**Моделирование взаимодействия кислородосодержащих молекул с поверхностью оксида железа Fe3O4**

***Савин Г.С.***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

*E-mail: savin.gleb.mephi@yandex.ru*

Один из методов защиты ферритно-мартенситных сталей от коррозии в агрессивной химической среде заключается в создании и поддержании тонкого защитного оксидного слоя на их поверхности. Этот подход рассматривается в контексте предотвращения разрушения структурных элементов стали в активной зоне будущих быстрых реакторов с использованием жидких легкоплавких металлов, таких как свинец или сплав свинца с висмутом. Регулирование толщины этого слоя осуществляется динамически путем поддержания оптимального уровня кислорода в жидком металле. Для более обоснованного предсказания поведения оксидного слоя в таких условиях эксплуатации крайне важно понимать закономерности взаимодействия оксида (магнетита), образующегося на поверхности стали, с содержащимся в окружающей среде кислородом. На данный момент такое понимание ограничено не только для жидкометаллических, но и для большинства других сред (кислород, водяной пар, углекислый газ и прочие). Атомистическое моделирование предоставляет важную информацию о микроскопических деталях и энергетических параметрах взаимодействия различных соединений кислорода с внешней поверхностью оксида, а также о дальнейшей диффузии захваченного кислорода вглубь оксидного слоя.

В данном исследовании было проведено моделирование взаимодействия молекул кислорода и воды с оксидом железа Fe3O4 с использованием метода молекулярной динамики и программного кода LAMMPS. Для описания взаимодействия между атомами использовался многочастичный потенциал ReaxFF [1], модифицированный путем совмещения с потенциалом ZBL и последующей подгонки параметров.

Показано, что молекулы кислорода легче адсорбируются на поверхности магнетита, где преобладают атомы железа в тетраэдрической позиции, а также обнаружено, что на такой поверхности возможно объединение атомов кислорода в кластер тетраэдрической формы вокруг атома железа, что может служить началом образования нового слоя атомов оксида.

Выяснено, что молекулы воды при взаимодействии со свободной поверхностью Fe3O4 склонны к распаду на составляющие в виде атома водорода и группы OH. Также на поверхности возможна реакция H2O → H2 + O, которая сопровождается десорбцией молекулы H2 и приводит к накоплению водорода над магнетитом.

Показано, что межузельные атомы кислорода и железа имеют гантельную конфигурацию с ориентацией оси <110> и относительно легко диффундируют, что позволило определить их барьеры миграции, проведя анализ траекторий перемещения дефектов при различных температурах. Вакансии же остаются практически неподвижными на характерной для моделирования методом молекулярной динамики временной шкале, поэтому величины их барьеров миграции были оценены с помощью метода NEB.

**Литература**

1. Michael C. Pitman, Adri C. T. van Duin. Dynamics of Confined Reactive Water in Smectite Clay−Zeolite Composites // J. Am. Chem. Soc. 2012. V. 134. P. 3042 – 3053.