

## **МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФОРМУВАННЯ НАНОЧАСТИНОК ZnO З ГАЗОВОГО СЕРЕДОВИЩА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ**

**Степан Савка**

Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача  
НАН України, savka.stepan.92@gmail.com

В роботі детально проаналізовано процеси формування нанокластерів ZnO, а також їх форму і розміри за допомогою методу молекулярної динаміки. Зміну основних параметрів системи від динаміки конденсації ми спостерігали, задаючи різні початкові швидкості охолодження та початкові концентрації атомів в системі. Було встановлено, що групування атомів в нанокластери здійснювалося досить активно в перші моменти часу і супроводжувалося утворенням значної кількості наночастинок. У наступні моменти часу спостерігалась конденсація вже сформованих нанооб'єктів, що супроводжувалось поступовим зменшенням кількості наночастинок та збільшенням їх розмірів. Під час першого етапу – нуклеації, відбувалося об'єднання вільних атомів в невеликі частинки, в так званні димери і тримери, що призводило до різкого збільшення частинок в системі. При подальшому відводі тепла невеликі кластерні фрагменти починали формувати рідкі краплі з розмірами в декілька десятків атомів. В результаті спонтанних процесів зіткнень даних крапель вже до 0,5 нс з початку моделювання утворювалися масивні аморфноподібні кластерні агрегації. Наступним етапом після високотемпературної нуклеації був процес поверхневого росту і коагуляції. При поверхневому рості одиничні атоми, димери чи тримери газової фази приєднуються до поверхні кластера, викликаючи його поступовий ріст. При цьому також можливий зворотній процес – випаровування одиничних атомів з поверхні нанокластера, але в основному він спостерігався в незначній кількості. Це спричинено інтенсивним відводом тепла, а водночас зменшенням енергії кожного атома, яка потрібна для подолання потенціального бар'єру, щоб вирватися з поверхні кластера. Останнім етапом у формуванні кластерів був процес зіткнення окремих вже сформованих кластерів між собою за сценарієм агломерації або коалесценції. При агломерації кластери об'єднуються практично без змін своєї початкової форми. Тобто результатом агломерації будуть нанооб'єкти різної форми, відмінної від сферичної. При коалесценції наночастинок сплаваються один з одним, і утворюють єдину

**Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2017»,  
23–25 травня 2017 р., Львів**

частинку з формою відмінною від тієї, яка була в нанокластерів до зіткнення. Такий механізм можливий на не дуже пізніх стадіях синтезу, коли температура є ще достатньою для того, щоб нанокластери знаходилися в рідкому стані. Але через досить швидкий відвід тепла, в камері синтезу відбувалося швидке зменшення температури, наслідком якого основним сценарієм стала агломерація. Тобто, при малих швидкостях охолодження кінцеві форми наночастинок набули різної форми, а при більших — кластери в основному мали сферичну форму, що і спостерігалось нами на експерименті [1], в подальшому можлива незначна зміна форми нанокластерів в результаті зміни положення окремих атомів. Отож, форма новоутворених об'єктів на пряму залежить від механізму кінцевого етапу формування, а, отже, і від швидкості охолодження.

1. *Gafiychuk V. V., Ostafiychuk B. K., Popovych D. I., Popovych I. D., Serednytski A. S.* ZnO nanoparticles produced by reactive laser ablation // Applied Surface Science, 257, – 2011. – P. 8396– 8401.

**MODELING OF THE FORMATION PROCESSES OF ZnO  
NANOPARTICLES FROM THE GAS PHASE BY MOLECULAR  
DYNAMICS METHOD**

*We carried out molecular dynamics simulations to investigate the process of formation of ZnO nanoclusters from the gas phase. We have been studied the influence of cooling rate and concentration of atoms on the physical parameters of obtained nanoparticles. Six computer experiments was conducted with different initial cooling rates and concentrations. Depending on this it is possible different mechanisms of cluster growth. In the present work it is shown that the processes of condensation of atoms from the high-temperature gas environment are divided into several stages: nucleation, coalescence and agglomeration, aggregation and coagulation. It is shown that the structure, shape and size of the obtained particles directly depends on the cooling rate of the system. At reduction of cooling rate the number of obtained nanoparticles decreases and their size increases. During the analysis it was found, that created clusters mainly are formed in three structural phases - amorphous, hexagonal wurtzite and cubic zincblende.*