

УДК 535.015

ФРАКТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ХИРАЛЬНЫХ ДЕНДРИТОВ

© 2022 г. Д. Д. Ружицкая¹, *, Ю. В. Рыжикова¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», физический факультет, Москва, Россия

*E-mail: dariaruzh@yandex.ru

Поступила в редакцию 17.01.2022 г.

После доработки 07.02.2022 г.

Принята к публикации 21.02.2022 г.

Предложен новый алгоритм расчета конфигурации дендритных кластеров, основанный на модификации модели диффузии, ограниченной агрегацией. Предложенный алгоритм позволяет учитывать влияние внешнего магнитного поля и взаимодействия частиц в процессе роста фрактального дендрита. Изучено влияние приложенного внешнего поля на морфологию кластера. Проанализирована устойчивость фрактальных свойств полученных кластеров на основе преобразования Фурье.

DOI: 10.31857/S0367676522060229

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно ведется изучение различных свойств дендритных объектов. Связано это с тем, что дендритный тип пространственных распределений наночастиц получил большее распространение в различных приложениях [1, 2]. Особую актуальность имеют медицинские приложения в области внедрения новых разработок средств инкапсулирования и доставки лекарственных веществ с помощью частиц-носителей. Сильно разветвленные дендритные структуры часто проявляются в таких процессах как рост колоний бактерий, пробой диэлектрика, ячейке Хелл-Шоу, росте жидких кристаллов, электроосаждении и др. [2–6]. Дендриты относятся к отдельной группе фракталоподобных структур, которые не обладают фрактальностью пространственных фурье-спектров [2, 6].

Одно из общих описаний процесса роста дендритных систем основано на модели диффузии, ограниченной агрегации (ДОВА, также известная как модель Виттена–Сандера) [7]. В рамках классического алгоритма ДОВА рост кластера происходит следующим образом. Пространство роста разбивается на решетку, в центр которой помещается первая частица (затравка). Затем, на некотором расстоянии от затравочной частицы другая частица начинает свое движение по случайной траектории до тех пор, пока не окажется в соседней с затравкой сетке. При этом, блуждающая частица может с равной вероятностью перемещаться вверх, вниз, право или лево по решетке. Процесс повторяется до тех пор, пока N частиц не образуют кластер. Более подробно детали алго-

ритма ДОВА и ряд модификаций и можно найти в [7, 8]. Однако, несмотря на свое широкое распространение классическая модель ДОВА не способна объяснить влияние внешних факторов на морфологию кластера, так как реальные процессы роста кластеров сложны и включают множество составляющих (электрические поля, концентрация частиц, размеры, взаимодействие частиц между собой и др.). Например, в экспериментальных работах [5, 9] показано, что наличие внешнего магнитного поля приводит к изменению формы кластера: происходит закручивание его ветвей по спирали, в соответствии с направлением приложенного поля.

Целью данной работы является разработка нового алгоритма расчета конфигурации двумерного дендритного кластера под влиянием внешнего магнитного поля и анализ его фрактальных свойств. В представленной работе рассматривается воздействие внешнего магнитного поля на фрактальную размерность кластера. Также анализируется устойчивость пространственных спектров таких кластеров.

В работе разработана расчетная двумерная модель для изучения процессов самоорганизации структур фрактальных кластеров дендритов, сформированных под действием множества случайных факторов. Полученные результаты исследования фрактальных свойств в характеристиках дендритов указывают на дополнительные диагностические возможности фрактальных методов для широкого класса стохастических структур.

МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ ХИРАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ

Формирование дендритного кластера происходит в рамках модификации модели ДОО с учетом влияния внешнего магнитного поля. Модель позволяет воспроизвести дендритные кластеры с “закрученной” морфологией, экспериментальная реализация которых приведена в [9, 10]. В тонкую электролитическую ячейку добавляется раствор соли цинка (кроме цинка так же используются растворы серебра, железа, кобальта), затем ячейка помещается в магнитное поле, таким образом, чтобы направление поля было перпендикулярно току в ячейке.

Расчет конфигурации дендритного кластера под действием приложенного внешнего поля происходит по следующему алгоритму, проиллюстрированному на рис. 1.

1. Задается область роста будущего кластера, которая представляет собой окружность радиуса R_{gen} (эквивалент электролитической ячейки). Первая частица (затравка) помещается в центр этой ячейки. В представленной работе $R_{gen} = 2048d$, где d – диаметр одной частицы. Если происходит расчет кластера, состоящего из частиц разного размера, то d представляет собой средний размер частиц. Также, каждая из частиц обладает одинаковым зарядом q , принятым за единицу в модельной системе.

2. На окружности R_{gen} случайным образом выбирается точка, из которой начинает свое движение новая частица. Блуждающая частица может перемещаться в случайном направлении внутри ячейки, а при столкновении со стенкой ячейки “отскакивает” в обратном направлении. Для каждого шага перемещения частица имеет четыре взаимно перпендикулярных возможных направления движения (см. рис. 1, возможные направления t показаны стрелками). Эти направления на каждом шаге случайным образом поворачиваются на угол $\alpha = 0 - 2\pi$ (выбор α происходит с помощью генератора случайных чисел).

Выбор направления перемещения частицы с учетом внешних факторов основан на задании частично упорядоченного движения по направлению к сформированному кластеру. В представленном алгоритме это направление определяется согласно алгоритму Метрополиса, который позволяет выбрать направление движения частицы с минимальным изменением энергии [11, 12]. В рамках этого алгоритма, для каждого возможного перемещения t вычисляется вероятность перемещения $p_t = \exp(-\Delta U_t)$ [11]. Здесь, $\Delta U = U(\vec{r}_i) - U(\vec{r}_i)$, где $U(\vec{r}_i)$ – энергия частицы в текущем положении, $U(\vec{r}_i)$ – энергия, которую приобретет частица при перемещении в одно из возможных положений $t = 1-4$ (см. рис. 1). Энергия частицы в каждом

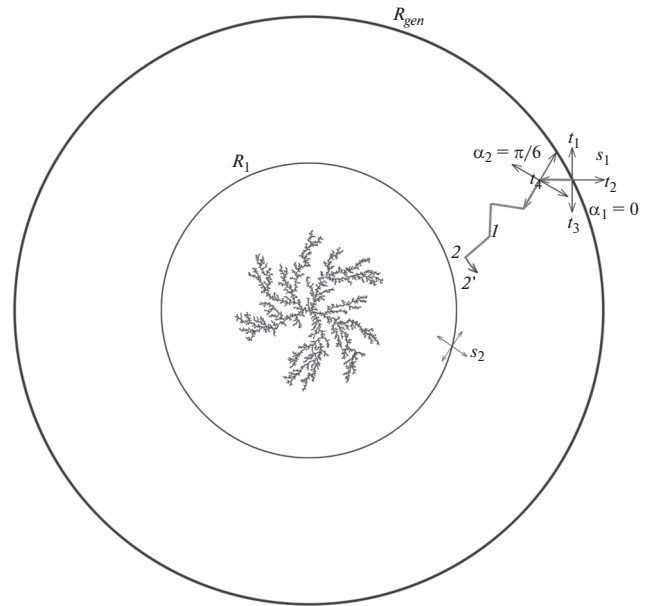


Рис. 1. Иллюстрация работы алгоритма. R_{gen} – граница роста кластера, s_1 – крупный шаг перемещения, t_i – возможные направления перемещения, α – угол поворота направлений перемещения, R_1 – область, после которой происходит смена шага на s_2 . 1 – Положение, которое заняла частица спустя n шагов, 2 – ожидаемое перемещение частицы, 2' – введенное отклонение перемещения частицы на угол θ .

положении складывается из двух составляющих $U(\vec{r}_i) = U_{elect}(\vec{r}_i) + U_{mag}(\vec{r}_i)$, где $U_{elect}(\vec{r}_i)$ – потенциальная энергия между движущейся частицей и сформированным кластером. $U_{mag}(\vec{r}_i)$ – энергия между заряженной частицей и внешним магнитным полем, приложенным перпендикулярно плоскости движения частиц (характеризуется силой Лоренца). Вычисление ΔU производится для каждого из возможных направлений t на текущем шаге, а затем вычисляются вероятности p_t . Далее, согласно алгоритму Метрополиса выбирается случайное перемещение t [11]. Если $\Delta U_t < 0$ в выбранном направлении, то перемещение выполняется. Если $\Delta U_t > 0$, то перемещение выбирается согласно наибольшей вероятности p_t . Такой выбор перемещения частицы является ключевым отличием от оригинальной модели ДОО, в которой частица имела равную вероятность перемещения в любом направлении [7, 8].

В процессе перемещения по ячейке роста частица под действием магнитного поля изменяет свою траекторию. В процессе расчета движения частицы под действием силы Лоренца может возникнуть ситуация, когда движение частицы станет ограниченным в определенной области и они перестанет двигаться по направлению к кластеру, то есть произойдет ее закливание. Чтобы избе-

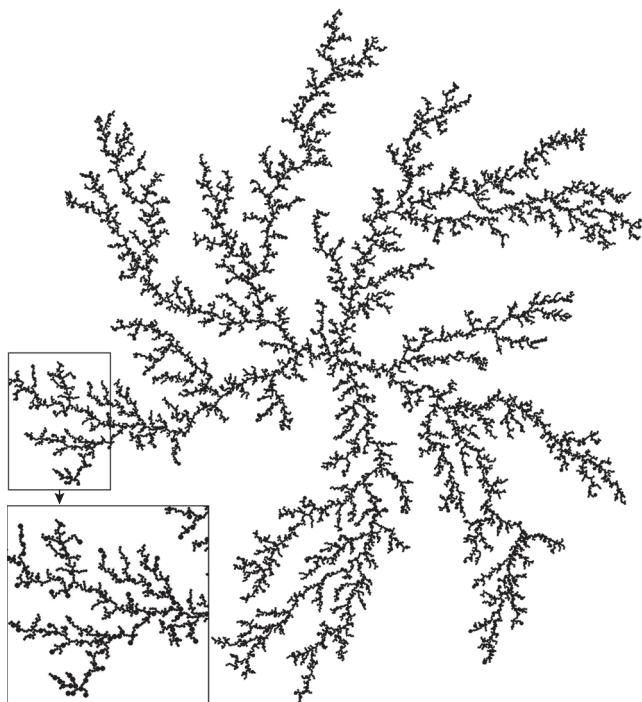


Рис. 2. Кластер, выращенный в рамках предложенной модели дендритного роста. Дендрит содержит в себе $N = 10000$ неоднородных частиц. Величина приложенного поля, оказывающего влияние на процесс роста и приложенного по направлению перпендикулярно от наблюдателя, составляет 0.2 Тл . На вставке показана увеличенная ветвь дендрита.

жать такого заикливания в представленном алгоритме предлагается использовать небольшое отклонение θ , обусловленное наличием силы Лоренца после каждых n шагов блуждающей частицы. Пример этого отклонения показан на рис. 1. При ожидаемом перемещении частицы в положение из положения 1 в положение 2, она искусственно отклоняется на угол θ в соответствии с направлением приложенного магнитного поля и занимает положение 2' из которого продолжает свое движение до присоединения к кластеру.

В общем случае n может быть выбрано произвольно. В ходе серии экспериментов было выбрано $n = 100$. При данном значении n частица не заикливаются в узкой области, а наличие такого отклонения не оказывает влияния на морфологию выращенного кластера.

Таким образом движение частицы продолжается до тех пор, пока она не коснется затравочной или уже присоединенной к кластеру.

3. В целях оптимизации расчетного времени алгоритма вводится условие переменных границ. До тех пор, пока расстояние между блуждающей частицей и кластером R находится в интервале от $[R_{gen}, R_1 = 512d]$ частица движется с шагом $s_1 = 10d$. Как только R становится меньше R_1 частица пере-

мещается с шагом $s_2 = 0.1d$. Указанные значения шагов s и R_1 выбраны на основе проведенных серий тестов по оптимизации работы алгоритма.

4. Шаги 2–3 повторяются для каждой последующей блуждающей частицы. Ограничивающим фактором роста в представленном алгоритме является число частиц N , образующих кластер. На рис. 2 показан кластер, состоящий из 10000 частиц, имеющих разный размер и выращенный под влиянием внешнего магнитного поля 0.2 Тл , приложенным перпендикулярно от наблюдателя.

Таким образом, предложен простой способ построения 2D-фрактального кластера дендритов, сформированного в процессе самоорганизации частиц с использованием агрегационных моделей частица–кластер. Реализованный алгоритм основывается на задании частично упорядоченного движения частиц под влиянием внешнего магнитного поля.

ОЦЕНКА ФРАКТАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ДЕНДРИТОВ

Полученные в рамках предложенной нами модели дендритные кластеры были проанализированы с применением аппарата фрактального анализа. Его ключевой количественной характеристикой является фрактальная размерность. Для определения фрактальной размерности дендритных образований использовались три способа: массовый (кластерный) [13], клеточный [8, 14] и метод, основанный на фурье-преобразовании [14, 15]. Все реализации предлагаемых методов определения фрактальной размерности были предварительно протестированы на строгих математических фракталах, таких, как фрактал Вичека, снежинка Коха, множество Жулиа и др. [14, 15].

Результаты проведенного исследования показаны на рис. 3. В случае, когда магнитное поле отсутствует ($B = 0 \text{ Тл}$) формируются кластеры со средним значением фрактальной размерности $D = 1.71$ (с погрешностью, обусловленной выбранным методом определения), что согласуется с известными литературными данными [6–8]. Заметим, что случай отсутствия магнитного поля позволяет получить кластеры, формирующиеся в рамках классической модели ДООА. В этом случае алгоритм представляет собой расширенную модификацию координатной модели, представленной ранее в работе [6]. Отметим, что метод, основанный на определении фрактальной размерности с помощью Фурье-преобразования, как правило, дает заниженную оценку. Напротив, клеточный метод определения фрактальной размерности дендритов приводит к завышенной оценке.

При приложении внешнего магнитного поля и появления хиральности в структуре дендрита его фрактальная размерность начинает возрастать.

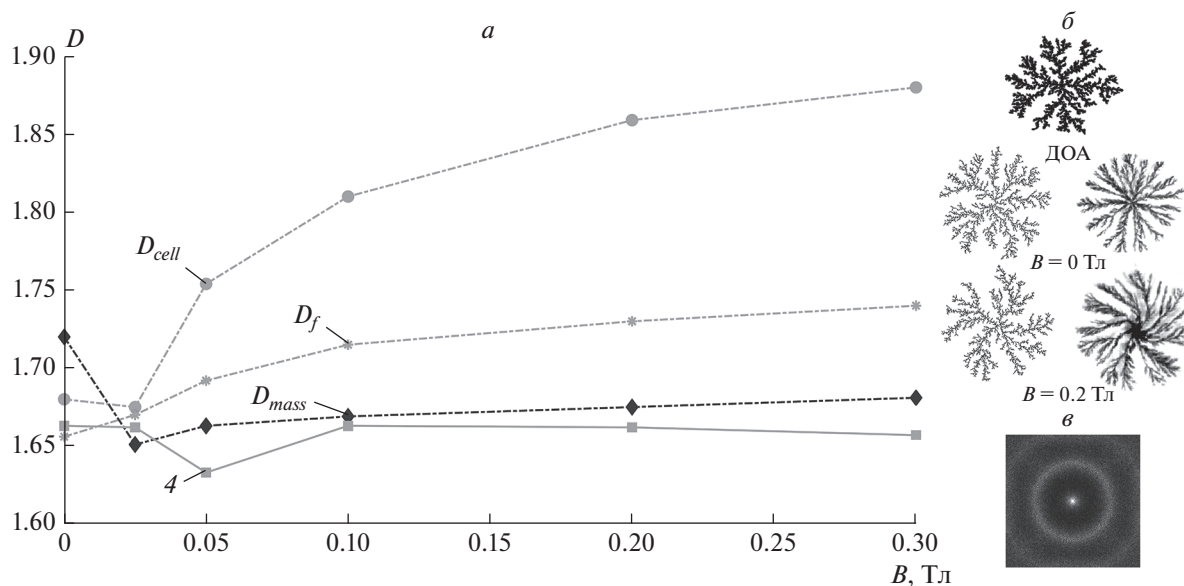


Рис. 3. Изменение фрактальной размерности кластеров, полученных при различном значении приложенного внешнего магнитного поля (*a*). B – Величина приложенного магнитного поля, Тл; D_{cell} – фрактальная размерность, определяемая клеточным способом; D_{mass} – кластерная фрактальная размерность; D_f – фрактальная размерность, определенная с помощью фурье-преобразования. Данные усреднены по 10 реализациям кластеров. Кривая 4 соответствует изменению фрактальной размерности пространственного Фурье-спектра рассматриваемых кластеров. Сравнение получаемых кластеров в рамках модели ДОА [6] и кластеров, полученных в рамках представленного алгоритма с экспериментальными из работы [9] (*б*). Магнитное поле $B = 0.2$ Тл приложено перпендикулярно на наблюдателя. Внешний вид типичного фурье-спектра дендритного кластера (*е*).

Причем чем выше значение приложенного поля, тем более сильные искажения проявляются в структуре кластера. Так, при высоком значении приложенного поля ветви дендрита начинают закручиваться по спирали, а в отдельных случаях способны вырождаться в игольчатые структуры (экспериментальная реализация показана в [10]). Примеры морфологии дендритов показаны на вставках на рис. 3б и качественно согласуются с экспериментальными результатами в работах [9, 10]. Анализируемые структурные изменения дендритных образований находят отражение в изменении их фрактальной размерности. Имеется тенденция к ее росту, одновременно с увеличением приложенного внешнего поля. Это обусловлено тем, что при закручивании ветви кластера начинают занимать большее пространство ячейки, в которой осуществляется процесс роста.

Также, установлено, что хотя фурье-спектр дендритных кластеров не обладает выраженной фрактальностью, он остается устойчивым по форме к изменениям морфологии кластера (кривая 4 на рис. 3). Типичный вид пространственного фурье-спектра кластера показан на рис. 3е. Кроме того, характерное значение фрактальной размерности этого спектра соответствует, полученным ра-

нее значениям $D_{ff} \sim 1.5$ для дендритных кластеров без искажений в морфологии [2, 6].

На основе проведенных нами научных исследований устойчивости спектральных характеристик анализируемых дендритных образований подтверждена эффективность и универсальность фрактальных методов анализа, являющихся важной составляющей интеграционных процессов в современной науке.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанная модель позволяет получать кластеры с учетом влияния внешних факторов, что расширяет представления об особенностях формирования фрактальных дендритов. Влияние внешнего магнитного поля приводит к проявлению хиральности в кластерах, которая проявляется в искажении морфологии дендрита в виде спирального “закручивания” ветвей в направлении приложенного внешнего поля. В дальнейшей работе мы планируем исследовать влияние других факторов, оказывающих влияние на морфологию кластера в реальных условиях (концентрация частиц, температурный градиент, частицы, обладающие разным зарядом и др.)

Анализ дендритов на основе использования фрактальной размерности позволяет выявить наличие внешнего фактора, оказывающего влияние на рост и морфологию формируемого кластера. Таким образом, фрактальная параметризация может быть использована для выявления структурных особенностей дендритных кластеров различной природы. Также продемонстрирована устойчивость пространственных фурье-спектров дендритов к изменению их морфологии. Полученные результаты позволяют усовершенствовать методы диагностики. Для диагностических приложений полезно установить устойчивую связь между фрактальностью структур дендритов и их спектральными характеристиками, например картинами дифракции. Полученные фрактальные закономерности могут использоваться при постановке и решении обратной задачи о соответствии регистрируемых световых полей определенным формам кластерных структур дендритных образований, а также для уточнения описания электрофизического механизма взаимодействия частиц, составляющих дендрит.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гридчина В.В., Короленко П.В., Рыжикова Ю.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2015. Т. 79. № 12. С. 1691; Gridchina V.V., Korolenko P.V., Ryzhikova Yu.V. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2015. V. 79. No. 12. P. 1480.
2. Короленко П.В., Косырев А.В., Ружицкая Д.Д. и др. // ФОП. 2021. Т. 10. С. 62.
3. Tokita R., Katoh Y., Maeda T. et al. // J. Phys. Soc. Japan. 2009. V. 78. Art. No. 074005.
4. Ciuchi F., Sorriso-Valvo L., Mazzulla A., Redondo J.M. // Eur. Phys. J. E. 2009. V. 29. P. 139.
5. Ní Mhíocháin T.R., Hinds G., Martin A. et al. // Electrochim. Acta. 2004. V. 49. P. 4813.
6. Ружицкая Д.Д., Рыжикова Ю.В., Рыжиков С.Б. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 11. С. 1512; Ruzhitskaya D.D., Ryzhikova Yu.V., Ryzhikov S.B. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. No. 11. P. 1375.
7. Witten T.A., Meakin P. // Phys. Rev. B. 1983. V. 28. P. 5632.
8. Meakin P. Fractals, scaling and growth far from equilibrium. Cambridge University Press, 1998.
9. Bodea S., Ballou R., Molho P. // Phys. Rev. E. 2004. V. 69. Art. No. 021605.
10. Mogi I., Kamiko M. // J. Cryst. Growth. 1996. V. 166. P. 276.
11. Luijten E. Introduction to cluster Monte Carlo algorithms. Springer Verlag, 2007.
12. Cronemberger C.M., Sampaio L.C. // Phys. Rev. E. 2006. V. 73. Art. No. 041403.
13. Feder J. Fractals. Springer, 1988.
14. Russ J.S. Fractal surfaces. Springer, 1994.
15. Florindo J.B., Bruno O.M. // Chaos Solitons Fractals. 2011. V. 44. No. 10. P. 851.

Fractal properties of chiral dendrites

D. D. Ruzhitskaya^a, *, Yu. V. Ryzhikova^a

^a Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: dariaruzh@yandex.ru

A new algorithm for calculating the configuration of dendritic clusters based on a modification of the diffusion model limited by aggregation was developed. The presented algorithm makes it possible to consider the effect of an external magnetic field and particle interaction during the growth of a fractal dendrite. The influence of the applied external field on the cluster morphology is shown. The stability of the fractal properties of the obtained clusters is estimated based on the Fourier transform.