

Конструктивные фракталы в моделях пространственного распределения наночастицМ. В. Ковальчук^{1,2}, П. В. Короленко^{1,3,*}, Ю. В. Рыжикова^{1†}¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Россия, 123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1³Физический институт имени П. Н. Лебедева Российской академии наук, Россия, 119991, ГСП-1, Москва, Ленинский проспект, д. 53
(Статья поступила 14.02.2015; Подписана в печать 18.02.2015)

Разработана процедура построения двумерных аperiодических конструктивных фракталов и осуществлена их классификация. Проведенный анализ экспериментальных данных указывает на то, что системы наночастиц в жидкостях, газах и на плоских подложках могут характеризоваться как пространственно разнесенным распределением частиц, так и наличием агрегатных образований. Моделирование распределения наночастиц показало, что даже внешне неупорядоченные системы наночастиц, не обладающие явными признаками самоподобия, могут формировать фрактальные картины дифракции с присутствующими в них паттерными образованиями. Рассмотрена возможность идентификации разнообразных систем наночастиц на основе оценки скейлинговых параметров как в картинах дифракции, так и в самих анализируемых объектах.

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

УДК: 535.015

Ключевые слова: конструктивные фракталы, наночастицы, дифракция, скейлинг, паттерны, диагностика наносистем.

ВВЕДЕНИЕ

Фрактальный анализ наносистем стал важным инструментом изучения их оптико-физических свойств [1–3]. Целью данной работы является расширение представлений об особенностях фрактальных распределений наночастиц на основе численного моделирования с использованием характеристик аperiодических конструктивных фракталов. Результаты численного моделирования рассматриваются с точки зрения возможности их применения при диагностике и идентификации различных типов нанокластерных образований, структура которых обладает фрактальными признаками.

Используемый в данной статье подход принципиально отличается от нашедшего освещение в литературе метода моделирования пространственных распределений наночастиц и формирования их фрактальных агрегатов (чаще всего дендритного типа) под действием случайных факторов [4, 5]. Фрактальный анализ получаемых в результате такого моделирования стохастических структур обычно осуществляется на основе оценки величины массовой фрактальной размерности и не позволяет непосредственным образом связать геометрические особенности рассматриваемого объекта с распределением поля дифрагирующего на нем излучения. Моделирование пространственных распределений наночастиц и структуры их агрегатов при помощи конструктивных фракталов дает

возможность выявить в картинах дифракции характерные для изучаемых объектов самоподобные образования — паттерны [6, 7]. Определяя их структурные и скейлинговые параметры, можно идентифицировать изучаемую наносистему с точки зрения ее геометрии и проявления в ней фрактальных свойств. Знание последних применительно к наноагрегатам позволяет в свою очередь оценить ряд важных характеристик, относящихся к электростатическим свойствам первичных наночастиц [2].

1. СВОЙСТВА КОНСТРУКТИВНЫХ ФРАКТАЛОВ

Построение конструктивных фракталов обычно реализуется на основе бесконечного повторения нескольких простых операций, например, замены одного элемента некоторой комбинацией других, ему подобных [8].

Использованные для моделирования системы наночастиц конструктивные фракталы строились при помощи алгоритмов, основанных на использовании свойств числовых последовательностей Кантора, Морса–Туэ, двойного периода и Фибоначчи [9]. Эти последовательности P_i могут быть представлены в виде чередующихся в определенном порядке нулей и единиц $\{0, 1\}$. Переход к более высокому структурному уровню, увеличивающему количество элементов в каждой из последовательностей $P_i = \{0, 1\}$, осуществляется с помощью правил замещения [9, 10].

$$\begin{aligned} g(0) &= 0, 1, 0; & g(1) &= 1, 1, 1, \\ g(0) &= 0, 1; & g(1) &= 1, 0, \\ g(0) &= 0, 1; & g(1) &= 0, 0, \\ g(0) &= 0, 1; & g(1) &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

*E-mail: pvkoro lenko@rambler.ru

†E-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru

справедливых соответственно для последовательностей Кантора, Морса–Туэ, двойного периода и Фибоначчи. Положение единиц в формуле (1) соответствует расположению рассеивающих центров, а нулей — по-

ложению свободных вакансий.

Апериодические 2D структуры формировались на основе матричных преобразований с использованием структурных матриц Q_{mn} и C_{mn} :

$$Q_{mn} = P_m P_n \quad \text{и} \quad C_{mn} = \begin{cases} C_{1n} = C_{m1} = P_j = \{0, 1\}, \\ P_j = \{0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 0\}, \quad \text{если } P_1 \neq C_{m1}, \\ P_j = \{0, 1\}, \quad \text{если } P_1 = C_{m1}, \end{cases} \quad (2)$$

где $0 \leq j, m, n \leq J$, J — максимальное значение индексов, определяющее общие размеры структуры [10].

Конструктивные фракталы можно разбить на три группы. К первой группе относятся фракталы, в структуре которых в явном виде присутствуют самоподобные элементы с определенным соотношением их размеров (это соотношение определяет так называемый коэффициент скейлинга ζ) [7]. Ко второй группе относятся структуры, не обладающие внешним проявлением самоподобия. Однако они характеризуются внутренней «скрытой» симметрией самоподобия [7, 10]. Третью группу образуют фракталы с неоднозначным соотношением между размерами их самоподобных элементов. На рис. 1 в качестве примеров указанных типов фрактальных объектов приведены двумерные пространственные распределения частиц с геометрией Кантора, Фибоначчи и так называемой геометрией «снежинки», сформированной в результате применения стандартной процедуры построения L-систем [11]. Алгоритмы построения систем, представленных на рис. 1а, б, основанные на применении формулы (2), приведены в [7, 10]. Рассматривая частицы в качестве точечных рассеивающих центров, несложно определить пространственные фурье-спектры распределений частиц, характеризующих структуру дифрагирующей волны с амплитудой A_q (рис. 1).

Картинки дифракции излучения на приведенных структурах рассеивающих центров показывают, что независимо от типов систем распределение дифракционных максимумов имеет четко выраженный фрактальный характер, причем геометрия и скейлинговые свойства присутствующих в них самоподобных элементов находятся в определенном соответствии с фрагментами изначального распределения рассеивающих центров. Коэффициенты скейлинга ζ структур на рис. 1а, б, равны соответственно 3 и $\Phi = 1.618$, где Φ — коэффициент золотого сечения. Такие же коэффициенты скейлинга характеризуют структуру паттернов в картинах дифракции. Иным свойством обладает структура на рис. 1в. Она также обладает четко выраженными самоподобными элементами. Оценку коэффициента скейлинга можно проводить или по изменению размеров шестиугольных элементов $\zeta = \frac{ob}{oa} = 3$, или же по размерам подобных участков ветвей, идущих из центра

$\zeta = \frac{oc}{bc} = 2.5$. Особенность структуры на рис. 1в состоит в том, что скейлинг характеристик ее фурье-образа определяется единым коэффициентом скейлинга. Соотношение размеров шестиугольных и треугольных элементов в картине дифракции дает для него величину $\zeta = \frac{ob}{oa} = 2$ (см. рис. 1е). Фрактальная форма картин дифракции излучения на конструктивных фракталах и присутствие в них самоподобных образований — паттернов — указывает на возможность использования фрактального анализа при обработке данных, получаемых при просвечивании систем наночастиц. В частности, идентификация систем частиц может определяться путем регистрации паттернов определенного типа. Для исключения ошибок при регистрации паттернов, существует возможность дополнительного контроля за правильностью проведения указанной процедуры путем определения коэффициентов скейлинга, исходя из расположения принадлежащих паттернам рефлексам.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ О ПРОСТРАНСТВЕННОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ НАНОЧАСТИЦ И РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Наночастицы, получаемые, в частности, методом лазерной абляции и нашедшие применение в медицине и разнообразных технологиях, находясь в жидких, газообразных средах или на плоских подложках, могут иметь разную форму распределения (рис. 2) [12, 13]. Часто их расположение носит внешне случайный вид, при этом, находясь на значительном расстоянии друг от друга, они сохраняют свои индивидуальные свойства (рис. 2а). В некоторых случаях, взаимодействуя между собой, они формируют агрегаты, форма которых не подчиняется общей закономерности (рис. 2б). При определенных условиях агрегаты могут иметь дендритный вид с развитой системой отростков (рис. 2в). Имеются данные о том, что пространственные конфигурации наночастиц могут приобретать фрактальные признаки [2]. Оценивая скейлинговые и геометрические параметры фрактальных образований, можно определять характеристики отдельных частиц, определяющие

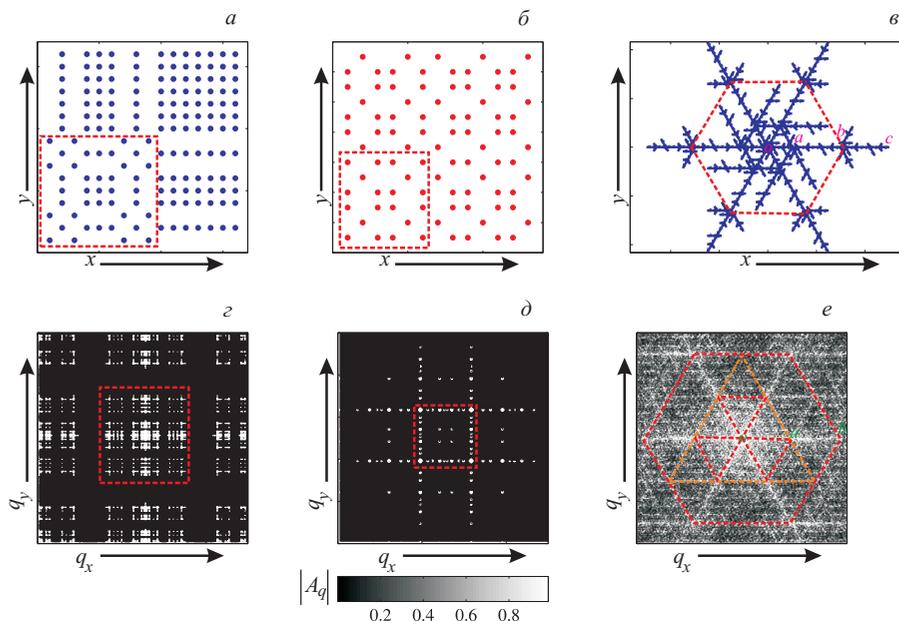


Рис. 1: Конструктивные фракталы (а–в) и их пространственные фурье-спектры (г–е). Системы Кантора (а, г), Фибоначчи (б, д), с геометрией «снежинки» (в, е); x, y — поперечные координаты в плоскости объекта, q_x, q_y — пространственные частоты. Красный пунктир — паттерны в полях дифракции (г–е) и соответствующие им структурные элементы в объектах (а–в)

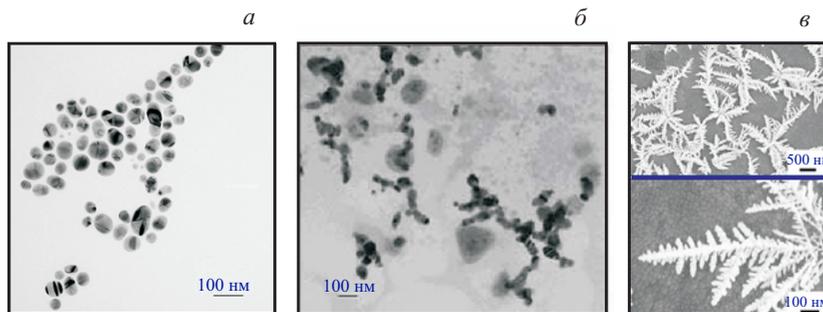


Рис. 2: Примеры пространственно разнесенных (а) и объединенных в агрегаты (б, в) наночастиц; а, б — частицы золота и серебра [12] (более светлые частицы — серебро, более темные — золото), в — частицы платины [13]

механизм их взаимодействия [12, 14].

Выявить особенности фрактальных распределений наночастиц и дать оценку возможности их идентификации по структуре полей дифракции позволяет процедура численного моделирования, использующая свойства конструктивных фракталов. На рис. 3а показана модель системы пространственно разнесенных частиц, созданная путем возмущения представленного на рис. 1б распределения Фибоначчи. Система частиц на рис. 3а не обладает видимым самоподобием, однако, в рассчитанной картине дифракции присутствуют фрактальные паттерны (пунктир на рис. 3г), с характерным для структур Фибоначчи коэффициентом скейлинга $\zeta \approx 1,62$. В этом можно убедиться, сравнивая рис. 3г и рис. 1д. Тем самым, существует возможность выявления фрактальных компонент в сложных распределениях разнесенных частиц.

Внешне неупорядоченное безагрегатное распределение частиц можно смоделировать, помещая рассеивающие центры в соответствии с геометрическим законом распределения простых чисел, известным как «скатерть Улама» [15, 16]. Несмотря на то, что при визуальном рассмотрении приведенного пространственного распределения рассеивающих центров в нем не видны элементы самоподобия (рис. 3б), его фурье-образ имеет фрактальный характер (рис. 3д) и в нем можно выделить характерные паттерные образования (пунктир).

Конструктивные фракталы позволяют моделировать фрактальные агрегаты сложной формы [8, 11]. На рис. 3в показан фрагмент фрактального объединения частиц в дендрит. Он построен с использованием известной итерационной процедуры комплексного отображения [11]:

$$z_{n-1} = z_n^2 + c, \tag{3}$$

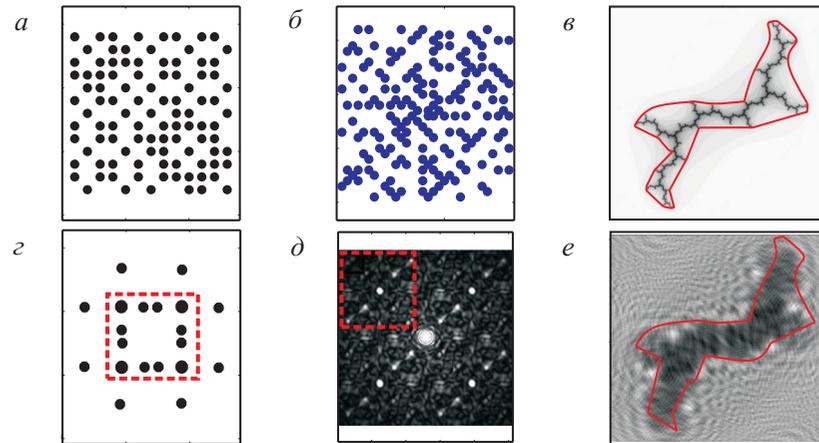


Рис. 3: Примеры моделей наносистем. Фрагмент системы Фибоначчи с дефектами (а), фрагмент «скатерти Улама» (б); структура дендрита (в); основные рефлексy картины дифракции на системе а (д), картина дифракции на «скатерти Улама» [15] (е), картина дифракции на структуре в (е); Пунктир — фиксируемые паттерны

где комплексная переменная $z = x + iy$, комплексная постоянная $c = a + ib$, $i = \sqrt{-1}$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Изображение структуры на рис. 3в соответствует параметрам $a = 0$, $b = 1$, $c = i$ формулы (3).

Несмотря на сложную конфигурацию, приведенное на рис. 3в изображение наносистемы состоит из целого ряда самоподобных элементов. Однако распределения светового поля дифрагированной на ней световой волны в силу сложного распределения интенсивности не позволяет выявить в нем фрактальные образования (рис. 3е). В то же время и в этом случае выполняется принцип структурного соответствия, обеспечивающий близость контурных очертаний объекта к наиболее интенсивной части дифракционной картины (красные линии на рис. 3в, е). Тем самым появляется возможность осуществлять диагностику сложных наносистем с низким уровнем упорядоченности, опираясь как на фрактальный подход, так и на принцип структурного соответствия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное исследование позволяет сделать следующие выводы:

1. Разработка и реализация процедуры формирования двумерных аperiodических конструктивных фракталов показали, что их можно условно разбить на три типа. Первый из них обладает явно выраженными фрактальными свойствами. У второго типа фрактальность проявляется скрытым образом в виде внутренней симметрии самоподобия. Фурье-образы фракталов первого и второго типов характеризуются теми же самыми коэффициентами скейлинга, что и изначальная структура. Третий тип конструктивных фракталов, обладая определенным самоподобием, отличается

от первых двух тем, что имеет место разброс значений коэффициентов скейлинга в структурах фрактала и его фурье-образа.

2. В картинах дифракции излучения на системах наночастиц, геометрия которых отражает свойства указанных типов фракталов, можно выделить характерные фрактальные образования — паттерны; пространственная конфигурация паттернов, как правило, соответствует определенным структурным элементам в изначальных объектах.
3. Анализ экспериментальных данных показал, что регистрируемые в эксперименте наночастицы могут характеризоваться как пространственно разнесенным распределением частиц, так и наличием агрегатных образований, в некоторых случаях приобретающих дендритную форму. Все указанные распределения могут быть численно смоделированы с использованием представлений о конструктивных фракталах.
4. Результаты моделирования показывают, что в ряде случаев даже внешне неупорядоченные системы наночастиц, не обладающие явными признаками самоподобия, могут формировать картины дифракции с фрактальными свойствами и определенными значениями коэффициентов скейлинга. Тем самым появляется возможность осуществлять диагностику сложных наносистем с низким уровнем упорядоченности, опираясь на фрактальный подход.
5. Выполненный анализ указывает на возможность идентификации разнообразных систем наночастиц на основе оценки скейлинговых параметров анализируемых объектов и соответствующих им картин дифракции. Кроме того, появляется

дополнительная возможность повысить точность диагностических процедур, используя принцип структурного соответствия.

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

- [1] Горелик О. П., Дюжев Г. А., Новиков Д. В., Ойченко В. М., Фурсей Г. Н. *ЖТФ*. **70**, вып. 11. С. 118. (2000).
- [2] Chiganova G. A. *Journal of Siberian Federal University. Engineering & Technologies*. **1(2)**. P. 155. (2008).
- [3] Короленко П. В., Рыжикова Ю. В. Сборник тезисов докладов научной конференции «Ломоносовские чтения». Секция физики. (Москва: Физический факультет МГУ, 2015). С. 5.
- [4] Смирнов Б. М. *УФН*. **149**, вып. 2. С. 177. (1986).
- [5] Александров Д. В., Галенко П. К. *УФН*. **184**, № 8. С. 833. (2014).
- [6] Рыжикова Ю. В., Короленко П. В., Логачев П. А. *Учен. зап. физ. фак-та. Моск. ун-та*. № 4. 144330. (2014).
- [7] Korolenko P. V., Ryzhikov S. B., Ryzhikova Yu. V. *Physics of Wave Phenomena*. **21**, N 4. P. 256. (2013).
- [8] Морозов А. Д. Введение в теорию фракталов. (Москва–Ижевск: «Институт компьютерных исследований», 2002).
- [9] Macia E. *Rep. Prog. Phys.* **69(2)**. P. 397. (2006).
- [10] Зотов А. М., Ким Е. Г., Короленко П. В., Рыжикова Ю. В. Электромагнитные волны и электронные системы. **18**, № 12. С. 10. (2013).
- [11] Кроновер Р. М. Фракталы и хаос в динамических системах. (М.: «Техносфера», 2006).
- [12] Симакин А. В., Воронов В. В., Шафеев Г. А. Труды института общей физики им. А. М. Прохорова. **60**. С. 83. (2004).
- [13] Liu Ju., Lin Zh., Wang X., Zeng Zh., Hu Zh. *A Letters Journal Exploring the Frontiers of Physics*. **108**. 37004. (2014).
- [14] Карасёв В. В., Онищук А. А., Готов О. Г., Бакланов А. М., Зарко В. Е., Панфилов В. Н. Физика горения и взрыва. **37**, № 6. С. 133. (2001).
- [15] Negro L. D. *Optics of Aperiodic Structures — Fundamentals and Device Applications*. (CRC Press Taylor & Francis Group, 2014).
- [16] Поршнев С. В. *Фундаментальные исследования*. № 8(5). С. 1075. (2013).

Constructive fractals in models of the spatial distribution of nanoparticles

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

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

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

³*P.N. Lebedev Physics Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow 119991, Russia*

E-mail: ^apvkorolenko@rambler.ru, ^bryzhikovaju@physics.msu.ru

The procedure for constructing two-dimensional aperiodic constructive fractals and their classification are considered. The analysis of the experimental data indicates that the nanoparticle system in liquids, gases and on flat substrates can be characterized as distribution of spatially separated particles and the presence of aggregate formation. Simulation of the nanoparticle distribution showed that even externally disordered nanoparticle systems without structural self-similarity can generate fractal diffraction patterns. The possibility to identify the different nanoparticle systems based on determination of scaling parameters in the diffraction patterns as well as in the original objects is analyzed.

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

Keywords: constructive fractals, nanoparticles, diffraction, scaling, patterns, nanosystem diagnostics.

Received 14.02.2015.

Сведения об авторах

1. Ковальчук Михаил Валентинович — докт. физ.-мат. наук, член-корреспондент РАН, заведующий кафедрой оптики, спектроскопии и физики наносистем; тел. +7(495) 939-59-81.
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.