

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ДИСОЦІАЦІЇ**

*Анотація.* В роботі на основі розробленої комп'ютерної моделі вивчається динаміка молекулярних систем аж до руйнування (дисоціації) на прикладі трьохатомної молекули діоксиду азоту ( $NO_2$ ).

*Ключові слова:* комп'ютерна модель, дисоціація, потенціал Морзе, хаотичні коливання.

**Вступ**

Можливості прогнозування властивостей матеріалів на мікро й нанорівні тісно пов'язані з дослідженням динаміки молекулярних систем, де руйнування обумовлено розривом зв'язків між атомами речовини. Прикладом подібного руйнування є дисоціація одиночних молекул [1].

**Постановка задачі**

Побудувати в середовищі SimuLink на основі молекулярної динаміки комп'ютерну модель міжатомної взаємодії на рівні молекулярної структури. Дослідити на її основі особливості виникненням хаотичних коливань та процесу дисоціації. Отримати спектральні характеристики міжатомних коливань окремих етапів процесу дисоціації на прикладі діоксиду азоту.

**Основна частина**

Сучасна концепція нормальної моди дійсно може пояснити багато явищ молекулярної спектроскопії. Однак, вона має в своїй основі недолік, через який не можна долучити дисоціацію хімічних зв'язків при високому збудженні. Наразі адекватною моделлю, що може описати дисоціацію є потенціал Морзе

$$\Pi(r) = D[e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)}], \quad (1)$$

Система диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} m_O \ddot{R}_{O_1} = \underline{F}_{O_1N} + \underline{F}_{O_1O_2}, \\ m_N \ddot{R}_N = \underline{F}_{NO_1} + \underline{F}_{NO_2}, \\ m_{O_2} \ddot{R}_{O_2} = \underline{F}_{O_2N} + \underline{F}_{O_2O_1}. \end{cases} \quad (2)$$

описує динаміку трьохатомної молекули NO<sub>2</sub>. За умов  $F_{ON1}$ ,  $F_{NO1}$ ,  $F_{ON2}$ ,  $F_{NO2}$ ,  $F_{O1O2}$ ,  $F_{O2O1}$  – вектори сил взаємодії атомів у молекулі. Зокрема

$$\underline{F}_{O_1N} = -\Pi'(R_{O_1N}) \underline{R}_{O_1N} / R_{O_1N}; \quad \underline{R}_{O_1N} = \underline{R}_{O_1} - \underline{R}_N, \quad R_{O_1N} = |\underline{R}_{O_1N}|, \quad (3)$$

Модель трьохатомної молекули (2) була реалізована в MatLab SimuLink. Це дозволило отримати результати обчислень в реальному часі та поточно, що необхідно для відображення моделі в Virtual Reality, з метою отримання тривимірного зображення динаміки молекули. На рис. 1 представлено перший рівень побудованої схеми.

У програмі присутні засоби пакетного розрахунку динаміки моделі для різних значень початкової енергії. На виході можливо отримати динаміку спектра коливань кожної пари атомів, динаміку кутів молекули, динаміку радіус-векторів атомів системи.

Як вхідні параметри програмі необхідні параметри атомів (маси), їхнє взаємне розташування, параметри зв'язків (параметри потенціалів Морзе), вектори початкових швидкостей атомів і початкова кінетична енергія системи в цілому. Такий підхід дає можливість використовувати модель для описання будь-якої трьохатомної молекули для якої відомі дані параметри. Параметри які використані для молекули NO<sub>2</sub> наведені у табл. 1 [2].

Таблиця 1

Параметри моделі NO<sub>2</sub>

Параметр	одиниці Хартрі
Маса атома азоту	25529
Маса атома кисню	29176
Енергія дисоціації зв'язку N-O	0,179
Відстань рівноваги зв'язку N-O	2,249
Параметр $\alpha$ для зв'язку N-O	1,122
Відстань рівноваги зв'язку O-O	4,138
Енергія дисоціації зв'язку O-O	0,0358
Параметр $\alpha$ для зв'язку O-O	1,592

Схема реалізує систему (2). Рівняння системи розбиті на однотипні блоки, сил, радіус-векторів, рівнянь. Система інтегрується на протязі 100000 тактів, з шагом 2.

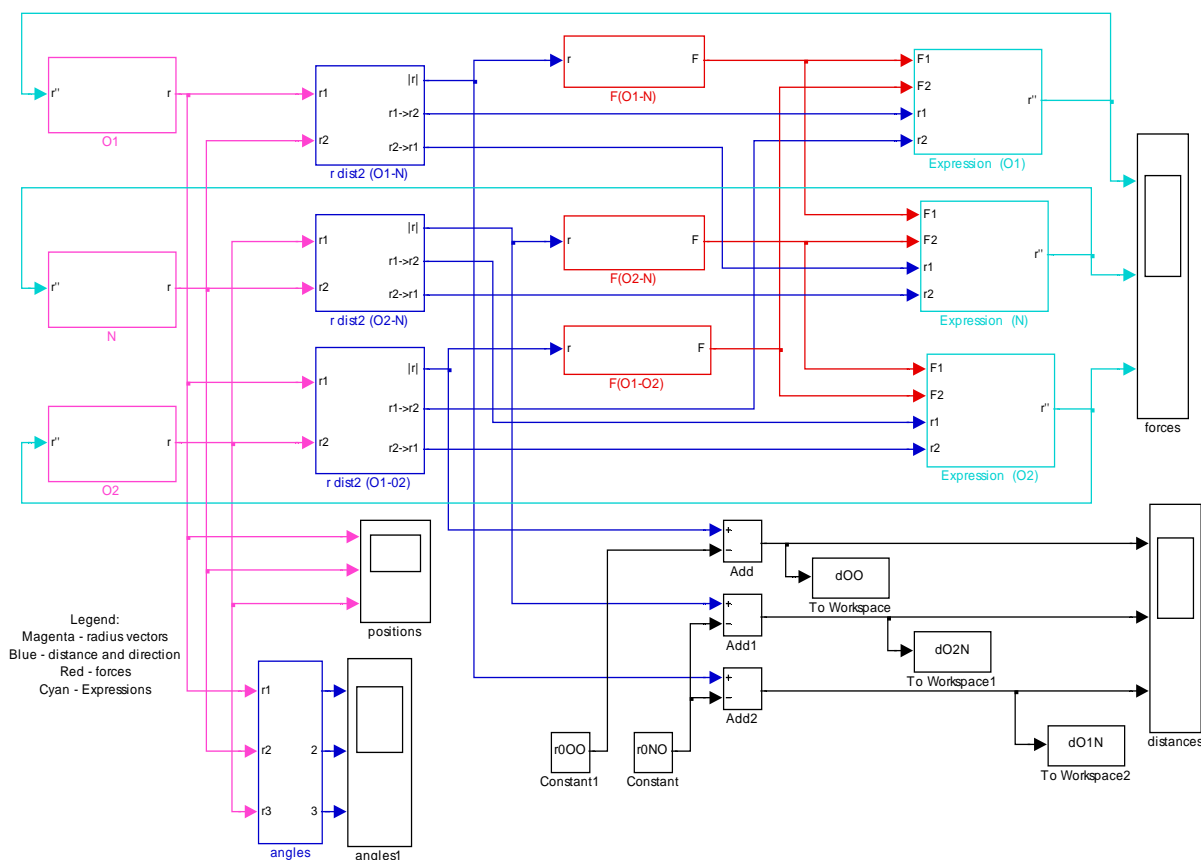


Рисунок 1 – Верхній рівень моделі, побудованої в середовищі SimuLink

Для молекули  $\text{NO}_2$  була отримана динаміка системи при різних значеннях початкової повної енергії молекули. На рис. 3 – 7 показані коливання та спектр зв'язку О-О. Встановлення кінетичної енергії здійснюється за рахунок початкової швидкості атомів:

$$V = \sqrt{\frac{2 \cdot Ek}{m}} \quad (4)$$

Напрямки векторів швидкостей атомів розраховуються так, аби сума цих векторів у початковий момент часу дорівнювала нулю.

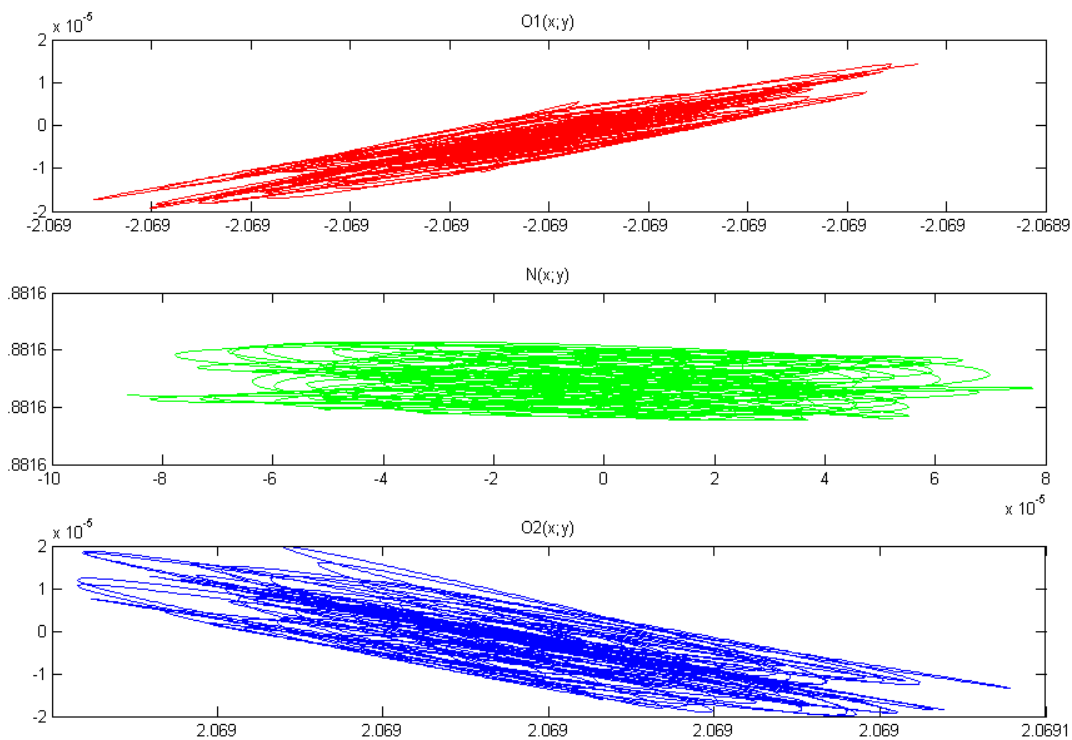


Рисунок 2 – Характер руху атомів молекули  $NO_2$  у 2D площині

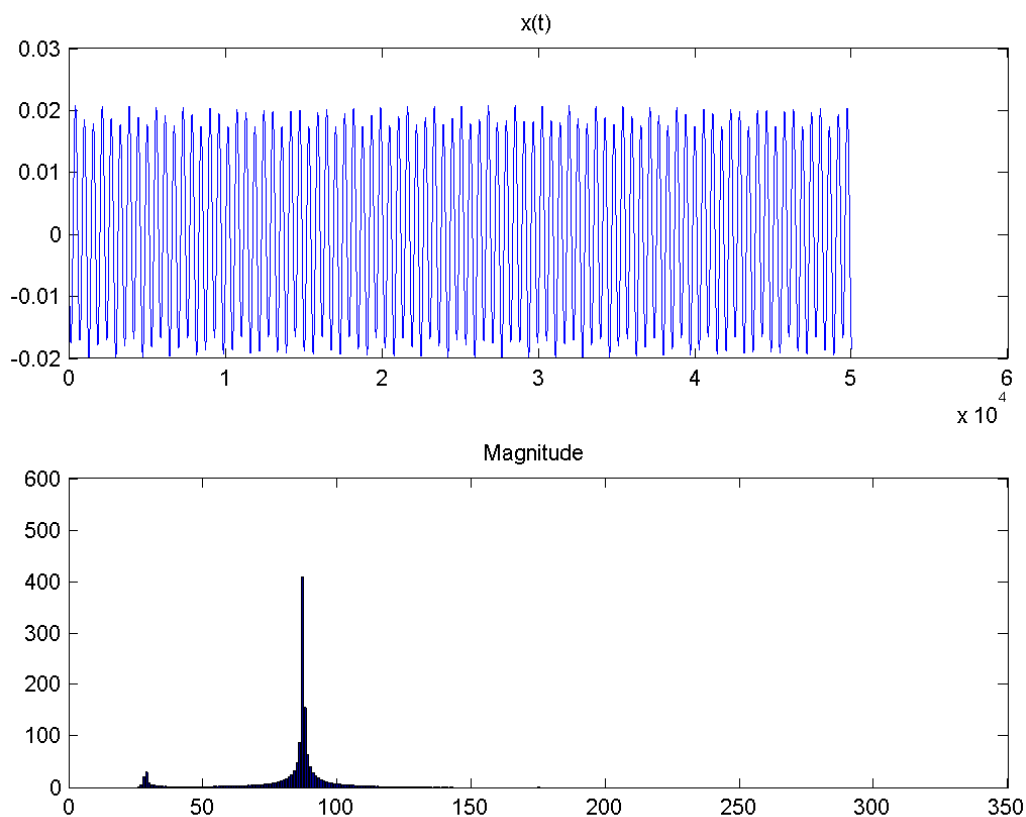


Рисунок 3 – Характер коливань O-O  $E_k=0,0001$

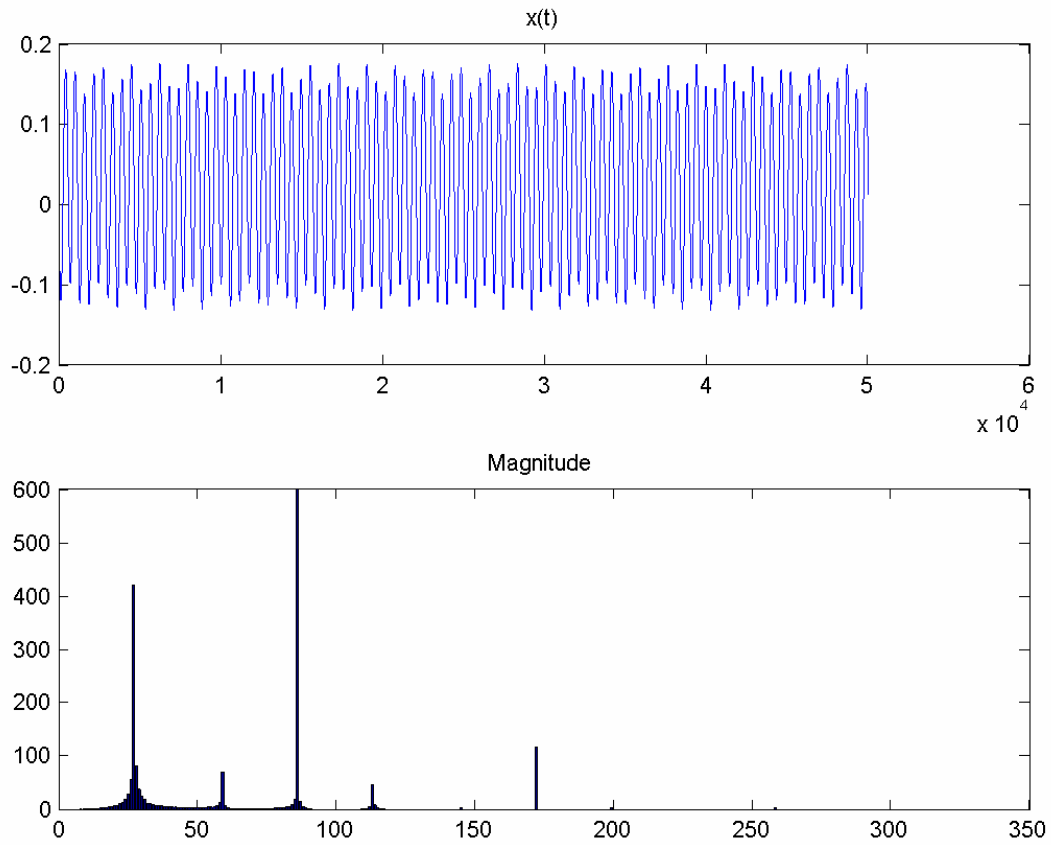


Рисунок 4 – Характер коливаний О-О при  $E_k = 0,005$

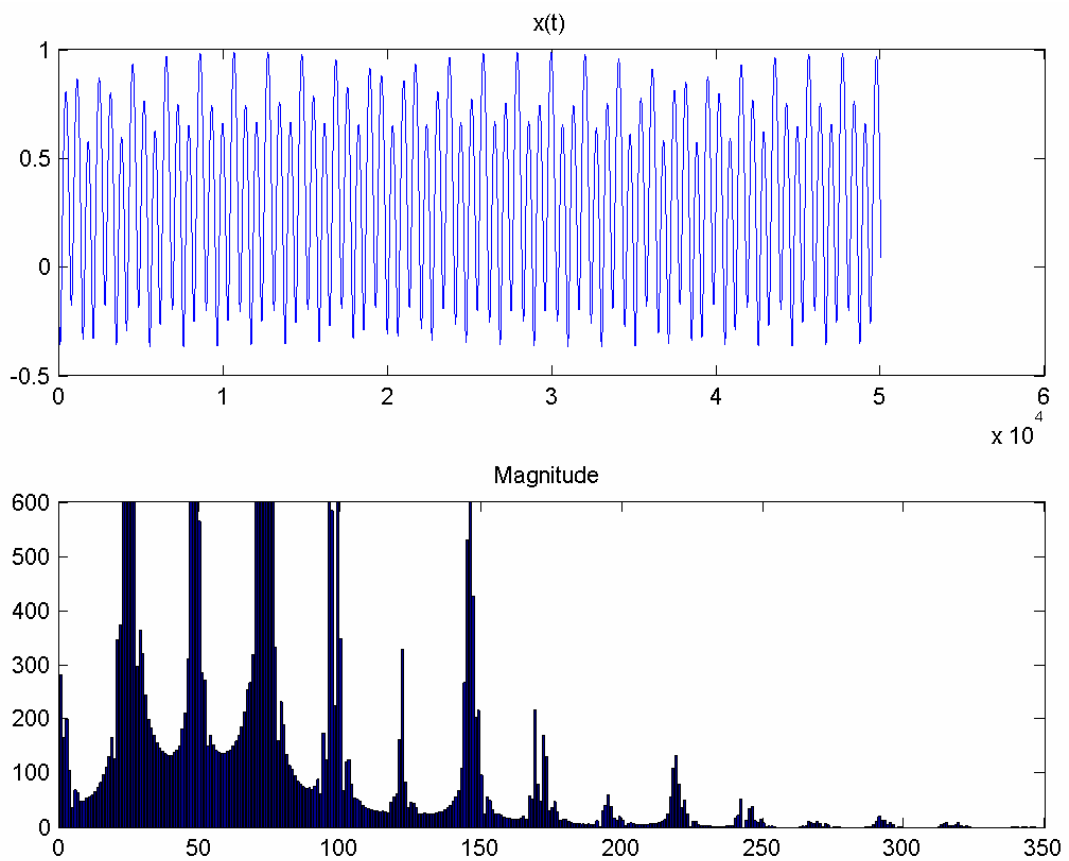
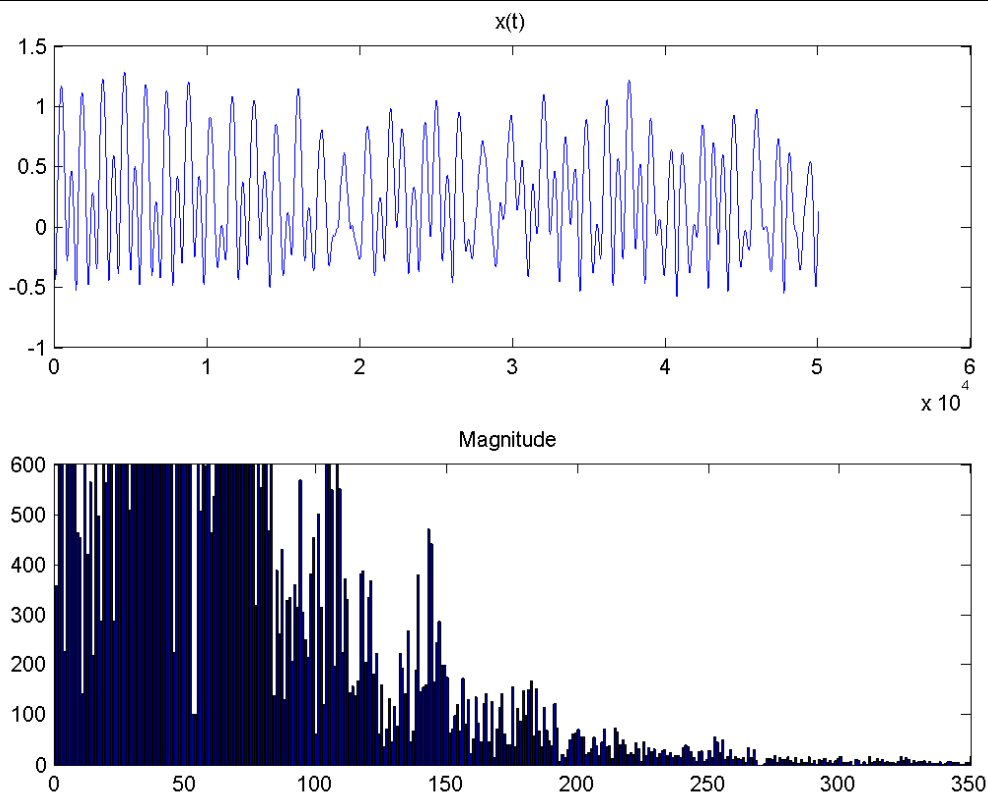


Рисунок 5 – Характер коливаний О-О при  $E_k=0,06$

Рисунок 6 – Характер коливань О-О при  $E_k = 0,1$ 

Енергією дисоціації у випадку  $\text{NO}_2$  буде  $3/2$  енергії дисоціації найміцнішого зі зв'язків, тобто N-O. Це є наслідком, того, що повна енергія системи розподіляється на кожний атом системи, а кожен зв'язок утримується тільки двома атомами. На рисунку 7 показаний характер коливань зв'язку O-O для початкової енергії системи близької до дисоціації молекули.

Тобто відбувається дисоціація обох зв'язків, що утримували атом кисню  $\text{O}_1$ . Повної дисоціації не відбулося і це показано на рис. 7.

**Висновки.** В роботі була побудована комп'ютерна модель міжатомної взаємодії на рівні молекулярної структури та на основі молекулярної динаміки. Ця модель дозволила провести дослідження особливостей виникнення хаотичних коливань та процесу дисоціації. Використовуючи побудовану модель були визначені послідовності змін характеристик динамічної моделі та виявлені зміни структури між атомних зв'язків, в разі переходу до хаотичних коливань. Загалом модель може бути використана у широкому колі досліджень міжатомної взаємодії на рівні молекулярної структури, наближуючи

отримані данні, певною мірою, до даних отриманих на основі фізичних експериментів.

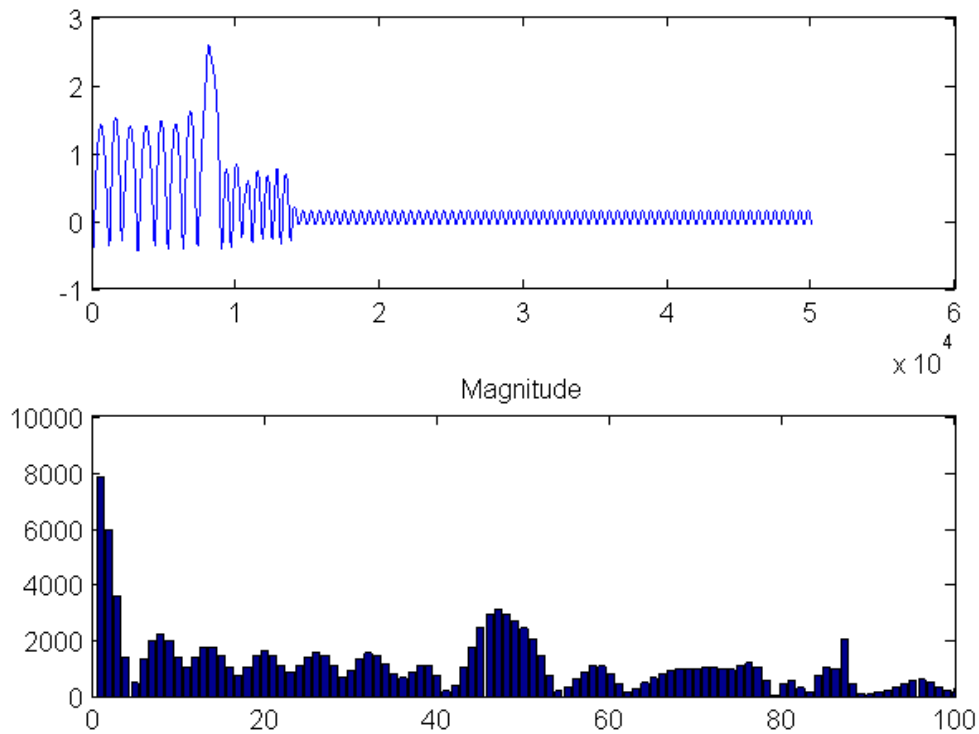


Рисунок 7 - Характер коливань О-О при  $E_k = 0,26$

#### ЛІТЕРАТУРА

1. Дервянко А.И. Хаотические колебания в PVD технологии углеродных материалов. //Системні технології. Регіональний міжвузівський збірник наукових праць. – Випуск 4 (93). – Дніпропетровськ, 2014. – с. 39-44.
2. Волковец И. Б., Ефимов А. А., Кривцов А. М., Ткачев П. В., - Труды СПбПУ. 2004. № 489. 152–161.