

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОКЛАСТЕРОВ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА КОЛЛОИДНЫЙ РАСТВОР

Синтез нанокластеров представляет интерес в сфере нанотехнологий получения материалов с уникальными наперед заданными свойствами. Уникальные свойства таких наноматериалов в основном связаны с размерными эффектами когда при достижении наноразмерного диапазона их свойства начинают значительным образом отличаться от массивных образцов [1].

Исходные коллоидные системы, содержащие металлические нанокластеры (Ni, Cu, Ti) были получены лазерным воздействием на твердую мишень, погруженную в жидкость. Экспериментальная установка и метод получения таких систем подробно описан в работе [2]

Из приведенных данных по размерам синтезированных частиц, можно сделать вывод о том, что на размеры синтезируемых частиц влияет, как интенсивность лазерного воздействия, с учетом длительности импульса, так и свойства самой жидкой среды. Причем использование непрерывного лазерного излучения умеренной интенсивности позволяет получать наночастицы наименьших размеров и представляется наиболее перспективным, для дальнейшего применения [3].

Моделирование процесса образования кластеров проводилось в рамках модели кластер-кластерной агрегации на двумерной расчетной области. В нижней части расчетной области располагалась мишень, от поверхности которой вследствие воздействия лазерного излучения отделялись модельные наночастицы. Их размеры N подразделялись на 6 типов – одномерные, двумерные, трехмерные, четырехмерные, пятимерные и многомерные. Частицы совершали броуновское движение по узлам решетки, реализованное методом случайных блужданий. Метод случайных блужданий на плоскости [4] описывается через случайное изменение координат (x, y) движущихся частиц на плоскости:

$$x_n = x_0 + \sum_{i=1}^n stx_i, y_n = y_0 + \sum_{i=1}^n sty_i, \quad (1)$$

где x_0, y_0 – координаты начала блуждания, stx, sty – шаги по горизонтали и вертикали соответственно, n – количество шагов.

При попадании блуждающих частиц в соседние к агрегатам ячейки в соответствии с окрестностью Мура порядка 1 [5] с заданной вероятностью p они становились элементами агрегата или двигались

дальше. Скорость движения i -ой частицы была обратно пропорциональна ее размеру $v_i=v/N$, где v – максимальная скорость частицы в системе. Кроме того, по мере удаления от мишени скорость частицы уменьшалась. Также учитывалось воздействие лазерного излучения на систему, когда в области его воздействия задавалась вероятность отсоединения мономера от агрегата (q), а значение p становилось значительно меньше. Кроме этого частота отсоединения частиц от мишени была пропорциональна мощности излучения.

На рисунке 1 изображены результаты моделирования образования кластеров на расчетной области размером 100×100 отн.ед. при воздействии лазера на мишень в при варьировании времени t на $[500; 2500]$ отн.ед. Максимальная скорость движения v выбиралась равной 10 отн.ед, скорость отсоединения частиц от мишени составила 1 шт в ед. времени. Вероятность присоединения частицы вне зоны лазерного воздействия составляла 80%, в зоне действия лазера (квадрат в центре расчетной области со стороной 30 отн.ед) вероятность отсоединения частицы от кластера составляла 80%.

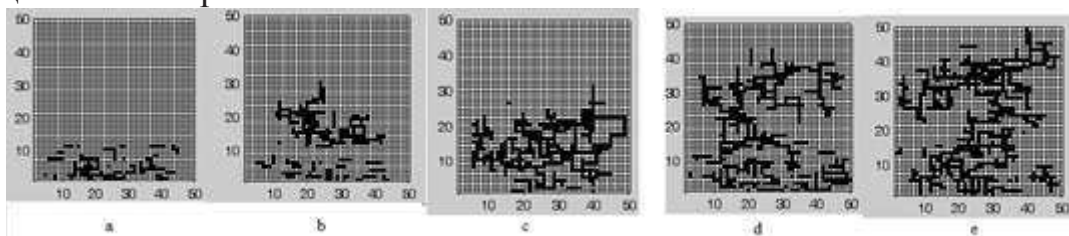


Рисунок 1 - Нанокластерные агрегаты при $t=500$ (a), $t=1000$ (b), $t=1500$ (c) $t=2000$ (d), $t=2500$ (d)

Из рисунка 2 можно оценить влияние максимальной скорости движения v на характер кластерных агрегатов 10 отн.ед(а), 20 отн.ед(б), 30 отн.ед(в). На рисунке 3 изображены результаты моделирования образования кластеров при вероятности отсоединения частицы от кластера составляла 70%(а), 90(б).

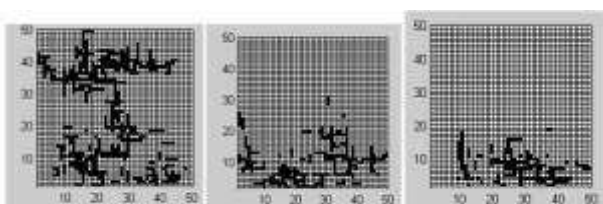


Рисунок 2 - Нанокластерные агрегаты при $t=2000$ для $v=10$ отн.ед(а), $v=20$ отн.ед(б), $v=30$ отн.ед(в)

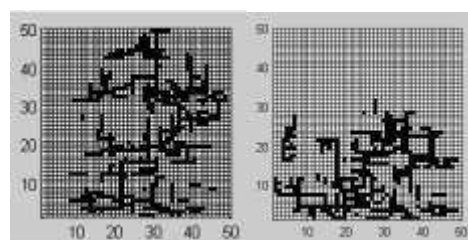


Рисунок 3 - Нанокластерные агрегаты при $t=2000$ для $p=70\%$ (а), $p=90\%$ (б).

Проводя сравнение результатов моделирования с экспериментальными можно сделать вывод об их совпадении на качественном

уровне. Таким образом, предложенные модели могут быть полезны при изучении процессов образования нанокластеров в жидкости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гусев, А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии/ А.И. Гусев. М.: Физматлит, 2007.

2. Антипов, А.А. Аракелян, С.М. Лазерный синтез микро- наночастиц в жидких средах/ А.А. Антипов, С.М. Аракелян, Д.Н. Бухаров, С.В. Кутровская, А.О. Кучерик, А.В. Осипов, В.Г. Прокошев, Л.А. Ширкин// Химическая физика и мезоскопия, 2012, 14(3), 401-407.

3. Антипов, А.А., Аракелян, С.М. Образование ансамбля наночастиц с бимодальным распределением по размерам при воздействии непрерывного лазерного излучения на пленки РbТе/ А.А. Антипов, С.М. Аракелян, В.И. Емельянов, С.П. Зимин, С.В. Кутровская, А.О. Кучерик, В.Г. Прокошев // Квантовая электроника, 2011, 41 (8), 735–737.

4. Грибова, Е.З., Саичев, А.И. Физический подход к анализу диффузии частиц: Монография/ Е.З. Грибова, А.И. Саичев. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2012.

5. Лобанов, А.И. Модели клеточных автоматов/ А.И. Лобанов// Компьютерные исследования и моделирование, 2010, 2(3), 273–293.