

ORCID: 0000-0002-3164-1009

В. В. МАНЖАРА

Викладач кафедри АКІТ, ННІ ІНФОТЕХ,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, Черкаси,
Україна,
manzhara157@gmail.com

ORCID: 0000-0002-8434-1544

М. О. ПАСІЧНИЙ

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
Доцент кафедри фізики, завідувач кафедри фізики,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, Черкаси,
Україна,
pasichnyy@ukr.net

ORCID: 0000-0003-1555-3831

Н. В. СТОРОЖУК

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
Доцент кафедри фізики,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, Черкаси,
Україна,
nadushenka@ukr.net

ORCID: 0000-0001-5885-2079

Є. В. ТАТАРЧУК

Кандидат фіз.-мат. наук, доцент фізики,
Доцент кафедри фізики,
Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького, Черкаси,
Україна,
etatar@ukr.net

DOI:10.31651/2076-5851-2025-102-114

PACS: 81.05.Qk, 81.05.Je, 81.20.Ka

**ЗАСТОСУВАННЯ КОНЦЕПЦІЇ БАЛІСТИЧНИХ СТИБКІВ
ДО МОДЕЛЮВАННЯ ВИДОВЖЕНИХ НАНОСТРУКТУР**

У роботі представлено та детально обґрунтовано узагальнений теоретичний підхід до опису складних процесів нуклеації, формування та подальшої структурної еволюції анізотропних наноструктур у суттєво нерівноважних фізико-хімічних системах. В основу запропонованої концепції покладено ідею про балістичні стрибки атомів, що виникають під інтенсивним зовнішнім впливом. Зокрема, модель розрізняє два типи таких елементарних актів: внутрішньокристалічні стрибки, що зумовлюють локальну перебудову ґратки, та процеси примусового виривання атомів із поверхневих шарів кристалічної структури під дією зовнішніх факторів нетермічної природи.

Запропонована теоретична модель дозволяє встановити прямий кількісний зв'язок між макроскопічними параметрами системи та мікроскопічними механізмами розпаду пересичених розчинів, обмеженої розчинності фаз та кінетикою росту видовжених наноб'єктів. Ключовим фактором виступає анізотропна ерозія різних кристалографічних граней, що стає домінуючим процесом у мовах сильного механічного збурення, наприклад, при інтенсивному перемішуванні середовища. Такий підхід дає

зможу пояснити, чому за певних динамічних умов швидкість від'єднання структурних одиниць від різних граней стає неоднаковою, що призводить до порушення ізотропії росту та формування високоаспектних структур (нанострічок чи нанопоясів).

У межах розробленого феноменологічного опису сформульовано замкнену систему диференціальних рівнянь, призначену для комплексного аналізу еволюції ансамблю наноструктур у часі. Дана система враховує суперпозицію балістичних і термічних процесів для кожної окремої грані, що дозволяє моделювати не лише середні розміри частинок, а й динаміку зміни ступеня їхньої анізотропії. Це створює надійне підґрунтя для проведення системних кількісних досліджень впливу інтенсивності зовнішнього збурення на морфологію наноматеріалів, а також відкриває можливості для прогнозування критичних умов, за яких відбувається перехід від ізотропного до спрямованого (видовженого) росту кристалів у нерівноважних середовищах.

Ключові слова: наноструктури, метод Рунге-Кутти, кінетика структурних перетворень, нерівноважні системи, балістичні стрибки.

1. Вступ

Дослідження одновимірних наноструктур, зокрема нанострижнів, нанострічок, нанодротів, нанотрубок та нанопіп, останніми роками набули інтенсивного розвитку в багатьох галузях науки [1,2,3]. Це зумовлено тим, що такі структури є основою для створення широкого спектра функціональних матеріалів і знаходять застосування в електроніці, фотоніці, системах зберігання енергії та біомедичних технологіях. [2–4]. Подальший розвиток досліджень у цій галузі потребує розробки чисельної моделі, здатної описувати та прогнозувати умови формування наноструктур із контрольованим подовжнім ростом атомів або структурних одиниць за одночасного обмеження їхніх поперечних розмірів. Така модель має враховувати основні фізичні механізми, що визначають анізотропію росту, зокрема кінетику поверхневих процесів, дифузію та взаємодію частинок у процесі синтезу. Застосування чисельного моделювання дозволяє встановити взаємозв'язок між параметрами процесу та морфологічними характеристиками сформованих наноструктур, що створює основу для цілеспрямованого керування умовами синтезу та відтворюваного отримання нанопоясів із заданими параметрами.

Формування одновимірних нанострічок V_2O_5 є одним із найбільш ефективних підходів до подолання цих обмежень, оскільки така морфологія сприяє поліпшенню транспорту електронів і підвищенню механічної стабільності електродних матеріалів [5].

У даній статті представлено чисельну модель для опису та прогнозування процесів формування одновимірних нанострічок пентаоксиду ванадію з урахуванням умов, що визначають анізотропний ріст і обмеження поперечних розмірів наноструктур.

2. Опис моделі

Чисельний підхід до моделювання кінетики формування та еволюції ансамблів нанопоясів ґрунтується на розв'язанні замкненої системи $3N_0$ диференціальних рівнянь (1), що описують еволюцію лінійних розмірів кожної окремої частинки у трьох вимірах. Для інтегрування даної системи було застосовано класичний метод Рунге-Кутти четвертого порядку, який забезпечує високу точність обчислень та обчислювальну стійкість при аналізі тривалих часових інтервалів.

$$\begin{cases} \frac{dA_i}{d\tau} = r_a^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_c^{therm}}{C_i} - \frac{r_b^{therm}}{B_i} - \frac{r_a^{bal}}{r_a^{kinet}} J \right) \\ \frac{dB_i}{d\tau} = r_b^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_a^{therm}}{A_i} - \frac{r_c^{therm}}{C_i} - \frac{r_b^{bal}}{r_b^{kinet}} J \right) \\ \frac{dC_i}{d\tau} = r_c^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_a^{therm}}{A_i} - \frac{r_b^{therm}}{B_i} - \frac{r_c^{bal}}{r_c^{kinet}} J \right) \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & 1 \leq i \leq N_0 \\ & (x_{eq} + \Delta(t)) \left(1 - \frac{\sum_i^{N(t)} A_i B_i C_i}{\tilde{v}^{total}} \right) + \frac{\sum_i^{N(t)} A_i B_i C_i}{\tilde{v}^{total}} = \\ & = (x_{eq} + \Delta(t=0)) \left(1 - \frac{\sum_i^{N(0)} A_{i0} B_{i0} C_{i0}}{\tilde{v}^{total}} \right) + \frac{\sum_i^{N(0)} A_{i0} B_{i0} C_{i0}}{\tilde{v}^{total}} \end{aligned} \quad (2)$$

де A_i, B_i, C_i – лінійні розміри i -тої анізотропної наноструктури вздовж трьох взаємно перпендикулярних кристалографічних напрямків, $\frac{dA_i}{d\tau}, \frac{dB_i}{d\tau}, \frac{dC_i}{d\tau}$ – швидкості зміни відповідних лінійних розмірів у часі, $r_a^{kinet}, r_b^{kinet}, r_c^{kinet}$ – кінетичні складові зміни граней, що описують внесок атомного приєднання або від'єднання, $r_a^{therm}, r_b^{therm}, r_c^{therm}$ – термодинамічні складові що пов'язані з відхиленням системи від рівноважного стану, $r_a^{bal}, r_b^{bal}, r_c^{bal}$ – складові, зумовлені балістичними елементарними подіями “стрибками атомів”, Δ – пересичення.

Рівняння типу (1), запропоновані у працях [6-9], описують як термічно зумовлені процеси приєднання та від'єднання атомів (іонів), так і балістичну анізотропну ерозію різних граней, спричинену інтенсивним перемішуванням. Інтенсивність цього перемішування визначається безрозмірним параметром J .

Значення пересичення Δt обчислюється на кожному кроці по часу відповідно до рівняння (2). Нижче наведено початкові умови для обрахунків:

$$\begin{aligned} N_0 &= 200000, \\ A_0 &= B_0 = C_0 = 200, \\ \tilde{v}^{total} &= N * A_0 * B_0 * C_0 * 100. \end{aligned}$$

$\Delta(t=0) = 0.01$ – початкове пересичення. Початковий розкид розмірів атомів: $A_i = A_0 * \ln(1/random)$, $B_i = B_0 * \ln(1/random)$, $C_i = C_0 * \ln(1/random)$.

Початковий розкид лінійних розмірів частинок є важливим елементом чисельної реалізації моделі еволюції видовжених наноструктур. З метою забезпечення відтворюваності результатів та коректного порівняння різних серій чисельних обрахунків було реалізовано алгоритм збереження та повторного використання початкового розкиду розмірів. Під час ініціалізації розрахунку здійснюється перевірка наявності файлу з попередньо згенерованими початковими значеннями лінійних розмірів частинок. У разі його відсутності початковий розкид формується відповідно до співвідношень, наведених вище, після чого зберігається та використовується у подальших обчисленнях. Якщо файл із початковими значеннями вже існує, етап генерації пропускається, а відповідні дані зчитуються безпосередньо для формування масивів початкових умов.

Після задання початкових умов здійснюється чисельне моделювання еволюції ансамблю наноструктур з фіксованим кроком інтегрування за часом, заданим на початковому етапі розрахунку. Важливим параметром чисельного моделювання є вибір кроку інтегрування за часом. Загальний час моделювання становив 10^6 с, при цьому крок по часу було обрано рівним $5 \cdot 10^{-4}$. Такий вибір забезпечує компроміс між чисельною точністю та стійкістю алгоритму. Оскільки метод Рунге–Кутти четвертого порядку є чутливим до величини кроку інтегрування, його збільшення призводить до накопичення чисельної похибки та можливого розходження розв'язку, тоді як подальше зменшення

кроку суттєво підвищує обчислювальні витрати без істотного покращення точності результатів.

Під час чисельного аналізу кінетики зміни розмірів ансамблю наночастинок вважається, що частинка зникає, якщо хоча б один з її розмірів набуває нульового або від'ємного значення; при цьому загальна кількість частинок у системі зменшується на одиницю. З плином часу більшість усереднених характеристик системи – середній об'єм, середні лінійні розміри, площа поверхні та кількість частинок, що скорочується внаслідок коалесценції, – асимптотично переходять до степеневих залежностей, показники яких визначаються ступенем асиметрії ерозійних процесів і величиною інтенсивності перемішування.

У даному дослідженні представлена чисельна модель еволюції ансамблю нанопоясів із використанням концепції балістичних стрибків використовуючи метод Рунге–Кутти четвертого порядку. Основу моделювання становить система диференціальних рівнянь, яка описує кінетику росту частинок відповідно до закону збереження речовини. Модель враховує як термічні процеси приєднання та від'єднання атомів (іонів), так і балістичну анізотропну ерозію, що виникає внаслідок інтенсивного перемішування. Формальною основою є система рівнянь виду (1).

Рівняння цього типу становлять основу чисельного моделювання росту наноструктур з урахуванням як термодинамічних, так і кінетичних факторів, зокрема впливу балістичних ефектів, зумовлених зовнішнім механічним перемішуванням. Початкові умови моделювання узгоджувалися з умовами, попередньо апробованими в межах реалізації базової моделі. З метою підвищення точності та стійкості чисельних розрахунків у даному дослідженні реалізовано метод Рунге–Кутти четвертого порядку. У цьому випадку праві частини системи диференціальних рівнянь подано у вигляді функцій:

$$\begin{aligned} f_a &= r_a^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_c^{therm}}{c_i} - \frac{r_b^{therm}}{b_i} - \frac{r_a^{bal}}{r_a^{kinet}} J \right), \\ f_b &= r_b^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_a^{therm}}{a_i} - \frac{r_c^{therm}}{c_i} - \frac{r_b^{bal}}{r_b^{kinet}} J \right), \\ f_c &= r_c^{kinet} \left(\Delta - \frac{r_a^{therm}}{a_i} - \frac{r_b^{therm}}{b_i} - \frac{r_c^{bal}}{r_c^{kinet}} J \right), \end{aligned} \quad (3)$$

У рівняннях (3) a_i, b_i, c_i – значення лінійних розмірів частинки, f_a, f_b, f_c – праві частини системи диференціальних рівнянь, що визначають швидкість зміни відповідних лінійних розмірів частинки. Відповідно, чисельна реалізація методу Рунге–Кутти для змінної a_i має вигляд:

$$\begin{aligned} k_1^a &= h * f_a(t_n, a_n, b_n, c_n), \\ k_2^a &= h * f_a \left(t_n + \frac{h}{2}, a_n + \frac{k_1^a}{2}, b_n, c_n \right), \\ k_3^a &= h * f_a \left(t_n + \frac{h}{2}, a_n + \frac{k_2^a}{2}, b_n, c_n \right), \\ k_4^a &= h * f_a(t_n + h, a_n + k_3^a, b_n, c_n), \end{aligned}$$

$$a_{n+1} = a_n + \frac{1}{6} (k_1^a + 2k_2^a + 2k_3^a + k_4^a),$$

де k_1, k_2, k_3, k_4 – проміжні коефіцієнти, що обчислюються на кожному кроці інтегрування та враховують значення правої частини диференціального рівняння на початку кроку, у двох серединних точках та в кінці кроку відповідно; h – крок інтегрування за часом; t – поточний момент часу; a_n – значення лінійного розміру a на n -му кроці інтегрування; $f a$ – функція правої частини відповідного диференціального рівняння, що визначає швидкість зміни змінної a ,

Аналогічні вирази застосовано до змінних b_i та c_i . При цьому, в рамках моделювання передбачається, що як тільки один з лінійних розмірів частинки досягає нуля або стає меншим за нього, така частинка вважається зниклою, а загальна кількість частинок в ансамблі зменшується. У процесі моделювання спостерігається поступове виходження усереднених характеристик системи – таких як середній об'єм, розміри, площа поверхні, концентрація та кількість частинок – на степеневі залежності від часу. Показники цих залежностей є функціями асиметрії ерозійного механізму та інтенсивності перемішування.

Отримані степеневі залежності порівнювалися з результатами, здобутими при використанні методу Ейлера, з метою оцінки точності нової чисельної схеми. При цьому вихідні параметри, які характеризують середній об'єм частинки (v), її лінійні розміри (a, b, c), пересичення (Δ), кількість частинок (n) та повну площу поверхні (p), були збережені відповідно до попередньої моделі та адаптовані під умови методу Рунге–Кутти для забезпечення більш точного аналізу.

З метою опису утворення видовжених наноструктур також було застосовано феноменологічну теорію перекристалізації, доповнену анізотропними нетермічними (балістичними) частотами від'єднання структурних одиниць від різних граней у процесі інтенсивного перемішування. На відміну від попередніх робіт, чисельна реалізація цього підходу базується саме на методі Рунге–Кутти.

3. Результати та обговорення

Результати комп'ютерного моделювання показали узгодженість з експериментальними спостереженнями, зокрема щодо високого ступеня витягнутості нанопоясів після тривалого механічного впливу та майже лінійної залежності середньої довжини нанопоясів від інтенсивності перемішування. Показники степеневих залежностей середнього об'єму частинки v , лінійних розмірів a, b, c , пересичення d , кількості частинок n та повної площі поверхні p , наведені в таблицях 1 та 2 і, відповідно, у таблицях 3 та 4, але для іншого значення пересичення d .

Таблиця 1

Асимптотичні показники степеневих залежностей середніх по ансамблю величин об'єму частинки v , лінійних розмірів (a, b, c), пересичення d , кількості частинок n в ансамблі та повної площі p .

$$\text{Параметри: } r_a^{therm} = r_b^{therm} = r_c^{therm} = 1, \quad r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, \\ r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1.$$

Table 1

Asymptotic indicators of power dependencies averaged over the ensemble of particle volume v , linear dimensions (a, b, c), supersaturation d , number of particles n in the ensemble, and total area p .

$$\text{Parameters: } r_a^{therm} = r_b^{therm} = r_c^{therm} = 1, \quad r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, \\ r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1.$$

	j=0	j=0.002	j=0.008
v	2,58013	1,22496	1,17491
a	0,20127	0,38366	0,38931
b	0,40174	0,37843	0,38642
c	0,39585	0,37736	0,38978
d	- 1,21464	- 0,21898	- 0,08992
n	- 2,51365	- 1,16685	- 1,07873
p	- 0,85038	- 0,37522	- 0,29668

Таблиця 2

Асимптотичні показники степеневих залежностей усереднених по ансамблю величин об'єму частинки v , лінійних розмірів (a, b, c) , пересичення d , кількості частинок n в ансамблі та повної площі p . Параметри: $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Table 2

Asymptotic indicators of power dependencies of ensemble averages of particle volume v , linear dimensions (a, b, c) , supersaturation d , number of particles n in the ensemble, and total area p . Parameters: $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

	j=0	j=0.002	j=0.008
v	1,17518	1,37701	1,68589
a	0,38597	0,74357	0,98874
b	0,38511	0,31315	0,35278
c	0,38652	0,30718	0,35632
d	- 0,40395	- 0,16478	- 0,03358
n	- 1,12542	- 1,32979	- 1,62779
p	- 0,34588	- 0,36458	- 0,33963

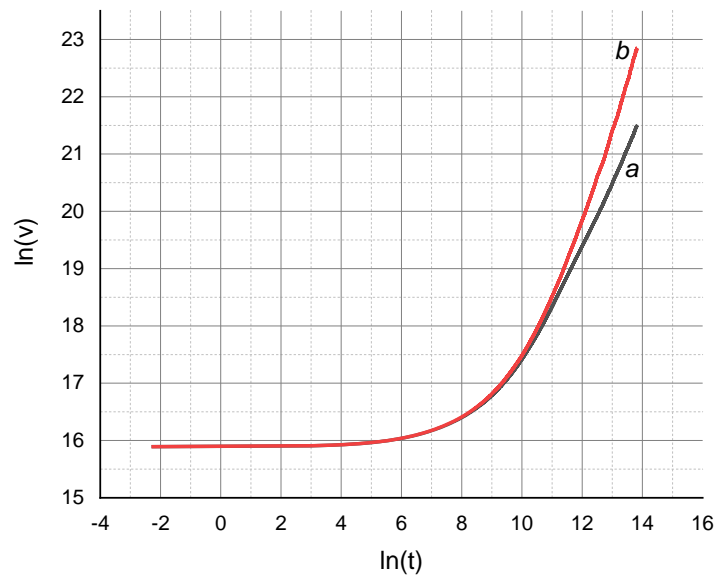


Рис. 1. Залежність середньої величини об'єму частинки v від часу, при параметрах $j=0.008$, а) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$, б) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Fig. 1. Dependence of the average particle volume v on time, with parameters $j=0.008$, а) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$, б) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

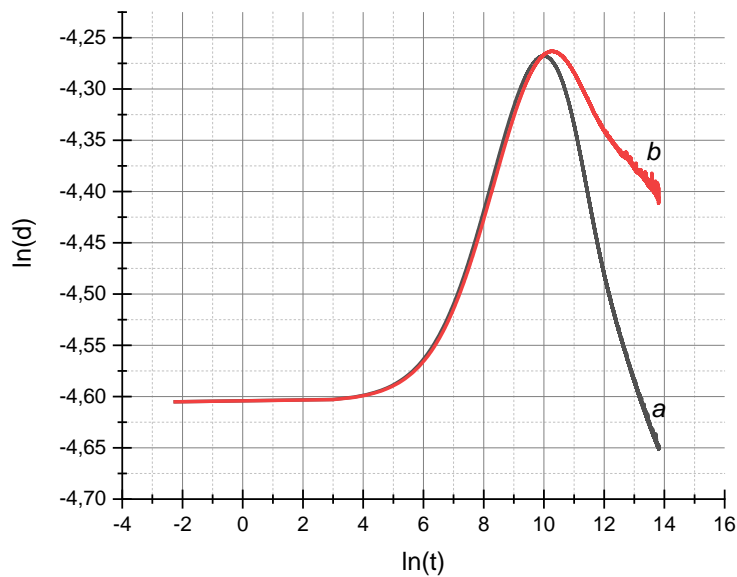


Рис. 2. Залежність середньої величини пересичення d від часу, при параметрах $j=0.008$, а) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} =$

$$1, r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1, b) r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = \frac{1}{2}; r_b^{bal} = \sqrt{2}; r_c^{bal} = \sqrt{2}.$$

Fig. 2. Dependence of the average oversaturation value d on time, with parameters $j=0.008$, a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$, b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = \frac{1}{2}; r_b^{bal} = \sqrt{2}; r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

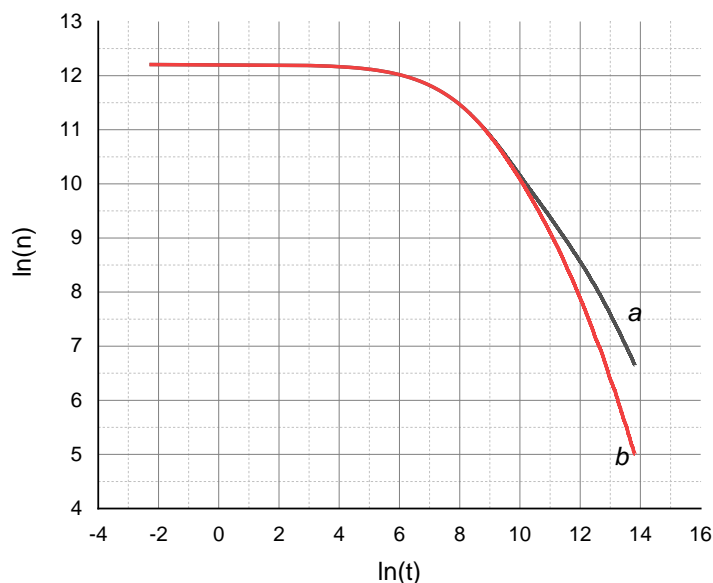


Рис. 3. Залежність величини кількості частинок n від часу, при параметрах $j=0.008$, a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$, b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = \frac{1}{2}; r_b^{bal} = \sqrt{2}; r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Fig. 3. Dependence of the number of particles n on time, with parameters $j=0.008, j=0.008$, a) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$, b) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1, r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1, r_a^{bal} = \frac{1}{2}; r_b^{bal} = \sqrt{2}; r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

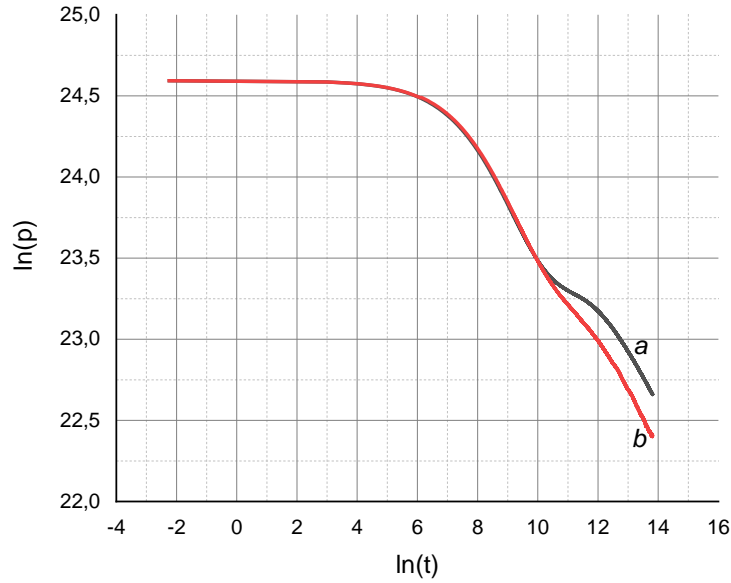


Рис. 4. Залежність величини повної площі частинок p від часу, при параметрах $j=0.008$, а) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$, б) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Fig. 4. Dependence of the total particle area p on time, with parameters $j=0.008$,

а) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$, б) $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

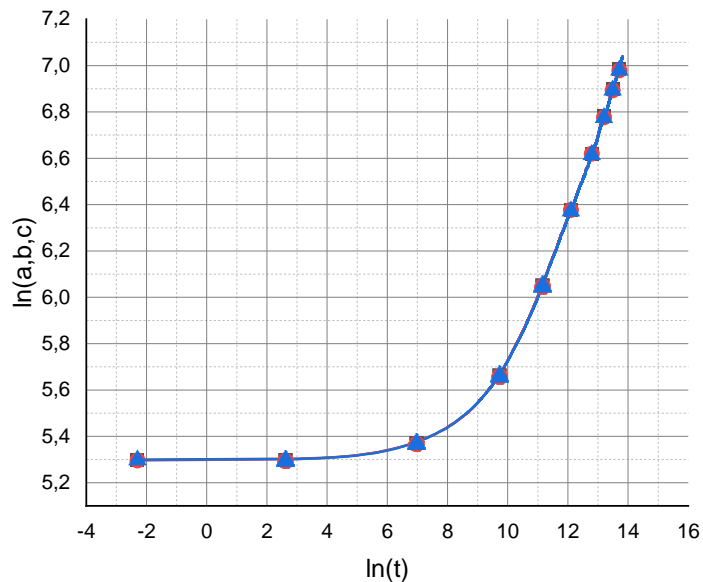


Рис. 5. Залежність середніх величин частинок (a,b,c) від часу, при параметрах $j=0.008$, $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$.

Fig. 5. Dependence of average particle sizes (a, b, c) on time, with parameters $j=0.008$, $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = r_b^{bal} = r_c^{bal} = 1$.

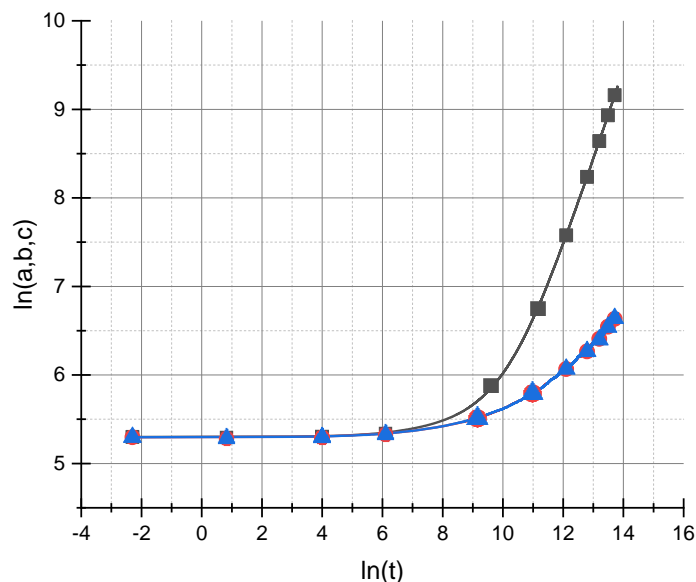


Рис. 6. Залежність середніх величин частинок (a, b, c) від часу, при параметрах $j=0.008$, $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Fig. 6. Dependence of average particle sizes (a, b, c) on time, with parameters $j=0.008$, $r_a^{therm} = r_b^{herm} = r_c^{herm} = 1$, $r_a^{kinet} = r_b^{kinet} = r_c^{kinet} = 1$, $r_a^{bal} = \frac{1}{2}$; $r_b^{bal} = \sqrt{2}$; $r_c^{bal} = \sqrt{2}$.

Для аналізу експериментальних даних та визначення характеру часової еволюції досліджуваної системи було використано логарифмічне представлення змінних. Зокрема, будувались графіки залежності $\ln(t)$ від $\ln(q)$ де t – час спостереження, q – відповідний вимірюваний параметр системи (a, b, c, v, d, n, p). Оскільки на початковому етапі еволюції система перебуває під впливом початкових умов і не досягає стаціонарного режиму, початкова ділянка даних не використовувалась для апроксимації. З метою мінімізації впливу перехідних процесів аналіз здійснювався лише на кінцевій частині часових рядів, де система виходить у стаціонарний режим. Повний набір даних охоплював діапазон значень $\ln(t)$ від 0 до 14. Для апроксимації було відібрано лише піддіапазон $12 \leq \ln(t) \leq 14$, що відповідає виходу системи на стаціонарний режим. Дані з області $\ln(t) < 12$ були виключені з аналізу. Для кожного експериментального набору будувались окремі графіки в зазначеному інтервалі, після чого здійснювалась лінійна апроксимація методом найменших квадратів із використанням стандартної процедури обрахунку.

5. Висновки

Механізми формування анізотропних наноструктур досліджено в межах нової феноменологічної моделі перекристалізації, що базується на концепції балістичних (нетермічних) стрибків. Модель враховує анізотропну ерозію та частоти від'єднання

атомів від різних кристалографічних граней в умовах інтенсивного механічного впливу. Для підвищення точності та стійкості розрахунків чисельну схему було вдосконалено шляхом переходу від методу Ейлера до методу Рунге–Кутти четвертого порядку.

Такий підхід забезпечив надійний опис кінетики зміни лінійних розмірів частинок, динаміки пересичення та еволюції ансамблю наноструктур у часі, зокрема в області асимптотичних степеневих залежностей. Результати моделювання добре узгоджуються з експериментальними даними: підтверджено формування нанопоясів із високим ступенем видовження та встановлено майже лінійну залежність їхньої середньої довжини від інтенсивності перемішування. Запропонована методика може бути ефективно використана для теоретичного аналізу та оптимізації умов синтезу подібних об'єктів.

Подяки

Статтю написано в межах виконання прикладного наукового дослідження «Гідромеханічний синтез наноструктурного пентаоксиду ванадію та дослідження його властивостей» (№ державної реєстрації 0125U001491).

Список використаної літератури:

1. Wang G. One-Dimensional Nanostructures As Electrode Materials For Lithium-Ion Batteries With Improved Electrochemical Performance / G.Wang, X.Shen, J.Yao // *Journal of Power Sources*. – 2009. – Vol. 189, No 1. – P. 543-546. –Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2008.10.044>
2. Xia Y.N. One-Dimensional Nanostructures: Synthesis, Characterization, And Applications / Y.N.Xia, P.D.Yang, Y.G.Sun, Y.Y.Wu, B.Mayers, B.Gates, Y.D.Yin, F.Kim, H.Q.Yan // *Advanced Materials*. – 2003. – Vol. 15. – P. 353-389. –Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/adma.200390087>
3. Dasgupta N.P. 25th Anniversary Article: Semiconductor Nanowires – Synthesis, Characterization, And Applications / N.P.Dasgupta, J.Sun, C.Liu, S.Brittman, S.C.Andrews, J.Lim, P.Yang // *Advanced Materials*. – 2014. – Vol. 26, No 14. – P. 2137-2184. –Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/adma.201305929>
4. Wang Z.L. Nanobelts, Nanowires, And Nanodiskettes Of Semiconducting Oxides – From Materials To Nanodevices / Z.L.Wang // *Advanced Materials*. – 2003. – Vol. 15. – P. 432-436. –Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/adma.200390100>
5. Niu C. Self-Template Processed Hierarchical V₂O₅ Nanobelts As Cathode For High Performance Lithium Ion Battery / C.Niu, J.Li, H.Jin, H.Shi, Y.Zhu, W.Wang, M.Cao // *Electrochimica Acta*. – 2015. – Vol. 182. – P. 621-628. –Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2015.09.113>
6. Gusak A.M. Application Of Ballistic Jumps Concept To Formation Of Non-Equilibrium Anisotropic Structures And To Severe Plastic Deformation / A.M.Gusak, Y.I.Huriev, D.S.Gertsricken // *Cherkasy University Bulletin: Physical And Mathematical Sciences*. – 2020. – No 1. – P. 3-16. –Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2020-1-3-16>
7. Gusak A.M. Anisotropic Nucleation, Growth And Ripening Under Stirring – A Phenomenological Model / A.M.Gusak, Y.Huriev, J.W.Schmelzer // *Entropy*. – 2020. – Vol. 22. – P. 1254. –Режим доступу: <https://doi.org/10.3390/e22111254>
8. Gusak A.M. Elementary Models Of The “Flux Driven Anti-Ripening” During Nanobelt Growth / A.M.Gusak, Y.I.Huriev, O.I.Malyi, Y.Tang // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2020. – Vol. 22, No 17. – P. 9740-9748. –Режим доступу: <https://doi.org/10.1039/C9CP06337D>

9. Коломієць Д. І. Синтез нанопоясків оксиду ванадію та використання концепції балістичних стрибків для опису їх утворення / Коломієць Д. І., Пасічний М. О // Вісник Черкаського університету: Серія «Фізико-математичні науки». – 2021. – №1. – С. 12–31. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-12-31>

References:

1. Wang G., Shen X., Yao J. (2009) One-dimensional nanostructures as electrode materials for lithium-ion batteries with improved electrochemical performance. *Journal of Power Sources*, 189, 543–546. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2008.10.044>
2. Xia Y.N., Yang P.D., Sun Y.G., Wu Y.Y., Mayers B., Gates B., Yin Y.D., Kim F., Yan H.Q. (2003) One-dimensional nanostructures: Synthesis, characterization, and applications. *Advanced Materials*, 15, 353–389. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1002/adma.200390087>
3. Dasgupta N.P., Sun J., Liu C., Brittan S., Andrews S.C., Lim J., Yang P. (2014) 25th anniversary article: Semiconductor nanowires – synthesis, characterization, and applications. *Advanced Materials*, 26, 2137–2184. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1002/adma.201305929>
4. Wang Z.L. (2003) Nanobelts, nanowires, and nanodiskettes of semiconducting oxides – from materials to nanodevices. *Advanced Materials*, 15, 432–436. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1002/adma.200390100>
5. Niu C., Li J., Jin H., Shi H., Zhu Y., Wang W., Cao M. (2015) Self-template processed hierarchical V_2O_5 nanobelts as cathode for high performance lithium ion battery. *Electrochimica Acta*, 182, 621–628. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2015.09.113>
6. Gusak A.M., Huriev Y.I., Gertsricken D.S. (2020) Application of ballistic jumps concept to formation of non-equilibrium anisotropic structures and to severe plastic deformation. *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, 1, 3–16. – Retrieved from: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2020-1-3-16>
7. Gusak A.M., Huriev Y., Schmelzer J.W. (2020) Anisotropic nucleation, growth and ripening under stirring – a phenomenological model. *Entropy*, 22, 1254. – Retrieved from: <https://doi.org/10.3390/e22111254>
8. Gusak A.M., Huriev Y.I., Malyi O.I., Tang Y. (2020) Elementary models of the “flux driven anti-ripening” during nanobelt growth. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22, 9740–9748. . – Retrieved from: <https://doi.org/10.1039/C9CP06337D>
9. Kolomiets D.I., Pasichnyi M.O. (2021) Synthesis of nanobelts of vanadium oxide and use of the concept of ballistic jumps to describe their formation. *Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences*, 1 (1), 12–31. – Retrieved from: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-12-31>

V. V. MANZHARA

Lecturer of the Department of ACIT,

The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
manzhara157@gmail.com

M. O. PASICHNYY

Candidate of physical and mathematical sciences,

associate professor, Head of the Department of Physics,
The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
pasichnyy@ukr.net

N. V. STOROZHUK

Candidate of physical and mathematical sciences, associate professor,
The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine,
nadushenka@ukr.net

E. V. TATARCHUK

Candidate of physical and mathematical sciences, associate professor,
The Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Cherkasy, Ukraine
etatar@ukr.net

APPLICATION OF THE CONCEPT OF BALLISTIC JUMPS TO MODELING OF ELONGATED NANOSTRUCTURES

DOI:10.31651/2076-5851-2025-102-114

PACS: 81.05.Qk, 81.05.Je, 81.20.Ka

*This paper proposes and theoretically substantiates a generalized approach to describing the processes of nucleation, formation, and structural evolution of anisotropic nanostructures in strongly nonequilibrium physicochemical systems. The concept is based on the idea of ballistic (non-thermal) atomic jumps arising under intense external *воздеїствія*. Two types of elementary events are distinguished: intracrystalline jumps leading to local lattice rearrangement, and forced detachment of atoms from surface layers of a crystal under external driving forces.*

The model establishes a quantitative relationship between macroscopic system parameters and microscopic mechanisms governing the decomposition of supersaturated solutions, limited phase solubility, and the growth kinetics of elongated nano-objects. Under conditions of strong mechanical perturbation, anisotropic erosion of crystallographic facets becomes the dominant mechanism. This results in different detachment rates of structural units from various facets and, consequently, in the formation of high-aspect-ratio structures such as nanoribbons and nanobelts.

Within the developed phenomenological framework, a closed system of differential equations is formulated that accounts for the superposition of ballistic and thermal processes for each crystallographic facet. This makes it possible to model not only the evolution of average particle sizes but also the dynamics of their anisotropy and the transition from isotropic to directed growth.

The numerical integration scheme was improved by replacing the Euler method with the fourth-order Runge–Kutta method, which significantly enhanced computational accuracy and stability. The obtained results adequately describe the kinetics of particle growth, supersaturation dynamics, and asymptotic power-law behavior. The simulation results are in good agreement with experimental data: the formation of highly elongated nanobelts is confirmed, and an almost linear dependence of their average length on the stirring intensity of the medium is established. The proposed approach can be effectively applied to the theoretical analysis and optimization of synthesis conditions for anisotropic nanostructures.

Keywords: nanostructures, Runge-Kutta method, kinetics of structural transformations, non-equilibrium systems, ballistic jumps.

Одержано редакцією 22.08.2025
Прийнято до друку 18.09.2025

Опубліковано 24.12.2025