УДК 535.015

СКЕЙЛИНГ В ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИКАХ НАНОКЛАСТЕРНЫХ ОБРАЗОВАНИЙ

© 2015 г. В. В. Гридчина, П. В. Короленко, Ю. В. Рыжикова

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова" E-mail: rvzhikovaju@phvsics.msu.ru

Рассмотрена возможность идентификации систем наночастиц на основе сопоставления скейлинговых параметров их геометрии и картин дифракции зондирующего излучения. Сопоставление проведено применительно к фрактальным объектам с различным типом симметрии самоподобия. Рассмотрена связь между скейлингом в различных пространственных распределениях наночастиц и их фурье-спектрами.

DOI: 10.7868/S0367676515120169

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время фрактальный анализ успешно применяют для описания оптико-физических свойств и морфологических особенностей агломератов, сформированных наночастицами различных типов [1–3]. Знание фрактальных характеристик агломератов позволяет определить ряд важных параметров в рамках электрофизического механизма взаимодействия первичных составляющих агломератов [4]. Такие характеристики можно получить на основе анализа картин дифракции излучения, просвечивающего нанообъект. Однако получение необходимых сведений часто оказывается затруднительным из-за недостаточно проработанного вопроса о характере связи между скейлинговыми параметрами дифрагирующих волн и симметрией самоподобия нанокластера. В литературе фрактальные свойства систем наночастиц обычно рассматривают на основе стохастических моделей [3, 5-6] кластеров дендритного типа, часто принимающих звездную форму [2-3, 7-8]. Применение таких моделей из-за необходимости статистических усреднений не дает возможности провести точные оценки.

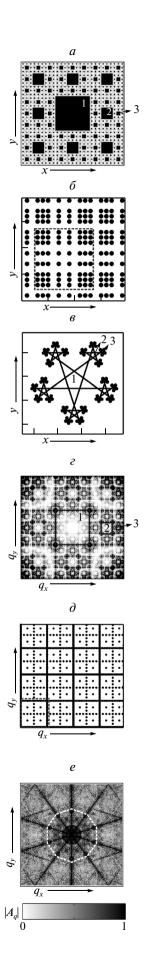
Цель данной работы — решение указанного выше вопроса с использованием представлений о детерминированных конструктивных фракталах с различным типом симметрии самоподобия. Такой подход дает возможность провести корректную классификацию исследуемых объектов и установить общие закономерности, определяющие связь между скейлингом их структуры и распределением поля дифрагирующего излучения.

СВОЙСТВА ФРАКТАЛЬНЫХ СИСТЕМ И ИХ КЛАССИФИКАЦИЯ

Конструктивные фракталы по их скейлинговым параметрам (коэффициентам скейлинга ζ [9]), могут быть разделены на три группы [3], различающиеся геометрией и типом самоподобия. Первую группу образуют фрактальные объекты с однозначно определяемым коэффициентом скейлинга ς, который находится по соотношению размеров самоподобных элементов, формирующихся при последовательных этапах процедуры построения фрактальной структуры [6, 9]. К первой группе можно отнести фракталы, построенные на основе использования числовых свойств множества Кантора и его двумерных аналогов (ковер и салфетка Серпинского).

Ко второй группе относятся объекты, характеризующиеся внутренней (или скрытой) симметрией самоподобия. Часто такой тип структур образуется на основе применения моделей 1D-квазикристаллов, сформированных с помощью числовых последовательностей Морса—Туэ, двойного периода, Фибоначчи и ряда "металлических сечений" [10–12]. Так, начальные уровни числовой последовательности двойного периода формируются элементами двух типов A и B: $S_0 = A$; $S_1 = AB$; $S_2 = ABAA$; $S_3 = ABAAABAB$. При этом переход к более высоким уровням генерации подчиняется следующему правилу замещения: $A \rightarrow AB$; $B \rightarrow AA$.

Наконец, третью группу фрактальных объектов образуют структуры с неоднозначным соотношением между размерами самоподобных элементов, принадлежащих соседним уровням используемого итерационного алгоритма. В частности, к этой



группе могут быть отнесены фрактальные объекты со сложной природоподобной геометрией, полученные в результате применения стандартной процедуры построения L-систем, а также звездные фракталы различных конфигураций [13–15]. На рис. 1 в качестве примеров указанных типов фрактальных структур приведены пространственные распределения частиц с геометрией ковра Серпинского, двойного периода и звездного фрактала в виде "пентаграммы". Алгоритмы построения фрактальных объектов, представленных на рис. 1a-1e, описаны в [3, 13, 16]. Так, моделирование объектов третьей группы, обладающих звездной геометрией, осуществлялось на основе известной итерационной процедуры [13]. Результ ее применения — задание фрактальных структур в виде замкнутых ломаных линий, последовательные отрезки которых пересекаются под одним и тем же углом а. Рекуррентные соотношения, по которым определяется длина J+2-го отрезка при известной J+1длине отрезка для пространственных координат х и у, запишем в виде

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

где l_1 — заданная длина отрезка, $Z(R^n)$ — функция выбора длины звена ломаной линии [13], R — параметр изменения длин (показатель уменьшения), n = 0, 1, 2, ... N, N — общее число шагов алгоритма построения. Варьируя основные параметры α, R, n и l_1 в формуле (1), можно изменять форму фрактальных структур в широких пределах. При моделировании фрактальных объектов использовалось преобразование полученных кривых (1) в двумерное пространственное распределение частиц, представляющих собой совокупность точечных рассеивающих центров. На рис. 2 представлены звездные структуры экспериментально зарегистрированного нанокластерного агломерата из наночастиц золота [7] (рис. 2a) и его модельное представление в виде фрагмента "пентаграммы" (рис. 2б), образованного точечными рассеивающими центрами.

Рис. 1. Конструктивные фракталы (a-e) и их пространственные спектры (z-e). Ковер Серпинского (a,z), система двойного периода $(\delta,\ \partial)$, звездный фрактал "пентаграмма" (e,e); x,y — поперечные координаты в плоскости объекта, $q_x,\ q_y$ — пространственные частоты. Цифрами показаны наиболее крупные самоподобные структурные элементы объектов (a,e) и элементы паттерных образований в поле дифракции (z). Пунктир — паттерны в полях дифракции $(\partial-e)$ и структурные элементы объекта (δ) , соответствующие паттерну (∂) .

ОСОБЕННОСТИ ДИФРАКЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ

При анализе прохождения излучения через фрактальные объекты структурная функция пропускания F^o задавалась в бинарной форме

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

где C представляет собой функцию пространственного распределения рассеивающих точечных центров, соответствующих расположению одного из типов образующих элементов квазикристаллических структур или контурной границы для объектов третьей группы. Тем самым сформированные структуры представлялись в виде чередующихся в определенном порядке нулей и единиц {0,1}, где значение 1 соответствует положению рассеивающего центра, а 0 – свободной вакансии. Такое представление анализируемых систем упрошает процедуру нахождения пространственных фурьеспектров распределений образующих частиц в моделях нанокластерных образований, определяющих структуру дифрагирующей волны. Поле дифракции в дальней зоне характеризуется амплитудой A_a :

$$A_{q} = \sum_{m=1}^{J} F_{m}^{o} \exp\{\pm 2\pi i m \sin \delta\} \omega_{J}^{(m-1)(q-1)},$$
 (3)

где $\omega_I = \exp\{-2\pi i s/J\}, q$ — нормированная пространственная частота, $i = \sqrt{-1}$, J — число элементов, s — масштабирующий множитель, δ — угол падения светового луча, F_m^o задается формулой (2) [9]. Следует отметить, что фурье-спектры рассматриваемых фрактальных объектов наиболее отчетливо передают их самоподобные свойства, что согласуются с известными литературными данными [10, 17]. На рис. 1*e*—*e* приведены картины дифракции излучения на фрактальных объектах, принадлежащих разным группам приведенной классификации. Анализ пространственных фурье-спектров рассматриваемых систем показал, что независимо от их принадлежности к тем или иным группам распределение дифракционных максимумов имеет четко выраженный фрактальный характер. При этом геометрия и скейлинговые свойства присутствующих в них самоподобных элементов находятся в определенном структурном соответствии с фрагментами исходного распределения точечных рассеивающих центров.

Расчеты показывают, что наиболее устойчивым параметром для оценки самоподобия как исследуемых структур, так и различных их оптических характеристик является коэффициент скейлинга. Коэффициенты скейлинга ς структуры и ее фурье-спектра (см. рис. 1a, 1ϵ) определяются отношением сторон выделенных квадратных областей (обозначены цифрами) по принципу большая к меньшей и равны 3.

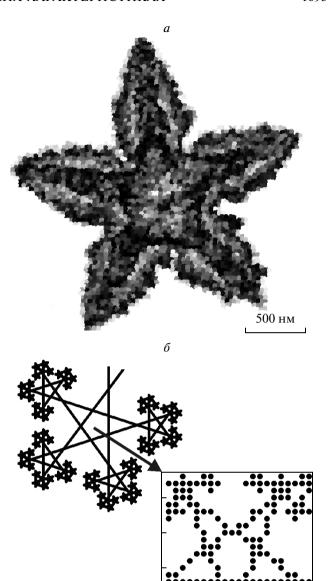


Рис. 2. Фрактальные структуры со "звездной" геометрией. Звездная структура на основе золотых наночастиц (a). Представление фрагментов "пентаграммы" с помощью точечных рассеивающих центров (δ).

Аналогично для структур квазикристаллического типа второй группы были определены коэффициенты скейлинга, устанавливающие связь между морфологическими особенностями систем и их оптическими свойствами [3, 9]. Коэффициенты скейлинга как в самих структурах, так и в их пространственных фурье-спектрах равны $\varsigma \approx 1.6$ (объекты Фибоначчи) и $\varsigma \approx 2$ (структуры Морса—Туэ и двойного периода (рис. 16, 10)).

Примечателен факт близости оценок коэффициентов скейлинга ς характеристик фрактальных структур первой группы, второй группы и оптических 1D-фотонных кристаллов, сформированных по схожему принципу [11, 18]. (В этом случае закон чередования образующих элементов двух типов A и B определяет распределение слоев c высоким и низким показателем преломления). Этот факт указывает на общность и универсальность подхода оценки скейлинговых характеристик применительно к различным оптическим системам.

Иными свойствами обладает структура на рис. 1в, принадлежащая к третьей группе исследуемых объектов. Она имеет четко выраженные самоподобные элементы, наиболее крупные из них отмечены цифрами. Оценку коэффициента скейлинга можно проводить по изменению размеров самоподобных звездных элементов, соответствующих соседним итерациям. Так, для звездного фрактала типа "пентаграммы" ($\alpha = 4\pi/5$) $\varsigma = \varsigma_{mn} =$ $= \zeta_{12} \approx 3, \zeta_{23} \approx 2.4$ и $\zeta_{34} \approx 5.1$, где m, n- итерационные индексы. Особенность таких структур (рис. 1e) состоит в том, что скейлинг характеристик их фурье-образов можно определить единым коэффициентом скейлинга. Так, соотношение размеров фиксируемых паттерных образований в центрированной картине дифракции "пентаграммы" дает для него величину $\varsigma \approx 2.6$. При варьировании угла α изменяется форма звездных фракталов и их скейлинговые параметры.

Фрактальная форма пространственных фурьеспектров излучения, дифрагирующего на рассматриваемых объектах, и фиксирование в них самоподобных образований — паттернов — указывает на возможность использования методов фрактального анализа при структурной обработке данных, получаемых в ходе просвечивания систем нанокластерных образований. Оптическая диагностика таких систем, составленных из наночастиц, может осуществляться на основе регистрации паттернов определенного типа, при этом оценка скейлинговых коэффициентов обеспечивает дополнительный контроль правильности процедуры идентификации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненный анализ скейлинговых и структурных свойств фрактальных объектов разных групп, различающихся геометрической конфигурацией и симметрией самоподобия, указывает на возможность установления взаимно однозначной связи между морфологическими особенностями структур и их пространственными фурье-спектрами на основе определения коэффициентов скейлинга ς. При этом фрактальные структуры первой группы характеризуются наличием одно-

го постоянного коэффициента скейлинга как в структуре, так и в фурье-спектрах. Фракталоподобные структуры второй группы характеризуются наличием фрактальности фурье-спектров и одного возможного значения коэффициента скейлинга $\varsigma \approx 2$ (системы Морса—Туэ и двойного периода) и $\varsigma \approx 1.6$ (системы Фибоначчи). Конструктивные фракталы третьей группы отличаются от первых двух тем, что имеет место различие коэффициентов скейлинга в геометрии фрактала и его фурьеобразе.

Таким образом, проведенный анализ указывает на необходимость учета особенностей преобразования излучения различными типами фрактальных объектов при диагностике наносистем методом просвечивания.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Pramanik B., Tadepalli T., Mantena P.R. // Materials. 2012. V. 5. P. 922.
- 2. *Hou C., Meng G., Huang Q. et al.* // Chem. Commun. 2014. V. 50. P. 569.
- 3. *Ковальчук М.В., Короленко П.В., Рыжикова Ю.В.* // Ученые записки физического факультета МГУ. 2015. № 1. С. 151401.
- Chiganova G.A. // J. Siberian Federal Univ. Eng. Technol. 2008. V. 1(2). P. 155.
- Dick V.V., Solov'yov I.A., Solov'yov A.V. // J. Physics: Conf. Seri. 2010. V. 248. 012025.
- 6. *Кроновер Р.М.* Фракталы и хаос в динамических системах. М.: Техносфера, 2006.
- 7. Wang Z., Bharathi M.S., Hariharaputran R. et al. // ACS Nano. 2013. V. 7. № 3. P. 2258.
- 8. Kohler J.M., Romanus H., Hubner U., Wagner J. // J. Nanomater. 2007. 98134.
- 9. Korolenko P.V., Ryzhikov S.B., Ryzhikova Yu.V. // Phys. Wave Phenom. 2013. V. 21(4). P. 256.
- 10. *Macia E.* // Rep. Prog. Phys. 2012. V. 75. 036502.
- Korolenko P.V., Mishin A.Y., Ryzhikova Yu.V. // Optik International Journal for Light and Electron Optics. 2013. V. 124(19). P. 3946.
- 12. Bauer C., Giessen H. // J.Opt. 2014. V. 16 P. 114001.
- 13. *Морозов А.Д.* Введение в теорию фракталов. Москва—Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002.
- 14. *Tzanov V.* // arXiv:1502.01384v1 [math.DS] 4 Feb
- 15. Xiao Ju., Qi L. // Nanoscale. 2011. V. 3. P. 1383.
- 16. Korolenko P.V., Logachev P.A., Ryzhikova Yu.V. // Phys. Wave Phenom. 2015. V. 23(1). P. 46.
- 17. *Арзамасцева Г.В., Евтихов М.Г., Лисовский Ф.В., Мансветова Е.Г.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2010. Т. 74. № 10. С. 1432; *Arzamastseva G.V., Evtikhov M.G., Lisovskii F.V., Mansvetova E.G.* // Bull. Russ. Acad. Scie.: Physics. 2010. V. 74. № 10. P. 1370.
- Korolenko P.V., Mishin A. Yu., Ryzhikova Yu.V. // Phys. Wave Phenom. 2013. V. 21(1). P. 68.