

УДК 539.315

## ПРОЦЕСИ ФОРМУВАННЯ НАНОСТРУКТУР ZnO ТИПУ «ЯДРО-ОБОЛОНКА»: МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Степан Савка, Дмитро Попович

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

savka.stepan.92@gmail.com, popovych@iapmm.lviv.ua

У цьому дослідженні ми проаналізували процеси адсорбції газу O на нанокластерах ZnO за допомогою методу молекулярної динаміки з подальшим утворенням наноструктур типу «ядро-оболонка». У ході нашого дослідження було встановлено, що структура, товщина оксидного шару та форма наночастинок залежать від початкових умов формування, зокрема, від початкової концентрації газу та температури системи [1, 2].

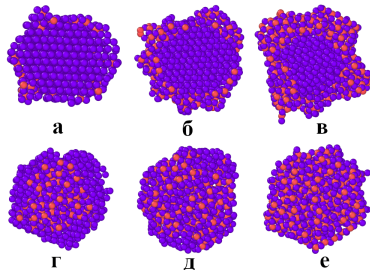


Рис. 1 Зображення зрізів наночастинок при різних концентраціях газу:

- a)  $n = 2.6 \times 10^{19}$  атомів/см<sup>3</sup>,  $T = 300$  К; б)  $n = 6 \times 10^{19}$  атомів/см<sup>3</sup>,  $T = 300$  К;  
с)  $n = 1.18 \times 10^{20}$  атомів/см<sup>3</sup>,  $T = 300$  К; д)  $n = 2.6 \times 10^{19}$  атомів/см<sup>3</sup>,  $T = 600$  К;  
е)  $n = 6 \times 10^{19}$  атомів/см<sup>3</sup>,  $T = 600$  К; ф)  $n = 1.18 \times 10^{20}$  атомів/см<sup>3</sup>,  $T = 600$  К

З наведених на рис. 1 зображень видно, що при підвищенні температури не спостерігається чіткого розмежування між оксидною плівкою та ядром, що призводить до формування нанокластерів ZnO. Це пояснюється тим, що нанокластери з такими розмірами при температурі 600 К починають плавитися, їх структура стає аморфною, а атоми кисню значно легше проникають в глибину наночастинок. У додаток до вищезгаданого, на рис. 1 представлена динаміка зміни товщини оболонки кінцевих нанокластерів при зміні тиску газу. З наведених зображень можна зробити висновок, що із збільшенням початкового тиску газу збільшується товщина оксидної плівки, та структура плівки відрізняється від структури ядра.

Також експериментально досліджено підвищення чутливості газового сенсора структури типу «ядро-оболонка». У таких гетеросистемах процеси хемосорбції газових компонент визначають висоту енергетичного бар'єру для носіїв заряду на гетерограниці нанокристалічної системи, що призводить до виникнення підвищеної (до одного порядку і більше) газової чутливості порівняно зі звичайним ZnO (рис. 2).

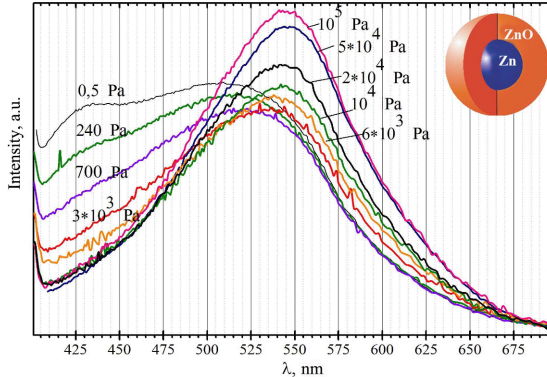


Рис. 2 Спектри фотолюмінесценції наноструктур типу «ядро-оболонка» при різних тисках повітря

1. Savka S.S., Venhryn Yu.I., Serednytski A.S., Popovych D.I. Molecular dynamics investigation of the formation processes of Zn-ZnO core-shell nanostructures // J. Phys. Stud. – 2019. – **23**, No. 2. – P. 2602–2607.
2. Savka S., Venhryn Y., Serednytski A., Popovych D. Molecular dynamics simulation of adsorption processes on the surface of ZnO nanoclusters // Appl Nanosci. – 2022. – **12**. – P. 673–678.

#### PROCESSES OF THE FORMATION OF CORE-SHELL ZNO NANOSTRUCTURES: THE MD STUDY

*We conducted molecular dynamics (MD) simulations to investigate the process of oxidation of zinc nanoclusters and the subsequent formation of Zn-ZnO “core-shell” nanoclusters. The dependence of the structure, shape, and thickness of the oxide layer of the resultant nanoparticles on the initial oxygen density and temperature of the system was investigated. MD simulations were performed at three different initial temperatures, three different initial oxygen concentrations, and two initial sizes of Zn nanoclusters. The simulations revealed that variations in the initial conditions led to differences in the structure, thickness of the oxide layer, and shape of Zn-ZnO “core-shell” nanoparticles. With an increase in the initial oxygen density, the thickness of the oxide layer of the nanoparticles increased up to a certain limit. The results showed that at a temperature of 300 K, the nucleus structure of the nanoclusters was retained, but the shell structure was mostly amorphous. At 600 K, the structure of the clusters was mostly amorphous, and there was no separation between the core and the shell. The percentage of the amorphous structure increased with the gas concentration due to the growth of the oxide shell. Our results are consistent with both experimental observations and previous molecular dynamics simulations.*