

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ НАНОКЛАСТЕРОВ
БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ ЛАЗЕРНОМ
ВОЗДЕЙСТВИИ НА КОЛЛОИДНЫЕ СИСТЕМЫ**

Коллоидные системы наночастиц, а также наноструктуры благородных металлов на их основе, например, Ag, Au и их соединения находят обширное применение в различных областях науки и техники, особенно в наноэлектронике и нанофотонике.

Коллоидные системы наночастиц благородных металлов (Ag, Au) формировались за счет воздействия лазерного излучения умеренной интенсивности (до 10^6 Вт/см²) на длине волны 1,06 мкм на объемные мишени (состав: Au– 99,9%, Ag-99,9%), помещенные в жидкие среды. Для осаждения нанокластеров из раствора на подложку нами применялся метод термодиффузного осаждения на стекло вещества из коллоидного раствора, полученного путем интенсивного перемешивания наночастиц благородных металлов (состава Ag, Au, и/или смеси Ag/Au, со средним размером 100 нм) с глицерином[1]. После лазерного воздействия коллоидные системы исследовались с использованием анализатора размеров частиц по динамическому рассеянию света – Horiba LB-550. Осажденные на подложку наноструктуры исследовались с использованием растрового электронного микроскопа Quanta 200 3D и зондовой нанолаборатории Интегра-Аура. Проведенные исследования показали их фрактальный и диффузионный характер, которым был обусловлен выбор приближения для моделирования.

Для описания модели процесса формирования нанокластеров при лазерном воздействии на коллоидные системы рассматривались два процесса: агрегация наночастиц из раствора в кластеры и их дальнейшее осаждение с последующим формированием кластерных структур.

Моделирование процесса образования кластеров проводилось в рамках приближения диффузионно-ограниченной агрегации (DLA)[2], позволяющей описывать агрегаты как в самой коллоидной системе, так и их осажденные системы.

В общем случае алгоритм формирования структур DLA реализуется как броуновское движение частицы по расчётной области с расположенной в ней структурой-зародышем, с последующим прилипанием с заданной вероятностью, называемой вероятностью

прилипания. Различные модификации общего случая DLA позволяют учитывать тепловые процессы, протекающие во время агрегации в коллоидных системах. Модель DLA и ее модификации с учетом дополнительных факторов могут быть реализованы с использованием техники клеточного автомата с окрестностями Неймана или Мура [3]. Так использование окрестности Неймана позволяет получать образцы с неоднородной структурой, а окрестности Мура – хорошо заполненные, однородные образцы.

Начальное распределение структур-зародышей, характер расчетной области, как и вероятность прилипания s , оказывают влияние на форму агрегатов. Так на рис.1 приведены 3d модельные изображения DLA кластеров в относительных единицах на основе клеточного автомата в окрестности фон Неймана. Системы кластеров формировались в сфере в центре расчетной области для случая $s < 1$ (рис. 1а) и $s < 0.1$ (рис. 1б), а также в случае агрегации от точки в центре (рис. 1в и 1г).

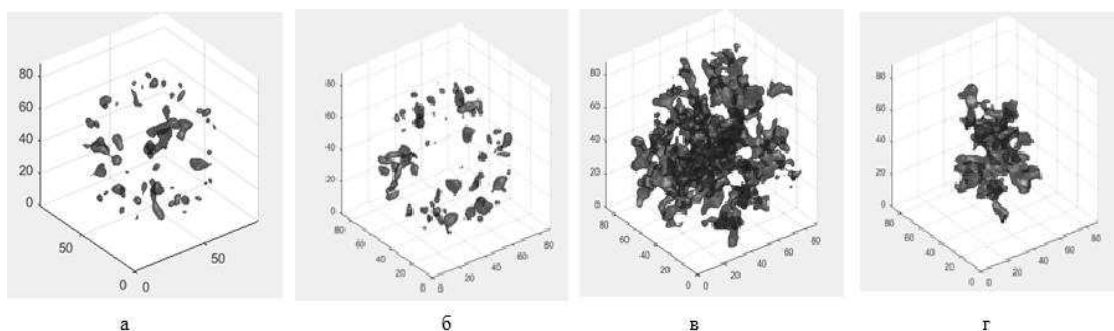


Рис 1. DLA кластеры: зародыш в сфере в центре, в рамках которой формируется агрегат $s < 1$ (а), $s < 0.1$ (б), зародыш в центре, агрегат формируется во всей расчетной области $s < 1$ (в), $s < 0.1$ (г).

На рис.2 приведено модельное изображение системы дендритных нанокластеров в относительных единицах, осажденных из коллоидного раствора на подложку. Оно формировалась на основе модели DLA, когда в качестве структуры-зародыша выбиралась горизонтальная плоскость, а значение s составляло величину 1 (рис. 2а). Так же рассматривался случай зависимости s от текущей максимальной высоты структуры (рис. 2б) в сторону увеличения.

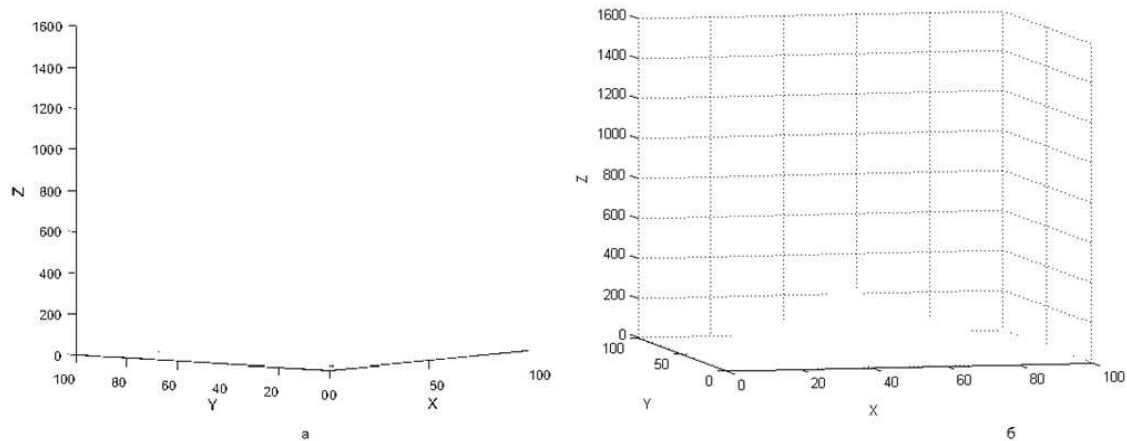


Рис 2. DLA структура кластеров, осажденных на поверхность:
 $s=1(a)$, s – зависит от текущей максимальной высоты структуры.

Проведенное сравнение результатов моделирования и эксперимента показало удовлетворительную степень, что говорит о достаточно хорошей степени адекватности предложенного моделирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Антипов, А.А., Аракелян, С.М., Бухаров, Д.Н., Кутровская, С.В., Кучерик, А.О., Осипов, А.В., Прокошев, В.Г., Ширкин, Л.А. 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. –Т. 14, № 3. –С. 401-407.

2. Mroczka, J., Woźniak, M., Onofri, F.R.A. Algorithms and methods for analysis of the optical structure factor of fractal aggregates / J. Mroczka, M. Woźniak, F.R.A. Onofri //Metrol. Meas. Syst.. – 2012 . – Vol. XIX, № 3. – PP. 459-470.

3. Лобанов, А.И. Модели клеточных автоматов/ А.И. Лобанов // Компьютерные исследования моделирование. – 2010. –№ 3. – С. 273–293.