

5 - 10 июня 2016 г.

XV Всероссийская школа-семинар



“Волновые явления
в неоднородных средах”
имени профессора А.П. Сухорукова

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Физический факультет

Российский фонд фундаментальных исследований

СБОРНИК ТРУДОВ

XV Всероссийской школы-семинара «Волновые явления в неоднородных средах» имени профессора А.П. Сухорукова

г. Можайск, Московская область

5 - 10 июня 2016 года

Информация о школе-семинаре «Волны-2016», включая сборник трудов школы-семинара, представлена на сайте <http://waves.phys.msu.ru/>.

Адрес электронной почты организационного комитета: orgwaves@gmail.com.

Мероприятие проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 16-02-20274.

Самоорганизация кластеров фрактальных нанодендритов

П.А. Логачев, С.Б. Рыжиков, Ю.В. Рыжикова
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем
ryzhikovaju@physics.msu.ru

В настоящее время фрактальный анализ получил широкое распространение в области исследования оптико-физических характеристик стохастических и детерминированных структур, в частности, при разработке эффективных методов повышения чувствительности спектральных методов анализа состава веществ и оценки морфологических особенностей агрегатов, сформированных наночастицами различных типов [1-3]. Особую актуальность имеют медицинские приложения в области внедрения новых технологий диагностики, разработки средств инкапсулирования и доставки лекарственных веществ с помощью частиц-носителей. Часто в качестве таких частиц выступают дендритоподобные макромолекулы – дендримеры [4]. Отметим, что дендритный тип пространственных распределений наночастиц получил наибольшее распространение в разных приложениях [5-7].

В данной работе проводится анализ процессов самоорганизации структур дендритного типа, сформированных под действием множества случайных факторов. Целью работы является установление взаимосвязи между морфологическими особенностями строения решеток дендритного типа и фрактальностью характеристик как самих структур, так и их дифракционных образов. Построение дендритных структур осуществлялось с учетом свойств ассоциации наночастиц в двумерном пространстве (рис. 1). Выбранные модели ассоциации – «баллистическая агрегация – кластер» (рис. 1, а) и «ограниченная диффузией агрегация» (рис. 1, б) самосогласуются с известными литературными данными [8-9].

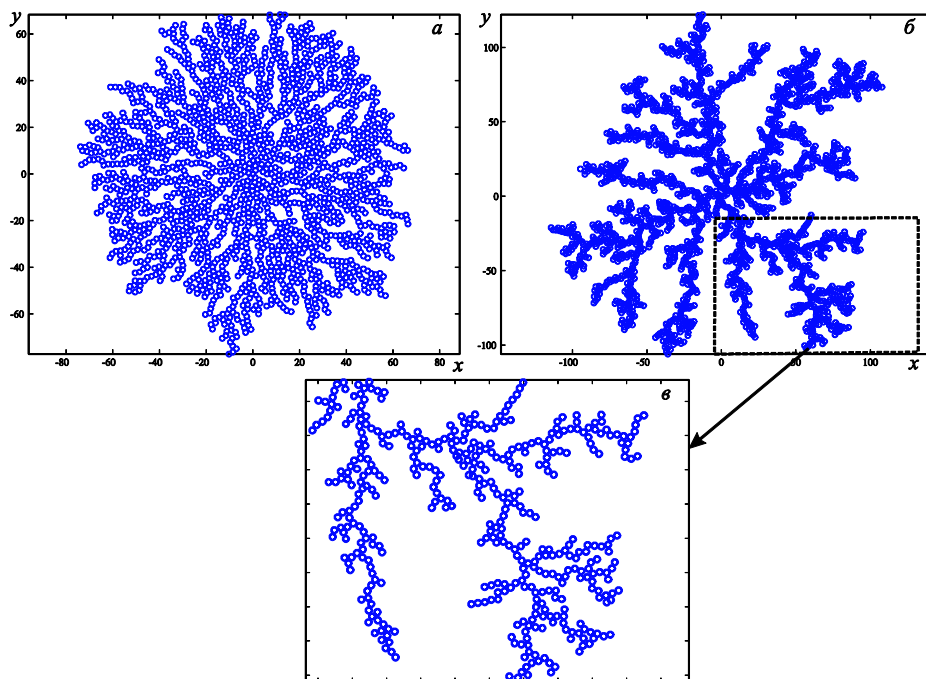


Рис. 1. Фрактальное пространственное распределение наночастиц дендритов в приближении ассоциации «баллистическая агрегация – кластер» (а) и «ограниченная диффузией агрегация» (б), в – фрагмент (б), составленный из рассеивающих центров.

Движение частиц в рамках реализации модели ассоциации частиц «баллистическая агрегация – кластер» (рис. 1, а) можно представить в виде последовательных перемещений на равные расстояния Δr за каждый шаг:

$$\begin{aligned} \beta &= \alpha + \varphi \cdot (\text{rand} - 0.5), \\ x_{k+1,j} &= x_{k,j} - \text{sgn}(x_{k,j}) \Delta r \cos \beta, \\ y_{k+1,j} &= y_{k,j} - \text{sgn}(y_{k,j}) \Delta r \sin \beta, \end{aligned} \quad (1)$$

где x, y – координаты частиц кластера, индекс j – номер частицы, индекс k – номер шага, $\alpha = \arctg\left(\frac{y_{k,j}}{x_{k,j}}\right)$ при $x_{k,j} \neq 0$ и $\alpha = \frac{\pi}{2}$ при $x_{k,j} = 0$, rand – генератор случайных чисел от 0 до 0.999..., sgn – функция, возвращающая знак числа, угол φ характеризует отклонение частиц от движения к центру дендрита.

Формула (1) допускает обобщение на процессы самоорганизации кластеров в рамках модели ассоциации «ограниченная диффузией агрегация» (рис. 1, б) при $\varphi = 2\pi \cdot \text{rand}$:

$$\begin{aligned} x_{k+1,j} &= x_{k,j} + \Delta r \cos \varphi, \\ y_{k+1,j} &= y_{k,j} + \Delta r \sin \varphi. \end{aligned} \quad (2)$$

При моделировании дендритов использовалось преобразование полученных кривых (1) и (2) в двумерное пространственное распределение частиц, представляющих собой совокупность рассеивающих центров (рис. 1, в). Функция пропускания F^o дендритов задавалась в бинарной форме

$$F^o(x, y) = \begin{cases} 1, & x_{k,j}, y_{k,j} \in C \\ 0 & x_{k,j}, y_{k,j} \notin C \end{cases} \quad (3)$$

где C – представляет собой функцию пространственного распределения рассеивающих центров. Такое представление анализируемых структур существенно упрощает нахождение фурье-спектров распределений образующих частиц в моделях нанокластерных образований, определяющих структуру дифрагирующей волны [10].

Поле дифракции в дальней зоне от структур дендритного типа рассчитывалось аналогично [10-11]. Количественная оценка самоподобных свойств, проявляющихся как в самих дендритных структурах, так и в их оптических характеристиках осуществлялась с использованием определения структурной функции, с помощью которой определяется «массовая» (кластерная) фрактальная размерность D [12-13]. Для примера на рис. 2 приведены зависимости средней массовой фрактальной размерности в зависимости от числа составляющих частиц кластера (рис.1, а) в случае линейной траектории частиц (1), реализующиеся при $\varphi = 0$. Кривые 1 и 2 соответствуют области структуры кластера и его дифракционной картине (анализировались распределения интенсивности дифрагированной волны), соответственно.

Результаты моделирования показывают, что массовые фрактальные размерности дендрита имеют близкие значения, как в области задания структуры кластера, так и в картинах дифракции. Аналогичные результаты для массовых фрактальных размерностей были получены на основе использования более общей модели формирования кластера с учетом броуновского движения составляющих его частиц (рис. 1, б).

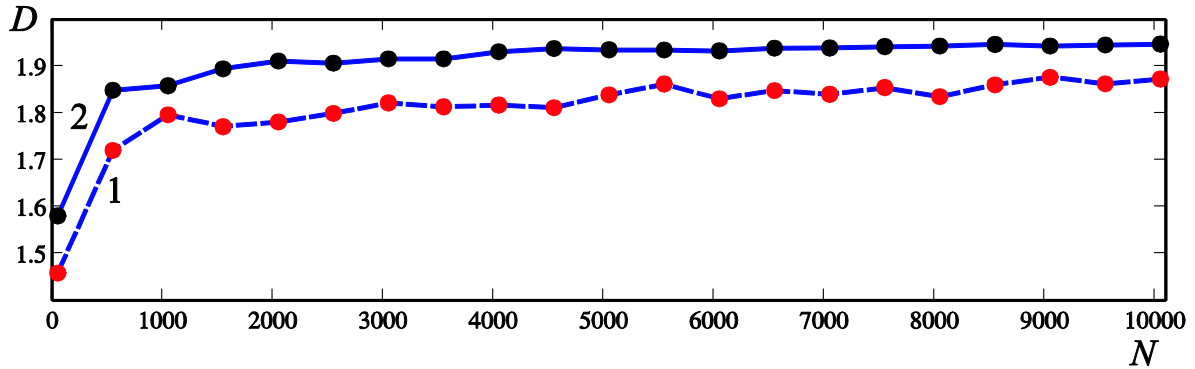


Рис. 2. Динамика изменения в процессе самоорганизации кластерных фрактальных размерностей структуры дендрита (1) и его дифракционных картин (2).

Полученные результаты указывают на то, что распределение дифракционных максимумов исследуемых объектов дендритного типа имеет фрактальный характер, причем топологические и фрактальные свойства элементов картин дифракции находятся в определенном соответствии с фрагментами начального геометрического распределения рассеивающих центров. Таким образом, результаты исследования фрактальных свойств в характеристиках дендритов, сформированных различными способами, указывают на дополнительные диагностические возможности фрактальных методов для широкого класса стохастических структур.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ в рамках научного проекта №16-32-00386 мол_а.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.В. Ковальчук, П.В. Короленко, Ю.В. Рыжикова // Ученые записки физического факультета МГУ. 2015. №1. С. 151401.
2. А.А. Потапов // Вестн. Нижегородского ун-та им. Н.И. Лобачевского. 2012. № 5 (2). С. 172.
3. А.Н. Боголюбов, А.А. Петухов, Н.Е. Шапкина // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. 2008. № 2. С. 7.
4. В.Н. Кидалов, А.А. Хадарцев “Тезиография крови и биологических жидкостей” Тула: Тульский полиграфист, 2009.
5. Д.В. Александров, П.К. Галенко // Успехи физических наук. 2014. Т. 184. №8. С. 833.
6. В.И. Марголин и др. // Известия академии инженерных наук им. А.М. Прохорова. 2015. № 1. С. 7.
7. В.В. Гридчина, П.В. Короленко, Ю.В. Рыжикова // Ученые записки физического факультета МГУ. 2015. №4. С. 154307.
8. В.М. Самсонов, Ю.В. Кузнецова, Е.В. Дьяков // Журнал технической физики. 2016. Т. 86. вып. 2. С.71.
9. Б.М. Смирнов // Успехи физических наук. 1986. Т. 149. вып. 2. С. 1055.
10. В.В. Гридчина, П.В. Короленко, Ю.В. Рыжикова // Известия РАН. Серия физическая. 2015. Т. 79. №12. С. 1691.
11. P.V. Korolenko, S.B. Ryzhikov, Yu.V. Ryzhikova // Phys. Wave Phenom. 2013. V. 21(4). P. 256.
12. Е. Федер “Фракталы” М.: Мир, 1991.
13. А.М. Зотов и др. // Электромагнитные волны и электронные системы. 2013. Т.18. №12. С. 10.