

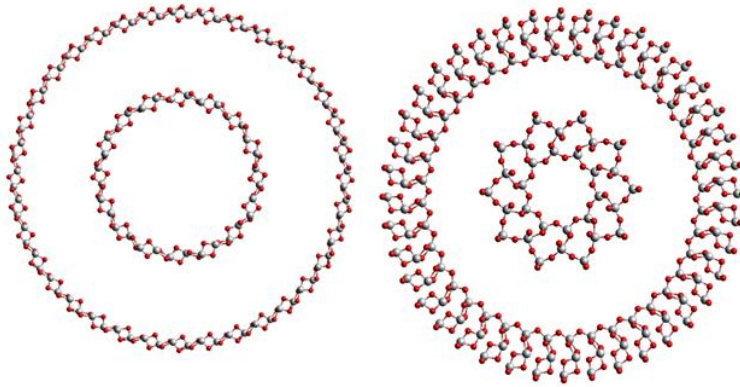
# Universālās metodes izstrāde nanocauruļu virsmas datormodelēšanai ar ierobežoto periodisko 2D struktūru pieeju

Oļegs Lisovskis

[olegs.lisovskis@cfi.lu.lv](mailto:olegs.lisovskis@cfi.lu.lv)

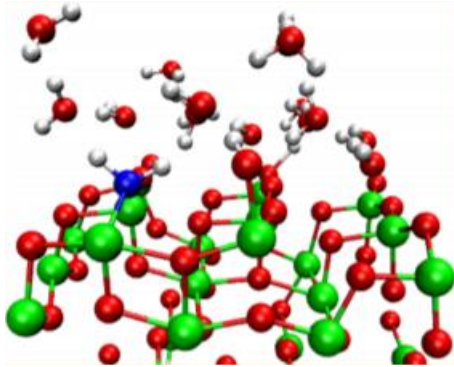
Cietvielu elektronisko struktūru modelēšanas laboratorija

Zemdimensionālas struktūras (t.i., struktūras ar vienu dimensiju, būtiski lielāku par divām pārējām), tādas kā nanovadi un nanocaurules, tiek uzskatītas par perspektīviem materiāliem daudzās pielietojumu sfērās, piemēram, fotokatalīzē un ūdeņraža ražošanā. Nanocauruļu priekšrocība ir to plānas sienīņas, kas nodrošina īsāku lādiņa ceļa garumu un labāku lādiņu separāciju, un līdz ar to – augstāku procesa efektivitāti, kas ir vajadzīgs procesa komercializēšanai.



1. Attēls.  $\text{TiO}_2$  nanocauruļu struktūru piemēri (šķērs griezumā).

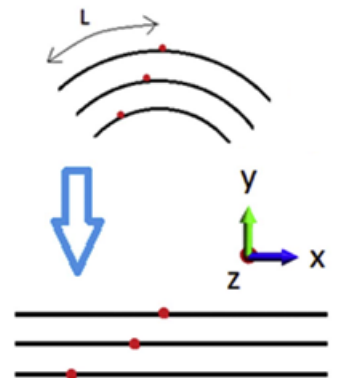
Savukārt, šādu modeļu simulēšana ir nepieciešama labākai ūdens fotokatalītiskās šķelšanas procesu izprašanai. Šīs problēmas atrisināšanai pastāv tipiska pieeja, kurā kā nanocauruļu virsmu tuvinājumu izmanto 2D periodiskās struktūras jeb plāksnes, no kurām nanocaurules tiek veidotas. Šādā veidā var izmantot sistēmas translācijas simetriju un samazināt skaitļošanai nepieciešamus datorresursus. Kamēr šī pieeja nodrošina pietiekamu precizitāti lielām nanocaurulēm (jo lielas nanocaurules virsma ir ne tik izliekta, kā mazas, un ir tuvāka plāksnei pēc īpašībām), šī pieeja nesniedz adekvātu



Attēls 3. 2D struktūra ar nanocaurules ģeometrijas motīviem, kas nodrošina ūdens adsorbcijas uz nanocaurules virsmas modelēšanu.

precizitāti maza un vidēja diametra nanocaurulēm. Tāpēc pastāv nepieciešamība pēc metodes, kas ļautu pētniekiem simulēt ūdens adsorbciju uz nanocaurulēm, saglabājot to īpašības. Šī projekta ietvaros mūsu grupas agrāk izstrādāta nanocauruļu simulēšanas metode ar modificēto 2D-periodisku struktūru ar daļēji saglabātiem nanocaurules ģeometrijas motīviem tika validēta priekš plašākam nanocauruļu diametru spektram, tādejādi pieradot metodes sistemātiskumu un lietderīgumu. Vēl viens projekta iznākums ir prognoze, ka metode ir universāla un pielietojama ne tikai  $\text{TiO}_2$ , bet arī citām nanocaurulēm, un citu molekulu adsorbcijas simulēšanai.

Neskatoties uz to, ka nanocaurules tiek veiksmīgi sintezētas un eksperimentāli pētītas, publikāciju, kas ir veltītas nanocauruļu datorsimulēšanai, nav daudz. Par iemeslu tam kalpo fakts, ka reālistiska izmēra nanocauruļu modeļu aprēķini, it īpaši ja modelī iekļautas ūdens molekulas, ir pārāk dārgi skaitļošanas laika ziņā, un būtiskais situācijas uzlabojums nav sagaidāms tuvākajā laikā.



Attēls 2. Nanocaurules, t.i., 1D struktūras atomu koordināšu translācija uz 2D-periodisku.