

Etudes cinétiques et structurales des clusters de carbone par dynamique moléculaire classique

A. Allouch¹, J. Mougenot¹, A. Michau¹, S. Prasanna¹, M. Seydou², F. Maurel², P. Brault³, K. Hassouni¹

¹ LSPM, UMR 3407 CNRS- Université Paris 13, Villetaneuse, France

² ITODYS, Université Paris Diderot, Paris, France

³ GREMI, UMR7344, CNRS-Université d'Orléans, Orléans, France

Résumé

Le plasma poussiéreux est un gaz ionisé dans lequel se trouvent des particules solides en suspension de taille variant du nanomètre à plusieurs centaines de micromètres. Ils sont souvent générés par la croissance moléculaire d'un pré-curseur et par la nucléation ultérieure de noyaux solides qui se développent et évoluent au cours de processus dynamiques en aérosol. Les particules formées dans les plasmas acquièrent une charge électrique souvent négative en moyenne et présentant des fluctuations dynamiques provenant du caractère discret du processus de chargement électrique. La cinétique de ces processus dépend de la valeur moyenne et de la fluctuation de charge des particules. Il y a donc un fort couplage entre les caractéristiques des particules et l'équilibre de décharge du plasma [1]. En particulier, ce couplage affecte fortement la distribution en taille et les caractéristiques structurales des nanoparticules. L'utilisation de plasmas poussiéreux en tant qu'outils pour la production de nanoparticules fonctionnelles avancées nécessite la compréhension de ce couplage et en particulier de la manière dont le plasma affecte la structure de la particule, surtout au cours de la première étape de leur formation. Celles-ci sont toutefois difficiles à étudier expérimentalement et la simulation numérique peut aider à éclairer plusieurs aspects.

Une étude structurale de différentes formes stables des clusters de carbone a été effectuée en utilisant la dynamique moléculaire trempée avec le potentiel d'ordre de liaison REBO. Cette méthode consiste à chauffer (de 0K à 3kK) un amas de carbones initialement désordonnés puis à refroidir brutalement la structure. Les résultats obtenus montrent que pour les clusters de carbone de petite taille C_n ($10 \leq n \leq 20$), les structures les plus stables sont soit monocycliques, soit polycycliques et sont cohérentes avec des calculs de chimie quantique [2]. Pour une taille de cluster comprise entre 20 et 60 atomes, des structures de type graphène et fullerène sont obtenues (Figure 1) en accord avec les résultats de la littérature [3,4].

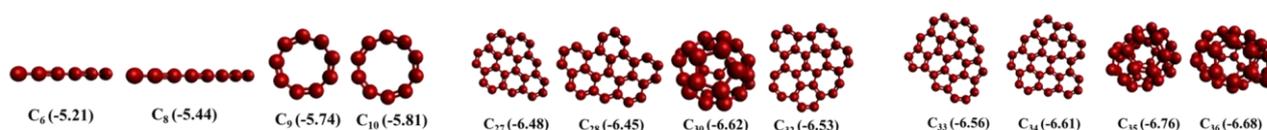


Figure 1. Structures stables des clusters de carbones (et énergie en eV/atomes)

De plus les cinétiques de collage ont été étudiées à l'échelle atomique lors de la collision d'un atome de carbone avec un cluster de carbone C_{80} en forme de fullerène. L'objectif essentiel de cette étude est de déterminer le coefficient de collage d'un atome sur un cluster et remonter après au calcul des sections efficaces de collage et avec des informations sur la répartition de l'énergie entre la cible et le projectile et la nature du collage en fonction de l'énergie du projectile et son incidence.

Références

- [1] A. Michau et al. PSST, 25, pp.15019 – 15019 (2016).
- [2] Ngandjong, A.C., Et al., Computational and Theoretical Chemistry 1102 (février 2017): 105-13.
- [3] Jeffrey C. Grossman et al., chemical physics letters, 284, 344-349 (1998).
- [4] Xiaodun Jing and James R.Chelikowsky, « Nucleation of carbon clusters », phys.Rev B, 46, 15503-15508 (1992).