

УДК 004.94

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ СИСТЕМ НАНОКЛАСТЕРОВ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ ОСАЖДЕНИИ ИЗ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА

© 2023 г. Д. Н. Бухаров¹ *, А. В. Осипов¹, А. О. Кучерик¹, С. М. Аракелян¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Владимирский государственный университет имени Николая Григорьевича и Александра Григорьевича Столетовых”, Владимир, Россия

*E-mail: buharovdn@gmail.com

Поступила в редакцию 07.07.2023 г.

После доработки 17.07.2023 г.

Принята к публикации 28.07.2023 г.

Предложена модель конвективного течения жидкой фазы коллоидного раствора глицерина и наночастиц благородных металлов (Ag, Au, Ag/Au), около подложки. Для описания процесса формирования систем нанокластеров на подложке использовано диффузионное приближение. Модель диффузионно-ограниченной агрегации была реализована путем применения клеточного автомата в окрестности Неймана. Разнообразная структура модельных систем нанокластеров, достаточно адекватно описывающая структурные особенности экспериментальных образцов, была получена за счет варьирования параметра вероятности агрегации. Предложенные модели могут быть полезны для калибровки параметров экспериментального получения систем нанокластеров благородных металлов, а также описания в первом приближении процессов, оказывающих определяющие влияние на нанокластерные структуры.

DOI: 10.31857/S0367676523702800, EDN: FTAUZO

ВВЕДЕНИЕ

Сегодня новые уникальные материалы на основе систем нанокластеров благородных металлов используются в качестве новой элементной базы для устройств современной наноэлектроники и фотоники [1, 2]. Их применение обусловлено появлением новых уникальных свойств, по сравнению с массивными образцами, которые проявляются при переходе на наномасштабы. Их свойства могут быть заданы заранее, за счет возможности синтеза требуемого рельефа поверхности, получаемого при использовании управляемого лазерного воздействия на подложки, помещенные в коллоидные растворы [3]. Основными процессами, возникающими при лазерном осаждении наночастиц из коллоидного раствора на подложку, которые оказывают определяющее влияние на результирующую структуру, являются тепловая конвекция и тепловая диффузия. Линия тока конвективного течения жидкой фазы коллоидного раствора из области лазерного воздействия и диффузии частиц в области нагрева и на подложке обладают противоположными направлениями. Конкуренция этих двух процессов позволяет формировать кластерные покрытия на подложке. Предварительную оценку влияния

этих процессов на итоговые осажденные нанокластерные структуры удобно производить с использованием возможностей математического/компьютерного моделирования.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО СИНТЕЗУ СИСТЕМ НАНОКЛАСТЕРОВ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Исследуемые образцы нанокластерных структур благородных металлов были получены методом лазерного синтеза, реализованного через осаждение наночастиц благородных металлов (Ag, Au, смеси Ag/Au) из коллоидного раствора глицерина [4].

Осаждение наночастиц из предварительно подготовленного коллоидного раствора [5] происходило на стеклянную подложку после нескольких сканирований YAG:Nd³⁺-лазера с длиной волны $\lambda = 1.06$ мкм и диаметром пучка 50 мкм, а также мощностью излучения 2.5 Вт. Варьирование скоростей движения от 0.4 до 5 мм/с, а также количества сканирований от 5 до 20 позволило синтезировать образцы с различной структурой. На рис. 1 приведены изображения образцов после 15 (рис. 1а) и 20 (рис. 1б) проходов лазерного пучка.

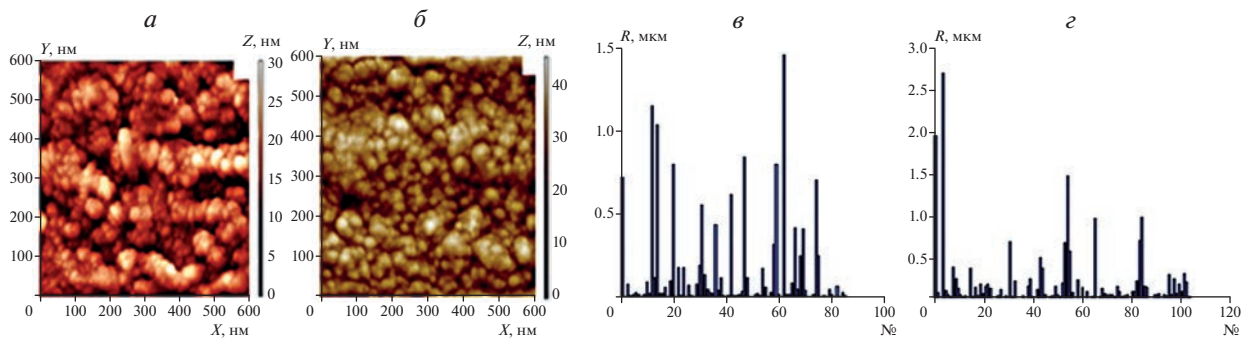


Рис. 1. АСМ-изображения биметаллических (Ag/Au) систем нанокластеров при скорости сканирования 1.2 мм/с после 15 (а) и 20 (б) проходов, распределение размеров объектов из образцов: для рис. 1а (в), для рис. 1б (з).

Таким образом, можно утверждать, что параметры лазерного излучения значительно влияют на результирующую структуру полученных образцов. Кроме этого, на наш взгляд, значительное влияние на структуру осажденных на подложку нанокластеров оказали тепловые и гидродинамические процессы в жидкой фазе коллоидного раствора, совместно с диффузионными процессами около и на подложке, протекавшими во время лазерного воздействия. Так, процессы, оказывающие влияние на итоговые структуры, можно описать как конкуренцию конвективного течения в нагретую область с меньшей вязкостью и диффузию частиц из области нагрева.

Исследование структурных особенностей АСМ-изображений полученных образцов производилось с использованием растрового электронного микроскопа Quanta 200 и 3D-зондовой нанолaborатории Интегра-Аура. Изучение рельефа образцов, проведенное с использованием возможностей MATLAB Image Processing Toolbox [6] позволило выявить кластерный характер структуры синтезированных образцов. Так, в системе нанокластеров были хорошо заметны агломераты с размерами от 1 до 3 мкм и средними высотами от 10 до 40 нм (рис. 1в и 1з). При осаждении из однокомпонентных коллоидных растворов (Ag или Au) структура итоговых образцов формировалась из изолированных друг от друга нанокластеров-дендритов. Таким образом, образцы обладали несвязной топологией поверхности. На их изображениях были хорошо заметны объекты величиной 10–300 нм. Величины этих объектов превосходили размеры наночастиц в исходной системе (5–20 нм). Этот факт свидетельствовал о термодиффузионном характере формирования систем нанокластеров, когда в коллоидном растворе еще до осаждения на подложку происходила агрегация нанообъектов.

При формировании систем нанокластеров из двухкомпонентного коллоидного раствора (Au/Ag в соотношении 50 : 50) образовывались образцы с более неоднородной, разреженной структурой. Их

структура носила кластерный характер, причем образующие кластеры были объединены в единую систему со связной топологией поверхности. Такая картина свидетельствовала о протекании процесса плавления нанообъектов во время их агрегации в единый кластер. Для определения типа образующих кластеров была произведена оценка фрактальных размерностей по методу boxcounting [7]. Полученные значения подтвердили предположения об их дендритном характере. Так, например, фрактальная размерность образца на рис. 1а составила величину $D = 1.898$, а образца на рис. 1б – величину $D = 1.922$. Таким образом, полученные величины размерностей достаточно адекватны оценкам фрактальных размерностей для дендритных структур [8].

ОПИСАНИЕ МОДЕЛЕЙ ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ ВО ВРЕМЯ ФОРМИРОВАНИЯ СИСТЕМ НАНОКЛАСТЕРОВ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Для описания конвективного течения в нагретой области использовалась стандартная модель Рейля–Бенара (в случае расположения точечного нагревателя снизу) для плоской геометрии в приближении Буссинеска [9] с учетом поворота расчетной области на угол π :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \nabla u = -\nabla p + \theta \hat{z} + \sqrt{\frac{\text{Pr}}{\text{Ra}}} \nabla^2 u, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \nabla \theta = u_z + \frac{1}{\sqrt{\text{PrRa}}} \nabla^2 \theta, \quad (2)$$

$$\nabla u = 0, \quad (3)$$

$$\theta = \frac{\theta(x, z, t)}{\Delta T} = \frac{T(x, z, t) - T_H - \frac{\Delta T}{H} z}{\Delta T}, \quad (4)$$

$$\Delta T = T_H - T_B,$$

где $\vec{u} = (u_x; u_z)$, p – относительные скорость и возмущение давления, \hat{z} – единичный вектор в на-

правлении оси z , Ra – число Рэлея, Pr – число Прандтля, θ – безразмерная температура, отклонение профиля температуры от среднего, T_n, T_b – температуры нижней и верхней границы соответственно, H – ширина расчетной области.

В рамках такого приближения на твердых границах для скоростей задавалось условие прилипания. Нижняя и боковые границы полагались изотермическими стоками тепла с температурой T_n . Верхняя граница рассматривалась теплоизолированной всюду, кроме точки в середине с температурой T_b .

Система (1)–(4) рассматривалась в переменных для функции тока и вихря [10]:

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} = \bar{v} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial \omega \partial \psi}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \omega \partial \psi}{\partial y \partial x} - G \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \bar{\chi} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial T \partial \psi}{\partial x \partial y} + \frac{\partial T \partial \psi}{\partial y \partial x}, \quad (6)$$

$$\omega = - \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right), \quad \omega(0) = 0, \quad (7)$$

$$\psi(0) = 0, \quad T(0) = T_0,$$

где T – температура, $\bar{v}, \bar{\chi}$ – относительные коэффициенты кинематической вязкости и температуропроводности, $G = g\beta$, где g – ускорение свободного падения, β – температурный коэффициент расширения, T_0 – начальная температура.

На границах для ω задавалось условие Тома [11]: $\omega_r = \frac{2\Psi_r}{h^2}$, где h шаг сетки по пространству. Также полагалось: $\psi_r = 0, T_r = T_0$,

Уравнения (5)–(7) дискретизировались на 5-точечном шаблоне на регулярной сетке [11]:

$$\begin{aligned} \Psi_{i,j} &= \frac{\Psi_{i-1,j} + \Psi_{i+1,j} + \Psi_{i,j-1} + \Psi_{i,j+1}}{4} - \omega_{ij} \frac{h^2}{4}, \\ \omega_{i,j} &= \omega_{i,j} - (\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1})(\omega_{i+1,j} - \omega_{i-1,j}) \times \\ &\times \frac{\tau}{4h} - (\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j})(\omega_{i,j+1} - \omega_{i,j-1}) \frac{\tau}{4h} + \\ &+ \bar{v} (\omega_{i-1,j} - 4\omega_{i,j} + \omega_{i+1,j} + \omega_{i,j-1}) \frac{\tau}{h^2} + \\ &+ G(T_{i+1,j} - T_{i-1,j}), \\ T_{i,j} &= T_{i,j} + \bar{\chi} (T_{i-1,j} - T_{i+1,j} + T_{i,j-1}) \frac{\tau}{h^2} - \\ &- (\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1})(T_{i+1,j} - T_{i-1,j}) \frac{\tau}{4h} + \\ &+ (\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j})(T_{i,j+1} - T_{i,j-1}) \frac{\tau}{4h}, \end{aligned} \quad (8)$$

где h и τ – шаги сетки по пространству и времени,

$$\bar{v} = \frac{\tau}{h^2} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}}, \quad \bar{\chi} = \frac{\tau}{h^2} \sqrt{\frac{1}{Pr \cdot Ra}}, \quad (9)$$

где

$$Pr = \frac{\nu}{\chi}, \quad Ra = \frac{gH^3\beta\Delta T}{\nu\chi}, \quad (10)$$

ν – абсолютный коэффициент кинематической вязкости, β – абсолютный температурный коэффициент объемного расширения теплоносителя, χ – абсолютный коэффициент температуропроводности, H – ширина расчетной области, g – ускорение свободного падения, $\Delta T = T_n - T_b$, T_n, T_b – температуры нижней и верхней границы соответственно

Для описания формирования агрегатов кластеров на подложке было выбрано диффузионное приближение, основанное на решении уравнения диффузии модельных частиц на двумерной расчетной области:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C + I, \quad C(0) = C_0, \quad (11)$$

где C – концентрация блуждающих частиц, D – нормированный коэффициент диффузии для блуждающей частицы, I – нормированный источник частиц, вводимых в расчетную область, C_0 – начальная концентрация частиц.

Для решения уравнения (11) в дискретном виде была выбран подход диффузионно-ограниченной агрегации (DLA) [12, 13], позволяющий построить решение в виде фрактальной фигуры.

Алгоритм построения модельной структуры в приближении DLA был реализован методом клеточного автомата и состоял из нескольких этапов (рис. 2):

- 1) в расчетной области с наложенной равномерной сеткой определялась стартовая структура, выполнявшая роль центров агрегации
- 2) в область R_p вносилась очередная частица, выполнявшая роль нанобъекта коллоидного раствора;
- 3) она выполняла единичные случайные блуждания по расчетной области с единичными относительными смещениями;
- 4) если частица попадала в окрестность фон Неймана [15] уже занятой клетки, то с заданной вероятностью могла прилипнуть, и клетка, в которой она находилась на текущем шаге блуждания, становилась занятой;
- 5) если частица уходила достаточно из области R_e , то она уничтожалась;
- 6) после прилипания или уничтожения в расчетную область производился ввод очередной частицы.

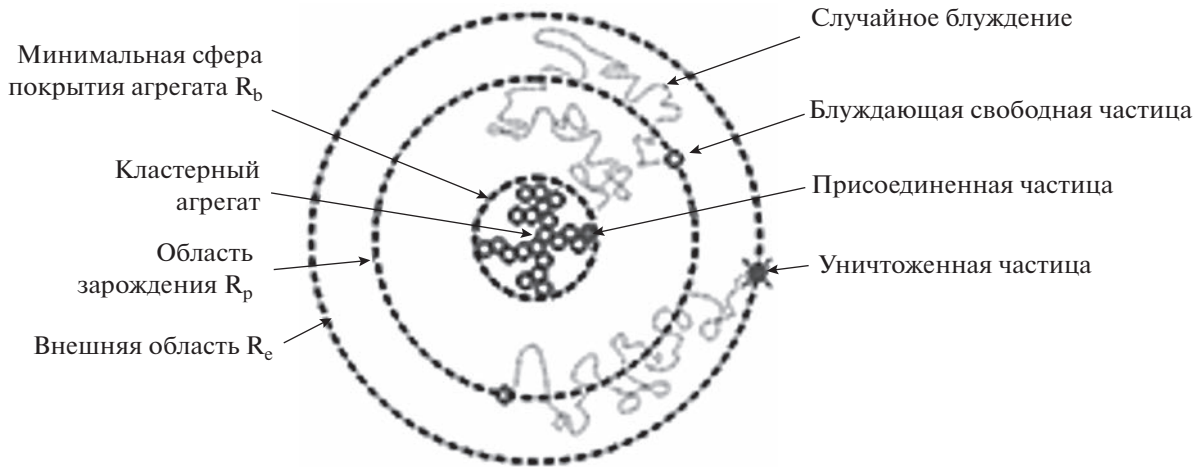


Рис. 2. Схема DLA для двумерного случая [14].

Влияние поверхностного натяжения жидкой фазы коллоида и температуры на поверхности подложки учитывалось в параметре вероятности прилипания (s). Он полагался пропорциональным относительному коэффициенту поверхностного натяжения (σ) [16]:

$$s = \sigma = \frac{Q_h}{\bar{k}} \left(1 - \frac{T}{T_k} \right), \quad \bar{k} = 1 / \left(\frac{N}{L^2} - \frac{L-1}{2L} \right), \quad (12)$$

где Q_h — относительная скрытая теплота, \bar{k} — кривизна фронта кристаллизации в дискретном виде, T — текущая температура, T_k — критическая температура, равная температуре кипения, N — количество занятых ячеек в окрестности клеточного автомата со стороной длины L . Так, в дискретном виде величина кривизны фронта кристаллизации для окрестности фон Неймана при $L = 3$ и $N = 4$ была равна $\bar{k} = 9$. Для моделирования систем нанокластеров, образованных из системы нанобъектов Ag/Au дополнительно учитывалась вероятность частицы быть Ag или Au, которая была пропорционально концентрации в исходном коллоидном растворе.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕН

Указанные выше модели были реализованы в среде MATLAB. Предложенная модель на основе уравнений Релея–Бенара использовалась для моделирования конвективного течения и поля температуры для жидкой фазы коллоидной системы. Так, для определения температуры нагревателя в первом приближении можно использовать тот факт, что во время лазерного воздействия в коллоидном растворе наблюдались вспышки без его кипения. Исходя из этого, температуру нагревателя в первом приближении можно положить равной 150°C , а температуру жидкой фазы — в 25°C . Для средних значений температуры, $H \sim 1$ см, $\beta \sim$

$\sim 53 \cdot 10^{-5} \text{C}^{-1}$ можно оценить $\text{Pr} = 267.526$ и $\text{Ra} = 2.427 \cdot 10^3$. На рис. 3 приведены результаты расчета поля температуры и функции тока при $\tau = 0.005$, $h = 1/2$, обеспечивающих устойчивость схемы ($\tau/h < 1$) и $\bar{v} = 0.06$, $\bar{\chi} = 2.482 \cdot 10^{-5}$ отн. ед.

В этом случае расчетной области формировался слабовытянутый вниз плюм округлой формы (рис. 3а), а поле скоростей показывало наличие двух разнонаправленных замедляющихся по направлению от своего центра вихрей (рис. 3б). Таким образом, в области между вихрями сталкиваются частицы с противоположным направлением движения, агрегируют, значительно замедляют свое движение и оседают на подложку. В связи с этим из этой области наиболее вероятно осаждение нанобъектов на подложку.

Несколько иные изображения формировались при моделировании в областях, близких к подложке, когда размеры источника составляли величины порядка десятков мкм). В таком случае при $H = 20$ мкм рассматривался не точечный, а протяженный источник (рис. 4). Так, для указанных выше параметров число Нуссельта оценивалось как 2.865, так что в пристеночной области реализовывалась картина достаточно слабой конвекции. В этом случае в расчетной области локализовалась система узких вытянутых вниз плюмов (рис. 4а). Поле скоростей в центре расчетной области представляло систему вытянутых вихрей с относительно высокими скоростями. Около горизонтальных границ располагалась совокупность меньших по величине и более медленных вихрей.

Полученные модельные картины не противоречат наблюдаемым результатам эксперимента. В эксперименте формирование нанокластерных покрытий реализуется за счет сравнительно не высоких характерных скоростей течения жидкой фазы коллоидного раствора. Моделирование

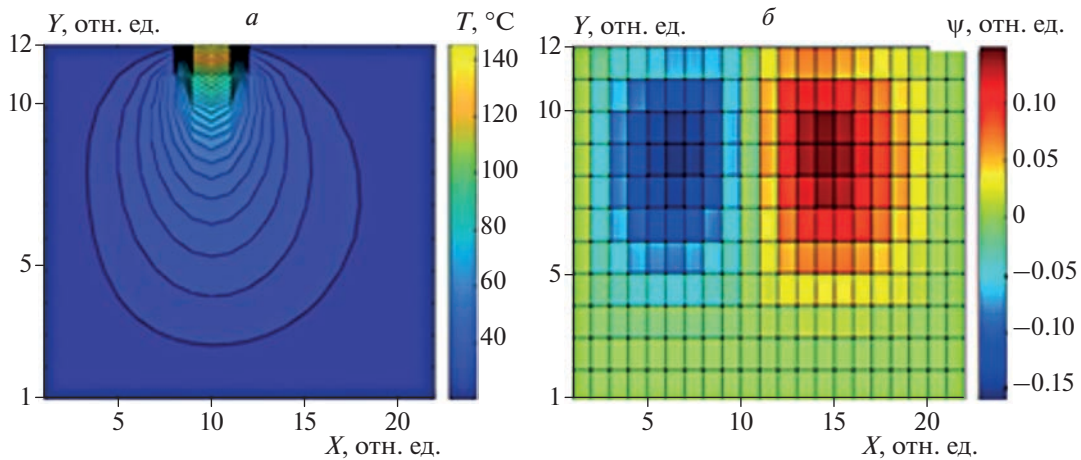


Рис. 3. Поле температур от точечного источника (а), линии тока от точечного источника (б).

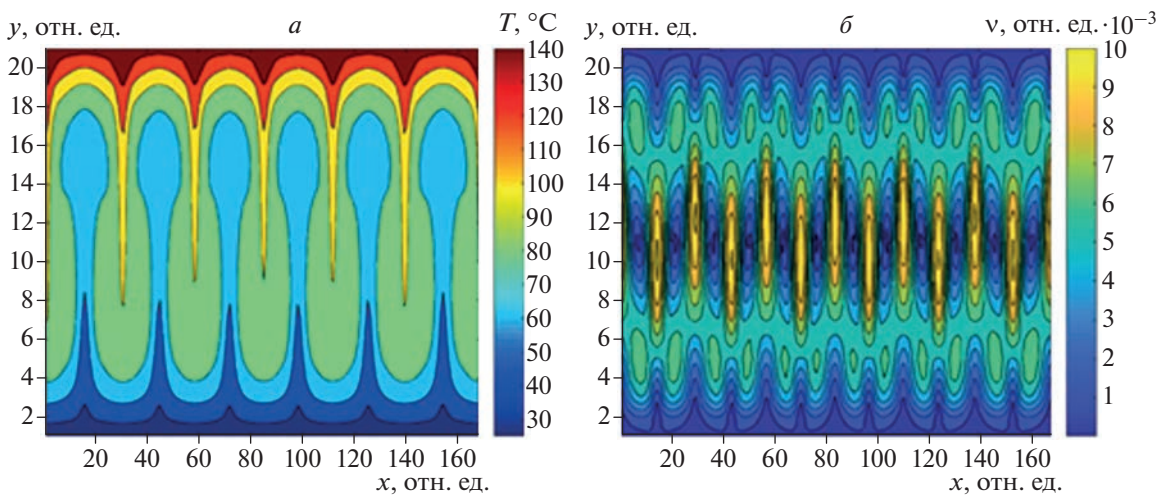


Рис. 4. Поле температур от протяженного источника (а), поле скоростей от протяженного источника (б).

структуры нанокластеров, сформированной на подложке за счет диффузии было проведено в рамках модели DLA. Так для оценки величины вероятности прилипания (s) в области фокусировки лазерного пучка по формуле (15) необходимо определить температуру. В этой области во время лазерного воздействия наблюдались вспышки глицерина, поэтому температуру можно определить как величину порядка 150°C , а температура кипения глицерина положить 290°C . Тогда по формуле (12) при $Q_h \sim 1$ вероятность прилипания можно оценить как $s = 0.054$. Для такой величины вероятности прилипания на рис. 5 приведена модель биметаллической структуры Ag/Au с с концентрацией 50 : 50. На рис. 5а показано начальное распределение модельных частиц-центров агрегации, на рис. 5б – итоговая смоделированная структура.

Полученная модель может быть соотнесена с образцом, изображенным на рис. 1а. Для оценки адекватности производилось сравнение фрактальных размерностей, причем их разница не

превосходила величину порядка 0.01. Также оценивалась погрешность модели на основе сравнения времени синтеза структуры (время 15 сканирований порядка) и абсолютного расчетного. Масштабный коэффициент по пространству выбирался 6 нм, по времени – $3.3 \cdot 10^{-9}$ с. Относительная величина погрешности составила значение 7.5%, что свидетельствует об адекватности подобранного приближения и его параметров. Варьирование величины вероятности прилипания позволили смоделировать дендритные структуры разнообразной формы (рис. 6), имеющие перспективу как модели различных образцов кластерных структур. Так, в случае малых значений вероятности прилипания моделировались хорошо заполненные достаточно однородные кластеры со сглаженной границей, обладавшие фрактальной размерностью (D) порядка 1.85–2.02 (рис. 6а). В случае больших значений вероятности прилипания формировались неоднородные кластеры с сильно изрезанной границей, обладавшие меньшей фрактальной размерностью (D)

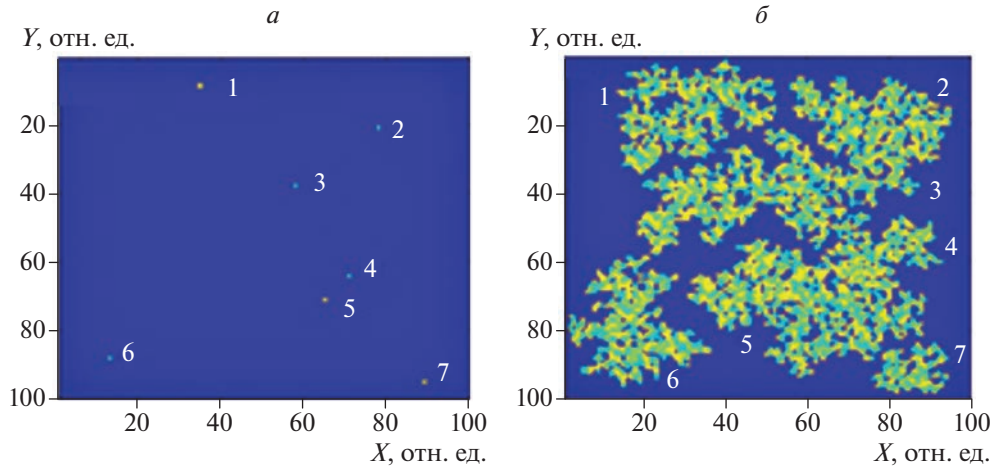


Рис. 5. Модель системы Ag/Au нанокластеров (синие частицы – Ag, желтые – Au): начальное распределение центров агрегации (а), итоговая структура (б).

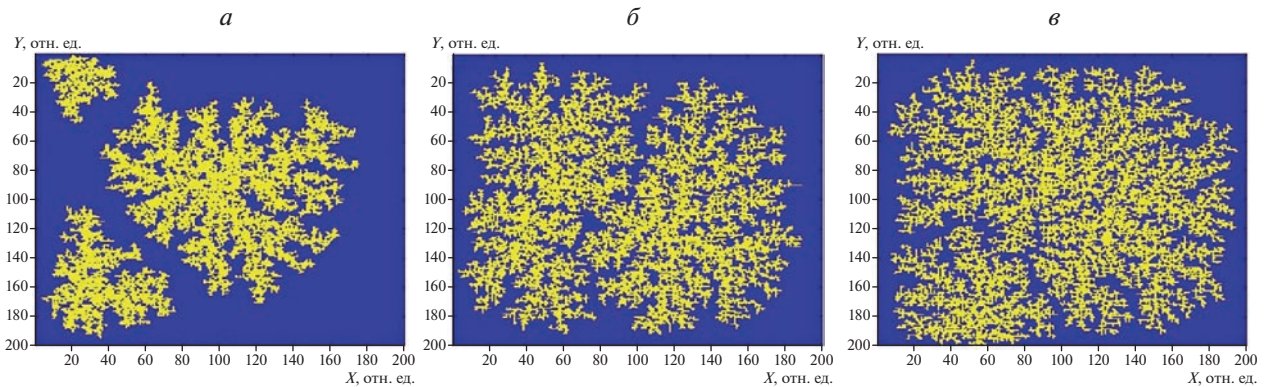


Рис. 6. Многообразие фрактальных структур, генерируемые за счет варьирования вероятности прилипания (s), в случае 3 центров начальной агрегации: при $s = 0.1$ и $D = 1.85$ (а), $s = 0.5$ и $D = 1.8$ (б), $s = 1$ и $D = 1.1779$.

порядка 1.7–1.85 (рис. 6б и 6в). Так, например, модель из рис. 10а может быть соотнесена с некоторыми элементами системы золотых нанокластеров. В этом случае в качестве критерия сравнения образца и модели можно рассматривать сходство топологий на качественном уровне.

Проведенное моделирование может быть использовано для уточнения некоторых управляющих параметров и условий экспериментального синтеза. Так, например, скорость течения жидкой фазы коллоида (u), полученная из расчетов конвективного течения, может быть соотнесена с мощностью излучения P и радиусом лазерного пучка r_0 , например, как [17]:

$$u = \frac{\sqrt{P}}{\sqrt{2\pi r_0}} \left(\frac{\sigma}{\rho C v} \right)^{1/3} A P^{1/2}, \quad (13)$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения, ρ – плотность, C – теплоемкость, A – коэффициент пропорциональности.

Также может быть определена зависимость толщины области около подложки (δ), использу-

емая в модели конвекции около подложки в случае протяженного источника тепла, от мощности лазерного излучения P [18]:

$$\delta = r_0 \left(\frac{2\pi\rho C v^3}{\sigma P} \right)^{1/4}. \quad (14)$$

Тогда в нашем случае для глицерина (при $P = 2.5$ Вт, $r_0 = 25$ мкм) получаем $\delta \sim 10$ мкм. Эта величина достаточно адекватно соответствует высоте области около подложке, оцениваемой в эксперименте.

Таким образом, варьируя параметры, используемые в схеме лазерного синтеза (мощность, радиус пучка, скорость его движения) можно получить сравнительно небольшие величины скоростей течения жидкой фазы коллоидного раствора (порядка 10^{-2} – 10^{-3} м/с). Таким же образом достигаются небольшие величины скоростей диффузии (порядка 10^{-6} м/с). Такие величины скоростей позволяют формировать упорядоченные по направлению движения лазерного луча нанокластерные агломераты различной структуры и топологии, зависящей от температуры системы.

Оценка температуры для модели конвекции может быть задана как [18]:

$$T = \frac{P^{3/4}}{(2\pi)^{3/4}} \left(\frac{\sigma}{\gamma C^3 \nu} \right)^{1/4} \sim BP^{3/4}, \quad (15)$$

где $\gamma = \frac{\delta\sigma}{\delta T}$, B – коэффициент пропорциональности.

Значение, полученное на основе такого соотношения, может быть использовано при оценке коэффициента поверхностного натяжения как параметра модели DLA, определяющего структуру смоделированного кластера.

Подставляя соотношение (15) в формулу (12) при $B = 75.4$ получаем $s = 0.054$, соответствующее соотношению (12) при $T = 150^\circ\text{C}$. Таким образом, предложенные соотношения не противоречат экспериментальным оценкам и могут быть применимы в первом приближении для связи параметров экспериментальной схемы синтеза и модели.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, предложенные модели позволяют в первом приближении описать характер конвективных течений и тепловых факторов, влияющих на структуру системы нанокластеров, осажденных из коллоидной системы. Полученные картины не противоречат теоретическим положениям. Предложенные фрактальные модели достаточно адекватно описывают образцы, полученные в ходе экспериментов. Предлагаемые модели конвекции и DLA дополняют друг друга и позволяют в первом приближении проводить численные эксперименты по моделированию структуры систем нанокластеров с учетом требуемой структуры (на основе соотношения фрактальных размерностей) с параметрами, аналогичными величинам из натуральных экспериментов.

Работа выполнена в рамках государственного задания в сфере научной деятельности Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема FZUN-2020-0013, государственное задание ВлГУ) с использованием оборудования межрегионального многопрофильного и междисциплинарного центра коллективного пользо-

вания перспективных и конкурентоспособных технологий по направлениям развития и применения в промышленности/машиностроении отечественных достижений в области нанотехнологий (соглашение № 075-15-2021-692 от 5 августа 2021 года).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аракелян С.М., Бухаров Д.Н., Кучерик А.О., Худайбергенов Т.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2022. Т. 86. № 6. С. 834; Arakelian S.M., Bukharov D.N., Kucherik A.O., Khudaiberganov T.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2022. V. 86. No. 6. P. 701.
2. Гулякович Г.Н., Северцев В.Н., Шурчков И.О. // Инж. вестн. Дона. 2012. Т. 2. № 20. С. 315.
3. Антипов А.А., Аракелян С.М., Кутровская С.В. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2012. Т. 76. № 6. С. 690; Antipov A.A., Arakelyan S.M., Kutrovskaya S.V. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2012. V. 76. No. 6. P. 611.
4. Антипов А.А., Аракелян С.М., Бухаров Д.Н. и др. // Хим. физ. и мезоскоп. 2012. Т. 14. № 3. С. 401.
5. Kucherik A.O., Arakelyan S.M., Kutrovskaya S.V. et al. // J. Nanomaterials. 2017. V. 2017. Art. No. 8068560.
6. Гонсалес Р., Вудс Р., Эддингс С. Цифровая обработка изображений в среде MATLAB. М.: Техносфера, 2006. 616 с.
7. Gonzato G.A. // Comput. Geosci. 1998. V. 24. P. 95.
8. Рыжикова Ю.В., Рыжиков С.Б. // Учен. зап. физ. фак-та Моск. ун-та. 2018. № 5. С. 1850401.
9. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. М.: URSS, 2020. 784 с.
10. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980. 618 с.
11. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
12. Kucherik, A., Samyshkin V., Prusov E. et al. // Nanomaterials. 2021. V. 11. No. 4. P. 1043.
13. Bukharov D.N., Arakelyan S.M., Kucherik A.O. et al. // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1439. Art. No. 012050.
14. Mroczka J., Woźniak M., Onofri F.R.A. // Metrol. Meas. Syst. 2012. V. 19. No. 3. P. 459.
15. Zaitsev D.A. // Theor. Comp. Sci. 2017. V. 666. P. 21.
16. Vakili S., Steinbach I., Varnik F. // Proc. Comput. Sci. 2017. V. 108. P. 1852.
17. Гурин А.М., Ковалев О.Б. // Теплофиз. и аэромех. 2013. Т. 20. № 2. С. 229.16
18. Гладуш Г.Г., Дробязко С.В., Лиханский В.В. и др. // Квант. электрон. 1998. Т. 25. № 5. С. 439.

Simulation of noble metal nanocluster systems formation during deposition from a colloid solution

D. N. Bukharov^{a, *}, A. V. Osipov^a, A. O. Kucherik^a, S. M. Arakelian^a

^aVladimir State University, Vladimir, 600000 Russia

*e-mail: buharovdn@gmail.com

A model was proposed for the convective flow of the liquid phase of a colloidal solution of glycerol and noble metal nanoparticles (Ag, Au, Ag/Au) near the substrate. The diffusion approximation is used to describe the formation of nanocluster systems on a substrate. The diffusion-limited aggregation model was implemented by applying a cellular automaton in the Neumann neighborhood. A diverse structure of model systems of nanoclusters, which adequately describes the structural features of the experimental samples, was obtained by varying the aggregation probability parameter. The proposed models can be useful for calibrating the parameters of the experimental production of systems of noble metal nanoclusters, as well as describing in the first approximation the processes that have a decisive effect on nanocluster structures.