

Д.Н. Бухаров, А.О. Кучерик, доц. к.ф.-м.н.,
С.М. Аракелян, проф., д-р. ф.-м.н
(ВлГУ, г. Владимир)

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ОСТРОВКОВЫХ НАНОПЛЕНОК БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

На сегодняшний день островковые нанопленки благородных металлов (Ag, Au и их комплексов) образуют семейство современных уникальных материалов с наперед заданными свойствами, которые могут использоваться как новая элементная база микро/наноэлектроники и фотоники.

Физико-химические, электрофизические и оптические свойства таких материалов существенно зависят от расположения структурных особенностей на их поверхности, что позволяет разрабатывать методы получения образцов с управляемыми свойствами.

Рассмотренные в работе нанопленки были получены методом термодиффузного осаждения из коллоидного раствора, полученного путем интенсивного перемешивания наночастиц благородных металлов (Ag, Au, смеси Ag/Au) (со средним радиусом 100 нм) с глицерином. В результате локального лазерного воздействия на коллоидный раствор на поверхности подложки, помещенной в него, происходило осаждение спекшихся наночастиц благородных металлов (Ag, Au, смеси Ag/Au) по траектории движения пучка с образованием островковых структур. Полученные наноструктуры исследовались с использованием растрового электронного микроскопа Quanta 200 3D и зондовой нанолаборатории Интегра-Аура (рис.1.) [1]. В процессе осаждения формировались кластерные пленки со средней высотой от 10 до 50 нм. Проведенные исследования показали фрактальный характер полученных пленок. Исследование фрактальных размерностей позволило провести классификацию полученных пленок и соотнести их с существующими фрактальными моделями. Так осаждению коллоидов из чистого золота и серебра образовывались фрактальные кластерные структуры, типа дендритов (рис 1 а), перколяционных кластеров (рис 1б) или фрактального броуновского движения (рис 1 в). В островках таких пленок хорошо выделяются отдельные частицы размерами 30–100 нм., величины которых превышают диаметры частиц в исходном коллоиде, что говорит о термодиффузии и агрегации частиц до осаждения.

При осаждении частиц из смешанного коллоида Au/Ag (рис. 1 г) образуются более разреженные кластерные структуры, которые уже имеют более явную общую поверхность, что позволяет говорить о плавлении частиц в процессе образования кластера.

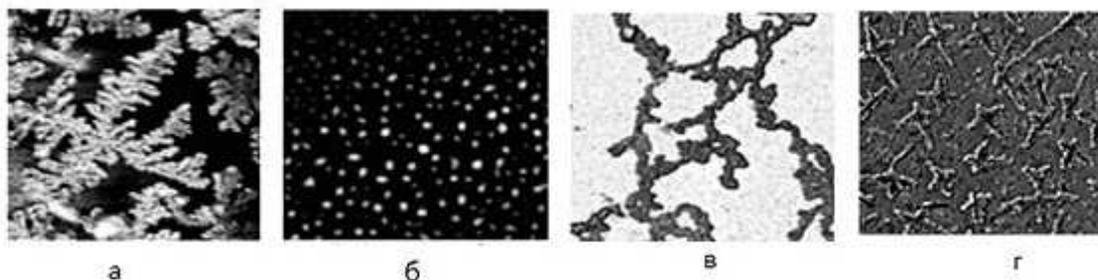


Рис. 1. АСМ изображения островковых пленок: дендритная Ag (а), перколяционная Ag/Au (б), фрактальное броуновское движение Ag (в), звездообразная Ag/Au (г)

В связи с очевидным фрактальным характером полученных пленок для моделирования их структуры применялся подход фрактальной геометрии.

Для хорошо сформированных дендритообразных, а так же звездообразных структур (рис 1а) выбиралась модель фрактала DLA [2]. Для описания пленки в рамках модели DLA, расчетная область представлялась как система ячеек, в качестве начальных условий в расчетной области задавалось распределение затравочных структур, к которым в процессе движения прилипали частицы. Варьируемыми параметрами были коэффициент прилипания и вязкости коллоида. В процессе моделирования в расчетную область вводились частицы, движущиеся по случайным траекториям с учетом вязкости коллоида. Частица, попавшая в область захвата (в окрестность Мура), прилипала уже сформированному агрегату с вероятностью прилипания, формируя модельный объект. На рис. 2 а смоделирована островковая пленка в приближении DLA фрактала с параметром вероятности прилипания равным 0.5 и вязкости 1, соответствующим условиям эксперимента, с равномерным начальным распределением затравочных частиц. Варьируя значения параметра прилипания, возможно получать различные структуры: при малом значении более однородно заполненные с достаточно гладкими границами, при большом значении - значительно разветвленные и неоднородные с сильно изрезанными границами. Так, для моделирования звездообразной пленки с изрезанными границами параметры вероятности прилипания и вязкости выбираются около 1.

Модель пленки основе перколяционного фрактала реализовалась методом Монте-Карло. При таком подходе расчетная

область представлялась системой ячеек, заполненных с заданной вероятностью проницаемости p случайным образом: 0 - пустой участок, 1 - занятый. Группа занятых ячеек решетки образовывала островок нанопленки, свойства которого вычислялись через процедуру ренорм-кластеризации [3]. Варьируя параметр p можно получить различные виды перколяционных фрактальных поверхностей. На рис 2 б представлен смоделированный перколяционный кластер при проницаемости $p=0.8$ для Ag/Au пленки, при соотношении частиц 50:50.

Модель островковой пленки в приближении фрактального броуновского движения [4] была реализована через механизмы случайных блужданий затравочных структур по плоскости при варьировании длины шага. На рис. 2 в представлена структура пленки для 1000 шагов для 10 затравочных структур.

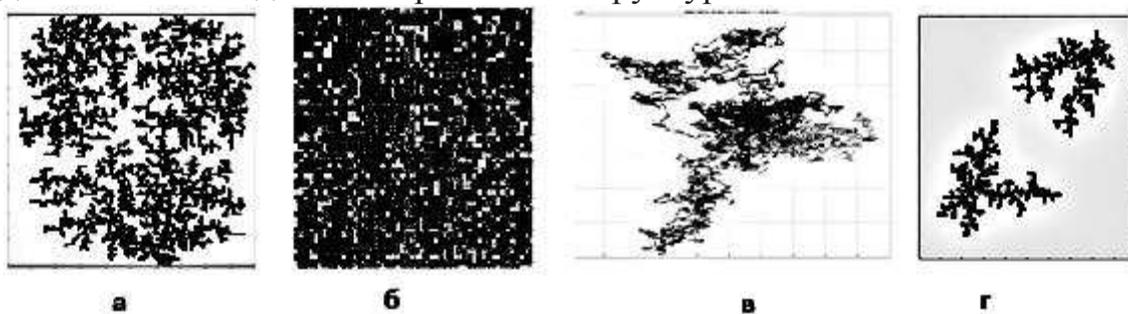


Рис. 2. Смоделированные изображения островковых пленок: модель DLA для Au пленки(а), перколяционная модель Ag/Au пленки (б), фрактальная броуновская модель для Ag пленки(в), модель DLA для звездообразной пленки Ag/Au

Предложенные модели позволяют оценить размеры островков нанопленки, перейдя от относительных к абсолютным единицам через масштабный коэффициент, равный величине ячейки расчетной области. Так, например, для DLA островка (рис 1 г) с диаметром минимального покрытия величиной 83.8276 отн. ед с размером ячейки в 10 нм, можно оценить абсолютный радиус как 838.267 нм., что качественно совпадает с результатами анализа с использованием зондовой нанолаборатории Интегра-Аура. Расчеты из рис. 1 в позволяют оценить размеры агломератов в пределах от 20 до 180 мкм, а горизонтальный и вертикальный размеры пленки составили 178 мкм и 350 мкм соответственно, что на качественном уровне удовлетворяет результатам экспериментальных измерений.

Таким образом, предложенные модели позволяют в первом приближении оценить как величины отдельных структур нанопленки пленки, так и ее размеры в целом. Этот факт дает возможность

спрогнозировать структуру нанопленки и свойства без проведения дополнительных натуральных экспериментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Антипов А.А. и др. Осаждение биметаллических кластеров Au/Ag с использованием метода лазерного осаждения наночастиц из коллоидных систем/ А. А. Антипов, С. М. Аракелян, С. В. Кутровская, А. О. Кучерик, Т. А. Вартанян //Оптика и спектроскопия. 2014. т. 116. № 2. С.349-352.
2. Меньшутин А.Ю, Щур Л.Н. Многомерное обобщение модели Diffusion Limited Aggregation (DLA)/ А.Ю. Меньшутин, Л.Н. Щур //Механика, управление и информатика. 2014. 6(51). С. 110-120.
3. Малютин В.М. Компьютерное моделирование физических явлений / В.М. Малютин, Е.А. Склярова.Томск: Изд-во ТПУ, 2004.
4. Кроновер Р. М. Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории/ Р. М. Кроновер. М.: Постмаркет, 2000.