



Науково-навчальний центр «Фрактал» Львівський національний університет імені Івана Франка

Лабораторія комп'ютерного моделювання

Комп'ютерне моделювання наноструктурованих матеріалів

Моделювання росту фрактальних кластерів

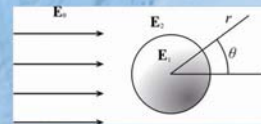
Агрегати, які формуються в нанокompозитах, також мають структуру, близьку до фрактальної. Утворення фрактальних агрегатів з окремих частинок можна змоделювати за допомогою спеціальних алгоритмів у дво- та тривимірному випадках. На рисунку праворуч - фрактальні кластери, отримані в моделі агрегації з обмеженою дифузєю (при різній кількості частинок).



Моделювання росту фракталів у алгоритмі кластер-кластер проводилося на скінченній квадратній ґратці з періодичними граничними умовами. Фрактальний кластер у моделі частинка-кластер для тривимірного випадку показано ліворуч. Фрактальна розмірність кластерів не залежить від кількості частинок у ньому (якщо кількість частинок не менша за 500) і становить $D=2,5$, що добре узгоджується з експериментальними даними.

Розрахунок спектрів металічних наночастинок

Спектри екстинкції фрактальних кластерів розраховували методом дискретної дипольної апроксимації (ДДА). Метод полягає в тому, що будь-який об'єкт, на який падає поляризована електромагнітна хвиля, зазнає апроксимування диполями. Оскільки куля радіусом a в електричному полі має властивості диполя, то досліджуване тіло зазнає апроксимування сферами. Під час розрахунку спектрів екстинкції фрактальних кластерів необхідно враховувати конкретну фізичну природу його елементів. Тому кожен елемент фрактального кластера, який вважали точкою в разі моделювання процесу його росту, зображали кластером срібла сферичної форми з діаметром 10 нм у вакуумі. Це пов'язано з тим, що кластери срібла мають ізолювану, порівняно вузьку смугу плазмонного поглинання, а тому є хорошими модельними об'єктами для теоретичних та експериментальних досліджень спектрів.



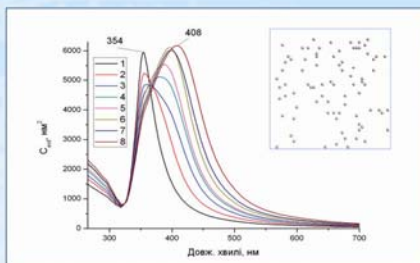
Куля в однорідному електричному полі поводить як диполь з дипольним моментом $p = \epsilon_m a^3 \frac{\epsilon - \epsilon_m}{\epsilon + 2\epsilon_m} E_0$

Екстинкція = поглинання + розсіяння

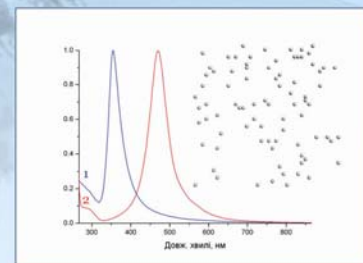
Ефективний переріз екстинкції ізолюваної металевої кульки в середовищі $C_{ext} = 4\pi k \text{Im}(\alpha)$

Ефективний переріз екстинкції системи з N диполів:

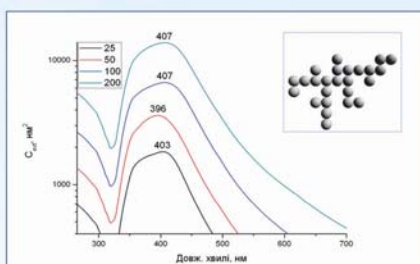
$$C_{ext} = \frac{4\pi k}{\epsilon_m |E_{пад}|^2} \sum_{j=1}^N \text{Im}(E_{пад,j}^* \cdot p_j)$$



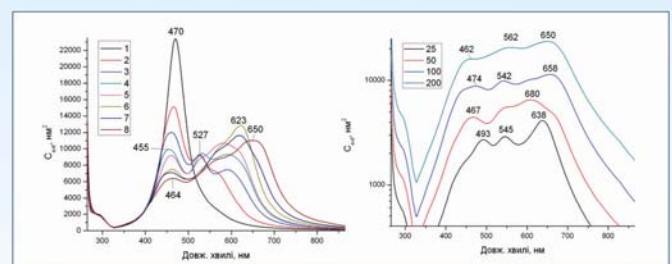
Спектри екстинкції фрактала (Ag) у вакуумі при агрегації



Спектри екстинкції кластера у вакуумі (1) та середовищі (2)



Спектри екстинкції фрактала (Ag) у вакуумі при різній кількості диполів



Спектри екстинкції фрактала (Ag) у середовищі (CdBr₂)