

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Сумський державний університет
Факультет електроніки та інформаційних технологій
Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

_____ Коплик І. В.

__ _____ 2023 р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня магістр

зі спеціальності 113 Прикладна математика, освітньо-професійної програми
Наука про дані та моделювання складних систем

на тему: Моделювання методом молекулярної динаміки залежності сили тертя
від площі контакту металевих наночастинок на графені

Здобувача групи ПМ.м-21 Самілика Антона Анатолійовича

Кваліфікаційна робота містить результати власних досліджень.
Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на
відповідне джерело.

_____ Антон Самілик

Керівник професор, доктор фіз.-мат. наук, Хоменко О.В. _____

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет **електроніки та інформаційних технологій**
Кафедра **прикладної математики та моделювання складних систем**
Рівень вищої освіти **другий (магістр)**
Галузь знань **11 Математика та статистика**
Спеціальність **113 «Прикладна математика»**
Освітня програма **освітньо-професійна 113.2 Наука про дані та моделювання складних систем**

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ПМ та МСС
доцент Коплик І.В. _____

«__» _____ 2023 р.

З А В Д А Н Н Я

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧУ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Самілику Антону Анатолійовичу

1. Тема роботи Моделювання методом молекулярної динаміки залежності сили тертя від площі контакту металевих наночастинок на графені.
2. Керівник роботи Хоменко О.В., професор, доктор фіз.-мат. наук затверджено наказом по факультету ЕІТ від «07» листопада 2023 р. № 1237-VI
3. Термін подання роботи студентом «19» грудня 2023 р.
4. Вихідні дані до роботи 1) Аналіз взаємодії металевих наночастинок з графеном засобами методів молекулярної динаміки та класичними законами механіки; 2) Обчислення траєкторій руху частинок у системі, показників динамічних та термодинамічних властивостей системи.
5. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити) Аналіз динаміки взаємодії металевих наночастинок з графеном за допомогою методу молекулярної динаміки. Розробка

математичної моделі для вивчення впливу різних факторів на властивості системи, таких як температура, тиск, площа контакту і величина зовнішнього поля. Комп'ютерне моделювання для оцінки термодинамічних і механічних характеристик взаємодії.

6. Перелік графічного матеріалу

- 1) Залежність напружень зсуву як функції площі контакту різних металів.
- 2) Відображення функції радіального розподілу для наночастинок алюмінію та паладію.
- 3) Різниця площі контакту металів між розрахунками еліпса і новим методом.

7. Консультанти до проекту (роботи), із значенням розділів проекту, що стосується їх Відсутні

8. Дата видачі завдання «01» листопада 2023 р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

САМІЛИКА АНТОНА АНАТОЛІЙОВИЧА

№ п/п	Найменування роботи, заходи	Термін виконання	Примітка
1	Провести ознайомлення з фізичними властивостями металів та графену.	01.11-03.11	
2	Ознайомитися з основними методами моделювання та симуляції процесів тертя металів.	03.11-07.11	
3	Аналіз існуючих джерел за темами “Моделювання процесів тертя металів”, “Взаємодія вуглецю та металів на атомарному рівні”, “Методи молекулярної динаміки”.	07.11-10.11	
4	Побудувати математичні моделі, які моделюють взаємодію метал-метал, вуглець-вуглець, вуглець-метал.	10.11-15.11	
5	Дослідити зміни у взаємодіях, спираючись на відповідні математичні моделі та параметри.	15.11-18.11	
6	Виконати комп'ютерне моделювання, шляхом симуляції руху частинок та встановити залежність площі контакту від сили тертя (залежно від	18.11-28.11	

	вхідних параметрів).		
7	Провести аналіз отриманих результатів відповідно до емпіричних досліджень.	28.11-18.12	

Здобувач вищої освіти

_____ Самілик А.А.
(підпис) (прізвище та ініціали)

Керівник роботи

_____ Хоменко О. В.
(підпис) (прізвище та ініціали)

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота: 41 с., 7 рисунків, 19 джерел.

Мета роботи: Дослідження взаємодії між металевими наночастинками і графеном використовуючи механізми, які можуть включати тертя та більш складні процеси методами молекулярної динаміки.

Об'єкт дослідження: Взаємодія між металевими наночастинками та графеном.

Предмет дослідження: Зміна сили тертя в залежності від різних параметрів системи, включно з температурою, навантаженням, швидкістю руху наночастинок, їх геометричними та хімічними властивостями.

Методи навчання: Молекулярна динаміка, математичне моделювання, чисельні та аналітичні методи розв'язку диференціальних рівнянь.

У випадку дослідження Ван дер Ваальсових сил застосовується апроксимація модифікованим потенціалом Леннарда-Джонса. Показано, що сила тертя залежить лінійно від площі контакту наночастинок. Для підтвердження чисельних розрахунків, наведені графіки залежностей відповідних механічних та термодинамічних величин при уточненні параметрів.

Ключові слова: МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, ГРАФЕН, МЕТАЛЕВІ НАНОЧАСТИНКИ, СИЛА ТЕРТЯ, ТРИБОЛОГІЯ.

ЗМІСТ

ЗМІСТ	6
ВСТУП.....	7
1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД.....	8
1.1 Поняття молекулярної динаміки.....	8
1.2 Опис графену.....	9
1.3 Динаміка металевих наночастинок на графені	11
1.4 Вплив площі контакту на силу тертя.....	12
1.5 Огляд існуючих математичних моделей тертя	13
1.6 Комп'ютерне моделювання в наукових дослідженнях.....	14
1.7 Перспективи використання графену в мікро- та нанотехнологіях	15
2 ОСНОВНА ЧАСТИНА	17
2.1 Постановка задачі.....	17
2.2 Математична модель	18
2.2.1 Опис взаємодії металу з графеном.....	19
2.2.2 Взаємодія наночастинок з графеном	21
2.2.3 Моделювання сили тертя.....	24
2.3 Комп'ютерна модель	26
2.3.1 Вибір програмного забезпечення.....	27
2.3.2 Імплементация моделі	29
2.4 Проведення моделювання	31
ВИСНОВКИ	38
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ	39
ДОДАТОК А	40
Код програми	40

ВСТУП

Сучасний світ стає свідком безперервного розвитку в галузях наукових досліджень та інновацій, зокрема у сфері нанотехнологій. Неперевершена міцність, провідність та інші унікальні властивості графену відкривають нові горизонти для розробки передових технічних рішень, від легких композитних матеріалів до електронних і мембранних систем. Один з ключових аспектів, що стосується ефективності цих технологічних застосувань, полягає у взаємодії металевих наночастинок з графеновими поверхнями, зокрема в залежності таких властивостей як сила тертя від площі контакту [1-12].

Завдяки розвитку технологій електронного та тунельного мікроскопів, спостерігається швидкий приріст експериментальних досліджень у сфері нанотрибології. Дослідники зійшлися на думці, що трибологічні властивості нанорозмірних систем не підпорядковуються відомим макроскопічним законам, тому їх теоретичний аналіз потребує подальшого розвитку. Моделювання тертя у випадку металевих наночастинок на графітовій поверхні знаходиться на початковому етапі. Вивчення нанорозмірних систем, насамперед їх трибологічних властивостей, є важливим. Це пов'язано з тим, що реальна поверхня має неоднорідну структуру, яку слід враховувати.

Комп'ютерне моделювання за допомогою методу молекулярної динаміки є альтернативним методом для теоретичного дослідження процесів тертя на атомному рівні, оскільки воно забезпечує компроміс між аналітичною моделлю і експериментальними умовами, і широко використовується для вирішення завдань у сфері нанотрибології. Враховуючи, що часто неможливо накласти бажану поведінку на нанооб'єкт, зокрема у поточний момент, методи теоретичного аналізу стають актуальними, дозволяють прогнозувати еволюцію властивостей наночастинок. Метод молекулярної динаміки дозволяє отримувати всі координати атомів на кожний момент часу симуляцій. Завдяки цьому ми маємо змогу розробляти підходи до підрахунку числових характеристик, таких як, наприклад, площа контакту між металевою наночастиною та графеновою підкладкою.

Даній звіт має на меті не просто об'єднати теоретичні основи з практичною стороною моделювання, але й забезпечити фундамент для майбутніх експериментальних та теоретичних досліджень у цій області, а також прагне відобразити потенційні приклади застосування цих знань в реальних виробничих процесах та розробках.

1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД

1.1 Поняття молекулярної динаміки

Молекулярна динаміка (МД) є потужним числовим методом, що дозволяє моделювати та вивчати рух атомів та молекул в різних системах. Метод ґрунтується на фізичних законах руху і здатний відтворювати реалістичні траєкторії для кожного атома чи молекули в часі. За допомогою МД можна проводити віртуальні експерименти, що імітують реальні умови на атомному рівні з надзвичайно високою точністю.

Фундаментом молекулярної динаміки є розв'язання рівнянь руху Ньютона для системи взаємодіючих часток, зазвичай атомів або молекул. Для цього використовують інтератомні потенціали, які визначають сили взаємодії між частинками та їх потенційну енергію. Потенціали можуть бути як емпіричними, так і похідними від більш загальних квантово-механічних розрахунків.

Рівняння руху Ньютона для кожного атома:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i, \quad (1.1)$$

де m_i - це маса i -того атома, r_i - вектор його положення, а F_i - вектор сумарної сили, що діє на атом.

Для інтеграції рівнянь руху загально прийнятий алгоритм – це часовий алгоритм Верле, що дозволяє визначити положення всіх атомів у системі в будь-який момент часу. Рівняння Верле:

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + \frac{F(t)}{m} \Delta t^2, \quad (1.2)$$

де Δt - малий часовий крок, а $F(t)$ - сила, яка діє на атом у час t [12].

Для визначення термодинамічних величин, таких як температура T та тиск P , використовуються наступні рівняння:

Температура:

$$k_B T = \langle E_{kin} \rangle / \left(\frac{3}{2} N \right), \quad (1.3)$$

де k_B - стала Больцмана, E_{kin} - кінетична енергія, а N - кількість ступенів свободи [11].

Тиск:

$$P = \frac{Nk_B T}{V} + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i < j} r_{ij} \cdot F_{ij} \right\rangle, \quad (1.4)$$

де V - об'єм, а $r_{ij} \cdot F_{ij}$ — скорочена сила взаємодії між частинками [11].

МД моделювання включає в себе ряд кроків, що дозволяють досліджувати динаміку системи протягом заданого проміжку часу. Спершу, задається початкова конфігурація системи. Потім, застосовуючи закони класичної механіки, обчислюються траєкторії всіх часток у системі для кожного кроку по часу. На основі цих даних можна отримати динамічні властивості, такі як кінетичну енергію, температуру, тиск, а також термодинамічні характеристики системи.

Метод молекулярної динаміки має широкий спектр застосувань. Він є важливим інструментом у матеріалознавстві, нанотехнологіях, біофізиці та багатьох інших галузях. Зокрема, використовуючи МД, дослідники можуть вивчати властивості наноструктур, взаємодію між різними матеріалами, складні біологічні системи та навіть процеси, що відбуваються всередині живих клітин.

Одним із ключових досягнень МД є здатність моделювати величезну кількість взаємодій у складних багаточасткових системах, що є недосяжним для експериментальних методів. Таким чином, він відкриває нові можливості для поглибленого розуміння фундаментальних процесів та створення нових матеріалів з бажаними властивостями.

Важливо відзначити, що МД моделювання потребує великих обчислювальних ресурсів, особливо коли мова йде про симуляцію великих систем або про довготривалі процеси. Впродовж останніх років, завдяки розвитку засобів паралельних обчислень та CUDA спеціалізованих програмних пакетів, стало можливим ефективніше моделювати явища на нанорівні, давши дослідникам потужний інструмент для аналізу і розуміння матерії на мікроскопічному рівні.

1.2 Опис графену

Графен - це одноатомний шар вуглецю, влаштований як двовимірна мережа з шестикутних кілець, що нагадує вулик. Завдяки своїй унікальній структурі, графен виявляє ряд неперевершених фізичних властивостей, таких як виняткова механічна міцність, висока теплопровідність, надзвичайна електрична провідність і низький рівень тертя.

Будова та фізичні властивості графену:

- **Атомна структура:** В атомах графену електрони sp^2 -гібридизації формують міцні σ -зв'язки в площині, тоді як вільні p -електрони протікають по площині, забезпечуючи високу електричну провідність.
- **Механічні властивості:** Графен вважається одним з найміцніших матеріалів, що виразно демонструє його здатність витримувати значні навантаження до того як він зруйнується, з теоретичною міцністю на розрив близько 130 ГПа.
- **Теплопровідність:** Графен має одну з найвищих теплопровідностей серед відомих матеріалів (більше 5000 Вт/м·К), що робить його ідеальним для застосувань, де потрібне швидке розсіювання тепла.
- **Електрична провідність:** Його електрична провідність може бути кращою за мідь, при цьому він залишається напівпрозорим.
- **Електронні властивості:** Графен показує високу електронну мобільність при кімнатній температурі, досягаючи до 200 000 $cm^2/V \cdot s$.

Графен надзвичайно легкий, один квадратний метр цього матеріалу важить приблизно 0.77 міліграми. Його товщина - близько 0.34 нм, що є насправді надтонкою межею.

Графен служить основою для цілого спектру інших вуглецевих матеріалів, включаючи графіт, вуглецеві нанотрубки (CNT), графеновий оксид (GO), та зменшений графеновий оксид (rGO). Кожен з цих матеріалів демонструє унікальні властивості, які можуть бути адаптовані для спеціалізованих застосувань[1].

Графен також може бути комбінований з іншими двовимірними матеріалами для створення гетероструктур, які можуть мати нові електронні, оптичні чи механічні властивості.

Для дослідження металевих наночастинок на графені, важливо розуміти не лише фізичні властивості графену, але й те, як графенова підкладка впливає на адгезію, дифузію та інші поверхневі процеси металевих наночастинок.

Дослідження динаміки металевих наночастинок на графені є важливим аспектом у пізнанні трибологічних та механічних властивостей на нанорівні. Графен, вважаючи його виняткові механічні та електронні властивості, становить інтерес у контексті змащувальних матеріалів і потенційних антифрикційних покриттів. Металеві наночастинки можуть взаємодіяти з графеном через різні механізми: від простого ковзання до більш складних процесів, таких як проникнення або вбудовування до графенової підкладки.

Графен є винятковим матеріалом для створення нанокомпозитів, які мають високу продуктивність і застосовуються у біологічній сфері, завдяки

своїй високій площі поверхні, великому аспектному співвідношенні, чудовим фізичним характеристикам і біосумісності.

В графені бензольні кільця розподілені таким чином, що це впливає на утворення ковалентних і нековалентних зв'язків з іншими атомами, що змінює його хімічну та електричну поведінку. Шестикутна плоска решітка є основою структури графену. Кожен атом вуглецю має чотири валентні електрони, три з яких ($2s$, $2p_x$ та $2p_y$) формують плоскі sp^2 гібридні орбіталі. Останній електрон орбіталі забезпечує міцний зв'язок і може вільно переміщатися по площині.

Виняткові структурні та морфологічні особливості графену та оксиду графену призводять до їх переважних електричних, механічних та термічних властивостей. Вони виявляють високу теплопровідність, ефект Холла, ефект тунелювання та біполярний ефект електричного поля. Максимальна рухливість електронів при кімнатній температурі може досягати $2 \times 10^5 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, а ідеальна провідність G становить більше $1 \times 10^6 \text{ см}^{-1}$. Його питома поверхня може бути до $2630 \text{ м}^2/\text{г}$, модуль Юнга може досягати 1100 ГПа , а прозорість для видимого світла складає близько $97,9\%$.

Оксид графену – це двовимірний вуглецева сполука з одноатомним шаром і різними розмірами листів. Порівняно з графеном, оксид графену має більшу кількість кисневих функціональних груп на своєму шарі, що ускладнює його структуру та впливає на його властивості. Графен є базовим елементом двовимірної вуглецевої родини, до якої входять елементи з різними властивостями на основі різних морфологій, дефектів, розмірів та шарів. Завдяки своїй незвичайній 2D структурі, графен є напівпровідником з нульовим зазором, що має як напівпровідникові, так і металеві властивості. Однак тришаровий графен має змішану структуру смуг моношару та бішару, а бішаровий графен демонструє параболічні смуги без електронів Дірака. Загалом, лінійна смуга існує у непарних шарах графену зі структурою штабеля АВ. Структура смуг стає все складнішою зі збільшенням кількості шарів графену через перекриття зон провідності та валентності[2].

1.3 Динаміка металевих наночастинок на графені

Розглянемо модель системи металевої наночастинки на графені, де основною взаємодією є ван-дер-Ваальсове притягнення та відштовхування, описане потенціалом Леннарда-Джонса. Цей потенціал описує взаємодію між парою атомів чи молекул, але може масштабуватися для опису взаємодії між більшими структурами, такими як наночастинки і плоскі поверхні:

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1.5)$$

де r відповідає відстані між центрами атомів (або точок на поверхнях), ϵ є глибиною потенціалу, а σ виражає відстань, на якій потенціал перетинає нуль.

Силу, що виникає у результаті цього потенціалу, можна обрахувати через градієнт:

$$F_{LJ}(r) = -\nabla V_{LJ}(r) = 24\epsilon \left[2 \left(\frac{\sigma^{12}}{r^{13}} \right) - \left(\frac{\sigma^6}{r^7} \right) \right] \hat{r}, \quad (1.6)$$

де \hat{r} є одиничним вектором, що вказує напрямок взаємодії між атомами, а від'ємний знак вказує, що сила направлена в бік протилежний до градієнту потенціалу.

Ще одним важливим аспектом в моделюванні є визначення контактної площі між наночастинкою та графеновою підкладкою. Розрахунок цієї площі може бути заснований на розподілі локальних мінімумів потенціалу Леннарда-Джонса, використовуючи наступний вираз:

$$A_{contact} = \pi \times (r_{min})^2, \quad (1.7)$$

де r_{min} - це радіус наночастинки, на якому потенціал має локальний мінімум.

Взаємодія металевих наночастинок з графеном вважається складною через їх суттєві відмінності в хімічній природі та електронній структурі. Для моделювання цієї системи необхідно використовувати складні мультирівневі моделі, що забезпечують адекватне представлення взаємодії між гетерогенними поверхнями.

Таким чином, якісне та кількісне розуміння процесів взаємодії металевих наночастинок з графеновими поверхнями дає можливість не лише прогнозувати поведінку таких систем при різних умовах експлуатації, але й розробляти нові матеріали та технології, які могли б використовувати ці властивості на практиці.

1.4 Вплив площі контакту на силу тертя

Сила тертя між двома поверхнями є ключовою характеристикою у визначенні трибологічної взаємодії, особливо на нанорівні. У випадку графену та металевих наночастинок, площа контакту відіграє вирішальну роль, оскільки сила тертя прямо пов'язана з реальною контактною площею, а не з очікуваною на основі макроскопічних розмірів. На мікроскопічному рівні, це може бути пояснено змінами у взаємодіях між атомами, які знаходяться в зоні дотику.

Амонтонс-Колумбів закон тертя для макроскопічних систем стверджує, що сила тертя, $F_{friction}$, пропорційна нормальній силі, F_{normal} , що діє між поверхнями:

$$F_{friction} = \mu F_{normal}, \quad (1.8)$$

де μ - коефіцієнт тертя.

Однак, на нанорівні поведінка може суттєво відрізнятись, і тому необхідно модифікувати цей підхід. Відношення між силою тертя та площею контакту можна виразити за допомогою модифікованої моделі, яка враховує адгезійні впливи та деформацію поверхонь на атомарному рівні:

$$F_{friction} = \mu F_{normal} + \tau A_{contact}, \quad (1.9)$$

де τ - напруження зсуву, яке діє на площу контакту, $A_{contact}$ - реальна контактна площа між графеновою підкладкою і металевою наночастинкою.

Залежність сили тертя від контактної площі можна додатково проаналізувати, враховуючи зміни мікроскопічної топографії та механічних властивостей в результаті навантаження. Емпірично можна встановити, що для багатьох нанорозмірних систем, середнє напруження зсуву, $\underline{\tau}$, яке виникає внаслідок тертя, може мати неочікувану залежність від площі контакту:

$$\underline{\tau} = k(A_{contact})^n, \quad (1.10)$$

де k та n - емпіричні константи, що відображають взаємодію між поверхнями.

В експериментах з молекулярної динаміки, можливо також спостерігати лінійну залежність між силою тертя та контактною площею, проте це залежить від конкретної системи та умов:

$$F_{friction}(A_{contact}) = \alpha + \beta A_{contact}, \quad (1.11)$$

де α і β - константи, характерні для кожної взаємодії.

Вивчення впливу контактної площі на силу тертя може допомогти зрозуміти механізми адгезії, пластичної та еластичної деформації відповідно до природи матеріалів, що взаємодіють на нанорівні. Подальший прогрес у цій області може призвести до розвитку нових методик для створення ефективних змащувальних матеріалів, які зменшать енергетичні втрати та знос у багатьох прикладних областях.

1.5 Огляд існуючих математичних моделей тертя

Наукове співтовариство давно визнає, що традиційні макроскопічні закони тертя не завжди можуть бути застосовні при вивченні взаємодії на нанорівні. Внаслідок цього, присутній розвинутий ряд математичних моделей, що прагнуть краще описати поведінку тертя в межах наномасштабів.

Одними із найбільш відомих моделей є теорія тертя Першиця-Томлінсона (PT) та Дерягіна (BD). PT модель є однією з перших теоретичних спроб дослідити механізми атомарного тертя, описуючи взаємодію між

наночастинкою та поверхнею як пружно зв'язану частку на періодичному потенціалі. VD модель розширює це розуміння, розглядаючи вплив адгезії.

PT модель описується наступним чином:

$$F_{friction} = k(x - x_0) - F_{ext} \sin(2\pi x/a), \quad (1.12)$$

де k - пружність зв'язу, x - положення наночастинки, x_0 - положення рівноваги, F_{ext} - амплітуда зовнішньої періодичної сили, і a - відстань між потенційними мінімумами [8].

VD модель додає адгезійні впливи до класичної PT моделі:

$$F_{friction} = \mu(F_{normal} + F_{adhesion}) - \tau_c A_{contact}, \quad (1.13)$$

де $F_{adhesion}$ - сила адгезії, втягуючи частку у потенційну яму, а τ_c - критичне напруження зсуву, що характеризує місцеву адгезію між наночастинкою та графеном [3].

Інший підхід полягає у використанні моделі випадкових пружин (SRS), що ефективно враховує вклад багатьох дрібних взаємодій у загальну силу тертя. Модель можна записати як:

$$F_{friction} = \sum_{i=1}^N k_i(x_i - x_{0_i}), \quad (1.14)$$

де N - кількість пружин, k_i - пружність i -ої пружини, x_i - положення i -ої точки контакту, і x_{0_i} - її положення рівноваги [4].

Наведені моделі наочно показують, що дослідження тертя на атомарному рівні є досить складним і потребує розгляду широкого спектру взаємодій, що включає еластичність, в'язкість, адгезію, а також квантово-механічні ефекти, що можуть стати вирішальними під час взаємодії частинок на нанорівні. Огляд сучасних математичних моделей вказує на важливість подальшого дослідження та розробки ширшого класу теоретичних підходів до моделювання процесів тертя у нано- та мікроскопічних системах.

1.6 Комп'ютерне моделювання в наукових дослідженнях

Комп'ютерне моделювання стало невід'ємною частиною наукових досліджень у багатьох сферах від матеріалознавства до біології. Це потужний інструмент, який дозволяє науковцям створювати деталізовані віртуальні копії реальних систем, передбачати їх поведінку і тестувати гіпотези без потреби у завчасному виготовленні зразків чи прототипів.

Основні методики комп'ютерного моделювання включають, але не обмежуються, молекулярною динамікою, квантово-хімічними розрахунками,

методом Монте-Карло, та дискретними елементами. Особливо значимим для дослідження наночастинок на поверхнях стали методи, засновані на засадах молекулярної динаміки, які дозволяють детально проаналізувати міжатомні взаємодії з урахуванням інтератомних потенціалів, що діють у системі.

В дослідженнях наночастинок на графені одним з ключових аспектів є алгоритми контролю температури. Методи контролю температури, такі як термостат Берендсена, чи термостати на кшталт Нуссельта, які регулюють кінетичну енергію системи для підтримки заданої температури, є критично важливими для повторюваності та достовірності симуляцій.

Однак, не зважаючи на потужність і точність комп'ютерного моделювання, воно все ще має ряд обмежень. Складність системи та вимоги до обчислювальних ресурсів можуть істотно варіюватись, що впливає на обсяг моделювання і час, необхідний для проведення експериментів. Також, точність моделі залежить від вірності інтератомних потенціалів та інших параметрів, що використовуються в розрахунках.

Масштабування симуляцій відбувається зі зростанням кількості частинок або з поглибленням деталізації, що вимагає все більше обчислювального часу. Використання спеціалізованих обчислювальних платформ, таких як GPU CUDA, дозволяє зі значною ефективністю прискорити чисельні симуляції і досягти значного прогресу в моделюванні наносистем.

Міждисциплінарний характер комп'ютерного моделювання збільшує число областей, де можливе його застосування, і надає ширші можливості для досліджень у сфері матеріалознавства, нанотехнологій, біології та інших наукових напрямів. Практичні аспекти моделювання включають дослідження трибологічних явищ, таких як вивчення тертя металевих наночастинок на поверхні графена [5].

1.7 Перспективи використання графену в мікро- та нанотехнологіях

Графен, зі своїм унікальним набором властивостей, включно з високою механічною міцністю, чудовими електронними та термічними характеристиками, відкриває нові обрії для використання у мікро- та нанотехнологіях. Здатність графену витримувати великі механічні навантаження при низькій вазі робить його ідеальним кандидатом для застосувань, які вимагають легких, але міцних матеріалів. Його електронні властивості, зокрема висока мобільність носіїв заряду, посприяли зацікавленості до його застосувань в електроніці, наприклад, для розробки високошвидкісних транзисторів та високоефективних електричних датчиків.

В мікро- та нанотехнологіях зростає інтерес до вивчення графену як основи для нових типів змащувальних матеріалів, які можуть вирішити проблеми пов'язані з тертям, зношуванням та іншими трибологічними викликами:

$$\sigma_{max-G} = \frac{E_G}{2(1 + \nu_G)}, \quad (1.15)$$

де σ_{max-G} - максимальний допустимий стрес для графену, E_G - модуль Юнга графену, та ν_G - пуассоннове відношення графену. Висока теплопровідність графену також надає йому переваги у розробках теплових інтерфейсів і охолоджувальних пристроїв на нанорівні.

Дослідження залежності сили тертя від площі контакту, які були проведені з використанням методів комп'ютерного моделювання, підкреслюють потенціал графену для використання у якості трибологічного захисного покриття. Ці дослідження не тільки покращують розуміння фундаментальних трибологічних процесів, але й дають змогу проектувати поверхні з покращеними тертями та зносостійкими властивостями.

Застосування графену у біомедичних та енергетичних технологіях також переживає стрімкий розвиток. Можливості створення медичних сенсорів, цілеспрямованих лікарських носіїв та міцних, але гнучких енергетичних накопичувачів вивчалися у численних дослідницьких програмах і проектах.

Проте, незважаючи на величезний потенціал, реалізація графену в суміжних технологіях стикається з перепонами, серед яких масштабування виробництва, екологічні та економічні виклики. Крім того, наукова громада продовжує пошук шляхів покращення хімічних властивостей графену, щоб забезпечити його сумісність зі технологічними вимогами сучасності, які швидко змінюються.

У майбутньому, за допомогою розширених комп'ютерних моделей та нових експериментальних підходів, дослідники зможуть краще розуміти фізичні характеристики графену, що дозволить реалізувати потенціал графену в мікро- та нанотехнологіях і створити нові покоління матеріалів зі значно покращеними властивостями. Розширення знань у цій області надасть змогу реалізувати повний спектр можливостей, які графен має для промисловості, науки та технологій [18].

2 ОСНОВНА ЧАСТИНА

2.1 Постановка задачі

Головна задача даної роботи полягає у вивченні залежності сили тертя від площі контакту між металевими наночастинками та графеном за допомогою методики молекулярної динаміки. Сила тертя має критичне значення в мікро- та нанотехнологіях, оскільки вона може суттєво впливати на зношування та тривалість експлуатації мікромеханічних пристроїв. Задача включає в себе три основні компоненти:

1. Розробка та верифікація математичної моделі взаємодії наночастинок та графена.
2. Створення комп'ютерної моделі, яка дозволить імітувати фізичний процес тертя та враховуватиме всі важливі параметри.
3. Аналіз отриманих результатів моделювання та виведення фізичних закономірностей, які регулюють силу тертя зміною площі контакту.

З метою реалізації цієї задачі математична модель має включати рівняння для опису взаємодії потенціалів між атомами. Загальний потенціал взаємодії $U(r_{ij})$ для пари атомів можна записати у вигляді Леннарда-Джонса:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2.1)$$

де r_{ij} - відстань між атомами i та j , ε - глибина потенціальної ями, σ - відстань, при якій потенціал взаємодії між атомами стає рівним нулю.

Силу тертя $F_{friction}$ можна розрахувати, використовуючи деривацію потенціалів взаємодії по відносним переміщенням:

$$F_{friction} = -\nabla U(r_{ij}) \quad (2.2)$$

Цілі дослідження та моделювання можуть включати знаходження залежності сили тертя від різних змінних, таких як: температура, вологості довкілля, навантаження, швидкість руху наночастинок, її геометричні та хімічні властивості.

Основним знаряддям для проведення цих експериментів служить комп'ютерна програма на основі класичної механіки, яка враховує вказані взаємодії на атомарному рівні. Отримана інформація з введених параметрів та проміжних розрахунків використовується для подальшого аналізу та узагальнення даних [5].

2.2 Математична модель

Математична модель, використана в даній роботі для вивчення взаємодії між металевими наночастинками та графеновою підкладкою, спирається на метод молекулярної динаміки з класичними законами механіки. Середовище симуляції припускає, що атоми можуть бути описані як точкові маси, що взаємодіють за певними потенціальними залежностями.

Рівняння руху Ньютона для атома в системі може бути записано в такій формі:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i, \quad (2.3)$$

де m_i - маса індивідуального атома i , r_i - його радіус-вектор (положення), а F_i - результуюча сила, що діє на атом. Сила визначається як градієнт потенціальної енергії взаємодії U , яка, в свою чергу, може бути описана різноманітними потенціалами залежно від характеристик системи.

В рамках симуляції тертя на атомному рівні, потенціали зазвичай включають двочастинкові як, наприклад, потенціал Леннарда-Джонса, а також можуть включати більш складні багаточастинкові потенціали для моделювання складних взаємодій.

Силу тертя $F_{friction}$, яка виникає при русі наночастинки на поверхні графену, можна визначити через взаємодії на мікроскопічному рівні, активовані зіткненнями, адгезією, а також завдяки властивостям самої будови графену:

$$F_{friction} = \sum_{i,j}^N -\nabla U_{ij}(r_{ij}), \quad (2.4)$$

де індекс i може представляти конкретну наночастинку, а j - атом графену, з яким вона взаємодіє, а $U_{ij}(r_{ij})$ - потенціал взаємодії між цими двома атомами як функція від їх відстані r_{ij} .

Для реалізації адекватної молекулярної моделі необхідно акуратно вибирати набір потенціалів взаємодії, які можуть відобразити правдоподібну поведінку наночастинок на поверхні графену.

Окрім згаданих потенціалів, модель також повинна включати облік дисипативних процесів, що ведуть до перетворення кінетичної енергії руху в теплову енергію. Важливим моментом є також розгляд системи в різних термодинамічних умовах, включаючи ізотермічні, ізохорні та ізобарні умови, що можуть бути реалізовані за допомогою термостатів і баростатів.

Одним з важливих аспектів є врахування ефектів міжповерхневої взаємодії, які включають в себе адгезійні сили і сили тертя. Адгезія на мікроскопічному рівні може бути описана за допомогою модифікованих потенціалів, які враховують зону контакту та хімічну природу поверхонь.

У цьому контексті можлива реалізація власного алгоритму симуляції, заснованого на розробці власної комп'ютерної програми, що використовує масштабованість та обчислювальну потужність сучасних високопродуктивних графічних процесорів для обчислень. Програма повинна мати набір інструментів для аналізу даних, розрахунку статистичних параметрів та візуалізації результатів.

2.2.1 Опис взаємодії металу з графеном

Взаємодія металу з графеном може бути розглянута за допомогою різних фізичних механізмів, таких як Ван дер Вальсові сили, ковалентні зв'язки, та кулонівські сили, в залежності від хімічних властивостей металевих наночастинок та графена. Ці взаємодії впливають як на статичні, так і на динамічні властивості системи та її трибологічні характеристики.

Ван дер Вальсові сили відіграють важливу роль в адгезії між наночастинами і графеном. Міжатомна взаємодія Ван дер Ваальса може бути описана за допомогою потенціалу Леннарда-Джонса:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2.5)$$

де r - відстань між атомами, ε - глибина потенціалу, а σ - відстань, при якій міжатомний потенціал рівний нулю.

Ковалентні зв'язки можуть утворюватися між металом та графеном у випадку, коли металеві наночастинки мають позитивні іони, здатні створювати ковалентні взаємодії з вуглецевими атомами графена. Основне призначення такого типу зв'язку - передача електронів від металу до графена поліпшення провідних властивостей.

Для опису електричних і ковалентних взаємодій зазвичай використовують квантово-механічні розрахунки або параметризовані потенціали, такі як модель вкладених атомів (ЕМА) для металів:

$$U(r) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \phi(r_{ij}) + \sum_i^N F_i(\underline{\rho}_i), \quad (2.6)$$

де $U(r)$ - загальна енергія системи, $\phi(r_{ij})$ - парний потенціал між атомом i і j , відстань між якими r_{ij} , і $F_i(\rho_i)$ - сила "входження" енергії атома i , що залежить від його електронної щільності ρ_i .

Кулонівська взаємодія має місце, якщо металеві наночастинки заряджені. Вона може істотно вплинути на статичні властивості системи.

Точна характеристика взаємодії металу з графеном вимагає детального розуміння метал-графен процесів і можливість їх кількісного аналізу, яка реалізується за допомогою методів молекулярної та квантової механіки.

Щоб з'ясувати вплив металевих наночастинок на механічні властивості графена, необхідно використовувати модель, яка може симулювати атомістичну структуру і дозволяє враховувати різноманітні дефекти, згини і розломи в графеновій решітці. В цих випадках можливо, наприклад, застосування потенціалів типу Ребо-Бреннера або модифікацій зготованої теорії зв'язків (ТВМД) для урахування механічних дефектів графену. Точні моделі та сценарії експериментів мають базуватися на даних, які отримані з дослідницької літератури та експериментальних досліджень, з метою перевірки правильності теоретичних прогнозів щодо поведінки наночастинок на графені [6][7].

З метою уточнення взаємодії металевих наночастинок з графеном, також необхідно звернути увагу на енергетичні зміни, що супроводжують адсорбційні процеси. Адсорбція металічних наночастинок на поверхні графену є ключовим фактором, що впливає на властивості системи, зокрема на її електронну і механічну стабільність. Адсорбційна взаємодія може бути описана в рамках модифікованих підходів, таких як потенціал типу:

$$U_{ads}(r) = D_e(e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)}), \quad (2.7)$$

де D_e є глибиною потенціальної ями, α - параметром, що визначає ширину потенціалу, r - відстань між атомом металу і найближчим атомом графена, і r_0 - рівноважною відстанню між ними.

Джерелом електронної щільності для металевих наночастинок у графенових системах зазвичай є d-орбіталі металу, які можуть накладатися на π - орбіталі графена. Це, в свою чергу, може впливати на локальну деформацію графенової підкладки і, як наслідок, на мікромеханічні властивості та електричну провідність графену, що має велике практичне значення для створення наноелектронних пристроїв.

Щоб провести якісну оцінку впливу металевих наночастинок на графен, інколи необхідно прибгати до розширення традиційних класичних симуляцій молекулярної динаміки з використанням підходів, базованих на квантовій

механіці або методах змішаних QM/MM (квантово-механічних/молекулярно-механічних) симуляцій. За допомогою квантово-механічних моделей можна оцінити електронну структуру та моделювати електронні відношення між металом і графеном з урахуванням квантово-релаксаційних ефектів.

Для аналізу зміцнення або ослаблення взаємодії важливо враховувати також хімічно-специфічні характеристики металів, зокрема їхню здатність до окислення та формування комплексних сполук із графеновою підкладкою. Хімічний аналіз поверхні, зокрема методами XPS (рентгенівської фотоелектронної спектроскопії) може пролити світло на молекулярні механізми адгезії та електронної взаємодії, дозволяючи розробити більш точні математичні моделі системи[9][10].

2.2.2 Взаємодія наночастинок з графеном

Фізична адсорбція на графені зазвичай відбувається через Ван дер Вальсові сили, які слабкі локально, проте істотні у великих масштабах. Хімічна взаємодія полягає в утворенні ковалентних зв'язків та може викликати значні зміни в електронній структурі графену і властивостях наночастинок.

Механічні взаємодії поміж наночастинок та графеном проявляються під час їх відносного руху, де присутні механізми тертя та зносу. Сила тертя, що діє на наночастинку, може бути розрахована використовуючи модифікований потенціал Леннарда-Джонса для адсорбції:

$$U_{friction}(r) = 4\varepsilon_{fr} \left[\left(\frac{\sigma_{fr}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{fr}}{r} \right)^6 \right], \quad (2.8)$$

де ε_{fr} та σ_{fr} - емпірично визначені параметри для взаємодії наночастинок з графеном.

Модель взаємодії також має враховувати ефекти ковзання наночастинок на графеновій поверхні. Ці ефекти можна описати через різницю між силами адгезії та кінетичної енергії наночастинок, що рухається:

$$F_{roll} = \frac{\tau_{crit}}{r_{NP}}, \quad (2.9)$$

де F_{roll} - сила ковзання, τ_{crit} - критичний момент сили, необхідний для ініціації ковзання, і r_{NP} - радіус наночастинок.

Теплові флуктуації на поверхні графену і взаємодіючої з ним наночастинок можуть істотно вплинути на динаміку системи, особливо при вищих температурах. Модель повинна інкорпорувати теплові ефекти через термічне коливання атомів в графеновій решітці:

$$r_i(t) = r_i^0 + \delta r_i(t), \quad (2.10)$$

де r_i^0 - рівноважне положення i -го атома графену, а $\delta r_i(t)$ - його теплове коливання в час t .

Зарядова та електронна транспортна динаміка надають додаткової складності моделюванню. Для врахування ефектів зарядового переносу можливе використання моделей, заснованих на Фаунгамі (Fermi) рівнях та електронної структурі обох матеріалів.

Необхідно враховувати відповідні зв'язки та взаємодії для атомів на поверхні. Вуглець-вуглець взаємодія для графену зображується гармонічним потенціалом, який припускає лінійне відновлення атомів до їх рівноважних позицій. Формула цього потенціалу:

$$V_C = \frac{1}{2} \sum_{i-j}^N \mu_r (r_{ij} - r_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i-j-k}^N \mu_\theta r_0^2 (\theta_{ijk} - \theta_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i-(j,k,l)}^N \mu_p \left(\delta z_i - \frac{\delta z_j + \delta z_k + \delta z_l}{3} \right)^2 \quad (2.11)$$

Сума розраховується за найближчими сусідами, їх парами і триплетами. [11]. Тут тільки зазначимо вираз для сили, що діє на атом i вуглецю з боку інших атомів вуглецю в шарі:

$$f_i = - \sum_{i-j}^N \mu_r (r_{ij} - r_0) \frac{r_{ij}}{r_{ij}} + \sum_{j \neq i, k \neq i}^N \mu_\theta r_0^2 (\theta_{jik} - \theta_0) \left[1 - \left(\frac{r_{ji} r_{ki}}{r_{ji} r_{ki}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \frac{\left(1 - \frac{r_{ji}}{r_{ki}} \cos \theta_{jik} \right) r_{ik} + \left(1 - \frac{r_{ki}}{r_{ji}} \cos \theta_{jik} \right) r_{ij}}{r_{ji} r_{ki}} + \sum_{j \neq i, k \neq i}^N \mu_\theta r_0^2 (\theta_{ijk} - \theta_0) \left[1 - \left(\frac{r_{ij} r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}} - \frac{(r_{ij} r_{kj})}{r_{ij}^3 r_{kj}} r_{ij} \right] - \sum_{j,k,l}^N \frac{2}{3} \mu_p [2\delta z_i - (\delta z_j + \delta z_k + \delta z_l)] - \frac{1}{9} \mu_p \sum_{m,n}^N (\delta z_m + \delta z_n) \quad (2.12)$$

В останній сумі індекси m, n означають сусідів атома i , наступних за найближчими. Таким чином, при розрахунку сили пружинного потенціалу слід

розглядати не лише трьох найближчих сусідів у шарі графена, а і сусідів до найближчих сусідів відповідно.

Для повного опису взаємодії важливо врахувати також методи, при яких вводяться легуючі елементи для модифікації властивостей графена, зокрема його електронної провідності або оптичних характеристик[12][13].

Розуміння взаємодії між наночастинками та графеном є критичним для передбачення та керування трибологічними властивостями в наношільних системах. Важливою особливістю таких систем є наявність механізмів самозмащування, пов'язаних з рухом наночастинок по поверхні графену, який підвищує зношування матеріалів.

Один із критеріїв, що впливають на взаємодію, — ступінь взаємного проникнення електронних хмар атомів. Ця характеристика залежить від відстані між наночастинкою та графеном і може бути визначена за допомогою потенціалів, що описують сили притягання та відштовхування. Відповідно до принципів молекулярної динаміки, для цього часто застосовують потенціал Леннарда-Джонса, а доповнити взаємодію може опис кулонівських сил, якщо наночастинки або графен несуть на собі електричний заряд.

Силу взаємодії $F_{interaction}$ між наночастинкою та графеном можна розрахувати наступним чином:

$$F_{interaction} = -\nabla U_{LJ}(r) + \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (2.13)$$

де $U_{LJ}(r)$ - потенціал Леннарда-Джонса, r - відстань між графеном та наночастинкою, q_1 і q_2 - заряди на наночастинці та графені відповідно, ϵ_0 - діелектрична проникність вакууму.

На характер взаємодії також істотний вплив роблять місцеві властивості поверхні графену, такі як наявність дефектів, функціональних груп або забруднень. Ці ефекти можуть змінювати локальний потенціальний ландшафт та умови адсорбції, тим самим впливаючи на адгезійні та трибологічні характеристики наночастинок на графені.

Інший важливий фактор, який слід розглянути, - це взаємодія наночастинок з домішками на графені, яка може призводити до зміцнення або слабшання адгезії, залежно від хімічної сумісності домішок та наночастинок. У таких випадках моделі молекулярної динаміки повинні бути адаптовані для врахування специфічних хімічних взаємодій[19].

2.2.3 Моделювання сили тертя

Моделювання сили тертя в молекулярних динамічних симуляціях включає детальний опис взаємодій між наночастинками та графеновою підкладкою, що дозволяє розрахувати фрикційні сили, які виникають під час їх відносного переміщення. В симуляціях використовується кілька типів взаємодій: метал-метал, вуглець-вуглець та метал-вуглець. Метал-метал взаємодія описується за допомогою потенціалу на базі методу вбудованих атомів (ЕАМ), тоді як вуглець-вуглець взаємодія моделюється використовуючи гармонійний потенціал. Для опису взаємодії метал-вуглець застосований потенціал Леннарда-Джонса[5].

Ключові обчислення для фрикційних сил проводяться на основі змін у взаємодіях під час нанесення навантаження та руху наночастинки вздовж графенової підкладки. Сила тертя $F_{friction}$ яка діє на наночастинку під час руху може бути визначена так:

$$F_{friction} = \mu \cdot F_{normal}, \quad (2.14)$$

де μ - коефіцієнт тертя, а F_{normal} - нормальна сила, що діє на наночастинку з боку графену.

Взаємодія між атомами металу в ЕАМ потенціалі може бути виражена як:

$$V_{eam} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j}^N \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i^N F_i(\rho_i), \quad (2.15)$$

де V_{eam} - загальна енергія системи, F_i - енергія i -го атома, ρ_i - електронна щільність у місці розташування атома i , r_{ij} - відстань між атомами i та j , а ϕ_{ij} - функція парного потенціалу між атомами [5].

Локальна електронна щільність:

$$\rho_i = \sum_{j,j \neq i}^N f_j(r_{ij}), \quad (2.16)$$

де $f_j(r_{ij})$ - електронна щільність у місці розташування атома i , що походить від атома j на відстані r_{ij} .

Узагальнений парний потенціал:

$$\phi(r) = \frac{A \cdot \exp \left[-\alpha \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \kappa \right)^{20}} - \frac{B \cdot \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}, \quad (2.17)$$

де r_e - рівноважна відстань між найближчими сусідами, A , B , α ,

β – параметри підгонки і κ , λ – два додаткові параметри для відсічення.

Функція електронної щільності має таку ж форму, як і член, що притягує в парному потенціалі з тими ж значеннями β і λ . Функція електронної щільності:

$$f(r) = \frac{f_e \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}, \quad (2.18)$$

У молекулярно-динамічних симуляціях для забезпечення постійності температури застосовується термостат Берендсена. У підході застосовується вирівнювання температури системи, щоб вона експоненціально наближалася до заданої температури T_0 з часом релаксації τ_T . Диференціальні рівняння руху вирішуються використовуючи чисельний метод Верле:

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{m_i} F_i(t), \quad (2.19)$$

де $r_i(t + \Delta t)$, $r_i(t)$, і $r_i(t - \Delta t)$ - положення атома i на черговому, поточному, і попередньому кроках часу відповідно.

Результати, отримані на основі моделювання, показують, що за рівних умов паладієві наночастинки мають більш сферичну або еліпсоїдну форму в порівнянні з алюмінієвими через сильніші метал-метал взаємодії, що впливає на розміри наночастинок та їхній вплив на площу контакту. Тому для точних обчислень сили тертя важливо точно розрахувати площу контакту. В симуляціях оцінка площі контакту проводиться на основі кількості металевих атомів нижніх шарів наночастинки, що взаємодіють з графеном, та області цих атомів, де відстань між атомами металу і вуглецю менша за 0.5 нм[5].

Для вивчення впливу контактної площі на фрикційні сили проводяться симуляції за різних умов, включаючи зміни у кількості атомів та температури системи. Обчислення фрикційних сил зафіксовано при температурах, що варіювалися від кімнатних значень до температур плавлення металу, а також залежно від розмірів наночастинок. Симуляції тривали від 350000 до 400000 часових кроків, з кроком в 0.2 пс. Ці деталі забезпечили достатню статистичну точність для визначення залежності сили тертя від площі контакту.

Продовжуючи моделювання сили тертя, ми спираємось на принципи молекулярної динаміки (МД), які передбачають числове розв'язування рівнянь руху Ньютона для систем взаємодіючих частинок, з визначенням сил між ними та їх потенційною енергією на основі міжатомних потенціалів. Сучасні методики МД дозволяють реалізувати такі розрахунки на GPU (графічних процесорах), значно прискорюючи обчислення[18].

Симуляція сили тертя включає кілька етапів: початкове розташування металевого шару над графеном, тепловий крок для досягнення рівноваги, а потім прикладання сили для руху наночастинки. Під час дії сили враховується максимальна сила, яка визначає максимальну швидкість центру маси наночастинки та максимальна температура перед охолодженням. Для обчислення залежності сили тертя від площі контакту і температури використовується метод рівномірної температури із застосуванням Берендсена термостату за вказаними кроками часу. Термостат Берендсена для контролю температури:

$$T(t + \Delta t) = T(t) + \frac{\Delta t}{\tau_T} (T_0 - T(t)), \quad (2.20)$$

де $T(t + \Delta t)$ - температура системи на новому кроці часу, $T(t)$ - поточна температура, Δt - крок часу, τ_T - час релаксації, T_0 - цільова температура.

На основі отриманих результатів можливе прогнозування поведінки наночастинок на графеновій підкладці при різних умовах, включаючи зміни в температурі та розмірах частинок.

2.3 Комп'ютерна модель

Для комп'ютерного моделювання системи, що включає вуглець-вуглець, метал-метал та вуглець-метал взаємодії, ключовим є використання потенціалів взаємодії та алгоритмів для вирішення рівнянь руху. Потенціал Леннарда-Джонса є стандартним вибором для моделювання взаємодій між металами та неметалами, оскільки він адекватно описує як дисперсійні взаємодії, так і відштовхування на коротких дистанціях.

Термостат Берендсена використовується для контролю температури системи та забезпечення статистичної еквівалентності розподілу Больцмана. Цей термостат плавно коригує швидкості частинок, щоб температура системи наближалася до бажаного значення.

Під час моделювання атоми металу спочатку розташовуються у гранецентрованій кубічній (ГЦК) решітці над графеном. Щоб досягти енергетично оптимальної конфігурації, система проходить етап релаксації, де атоми металу можуть переміститися з метою мінімізації вільної енергії системи. Процес агломерації та подальшого зсуву наночастинки моделюється шляхом прикладання зовнішньої сили до атомів металу, які знаходяться з одного боку від центру маси наночастинки. Вимірювання сумарної сили тертя виконується як сума сил, які діють на кожен атом наночастинки з боку атомів вуглецю[19].

Розмір і форма наночастинки визначають взаємодійну площу з графеном, що є критичним фактором при визначенні сили тертя. Важливість точного

визначення площі контакту була підтверджена чисельними експериментами, в яких спостерігалася приблизно лінійна залежність сили тертя від площі контакту для наночастинок алюмінію та паладію в діапазоні від декількох тисяч до 20–22 тисяч атомів [5].

Сила тертя усереднюється за період, коли наночастинки перебувають у русі, що імітує реальні умови трибологічних досліджень. Результати дозволяють розробити передбачення щодо поведінки наночастинок під час тертя, що може бути застосоване для керування властивостями трибосистем у промисловості і для створення нових матеріалів з бажаними трибологічними характеристиками.

Для вирішення рівнянь руху в умовах різних взаємодій і температур використовують чисельні методи, такі як метод Верле. У майбутніх роботах буде реалізовано повноцінне комп'ютерне моделювання, що включає детальне налаштування параметрів моделі, виконання чисельних розрахунків і аналіз отриманих даних.

2.3.1 Вибір програмного забезпечення

Підбір програмного забезпечення для молекулярної динаміки (МД) є ключовим аспектом в процесі моделювання, оскільки саме воно визначає спроможність системи до проведення обчислень з необхідною точністю та ефективністю. Серед доступних опцій популярним вибором є програми, які підтримують паралельні обчислення на графічних процесорах (GPUs), наприклад, використання технології NVIDIA CUDA.

Основні критерії, які слід врахувати при виборі програмного забезпечення:

- Сумісність з використовуваними взаємодіями та потенціалами, які мають бути застосовані в моделі, включаючи, у випадку дослідження, ЕАМ для метал-метал та Леннарда-Джонса для вуглець-метал взаємодій.
- Підтримка різних термостатів для контролю температури, зокрема термостата Берендсена.
- Здатність до моделювання великих систем, що включають тисячі атомів, як це потрібно для нашого випадку з наночастинками алюмінію та паладію, а також для розглянутих сценаріїв зсуву.
- Належна документація й активне співтовариство, яке може надати підтримку та допомогу у вирішенні потенційних проблем, що виникають під час моделювання.

Враховуючи ці критерії, оптимальний вибір може бути зроблений на користь програмного забезпечення, яке забезпечує гнучкість, високу продуктивність та

широкі моделювальні можливості. Для прикладу, програми, як LAMMPS або GROMACS, які є відкритими та широко використовуваними у наукових дослідженнях, зазвичай відповідають цим вимогам і здатні обслуговувати велику кількість сценаріїв моделювання в галузі молекулярної динаміки.

Розглядаючи потенціали взаємодії, програмне забезпечення повинно підтримувати метод вбудованих атомів (EAM) для метал-метал взаємодій, що є особливо важливим для адекватного моделювання металічних наночастинок. EAM потенціал ефективно враховує багаточастинкові взаємодії всередині металевих структур і дозволяє моделювати їх фізичні властивості з високою точністю[14].

Надалі розглянемо існуючі засоби моделювання, які можуть слугувати основою та прикладом для подальшої власної реалізації програмного коду.

Для вуглець-вуглець взаємодії з графеном LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) забезпечує реалізацію різних потенціалів як-от Айр-Стіллінджера, Ребо та інших, які потрібні для дослідження властивостей графену і його взаємодії з адсорбованими металами[16].

Для метал-вуглець взаємодій значну роль відіграє правильний вибір параметрів потенціалу Леннард-Джонса, щоб відтворити адсорбцію і тертя металевих наночастинок на графенах підкладках. Програмне забезпечення як GROMACS (GROningen MACHine for Chemical Simulations) пропонує розширені можливості для тонкого налаштування міжатомних взаємодій та врахування температурних ефектів[15].

Слід відзначити, що обране програмне забезпечення має бути також адаптоване для великомасштабних пролонгованих симуляцій, здатних вирішувати мільйони рівнянь руху для тисяч атомів. Такий функціонал пропонує LAMMPS завдяки його підтримці паралельних обчислень та широких можливостей для роботи з різними матеріалами та хімічними системами.

У підсумку, реалізація програмної реалізації буде плануватися з урахуванням вимог до моделювання, його здатності до проведення точних симуляцій та надання достовірних результатів для конкретних задач дослідження згідно структурних особливостей та взаємодій в системі металів алюмінію та паладію з графеном.

Формули та рівняння, які мають бути підтримані програмним забезпеченням для виконання моделювання:

- Рівняння руху Ньютона
- Потенціал Леннарда-Джонса
- Схему інтегрування Верле

- Контроль температури за допомогою термостата Берендсена

Ці характеристики зроблять можливим виконання моделювання відповідно до плану експериментів, дозволяючи адекватно оцінити вплив різних факторів на силу тертя металевих наночастинок на графені.

2.3.2 Імплементация моделі

Імплементация комп'ютерної моделі для моделювання взаємодії металевих наночастинок з графеном починається з визначення міжатомних потенціалів, які описують зміну енергії в системі в залежності від розміщення та руху атомів:

1. **Метал-метал взаємодія** описується за допомогою потенціалу вбудованих атомів (EAM), який враховує вплив зовнішньої електронної щільності на енергію ізолюваного атома. Взаємодія між атомами металу в EAM потенціалі може бути виражена як:

$$V_{eam} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j}^N \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i^N F_i(\rho_i), \quad (2.21)$$

де V_{eam} - загальна енергія системи, F_i - енергія i -го атома, ρ_i - електронна щільність у місці розташування атома i , r_{ij} - відстань між атомами i та j , а ϕ_{ij} - функція парного потенціалу між атомами [5].

Локальна електронна щільність:

$$\rho_i = \sum_{j,j \neq i}^N f_j(r_{ij}), \quad (2.22)$$

де $f_j(r_{ij})$ - електронна щільність у місці розташування атома i , що походить від атома j на відстані r_{ij} .

Узагальнений парний потенціал:

$$\phi(r) = \frac{A \cdot \exp \exp \left[-\alpha \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \kappa \right)^{20}} - \frac{B \cdot \exp \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}, \quad (2.23)$$

де r_e - рівноважна відстань між найближчими сусідами, A , B , α , β - параметри підгонки і κ , λ - два додаткові параметри для відсічення.

Функція електронної щільності має таку ж форму, як і член, що притягує в парному потенціалі з тими ж значеннями β і λ . Функція електронної щільності:

$$f(r) = \frac{f_e \exp \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}, \quad (2.24)$$

2. **Вуглець-вуглець взаємодія** в графені зображується гармонічним потенціалом, який припускає лінійне відновлення атомів до їх рівноважних позицій. Формула цього потенціалу:

$$V_c = \frac{1}{2} \sum_{i-j}^N \mu_r (r_{ij} - r_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i-j-k}^N \mu_\theta r_0^2 (\theta_{ijk} - \theta_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i-(j,k,l)}^N \mu_p \left(\delta z_i - \frac{\delta z_j + \delta z_k + \delta z_l}{3} \right)^2 \quad (2.25)$$

3. **Взаємодія вуглець-метал** моделюється за допомогою потенціалу Леннарда-Джонса (LJ), який описує як притягнення на більших дистанціях, так і відштовхування при близькому зіткненні:

$$U_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (2.26)$$

де ε і σ - параметри потенціалу, які залежать від конкретного типу атомів металу та вуглецю.

Вибір відповідних значень для параметрів енергії та відстаней в потенціалі є ключовим для вірного відображення фізичних характеристик моделі. Ці значення можуть бути адаптовані з експериментальних даних або отримані через квантово-механічні розрахунки, які проводяться для подібних систем.

Визначені, потенціали використовуються для розрахунку взаємодій між атомами під час кожного кроку МД симуляцій. Імплементация потенціалів та рівнянь руху проводиться у програмному забезпеченні, яке здатне ефективно обробляти велику кількість атомів і взаємодій у реалістичних часових рамках.

Для контролю температури в симуляціях використовується термостат, який підтримує температуру системи навколо заданого середнього значення. Це важливо для умов, які імітують реальні експериментальні ситуації, де теплові флуктуації можуть суттєво впливати на поведінку системи.

Отже, також використовується термостат Берендсена, щоб керувати температурою під час моделювання і підтримувати її на постійному рівні:

$$T_{new} = T + \frac{\Delta t}{\tau} (T_{target} - T), \quad (2.27)$$

де T_{new} - оновлена температура, T - поточна температура системи, Δt - інтервал часу, τ - часова константа релаксації, T_{target} - цільова температура.

Для реалізації цих потенціалів та термостата в програмі симуляції, треба зробити певну підготовчу роботу:

1. Задати початкові параметри системи, включаючи положення атомів, їх маси та взаємодії.
2. Забезпечити верифікацію моделі шляхом порівняння з експериментальними даними.
3. Реалізувати алгоритми симуляцій, враховуючи відповідні потенціали та термостати.

Таке комп'ютерне моделювання вимагає достатньої обчислювальної потужності та ресурсів пам'яті, особливо при роботі з великими системами, що містять тисячі або навіть мільйони атомів. Останнім часом великий інтерес до використання графічних прискорювачів (GPU) для прискорення обчислень в області МД симуляцій. Доступність бібліотек та відповідних пакетів, таких як CUDA, відкривають шлях до використання потужних паралельних обчислень на GPU, що дозволяє значно зменшити час обчислень для складних симуляцій[17].

2.4 Проведення моделювання

Експерименти з моделювання молекулярної динаміки проводилися для вивчення сили тертя при взаємодії алюмінієвих та паладієвих наночастинок з графеновою підкладкою. Зокрема, досліджувались залежності сили тертя від площі контакту та температури.

На першому часовому етапі моделювання металевий шар розміщується над графеновою підкладкою з фіксованими краями вздовж напрямків x і y . Металевий шар організований у гранецентровану кубічну решітку. Така конфігурація не є енергетично вигідною, і атоми металу перебудовуються в більш компактну структуру з мінімальною вільною енергією. При цьому виділяється енергія, і температура T системи зростає. На етапі рівноваги система розвивається без теплових змін. Агломерація металу не відбувається шляхом застосування терморегулятора системи.

Другий крок - це рух наночастинок. Рух в нашій системі здійснюється шляхом застосування сили вздовж y -напрямку до всіх атомів металу, розташованих ліворуч від y -координати центру маси (ЦМ) наночастинки (рис. 2.1). Максимальна прикладена сила для наночастинок паладію та алюмінію з 20000 атомами становить 18,14 нН та 40 нН відповідно. Максимальна

швидкість ЦМ для наночастинки Pd $V_y = 3,31$ м/с, для наночастинки Al $V_y = 9,83$ м/с. Максимальна температура до охолодження становить 1150 К для паладію 750 К для алюмінію. Розраховано залежності сили тертя та напруження зсуву від площі контакту для наночастинок алюмінію з 5000–20000 атомів і для наночастинок паладію з 13000–22000 атомів. Загальна кількість атомів у системі становить від 37768 до 52768 атомів у випадку наночастинок алюмінію та від 45768 до 54768 атомів у випадку наночастинок паладію. Моделювання тривало від 350 000 до 400 000 часових кроків. Один часовий крок Δt дорівнює 0,2 пс.

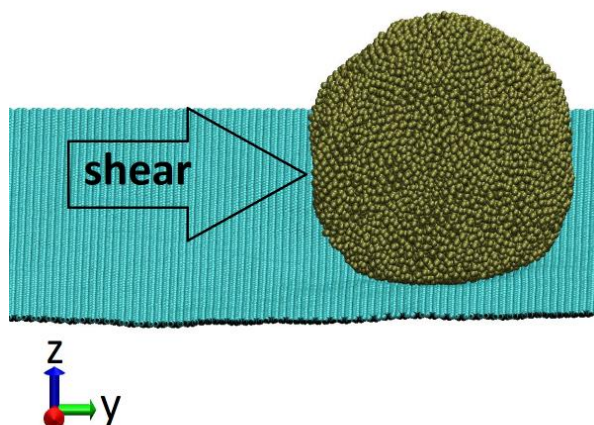


Рис. 2.1. Знімок утвореної наночастинки паладію з 22000 атомів при температурі 300 К.

У дослідженні було отримано наступні результати:

- Було виявлено, що алюмінієві наночастинки мають сферичну форму, а паладієві наночастинки - еліпсоїдальну форму, що зумовлено більш сильною взаємодією метал-метал у паладію порівняно з алюмінієм.
- Зафіксовано, що сила тертя збільшується приблизно лінійно з ростом площі контакту.
- Шар (рис. 2.2), що взаємодіє, та розмір у поперечному напрямку алюмінієвої наночастинки з 10000 атомів при температурі 300 К.

Різні методики визначення площі контакту призводять до розбіжностей у кутах нахилу лінійних апроксимацій (рис. 2.3). Кути нахилу середньої напруження зсуву для алюмінію за новим методом складають $-0,057$ нН/нм² та $0,0088$ нН/нм² при використанні розрахунків за еліпсом. Для наночастинок паладію кути нахилу середнього напруження зсуву за новим методом є $0,07$ нН/нм², а при розрахунку за еліпсом - $0,158$ нН/нм². Кожна точка, представлена на рисунках, які описуються нижче, відображає середнє значення сили субстрату, виміряне кожні 250 часових кроків, та середню площу контакту, обчислену кожні 4000 часових кроків під час переміщення.

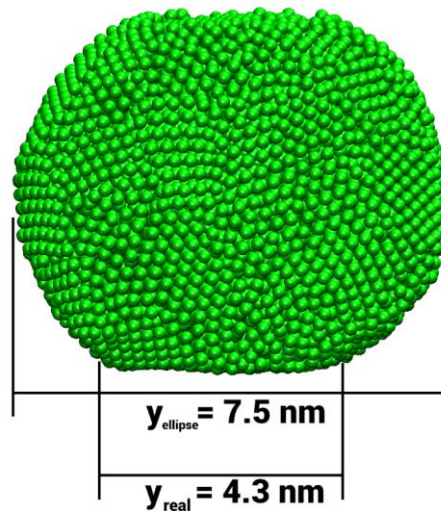


Рис 2.2. Взаємодіючий шар і розмір наночастинки алюмінію з 10000 атомів при температурі 300 К.

Сила тертя, яка залежить від площі контакту наночастинок, варіюється в межах від 0,21 нН до 0,46 нН для нікелю та від 0,10 нН до 0,24 нН для міді. Для золота цей показник становить від 0,04 нН до 0,28 нН, для срібла - від 0,1 нН до 0,23 нН, для паладію - від 0,56 нН до 0,85 нН, а для наночастинок алюмінію - від 0,15 нН до 0,43 нН. Площа контакту A коливається від 22 nm^2 до 62 nm^2 для нікелю та від 19 nm^2 до 53 nm^2 для міді, від 27 nm^2 до 72 nm^2 для золота, від 29 nm^2 до 82 nm^2 для срібла, від 52 nm^2 до 60 nm^2 для паладію та від 19 nm^2 до 50 nm^2 для алюмінію при температурі 300 К. Площу контакту для срібла, золота, міді та нікелю визначали, використовуючи розрахунки еліпса (рис. 2.3).

Розміри контактної площі для розрахунків напруження зсуву такі ж, як і для вимірювання сили тертя. Для частинок Sb на підкладці MoS₂ напруження зсуву змінюється від 1 МПа до 3 МПа з площею контакту від 10^3 nm^2 до 10^5 nm^2 (рис. 2.3). Крім того, для частинок Sb на графіті напруження зсуву змінюється від 0,1 МПа до 1 МПа при однакових значеннях площі контакту.

Функція радіального розподілу (ФРР) для різних температур наведена нижче (рис. 2.4, 2.5). ФРР має більш чіткі перші піки при вищій температурі (75-298 К) для наночастинок алюмінію. І навпаки, наночастинка паладію має однакову ФРР незалежно від температури.

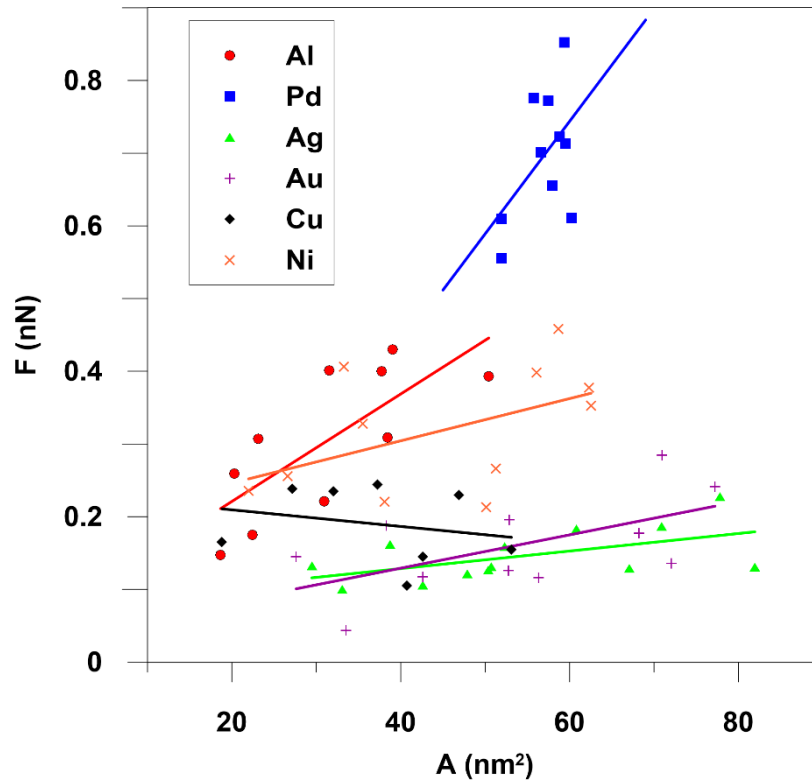


Рис. 2.3. Порівняння лінійних апроксимацій напружень зсуву як функції площі контакту різних металів при температурі 300 К.

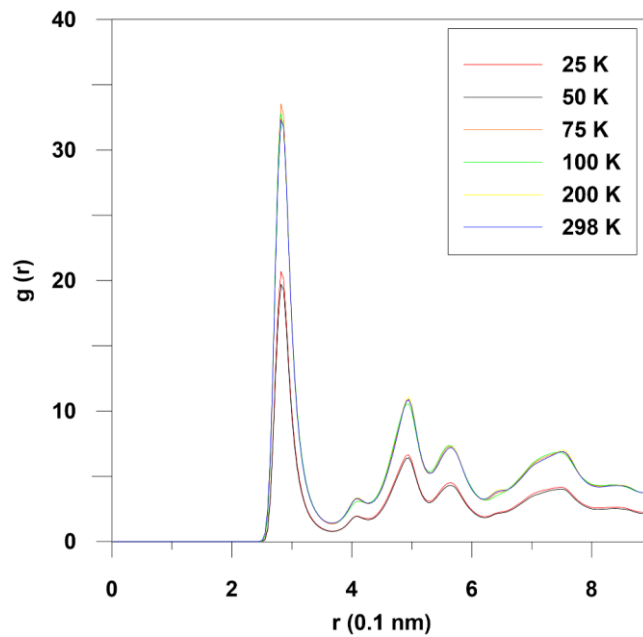


Рис. 2.4. ФРР наночастинки алюмінію з 20000 атомів.

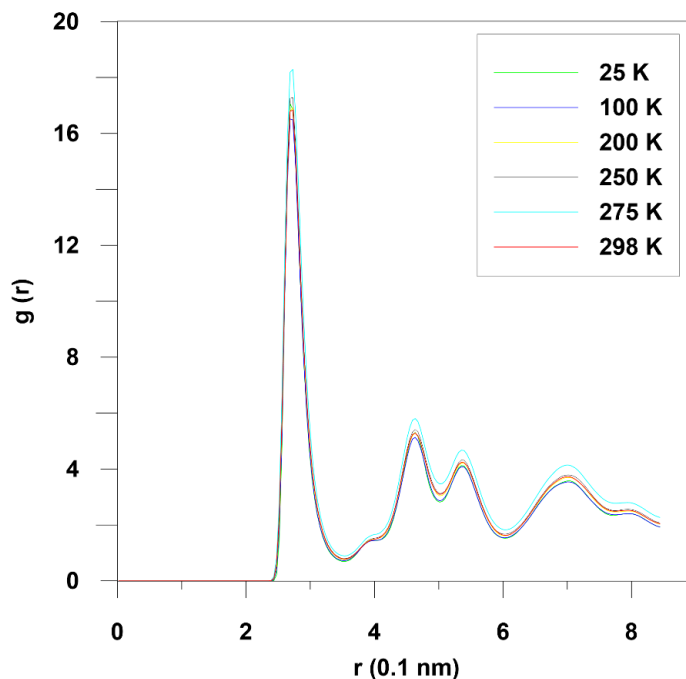


Рис. 2.5. ФРР наночастинки паладію з 20000 атомами.

- Вимірювання показали, що максимальна сила, що прикладається до паладієвої та алюмінієвої наночастинок із 20000 атомів, складала 18.14 нН та 40 нН відповідно.
- Максимальна швидкість центру мас для паладієвих наночастинок становила 3.31 м/с, а для алюмінієвих - 9.83 м/с.

В процесі моделювання було застосовано наступні параметри:

- Кількість часових кроків моделювання від 350000 до 400000.
- Розмір часового кроку Δt дорівнює 0.2 пс.
- Площа контакту для алюмінію варіюється від 5000 до 20000 атомів, для паладію - від 13000 до 22000 атомів.

Якщо взаємодія метал-метал значно сильніша, ніж метал-вуглець, то наночастинка має сферичну або еліпсоїдну форму. Отже, x - та y -розміри наночастинки більші за розміри шару, що взаємодіє з поверхнею (рис. 2.2). Через це площа, обчислена еліпсом, іноді вдвічі перевищує фактичну. Щоб уникнути такої помилки площа контакту повинна розраховуватися за розмірами нижніх шарів наночастинок, які взаємодіють з підкладкою. Попередньо площа контакту визначалася за допомогою бічних розмірів L_x і L_y наночастинки та апроксимації еліпсом. У поточній роботі площа контакту розраховується таким чином: кількість атомів металу нижніх шарів наночастинки, для яких відстань між атомами вуглецю та металу менше 0,5 нм, помножена на площу вибраного атома.

У наночастинках паладію взаємодія метал-метал сильніша, ніж в алюмінію, який має форму кулі. Тому для алюмінію різниця між фактичною площею та площею еліпса більша. Наприклад, розрахована за новим методом площа контакту наночастинки алюмінію з 10000 атомів дорівнює $20,31 \text{ nm}^2$ і $35,769 \text{ nm}^2$ для розрахунку по еліпсу (рис. 2.6, 2.7).

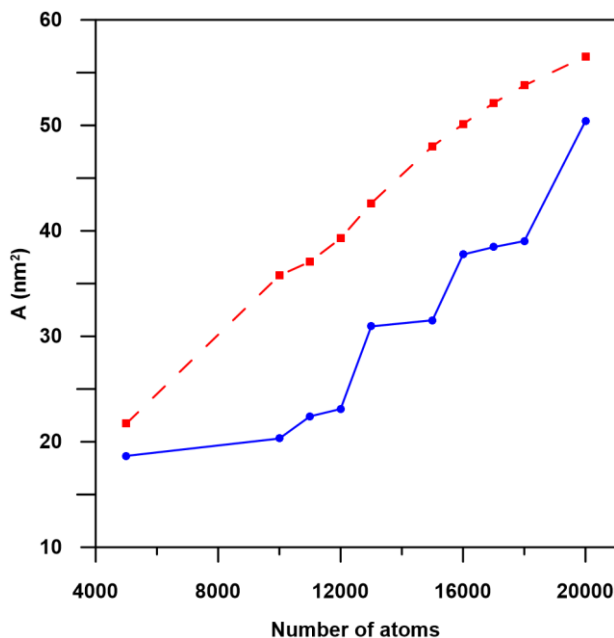


Рис. 2.6. Різниця контактної площі алюмінію між розрахунками еліпса (червоні пунктири) і новим методом (сині суцільні) при температурі 300 К.

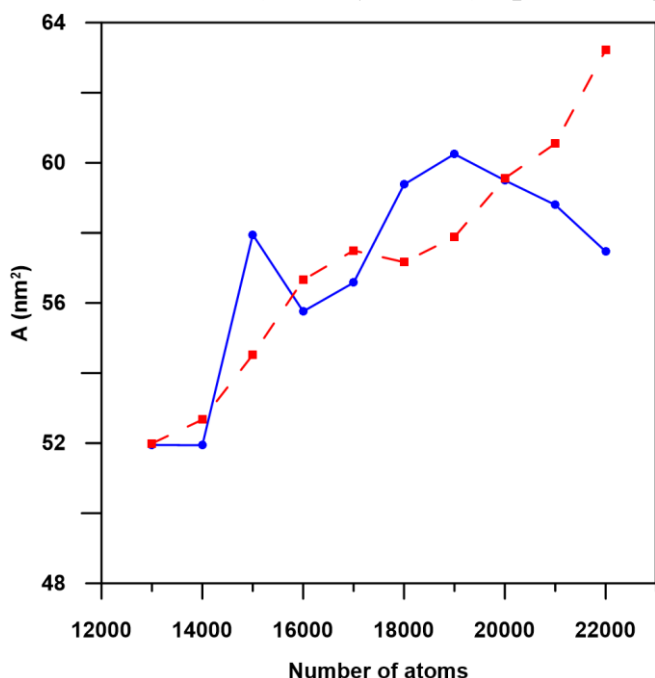


Рис. 2.7. Різниця в площі контакту з паладієм між розрахунками еліпса (червоний пунктир) і новим методом (синій суцільний колір) при температурі 300 К.

- Загальна кількість атомів в системі коливається від 37768 до 54768.
- Графічно представлення об'єктів були надані на рисунках, які демонстрували сформовану паладієву наночастинку з 22000 атомів при температурі 300 К.
- Шар, що взаємодіє, та розмір у поперечному напрямку алюмінієвої наночастинки з 10000 атомів при температурі 300 К.

Форми розрахунків площі контакту, що використовуються в попередніх роботах, були удосконалені: замість використання проекції наночастинок у вигляді еліпса, новий метод визначення площі контакту був базований на розмірах нижніх шарів наночастинки, які безпосередньо взаємодіють з підкладкою, припускаючи відстань між атомами менше 0.5 нм. Цей метод дозволяє точніше оцінити реальну площу контакту.

Ці результати показали важливість точного розрахунку площі контакту та її вплив на властивості тертя системи.

ВИСНОВКИ

1. Побудовано розподіли поточних і стаціонарних значень статичної та кінетичної сил тертя, а також температури за різних умов. Аналізуючи динаміку руху та взаємодії частинок, визначено залежності напружень, деформації та температури від координати, що дає можливість розуміти механізми тертя та взаємодії на мікрорівні.
2. Дослідження, представлене у роботі, пояснює зміну в механізмі тертя від атомного до пластичного тертя. Показано, що сили тертя змінюються значно при дуже малих навантаженнях, тоді як за великих навантажень вони залишаються постійними. Особливо відзначено роль деформацій поверхні в механізмі тертя наночастинок та важливість поверхневих деформацій, які виявилися важливими також у випадку атомного тертя. Це підкреслює значення адекватного моделювання взаємодії між металевими наночастинками та графеновими підкладками для розуміння основних принципів тертя та зношування на атомному рівні. Детальний аналіз пружних матеріалів, що включає атомні зміщення, необхідний для підтвердження обертання наночастинок та надзмащення за рахунок зниження енергетичного бар'єру, розглядається як перспективний напрям подальших досліджень.
3. За результатами нашого моделювання, можна зробити висновок, що металеві наночастинки на графені демонструють суттєву залежність сили тертя від площі контакту. Кореляція цих показників може привести до розробки нових стратегій зменшення тертя, що мають велике прикладне значення у багатьох галузях науки та техніки, таких як наноелектроніка, наномеханіка та нанотехнології змащування.
4. Таким чином, результати роботи демонструють, що моделювання методом молекулярної динаміки є потужним інструментом для вивчення мікроскопічних механізмів тертя та взаємодій між металевими наночастинками та графеновою підкладкою. Отримані дані дають можливість кращого розуміння процесів зносу та розробки принципово нових підходів до зменшення тертя на нанорівні.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Geim, A.K. & Novoselov, K.S. The rise of graphene, *Nature Materials*, 2007, vol. 6, pp. 183-191
2. Ababay Ketema Worku. Recent advances of graphene-based materials for emerging technologies, *Results in Chemistry*, 2023
3. James et al. Berman et al. Adhesion and Friction in Mesoscopic Contact Models, (2013)
4. Understanding Nanofriction Through Random Spring Models, (2006)
5. A.V. Khomenko, M.V. Zakharov, K.P. Khomenko, Ya.V. Khyzhnya, P.E. Trofimenko. Atomistic modeling of friction force dependence on contact area of metallic nanoparticles on graphene
6. Bhushan (Ed.). *Fundamentals of Friction and Wear on the Nanoscale*; Gnecco, Meyer. *Nanotribology and Nanomechanics*
7. Khomenko, Prodanov. Study of friction of Ag and Ni nanoparticles: an atomistic approach
8. Persson and Tosatti. *Modeling Friction on the Atomic Scale*, (1995)
9. Dietzel et al. Frictional duality observed during nanoparticle sliding
10. Feldmann et al. Universal aging mechanism for static and sliding friction of metallic nanoparticles
11. N. Sasaki, K. Kobayashi, M. Tsukada, *Phys. Rev. B* 54. Atomic-scale friction image of graphite in atomic-force microscopy (1996)
12. Prodanov et al. Computational investigation of the temperature influence on the cleavage of a graphite surface
13. Zhou et al. Atomic scale structure of sputtered metal multilayers
14. M. I. Mendeleev et al., *J. Applied Physics*. Molecular dynamics method for the simulation of nanoparticle synthesis and growth
15. D. Van Der Spoel et al., *Journal of Computational Chemistry*. GROMACS: Fast, flexible, and free
16. A.V. Khomenko, *International Journal of Modern Physics B*. Graphene-metal particle nanocomposites: MD simulations and theoretical predictions
17. E. Lindahl. *Accelerating Molecular Dynamics Simulations on Graphics Processing Units*
18. A.V. Khomenko, D.V. Boyko, M.V. Zakharov, K.P. Khomenko, Ya.V. Khyzhnya. Molecular dynamics of aluminum nanoparticles friction on graphene, (2017)
19. A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko. Melting of ultrathin lubricant film due to dissipative heating of friction surfaces, (2007)

ДОДАТОК А

Код програми

```
import numpy as np

class EAMModel:
    def __init__(self, A, B, alpha, beta, kappa, lambda_, re):
        self.A = A
        self.B = B
        self.alpha = alpha
        self.beta = beta
        self.kappa = kappa
        self.lambda_ = lambda_
        self.re = re

    def __phi(self, r):
        return self.A * np.exp(-self.alpha * (r/self.re - 1)) / (1 + (r/self.re - self.kappa)**20) - \
            self.B * np.exp(-self.beta * (r/self.re - 1)) / (1 + (r/self.re - self.lambda_)**20)

    def __f(self, r):
        return self.B * np.exp(-self.beta * (r/self.re - 1)) / (1 + (r/self.re - self.lambda_)**20)

    def Veam(self, atoms_positions):
        N = len(atoms_positions)
        rho = np.zeros(N)
        F = np.zeros(N)
        Veam_total = 0.0

        # Calculate electron density at each atom's position from all other atoms
        for i in range(N):
            for j in range(N):
                if i != j:
                    r_ij = np.linalg.norm(atoms_positions[i] - atoms_positions[j])
                    rho[i] += self.__f(r_ij)

        # Calculate the energy of each atom
        for i in range(N):
            F[i] = np.log(np.sqrt(rho[i])) if rho[i] > 0 else -np.inf # Avoiding Log(0)

        # Calculate the pairwise potential
        for j in range(N):
            if i != j:
                r_ij = np.linalg.norm(atoms_positions[i] - atoms_positions[j])
                Veam_total += 0.5 * self.__phi(r_ij)

        # Add the embedded energy of each atom to the total potential energy
        Veam_total += sum(F)

    return Veam_total
```



```

class HarmonicPotentialModel:
    def __init__(self, mu, mu_g, r0, theta0):
        self.mu = mu
        self.mu_g = mu_g
        self.r0 = r0
        self.theta0 = np.radians(theta0) # Convert to radians for calculation

    def Vc(self, r_ij, theta_ijk, delta_z):
        N = len(r_ij)
        Vc_total = 0.0

        # Bond stretching term
        for i in range(N):
            for j in range(N):
                if i < j:
                    Vc_total += 0.5 * self.mu * (r_ij[i][j] - self.r0)**2

        # Angle bending term
        for i in range(N):
            for j in range(N):
                for k in range(N):
                    if i < j and j < k: # Ensure we only count each angle once
                        Vc_total += 0.5 * self.mu_g * (theta_ijk[i][j][k] - self.theta0
)**2

        # Out-of-plane term
        for i in range(N):
            Vc_total += 0.5 * self.mu_g * (delta_z[i] - np.mean(delta_z))**2

        return Vc_total

# Example parameters
mu = 1.0 # Bond stretching coefficient
mu_g = 1.0 # Angle bending coefficient
r0 = 1.0 # Equilibrium bond distance
theta0 = 120 # Equilibrium bond angle in degrees

# Placeholder values for the r_ij matrix and theta_ijk tensor
N = 10000 # Number of atoms
r_ij = np.array([[0, 1.1, 1.1], [1.1, 0, 1.1], [1.1, 1.1, 0]]) # Distance matrix
theta_ijk = np.zeros((N, N, N)) # Angle tensor
for i in range(N):
    for j in range(N):
        for k in range(N):
            if i < j and j < k:
                theta_ijk[i][j][k] = np.radians(120) # Example angle in radians

delta_z = np.array([0.1, -0.1, 0]) # Displacement from the plane

# Initialize the model
model = HarmonicPotentialModel(mu, mu_g, r0, theta0)

# Calculate the potential energy
Vc_energy = model.Vc(r_ij, theta_ijk, delta_z)
Vc_energy

```

```

class LennardJonesPotential:
    def __init__(self, epsilon, sigma):
        self.epsilon = epsilon # Depth of the potential well
        self.sigma = sigma     # Finite distance at which the inter-particle potential
is zero

    def U_LJ(self, r):
        # Calculate the Lennard-Jones potential for a distance r
        return 4 * self.epsilon * ((self.sigma / r)**12 - (self.sigma / r)**6)

# Assuming typical Lennard-Jones parameters for Al-graphene and Pd-graphene interaction
s
epsilon_Al_graphene = 0.0103 # Depth of the potential well for Al-graphene (in eV)
sigma_Al_graphene = 2.49     # Distance for Al-graphene (in Angstroms)

epsilon_Pd_graphene = 0.039  # Depth of the potential well for Pd-graphene (in eV)
sigma_Pd_graphene = 2.5      # Distance for Pd-graphene (in Angstroms)

# Initialize Lennard-Jones potential instances for Al-graphene and Pd-graphene
lj_potential_Al = LennardJonesPotential(epsilon_Al_graphene, sigma_Al_graphene)
lj_potential_Pd = LennardJonesPotential(epsilon_Pd_graphene, sigma_Pd_graphene)

# Let's say we have a certain distance between the nanoparticles and the graphene sheet
distance_Al_graphene = 3.0 # Distance between Al nanoparticle and graphene (in Angstro
ms)
distance_Pd_graphene = 3.5 # Distance between Pd nanoparticle and graphene (in Angstro
ms)

# Calculate the Lennard-Jones potential energy for the interactions
U_LJ_Al = lj_potential_Al.U_LJ(distance_Al_graphene)
U_LJ_Pd = lj_potential_Pd.U_LJ(distance_Pd_graphene)

class BerendsenThermostat:
    def __init__(self, target_temp, relaxation_time, timestep, mass):
        self.target_temp = target_temp # Target temperature T0
        self.relaxation_time = relaxation_time # Relaxation time  $\tau$ 
        self.timestep = timestep # Time step  $\Delta t$ 
        self.mass = mass # Mass of the particle m

    def integrate(self, r_i, r_i_prev, F_i):
        # Calculate new position using Verlet integration (equation 2.19)
        r_i_next = 2 * r_i - r_i_prev + (self.timestep ** 2 / self.mass) * F_i
        return r_i_next

    def adjust_velocity(self, velocities, current_temp):
        # Adjust velocities to maintain the target temperature
        lambda_factor = np.sqrt(1 + self.timestep / self.relaxation_time *
(self.target_temp / current_temp - 1))
        new_velocities = velocities * lambda_factor
        return new_velocities

```