

Термическая аккомодация при соударениях холодных атомов аргона с малыми железными кластерами

Д.Ю. Ленёв^{1,2}, Г.Э. Норман²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Железные наночастицы представляют значительный интерес для исследователей из-за их широкого спектра применений. Они используются, к примеру, в качестве катализаторов [1]. Также следует заметить их способность улучшать производительность фотогальванических элементов и перспективы применения в медицине.

Тема освещалась в ряде работ, как теоретических [1], так и экспериментальных [2]. В первой вычисляется коэффициент термической аккомодации при помощи метода молекулярной динамики для плоской поверхности и при одной температуре кластера. Во второй исследуется рост наночастиц железа с подробным описанием стадий процесса.

Исследуются усредненные результаты молекулярно-динамических траекторий налетающего на железный кластер атома аргона. Кластер создается путем помещения атомов железа в узлы объемноцентрированной кристаллической решетки. Исследуется 3 размера кластеров: из 9, 27 и 113 атомов. Их скорости соответствуют распределению Максвелла при 300 К. Далее происходит нагрев до требуемой температуры термостатом Ланжевена. Для описания взаимодействия атомов кластера между собой используется потенциал Финниса-Синклера.

Налетающий атом аргона взаимодействует с кластером через потенциал Букингема. Атом имеет случайную скорость, также подчиняющуюся распределению Максвелла при комнатной температуре. Его положение относительно кластера определяет прицельный параметр. Он варьируется от 0 до суммы радиуса кластера и радиуса обрезания.

Целью работы является вычисление коэффициента термической аккомодации для 3 размеров кластеров и диапазона температур 200 — 2500 К. Коэффициент термической аккомодации нужен для определения распределения наночастиц при обработке результатов эксперимента.

Коэффициент термической аккомодации характеризует эффективность энергообмена между атомом и кластером. Его можно вычислить по следующей формуле [1]:

$$\beta = \frac{m(v_o * v_o - v_i * v_i)}{4 * k_B * (T_p - T_c)}$$

Где m – масса налетающего атома, v_o и v_i – скорости атома после и до соударения, T_p и T_c – температуры частицы и кластера, k_B – константа Больцмана.

Также его следует отличать от ещё одной вычисляемой величины — теплообмена. Он представляет собой числитель этой формулы и показывает количество энергии, полученной атомом от кластера. Величины рассчитываются для каждой траектории и затем усредняются по ансамблю траекторий. Для кластера из 9 атомов рассматривалось 300000 траекторий, для 27 — 100000, для 113 — 10000.

Усреднение проходит по плато в зависимости коэффициента термической аккомодации от прицельного параметра.

Были получены зависимости энергообмена (рис. 1) и коэффициента аккомодации от температуры. Теплообмен ожидаемо растет с увеличением температуры кластера, проходит через 0 в 300 К и оказывается отрицательным для 200 К. Коэффициент термической аккомодации тем временем падает с ростом температуры. Уменьшение эффективности энергообмена объясняется сокращением времени, которое атом аргона проводит в зоне действия потенциала кластера. Причиной этого является уменьшение числа соударений, необходимых атому для набора энергии, достаточной, чтобы покинуть кластер.

T -зависимость коэффициента термической аккомодации линейна от $N^{-1/3}$. Это отношение поверхностной энергии кластера к объёмной. Ожидается, что оно будет хорошо выполняться для больших кластеров. Коэффициент термической аккомодации также коррелирует со временем взаимодействия и для N -зависимости. Наблюдается рост обеих величин при увеличении размера кластера.

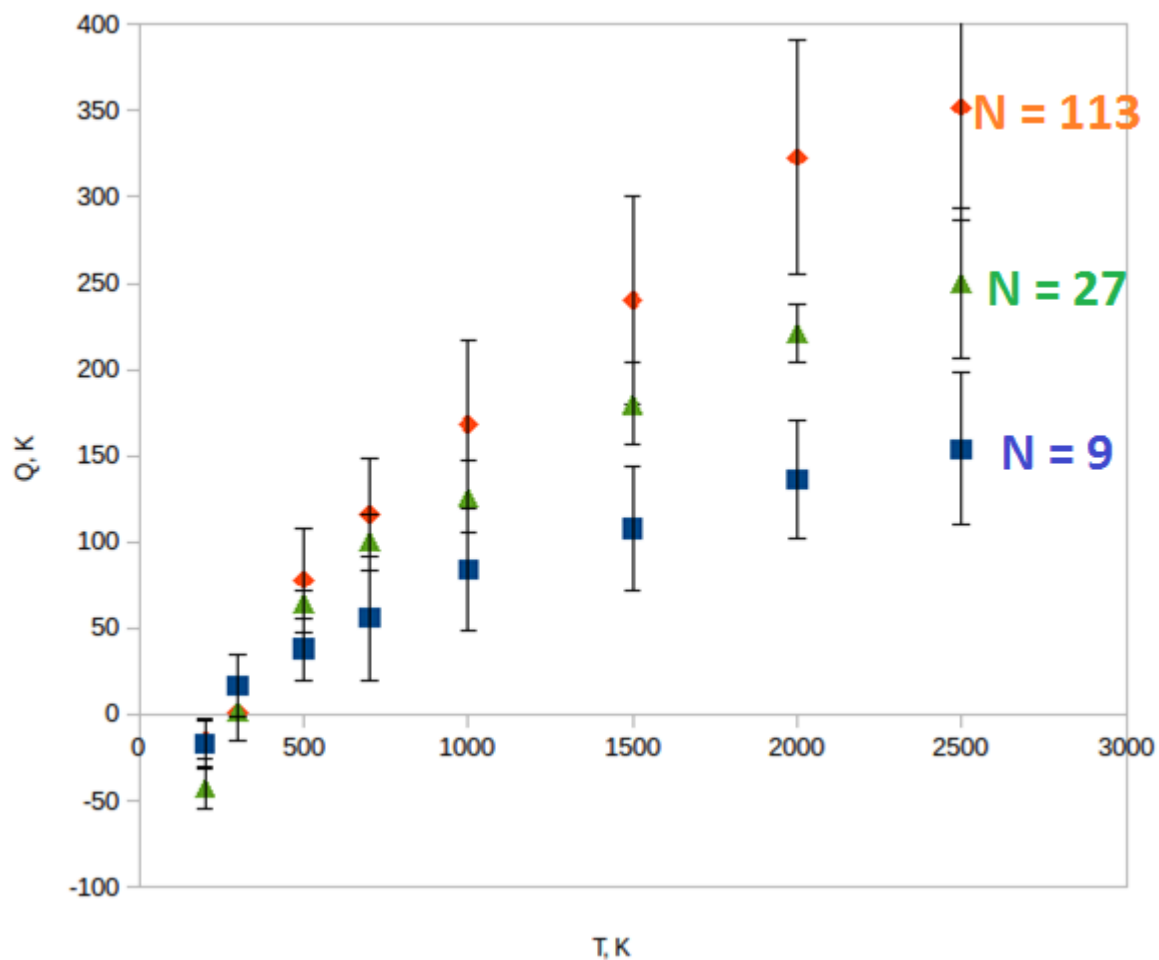


Рис 1. Зависимость энергообмена от температуры для кластеров из 9, 27 и 113 атомов.

Литература

- 1 Daun K., Sipkens T.A., Titantah J.T. and Karttunen M. Thermal Accommodation Coefficients for Laser-Induced Incandescence Sizing of Metal Nanoparticles in Monatomic Gases, - J. Appl. Phys. – 2013 - В. 8. – P. 409-420.
- 2 Eremin A.V., Gurentsov E.V., Priemchenko K.Y. Iron particle growth induced by Kr-F excimer laser photolysis of Fe(CO)₅ // J. of Nanoparticle Research. - 2013. - V.15. № 6. 1537.