

ЗАРЯДОВЫЙ СОСТАВ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ С МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

© 2022 г. И. И. Файрушин^{a, b, *}

^a Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

^b Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*e-mail: fairushin_ilnaz@mail.ru

Поступила в редакцию 27.06.2022 г.

После доработки 10.07.2022 г.

Принята к публикации 15.07.2022 г.

На основе простой аналитической модели рассчитан зарядовый состав термической плазмы с наночастицами металла. Установлены пространственные распределения свободных электронов и ионов при различных значениях радиуса частиц, температуры системы и потенциала ионизации атомов буферного газа. Определен характер влияния размерной зависимости работы выхода электронов из наночастиц на концентрацию электронов в плазме.

Ключевые слова: термическая пылевая плазма, наночастицы металла, размерный эффект, зарядовый состав

DOI: 10.31857/S0367292122600753

1. ВВЕДЕНИЕ

Термическая плазма с содержащимися в ней наночастицами – широко распространенная система [1–6]. Помимо реакторов по газотермическому и плазменному синтезу наноструктур [2–4], такая пылевая плазма обнаруживается в установках по управляемому термоядерному синтезу [5] и в газопылевых облаках рядом со звездами гигантами [6]. Электрофизические свойства могут играть ключевую роль в протекании физических процессов в данной системе [7]. В частности заряд, который приобретают наночастицы в термической плазме, сильно влияет на их агломерацию и рост [2, 8]. Приобретение наночастицами электрического заряда в условиях термической плазмы обусловлен в основном термоэлектронной эмиссией с поверхности частиц [1, 7–14]. Можно выделить два метода расчета значений заряда конденсированных частиц в термической плазме. Первый метод основан на соотношении Ричардсона для концентрации термоэлектронов у поверхности проводящего тела [10–12]. Второй метод рассматривает подсистему частиц как плазму твердого тела и самосогласованным образом описывает распределение концентрации электронов внутри и за пределами конденсированных частиц [9, 13]. В случае рассмотрения наночастиц металла, которые характеризуются большой собственной концентрацией свободных электронов, возникает неоправданное усложнение модели из-за необходимости использования нелинейного

уравнения Пуассона–Больцмана для потенциала электрического поля. Вследствие чего, в данной работе для расчета зарядового состава термической пылевой плазмы с наночастицами металла использован первый метод.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Основной модели является уравнение Пуассона–Больцмана для потенциала электрического поля φ в сферически-симметричной постановке с началом отчета координаты r в центре частицы

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr} = \frac{q}{\epsilon\epsilon_0} \left(n_{es} \exp\left(\frac{q\varphi}{k_B T}\right) - n_{is} \exp\left(-\frac{q\varphi}{k_B T}\right) \right). \quad (1)$$

Здесь q – элементарный заряд, ϵ – диэлектрическая проницаемость среды, которая в рассматриваемом случае равна единице, ϵ_0 – электрическая постоянная, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура системы, n_{es} и n_{is} – соответственно концентрации электронов и ионов плазмы при $r = R$, где R – радиус пылевой частицы, за начало отчета потенциала принят потенциал у поверхности частицы: $\varphi(R) = 0$. Кроме того, условие нейтральности объема, приходящегося на одну пылевую частицу и окружающую ее плазму, требует выполнения условия $\varphi'(l) = 0$, где l – половина расстояния между центрами соседних ча-

стиц. Величина n_{es} может быть определена с помощью формулы Ричардсона–Дешмана для термоэлектронов [10–12]

$$n_{es} = 2\Lambda^{-3} e^{\frac{qW}{k_B T}}, \quad (2)$$

где Λ – дебройлевская длина волны электрона, W – работа выхода электрона из материала пылевой частицы (в эВ). Как известно [15, 16], величина работы выхода электрона зависит от размера наночастиц металла. Данную зависимость можно выразить следующим простым соотношением:

$$I = W + \frac{I_m - W}{N_m^{1/3}}, \quad (3)$$

где I_m и N_m – соответственно потенциал ионизации (в эВ) и число атомов металла, составляющих наночастицу. Таким образом, в формуле (2) вместо W нужно использовать величину I , которая учитывает поправку на размерные эффекты (3).

Для вычисления концентрации ионов в плазме воспользуемся формулой Саха [17]

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = \Lambda^{-3} e^{\frac{qI_a}{k_B T}}, \quad (4)$$

где n_e и n_i – соответственно концентрации электронов и ионов в произвольной точке пространства между наночастицами, n_a и I_a – соответственно концентрация и потенциал однократной ионизации атомов буферного газа. При этом с учетом баланса числа частиц: $n = n_{is} + n_{as}$, из формулы (4) для n_{is} получаем следующее выражение:

$$n_{is} = \frac{An}{n_{es} + A}, \quad (5)$$

где

$$A = \Lambda^{-3} e^{\frac{qI_a}{k_B T}}, \quad (6)$$

n – концентрация атомов газа до ионизации, которая определяется из уравнения состояния идеального газа.

Уравнение (1) может быть решено аналитически при условии, что

$$\left| \frac{q\Phi}{k_B T} \right| \ll 1. \quad (7)$$

Данное условие с приемлемой точностью выполняется для наноразмерных частиц [10, 11]. Решение уравнения (1) при выполнении условия (7) записывается в следующем виде:

$$\psi(x) = \frac{1 - \bar{n}_{is}}{1 + \bar{n}_{is}} \left(\frac{1}{x} \frac{b\lambda \operatorname{ch}(b(x - \lambda)) + \operatorname{sh}(b(x - \lambda))}{b\lambda \operatorname{ch}(b(1 - \lambda)) + \operatorname{sh}(b(1 - \lambda))} - 1 \right). \quad (8)$$

Здесь введены следующие безразмерные величины:

$$\psi = \frac{q\Phi}{k_B T}; \quad x = \frac{r}{R}; \quad \bar{n}_{is} = \frac{n_{is}}{n_{es}};$$

$$b = \sqrt{(\bar{n}_{is} + 1) \frac{q^2 R^2 n_{es}}{\epsilon_0 k_B T}}.$$

Поскольку концентрации электронов и ионов в рассматриваемой системе непосредственно (через распределение Больцмана) связаны с найденными распределениями потенциала электрического поля, то с помощью выражения (8) можно проводить прямой аналитический расчет зарядового состава термической пылевой плазмы с наночастицами металла. При этом становится возможным достаточно подробно исследовать влияния потенциала ионизации атомов плазмообразующего газа и размерной зависимости работы выхода на эмиссионные свойства частиц.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим следующие диапазоны ключевых параметров: $R = 10\text{--}20$ нм, $T = 3000\text{--}3500$ К, $\lambda = 10$, $I_a = 7.7$ эВ и 15.76 эВ. В качестве параметров материала наночастиц использованы характеристики вольфрама: $W = 4.52$ эВ, $I_m = 7.98$ эВ, давление буферного газа принималось равным атмосферному. Выбор перечисленных значений параметров системы основывался на корректном выполнении условия (7).

На рис. 1 представлены графики пространственных распределений концентраций электронов и ионов при различных параметрах системы. Как и следовало ожидать, с повышением температуры концентрации электронов и ионов растут. Видно, что при рассмотрении наночастиц меньшего размера, концентрация электронов при прочих равных условиях принимает большие значения, чем в случае наночастиц большего размера. Концентрация же ионов буферного газа, напротив, принимает большие значения в случае крупных частиц. В целом, ионизация атомов буферного газа приводит к увеличению общей концентрации электронов в плазме. Для того, чтобы выявить влияние ионизации газа на эмиссию электронов из наночастиц необходимо отделить те электроны, которые образовались в результате ионизации газа от электронов, вышедших из частиц. С этой целью рассмотрим среднюю концентрацию электронов и ионов в окружающей наночастицы плазме, которые можно рассчитать из следующих соотношений:

$$\tilde{n}_e = \frac{3n_{es}}{\lambda^3} \int_1^\lambda e^{\psi(x)} x^2 dx, \quad (9)$$

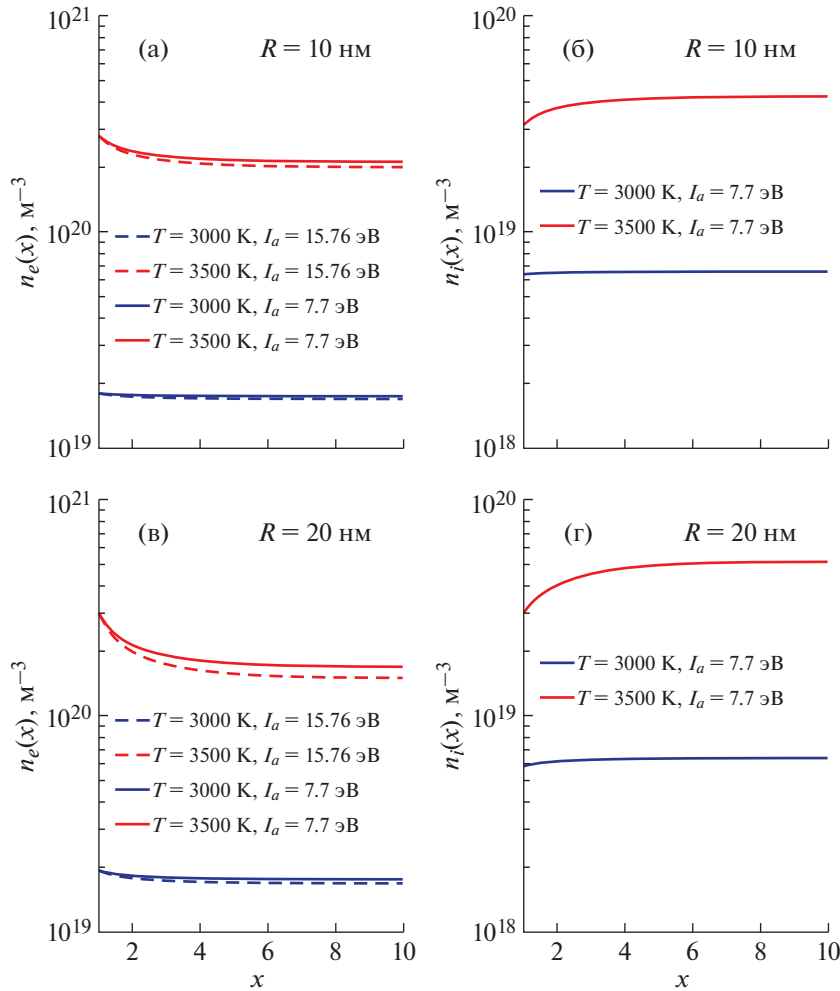


Рис. 1. Пространственные распределения концентраций электронов (а, в) и ионов (б, г) в термической пылевой плазме с наночастицами металла при различных температурах системы T , радиусах наночастиц R и потенциалах ионизации атомов буферного газа I_a .

$$\tilde{n}_i = \frac{3n_{is}}{\lambda^3} \int_1^\lambda e^{-\psi(x)} x^2 dx. \quad (10)$$

При этом с учетом условия (7) из (9) и (10) получим:

$$\tilde{n}_e = \frac{3n_{es}(1 - \bar{n}_{is})}{\lambda^3 b(1 + \bar{n}_{is})} \times \left(\frac{2b\bar{n}_{is}(\lambda^3 - 1)}{3(1 - \bar{n}_{is})} - \frac{b\lambda \text{th}(b(1 - \lambda)) + 1}{b\lambda + \text{th}(b(1 - \lambda))} + \frac{1}{b} \right), \quad (11)$$

$$\tilde{n}_i = \frac{3n_{is}(1 - \bar{n}_{is})}{\lambda^3 b(1 + \bar{n}_{is})} \times \left(\frac{2b(\lambda^3 - 1)}{3(1 - \bar{n}_{is})} + \frac{b\lambda \text{th}(b(1 - \lambda)) + 1}{b\lambda + \text{th}(b(1 - \lambda))} - \frac{1}{b} \right). \quad (12)$$

Наконец, средняя концентрация электронов, эмитированных из металлических наночастиц в

плазму, будет определяться из следующего соотношения:

$$\tilde{n}_{ep} = \tilde{n}_e - \tilde{n}_i = \frac{3(n_{es} - n_{is})}{\lambda^3 b} \left(\frac{1}{b} - \frac{b\lambda \text{th}(b(1 - \lambda)) + 1}{b\lambda + \text{th}(b(1 - \lambda))} \right). \quad (13)$$

На рис. 2 представлены графики зависимости средней концентрации эмитированных электронов и ионов плазмы от температуры системы при разных радиусах частиц и при наличии или отсутствии ионизации буферного газа. Обнаруживается, что, как и для случая микрочастиц [9, 13], термоэлектронная эмиссия из наночастиц будет ослабевать при заметной ионизации окружающего буферного газа. Как видно из рис. 2б, концентрация ионов в плазме в присутствии частиц малого размера меньше, чем в случае более крупных частиц. Данный эффект объясняется тем, что более эффективная эмиссия электронов наночасти-

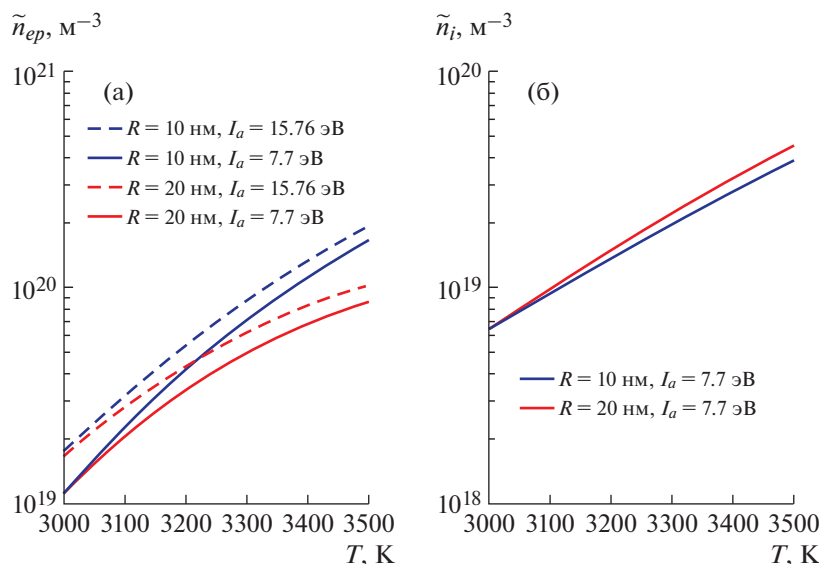


Рис. 2. Температурная зависимость средней концентрации эмитированных электронов (а) и ионов (б) в термической пылевой плазме с наночастицами металла при различных радиусах наночастиц R и потенциалах ионизации атомов буферного газа I_a .

цами меньших размеров приводит к более эффективной рекомбинации ионов в плазме.

Рассмотрим влияние размерной зависимости работы выхода электронов на их концентрацию в термической плазме. Для этого рассчитаем величину отношения \tilde{n}_{ep} , найденную с использованием значения работы выхода без учета размерной поправки на ту же величину, найденную с учетом размерной поправки. В таблице приведены значения данного отношения при разных параметрах системы.

Как видно из таблицы 1, наибольшее влияние размерная зависимость работы выхода на кон-

центрацию электронов в термической пылевой плазме оказывает при малых размерах частиц и меньших температурах, а также при наличии ионизации буферного газа.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе с использованием аналитической модели рассчитан зарядовый состав термической пылевой плазмы с наночастицами металла. Установлено, что когда окружающий частицы буферный газ ионизован, то эмиссия электронов из наночастиц ослабевает. Эмитированные из наночастиц электроны оказывают влияние на процессы ионизации в плазме, снижая концентрацию ионов. Размерную зависимость работы выхода электрона из наночастиц необходимо учитывать при минимальной рассмотренной температуре системы ($T = 3000$ К) и наименьшем радиусе частиц ($R = 10$ нм).

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ваулина О.С., Петров О.Ф., Фортвов В.Е., Храпак А.Г., Храпак С.А. Пылевая плазма (эксперимент и теория). М.: Физматлит, 2009.
2. Shigeta M., Murphy A.B. // Journal of Physics D: Applied Physics. 2011. Т. 44. С. 174025.
3. Mitrani J.M., Shneider M.N., Stratton B.C., and Raites Y. // Appl. Phys. Lett. 2016. Т. 108. С. 054101.

Таблица 1. Отношение средней концентрации электронов в термической пылевой плазме с наночастицами металла, рассчитанной с использованием значения работы выхода без учета размерной поправки $\tilde{n}_{ep}(W)$, к средней концентрации электронов полученной с учетом размерной поправки $\tilde{n}_{ep}(I)$. В расчете использовались радиусы наночастиц $R = 10$ нм и $R = 20$ нм при разных значениях температуры $T = 3000$ К и $T = 3500$ К. Расчеты проведены для двух значений потенциала ионизации атомов буферного газа $I_a = 15.76$ эВ и $I_a = 7.7$ эВ.

	$\tilde{n}_{ep}(W)$ $\tilde{n}_{ep}(I)$	R , нм ($T = 3000$ К)		R , нм ($T = 3500$ К)	
		10	20	10	20
I_a , эВ	15.76	1.14	1.06	1.08	1.02
	7.7	1.28	1.12	1.13	1.04

4. *Файрушин И.И., Сайфутдинов А.И., Софроницкий А.О.* // Химия высоких энергий. 2020. Т. 54. С. 164.
5. *Крауз В.И., Мартыненко Ю.В., Свечников Н.Ю., Смирнов В.П., Станкевич В.Г., Химченко Л.Н.* // УФН. 2010. Т. 180. С. 1055.
6. *Mendis D.A.* AIP Conference Proceedings. 2005. Т. 799. С. 583.
7. *Фортос В.Е., Филинов В.С., Нефедов А.П., Петров О.Ф., Самарян А.А., Липаев А.М.* // ЖЭТФ. 1997. Т. 111. С. 889.
8. *Vekselman V., Raitses Y., Shneider M.N.* // Phys. Rev. E. 2019. Т. 99. С. 063205.
9. *Файрушин И.И.* // Химия высоких энергий. 2020. Т. 54. С. 497.
10. *Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т.* // Химия плазмы / Под ред. Смирнова Б.М. М.: Энергоатомиздат, 1984. № 11. С. 130.
11. *Рудинский А.В., Ягодников Д.А.* // ТВТ. 2019. Т. 57. С. 777.
12. *Vishnyakov V.I.* // Physical Review E. 2012. Т. 85. С. 026402.
13. *Файрушин И.И. и др.* // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42. С. 42.
14. *Мартыненко Ю.В., Нагель М.Ю., Орлов М.А.* // Физика плазмы. 2009. Т. 35. С. 542.
15. *Wood D.M.* // Phys. Rev. Lett. 1981. Т. 46. С. 749.
16. *Смирнов Б.М.* // УФН. 2000. Т. 170. С. 495.
17. *Франк-Каменецкий Д.А.* Лекции по физике плазмы. Долгопрудный: Интеллект, 2008.