

**СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**Проданов Микола Вікторович**

УДК 539.216-032.36-022.532(043.3)

**АТОМІСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТРИБОЛОГІЧНИХ ЯВИЩ У  
НАНОРОЗМІРНИХ СИСТЕМАХ, ЩО МІСТЯТЬ ВУГЛЕЦЕВІ  
ПОВЕРХНІ**

01.04.07 – фізика твердого тіла

**АВТОРЕФЕРАТ**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Суми – 2011

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана у Сумському державному університеті Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України.

**Науковий керівник** — доктор фізико-математичних наук, доцент  
**Хоменко Олексій Віталійович**,  
Сумський державний університет,  
професор кафедри моделювання  
складних систем.

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Метлов Леонід Семенович**,  
Донецький фізико-технічний інститут  
НАН України ім. О. О. Галкіна,  
старший науковий співробітник  
відділу фізики високих тисків  
та перспективних технологій;

доктор технічних наук,  
старший науковий співробітник  
**Береснев В'ячеслав Мартинович**,  
Харківський національний університет  
імені В. Н. Каразіна,  
професор кафедри матеріалів  
реакторобудування.

Захист відбудеться “21” жовтня 2011 р. о 13-й годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 55.051.02 при Сумському державному університеті за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2, корпус ЕТ, ауд. 236.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Сумського державного університету за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2.

Автореферат розісланий “20” вересня 2011 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради

В. О. Журба

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Тертя і зношування – невід’ємні явища, що супроводжують відносний рух двох поверхонь, які знаходяться у безпосередній близькості одна від одної. Ці процеси спостерігаються повсюдно у повсякденному житті та різноманітних промислових застосуваннях, де вони відіграють важливу, а часто й основну роль для досягнення оптимальної роботи. У різних застосуваннях вимагаються як низькі, так і високі значення тертя і зношування, що свідчить про необхідність вміння керувати цими процесами. Усвідомлення останнього факту привело до інтенсивних досліджень, накопичення великої кількості емпіричних результатів і формування у середині ХХ століття трибології – науки, що вивчає тертя, зношування, змащування та інші споріднені процеси, які виникають при відносному русі поверхонь контакту.

Складність процесів, що вивчаються, приводила до того, що трибологія до недавнього часу залишалася, головним чином, прикладною наукою, а розглядувані задачі мали в основному інженерний, а не фундаментальний характер. Корінні зміни стали відбуватися з 80-х років ХХ століття завдяки виникненню принципово нових експериментальних методик, що дозволяють вивчати трибологічні явища на атомарному рівні, а також збільшенню обчислювальних потужностей комп’ютерів, яке дало можливість теоретично моделювати відповідні системи. Стрімке накопичення результатів досліджень із використанням зазначених підходів привело до виділення нової науки – нанотрибології, яка розглядає тертя, зношування і пов’язані процеси на нанорівні. Незважаючи на значний прогрес у розумінні атомарних витоків тертя і зношування, досягнутий за останні два десятиліття, на сьогоднішній день існує багато відкритих питань. Особливу увагу привертають нанотрибологічні властивості систем, що містять вуглецеві, зокрема алмазні та графітові, поверхні, внаслідок унікальних властивостей останніх. Теоретичний розгляд деяких з них є метою цієї роботи.

Унаслідок сучасних тенденцій з мініатюризації різноманітних приладів із рухомими компонентами у технологічних застосуваннях усе частіше доводиться мати справу із тертям і зношуванням на наномасштабі. Високі темпи розвитку нових експериментальних методик вивчення трибологічних процесів на атомарному рівні приводять до швидкого накопичення емпіричних даних. Для виявлення фізичних закономірностей, що лежать в основі отриманих експериментальних результатів, є необхідним їх всебічний теоретичний аналіз. Однак через складність розглядуваних процесів їх теоретичний опис відстає від експериментів. Таким чином, на сьогоднішній день існує безсумнівна потреба у теоретичних дослідженнях процесів тертя і зношування на нанорівні.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконана на кафедрі моделювання складних систем Сумського державного університету і пов'язана з виконанням таких держбюджетних науково-дослідних робіт (НДР): НДР 0106U001940 “Статистична теорія складних систем економічного типу” (2006–2008 рр.); НДР 0107U001279 “Синергетика межового тертя” (2007–2008 рр.); НДР Державного фонду фундаментальних досліджень 0110U006721 “Вплив кореляцій температури мастила і гістерезисних явищ на динаміку межового тертя у нанопристроях” (2008–2010 рр.); НДР 0109U001378 “Фізика формування потоків заряджених частинок у пристроях для діагностики матеріалів атомної енергетики” (2009–2011 рр.); НДР Державного фонду фундаментальних досліджень України і Російського фонду фундаментальних досліджень 0109U007301 “Структурний стан і механічна поведінка наноструктурних металів і сплавів” (2009–2010 рр.).

**Мета і завдання дослідження.** Мета роботи пов'язана з побудовою моделей нанорозмірних систем, що містять вуглецеві поверхні, встановленням атомістичних витоків трибологічних явищ, які спостерігаються у цих системах, та використанням теоретично отриманих результатів для інтерпретації відповідних експериментальних даних і передбаченням нових явищ.

Досягнення названої мети вимагало вирішення таких задач:

- у наближенні ТІР4Р моделі молекул води вивчити структуру і трибологічні властивості ультратонкої плівки води, стиснутої між абсолютно жорсткими гладкими алмазними поверхнями й алмазними пластинами, які мають періодичний атомарний рельєф;
- використовуючи потенціали міжатомних взаємодій Бреннера і Колмогорова-Креспі, побудувати атомістичну модель графіту; для цієї моделі розробити алгоритм і реалізувати відповідну програму для паралельного розрахунку міжатомних сил взаємодії у межах методу класичної молекулярної динаміки;
- на основі розробленої методики дослідити розшарування поверхні графіту, яка взаємодіє із абсолютно жорстким пірамідальним нановиступом, в умовах різних значень енергії взаємодії зонд-підкладка, сталої кристалічної решітки нановиступу, а також за різних температур;
- у межах побудованої моделі дослідити опромінення пластини графену потоком атомів вуглецю;
- побудувати атомістичну модель, яка описує взаємодію срібних і нікелевих наночастинок (НЧ) із графеном; отримати та проаналізувати залежність сили тертя, що діє на НЧ при її зсуві, від часу, положення її центра мас і площі контакту.

*Об'єкт дослідження* — структурні та трибологічні процеси, що мають місце в адсорбованих шарах та на поверхнях нанорозмірних систем.

*Предмет дослідження* — фазові переходи в ультратонкій плівці води, яка стиснена між поверхнями з алмазного матеріалу, і тертя цих поверхонь; утворення графену внаслідок зношування графітової підкладки, що взаємодіє з вольфрамовим нановиступом; тертя Ag та Ni наночастинок, адсорбованих на графені.

*Методи дослідження.* Для вивчення поведінки всіх атомістичних моделей використовувався метод класичної молекулярної динаміки (МД), який об'єднує у собі методи математичного моделювання, обчислювальної і статистичної фізики. Рівняння руху інтегрувалися методом Верле і предиктора-коректора. Розрахунок взаємодій проводився із використанням методів усіх пар, зв'язаних списків комірок і списків сусідів. Для паралелізації алгоритму розрахунку міжатомних взаємодій у графітовій системі використовувався метод доменної декомпозиції.

### **Наукова новизна одержаних результатів**

1. Уперше для ультратонкої плівки води, молекули якої представлені моделлю TIP4P, стиснутої між абсолютно жорсткими атомарно-гладкими алмазними поверхнями й алмазними пластинами, які мають періодичний атомарний рельєф, виявлено існування твердоподібного стану. При цьому показано, що:

- він спостерігається для навантажень, які перевищують 430 МПа;
- періодичний атомарний рельєф руйнує як вертикальне, так і горизонтальне впорядкування молекул у плівках товщиною два молекулярних діаметри;
- залежності середнього за часом значення сили тертя, яка діє на верхню пластину, від навантаження якісно збігаються з експериментальними залежностями для простих сферичних молекул;
- наявність періодичного атомарного рельєфу якісно не змінює виду зазначених залежностей.

2. Використовуючи метод класичної МД, вперше встановлено умови, за яких відбуваються розшарування графітового зразка, який взаємодіє з адгезивним нановиступом, й утворення nanoшматочка шляхом руйнування верхнього графенового шару. Показано, що для значення сталої решітки нановиступу, що дорівнює 0.3165 нм, при температурі 298 К розшарування зразка відбувається при енергії взаємодії зонд–поверхня, більшій або такій, що дорівнює 0.5 еВ на атом. Вперше для адгезивного зонда, що взаємодіє із графітовою поверхнею, отримано залежності нормальної сили, яка діє на зонд, від відстані до зразка.

3. У межах побудованої моделі вперше виявлено, що врахування внеску, обумовленого короткодіючою відштовхувальною взаємодією внаслідок перекриття електронних орбіталей атомів вуглецю, в енергії зв'язку

шарів графіту якісно змінює кінетику розшарування зразка при температурах нижче 8 К. Уперше проведено аналітичні оцінки, що якісно пояснюють поведінку, яка спостерігається, та зазначено експериментальні умови для перевірки розрахункових результатів.

4. Методом МД вперше визначено силу тертя, яка діє на срібні й нікелеві наночастинки, що адсорбовані на графені. Встановлена лінійна залежність сили тертя від площі контакту для срібних наночастинок. Показано, що кут нахилу лінійної апроксимації для Ag дорівнює  $1.21 \text{ пН/нм}^2$ , що з точністю 15 % відповідає експериментальним даним для Sb наночастинок. Уперше передбачено існування пілкоподібної форми залежності сили тертя, що діє на нікелеві наночастинки, від латеральної координати центра мас наночастинок.

**Практичне значення одержаних результатів.** Розроблені моделі й отримані на їх основі результати мають як фундаментальне, так і прикладне значення. Перше полягає у виявленні існування твердоподібного стану ультратонкої плівки води, стиснутої між алмазними поверхнями. Передбачена температурна залежність розшарування графіту подає додатковий приклад, який ілюструє наявність основних вкладів в енергію зв'язків шарів графену. Дослідження тертя металевих наночастинок розширило уявлення про атомістичні витоки цього явища.

Прикладне значення результатів роботи полягає у декількох аспектах. Отримані оцінки значень навантаження, за яких спостерігається твердоподібний стан ультратонкої плівки води, дають змогу передбачати цей стан. Також встановлено умови, за яких відбувається розшарування графіту, що дозволяє прогнозувати можливість спостереження явища суперзмащування для різних матеріалів нановиступу, який взаємодіє із графітовою поверхнею. Крім того, отримана інформація безпосередньо стосується однієї з методик виробництва графену — мікромеханічного розколювання графіту і може бути цінною для її оптимізації. Результати для тертя НЧ, адсорбованих на графені, дають можливість передбачати форму залежностей сили тертя, яка діє на НЧ з боку графену, для різних матеріалів.

**Особистий внесок здобувача.** Постановка задач дослідження та обговорення отриманих результатів проводилися разом із науковим керівником д.ф.-м.н., доцентом Хоменком О. В. У всіх роботах [1–16] автором були розроблені та програмно реалізовані моделі досліджуваних систем. Крім того, при отриманні результатів публікацій [3–6, 10–14] дисертант брав безпосередню участь у проведенні розрахунків і обробці результатів. У роботі [5] автор дисертації також провів аналітичну оцінку температурної залежності енергії зв'язку графену в графіті. У роботах [7–9, 15, 16] дисертант розробив алгоритми розрахунків, брав участь в організації та проведенні обчислень, аналізі й інтерпретації отриманих даних. Особисто автором підготовлені статті [1, 5, 7].

**Апробація результатів дисертації.** Матеріали дисертації доповідалися й обговорювалися на семінарах Донецького фізико-технічного інституту ім. О. О. Галкіна, Інституту прикладної фізики НАН України м. Сум і Центру нанотехнологій Вестфальського університету ім. Вільгельма м. Мюнстер, Німеччина, і таких конференціях: Міжнародних конференціях студентів і молодих вчених з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА” (Львів, 2008, 2010 рр.); 1-й і 2-й Всеукраїнських наукових конференціях молодих вчених “Фізика низьких температур (КМВ-ФНТ)” (Харків, 2008, 2009 рр.); Міжнародних конференціях “Высокие давления. Фундаментальные и прикладные аспекты” (Судак, Крым, 2008, 2010 гг.); International conference “Statistical Physics 2009: Modern Trends and Applications” (Lviv, 2009); International conference “Functional Materials (ICFM’2009)” (Partenit, Crimea, 2009); International conference “Physics of liquid matter: modern problems (PLMMP-2010)” (Kyiv, 2010); 10-й Всеукраїнській школі-семінарі та Конкурсі молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 2010 р.); 2-й Міжнародній науковій конференції “Наноструктурные материалы: Беларусь-Россия-Украина (НАНО - 2010)” (Киев, 2010 г.); 2-й Всеросійській науково-інноваційній молодіжній конференції (з міжнародною участю) “Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент” (Тамбов, Россия, 2010 г.).

**Публікації.** За матеріалами дисертації опубліковано 20 наукових праць, основні 16 з яких наведені в авторефераті. Серед них 8 статей у фахових наукових журналах, що входять до переліку ВАК України.

**Структура і обсяг роботи.** Дисертація складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, одного додатка на 3 сторінках і списку використаних джерел із 178 найменувань на 18 сторінках. Загальний обсяг дисертації становить 174 сторінки, з них 104 сторінки основного тексту. Робота містить 83 рисунки, з них 50 рисунків на 29 окремих аркушах.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ

У **вступі** обґрунтована актуальність теми дисертації, зазначені мета й основні завдання дослідження, визначені його об’єкт та предмет, розкриті наукова новизна і практичне значення результатів, наведені дані про особистий внесок здобувача, апробацію результатів.

**Перший** розділ “Трибологічні властивості нанорозмірних систем” є оглядом літератури і складається з трьох підрозділів. У *першому підрозділі* наведено результати досліджень трибологічних властивостей межових плівок вуглеводнів і води, стиснутих як між атомарно-гладкими, так і шорсткими поверхнями. Теоретично й експериментально показано, що ультратонка плівка рідини товщиною менше 6 молекулярних діаметрів,

стиснута в малих об'ємах, перебуває у твердоподібному стані. Він проявляється у зниженні рухливості молекул, вираженому в збільшенні часів релаксації і зменшенні коефіцієнта дифузії. Також у цьому стані спостерігаються утворення квазідискретних шарів молекул рідини та їх упорядкування у площині шарів. Наявність атомарного рельєфу стінок руйнує впорядкованість молекул. *Другий підрозділ* подає інформацію про експерименти з вивчення тертя поверхні графіту на атомарному рівні. Подано результати, які вказують на можливість існування суперзмащування для вольфрамового зонду фрикційного силового мікроскопа (ФСМ) на поверхні графіту. Наведено можливе пояснення цього явища, що ґрунтується на припущенні про утворення графітового наношматочка, прикріпленого до зонда. Констатується відсутність достовірного підтвердження цього припущення в літературі. Також описані нові методики отримання графену, що базуються на розшаруванні графітового зразка, і відомості про утворення дефектів у графені внаслідок його опромінення різними частинками. У *третьому підрозділі* описується експериментальна методика вивчення тертя металевих наночастинок, адсорбованих на поверхні графіту. Відмічено основні переваги цього підходу порівняно з існуючими методиками, а також існування фрикційного дуалізму в досліджуваних системах. Констатується відсутність адекватного теоретичного розгляду тертя металевих НЧ, адсорбованих на атомарно-гладкій поверхні.

**Другий** розділ “Ультратонка плівка води, стиснута між алмазними поверхнями” присвячений дослідженню трибологічних властивостей зазначеної системи методом МД. У *першому підрозділі* описано атомістичну модель системи. Використовується планарна куєттівська геометрія. Тонка плівка води стиснута між двома абсолютно твердими стінками із періодичними граничними умовами у площині пластин, паралельній площині  $xy$ . Розглядаються як атомарно-гладкі пластини, так і поверхні з періодичним атомарним рельєфом. У першому випадку кожна стінка складається із 1152 атомів, що утворюють дві (001) кристалографічні площини з алмазною решіткою. У другому випадку періодичний рельєф створювався видаленням 144 атомів з кожної поверхні, у яких залишалося по 1008 атомів. На початку моделювання один шар води містить 196 молекул. Максимальна кількість частинок у розрахунках становить 2696. Горизонтальні розміри комірки моделювання однакові в  $x$ - та  $y$ -напрямах і дорівнюють 4.281 нм.

Для імітації експериментів моделювання виконується при сталій температурі 298 К, яка підтримується методом обмежень. Зовнішнє навантаження моделюється шляхом прикладення сталої сили  $L$  до кожного атома у вертикальному напрямі. Зсув імітується прикладенням сталої горизонтальної сили зсуву  $F_S$  до кожного атома верхньої пластини вздовж осі  $x$ , яка відповідає напрямку [010]. Опис взаємодій молекул у плівці води ба-



зується на використанні TIP4P моделі молекули. Потенціальна енергія взаємодії молекули води з атомами вуглецю має леннард-джонсівський (ЛД) вид. Рівняння обертального руху молекул води виражаються через гамільтонові кватерніони. Рівняння трансляційного і обертального руху інтегруються з використанням алгоритму предиктор-коректор четвертого порядку із часовим кроком 2.627 фс.

У *другому підрозділі* наведено інформацію про результати комп'ютерних експериментів. Обчислювання проводилися для навантажень  $L$  на атом у діапазоні від 2 (6.838 пН у фізичних одиницях) до 50 (0.171 нН). Відповідний тиск, що діє на пластини, змінюється від 0.43 до 10.751 ГПа. Сила зсуву  $F_S$  має значення від 0.5 (1.71 пН) до 10 (34.3 пН) на атом. Результуюча сила зсуву, яка діє на верхню пластину, змінюється від 1.97 до 394 нН. Максимальна тривалість моделювання становить 136.6 пс. Виконувалися дві групи моделювань. Перша характеризується відсутністю зсуву, і вимірюється коефіцієнт дифузії молекул у плівці. У другій групі має місце зсув верхньої пластини, і вимірюється сила тертя, яка дорівнює сумі  $x$  компонент сил, що діють на верхню пластину з боку води. Коефіцієнт дифузії  $D$  обчислюється двома способами – із використанням виразів Ейнштейна і Гріна-Кубо. Останній ґрунтується на інтегральній автокореляційній функції швидкостей  $\varphi(t)$ .

Часові залежності  $\varphi(t)$ , отримані для атомарно-гладких алмазних поверхонь, мають осцилюючий вигляд із областю від'ємних значень, які в об'ємних рідинах спостерігаються біля критичної точки твердіння. У даному випадку вони свідчать про твердоподібний стан ультратонкої плівки води. Величина  $D$ , отримана обома названими методами, зменшується із зростанням навантаження  $L$ . Це вказує на зменшення рухливості молекул води між стінками і на перехід ультратонкої плівки до твердоподібного стану, особливістю якого є впорядкованість молекул, яка може бути вертикальною і горизонтальною. Квазідискретні шари мають місце на миттєвих знімках системи. Упорядкування у площині для одношарової плівки не спостерігалось для всіх значень навантаження і зсуву. У плівках товщиною два молекулярних діаметри впорядкування у площині має місце, особливо за високих навантажень (рис. 1).

На залежності середньої за часом сили тертя від зовнішнього навантаження  $L$  можна виділити дві основні області. Перша – лінійна при низьких  $L$ , вона відповідає першому закону Амонтона, друга – горизонтальна, спостерігається за високих навантажень. Ці залежності можна пояснити, використовуючи модель “брущатки”, згідно з якою сила тертя визначається двома внесками. Перший обумовлений адгезією між молекулами рідини й поверхнею і пропорційний площі контакту. Другий внесок пропорційний зовнішньому навантаженню. У нашій моделі переважає перший внесок внаслідок гладкості поверхонь. При підвищенні навантаже-

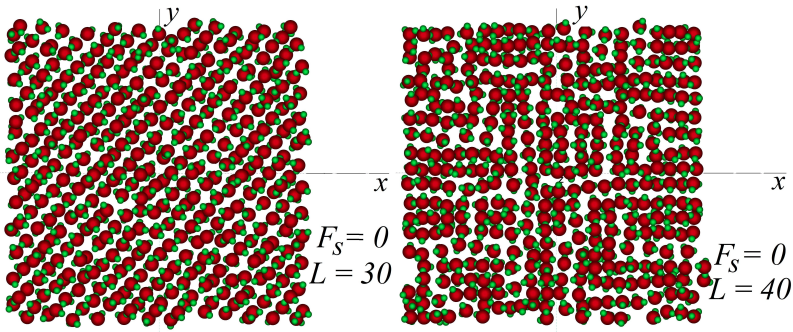


Рис. 1. Конфігурації молекул у площині  $xy$  для різних навантажень і нульової сили зсуву наприкінці моделювання двошарової плівки

ння кількість адгезивних зв'язків збільшується, обумовлюючи зростання тертя. Після визначеного значення  $L$  сила адгезії не може зростати внаслідок досягнення максимально можливої кількості адгезивних зв'язків, що зумовлює ділянку насичення.

У випадку алмазних пластин із періодичним атомарним рельєфом залежності автокореляційної функції швидкості та коефіцієнта дифузії мають вигляд, аналогічний до залежностей для системи з гладкими пластинами, що свідчить про наявність твердоподібного стану плівки води. Основною відмінністю є те, що квазидискретні шари не утворюються, і у плівці товщиною два молекулярних діаметри відсутнє впорядкування молекул води у площині  $xy$ . Для характеристики структури плівки води також було використано динамічний структурний фактор, частотні залежності якого свідчать про аморфну структуру плівки води товщиною два молекулярних діаметри. Також виявлено, що періодичний атомарний рельєф не приводить до якісних змін залежностей сили тертя від навантаження.

У **третьому** розділі “Розшарування графітової поверхні при взаємодії з адгезивним нановиступом” проведено дослідження розшарування графітового зразка за різних умов методом МД. *Перший підрозділ* присвячено опису моделі системи. Графітовий зразок утворений трьома шарами графену з АВ упаковкою (рис. 2), періодичні граничні умови прикладені у площині  $xy$ . Кожен шар складається з  $24 \times 24$  гексагонів і містить 3456 атомів. Довжини вздовж  $x$ - та  $y$ -напрямів дорівнюють 10.082 нм та 8.731 нм відповідно. Щоб утримати зразок, нижній графеновий шар є жорстким. Абсолютно жорсткий квадратний пірамідальний нановиступ (який також будемо називати зондом) складається з 5 шарів атомів, паралельних площині  $xy$ . Частинки розміщені у вершинах ОЦК решітки із сталою 0.3165 нм, що відповідає кристалічній структурі вольфраму. Нановиступ містить 1135 атомів, їх загальна кількість складає 11503.

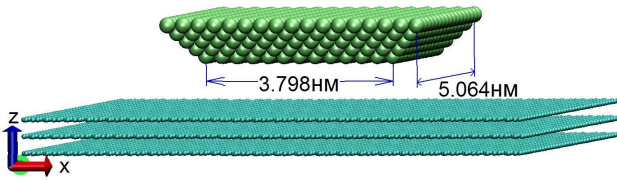


Рис. 2. Видяг збоку початкової атомарної конфігурації досліджуваної системи. Великі й малі кульки відповідають атомам вольфраму й вуглецю

Ковалентні зв'язки між атомами вуглецю у двох верхніх динамічних шарах графену описуються потенціалом Бреннера. Для опису зв'язування шарів використовуються два типи потенціалів. Перший — потенціал Колмогорова-Креспі (RDP), який містить ван-дер-ваальсове (ВДВ) притягання й експоненціальне затухаюче відштовхування внаслідок перекриття  $\pi$ -орбіталей атомів вуглецю з різних шарів. Спрямованість орбіталей відтворюється використанням “локальних” нормалей до  $sp^2$ -площини поблизу кожного атома вуглецю. Взаємодія зонд—поверхня має місце лише для верхнього шару графену й описується ЛД потенціалом з енергетичним мінімумом глибиною  $\varepsilon$ . Необхідна температура підтримується через термостат Берендсена, з'єднаний із двома верхніми шарами графену. Рівняння руху інтегруються методом Верле із часовим кроком  $\Delta t = 0.1$  фс.

У другому підрозділі подано результати моделювань. Спочатку з'ясовується, за яких умов відбувається розшарування зразка при використанні RDP потенціалу. Розглядаються такі значення енергетичного мінімуму  $\varepsilon$  в ЛД потенціалі: 0.1; 0.25; 0.5; 1 та 6 еВ на атом. Після врівноваження системи впродовж перших  $10^4$  часових кроків при 298 К із зондом, розміщеним на відстані 1.16 нм над поверхнею, виступ починає знижуватися в напрямі зразка. Рух відбувається кроками, змінюючи  $z$ -координати атомів вольфраму на 0.01304 нм. Система врівноважується впродовж 500 часових кроків між зміщеннями зонду, що відповідає швидкості руху 260.8 м/с. Тривалість моделювання становить 10 пс. На рис. 3 подані типові криві сила—відстань, що відбивають зміни нормальної сили, яка діє на зонд, із відстанню до поверхні. Ця сила обчислюється як сума  $z$ -компонент сил, що діють на атоми вольфраму з боку графітового зразка, і вона усереднюється впродовж останніх 100 часових кроків процедури врівноваження між зміщеннями зонду.

При наближенні зонда до поверхні спостерігається початок нестабільності, позначений зростанням притягання між двома поверхнями (воно відповідає від'ємному значенню сили), що супроводжується зменшенням потенціальної енергії системи. Максимум притягання (точка А на рис. 3) відповідає явищу “стрибка для контакту” (СК), при якому атоми

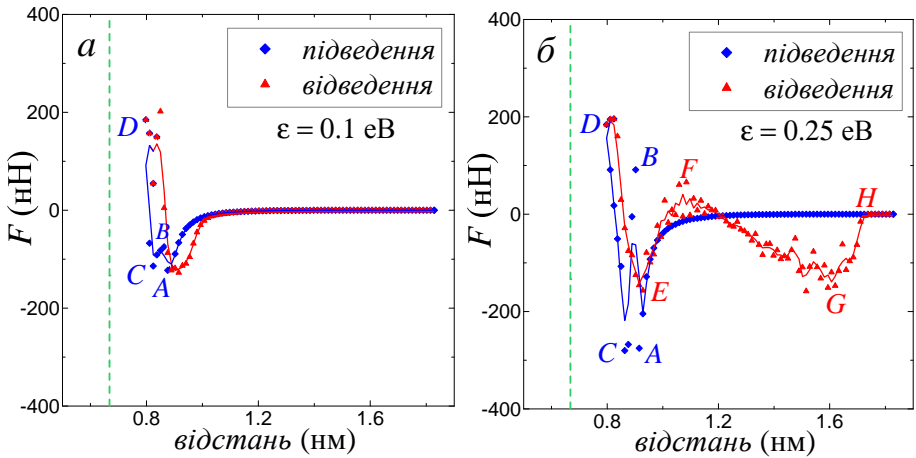


Рис. 3. Нормальна сила, що діє на нановиступ, при його наближенні та відведенні від поверхні графіту зі швидкістю 260.8 м/с для значень  $\varepsilon = 0.1$  eV (а) і  $\varepsilon = 0.25$  eV (б). Вісь абсцис відповідає вертикальній відстані між жорстким шаром графену й нижнім атомним шаром вольфраму

вуглецю під виступом зміщуються в напрямі до зонда впродовж короткого часового інтервалу  $\sim 0.5$  пс. СК пов'язується з індукованою зондом деформацією зразка і призводить до зіштовхувань атомів вуглецю з нановиступом, що зумовлює раптове спадання притягання у точці *B*. Подальше просування зонда має результатом зменшення відштовхування, а по досягненні точки *C* спостерігається нове різке зростання сили (*CD* сегмент), що свідчить про індентацію зразка.

Підйом зонда починається після  $5 \cdot 10^4$  часових кроків і має результатом підвищену адгезію між зондом і поверхнею, про що свідчить гістерезис на залежностях сила–відстань. Для  $\varepsilon = 0.1$  eV крива сила–відстань на рис. 3а при відведенні має таку саму форму, як і при підведенні. Те, що в енергії зв'язку шарів не спостерігається значних змін, і остаточне наближення сили, що діє на зонд, до нуля, свідчить про відсутність розшарування для  $\varepsilon = 0.1$  eV. Значення  $\varepsilon = 0.25$  eV також не є достатнім для зняття верхнього шару, і на відрізку *GH* (рис. 3б) зонд “втрачає” атоми вуглецю, які повертаються у рівноважне вертикальне положення верхнього шару. Розрахунки вказують на те, що для відшарування потрібне значення  $\varepsilon \geq 0.5$  eV.

Також проведено дослідження можливості утворення шматочка графену, прикріпленого до зонда, шляхом виривання атомів вуглецю з верхнього графітового шару. Показано, що це відбувається для значень 4814 м/с і 6 eV швидкості руху зонда і  $\varepsilon$  відповідно. Такі великі значення

ня свідчать про неможливість реалізації даного механізму розшарування в експериментах щодо суперзмащення.

Для виявлення впливу температури на розшарування графіту проведено моделювання з використанням як RDP потенціалу для зв'язування шарів, так і ЛД потенціалу. Параметри останнього підібрані таким чином, щоб отримані значення енергії зв'язку шарів і відстані між ними були близькими до тих, що дає RDP. Для взаємодії зонд—поверхня використовується значення  $\varepsilon = 0.5$  eV, яке забезпечує зняття верхнього шару графену при температурі 298 К. Рух зонда відбувається, як було описано вище, і швидкість руху становить 265 м/с.

Для обох потенціалів розрахунки виконано в інтервалі температур від 298 К до 2 К. Основним результатом проведених обчислень є те, що при використанні RDP потенціалу зняття верхнього шару має місце в інтервалі температур від 298 К до 16 К. Для  $T$  від 8 К до 2 К розшарування не відбувається, і зонд “втрачає” шар графену, у той час як для ЛД потенціалу шар знімається в усьому інтервалі температур. Часові залежності енергії зв'язку шарів графену свідчать про наявність потенціального бар'єра для RDP потенціалу, який проявляється за низьких  $T$ . Для пояснення отриманих результатів проведено аналітичні оцінки температурних залежностей різних внесків у потенціальну енергію зв'язку шарів у графіті. Радіус-вектор, який з'єднує найближчих сусідів атомів з різних шарів, і кут  $\theta$  між векторами  $\mathbf{r}$  і  $\mathbf{n}$  (рис. 4) записуються у вигляді суми сталої і стохастичної компонент, де остання обумовлена тепловим рухом атомів. Підставляючи це у вираз для  $\rho$ , використовуючи тригонометричні й термодинамічні тотожності й усереднюючи за достатньо тривалим часовим інтервалом, можна отримати

$$\langle \rho^2 \rangle = a^2 + (\alpha T - \beta r_0^2 T - \alpha \beta T^2) a^2 / r_0^2. \quad (1)$$

Використовуючи (1), отримаємо оцінку температурної залежності анізотропного внеску в RDP потенціал (позначимо його через  $\langle V_\pi \rangle$ ). Провівши аналогічні викладки, можна оцінити залежність ВДВ внеску  $\langle V_{vdW} \rangle$  від  $T$ . Результати вказують на спадання  $\langle V_{vdW} \rangle$  і зростання  $\langle V_\pi \rangle$  із температурою  $T$ . Причому  $\langle V_\pi \rangle$  зростає на порядок швидше, ніж  $\langle V_{vdW} \rangle$  спадає. Використовуючи ці дані, проаналізуємо утворення потенціального бар'єра. При найнижчій температурі  $\langle V_\pi \rangle$  має найменше можливе значення, а  $\langle V_{vdW} \rangle$  максимальне. Тому в конкуренції трьох взаємодій: ВДВ притягання зонд—зразок і перекриття  $\pi$ -орбіталей  $\langle V_\pi \rangle$ , які прагнуть розділити шари, і ВДВ притягання між шарами  $\langle V_{vdW} \rangle$  виграє остання, і розшарування не відбувається. Ця ситуація за вибраних параметрів моделі зберігається до 8 К. Починаючи з 16 К, внаслідок швидкого зростання із  $T$  дві взаємодії, що прагнуть відокремити верхній шар, починають переважати над  $\langle V_{vdW} \rangle$  (яке зменшилось внаслідок теплового розширення), величина

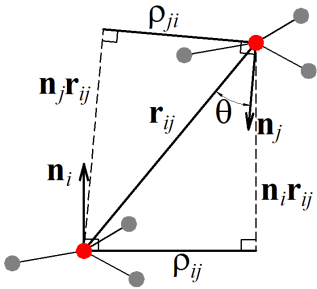


Рис. 4. Геометрична ілюстрація величин, які використовуються в аналітичних оцінках

бар'єра досягає значення, яке можна подолати, і відбувається розшарування.

Наприкінці підрозділу подано результати дослідження впливу розміру кристалічної решітки зонда на розшарування. Розглянуто два значення сталої решітки  $a$  зонда, що дорівнюють 0.3165 нм і 0.1583 нм, за умов декількох значень енергії взаємодії зонд–зразок  $\varepsilon$  і швидкості руху зонда. Показано, що нановиступ “втрачає” шар графену, коли  $\varepsilon = 0.1$  еВ при  $a = 0.1583$  нм.

**Четвертий** розділ “Трибологічні властивості графену, який взаємодіє з нанооб’єктами” складається з двох підрозділів. У *першому підрозділі* досліджено тертя нікелевих і срібних наночастинок (НЧ), адсорбованих на графені. Шар графену лежить у площині  $xy$  із зигзаговим краєм, паралельним  $x$ -напрямку (рис. 5). Для утримання зразка у просторі граничні атоми вздовж периметра шару підтримуються фіксованими впродовж моделювань. Розглянуто Ni і Ag наноострівці, що містять від 5000 до 30000 атомів. Для кожного розміру НЧ використовуються спеціально підібрані  $x \times y$  розміри графенової пластинки, які змінюються від 19.68 нм  $\times$  17.04 нм до 36.40 нм  $\times$  31.52 нм відповідно. Повна кількість атомів змінюється від 17800 до 73808.

Сили між атомами металу виводяться з форми потенціалу, що базується на методі зануреного атома. Взаємодія між атомами вуглецю у графені описується гармонічним потенціалом, сили між графеном і НЧ обчислюються із ЛД потенціалу. У ході розрахунків вимірюється температура  $T$  системи, латеральні координата  $X_{CM}$  і швидкість  $V_X$  центра мас (ЦМ) НЧ, повна сила зсуву  $F_S$ , розміри  $L_X$  (див. рис. 5),  $L_Y$ ,  $L_Z$  НЧ. Сила тертя  $F_f$  визначається як сума  $x$  компонент сил, що діють на атоми металу з боку атомів вуглецю.

Наноострівець одержується за допомогою процедури, яка імітує відшарування тонких металевих плівок внаслідок термічної обробки. Тонкий шар атомів металу із ГЦК решіткою поміщається на графен. Атоми починають перебудовуватися у більш енергетично вигідну конфігурацію, агломеруючись у наноострівець (це виражається зменшенням розміру  $L_X$  на рис. 6). Після досягнення півсферичної форми НЧ до системи приклада-

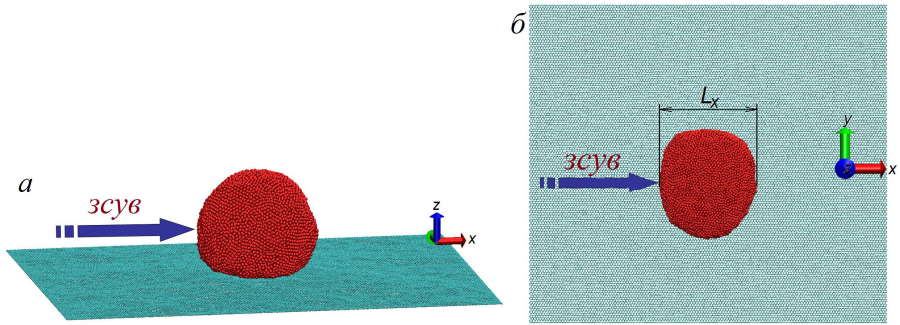


Рис. 5. Миттєві знімки сформованої НЧ, що містить 25000 атомів Ag

ється термостат, вона охолоджується, і підтримується стала температура близько 300 К. Після охолодження до атомів металу, значення  $x$  координати яких менше, ніж  $X_{CM}$ , прикладається сила зсуву вздовж  $x$ -напряму. При цьому  $V_x$  і  $X_{CM}$  зростають відповідно лінійно й квадратично із часом і свідчать про переміщення НЧ із сталим прискоренням, що відповідає сталому значенню  $F_S$ .

Сила тертя  $F_f(t)$  (рис. 6), що діє на НЧ, не є однорідною, а має пилкоподібну форму із зростаючою частотою піків. Залежності  $F_f$  від  $X_{CM}$  для більшості Ni НЧ також мають пилкоподібну форму з більш-менш регулярними піками, відстань між якими флюктує біля значення 0.246 нм, яке відповідає сталій решітці графену. Для Ag НЧ сила тертя має нерегулярну форму. Середнє за часом значення  $F_f$  зростає приблизно лінійно з площею контакту  $A$ . Для Ni має місце великий розкид даних, і  $F_f$  є меншою для Ag НЧ. Нахили лінійних апроксимацій становлять 2.91 пН/нм<sup>2</sup> для Ni та 1.21 пН/нм<sup>2</sup> для Ag. Останнє значення є близьким до експериментального 1.04 пН/нм<sup>2</sup> для Sb НЧ. Отримані результати можна пояснити локальною сумірністю поверхонь НЧ і графену. Далекий порядок не відіграє ролі, оскільки згідно із вимірами функції радіального розподілу атомів НЧ її структура не має далекого порядку. Однак близькість відстані між найближчими сусідами в Ni 0.249 нм до сталої решітки графену може зумовити локальну сумірність поверхонь. У Ag це значення дорівнює 0.289 нм, і сумірність є менш ймовірною.

У другому підрозділі проведено моделювання опромінення пластини графену потоком атомів вуглецю. Показано, що за відсутності відведення тепла із системи руйнування зразка відбувається, коли енергія налітаючих частинок є більшою або рівною 0.5 еВ. Відведення тепла обумовлює зменшення цього значення до більших енергій.

У додатку А наведено алгоритм розрахунку взаємодій атомів вуглецю у графітових системах.

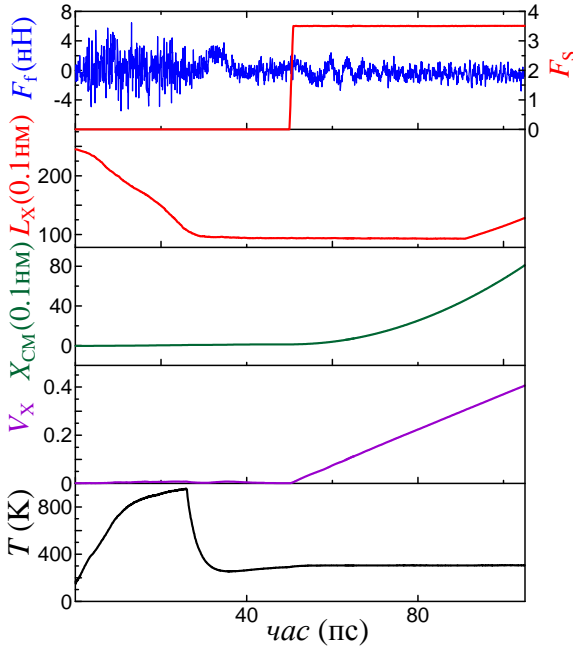


Рис. 6. Часові залежності величин, розраховані для Ni НЧ, що містить 16000 атомів

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі побудовано атомістичні моделі нанорозмірних систем, які містять поверхні різних алотропних форм вуглецю. У межах єдиного підходу, що базується на методі класичної молекулярної динаміки, вивчено структурні та трибологічні властивості згаданих об'єктів. Отримані результати дозволяють зробити такі висновки.

1. Ультратонка плівка води, стиснута між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями, проявляє загальні властивості межових плівок рідин як для атомарно-гладких пластин, так і за наявності періодичного атомарного рельєфу. При навантаженнях, що перевищують 430 МПа, і температурі 298 К виявлено існування твердоподібного стану плівки, вираженого у малих значеннях коефіцієнта дифузії молекул води і в присутності їх упорядкованих конфігурацій. У плівці товщиною два молекулярних діаметри спостерігається утворення шарів і впорядкування у горизонтальній площині. Періодичний атомарний рельєф руйнує як вертикальне, так і горизонтальне впорядкування молекул у плівках товщиною два молекулярних діаметри. Залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження якісно збігаються з експериментально отриманими для сферичних молекул. Зокрема, при навантаженнях, менших приблизно 4 ГПа, має місце перший закон Амонтона. Наявність періодичного атомарного рельєфу якісно не змінює вигляду названих залежностей.



2. Методом МД вивчено взаємодію графітового зразка з адгезивним жорстким нановиступом. Отримано залежності нормальної сили, що діє на зонд, від відстані до зразка, які дають можливість безпосереднього порівняння з експериментом. Утворення контакту між зондом і поверхнею відбувається внаслідок явища “стрибка для контакту”. При температурі 298 К й енергії  $\epsilon$  взаємодії зонд–поверхня, більшій або такій, що дорівнює 1 еВ на атом, спостерігається індуковане адгезією змочування зонда атомами вуглецю. Робота сил адгезії виражена у гістерезисі залежностей нормальної сили, що діє на нановиступ, від відстані. Показано, що для розглядуваної геометрії системи розшарування зразка відбувається для значень  $\epsilon$ , більших або таких, що дорівнюють 0.5 еВ на атом, коли стала решітки  $a$  зонда дорівнює 0.3165 нм. Показано, що нановиступ “втрачає” шар графену, коли  $\epsilon = 0.25$  еВ і  $\epsilon = 0.1$  еВ при  $a = 0.3165$  нм і  $a = 0.1583$  нм відповідно.

3. У межах побудованої моделі показано, що включення до енергії зв'язку шарів графіту анізотропного внеску, який враховує перекриття електронних хвильових функцій атомів вуглецю, якісно змінює кінетику розколювання за низьких температур. Для значень сталої решітки нановиступу  $a = 0.3165$  нм й енергії взаємодії зонд–поверхня 0.5 еВ на атом при врахуванні зазначеного внеску показано відсутність розшарування для температур нижче 8 К. За наявності лише ВДВ взаємодії встановлено, що верхній шар графену ізолюється в усьому діапазоні розглянутих температур від 298 К до 2 К. Аналітичні оцінки, проведені для якісного пояснення спостережуваної поведінки, показують, що її причинами є швидка зміна із температурою величини анізотропного внеску й особливості обраної геометрії системи. Результати розрахунків свідчать про необхідність експериментальної перевірки ролі перекриття орбіталей у зв'язуванні шарів графіту. Розроблена модель подає ескіз для експериментальної установки, яка може ґрунтуватися на методі електростатичного розшарування.

4. Методом МД встановлено, що трибологічні властивості металевих НЧ, адсорбованих на графені, значною мірою визначаються типом матеріалу НЧ. Виявлена неоднорідна форма залежностей сили тертя від часу й латеральної координати центра мас НЧ є випадковою і пілкоподібною для Ag і Ni НЧ відповідно. Дана поведінка пояснюється практично однаковими значеннями відстані між найближчими сусідами у Ni і сталої решітки графену, що приводить до локальної сумірності поверхонь контакту. Показано, що середнє за часом значення сили тертя зростає приблизно лінійно з площею контакту для Ag НЧ. Отриманий кут нахилу лінійної апроксимації для Ag дорівнює 1.21 пН/нм<sup>2</sup>, що з точністю 15 % відповідає експериментальним даним для Sb НЧ.

5. Опромінення пластинки графену в умовах мікроканонічного ан-

самблю потоком атомів вуглецю з енергіями, більшими або такими, що дорівнюють 0.5 еВ, приводить до руйнування зразка, яке проявляється у стрибках напружень і різкому зростанні деформації та потенціальної енергії системи. Показано, що за відсутності відведення тепла із системи вплив густини пучка при енергіях частинок, більших за 0.5 еВ, зводиться до більш інтенсивного руйнування зразка. Наявність термостата зсуває величину енергії, при якій руйнується зразок, у бік більших значень.

### СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Khomenko A.V. Molecular dynamics simulations of ultrathin water film confined between flat diamond plates / A.V. Khomenko, **N.V. Prodanov** // Condensed Matt. Phys. – 2008. – Vol. 11, № 4 (56). – P. 615 – 626.
2. Хоменко А.В. Влияние шероховатости алмазных поверхностей на поведение ультратонкой пленки воды, заключенной между ними / А.В. Хоменко, **Н.В. Проданов** // ФТВД. – 2009. – Т. 19, № 1. – С. 123 – 133.
3. Хоменко А.В. Численное исследование облучения пластинки графена пучком атомов углерода / А.В. Хоменко, **Н.В. Проданов**, Ю.В. Щербак // ЖНЭФ. – 2009. – Т. 1, № 2. – С. 76 – 88.
4. Khomenko A.V. Molecular dynamics of cleavage and flake formation during the interaction of a graphite surface with a rigid nanoasperity / A.V. Khomenko, **N.V. Prodanov** // Carbon. – 2010. – Vol. 48. – P. 1234 – 1243.
5. Prodanov N.V. Computational investigation of the temperature influence on the cleavage of a graphite surface / **N.V. Prodanov**, A.V. Khomenko // Surf. Sci. – 2010. – Vol. 604. – P. 730 – 740.
6. Khomenko A.V. Molecular dynamics of graphene preparation by mechanical exfoliation of a graphite surface / A.V. Khomenko, **N.V. Prodanov** // Functional Materials. – 2010. – Vol. 17, № 2. – P. 230 – 237.
7. Khomenko A.V. Study of friction of Ag and Ni nanoparticles: an atomistic approach / A.V. Khomenko, **N.V. Prodanov** // J. Phys. Chem. C. – 2010. – Vol. 114. – P. 19958 – 19965.
8. Хоменко А.В. Алгоритм для реалистичного моделирования графитовых систем / А.В. Хоменко, **Н.В. Проданов** // ЖНЭФ. – 2011. – Т. 3, № 2. – С. 36 – 47.
9. Khomenko A.V. Molecular dynamics simulation of friction of nickel and silver nanoparticles / A.V. Khomenko, **N.V. Prodanov** // II Всероссийская научно-инновационная молодежная конференция (с международным участием) “Современные твердофазные технологии: теория,

практика и инновационный менеджмент”, 27-29 окт. 2010 г.: Сборн. материалов. – Тамбов: Изд-во ИП Чеснокова А.В., 2010. – С. 172 – 174.

10. Проданов Н.В. Молекулярная динамика раскалывания графита при наноиндентации / **Н.В. Проданов** // “Фізика низьких температур (КМВ-ФНТ-2009)”: 2-га Всеукраїнська наукова конференція молодих вчених, 1-5 червня 2009 р.: тези доповідей. – Харків: ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, 2009. – С. 113.
11. Khomenko A.V. Modeling of nanoindentation of  $\alpha$ -graphite using registry-dependent interlayer potential / A.V. Khomenko, **N.V. Prodanov** // “Statistical Physics 2009: Modern Trends and Applications”: International conference, 23-25 June 2009 year: abstracts. – Lviv, 2009. – P. 162.
12. Khomenko A.V. Molecular dynamics of graphene production by mechanical exfoliation of a graphite surface / A.V. Khomenko, **N.V. Prodanov** // “Functional Materials (ICFM’2009)”: International conference, Partenit, Crimea, 5-10 October 2009 year: abstracts. – Simferopol: Taurida National V.I. Vernadsky University, 2009. – P. 348.
13. Khomenko A.V. Temperature influence on the mechanical exfoliation of a graphite surface: a molecular dynamics study / A.V. Khomenko, **N.V. Prodanov** // “Physics of liquid matter: modern problems (PLMMP-2010)”: International conference, 21-24 May 2010 year: abstracts. – Kyiv, 2010. – P. 189.
14. Проданов М. Атомістичне моделювання мікромеханічного розколювання графіту / **М. Проданов**, О.В. Хоменко // 10-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 3-4 червня 2010 р.: тези доповідей. – Львів: Інститут фізики конденсованих систем НАН України, 2010. – С. 27.
15. Хоменко А.В. Атомистическое исследование трения металлических наночастиц / А.В. Хоменко, **Н.В. Проданов** // “Высокие давления-2010. Фундаментальные и прикладные аспекты”: 11-я Международная конференция, Судак, Крым, 26-30 сентября 2010 г.: тезисы докладов. – Донецк: ДонФТИ им. А.А. Галкина НАН Украины, 2010. – С. 172.
16. Проданов Н.В. Атомистическое изучение трения металлических наночастиц / **Н.В. Проданов**, А.В. Хоменко // “Наноструктурные материалы - 2010: Беларусь - Россия - Украина (НАНО-2010)”: 2-я Международная научная конференция, 19-22 октября 2010 г.: тезисы докладов. – Киев, 2010. – С. 608.

## АНОТАЦІЯ

**Проданов М.В. Атомістичне моделювання трибологічних явищ у нанорозмірних системах, що містять вуглецеві поверхні. — Рукопис.**

*Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 — фізика твердого тіла, Сумський державний університет, Суми, 2011.*

Дисертаційна робота присвячена теоретичному дослідженню тертя і зношування на атомарному рівні в нанорозмірних системах, які містять поверхні різних алотропних форм вуглецю. З цією метою розроблено відповідні атомістичні моделі та проведено моделювання методом класичної молекулярної динаміки.

Для ультратонкої плівки води, стиснутої між жорсткими алмазними поверхнями, показано існування твердоподібного стану для навантажень, більших від 430 МПа, при температурі 298 К. Він характеризується низькими значеннями коефіцієнта дифузії та наявністю впорядкованих конфігурацій молекул для атомарно-гладких поверхонь. Показано, що сила тертя, яка діє на верхню стінку, за низьких навантажень задовольняє перший закон Амонтона, а за високих — має місце насичення.

Розшарування графіту внаслідок взаємодії з адгезивним зондом при температурі 298 К відбувається для енергії взаємодії, більшої або такої, що дорівнює 0.5 еВ на атом, коли стала решітки  $a$  зонда дорівнює 0.3165 нм. Показано, що нановиступ “втрачає” шар графену, коли енергія становить 0.25 еВ і 0.1 еВ при  $a = 0.3165$  і  $a = 0.1583$  нм відповідно.

Встановлено, що залежність сили тертя, яка діє на Ni та Ag наночастинки з боку графену, від положення їх центра мас має пілкоподібну і випадкову форми відповідно. Залежність середнього за часом значення сили тертя від площі контакту є лінійною для Ag із нахилом лінійної апроксимації 1.21 пН/нм<sup>2</sup>.

**Ключові слова:** межове тертя, ультратонка плівка мастила, графен, адгезія, розшарування, наночастинка, графіт, молекулярна динаміка.

## АННОТАЦИЯ

**Проданов Н.В. Атомистическое моделирование трибологических явлений в наноразмерных системах, содержащих углеродные поверхности. — Рукопись.**

*Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика твердого тела, Сумский государственный университет, Сумы, 2011.*

Диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию трения и износа на атомарном уровне в наноразмерных системах, содер-

жащих поверхности различных аллотропных форм углерода. С этой целью разработаны соответствующие атомистические модели и проведено моделирование методом классической молекулярной динамики.

Для ультратонкой пленки воды, сжатой между жесткими алмазными поверхностями, показано существование твердopodobного состояния для нагрузок, превышающих приблизительно 430 МПа, и температуры 298 К. Оно характеризуется низким значением коэффициента диффузии и наличием упорядоченных конфигураций молекул для атомарно-гладких поверхностей. Показано, что сила трения, действующая на верхнюю стенку, при низких нагрузках удовлетворяет первому закону Амонтона, а при высоких — наблюдается насыщение.

Расслоение графита вследствие взаимодействия с адгезивным зондом при температуре 298 К происходит для энергии взаимодействия, большей или равной 0.5 эВ на атом, когда постоянная решетки  $a$  зонда равна 0.3165 нм. При температуре 298 К и энергии  $\epsilon$  взаимодействия зонд—поверхность, большей или равной 1 эВ на атом, наблюдается индуцированное адгезией смачивание зонда атомами углерода. Работа сил адгезии выражена в гистерезисе зависимостей нормальной силы, действующей на нановыступ, от расстояния. Показано, что нановыступ “теряет” слой графена, когда энергия составляет 0.25 эВ и 0.1 эВ при  $a = 0.3165$  и  $a = 0.1583$  нм соответственно. В рамках разработанной модели выявлено, что учет в энергии связи слоев графита анизотропного вклада, обусловленного перекрытием электронных орбиталей атомов углерода из соседних слоев графена, качественно изменяет кинетику раскалывания при низких температурах. Для значения постоянной решетки нановыступа  $a = 0.3165$  нм и энергии взаимодействия зонд—поверхность 0.5 эВ на атом при учете указанного вклада показано отсутствие расслоения для температур ниже 8 К. При наличии только лишь ВДВ взаимодействия верхний слой графена изолируется во всем диапазоне рассмотренных температур от 298 К до 2 К.

Установлено, что зависимость силы трения, действующей на Ni и Ag наночастицы со стороны графена, от положения их центра масс имеет пилообразную и случайную формы соответственно. Данное поведение объясняется практически одинаковыми значениями расстояния между ближайшими соседями в Ni и постоянной решетки графена, что приводит к локальной соизмеримости контактирующих поверхностей. Зависимость среднего по времени значения силы трения от площади контакта является линейной для Ag с наклоном линейной аппроксимации 1.21 пН/нм<sup>2</sup>.

**Ключевые слова:** граничное трение, ультратонкая пленка смазки, графен, адгезия, расслоение, наночастица, графит, молекулярная динамика.

## SUMMARY

**Prodanov M.V. Atomistic simulation of the tribological phenomena in nano-dimensional systems containing carbon surfaces. — Manuscript.**

*Thesis for the candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.07 – Solid State Physics, Sumy State University, Sumy, 2011.*

The thesis is devoted to theoretical investigation of friction and wear at the atomic level in nano-dimensional systems containing surfaces of different allotropic forms of carbon. With this aim, corresponding atomistic models have been developed and classical molecular dynamics simulations have been carried out.

The existence of solidlike state was revealed for loads higher than 430 MPa and temperature of 298 K in ultrathin water film confined between rigid diamond surfaces. This state is characterized by low value of the diffusion constant and the presence of ordered configurations of molecules for the atomically-flat surfaces. It was established that the friction force acting on the upper wall obeys the first Amontons' law under low loads, and saturation is observed at high loads.

Exfoliation of graphite as a result of the interaction with adhesive tip at the temperature of 298 K occurs when the interaction energy is greater than or equal to 0.5 eV per atom and the lattice constant  $a$  of the tip is equal to 0.3165 nm. It was shown that the nanoasperity "losses" the graphene layer when the energy is 0.25 eV and 0.1 eV for  $a = 0.3165$  and  $a = 0.1583$  nm, respectively.

The simulations revealed that the dependence of the friction force acting on Ni and Ag nanoparticles from graphene on the position of their center of mass has sawtooth and random shapes, respectively. The dependence of time-averaged friction force on the contact area is linear, and the slope of linear approximation is 1.21 pN/nm<sup>2</sup>.

**Key words:** boundary friction, ultrathin lubricant film, graphene, adhesion, exfoliation, nanoparticle, graphite, molecular dynamics.

Підписано до друку 15.09.2011 р.  
Формат 60x90/16. Ум.друк.арк. 1,1. Обл.-вид.арк. 0,9. Тираж 100 пр. Зам. № 1127

Видавець і виготовлювач  
Сумський державний університет  
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3062 від 17.12.2007.