

PYTHON-ПРОГРАМА МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІЧНОГО РОЗСІЮВАННЯ СВІТЛА У ГЕТЕРОГЕННІЙ СИСТЕМІ РІДИНА-НАНОЧАСТКИ

У наш час інтенсивно досліджуються об'єкти нанофізики. З цією метою, зокрема, використовують динамічне розсіювання світла (ДРС), яке дозволяє визначати розмір нанооб'єктів.

Розробка програм для обробки даних ДРС та його моделювання є актуальною задачею. У роботі [1] було виконано моделювання ДРС на наночастках за допомогою комерційної платформи програмування та розрахунків MatLAB. У той час, мова програмування Python, яка вільно розповсюджується, має API, що дозволяє також вирішити цю задачу.

У даній роботі було поставлене завдання розробити Python-програму моделювання динамічного розсіювання світла у гетерогенній системі рідина-наночастки.

При спостереженні ДРС на наночастках в рідині флуктуації інтенсивності розсіяного світла формують на фотодетекторі сигнал, тимчасові зміни якого обумовлені броунівським рухом часток.

Рух частки у одному вимірі може бути визначений виразом [1]:

$$x_i = x_{i-1} + w_i \sqrt{2D\Delta t}, \quad (1)$$

де x_i - нова позиція, відносно попередньої x_{i-1} , D - коефіцієнт дифузії, w_i - випадкове число з нормального розподілу із нульовим середнім та одиничною дисперсією, Δt - проміжок часу між зайняттям позицій x_i і x_{i-1} . Значення D визначається на основі рівняння Ейнштейна-Стокса:

$$D = k_B T / (6\pi\eta R), \quad (2)$$

де k_B - постійна Больцмана, T - температура, η - динамічна в'язкість рідини, R - гідродинамічний радіус.

У декартовій системі координат, електричне поле E при розсіюванні світла N частками, відповідно до [1], має вигляд:

$$E = E_0 \sum_{i=1}^N \exp(2j\pi n(x_i + z_i)/\lambda), \quad (3)$$

де E_0 - амплітуда, j - мнима одиниця, n - показник заломлення рідини, x, z - позиції окремої частки в об'ємі, що розсіює світло, λ - довжина хвилі випромінювання. ДРС спостерігається уздовж осі y .

При цьому інтенсивність світла I , що реєструється фотодетектором, визначається виразом:

$$I = E \cdot E^*, \quad (4)$$

де E^* - комплексно сполучена величина E .

На рис. 1, як приклад, зображено вікно розробленої Python-програми з результатом моделюванні ДРС у системі вода-наночастки. При роботі додатка величини N , Δt , T , η , R , E_0 , n і λ приймали значення, 100, 10^{-5} с, 293 K, $0.001002 \text{ Н} \cdot \text{с} / \text{м}^2$, $2 \cdot 10^{-7} \text{ м}$, 1 В/м, 1.33, $633 \cdot 10^{-9} \text{ м}$, відповідно.

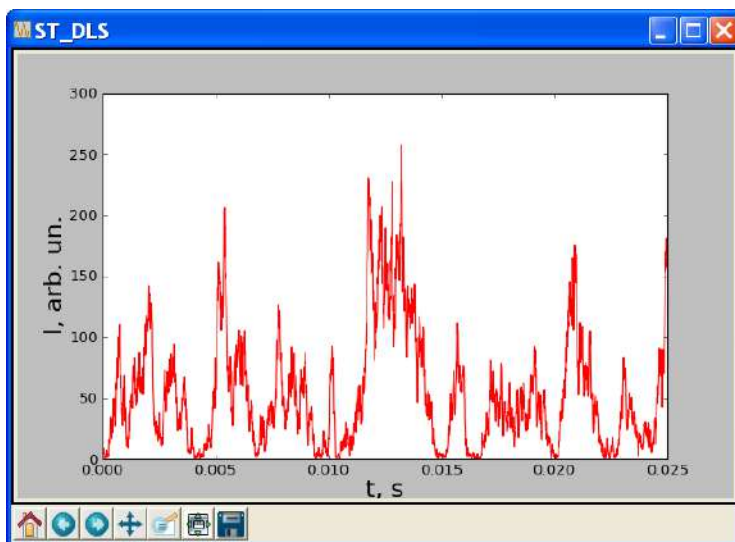


Рисунок 1 – Вікно Python-програми з результатом моделювання динамічного розсіювання світла у системі вода-наночастки за проміжків часу $t = 2,5 \cdot 10^{-2}$ с.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Mullen R. Simulation of light scattering from Brownian particles [Електронний ресурс] / R. Mullen. – Режим доступу: <https://digitalcommons.calpoly.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=1121&context=phypssp>.