

# Klastry v plynné fázi: techniky tvorby a detekce

Ondřej Votava



*Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského  
AV ČR*



# Obsah

- A) Zavedení základních pojmů**
- B) Tvorba klastrů v supersonických atomových a molekulových paprscích**
- C) Metody detekce klastrů v molekulových paprscích**

# Obsah

## A) Zavedení základních pojmů

- Mikroskopický pohled
- Makroskopický (termodynamický) pohled

## B) Tvorba klastrů v supersonických atomových a molekulových paprscích

## C) Metody detekce klastrů v molekulových paprscích

# Obsah

**A) Zavedení základních pojmů**

**B) Tvorba klastrů v supersonických atomových a molekulových paprscích**

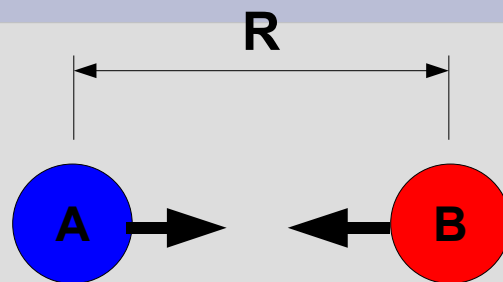
- **Dynamika supersonické expanze**
- **Kondenzace v molekulových paprscích**

**C) Metody detekce klastrů v molekulových paprscích**

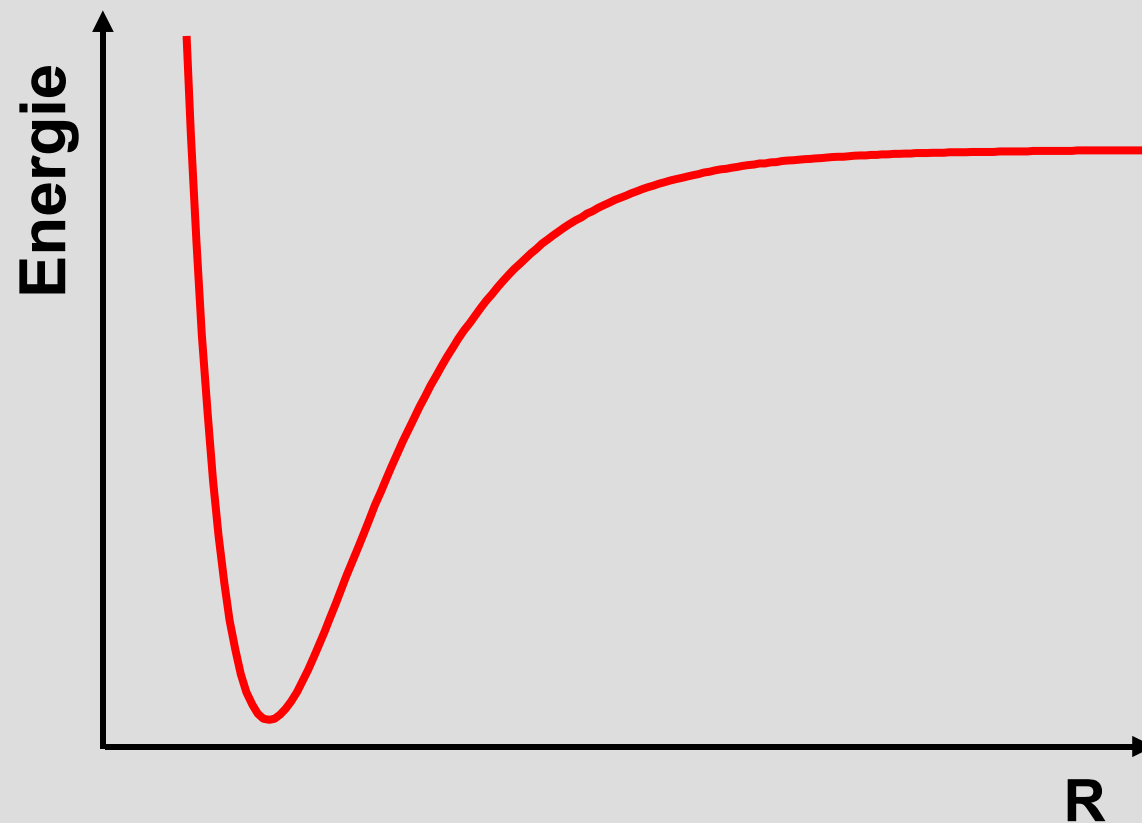
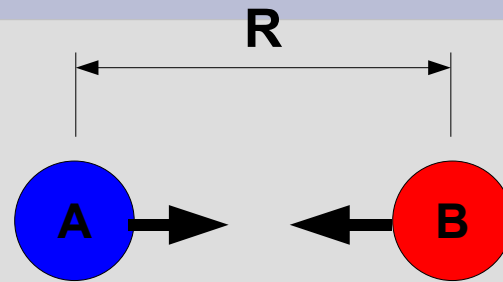
# Obsah

- A) Zavedení základních pojmů**
- B) Tvorba klastrů v supersonických atomových a molekulových paprscích**
- C) Metody detekce klastrů v molekulových paprscích**
  - **Hmotová spektrometrie**
  - **Optické metody - spektroskopie**

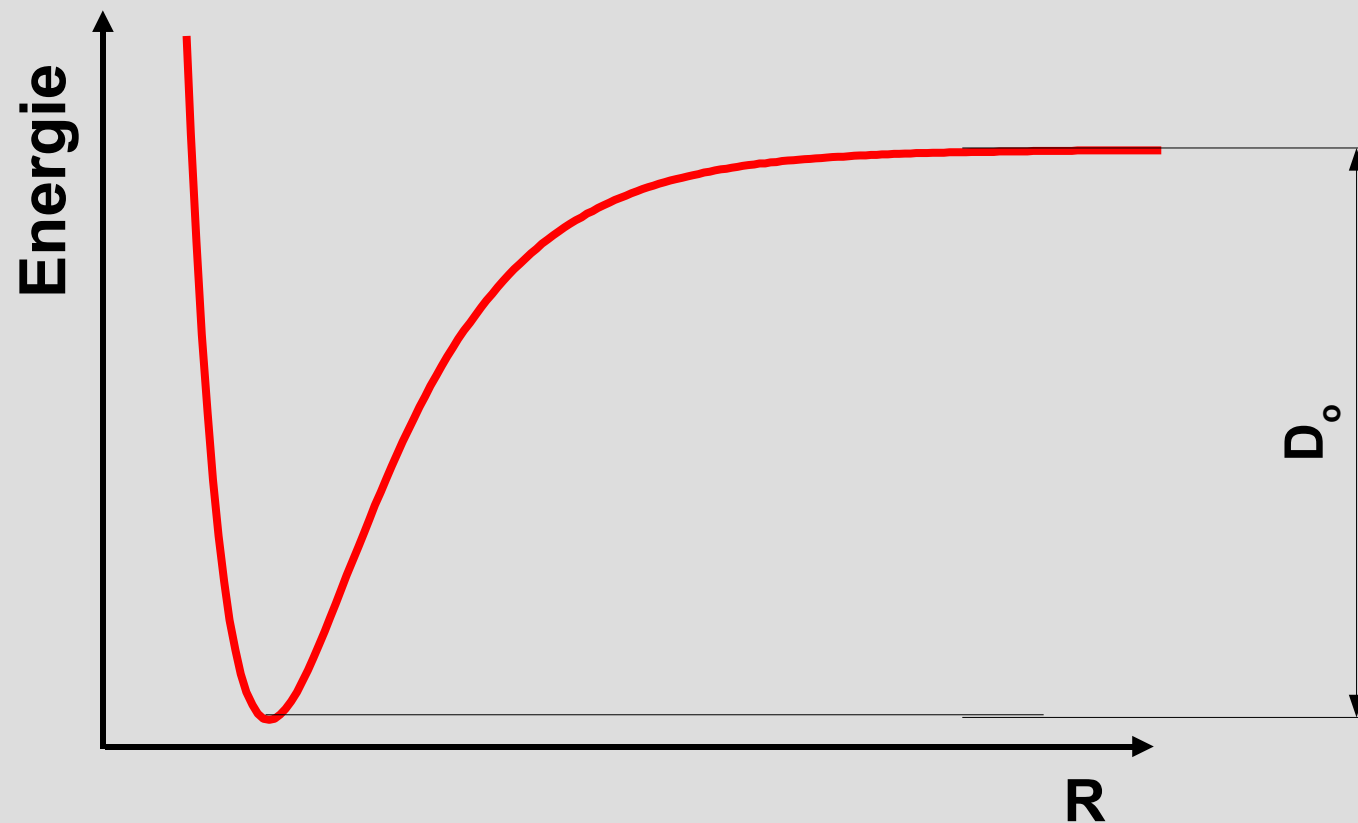
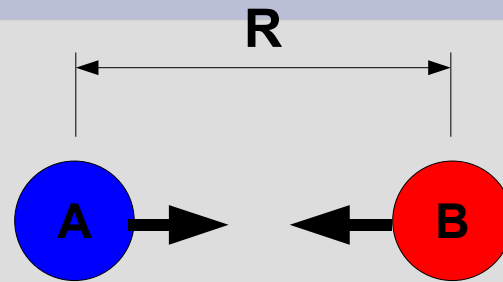
# Slabé mezimolekulové síly



# Slabé mezimolekulové síly

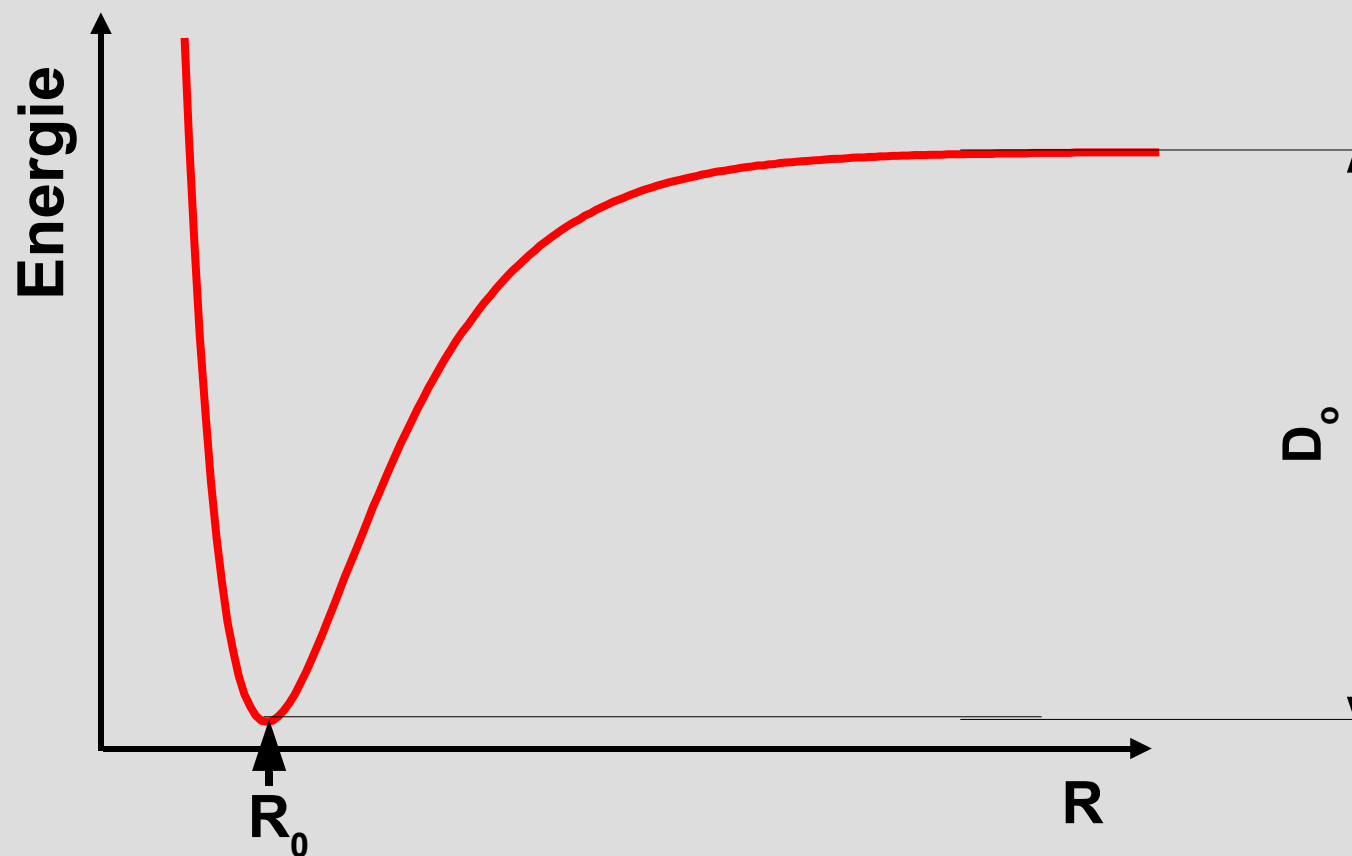
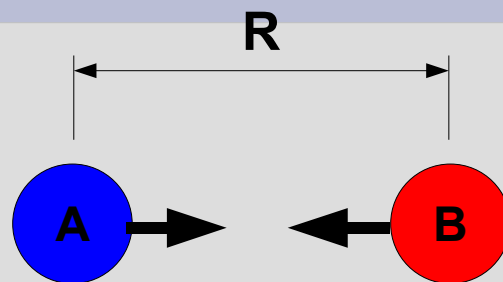


# Slabé mezimolekulové síly





# Slabé mezimolekulové síly

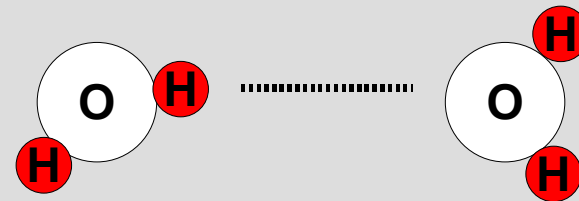


# Slabé mezimolekulové síly

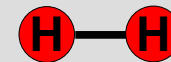
van der Waalsovské síly (~1kJ/mol)



Vodíkové vazby (~10kJ/mol)



Kovalentní vazby (~100kJ/mol)



# Elementární kroky tvorby klastrů



Tvorba dimeru

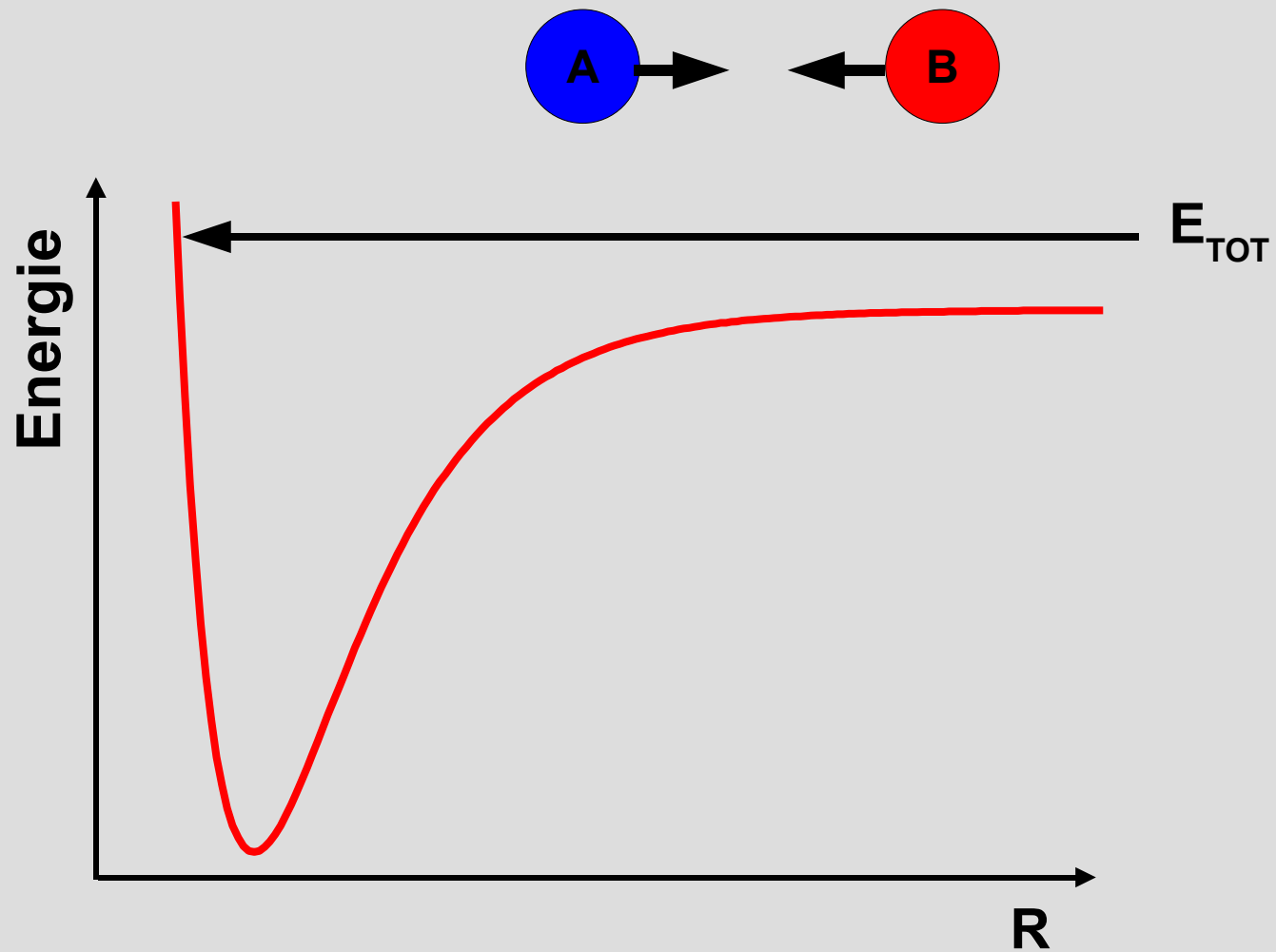


Tvorba trimeru

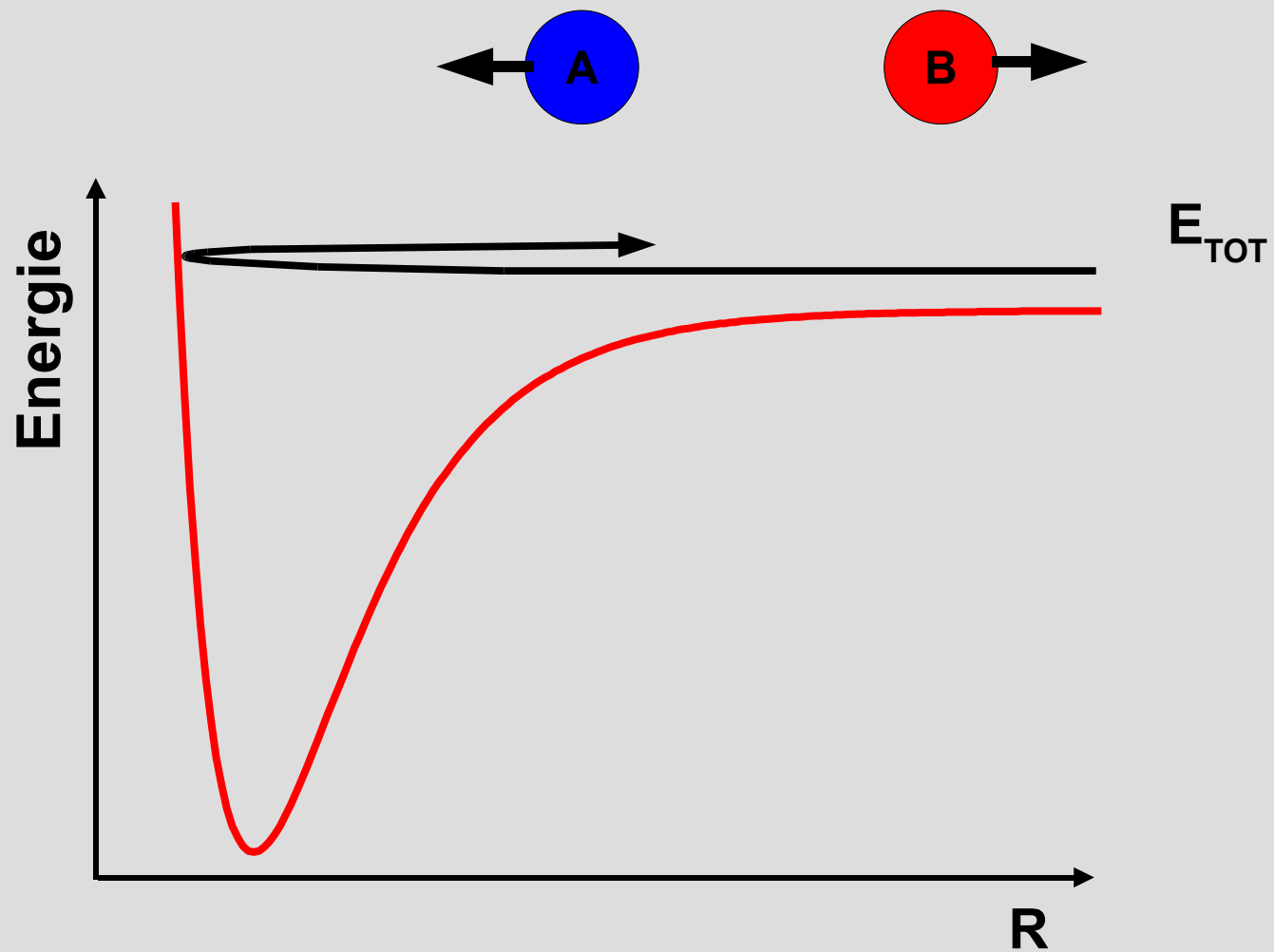
⋮

⋮

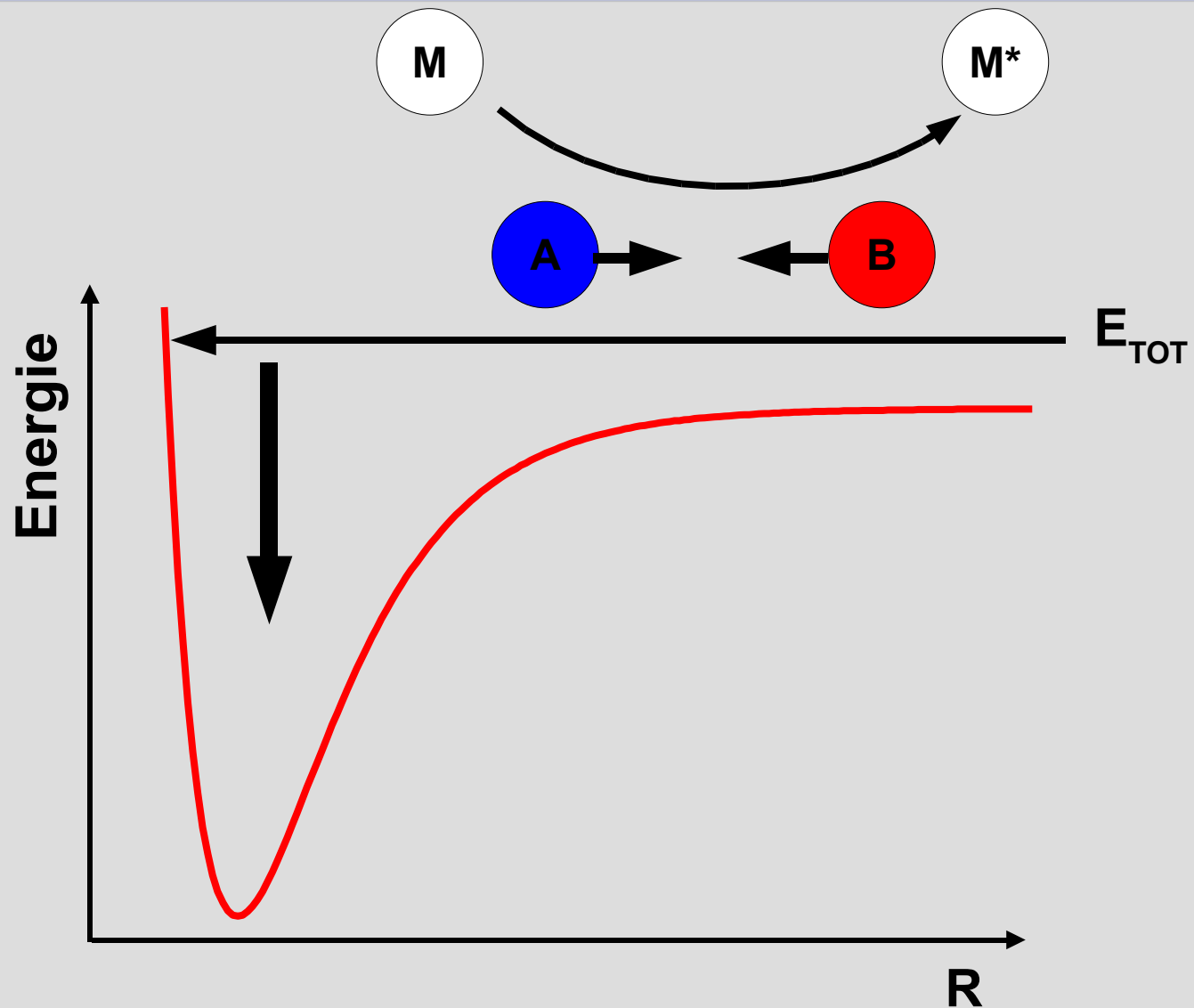
# Elementární kroky tvorby klastrů



# Elementární kroky tvorby klastrů



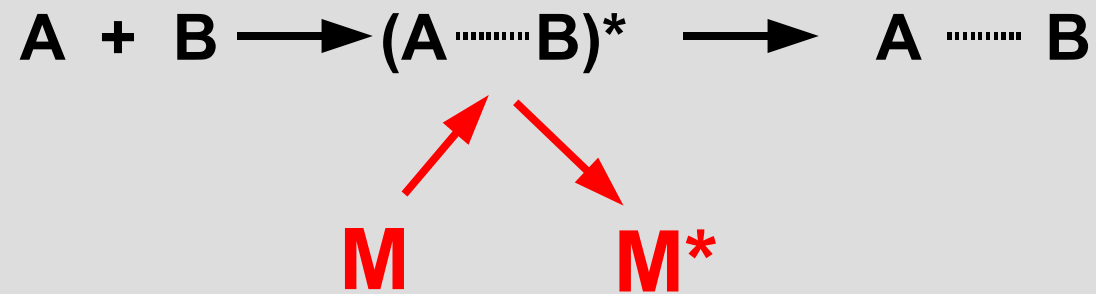
# Elementární kroky tvorby klastrů



# Elementární kroky tvorby klastrů



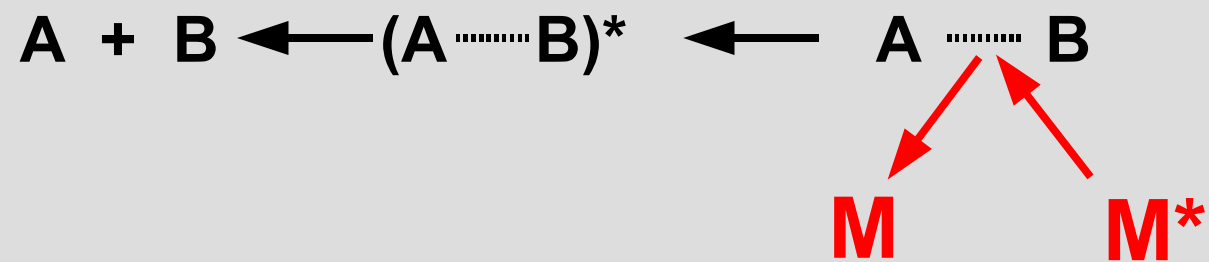
# Elementární kroky tvorby klastrů



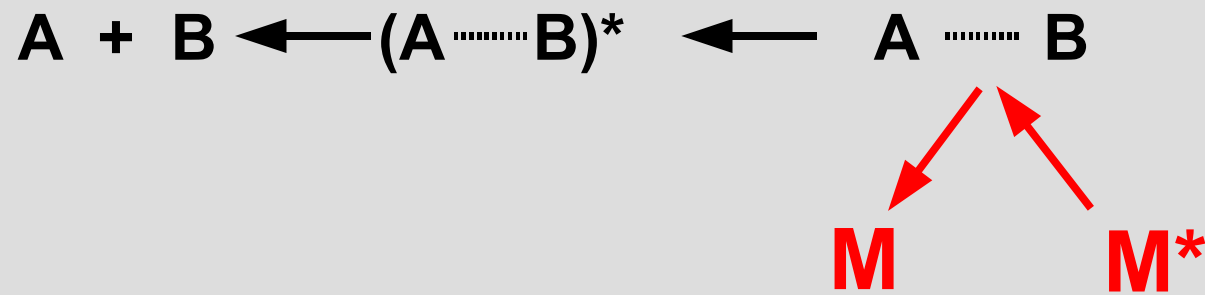
Pro stabilizaci klastrů jsou zapotřebí **trojčásticové** srážky



# Elementární kroky tvorby klastrů



# Elementární kroky tvorby klastrů

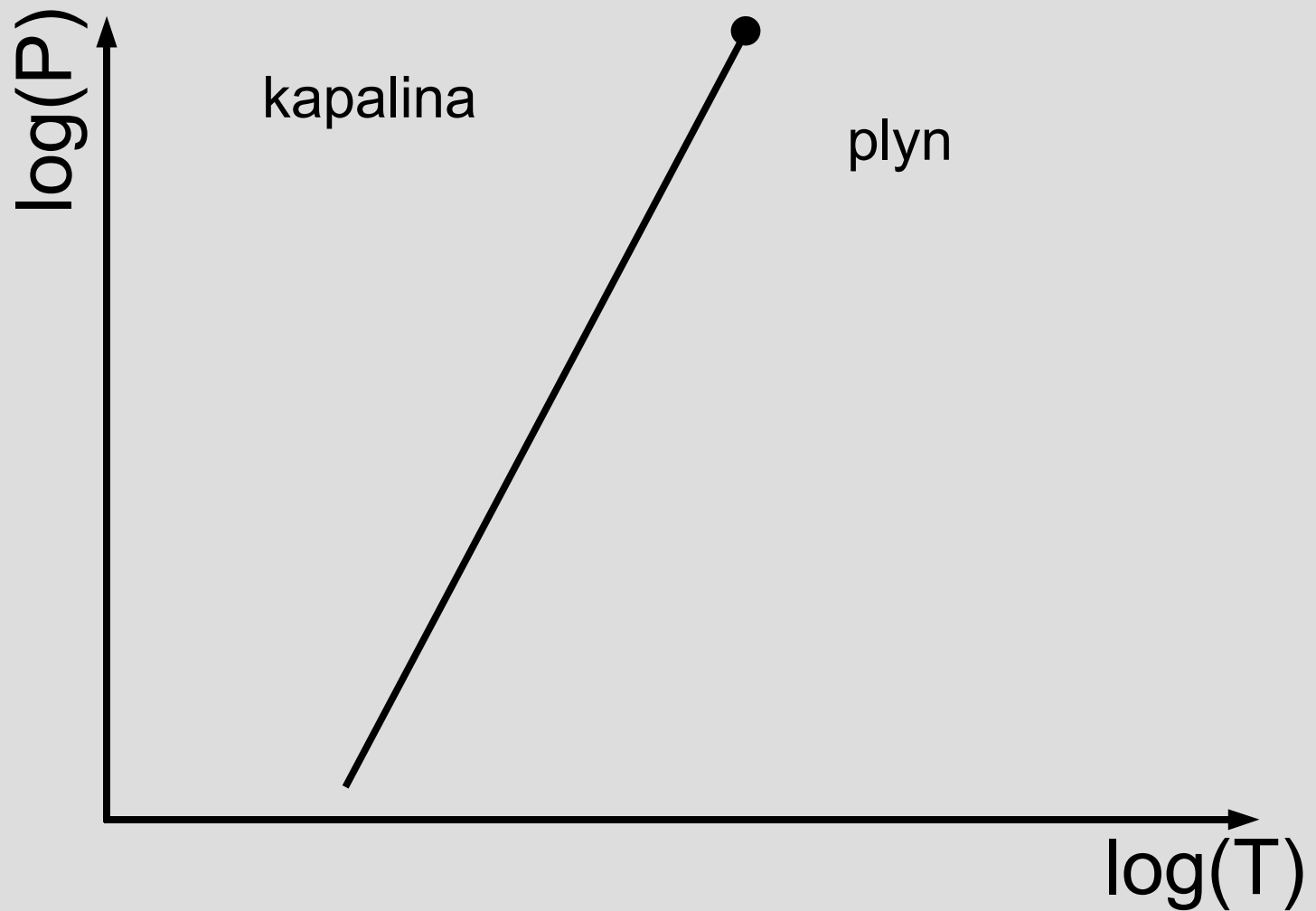


$E_{\text{kol}} \sim k_B T > D_0 \longrightarrow$  **Převládá disociace**

$E_{\text{kol}} \sim k_B T < D_0 \longrightarrow$  **Převládá asociace  $\longrightarrow$  KLASTROVÁNÍ**

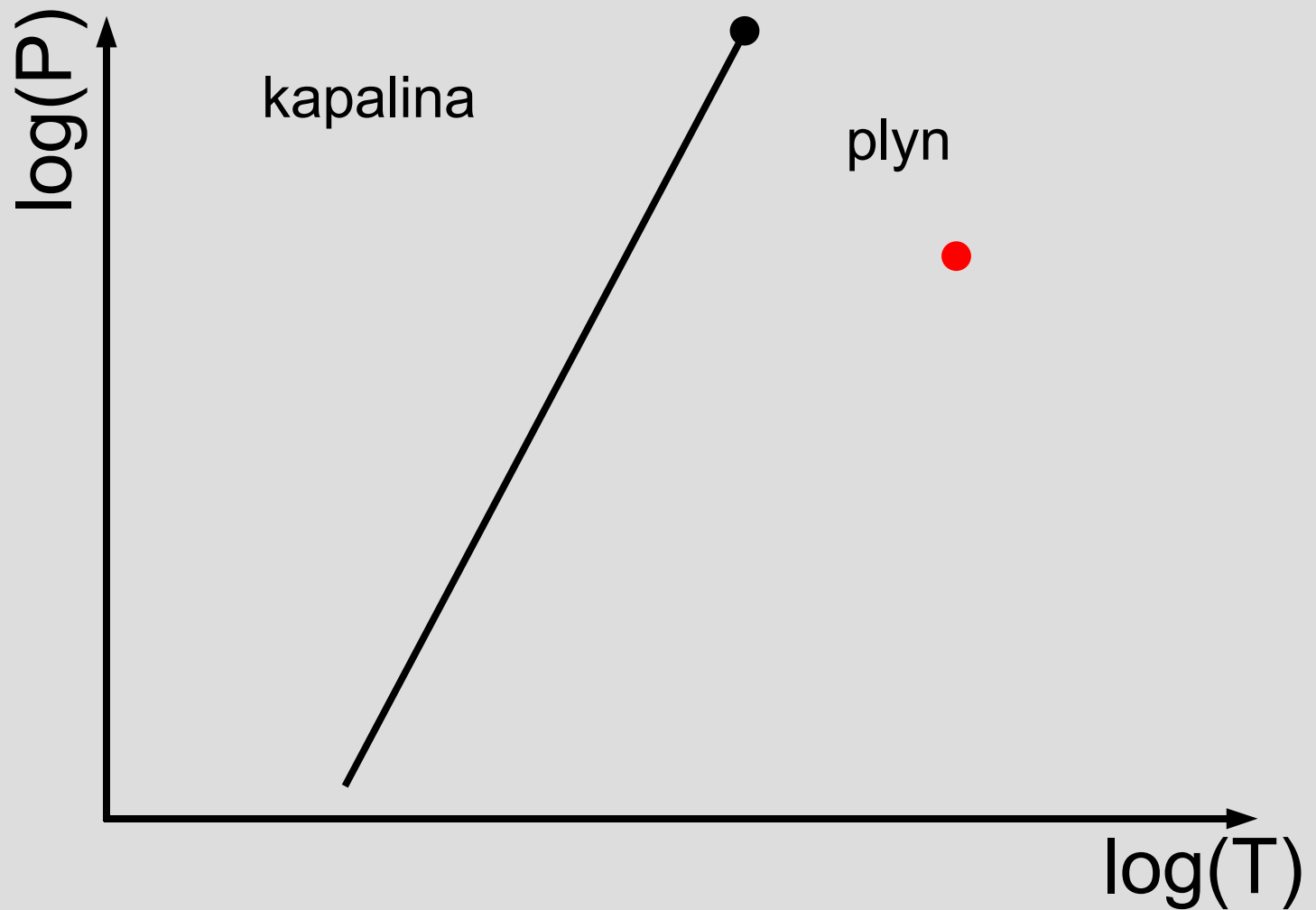
# Tvorba klastrů: termodynamický pohled

P-T diagram



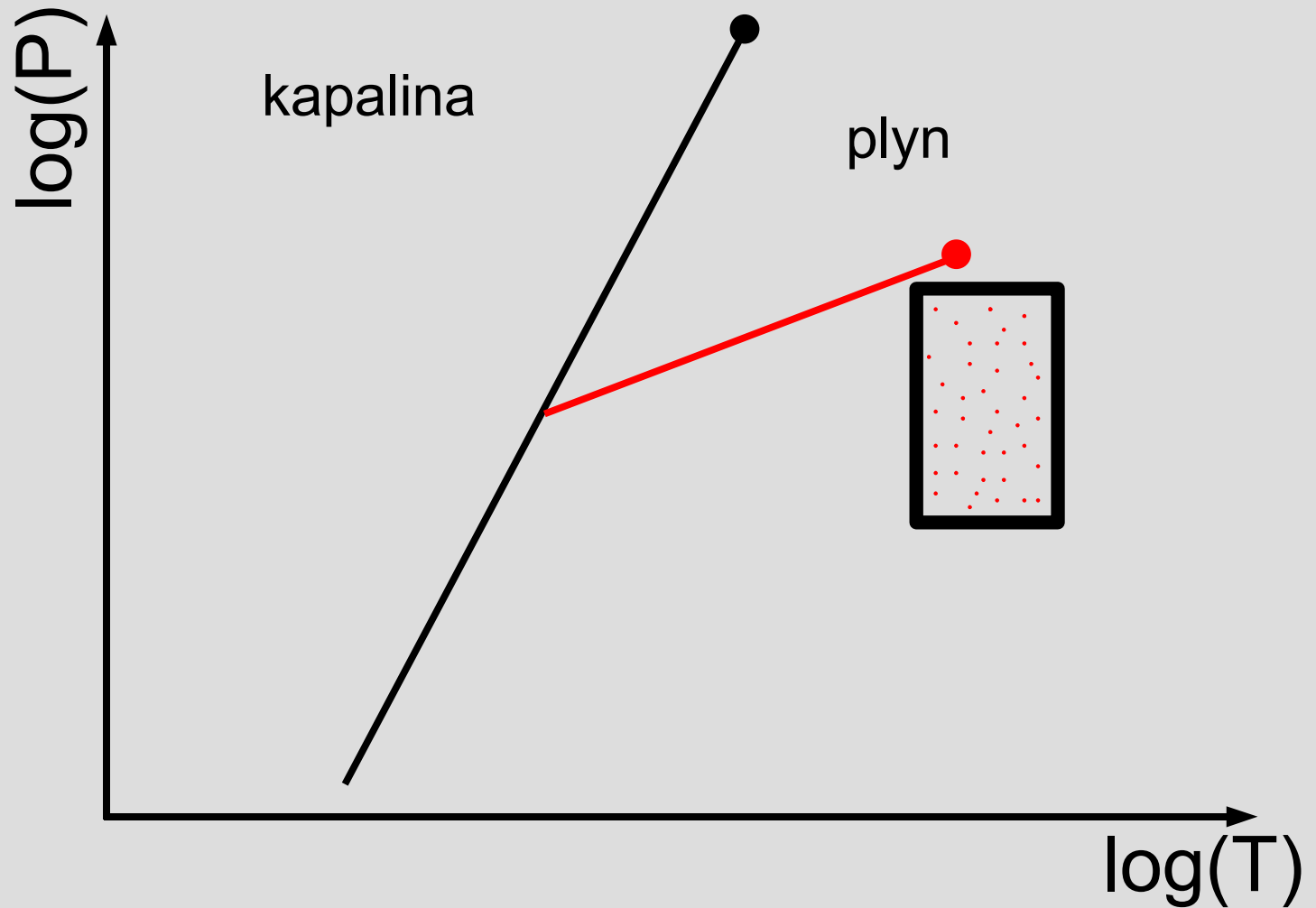
# Tvorba klastrů: termodynamický pohled

P-T diagram



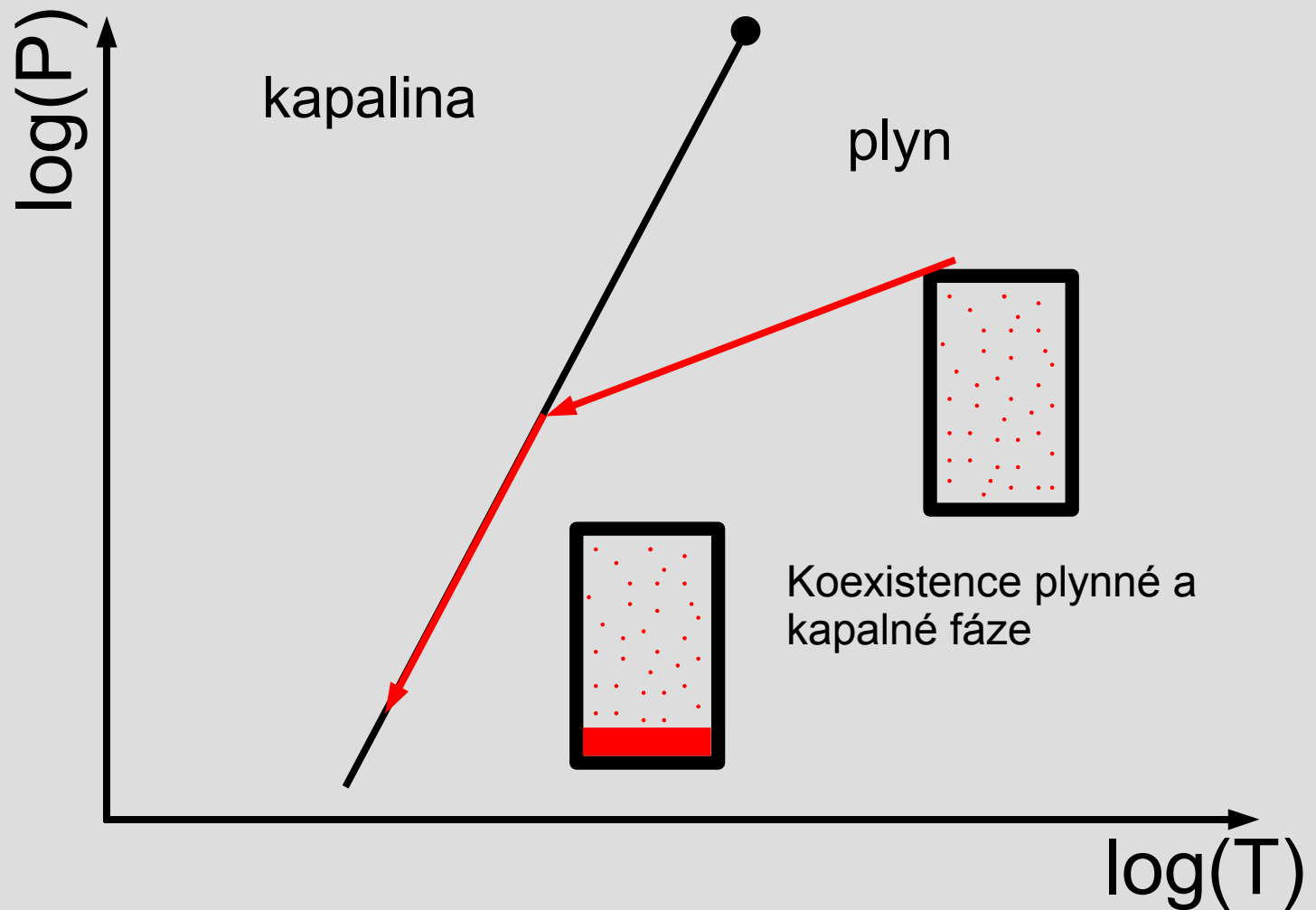
# Tvorba klastrů: termodynamický pohled

P-T diagram



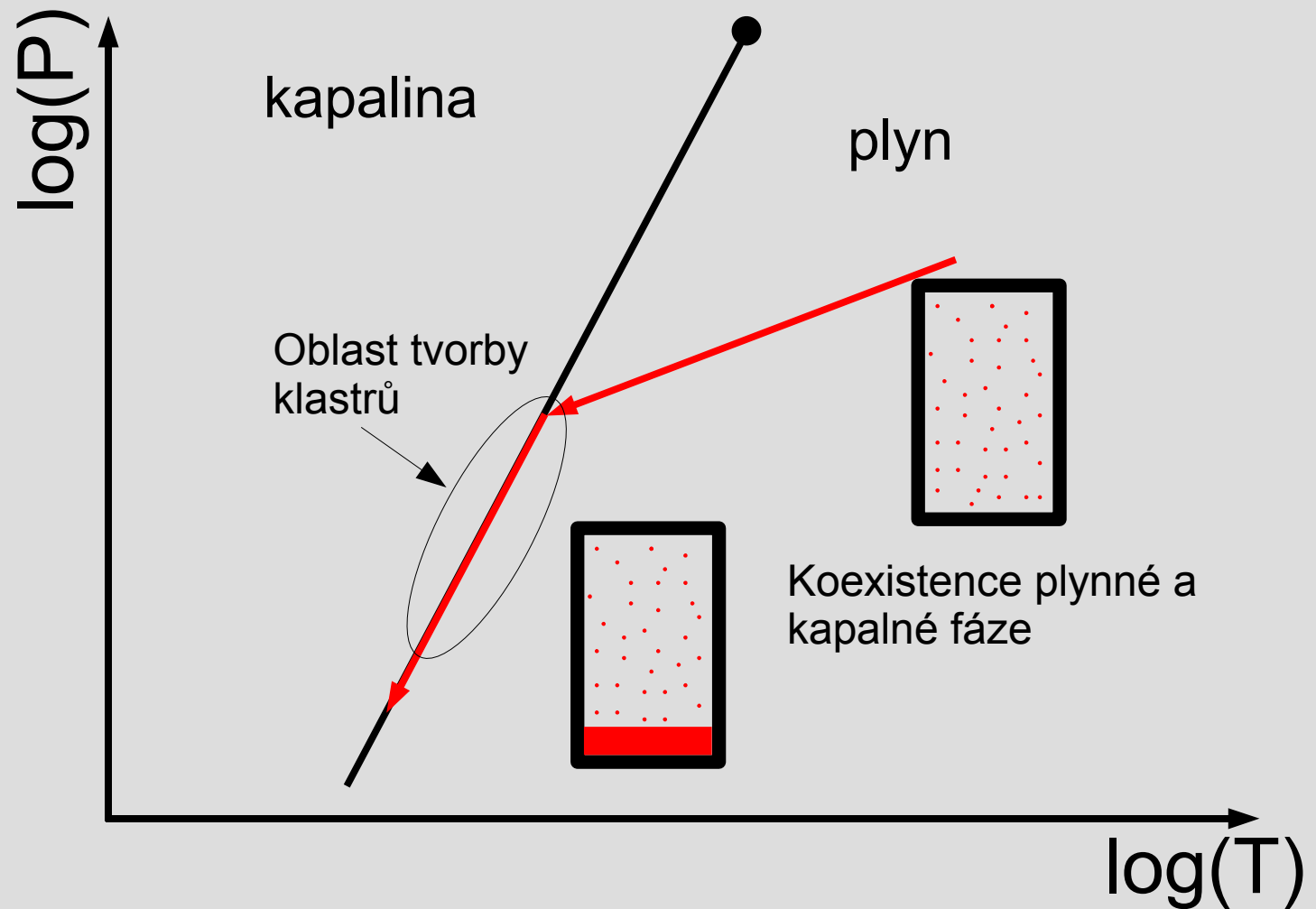
# Tvorba klastrů: termodynamický pohled

P-T diagram



# termodynamický pohled

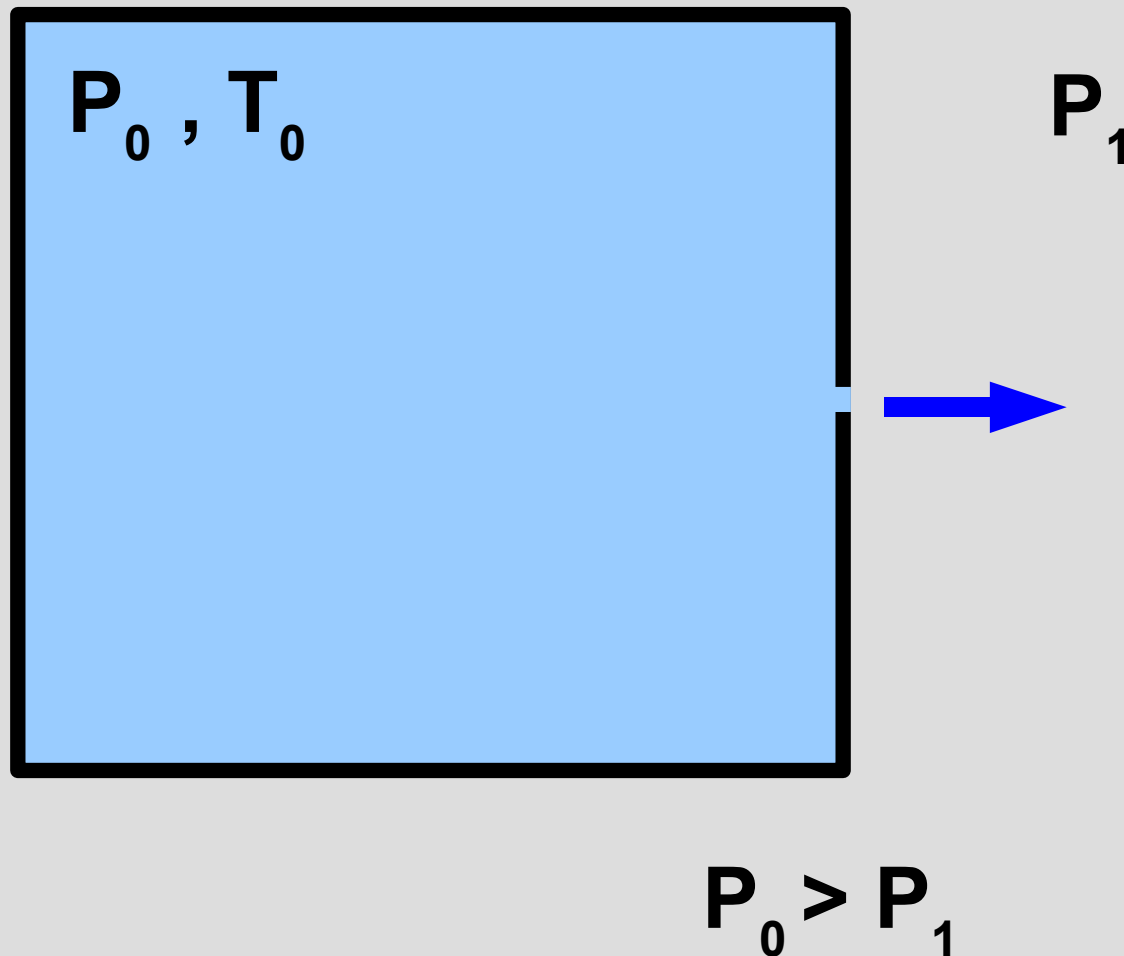
P-T diagram



## **B) Tvorba klastrů v supersonických atomových a molekulových paprscích**



## B) Tvorba klastrů v supersonických atomových a molekulových paprscích

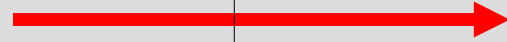


# Proudění tekutiny tryskou

Oblast vysokého tlaku

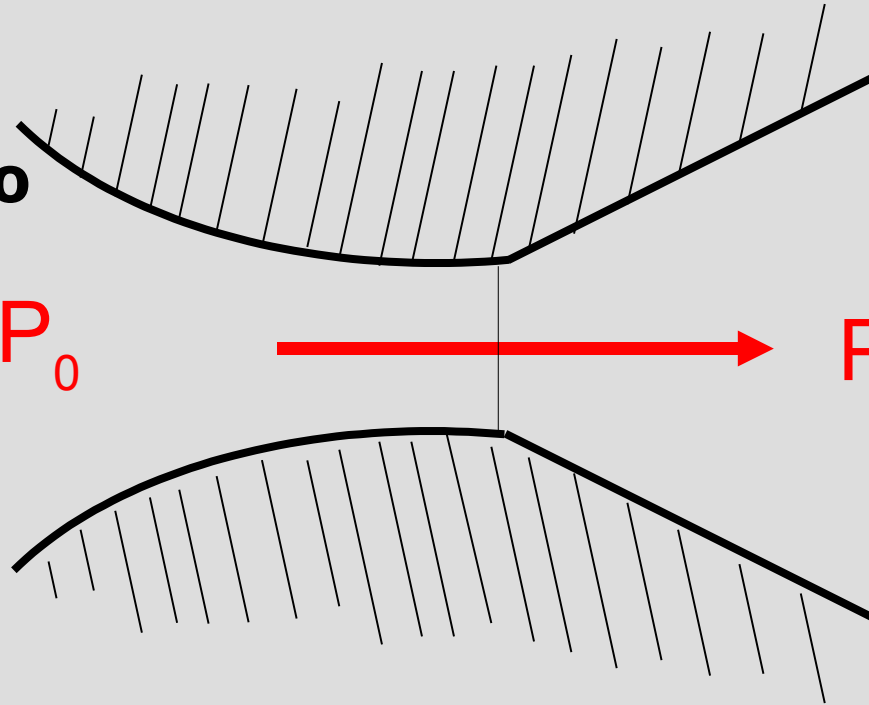
$$v=0, T=T_0$$

$P_0$



$P_1$

Oblast nízkého tlaku





# Proudění tekutiny tryskou

Oblast vysokého tlaku

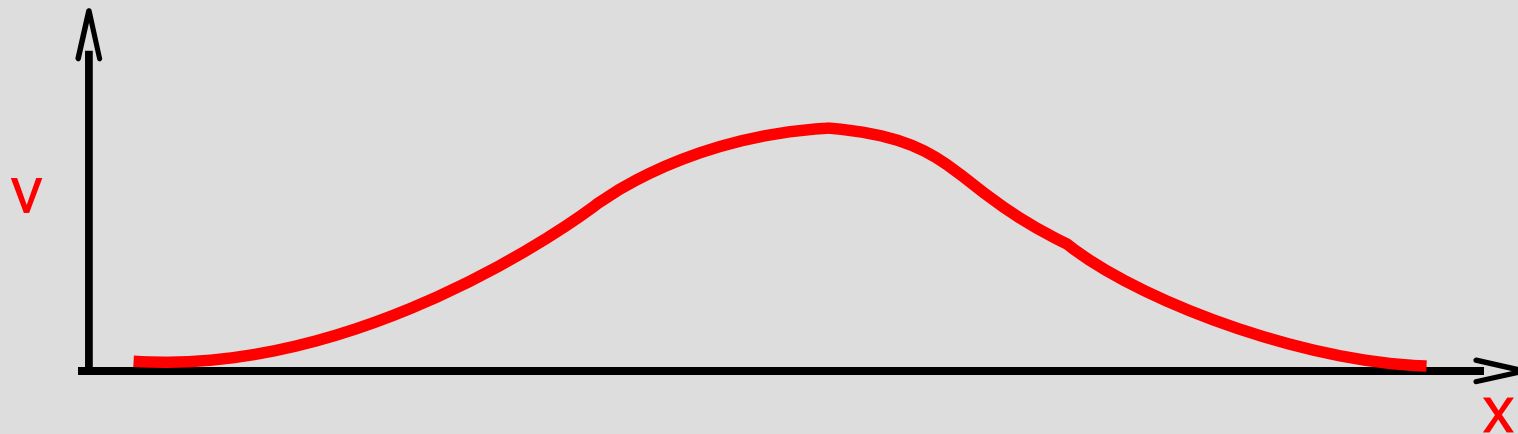
$$v=0, T=T_0$$

$$P_0$$

Oblast nízkého tlaku

$$P_1$$

$$M > 1, T < T_0$$



# Proudění tekutiny tryskou

Oblast vysokého tlaku

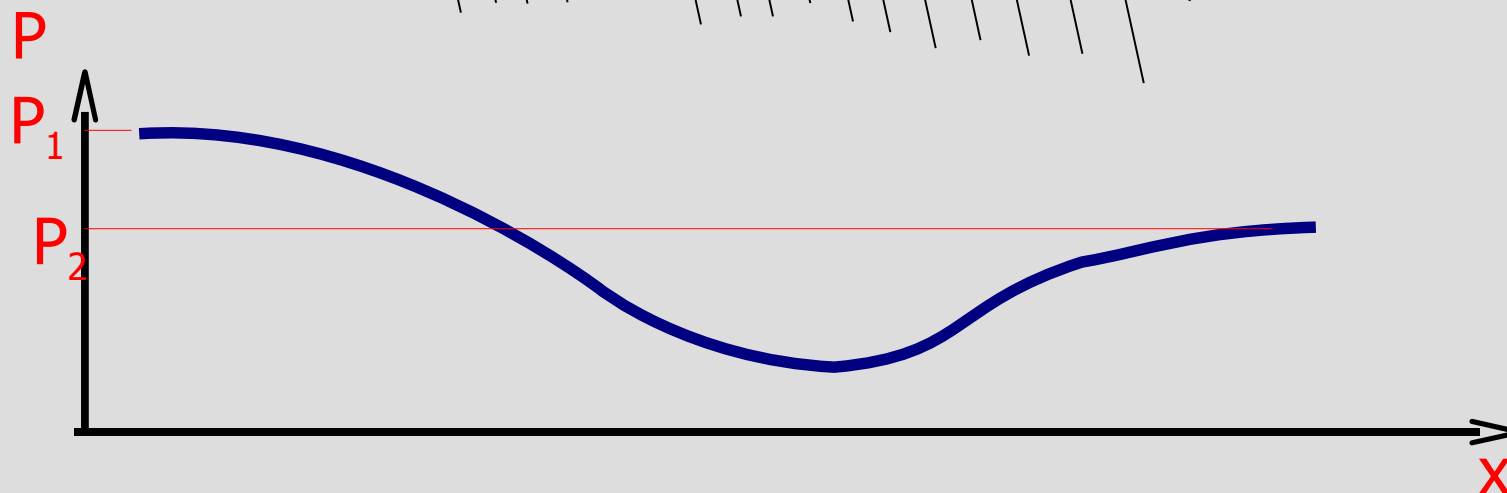
$$v=0, T=T_0$$

$P_0$



$P_1$

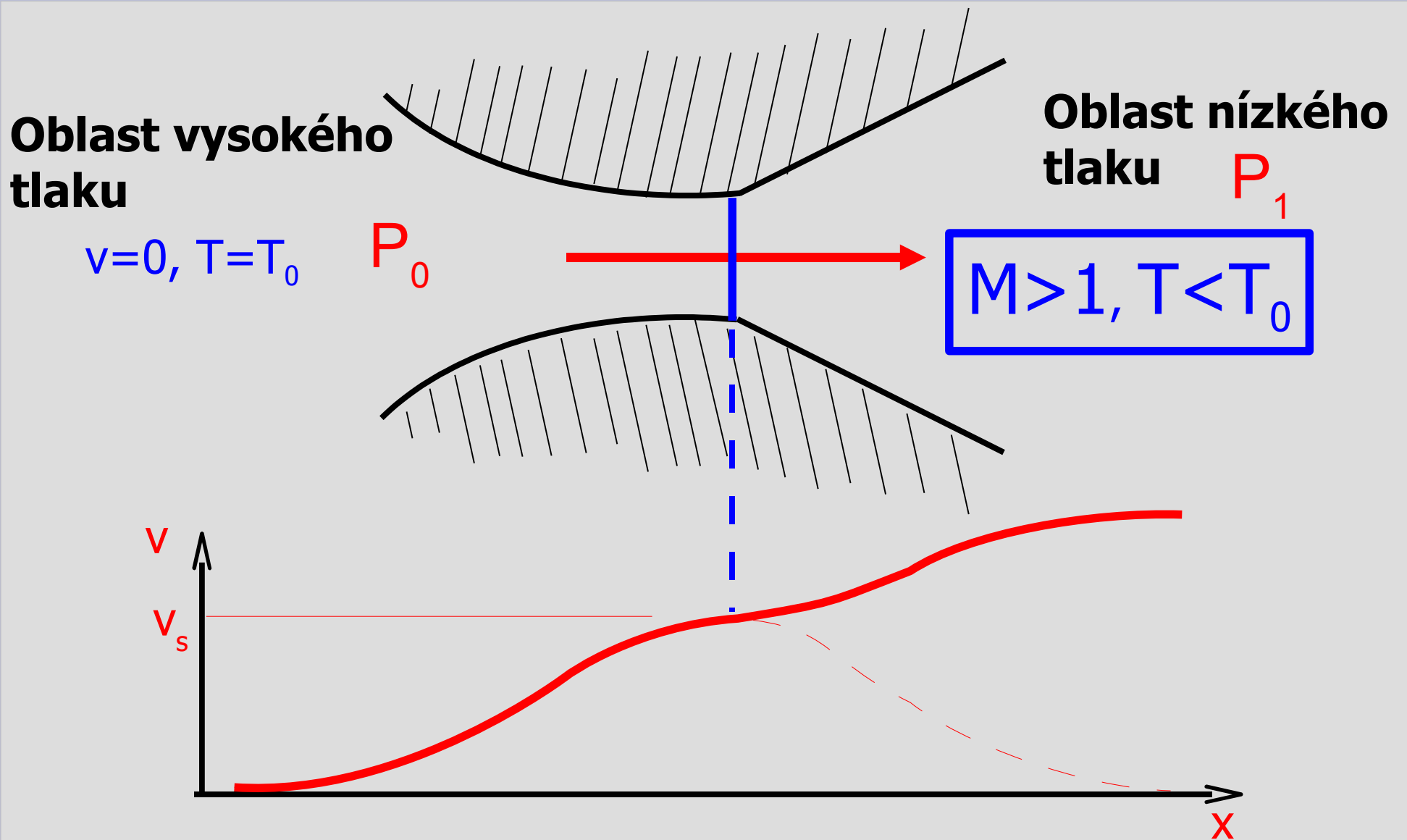
Oblast nízkého tlaku





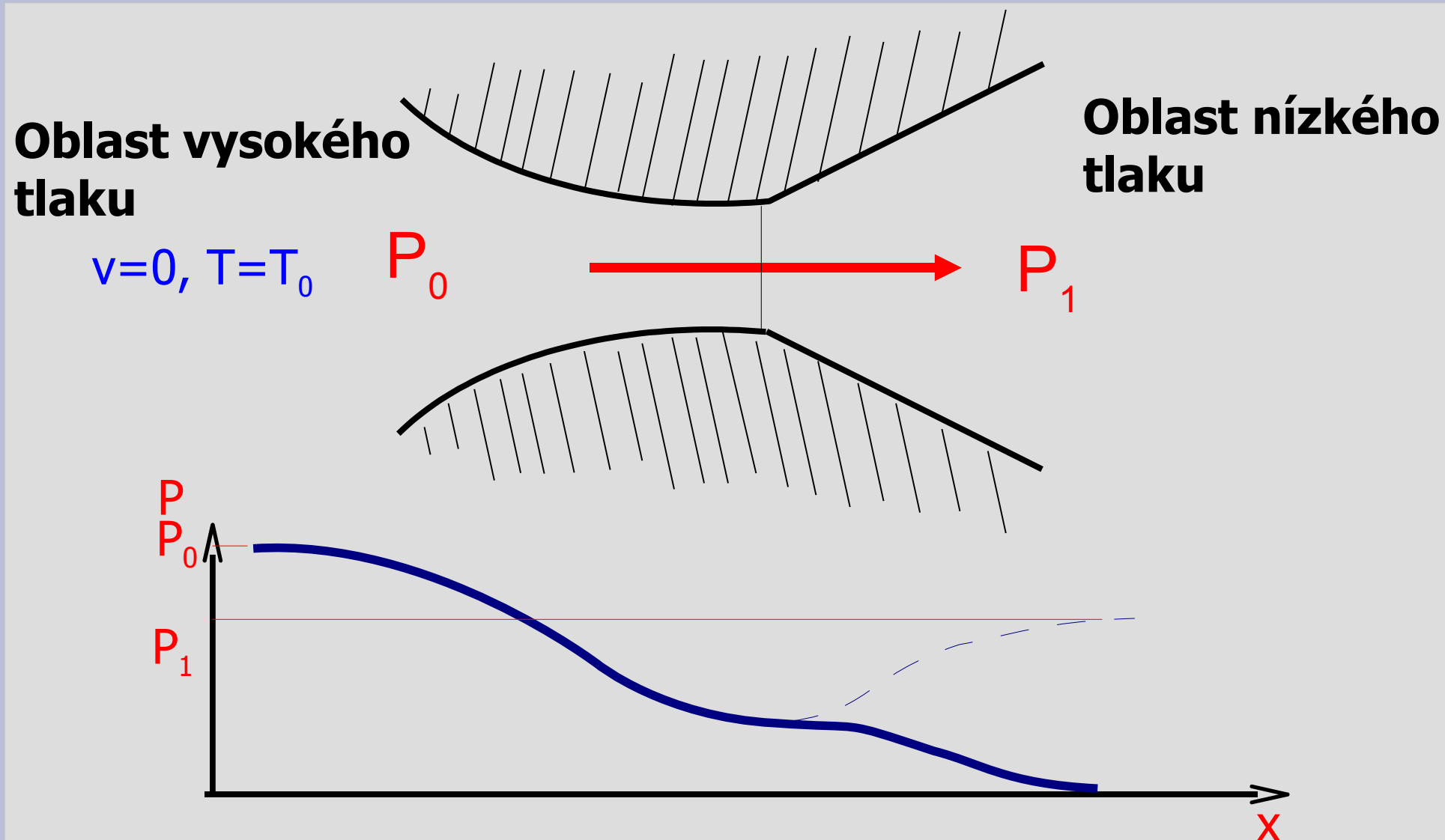
# Proudění tekutiny tryskou

přechod k nadzvukovému proudění



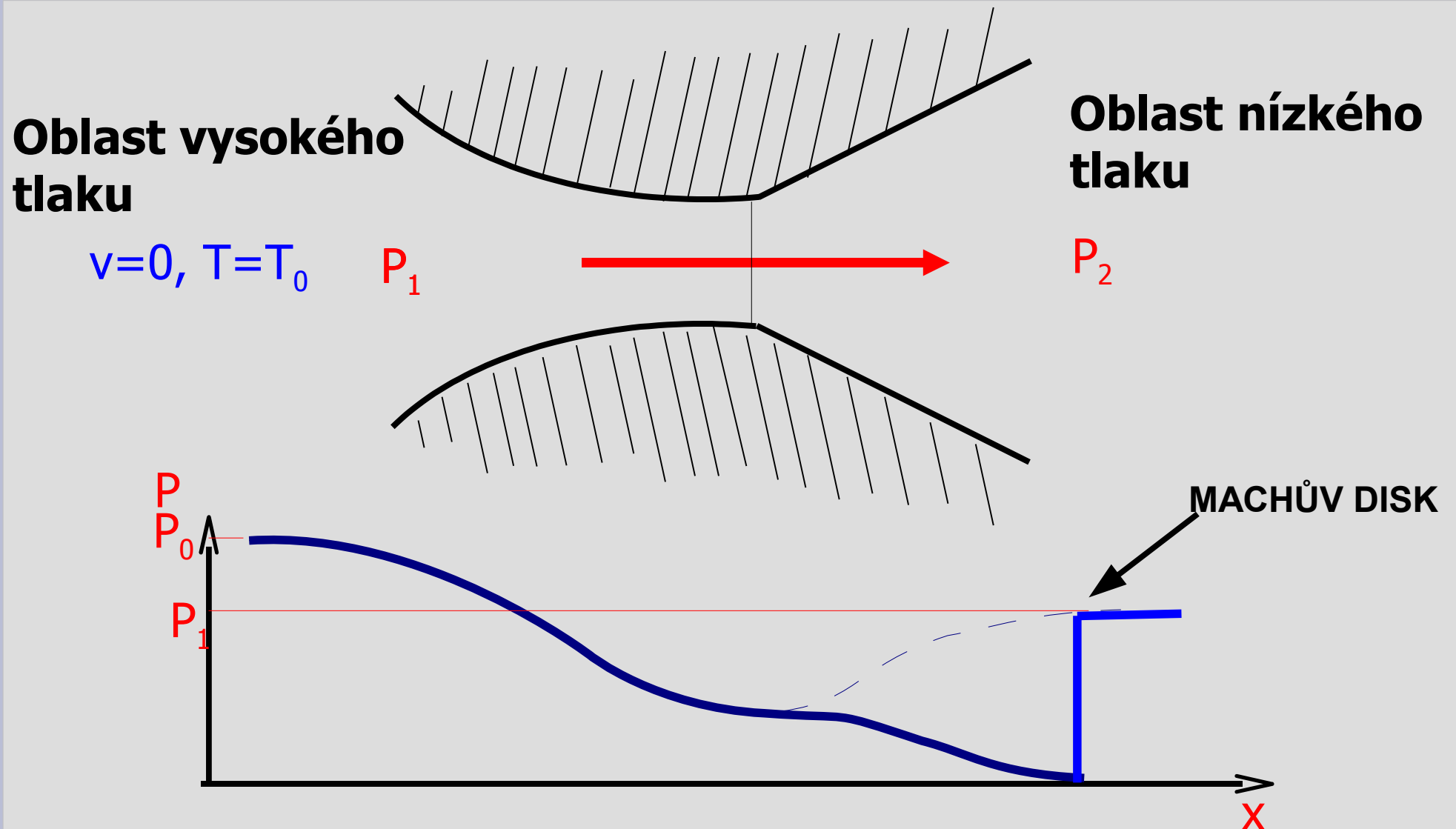
# Proudění tekutiny tryskou

přechod k nadzvukovému proudění

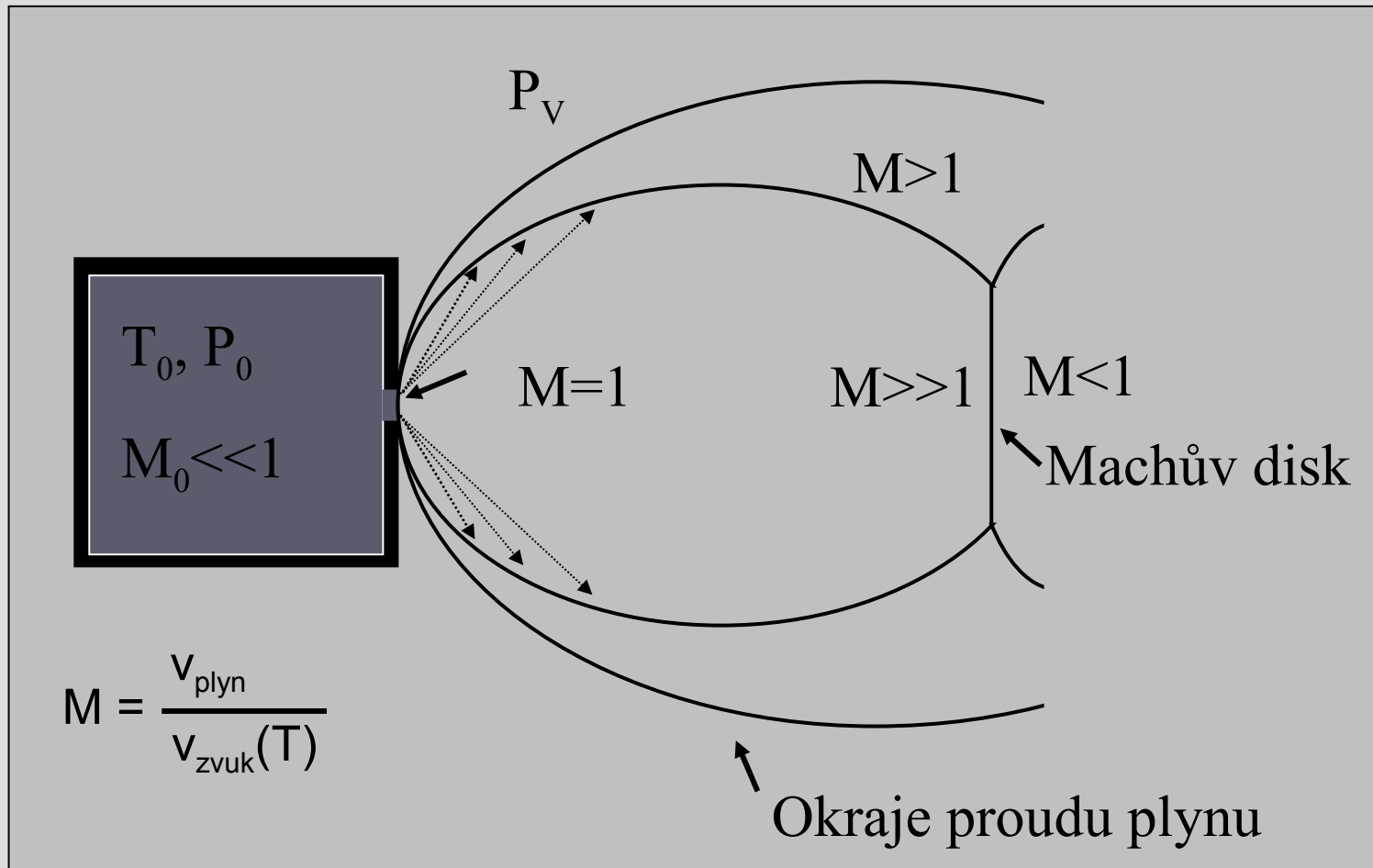


# Proudění tekutiny tryskou

## vznik Machova disku



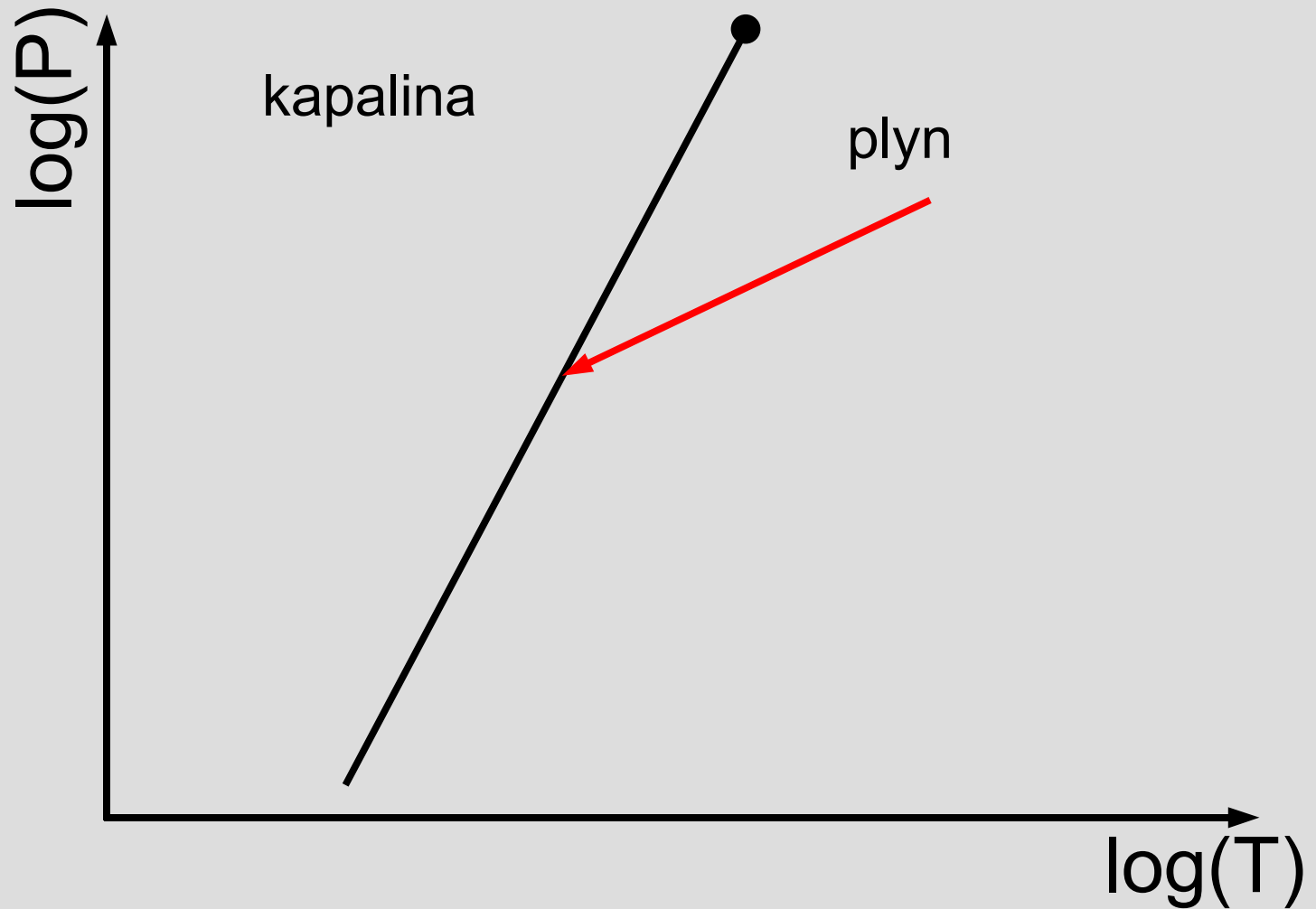
# Supersonická expanze volné trysky





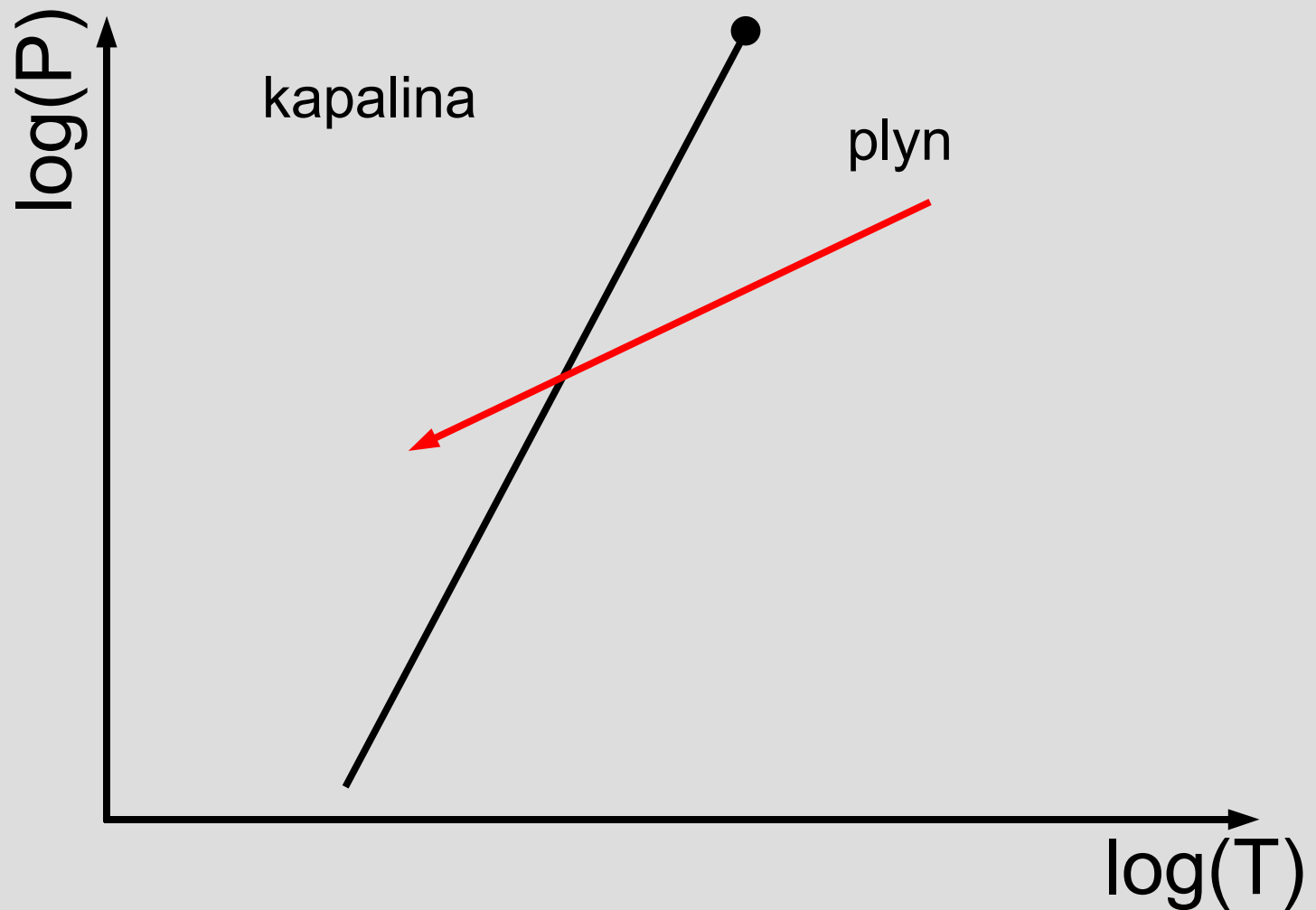
# Nerovnovážná termodynamika v trysce: supersaturace

P-T diagram



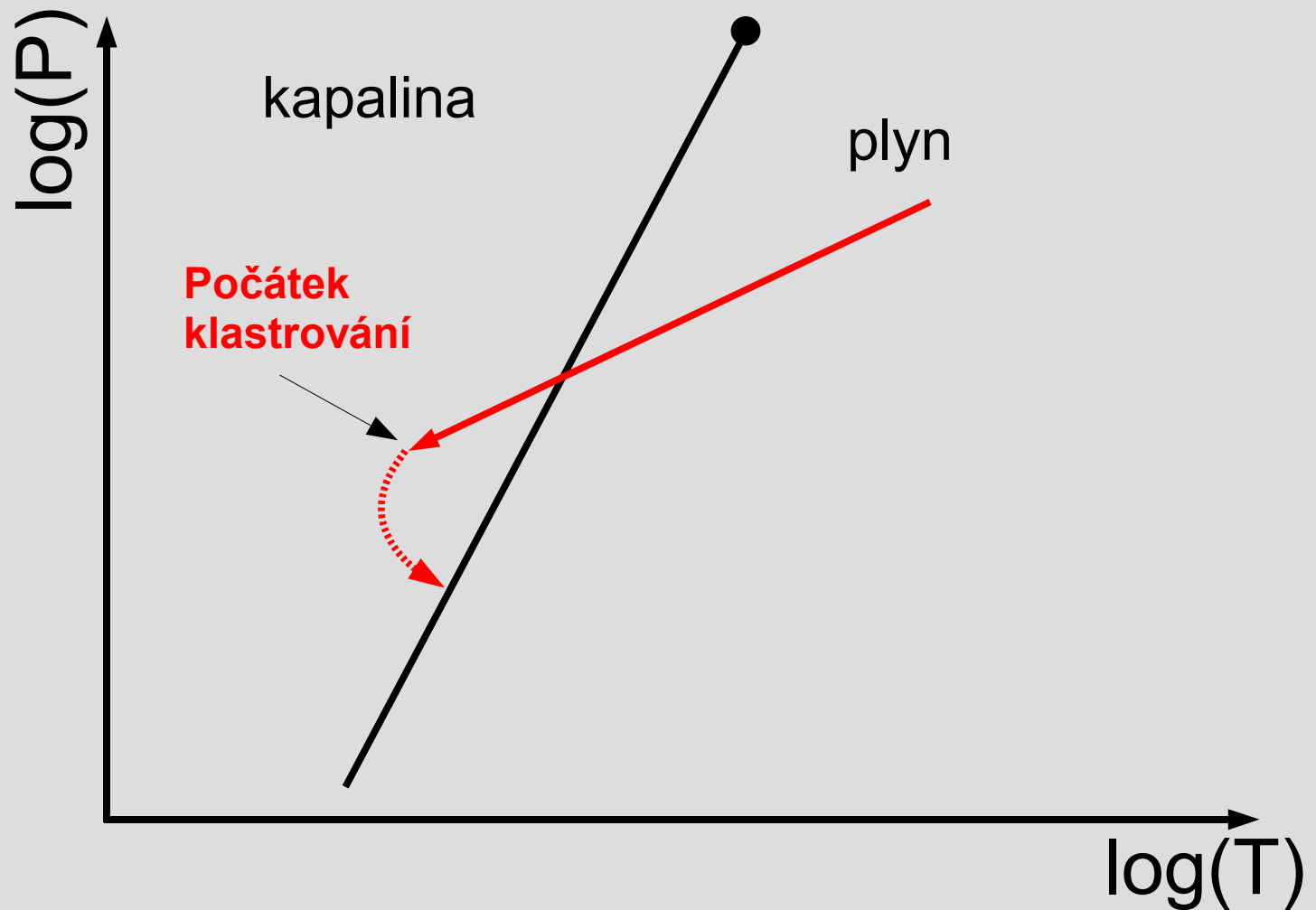
# Nerovnovážná termodynamika v trysce: supersaturace

P-T diagram



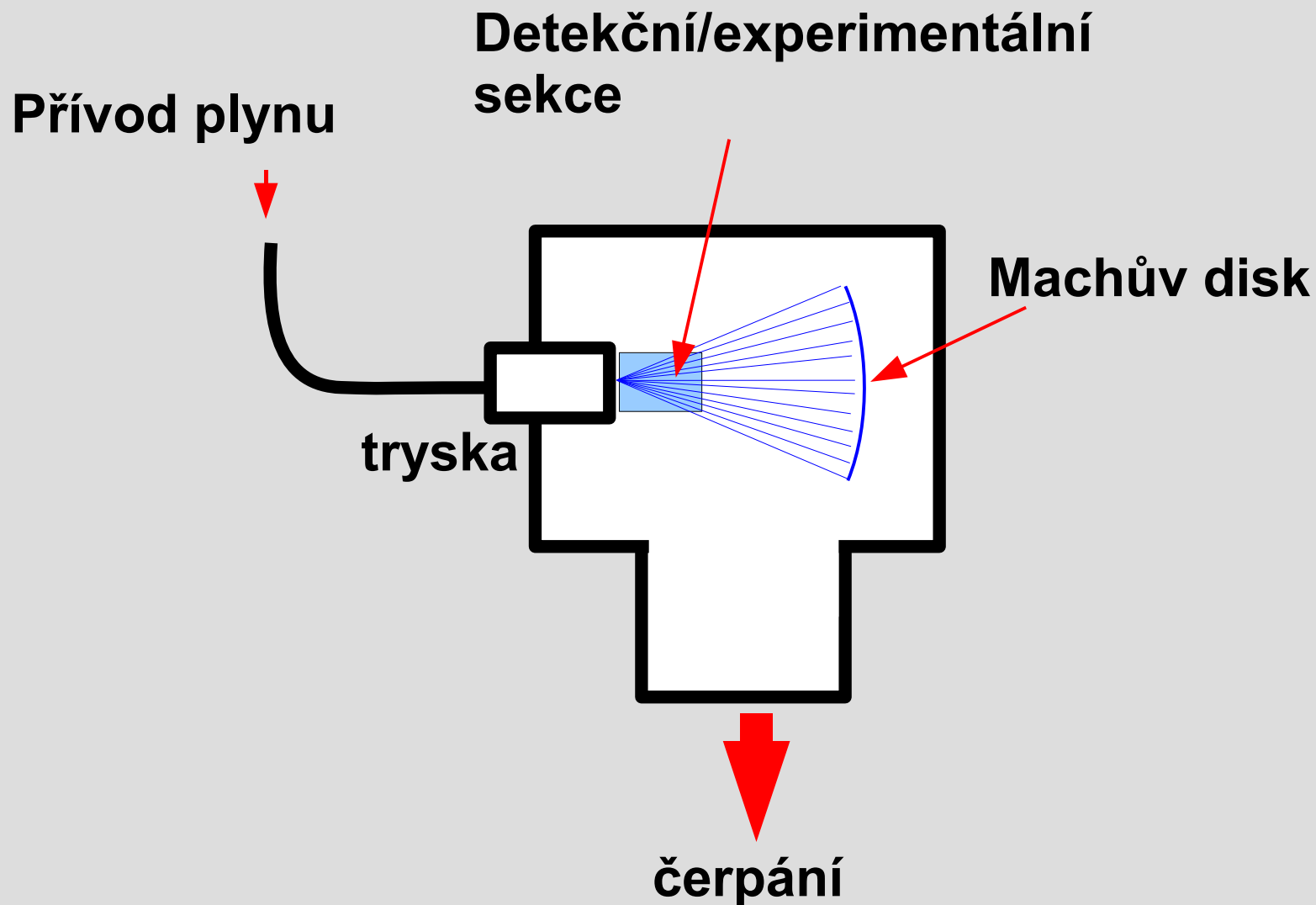
# Nerovnovážná termodynamika v trysce: supersaturace

P-T diagram



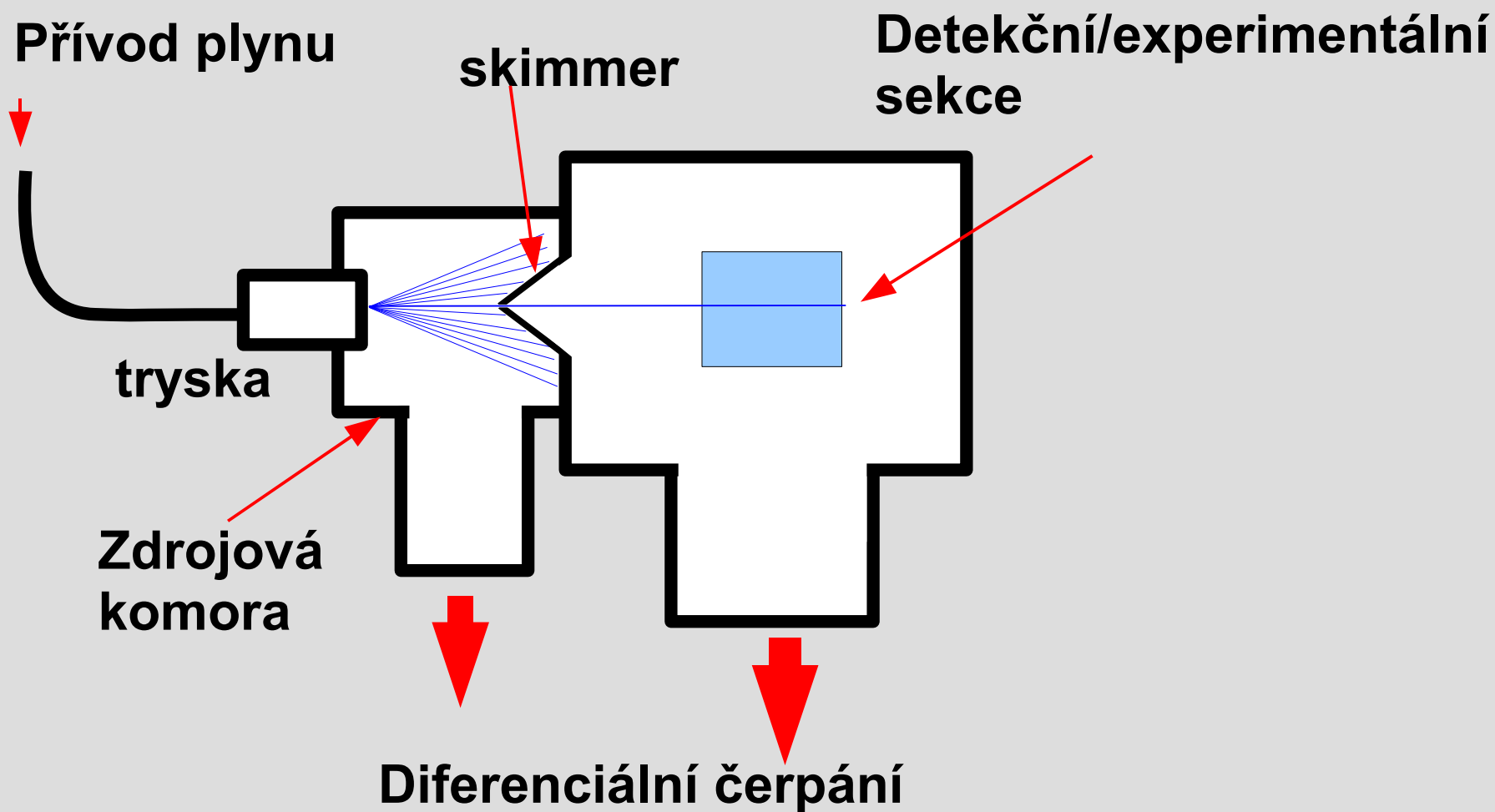
# Typická experimentální uspořádání

## Volná supersonická expanze



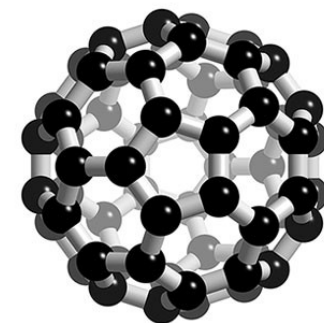
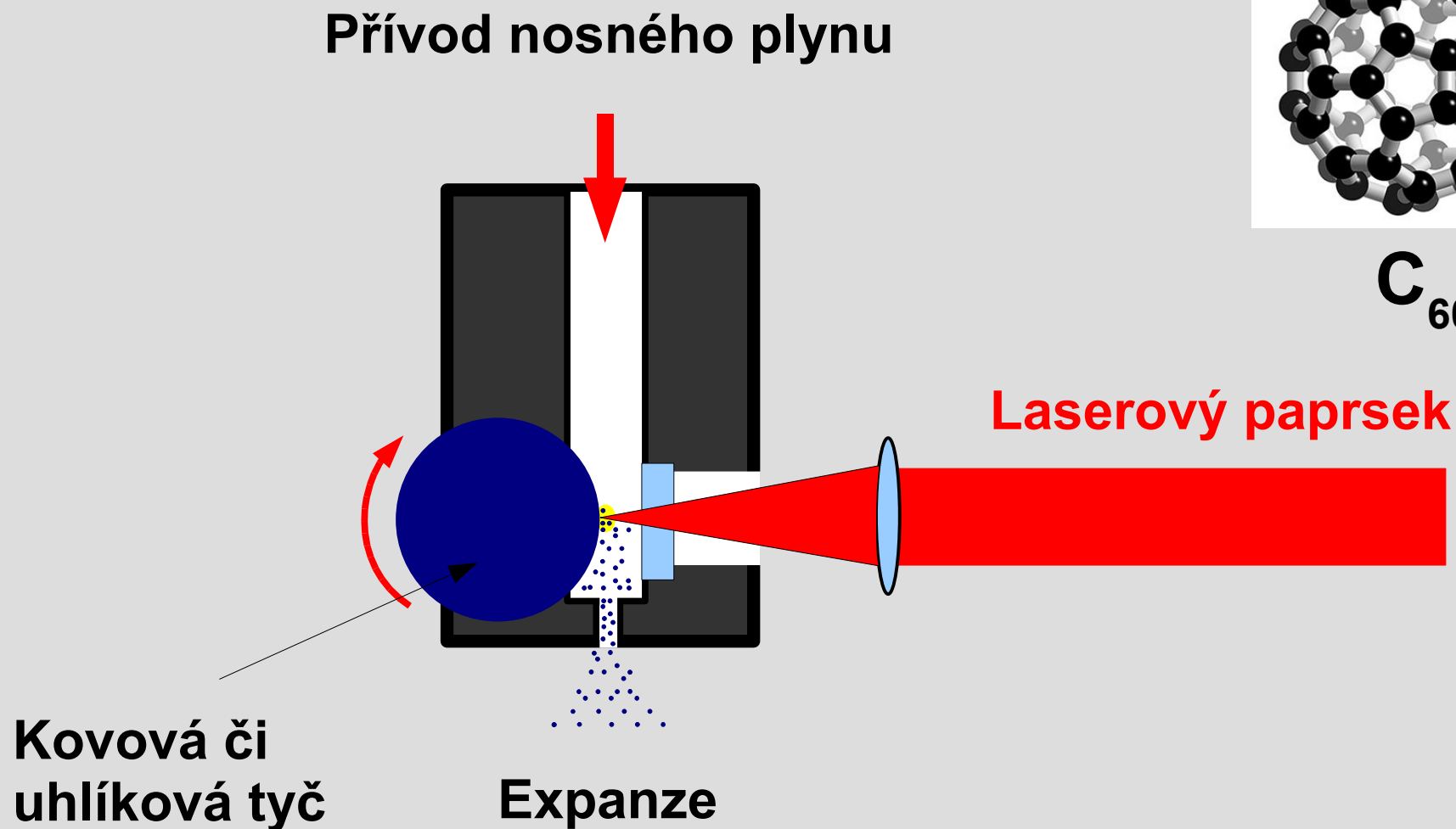
# Typická experimentální uspořádání

## Kolimovaný molekulový paprsek:



# Typická experimentální uspořádání

## Ablační zdroj pro kovové a uhlíkaté klastry



$C_{60}$

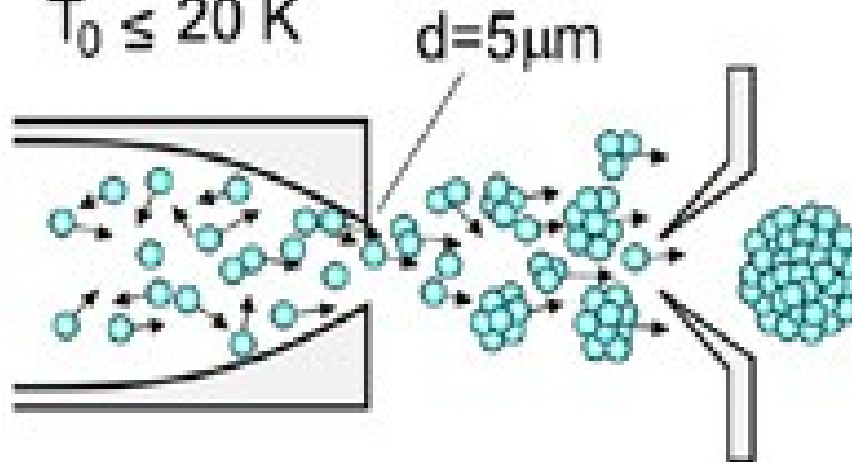
# Typická experimentální uspořádání

## Zdroj heliových nanokapiček

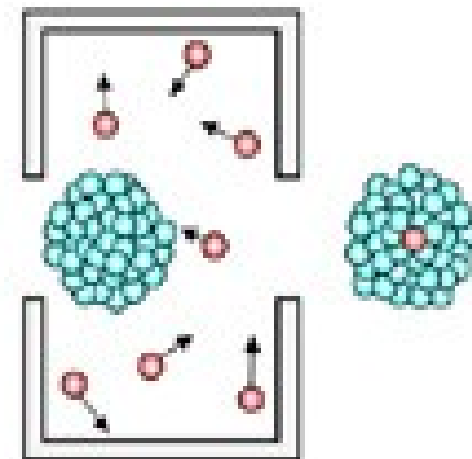
### Nízkoteplotní tryska

$$P_0 \geq 20 \text{ bar}$$

$$T_0 \leq 20 \text{ K}$$



### Pick-up komůrka



## **C) Metody detekce klastrů v molekulových paprscích**

**...záleží na tom co měříme:**

**Základní charakteristiky molekulového paprsku:**

- Teplota expanze**
- rozložení velikostí klastrů**
- hustota paprsku**

**...a hlavně nás většinou zajímá  
vnitřní struktura a vlastnosti klastrů**



## **C) Metody detekce klastrů v molekulových paprscích**

**Obecně požadujeme:**

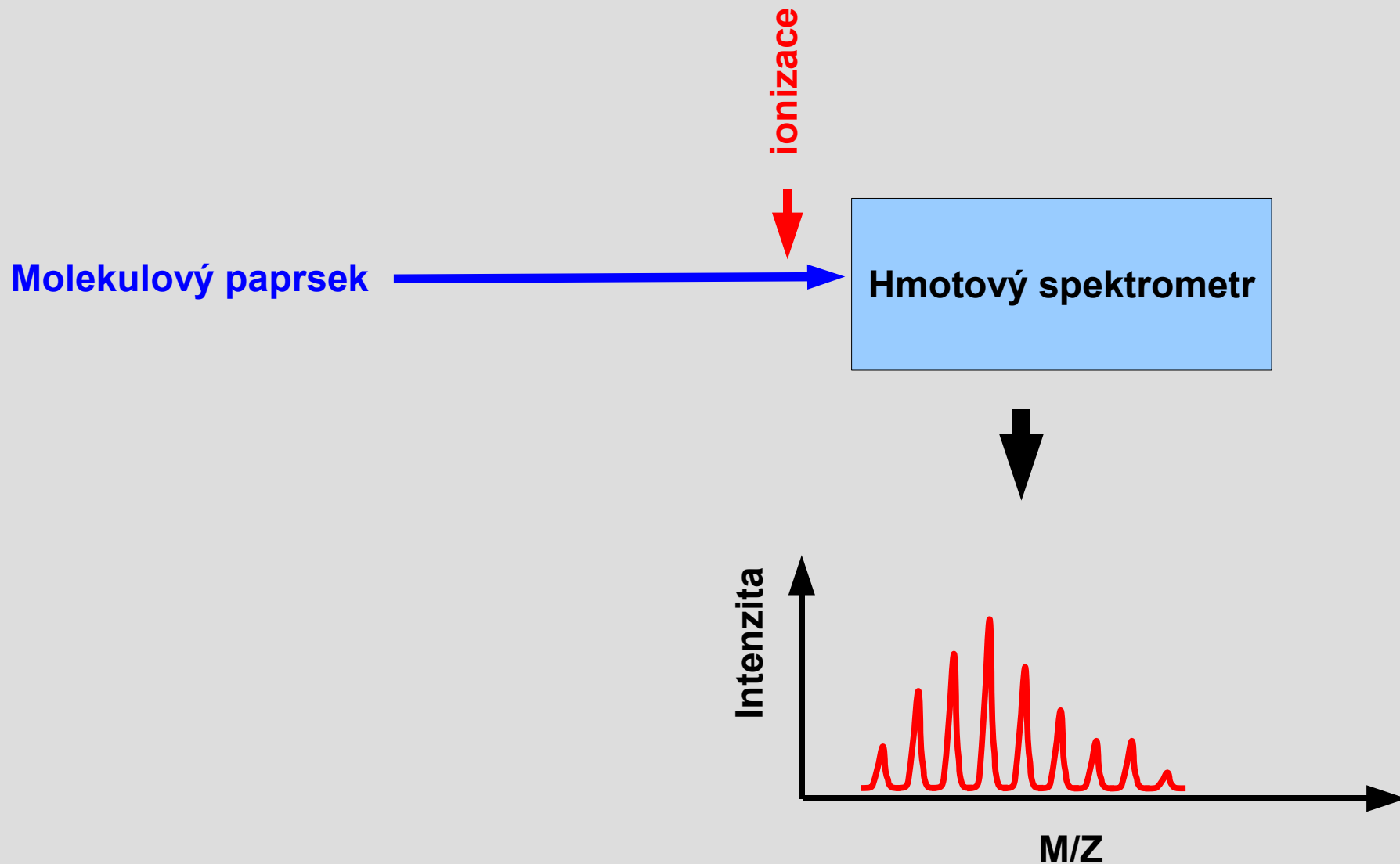
- **vysokou citlivost**
- **imunitu ke zbytkovému plynu**

**Nabízejí se metody:**

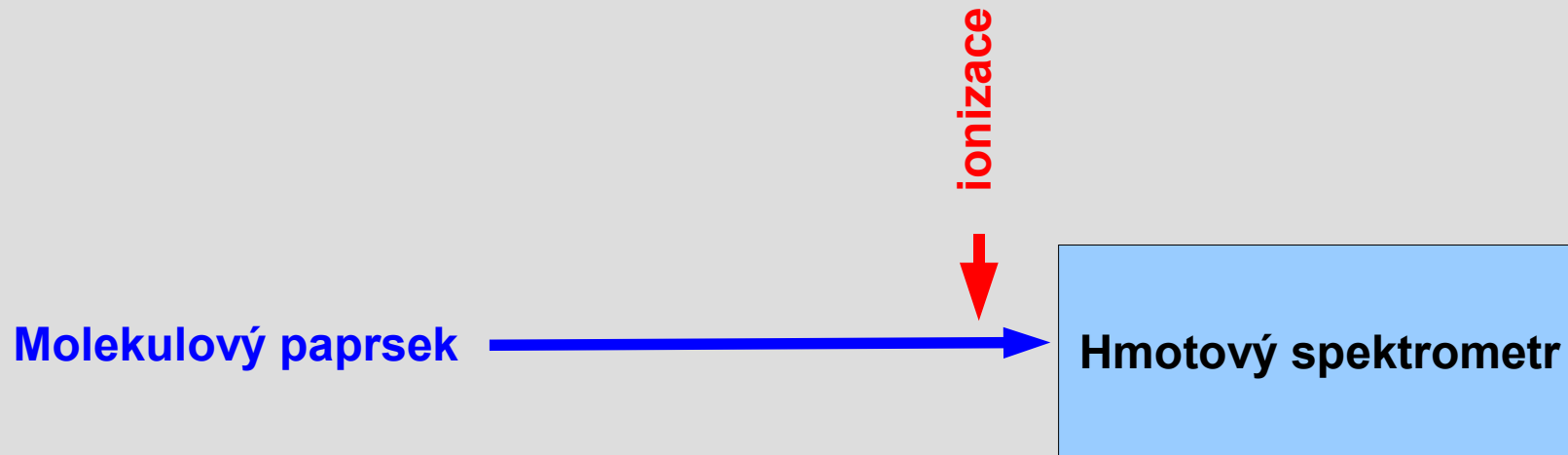
- **Hmotová spektrometrie**
- **Optické metody**
- **Metody zkřížených paprsků**

**.....a jejich kombinace**

# Hmotová spektrometrie

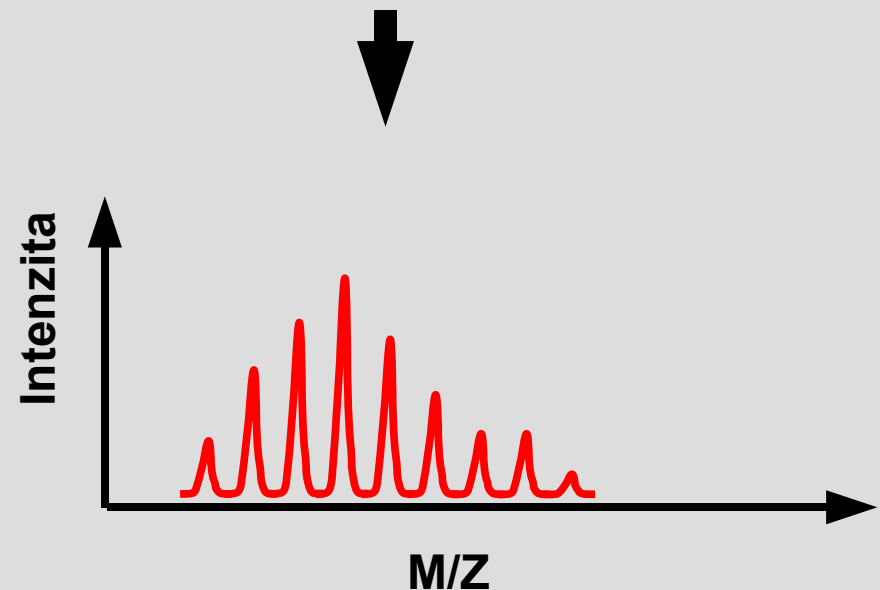


# Hmotová spektrometrie

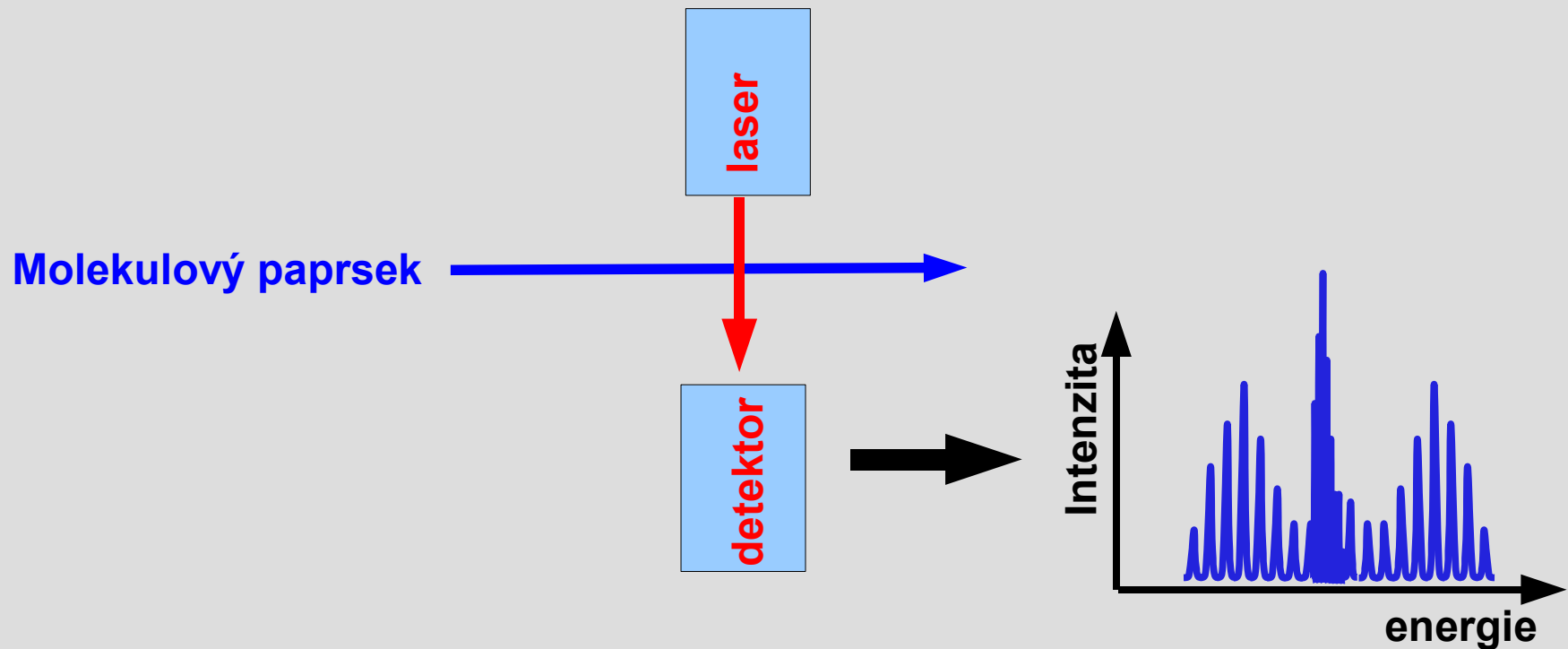


- + vysoká citlivost
- + rozložení velikostí klastrů

- problémy s fragmentací
- neposkytuje informac  
o vnitřní struktuře klastrů



# Spektroskopické metody:

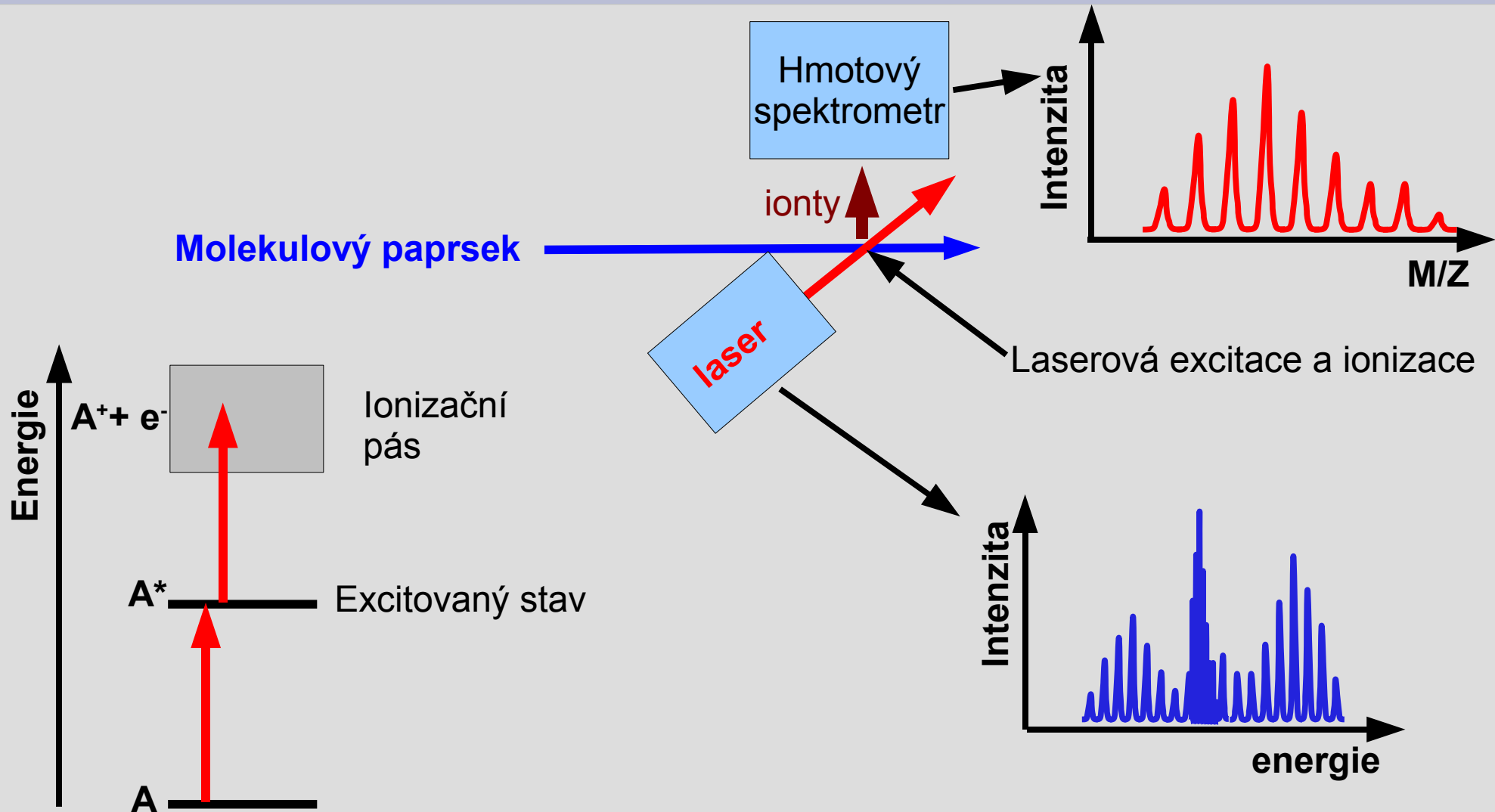


+ dává informaci o struktuře a vnitřních stavech  
(elektronické stavy, vibrační, rotační ...)

-často nižší citlivost

-problémy s rozlišením velikostí klastrů

# REMPI: kombinace spektroskopie a hmotové spektrometrie



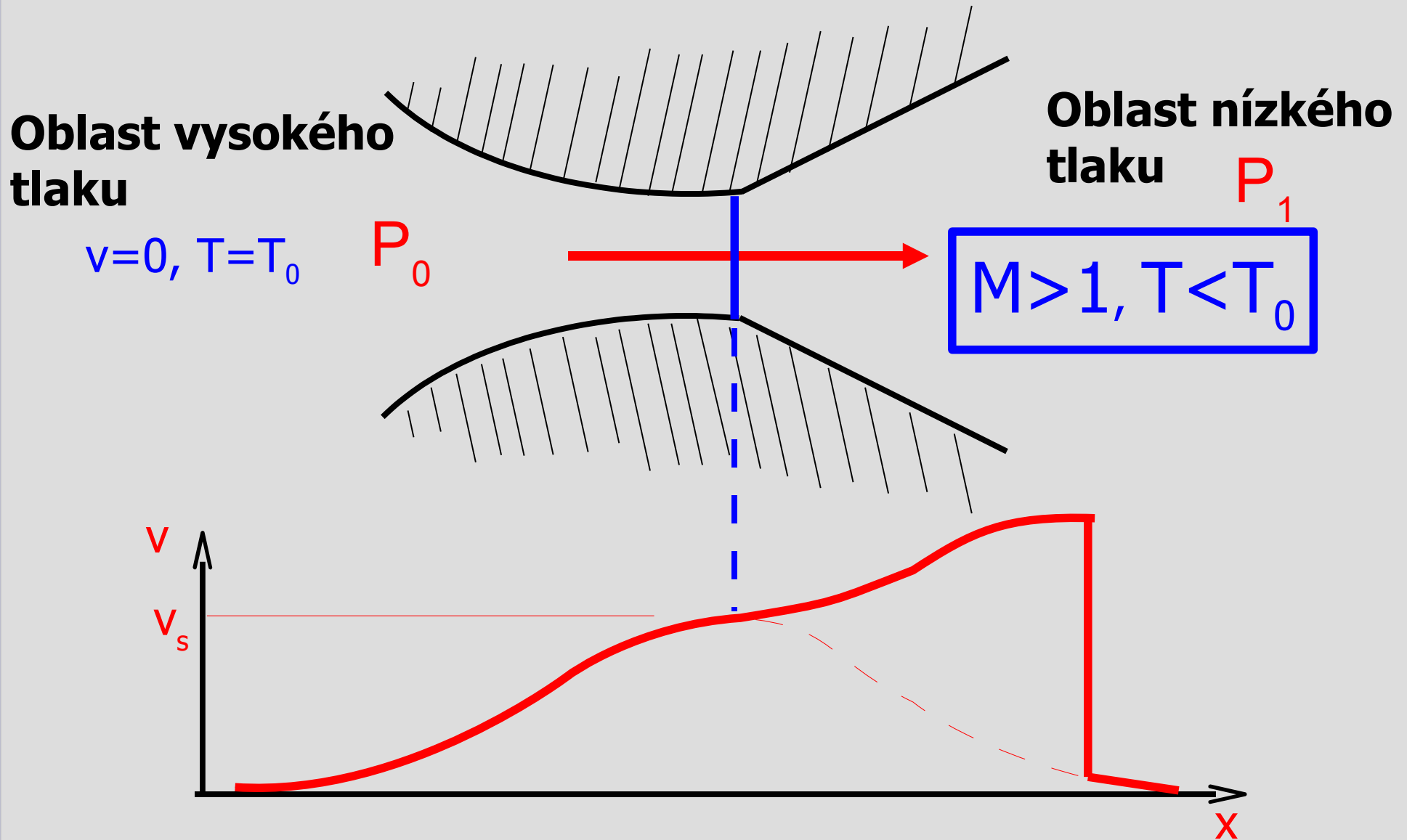
# Shrnutí

Supersonické molekulové paprsky poskytují jedinečný nástroj pro tvorbu atomových a molekulových klastrů – izolovaných nanostruktur v plynné fázi

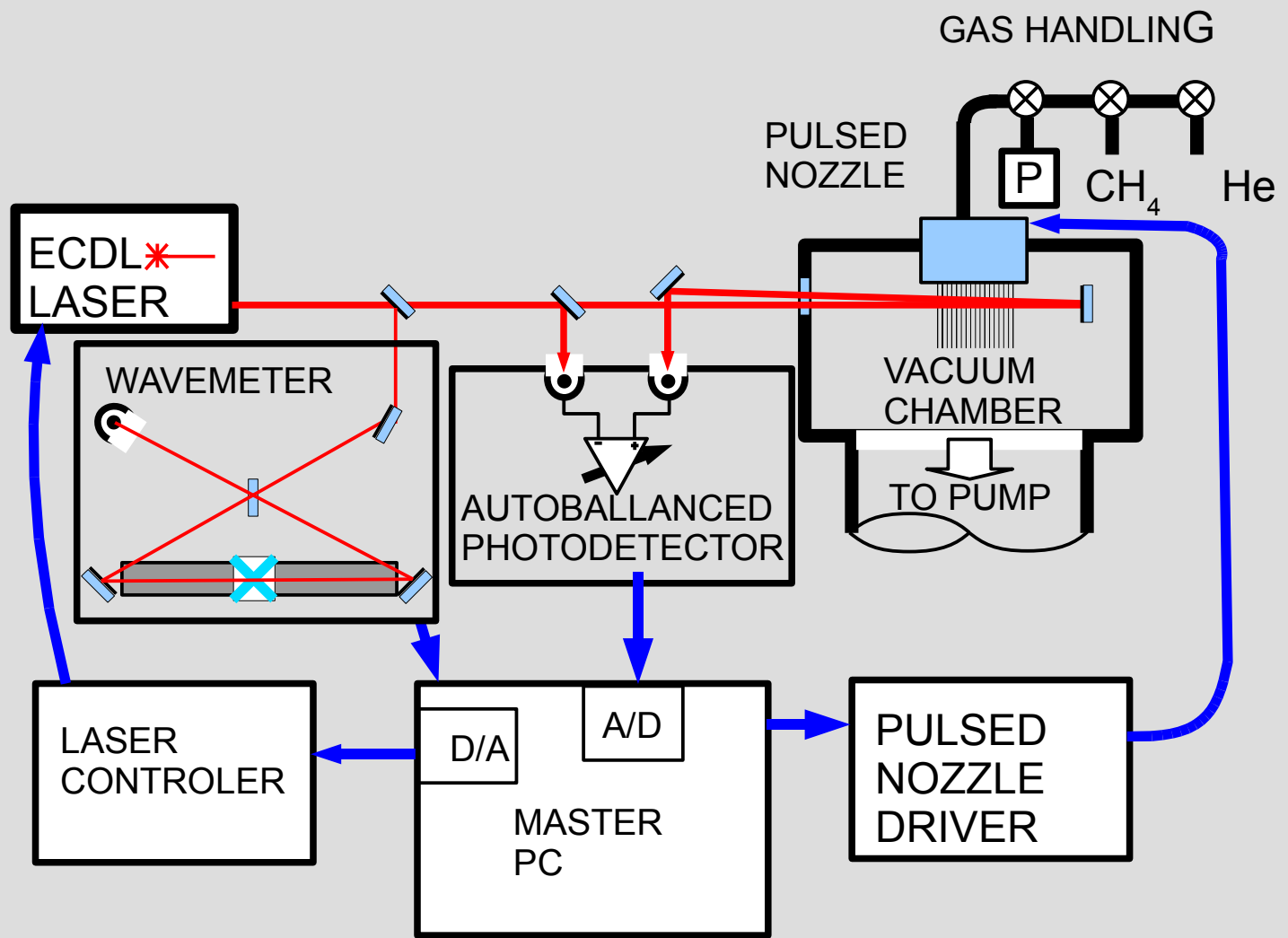


# Proudění tekutiny tryskou

## vznik Machova disku



# Schéma experimentální aparatury





# Pulsní supersonická tryska

