

**Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2019»,
27–29 травня 2019 р., Львів**

УДК 621.315.592

МОДЕЛЮВАННЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ ПРОЦЕСІВ АДСОРБЦІЇ ГАЗІВ НА НАНОКЛАСТЕРАХ ZnO

Степан Савка

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

В даній роботі нами було детально проаналізовано процеси адсорбції газу O_2 на нанокластерах ZnO за допомогою методу молекулярної динаміки. Визначальним кроком у створенні коректної моделі є вибір потенціалу міжатомних зв'язків у системі. Шляхом аналізу характеру формування таких наноструктур та посилаючись на джерела про потенціали міжатомних зв'язків, нами був вибраний потенціал Reactive Force Field (ReaxFF). Даний потенціал розроблений для широкого спектра хімічних сполук, в тому числі й для ZnO , і вже використовувався нами в попередніх роботах по моделюванні процесів формування наночастинок ZnO в хімічно-активному середовищі [1, 2]. ReaxFF є емпіричним потенціалом, який походить з квантомеханічних обчислень. Порядковий зв'язок безпосередньо обчислюється з міжатомних відстаней і оновлюється кожною ітерацією для всіх зв'язаних взаємодій, включаючи ковалентний зв'язок, валентність та торсійні кути. Крім того, ReaxFF описує незв'язані вандерваальсову та кулонівську взаємодії. Початковими умовами моделювання були різні конфігурації системи. Для дослідження основних параметрів змінювались тиск газу в системі, розміри наночастинок ZnO , а також температуру системи. При високій температурі невеликі нанокластери починали плавитися вже на початкових моментах моделювання, а коли вибирались занадто великі нанокластери, часи моделювання ставали дуже великими, що не давало змоги прослідкувати еволюцію системи до кінцевого моменту моделювання. Тому була необхідність у виборі оптимальних початкових умов. Об'єм системи вибирався 8000 nm^3 . Ключовим моментом моделювання є зв'язок системи з термостатом для підтримки конкретної температури системи. Оскільки значна кількість енергії виділялась в процесі окислення нанокластерів, то такий зв'язок необхідний для того, щоб уникнути додаткових підвищень температур. У реальних експериментах цей зв'язок забезпечується інертним чи реактивним газом. У нашому комп'ютерному моделюванні, контроль температури забезпечувався з використанням методу термостата Бердсена.
<http://www.iapmm.lviv.ua/chyt2019>

Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2019», 27–29 травня 2019 р., Львів

Протягом моделювання зображення системи зберігалися кожні 0,5 пс. Дані знімки, окрім візуального спостереження, також використовувалися для аналізу форми, розмірів, структури кінцевих нанокластерів, і для досліджень віддалей адсорбованих молекул газу на поверхні нанокластерів. Для опису адсорбційних процесів використовувалися графіки повної енергії системи та радіальної функції розподілу (RDF), а для вивчення поверхневих властивостей використовувався CSP метод. Наші результати показують, що весь процес адсорбції можна розділити на два етапи, і чим більше тиск газу, тим більше молекул O₂ дифундують в об'єм нанокластера ZnO. Кристалічна структура поверхні нанокластера ZnO стає аморфною при збільшенні концентрації молекул O₂ в системі.

1. Savka S. S., Popovych D. I., Serednytski A. S. Molecular Dynamics Simulations of the Formation Processes of Zinc Oxide Nanoclusters in Oxygen Environment // Nanophysics, Nanomaterials, Interface Studies, and Applications. NANO 2016. Springer Proceedings in Physics. – 2016. – 195. – P. 145-156.
2. Savka S. S., Venhryn Yu. I., Serednytski A. S., Popovych D. I. Molecular Dynamics Simulations of the Formation Processes and Luminescence Properties of Zn-ZnO Core-Shell Nanostructures // Journal of Nano- and Electronic Physics. - 2018. – 10. - 03008(5).

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

In this work we have analyzed in detail the processes of adsorption of O₂ gas on ZnO nanoclusters by the molecular dynamics method. We have been studied the influence of initial temperature, concentration of gas molecules and initial size of ZnO nanoparticles on the physical parameters of obtained nanoparticles. Graphs of total energy of the system and radial distribution functions (RDF) were used to describe the adsorption processes, and centro-symmetry parameter (CSP) analysis was adopted to study the surface properties. Our results show that the whole process of adsorption can be divided into two stages, and the greater the gas pressure, the more O₂ molecules are diffused into the volume of the nanoclusters ZnO. The crystalline structure of the surface of the ZnO nanocluster becomes amorphous with increasing concentrations of O₂ molecules in the system.