshold. Better results of transport phenomena in the composite structures can be found, due to morphological analysis and percolation theory.

Keywords:

Composite films, Morphology, Infinite cluster, Percolation threshold, Various shapes

Obsah

Abstrakt	5
Úvod	9
1 Přehled současného stavu problematiky	10
1.1 Kompozitní materiál	10
1.2 Druhy kompozitních materiálů	11
1.3 Využití kompozitních materiálů	11
1.4 Výroba kompozitních materiálů	12
1.5 Módy růstu povrchové vrstvy	14
1.6 Počítačové modely kompozitních struktur	15
2 Morfologická analýza kompozitních struktur	19
2.1 Integrální charakteristiky	19
2.2 Informace o jednotlivých objektech	20
2.3 Informace o rozložení objektů	22
2.4 Teorie perkolace	26
2.5 Morfologie perkolující struktury	28
3 Cíle práce	30

4 Implementace	31
4.1 Struktury s objekty obecných tvarů	31
4.2 Aplikační rámec	32
5 Struktury s objekty obecných tvarů	35
5.1 Plošné struktury	36
5.2 Trojrozměrné struktury	39
6 Závěr	44
Literatura	46
A Článek	48
B Struktura přiloženého DVD	52

Seznam obrázků

1.1	Módy růstu vrstev	15
1.2	Příklady struktur vytvořených „hard–disk“ modelem	16
2.1	Příklady hodnot tvarového faktoru pro některé plošné objekty	21
2.2	Princip radiální distribuční funkce	23
2.3	Voronoiovské dláždění	25
4.1	„Nafukovací“ metoda	32
4.2	Řez trojrozměrnou strukturou s obecnými objekty	34
5.1	Struktury v perkolačním prahu s kruhovými objekty	36
5.2	Struktury v perkolačním prahu s eliptickými objekty	37
5.3	Závislost perklačního prahu na tvarovém faktoru elips	37
5.4	Struktury v perkolačním prahu s n-úhelníkovými objekty	38
5.5	Struktura v perkolačním prahu s kulovými objekty	39
5.6	Srovnání modifikované „hard–sphere“ metody a „nafukovací metody“	40
5.7	Struktura v perkolačním prahu se sféroidy	41
5.8	Struktura v perkolačním prahu s válcovými objekty	42
5.9	Vizuální porovnání modelu a reálné struktury	42

Úvod

Práce se zabývá počítačovým modelováním kompozitních struktur. V této oblasti probíhá velmi živý vývoj a právě naše katedra se této problematice věnuje. Zkoumají se např. elektrické a optické vlastnosti. A proto je potřeba kompozitní struktury modelovat.

Doposud se využívaly převážně modely s kulovými (kruhovými) částicemi. Zejména pro jednoduchou implementaci a pro nízkou výpočetní náročnost. V praxi se ale ukazuje, že mnoho struktur obsahuje částice obecnějších tvarů. Proto se pracuje na počítačových metodách vytváření a zpracování takových struktur.

Vedle trojrozměrných kompozitních struktur se v práci zabýváme i jejich dvojrozměrnými analogiemi. Představuje doposud používané algoritmy generování kompozitních struktur, metody pro morfologickou analýzu a další metody pracující s kompozitní strukturou.

Cílem práce je navrhnout nové postupy jak pro vytváření modelů kompozitních struktur, tak pro jejich morfologickou analýzu. Popsané metody a algoritmy byly implementovány a byl vytvořen aplikační rámec, který umožňuje generování obecných struktur s libovolnými částicemi.

Kapitola 1

Přehled současného stavu problematiky

1.1 Kompozitní materiál

Kompozitní materiál, nebo zkráceně kompozit, je materiál složený minimálně ze dvou různých složek, které se obvykle liší fyzikálními a chemickými vlastnostmi. Spojením těchto složek vznikne zcela nový materiál s unikátními vlastnostmi, které nemohou být dosaženy kteroukoli složkou samostatně, ani prostým smícháním.

Pro kompozitní materiály je charakteristický tzv. **synergismus**, což znamená, že vlastnosti kompozitu jsou výraznější, než by odpovídalo pouhému poměrnému sečtení vlastností jednotlivých složek. Existence synergismu je velmi významná, neboť vede k získávání materiálů kvalitativně zcela nových vlastností.

Pro kompozitní materiály je dále charakteristické, že se vyrábějí mechanickým (nereaktivním) mísením jednotlivých složek. Tím se liší například od slitin, které jsou rovněž heterogenní. U slitin však jednotlivé fáze vznikají fázovými přeměnami (třeba tuhnutím) a jsou tedy blízko termodynamické rovnováhy.

Kompozit dosahuje zajímavých optických, chemických, elektrických nebo mechanických vlastností. Cílem je vytváření takových kompozitních materiálů, které přinášejí na první pohled neslučitelné vlastnosti (průhledný a vodivý materiál, pevný a lehký materiál).

1.2 Druhy kompozitních materiálů

Obecně je kompozit tvořen více složkami. Základní složkou je **matrice** a v ní jsou umístěny **inkluze** ostatních složek, nazývané také výztuha. Podle složení matrice rozdělujeme kompozity do několika skupin:

- *kovová matrice*
- *polymerní matrice*
- *keramická matrice*
- *ostatní*

Dále lze kompozitní materiály dělit podle velikosti inkluzí:

- *nanokompozity* (do 30–50 nm)
- *mikrokompozity* (od 30–50 nm do 50–100 nm)
- *kompozity* (od 1000 nm)

V neposlední řadě lze kompozitní materiály dělit podle vlastností inkluzí. Obecně máme více možností, jak kompozity dělit podle vlastností jejich inkluzí. Je možno sledovat velikost inkluzí, jejich tvar, zda tvoří shluky, jejich interakce mezi sebou nebo jejich interakce s matricí [1].

Kompozity lze zkoumat celou řadou metod. Složení kompozitního materiálu obdržíme například metodou hmotnostní spektroskopie sekundárních iontů (SIMS) nebo metodou rentgenové fotoelektronové spektroskopie (XPS). Strukturu kompozitu lze získat metodami transmisní elektronové mikroskopie (TEM), mikroskopie atomárních sil (AFM) nebo řádkovací tunelové mikroskopie (STM).

1.3 Využití kompozitních materiálů

Díky svým výjimečným vlastnostem jsou kompozitní materiály hojně využívány a studovány. Nacházejí uplatnění v mnoha oblastech výzkumu i použití.

- *stavebnictví*

Za kompozit lze považovat i železobeton, tedy beton s železnými pruty. Právě díky využití železných prutů se jedná o stavební materiál, který svou pevností dalece předčí obyčejný beton.

- *strojírenství*

Uplatnění kompozitů ve strojírenství je velmi široké. V letech se kompozity využívají pro lehkost a tuhost.

- *medicína*

Výroba protéz a rozpěrek. Uhlíkové kompozity jsou netoxické a mají dobrou biokompatibilitu [2].

- *elektronika*

Magnetooptická média, polovodičové prvky, průhledné vodivé displeje (ITO).

1.4 Výroba kompozitních materiálů

Přípravu kompozitních materiálů nebo jen jejich vrstev dělíme do několika skupin:

- *fyzikální* (PVD)
- *chemické* (CVD)
- *smíšené* (PECVD, PACVD, PICVD)
- *speciální*
- *elektrochemické*

1.4.1 Fyzikální metody přípravy

Napařování

Deponované materiály jsou vypařeny a kondenzují na povrchu cíle. Celý proces musí probíhat za nízkého tlaku kvůli prodloužení střední volné dráhy částic deponovaných materiálů. Standardně se používají tlaky $p < 10^{-4}$ Pa. V důsledku nízkého tlaku se také snižuje bod varu deponátů. Energie částic dopadajících na terč se pohybuje v rozmezí $10^0 - 10^4$ eV. Růst vrstvy a adhezi lze ovlivnit teplotou substrátu (terče).

Samotné vypařování deponátů může probíhat několika způsoby:

- *ohmický odpor*

Elektrický proud vytváří teplo (vyhřívaný kelímek, napařovací lodička, hexaBN vodivá keramika).

- *elektronový svazek*

Hojně využívané v laboratoři i v průmyslu. Svazek elektronů je ohýbán magnetickým polem a směrován na deponát. Tato metoda je vhodná pro vysoké teploty tání.

- *nízkonapěťový oblouk*

Výboj se soustředí do bodu na katodě. Tento bod se po katodě náhodně pohybuje (katodová skvrna). V tom místě je vysoká teplota a dochází k odpařování katody. Do aparatury lze přidat reaktivní plyn.

Naprašování

Při klasickém naprašování je terč z vodivého materiálu umístěn ve vakuové komoře a je přiveden na vysoký záporný potenciál řádově tisíce voltů. Do komory se přes jehlový ventil připouští pracovní plyn (obvykle argon) a tlak se udržuje na hodnotě řádově jednotky pascalu. Před terčem se zapálí doutnavý výboj, přičemž kladné ionty bombardují záporný terč a záporné elektrony dopadají na uzemněnou kostru komory. Těžké ionty svým dopadem rozprašují terč a rozprášené atomy se usazují na vnitřních površích. Substráty se umísťují před terč, tenká vrstva tedy vzniká především na nich. Pro zajištění lepší homogenity vrstvy se mohou substráty pohybovat, např. rotovat [3].

Při tvorbě kompozitu můžeme odprašovat několik materiálů najednou (nebo odprašovat slitinu) nebo při naprašování použijeme reaktivní plyn. Energie iontů dopadajících na deponát (katodu) je v rozmezí $10^2 - 10^3$ eV a energie odprášených částic se pohybuje v rozmezí $10^1 - 10^2$ eV [3].

Nejpoužívanější metodou naprašování je

- *magnetronové naprašování*

Magnetronové naprašování je zdokonalená technologie klasického naprašování. Před terčem je vytvořeno magnetické pole definovaného tvaru elektromagnetem nebo permanentními magnety. Takové zařízení se nazývá magnetron. Elektrony, které při klasickém naprašování unikají z prostoru před terčem, se v tomto případě v důsledku Lorentzovy síly musí pohybovat po šroubovici podél siločar. Tak se výrazně prodlužuje jejich dráha v blízkosti terče, prodlužuje se i doba jejich se-trvání v oblasti výboje a zvyšuje se pravděpodobnost ionizace dalších atomů pracovního plynu. To umožňuje udržet výboj při nižším tlaku (řádově desetiny pascalu) i při nižším napětí (řádově stovky voltů). Zejména nižší tlak se pozitivně projevuje ve větší čistotě vytvářených vrstev [3].

Jestliže se spolu s pracovním plynem připouští do vakuové komory reaktivní příměs, např. kyslík, dusík apod., je možné vytvářet oxidy, nitridy atd. rozprašovaného materiálu. V tom případě jde o reaktivní magnetronové naprašování [3].

U nevodivých terčů na povrchu postupně vzniká elektrický náboj, který zabraňuje dalšímu bombardování. Použíje-li se střídavý vysokofrekvenční signál, lze rozprašovat i tyto nevodivé materiály, např. různé keramiky. V tom případě se během jedné půlperiody rozprašuje terč a během druhé půlperiody opačná polarita vede k neutralizaci nahromaděného náboje dopadajících iontů a opět je možný proces bombardování při následné změně polarity elektrického pole [3].

Hlavními výhodami naprašování je jednoduchá depozice i z těžkotavitelných materiálů, ve vytvářené vrstvě se zachovává složení slitinového terče ve stejném poměru jednotlivých složek a je možná homogenní depozice vrstev i na větších plochách [3].

1.4.2 Chemické metody přípravy

Vytvoření vrstvy rozkladem vhodné sloučeniny a chemickými reakcemi na terči, často s katalytickým účinkem terče.

Chemické metody přípravy se dělí podle způsobu rozkladu použité sloučeniny:

- *vysoká teplota*
- *vysokofrekvenční plazma*
- *laser*
- *cyklotronová rezonance plazmatu*

1.5 Módy růstu povrchové vrstvy

Průběh nanášení deponátu na terč a vytváření ostrůvků nebo vrstev probíhá v závislosti na použitých materiálech a na teplotě deponátu i terče. Z termodynamického pohledu lze mód růstu určit z povrchových energií deponátu (γ_d), terče (γ_t) a rozhraní (γ_r) mezi nimi. Na obrázku 1.1 jsou zobrazeny 3 základní módy růstu [4]:

- *Volmer–Weber (VW mód)*
Vysoká povrchová energie deponátu vede k tvorbě izolovaných 3D „ostrůvků“.
$$\gamma_t < \gamma_d + \gamma_r$$
- *Stranski–Krastanov (SK mód)*
V tomto módu je nejprve povrchová energie terče snížena jednou vrstvou deponátu a vrstva dále roste v podobě 3D „ostrůvků“.

- *Frank–van der Merwe (FM mód)*

Vrstva v tomto módu roste vrstvu po vrstvě. Díky nízké povrchové energii deponátu je terč pokryt kontinuální vrstvou, než započne vznikat vrstva druhá. Deponát tak vykazuje „smáčivé chování“.

$$\gamma_t > \gamma_d + \gamma_r$$



Obrázek 1.1: Časový vývoj růstu vrstvy v závislosti na módu: Zleva doprava VW mód, SK mód, FM mód.

1.6 Počítačové modely kompozitních struktur

Přestože jsou dostupné technologické postupy pro zkoumání reálných kompozitních struktur, je účelné tyto struktury počítačově modelovat. K počítačovému modelování se přistupuje zejména z těchto důvodů:

- *komplexní informace*

Díky počítačovému modelu jsou k dospozici veškeré potřebné a sledované informace. Tyto informace jsou často z reálného vzorku nezískatelné. Jedná se především o informace z oblasti matematiské morfologie.

- *škálovatelnost*

Počítačovému modelu je možno předat mnoho parametrů, které ovlivňují získaný model. Lze tak „velmi levně“ prozkoumat mnoho možností, jejichž laboratorní zpracování by bylo příliš zdlouhavé nebo nákladné.

Kompozitní struktury lze modelovat (generovat) dvěma základními způsoby:

- *přímé metody*

V této skupině metod není podstatné fyzikální či chemické pozadí procesu tvorby materiálu. Algoritmy přímo vytvářejí finální struktury, které svou morfologií odpovídají reálnému materiálu.

- *růstové metody*

Tato skupina metod pracuje s modely atomů či jiných částic a zohledňuje fyzikální podstatu tvorby kompozitního materiálu.

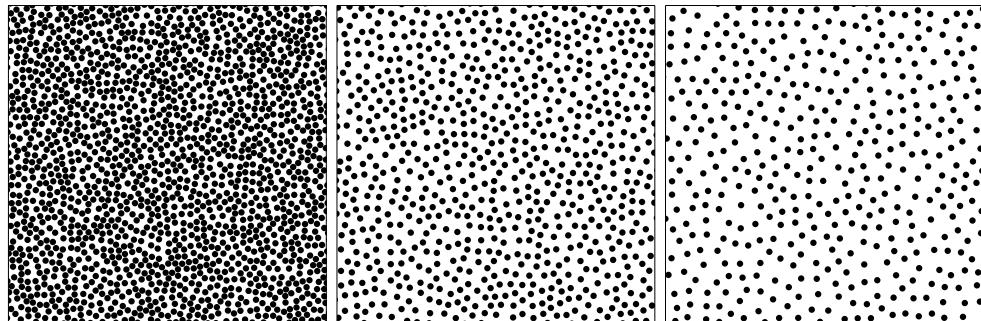
V poslední době se uplatňuje sloučení obou metod do jedné. Zárodky kompozitu jsou generovány s ohledem na fyzikální podstatu použitých materiálů a s hotovými zárodky (ostrůvky) se dále manipuluje stochasticky pomocí náhodného pohybu.

1.6.1 Přímé metody modelování kompozitů

V této skupině modelů se nejvíce uplatňuje metoda Monte Carlo (MC). Jednotlivé inkluze jsou v konečné podobě přímo vkládány do matrice. Tento proces lze parametrisovat velikostí a tvarem inkluze, jejich počtem (hustotou) nebo **difúzní zónou**, která určuje v jaké vzdálenosti od konkrétní inkluze se může vyskytnout nějaká další. Všechny tyto parametry ovlivňují výslednou strukturu a lze díky nim dosáhnout celé škály výsledků (hustota, uspořádanost, atd.).

„Hard–sphere“ model

„Hard–sphere“ model (ve 2D nazýván „Hard–disk“) náhodně vkládá inkluze do pracovní oblasti. Při každém pokusu o vložení je kontrolována kolize inkluze, případně jejich difúzních zón. S rostoucí difúzní zónou roste i uspořádanost výsledné struktury.



Obrázek 1.2: Příklady struktur vytvořených „hard–disk“ modelem. Zleva doprava roste difúzní zóna ($0, r, 2r$), kde r je poloměr inkluze.

Zápornou hodnotou difúzní zóny lze docílit dotyku (prolínání) inkluze. To je nezbytné pro tvorbu perkolující struktury, která je dotykově propojena z jedné strany pracovní oblasti na druhou.

„Soft–sphere“ model

„Soft–sphere“ model (ve 2D nazýván „Soft–disk“) pracuje s již vytvořenou strukturou. Ta může být připravena „hard–sphere“ modelem nebo jakýmkoli jiným způsobem. Používá se též rozmístění inkluzí do matrice na mříž (čtvercová - krychlová, hexagonální). Do takové struktury se zavede mezičásticový potenciál a soustava inkluzí se nechá vyvijet.

Vývoj (míchání) může probíhat Monte Carlo (MC) metodou nebo metodou molekulární dynamiky (MD).

V případě MD metod se v každém kroku počítají síly a zrychlení působící na jednotlivé inkluze. Z těchto hodnot je pak spočítána nová poloha inkluzí [5].

V případě MC metody se nové pozice inkluzí určují náhodně. Každá konfigurace má délky danému potenciálu nějakou energii. Upřednostňuje se přijetí konfigurací s nižší energií. Vývoj konfigurací probíhá Metropolisovou metodou [5].

Modifikovaný „hard–sphere“ model

Tato metoda umožňuje generování perkolujičích struktur. To znamená, že se v ní vyskytují dotýkající se částice. Pozice objektů ve struktuře je, stejně jako u klasického „hard–sphere“ modelu, generována náhodně, ale objektům je navzájem umožněna kolize (dotyk). Parametrem, ovlivňujícím výslednou strukturu je, stejně jako u „hard–sphere“ modelu, difúzní zóna. Ta může v tomto případě nabývat i záporných hodnot. Metoda je implementována tak, aby objektů s menší difúzní zónou bylo méně než s větší difúzní zónou [6].

Modifikovaný „soft–sphere“ model

Tato metoda také umožňuje generování perkolujičích struktur. Pozice objektů je opět generována náhodně. Ve struktuře je zaveden mezičásticový potenciál a vývoj struktury je prováděn simulovaným žíháním [7]. Pohyb objektů v pracovní oblasti je prováděn metodou Monte Carlo [6].

1.6.2 Růstový model

V tomto modelu se kompozitní vrstva konstruuje s ohledem na reálný růst tenkých vrstev. Generování struktury neprobíhá v celé pracovní oblasti najednou, ale po částech.

Inkluze se generují do pásu zvolené šířky, kterým je pohybováno vzhůru pracovní oblastí. Parametry modelu tak jsou právě šíře tohoto pásu, rychlosť jeho pohybu pracovní oblastí (rychlosť depozice) a difúzní zóna. Vhodnou volbou těchto parametrů lze růstovým modelem získat celou řadu modelů. Od vysoce usporádaných až po náhodné [6].

Kapitola 2

Morfologická analýza kompozitních struktur

Cílem morfologické analýzy je získat komplexní informaci o zkoumané struktuře. Lze se zaměřit jak na jednotlivé objekty tak na celou strukturu. Naším cílem je klasifikace jednotlivých struktur a možnost jejich porovnávání. Samotný pohled na strukturu nemusí stačit, uvážíme-li, že se v ní mohou vyskytovat desítky tisíc objektů. Proto byly vyvinuty metody jak morfologii struktur vizualizovat v grafu nebo dokonce převést na číselný údaj, ten pak nazýváme příznakem. Dobrá morfologická analýza dokáže postihnout rozdíly mezi strukturami, které není lidské oko schopno rozeznat.

Morfologické metody dělíme do dvou hlavních skupin:

- *metody pro bodové objekty*

Velikost objektů je zanedbatelná vzhledem k velikosti pracovní oblasti.

- *metody pro plošné nebo prostorové objekty*

Velikost objektů nelze vzhledem k velikosti pracovní oblasti zanedbat.

Tyto skupiny nejsou striktně odděleny a existuje mnoho metod, které jsou použitelné jak pro bodové, tak pro plošné či prostorové objekty.

2.1 Integrální charakteristiky

Postihují strukturu v její celistvosti a dávají infomace podobné lidskému odhadu. Tato analýza se vůbec nevěnuje samotným objektům ani jejich uspořádání.

2.1.1 Počet objektů (koncentrace objektů)

Počet objektů v pracovní oblasti (většinou těžiště objektů). Známe-li měřítko analyzovaného obrazu, můžeme počet objektů přepočítat na veličinu *koncentrace objektů*. Tato nám poskytuje relevantnější informaci – vztahuje se přímo k pracovní oblasti [8].

2.1.2 Faktor plnění (f_v)

Tato charakteristika (ve 2D nazývaná stupeň pokrytí) nabývá hodnot z intervalu $\langle 0; 1 \rangle$ a udává relativní velikost pracovní oblasti, která je zaplněna objekty. Hodnotu lze určit analyticky nebo numericky, jsou-li objekty složité a jejich obsah či objem nelze analyticky spočítat. Tuto metodu nelze použít pro bodové objekty [8].

2.2 Informace o jednotlivých objektech

Tato skupina metod morfologické analýzy zkoumá vlastnosti jednotlivých objektů. Důležitým aspektem těchto metod je, že všechny objekty mají stejnou vypovídací hodnotu a pro následující metody mají stejnou váhu – žádný objekt není důležitější než jiný. Proto je třeba zkoumanou charakteristiku zjišťovat u všech objektů, u kterých to lze (to nemusí být všechny objekty v pracovní oblasti. Např. u radiální distribuční funkce nelze za střed měření volit objekty ležící blízko hranice pracovní oblasti) [8].

2.2.1 Rozdělení poloměrů

U kulových nebo kruhových objektů je jediným parametrem objektu poloměr. Spočtením a normováním poloměrů každého objektu získáváme rozdělovací funkci poloměrů. Ta se obvykle vynáší do histogramu a dává dobrou informaci o velikostech objektů [8].

Objekty obecnějších tvarů nelze jednoduše charakterizovat poloměrem. K jejich popisu je potřeba dvou charakteristik – rozdělení efektivních poloměrů a rozdělení tvarových faktorů.

2.2.2 Rozdělení efektivních poloměrů

Při určení rozdělení efektivních poloměrů postupujeme tak, jako by objekty byly přesně kruhové nebo kulové. Efektivní poloměr objektu R_{ef} se získá ze vztahu:

$$R_{\text{ef}} = \sqrt{\frac{S}{\pi}} \quad \text{pro plošené objekty} \quad (2.1)$$

$$R_{\text{ef}} = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi}} \quad \text{pro prostorové objekty} \quad (2.2)$$

kde S je obsah objektu a V je objem objektu.

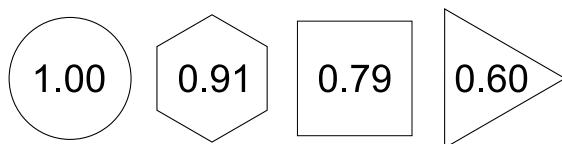
2.2.3 Rozdělení tvarových faktorů (FF)

Tvarový faktor vyjadřuje odchylku tvaru objektu od kruhu nebo koule. Zavádí se tak, aby pro kruh resp. kouli nabýval hodnoty jedna a s růstem deformace se jeho hodnota snižovala k nule. Tomuto popisu vyhovuje definice:

$$FF = 4\pi \frac{S}{O^2} \quad \text{pro plošené objekty} \quad (2.3)$$

$$FF = 36\pi \frac{V^2}{P^3} \quad \text{pro prostorové objekty} \quad (2.4)$$

kde S je obsah objektu a O jeho obvod. V je objem objektu a P jeho povrch. Pokud není možné hodnoty S , O , V nebo P určit analyticky, musejí se určit z počtu pixelů (prvků matice) příslušejících k danému objektu (toto určení, zejména u malých objektů, nemusí být vždy jednoduché a přesné).



Obrázek 2.1: Příklady hodnot tvarového faktoru pro některé plošné objekty.

2.2.4 Rozdělení poloos a rozdělení směrů (efektivních) elips

V některých případech není zcela vhodné popisovat objekt kruhovým či kulovým tvarem. Pokud lze popsat objekt několika parametry, které jasně definují jeho velikost,

natočení nebo jakoukoliv jinou charakteristiku, je vhodné tento objekt popsat právě těmito parametry. Velmi často bývá tímto tvarem elipsa nebo elipsoid. Místo jednoho parametru – poloměru se pak zavádí více parametrů popisujících objekt. U elipsy je to délka hlavní poloosy, délka vedlejší poloosy a úhel, který hlavní poloosa svírá s osou x . I zde můžeme využít tvarového faktoru FF , jsou-li objekty deformované [8].

2.2.5 Obecné tvary

V praxi se můžeme setkat i s velmi atypickými tvary, které nelze jednoduše popsat pomocí výše uvedených metod. Jednou z možností je nalezení nějakého analytického tvaru, kterým dané objekty popíšeme (případně odchylky od něj). Pokud ovšem objekt nelze approximovat žádným vhodným útvarem je vhodné vytvořit vlastní charakteristiky, které vyhovují danému problému. Obvykle se přistupuje k popisu konkávnosti a konvexnosti objektu. Zjišťuje se počtu vrcholů, stěn nebo hran [8].

2.3 Informace o rozložení objektů

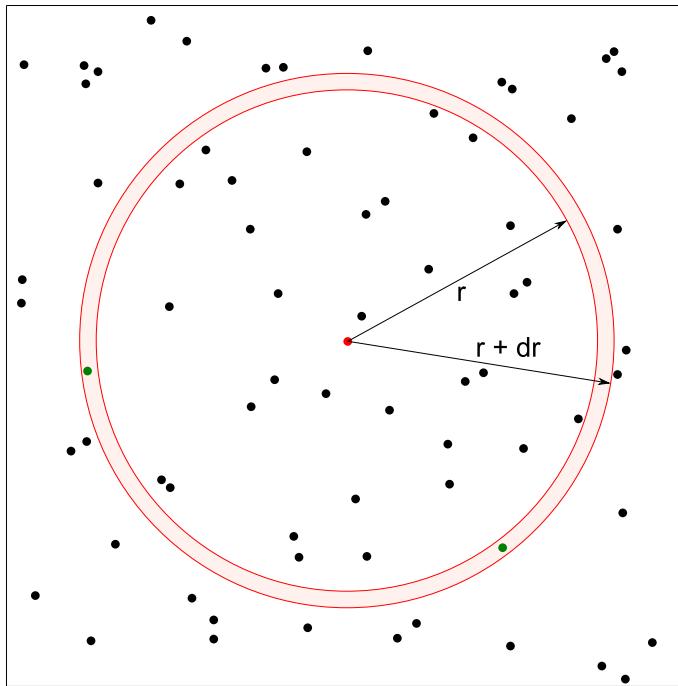
Tato charakteristika se uplatňuje při zkoumání plošných i prostorových struktur. Také je možno ji aplikovat na plošnou interpretaci prostorové struktury (např. astronomická fotografie). V oblasti kompozitů patří tyto charakteristiky k nejdůležitějším.

2.3.1 Radiální distribuční funkce (RDF)

Tato metoda byla navržena pro bodové objekty, ale dnes se hojně využívá i pro plošné a prostorové objekty. V jejich případě se bod nahrazuje těžištěm objektu. Toto nahrazení tělesa za bod je možné, pokud je velikost objektu mnohem menší než meziobjektové vzdálenosti, např. hvězdná fotografie [8].

Radiální distribuční funkci (někdy se též nazývá párová distribuční funkce) $P(r)$ určíme způsobem znázorněným na obr. 2.2:

- Vezmeme nějaký objekt jako počátek soustavy souřadné a vedeme z něho osu r .
- Na této ose zvolíme interval šířky Δr , $\langle r; r + \Delta r \rangle$.
- Vytvoříme mezikruží a spočítáme počet objektů v něm ležících, Δn .



Obrázek 2.2: Princip radiální distribuční funkce.

- Postup opakujeme pro další r měnící se od nuly až po nějaké r_{max} .
- Radiální distribuční funkce se spočítá podle vztahu:

$$P(r) \doteq \frac{1}{n_0} \cdot \frac{\Delta n}{2\pi r \Delta r}, \quad (2.5)$$

kde n_0 je koncentrace objektů. Tento vztah je dostatečně přesný pro velká r , poblíž objektu musíme plochu mezikruží určit přesněji. [8]

Výše uvedený postup, aplikovaný na jediný objekt, by generoval distribuční funkci značně nepřesně (trpěla by šumem). Proto se tento algoritmus opakuje pro každý objekt **ze střední části struktury**¹ a výsledná distribuční funkce se získá průměrováním přes všechny objekty [8].

2.3.2 Rozdelení nejbližších sousedů (DNN)

Tato metoda je použitelná pro bodové, plošné i prostorové objekty. Výše uvedenou radiální distribuční funkci lze z DNN konstruovat. Používá se ve dvou modifikacích (pro bodové objekty splývají v jednu):

¹Do histogramu lze započítat pouze data získaná z celých mezikruží.

- DNNc: Vzdáleností mezi objekty se myslí vzdálenost jejich středů (těžišť).
- DNNs: Vzdáleností mezi objekty se myslí vzdálenost jejich nejbližších bodů (vzdálenost hranic).

Distribuce nejbližších sousedů se konstruuje následujícím způsobem:

- zvolíme jeden konkrétní objekt ve struktuře
- zjistíme, který ze zbývajících objektů je mu nejblíže (případně se hledají 2. nejbližší, 3. nejbližší, atd.)
- zjištěná vzdálenost se započítává do histogramu
- předchozí 3 body se opakují pro všechny objekty ve struktuře

2.3.3 Kovariance

Metoda navržená výlučně pro plošné objekty. Lze ji implementovat více způsoby, v této práci je použita maticová formulace. Vstupem do metody je dvourozměrné pole (matice), které obsahuje digitalizovaný a binarizovaný obraz. Lze použít obraz plošné struktury nebo obraz řezu trojrozměrné struktury. V principu se obraz duplikuje a je posouván vůči originálu v libovolném směru. Sleduje se pokrytí obrazové plochy průnikem obou obrazů. Metodou konstruujeme kovarianční funkci $C(h)$ dle následujícího vzorce:

$$C(h) = \frac{1}{K} \cdot \sum_i \sum_j A(i, j) \cdot A(i + h, j) \quad (2.6)$$

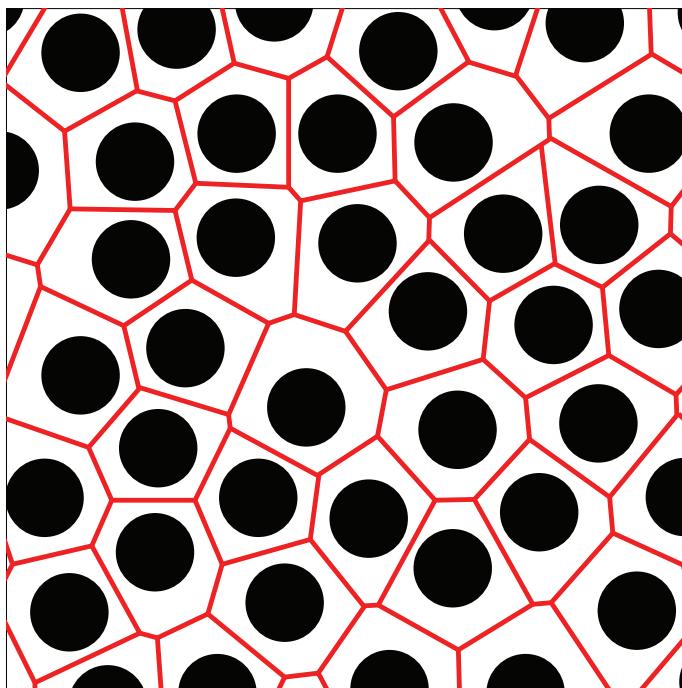
$A(i, j)$ představuje matici s obrazovými informacemi, h je velikost posunutí obrazů a K je normalizační konstanta, kterou se oba obrazy překrývají [8].

Výsledná kovarianční funkce obsahuje více morfologických informací:

- $C(0)$ odpovídá stupni pokrytí f_v
- $\sqrt{C(\infty)}$ také odpovídá stupni pokrytí f_v
- $-\left(\frac{dC(h)}{dh}\right)_{h=0}$ vypovídá o středním poloměru objektů
- monotónní průběh funkce $C(h)$ vypovídá o rovnoměrném rozložení objektů v obrazu
- maxima a minima funkce $C(h)$ a jejich poloha vypovídají o uspořádanosti struktury

2.3.4 Voronoiovské dláždění

Velmi silná morfologická metoda, použitelná pro bodové, plošné i trojrozměrné objekty. Metoda rozděluje pracovní oblast s objekty na množinu dílčích oblastí. V každé dílčí oblasti (buňce²) je právě jeden objekt. Buňky se tvoří tak, aby každý bod v buňce příslušného objektu měl k tomuto objektu kratší vzdálenost než ke kterémukoliv jinému objektu v pracovní oblasti. Příklad Voronoiovského dláždění je na obrázku 2.3 (převzato z [9]).



Obrázek 2.3: Voronoiovské dláždění.

U vytvořených buňek lze zkoumat celou řadu atributů, které poukazují na morfologii zkoumané struktury. Sledují se například rozdělení těchto atributů:

- plochy buňek
- obvody buňek
- tvarové faktory buňek
- efektivní poloměry buňek
- počet hran buňek

²někdy označované jako Wigner–Seitzovy buňky

2.3.5 „Quadrat counts“

Tato metoda poskytuje přímo příznak struktury. Struktura je tedy popsána jediným číslem. Metoda je použitelná pro bodové i plošné objekty. Dá se aplikovat i na 3D struktury, pak se označuje jako „cube counts“ [10]. Tato charakteristika je založena na počítání poměru rozptylu vzdáleností a středního počtu objektů ve čtverci náhodně umístovaném do studované oblasti [9]. Pokud jsou objekty ve struktuře rozmístěny rovnoměrně, je počet objektů v různých čtvercích přibližně stejný. Naopak struktura se shluky částic vykazuje velké rozdíly v počtu částic v různých čtvercích. Pro náhodné struktury se hodnota příznaku blíží jedné, naopak pro uspořádané struktury se hodnota blíží nule [9] [11].

2.3.6 „Chord-length distribution“

Metoda použitelná jen pro plošné objekty. Pracovní oblastí se vedou náhodné přímky a zkoumá se rozdělení délek tmavých úseček (to jsou ty, které jsou uvnitř objektů – sečny) nebo světlých úseček (to jsou ty, které nejsou uvnitř objektů). Většinou se používá distribuce „tmavých“ úseků. Výsledky metody souvisí s efektivním poloměrem objektů v pracovní oblasti.

2.3.7 Řezy

V praxi je trojrozměrná struktura komplexně zkoumána jen obtížně. Velmi často se z trojrozměrné struktury získávají řezy a na ně se uplatňují morfologické metody pro plošné objekty. Tyto výsledky pak mají přímou souvislost s celou strukturou. Např. střední hodnota stupně pokrytí mnoha řezů dává stupeň plnění celé struktury:

$$\langle f_v^{2D} \rangle \doteq f_v^{3D} \quad (2.7)$$

2.4 Teorie perkolace

Při studiu elektrických vlastností kompozitních struktur je perkolace klíčovým pojmem. Teorie perkolace je disciplína, která se zabývá tvorbou a morfologií shluků (klastrů) tvořených více částicemi. Původně se tato vědní disciplína uplatňovala při studiu zavlažování půdy vodou, kde se zkoumalo prosakování vody půdním materiélem. Dříve se, zejména pro jednoduchost, používaly modely mrížkové a zkoumala se vazbová nebo uzlová perkolace. Tato práce se však zabývá perkolací struktur nemřížkového charakteru [12].

2.4.1 Vybrané pojmy teorie perkolace

- *shluk*

Pokud je ve struktuře částice v kontaktu s jinou nebo s více jinými částicemi, tvoří tyto částice shluk (klastr).

- *perkolační práh*

Hodnota f_v , při které dochází ke kontaktnímu propojení opačných okrajů pracovní oblasti.

- *nekonečný shluk*

Shluk, který tvoří spojení opačných okrajů pracovní oblasti (z pohledu elektrické vodivosti jsou tyto okraje tvořeny elektrodami).

- *páteř*

Ty částice v nekonečném shluku, které zajišťují propojení opačných okrajů pracovní oblasti. Z pohledu elektrické vodivosti jsou to ty částice, kterými protéká proud.

- *mrtvé konce*

Nekonečný shluk tvoří páteř a mrtvé konce. Jsou to částice, které jsou ve spojení s oběma okraji pracovní oblasti, ale z pohledu elektrické vodivosti jimi neprochází proud. Ve výsledcích jsou značeny modrou barvou.

- *elastická páteř*

Jsou to částice nekonečného shluku, které tvoří nejkratší spojení obou opačných okrajů pracovní oblasti.

- *kritické vazby*

Částice, bez kterých by struktura nebyla nad perkolačním prahem – nedošlo by ke spojení opačných okrajů pracovní oblasti. Ve výsledcích jsou značeny červenou barvou.

- *paralelní větve (cykly)*

Částice páteře, jejichž odebráním není narušen perkolační práh. Ve výsledcích jsou značeny fialovou barvou.

2.4.2 Analýza nekonečného shluku

Jak je uvedeno výše, skládá se nekonečný shluk z více druhů částic. K rozklíčování částic na příslušné typy se používá **metoda hoření** [13]:

- V prvním kroku jsou vybrány startovací objekty, to jsou všechny objekty, které jsou v kontaktu s „elektrodami“. Těmto objektům je přiřazen atribut hoření, pořadí 1 a informace, odkud objekt hoří (od které „elektrody“).

- V každém dalším kroku se zjišťuje, zda je již hořící objekt v kontaktu s nehořícím objektem. Pokud ano, nový objekt získá také atribut hoření a pořadí o jedničku větší než objekt, který ho zapálil.
- Předchozí bod algoritmu končí ve chvíli, kdy už není objekt, který by bylo možné zapálit. V tuto chvíli máme k dispozici informace o tom, které objekty hoří, které nehoří, které jsou v kontaktu jen s jednou z „elektrod“. Hořící objekty, které jsou spojeny s oběma „elektrodami“, tvoří nekonečný shluk.
- Odebíráním jednotlivých objektů z nekonečného shluku získáváme informace o druhu objektů. Pokud po odebrání objektu z nekonečného shluku zůstanou ve struktuře nějaké objekty bez spojení s některou z „elektrod“, jsou označeny jako mrtvé konce. Pokud se při odebrání poruší celý shluk a dále nespojuje obě „elektrody“, je tento objekt označen jako kritická vazba. Tento proces je časově náročný.

2.5 Morfologie perkolující struktury

V této oblasti se často používají morfologické metody, které jsou užívány pro neperkolující struktury. Perkolující struktura však obsahuje mnoho dotýkajících se částic a dovoluje tak zavést nové morfologické hodnocení její struktury.

2.5.1 Počet kontaktů

Perkolující strukturu tvoří nekonečný shluk a další menší shluky. Obecně je v perkolující struktuře mnoho dotýkajících se částic. Mnohé z nich se dokonce dotýkají více dalších částic. Tento údaj lze statisticky zpracovat. Zjišťuje se tedy rozdělení počtu dotyků.

2.5.2 Počet částic v nekonečném shluku

Počet částic, které tvoří nekonečný shluk, úzce souvisí s plnícím faktorem i s tvarovým faktorem částic. Tato statistika tak může nahradit obě jmenované. Navíc lze počet částic normovat objemem a získat tak nezávislou charakteristiku.

2.5.3 Poměry jednotlivých typů částic, dle hoření

V perkolující struktuře rozlišujeme několik druhů částic:

- částice, které se neúčastní hoření, nejsou v žádném kontaktu s „elektrodami“
- částice, které jsou v kontaktu jen s jedinou „elektrodou“
- mrtvé konce
- částice hořícího cyklu
- kritické vazby páteře

Poměry počtů různých druhů částic mohou vypovídat o uspořádanosti struktury.

Kapitola 3

Cíle práce

Cílem diplomové práce bylo navrhnout a implementovat metody pro získávání počítačových modelů struktur s objekty obecných tvarů, aby byla možná jejich následná morfologická analýza včetně určování hodnot perkolačních prahů.

- *seznamení se s problematikou*

Úvod do problematiky kompozitních materiálů. Shrnutí dosavadních metod jejich modelování.

- *inovace modelů kompozitních struktur*

Inovace stávajících modelů a metod. Vytvoření nových modelů a metod.

- *morfologická analýza*

Souhrn používaných metod a jejich aplikace či modifikace na nové modely.

- *porovnání s reálnou strukturou*

Simulace pomocí programu PovRAY. Morfologické srovnání s experimentálními daty.

Kapitola 4

Implementace

4.1 Struktury s objekty obecných tvarů

4.1.1 „Nafukovací“ metoda generování struktur v oblasti perkolačního prahu

V sekci 1.6 bylo uvedeno několik algoritmů, jimiž lze generovat struktury v oblasti perkolačního prahu. Tyto metody jsou vhodné pro kruhové (případně kulové) objekty, ale u objektů obecných tvarů narážejí na implementační problémy:

- zavedení mezičásticového potenciálu pro složité tvary
- práce se zápornou difúzní zónou, která zajišťuje dotyk objektů

„Nafukovací“ metoda se skládá ze dvou dílčích kroků:

- „hard–sphere“ model
V prvním kroku je generována neperkolující struktura klasickým „hard–sphere“ modelem. Uspořádanost struktury lze tedy ovlivnit difúzní zónou.
- „nafukování“
Ve struktuře jsou náhodně vybírány objekty a je zvětšena jejich plocha (případně objem) jednoduchým přeskálováním jejich rozměrů. Tento proces lze ovlivnit dvěma parametry: maximálním počtem „nafouknutí“ jednoho objektu a koeficientem přeskálování.

Metoda vychází z principu růstu plošné tenké vrstvy, který se modeluje Monte Carlo bombardem pracovní oblasti. Částice po dopadu náhodně migrují a po kolizi s jinou

částicí vznikají ostrůvky, které se mohou dále spojovat a tvořit větší celky. Větší objekty zaujmají v pracovní oblasti větší plochu a proto je pravděpodobnější právě jejich růst. Tato skutečnost se odráží v přeskálování velikostí objektů v „nafukovací“ metodě.



Obrázek 4.1: „Nafukovací“ metoda: vlevo „hard-disk“ struktura, uprostřed po aplikaci „nafukovací“ metody, vpravo morfologie nekonečného shluku.

Vedlejším efektem metody je, že generuje rozdílně velké objekty.

4.2 Aplikační rámec

Jako programovací jazyk byl zvolen jazyk Java (minimální verze virtuálního stroje: 1.6). Java sice neposkytuje takovou rychlosť výpočtu jako komplikované jazyky, ale vzhledem k budování znovupoužitelného modelu byla vhodnou volbou. Jazyk Java je navíc multiplatformní a díky tomu lze s vytvořeným programem pracovat pod libovolným operačním systémem. V neposlední řadě nabízí nativní podporu pro vícevláknové programování.

Nad počítačovým modelem byl vystavěn aplikační rámec, umožňující jednoduchou flexibilitu a škálovatelnost modelu. Program pracuje s několika knihovnami třetích stran. Všechny jsou poskytované jako volně šířitelné (open-source):

- *Flanagan math lib*
Knihovna implementující množství užitečných matematických funkcí.
- *jYaml*
Knihovna implementující serializační formát YAML, pro univerzální export dat.
- *jMonkeyEngine*
Knihovna pro práci s OpenGL. Knihovna nabízí mnoho užitečných geometrických funkcí a rozhraní pro práci s grafickou kartou.

4.2.1 Struktura projektu

Projekt obsahuje dva hlavní balíky (obdoba jmenných prostorů v C++): balík `lib`, který v sobě zahrnuje veškeré knihovní třídy a balík `app`, ve kterém definujeme aplikace samotné. Oba hlavní balíky pak obsahují dva podbalíky definující rozměr (`dim2`, `dim3`), pro který jsou určeny.

Kompletní zdrojové kódy jsou k nalezení ve složce `src` na přiloženém DVD. Ve složce `doc` je kompletní programová dokumentace k aplikačnímu rámci.

4.2.2 Klíčové třídy a metody

Bez újmy na obecnosti se budeme věnovat pouze třídám a metodám v balíku `dim2`. Práce s třídami v balíku `dim3` je obdobná.

Základní třídou balíku `dim2` je `Composite2D`, která poskytuje veškeré potřebné metody k vytváření a analýze modelů kompozitních struktur. Definuje se velikost pracovní oblasti a šířka hranice kolem pracovní oblasti, kvůli odstínění vlivů neperiodických okrajových podmínek. Každá spustitelná třída obsahuje alespoň jeden objekt typu `Composite2D`.

Další velmi důležitou třídou v balíku `dim2` je třída `Object2D`. Je to třída, od které se dědí veškeré objekty v plošných strukturách. Obsahuje abstraktní metody, které je při tvorbě nových tvarů objektů nutno implementovat. Tato třída umožňuje práci s libovolnými objekty.

Přidání plošného objektu nového tvaru lze provést následujícím způsobem:

- *Vytvoření nové třídy, která je potomkem třídy `Object2D`*
- *Implementace a překrytí poděděných metod*

Implementací předepsaných abstraktních metod je objekt ihned připraven k použití.

4.2.3 Detekce kolizí a vzdálenost objektů

Klíčovým problémem práce s obecnými tvary objektů je vyřešení detekce jejich kolizí a vzdáleností. Tento problém je řešen diskretizací objektů na úsečky (pro plošné objekty) nebo na trojúhelníky (pro trojrozměrné objekty). Tento postup má několik výhod:

- jednoduchá programová implementace
- přenos dat z jiných programů, aplikační rámec dokáže číst .obj soubory
- volitelná přesnost (LOD)
- portování největší početní zátěže na grafickou kartu

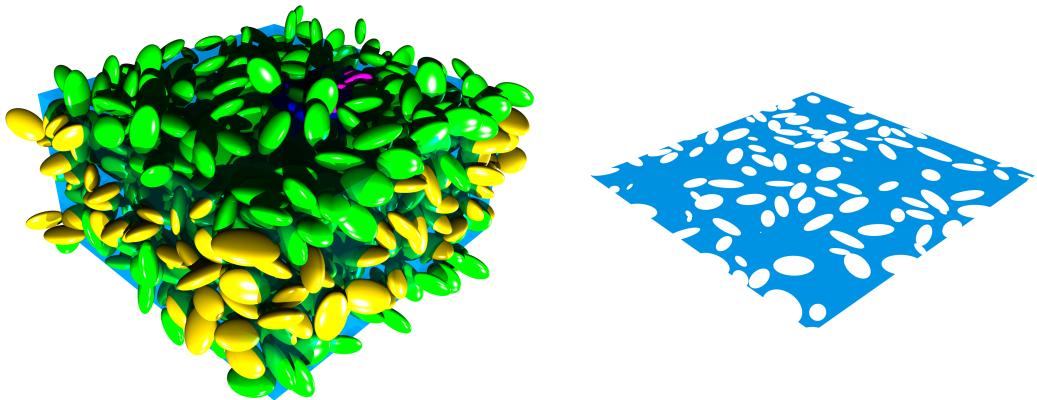
Zvláště poslední bod se jeví v dnešní době jako velká devíza. Proto je tento aplikační rámec vystavěn s knihovnou *jMonkeyEngine*, která práci s grafickou kartou zprostředkovává. V budoucnu bude možné přenést právě výpočet kolizí a vzdáleností na grafickou kartu.

O počítání kolizí a vzdáleností se pak starají metody počítačové grafiky [14].

4.2.4 Získávání řezů

Získávání řezů je důležité, neboť na ně lze aplikovat plošnou morfologickou analýzu. Určit řez analyticky pro strukturu s objekty obecných tvarů je velmi náročné a často nemožné. Proto tento aplikační rámec využívá aplikaci PovRAY, která je dostupná zdarma.

PovRAY je vizualizační nástroj s vysokou kvalitou a přesností výsledných obrazů. Ke konstrukci obrazu používá metodu sledování paprsků [14].



Obrázek 4.2: Ukázka získávání řezů pomocí programu PovRAY.

Kapitola 5

Struktury s objekty obecných tvarů

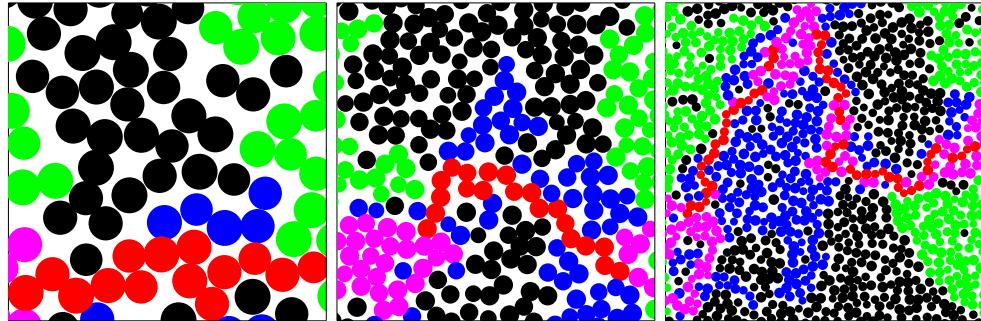
„Nafukovací“ metoda byla nejprve testována na modelech s kruhovými a kulovými částicemi a poté byla aplikována na množství dalších tvarů. Všechny hodnoty byly statisticky zpracovány, za znaménkem \pm je vždy uveden poloměr konfidenčního intervalu (hladina významnosti $90\% \Rightarrow \alpha = 0.1$) [15]. V obrázcích platí toto značení:

- *černé objekty* se neúčastní hoření, nejsou v kontaktu s žádnou z „elektrod“
- *zelené objekty* se neúčastní hoření, jsou v kontaktu pouze s jednou „elektrodou“
- *modré objekty* se účastní hoření, ale z pohledu elektrické vodivosti jimi neprotéká proud
- *fialové objekty* se účastní hoření a z pohledu elektrické vodivosti jimi protéká proud
- *červené objekty* se účastní hoření a z pohledu elektrické vodivosti jimi protéká proud, tvorí kritické vazby

Měření byla prováděna s různě velkými pracovními oblastmi a s různě velkými objekty (efektivní poloměry od 1 do 50). Velikost 2D pracovní oblasti: od 200×200 do 5000×5000 . Velikost 3D pracovní oblasti: od $200 \times 200 \times 50$ do $2000 \times 2000 \times 500$. Tyto délky jsou bezrozměrné, často se lze v literatuře setkat s tím, že je za jednotku délky brán pixel a za jednotku objemu voxel. V této práci jsou z ilustračních důvodů použity obrázky ze struktur s menší pracovní oblastí.

5.1 Plošné struktury

5.1.1 Kruhové objekty



Obrázek 5.1: Struktury v perkolačním prahu s kruhovými objekty, zleva do prava klesá poloměr objektů: 10, 5, 2.5. Pracovní oblast má rozměr 200×200 .

r_{init}	f_v	$p_{cluster}$	p_{dead}	$p_{critical}$
10	$0,703 \pm 0,002$	$0,341 \pm 0,086$	$0,356 \pm 0,039$	$0,246 \pm 0,134$
5	$0,738 \pm 0,007$	$0,265 \pm 0,067$	$0,455 \pm 0,181$	$0,147 \pm 0,109$
2,5	$0,770 \pm 0,012$	$0,241 \pm 0,091$	$0,571 \pm 0,088$	$0,139 \pm 0,160$

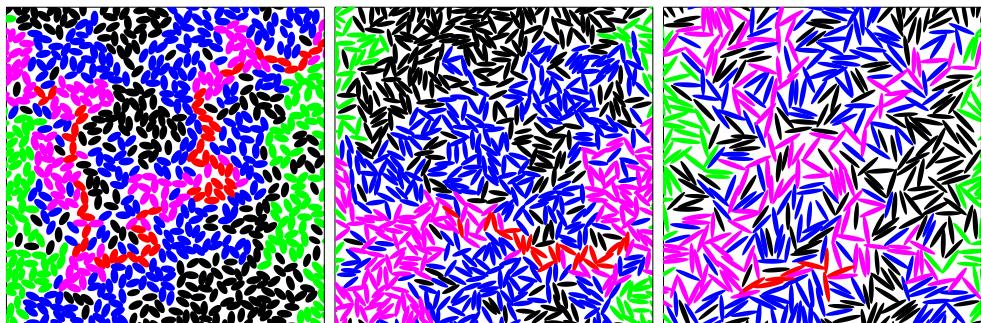
Tabulka 5.1: Závislost stupně pokrytí f_v a morfologie nekonečného shluku na výchozím poloměru kruhových objektů r_{init} , $p_{cluster}$: podíl nekonečného shluku ve struktuře, p_{dead} : podíl mrtvých konců v nekonečném shluku, $p_{critical}$: podíl kritických vazeb v nekonečném shluku. Pracovní oblast má rozměr 200×200 .

5.1.2 Eliptické objekty

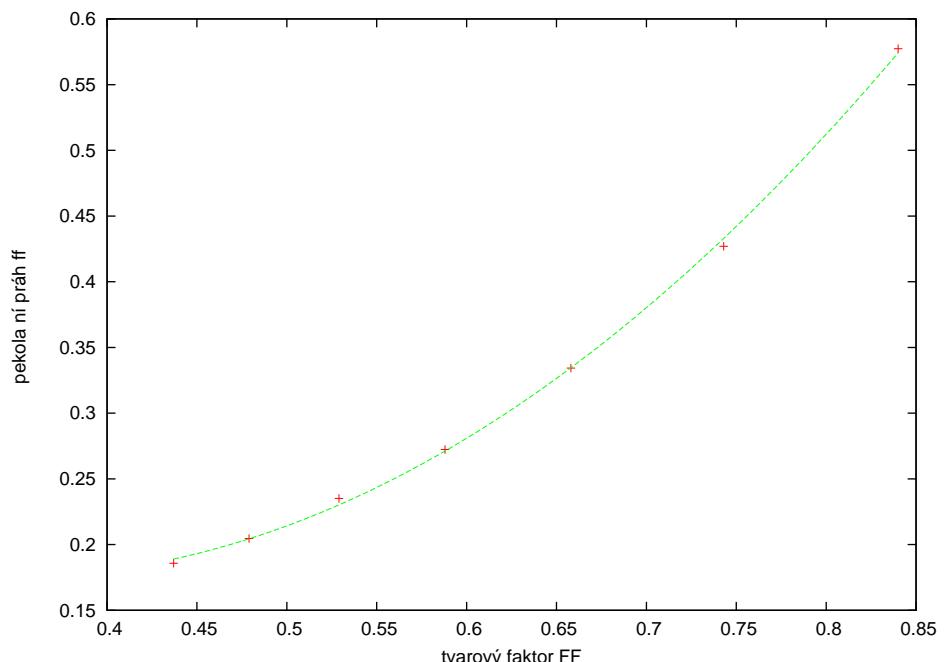
Eliptickou strukturu lze v praxi získat více způsoby. Může jít například o řez trojrozměrné struktury s elipsoidy nebo válci, může jít o deformovanou plochu s původně kruhovými inkluzemí. Opět byly zkoumány perkolační prahy a zejména jejich závislost na tvarovém faktoru použitých elips [16].

Byly generovány struktury s elipsami různých tvarových faktorů. Získané hodnoty perkolačních prahů jsou znázorněny v grafu 5.3. Tato diskrétní data byla approximována metodou nejmenších čtverců [17] na kvadratickou funkci $f_v(FF)$:

$$f_v(FF) = 1.63224(\pm 0.1095)FF^2 - 1.1287(\pm 0.1399)FF + 0.370549(\pm 0.04298) \quad (5.1)$$



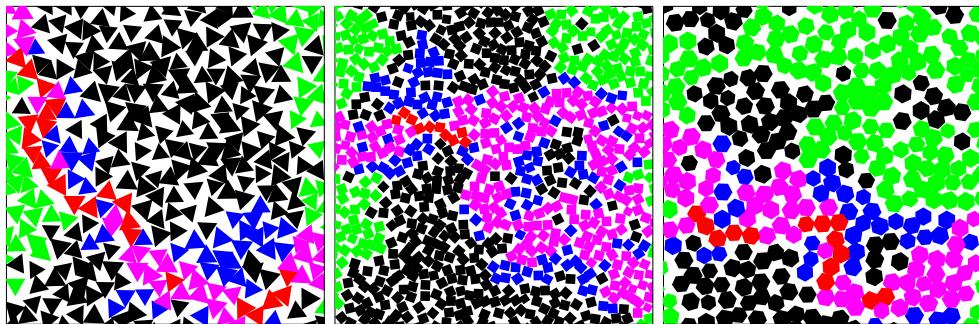
Obrázek 5.2: Struktury v perkolačním prahu s eliptickými objekty, zleva do prava roste poměr vedlejší a hlavní poloosy: $1/2$, $1/4$, $1/6$.



Obrázek 5.3: Závislost perklačního prahu na tvarovém faktoru elips: červené body dává počítačový experiment, zelená přerušovaná křivka je funkce $f_v(FF)$, která body approximuje.

5.1.3 Polygony (n-úhelníky)

Struktury s polygonálními objekty se v praxi nevyskytují tak často, ale například ZnO vytváří šestiúhelníkové ostrůvky (SK mód růstu) [18]. Ukázka těchto struktur spíše demonstруje možnosti univerzálního využití aplikačního rámce. Použité polygony nemusí být konvexní. Byly zkoumány hodnoty perkolačních prahů v závislosti na počtu vrcholů pravidelných n-úhelníků.



Obrázek 5.4: Struktury v perkolačním prahu s n-úhelníkovými objekty. Všechny n-úhelníky jsou pravidelné.

n	FF	f_v
3	0,60	$0,398 \pm 0,023$
4	0,79	$0,447 \pm 0,015$
6	0,91	$0,461 \pm 0,008$

Tabulka 5.2: Závislost stupně pokrytí f_v na počtu vrcholů pravidelného n-úhelníku.

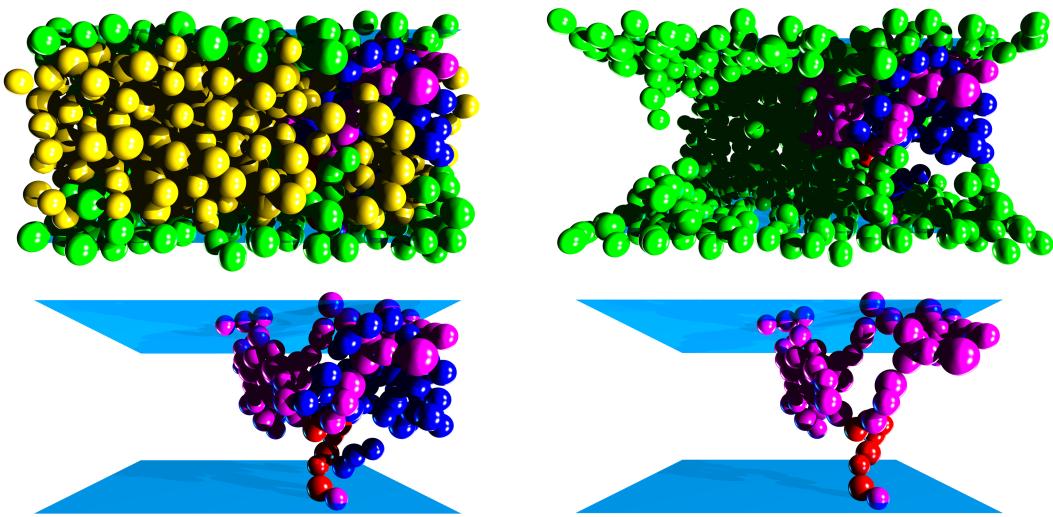
5.1.4 Diskuze

Dle grafu 5.3 lze usuzovat, že tvarový faktor objektů ovlivňuje stupeň pokrytí struktury v perkolačním prahu. Zdá se, že s klesajícím tvarovým faktorem klesá hodnota perkolačního prahu struktury. To je pravděpodobně zapříčiněno tím, že objekt nepravidelného tvaru má větší šanci na kontakt s jiným objektem.

5.2 Trojrozměrné struktury

5.2.1 Kulové objekty

Perkolační práh pro strukturu s kulovými objekty byl studován mnohokrát a díky tomu lze výsledky dosažené „nafukovací“ metodou srovnat s celou řadou dat [9] [19]. Kulové částice se také velmi často vyskytují v reálných strukturách.



Obrázek 5.5: Struktura s kulovými objekty v perkolačním prahu. Vlevo nahoře kompletní struktura, vpravo nahoře jen objekty v kontaktu s jednou z „elektrod“, vlevo dole nekonečný shluk, vpravo dole nekonečný shluk bez mrtvých konců.

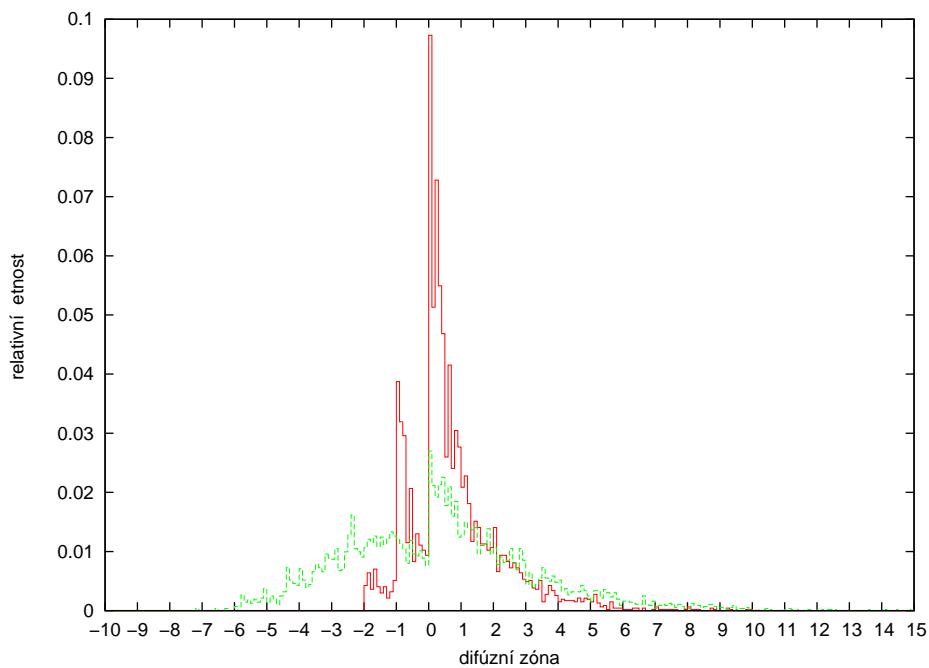
r_{init}	f_v	$p_{cluster}$	p_{dead}	$p_{critical}$
3,0	$0,384 \pm 0,011$	$0,025 \pm 0,070$	$0,554 \pm 0,108$	$0,145 \pm 0,063$
0,5	$0,411 \pm 0,032$	$0,042 \pm 0,011$	$0,571 \pm 0,095$	$0,140 \pm 0,040$

Tabulka 5.3: Závislost faktoru plnění f_v a morfologie nekonečného shluku na výchozím poloměru kulových objektů r_{init} , $p_{cluster}$: podíl nekonečného shluku ve struktuře, p_{dead} : podíl mrtvých konců v nekonečném shluku, $p_{critical}$: podíl kritických vazeb v nekonečném shluku.

Získané výsledky byly porovnány s metodami: modifikovaný „hard–sphere“ model a „soft–sphere“ model [9]:

	mod. „hard–sphere“ model	mod. „soft–sphere“ model
faktor plnění f_v	$0,432 \pm 0,006$	$0,407 \pm 0,005$
podíl páteře ve shluku	$0,050 \pm 0,013$	$0,052 \pm 0,030$
podíl mrtvých konců ve shluku	$0,950 \pm 0,013$	$0,950 \pm 0,030$
podíl kritických vazeb v páteři	$0,203 \pm 0,114$	$0,455 \pm 0,219$

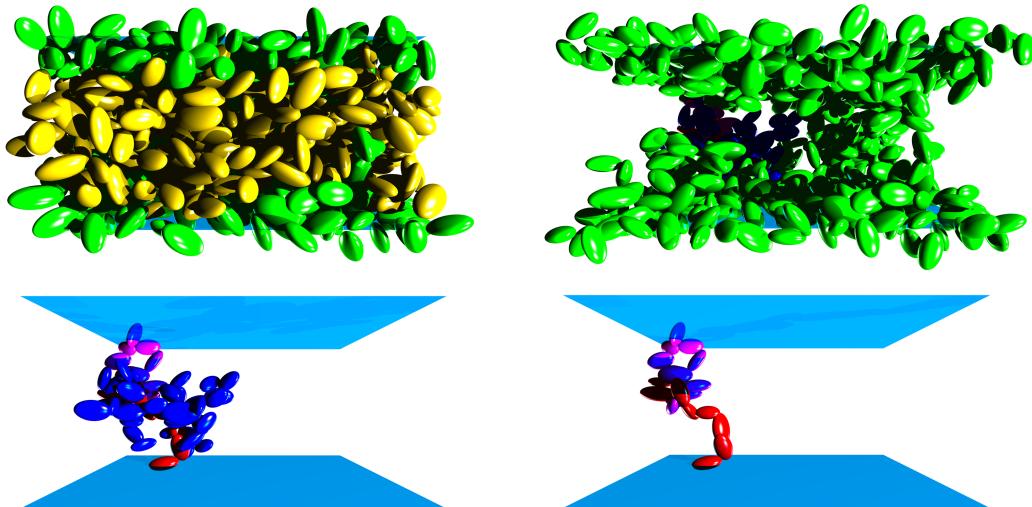
Tabulka 5.4: Závislost faktor plnění f_v a morfologie nekonečného shluku na použité metodě [9].



Obrázek 5.6: Morfologické srovnání modifikované „hard–sphere“ metody a „nafukovací metody“ pomocí DNN. Obě struktury jsou v perkolačním prahu a mají podobný faktor plnění $f_v \doteq 0,4$. Červený histogram představuje DNN struktury získané modifikovaným „hard–sphere“ modelem, zelený histogram představuje DNN struktury získané „nafukovací“ metodou. Koule byly generovány s poloměrem 25.

5.2.2 Sféroidy

Strukturu, která obsahuje sféroidy, lze získat několika způsoby, podobně jako plošné struktury s eliptickými objekty. Takový kompozit lze vytvořit deformací (tažením, stlačením) kompozitu s kulovými objekty. Dále lze sféroidy approximovat jiné útvary (např. molekuly). Byly studovány hodnoty perkolačních prahů v závislosti na tvaru sféroidů. Dále byly vytvořeny řezy různých struktur a na nich aplikována metoda kovariance. Byla zkoumána souvislost mezi kovarianční funkcí a geometrií struktury (viz příloha A).



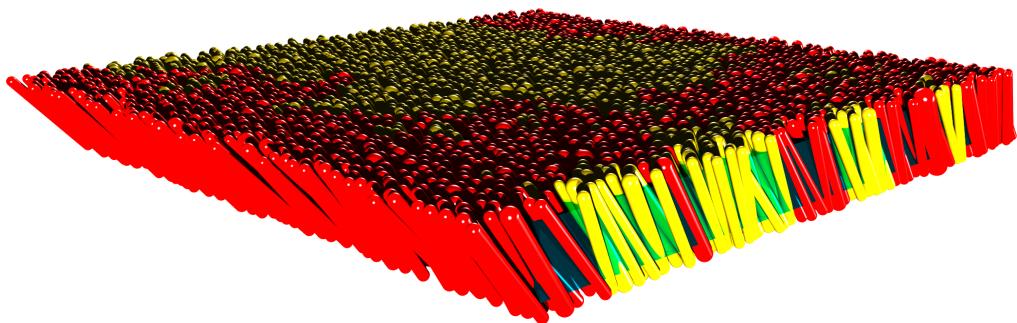
Obrázek 5.7: Struktura se sféroidy v perkolačním prahu. Vlevo nahoře kompletní struktura, vpravo nahoře jen objekty v kontaktu s jednou z „elektrod“, vlevo dole nekonečný shluk, vpravo dole nekonečný shluk bez mrtvých konců.

poměr poloos	faktor plnění f_v	poměr poloos	faktor plnění f_v
5/3/1	$0,234 \pm 0,022$	5/5/1	$0,231 \pm 0,023$
5/3/2	$0,342 \pm 0,016$	5/5/2	$0,352 \pm 0,016$
5/3/3	$0,370 \pm 0,012$	5/5/3	$0,361 \pm 0,073$

Tabulka 5.5: Závislost faktoru plnění f_v v perkolačním prahu na tvaru použitých sféroidů.

5.2.3 Válcové objekty

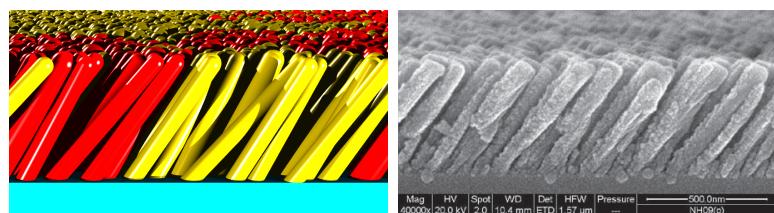
Mnoho organických materiálů má vnitřní strukturu vláknového charakteru. Taková vlákna se se dají dobře approximovat válcovými tvary. V průmyslu se hojně využívají uhlíková vlákna. Kompozity s válcovými strukturami jsou v praxi běžné. Na základě požadavků experimentátorů byl vytvořen model reprezentující molybdenovou vrstvu. Opět byly zkoumány hodnoty perklačních prahů. Tentokrát v závislosti na sklonu válců vůči podložce a v závislosti na rozptylu tohoto úhlu.



Obrázek 5.8: Struktura s válcovými objekty v perkolačním prahu.

maximální úhlová odchylka	faktor plnění f_v
0°	0, 745 ± 0, 008
5°	0, 609 ± 0, 034
10°	0, 548 ± 0, 048
15°	0, 505 ± 0, 090

Tabulka 5.6: Závislost faktoru plnění f_v v perkolačním prahu na maximální úhlové odchylce (maximální změna úhlu od původního směru).



Obrázek 5.9: Vizuální porovnání modelu a reálné struktury (Ti-plasmový polymer), převzato z [20].

5.2.4 Diskuze

Podobně jako je tomu u plošných struktur, vykazuje chování trojrozměrných struktur v perkolačním prahu podobné vlastnosti. I zde se projevuje tendence snižování hodnot perkolačního prahu se snižujícím se tvarovým faktorem (viz tabulka 5.5). Z dat v tabulce 5.6 lze usuzovat, že s rostoucí náhodností struktury opět klesá hodnota perkolačního prahu.

Kapitola 6

Závěr

Dle cílů této diplomové práce byl vytvořen počítačový program (aplikáční rámec), který umožňuje modelování kompozitních struktur s objekty velmi obecných tvarů. Aplikáční rámec byl navržen tak, aby podporoval znovupoužitelnost a škálovatelnost. Modely kompozitních struktur lze generovat v ploše i v prostoru s různými parametry a dosáhnout tak morfologicky rozličných výsledků. Generované modely pak mohou být dále zpracovávány a studovány.

Modely byly podrobeny morfologické analýze. Zejména byly studovány struktury v perkolačním prahu a jejich faktor plnění. Dále byla uplatněna metoda kovariance, která dává z řezů trojrozměrných struktur informaci o uspořádanosti a geometrii celé struktury.

Byla navržena „nafukovací“ metoda pro získávání kompozitních struktur v perkolačním prahu, která je také použitelná pro modely s objekty libovolných tvarů. Díky ní bylo možno získat hodnoty perkolačních prahů pro objekty obecných tvarů. Tato metoda je také mnohem rychlejší než dosud používané metody.

Výsledky práce byly prezentovány na mezinárodní konferenci E-MRS (European Materials Research Society) ve Strasbourgu v roce 2009 a byly přijaty k publikaci ve formě článku do časopisu Thin Solid Films (viz příloha A).

Práce nechává otevřeny dva směry, kterými by se autor rád vydal v doktorském studiu:

- *počítání na grafické kartě*

V současné době nabízejí grafické karty obrovský početní výkon, který lze využít k zrychlení výpočtů v počítačové fyzice. Vytvořený aplikáční rámec používá vhodnou geometrickou reprezentaci a je připraven pro nasazení na grafickou kartu.

- *PovRAY geometrie*

Tento program byl v práci použit pro získávání řezů a pro vizualizaci prostorových dat. Mohl by být vhodný pro studium rekonstrukce prostorových struktur z řezů a díky metodě sledování paprsku by mohl být dále vhodný pro zkoumání optických vlastností kompozitních vrstev.

Literatura

- [1] POMOGAILO, A. D., KESTELMAN, V. N. *Metallopolymer Nanocomposites*. Springer, 2005.
- [2] M. WANG. *Developing bioactive composite materials for tissue replacement. Biomaterials*, 24(13):2133–2151, 2003.
- [3] LIBRA, M. *Naprašování tenkých vrstev. Elektro*, 7(13):10–12, 2003.
- [4] LI, A., LIU, F., PETROVYKH, D. Y., LIN, J.-L., VIERNOW, J., HIMPSEL, F. J., LAGALLY, M. G. *Creation of “Quantum Platelets” via Strain-Controlled Self-Organization at Steps. Phys. Rev. Lett.*, 85(25):5380–5383, 2000.
- [5] NEZBEDA, I., KOLAFA, J., KOTRLA, M. *Úvod do molekulárních simulací*. Karolinum, Praha, 2002.
- [6] HRACH, R., ŠVEC, M., NOVÁK, S., SEDLÁK, D. *Electrical and morphological properties of composite films near the percolation threshold: models of composite structures. Thin Solid Films*, 459:174–177, 2004.
- [7] KIRKPATRICK, S., GELATT, C. D., VECCHI, M. P. *Optimization by Simulated Annealing. Science*, 220(4598):671–680, 1983.
- [8] HRACH, R. *Počítačová fyzika II*. Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, 2003.
- [9] ŠVEC, M. *Morfologické a transportní vlastnosti kompozitních struktur*. dizertační práce, MFF UK, 2006.
- [10] NOVÁK, S., HRACH, R. *Computer Study of Object Distribution in Composite Films. Materials and manufacturing processes*, 17(1):97–102, 2002.
- [11] RIPLEY, B. D. *Spatial statistics*. Wiley–IEEE, 2004.
- [12] STAUFFER, D. *Introduction to Percolation Theory*. Taylor & Francis, Washington, 1994.

- [13] HERRMANN, H. J., HONG, D. C., STANLEY, H. E. *Backbone and elastic backbone of percolation clusters obtained by the new method of 'burning'*. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 17(5):261–266, 1984.
- [14] ŽÁRA, J., BENEŠ, B., SOCHOR, J., FELKEL, P. *Moderní počítačová grafika*. Computer Press, Brno, 2004.
- [15] CIHLÁŘ, J. *Statistika*. Pedagogická fakulta v Ústí nad Labem, 1982.
- [16] BARTSCH, H. J. *Matematické vzorce*. Mladá fronta, 2000.
- [17] VICHER, M. *Numerická matematika*. Pedagogická fakulta, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, 2003.
- [18] PAUPORTÉ, T., LINCOT, D. Heteroepitaxial electrodeposition of zinc oxide films on gallium nitride. *Applied Physics Letters*, 75(24):3817–3819, 1999.
- [19] YI, Y.-B., SASTRY, A. M. *Analytical approximation of the percolation threshold for overlapping ellipsoids of revolution*. *Proc R Soc A*, 460:2353–2380, 2004.
- [20] SOLAŘ, P. *Nanostrukturované vrstvy na bázi plazmových polymerů*. diplomová práce, MFF UK, 2009.

Příloha A

Článek

Převážnou většinu výsledků uvedených v této práci shrnuje článek *Metal/dielectric composite films – particle shapes and transport propertie*, který byl přijat do tisku v časopisu *Thin Solid Films*.

ARTICLE IN PRESS

TSF-27046; No of Pages 3

Thin Solid Films xxx (2009) xxx-xxx



Contents lists available at ScienceDirect

Thin Solid Films
journal homepage: www.elsevier.com/locate/tsf



Metal/dielectric composite films – particle shapes and transport properties

Martin Švec ^{a,*}, Stanislav Novák ^a, Rudolf Hrach ^{a,b}, Daniel Máslo ^a

^a Department of Physics, Faculty of Science, J. E. Purkinje University, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, Czech Republic

^b Department of Surface and Plasma Science, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, V Holešovičkách 2, 180 00 Prague 8, Czech Republic

ARTICLE INFO

Available online xxxx

Keywords:

Composite films
Morphology
Infinite cluster
Covariance
Modelling
Monte Carlo

ABSTRACT

Physical properties of (nano)composite films can be strongly influenced by geometry of inclusions. In this contribution, we study an impact of the particle shapes to the morphological and transport properties. We use several models of the composite structures with various shapes by the help of the Monte Carlo method. These structures are analysed by methods of mathematical morphology. The theory of percolation helps us to reveal transport properties of such structures, in particular to determine the percolation threshold in light of electrical conductivity. The morphological and transport results are compared and the relationships between the geometry and transport properties are searched.

© 2009 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Composite and nanocomposite materials are of huge interest for their large scale of applications in many areas of industry and science. Their extraordinary physical properties are influenced foremost by their structural parameters [1]. In light of the transport properties of the (nano)composite materials among the main structural parameters belong the metal volume fraction, the shape of inclusions (often metallic if used as electronic devices) and their spatial distribution, in common the morphology of the structure. These parameters influence the main transport parameter called the percolation threshold. Structures near the percolation threshold embody interesting behaviour, e.g. rapid increase of electric conductivity. Therefore, it is desirable to determine this value for various types of structures.

In this contribution, we describe a self-made software tool for morphological and transport analyses of (nano)composite structures as well as results obtained by this tool applied to model structures of these materials. The morphological analysis of the structures is done on sections of composite materials, which is experimentally gainable information. The evaluation of percolation threshold together with the determination of geometry of so-called infinite cluster is done by methods of the percolation theory [3].

In our previous paper [5], we dealt with models of composite structures with spherical inclusions of constant radii. This contribution extends the shape of the inclusions to ellipsoids and studies the structure morphology and its correlation with the transport properties.

2. Models and methods

Models of composite materials were made by the Monte Carlo method. Both two-dimensional (2D) and three-dimensional (3D) models were prepared. The 2D model structures were used for a study of the transport properties because of their simplicity, easier algorithm development, and clear visualization. The model stems from principles of the hard-sphere model [5] with a slight modification when generating percolating structures – some object has to intersect each other to ensure the ohmic conductivity of the structure. The objects representing inclusions were generated to a working area of dimension ratio 1:1:0.5 for 3D structures and 1:1 for 2D structures, respectively. The size of the inclusions varies between 5 and 10 % of the working area edge length. The objects were placed subsequently to the working area with respect to the positions of objects already generated and with respect to desired structure parameters (isotropy, randomness, percolating structure).

The morphological analysis was done by the covariance method, one of several methods used in mathematical morphology [2]. This method works with two-dimensional images obtained from sections of composite materials or from models of them. Sections of real structures must be processed by known methods of image processing like binarization, filtering, etc. [2] ahead of the covariance applied to them. The output of the covariance method is a function $C(h)$, where h is a mutual shift of the same sections of the composite structure and the C value is evaluated from comparison of these sections [2]. We analysed sections of the model structures.

The transport properties were studied by methods of percolation theory. Values of the percolation thresholds of different structures were obtained by searching conductive channels in the structures during their generation. If a conductive connection between two opposite sides of the structure was found then the structure reached

* Corresponding author. Tel.: +420 475 283 221; fax: +420 475 283 563.
E-mail address: Martin.Svec@ujep.cz (M. Švec).

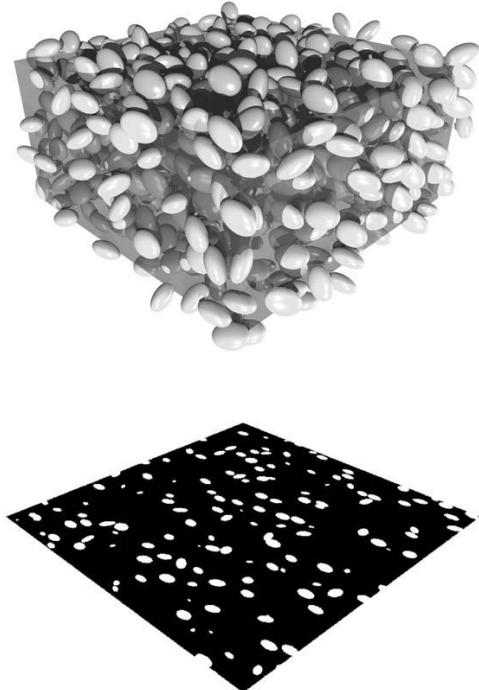


Fig. 1. Model structure of composite film (top) and section of the structure parallel to xy -plane (bottom). Inclusions are oriented randomly.

the percolation threshold. Several structures of the same kind were analysed because of the statistical reliability. The structure geometry with a view of transport properties was studied by the burning method [4]. This method enables a categorization of objects in the structure to several groups: the infinite cluster – objects connected to both electrodes, the backbone of the infinite cluster – objects involved in a current conduction, critical bonds – removal of these objects causes an electrical disconnection, cycles – removal of these objects changes the conductivity of the structure, dead-ends – objects in the infinite cluster which do not participate in conduction at all, and remaining objects – objects outside of the infinite cluster.

The burning method described in [4] had to be modified to suit the structures to be analysed. Firstly, there are many starting points of burning belonging to linear or plane electrodes. Second, the irregular percolation lattice affects determination of cycles in the infinite cluster.

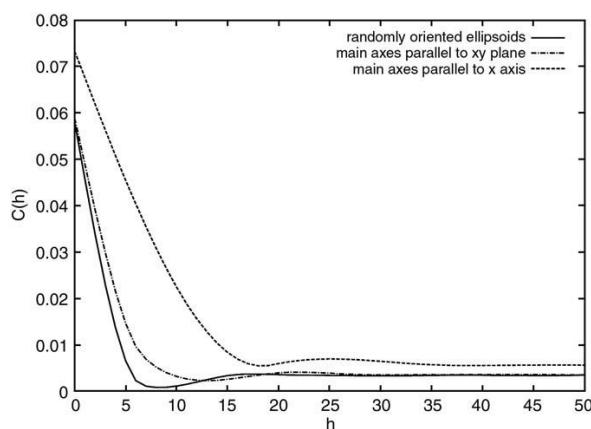


Fig. 2. Covariance function $C(h)$ taken from sections of three types of structures with ellipsoidal inclusion.

3. Results

Several model structures with requested parameters were prepared. Fig. 1 shows a 3D model structure of composite film with ellipsoidal inclusions. This structure has randomly oriented inclusions. Besides this kind of structures two types of isotropic structures were prepared: (1) ellipsoids with major axes parallel to xy -plane of the structure and (2) ellipsoids with major axes parallel to x -axis of the structure (the highest degree of isotropy).

Several sections of these structures parallel to xy -plane were processed by the covariance method and then compared. Results are shown in Fig. 2. The sections were shifted in x -axis direction. The

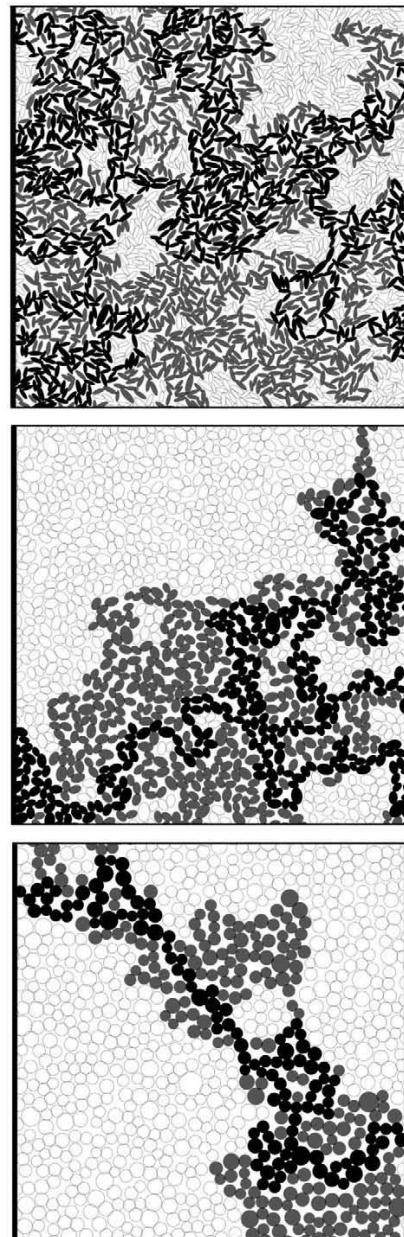


Fig. 3. Percolating structures in horizontal direction with marked backbones (black objects) and dead-ends (grey objects). Inclusions are elliptical with axes ratio 1:3 (top), 2:3 (middle) and circular (bottom).

values of $C(0)$ denote mean values of the coverage of each structure sections.

Next part of the computer experiment was devoted to the transport analysis of the model composite structures aimed to study of correlation between the shapes of inclusions and the percolation threshold of the isotropic random structures. Three shapes of inclusions were studied: circular and two elliptical with different ratios of major and minor axes (2:3 and 1:3). Fig. 3 shows examples of these structures with infinite clusters geometries depicted. The infinite clusters are formed together by the backbone (black objects) and dead-ends (grey objects). We measured the mean value of the percolation thresholds of these three types of composite structure: circular inclusions – $p = 0.71$, elliptical inclusions with minor/major axes ratio 2:3 – $p = 0.70$ and elliptical inclusions with axes ratio 1:3 – $p = 0.63$.

4. Discussion

The graphs in Fig. 2 show changing covariance function $C(h)$ with increasing isotropy of the structure. The covariance function of random structures tends to be constant more rapidly than the covariance functions of structures with some degree of anisotropy. One can see that the more ordered the structure is the slower the covariance goes to a constant value or, in other words, the minimum of the covariance function is found for larger h .

The transport analysis shows the correlation between the shape of the inclusions and the value of percolation threshold for isotropic random structures. The value of percolation threshold decreases with increasing eccentricity of inclusions. When we compare the infinite clusters or the backbones of these three types of structures (Fig. 3), we can say that with increasing eccentricity of inclusions the infinite cluster or the backbone includes more objects and they are more complex than in structures with inclusion of higher symmetry. The burning method also shows inclusions which do not affect electrical conductivity at all –

the dead-ends. Moreover, this method can analyse structure of the backbone and can divide it into critical objects (when removed from the structure, the electrical conductivity is lost) and parallel ones (when removed, the value of conductivity is affected).

5. Conclusions

From the results shown in Fig. 2 one can say that the covariance can be a usable method for spatial analysis of composite structures. It can reveal anisotropy of the structure when applied to its sections. The anisotropy information can be lost when the symmetry axis of the inclusions is perpendicular to the section plane.

The modified burning method can be used for the transport analysis of composite films with known structural parameters. By the help of this method can be analysed the conductive trajectories e.g. dealing with electrical conductivity. The computer experiment can be a helpful instrument when studying transport properties of composite structures.

Acknowledgements

This work was supported by the Ministry of Education of Czech Republic (Project LC 0641) and by the Czech Academy of Science, Project KAN101120701, and by the Ministry of Education of Czech Republic, research plan MSM0021620834.

References

- [1] P. Sheng, Phil. Mag. B 65 (1992) 357.
- [2] J. Serra, *Image Analysis and Mathematical Morphology*, Academic Press, London, 1982.
- [3] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis, London, 2003.
- [4] H.J. Hermann, D.C. Hong, H.E. Stanley, J. Phys. A: Math. Gen. 17 (1984) 261.
- [5] R. Hrach, M. Švec, S. Novák, D. Sedlák, Thin Solid Films 459 (2004) 174.

Příloha B

Struktura přiloženého DVD

- složka `src`

V této složce jsou uloženy veškeré zdrojové kódy aplikačního rámce. Každá třída i metoda má dokumentační komentář.

- složka `doc`

V této složce je kompletní programová dokumentace k vytvořenému aplikačnímu rámci. Tato dokumentace byla generována programem *javadoc* a je ve formátu HTML.

- složka `article`

V této složce je uložen článek (viz příloha A) ve formátu PDF.

- složka `data`

V této složce jsou uložena zejména obrazová data a animace modelovaných struktur.