**Молекулярно-динамическое моделирование кристаллизации наночастиц MoS2 с машинно-обучаемым потенциалом**

***С.А. Смирнов, Н.Д. Орехов, И.А. Круглов, А.Б. Мазитов***

*Студент, 3 курс бакалавриата*

*Московский физико-технический институт, лаборатория компьютерного дизайна материалов, Москва, Россия*

*E-mail:* [*segakarel@icloud.com*](mailto:ivanov@yandex.ru)

Ван-дер-Ваальсовы вещества, и, в частности MoS2, являются перспективными материалами для различных областей техники, например, в спинтронике, фотонике, сенсорах-газоанализаторах, микро-/наноэлектронике и других. Так, получение оптически неоднородных наночастиц MoS2 является важной практической задачей для производства оптических устройств, электрохимических катализаторов и других [1].

Оптические свойства определяются, в том числе, кристаллической структурой наночастиц. При помощи перспективного метода лазерной абляции возможно получение структуры “core-shell”, которая состоит из внешней оболочки концентрических сферических слоёв (“shell”) и внутренних разупорядоченных кристаллов (“core”). Количество слоёв “core” структуры, а также внутренних кристаллов зависит от темпа охлаждения, который в экспериментальных исследованиях варьируется изменением теплопроводности среды, в которой находится обрабатываемая лазером подложка.

Постановка задачи моделирования формулировалась из метода получения наночастиц фемтосекундной абляцией, при котором происходит резкое испарение, плавление и диссоциация слоёв материала подложки с последующим отделением от подложки и охлаждением в растворителе или на воздухе[2]. Исследуемые модели представляли собой тонкие срезы из центра сфер; на границе были выделены участки, имитирующие взаимодействие со средой растворителя. Моделирование производилось в программном пакете LAMMPS[3] с использованием машинно-обучаемого потенциала MLIP-2[4], обученного на 3250 конфигурациях, силы, энергии и напряжения для которых были получены при помощи программного пакета VASP[5], ошибка обучения составила 16 meV/atom.

В данной работе были представлены результаты моделирования образования core-shell структур, показано хорошее качественное сходство экспериментальных TEM изображений и полученных в ходе расчётов слоистых структур: при лазерной абляции в среде с предельно низкой температуропроводностью наблюдается образование структур с единым внутренним кристаллом и многослойной shell структурой; в высокотемпературных средах, напротив, core-слой может быть один, в то время как внутренних кристаллов наблюдается больше 10. Таким образом, при увеличении скорости охлаждения, количество атомов в core структуре и средний размер кристалла снижается.

**Литература**

1. Tselikov G.-I. et al. Transition metal dichalcogenide nanospheres for high-refractive-index nanophotonics and biomedical theranostics // PNAS. 2022. Vol. 119. P. e2208830119.

2. Pan C. et al. Ultrafast optical response and ablation mechanisms of molybdenum disulfide under intense femtosecond laser irradiation // Light Sci. Applic. 2020. Vol. 9. P. 80.

3. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. 1995. Vol. 117. P. 1-19.

4. Shapeev A.V. Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials // Mult. Mod. Sim. 2016. Vol. 14. P. 1153-1173.

5. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 1758.