

Особенности структурирования дендритных нанообъектов

Ю. В. Рыжикова^{1,*}, М. В. Ковальчук^{1,2}, П. В. Короленко^{1,3}, А. В. Косырев¹

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» Россия, 123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1

³Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук Россия, 119991, ГСП-1, Москва, Ленинский проспект, д. 53
(Статья поступила 28.09.2020; подписана в печать 03.11.2020)

Предложен новый метод моделирования самоорганизации двумерных дендритов со стохастически образующимися центрами роста. Рассмотрены алгоритмы формирования фрактальных дендритных кластеров. Приведены оценки фрактальной размерности дендритных структур.

PACS: 61.43. Нv; 02.70.-с

УДК: 519.85

Ключевые слова: дендриты, самоорганизация, диффузионно-ограниченная агрегация, баллистическая агрегация, фрактальные кластеры, фрактальная размерность, наночастицы.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно ведется изучение свойств фракталоподобных объектов дендритной геометрии [1, 2, 3]. Обусловлено это тем, что элементы такой формы стали широко использоваться в различных областях науки и техники. В частности, они применяются: в биомедицине при диагностике различных заболеваний и разработке новых лекарственных веществ, для интерпретации процессов возникновения жизни на Земле, при исследовании особенностей структурирования нанообъектов в результате процесса самоорганизации. Находят они применение в арт-терапии, при создании фрактальных антенн, для синтеза гиперболических метаматериалов, в нанотехнологиях при проектировке микросхем фотолитографическими методами, а также в других приложениях науки, техники и медицины [4, 5, 6, 7].

Несмотря на большое количество работ в данной области [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10], недостаточно изученными оказались вопросы, связанные с изучением особенностей формирования дендритных структур со спонтанно образующимися центрами роста. В частности, не изученными оказались их предельные фрактальные характеристики.

В настоящей работе указанные выше вопросы рассмотрены на основе численного моделирования применительно к дендритным системам разной симметрии. Ее цель состоит в разработке комплекса новых оригинальных алгоритмов и программ построения двумерных дендритов со спонтанно образующимися центрами роста в процессе их самоорганизации, который позволяет проводить расширенный анализ их морфологических особенностей.

*E-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru

ОСОБЕННОСТИ ПОСТРОЕНИЯ СТОХАСТИЧЕСКИХ ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР

Фрактальные нанообъекты допускают классификацию по типу структурной группировки, составляющих их частиц [11]. При определенных условиях наночастицы формируют образования дендритной формы. Дендриты представляют собой системы с рыхлой ветвистой структурой, которая формируется в различных процессах, сопровождающихся агрегацией частиц близких размеров. Оценивая их геометрические и скейлинговые параметры, можно определить физический механизм взаимодействия составляющих частиц [11, 12].

В основу разработанных алгоритмов легли модели — DLA (диффузионно-ограниченная агрегация, ДОА) и ВА (баллистическая агрегация, БА) [13, 14]. При использовании этих моделей изначально в расчетное поле вносится центр агрегации, к которому присоединяется всякая случайно прикоснувшаяся частица, после чего начинается рост скопления частиц. Такое скопление частиц вокруг одного центра роста порождает образование фрактального кластера. Основная разница между моделями диффузионно-ограниченная агрегация и баллистическая агрегация заключается в том, что в первой частица движется случайным образом, а во второй — по прямой. На рис. 1 показаны кластеры, сформированные в рамках традиционных представлений частица-кластер на основе моделей ДОА и БА.

Недостатком, ограничивающим возможные применения известных алгоритмов ДОА, БА и их модификаций [8, 9, 13, 14, 15], является невозможность моделирования автономного образования большого количества центров роста дендритов и стохастического процесса их самоорганизации. Вследствие этого, работы по моделированию дендритных объектов, например [8, 13, 15, 16], часто ограничиваются рассмотрением дендрита как одного фрактального кластера. Та-

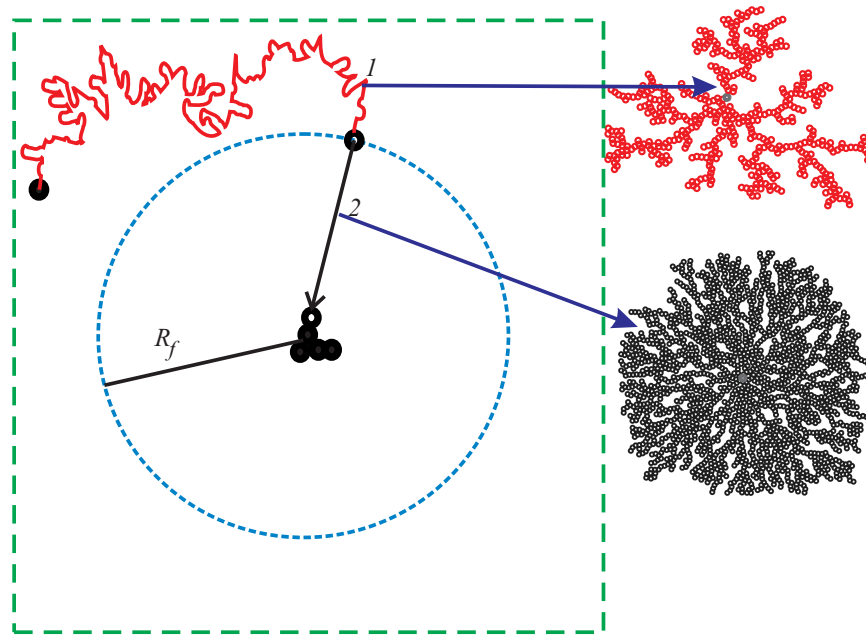


Рис. 1: Ключевые фрагменты схемы алгоритма роста дендритных систем: участки возможной траектории движения частицы: 1 — модель «диффузионно-ограниченная агрегация», 2 — модель «баллистическая агрегация». Пунктир — граница рабочего поля. Стрелками показаны дендриты, сформированные в рамках классических моделей частица-кластер — «диффузионно-ограниченная агрегация» и «баллистическая агрегация»

кое рассмотрение неприменимо к самоорганизующимся стохастическим процессам фрактального образования дендритов с множеством центров роста.

Предлагаемый нами новый метод построения дендритных кластеров произвольной симметрии со спонтанно образующимися центрами роста основан на использовании свойств агрегационных моделей ДООА и БА с учетом взаимодействия между составляющими дендрит частицами.

На первом этапе реализации нового алгоритма задается случайное движение частиц в рабочем поле (рис. 1, пунктир). За основу движения частиц берётся модель «диффузионно-ограниченная агрегация» (рис. 1, кривая 1). Частица, приблизившись к формируемому кластеру на заданное расстояние сильного взаимодействия R_f , начинает движение к нему по прямой траектории в рамках модели «баллистическая агрегация» (рис. 1, кривая 2) и, соприкоснувшись с ним, становится неподвижной.

На втором этапе реализации алгоритма фрактального роста дендритных образований производится сеточное представление данных с разбиением рабочей области на сектора, в которых хранится информация о присутствующих в них частицах (рис. 2).

На рис. 2 стрелками показан возможный вариант образования нового центра роста дендрита. В качестве количественного параметра вводится критическое число частиц в одной ячейки сетки N_{cr} , при достижении, которого частицы внутри данной ячейки заменяются новым центром роста дендрита. Так, на рис. 2 в центральной ячейке $N_{cr} = 7$. Отметим, что погрешность

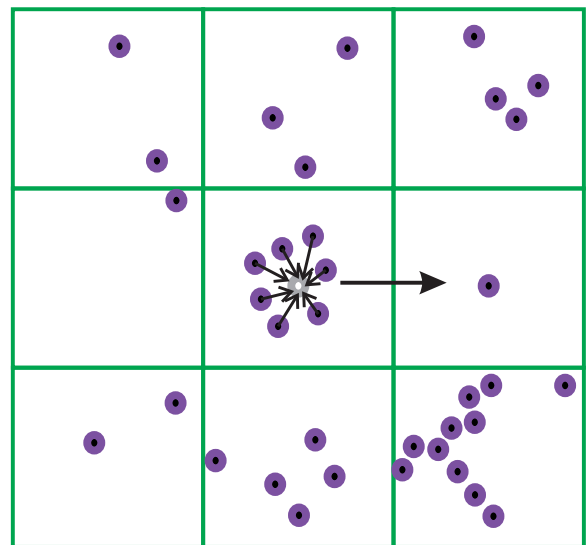


Рис. 2: Расчетная сетка с частицами. Стрелками показано рождение нового центра

расчетного метода, обусловленная исчезновением из рассмотрения части частиц пренебрежимо мала для фрактальных дендритов с числом частиц $N > 1000$.

Взаимодействие частиц считается обратно пропорциональным квадрату расстояния между ними. Для оптимизации расчета взаимодействий частиц вводится эффективный радиус взаимодействия частиц R_{int} , при превышении которого этим взаимодействием мож-

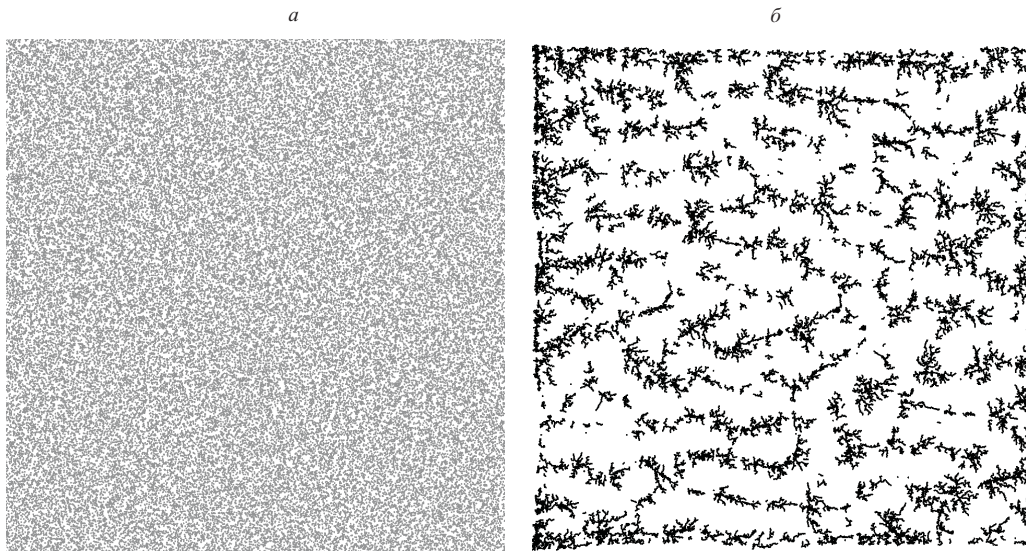


Рис. 3: Начальное состояние (а) и образованные кластеры дендритов в модели «первичного бульона» (б)

но пренебречь: $R_{int} < L$. Здесь L — размер сетки, который задается так, что каждая частица будет взаимодействовать только с частицами из своей же клетки и восемью соседними.

На рис. 3 и рис. 4 представлены полученные с помощью численного моделирования — различные двумерные дендритные образования с автономным образованием их центров фрактального роста.

Так, на рис. 3,б показана дендритная структура в рамках условно реализованной модели «первичного бульона», предложенной в свое время академиком А.И.Опариным для описания возникновения жизни на Земле. В начальный момент времени сетка заполняется частицами (рис. 3,а), так что в каждой клетке сетки с некоторой вероятностью P_b рождаются N_b частиц. При взаимодействии частицы образуют дендритные образования. В процессе образования кластеров из первичного материала (рис. 3,а) формируются разветвленная и расходящиеся по всей расчетной области дендритная система полимерного вида.

Такая структура нашла применение в материаловедении для синтеза и анализа новых свойств полимерных дендритов [17].

На рис. 4 показан вариант модели, близкой к традиционным вариантам центрально-симметричных дендритных образований [13]. Число частиц, составляющих дендритное образование $N = 12000$ (рис. 4,а) и $N = 70000$ (рис. 4,б). Разработанные алгоритм и программа позволяли отказаться от задания фиксированного центра роста и от расчёта случайного угла, характеризующего направление движения частицы [9, 15]. В ходе расчета при каждой итерации в каждой периферийной клетке, если в ней нет неподвижных частиц, с заданной вероятностью рождается новая частица. Если частица выходит за границы рабочего поля, она исключается из рассмотрения. Для быстроты

работы алгоритма моделирование начинается с сетки небольшого размера. Это приводило к росту первого фрактального кластера примерно в центре задаваемой области и как, следствие, к центральной симметрии формирующейся дендритной системы.

Для дендритных структур количественная оценка самоподобных свойств проводилась на основе определения фрактальной размерности D [9]. В литературе часто используются разные варианты расчета фрактальной размерности (размерность подобия, клеточная размерность (размерность Минковского), корреляционная размерность, информационная размерность, кластерная (массовая) размерность и др.) [9, 14, 18, 19], как правило, это связано с морфологическими особенностями исследуемых объектов.

В данной работе проводилась оценка размерности Минковского методом box-counting, а также массовой фрактальной размерности, как для смоделированного дендрита в целом, так и для отдельных его фрактальных кластеров. При этом анализировались зависимости фрактальной размерности дендритных образований от числа составляющих их частиц.

Достоверность численной реализации определения фрактальных размерностей такими способами проверялась на тестовых объектах. Они представляли собой круги с равномерным и с неравномерным заполнением частиц [15]. В случае равномерного пространственного распределения частиц по кругу, клеточная D_b и массовая D фрактальная размерность структурных образований $D_b \approx D \rightarrow 2$ при числе частиц $N \rightarrow 10^6$. Эти оценки фрактальных размерностей служат ориентиром в случае использования модели ассоциации частиц БА. Неравномерное распределение частиц допускает получение различных вариантов значений фрактальных размерностей при изменении «рыхлости» сформированного круга: $D_b, D < 2$. Такие тестовые

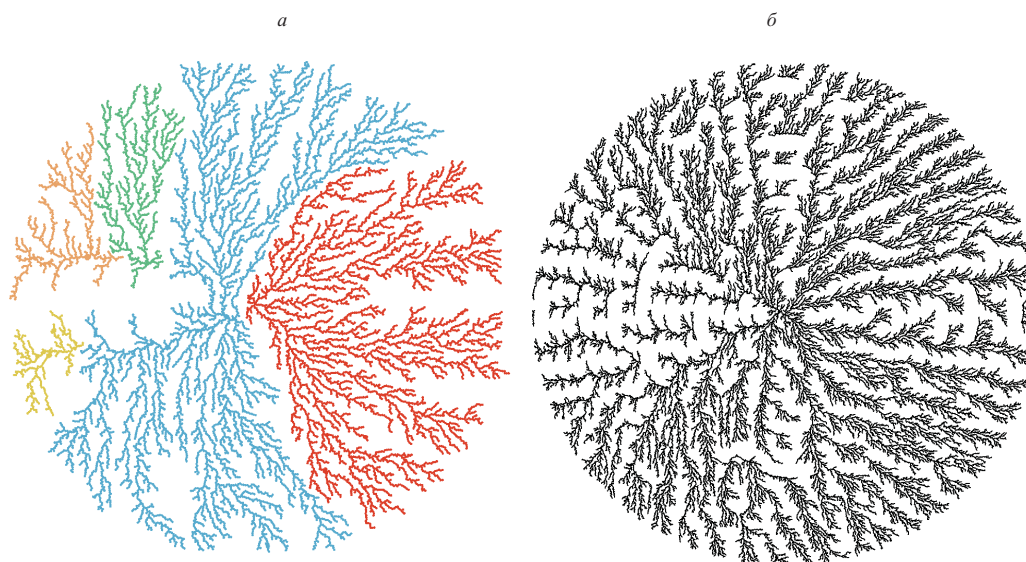


Рис. 4: Примеры моделирования дендритных структур: модификация модели «диффузионно-ограниченная агрегация» из 12000 частиц (а) и 70000 частиц (б). Разные кластеры обозначены разными цветами (а)

вые оценки фрактальных размерностей соответствуют двумерной модели ДОО.

Результаты моделирования формирования двумерных фрактальных дендритных структур (рис. 4) разными способами показали, что предельное значение средних фрактальных размерностей дендритных образований с центральной симметрией принимает значение близкое к $D \approx D_b \approx 1.7$ (число частиц $N \rightarrow 10^6$). Полученное численное значение фрактальной размерности согласуется с литературными данными [1, 8, 9, 13, 14, 15].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный алгоритм и его численная реализация формирования дендритных образований со спон-

танно образующимися центрами роста является ценной альтернативой ранее использованным агрегационным моделям. Новый алгоритм позволяет создавать дендритные структуры разной симметрии и разреженности.

Разработанная модель взаимодействия наночастиц дает новые возможности целенаправленного влияния на особенности роста дендритов со стохастическими центрами роста, что может использоваться для описания процессов самоорганизации нанообъектов разной природы, в том числе имитации морфогенеза различных биологических систем.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 19-02-00540).

- [1] Каретин Ю. А. Самоорганизация живых систем. Краткий курс синергетики для биологов. Владивосток: Мор. гос. ун-т., 2017.
- [2] Canabal J. A., Otaduy M. A., Kim B., Echevarria J. // *Eurographics*. 2020. **39**, N 2. P. 1.
- [3] Ryzhikova Yu., Mukhartova Iu., Ryzhikov S. // *J. Phys. Conf. Ser.* 2018. P. 012059.
- [4] Frolov V. D., Pivovarov P. A., Zavedeev E. V., Shupegin M. L., Pimenov S. M. // *Nanotechnologies in Russia*. 2017. **12**, P. 376.
- [5] Зотов А. М., Короленко П. В., Мишин А. Ю., Рыжикова Ю. В. // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* 2019. №6. С. 52. (А. М. Zotov, P. V. Korolenko, A. Yu. Mishin, Yu. V. Ryzhikova // *Mosc. Univ. Phys. Bull.* 2019. **74**, N 6. P. 625).
- [6] Rocha-Rodrigues P., Hierro-Rodriguez A., Guerreiro A., Jorge P., Santos J. L., Araujo J. P., Teixeira J. M. // *Chemistry Select*. 2016. **1**. P. 3854.
- [7] Kanari L., Dictus H., Chalimourda A., Geit W. V., Coste B., Shillcock Ju., Hess K., Markram H. Computational synthesis of cortical dendritic morphologies. 2020. preprint bioRxiv.
- [8] Nicolas-Carlock J. R., Carrillo-Estrada J. L., Dossetti V. // *Scientific reports*. 2016. **6**, P. 19505.
- [9] Рыжикова Ю. В., Рыжиков С. Б. // *Ученые записки физического ф-та Московского ун-та*. 2018. № 5. 1850401.
- [10] Краевой С. А., Колтовой Н. А. Диагностика по капле крови. Кристаллизация биожидкостей. Книга 3. Тезиография. Кристаллизация тестовых растворов. Москва —

- Смоленск. / Электронный математический и медико-биологический журнал «Математическая морфология» 2016.
- [11] Ковальчук М. В., Короленко П. В., Рыжикова Ю. В. // Ученые записки физического ф-та Московского ун-та. 2015. № 1. 151401.
- [12] Chiganova G. A. // Journal of Siberian Federal University. Engineering & Technologies. 2008. **1**(2), P. 155.
- [13] Witten T. A., Sander L. M. // *Phys. Rev. Lett.* 1981. **47**, P. 1400.
- [14] Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991.
- [15] Ружицкая Д. Д., Рыжикова Ю. В., Рыжиков С. Б. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. № 11. С. 1512.
- [16] Меньшутин А. Ю. // Вестник Нижегородского университета имени Н. И. Лобачевского. 2013. № 2(2). С. 46.
- [17] Soleyma R., Adeli M. // *Polym. Chem.* 2015. **6**, P. 10.
- [18] Вохник О. М., Зотов А. М., Короленко П. В., Рыжикова Ю. В. Моделирование и обработка стохастических сигналов и структур. Учебное пособие. М.: МГУ, 2013.
- [19] Korolenko P. V., Ryzhikov S. B., Ryzhikova Yu. V. // *Phys. Wave Phenom.* 2013. **21**, N. 4. P. 256.

Features of structuring of dendritic nanoobjects

Yu. V. Ryzhikova^{1,a}, M. V. Kovalchuk^{1,2}, P. V. Korolenko^{1,3}, A. V. Kosyrev¹

¹Department of optics, spectroscopy and nanosystems physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia

²National Research Centre «Kurchatov Institute». Moscow 123182, Russia

³P. N. Lebedev Physics Institute, Russian Academy of Sciences. Moscow 119991, Russia
E-mail: ^aryzhikovaju@physics.msu.ru

A new method for modeling the self-organization of two-dimensional dendrites with stochastically generated growth centers is proposed. Algorithms for the formation of fractal dendritic clusters are considered. Estimates of the fractal dimension of dendritic structures are given.

PACS: 61.43. Hv; 02.70.-c.

Keywords: dendrites, self-organization, diffusion-limited aggregation, ballistic aggregation, fractal clusters, fractal dimension, nanoparticles.

Received 28 September 2020.

Сведения об авторах

1. Рыжикова Юлия Владимировна — канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-57-40, e-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru.
2. Ковальчук Михаил Валентинович — доктор физ.-мат. наук, член-корр. РАН, зав. кафедрой; тел. (495) 939-59-81.
3. Короленко Павел Васильевич — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел. (495) 939-57-40, e-mail: pvkorolenko@rambler.ru.
4. Косырев Алексей Васильевич — студент; тел. (495) 939-57-40, e-mail: leshakosyrev@gmail.com.