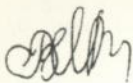


НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ БІОКОЛОЇДНОЇ ХІМІЇ

На правах рукопису



Вигорницький
Микола Вікторович

УДК 541.18.041+530.17

**ОСОБЛИВОСТІ ЛОКАЛЬНОЇ СТРУКТУРИ ФРАКТАЛЬНИХ
ЛАПЛАСІВСЬКИХ АГРЕГАТІВ.**

01.04.24 - фізика колоїдів

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ - 1996

349. 22

AB 36.534

ЛННБ України ім.В.Стефаніка



00760740 (0)

Дисертація є рукопис

Робота виконана в Інституті біологічної хімії НАН України

Наукові керівники:

доктор фізико-математичних наук, ст.н.с
ЛЕБОВКА М.І.

доктор хімічних наук, професор
МАНК В.В.

Офіційні опоненти:

доктор фізико-математичних наук, професор
ДОРОШ А.К.

доктор хімічних наук
СУШКО В.О.

Провідна організація :

Київський державний університет ім.
Т.Г.Шевченка

Захист відбудеться "30" січня 1997 року о 14⁰⁰ годині
на засіданні спеціалізованої вченої ради Д.01.41.02 в Інституті
біологічної хімії НАН України за адресою : 252080, Київ, Фрунзе 85

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Інституту
біологічної хімії.

Автореферат розісланий "30" червня 1996 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради,
к.т.н.

Прокопенко В.А.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. В останні роки значні зусилля дослідників усього світу направлені на вивчення фрактальних агрегатів лапласівського типу, які утворюються в колоїдних системах у нерівноважних умовах. Ріст таких структур - важливий процес в багатьох галузях науки та техніки. Широка розповсюдженість структур такого типу в природі та їх велике практичне значення (фрактальні структури лапласівського типу утворюються при електролітичному осадженні металів на тонких електродах, при витісненні рідин з порового середовища, при пробі діелектриків, при осадженні тонких плівок, при рості дендритних кристалів і т.і.) робить перспективним дослідження взаємозв'язку законів їх формування та локальної структури.

Мета дослідження. Метою даної роботи є вивчення локальної структури фрактальних агрегатів лапласівського типу в залежності від умов росту та з'ясування причин виникнення нещодавно відкритої мультискейлінгової поведінки радіального профілю густини в моделі дифузійно-обмеженої агрегації (ДОА).

Наукова новизна досліджень. В роботі вперше проведено дослідження локальної структури тривимірних ДОА агрегатів, зрощених на простій кубічній ґратці. Досліджені радіальні залежності ймовірностей реалізації різних конфігурацій з заданим координаційним числом f_c та їх розподіл. Виявлено локальну анізотропію конфігурацій першої координаційної сфери.

Вперше досліджено профіль густини та фрактальні властивості кластерів, які утворюються під час росту за механізмом ДОА в замкненій порожнині. Виявлено мультискейлінгову поведінку радіального профілю густини кластерів цього типу.

Вперше виявлено мультискейлінгову поведінку радіальних профілів густини для кластерів, одержаних за допомогою моделі детерміністичного лапласівського росту (ДЛР) на плоских квадратних і трикутних ґратках. Показано, що локальна структура лапласівських клімів в широкому інтервалі значень параметра росту p не є однорідною як до того вважалося.

Практичне значення роботи. Розроблені алгоритми та програми можуть бути використані для розрахунку енергії взаємодії агрегатів колоїдних частинок в рідкому дисперсійному середовищі. Дані про конфігураційний склад тривимірних ДОА агрегатів можуть бути використані для розрахунку реологічних та електропровідних характеристик фрактальних агрегатів. Модель агрегації частинок у замкненій порожнині можна розглядати як перший крок на шляху до моделювання процесів капілярного просочування сферичних гранул пористих адсорбентів.

Автор захищає:

1. Результати конфігураційного та мультискейлінгового аналізу тривимірних ДОА агрегатів
2. Фрактальні властивості структури агрегаційних систем, вирощених в замкненій порожнині за механізмом ДОА.
3. Результати дослідження поведінки радіального профіля густини для агрегатів, вирощених в замкненій порожнині.
4. Мультискейлінгову поведінку профілю густини в моделі детерміністичного лапласівського росту (ДЛР).

Апробація роботи. Результати роботи доповідалися на національних та міжнародних конференціях, зокрема, на наукових школах країн СНГ "Вібротехнологія-95" /Одеса, вересень 18-23, 1995/, "Вібротехнологія-96" /Одеса, вересень 9-14, 1996/, на 11th International Conference SURFACE FORCES /Moscow, Russia, June 25-29, 1996/, на

щорічних наукових конференціях: "Україна: людина, суспільство, природа" /Київ, 17-18 січня, 1995, Київ, 25-26 січня, 1996/.

Особистий вклад автора. Основний об'єм наукових досліджень, що представлені в роботі, проведений дисертантом особисто. Особисто розроблені алгоритми і написані програми для проведення моделювання росту агрегатів частинок при різних зовнішніх умовах. Самостійно проведено більшість аналітичних обчислень та математична обробка одержаних результатів. Постановка задачі та обговорення наукових результатів проводились в основному з науковими керівниками.

Структура та об'єм дисертації. Дисертація складається з вступу, п'яти глав, висновків, списку літератури та додатків, викладена на 160 сторінках друкованого тексту, містить 2 таблиці та 25 рисунків. Список використаної літератури включає 120 найменувань.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

В першій главі зібрана інформація про сучаний стан дослідження фрактальних агрегаційних систем лапласівського типу, розглядаються основні поняття концепції фрактальної геометрії та методи аналізу фрактальних структур. В найпростішому випадкові самоподібних фрактальних агрегатів частинок виконується масштабне (скейлінгове) співвідношення між числом частинок фрактального агрегату N та характерним розміром r

$$N \sim r^{D_f} \quad (1)$$

де D_f - фрактальна вимірність. Слід сказати, що співвідношення (1) є по суті визначенням глобальної фрактальної вимірності агрегату, яка відображає його скейлінгові властивості в цілому. В якості r на практиці часто беруть радіус гірщини агрегата R_g (для моделі ДОО ця

величина приблизно вдвічі менша за максимальний радіус кластера). Оскільки, об'єм кластера $V \sim r^d$ де d - евклідова розмірність простору, то, враховуючи співвідношення (1), для радіального профілю густини фрактального агрегата повинно виконуватися наступне співвідношення

$$\rho(r) \sim r^{-(d-1)\beta} \quad (2)$$

де r - відстань від "зерна росту" ДОО агрегату.

Радіальний профіль густини $\rho(r, R_g)$ двовимірних ДОО агрегатів (рис. 1а) описується більш складним співвідношенням

$$\rho(r, R_g) = C(x)r^{-(d-D(x))} \quad (3)$$

де під густиною $\rho(r, R_g)$ слід розуміти число частинок одиничної маси в одиниці об'єму, r - відстань від "зерна росту", R_g - радіус гірації кластера, $x = r/R_g$ -приведена відстань, $C(x)$ - скейлінгова функція, $D(x)$ - неперервна фрактальна вимірність. $D(x)$ є локальною фрактальною вимірністю й відображає особливості формування фрактальної структури на локальному рівні.

Природа мультискейлінгу вивчена ще недостатньо, зокрема, не з'ясована роль випадкових флуктуацій, які супроводжують процеси додавання одиничних частинок до кластеру, в визначенні неоднорідних властивостей кластерів. З метою з'ясування цього питання була вибрана для дослідження модель ДЛР, в якій відсутні випадкові флуктуації. Ця модель використовується для вивчення процесів росту дендритних кристалів.

В другій главі розглядаються алгоритми моделювання процесів агрегатоутворення та деякі з особливостей роботи програмного забезпечення. В роботі використовувалися три моделі: ґраткова ДОО, позаґраткова модель агрегатоутворення в замкненій порожнині за механізмом ДОО та ґраткова модель ДЛР. Для моделювання росту

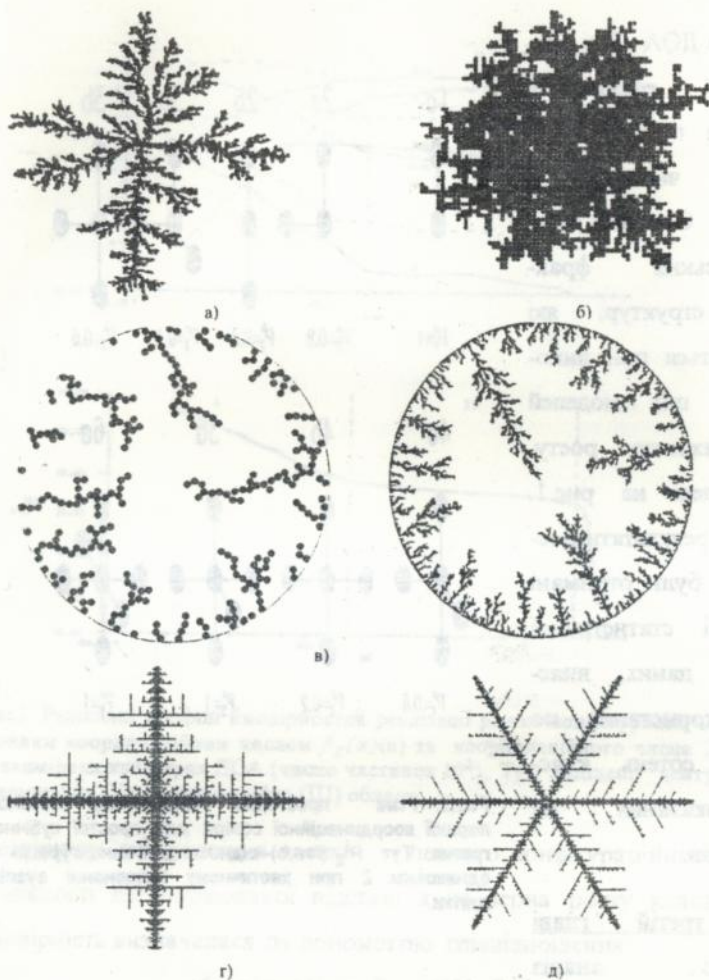


Рис.1. Лапласівські фрактальні агрегати: а) двовимірний ґратковий агрегат моделі ДОА розміром 10^5 частинок; б) проекція тривимірного ґраткового ДОА агрегату розміром 10^4 частинок; в) двовимірні позаґраткові агрегати частинок, які утворюються за механізмом ДОА в порожнинах різного радіусу R (вимірюється в радіусах частинки); г-д) двовимірні ґраткові агрегати, які утворюються в моделі ДЛР на квадратній та трикутній ґратці.

агрегатів ДОА був розроблений ефективний алгоритм пошуку найближчої частинки в кластері. Основні типи лапласівських фрактальних структур, які утворюються при використанні цих моделей нерівноважного росту, представлені на рис.1. Головні результати дослідження були отримані на основі статистичної обробки даних, внаслідок використання по декількох сотнях кластерів, вказаних на рис.1 типів.

В третій главі

проведено аналіз конфігурацій частинок в першій координаційній сфері тривимірних та двовимірних ДОА агрегатів, зрощених на простій кубічній та квадратній ґратці. Частинки ґраткових ДОА агрегатів поділялися на класи за конфігураційними типами першої координаційної сфери кубічної ґратки. Основні конфігураційні типи частинок представлені на рис.2.

Для характеристики локальної структури обчислювалась

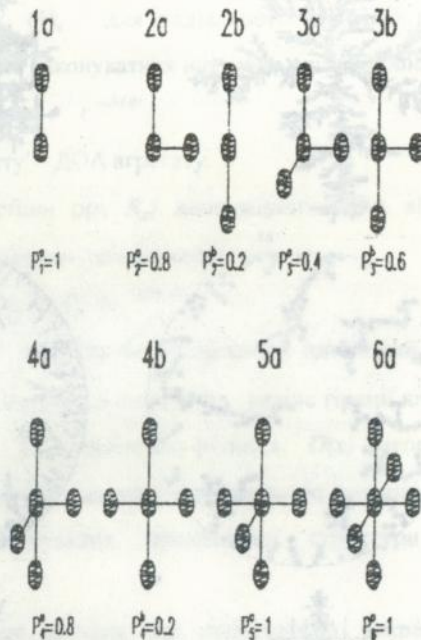
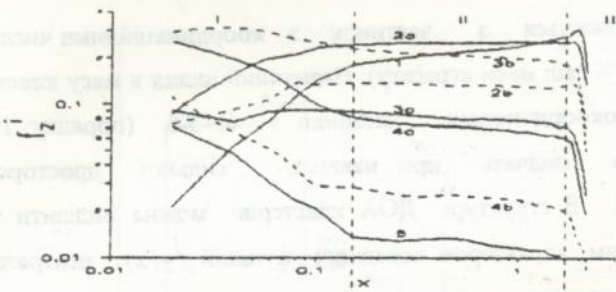
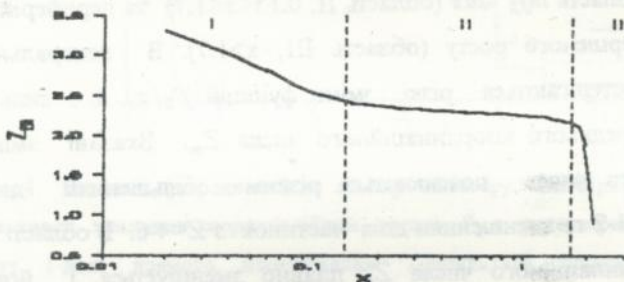


Рис.2. Різні просторові конфігурації частинок першої координаційної сфери для простої кубічної ґратки. Тут P_i^c ($i=a,b$) - відносні долі конфігурацій з однаковим Z при хвотичному заповненні вузлів ґратки.



a)



b)

Рис.3. Радіальні профілі ймовірностей реалізації різних конфігурацій частинок з заданим координаційним числом $f_z(x)$ (а) та координаційного числа $Z_m(x)$ (б) в тривимірних кластерах ДОА (число частинок 10^4). Тут виділені центральна (I), стаціонарна (II) та периферійна (III) області.

ймовірність знаходження частки певного конфігураційного типу в залежності від нормованої відстані x до зерна росту кластера. Ця ймовірність визначалася за допомогою співвідношення

$$f_z(x) = \Delta N_z(r, R_g) / \Delta N(r, R_g) \quad (4)$$

де $\Delta N(r, R_g)$ - загальна кількість частинок в сферичному сегменті з середнім радіусом r для кластера з радіусом гірації R_g , а $\Delta N_z(r, R_g)$ число частинок певного конфігураційного типу, представлених на рис.

2. Результати конфігураційного аналізу тривимірних ДОА агрегатів представлені на рис.3. Тут же показана залежність середнього координаційного числа Z_m від x . Середнє значення Z_c для всього кластера дорівнює 2.26 ± 0.01 . Тривимірні ДОА агрегати, в основ-

ному, складаються з частинок з координаційними числами $Z=1-3$ (біля 90% від маси агрегату). Незначний вклад в масу кластера вносять сильнокоординовані частинки з $Z=5-6$ (порядку 1%). Одержані дані свідчать про наявність сильної просторової неоднорідності. В структурі ДОА кластерів можна виділити три області з різним характером поведінки функцій $f_z(x)$: центральну область, що включає затравну частинку (область I, $x < 0.15$), стаціонарну область $\ln f_z \sim \ln x$ (область II, $0.15 < x < 1.7$) та периферійну область незавершеного росту (область III, $x > 1.7$). В центральній області (I) спостерігаються різкі зміни функцій $f_z(x)$ й сильне зменшення середнього координаційного числа Z_m . Вказані зміни координаційного числа пояснюються різким збільшенням долі частинок з $Z=1-2$ та зменшенням долі частинок з $Z=4-6$. В області II значення координаційного числа Z_m плавно зменшується, і його середнє значення на інтервалі $0.15 < x < 1.7$ досягає величини $Z=2.265$, що практично співпадає з середнім значенням, характерним для всього кластера Z_c . Тому можна припустити, що більшість глобальних характеристик ДОА агрегата визначається структурою області II.

Подібні дослідження були проведені і для двовимірних ДОА агрегатів розміру 10^4 та 10^5 частинок. Порівняння залежностей $f_z(x)$ агрегатів різного розміру показало, що радіальна конфігураційна будова двовимірних ґраткових ДОА кластерів інваріантна до розміру кластера.

На рис.4 приведено розподіл ймовірностей реалізації конфігурацій f_z (усереднених по всьому кластеру) для ґраткових тривимірних ДОА агрегатів. Слід сказати, що розподіл ймовірностей наближено описується за допомогою формули Бернуллі

$$f_z = P_z^z \cdot C_z^e \cdot p^z (1-p)^{6-z} \quad (5)$$

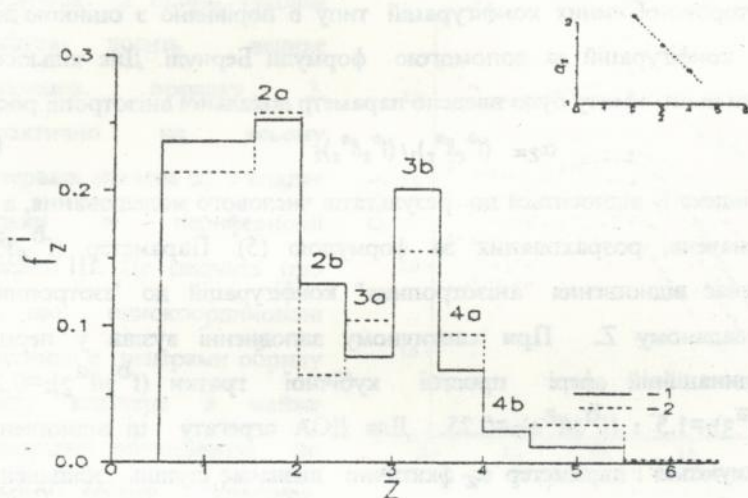


Рис.4. Розподіл, усереднений по всьому кластеру, ймовірностей знаходження частинок з заданим координаційним числом Z_c в тривимірному ДООА агрегаті. Тут 1-дані прямого моделювання, 2-результати оцінки за допомогою співвідношення (5). На вставці показана залежність параметру локальної анізотропії росту α_z , визначеного за допомогою співвідношення (6), від координаційного числа.

де C_c^z - число сполучень з 6 по Z , $p = Z_c/6$ - ймовірність реалізації конфігурації частинок з середнім координаційним числом $Z_c = 2.26 \pm 0.01$, одержаним для кластера ДООА, множник P_z^j враховує вклад окремих парних конфігурацій при заданому значенні Z (величини P_z^j приведені на рис. 2). Суцільними лініями показані дані, одержані за допомогою чисельного моделювання, а значення f_z , розраховані за формулою Бернуллі, показані пунктирною лінією. Одержані функції розподілу непогано співвідносяться між собою, хоч і спостерігаються різниці відносних вкладів конфігурацій a та b . Для тривимірних так само, як і для двовимірних ДООА кластерів спостерігається деяка перевага "анізотропних", або більш

просторово-об'ємних конфігурацій типу b порівняно з оцінкою доли цих конфігурацій за допомогою формули Бернуллі. Для кількісної оцінки цього ефекту було введено параметр локальної анізотропії росту

$$\alpha_Z = (\Gamma_Z^b / \Gamma_Z^a)_1 / (\Gamma_Z^b / \Gamma_Z^a)_2 \quad (6)$$

Тут індекс 1- відноситься до результатів числового моделювання, а 2- до значень, розрахованих за формулою (5). Параметр $(\Gamma_Z^b / \Gamma_Z^a)$ визначає відношення "анізотропних" конфігурацій до "ізотропних" при заданому Z . При хаотичному заповненні вузлів у першій координаційній сфері простої кубічної ґратки $(\Gamma_2^b / \Gamma_2^a)_2 = 0.25$, $(\Gamma_3^b / \Gamma_3^a)_2 = 1.5$ і $(\Gamma_4^b / \Gamma_4^a)_2 = 0.25$. Для ДОА агрегату ці відношення збільшуються і параметр α_Z фактично визначає ступінь збільшення доли "анізотропних" конфігурацій типу b за відношенням до "ізотропних" типу a . На вставці до рис.4 приведена залежність параметру анізотропії α_Z від координаційного числа Z . Вказаний параметр має максимальне значення для частинок з двома сусідами й зменшується з ростом координаційного числа. Зокрема, для $Z=2$ це означає, що при переході від хаотичної упаковки до кластерів ДОА спостерігається збільшення доли лінійних конфігурацій типу $2b$ порівняно з долею конфігурацій типу $2a$, тобто в кластерах ДОА відбувається посилення локальної анізотропії. Така поведінка є ще одним проявом дискусійного ефекта локальної анізотропії для кластерів моделі ДОА.

Основні результати дослідження радіального профілю густини тривимірних ґраткових ДОА агрегатів з урахуванням конфігураційної структури представлені на рис. 5. Нами було виявлено різну мульти-скейлінгову поведінку для всіх типів частинок, представлених на рис. 2. Для тривимірного випадку, як і для двовимірного, на сумарній кривій $D_S(x)$ в області $x \sim 1.4$ спостерігається максимум. Функція $D_I(x)$ для

частинок з одним сусідом набуває досить велике значення, порядку 3, практично на всьому інтервалі значень x , і спадає тільки в периферійній області III. Це свідчить про те, що однокоординатні частинки є центрами обриву росту кластера й майже однорідно розташовані по всьому об'єму кластера. Характер поведінки функцій $D_3(x)$ та $D_2(x)$ відрізняється незначною мірою і

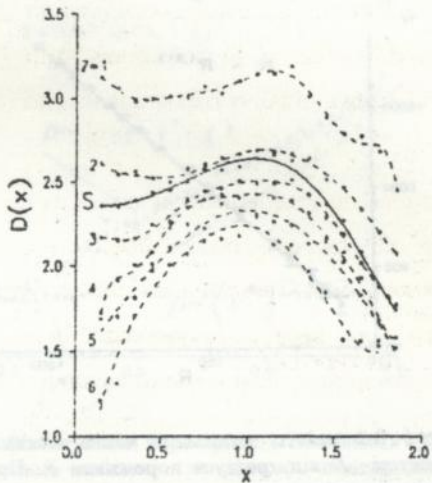


Рис. 5. Залежність показника $D(x)$ в співвідношенні (3) для різних наборів частинок з ($Z=1-6$). S-сумарна крива для всіх наборів частинок з різними координативними числами.

пояснюється тим, що частинки з двома сусідами є домінуючими в кластері. При збільшенні Z криві $D_z(x)$ зміщуються вниз. Максимум на них стає більш вираженим. В цілому така зміна поведінки $D_z(x)$ корелює з даними, представленими на рис.3

Четверта глава присвячена дослідженням фрактальної структури та вивченню особливостей формування агрегатів за механізмом ДОА в замкненій порожнині. Залежність (в логарифмічному масштабі) повного числа частинок в кластері N від радіусу порожнини R для агрегатів, зображених на рис. 1в, представлена на рис. 6. Ця залежність добре згладжується степеневим співвідношенням типу (1). При цьому $D_f = 1.815 \pm 0.008$, що свідчить про самоподібність зазначеного набору структур. Приведене значення фрактальної вимірності суттєво відрізняється від значення $D_f = 1.71$, характерного для звичайних ДОА агрегатів (рис. 1а). Така відмінність, мабуть, пов'язана з

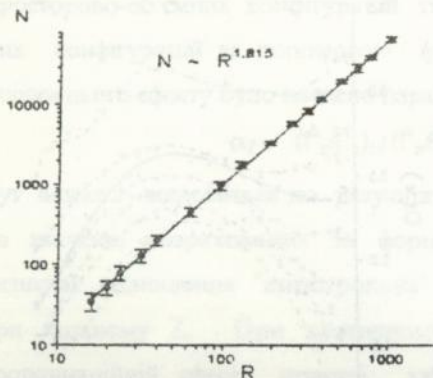


Рис.6. Залежність загального числа частинок в кластері N від радіуса порожнини R . Пряма лінія проведена за результатами спадкування за допомогою степеневої функції. Показані на рисунку інтервали біля кожної точки відповідають середньоквадратичним похибкам.

ефектами конкуруючого росту гілок кластера при агрегації в замкненій порожнині. Слід зауважити, що ефекти конкуруючого росту біля стінок порожнини чисто зовні проявляються в збільшенні густини кластерів, що повинно ефективно відобразитися на величині значення фрактальної вимірності.

На рис. 7 приведені результати дослідження локальної структури ДОО агрегатів в порожнині. На цьому рисунку зображені усереднені по різних кластерам масштабовані профілі густини для різних значень R . По осі абсцис відкладено нормовану відстань $r^* = r/R$ від центру порожнини. При русі від центру порожнини до її стінки густина спочатку зменшується, проходить через мініум (в області $r^* \approx 0.35-0.4$), а потім різко зростає. Початкове зниження ρ можна пояснити тим, що в центральній області (рис. 7, область I) розвиваються одиничні, слабо взаємодіючі гілки ДОО. В цій області можна чекати, що густина при збільшенні r^* буде зменшуватися за законом

$$\rho(r^*) \propto R^{D_b-2} r^{*D_b-2} \quad (7)$$

При достатньо великих $R (> 100)$ профіль масштабованих значень $\rho(r^*)/R^{D_b-2}$ добре описується за допомогою співвідношення (7) (див. рис.7, крива пунктирна лінія). Це вказує на те, що структура гілок в

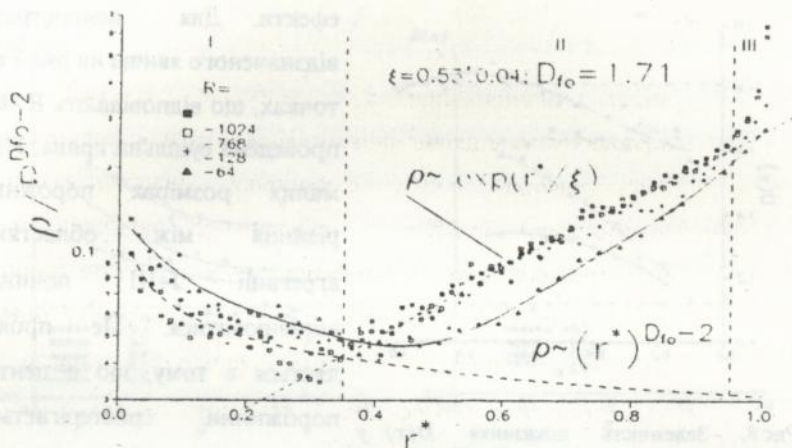


Рис.7. Радіальні масштабовані профілі густини при різних значеннях R . Вертикальні пунктирні лінії розділяють області з різною поведінкою масштабованих профілів густини. Суцільна лінія проведена по точках, які відповідають $R=64$. Пряма пунктирна лінія, проведена по експериментальних точках, відповідає співвідношенню (8), а крива пунктирна лінія - співвідношенню (7).

центрі порожнини дійсно схожа на структуру кластерів моделі ДОО (рис.1а). Різке збільшення $\rho(r^*)/R^{D_{fo}-2}$ області $0.4 < r^* < 0.95$ (рис.7, область II) добре описується за допомогою "емпіричного" експоненційного закону

$$\rho(r^*) \propto e^{r^*/\xi} \quad (8)$$

де $\xi = 0.53 \pm 0.04$ - кореляційна довжина (див. рис.7, пряма пунктирна лінія). Зростання нормованої густини в цій області можна пояснити збільшенням ролі ефектів конкуруючого росту. Особливо сильно вказані ефекти проявляються у вузькій пристінній області при $r^* > 0.95$ (рис.7, область III). В цій області завдяки сильній конкуренції росту йде найбільш інтенсивний обрив гілок кластера, що ростуть від стінок порожнини.

Слід відзначити, що при $R < 100$ починають проявлятися розміри

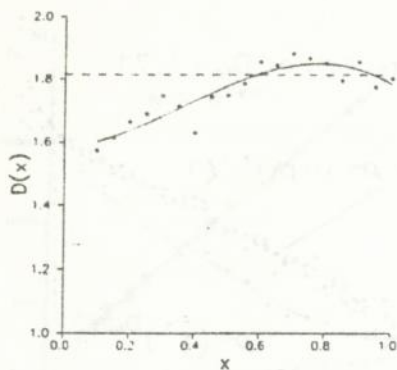


Рис.8. Залежність показника $D(x)$ у співвідношенні (3) від $x=r/R$. Пунктирна лінія відповідає значенню ефективної фрактальної вимірності $D_f=1.815\pm 0.008$. асимптотично великих систем при $R\rightarrow\infty$.

Результати мультискейлінгового аналізу радіальних профілів густини набору кластерів, вирощених в порожнинах різних радіусів R представлені на рис. 8. Тут приведена залежність показника $D(x)$ у співвідношенні (3) від $x=r/R$. Одержана залежність $D(x)$ значно відрізняється від аналогічних залежностей, які спостерігаються для моделі ДОА. При русі від стінок порожнини в інтервалі $0.5 < x < 1$ величина $D(x)$ практично не змінюється і в межах похибок не відрізняється від ефективного значення фрактальної вимірності D_f (показано пунктирною лінією), одержаного з аналізу залежності повного числа частинок в кластері N від розміру порожнини R . При $x < 0.5$ спостерігається значне зменшення $D(x)$ до величини порядку 1.6. Одержані результати дозволяють зробити припущення про те, що ефективне значення фрактальної вимірності для систем цього типу визначається структурою найбільш густих шарів кластерів, які знаходяться поблизу стінки порожнини. Зниження $D(x)$ при $x < 0.5$ в цілому корелює з появою в цій області одиничних ДОА-подібних

ефекти. Для демонстрації відзначеного явища на рис.7 по точках, що відповідають $R=64$, проведена суцільна крива. При малих розмірах порожнин різниця між областями агрегації I÷III починає вирівнюватися. Це проявляється в тому, що в центрі порожнини спостерігається вища, а поблизу стінок нижча густина, ніж у випадку

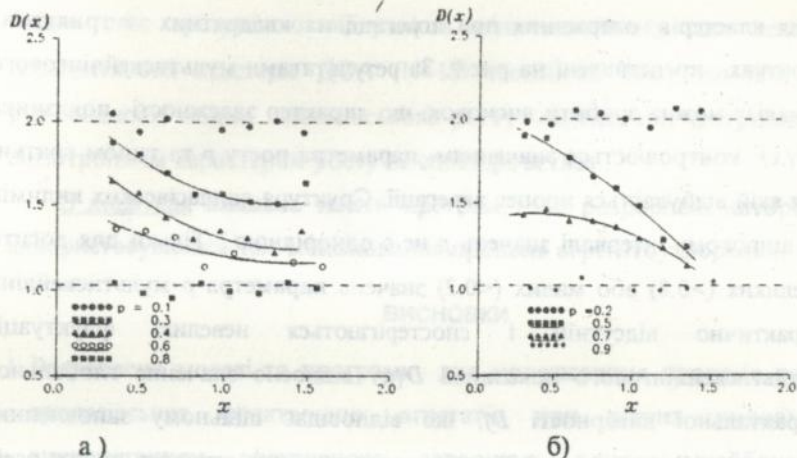


Рис. 9. Залежність показника мультискейлінгової експоненти $D(x)$ у співвідношенні (3) від $x=r/R_g$ при різних значеннях p для квадратних (а) та трикутних (б) ґраток.

гілок-лідерів, для яких в їх периферійній частині можуть проявлятися значення $D(x)$ навіть більш нижчі ніж D_{f_0} .

В п'ятій главі приведено результати дослідження фрактальних властивостей моделі ДЛР, а також результати мультискейлінгового аналізу радіальних профілів густини для квадратних та трикутних ґраток.

Розподіл температури в моделі ДЛР задовольняє рівняння Лапласа $\Delta T=0$. Після визначення розподілу температури в системі нові частинки приєднуються до кластера тільки в тих місцях, де нормалізований градієнт $\nabla T/\nabla T_{max}$ перевищує деяку величину p (параметр росту, $0 \leq p \leq 1$).

В роботі було проведено моделювання на квадратних та трикутних ґратках при різних значеннях p . Залежності мультискейлінгового показника $D(x)$ у співвідношенні (3) від $x=r/R_g$

для кластерів, одержаних при агрегації на квадратних і трикутних ґратках, представлені на рис.9. За результатами мультискейлінгового аналізу можна зробити висновок, що характер залежності показника $D(x)$ контролюється значенням параметра росту p та типом ґратки, на якій відбувається процес агрегації. Структура лапласівських килимів в широкому інтервалі значень p не є однорідною. Тільки для досить великих (>0.8) або малих (<0.2) значень параметра p мультискейлінг практично відсутній і спостерігаються невеликі флуктуації мультискейлінгового показника $D(x)$ відносно значення глобальної фрактальної вимірності Df , що відповідає щільному заповненню простору ($Df = 2$, $p < 0.2$), або росту лінійних структур вдовж осей ґратки ($Df = 1$, $p > 0.8$) (пунктирні лінії на рис.9). В інтервалі проміжних значень $0.2 < p < 0.8$ спостерігається мультискейлінгова поведінка і $D(x)$ є неперервно спадаючою функцією. При цих умовах кластери ДЛР не можна вважати регулярним фракталами. Характерною особливістю поведінки $D(x)$ є режим насичення, що спостерігається в області великих x для квадратної ґратки і в області малих x для трикутної. Така поведінка мультискейлінгового показника $D(x)$ суттєво відрізняється від тої, що спостерігається для моделі ДОА. Це вказує насамперед на важливість стохастичних ефектів у визначенні характеру мультискейлінгу. Таким чином, можна зробити припущення, що навіть у більш загальних моделях лапласівського росту (наприклад, при включенні стохастичності) мультискейлінг може бути пов'язаний з наявністю переходу від ізотропного до анізотропного росту. Відзначимо, що з ростом розмірів ґраткових кластерів ДОА спостерігається посилення їх анізотропії (великі кластери мають анізотропний зіркоподібний зовнішній контур з гілками, які направлені вздовж осей ґратки) і тому саме для таких кластерів можна чекати прояву мультискейлінгу.

Звідси стає зрозуміло відсутність мультискейлінгу для великих позаграткових кластерів ДОА ($N \sim 10^6$ частинок), тому що для цієї різновидності моделі лапласівського росту перехід між ізотропним і анізотропним характером росту не спостерігається.

В додатках вміщено тексти програм, що розроблені автором і використовувалися для моделювання процесів агрегатоутворення.

ВИСНОВКИ

1. Розроблено моделі та програми для моделювання процесів росту лапласівських фрактальних агрегатів при різних умовах з використанням ефективного алгоритму пошуку найближчої частинки кластера.
2. Проведено конфігураційний аналіз агрегатів частинок, що ростуть на зерні росту за дифузійним механізмом у площині та в просторі з використанням граткової моделі ДОА. Показано, що ДОА агрегати є неоднорідними за своєю радіальною конфігураційною структурою.
3. Запропоновано механізм росту агрегатів ДОА, відповідно до якого активна зона росту ДОА агрегата має сталий парціальний конфігураційний склад, який інваріантний до розміру кластера, і не змінюється з його ростом.
4. Проведено дослідження профілю густини двовимірних та тривимірних агрегатів моделі ДОА. Виявлена різна мультискейлінгова поведінка радіального профілю густини для агрегатів з різними конфігураційними типами частинок. Встановлено що для цієї моделі характерне формування анізотропних (переважно лінійних) конфігурацій частинок.
5. Вперше досліджено будову кластерів, які утворюються під час росту за механізмом ДОА в замкненій порожнині. Показано, що

структури, які виникають в цій моделі росту, є масштабно інваріантними до розміру порожнини її описуються ефективною фрактальною вимірністю $D_f = 1.815 \pm 0.008$, яка суттєво перевищує значення $D_{fo} = 1.71$, характерне для звичайних ДОА агрегатів.

6. Виявлено мультискейлінгову поведінку профілю густини агрегатів частинок, що формуються в замкненій порожнині за механізмом, що контролюється дифузією. При цьому ефективне значення фрактальної розмірності D_f для систем цього типу визначається структурою найбільш густих шарів, що знаходяться поблизу стінки порожнини.
7. Виявлено мультискейлінгову поведінку профілів густини для кластерів, одержаних за допомогою моделі детерміністичного лапласівського росту. Показано, що їх локальна структура в широкому інтервалі значень параметра росту p не є однорідною, як до того вважалося.

По темі дисертації опубліковані наступні роботи:

1. Н.В. Выгорницкий, Н.И. Лебовка, В.В. Манк. Особенности локальной структуры трехмерных кластеров, формирующихся при диффузионно-контролируемой агрегации /Коллоидный журнал, 1995, т. 57, N 6, с.788- 792.
2. N.I.Lebovka, V.V. Mank, F.D. Ovcharenko, N.V. Vygornitskii. Internal structure of diffusion-limited aggregates: near-neighbours coordination analysis /ДАН України, 1996, N 3, P. 82-85.
3. М.В. Вигорницький, М.І. Лебовка, Ф.Д. Овчаренко, В.В.Манк. Мультискейлінг у детерміністичній моделі лапласівського росту. /ДАН України, 1996, N 9, с.90-93
4. Лебовка Н.И., Выгорницкий Н.В., Манк В.В. Моделирование двумерной диффузионно-ограниченной агрегации в замкнутой

- полости./ В материалах 6 научной школы стран СНГ "Вибротехнология -96", 9-14 сентября, Одесса, 1996 г., с. 27-30.
5. М.І. Лебовка, М.В. Вигорницький, В.В. Манк . Конфігураційний та мультискейлінговий аналіз тривимірних дифузійно-обмежених агрегатів /В тезах доповідей щорічної наукової конференції: "Україна: людина, суспільство, природа", Київ, 17-18 січня,1995, с.44-45
 6. Вигорницький Н.В, Лебовка Н.И., Манк В.В., Марцин И.И. Анализ внутренней структуры агрегатов частиц. /В материалах конференции "Вибротехнология-95", Одеса, 18-23 вересня, 1995, с.69-71
 7. М.І. Лебовка, М.В. Вигорницький, В. В. Манк . Мультискейлінг в детерміністичній моделі агрегації / В тезах доповідей щорічної наукової конференції: "Україна: людина, суспільство, природа", Київ, 25-26 січня, 1996, с.71-72
 8. Vygorntskii, N.I.Lebovka , V.V.Mank . Multiscaling properties of particles aggregates under different growth conditions. /In materials: 11th International Conference SURFACE FORCES, June 25-29,1996, Moscow, Russia, P. 69

АННОТАЦИЯ

Вигорницький Н.В. Особенности локальной структуры фрактальных лапласовских агрегатов. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.24 - физика коллоидов, Институт биокolloидной химии НАН Украины, Киев, 1996 г.

Защищается 8 научных работ, в которых проведено моделирование роста и изучена локальная структура фрактальных агрегатов модели диффузионно-контролируемой агрегации (ДКА), модели детерминистического лапласовского роста (ДЛР). Обнаружено влияние условий роста на проявление мультискейлингового поведения радиального профиля плотности в модели ДЛР. Предложен механизм формирования активной зоны в модели ДКА. Впервые

проведены исследования фрактальных свойств кластеров, формирующихся по механизму ДКА в замкнутой полости.

Ключевые слова: фрактал, координационное число, ДКА, агрегация, кластер, мультискейлинг

ABSTRACT

Vygornitskii N.V. **Peculiarities of the local structure of Laplace fractal aggregates.**

Thesis for scientific degree of candidate in physics and mathematics on speciality 01.04.24- physics of colloids, Institute Biocolloide Chemistry NAS Ukraine, Kyiv, 1996.

The applicant present 8 scientific papers, in which the investigation of the local structure of the DLA aggregates and deterministic growth model (DGM) are described. The Influence of growth conditions on the multiscaling behaviour of the radial density profile in DGM was found. The formation mechanism of the active zone for DLA model was proposed. For the first time the fractal properties of clusters forming through DLA mechanism in a closed cavity were analyzed.

Key words: fractal, coordination number, DLA, aggregation, cluster, multiscaling

Підп. до друку 25.12.96 Формат 60x84¹/16. Папір друк. № 8.
Обх.-вид.арк. 1,3 . Тираж 100 прим. Век. № 678.

Український державний університет херсонських технологій
252601 Київ-33, вул.Володимирська, 68

439238

AB 36.534