

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

Допущено до захисту
Завідувач кафедри ПМ та МСС
_____ Коплик І.В.

(підпис)

«__» _____ 2023 р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня «бакалавр»

спеціальність 113 «Прикладна математика»

освітньо-професійна програма «Наука про дані та моделювання складних
систем»

тема роботи «**АТОМІСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ТА
КІНЕТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ УЛЬТРАТОНКОГО ШАРУ
СІРКОВУГЛЕЦЮ МІЖ АЛМАЗНИМИ ПОВЕРХНЯМИ**»

Виконавець

студент факультету ЕЛІТ

Тацький К.К. _____

(підпис)

Науковий керівник

професор, доктор фіз.-мат. наук

Хоменко О.В. _____

(підпис)

Суми – 2023

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

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

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ПМ та МСС

_____ Коплик І.В.

«__» _____ 2023 р.

ЗАВДАННЯ

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧА ВИЩОЇ ОСВІТИ

Тацького Костянтина Костянтиновича

1. Тема роботи: **Атомістичне моделювання структури та кінетичних властивостей ультратонкого шару сірковуглецю між алмазними поверхнями**

Керівник роботи Хоменко О.В. професор, доктор фіз.-мат. наук
затверджено наказом по факультету ЕлІТ від «09» лютого 2023 р. № 0110-VI

2. Термін подання роботи студентом «17» червня 2023 р.

3. Вихідні данні до роботи 1) Метод молекулярної динаміки; 2) Теоретичні та експериментальні відомості про сірковуглець та алмаз.

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити) Дослідження впливу параметрів системи на комп'ютерну модель поведінки шару атомів сірковуглецю між алмазними пластинами. Написання коду для модифікації існуючої програми.

5. Перелік графічного матеріалу

1) Початкова конфігурація досліджуваної системи з одним шаром молекул сірковуглецю;

2) Розташування молекул дисульфиду вуглецю (ліворуч) і форма алмазної пластини (праворуч) у площині ху на початку моделювання;

3) Конфігурації досліджуваної системи з навантаженням 0 і 20;

4) Часові залежності кінетичної енергії. Величина навантаження 0 і 20;

5) Залежності сили підкладки від часу. Величина навантаження 0 і 20;

6) Часові залежності автокореляційної функції швидкості для різних навантажень;

7) Часові залежності константи дифузії для різних навантажень;

8) Усереднене за часом значення сили тертя для різних прикладених сил як функція навантаження.

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

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Завдання видав	Завдання прийняв

7. Дата видачі завдання «15» квітня 2023 р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Найменування роботи, заходи	Термін виконання	Примітка
1	Ознайомитися з причинами та проблемами вивчення тертя та методами досліджень нанотрибологічних явищ.	15.05-22.05	
2	Провести аналіз літератури з метою вивчення методів дослідження поверхні зразка, а саме методів атомно-силової мікроскопії (АСМ).	23.05-29.05	
3	Побудувати математичну модель, що описує режим роботи атомно-силового мікроскопа.	29.05-07.06	
4	Оцінити вплив матеріалу підкладки та її структурного стану на трибологічні властивості та процеси.	07.06-11.06	
5	На базі математичної моделі написати комп'ютерну програму для дослідження методом АСМ. Оформлення роботи.	12.06-14.06	

Здобувач вищої освіти

(підпис)

Тацький К.К.

Керівник роботи

(підпис)

Хоменко О.В.

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота: 36 с., 10 рис., 33 джерела.

Мета роботи: дослідження трибологічних властивостей одного молекулярного шару рідкого сірковуглецю, спресованого двома атомно-гладкими алмазними поверхнями за допомогою методу класичної молекулярної динаміки. Для зручності сприйняття процесів у роботі наведені формули, які описують даний процес, а також рисунки, які пояснюють наглядно процеси викладені в роботі.

Об'єкт дослідження: трибологічні властивості одного молекулярного шару рідкого сірковуглецю, спресованого двома атомно-гладкими алмазними поверхнями.

Предмет дослідження: молекулярна динаміка ультратонкого шару рідкого сірковуглецю, укладеного між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями.

Методи навчання: метод класичної молекулярної динаміки, структурне моделювання.

Вивчено поведінку рівноважних й динамічних характеристик системи. Показано, що при збільшенні зовнішнього навантаження відбувається перехід плівки до твердоподібного стану, на що вказує зменшення величини коефіцієнта дифузії. Виявлена організація молекул у площинному шарі. Також отримані залежності кінетичної сили тертя від навантаження й обчислені значення коефіцієнта тертя. Зроблено висновки про реалістичність досліджуваної моделі.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, ТРИБОЛОГІЯ, МЕЖОВЕ ТЕРТЯ, УЛЬТРАТОНКА ПЛІВКА СІРКОВУГЛЕЦЮ, КОМП'ЮТЕРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ, МІЖАТОМНІ ПОТЕНЦІАЛИ ВЗАЄМОДІЇ.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	7
РОЗДІЛ 1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД	8
1.1 Атомістика визначення та застосування	8
1.2 Види моделювання	12
1.3 Синтез і властивості моношарового аморфного вуглецю	13
РОЗДІЛ 2 ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ	17
2.1 Загальні поняття	17
2.2 Модельні та обчислювальні деталі	18
2.3 Результат дослідження	21
ВИСНОВОК	28
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	29
ДОДАТОК А.....	32

ВСТУП

Трибологія, багатовікова галузь науки та техніки, яка займається фундаментальними принципами та застосуванням тертя, зношування та змащування взаємодіючих поверхонь, стала активно проявляти себе завдяки останнім досягненням у нано науці та наноінженерії [1-13].

Метою цього дослідження є продовження досліджень молекулярної динаміки [13] трибологічних властивостей ультратонких плівок рідкого сірковуглецю CS_2 , запресованих між атомарно плоскими алмазними поверхнями. Вибір сірковуглецю як рідини для моделювання мотивований його важливістю, повсюдністю та унікальними трибологічними властивостями.

В цій роботі ми дослідимо трибологічні властивості одного молекулярного шару рідкого сірковуглецю, спресованого двома атомно-гладкими алмазними поверхнями за допомогою методу класичної молекулярної динаміки. В ній будуть розглянуті моделі пружних сфер для молекул сірковуглецю та абсолютно жорстких алмазних пластин. Знайдений часовий ряд сили тертя атомного рівня. Підвищення зовнішнього нормального тиску призводить до переходу плівки в твердоподібний стан. Це проявляється в зменшенні константи дифузії, поведінці автокореляційної функції швидкості молекул рідини та середньої сили тертя.

РОЗДІЛ 1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД

1.1 Атомістика визначення та застосування

Атомістика, або атомізм — натурфілософська концепція будови Всесвіту, в основу якої покладено поняття атому як гранично неподільної частки. В атомістиці стверджується, що всі об'єкти у Всесвіті складаються з дуже малого розміру неподільних часток, званих атомами. В класичній атомістиці різноманітність речей і явищ пояснюється поєднанням і взаємодією атомів різних видів.

Атомістика була і залишається ареною боротьби матеріалізму проти ідеалізму, діалектики проти метафізики. Визнання атомістики об'єктивно реального буття мікрочастинок матерії, можливості пізнання їх властивостей та законів взаємодії веде до матеріалістичного розуміння світу як закономірного руху матерії, тим часом як заперечення об'єктивної реальності частинок матерії і можливості їх пізнання приводить до ідеалістичного погляду на світ.

В 1911—1913, узагальнюючи дані про проходження частинок крізь речовину і беручи до уваги дискретну природу випромінювання світла атомами, Е. Резерфорд і Н. Бор побудували планетарну квантову модель атома. Ідея цієї моделі впливала з періодичного закону. В свою чергу вчення Резерфорда — Бора про будову атомів пояснило фізичний зміст періодичної системи. Було показано, що фізико-хімічні властивості атомів і форм їх сполук перебувають в періодичній залежності від величин зарядів їх ядер. Ця теорія розкрила генетичні зв'язки електронних оболонок атомів, була доведена єдність перервності і неперервності у вузловій лінії мір розвитку атомів хімічних елементів.

Вивчення радіоактивних рядів привело до відкриття ізотопів. Важливим результатом аналізу генетичних зв'язків ізотопів під кутом періодичного закону

було діалектичне визначення поняття хімічного елемента. Хімічний елемент є сукупність атомів з однаковим зарядом ядер, однаковою будовою електронних оболонок, які можуть відрізнятися величиною маси своїх ядер. Отже, у фізичній атомістиці атомні ядра і атоми розглядаються в органічному взаємозв'язку, в якісних перетвореннях, у розвитку від менш складних до складніших. Кожний атом як дана якість є неперервний, а як певна кількість якостей (ядро і електрони), що своєю взаємодією утворюють його, він перервний. Атом неподільний при хімічних взаємодіях, але здатний до якісних перетворень при ядерних реакціях. Тому атом — єдність стійкості й мінливості.

В 1924—27 Луї де Бройль, В. Гейзенберг, Е. Шредінгер, Нільс Бор, М. Борн та ін. розробили нерелятивістську квантову механіку, яка розглядає рух мікрочастинок з малими швидкостями (порівняно з швидкістю світла). Якщо в планетарній моделі Резерфорда — Бора електрони розглядались як маленькі кульки, що рухаються по стаціонарних орбітах, то в квантовій (хвильовій) механіці мікрооб'єкти розглядаються в єдності корпускулярного і хвильового аспектів, а рух їх відображається хвильовим рівнянням Шредінгера. В ній зв'язок між причиною і наслідком може бути не однозначним, а статистичного характеру. Враховуючи квантовий характер обміну енергією і імпульсом між атомними системами, В. Гейзенберг побудував у 1925 матричну (квантову) механіку. В подальшому обидва підходи до проблеми руху елементарних частинок були поєднані: Шредінгер довів еквівалентність хвильової і матричної механіки. Теоретичні передбачення були блискуче підтвержені експериментально. З часу, коли була доведена «двоєдина», перервно-неперервна, корпускулярно-хвильова природа частинок речовини, а також встановлена єдність протилежностей для частинок електромагнітного поля — фотонів, стало зрозуміло, що таким формам матерії, як речовина і поле, властива єдність перервного і неперервного. Єдність протилежностей для світла була встановлена після досліджень, з одного боку, наявності дифракції та інтерференції світла, що свідчило про неперервність

світла, про його хвильову природу, з другого — фотоелектричного ефекту (1898, 1905) і ефекту Комптона (1923), що свідчило про притаманність світлу корпускулярних властивостей.

Нерелятивістська квантова (хвильова) механіка розкрила нові закономірності мікроявищ, показавши обмеженість класичної фізичної атомістики, яка вважала мікрооб'єкти винятково перервними, корпускулярними. Положення нерелятивістської квантової механіки повністю підтверджуються фізичними експериментами і сучасною атомною технікою. Виявивши обмеженість класичного атомізму, нерелятивістська квантова (хвильова) механіка робить лише перший крок на шляху встановлення зв'язку між полем і частинкою, готує основу для нового розуміння частинок. Вважаючи речовинні мікрооб'єкти перервними і неперервними, вона розглядає їх як незмінні, як такі, що не переходять з однієї своєї якості в іншу. Цю обмеженість нерелятивістської квантової механіки ліквідують релятивістська квантова механіка і квантова електродинаміка, створені в 1927 працями П. Дірака, В. Гейзенберга, В. Паулі, В. О. Фока. Великим досягненням релятивістської квантової механіки є пояснення існування спіна електрона, передбачення існування позитрона, антипротона, антинейтрона та інших античастинок. З релятивістської квантової теорії електрона і квантової електродинаміки випливає висновок про перетворення пари — електрона і позитрона — в фотон і навпаки, а також інші пар частинок і античастинок. Цей висновок пізніше був підтверджений експериментально. У 1932 К.-Д. Андерсон відкрив у космічному промінні позитрон, у 1933 Ірен та Фредерік Жоліо-Кюрі експериментально встановили перетворення пари — електрона і позитрона — в фотон і навпаки.

У 1955 Сегре і його група експериментально виявили антипротон, а через рік О. Піччіоні та ін. довели існування антинейтрона. Сучасна фізична атомістика вказує на можливість існування антиречовини, тобто речовини, побудованої з антиатомів і антимолекул. Слідом за відкриттям нейтрона і

позитрона була відкрита значна кількість елементарних частинок: електрично заряджених або нейтральних μ -мезонів, π -мезонів, K -мезонів (які мають маси, середні між масами протонів і електронів), гіперонів (з масою, більшою від маси нейтрона). До елементарних частинок слід також віднести фотони і нейтрино, які мають лише масу руху і не мають маси спокою. Взаємоперетворюваність елементарних частинок матерії однієї в іншу, подібно до перетворень хімічних елементів, а також хімічні, молекулярні перетворення речовини з однієї якості в іншу свідчать про загальну взаємоперетворюваність усіх видів матерії і всіх форм її руху, про перехід їх з однієї форми в іншу.

Знання про природу частинок, добуті сучасною фізикою, блискуче підтверджують положення діалектичного матеріалізму про матеріальну єдність світу, про те, що матерію неможливо ні створити, ні знищити.

Створення потужних прискорювачів елементарних частинок дало можливість піти далі в пізнанні будови і властивостей матерії. Бомбардування елементарних частинок, напр. нейтронів і протонів, електронами і мезонами великих енергій привело до висновку, що й ці частинки мають складну структуру.

Трибологія, багатовікова галузь науки та техніки, яка займається фундаментальними принципами та застосуванням тертя, зношування та змащування взаємодіючих поверхонь, стала активно проявляти себе завдяки останнім досягненням у нано науці та наноінженерії. У макромасштабі відомий закон Амонтона, який встановлює зв'язок між силою тертя та нормальною силою на сполучній поверхні розділу, був добре прийнятий і широко використовувався в інженерних додатках.

Дослідження, які були проведені не так давно, показали, що цей макроскопічний закон може більше не застосовуватись, коли контактний домен зменшується до нанорозміру. Доведено, що рух ковзання на нанорозмірі демонструє особливу поведінку та унікальні механізми, тісно пов'язані з наноскопічними особливостями, такими як теплові флуктуації, шорсткість

поверхні атомного рівня, фізична взаємодія та хімічне зв'язування на контактних поверхнях [14-22]. Для того, щоб зрозуміти механізми тертя та сформулювати закони тертя на нанорозмірі, необхідно мати глибоке розуміння атомістичної поведінки, зокрема, атомних взаємодій через межі розділу між контактуючими матеріалами.

В останні роки швидкий розвиток нанотехнологій значно сприяв розвитку мікроелектромеханічних систем (MEMS) і мікромеханічних пристроїв. Мікромеханічне застосування стає все більш поширеним у різних областях [3-14]. Коли масштаб пристрою зменшується до мікрометрів або нанометрів, під впливом поверхневих і розмірних ефектів сили адгезії та тертя збільшуються майже в 10 разів вищим, ніж об'ємна сила.

Адгезія, тертя та знос призводять до серйозних проблем у MEMS. Це дуже поширене явище, що адгезія та знос можуть легко виникнути на поверхнях тертя ковзання на нанорозмірі, що також є основною причиною, яка призводить до невдачі у створенні та використанні мікромеханічної системи. Тому вивчення тертя ковзання на нанорозмірі має велике значення для розробки MEMS. Це також важливий метод підтримки надійності MEMS і продовження терміну його експлуатації [8].

Метою цього дослідження є продовження досліджень молекулярної динаміки [13] трибологічних властивостей ультратонких плівок рідкого сірководню CS₂, запресованих між атомарно плоскими алмазними поверхнями. Вибір сірководню як рідини для моделювання мотивований його важливістю, повсюдністю та унікальними трибологічними властивостями.

1.2 Види моделювання

Молекулярне моделювання біологічних систем є дуже важливою міждисциплінарною галуззю науки, яка бурхливо розвивається в усьому світі і має безпосереднє практичне застосування. Об'єктами дослідження молекулярного моделювання біологічних систем є біологічні молекули (білки,

нуклеїнові кислоти, ліпіди), їх надмолекулярні агрегати (біологічні мембрани, білкові комплекси), а також природні та штучні наноструктури, що містять біологічні молекули.

Структурне моделювання — це визначення просторової структури молекул різних розмірів — як мікро-, так і макромолекул. Завданнями структурного моделювання є, зокрема, розрахунок геометрії молекул, їх електронної структури та хімічних реакцій (переважно методами квантової хімії), побудова структурних моделей для потреб кристалографії, ядерного магнітного резонансу та кріоелектронної мікроскопії, передбачення структури і гомологічне моделювання білків та нуклеїнових кислот.

Динамічне моделювання — це моделювання рухів біологічних молекул у динаміці. У динамічному моделюванні використовують найчастіше методи квантової динаміки, атомістичної класичної молекулярної динаміки, грубозернистої класичної молекулярної динаміки, блочної та доменної динаміки білків, континуальної динаміки супрамолекулярних комплексів.

На сьогодні є окремі наукові групи, які успішно працюють за цією тематикою на світовому рівні, але в цілому цей науковий напрям недостатньо розвинений.

1.3 Синтез і властивості моношарового аморфного вуглецю

Сипучі аморфні матеріали широко вивчені і широко використовуються, проте їх атомна структура залишається відкритим питанням. Хоча прийнято вважати, що вони являють собою неперервні випадкові мережі Захаріасена, недавні експериментальні дані свідчать на користь конкуруючої моделі кристалітів у випадку аморфного кремнію 2–4 . У двовимірних матеріалах, однак, відповідні питання залишаються без відповіді. Тут ми повідомляємо про синтез методом хімічного осадження з газової фази за допомогою лазера 5 сантиметрового масштабу, окремо стоячого, безперервного і стабільного

моношарового аморфного вуглецю, топологічно відмінного від неупорядкованого графену. На відміну від об'ємних матеріалів, структуру моношарового аморфного вуглецю можна визначити за допомогою зображень з атомною роздільною здатністю. Детальна характеристика за допомогою раманівської та рентгенівської спектроскопії, а також трансмісійної електронної мікроскопії виявила повну відсутність дальньої періодичності та потрійну координовану структуру з широким розподілом довжин зв'язків, кутів зв'язку та п'яти-, шести-, семи- і восьмичленних кілець. Розподіл кілець не є неперервною випадковою мережею Захаріасена, а нагадує конкуруючу модель (нано-)кристалітів 6. Ми побудували відповідну модель, яка дозволяє проводити розрахунки властивостей моношарового аморфного вуглецю на основі теорії функціоналу густини відповідно до спостережень. Прямі вимірювання підтверджують, що він є ізолюючим, з питомим опором, подібним до питомого опору нітриду бору, вирощеного методом хімічного осадження з парової фази. Моношаровий аморфний вуглець, що стоїть окремо, є напрочуд стабільним і деформується до високої міцності на розрив, без поширення тріщини від точки зламу. Чудові фізичні властивості цього стабільного моношарового аморфного вуглецю можуть виявитися корисними для створення бар'єрів проникнення та дифузії в таких сферах застосування, як пристрої магнітного запису та гнучка електроніка.

Аморфні матеріали використовуються в широкому спектрі застосувань, але їхня атомно-масштабна структура та її вплив на властивості набагато складніші, ніж у кристалічних аналогів. У класичній статті 1932 року Захаріасен 1 використовуючи аргументи вільної енергії, припустив, що аморфні матеріали складаються з тих самих одиниць зв'язку, що і їхні кристалічні аналоги, але ці одиниці утворюють не періодичні структури, а безперервні випадкові мережі (Z-CRNs). Конкуруюча модель, а саме, існування кристалітів, вбудованих в інше середовище CRN, є ще старішою 7 (кристалічна модель аморфних твердих тіл відрізняється від нанокристалічних матеріалів, оскільки останні складаються з

нанорозмірних зерен, розділених межами зерен). За останні кілька десятиліть модель Z-CRN набула широкого визнання, особливо для аморфних Si і SiO₂ (a-Si і a-SiO₂), які розглядаються як прототипи. Первинна експериментальна Доказом цього слугували функції радіального розподілу, які можна було точно відтворити за допомогою моделі Z-CRN. Однак нещодавно експерименти, які виходять за межі парних кореляцій, виявили великі концентрації нанокристалітів порядку 1-2 нм, тоді як моделі, що відповідають кореляціям, відповідають експериментальним функціям радіального розподілу так само добре, як і моделі Z-CRN 2–4 . Неможливість зобразити атомномасштабну структуру об'ємних аморфних матеріалів безпосередньо за допомогою мікроскопії означає, що дискусія про CRNs проти кристалітів залишилася невирішеною [32]. Для двовимірних (2D) атомно-тонких матеріалів природа аморфного стану в принципі може бути визначена за допомогою прямого зображення з атомною роздільною здатністю. Моношаровий аморфний вуглець (MAC) можна розглядати, як прототип аморфного 2D-матеріалу, аналог моношарового кристалічного вуглецю (графену). Пропускання електронів з атомною роздільною здатністю для отримання зображень окремо розташованих моношарів графену, опромінених пучками електронів для індукції безладу, використано електронну мікроскопію (ТЕМ) [9,10] . Такі моношари, однак, обмежені в розмірах, як правило, неоднорідні через втрату вуглецю і, коли кристаліти все ще присутні, вони не обов'язково випадково орієнтовані, як це було б у справді аморфному матеріалі, і можуть бути усунені подальшим опроміненням. Аналогічно, опромінення ароматичних самозбірних моношарів на підкладках призводить до утворення нанокристалічного графену лише з невеликими аморфними ділянками [11] . Прямий синтез зразків MAC залишається Тут ми повідомляємо про синтез MAC за допомогою процесу CVD-зростання за допомогою лазера. Процес, що самообмежується, призводить до отримання рівномірного моношару площею кілька квадратних сантиметрів менш ніж за 1 хвилину при температурі підкладки до 200 °С. Широкомасштабна ТЕМ-характеристика з атомною роздільною здатністю однозначно показує як

повну відсутність далекої періодичності, так і структуру, яка відповідає моделі кристалітів: тобто нанометрових, випадково орієнтованих і деформованих кристалітів, що складаються лише з шестичленних кілець, занурених у середовище Z-CRN. Для простоти, тут ми обговорюємо репрезентативні дані для плівок MAC, вирощених на мідній фользі при 250 °C, якщо не вказано інше. Після вирощування зразки легко переносяться за допомогою мокрого травлення. На відміну від інших 2D-матеріалів, вирощених методом CVD, MAC вільно стоїть навіть на рідких поверхнях, не потребуючи полімеру підтримки (додаткове відео). На рисунках 1а, б показано, що перенесений зразок (на підкладці SiO₂, Si і сітці TEM відповідно) є однорідним і безперервним, без багатошарових ділянок або зморшок, які зазвичай спостерігаються при перенесенні 2D шарів. Крім того, MAC є стабільним і незалежним навіть при зберіганні в умовах навколишнього середовища протягом щонайменше 1 року. [32-33].

РОЗДІЛ 2 ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

2.1 Загальні поняття

Теоретичні моделі та моделювання, що називають комп'ютерним експериментом, допомагають в інтерпретації експериментальних даних і забезпечують прогнозування явищ, які з часом можуть бути підтверджені або спростовані експериментами. Серед цих методів можна виділити аналітичні моделі і великомасштабні моделювання методом молекулярної динаміки (МД) [24-30]. Моделювання методом МД є компромісом між аналітичними моделями і експериментальними умовами. Так, МД моделювання ґрунтуються на приблизних міжатомних силах і класичній динаміці, що близько наближенням аналітичних моделей. Також комп'ютерні експерименти можуть відкривати неочікувані явища, що вимагають подальшого пояснення. Це нагадує ситуацію, що відбувається в реальних експериментах. Більше того, невдалий вибір умов моделювання може призвести до безглузлого результату, що також має місце в експериментальних дослідженнях. Проведення атомістичного комп'ютерного моделювання здається на перший погляд досить простим: маючи набір початкових умов і спосіб опису міжатомних сил, необхідно просто проінтегрувати ньютонівські класичні рівняння руху одним з декількох стандартних методів. Моделювання дає нові відносні атомні розташування, швидкості і сили, і за поведінкою атомів можна стежити в режимі реального часу за допомогою зображень-анімацій. Однак ефективне використання МД моделювання для вивчення тертя на атомарному масштабі вимагає розуміння багатьох деталей, які є очевидними в цьому простому аналізі. Розглянемо деякі з них.

2.2 Модельні та обчислювальні деталі

У симуляціях [7,12,13] моделі побудовані таким чином, що вони відображають експериментальні дослідження сірковуглецю в пористих середовищах. Ось чому обмежувальні стінки є фіксованими, а в деяких роботах [23-27] модель складається як з порової, так і з об'ємної області, щоб встановити умови рівноваги між об'ємною фазою та рідиною в порі. На рис. 2.1 показані початкові конфігурації досліджуваної системи. Початковий стан плівки та кристалічної пластини (вид зверху в негативному напрямку осі z) показано на рис. 2.2.

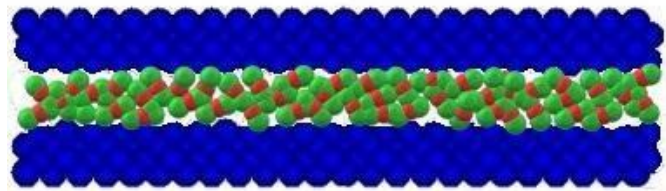


Рисунок 2.1 - Початкова конфігурація досліджуваної системи з одним шаром молекул сірковуглецю.

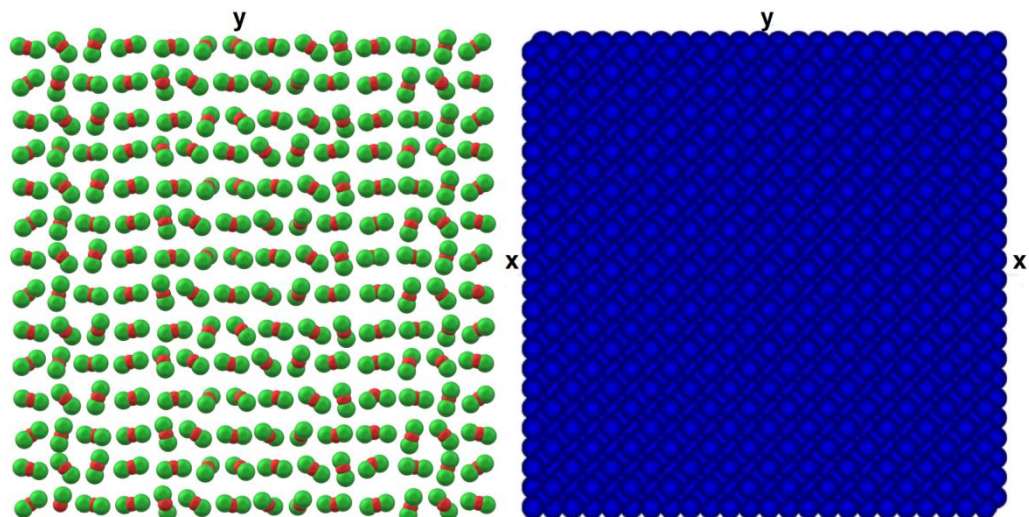


Рисунок 2.2 - Розташування молекул дисульфїду вуглецю (ліворуч) і форма алмазної пластини (праворуч) у площині xy на початку моделювання.

Проте в даному дослідженні модель побудована для моделювання нанотрибологічних експериментів з апаратом поверхневих сил [3-14]. Тут радіус площі контакту двох атомарно плоских поверхонь має порядок мікрометрів, відстань між пластинами може змінюватися під нормальним навантаженням, а верхня поверхня може зсуватися вбік (або зрізатися). Коли дві стінки ковзають одна по відношенню до однієї, виконується робота над системою. Енергія в кінцевому підсумку перетворюється на тепло і передається в основному від поверхні розділу до підкладок [3, 13] через відносно велику площу контакту. Тому під час експериментів із моделюванням поверхневих сил забороняється з'єднувати маленьку щілину з об'ємом. Загальновизнаним вибором є використання періодичних граничних умов у горизонтальній площині, а тепловий потік забезпечується за допомогою з'єднання частинок із тепловою ванною.

Описаний підхід використовується в ряді симуляцій [7,12-16], де розглядається плоска геометрія Куетта. Подібна модель представлена в даній роботі. Ультратонка плівка сірковуглецю вважається обмеженою між двома суцільними пластинами з періодичними граничними умовами в площині пластин, що застосовуються як до рідини, так і до поверхонь. Програма містить код, що виконує обчислення, і інтерфейс, що дозволяє спостерігати анімацію тривимірного зображення системи в реальному часі. Програма написана в середовищі Microsoft Visual Studio 2008 з використанням компілятора Microsoft Visual C++ 8.0 [7,12,13].

Кожна стінка складається з 1152 атомів, які утворюють дві (001) кристалографічні площини алмазної решітки з горизонтальними розмірами $4,281 \times 4,281$ нм. Початкова відстань між поверхнями становить 0,31 нм. Хоча експериментальне дослідження тертя алмазних пластин, розділених ультратонкою плівкою сірковуглецю, ще не проводилося, все ж алмаз прозорий для світла і тому може використовуватися в апараті поверхневих сил. Стінки вважаються абсолютно жорсткими і пружність плит не враховується в моделі. Але, враховуючи, що алмаз є одним із найтвердіших матеріалів, ми вирішили

перевірити наближення. Досліджено плівку сірковуглецю товщиною один молекулярний діаметр. На початку моделювання шар CS₂ складається з 196 молекул. Максимальне значення частинок, які беруть участь у моделюванні, становить 2500.

Модель TIP4P використовується для молекул сірковуглецю [12, 13, 23, 24]. Він заснований на чотирьох місцях взаємодії, розташованих у планарній конфігурації, два з яких пов'язані з ядром вуглецю, а два – з атомами сірки. Енергія взаємодії між двома молекулами складається з подвійної суми по місцях взаємодії обох молекул, що враховує кулонівські взаємодії між електричними зарядами, прописаними до місць, а також внески типу Леннарда-Джонса. Одиницями вимірювання сили є атом, енергія та час $F_0 = 3.42$ пН, $\epsilon = 0.155$ ккал/моль та $t_0 = 5.253$ пс. Крок за часом дорівнює $\Delta t = 2.627$.

У моделюванні нерівноважні рівняння руху (або метод обмежень) використовуються для підтримки постійної температури. Особливістю цього методу є відсутність цільової температури, на відміну, наприклад, від термостата Берендсена (див. посилання [10]). Швидше, постійна температура системи підтримується з початку моделювання, коли ініціюється обмеження. Під час моделювання є деякий температурний дрейф, але він досить малий і в нашій роботі становить приблизно 2–4 %. Ось чому протягом часу рівноваги ми очікуємо лише досягнення розподілу швидкості Максвелла. Ми розрахували розподіл кожні 1000 часових кроків протягом перших 4000 кроків моделювання. Форма кривих може свідчити про правильність розподілу швидкостей після перших 2000 часових кроків. Тому при кожному моделюванні протягом цього часу система досягає рівноваги і після цього проводяться вимірювання.

Константа дифузії D розраховується за допомогою виразу Ейнштейна [12, 24].

$$D = \frac{1}{6N_m t} \langle \sum_{j=1}^{N_m} [r_j(t) - r_j(0)]^2 \rangle, \quad (2.1)$$

де N_m — кількість молекул, t — час моделювання, r_j — радіус-вектор центру мас j молекули, кутові дужки означають усереднення за достатньо великою кількістю незалежних вимірювань.

Метою цієї роботи є дослідження поведінки плівки дисульфиду вуглецю, що складається з молекул TP4P, обмежених між абсолютно жорсткими плоскими алмазними пластинами, і перевірка моделі на узгодженість з експериментами та іншими методами моделювання. Дане дослідження стосується не тільки рівноважних структурних і динамічних властивостей сірковуглецю, а й трибологічних характеристик, які не були залучені в попередніх дослідженнях [13]. Результати, у свою чергу, можуть дати нам оцінки надійності використання моделі TP4P для молекул сірковуглецю та застосовності апроксимації абсолютно жорстких пластин у моделюванні нанотрибологічних систем.

2.3 Результат дослідження

На рисунках 2.3 – 2.9 представлені результати, отримані під час моделювання ультратонкої плівки сірковуглецю, обмеженої між плоскими алмазними пластинами. На рисунку 2.3 показана початкова конфігурація досліджуваної системи з навантаженням L 0 і 20 для одного шару. Типові конфігурації молекул дисульфиду вуглецю показані на рисунку 2.4. У площині шару спостерігається слабо виражене впорядкування.

Короткого часу рівноваги достатньо для повної релаксації системи відповідно до розподілу швидкостей. Проведено дві групи моделювання. Перша група характеризується відсутністю прикладеної (зсувної) сили F_a та визначеною константою дифузії. У другій групі відбувається зсув верхньої пластини з прикладеною силою $F_a = 1.71$ для вимірювання кінетичної енергії E_k і сили підкладки (атомного рівня) F_s .

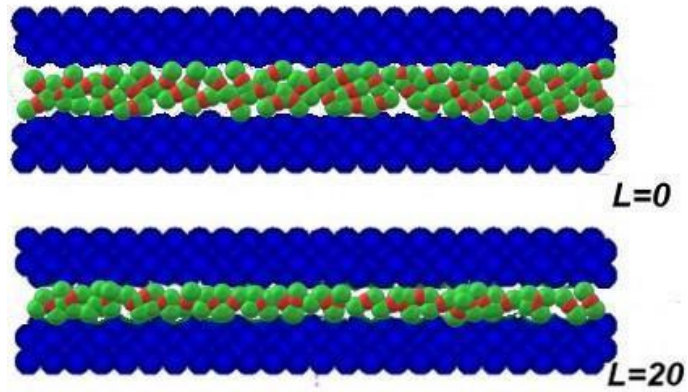


Рисунок 2.3 - Початкова конфігурація досліджуваної системи з навантаженням
0 і 20

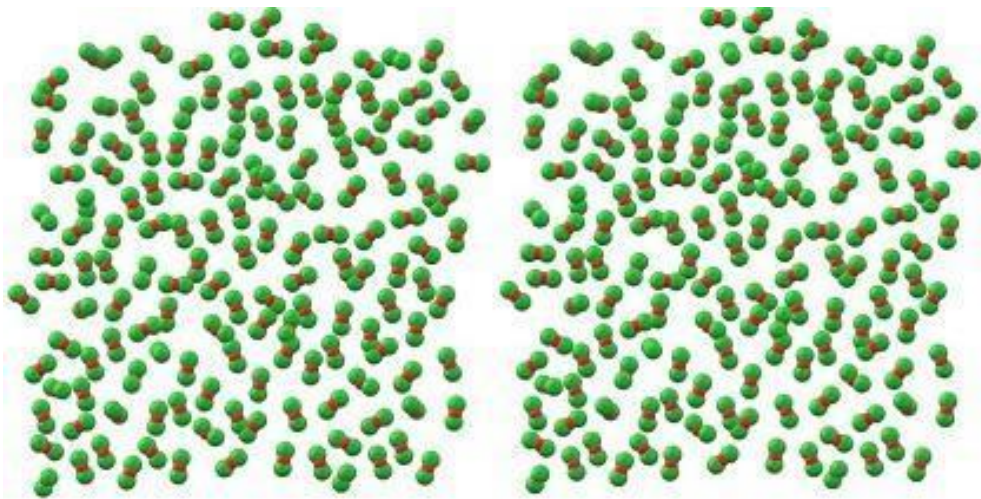
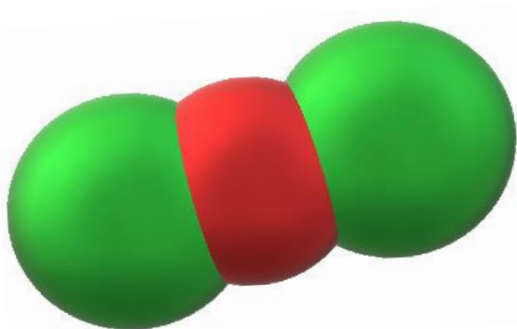


Рисунок 2.4 - Типові конфігурації молекул дисульфиду вуглецю при $L=0$
(ліворуч) і $L=20$ (праворуч)

Розташування молекул діоксиду вуглецю (ліворуч) та форма алмазної пластини (праворуч) у площині xy на початку моделювання.

Молекула сірковуглецю CS_2 :



На рисунку 2.5 показано зміну кінетичної енергії для навантажень $L = 0$ і $L = 20$. Кінетична енергія об'єкта - це енергія, якою він володіє внаслідок свого руху. Вона визначається як робота, необхідна для прискорення тіла заданої маси з стану спокою до заданої швидкості. Отримавши цю енергію під час свого прискорення, тіло зберігає цю кінетичну енергію, поки не зміниться його швидкість. Флуктуації кінетичної енергії значно збільшують амплітуду при навантаженні на поверхню; це вказує на підвищення температури молекул рідини. Якщо порівняти кінетичну енергію для обох навантажень, то можна зробити висновок, що зі збільшенням навантаження на поверхню алмазу коливання кінетичної енергії стають більш регулярними в часі. Це доводить, що взаємодія між молекулами посилюється. Зміна середнього в часі значення кінетичної енергії тертя з навантаженням для обох видів навантажень задовольняє модель «бруківки» в наближенні переважання адгезійних взаємодій [4].

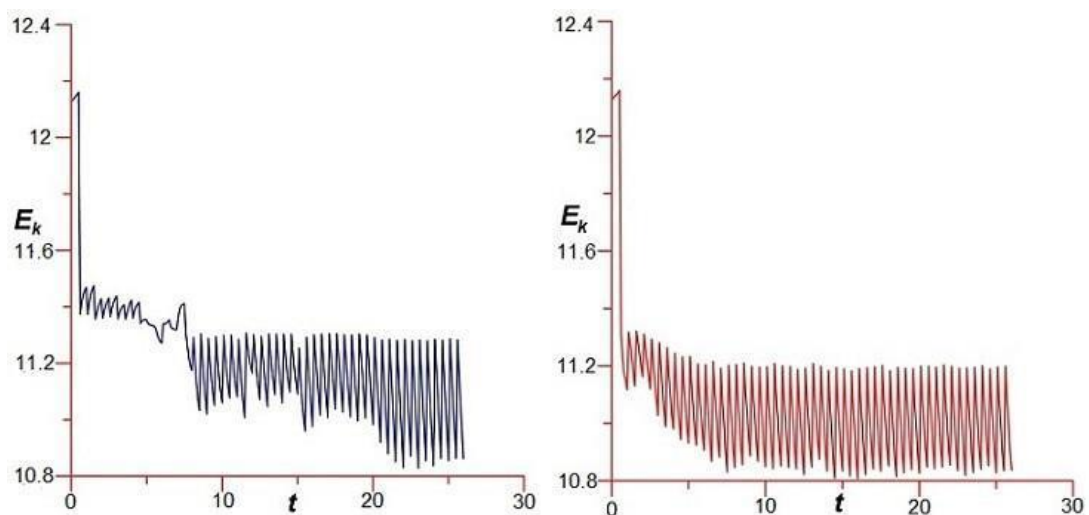


Рисунок 2.5 - Часові залежності кінетичної енергії. Величина навантаження нуль (ліворуч) і 20 (праворуч)

На рисунку 2.6 показано часові залежності сили підкладки F_s . Така залежність нерегулярна зі значними флуктуаціями, що відповідають режиму тертя прилипання. Частота коливань зменшується з часом поступово. Для більш товстої плівки амплітуда і частота коливань більші. Субстрат і нормальні сили

значні коливання, тобто субстрат і нормальні сили проти кривих зміщення, представляють хвилі пілкоподібної форми. Встановлено, що величина сил тертя атомного рівня на межі розділу дуже неоднорідна. Напрями сил підкладки можуть бути навіть протилежними. Зі збільшенням нормального тиску неоднорідність сил тертя атомного рівня спочатку зменшується, а потім знову зростає. Цю зміну можна пояснити одночасними ефектами великої різниці в жорсткості матеріалу та змін у шорсткості поверхні під нормальним тиском [3,17,25-31].

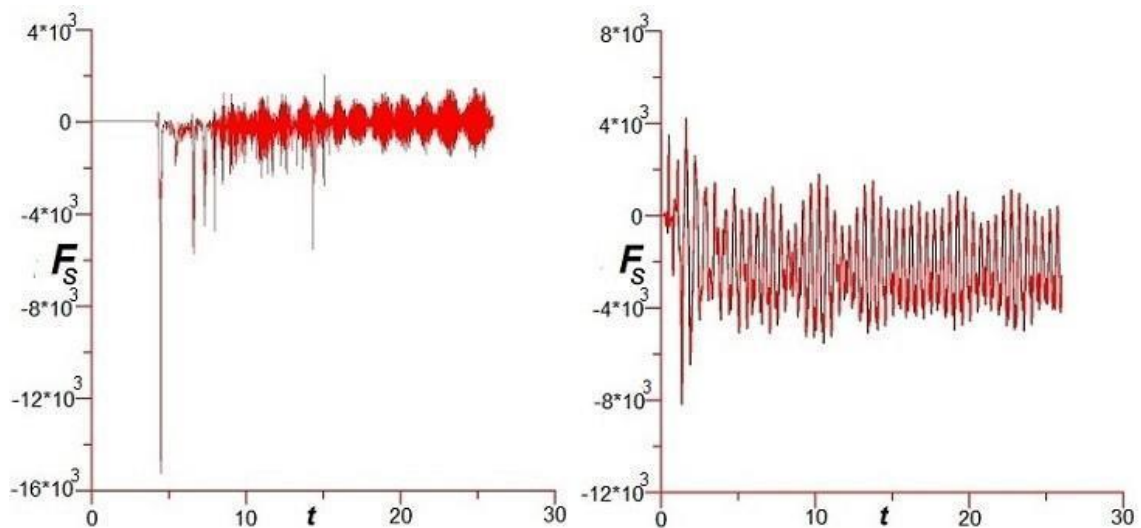


Рисунок 2.6 Залежності сили підкладки від часу. Величина навантаження нуль (ліворуч) і 20 (праворуч)

На рис. 2.7 наведені розрахункові залежності автокореляційної функції швидкості $\varphi(t)$ молекул сірковуглецю від часу для різних навантажень. Видно, що зі збільшенням навантаження збільшується кількість і частота коливань. Це вказує на те, що швидкості молекул стають більш корельованими при більших навантаженнях.

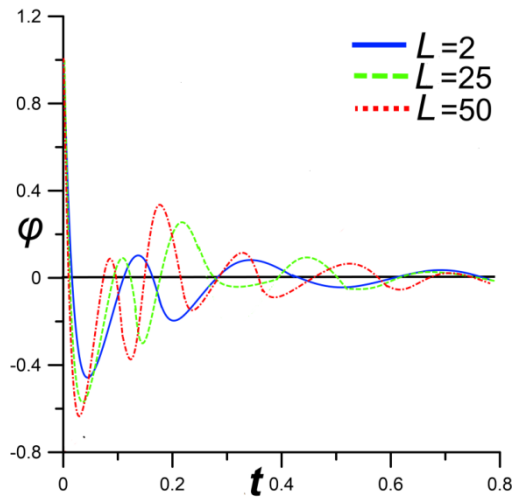


Рисунок 2.7 - Часові залежності автокореляційної функції швидкості для різних навантажень.

Поступове зниження константи дифузії зі збільшенням зовнішнього навантаження, показано на рисунку 2.8, демонструє перехід плівки у твердоподібний стан. Особливістю цього стану є впорядкування молекул, яке може бути вертикальним (у вигляді квазідискретних шарів) і горизонтальним (тобто в площині). Аналітично перше проявляється в осциляціях густини з відстанню, нормальною до границь, а мірою останнього є фактор Дебая-Валлера [3,4]. Зараз ці величини не розраховані, але візуально спостерігається слабо виражене впорядкування.

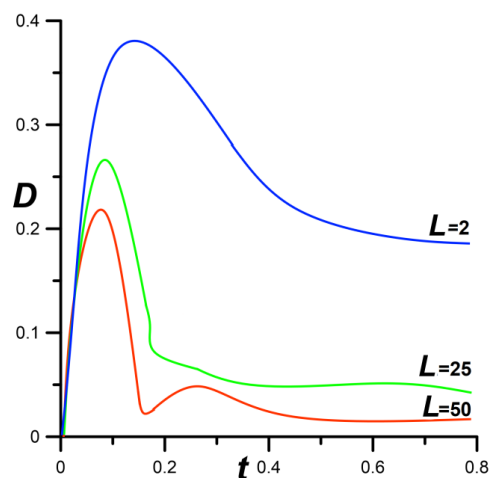


Рисунок 2.8 - Часові залежності константи дифузії для різних навантажень. Значення обчислюються за виразом Ейнштейна.

Щоб зрозуміти, як використовується співвідношення Ейнштейна (2.1), ми коротко опишемо процедуру обчислення, виконану в моделюванні. Для розрахунку дифузійної постійної за формулою Ейнштейна використовується метод перекривання вибірок. Ми повинні отримати середнє значення середнього квадратичного зміщення (MSD) молекул сірковуглецю (вираз у кутових дужках у (2.1)). Для цього ми маємо 20 наборів даних (або зразків), у яких вимірювання константи дифузії починаються через фіксовані проміжки часу, так що 20 наборів вимірювань, заснованих на різних джерелах часу, виконуються одночасно. У кожному зразку ми виконуємо 400 вимірювань суми молекул MSD (сума в кутових дужках у (2.1)) кожні 4 часові кроки. Після 400 вимірювань у зразку обчислені значення зберігаються в буфері для подальших розрахунків середнього стандартного відхилення. Ця процедура повторюється для кожного зразка у відповідні моменти. Після накопичення в буфері 200 разів розраховується середнє значення MSD і додається до формули Ейнштейна.

Говорячи про застосовність формули Ейнштейна в таких суворих обмеженнях, можна відзначити, що зменшення константи дифузії до дуже малого значення на рисунку 2.8 замість збіжності до деякого значення може свідчити про те, що дифузії майже немає, тобто плівка знаходиться в твердому стані. Зауважимо, що аналогічні криві спостерігаються для м'якосферної рідини для високих густин [24]. Крім того, вираз Ейнштейна використовувався в аналогічних дослідженнях, наприклад, у літературі [7,12,13,15,25-27], майже без будь-яких зауважень. Лише в посиланні [27] автори зазначають, що співвідношення Ейнштейна для обмеженої рідини дає приблизну оцінку постійної дифузії. Проте, він все ще визначає загальну закономірність рухливості молекул.

Залежності на рисунку 2.9 можна пояснити наступним чином. Оскільки поверхні в моделюванні є гладкими, а молекули сірковуглецю малі та мають просту форму, ми можемо припустити, що середня сила тертя F визначається лише внеском адгезії. Зі збільшенням навантаження кількість і міцність адгезійних зв'язків молекул сірковуглецю з поверхнями спочатку швидко

зростає. Таким чином, модель дає результати, які значною мірою відповідають поведінці рідких плівок зі сферичними молекулами. Також можна зробити висновок, що лінійне зростання сили тертя з навантаженням визначається не рельєфом поверхонь, що пояснюється швидким досягненням насичення сили тертя зі зростанням нормального тиску.

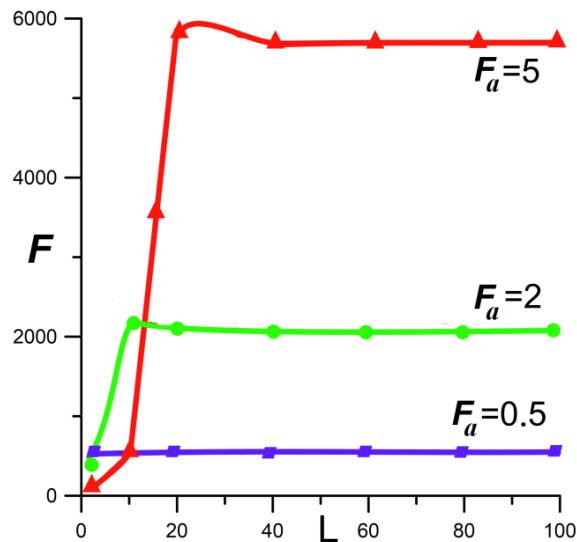


Рисунок 2.9 - Усереднене за часом значення сили тертя для різних прикладених сил як функція навантаження.

Таким чином, розглянута модель дає результати, які багато в чому відповідають простим сферичним молекулам і відтворюють експериментально спостережуваний перший закон Амонтона для сірковуглецю при низьких навантаженнях. Проте молекули CS_2 не можна віднести до простих сферичних. Отже, щоб отримати більш реалістичні результати, підхід слід удосконалити, наприклад, враховувати пружність, шорсткість, взаємодію поверхонь. Ці більш складні моделі є предметом подальших досліджень.

ВИСНОВОК

З дослідження можна зробити висновок, що для неструктурованих поверхонь спостерігається майже лінійне збільшення сили тертя за незначного навантаження. Це пояснюється швидким досягненням насичення сили тертя зі зростанням навантаження для розглянутої моделі. Флуктуації кінетичної енергії значно збільшують амплітуду при навантаженні на поверхню, а це свідчить про підвищення температури молекул рідини. Часові залежності сили підкладки, отримані під час моделювання, демонструють схожість з експериментальними залежностями для різних нанотрибологічних систем.

Основним результатом моделювання є перехід ультратонкої плівки сірковуглецю в твердоподібний стан. Це проявляється в зменшенні константи дифузії і в упорядкуванні молекул. Один шар молекул між плоскими жорсткими алмазними пластинами поводить як проста гранична рідка мастильна речовина Леннарда-Джонса, і в ньому немає вираженого горизонтального впорядкування. Дія рушійної сили викликає більш швидке формування впорядкованих структур і відбувається зсувне впорядкування. Таку поведінку можна пояснити особливостями моделі, зокрема наявністю кулонівських взаємодій між молекулами сірковуглецю. Однак значна різниця просторових і часових масштабів у симуляціях і експериментах заважає провести певне порівняння відповідних результатів. Залежності усереднених у часі значень сили тертя подібні до експериментально отриманих для сферичних молекул. Їх можна пояснити за допомогою моделі “бруківки” в наближенні домінування адгезійних сил.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Dai, L., Sorkin, V., Sha, Z. D., Pei, Q. X., Branicio, P. S., & Zhang, Y. W. (2014). *Langmuir*, 30, 1573-1579. doi:10.1021/la404680v
2. Luan, B., & Robbins, M. O. (2005). *Nature*, 435, 929-932. doi:10.1038/nature03700
3. Braun, O. M., & Naumovets, A. G. (2006). *Surf. Sci. Rep.*, 60, 79-158. doi:10.1016/j.surfrep.2005.10.004
4. Zhang, J., & Meng, Y. (2015). *Friction*, 3, 115-147. doi:10.1007/s40544-015-0084-4.
5. Khomenko, A. V., Zakharov, M. V., Khomenko, K. P., Khyzhnya, Y. V., & Trofimenko, P. E. (2018). In: *Proceedings of the IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Application Properties (NAP'18)*, (IEEE, USA), 4, 04NNLS15-1-4. doi:10.1109/NAP.2018.8915102
6. Zhang, X., Tsukamoto, M., Zhang, H., Mitsuya, Y., Itoh, S., & Fukuzawa, K. (2020). *J. Adv. Mech. Des. Syst.*, 14(4), 19-00442. doi:10.1299/jamdsm.2020jamdsm0044
7. Khomenko, A. V., Boyko, D. V., Zakharov, M. V., Khomenko, K. P., & Khyzhnya, Ya. V. (2016). *J. Nano- Electron. Phys*, 8(1), 01028-8. doi:10.21272/jnep.8(1).01028
8. Yang, XiaoJing, & Yang, XiaoJiang (2013). *Appl. Mech. Materials*, 345, 167-171. doi:10.4028/www.scientific.net/AMM.345.167
9. Khomenko, A. V., & Yushchenko, O. V. (2003). *Phys. Rev. E*, 68, 036110-6. doi:10.1103/PhysRevE.68.036110
10. Heo, S. J., Sinnott, S. B., Brenner, D. W., & Harrison, J. A. (2005). In *Nanotribology and Nanomechanics*, B. Bhushan (Ed.), Springer: Berlin, 623 - 691. doi:10.1007/3-540-28248-3
11. Krass, M. D., Gosvami, N. N., Carpick, R. W., Muser, M. H., & Bennewitz, R. (2016). *J. Phys.: Condens. Matter*, 28(13), 134004. doi:10.1088/0953-8984/28/13/134004
12. Khomenko, A.V., & Prodanov, N.V. (2008). *Condens. Matter Phys.*, 11(4), 615-626. doi:10.5488/CMP.11.4.615
13. Khomenko, A., Boyko, D., & Khomenko, K. (2019). In: *Proceedings of the IEEE 9th International Conference on Nanomaterials: Application Properties (NAP'19)*, (IEEE, USA), 2, 02TM17-1-3. doi: 10.1109/NAP47236.2019.216935

14. Yamada, S. (2008). *Langmuir*, 24(4), 1469-1475. doi:10.1021/la701714g
15. Khomenko, A. V., Boyko, D. V., & Zakharov, M. V. (2018). *J. Frict. Wear*, 39(2), 152-157. doi:10.3103/S106836661802006X
16. Khomenko, A. V., & Lyashenko, I. A. (2010). *J. Frict. Wear*, 31(4), 308-316. doi:10.3103/S1068366610040100
17. Khomenko, A. V., Prodanov, N. V., & Persson, B. N. J. (2013). *Condens. Matter Phys.*, 16(3), 33401: 1-8. [doi:10.5488/CMP.16.33401](https://doi.org/10.5488/CMP.16.33401)
18. Takae, K., & Onuki, A. (2015). *J. Phys. Chem. B*, 119(29), 9377-9390. doi:10.1021/jp510296b
19. Satomi, O., Daisaku, K., Jian, P.G., Yoshihito, O., Stewart, A.M., & Vassili, V. Y. (2007). *Langmuir*, 23(13), 7032-7038. doi:10.1021/la0632732
20. Metlov, L. S., Myshlyaev, M. M., Khomenko, A. V., & Lyashenko, I. A. (2012). *Tech. Phys. Lett.*, 38(11), 972-974. doi:10.1134/S1063785012110107
21. Braun, O. M., & Peyrard, M. (2001). *Phys. Rev. E*, 63(4), 46110. doi:10.1103/PhysRevE.63.046110
22. Khomenko, A. V., Troshchenko, D. S., & Metlov, L. S. (2015). *Condens. Matter Phys.*, 18(3), 33004: 1-14. doi:10.5488/CMP.18.33004
23. Allen, M. P., & Tildesley, D. J. (1995). *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press: Oxford.
24. Rapaport, D. C. (2004). *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd ed. Cambridge University Press: Cambridge. doi:10.1017/CBO9780511816581
25. Sansom, M. S. P., Kerr I. D., Breed, J., & Sankararamakrishnan, R. (1996). *Biophys. J.*, 70(2), 693-702. doi:10.1016/S0006-3495(96)79609-1
26. Gallo, P., & Rovere, M. (2003). *J. Phys.: Condens. Matter*, 15(45), 7625-7633. doi:10.1088/0953-8984/15/45/002
27. Hua, L., Huang, X., Zhou, R., & Berne, B. J. (2006). *J. Phys. Chem. B*, 110, 3704-3711. doi:10.1021/jp055399y
28. Goncharov, A. A., Konovalov, V. A., Volkova, G. K., & Stupak, V. A. (2009). *Phys. Met. Metall.*, 108(4), 368. doi:10.1134/S0031918X0910007X
29. Yushchenko, O. V., & Badalyan, A. Y. (2012). *J. Nano- Electron. Phys.*, 4(3),

03009(6).

30. Mazur, O. Yu., & Stefanovich, L. I. (2019). *Phys. Solid State*, 61, 1420-1424.
doi:10.1134/S10637834190801
31. Pogrebnjak, A. D., & Ruzimov, Sh. M. (1987) *Phys. Lett. A*, 120(5), 259-261.
doi:10.1016/0375-9601(87)90221-0
32. A.V. Khomenko, D.V. Boyko, M.V. Zakharov, K.P. Khomenko, Ya.V. Khyzhnya
Atomistic Simulation of Properties of Ultra-thin Layer of Liquid Argon Compressed
Between Diamond Surfaces *J. Nano- Electron. Phys.*, Vol. 8 No 1, 01028(8pp) (2016)
33. Ebru Cihan , Dirk Dietzel , Benedykt R. Jany and Andr´e Schirmeisen Effect of
Amorphous-Crystalline Phase Transition on Superlubric Sliding
PHYSICAL REVIEW
LETTERS 130, 126205 (2023)

ДОДАТОК А

Програмна реалізація моделі

```
CCompute::CCompute()
{
    deltaT = 0.0005;
    density = 1.05;
    initUcell.x = 7;
    initUcell.y = 7;
    initUcell.z = 2;
    rCut = 2.8;
    /*
    limitRdf = 100;
    rangeRdf = 2.5;
    sizeHistRdf = 125;
    stepRdf = 50;
    */

    stepLoad = 1000;//interval for applying nonzero load
    stepForce = 20;//interval for force and cm measurments
    stepAdjustTemp = 1000;
    stepAvg = 200;
    stepEquil = 1000;
    stepLimit = 20000;

    temperature = 3.8;
```



```
m_pbStart = NULL;
```

```
m_bFlag = FALSE;
```

```
//densityD = 15.7;
```

```
initUcellD.x = 6;
```

```
initUcellD.y = 6;
```

```
initUcellD.z = 1;
```

```
m_Shear = 0;
```

```
M_C = 0.672;
```

```
sigma_CO = 0.86;
```

```
e_CO = 2;
```

```
//sigma_CC = 0.2;
```

```
//e_CC = 0.1;
```

```
loadUp = -50;
```

```
loadLow = 50;
```

```
//shear = 0;
```

```
stiffK = 0;//1.2;
```

```
shearVel = 0;//0.1;
```

```
//itIALIZATION for diffusion
```

```
limitDiffuseAv = 200;
```

```
nBuffDiffuse = 10;
```

```
nValDiffuse = 250;
stepDiffuse = 4;

//!!!after these functions no one parameter must be there!!!

    SetParams ();

SetupJob ();

    GenSiteCoords ();

//code for atom radii

double Xc = molDup[0].r.x - molDup[1].r.x;
double Yc = molDup[0].r.y - molDup[1].r.y;
double Zc = molDup[0].r.z - molDup[1].r.z;
m_dDist = sqrt(Xc*Xc + Yc*Yc + Zc*Zc);

}

CCompute::~~CCompute()
{
    free(mol);
    free(site);
    free(mSite);
    //free(histRdf);
    free(molDup);
    free(molDlow);
}
```

```
//diffusion
    int nb;

    free (rrDiffuseAv);
    free (tBuf);
    for (nb = 0; nb < nBuffDiffuse; nb ++)
    {
        free (tBuf[nb].orgR);
        free (tBuf[nb].rTrue);
        free (tBuf[nb].rrDiffuse);
    }
    /*
        HeapFree(hHeap,0,rrDiffuseAv);
        HeapFree(hHeap,0,tBuf);
        for (nb = 0; nb < nBuffDiffuse; nb ++)
        {
            HeapFree(hHeap,0,tBuf[nb].orgR);
            HeapFree(hHeap,0,tBuf[nb].rTrue);
            HeapFree(hHeap,0,tBuf[nb].rrDiffuse);
        }
        HeapDestroy(hHeap);*/
}

void CCompute::SetParams()
```

```
{  
  sitesMol = 4;  
  VSCopy (region, 1. / pow (density, 1./3.), initUcell);  
  nMol = VProd (initUcell);  
  velMag = sqrt (NDIM * (1. - 1. / nMol) * temperature);  
  //for diamond  
  VSCopy (regionD, 1.131, initUcellD);  
  nMolD = 8*VProd (initUcellD);  
  nMolD2 = 2*nMolD;  
  totalMass = nMolD * M_C;//the mass of an upper plate
```