

УДК 538.915

А.В. ПОПОВ¹, Н.В. МЕЛЬНИКОВА²**НУКЛЕАЦИЯ НАТРИЯ В ПЛАЗМЕННОМ ПОТОКЕ С НЕОНОМ**

Рассмотрена нуклеация натрия в неоновом потоке в рамках метода, учитывающего ширину энергетических уровней. Показано, что атомы натрия в плазменном потоке с неоном образуют метастабильные двух-, трех- и четырехатомные кластеры, содержащие только натрий. При этом в условиях внешних возбуждений могут образовываться системы Na–Ne, быстро теряющие неон при снятии возбуждений, а также быстро распадающиеся системы Ne–Ne.

Ключевые слова: плазма, кластеры, конденсация, натрий, неон, электронная структура, полная энергия.

Введение

Нанотехнологии требуют создания устройств с атомарной точностью, что возможно только при наличии методов контролирования вещества на атомном уровне. В этой связи способность управлять процессами нуклеации приобретает ключевую роль в технологических процессах [1] и способствует бурному развитию различных методов синтеза новых наноматериалов [2–4]. При синтезе наноматериалов часто используют кластерные пучки [5], обеспечивающие высокую скорость генерации частиц требуемой структуры и размеров, их быструю доставку к месту получения материала с заранее заданными свойствами. Однако, по мере усложнения реакций синтеза, традиционные методы проб и ошибок становятся более неэффективными. Причем цепь сложных неравновесных процессов сильно зависит от внешних условий и режимов генерации. Для управления этими процессами часто используется инертный газ в качестве буферного газа [6–8]. Для подавления агрегации или диссоциации кластеров используют лазерное излучение [9, 10]. При этом, как показано в работе [9], эффективность подавления кластеризации молекул и диссоциации кластеров существенно зависит от мощности возбуждающего лазерного излучения.

Подчеркнем, что атомные кластеры [11] являются предельными наночастицами, где каждый атом и каждый электрон играют важную роль [12], что не позволяет ограничиться только качественными соображениями. Поэтому сегодня все чаще говорят о необходимости глубокого теоретического осмысления механизма образования наночастиц [13]. Настоящая работа посвящена проблеме описания процессов формирования наноструктур в неравновесных условиях, в частности образования устойчивых двух-, трех-, четырех- и других многоатомных кластеров натрия в процессе нахождения атомов натрия в плазменном потоке инертного неона.

1. Метод теоретического исследования

Наиболее глубокое и полное понимание процессов формирования зародышей конденсированной фазы в неравновесных условиях можно получить, опираясь на теорию несамосопряженных операторов, собственные значения которых являются комплексными [14]. При этом мнимая часть собственных значений энергии имеет смысл ширины уровней действительной части собственных значений энергии [15]. Подробное описание реализации данной идеи может быть найдено в обзоре [16]. Суть же этой идеи состоит в использовании теории несамосопряженных операторов для описания орбитальных возбуждений атома. В этом случае собственные значения оператора момента импульса должны быть комплексными с квантовыми числами, равными $l + x + iy$, где l , как обычно, пробегает целочисленные значения. Тогда область изменения комплексной добавки $x + iy$ может быть ограничена значениями $|x| < 0.5$ и $|y| < 0.5$. При этом параметр x отвечает за штарковский сдвиг энергетических уровней при $y = 0$, а параметр y – за уширение этих уровней при $x = 0$. Перебирая все возможные значения $|x| < 0.5$ и $|y| < 0.5$ в процессе поиска самосогласованных решений уравнения Шредингера, по минимуму полной энергии возбужденного атома можно проследить и за его спектральными характеристиками, обусловленными орбитальными переходами электронов. Данная идея была использована для описания возбужденных состояний в кластерах [17, 18] и кристаллах [19–21].

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>