بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰

شبیه‌سازی اثر حرکت سوقی یون بر شکل نانوذرات فرساب لیزری درون مایع

رقیه چراغچی، مسعود رضوانی جلال*، مسعود پیشدست، علیرضا عبدی کیان

گروه فیزیک و فوتونیک، دانشگاه ملایر، ملایر

rezvanijalal@malayeru.ac.ir

چکیده – در این مقاله، رشد نانوذرات در فرساب لیزری درون مایع با مکانیسم حرکت مداری محدود (یا OML) مورد شبیه‌سازی قرار می‌گیرد. فرض می‌شود که پلاسمای در حال انبساط فرساب دارای سرعت فراصوتی تا حد ۸۰۰۰ *m/s* باشد. نتایج محاسبات نشان می‌دهند که چنین سرعت سوقی باعث خواهد شد که شکل نانوذرات از حالت متقارن کروی خارج شده و به شکل صنوبری در بیاید. چنین نتیجه گرفته می‌شود که اگر رشد نانوذرات براساس نظریه باردارشدگی الکتریکی صحیح باشد آنگاه شکل نانوذرات حاصله در آزمایش واقعی نباید به صورت کروی و بلکه به شکل صنوبری باشد. از آنجا که چنین چیزی در نانوذرات سنتز شده از فرساب درون مایع مشاهده نشده است به نظر می‌آید که نظریه OML برای رشد نانوذرات قدری دچار تردید خواهد شد.

کلید واژه- حرکت سوق یونی، فرساب لیزری درون مایع، نانوذرات صنوبری.

Simulation of the Effect of Ion Drift Motion on the Shape of the Nano-Particles of Laser Ablation in Liquid

Roghayeh Cheraghchi, Masoud Rezvani Jalal, Masoud Pishdast, Alireza Abdikian

Physics and Photonics Department, Malayer University, Malayer

rezvanijalal@malayeru.ac.ir

Abstract- In this paper the growth of nano-particles in laser ablation within a liquid by Orbital Motion Limited mechanism (OML) is simulated. It is assumed that the expanding plasma of the ablation has a supersonic speed up to 8000 *m/s*. Calculation results show that such a drift motion will cause the nano-particles to lose their symmetric spherical shapes and get a pine-like shape. It is concluded that if the growth of nano-particles obeys the electrical charging theorem then the shape of the produced nano-particles in real experiments should not be spherical but must be pine-like instead. As such thing has not been seen in the synthesized nano-particles from the experimental liquid-phase ablation; it seems that the OML theorem for nono-particle growth is rather doubted.

Keywords: Ion drifts motion, Laser ablation in liquid, Pine-like nano-particles.

[Downloaded from opsi.ir on 2024-11-22]

مقدمه

یکی از روش‌های جدیدی که برای تولید نانوذرات با استفاده از لیزرهای پالسی پرقدرت جذابیت زیادی بین پژوهشگران پیدا کرده است فرساب لیزری درون مایعات (Laser Ablation in Liquids یا LAL) می‌باشد [۱]. LAL نانوذرات ریزتر و همگن‌تری نسبت به فرساب گازی به دست می‌دهد. سوالات زیادی درباره مکانیسم تشکیل نانوذرات در LAL وجود دارد که هنوز جواب قانع‌کننده‌ای به آنها داده نشده است. یکی از این سوالات به سازوکار رشد نانوذرات مربوط است. تعدادی از پژوهشگران معتقد هستند که هسته‌زایی و رشد نانوذرات در فاز پلاسمایی LAL و به خاطر باردارشدگی الکتریکی اتفاق می‌افتد [۲و۳]. محققان دیگری نیز اعتقاد دارند که این فرایند به خاطر چگالش هیدرودینامیکی بخار ماده کندوسوز شده رخ می‌دهد [۴و۵]. از این مباحث معلوم است که مکانیسم رشد نانوذرات در LAL یک مسئله حل نشده است که نیاز به بررسی‌های دقیق‌تر دارد.

نویسندگان حاضر، رشد نانوذرات در LAL را با مدل باردارشدگی الکتریکی از طریق نظریه حرکت مداری محدود (Orbital Motion Limited یا OML) در مرجع [۶] شبیه‌سازی کردند. نتیجه گرفته شد که این نظریه منجر به ذراتی کوچک‌تر از ۱۰ nm می‌شود. پدیده مهمی که در مدل مذکور و شبیه‌سازی‌های گزارش شده در مراجع مغفول مانده است حرکت سوقی ناشی از انبساط فراصوتی پلاسما در لحظات اولیه می‌باشد. در مراجع گزارش شده است که سرعت انبساط پلاسما می‌تواند بین ۵۰۰۰ تا ۲۴۰۰۰ m/s باشد [۱]. در مقاله حاضر اثر سرعت سوق پلاسما (مخصوصاً یون‌های مثبت آن) بر رشد ذره و شکل نهایی آن از طریق مکانیسم OML مورد شبیه‌سازی قرار می‌گیرد.

فرمول‌بندی مدل رشد

برهمکنش لیزر با هدف در زمان‌های اولیه فرایند LAL (زیر ۱۰۰ ns) به تولید یک پلاسمای بسیار داغ و چگال (با دمای ۴۰۰۰-۸۰۰۰ K و چگالی نوعی $10^{18}\ cm^{-3}$) از ماده هدف منجر می‌شود [۲]. ساده‌ترین مدلی که می‌توان برای رشد نانوذرات لحاظ کرد نظریه OML است. طبق این نظریه، الکترون‌های پلاسما که حرکت‌پذیری بیشتری دارند باعث باردار شدن هسته اولیه می‌شوند و یون‌های مثبت را جذب می‌کنند. این فرایند می‌تواند باعث رشد ذره شود. طبق نظریه OML جریان الکترونی و یونی به سمت ذره از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند [۲]:

$$I_e=-\pi r^2\ en\sqrt{\frac{8kT}{\pi m_e}}e^{\frac{e\Phi(r)}{kt}} \qquad (۱)$$

$$I_i=\pi r^2 en\sqrt{\frac{8kT}{\pi m_i}}\left(1-\frac{e\Phi(r)}{kT}\right) \qquad (۲)$$

که در آن m_i و m_e جرم یون و الکترون، k ثابت بولتزمن، e اندازه بار الکترون، r شعاع ذره و Φ پتانسیل الکتریکی آن می‌باشد. n و T هم چگالی و دمای پلاسما هستند.

این جریان‌ها برای وقتی که ذره ساکن باشد و محیط اطراف آن نیز هیچ سرعت سوقی نداشته باشد و تعادل گرمایی نیز حاکم باشد صادق هستند. برای لحاظ کردن حرکت سوقی پلاسمای اطراف ذره می‌توان از توزیع سرعت ماکسول در حضور سوق استفاده کرد:

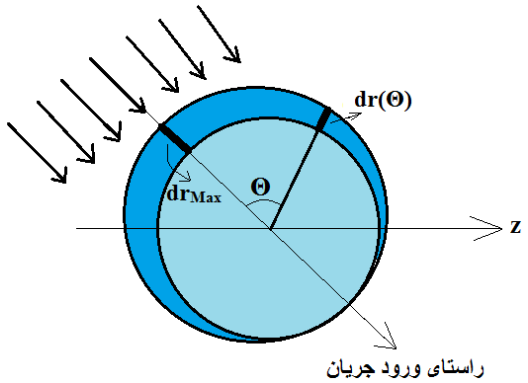
$$p(\vec{v})=\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}}e^{\frac{-mv_x^2}{2kT}}e^{\frac{-mv_y^2}{2kT}}e^{\frac{-m(v_z-v_0)^2}{2kT}} \qquad (۳)$$

که در آن، v_0 سرعت سوق در راستای محور z است. با استفاده از توزیع فوق و میانگیری روی اندازه سرعت، دیفرانسیل جریان یونی وارد بر ذره از سمت زاویه فضایی $Sin\theta d\theta d\varphi$ به صورت زیر به دست می‌آید:

[Downloaded from opsi.ir on 2024-11-22]

$$dI_i = (2r^2)\ en\ \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-mv_0^2}{2kT}} \left[\int_0^{\infty} \left(1-\frac{2eV(r)}{mv^2}\right) v^3 e^{\frac{-m\left(v^2-2vv_0\,Cos\,\theta\right)}{2\pi}} dv\right] Sin\,\theta\, d\theta d\varphi \qquad (۴)$$

حال که جریان یونی پیدا شد باید مدلی برای تغییر شکل ذره در حین رشد ارائه نمود. ساده‌ترین مدلی که می‌توان فرض کرد رشد خطی وابسته به زاویه قطبی محلی است. در شکل ۱ چنین مدلی نشان داده شده است:



شکل ۱: تغییر شکل ذره با وابستگی خطی به زاویه قطبی محلی.

طبق این مدل، در فرود یون‌ها از زاویه فضایی مورد نظر، بیشترین رشد در جلوی ذره و کمترین رشد نیز در سمت مخالف خواهد بود. افزایش شعاع در قسمت‌های مختلف ذره را با این مدل می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$dr(\Theta)=dr_{Max}\left(\frac{\pi-\Theta}{\pi}\right) \qquad (۵)$$

که در آن منظور از Θ زاویه بین راستای فرود جریان و نقطه مشاهده می‌باشد که در شکل ۱ نیز معلوم است. سایر عبارات داخل رابطه (۵) نیز به شکل زیر می باشند:

$$dr_{Max}=\frac{dV}{2\pi r^2} \qquad (۶)$$

$$dV=\frac{(dI_i dt)}{e}\left(\frac{4}{2}\pi r^3\right) \qquad (۷)$$

که در آن dV دیفرانسیل حجم است. پتانسیل الکتریکی ذره نیز از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\Phi=\frac{q_i+q_e}{4\pi\varepsilon_0\langle r\rangle} \qquad (۸)$$

q_i و q_e در رابطه فوق نیز بارهای تجمع یافته بر روی ذره به خاطر جریان یونی و جریان الکترونی هستند و $\langle r\rangle$ نیز مقدار متوسط شعاع ذره می‌باشد.

با داشتن معادلات فوق و حل آنها برای کل زاویه فضایی از زمان صفر تا مدت زمان طول عمر پلاسما می‌توان نحوه رشد و تغییر شکل ذره را مشاهده کرد. اجرای این کار به صورت تحلیلی قابل انجام نیست و باید به برنامه‌نویسی متوسل شد. الگوریتم حل عددی به این صورت است که بعد از المان‌بندی زمان و فضا، در گام زمانی مشخص ابتدا از فرمول (۴) دیفرانسیل جریان به دست می‌آید و از طریق رابطه (۵) افزایش شعاع قسمت‌های مختلف ذره محاسبه می‌شود. در انتهای گام زمانی نیز کل بار یونی و بار الکترونی رسوب یافته روی ذره حساب می‌گردد و پتانسیل ذره از طریق رابطه (۸) پیدا می‌شود. همین کار باید برای کل گام‌های زمانی تکرار شود تا رشد ذره شبیه‌سازی گردد. در ادامه به نتایج شبیه‌سازی پرداخته می‌شود.

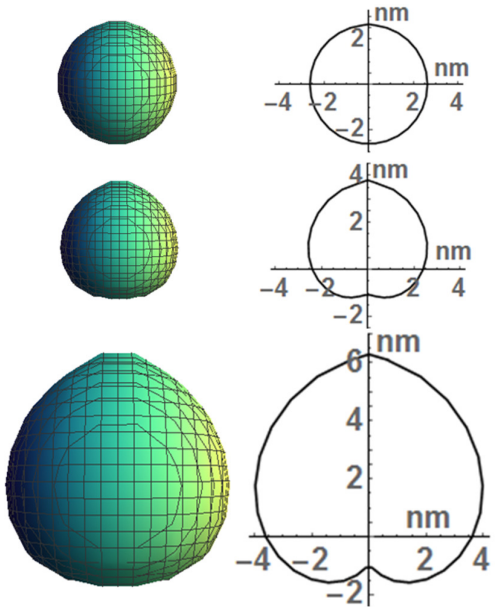
شبیه‌سازی

برای انجام شبیه‌سازی یک کد در محیط Mathematica توسط نویسندگان مقاله نوشته شده است. نیکل با چگالی $۹/۸\ g/cm^3$ به عنوان هدف فرساب انتخاب می‌گردد. چگالی پلاسما $n= ۱۰^{۱۸}\ cm^{-3}$ و دما نیز $T_0=۶۰۰۰\ k$ در نظر گرفته می شود. شعاع هسته اولیه نیز $۰/۸\ nm$ انتخاب می‌گردد. شکل سه بعدی نهایی نانوذره و برشی از آن برای پلاسمایی با طول عمر $۱۰۰\ ns$ و سرعت های سوق ۰، ۴۰۰۰، ۸۰۰۰ متر بر ثانیه در شکل ۲ آورده شده است.

از شکل ۲ مشخص است که وجود سرعت سوق در پلاسما تاثیر زیادی روی شکل و ابعاد نهایی نانوذره دارد. شکل نهایی نانوذره همانطور که از شکل هم مشخص است به صورت صنوبری می‌باشد. در سرعت‌های سوقی زیاد نیز ابعاد نهایی نانوذره بزرگ‌تر شده است. از طرفی، همانطور که در مراجع نیز گزارش شده است سرعت انبساط پلاسمای فرساب درون مایع می‌تواند دارای مقادیر زیادی بین m/s ۵۰۰۰-۲۴۰۰۰ باشد. این موضوع نشان می‌دهد که در

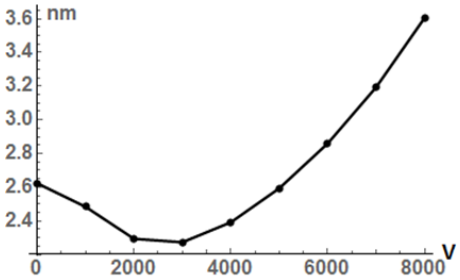
[Downloaded from opsi.ir on 2024-11-22]

پلاسمای ناشی از فرساب حتماً باید اثرات مربوط به سرعت سوق در نظر گرفته شود [۱].



شکل ۲: تاثیر سرعت سوق بر شکل نهایی نانوذره. ردیف بالا برای سرعت ۰، ردیف وسط m/s ۴۰۰۰ و ردیف پایین m/s ۸۰۰۰.

وابستگی اندازه نهایی نانوذره به سرعت سوق نیز در شکل ۳ آورده شده است. طبق این نمودار، با افزایش سرعت سوق (به استثنای سرعت‌های پایین) ابعاد نانوذره نیز رشد بیشتری می‌کند.



شکل ۳: ابعاد نهایی نانوذره بر حسب سرعت سوق.

شبیه‌سازی فوق نشان می‌دهد که سرعت فراصوتی پلاسما این پیامد را دارد که شکل ذرات را از حالت کروی خارج کرده و به شکل صنوبری تبدیل می‌کند. با توجه به اینکه شکل واقعی نانوذرات در فرساب تجربی به صورت کروی است و نه صنوبری، می‌توان استدلال کرد که نظریه OML برای رشد نانوذرات فرساب لیزری دارای نقایصی می‌باشد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله تاثیر سرعت سوق پلاسما بر شکل و اندازه نهایی نانو ذرات حاصله از فرساب لیزری درون مایع با نظریه باردارشدگی الکتریکی مورد شبیه‌سازی قرار گرفت. معلوم شد که اگر این نظریه درست باشد شکل نهایی نانوذرات باید به صورت صنوبری باشد. از آنجایی که شکل نانوذرات به دست آمده از فرساب تجربی کروی است نتیجه‌گیری می‌شود که مکانیسم باردارشدگی با تئوری OML نمی‌تواند مدل کاملی برای رشد نانوذره باشد.

سپاسگزاری

از حمایت پژوهشی دانشگاه ملایر قدردانی می‌شود.

مرجع‌ها

[1] K. Sasaki, and N. Takada, “Liquid-phase laser ablation”, Pure Appl. Chem., 82(6), 1317–1327, 2010.

[2] F. Taccogna et al, “On the growth mechanism of nanoparticles in plasma during pulsed laser ablation in liquids”, Plasma Sources Sci. Technol. 26, 045002, 2017.

[3] F. Taccogna, “Nucleation and growth of nanoparticles in a plasma by laser ablation in liquid”, J. Plasma Phys., 81, 495810509, 2015.

[4] W. Soliman et al, “Growth processes of nanoparticles in liquid-phase laser ablation studied by laser-light scattering”, Applied Physics Express 3, 035201, 2010.

[5] N. A. Inogamov et al, “Hydrodynamic and molecular-dynamics modeling of laser ablation in liquid: from surface melting till bubble formation”, Optical and Quantum Electron., 52(63) 1-24, 2020.

[۶] رقیه چراغچی، مسعود رضوانی جلال، مسعود پیشدست، علیرضا عبدی کیان، "شبیه‌سازی رشد نانوذرات حاصله از فرساب لیزری درون مایع با سازوکار باردارشدگی الکتریکی"، مقاله نامه ششمین کنفرانس رشد بلور، آبان ۱۴۰۰، دانشگاه سمنان.

[Downloaded from opsi.ir on 2024-11-22]

با سلام

ضمن تشکر از مسئولین محترم کنفرانس، احتراماً به استحضار می رساند که نظرات داوران محترم اعمال گردید.

نظر داوران: چکیده انگلیسی ترجمه کلمه به کلمه شده است و مناسب نیست.

پاسخ: چکیده انگلیسی تا حد امکان اصلاح گردید.

با تشکر

[Downloaded from opsi.ir on 2024-11-22]