

Atomistische Untersuchungen von Kupfernanopartikeln: Methoden und Untersuchungen zum Einfluss der Oxidation auf Haftkräfte und mechanische Eigenschaften

Alexander Plack, Nina Merkert, Alfred P. Weber, Institut für Mechanische Verfahrenstechnik – TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld / Germany
E-Mail des korrespondierenden Autors: alexander.plack@tu-clausthal.de

Die Oxidation von Kupfer-Nanopartikeln spielt eine entscheidende Rolle in verschiedenen Anwendungen, von der Katalyse über Elektronik bis hin zu antimikrobiellen Beschichtungen. Trotz ihrer praktischen Bedeutung sind die grundlegenden Mechanismen, die den Oxidationsprozess auf der Nanoskala steuern, bislang unzureichend verstanden. Diese Arbeit nutzte Molekulardynamik-Simulationen (MD), um die atomaren Dynamiken und Thermodynamiken der Oxidation von Kupfer-Nanopartikeln zu untersuchen und Einblicke in die Reaktivität und strukturelle Entwicklung während der Oxidation zu gewinnen, damit die gebildeten Partikeln anschließend mit im Labor durch Funkenablation hergestellten Partikeln verglichen werden können. Ziel der Arbeit ist die Bestimmung des Einflusses der Oxidation auf die mechanischen Eigenschaften der Partikel und ihrer Haftkräfte. Dazu wurden experimentelle Daten aus der Niederdruckimpaktion als Vergleich zu den Ergebnissen aus den Simulationen herangezogen.

Unsere Simulationen verwendeten ein reaktives Kraftfeld (ReaxFF), das in der Lage ist, die komplexen Wechselwirkungen zwischen Kupferatomen und Sauerstoffmolekülen abzubilden. Die Ausgangskonfigurationen bestanden aus kristallinen Kupfernanopartikeln mit Durchmessern von 4 bis 7 nm, die kontrollierten Sauerstoffatmosphären bei unterschiedlichen Temperaturen und Drücken ausgesetzt wurden. Der Oxidationsprozess wurde im Hinblick auf Sauerstoffadsorption, Diffusion und die anschließende Bildung von und CuO-Phasen analysiert. Die gebildeten Oxide wurden daraufhin auf Ihre mechanischen Eigenschaften getestet, etwa durch Zug- und Druckversuche. Haftenergien von oxidischen Partikeln und nicht oxidischen Partikeln auf oxidische und nicht oxidischen Substraten wurden durch weitere Simulationen durch Abziehen der Partikel vom Substrat bestimmt, indem die benötigte Kraft über die Zeit aufgezeichnet und integriert wurde. Die gesammelten

Daten wurden anschließend genutzt um den Einfluss der Oxidation auf das Abspringverhalten der Partikel während der Niederdruckimpaktion besser einordnen zu können.