

УДК 538.9

*К.С. БАКТЫБЕКОВ, А.А. БАРАТОВА***ПРОЦЕССЫ ОБРАЗОВАНИЯ УСТОЙЧИВЫХ ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР  
ПРИ ПЕРЕНОСЕ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ**

Представлены результаты компьютерного моделирования гетероаннигиляционных взаимодействий в средах с разным типом начального распределения. Показано, что при низких температурах процессы самоорганизации происходят преимущественно за счет пространственного разделения реагентов в результате межчастичных взаимодействий между слабоподвижными реагентами. С повышением температуры превалирующими в процессе самоорганизации становятся процессы, связанные с миграцией энергии по донорной подсистеме.

*Ключевые слова:* фрактальные структуры, компьютерное моделирование.

**Введение**

Одними из важнейших проблем физики конденсированного состояния являются исследование и разработка методов управления фотофизическими процессами на структурно-неоднородных поверхностях, так как направленный синтез поверхностных структур открывает новые возможности в получении новых перспективных материалов и наноструктур. Эффективность таких процессов определяется числом частиц и характером их распределения по поверхности и может зависеть от физико-химического состояния адсорбционного слоя и структурных особенностей материалов. О протекании указанных процессов можно судить по изменению кинетики затухания люминесценции и изменению соотношений между кинетическими параметрами процессов разгорания или затухания люминесценции. Существующие в настоящее время подходы для анализа кинетики люминесценции и расчета соответствующих кинетических параметров не дают полной интерпретации температурных и концентрационных кинетических зависимостей. В связи с этим, все большее применение находят методы компьютерного моделирования гетероаннигиляционных взаимодействий. Они позволяют существенно расширить возможности исследования природы и механизмов процессов в неупорядоченных средах.

**Методика компьютерного моделирования и мультифрактального анализа**

В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования парных гетероаннигиляционных взаимодействий между донорами и акцепторами триплетной энергии в средах с начальным хаотическим и мультифрактальным распределениями реагентов. Моделирование проводилось с использованием метода вероятностного клеточного автомата (ВКА) IV класса на плоской квадратной решетке размером  $500 \times 500$  узлов при степени покрытия поверхности молекулами статически закрепленных по поверхности доноров ( $D$ ) и диффундирующих по поверхности молекул акцепторов ( $A$ )  $\sigma_D = \sigma_A = 0,4\%$  в диапазоне температур от 193 до 273 К. Вероятность взаимодействия между реагентами варьировала в диапазоне  $p = 0,2-1$ . Моделирование проводилось через дискретные промежутки времени, задаваемые в условных единицах времени. Эта модель соответствует процессу переноса энергии электронного возбуждения и последующей триплет-триплетной аннигиляции в донорно-акцепторных парах, адсорбированных на неоднородной поверхности [1, 2].

Распределение реагентов по поверхности анализировалось на основе данных мультифрактального анализа (МФА), позволяющего определить такие параметры системы, как обобщенные фрактальные размерности  $D_q$ , параметры упорядоченности  $\Delta$  и однородности, энтропию  $S$ , а также обнаружить общие закономерности процессов образования, устойчивости и распада упорядоченных временных и пространственных структур. Методика компьютерного моделирования и мультифрактального анализа описана в работе [3].

Дополнительная информация о распределении взаимодействующих частиц была получена из результатов расчета условного потенциала взаимодействия (УПВ)  $U$  [4]:

$$U = \sum_i U_i = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j,k} \frac{q_j q_k}{r_{jk}},$$

где  $i$  – число ячеек, на которые разбивается исследуемая поверхность;  $j, k$  – индексы компонент пары;  $q_j, q_k$  – условные единичные заряды;  $r_{jk}$  – расстояние между взаимодействующими частицами. Зная УПВ, можно определить не только распределение частиц, но и геометрические характеристики, размер образующихся структур. Если взаимодействуют частицы разных сортов, то УПВ будет отрицательным:  $U < 0$ . Если взаимодействие происходит между одинаковыми компонентами, то значение УПВ будет положительным:  $U > 0$ .

### Результаты и их обсуждение

Как показало проведенное компьютерное моделирование, в результате аннигиляционных взаимодействий  $D+A \rightarrow 0$  происходит образование областей (кластеров), занятых частицами одного сорта, что, очевидно, обусловлено тем, что гибель частиц одного сорта, попадающих в область флуктуационного избытка частиц второго сорта, происходит быстрее, чем изменение размеров этих областей. Об этом свидетельствует поведение параметра  $U$  (рис. 1), положительные значения которого говорят о преобладании областей из однотипных частиц. Как видно из рис. 1, при низких температурах значение  $U$  увеличивается, что говорит о высокой доле образующихся микрокластеров из однотипных частиц, а уменьшение  $U$  свидетельствует об их разрушении и образовании макрокластера. Аналогичная периодическая перестройка структуры наблюдалась в работе [5] при образовании рыхлых скоплений (агрегатов) невзаимодействующих дефектов одного типа в результате облучения твердого тела радиацией. Данный процесс сопровождается увеличением энергии активации, причем при любом типе распределения для больших вероятностей взаимодействия  $p > 0,2$  наблюдается более резкое ее увеличение (рис. 2).

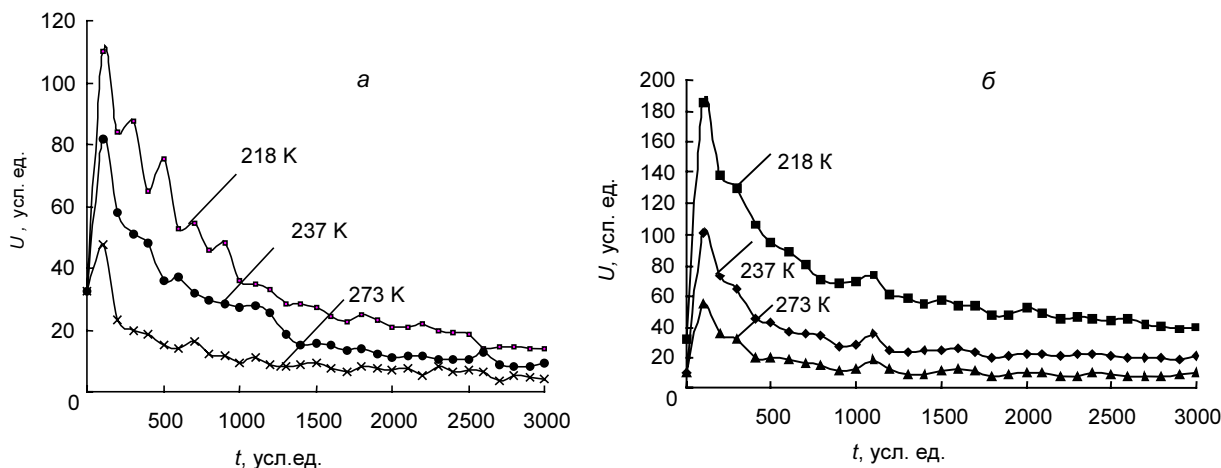


Рис. 1. Изменение УПВ  $U$  частиц в процессе эволюции бимолекулярной системы при вероятности взаимодействия  $p = 1$ : а – хаотическое распределение; б – мультифрактальное распределение

Анализ зависимости логарифма отношения числа выживших доноров  $\ln(C/C_0)$ , где  $C_0$  – начальная концентрация доноров,  $C$  – концентрация доноров в момент времени  $t$ , от обратной температуры  $1/T$  (рис. 2) показал, что при температурах  $T < T_c$  ( $T_c = 213$  К) изменение энергии активации носит постоянный характер при всех вероятностях взаимодействия, затем наблюдается изменение характера энергии активации, уже зависящее от вероятности взаимодействия частиц и вызываемое зависимостью структуры образующихся на поверхности макрокластеров от скорости парных взаимодействий.

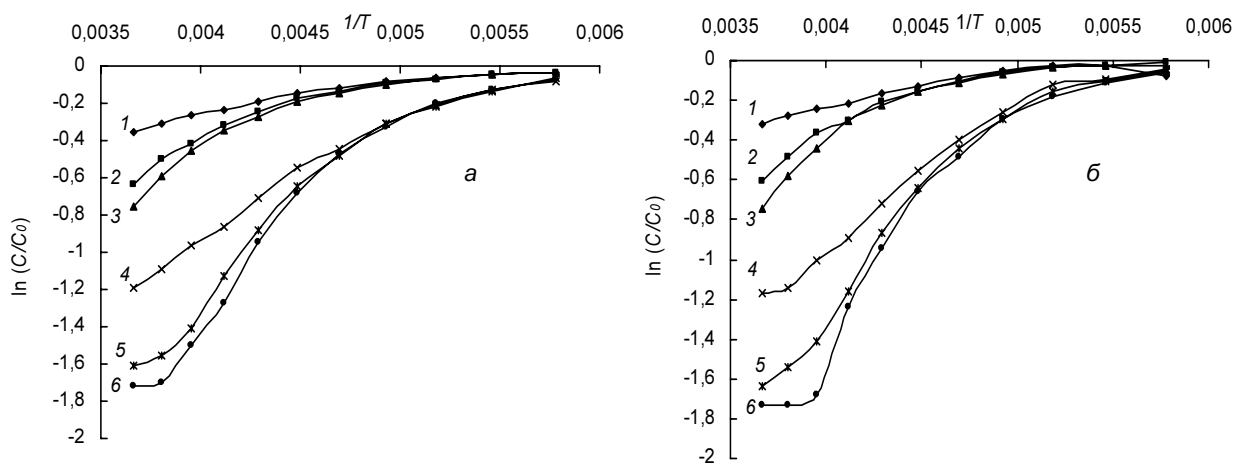


Рис. 2. Полулогарифмические зависимости относительного числа выживших доноров  $\ln(C/C_0)$  на ближне- (кр. 1, 2, 3) и дальневременном (кр. 4, 5, 6) этапах эволюции системы от обратной температуры  $1/T$ : кр. 1, 4 –  $p = 0,2$ ; кр. 2, 5 –  $p = 0,5$ ; кр. 3, 6 –  $p = 1$  для начального хаотического (а) и мультифрактального (б) распределений

Очевидно, некоторая критическая температура  $T_c = 213$  К соответствует изменению механизма взаимодействия при изменении геометрических параметров образующихся структур.

В кинетических зависимостях для двух типов распределения можно выделить две температурные области: в одной – при  $T \approx T_c$ , где энергия активации не зависит от вероятности взаимодействия, во второй – где меняется в зависимости от вероятности взаимодействия. При этом при низких температурах и малых вероятностях взаимодействия кинетика убыли реагентов определяется типом начального распределения частиц, при высоких температурах и для больших вероятностей взаимодействий наблюдается слабая зависимость кинетики от вероятности взаимодействия и характера начального распределения частиц. Наблюдаемые кинетические зависимости связаны с нарушением упорядоченности, что происходит по определенным законам, определяемым наличием характерных элементов структуры, разбивающих исследуемую систему на области, в пределах которых сохраняется порядок. Образование таких локальных структур приводит к некоторым характерным универсальным особенностям, изменяет механизм передачи энергии и/или её дезактивации [6].

Проведенный МФА показал, что изменение характера поведения параметра упорядоченности  $\Delta$  системы в результате парных взаимодействий определяется температурой матрицы, типом начального распределения и вероятностью взаимодействия между частицами. При любом типе начального распределения при больших вероятностях взаимодействия ( $p \sim 0,7$ ) и температурах  $T \leq 237$  К изменение  $\Delta$  носит линейный характер, а при повышении температуры наблюдается отклонение от линейного поведения. Причем для системы с начальным мультифрактальным распределением с повышением температуры  $T$  наблюдается его более резкое возрастание. При малых вероятностях взаимодействия ( $p \sim 0,2$ ) изменение  $\Delta$  в процессе эволюции характеризуется сложной зависимостью с наличием максимумов, причем при  $T > 237$  К  $\Delta$  не зависит от типа начального распределения, а с повышением вероятности взаимодействия и понижением температуры наблюдается различие во временных зависимостях  $\Delta = f(t)$  для систем с разным типом начального распределения.

Анализ зависимостей параметра упорядоченности  $\Delta$  от вероятности взаимодействия  $p$  на разных временных участках кинетических кривых при начальном хаотическом и мультифрактальном распределениях (рис. 3) показал, что более резкое изменение  $\Delta$  в процессе эволюции системы наблюдается при температуре  $T \sim 273$  К и начальном хаотическом распределении (рис. 3, в).

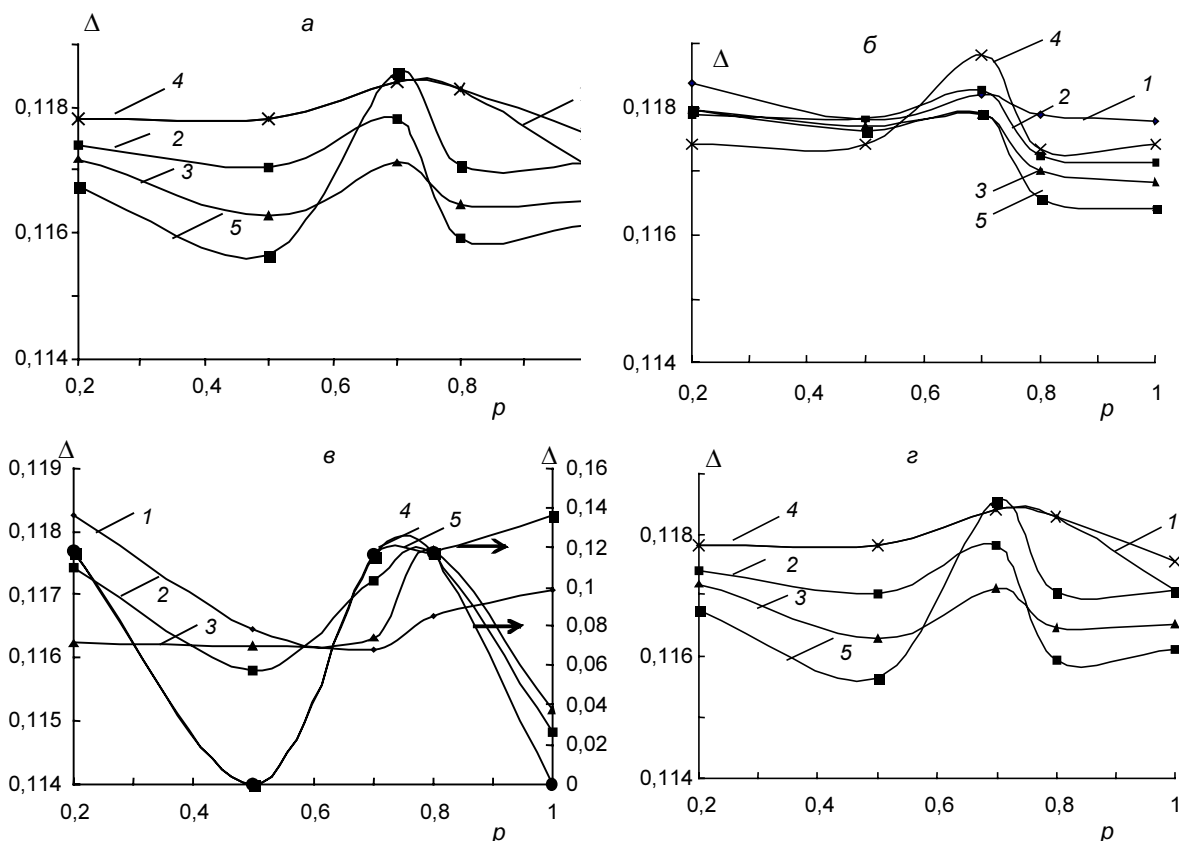


Рис. 3. Зависимость параметра упорядоченности  $\Delta$  от вероятности межмолекулярного взаимодействия  $\rho$  на разных временных участках кинетических зависимостей в процессе эволюции системы: начальное хаотическое распределение частиц: *a* –  $T = 237$  К, *в* –  $T = 273$  К; начальное мультифрактальное распределение частиц: *б* –  $T = 237$  К, *г* –  $T = 273$  К. Кр. 1 – 500 итерация, кр. 2 – 1000 итерация, кр. 3 – 1500 итерация, кр. 4 – 2000 итерация, кр. 5 – 2500 итерация

Наблюдаемые изменения в поведении параметров  $U$  и  $\Delta$  объясняются тем, что при низких температурах процесс самоорганизации системы, заключающийся в переходе от наиболее хаотического состояния к более упорядоченному, происходит преимущественно за счет пространственного разделения реагентов в результате межчастичных взаимодействий между слабоподвижными реагентами. С повышением температуры превалирующими в процессе самоорганизации становятся процессы, связанные с миграцией энергии по донорной подсистеме. Образующиеся при этом поверхностные фрактальные кластеры будут состоять из определенного числа молекул (т.е. иметь характерные размеры), которое не изменяется в процессе эволюции системы. Это согласуется с результатами работы [7], в которой показано, что по мере увеличения размера кластеров замедляется процесс их объединения, а при достижении определенного размера кластер не может расти дальше из-за ограниченной плотности. Изменение поверхностной концентрации частиц одного сорта не изменяет характерных размеров кластеров, а приводит только к изменению их количества.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Карстина С.Г., Маркова М.П., Брюханов В.В. // Журн. прикл. спектр. – 2003. – № 5. – С. 646–651.
2. Бактыбеков К.С., Карстина С.Г., Маркова М.П., Вертягина Е.Н. // Вестник КазНУ. Сер. физич. – 2004. – № 2(17). – С. 72–75.
3. Карстина С.Г., Бактыбеков К.С., Баратова А.А. // Нелинейный мир. – 2007. – № 3(5). – С. 133–138.
4. Bakt'ybekov K., Vasil'eva I. // Proceedings of the 9<sup>th</sup> International Symposium on Spacecraft Materials in a Space Environment. – The Netherlands, 2003. – P. 719–721.

5. Винецкий В.Л., Калнинь Ю.Х., Котомин Е.А., Овчинников А.А. // УФН. – 1990. – Т. 160. – № 10. – С. 1–33.
6. Малиновский В.К. // ФТТ. – 1999. – Т. 41. – № 5. – С. 805–808.
7. Смирнов Б.М. // УФН. – 1991. – Т. 161. – № 6. – С. 171–200.

Евразийский национальный университет им Л.Н. Гумилёва,  
г. Астана, Республика Казахстан  
E-mail: bkazbek@mail.ru

Поступила в редакцию 02.11.10.