



Ibrat O'RUNOV,

O'zbekiston Milliy universiteti Fizika fakulteti magistranti
O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti muhandisi
E-mail: ibraturunov@gmail.com

Faxriddin SAFAROV,

Denov tadbirkorlik va pedagogika instituti stajyor-o'qituvchisi
E-mail: safarov-faxriddin@mail.ru

Islomjon JO'RAYEV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti kichik ilmiy xodimi
E-mail: islom1984jon@gmail.com

Kamoladdin EGAMBERDIEV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti katta ilmiy xodimi
Geologiya fanlari universiteti Aniq va tabiiy fanlar kafedrasida dotsenti
E-mail: kegamberdiev@yandex.ru

Turg'unali AXMADJANOV,

O'zbekiston Milliy universiteti fizika fakulteti Fotonika kafedrtasi mudiri
E-mail: t.akhmadjanov@nuu.uz

Umedjon XALILOV,

O'zR FA, Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti bosh ilmiy xodimi
Denov tadbirkorlik va pedagogika instituti o'qituvchisi,
E-mail: umedjon.khalilov@uantwerpen.be

Geologiya fanlari universiteti dotsenti, f.-m.f.d. X.Raximov taqrizi asosida

AGGREGATION MECHANISMS OF MONODISPERSED NiO NANOCCLUSERS

Abstract

Investigating nanocatalyst aggregation mechanisms is important for controlling the size of nanocatalysts in different environments. Despite the aggregation processes of NiO nanoparticles have been studied to some extent in ideal environments, i.e., gas and aqueous solutions, their interaction mechanisms between aqueous media and nanoclusters are still not fully understood. In this work, the environmental effect on the aggregation process of NiO nanoclusters with a size of about 1 nm has been studied using molecular dynamics simulations. Obtained results show that (1) nanoclusters are located at a longer distance from each other in aqueous media in comparison to vacuum due to the hydrodynamic shell (with a thickness of 0.08 nm) formed around the NiO nanoaggregates affected by the aqueous environment, and (2) the stability of NiO nanoclusters in the water environment decreases as a result of the formation of the hydrodynamic shell. The results of our study suggest that a better understanding of the tuning of nanocatalyst size will lead to the selective synthesis of nanomaterials with unique properties, which are the basis of nanotechnology.

Keywords: process modeling, nickel oxide nanocluster, aggregation, stability, reactive molecular dynamics

МЕХАНИЗМЫ АГРЕГАЦИИ МОНОДИСПЕРСНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ NiO

Аннотация

Изучение механизмов агрегации нанокатализаторов важно для контроля размера нанокатализаторов в различных средах. Несмотря на то, что процессы агрегации наночастиц NiO в той или иной степени изучены в идеальных средах, т.е. в газе и водных растворах, механизмы их взаимодействия между водными средами и нанокластерами до конца не изучены. В данной работе влияние окружающей среды на процесс агрегации нанокластеров NiO размером около 1 нм изучалось с помощью молекулярно-динамического моделирования. Полученные результаты показывают, что (1) нанокластеры располагаются на большем расстоянии друг от друга в водной среде по сравнению с вакуумом за счет гидродинамической оболочки (толщиной 0,08 нм), формирующейся вокруг наноагрегатов NiO под воздействием водной среды, и (2) устойчивость нанокластеров NiO в водной среде снижается в результате образования гидродинамической оболочки. Результаты нашего исследования показывают, что лучшее понимание настройки размера нанокатализатора приведет к селективному синтезу наноматериалов с уникальными свойствами, которые являются основой нанотехнологии.

Ключевые слова: моделирование процессов, нанокластер оксид никеля, агрегация, стабильность, реактивная молекулярная динамика.

MONODISPERS NiO NANOKLASTERLARINING AGREGATSIYA MEXANIZMLARI

Annotatsiya

Turli muhitlarda nanokatalizatorlar o'lgamini boshqarishda ularning muhitdagi agregatsiya mexanizmlarini o'rganish fundamental ahamiyatga ega. Garchi NiO nanozarralar agregatsiya jarayonlari ideal muhitlarda (ya'ni, gaz va suvli eritmalarda) qisman o'rganilgan bo'lsada, ularning suvli muhit bilan ta'sir mexanizmlari haligacha to'la tushinilmagan. Ushbu tadqiqotda o'lgami 1 nm atrofidagi NiO nanoklastarlari agregatsiya jarayoniga muhitning ta'siri molekulyar dinamika usuli yordamida o'rganildi. Hisoblash natijalari shuni ko'rsatadiki, (1) suvli muhit ta'sirida NiO nanoagregatlari atrofida hosil bo'lgan

gidrodinamik qobiq (qalinligi 0.08 nm) hisobiga bu nanoagregatlar vakuumdagiga nisbatan bir-biridan uzoqroq masofada joylashadi, hamda (2) bu gidrodinamik qobiqning hosil bo'lishi natijasida NiO nanoklastarlari suv muhitidagi barqarorligi pasayadi. Ushbu tadqiqot nanotexnologiyaning asosini tashkil qilgan noyob fizik xususiyatli nanomateriallarning selektiv sintezi uchun nanokatalizatorlar o'lchamini boshqarishni yaxshiroq tushinishda yordam beradi.

Kalit so'zlar: jarayonlarni modellashtirish, nikel oksidi nanoklasteri, agregatsiya, barqarorlik, reaktiv molekulyar dinamika.

Kirish. Hozirda nano o'lchamdagi materiallar, xususan, nanozarralar o'zining noyob mexanik, optik va elektron xususiyatga ega ekanligi bilan mikro o'lchamdagi zarralar xususiyatlaridan tubdan farq qilib, zamonaviy nanotexnologiyada muhim o'ringa ega [1-3]. Xususan, hozirgi nanotexnologiyada, Au, Ag va Pt kabi qimmat metal nanozarralari o'rni bosuvchi nanozarralar olish va ularni sanoatda tadbiiq qilish ustivor vazifalardan biri hisoblanad [4].

Bunday turdagi nanozarralardan biri nikel oksid (NiO) nanozarralari bo'lib, ularning keng taqiqlangan sohaga (3.6–4.0 eV) [5,6] va fotokatalitik xususiyatga egaligi hamda tan narxining arzon ekanligi tufayli bugungi kunda ulardan katalizator [7,8], quyosh panellari [9], gaz sensorlari [10,11] va yuqori issiqlik o'tkazuvchanlikka ega nanosuyuqliklar yaratishda [12] keng qo'llanilmoqda. Bu yerda ularning bir jinsiligi va bir xil o'lchamga ega bo'lishi (monodispers) hal qiluvchi faktorlardan biri hisoblanadi [13].

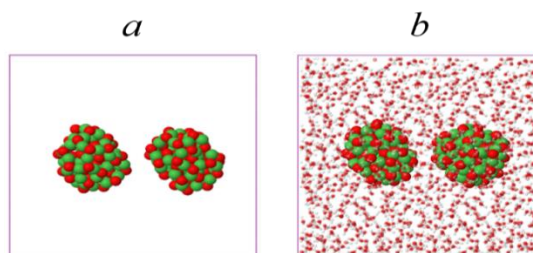
Shunga qaramay, NiO nanozarralari sintezi jarayonida ularning bir-biri bilan qo'shilishi (agregatsiya) sirt bilan bog'liq xususiyatlariga sezilarli ta'sir ko'rsatib, katalitik faolligini keskin tushirib yuborishi bir qator eksperimental tadqiqotlar orqali aniqlangan [14,15]. Ma'lumki, zol-gel usuli yordamida [16,17] bir jinsli NiO nanozarralarini olishda, asosan, yuqori 1073 K kaltsinatsiya temperaturasi (ya'ni qizdirish orqali qattiq kimyoviy birikma tarkibidan uchuvchi moddalarni olib tashlash temperaturasi) talab etiladi. Lekin temperaturani me'yorida ortib ketishi nanozarralar agregatsiya tezligini keskin oshib ketishiga sabab bo'lib, katta o'lchamdagi NiO nanozarralari hosil bo'lishiga olib keladi [14–18]. Bundan tashqari, turli muhitlarda nanozarralar o'lchamini boshqarishda [10] va ularning muhit molekullari bilan o'zaro ta'sirlashishi tufayli vujudga keladigan diffuziya hodisalari [19] mexanizmlarini talqin qilishda hamda nanosuyuqliklarning issiqlik o'tkazuvchanlik samaradorligini oshirishda [20] nanozarralar agregatsiya jarayonlarini o'rganish fundamental ahamiyatga ega [21].

NiO nanozarralar agregatsiya jarayonlari ideal muhitda (ya'ni, gaz va suvli eritmalarida) qisman o'rganilgan bo'lsada [22–25], ularning suyuqlik muhitidagi xususiyatlari molekulyar darajada yetarlicha o'rganilmagan [26,27]. Xususan, NiO nanozarralari konsentratsiyasi oshib borishi bilan nanosuyuqlikning issiqlik o'tkazish xususiyati yaxshilanib borsada [12], nanozarralar konsentratsiyasini 0.6% massaviy ulushdan oshishi nanosuyuqlikda nanoagregatlarning hosil bo'lishiga olib keladi [28]. Buning natijasida nanozarralar sedimentatsiyasi (ya'ni, cho'kma) paydo bo'lib, nanosuyuqlikda "suyuq-qattiq" fazalar vujudga keladi [29]. Bu esa nanosuyuqlik agregat holatining o'zgarishiga va nanosuyuqlik issiqlik tashish xususiyatining yomonlashishiga olib keladi [30,31]. Suyuq muhitda transmissiya elektron mikroskop (TEM) orqali nanoagregatlar o'lchamini aniqlashda namunani o'ta past temperaturada ushlab turish talab etiladi. Bu kabi eksperimental sharoitlar muhit bilan nanozarralar orasidagi o'zaro ta'sir jarayonlariga ta'sir etishi tufayli muhitda nanoagregatlar o'zaro ta'sirining tub mexanizmlari haqida to'liq ilmiy manzara yaratish [32] ham murakkabligicha qolmoqda [33]. Shuning uchun, ushbu ishda, NiO nanoklasterlarining xona temperaturasida agregatsiyalanish jarayoniga suv muhitining ta'siri kompyuterda modellashtirish yordamida tadqiq qilindi.

Modellashtirish usuli va tafsilotlari

1. *Modellashtirish usuli.* NiO nanozarralarining agregatsiya jarayoni reaktiv molekulyar dinamika (MD) usuli [34] orqali modellashtirildi. MD usulida, termodinamik tizimdagi har bir atomning joylashgan o'rni va tezligi vaqt birligi ichida Nyuton harakat tenglamalarini yechish orqali aniqlanadi. MD ga asoslangan modellashtirishlarda, tizim atomlariga mos ta'sir potentsialini tanlash modellashtirish natijalarining ishonchlilikiga asos bo'lib xizmat qiladi. Ushbu tadqiqot ishida, tizimdagi Ni, O va H atomlari orasidagi o'zaro ta'sir Zou va boshqalar tomonidan ishlab chiqilgan parametrlarga asoslangan ReaxFF potentsiali orqali ifodalanadi [35]. Ushbu tadqiqot ishida, jarayonlarni modellashtirish klassik MD usuliga asoslangan hamda materialshunoslikda fizik-kimyoviy jarayonlarni modellashtirishda keng qo'llaniladigan LAMMPS dasturiy to'plamidan foydalanib bajarildi [36].

2. *Modellashtirish tafsilotlari.* Bu tadqiqotda diametri 1.15 nm atrofiga bo'lgan 55 ta nikel va 55 ta kislorod atomidan tashkil topgan NiO nanoklasterlaridan foydalanildi. Bu nanoklasterlarning o'lchami eksperimental (1.48 nm [37]) va boshqa MD modellashtirish usullari yordamida tadqiq qilingan NiO nanoklasterlarining o'lchamiga (1.30 nm [38]) yaqin. NiO nanoklasterlarining agregatsiyasida muhitning ta'sirini o'rganish uchun modellashtirish jarayonlari vakuumda va suvda amalga oshirildi. Modellashtirish jarayonlarida muhit sifatida tanlab olingan suv modelining strukturaviy, statik va dinamik parametrlari nazariy va eksperiment orqali olingan qiymatlar bilan mos keladi [39]. Xususan, suv muhitidagi vodorod va kislorod atomlari orasidagi kimyoviy bog' uzunligi 0.098 nm va H-O-H bog'lanish burchagi 104.5° ni tashkil qilib, bu qiymatlar eksperimental [40] va nazariy hisoblash natijalari [41] bilan mos keladi [42]. NiO nanoklasterlari vakuumda joylashgan holat uchun termodinamik tizim 2 ta Ni₅₅O₅₅ nanoklasteri (umumiy 220 ta atom) dan, suv muhitida esa 2 ta Ni₅₅O₅₅ nanoklasteri hamda 2055 ta H₂O suv molekulasini (umumiy 6385 ta atom) dan tashkil topadi. Modellashtirish jarayonida ikkita NiO nanoklasterlar vakuumda va suvda bir-biridan bir xil uzoqlikda joylashtirilib, ularning massa markazlari orasidagi dastlabki masofa 1.56 nm sifatida olindi. Ularning dastlabki holatdagi ko'rinishlari 1-rasmda tasvirlangan.



1-rasm. NiO nanoklastlarining vakuumdagi (a) va suvdagi (b) ko'rinishlari. Bu yerda Ni, O va H atomlari mos ravishda yashil, qizil, va oq ranglarda tasvirlangan.

Modellashtirish fazosining geometrik o'lchamlari $4 \times 4 \times 4 \text{ nm}^3$ ga teng. Atomlarning bir-biri bilan o'zaro ta'sir doirasi $r_{cut} = 1 \text{ nm}$ [35] ni e'tiborga olib, modellashtirish fazosi o'lchamlari yetarlicha katta ($> 2r_{cut}$) qilib tanlab olindi. Kompyuter imkoniyatlari cheklangani bois, termodinamik tizimdagi juda katta sondagi atomlarni hisobga olish uchun modellashtirish fazosining X, Y va Z yo'nalishlari bo'yicha davriylik shartlari qo'llanildi.

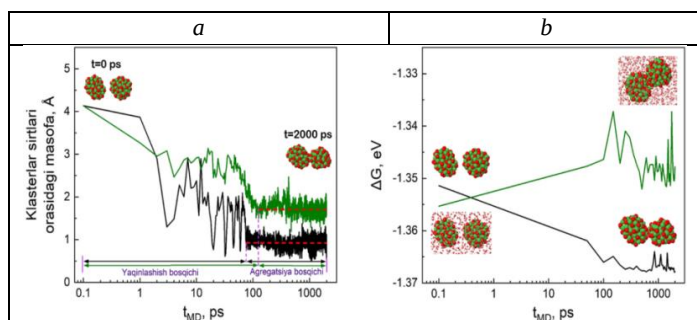
Modellashtirishlarda model tizim energiyasi, dastlab, *keskin tushish* va *birlashgan gradient* usullarini qo'llash orqali minimal darajaga keltirildi. So'ngra, tizimning temperaturasi Nose-Hoover termostati [43] yordamida (NVT ansamblida) 1 K/ps tezlik bilan 300 K gacha qizdirilib, 2 ns davomida ushbu temperaturada ushlab turiladi. Modellashtirishlarda vaqt qadami 0.5 fs sifatida tanlab olindi.

3. *Molyar Gibbs erkin energiyasi.* Muhitdagi NiO nanoklastlari va ular agregatsiya holatining barqarorligi quyidagicha ifodalangan molyar Gibbs erkin energiyasining o'zgarishi (δG) orqali baholandi [44]:

$$\delta G = E_{coh} - \sum \chi_i \mu_i$$

bu yerda E_{coh} – tizimning har bir atomiga to'g'ri keluvchi (kogesiya) energiya. χ_i va μ_i – tizimdagi i turdagi atom konsentratsiyasining tizimdagi jami atomlar konsentratsiyasiga nisbati va uning kimyoviy potentsiali bo'lib, Ni va O uchun bu qiymatlar mos ravishda -4.45 eV va -2.8 eV ga teng [44].

Olingan natijalar va ularning tahlili. NiO nanoklastlarining vakuum va suv muhitida bir-biriga yaqinlashishi nanoklastlar sirtlari orasidagi masofa orqali baholandi. Xususan, 2 a)-rasmida nanoklastlar sirtlari orasidagi masofaning vaqtga bog'liqlik grafigi tasvirlangan. Olingan natijalarga ko'ra, NiO nanoklastlarining agregatsiya jarayonini ikki bosqichga bo'lib tahlil qilish mumkin: (i) “yaqinlashish” (yoki “birikish”) va (ii) “agregatsiya” bosqichlari. Birinchi bosqichda, nanoklastlar sirtlari orasidagi o'rtacha masofa vaqt o'tishi bilan kamayishda davom etsa, ikkinchi bosqichda esa nanoklastlar sirtlari orasidagi o'rtacha masofa vaqt davomida o'zgarib qoladi. Ushbu tadqiqot ishida, NiO nanoklastlari dastlabki holatda bir-biriga juda yaqin joylashganligi sababli nanoklastlar orasida Braun harakati kuzatilmagan, jarayon to'g'ridan-to'g'ri yaqinlashish bosqichidan boshlangan. Vakuumda birinchi va ikkinchi bosqichlar mos ravishda 74 ps (0-74 ps) va 1926 ps (74-2000 ps) davom etsa, suvda esa bu bosqichlar mos ravishda 125 ps (0-125 ps) va 1875 ps (125-2000 ps) davomiylikni tashkil etadi. Xususan, nanoklastlarning agregatsiya jarayoni vakuumdagiga nisbatan 51 ps ga kechikish bilan sodir bo'lishini “nanoklast-suvli muhit” tizimining qovushqoqligi ortishi evaziga [45] Stoks – Eynshteyn qonuni bo'yicha NiO nanoklastlarining suv muhitidagi diffuziya koeffitsiyenti kamayishi [46] orqali tushuntirish mumkin. Nanoklastlar sirtlari orasidagi o'rtacha masofa, dastlab ($t=0$ ps), vakuum va suvli muhitda 0.41 nm ga teng bo'lib, birinchi bosqichda bu masofa vakuumda taxminan 0.09 nm gacha, suvda esa 0.17 nm gacha keskin kamayadi. Natijalar shunga dalolat qiladiki, agregatsiya jarayonida NiO nanoklastlari suvli muhitda vakuumdagiga nisbatan uzoqroq masofada joylashadi.



2-rasm. NiO nanoklastlarining vakuumdagi (qora chiziq) va suvdagi (yashil chiziq) sirtlari orasidagi o'rtacha masofaning (a), hamda molyar Gibbs erkin energiyalari o'zgarishining (b) vaqtga bog'liqligi.

Xususan, jarayonni modellashtirish davomida suvli muhitda joylashgan NiO nanoklastlari sirti bilan suyuq faza o'rtasida hosil bo'lgan qatlarning qalinligi 0.08 nm atrofida ekanligi aniqlandi. Yu [47] va boshqalar [48] tomonidan olib borilgan eksperimental tadqiqot ishlarida suyuqlikdagi nanozarralar atrofida gidrodinamik qobiq paydo bo'lishi va uning o'lchami maksimum 1 nm bo'lishi aniqlangan. Demak, modellashtirish natijasida olingan qiymat tajriba orqali olingan natijalarga yaqin bo'lib, agregatsiya jarayonini o'rganish orqali gidrodinamik qobiq va uning o'lchamini baholash imkonini beradi.

Nanoagregatlarning barqarorlik holatini baholash uchun molyar Gibbs erkin energiya o'zgarishi qo'llanildi [26]. 2 b)-rasmida NiO nanoklastlarning vakuumda va suvda molyar Gibbs erkin energiyasining vaqt o'tishi bilan o'zgarishi tasvirlangan. Natijalar shuni ko'rsatdiki, vakuumda NiO nanoklastlari molyar Gibbs erkin energiyasining jarayon boshidagi qiymati (-1.351 eV) nanoklastlar o'zining hali barqaror holatda emasligi tufayli yaqinlashish bosqichi davomida sekinlik bilan kamayib borib, agregatsiya bosqichida klasterlarning erkin energiyasi o'zining -1.367 eV qiymatida deyarli o'zgarib qoladi. Aksincha, suv muhitida esa vakuumdagidan farqli natijani ko'rishimiz mumkin. Xususan, suvdagi nanoklastlarning molyar Gibbs erkin energiyasi dastlab eng kichik -1.355 eV qiymatiga ega bo'lib, vaqt o'tishi bilan bu qiymat ortib borishi aniqlandi. Olingan qiymatlardagi kuchli o'zgarishlar shunga dalolat qiladiki, nanoagregatlar suv bilan o'zaro ta'sirlashishi tufayli o'zining barqarorligini vakuumdagiga nisbatan kamaytiradi.

Garchi Y. Zang va boshqalar olib borgan tadqiqotlarda turli xil metall oksidi nanozarralarining suv muhitidagi agregatsiyasi vakuumdagiga nisbatan barqarorroq ekanligi haqida xabar berishgan bo'lsada [49], aynan NiO nanozarralari agregatsiyasi bo'yicha ma'lumotlar adabiyotlarda uchramaydi. NiO nanozarralari bo'yicha olingan natijalarimiz boshqa nanoklastlarning suvli muhitda barqarorligi bilan bog'liq eksperimental tadqiqot natijalariga mos kelmasligini nanoklastlarning nisbatan juda kichik o'lchamga egaligi orqali izohlash mumkin. Xususan, ushbu tadqiqot ishida NiO

nanoklasterining o'lchami eksperimental tadqiqotlarda [47] o'rganilgan nanozarralar o'lchamidan ancha (taxminan 10–20 marta) kichik bo'lib, suyuq muhitda zarrachaning o'lchami kichraygan sari uning barqarorligi ham kamayishi mumkinligi haqida boshqa tadqiqotlarda keltirilgan natijalar bilan tushuntirilishi mumkin [50]. Yuqoridagilarni inobatga olganda holda, olgan natijalarimiz shunga dalolat qiladiki, kichik (1.15 nm atrofida) o'lchamga ega NiO nanoklasterlarining suv muhitidagi agregatsiyasi natijasida hosil bo'lgan nanoagregatlarning barqarorligi gidrofobik qobiq [45, 46] hosil bo'lishi natijasida pasayadi.

Xulosa. Ushbu ishda, NiO nanoklasterlarining agregatsiya jarayoni mexanizmlari reaktiv molekulyar dinamika (MD) usuli orqali o'rganildi. Natijalar shuni ko'rsatadiki, suv muhitida NiO nanoklasterlari orasida taxminan 0.08 nm qalinlikdagi gidrodinamik qobiq hosil bo'lishi sababli nanoklasterlar vakuumdagiga nisbatan bir-biridan uzoqroq masofada joylashadi. Xususan, NiO nanoklasterlari orasidagi masofa (ya'ni gidrodinamik qobiq qalinligi) eksperimental natijalar bilan mos kelib, olingan natijalar gidrodinamik qobiqning sintez jarayoniga ko'rsatadigan ta'sirini yaxshiroq tushunish uchun yordam beradi.

Undan tashqari, gidrodinamik qobiqning hosil bo'lishi natijasida NiO nanoklasterlari suv muhitidagi barqarorligining pasayishi molyar Gibbs erkin energiyasi orqali baholandi. Umuman olganda, ushbu tadqiqot diametri 1- nm atrofida bo'lgan NiO nanoklasterlarining agregatsiyasi tabiatini atomar darajada tushunishga yordam berib, sintez jarayonida nanokatalizatorlarning o'lchamini boshqarish bo'yicha eksperimentatorlarga ma'lumot beradi.

Tashakkurnoma. Ushbu tadqiqot ishi O'zbekiston Respublikasi Innovatsion rivojlanish vazirligi tomonidan moliyalashtirilgan F-FA-2021-512 fundamental loyiha doirasida bajarildi. Modellashtirish ishlari O'zR FA, Ion-plazma va lazer texnologiyalari institutidagi NanoSim guruhi tomonidan tashkil etilgan FISTUZ superkompyuterlar klasteri yordamida olib borildi.

ADABIYOTLAR

1. Z. Lu and Y. Yin, Colloidal Nanoparticle Clusters: Functional Materials by Design, Chem. Soc. Rev. 2012, 41, 6874.
2. Huang, He, et al. Colloidal Lead Halide Perovskite Nanocrystals: Synthesis, Optical Properties and Applications, NPG Asia Mater. 2016, 8, e328.
3. Hu, Jiangtao, et al. Controlled Growth and Electrical Properties of Heterojunctions of Carbon Nanotubes and Silicon Nanowires, Nature 1999, 399, 48.
4. Jin, Rongchao, et al. Atomically Precise Colloidal Metal Nanoclusters and Nanoparticles: Fundamentals and Opportunities, Chem. Rev. 2016, 116, 10346.
5. Swagten, H. J. M., et al. Enhanced Giant Magnetoresistance in Spin-Valves Sandwiched between Insulating NiO, Phys. Rev. 1996, B 53, 9108.
6. Yang, Huaming, et al. Solid-State Synthesis and Electrochemical Property of SnO₂/NiO Nanomaterials, J. Alloys Compd. 2008, 459, 98.
7. Harraz, F. A., et al. Composition and Phase Control of Ni/NiO Nanoparticles for Photocatalytic Degradation of EDTA, J. Alloys Compd. 2010, 508, 133.
8. Hayat, Khizar, et al. Effect of Operational Key Parameters on Photocatalytic Degradation of Phenol Using Nano Nickel Oxide Synthesized by Sol–Gel Method, J. Mol. Catal. Chem. 2011, 336, 64.
9. J. Bandara and J. P. Yasomane, P-Type Oxide Semiconductors as Hole Collectors in Dye-Sensitized Solid-State Solar Cells, Semicond. Sci. Technol. 2006, 22, 20.
10. A. Aslani, V. Oroojpour, and M. Fallahi, Sonochemical Synthesis, Size Controlling and Gas Sensing Properties of NiO Nanoparticles, Appl. Surf. Sci. 2011, 257, 4056.
11. Liu, Bin, et al. Synthesis and Enhanced Gas-Sensing Properties of Ultralong NiO Nanowires Assembled with NiO Nanocrystals, Sens. Actuators B Chem. 2011, 156, 251.
12. Chen, Zhixiong, et al. Evaluation of Thermal Conductivity of Deionized Water Containing SDS-Coated NiO Nanoparticles under the Influences Of constant and Alternative Varied Magnetic Fields, Powder Technol. 2020, 367, 143.
13. Lang, Fengpei, et al. Improved Size-Tunable Synthesis of Monodisperse NiO Nanoparticles, Mater. Lett. 2016, 181, 328.
14. Han, D. Y., et al. Synthesis and Size Control of NiO Nanoparticles by Water-in-Oil Microemulsion, Powder Technol. 2004, 147, 113.
15. Du, Yu, et al. Preparation of NiO Nanoparticles in Microemulsion and Its Gas Sensing Performance, Mater. Lett. 2012, 68, 168.
16. Mateos, D., et al. Synthesis of High Purity Nickel Oxide by a Modified Sol-Gel Method, Ceram. Int. 2019, 45, 11403.
17. K. P. Raj, V. Thangaraj, and A. P. Uthirakumar, Synthetic Routes to Nickel Oxide Nanoparticles-an Overview, Chemistry 1990, 1980, 6.
18. N. N. M. Zorkipli, N. H. M. Kaus, and A. A. Mohamad, Synthesis of NiO Nanoparticles through Sol-Gel Method, Procedia Chem. 2016, 19, 626.
19. Jose-Yacaman, M., et al. Surface Diffusion and Coalescence of Mobile Metal Nanoparticles, J. Phys. Chem. B 2005, 109, 9703.
20. W. Yu and S. U. S. Choi, The Role of Interfacial Layers in the Enhanced Thermal Conductivity of Nanofluids: A Renovated Maxwell Model, J. Nanoparticle Res. 2003, 5, 167.
21. Jiang, Di, et al. Determining the Aggregation Kinetics of Nanoparticles by Single Nanoparticle Counting, ACS EST Water 2020, 1, 672.
22. J. A. Medford, A. C. Johnston-Peck, and J. B. Tracy, Nanostructural Transformations during the Reduction of Hollow and Porous Nickel Oxide Nanoparticles, Nanoscale 2013, 5, 155.
23. Siddiqui, Maqsood A., et al. Nickel Oxide Nanoparticles Induce Cytotoxicity, Oxidative Stress and Apoptosis in Cultured Human Cells That Is Abrogated by the Dietary Antioxidant Curcumin, Food Chem. Toxicol. 2012, 50, 641.
24. Sun, Jing, et al. UV Irradiation Induced Transformation of TiO₂ Nanoparticles in Water: Aggregation and Photoreactivity, Environ. Sci. Technol. 2014, 48, 11962.
25. S. Shrestha, B. Wang, and P. Dutta, Nanoparticle Processing: Understanding and Controlling Aggregation, Adv. Colloid Interface Sci. 2020, 279, 102162.

26. D. Spagnoli, J. F. Banfield, and S. C. Parker, Free Energy Change of Aggregation of Nanoparticles, *J. Phys. Chem. C* 2008, 112, 14731.
27. M. Alimohammadi and K. A. Fichthorn, Molecular Dynamics Simulation of the Aggregation of Titanium Dioxide Nanocrystals: Preferential Alignment, *Nano Lett.* 2009, 9, 4198.
28. Gupta, V., et al. Investigations on Acoustical and Thermal Properties of Ethylene Glycol Based Nickel Oxide Nanofluids: Concentration and Temperature, *Russ. J. Phys. Chem. A* 2020, 94, 2312.
29. Jiang, Weiting, et al. Modeling of Nanoparticles' Aggregation and Sedimentation in Nanofluid, *Curr. Appl. Phys.* 2010, 10, 934.
30. N. R. Karthikeyan, J. Philip, and B. Raj, Effect of Clustering on the Thermal Conductivity of Nanofluids, *Mater. Chem. Phys.* 2008, 109, 50.
31. K. S. Hong, T.-K. Hong, and H.-S. Yang, Thermal Conductivity of Fe Nanofluids Depending on the Cluster Size of Nanoparticles, *Appl. Phys. Lett.* 2006, 88, 031901.
32. P. Grammatikopoulos, M. Sowwan, and J. Kiouoglou, Computational Modeling of Nanoparticle Coalescence, *Adv. Theory Simul.* 2019, 2, 1900013.
33. Lizunova, A. A., et al. Comparison of the Results of Measurements of the Sizes of Nanoparticles in Stable Colloidal Solutions by the Methods of Acoustic Spectroscopy, Dynamic Light Scattering, and Transmission Electron Microscopy, *Meas. Tech.* 2017, 59, 1151.
34. B. J. Alder and T. E. Wainwright, Phase Transition for a Hard Sphere System, *J. Chem. Phys.* 1957, 27, 1208.
35. Zou, Chenyu, et al. Molecular Dynamics Simulations of the Effects of Vacancies on Nickel Self-Diffusion, Oxygen Diffusion and Oxidation Initiation in Nickel, Using the ReaxFF Reactive Force Field, *Acta Mater.* 2015, 83, 102.
36. S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *J. Comput. Phys.* 1995, 117, 1.
37. Lu, Yulan, et al. A Combined DFT and Experimental Study on the Nucleation Mechanism of NiO Nanodots on Graphene, *J. Mater. Chem. A* 2018, 6, 13717.
38. P. Van de Sompel, U. Khalilov, and E. C. Neyts, Contrasting H-Etching to OH-Etching in Plasma-Assisted Nucleation of Carbon Nanotubes, *J. Phys. Chem. C* 2021, 125, 7849.
39. Yusupov, M., et al. Reactive Molecular Dynamics Simulations of Oxygen Species in a Liquid Water Layer of Interest for Plasma Medicine, *J. Phys. Appl. Phys.* 2014, 47, 025205.
40. F. Franks, *Water A Comprehensive Treatise: Aqueous Solutions of Amphiphiles and Macromolecules* 1975 (Springer US, Boston, MA).
41. S. W. Rick, S. J. Stuart, and B. J. Berne, Dynamical Fluctuating Charge Force Fields: Application to Liquid Water, *J. Chem. Phys.* 1994, 101, 6141.
42. Fogarty, Joseph C., et al. A Reactive Molecular Dynamics Simulation of the Silica-Water Interface, *J. Chem. Phys.* 2010, 132, 174704.
43. D. J. Evans and B. L. Holian, The Nose-Hoover Thermostat, *J. Chem. Phys.* 1985, 83, 4069.
44. U. Khalilov and E. C. Neyts, Mechanisms of Selective Nanocarbon Synthesis inside Carbon Nanotubes, *Carbon* 2021, 171, 72.
45. Huminic, Angel, et al. Thermal Conductivity, Viscosity and Surface Tension of Nanofluids Based on FeC Nanoparticles, *Powder Technol.* 2015, 284, 78.
46. G. Lu, Y.-Y. Duan, and X.-D. Wang, Surface Tension, Viscosity, and Rheology of Water-Based Nanofluids: A Microscopic Interpretation on the Molecular Level, *J. Nanoparticle Res.* 2014, 16, 2564.
47. Yu, C.-J., et al. Molecular Layering in a Liquid on a Solid Substrate: An X-Ray Reflectivity Study, *Phys. B Condens. Matter* 2000, 283, 27.
48. Li, Ling, et al. An Investigation of Molecular Layering at the Liquid-Solid Interface in Nanofluids by Molecular Dynamics Simulation, *Phys. Lett. A* 2008, 372, 4541.
49. Zhang, Yang, et al. Stability of Commercial Metal Oxide Nanoparticles in Water, *Water Res.* 2008, 42, 2204.
50. Nithiyanantham, Udayashankar, et al. Effect of Silica Nanoparticle Size on the Stability and Thermophysical Properties of Molten Salts Based Nanofluids for Thermal Energy Storage Applications at Concentrated Solar Power Plants, *J. Energy Storage* 2022, 51, 104276.