

УДК 538.9.

С.Г. Карстина, проф., д-р физ.-мат.наук;  
А.А. Маратбаев, магистрант  
(КарГУ им. академика Е.А. Букетова, г.Караганда)

## САМООРГАНИЗАЦИЯ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ДИСПЕРСНЫХ МАТРИЦАХ ПРИ ОБМЕННО-РЕЗОНАНСНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯХ

В дисперсных матрицах при изменении геометрических, термодинамических, статистических и кинетических параметров возможны самоорганизация и согласованное поведение системы в целом. Изучение этих процессов представляет собой одну из актуальных задач современного материаловедения. В связи с этим в настоящей работе в широком диапазоне температур ( $T=157\text{K}\div 293\text{K}$ ) исследовано влияние процессов переноса энергии электронного возбуждения и аннигиляции на самоорганизацию неоднородной молекулярной матрицы, представляющей собой адсорбированные на фрактальной поверхности широкопористого кремнезема молекулы красителя эритрозина (Эр) и ароматического углеводорода антрацена (Ан). Все спектрально-кинетические измерения выполнены на установке лазерного фотолиза. Начальная поверхностная концентрация молекул красителя в исследуемых образцах выбиралась равной  $7,4\cdot 10^{-4}$   $1/\text{нм}^2$ , что соответствовало монослойному покрытию поверхности. Поверхностная концентрация молекул антрацена изменялась от  $3,9\cdot 10^{-1}$   $1/\text{нм}^2$  до  $3,9\cdot 10^{-2}$   $1/\text{нм}^2$ . При выбранных поверхностных концентрациях соотношение степеней покрытия поверхности сорбента молекулами составляло Эр и Ан составляло 1:1, 1:4, 1:40. Проведенные эксперименты показали, что наиболее резкое изменение скоростного коэффициента аннигиляции  $K$  в структурно-неоднородной молекулярной матрице (параметр локальной неоднородности  $h \neq 0$ ), рассчитываемого на разных временных участках экспериментальных кинетических зависимостей наблюдается на начальных временах. При этом скорость  $K$  увеличивается с увеличением параметра  $h$ , на значение которого оказывает влияние температура матрицы и эффективность протекающих на поверхности процессов. С понижением температуры матрицы параметр  $h$  стремится к некоторому постоянному значению, что указывает на образование устойчивых локальных структур, фрактальные свойства которых не изменяются в результате переноса энергии электронного возбуждения. Достижение предельного значения  $h=1$  на больших временах свидетельствует об образовании на поверхности микрокластеров.

Результаты эксперимента сопоставлялись с данными компьютерного моделирования, проводимого с помощью вероятностного клеточного автомата и решеточной модели. При моделировании расстояние между узлами решетки принималось равным радиусу взаимодействия для процессов обменно-резонансного переноса энергии. Влияние топологии поверхности и окружения на процессы межмолекулярного взаимодействия учитывались заданием начального распределения реагентов (хаотическое и мультифрактальное) по поверхности и вероятностью взаимодействия. Анализ кинетики парных взаимодействий в модели межмолекулярных взаимодействий проводился через дискретные промежутки времени, задаваемые числом итераций  $N$ . Каждая итерация, в среднем, соответствует времени между актами взаимодействия. Изменение характера распределения взаимодействующих частиц по поверхности в результате межмолекулярных взаимодействий анализировалось по изменению функции распределения частиц по ячейкам заданного размера методом мультифрактального анализа (МФА).

Компьютерное моделирование и расчет фрактальных размерностей методом мультифрактального анализа (МФА) позволили провести анализ изменения фрактальности молекулярных кластеров при переносе энергии электронного возбуждения и аннигиляции взаимодействующих молекул. В качестве критерия самоорганизации структуры и степени нарушения симметрии использован параметр упорядоченности  $\Delta$ . Значение  $\Delta < 0$  характеризует отсутствие упорядоченности в моделируемой матрице. Полученные временные зависимости  $\Delta$  позволяют сделать вывод, что перенос энергии между взаимодействующими молекулами и аннигиляция приводят к увеличению параметра упорядоченности. При этом на больших временах параметр  $\Delta$  достигает некоторого постоянного значения и далее не изменяется. Данная тенденция наиболее ярко проявляется в менее упорядоченных матрицах при увеличении концентрации одного из сортов взаимодействующих молекул. Увеличение температуры исследуемых образцов не приводит к существенным изменениям численных значений параметра упорядоченности, но сокращает время насыщения. Наблюдаемые временные зависимости  $\Delta$  хорошо согласуются с результатами расчета на основе экспериментальных данных параметра неоднородности  $h$ .

Таким образом, на основе полученных результатов установлено, что процессы переноса энергии в структурно-неоднородной молекулярной матрице приводят к образованию на поверхности устойчивых фрактальных структур и самоорганизации всей системы.