# ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

# Оптические свойства фрактальных нанодендритов в процессах их самоорганизации

Д. Д. Ружицкая, С. Б. Рыжиков, Ю. В. Рыжикова<sup>*а*</sup>

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2. E-mail: <sup>a</sup>ryzhikovaju@physics.msu.ru

Статья поступила 27.06.2017, подписана в печать 18.07.2017.

Представлен простой способ построения 2D фрактального кластера нанодендритов, образованного в процессе самоорганизации наночастиц. Установлена закономерность между структурными особенностями решеток дендритного типа и фрактальностью характеристик как самих исследуемых объектов, так и их дифракционных картин.

*Ключевые слова*: фрактальные кластеры, дендриты, самоорганизация, кластерная фрактальная размерность.

УДК: 535.015. PACS: 42.25.Fx; 61.43.Hv; 07.05.Tp.

### Введение

В настоящее время фрактальный анализ получил широкое распространение в области исследования оптических и других физических характеристик стохастических и детерминированных структур [1–3]. В частности, он успешно используется для разработки новых методов повышения чувствительности спектральных методов анализа состава веществ и анализа структурных особенностей агрегатов, сформированных наночастицами различных типов [1, 3, 4].

Фрактальные элементы со сложной пространственной структурой нашли применение в различных оптических устройствах, создаваемых, в частности, на основе использования современных нанотехнологий. Их совершенствование тесным образом связано с разработкой и улучшением методов диагностики, позволяющих определять качество рассматриваемых систем [5, 6].

Отметим, что дендритный тип пространственных распределений наночастиц получил большее распространение в различных приложениях [7–10]. Особую актуальность имеют медицинские приложения в области внедрения новых разработок средств инкапсулирования и доставки лекарственных веществ с помощью частиц-носителей. Часто в качестве таких частиц выступают дендритоподобные макромолекулы — дендримеры [9, 10]. Знание фрактальных характеристик агломератов наночастиц позволяет корректно описать электрофизический механизм их взаимодействия [11].

В работе проводится анализ процессов самоорганизации структур дендритного типа, сформированных под действием случайных факторов. Цель работы — установление взаимосвязи между структурными особенностями решеток дендритного типа и фрактальностью характеристик как самих исследуемых объектов, так и их дифракционных картин. При решении задачи о нахождении такой закономерности ключевым параметром, влияющим на вид траекторий частиц кластера и его форму в процессе его образования, является угол разлета частиц, формирующих дендритные структуры.

#### 1. Методы построения дендритных структур

Построение дендритных структур осуществляется с учетом свойств ассоциации наночастиц в двумерном пространстве (рис. 1) с использованием агрегационных моделей частица-кластер. Результаты моделирования кластеров в рамках выбранных моделей ассоциации — «ограниченная диффузией агрегация» (рис. 1, a) и «баллистическая агрегация — кластер» (рис. 1, б) согласуются с известными литературными данными [12–15].

Движение составляющих частиц кластеров, формирующихся в рамках модели ассоциации «ограниченная диффузией агрегация» (рис. 1, a) в нашей программе мы рассчитывали в виде последовательных перемещений на равные расстояния  $\Delta r$  за каждый шаг цикла:

$$x_{k+1,j} = x_{k,j} + \Delta r \cos \varphi,$$
  

$$y_{k+1,j} = y_{k,j} + \Delta r \sin \varphi.$$
(1)

Здесь угол  $\varphi$  характеризует отклонение частиц от движения к центру дендрита:  $\varphi = 2\pi \cdot \text{rand}$ , где rand — генератор случайных чисел от 0 до 0.999..., x, y — координаты частиц кластера, индекс j номер частицы, индекс k— номер шага. Кластер формируется из частицы-затравки, расположенной в центре области его формирования.

Случайность процесса в нашей программе реализовалась тем, что частица, совершающая случайное



Рис. 1. Фрактальное пространственное распределение наночастиц дендритов (число частиц N = 5000) в приближении ассоциации «ограниченная диффузией агрегация» (а) и «баллистическая агрегация — кластер» (б); s — фрагмент (б), выделенный пунктиром

движение (1), начинает двигаться из произвольной точки окружности с фиксированным радиусом  $R_{\rm gen}$ , проведенной вокруг затравки. При соприкосновении с кластером частица присоединяется к нему, после чего формируется новая частица на окружности. Для увеличения скорости формирования кластера задается дополнительная окружность с радиусом  $R_{\rm del} > R_{\rm gen}$ , ограничивающая область блуждания частиц. При выходе за пределы этой окружности частица уничтожается и выпускается новая с окружности генерации частиц  $R_{\rm gen}$ .

В другой модели нами задавалось частично упорядоченное движение частиц с преимущественным направлением к затравке (рис. 1, *a*). В этом случае реализуется процесс самоорганизации частиц в рамках модели ассоциации «баллистическая агрегация — кластер», соответствующей более общему виду формулы (1):

$$\beta = \alpha + \varphi(\text{rand} - 0.5),$$
  

$$x_{k+1,j} = x_{k,j} - \text{sgn}(x_{k,j})\Delta r \cos\beta,$$
  

$$y_{k+1,j} = y_{k,j} - \text{sgn}(x_{k,j})\Delta r \sin\beta,$$
(2)

где  $\alpha = \operatorname{arctg}(y_{k,j}/x_{k,j})$ , если  $x_{k,j} \neq 0$ , и  $\alpha = \pi/2$ , если  $x_{k,j} = 0$ ; sgn — функция, возвращающая знак числа. Таким образом, значение угла соответствует случайным прямолинейным траекториям частиц (рис. 1, б). При  $\varphi = 2\pi$  формула (2) переходит в (1) и частицы движутся по случайным траекториям.

Полученное пространственное распределение частиц, заданное формулами (1) и (2) можно рассматривать как совокупность рассеивающих центров (рис. 1, e) с бинарной функцией пропускания  $F^0$ :

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

где *С* представляет собой функцию пространственного распределения рассеивающих центров. Представление (3) анализируемых структур упрощает расчет их дифракционных картин.

# 2. Фрактальные свойства дендритных структур

Полученные результаты позволяют отметить высокую степень устойчивости формы кластера дендрита (см. рис. 1, б) к варьированию угла  $\varphi$  в интервале от 0 до 5 рад. На рис. 2 показаны траектории движения частиц и форма образованных кластеров нанодендритов при изменении  $\varphi$ . При значениях угла  $\varphi$ , близком к  $2\pi$ , происходит значительное изменение траектории движения частиц к затравке (рис. 2, *б*, *в*) по отношению к практически линейным траекториям движения частиц при малых  $\varphi$  (рис. 2, *а*). Результаты численного моделирования показали, что в интервале  $6 < \varphi < 2\pi$  рад сформированные дендритные кластеры удовлетворяют модели «ограниченная диффузией агрегация» (см. рис. 1, *a*).

Часто исследования оптических характеристик широкого класса фрактальных и фракталоподобных структур базируются на анализе пространственных фурье-спектров распределений составляющих их частиц, определяющих структуру дифрагирующей волны в дальней зоне [16]. Это прежде всего связано с тем, что фурье-спектры наиболее отчетливо передают скрытые свойства структур объектов разной физической природы [17–19].

В дальней зоне картины пространственных фурье-спектров распределений образующих частиц дендрита представляют собой по форме совокупность концентрических колец разной интенсивности. Поэтому регистрацию самоподобных образований в картинах дифракции таких структур целесообразно осуществлять при изменении расстояния z до области наблюдения и длины волны излучения  $\lambda$ . Анализ оптических характеристик анализируемых структур дендритного типа (распределения амплитуды поля и интенсивности дифрагированных волн) проводился на основе использования формулы Рэлея–Зоммерфельда [20, 21].

Для дендритных структур количественная оценка самоподобных свойств, проявляющихся как в самих анализируемых объектах, так и в их дифракционных картинах, также проводилась на основе определения «массовой» (кластерной) фрактальной размерности D [22]. Для примера на рис. 3 приведены зависимости средней кластерной фрактальной размерности от числа составляющих частиц кластера N в случае траектории частиц (2), реализующиеся при  $\varphi = 0.1$  рад, соответствующих виду дендрита, представленного на рис. 1, *б*. Усреднение проводилось по 10 реализациям фрактального роста



*Рис.* 2. Вид траекторий частиц кластера и его формы при изменении угла  $\varphi$ :  $\varphi = 0.5$  рад (a, e), 5.5 рад (f, d), 6.27 рад (e, e)



*Рис. 3.* Зависимость кластерных фрактальных размерностей D структуры дендрита (1) и его дифракционных картин (2–3) от числа частиц N; 2 соответствует условиям z = 10d,  $\lambda = d$ , где d — расстояние между соседними частицами дендрита; 3 соответствует условиям z = 600d,  $\lambda = d$ 

дендрита. Кривая 1 показывает зависимость кластерной фрактальной размерности дендрита D от числа составляющих его частиц N. Следует отметить, что при N > 5000 вид кривой 1 не претерпевает существенных изменений, при этом кластерная фрактальная размерность медленно возрастает в пределах значений, указанных в [3]. Так, при изменении Nот 1500 до 15000 средняя фрактальная размерность кластера D (рис. 3) изменялась в интервале от 1.8 до 1.87. Кривые 2-3 на рис. 3 характеризуют изменение D в картинах дифракции при разных начальных условиях.

Полученные результаты указывают на то, что массовые фрактальные размерности D структуры дендрита и картины его дифракции имеют близкие значения. Причем наибольшее соответствие значений D достигается в ближней зоне (рис. 3, кривая 2) при следующих условиях: z = 10d,  $\lambda = d$ , где d — расстояние между соседними частицами дендрита. Приведенной зависимости (рис. 3, кривая 2) свойствен слабый осциллирующий характер и близость значений к соответствующим значениям кластерной фрактальной размерности формирующегося дендрита. Слабую закономерность изменения формы и значений фрактальных характеристик, полученных в иных приближениях при изменении N, подтверждают результаты работы [23].

При числе частиц дендрита N < 1500 наблюдается неустойчивая область изменения значений кластерной фрактальной размерности D (отмечена пунктиром на рис. 3). Ее наличие указывает на значительное влияние случайных факторов при формировании таких структур и невыраженность самоподобных свойств при малом N.

Таким образом, установлено определенное соответствие фрактальных признаков рассеивающих центров первоначальных структур и распределения их дифракционных максимумов. Результаты исследования фрактальных свойств в характеристиках рассматриваемых дендритов указывают на дополнительные диагностические возможности фрактальных методов для широкого класса стохастических структур дендритного типа.

#### Заключение

Выполненный анализ указывает на то, что картинам дифракции излучения на исследуемых объектах свойственно проявление самоподобных свойств, характерных для формируемых структур дендритов, геометрия которых задается пространственным распределением рассеивающих центров. При этом значения кластерных фрактальных размерностей *D* полученных картин дифракции оказались близкими к их значениям для формируемых структур в широкой области изменения числа частиц. Полученные закономерности взаимосвязи кластерных фрактальных размерностей и их картин дифракции при изменении числа частиц могут использоваться для идентификации систем кластеров нанодендритов, образованных в процессе самоорганизации наночастиц в рамках двумерных стохастических моделей. Наилучшее соответствие для кластерных фрактальных размерностей дендритных структур и их картин дифракции достигаются в ближней зоне.

Проведенный анализ указывает на необходимость учета особенностей преобразования излучения различными типами фрактальных объектов при диагностике наносистем на основе использования метода просвечивания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-01-00723 а.

# Список литературы

- Гридчина В.В., Короленко П.В., Рыжикова Ю.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2015. **79**, № 12. С. 1691. (Gridchina V.V., Korolenko P.V., Ryzhikova Yu.V. // Bull. of the Russian Acad. of Sci.: Physics. 2015. **79**, N 12. P. 1480.)
- Боголюбов А.Н., Петухов А.А., Шапкина Н.Е. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2011. № 2. С. 20. (Bogolyubov A.N., Petukhov A.A., Shapkina N.E. // Moscow University Phys. Bull. 2011. 66. N 2. P. 122.)
- Nicolás-Carlock J.R., Carrillo-Estrada J.L., Dossetti V. // Scientific Rep. 2016. 6. P. 19505.
- Sorouri R., Bagheri H., Afkhami A., Salimian J. // Sensors. 2017. 17. P. 1074.
- 5. Ковальчук М.В., Короленко П.В., Рыжикова Ю.В. // Ученые записки физического факультета Московского ун-та. 2015. № 1. 151401.
- Metze K. // Expert Rev. Mol. Diagn. 2013. 13(7). P. 719.
- 7. Александров Д.В., Галенко П.К. // УФН. 2014. **184**, № 8. С. 833. (Alexandrov D.V., Galenko P.K. // Physics—Uspekhi. 2014. **57**. Р. 771.)
- Адрианов В.Е., Маслов В.Г., Баранов А.В. и др. // Оптический журнал. 2011. 78. С. 11. (Adrianov V.E., Maslov V.G., Baranov A.V. et al. // J. of Optical Technol. 2011. 78(11). Р. 699.)
- Mohanty S., Biswal S.K. // IJPRAS. 2015. 4(4). P. 18. www.ijpras.com.
- Madaan K., Kumar S., Poonia N. et al. // J. of Pharmacy & BioAllied Sciences. 2014. 6(3). P. 139.
- Chiganova G.A. // J. of Siberian Federal University. Engineering & Technologies. 2008. 1(2). P. 155.
- Самсонов В.М., Кузнецова Ю.В., Дьякова Е.В. // ЖТФ. 2016. 86(2). С. 71. (Samsonov V.M., Kuznetsova Yu.V., D'yakova E.V. // Technical Physics. 2016. 61(2). Р. 227.)
- Смирнов Б.М. // УФН. 1986. 149(2). С. 177. (Smirnov B.M. // Sov. Phys. Usp. 1986. 29, N 6. P. 481.)
- Жюльен Р. // УФН. 1989. 157(2). С. 339. (Jullien R. // Comm. Cond. Mat. Phys. (Comm. Mod. Phys. Pt B) 1987. 13, N 4. P. 177.)
- Witten T.A., Sander L.M. // Phys. Rev. B. 1983. 27, № 9. P. 5686.
- Korolenko P.V., Ryzhikov S.B., Ryzhikova Yu.V. // Physics of Wave Phenomena. 2013. 21, N 4. P. 256.
- 17. Maci'a E. // Rep. Prog. Phys. 2006. 69, N 2. P. 397.

- 18. Короленко П.В., Мишин А.Ю., Рыжикова Ю.В. // Оптический журнал. 2012. 79(12). С. 11. (Korolenko P.V., Mishin A.Yu., Ryzhikova Yu.V. // J. of Optical Technology. 2012. 79 (12). P. 754.)
- 19. Емельянов В.И. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2011. № 4. C. 61. (Emel'yanov V.I. // Moscow University Phys. Bull. 2011. 66, N 4. P. 383.)
- 20. Гудмен Дж. Введение в фурье-оптику. М.: Мир, 1970.

(Goodman J.W. Introduction to Fourier Optics. New York: McGraw-Hill Book Company, 1968.)

- 21. Born M., Wolf E. Principles of Optics. New York: Cambridge University Press, 2001.
- 22. Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991. (Feder J. Fractals. New York: Plenum Press, 1988.)
- 23. Burkovets D.M., Maksimyak O.P., Nestina K.I. // Proc. of SPIE. 2008. 7008. P. 700812.

# The optical properties of fractal nanodendrites in the processes of their self-organization

# D. D. Ruzhitskaya, S. B. Ryzhikov, Yu. V. Ryzhikova<sup>a</sup>

Department of Optics, Spectroscopy and Nanosystems Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia. *E-mail:* <sup>*a*</sup> *ryzhikovaju@physics.msu.ru*.

A simple method for constructing a 2D fractal cluster of nanodendrities formed in the self-organization process of nanoparticles is presented. The relationship between the structural features of dendrite-type lattices and the fractal characteristics of both studied objects and their diffraction patterns is revealed.

Keywords: fractal cluster, dendrite, self-organization, cluster fractal dimension. PACS: 42.25.Fx; 61.43.Hv; 07.05.Tp. Received 27 June 2017.

English version: Moscow University Physics Bulletin. 2018. 72, No. 3. Pp. 306–309.

#### Сведения об авторах

- 1. Ружицкая Дарья Дмитреевна студентка; тел.: (495) 939-57-40, e-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru.
- 2. Рыжиков Сергей Борисович доктор пед. наук, доцент; тел. (495) 939-57-40, e-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru.
- 3. Рыжикова Юлия Владимировна канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-57-40,
- e-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru.