

OPTIMALIZACJA GEOMETRII NANORUREK TiO_2 PRZY UŻYCIU ROZMYTEGO SYSTEMU WNIOSKOWANIA

SYLWIA SOBIESZCZYK

POLITECHNIKA GDAŃSKA, WYDZIAŁ MECHANICZNY,
NARUTOWICZA 11/12, 80-952 GDAŃSK, POLSKA
MAILTO: SSOBIESZ@PG.GDA.PL

Streszczenie

Opracowano metodę wnioskowania rozmytego do określenia geometrii warstwy nanorurek TiO_2 na podłożu tytanowym, wytworzonej metodą elektrochemiczną. Zaproponowana metoda umożliwi optymalizację warstwy tlenkowej poprzez dobór odpowiednich parametrów procesu anodyzowania. Zaprojektowano i przeprowadzono symulację działania sterownika rozmytego (FLC) za pomocą oprogramowania Matlab. [Inżynieria Biomateriałów, 89-91, (2009), 77-78]

Wprowadzenie

Tytan oraz stopy tytanu pokryte nanorurkową warstwą tlenkową są bardzo interesującym materiałem do zastosowań biomedycznych, ze względu na doskonałe własności fizyczne i chemiczne, jak i biogodność [1-3]. Ponadto, warstwy TiO_2 na powierzchni Ti posiadają również szereg funkcjonalnych własności dla zastosowań fotoelektronicznych, fotokatalitycznych i jako czujniki gazowe. Skuteczność nanowarstwy TiO_2 zależy od geometrii oraz obszaru powierzchni nanorurek. Nanorurkowa warstwa tlenku może być bezpośrednio wytworzona na powierzchni tytanu za pomocą metod takich, jak anodowe utlenianie w roztworach fluorków [4]. Do formowania nanorurkowej warstwy TiO_2 używa się głównie elektrolitów: roztwory HF/H_2SO_4 , roztwory kwasu chromowego i HF , roztwory $NH_4F/(NH_4)_2SO_4$ oraz roztwory H_3PO_4/HF [1,2,4]. Struktura nanorurkowej warstwy tlenku na powierzchni tytanu zależy od warunków wytwarzania, takich jak zastosowane napięcie, pH elektrolitu oraz czas anodowego utleniania. Geometria warstwy nanorurek TiO_2 może być sterowana za pomocą doboru optymalnych parametrów procesu anodowego utleniania tytanu.

Metodyka badań

Rozmyty system wnioskowania jest skuteczną metodą służącą do ustalenia związków pomiędzy wielkościami wejściowymi i wyjściowymi bez użycia modeli matematycznych [5]. Przestrzeń zbiorów wejściowych została ustalona na podstawie danych z literatury [3,4]. Jako zmienne wejściowe przyjęto napięcie prądu anodowego utleniania ($0V \div 25V$) oraz czas anodowania ($0 \div 12h$). Rozmyte zbiory wyjściowe to: średnica nanorurki ($0 \div 120nm$) oraz długość nanorurki ($0 \div 1200nm$), otrzymane na podstawie badań eksperymentalnych przeprowadzonych przez Bauer'a et al. [3]. Przestrzeń wejściowa i wyjściowa zostały podzielone na zbiory rozmyte, którym nadano nazwy lingwistyczne: "bardzo mały (VS), mały (S), średni (M), duży (L), bardzo duży (VL)". Rozmyta baza reguł odpowiada podziałowi przestrzeni wejściowej oraz wyjściowej i składa się z 15 reguł rozmytych łączących odpowiednie parametry wejściowe oraz wyjściowe, wprowadzane następnie do środowiska oprogramowania Matlab, Fuzzy Toolbox [5]. Reguły w postaci zdań warun-

OPTIMALIZATION OF TiO_2 NANOTUBE GEOMETRY USING FUZZY REASONING APPROACH

SYLWIA SOBIESZCZYK

GDANSK UNIVERSITY OF TECHNOLOGY,
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING,
11/12 NARUTOWICZA STR., 80-952 GDANSK, POLAND
MAILTO: SSOBIESZ@PG.GDA.PL

Abstract

The geometry of TiO_2 nanotube layer on titanium, obtained by electrochemical anodization, has been determined by using fuzzy reasoning approach. A proposed method showed the possibility of nanotube array architecture optimization by choosing an appropriate anodization conditions. A fuzzy logic controller (FLC) was utilized using Matlab Software. [Engineering of Biomaterials, 89-91, (2009), 77-78]

Introduction

Titanium and titanium alloys covered with nanotubular oxide layers are very interesting materials for high performance implants, because they have excellent physical and chemical properties as well as biocompatibility [1-3]. Furthermore, TiO_2 layers possesses a variety of functional properties for gas sensing, photoelectronics, and photocatalysis applications. The efficiency of TiO_2 nanotubular layer depends on the geometry and surface area of nanotubes. The nanotubular oxide layer can be grown directly by cost-effective method such as electrochemical anodization of titanium in fluoride electrolytes [4]. Various electrolytes have been used to form TiO_2 nanotube arrays, such as HF/H_2SO_4 , chromic acid/ HF , $NH_4F/(NH_4)_2SO_4$ and H_3PO_4/HF mixtures [1,2,4]. The structure of nanotubular oxide layer on titanium substrate depends on fabrication conditions, like applied potential, pH value of electrolyte, and anodization time. The geometry of TiO_2 nanotube layer can be controlled by choosing optimal parameters of anodization process.

Material and methods

Fuzzy reasoning approach is an efficient method to establish the relationships between an input and an output without the need of complex mathematical models [5]. Domains of input sets have been drawn from previous work [3,4]. As input variables the applied potential ($0V \div 25V$) and anodization time ($0 \div 12h$) have been chosen. Fuzzy output sets are: the nanotube diameter ($0 \div 120nm$), and tube length ($0 \div 1200nm$), based on experimental results presented by Bauer et al. [3]. Input and output space have been divided into fuzzy triangular and trapezoidal sets, with linguistic names given: "very small (VS), small (S), medium (M), large (L), very large (VL)". The rule base corresponds to division of input and output space. It consists of 15 rules linking input values with output for certain parameters, which were introduced into Matlab environment, Fuzzy Toolbox [5]. Rules in the form "if – then" can be presented as decision table (TAB.1). For resultant output values of tube diameter and tube length, the center of gravity defuzzification method was used [5].

kowych „if-then” zostały przedstawione jako tabela decyzyjna (TAB.1). W celu określenia wynikowych wartości system rozmytego wykorzystano metodę wyostrzenia środka ciężkości [5].

Wyniki badań i dyskusja

Na RYS.1 pokazano wyniki wnioskowania rozmytego dla wybranych wartości wielkości wejściowych. Po przeprowadzeniu procesu wyostrzenia wybrano jedną wartość, która odpowiada wartościom wielkości wejściowych. Jako przykład, dla wybranych wartości zmiennych wejściowych zastosowanego napięcia 10V oraz czasu anodowania 2h, otrzymano w wyniku przeprowadzonych symulacji wartości zmiennych wyjściowych średnicę nanorurki TiO_2 53,5nm oraz długość nanorurki 600nm. Zwiększenie napięcia prądu anodowania do 20V umożliwiło uzyskanie nanorurki o średnicy 93nm oraz długości 970nm. Wyniki przeprowadzonych symulacji są zgodne z wynikami otrzymanymi za pomocą badań eksperymentalnych przez Bauera i in. [3].

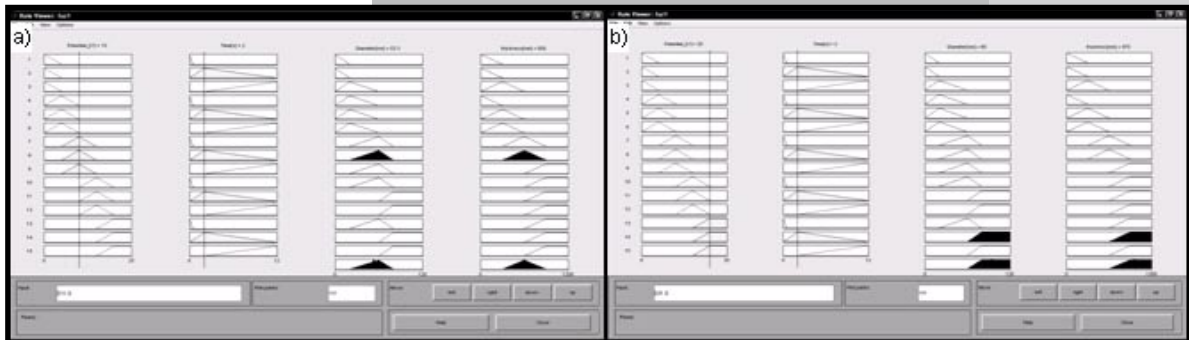
| Wejście rozmyte Fuzzy input | | | Wyjście rozmyte Fuzzy output | | |
|--------------------------------|--|--------|---------------------------------|--|----------|
| V is VS | | t is S | ϕ is VS | | th is VS |
| V is VS | | t is M | ϕ is VS | | th is VS |
| V is VS | | t is L | ϕ is S | | th is S |
| V is S | | t is S | ϕ is S | | th is VS |
| V is S | | t is M | ϕ is S | | th is S |
| V is S | | t is L | ϕ is S | | th is S |
| V is M | | t is S | ϕ is M | | th is M |
| V is M | | t is M | ϕ is M | | th is M |
| V is M | | t is L | ϕ is M | | th is L |
| V is L | | t is S | ϕ is M | | th is L |
| V is L | | t is M | ϕ is L | | th is L |
| V is L | | t is L | ϕ is L | | th is L |
| V is VL | | t is S | ϕ is M | | th is L |
| V is VL | | t is M | ϕ is L | | th is L |
| V is VL | | t is L | ϕ is L | | th is L |

TABELA 1. Tabela decyzyjna bazy reguł dla elektrochemicznego anodowania w roztworze $1\text{M H}_3\text{PO}_4$ z $0,3\%$ mas. HF [3], gdzie: V–zastosowany potencjał, t–czas anodowania, ϕ –średnica nanorurki, oraz th–długość nanorurki.

TABLE 1. Decision table of fuzzy rule base for electrochemical anodization in $1\text{M H}_3\text{PO}_4$ with $0,3\text{wt.}\%$ HF electrolyte [3], where: V–applied potential, t–anodization time, ϕ –tube diameter, and th–tube length.

Results and discussion

As a result of approximate reasoning for chosen input variables values, the resultant output sets have been received (FIG.1). After defuzzification process, only one value was chosen, in response to given input values. As an example, for the chosen input variables: applied voltage of 10V and the anodization time 2h, the diameter of TiO_2 nanotube of 53.5nm and length of 600nm was determined. The potential increasing to 20V results then in change of nanotube diameter to 93nm and length to 970nm. The simulation results are in line with the experimental data achieved by Bauer et al. [3].



RYS.1. Wyniki obliczeń metodą wnioskowania przybliżonego dla procesu tworzenia warstwy TiO_2 : a) wielkości wejściowe - przykładowy potencjał 10V i czas anodowania 2godz., wielkości wyjściowe - średnica nanorurki 53,3nm i długość nanorurki 600nm; b) wielkości wejściowe przykładowy potencjał 20V i czas anodowania 2 godz., wielkości wyjściowe - średnica nanorurki 95 nm i długość nanorurki 970nm.

FIG.1. Results of fuzzy reasoning system for TiO_2 layer formation: a) the inputs - applied potential 10V and anodization time 2h, the outputs - diameter 53.3 nm and tube length 600 nm, b) the inputs - applied potential 20V and anodization time 2h, the outputs - tube diameter 95 nm and the t length 970nm.

Wnioski

Metoda wnioskowania rozmytego umożliwia oszacowanie geometrii nanorurkowej warstwy tlenkowej na powierzchni tytanowej oraz jej optymalizację poprzez regulację warunków anodowania, takich jak zastosowane napięcie i czas anodowania podczas procesu anodowego utleniania tytanu.

Conclusions

Using fuzzy reasoning approach, the geometry of TiO_2 nanotube layer on titanium surface can be predicted and optimized by regulation of fabrication conditions, like applied voltage or anodization time during electrochemical anodization process. Proposed method provides a good predictor within the range of area responses established, based on selective and limited representative experimental data.

Piśmiennictwo

- [1] Ghicov A., Tsuchiya H., Macak J.M., Schmuki P.: Titanium oxide nanotubes prepared in phosphate electrolytes. *Electrochemistry Comm.* 7 (2005) 505-509.
- [2] Raja K.S., Misra M., Paramguru K.: Deposition of calcium phosphate coating on nanotubular anodized titanium. *Materials Letters* 59 (2005) 2137-2141.
- [3] Bauer S., Kleber S., Schmuki P.: TiO_2 nanotubes: Tailoring the geometry in $\text{H}_3\text{PO}_4/\text{HF}$ electrolytes. *Electrochemistry Communications* 8 (2006) 1321-1325

References

- [4] Kaneco S., Chen Y., Westerhoff P., Crittenden J.C.: Fabrication of uniform size titanium oxide nanotubes: Impact of current density and solution conditions. *Scr. Mat.* 56 (2007) 373-376.
- [5] Łachwa A.: Rozmyty świat zbiorów, liczb, faktów, reguł i decyzji. *Problemy współczesnej nauki, teoria i zastosowania.* Akad. Oficyna Wyd. EXIT, W-wa 2001.