

МОРФОЛОГІЧНІ ТА СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОПОРОШКОВИХ МЕТАЛООКСИДІВ: МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Степан Савка

*Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача НАН
України*

Це дослідження представляє комплексний молекулярно-динамічний аналіз утворення наночастинок оксиду цинку (ZnO) та їх подальшої адсорбційної поведінки в середовищі газу кисню (O₂) [1]. Використовуючи пакет програм LAMMPS у поєднанні з міжатомним потенціалом поля реактивної сили (ReaxFF), були проведені моделювання динамічних процесів за різноманітних початкових умов, включаючи різні концентрації та температури. Мета дослідження полягала в тому, щоб з'ясувати вплив цих початкових умов на утворення наночастинок та на явища адсорбції газу.

Завдяки детальному моделюванню методом молекулярної динаміки було відстежено траєкторії окремих атомів, дозволяючи глибоко зрозуміти агрегацію частинок і кінетику адсорбції. Морфологічні та структурні властивості наночастинок ZnO були кількісно визначені за допомогою функцій радіального розподілу (RDF) і центрального параметра симетрії (CSP). Ці методи дозволили зрозуміти атомні конфігурації, виявивши, як локальні структурні зміни впливають на загальну стабільність та властивості наночастинок.

Наші результати демонструють критичну залежність характеристик наночастинок від змодельованих умов середовища. Ми спостерігали значні варіації розміру, форми та структурної цілісності наночастинок при різних початкових умовах температури та концентрації. Ці висновки підкреслюють нюанси взаємодії між термодинамічними параметрами та властивостями наночастинок, пропонуючи потенційні шляхи для оптимізації синтезу наночастинок ZnO для конкретних застосувань.

Крім того, дослідження адсорбції з'ясовує механізми, за допомогою яких наночастинок ZnO взаємодіють з молекулами O₂, демонструючи потенціал цих наночастинок у каталізі та газових сенсорах. Ця робота сприяє теоретичному розумінню поведінки наночастинок у реактивних середовищах і забезпечує надійну основу для майбутніх експериментальних і промислових застосувань металооксидних наночастинок.

**Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2024»,
27–29 травня 2024 р., Львів**

1. *Savka, S. S., Serednytski, A. S., Popovych, D. I. Modeling the adsorption processes and luminescence properties of the metal oxide ZnO nanoparticles // Journal of Physical Studies. – 2023. – № 27 (4) – P. 4601(6).*

**MORPHOLOGICAL AND STRUCTURAL PROPERTIES OF
NANOPOWDER METAL OXIDES: THE METHOD OF MOLECULAR
DYNAMICS**

This research presents a comprehensive molecular dynamics analysis of zinc oxide (ZnO) nanoparticle formation and their adsorption behavior in an oxygen (O₂) gas environment. Using the LAMMPS software and the ReaxFF interatomic potential, we simulated dynamic processes under various initial conditions, including different concentrations and temperatures, aiming to understand the effects of these conditions on nanoparticle formation and gas adsorption phenomena. Detailed molecular dynamics simulations tracked individual atom trajectories, deepening our understanding of particle aggregation and adsorption kinetics. The morphological and structural properties of ZnO nanoparticles were quantitatively analyzed using Radial Distribution Functions (RDF) and the Central Symmetry Parameter (CSP), revealing how local structural changes affect overall stability and properties. Our findings demonstrate that nanoparticle characteristics critically depend on the simulated environmental conditions, showing significant variations in size, shape, and structure under different conditions. This highlights the nuanced interplay between thermodynamic parameters and nanoparticle properties, suggesting pathways to optimize ZnO nanoparticle synthesis for specific applications. Additionally, the adsorption study clarifies the mechanisms through which ZnO nanoparticles interact with O₂ molecules, underscoring their potential in catalysis and gas sensing applications. This work enhances our theoretical understanding of nanoparticle behavior in reactive environments and lays a solid foundation for future experimental and industrial applications of metal oxide nanoparticles.