МногомасштАбное моделирование процесса образования наночастиц меди в микроразряде постоянного тока

1,2Файрушин И.И., 2,3Сайфутдинов А.И.

1Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия,
 fairushin\_ilnaz@mail.ru
2Казанский национальный исследовательский технический университет
 им. А.Н. Туполева-КАИ, г. Казань, Россия
3Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия,
 as.uav@bk.ru

Поиск новых способов синтеза наночастиц металлов является актуальной задачей для современной науки. Прежде всего это вызвано широким распространением их использования в различных сферах деятельности человека. Особое место занимают биомедицинские применения наночастиц меди [1].

Данная работа посвящена моделированию процессов, приводящих к образованию наночастиц меди в электрическом микроразряде постоянного тока. Возможность возникновения условий образования нанокластеров металлов в газовом разряде обусловлено бомбардировкой высокоэнергетическими частицами поверхности электрода и выбивания отдельных атомов в межэлектродное пространство. Реализовано два основных этапа симуляции отличающихся пространственно-временными масштабами. В основе первого этапа лежит расширенная гидродинамическая модель [2], описывающая дуговой разряд постоянного тока в широком диапазоне токов. Она включает уравнения непрерывности для концентраций заряженных (электронов, ионов) и возбужденных частиц, уравнении непрерывности для плотности энергии электронов, уравнении теплопроводности для определения температуры тяжелых частиц плазмы (ионов и нейтралов). Самосогласованное электрическое поле определяется из уравнения Пуассона для потенциала. На катоде учитывалась как вторичная электронная эмиссия электронов, так и термоэлектронная эмиссии с его поверхности согласно формуле Ричардсона-Дэшмана [3, 4]. В результате моделирования были получены пространственные распределения параметров плазмы в широком диапазоне разрядных токов: от 1А до 15 А.

Далее, на втором этапе, было проведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование процесса нуклеации паров меди в аргоне в широком диапазоне параметров (температура, давление, концентрации частиц), которые были взяты из данных, полученных на первом «гидродинамическом» этапе. МД расчет проведен с использованием свободно распространяемого программного пакета LAMMPS [5]. Симуляция проводилась с 10 000 частиц (атомов) аргона и меди в разных соотношениях. Межчастичное взаимодействие аргон-аргон и аргон-медь задавалось потенциалом Леннард-Джонса с параметрами для аргона [6], взаимодействие медь-медь задавалось потенциалом погруженного атома (EAM-potential) [7]. Получена информация об условиях образования нанокластеров меди, времени их жизни, скорости роста, температуре, фазовых состояниях и структурных особенностях.

Литература

1. Imran M., Rehan R., Analytical Letters, 2017, 50, p. 50-62.
2. Saifutdinov A. I., Fairushin I. I., Kashapov N. F., JETP Letters, 2016, 104, p. 180–185.
3. Raizer Yu. P., Gas Discharge Physics, 1991, Springer, Berlin.
4. Benilov M. S., J. Phys. D: Appl. Phys. 2008, 41, p. 144001.
5. Plimpton S., J. Comput. Phys., 1995, 117, p. 1-19.
6. Rahman A., Phys. Rev., 1964, 136, p. 405-411.
7. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S., Phys. Rev. B, 1986, 33,p. 7983-7991.