

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ САМООРГАНИЗАЦИИ АНСАМБЛЕЙ НАНОЧАСТИЦ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВАНДЕРВААЛЬСОВЫХ СИЛ

К.А. Емельяненко

*ИФХЭ РАН, Москва 119991 Москва, Ленинский проспект, д.31, корп.4
e-mail: ame@phycs.ac.ru*

В последние годы основной интерес исследователей, работающих в области нанотехнологий и науки о наносостоянии вещества, постепенно сдвигается с проблемы синтеза индивидуальных частиц к задаче упорядоченной организации частиц в ансамбли с образованием макроскопических систем. Это во многом связано с тем обстоятельством, что сегодня в основных направлениях использования наноматериалов, таких как медицинская диагностика, доставка лекарств, создание сенсоров и электронных устройств и т.п., востребованы ансамбли нанообъектов, в которых организация индивидуальных наносоставляющих определяется назначением материала. Одним из самых многообещающих методов организации частиц в ансамбли является самоорганизация индивидуальных частиц в высокоупорядоченные структуры. Возможность использовать самоорганизацию в первую очередь опирается на фундаментальное понимание и инженерное использование взаимодействий между наночастицами. Среди механизмов, определяющих такие взаимодействия, наиболее важным является механизм вандерваальсовых сил.

Ранее нами были разработаны численные методы расчета вандерваальсовых взаимодействий с использованием подхода Аксильрода–Теллера–Муто. Были получены зависимости энергии взаимодействия от расстояния между центрами частиц в симметричных системах, включающих одинаковые кубы, шары, параллельные и скрещенные стержни.

Основной задачей данной работы был анализ процессов самоорганизации ансамблей нанопроволок, наночастиц на поверхности нанофольги, расчет вандерваальсовых сил взаимодействия между однородными и композитными наночастицами различной формы.

Анализ величины и характера взаимодействий различных наноразмерных объектов показал, что для образования высокоупорядоченных ансамблей на основе нанонитей или ансамблей частиц на подложках необходимо снижать величину контактной энергии вандерваальсовых взаимодействий. Для решения этой задачи предлагается использовать процессы самоорганизации не в вакууме, а в конденсированной среде, с поляризуемостью, близкой к поляризуемости самоорганизующихся частиц. Анализ влияния композитного состава частиц типа ядро/оболочка указал на то, что в исследованных системах применение оболочки лишь увеличивает величину энергии и не может способствовать получению более упорядоченных ансамблей на подложках в воздушной среде.