

Simulace adsorpce ethanolu na chlorid sodný

Matúš P.¹, Tomáš T.², Vojtěch K.³

¹Gymnázium Christiana Dopplera, ²Gymnázium Děčín, ³Schiller-Gymnasium Pirna
¹pull@gchd.cz, ²tomas.toman@gymnaziumdc.cz, ³kubat.vojtech16@fsg.lernsax.de

21. 6.

Abstrakt

Co se stane, když pustím skleněnou kouli z patnáctého patra? To je otázka, na kterou chceme znát odpověď všichni. Jenže jak u toho nezabít 7 lidí? Nasimulovat to. To jsme sice nedělali, ale simulovali jsme, co se stane, když se v kuchyni vylije alkohol na kuchyňskou sůl - měřili jsme volnou energii ethanolu, který se váže na povrch krystalického chloridu sodného. Zjistili jsme, že se váže kyslík na sodík, jaká je energie této vazby a při jakých teplotách tato vazba proběhne.

1 Úvod

Počítačové simulace se dnes dají použít na širokou škálu aplikací. Krom toho, že jsou děsně cool, se využívají například na zjišťování různých vlastností materiálů a změn jejich fází, či pro určování vhodných nastavení experimentů (depozice, implantace).

V této práci jsme se konkrétně zaměřili na studium adsorpce ethanolu na krystalu chloridu sodného.

Adsorpce je jev, kdy se molekula naváže na povrch materiálu. Znalost průběhu adsorpce je důležitá z hlediska výběru vhodných materiálů a molekul pro aplikační účely využívající její proces, jako jsou plynová čidla.

Naším cílem bylo určit adsorpční energii a vzdálenost, ve které se molekuly navážou pomocí simulační metody molekulární dynamiky.

2 Nastavení simulací

Pro simulace jsme používali program LAMMPS[1]. Data jsme poté vizualizovali přes OVITO[2].

Časový krok jsme zvolili na 1 fs. Celkový čas simulace byl 13,2 ns. Využili jsme periodických okrajových podmínek ve směrech x, y, z.

2.1 Aproximace meziatomového potenciálu

Potenciální energii atomů jsme aproximovali přes jejich vzájemné přitažlivé síly vypočtené podle Coulombova zákona⁽¹⁾, Lennard-Jonesově potenciál⁽²⁾ a harmonický potenciál⁽³⁾

$$U_{ij}^C(r_{ij}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{Q_i Q_j}{r_{ij}} \quad (1)$$

kde Q jsou náboje částic, r je jejich vzdálenost a ϵ je permitivita

$$U_{ij}^{LJ}(r_{ij}) = 4\psi \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad (2)$$

kde r je vzdálenost částic, ψ je hloubka potenciálu a σ je vzdálenost, při které je potenciální energie minimální

$$U_i^h = k_i(r_i - r_0)^2 \quad (3)$$

kde k_i je aproximace tuhosti vazby, jako tuhost pružiny, r_i je vzdálenost dvou atomů a r_0 je jejich klidová vzdálenost závislá na typech konkrétních dvou atomů.

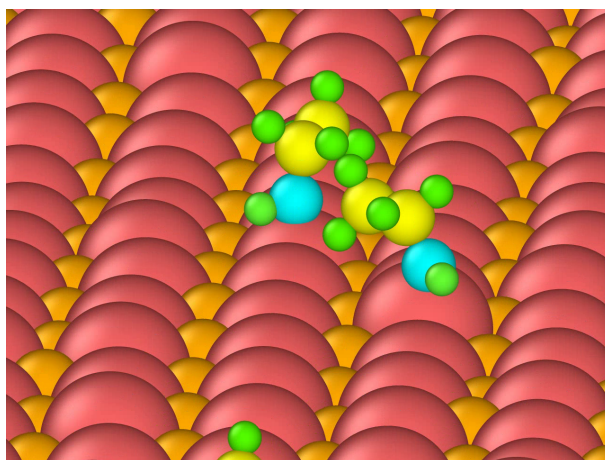
Parametry meziatomárních potenciálů pro NaCl jsme brali z *The journal of Physical Chemistry*[3], pro ethanol *Journal of chemical theory and computation*[4], obojí jsme našli na webu *Crystallography Open Database*[5].

2.2 Metoda analýzy

Pro měření volné energie jsme použili metodu Umbrella sampling. To znamená, že k simulaci systému jsme použili různé reakční koordináty z - vzdálenost molekuly ethanolu od chloridu sodného a měřili energii při této fixní vzdálenosti. Jelikož zafixováním pozice jsme dodali ethanolu potenciální energii, museli jsme se zpětně dopočítat k reálným datům pomocí metody WHAM[6] - Weighted Histogram Analysis Method.

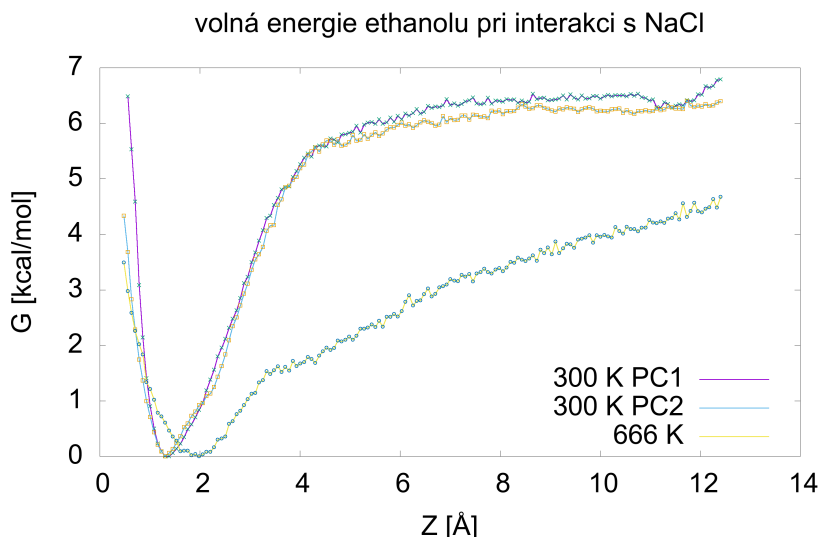
3 Výsledky a diskuze

Pozorovali jsme, že molekula ethanolu se váže kyslíkem na atomy chloru v NaCl (viz obrázek 1).



Obrázek 1: Adsorpce molekuly ethanolu na povrchu NaCl

Hodnota adsorpční energie byla vypočtena pro teplotu 300K, jako 6 kcal/mol, zatímco pro teplotu 666K to jsou 2 kcal/mol. Vzdálenosti, při kterých je energie vazby nejmenší vyšly pro 300K 1,38 nm, zatímco pro 666K se tato vzdálenost zvýšila na 1,98 nm.



Obrázek 2: Naměřené hodnoty volné energie ethanolu jako funkce o vzdálenosti od NaCl

V následující tabulce jsou shrnuta naměřená data.

Teplota (K)	Vzdálenost (nm)	Adsorpční energie (kcal/mol)
300	1,38	6
666	1,98	2

4 Shrnutí

V miniprojektu jsme simulovali adsorpci ethanolu na krystalickém NaCl metodou molekulární dynamiky. Zjistili jsme, že ethanol se váže na NaCl kyslíkem s chlorem a určili jsme adsorpční energie ethanolu pro teploty 300K a 666K a jeho rovnovážné vzdálenosti od povrchu NaCl. Celkově lze říci, že jsme si vyzkoušeli simulování interakcí dvou sloučenin metodou molekulární dynamiky a práci v programu LAMMPS a OVITO.

Poděkování

Děkujeme studentům Miroslavu Lebedovi a Lucii Celbové za úžasné vysvětlení zkoumaných fyzikálních jevů i použitého softwaru, asistenci s problémy, které v průběhu nastaly a vůbec za zprostředkování tohoto miniprojektu.

Reference

- [1] LAMMPS - *a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales*, A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S. J. Plimpton, *Comp Phys Comm*, 271 (2022) 10817. [citováno dne 20.6.]
- [2] OVITO *Open Visualization Tool*. <https://www.ovito.org/>. [citováno dne 20.6.]
- [3] Loche, Philip, et al. Transferable ion force fields in water from simultaneous optimization of ion solvation and ion-ion interaction. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2021, 125.30: 8581-8587. [citováno dne 20.6.]
- [4] Malde, Alpeshkumar K., et al. An automated force field topology builder (ATB) and repository: version 1.0. *Journal of chemical theory and computation*, 2011, 7.12:4026-4037. [citováno dne 20.6.]
- [5] Crystallography Open Database *Open-access collection of crystal structures of organic, inorganic, metal-organic compounds and minerals, excluding biopolymers*. <http://www.crystallography.net/co>. [citováno dne 20.6.]
- [6] Grossfield, Alan, *WHAM: the weighted histogram analysis method*, version XXXX, http://membrane.urmc.rochester.edu/wordpress/?page_id=126. [citováno dne 20.6.]