И. Л. ДОРОШЕВИЧ
УО БГУИР (г. Минск, Беларусь)

КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ БИНАРНОЙ СМЕСИ «ПАР АТОМОВ МЕТАЛЛА – БУФЕРНЫЙ ГАЗ»

Одними из самых производительных способов формирования наноструктур являются конденсационные методы получения наночастиц с применением высокоэнергетических воздействий [1]. Конденсационные методы синтеза наночастиц основаны на испарении материалов с последующим ростом частиц из пересыщенных паров либо в вакууме, либо в буферном газе (неон, аргон, азот и др.).

Для численной оценки и компьютерного моделирования кинетики процесса нуклеации атомов металла в отдельную наночастицу в плотной компрессионной плазме с плазмообразующим газом необходимы значения параметров Леннард-Джонса и коэффициента диффузии атомов металла с учетом атмосферы буферного газа. Поскольку процесс формирования наночастицы происходит в буферном газе, то, как показал анализ литературы [2, 3], в этом случае диффузия практически полностью определяется соударениями частиц разных сортов и поэтому зависит главным образом от потенциала, связанного с подобными соударениями. Следовательно, в качестве коэффициента диффузии атомов металлического пара в разреженном буферном газе необходимо рассматривать коэффициент диффузии бинарной смеси «пар атомов металла – буферный газ». Выражение для коэффициента диффузии бинарной смеси в первом приближении методов Чепмена – Каулинга и Кихары имеет вид [3]:

$$D_{12} = \frac{3\sqrt{2\pi k T m_{12}}}{16\pi n m_{12} \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*}(T^*)} = \frac{3}{16 n \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*}(T^*)} \sqrt{\frac{2kT}{\pi m_{12}}}, \quad (1)$$

где m_{12} – приведенная масса атомов массой m_1 и m_2:

$$m_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2};$$

n – концентрация атомов металлического пара;

σ_{12} – характеристическое расстояние, зависящее от выбранного закона межмолекулярных сил между молекулами газа и металла;

$\Omega_{12}^{(1,1)*}(T^*)$ – приведенный интеграл столкновений для диффузии, значение которого определяется выбором закона межмолекулярного взаимодействия сталкивающихся молекул и приведенной температурой T^*, равной

$$T^* = \frac{kT}{\varepsilon_{12}},$$

где ε_{12} – характеристическая энергия, зависящая от выбранного закона межмолекулярных сил между молекулами газа и металла.

Для вычисления параметров ε_{12} и σ_{12} парного взаимодействия молекулы буферного газа с атомом металла использовались комбинаторные соотношения, устанавливающие значения параметров смеси через параметры взаимодействия однородных молекул [3]:

$$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2},$$

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2},$$

где ε_1 и σ_1 – параметры потенциальной энергии парного взаимодействия для металла, ε_2 и σ_2 – для буферного газа.

Для расчета коэффициента диффузии D_{12} бинарной смеси «пар атомов железа – азот» в качестве закона межмолекулярного взаимодействия была выбрана потенциальная энергия парного взаимодействия (модельный потенциал) Леннард-Джонса. При проведении численных расчетов использовались следующие значения: для железа $\varepsilon_1 = 4{,}78 \cdot 10^{-20}$ Дж и $\sigma_2 = 2{,}62 \cdot 10^{-10}$ м [4]; для азота $\varepsilon_2 = 1{,}31 \cdot 10^{-21}$ Дж и $\sigma_2 = 3{,}7 \cdot 10^{-10}$ м [5]; приведенных интегралов столкновений, рассчитанных на основе потенциальной энергии Леннард-Джонса, по данным [6].

Результаты вычислений коэффициента диффузии D_{12} бинарной смеси «пар атомов железа – азот» для различных температур T и концентраций n приведены на рисунке.

где ε_{12} – характеристическая энергия, зависящая от выбранного закона межмолекулярных сил между молекулами газа и металла.

Для вычисления параметров ε_{12} и σ_{12} парного взаимодействия молекулы буферного газа с атомом металла использовались комбинаторные соотношения, устанавливающие значения параметров смеси через параметры взаимодействия однородных молекул [3]:

$$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2},$$

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2},$$

где ε_1 и σ_1 – параметры потенциальной энергии парного взаимодействия для металла, ε_2 и σ_2 – для буферного газа.

Для расчета коэффициента диффузии D_{12} бинарной смеси «пар атомов железа – азот» в качестве закона межмолекулярного взаимодействия была выбрана потенциальная энергия парного взаимодействия (модельный потенциал) Леннард-Джонса. При проведении численных расчетов использовались следующие значения: для железа $\varepsilon_1 = 4{,}78 \cdot 10^{-20}$ Дж и $\sigma_2 = 2{,}62 \cdot 10^{-10}$ м [4]; для азота $\varepsilon_2 = 1{,}31 \cdot 10^{-21}$ Дж и $\sigma_2 = 3{,}7 \cdot 10^{-10}$ м [5]; приведенных интегралов столкновений, рассчитанных на основе потенциальной энергии Леннард-Джонса, по данным [6].

Результаты вычислений коэффициента диффузии D_{12} бинарной смеси «пар атомов железа – азот» для различных температур T и концентраций n приведены на рисунке 1.

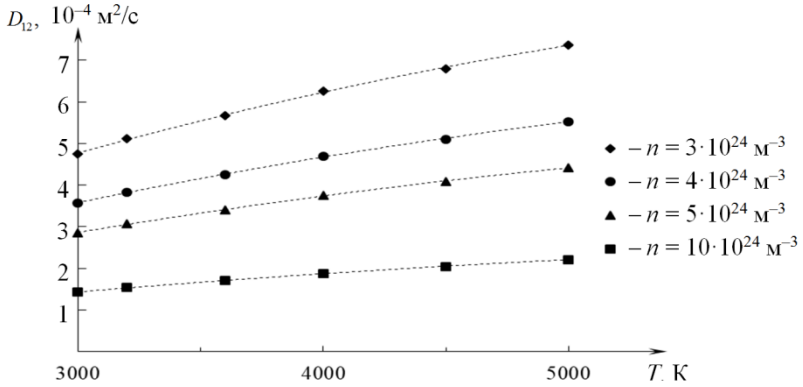

Рисунок 1. – Значение коэффициента диффузии бинарной смеси «пар атомов железа – азот» при различных температурах и концентрациях. Штриховые линии добавлены для визуализации

Зависимость коэффициента диффузии D_{12} бинарной смеси «пар атомов металла – буферный газ» от концентрации *n* согласно выражению (1) можно представить в виде

$$D_{12} = \frac{d_{12}}{n},$$

где коэффициент d_{12} равен

$$d_{12} = \frac{3\sqrt{2\pi k T m_{12}}}{16\pi m_{12} \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)^*}(T^*)}.$$

Результаты расчета коэффициента d_{12} для бинарной смеси «пар атомов железа – азот» при различных температурах представлены в таблице 1.

Таблица 1. – Коэффициент d_{12} для бинарной смеси «пар атомов железа – азот» при различных температурах

T, К	3000	3200	3600	4000	4500	5000
d_{12}, 10^{21} (м·с)$^{-1}$	2,06	2,16	2,37	2,53	2,75	2,94

ЛИТЕРАТУРА

1. Многомасштабное компьютерное моделирование газофазного синтеза металлических наночастиц / Б. Р. Гельчинский [и др.] // Доклады Академии наук. – 2011. – Т. 436, № 4. – С. 486–489.
2. Рид, Р. Свойства газов и жидкостей: Справочное пособие / Р. Рид, Дж. Прауснитц, Т. Шервуд ; пер. с англ. ; под ред. Б. И. Соколова. – 3-е изд., перераб. и доп. – Л. : Химия, 1982. – 592 с.: ил. – Нью-Йорк, 1977.
3. Ферцигер, Дж. Математическая теория процессов переноса в газах / Дж. Ферцигер, Г. Капер ; пер. с англ. ; под ред. Д. Н. Зубарева, А. Г. Башкирова. – М. : Мир, 1976. – 555 с.
4. Дорошевич, И. Л. Расчет параметров потенциальной энергии Леннард-Джонса для атомов железа / И. Л. Дорошевич // Инновационные технологии обучения физико-математическим дисциплинам : материалы VII Междунар. науч.-практ. интернет-конф., Мозырь, 24–27 марта 2015 г. / УО МГПУ им. И. П. Шамякина ; редкол.: И. Н. Ковальчук (отв. ред.) [и др.]. – Мозырь, 2015. – С. 181–183.
5. Эткинс, П. Физическая химия: в 2 т. / П. Эткинс ; пер. с англ. К. П. Бутина. – М. : Мир, 1980. – Т. 2. – 584 с.
6. Васильева, И. А. Теплофизические свойства веществ : учеб. пособие / И. А. Васильева, Д. П. Волков, Ю. П. Заричняк. – СПб. : СПбГУ ИТМО, 2004. – 80 с.