

УДК 622

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ НАНООБЪЕКТОВ НИКЕЛЯ В КОЛЛОИДНОМ РАСТВОРЕ

Зотов А.И., студент гр. НТ-120, III курс

Научный руководитель: Бухаров Д.Н., старший преподаватель  
Владимирский Государственный Университет имени А. Г. и Н. Г. Столетовых

Системы металлических наночастиц представляют интерес для инновационно научных и технологических приложений, поскольку, в зависимости от характера лазерного воздействия, они проявляют отличные от большинства образцов полезные характеристики. Так, коллоиды никеля обладают каталитическими и парамагнитными свойствами, причем последние представляют особый интерес с антиферромагнитным и ферромагнитным упорядочиванием [1]. Установлено, что частицы никеля имеют значимый эффект при достижении 70-100 нм. Благодаря таким особенностям системы претерпевают бурное развитие в областях нанотехнологии.

Одним из удобных и перспективных методов получения систем металлических наночастиц является лазерный синтез из коллоидного раствора массивной мишени [2]. Лазерная абляция состоит из различных взаимосвязанных процессов. В работе [3] описан поэтапный процесс формирования наноструктур металлов. В ходе эксперимента применялся фемтосекундный комплекс типа Ti:Sp с энергией излучения  $E = 80$  мДж. Непрерывный лазер с длиной волны  $\lambda = 720$  нм и диаметром пучка 30-100 мкм воздействовал на твердую никелевую мишень, погруженный в спирт (глицерин). Полученные системы частиц перемешивались и выдерживались в течение времени, после чего, если следовать рисунку 1, образовались сферические наноструктуры порядка 30-100 нм.

Случайное движение модельных объектов осуществлялось по узлам решетки и, сталкиваясь с другими агрегатами, распадались с заданной вероятностью  $p$  или объединялись. Так объект  $i$  величиной  $N_i$  в зоне воздействия лазера распадался с вероятностью 80% или объединялись друг с другом с вероятностью 20%. С другой стороны, находясь вне области лазерного воздействия при встрече они слипались с вероятностью 80% и распадались с вероятностью 20%. Вместе с этим, вероятность присоединения с  $n$ -мерных частиц на периферии выше, чем внутри агрегата, что дает кластеру разветвленную структуру.

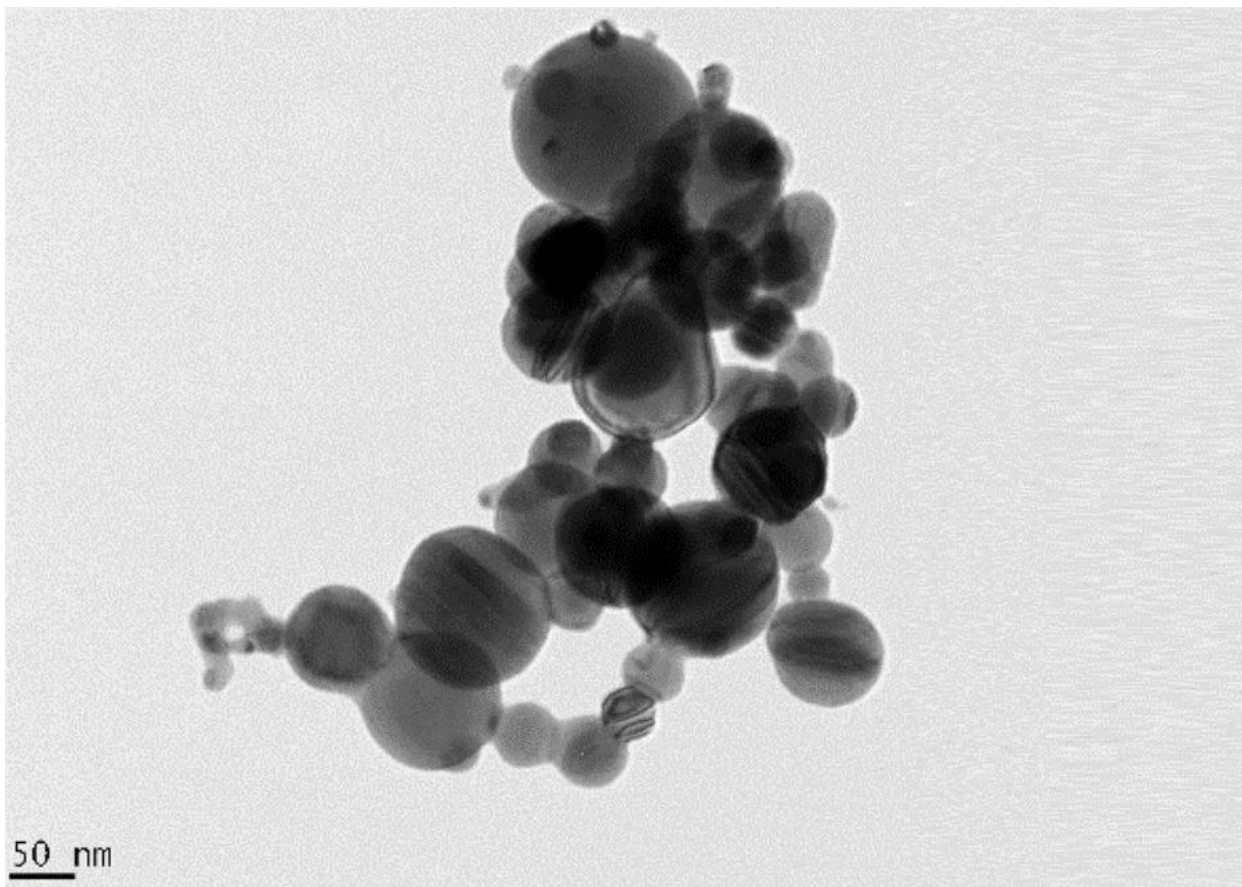


Рисунок 1 – Наночастицы никеля под РЭМ после лазерной бомбардировки системы

Наблюдается дальнейшее развитие процессов, состоящих из нетривиальных задач, требующие объективного моделирования. В данном случае, симуляция образования кластеров Ni приведено [4] через уравнение Смолуховского:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^{k-1} K(k-p, p) n_{k-p} n_p - \sum_{p=1}^{k-1} K(k, p) n_k n_p$$

Здесь оператор  $K$  – ядро, позволяющее интерпретировать взаимодействие частиц  $x$  и  $y$ . Решение уравнения существует тогда, когда имеет аддитивную форму ядра:

$$K = x + y$$

Числа  $n_{k-p}$ ,  $n_p$ ,  $n_k$  – концентрация частиц. Значения  $(k-p, p)$  и  $(p, k-p)$  являются размерами сталкивающихся агрегатов в течение времени  $t$ .

Проведены расчеты по предоставленной модели, демонстрирующие картину формирования системы нанообъектов с разветвленной структурой. На скорость движения нанообъектов, проходящие по узлам решетки, влияют вязкость жидкой фазы раствора и мощность лазерного излучения. В модели влияние на скорость можно неявно учитывать путем выбора соответствующей функции  $K$ , где  $v$  – максимальная скорость, эквивалентен 10 отн. ед.  $N_i$  – величина  $i$ -го агрегата в отн. ед

Данное уравнения является основой моделирования кластер-кластерной агрегации на двумерной области. Уравнение Смолуховского [4], дополненное начальными условиями  $K$ , с учетом функции максимальной скорости, являлось основой моделирования кластер-кластерной агрегации на двумерной области  $50 \cdot 50$  отн. ед и решалось методом клеточного автомата [5]. В нижней части условно расположена мишень, из которой вылетают броуновские частицы никеля с размером  $i$  от одного до пяти и больше со скоростью, равной:

$$v_i = \frac{v}{N_i}$$

где  $v$  – максимальная скорость, эквивалентен 10 отн. ед. Движение хаотичных наночастиц осуществляется по узлам решетки, а потому сталкиваясь с агрегатом или с другой, схожей с ее свойствами, отлипают с вероятностью  $p = 80\%$ . Вязкость жидкой фазы раствора, а также мощность лазерного излучения влияют на скорость движения нанообъектов.

Для объяснения роста частиц никеля применяется модель [6], указывающая на зависимость сформированных ветвей от времени, скорости и вероятности отсоединения частицы. Несмотря на беспорядочность строения, нанообъекты из никеля обладают внутрикристаллическим порядком.

Так, рисунок 1 иллюстрирует то, что с увеличением скорости  $v$  формируются достаточно однородные, хорошо заполненные агрегаты с недлинными ветвями (рисунок 1в). В случае уменьшения величины скорости структура агрегатов становится более разветвленной и неоднородной (рисунок 1а, б).

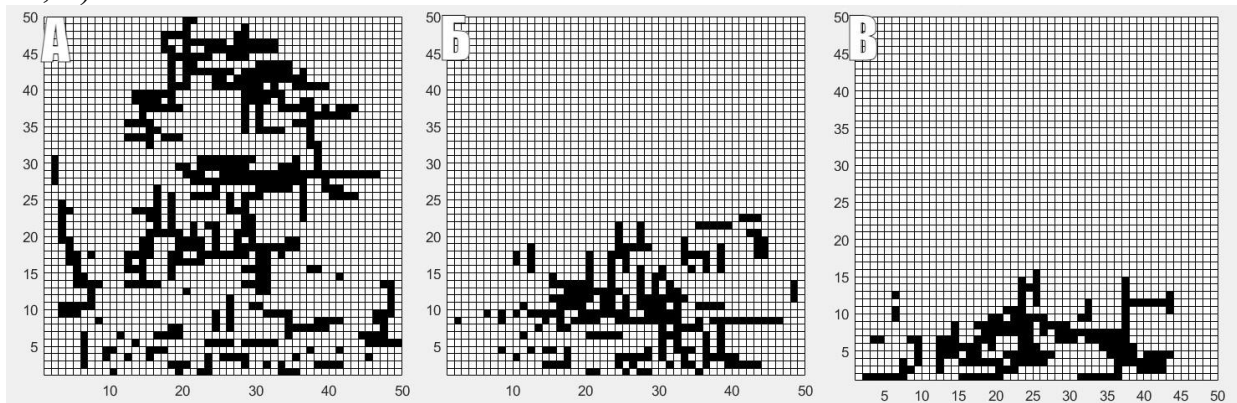


Рисунок 1 – Полученные агрегаты металлов с максимальными скоростями а)  $v_a = 10$  отн. ед.; б)  $v_b = 20$  отн. ед.; в)  $v_v = 30$  отн. ед.

На рисунке 2 приведены системы модельных объектов при различных значениях вероятности отлипания. При величине вероятности отлипания, близкий к нулю (рисунок 2в), агрегат обростает широкими ветками, занимающий практически всю расчетную область и формирует общую поверхность. В случае увеличения вероятности отлипания процесс агрегации протекает менее интенсивно, объекты совершают большие перемещения, формируя множество несвязанных друг с другом объектов небольшого размера (рисунок 2а, б) .

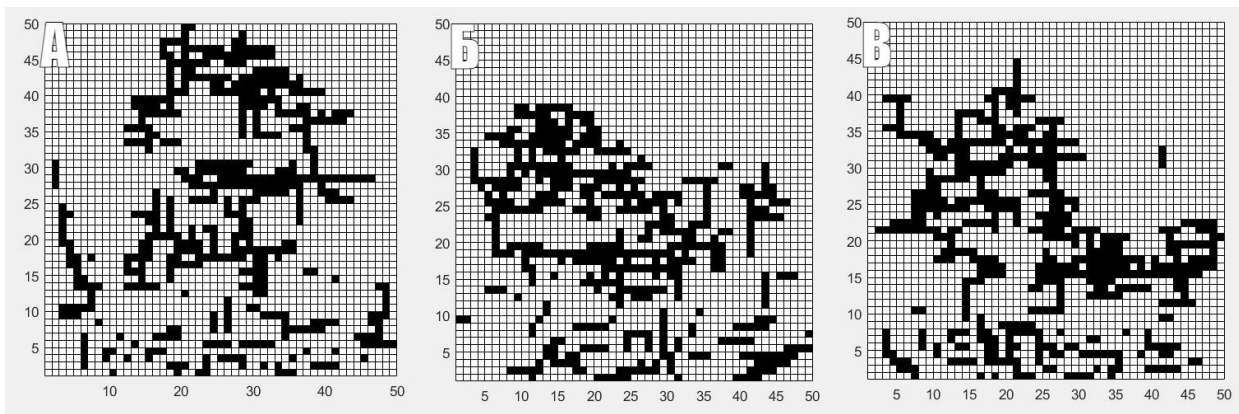


Рисунок 2 – Полученные агрегаты металлов через вероятность отлипания при  
 а)  $p_a = 0.8$ ; б)  $p_b = 0.5$ ; в)  $p_b = 0.2$ .

Таким образом, переход к абсолютным единицами измерения позволяет соотнести размеры результирующих структур, полученных из эксперимента и после моделирования. Предложенная модель позволяет получить достаточно адекватные результаты с погрешностью в среднем не превосходящей 10%, поэтому она полезна в задачах получения металлических нанобъектов.

#### Список литературы:

1. Губин С.П., Кокшаро Ю.А., Хомутов Г.Б., Магнитные наночастицы: методы получения, строение и свойства // Успехи химии. - 2005. - Т. 74. - № 6. - С. 539–574.
2. Зырянов, Р. С. Развитие фрактальных моделей агрегации коллоидных частиц / Р. С. Зырянов. — Текст: непосредственный // Молодой ученый. — 2016. — № 24 (128). — С. 72-76
3. Антипов, А.А. Аракелян, С.М. 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, 14(3), 401-407.
4. Исследование процессов получения наночастиц благородных металлов при лазерном воздействии на мишени в жидких средах // Аракелян С.М., Итина Т.Е., Кутровская С.В., Кучерик А.О., Ширкин Л.А., Махалова Е.Ю., Волкова А.Ю., Поварницын М.Е. Известия кабардино-балкарского государственного университета. – 2014. –Т.4. – №3. – С.104-108.
5. В. А. Галкин, “Об уравнении Смолуховского кинетической теории коагуляции для пространственно неоднородных систем”, Докл. АН СССР, 285:5 (1985), 1087–1091
6. А. И. Лобанов Модели клеточных автоматов КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ 2010 Т. 2 № 3 С. 273–293