

**Молекулярное моделирование процесса конденсации***Д.Ю. Ленёв, Г.Э. Норман*Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединённый институт высоких температур РАН

Моделируется процесс конденсации пересыщенного пара железа. При помощи метода молекулярной динамики (ММД) вычисляются вероятность прилипания атома к кластеру и коэффициент термической аккомодации. Исследуемые наночастицы металлов имеют широкое применение, например, в качестве катализаторов. Отметим экспериментальное изучение процессы роста кластеров и их испарение [1, 2]. Метод Time-Resolved Laser-Induced Incandescence использован для измерения размеров образующихся кластеров [3]. Для этого потребовался коэффициент термической аккомодации, который был вычислен при помощи ММД. В [4] ММД использовался для моделирования конденсации железа за ударной волной и подтверждения участия  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  в процессе.

В данной работе, в отличие от [3], рассматривается сферический кластер, а не поверхность. Были проведены расчёты для набора чисел частиц  $n$  и температур  $T$ . Использован потенциал Финниса-Синклера [3] для атомов кластера. Налетающий атом взаимодействует с ними через потенциал Леннард-Джонса.

Начальный кластер с объемно-центрированной кристаллической решёткой нагревается до требуемой температуры за 20 пс термостатом Ланжевена. Чтобы изучить рост кластера, требуется определить коэффициент прилипания единичного атома к нему. Для этого рассматривается атом, налетающий на кластер. Скорость атома выбирается методом Монте-Карло, из распределения Максвелла для комнатной температуры, подобно работам [1, 3]. Значения прицельного параметра лежат на отрезке от 0 до радиуса кластера.

Для системы из  $(n + 1)$  частицы решаются уравнения движения в течение 6 пс. Рассчитывается 500 траекторий налетающего атома с разными начальными условиями. Результаты усредняются. Коэффициент прилипания  $\alpha$  равен доле траекторий, которые не покидали зону действия потенциала кластера после попадания туда за время моделирования. На рис.1. представлены температурные зависимости коэффициента прилипания для 3 размеров кластера. С увеличением размера кластер становится стабильнее, и значения  $\alpha$  увеличиваются.

Коэффициент термической аккомодации  $\beta$  равен отношению разности конечной и начальной кинетической энергии налетающей частицы к разности температур кластера и частицы. Результаты расчётов коэффициента термической аккомодации представлены на рис.2. Он оказался слабо зависящим от количества частиц в кластере и составил величину около 0.1. Близкое значение коэффициента  $\beta$  было измерено в работах [1, 3] для

взаимодействия атомов Ag с кластерами Fe. Учитывая небольшое различие в массах атомов Ag и Fe и слабую зависимость наших результатов от  $n$ , можно говорить об удовлетворительном согласии полученных значений  $\beta$  с результатами измерений.

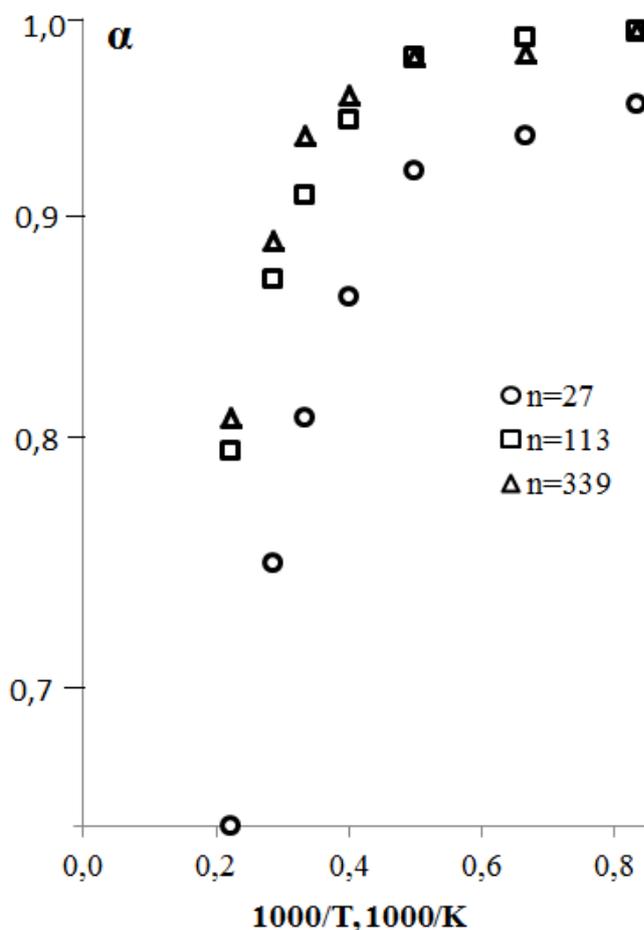


Рис.1. Зависимость коэффициента прилипания от температуры для 3 размеров кластера

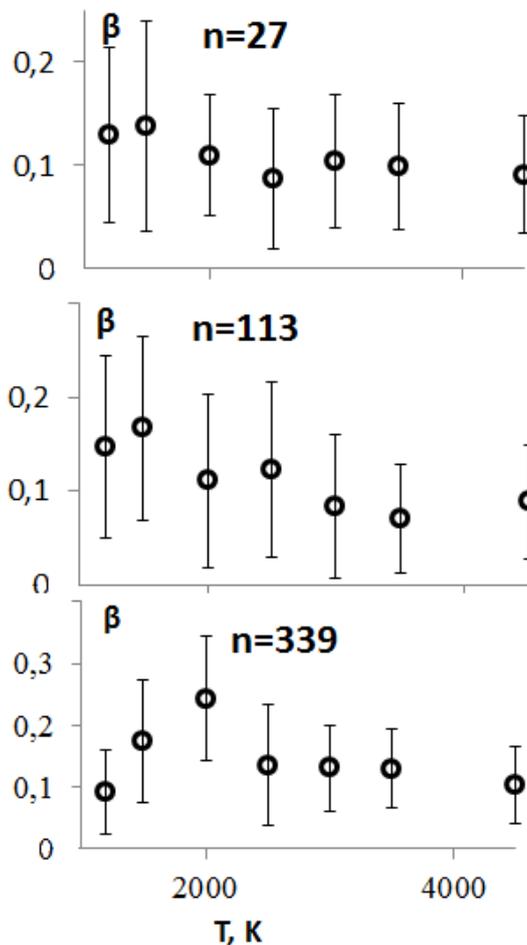


Рис.2. Зависимость коэффициента термической аккомодации от температуры

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта 14-50-00124. Расчёты были проведены на кластере ОИВТ РАН.

#### Литература

1. Eremin A.V., Gurentsov E.V., Priemchenko K.Y. Iron particle growth induced by Kr-F excimer laser photolysis of  $\text{Fe}(\text{CO})_5$  // J. Nanoparticle Research. - 2013. - V.15. # 6. 1537.
2. Eremin A., Gurentsov E., Mikheyeva E., Priemchenko K. Experimental study of carbon and iron nanoparticle vaporisation under pulse laser heating // Applied Physics B Laser and Optics. – 2013. – Vol. 112. – I. 3. – P. 421-432.
3. Daun K., Siphens 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 - B. 8. – P. 409-420.
4. Insepov Z.A., Karataev E.M., Norman G.E. The kinetics of condensation behind the shock front. Z.Phys. D – Atoms, Molecules and Clusters. - 1991. - V.20. - P.449-451