

Звездные модели нанокластерных образований

В.В. Гридчина,* П.В. Короленко,† Ю.В. Рыжикова‡
 Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
 физический факультет, кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем
 Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.2

Рассмотрена возможность идентификации систем нанокластерных образований со звездной геометрией на основе оценки скейлинговых параметров как в картинах дифракции зондирующего излучения, так и в самих анализируемых объектах.

PACS: 42.25.Fx; 42.30.Kq; 61.43.Nv; 61.46.-w УДК: 535.015
 Ключевые слова: звездные модели фракталов, дендритные структуры, нанокластеры, дифракция, скейлинг, паттерны, диагностика наносистем.

В настоящее время фрактальный анализ разнообразных структур, в том числе квазикристаллического типа, успешно используется для описания их оптико-физических характеристик, в частности, для оценки степени шероховатости поверхности, определения размеров кластеров, агломератов, образующихся в коллоидных растворах, а также для классификации объектов биологического происхождения [1–3]. Разработка диагностических методов исследования различных систем нанобъектов на основе применения моделей формирования фрактальных структур является перспективным направлением развития наукоемких технологий [4–5]. Часто агломераты, сформированные наночастицами различных типов имеют дендритный вид [6–7]. Рис. 1, а, б иллюстрируют процесс роста и форму такого рода агломератов [8].

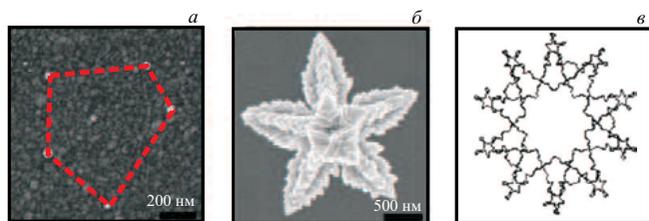


Рис. 1: Фрактальные структуры со «звездной» геометрией. Динамика роста звездной структуры на основе золотых наночастиц за 1 мин (а) и за 30 мин (б) [8]. Фазовый портрет движения частицы [12]. Красный пунктир — область формирования структуры б

Для описания их структуры и оптических свойств обычно привлекаются стохастические фрактальные модели [9–11]. Однако в некоторых случаях, когда требуется найти общие закономерности, связывающие характеристики дифрагирующих на агломератах волн с фрактальными свойствами самих просвечиваемых нанобъектов, становится целесообразным использо-

вать детерминированные модели «звездного» типа [10–11]. В теории детерминированного хаоса такие модели используются для описания специфического движения заряженных частиц, наблюдаемого при определенных условиях в электромагнитных полях (см. рис. 1, в) [12].

В данной работе рассматривается возможность идентификации систем нанокластерных образований на основе ранее предложенного паттерного подхода [13] к оценке скейлинговых параметров структур разной геометрии и их картин дифракции. Анализ проводится с использованием представлений о структурах, обладающих так называемой звездной геометрией. Такие структуры характеризуются неоднозначным соотношением между размерами образующих их самоподобных элементов и могут быть отнесены к третьей группе конструктивных фракталов [10]. Их построение осуществлялось с помощью известного итерационного алгоритма [11], позволяющего задавать фрактальный объект в виде замкнутых ломаных линий, последовательные отрезки которых пересекаются под одним и тем же углом α . Рекуррентные соотношения, согласно которым определялась длина $J+2$ -го отрезка при известной $J+1$ длине отрезка, имеют вид:

$$\begin{cases} x_{J+2} = x_{J+1} + \sin \alpha \cdot l_1 \cdot Z(R^n) \\ y_{J+2} = y_{J+1} - \cos \alpha \cdot l_1 \cdot Z(R^n) \end{cases} \quad (1)$$

где l_1 — заданная длина отрезка, $Z(R^n)$ — функция выбора длины звена ломаной линии, R — параметр изменения длин (показатель уменьшения), $n = 0, 1, 2, \dots, N$, N — общее число шагов алгоритма построения, x, y — пространственные координаты. Изменяя параметры α, R, n и l_1 в (1), можно варьировать форму фрактальных образований в широких пределах (см. рис. 2).

На рис. 2 представлены структуры звездных фракталов при $N = 5$, сформированных согласно (1) с учетом бинарной функцией пропускания F :

$$F(x, y) = \begin{cases} 1, & x, y \in C, \\ 0 & x, y \notin C, \end{cases} \quad (2)$$

*E-mail: vi4ka.fizi4ka@gmail.com

†E-mail: pvkorolenko@rambler.ru

‡E-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru

где C — заданная контурная граница объекта.

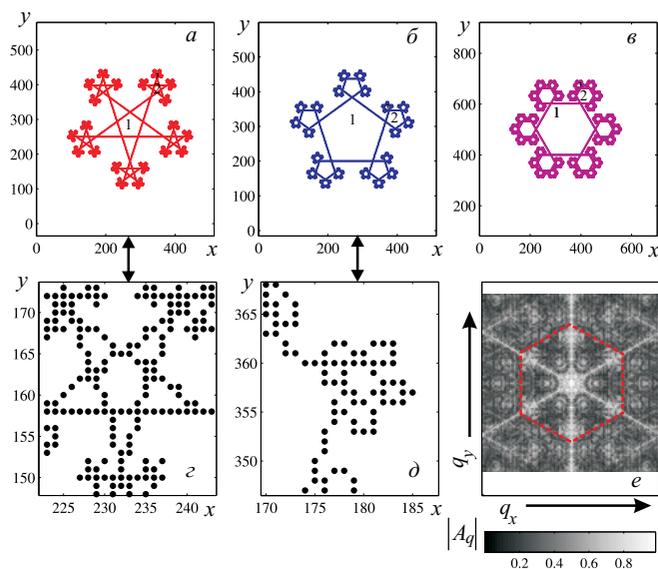


Рис. 2: Структуры звездных фракталов (а-в) и их фрагменты, составленные из рассеивающих центров (z, d). Пространственный фурье-спектр звездного фрактала с геометрией шестиугольника (e). q_x, q_y — пространственные частоты. Красный пунктир — паттерн в поле дифракции. Цифрами обозначены наиболее крупные самоподобные образования в структурах (а-в).

С использованием формул (1)–(2) были сформированы структурные матрицы анализируемых объектов $S_n = \{0, 1\}$, для которых значение 1 соответствует положению точечных рассеивающих центров, а 0 — свободным вакансиям (см. рис. 2, z, d). Такое представление анализируемых систем позволяет определить пространственные фурье-спектры распределений нанокластерных образований. При этом структура дифрагирующей волны характери-

зуется амплитудой A_q :

$$A_q = \sum_{m=1}^J S_m \exp\{\pm 2\pi i m \sin \alpha\} \omega_J^{(m-1)(q-1)}, \quad (3)$$

где $\omega_J = \exp\{-2\pi i s/J\}$, q — нормированная пространственная частота, $i = \sqrt{-1}$, J — число элементов, s — масштабирующий множитель, α — угол падения светового луча.

Коэффициенты скейлинга ς исследуемых структур и соответствующих им картин дифракции определялись соотношением размеров подобных фигур, соответствующих разным масштабам формирования задаваемых фракталов (см. рис. 2, а-в). Так для звездного фрактала с геометрией шестиугольника (рис. 2, в) коэффициенты скейлинга равны $\varsigma_1 = 3.4$ и $\varsigma_2 = 2.8$ (на объекте) и $\varsigma \approx 2$ (в фурье-образе).

Результаты численного моделирования показали, что пространственные фурье-спектры (картины дифракции излучения на исследуемых объектах) характеризуются фрактальным распределением дифракционных максимумов, причем топологические и скейлинговые свойства самоподобных элементов картин дифракции находятся в определенном соответствии с фрагментами начального геометрического распределения рассеивающих центров. Это дает возможность распространить способ определения фрактальных характеристик нано-объектов на основе регистрации особенностей паттернов образований в полях дифракции. В свою очередь знание фрактальных характеристик агломератов наночастиц позволяет корректно описать электрофизический механизм их взаимодействия [14].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ офи_м (грант № 14-22-01086).

[1] Macia E. Rep. Prog. Phys. **75**. P. 036502. (2012).
 [2] Korolenko P.V., Mishin A.Y., Ryzhikova Yu.V. Optik. **124**(19). P. 3946. (2013).
 [3] Ho I-L. and Chang Y-C. J. Opt. **17**. P. 045601. (2015).
 [4] Крауз В.И., Мартыненко Ю.В., Свечников Н.Ю. и др. УФН. **180**, № 10. С. 1055. (2010).
 [5] Иванов В.В. Современные наукоемкие технологии. № 11. С. 61. (2013).
 [6] Александров Д.В., Галенко П.К. УФН. **184**, № 8. С. 833. (2014).
 [7] Dick V.V., Solov'ov I.A., Solov'ov A.V. J. of Physics: Conference Series. **248**. P. 012025. (2010).
 [8] Wang Z., Bharathi M.S., Hariharaputran R. et al. ACS Nano. **7**. No 3. P. 2258. (2013).
 [9] Кроновер Р.М. Фракталы и хаос в динамических системах. (М.: «Техносфера», 2006).

[10] Ковальчук М.В., Короленко П.В., Рыжикова Ю.В. Ученые записки физического факультета МГУ. № 1. С. 151401. (2015).
 [11] Морозов А.Д. Введение в теорию фракталов. М. Ижевск. (2002).
 [12] Заславский Г.М., Сагдеев Р.З., Усиков Д.А., Черников А.А. УФН. **156**(2). С. 193. (1988).
 [13] Korolenko P.V., Ryzhikov S.B., Ryzhikova Yu.V. Phys. Wave Phenom. **21**(4). P. 256. (2013).
 [14] Chiganova G.A. Journal of Siberian Federal University. Engineering & Technologies. **1**(2). P. 155. (2008).

Star models of nanocluster formations**V. V. Gridchina^a, P. V. Korolenko^b, Yu. V. Ryzhikova^c***Department of optics, spectroscopy and nanosystems physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia**E-mail: ^avi4ka.fizi4ka@gmail.com, ^bpvkorolenko@rambler.ru, ^cryzhikovaju@physics.msu.ru*

The possibility to identify the nanocluster formations with star geometry based on the definition of the scaling parameters as in diffraction patterns of the probing radiation and within the analyzed objects is considered.

PACS: 42.25.Fx; 42.30.Kq; 61.43.Hv; 61.46.-w.

Keywords: star model fractals, dendritic structure, nanoclusters, diffraction, scaling, patterns, nanosystem diagnostics.

Received 27.07.2015.

Сведения об авторах

1. Гридчина Виктория Викторовна — студент; тел.: +7(495) 939-57-40, e-mail: vi4ka.fizi4ka@gmail.com.
2. Короленко Павел Васильевич — докт. физ.-мат. наук, профессор; тел. +7(495) 939-57-40, e-mail: pvkorolenko@rambler.ru.
3. Рыжикова Юлия Владимировна — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник; тел.: +7(495) 939-57-40, e-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru.