

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІНФОРМАТИКА, МАТЕМАТИКА,
АВТОМАТИКА

ІМА :: 2017

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 17–21 квітня 2017 року)



Суми
Сумський державний університет
2017

**Моделирование методом молекулярной динамики
напыления и трения наночастиц алюминия на графене**

Хоменко А.В., профессор; Бойко Д.В., студент;
Захаров М.В., студент; Хоменко Е.П., ассистент
Сумский государственный университет, г. Сумы

Изучение поверхностных явлений на атомарном уровне вызывает значительный интерес в течение последних двух десятилетий. Это обусловлено развитием соответствующих экспериментальных методик, а также интенсивной миниатюризацией электронных устройств. Для исследования нанотрибологических явлений, как правило, нужны атомарно-гладкие поверхности. В связи с этим, высокоориентированный пиролитический графит занимает особое место в нанотрибологии, поскольку позволяет легко получить атомарно-гладкую поверхность. Компьютерное моделирование, в частности метод молекулярной динамики, является незаменимым инструментом теоретического изучения трения и износа на атомарном уровне. Для моделирования создавалась программа на языке программирования CUDA. При расчете задавались размеры графенового слоя и число атомов металла. В процессе моделирования сдвига наночастиц (НЧ), состоящих из атомов алюминия, производится измерение различных параметров: полного импульса системы, полной и потенциальной энергий, температуры, скорости и положения центра масс НЧ, размеров НЧ, сил трения и сдвига, действующих на НЧ, а также функции радиального распределения, которая позволяет следить за структурой НЧ. Показано, что взаимодействие алюминий-графен гораздо слабее, чем алюминий-алюминий, при этом конфигурация НЧ в форме шара имеет минимальную энергию. Поскольку площадь контакта мала, и в экспериментах НЧ не сферические, то желательно остановить формирование сферы в подходящий момент времени. Остановка производится путем приложения термостата Берендсена как к металлу, так и к графену после времени уравнивания. Во время установления равновесия система эволюционирует без отвода тепла. Сила трения подложки НЧ в зависимости от латеральной координаты центра масс имеет пилообразный характер, соответствующий прерывистому (stick-slip) режиму трения.