

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Сумський державний університет

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

_____ Коплик І.В.
(підпис) (Ім'я та ПРІЗВИЩЕ)
_____ 20__ р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА
на здобуття освітнього ступеня магістр

зі спеціальності 113 Прикладна математика,
освітньо-професійної програми Наука про дані та моделювання складних систем
на тему: Атомістичне моделювання фрикційної анізотропії металевих
наночастинок на графені

Здобувача групи ПМ.м-21 Чопова Андрія Петровича

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

(підпис)

Андрій Чопов

Керівник професор кафедри ПМтаМСС, доктор фіз.-мат. наук,
професор, Олексій Хоменко

(підпис)

Суми – 2023

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

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

ЗАТВЕРДЖУЮ

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

«__» _____ 2023 р.

ЗАВДАННЯ

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧУ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Чопову Андрію Петровичу

1. Тема роботи: Атомістичне моделювання фрикційної анізотропії металевих наночастинок на графені.

Керівник роботи Хоменко О.В., професор, доктор фіз.-мат. наук
затверджено наказом по факультету ЕлІТ від «07» листопада 2023 р. № 1237-

VI

2. Термін подання роботи студентом «14» грудня 2023 р.
3. Вихідні дані до роботи 1) Експериментальні та теоретичні відомості про наночастинки та графен. 2) Метод класичної молекулярної динаміки.
4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити): Вивчення поверхневих явищ на атомарному рівні. Програмна реалізація молекулярної динаміки наночастинок та графені. Вимірювання та отримання результатів.
5. Перелік графічного матеріалу
 - 1) Блок-схема методу класичної молекулярної динаміки.
 - 2) Схематичне зображення підходів до обчислення взаємодій.
 - 3) Схема сил, що діють на наночастинку під час зсуву по графеновій підкладці.
 - 4) Верхній вид системи з наночастинкою Al.
 - 5) Залежності від часу величин.
 - 6) Анізотропія наночастинок платини, які містять 10000 атомів.
 - 7) Анізотропія наночастинок алюмінію, що містять 10000 атомів.
 - 8) Анізотропія наночастинок паладію, які містять 10000 атомів.
 - 9) Вид знизу наночастинки платини, яка містить 10000 атомів.
6. Дата видачі завдання «6» листопада 2023 р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Найменування роботи, заходи	Термін виконання	Примітка
1	Ознайомитися з типовими моделями, що використовуються у фізиці тертя та зносу поверхонь на атомарному рівні.	06.11-09.11	Виконав
2	Ознайомитись з методами молекулярної динаміки.	09.11-11.11	Виконав
3	Провести аналіз літератури за темою: «Атомістичне моделювання фрикційної анізотропії металевих наночастинок на графені».	11.11-14.11	Виконав
4	Побудувати математичну модель, що описує залежність сили тертя від напрямку зсуву.	14.11-17.11	Виконав
5	На базі математичної моделі створити комп'ютерні програми.	17.11-01.12	Виконав
6	Побудувати залежності сили підкладки від координати центра мас наночастинок.	02.11-07.12	Виконав
7	Побудувати залежності сили тертя від напрямку зсуву.	08.12-14.12	Виконав

Здобувач вищої освіти

_____ Чопов А. П.
(підпис) (прізвище та ініціали)

Керівник роботи

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

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота: 51 с., 9 рисунків, 36 джерел.

Мета роботи: Ознайомитися з типовими моделями, що використовуються у фізиці тертя та зносу поверхонь на атомарному рівні, ознайомитись з методами молекулярної динаміки, побудувати математичну модель, що описує залежність сили тертя від напрямку зсуву.

Об'єкт дослідження: процес тертя наночастинок по графену.

Предмет дослідження: математична модель, що описує залежність сили тертя від напрямку зсуву.

Методи навчання: рівняння математичної фізики, метод класичної молекулярної динаміки. диференціальні рівняння, методи чисельного розв'язання диференціальних рівнянь.

Встановлено закономірності структурних, трибологічних та кінетичних явищ на атомарному та макроскопічному рівнях при русі наночастинок алюмінію, паладію та платини, що адсорбовані на поверхні графену, залежно від кута зсуву. Для зручності сприйняття числових значень в роботі наведені залежностей, які відповідають оптимальним числовим значенням параметрів.

Ключові слова: Молекулярна динаміка; Сила тертя; Графен; Наночастинка; Нанотрибологія; Алюміній; Паладій; Платина.

ЗМІСТ

ВСТУП	3
1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД	5
1.1 Анізотропія	5
1.2 Вивчення поверхневих явищ на атомарному рівні	11
2 ОСНОВНА ЧАСТИНА	14
2.1 Принципи молекулярної динаміки	14
2.2 Реалізація МД на GPU	18
2.3 Опис системи.....	20
2.3.1 Потенціали взаємодії.....	20
2.3.2 Безрозмірні одиниці.....	24
2.3.3 Контроль температури.....	25
2.3.4 Режими.....	27
2.3.5 Вимірювання.....	31
2.4 Результати.....	36
ВИСНОВОК.....	44
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	45
ДОДАТОК А.....	49

ВСТУП

Протягом останніх двох десятиліть, значний інтерес викликає вивчення поверхневих явищ на атомарному рівні, завдяки розвитку відповідних експериментальних методів, таких як атомна силова мікроскопія, і мініатюризації електронних та інших пристроїв. Переважно, окрім дослідження традиційних явищ, таких як нанесення покриттів або напилення тонких плівок, на передній план виходить нанотрибологія – нова галузь нанотехнології, що досліджує тертя та знос поверхонь на атомарному рівні [1-10].

Експерименти щодо тертя графіту на нанорівні, призвели до відкриття цікавих явищ, включаючи тертя металевих наночастинок на поверхні графіту. Відсутність достовірної теорії стосовно цих явищ підкреслює потребу в теоретичних дослідженнях, зокрема комп'ютерному моделюванні методом молекулярної динаміки, оскільки складність та багатофакторність нанотрибологічних завдань роблять неможливою побудову достовірної аналітичної теорії таких явищ.

Протягом останнього десятиліття в галузі нанотрибології відбувається швидке зростання експериментальних досліджень, що є наслідком розвитку скануючих електронних мікроскопів і скануючих тунельних мікроскопів. Вчені вважають, що трибологічні властивості наносистем не підпорядковуються відомим макроскопічним законам, тому їх теоретичний аналіз потребує подальшого розвитку. Зокрема, атомістичне моделювання тертя металевих наночастинок на графітовій поверхні знаходиться на початковому етапі.

На сьогоднішній день, дослідження нанорозмірних систем та їх трибологічних властивостей є актуальними, оскільки реальна поверхня має неоднорідну структуру, що потребує врахування при дослідженні тертя наночастинок. Феноменологічні моделі мають свої слабкості, так як їх

застосування потребує припущень, що можуть призвести до неточних результатів, а також дають якісний опис нанотрибологічних процесів. Комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки є альтернативним методом для теоретичного дослідження процесів тертя на атомарному рівні, оскільки поєднує переваги аналітичних моделей та експериментальних умов. Враховуючи те, що в експериментах на наноб'єкти часто неможливо нав'язати потрібну поведінку, теоретичні методи стають все актуальнішими для прогнозування властивостей наночастинок, їх самоорганізації в наноструктури, режимів руху та взаємодії з навколишнім середовищем.

1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД

1.1 Анізотропія

Анізотропія (нерівний, неоднаковий напрям) — відмінність властивостей середовища у різних напрямках (на відміну від ізотропії).

Щодо одних властивостей середовище може бути ізотропним, щодо інших — анізотропним. Може різнитися також ступінь анізотропії.

Це явище характерне для показника заломлення світла, діелектричної сталої, теплопровідності, магнітних властивостей кристалів та проникності порід. Виявляється в кристалах низької симетрії та рідких кристалах.

Анізотропія механічних властивостей у монокристалі виявляється насамперед у тому, що їх міцність у різних напрямках різна. Монокристали легше руйнуються в одних напрямках, ніж в інших, і саме тому їх злами плоскі. Наприклад, шматочок слюди, який є кристалом, легше розщепити на тоненькі пластинки, ніж розірвати ці пластинки на частини. Якщо, наприклад, виготовити з монокристала кулю, а потім ударити по ній молотком, то вона розколеться у певних напрямках на шматки, грані яких утворять кути, характерні для даної речовини. Це означає, що міцність монокристала у цих напрямках найменша.

В анізотропії теплових властивостей монокристалів можна переконатися на такому досліді. Покриємо слюдяну (кристалічне тіло) і скляну (аморфне тіло) пластинки тонким шаром парафіну і потім доторкнемося до них однаково нагрітими цвяхами. Побачимо, що поверхня розплавленого парафіну має на слюді форму еліпса а на склі - кола. Це й свідчить про те, що на відміну від скла слюда має різну теплопровідність у різних напрямках.

Анізотропія пов'язана з будовою тіла, властивостями його структурних частинок - молекул, атомів, іонів та специфікою їх розташування. Найхарактернішою особливістю кристалів є їхня природна анізотропія. Саме тому, що швидкості росту кристалів у різних кристалографічних напрямках розбіжні, кристали виростають у формі правильних багатогранників (шестикутні призми кварцу, кубики галіту, восьмикутні кристали алмазу та ін.). Не всі властивості кристалів є анізотропними. Зокрема, густина й питома теплоємність не залежать від напрямку. Анізотропія інших властивостей кристалів тісно пов'язана з їхньою симетрією, її прояви тим яскравіші, чим нижча симетрія кристалів. Нагрівання сфери, виготовленої з ізотропної речовини, зумовлює її рівномірне розширення в усіх напрямках та збереження сфероїдної форми. Тоді як кристалічна сфера з анізотропної речовини, внаслідок нагрівання, змінюватиме форму, оскільки температурні коефіцієнти лінійного розширення вздовж головної осі симетрії кристала (α_{\parallel}) і перпендикулярної до неї (α_{\perp}) можуть різнитися як за величиною, так і за знаком, у зв'язку з чим може трапитися, що за нагрівання кристалічна сфера розширюватиметься в одному напрямку й стискуватиметься в іншому, поперечному до попереднього.

Подвійне променезаломлення, а також різну поляризацію світла в різних напрямках, спостерігають під час поширення світла в прозорих кристалах (за винятком кристалів з кубічними решітками), що й характеризує так звану оптичну анізотропію. Наприклад, у кристалах кварцу, рубіну й кальциту (тобто в кристалах з гексагональними, тригональними й тетрагональними решітками) подвійне променезаломлення найбільше в напрямку, перпендикулярному до головної осі симетрії. І зовсім відсутнє за поширення світла вздовж цієї осі. В оптично анізотропних середовищах швидкість поширення світла v , а також показник заломлення світла n у різних напрямках розбіжні.

Різниця механічних властивостей кристала (міцності, твердості, в'язкості, пружності) у різних напрямках становить його механічну анізотропію. Пружну анізотропію будь-якого тіла оцінюють за максимальною відмінністю пружності модулів, характерних для нього. Зокрема, для таких металічних матеріалів з кубічними решітками, як залізо, свинець і латунь, відношення модулів пружності вздовж ребра й діагоналі куба становлять, відповідно: 2,5, 3,85 і 8,7. Кубічні монокристали характеризують трьома головними значеннями модулів пружності. У випадку кристалів складнішої структури (нижчої симетрії) детальний опис пружних властивостей потребує знання більшої кількості значень модулів пружності для різних напрямків. Для цинку або кадмію їх, наприклад, 5, а для тригліцинсульфату або винної кислоти — 13, відмінних між собою як за абсолютним значенням, так і за знаком.

Під магнітною анізотропією розуміють залежність магнітних властивостей від напрямку, у якому їх розглядають. Така анізотропія залежить від структури тіла, а також від особливостей взаємодії між елементарними носіями магнітного моменту. Особливо велика магнітна анізотропія характерна для монокристалічних феромагнетиків. Залежно від кута між вектором намагніченості J та вектором напруженості магнітного поля H , це поле в монокристалі може як підсилюватися, так і послаблюватися.

На відміну від ізотропних властивостей (наприклад, густини), описуваних за допомогою скалярних величин, анізотропні властивості описують за допомогою векторів та тензорів. Наприклад, коефіцієнт піроелектричного ефекту є вектором; питомий опір, діелектрична та магнітна проникність, теплопровідність — тензори другого рангу; коефіцієнт п'єзоелектричного ефекту — тензор третього рангу; пружність — тензор четвертого рангу. Графічно анізотропію зображують у вигляді так званих

індикатрис. Індикатрису одержують, відклавши з однієї точки (яка є початком координат) у всіх напрямках відрізки, пропорційні величині, що розглядають у цьому напрямку. Кінці цих відрізків і утворюють відповідну індикатрису.

Полікристалічні матеріали (метали або сплави), що утворюються з безлічі дрібних кристаликів (кристалітів), орієнтованих довільно в просторі, у цілому ізотропні або майже ізотропні. Анізотропія таких матеріалів може проявитися в результаті оброблення (відпалювання, прокатування тощо), що може приводити до переважної орієнтації кристалітів в одному певному напрямку.

Природна анізотропія може виникати не тільки внаслідок упорядкованого розташування в просторі частинок (атомів, молекул, іонів), які утворюють тіло, а й за рахунок асиметрії їхнього відносного розташування. Саме цим зумовлено природну анізотропію деяких рідин, зокрема й анізотропію рідких кристалів. В останніх спостерігають подвійне променезаломлення, хоча для більшості інших їхніх властивостей характерний високий ступінь ізотропії, властивої звичайним рідинам.

Анізотропія властива й деяким некристалічним речовинам з природною або штучною текстурою, наприклад, деревині.

Штучну анізотропію можна створити навіть у природно ізотропному матеріалі (електрична провідність у кубічному кристалі на зразок германію або силіцію), піддавши його скерованому стискуванню або розтягуванню в певних кристалографічних напрямках.

Штучна оптична анізотропія може виникати в кристалічних тілах і в ізотропних середовищах під дією механічного впливу, а також під дією електричного і магнітного полів (ефект Коттона — Мутона).

Анізотропія поширена також у живій природі (наприклад, оптичну анізотропію спостерігають у деяких м'язових і кісткових тканинах).

Різноманітні геологічні матеріали, наприклад, шаровисті породи, зцементовані глини, частинкові матеріали з елонгованими зернами тощо, проявляють сильну напрямкову залежність механічних властивостей. Модель вбудованої анізотропії Хілла має практичне застосування в аналізі процесу металоформування [1,2]. Дослідження у напрямку вивчення анізотропії тертя методом молекулярної динаміки тривають протягом останніх трьох десятиліть. Молекулярно-динамічне моделювання тертя між кремнієвим наконечником та підкладкою [3] виявило, що сила тертя залежить від напрямку зсуву, температури та ступеня співмірності поверхні, що контактує. Хе, Мюзер та Роббінс досліджували походження статичного тертя між поверхнями, змодифікованими адсорбованими шарами, використовуючи моделювання методом молекулярної динаміки. В їхньому дослідженні було показано, що тертя подібне до несумісних міжфазних інтерфейсів між рішеннями поверхні, але вище, ніж у випадку співмірних інтерфейсів [4]. У роботі Депондта, Газалі та Леві було виявлено сильну анізотропію сили тертя. Симульована система складалася з одного шару адсорбата, що був відкладений на поверхню з границевою кристалічною решіткою просторово-центрованої кубічної решітки [5]. При цьому Алмейда, Пріолі, Фрагно проаналізували силу тертя в графені, яка дуже залежить від напрямку сканування, а енергія, що витрачається під час руху вздовж напрямку «крісла», в 80% вища, ніж вздовж «зигзаг»-напрямку [6]. У багатьох випадках ці явища є головними перешкодами для досягнення надійної роботи або навіть впровадження практичних застосувань.

Циркумстанція спричинила стрімкий розвиток експериментальних технік, таких як атомно-силові та динамічні мікроскопи з силами тертя, а також мікрота нанозонди [7,9]. Зокрема, експерименти з тертя напівпровідникових

наночастинок з антимонію на графіті виявили наявність рухів стику-роз'їждження та старіння контакту [10].

Однак відповідні теоретичні дослідження далеко не відповідають темпу накопичення експериментальних результатів. Тому існує загальна потреба у теоретичному вивченні властивостей різноманітних нанорозмірних систем, таких як металеві наночастинки, графен тощо. Дослідники згодні, що трибологічні властивості нанорозмірних систем не підпорядковуються макроскопічним законам типу законів Амонтона або Куломба, тому їх теоретичний аналіз потребує подальшого розвитку. Зокрема, моделювання атомного тертя великих наночастинок на поверхні графіту знаходиться на початковій стадії [11]. Мартіні, Тіель та інші представили результати симуляції молекулярною динамікою для виявлення механізмів, які лежать в основі великої анізотропії тертя. Вони якісно відтворили експериментальну анізотропію тертя, виявивши злиття органічних ланцюгів в квазикристалічних борознах на поверхні вздовж періодичного напрямку [12].

Сила тертя металевих наночастинок визначається матеріалом наночастинок, площею контакту та локальною співмірністю структур. Форма наночастинок, виміряна атомно-силовим мікроскопом, може не бути надійним джерелом для визначення площі контакту через значні деформації поверхні. Дослідження залежності сили тертя від напрямку зсуву наночастинок відносно кристалічної решітки підкладки є цінним для визначення умов для реалізації структурної змащеності (суперзмащування) [11]. Крім того, надзвичайні властивості графену відкривають широкі горизонти для можливих застосувань, зокрема, в наноелектроніці [13]. Це ускладнило розуміння трибології цих матеріалів, зокрема, перегрупування атомів на контактній площі наночастинок, адсорбованих на графені, методом молекулярної динаміки [14,16].

Основною слабкістю феноменологічних моделей є використані наближення та припущення, які можуть привести до не на стільки якісного опису нанотрибологічних процесів [17,20]. Комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки (яке також називається комп'ютерним експериментом) є альтернативним підходом до теоретичного дослідження процесу тертя на атомному рівні. Воно дає компроміс між аналітичними моделями та експериментальними умовами і широко використовується для вирішення нанотрибологічних задач [11,21].

Ця робота є продовженням серії моделювання методом молекулярної динаміки різних металів, таких як золото, мідь, нікель і срібло [14,15]. Ми маємо на меті встановити закономірності структурних, трибологічних та кінетичних явищ на атомному та макроскопічному рівнях під час переміщення наночастинок, які адсорбовані на графені. Зокрема, наше дослідження визначає відсутність анізотропії тертя у випадку неупорядкованих металевих наночастинок, коли вони зсуваються по графену під різними кутами відносно кристалічної решітки вуглецевого матеріалу.

1.2 Вивчення поверхневих явищ на атомарному рівні

Вивчення поверхневих явищ на атомарному рівні викликає значний інтерес протягом останніх двох десятиліть, що обумовлено розвитком відповідних експериментальних методів, наприклад, атомної силової мікроскопії, а також інтенсивною мініатюризацією електронних і інших пристроїв [1]. Крім дослідження традиційних явищ, наприклад, нанесення покриттів або напилення тонких плівок, досить швидко розвивається нова галузь нанотехнології - нанотрибологія, яка розглядає тертя та знос поверхонь на атомарному рівні [2, 3]. Експерименти з вивчення тертя графіту на нанорівні

відкрили ряд цікавих явищ [4]. Відзначимо лише дослід, який має безпосереднє значення для розрахунків: в роботі [5] досліджується тертя металевих наночастинок, утворених на поверхні високоорієнтованого піролітичного графіту. Відсутність в літературі достовірного пояснення фрикційної дуальності вказує на необхідність теоретичного дослідження тертя металевих наночастинок по поверхні графіту. Складність і багатофакторність нанотрибологічних завдань робить практично неможливою побудову достовірної аналітичної теорії явищ, які розглядаються. Тому комп'ютерне моделювання, зокрема метод молекулярної динаміки, є незамінним інструментом теоретичного вивчення тертя і зносу на атомарному рівні [2,6]. Останнє десятиліття в області нанотрибології відбувається стрімке накопичення експериментальних досліджень, що обумовлено розвитком скануючого електронного мікроскопа, скануючого тунельного мікроскопа і т.д. Дослідники сходяться на думці, що трибологічні властивості нанорозмірних систем не підпорядковуються відомим макроскопічним законам, а тому їх теоретичний аналіз потребує подальшого розвитку [1,6]. Зокрема, атомістичне моделювання тертя, у випадку металевих наночастинок на графітовій поверхні, знаходиться на початковому етапі.

На сьогоднішній день є актуальним дослідження нанорозмірних систем і, зокрема, їх трибологічних властивостей. Це пов'язано з тим, що реальна поверхня має неоднорідну структуру, яку необхідно враховувати, що досягається за допомогою дослідження тертя наночастинок. Основною слабкістю феноменологічних моделей є те, що для їх застосування необхідні припущення, що можуть призвести до некоректних результатів. Крім того, феноменологічний підхід, як правило, дає лише якісний опис нанотрибологічних процесів. Комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки є альтернативним методом для теоретичного дослідження процесів

тертя на атомарному рівні, оскільки подає компроміс між аналітичними моделями й експериментальними умовами і дуже широко використовується для розв'язання нанотрибологічних задач. Зважаючи на те, що в експерименті наноб'єктам часто неможливо нав'язати потрібну поведінку, особливої актуальності в наш час набувають теоретичні методи аналізу, що дозволяють прогнозувати еволюцію властивостей наночастинок, колективні процеси їх самоорганізації в наноструктури, режими руху наночастинок, їх взаємодію з навколишнім середовищем і т. і.

2 ОСНОВНА ЧАСТИНА

2.1 Принципи молекулярної динаміки

Суть атомістичного комп'ютерного моделювання методом класичної молекулярної динаміки досить проста: маючи набір початкових умов та спосіб опису міжатомних сил, необхідно проінтегрувати ньютонівські класичні рівняння руху одним з декількох стандартних методів. Моделювання надають нові атомні координати, швидкості та сили, і за поведінкою атомів можна стежити в режимі реального часу за допомогою зображень-анімацій, а також можна проводити вимірювання різних параметрів системи.

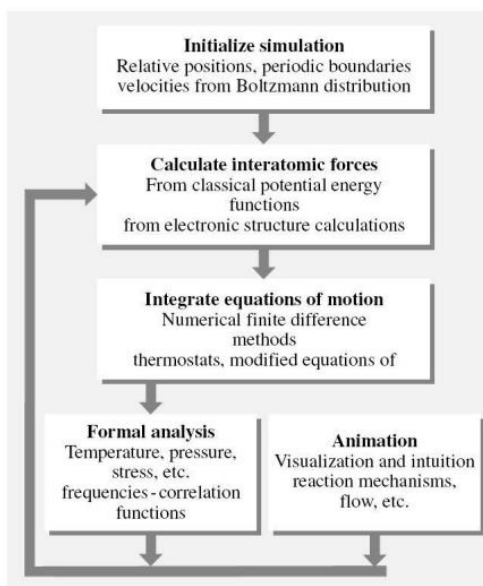


Рис. 2.1 - Блок-схема методу класичної молекулярної динаміки.

Однак ефективне використання методу молекулярної динаміки потребує розуміння багатьох деталей, які не є очевидними в зазначеному простому аналізі. Їх детальний опис та алгоритми, що використовуються в класичній молекулярній динаміці, можна знайти в книгах [10,11,12,13]. У цьому документі

багато деталей, таких як періодичні межі, використання безрозмірних одиниць та інше, не наведені, і пропонується звернутися до зазначених джерел. Ми звернемо увагу на питання, які є принциповими при реалізації молекулярної динаміки на графічних процесорах (graphic processing units), і, отже, мають великий вплив на структуру додатку SurfaceGrowth.

Рівняння Ньютона, які дають прискорення кожного атома відповідно до дії зусиль, нанесених на нього, мають наступний вигляд:

$$F = ma, \quad (2.1)$$

$$-\nabla V = m \left(\frac{\partial^2 r}{\partial t^2} \right), \quad (2.2)$$

де F - сила, що діє на кожний атом, m - маса атома, a - прискорення атома, V - потенціальна енергія атома, r - просторова координата атома, а t - час. На початку моделювання обчислюються сили, що діють на кожен атом. Потім атоми рухаються на невеликий проміжок часу t (називається часовим кроком) у відповідь на дію прикладених сил, що супроводжується зміною атомних координат, швидкостей та прискорень. Описаний процес повторюється для певної кількості часових кроків, яку обирає користувач.

Перевагою цього методу є те, що він дає можливість стежити за індивідуальним рухом всіх атомів в режимі реального часу. Недоліком є те, що часові масштаби дуже обмежені (від піко- до наносекунд). Крім того, розміри систем, які можна розглядати на даний момент, обмежені числом в 10^6 - 10^8 атомів, яке, хоча і вражає, проте все ще далеко від реальних систем, що містять 10^{23} атомів та більше. Отже, хоча моделювання використовуються для вивчення тертя на атомарному рівні та зробили хорошу роботу для забезпечення розуміння цього процесу, проте вони все ще обмежені просторовими та

часовими масштабами, які значно менші більшості експериментальних значень. Інтенсивний розвиток паралельних обчислень, зокрема з використанням *graphic processing units*, може значно послабити вказані обмеження.

Для атомістичного моделювання матеріалу необхідні математичні вирази його потенційної енергії. У програмі *SurfaceGrowth* використовуються емпіричні потенціали, в яких передбачається, що потенціальна енергія атомів може бути представлена як функція лише їх відносних положень. Тут слід зазначити, що для обчислення потенційної енергії атома та відповідно сили, що діє на нього, необхідно розрахувати відстані до всіх інших атомів. У зв'язку з відсутністю далекодіючих внесків для багатьох потенціалів можна пропустити розгляд віддалених сусідів для даного атома, і часто вводиться радіус відрізка r_c . Атоми, відстань до яких менше r_c , дають внесок у енергію та силу для розглянутого атома, а інші атоми - ні. Однак простий перебір всіх атомів та порівняння відстані до них з r_c - так званий метод всіх пар (див. ліву частину Рис. 2.2) - призводить до того, що кількість обчислень зростає пропорційно N^2 , де N - кількість атомів. Це робить метод всіх пар непридатним для великих систем.

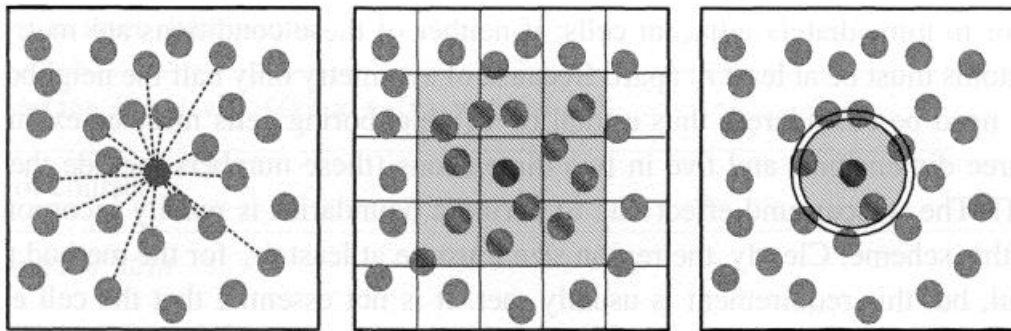


Рис.2.2 - Схематичне зображення підходів до обчислення взаємодій: всі пари, поділ на комірки, список сусідів.

Розроблено інші методики, зокрема метод комірок та використання списку сусідів (відповідно центральний та правий малюнки на Рис. 2.2), що дають лінійне збільшення обчислювальних витрат з N .

У першому методі область моделювання розділяється на комірки розміром не менше r_c . Тоді, якщо атоми потрапляють в комірку на основі їх поточних координат, то очевидно, що взаємодії можливі лише між атомами, що перебувають у одній і тій же комірці або у безпосередніх сусідніх. Якщо жодна з цих умов не виконується, то відстань між атомами дорівнює, як мінімум, r_c , та такі атоми не вносять внесок у силу та енергію і можуть не розглядатись.

У методі списку сусідів враховується те, що лише мала частка атомів, що перебираються в методі комірок, лежить всередині радіусу взаємодії. Тому спочатку, використовуючи метод комірок, будується список пар сусідів, що не тільки вносять внесок у силу та енергію, але також і деякої кількості атомів, що знаходяться безпосередньо за межами радіуса взаємодії.

Для цього радіус відсічки r_c , при порівнянні міжатомних відстаней, замінюється на:

$$r_n = r_c + \Delta r. \quad (2.3)$$

Далі, базуючись на тому, що мікроскопічне середовище змінюється повільно, цей список використовується протягом кількох послідовних часових кроків. Список сусідів залишається дійсним зазвичай на 10-20 часових кроках, навіть для відносно малих r . Той факт, що список містить пари атомів, що лежать поза радіусом взаємодії, гарантує, що протягом даної послідовності часових кроків не можуть з'явитися нові пари, що взаємодіють, які не були додані до списку сусідів. Один з можливих критеріїв оновлення списку може

бути заснований на спостереженні за максимальною швидкістю атомів на кожному кроці, очікуючи, доки не буде виконано певну умову.

$$\sum_{steps} \left(\max_i |V_i| > \frac{\Delta r}{2\Delta r} \right),$$

(2.4)

Після цього список оновлюється. Важливо зазначити, що оскільки оновлення списку не відбувається на кожному кроці, то зазвичай використання списку сусідів дає приріст продуктивності в кілька разів (для деяких задач до 7) порівняно з методом комірок.

2.2 Реалізація молекулярної динаміки на graphic processing units

Починаючи з цього розділу і далі в документі використовуються два терміни - хост (host), що означає центральний процесор та його адресний простір пам'яті, і девайс (device).

У роботах [14,15,16] представлені алгоритми та результати моделювання простих рідин, атоми яких взаємодіють один з одним за допомогою парного потенціалу Леннарда-Джонса. Отримані результати у всіх вказаних роботах показують в середньому прискорення від 10 до кількох десятків разів порівняно з одним центральним процесором (у всіх роботах використовувалися центральні процесори приблизно однакової продуктивності та GPU NVIDIA GeForce™ 8800 GTX). Однак слід зазначити особливості реалізацій алгоритмів. У [14] розрахунок взаємодій ґрунтується на методі комірок, алгоритм повністю реалізований на девайсі, без проміжного копіювання даних на хост.

Формування комірок (називається "binning") відбувається з використанням методики подвійного буфера. Автори [14] повідомляють про час розрахунку, що дорівнює 20 мс для 100000 частинок, отриманому на graphic processing units GeForce 8800 GTX. У [15], незважаючи на використання списку сусідів, а не методу комірок як у [14], та також виконання коду на девайсі, отримано найнижче прискорення. Це пов'язано з використанням методу всіх пар, а не комірок для формування списку сусідів, а також з неоптимальним використанням пам'яті (не враховані "з'єднані запити" до глобальної пам'яті, "coalesced reads"). У [16] представлені алгоритми, також як і у [15], засновані на використанні списку сусідів, але у яких на відміну від [15] список сусідів формується з використанням комірок, та враховані тонкощі роботи з пам'яттю. Автори відзначають, що їхній алгоритм працює приблизно в 3 рази швидше, ніж у роботі [14], даючи менш ніж 10 мс за один крок для 100000 частинок на GeForce 8800 GTX. Однак суттєвим недоліком роботи [16] є те, що не увесь код виконується на graphic processing units. А саме, binning відбувається на хості, тобто координати атомів копіюються з девайса на хост, а потім після виконання binning знову на девайс, що займає додатковий час, який для великих систем може бути значним. Автори пояснюють свій підхід тим, що для реалізації методики подвійного буфера формування комірок, реалізованої в [14], у них не було часу. А реалізація альтернативного методу, який можливий, але не описаний в їхній роботі, потребує використання атомних функцій, які не підтримуються graphic processing units серії 8800 GTX.

У SurfaceGrowth, виходячи з розглянутих результатів, обрано використання списку сусідів, і за основу взяті алгоритми, описані в [16]. Але оскільки розробка додатку проводилась на graphic processing units NVIDIA GeForce™ GTX 260, що підтримує атомні функції, то формування комірок (binning) здійснюється на graphic processing units з використанням спеціально

розробленого алгоритму, що базується на атомних операціях. Це дозволяє уникнути копіювання координат на хост та сприяє прискоренню роботи додатку. У роботі [16] також присутня сортування координат атомів, що дозволяє прискорити алгоритм для великих систем. У даній реалізації SurfaceGrowth сортування відсутнє.

2.3 Опис системи

У цьому розділі наведені особливості моделі, яка є основою роботи SurfaceGrowth.

2.3.1 Потенціали взаємодії

Як відзначалося вище, в класичній молекулярній динаміці ключову роль для моделювання того чи іншого матеріалу відіграє потенціальна енергія взаємодії атомів V . Для металів в SurfaceGrowth використовується емпіричний багаточастинний потенціал, заснований на методі вбудованого атома (embedded atom method) та реалізований у роботі [17]. Він був розроблений для моделювання сплавів та повністю виражений через аналітичні функції, на відміну від перших версій embedded atom method, де для функції вбудовування (embedding function) використовувалися кубічні сплайни [13].

У embedded atom method потенціальна енергія V кристала може бути виражена наступним чином [17]:

$$V_{eam} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (2.5)$$

де φ_{ij} представляє парну енергію між атомами i та j , розділеними відстанню r_{ij} , а F_i означає енергію вбудовування, необхідну, щоб помістити атом i в локальну позицію з електронною щільністю ρ_i . ρ_i розраховується наступним чином:

$$\rho_i = \sum_{j, j \neq i} f_j(r_{ij}), \quad (2.6)$$

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

Загальний парний потенціал має такий вигляд:

$$\varphi(r) = \frac{A \exp[-\alpha(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - k)^{20}} - \frac{B \exp[-\beta(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - \lambda)^{20}}, \quad (2.7)$$

де r_e - рівноважна відстань між найближчими сусідами, A , B , α , β - підгоночні параметри, а k , λ - два додаткових параметра для обрізки.

Функція електронної щільності має таку ж форму, як притягуючий член у парному потенціалі з тими ж значеннями β та λ , тобто:

$$f(r) = \frac{f_e \exp[-\beta(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - \lambda)^{20}}. \quad (2.8)$$

Для того, щоб функція вбудовування F працювала для широкого діапазону значень електронної щільності, використовуються три рівняння для

кожного з наступних інтервалів: $\rho < \rho_n$, $\rho_n \leq \rho < \rho_o$ і $\rho_o \leq \rho$. Використовуючи $\rho_n = 0.85\rho_e$, де ρ_e - рівноважна електронна щільність, можна бути впевненим, що всі рівноважні властивості можуть бути отримані в діапазоні електронної щільності $\rho_n \leq \rho < \rho_o$. Для гладкої зміни енергії вбудовування потрібні рівняння, які дають однакові значення функції та її похідної на межах інтервалів. Ці рівняння мають вигляд:

$$\begin{aligned}
 F(\rho) &= F_{ni} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \quad \rho_n = 0.85\rho_e, \\
 \sum_{i=0}^3 F(\rho) &= \sum_{i=0}^3 F_i \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_o, \quad \rho_o = 1.15\rho_e, \\
 F(\rho) &= F_e \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^n, \quad \rho_o \leq \rho.
 \end{aligned}
 \tag{2.9}$$

Значення параметрів, що входять до всіх вказаних рівнянь, для 16 металів можна знайти у роботі [17], або для шести металів, перерахованих у розділі 2, - в кодї SurfaceGrowth. Величини щільностей та мас металів у SurfaceGrowth були взяті з книги [18], де також можна знайти інші характеристики металів.

Сила, що діє на металевий атом k з боку інших атомів металу, задається виразом:

$$f_k = - \frac{\partial V_{eam}}{\partial r_k} = - \sum_{j \neq k} \frac{d_\phi(r_{kj})}{dr} \hat{r}_{kj} - \sum_{i=1}^{N_m} \frac{\partial F_i}{\partial \rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial r_k}, \tag{2.10}$$

де N_m - повна кількість атомів металу, r_{kj} - одиничний вектор, спрямований від атома j до атома k . Вирази для похідних мають такий вигляд:

$$\frac{d\phi}{dr} = - \frac{A \exp[-\alpha \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right)]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - K \right)^{20}} \left[\alpha + \frac{20 \left(\frac{r}{r_e} - K \right)^{19}}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - K \right)^{20}} \right] \frac{1}{r_e} +$$

$$\frac{B \exp[-\beta(\frac{r}{r_e}-1)]}{1+(\frac{r}{r_e}-\lambda)^{20}} \left[\beta + \frac{20(\frac{r}{r_e}-\lambda)^{19}}{1+(\frac{r}{r_e}-\lambda)^{20}} \right] \frac{1}{r_e}, \quad (2.11)$$

$$\sum_{-1}^{N_m} \frac{\partial F_i}{\partial \rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial r_k} = \sum_{i=1, i \neq k}^{N_m} \frac{df(r_{ki})}{dr} \left(\frac{\partial F_i}{\partial \rho_i} + \frac{\partial F_k}{\partial \rho_k} \right) \hat{r}_{ki}, \quad (2.12)$$

$$\frac{df}{dr} = - \frac{f_r \exp[-\beta(\frac{r}{r_e}-1)]}{1+(\frac{r}{r_e}-\lambda)^{20}} \left[\beta + \frac{20(\frac{r}{r_e}-\lambda)^{19}}{1+(\frac{r}{r_e}-\lambda)^{20}} \right] \frac{1}{r_e}, \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho_n} \left[F_{n1} + 2F_{n2} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right) + 3F_{n3} \left(\frac{\rho}{\rho_n} \right)^2 \right], \rho < \rho_n, \rho_n = 0.85\rho_e, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho_e} \left[F_1 + 2F_2 \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right) + 3F_3 \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^2 \right], \rho_n \leq \rho < \rho_o, \rho_o = 1.15\rho_e, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} = - \frac{F_e \eta}{\rho_e} \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\eta-1} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^\eta, \rho_o \leq \rho. \quad (2.16)$$

Оскільки вирази для потенційної енергії металу та сили, що діє на атом металу, складаються з двох частин - парної, що залежить від відносного положення атомів, та частини, що залежить від електронних щільностей всіх атомів, окрім даного, то розрахунок V_{eam} та сили здійснюється в два етапи. Спершу розраховується електронна щільність для кожного атома, а потім - зазначені величини.

Потенціальна енергія V_C взаємодії атомів вуглецю в шару графену описується пружинним потенціалом з роботи [19] наступного вигляду:

$$V_C = \frac{1}{2} \sum_{i-j} \mu_r (r_{ij} - r_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i-j-k} \mu_\theta r_0^2 (\theta_{ijk} - \theta_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i-(j,k,l)} \mu_\rho (\delta z_i - \frac{\delta z_j + \delta z_k + \delta z_l}{3})^2. \quad (2.17)$$

Сумування проводиться за ближніми сусідами, їх парами та триплетами, і значення параметрів можна знайти у [19]. Тут ми лише записали вираз для сили, що діє на атом i вуглецю з боку інших атомів вуглецю в шарі:

$$\begin{aligned}
f_i = & - \sum_{i-j} \mu_r (r_{ij} - r_0) \frac{R_{ij}}{r_{ij}} + \sum_{j \neq i, k \neq i} \mu_0 r_0^2 (\theta_{jik} - \theta_0) \left[1 - \left(\frac{R_{ji} R_{ki}}{r_{ji} r_{ki}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} X \\
& \frac{\left(1 - \frac{r_{ji}}{r_{ki}} \cos \theta_{jik} \right) R_{ik} + \left(1 - \frac{r_{ki}}{r_{ji}} \cos \theta_{jik} \right) R_{ij}}{r_{ji} r_{ki}} \\
& + \sum_{j \neq i, k \neq i} \mu_0 r_0^2 (\theta_{ijk} - \theta_0) \left[1 - \left(\frac{R_{ij} R_{kj}}{r_{ij} r_{kj}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} X \\
& \left[\frac{R_{kj}}{r_{ij} r_{kj}} - \frac{(R_{ij} R_{kj})}{r_{ij}^3 r_{kj}} R_{ij} \right] - \sum_{j,k,l} \frac{2}{3} \mu_\rho [2\delta z_i - (\delta z_j + \delta z_k + \delta z_l)] - \\
& \frac{1}{9} \mu_\rho \sum_{m,n} (\delta z_m + \delta z_n). \tag{2.18}
\end{aligned}$$

У останній сумі індекси m, n означають сусідів атома i , які йдуть після найближчих. Таким чином, при розрахунку сили з пружинного потенціалу потрібно розглядати не тільки трьох найближчих сусідів в шарі графену, а також сусідів найближчих сусідів, що враховано у коді програми.

Взаємодія метал-вуглець описується потенціалом Леннарда-Джонса:

$$V_{LJ} = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], & r < r_c, \\ 0, & r \geq r_c \end{cases} \tag{2.19}$$

де за замовчуванням значення параметрів ϵ та σ вибрані, як у роботі [19], проте інтерфейс додатку дозволяє задавати ці значення. Відстань відсічення дорівнює $r_c = 2.5\sigma$. Варто зазначити, що для ЕАМ потенціалу використовується відстань відсічення $r_c = 1.45a$, де a - постійна решітки металу.

2.3.2 Безрозмірні одиниці

У SurfaceGrowth використовуються такі одиниці вимірювання:

маси: маса вуглецю $m_0 = 19.9441 \cdot 10^{-27}$ кг;

довжини: довжина ковалентного зв'язку в графені $a_0 = 1.42$ Å;

часу: $t_0 = 0.2$ ps;

енергії: $\epsilon_0 = \frac{m_0 a^2}{t_0^2} = 6.275049 \cdot 10^{-2}$ eV;

температури: 1 К безрозмірний дорівнює 0.001373;

сили: 1 nN безрозмірний дорівнює 14.123984.

2.3.3 Контроль температури

Звичайна молекулярна динаміка відрізняється від більшості експериментальних досліджень тим, що у моделюванні фіксованими є повна енергія E та об'єм V , а не температура T та тиск P . В термінах статистичної механіки звичайна молекулярна динаміка надає середні значення з мікроканонічного ансамблю NVE (де N - кількість молекул), тоді як експерименти з постійною температурою відповідають канонічному ансамблю NVT .

Для проведення моделювань, близьких до експериментів, необхідно використовувати канонічний ансамбль, тож підтримувати постійну температуру. Оскільки зовнішніми силами над системою виконується робота, то підтримання постійної температури означає вибір методу відведення зайвого тепла або з'єднання системи з термостатом. У SurfaceGrowth використовується термостат Берендсена [20], який, хоча не дає траєкторії справжнього канонічного ансамблю, простий у виконанні.

Термостат Берендсена передбачає, що температура T системи експоненційно наближується до потрібної температури T_0 за час релаксації τ_T , тобто:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{T_0 - T}{\tau_T}. \quad (2.20)$$

У дискретному вигляді (2.20) має такий вигляд:

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{h} = \frac{T^n}{\tau_T} (T_0 - 1), \quad (2.21)$$

де h - часовий крок, T^n та T^{n+1} - температура на поточному та на наступному часовому кроці відповідно. Зв'язок між T та кінетичною енергією системи має вигляд:

$$T = \frac{2}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2}, \quad (2.22)$$

тут N - кількість частинок, k_B - постійна Больцмана, m_i та v_i - відповідно маса та швидкість частинки. Позначаючи швидкість частинки на поточному та

наступному кроці через v_i^n та v_i^{n+1} та підставляючи рівняння (2.21) в (2.22), маємо (припускаючи, що частинки одного виду):

$$\frac{\sum_{i=1}^N (v_i^{n+1})^2 - \sum_{i=1}^N (v_i^n)^2}{h} = \sum_{i=1}^N \frac{(v_i^n)^2}{\tau_T} \left(\frac{T_0}{T^n} - 1 \right). \quad (2.23)$$

Для частинки i можна записати:

$$(v_i^{n+1})^2 = (v_i^n)^2 \left[1 + \frac{h}{\tau_T} \left(\frac{T_0}{T^n} - 1 \right) \right]. \quad (2.24)$$

Отже, реалізація термостату Берендсена зводиться до перемасштабування швидкостей, тобто $v_i^{n+1} = \beta v_i^n$. Проте множник β не є постійним, а залежить від поточного значення температури.

$$\beta = \sqrt{1 + \gamma \left(\frac{T_0}{T^n} - 1 \right)}, \quad (2.25)$$

де $\gamma = h/\tau_T \in [0; 1]$. Якщо поточна температура T^n вища за необхідну T_0 , то $\beta < 1$ і v_i^{n+1} зменшується. А якщо $T^n < T_0$, то $\beta > 1$ і v_i^{n+1} збільшується. Нагадаємо, що γ характеризує швидкість дисипації тепла. Чим більше γ наближається до 1, тобто чим менше τ_T , тим швидше тепло дисипується і, відповідно, сильніше зв'язок системи з термічною ванною. У SurfaceGrowth вибрано значення $\gamma = 0.005$, що відповідає відносно слабкому зв'язку з термостатом.

Варто зазначити, що масштабування швидкостей може вплинути на розподіл енергії в системі. Щоб зменшити цей вплив, в програмі

використовується реалізація термостата Берендсена, описана в роботі [13], де швидкості перемножуються не кожен часовий крок, а кожні k кроків, а в проміжні кроки система інтегрується без масштабування. У SurfaceGrowth $k = 25$, щоб встановилась "рівновага" між потенційною та кінетичною енергіями системи.

Рівняння руху інтегруються методом Верле (leapfrog method), описаним в [12]. Величину часового кроку можна вибирати, вона вказується в безрозмірному вигляді.

2.3.4 Режими

Як відзначалося раніше, в SurfaceGrowth моделювання проводиться в одному з трьох режимів: Bulk, Surface Growth, Shear. Вони відрізняються один від одного складом атомів, їх початковим розташуванням, порядком обчислень та можливостями вимірювання. Варто зазначити, що всім трьом режимам притаманні загальні і специфічні параметри, необхідні для проведення моделювання, які задає користувач. Також можливо вимірювати як параметри, присутні в усіх режимах (і називаються "загальними параметрами"), так і специфічні для кожного з режимів.

Розглянемо особливості кожного з режимів.

Режим Bulk. Даний режим призначений для моделювання об'ємних властивостей металу. Використовуються тільки атоми металу (без графену), вони розташовуються в вершинах ГЦК решітки, по всім координатним напрямкам (x , y , z) застосовуються періодичні граничні умови. Термостат

відсутній, тобто підтримуються умови мікроканонічного статистичного ансамблю з постійними N (число атомів), V (об'єм зразка), E (повна енергія системи). У режимі Bulk моделювання протікає в рівноважних умовах, і можна проводити вимірювання загальних параметрів та функції радіального розподілу (radial distribution function), деталі вимірювань наведені в наступному розділі. Призначення режиму Bulk - перевірка правильності загального алгоритму молекулярної динаміки та розрахунку embedded atom method потенціалу - енергії зв'язку та атомних конфігурацій, а також правильності роботи reduction. Це обумовлено тим, що в умовах даного режиму повна енергія повинна бути постійною, повний імпульс повинен бути рівним 0, і ці значення повинні зберігатися по ходу обчислень.

Режим Surface Growth. Початково планувалося, що програма SurfaceGrowth буде повністю відтворювати експерименти з дослідження тертя металевих наночастинок, в яких наночастилки отримуються напиленням атомів металу на поверхню, а потім зсуваються за допомогою атомного силового мікроскопа [5]. Однак з ряду причин на поточному етапі розробки програми дана мета не реалізована, і введені два режими Surface Growth та Shear.

Про Shear буде розказано далі. У режимі ж Surface Growth можна досліджувати напилення атомів обраного металу на шар графену в залежності від енергії напилення атомів металу, від температури, щільності потоку напилюваних атомів та від параметрів взаємодії метал-вуглецю.

Алгоритм перебігу обчислень в режимі Surface Growth складається з наступного. Задаються розміри графенового шару та кількість атомів металу. Спочатку в області моделювання присутній лише шар графену, розташований паралельно площині xy , і атоми металу знаходяться поза областю моделювання та не взаємодіють між собою. Періодичні границі застосовуються в площині xy .

Крайні атоми по периметру в шарі графену жорстко закріплені, щоб шар не зсувався в вертикальному напрямку, паралельному осі z . Після періоду вирівнювання (equilibration), тривалість якого задається користувачем, та під час якого досягається задане користувачем значення температури шару графену, через задане користувачем число часових кроків відбувається введення атомів металу в область моделювання над шаром графену групами, розмір яких також задається користувачем. Введені атоми мають випадкові координати в площині xy , їх координата z визначається розмірами області моделювання.

Компоненти x , y початкових швидкостей внесених атомів металу рівні 0, а z компонента спрямована до шару графену (проти осі z) і її значення визначається виразом:

$$v_{0z} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{dep}}{m}}, \quad (2.26)$$

де ε_{dep} - енергія напилюваних атомів, задавана користувачем, m - маса атома металу.

В режимі Surface Growth можна проводити вимірювання загальних параметрів. Зазначимо, що термостат Берендсена, який використовується для відведення тепла, прикладається лише до атомів вуглецю, і занадто інтенсивне бомбардування шару графену призведе до його перегріву та руйнування. Тому даному режиму потрібен дуже ретельний відбір значень параметрів, оскільки високі значення енергії атомів або щільності потоку приводять до руйнування шару графену.

Режим Shear. У цьому режимі відбувається дослідження тертя на наночастинках. Користувач задає розміри шару графену та кількість атомів металу. Як і в попередньому режимі, шар графену лежить в площині xy , в якій

застосовані періодичні границі, а крайні атоми периметру шару графену жорстко закріплені, щоб шар не зміщувався в вертикальному напрямку, паралельному осі z . Атоми металу розміщуються над шаром графену в вершинах ідеальної ГЦК решітки. Початкові швидкості атомів металу дорівнюють 0. Протягом періоду вирівнювання, заданого користувачем, система еволюціонує без відводу тепла, тобто термостат не застосовується ні до атомів металу, ні до атомів вуглецю. На цьому етапі атоми перебудовуються в конфігурацію, що відповідає мінімуму потенційної енергії, при цьому відбувається нагрів системи внаслідок виділення енергії зв'язку. Якщо взаємодія метал-графен набагато слабша, ніж метал-метал, то конфігурація з мінімальною енергією має форму кулі. Однак, оскільки площа контакту сферичних наночастинок з графеном досить мала, а у експериментах наночастинки не сферичні, то бажано зупинити формування кулі в потрібний момент часу. У SurfaceGrowth ця зупинка здійснюється за допомогою застосування термостата Берендсена як до металу, так і до графену після часу вирівнювання. Термостат застосовується протягом часу, заданого користувачем, а потім тепло відводиться тільки від графену до кінця моделювання. Відразу після вимкнення термостата до атомів наночастинки, розташованим ліворуч від її центру мас (за віссю x), починає прикладатися сила вздовж напрямку x , імітуючи зсув, який має місце в експериментах. Дана сила збільшується кожен часовий крок на величину, задану користувачем, доки швидкість центра мас наночастинки не досягне значення, рівного 0,005 (у безрозмірних одиницях). Після цього до атомів вже прикладається постійна сила, і частинка зсувається під дією практично постійної сили.

У режимі Shear можна проводити вимірювання загальних параметрів, а також різних характеристик наночастинки: швидкості та положення центра мас, сил тертя та зсуву, розмірів, а також структури. Варто зазначити, що в цьому

режимі важливим є вибір тривалості вирівнювання, яка визначає форму та структуру наночастинки, і, відповідно, площу контакту. Так, занадто короткий період призведе до наночастинки з кристалічною структурою та прямокутної форми. Також варто зазначити, що ці періоди залежать від типу металу, оскільки для важких металів, наприклад свинцю, атоми перебудовуються набагато повільніше легких (наприклад, алюмінію).

2.3.5 Вимірювання

Як вказано в попередніх розділах, програмою можна вимірювати різні параметри системи: загальні параметри та характеристики наночастинки. Якщо користувач зробив відповідний вибір, то загальні параметри виводяться у текстовий файл через вказану користувачем кількість часових кроків. Це число також визначає інтервал, на якому проводиться усереднення величин. За допомогою текстового файлу з даними можна будувати графіки залежностей величин за допомогою різних плоттерів (Grapher, Origin, Sigma Plot і т. д.). До загальних параметрів належать (назви, наведені нижче, відповідають заголовкам стовпців у файлі з результатами):

- `stepCnt` - кількість часових кроків, що минули від початку моделювання;
- `impulse` - повний імпульс системи;
- `totEn (eV)`, `totEn.rms (eV)` - повна енергія системи та її середньоквадратичне відхилення (в електрон-вольтах) протягом періоду усереднення. Повна енергія дорівнює сумі потенціальної та кінетичної енергій всіх атомів;
- `potEn (eV)`, `potEn.rms (eV)` - потенціальна енергія системи та її середньоквадратичне відхилення (в електрон-вольтах). Дорівнює сумі потенціальних енергій всіх атомів;

- $Temp_r$ (K), T_{rms} (K) - температура системи та її середньоквадратичне відхилення (в градусах Кельвіна) протягом періоду усереднення. Розраховується, виходячи з кінетичної енергії атомів за допомогою рівняння. Також в режимі Shear при розрахунку суми квадратів швидкостей віднімається швидкість центра мас від швидкості кожного атома металу, щоб уникнути цей внесок до температури;
- $oneStep$ (ms) - середня тривалість розрахунку одного часового кроку в мілісекундах.

Більшість характеристик наночастинки виводиться в той самий текстовий файл, що і загальні параметри. До характеристик належать:

- $Veloc_CM$ - швидкість центру мас наночастинки вздовж напрямку x (в безрозмірних одиницях);
- CM (angstr) - координата центру мас наночастинки вздовж напрямку x (в ангстремах). Початок координат знаходиться в центрі області моделювання;
- $friction$ (nN) - сила тертя, що діє на частинку (в наноньютонах). Вона дорівнює x компоненті сили, що діє на атоми металу з боку атомів вуглецю;
- $size_x$ (angstr), $size_y$ (angstr), $size_z$ (angstr) - розміри частинки вздовж напрямів x , y , z (в ангстремах). Визначаються як різниці між максимальними та мінімальними значеннями координат атомів вздовж відповідного напрямку;
- $shearForce$ (nN) - повна сила зсуву, яка діє на наночастинку (в наноньютонах). Дорівнює добутку значення сили зсуву, що діє на один атом, на кількість атомів, які знаходяться лівіше центру мас наночастинки.

Вимірювання характеристик наночастинки проводиться в усіх режимах, якщо задане відмінне від нуля число атомів металу. При нульовому числі атомів металу ці характеристики дорівнюють нулю. Однак треба розуміти, що повний

зміст зазначених характеристик мають лише в режимі Shear. У режимі Bulk вся система фактично відповідає наночастинці, параметри `Veloc_CM`, `CM (angstr)` дають ще одну можливість перевірити правильність роботи `reduction`, оскільки їх значення мають бути близькі до нуля, а `sizeX(angstr)`, `sizeY(angstr)`, `sizeZ(angstr)` показують розміри системи. У режимі Surface Growth характеристики наночастинки в більшості випадків не несуть змісту. Тільки якщо в результаті наплення утворюється повний шар, то лише після цього можна використовувати зазначені величини для його характеристики.

Окрім зазначених параметрів наночастинки також можна спостерігати за її структурою шляхом вимірювання функції радіального розподілу $g(r)$ (radial distribution function). Яка показує ймовірність знайти сусідній атом на певній відстані відносно даного атома. У SurfaceGrowth користувач задає крок, через який проводиться вимірювання $g(r)$ за спеціальним алгоритмом. Після проведення 100 таких вимірювань отримані результати усереднюються і виводяться в окремий файл у вигляді гістограми, що показує частоту потрапляння атома в один з 200 інтервалів, на які розбивається відстань розміром приблизно $7,5 \text{ \AA}$. Також слід зазначити, що у режимах Bulk і Shear RDF є повноцінною характеристикою. Однак в режимі Surface Growth вона в більшості випадків не є точною характеристикою структури металу.

Окрім зазначених характеристик програма SurfaceGrowth дозволяє періодично (інтервал задається користувачем) зберігати координати всіх атомів у форматі Protein Data Bank, в файл з розширенням `.pdb` з метою подальшої візуалізації систем. Формат Protein Data Bank підтримується програмами, що спеціалізуються на візуалізації молекул. Зокрема для візуалізації системи на основі `.pdb` файлів, отриманих за допомогою SurfaceGrowth, рекомендується використовувати програму Visual Molecular Dynamics [8], доступну для вільного

використання і також передбачає можливість використання технології NVIDIA CUDA TM.

У даному дослідженні, основою атомістичного розгляду трибологічних процесів металевих наночастинок є метод класичної молекулярної динаміки. Модель симуляції була побудована з металевої наночастинок з 10000 атомів, яка зсувається по графеновій підкладці зі структурою 64×64 вузлів або $64 \times 64 \times 32 = 65536$ атомів вуглецю. Обчислення проводились на відеокарті NVIDIA GeForce GTX 750. Для створення програми та проведення розрахунків були використані Microsoft Visual Studio 2008, NVIDIA CUDA SDK та NVIDIA CUDA Toolkit 3.2. Графенова підкладка має фіксовані грані зігзагоподібної та аміачної форми вздовж осей x та y , і паралельна x та y площині. Вона фіксована тільки на гранях протягом всієї симуляції, підкладка може бути перекручена (наприклад, вигнута під вагою наночастинок). Для поліпшення моделі використовуються реалістичні напівемпіричні потенціали міжатомної взаємодії, які добре відображають властивості вибраних матеріалів. Взаємодія атомів вуглецю описується гармонійним потенціалом [24]. Сили взаємодії між металевими атомами описуються потенціалом моделі вбудованого атома [25]. Для зображення взаємної енергії між металевими атомами наночастинок та графенової підкладки використовується потенціал Леннарда-Джонса з енергією $0,008738$ eV та параметром довжини $0,24945$ нм [26,27], який є еквівалентним для різних металів [14-16]. Параметри для потенціалу Леннарда-Джонса були взяті з дослідження [24]. У статті зазначено, що цей потенціал взаємодії з вказаними параметрами добре описує амплітуду зігнування зображень атомного мікроскопу сил на графіті. Для інтегрування руху використовується метод Верле [28]. Часовий крок визначається як $0,2$ fs. Симуляція має три стадії: агломерацію, охолодження та рух наночастинок. Спочатку металеві атоми упаковуються у гранцеву кубічну решітку та розташовуються над графеновою

площиною. Потім на першому етапі знищується кристалічна решітка металу та відбувається агломерація у наночастинку з виділенням тепла. Наночастинка стає аморфною. Друга стадія називається охолодженням, на цьому етапі застосовується термостат Берендсена, і відбувається видалення надлишкового тепла [26,27,29]. Коли температура падає до передбаченого значення, починається утворення нової полікристалічної структури. Третій етап - рух наночастинки, поширення сили F_a та моделювання тиску наночастинки верхньою площиною атомного мікроскопу. Силу зсуву застосовують до кожного атома, розташованого у виділеному секторі вздовж напрямку, визначеного кутом θ , який вираховується відносно напрямку x . Сектори утворюються і діляться діагональною лінією F_a , кути рівні 90 забезпечують приблизно однакову кількість атомів в кожній половині сектора, симетрично розташованих відносно напрямку застосованої сили F_a . Нульовий момент сили відносно центра мас наночастинки в площині xy забезпечується описаною вище геометрією наночастинки. Таким чином, уникнуто обертання наночастинки в цій площині. Не моделюється обертання наночастинки, щоб забезпечити рух уздовж поверхні графену. Загальна результативна сила тертя, що діє на наночастинку, визначається наступним чином:

$$F = \sqrt{F_x^2 + F_y^2}, \quad (2.27)$$

де F_x та F_y - компоненти сили тертя вздовж відповідних осей. Силу тертя вимірюють для таких кутів: 15, 22,5, 30, 37,5, 45, 52,5, 60, 67,5. Типовий знімок молекулярної динаміки, отриманий за допомогою програмного забезпечення Visual Molecular Dynamics. Швидкість наночастинок змінюється від 1 м/с до 9,8 м/с в обох напрямках x ; y . Застосовувана сила коливається від 2,4 nN до 2,9 nN.

Розміри наночастинок такі: для алюмінію приблизно $6,0 \times 7,8 \times 6,4$ nm (для $L_x \times L_y \times L_z$ відповідно); для паладію - $7,4 \times 6,3 \times 5,8$ nm; для платини - $6,0 \times 6,9 \times 6,5$ nm.

2.4 Результати

На рисунках 2.3, 2.4 та 2.5 представлено силу тертя для трьох значень температури при різних кутах застосованої сили. Ми зауважуємо, що протягом руху наночастинок застосована сила F_a є сталою, як показано на рис. 2.3. Наприклад, в разі наночастинок Pd при 100 K та куті 45° $F_a = 2,51$.

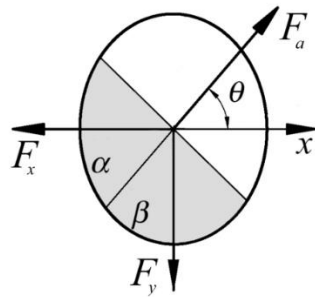


Рис. 2.3 - Схема сил, що діють на наночастинку під час зсуву по графеновій підкладці.

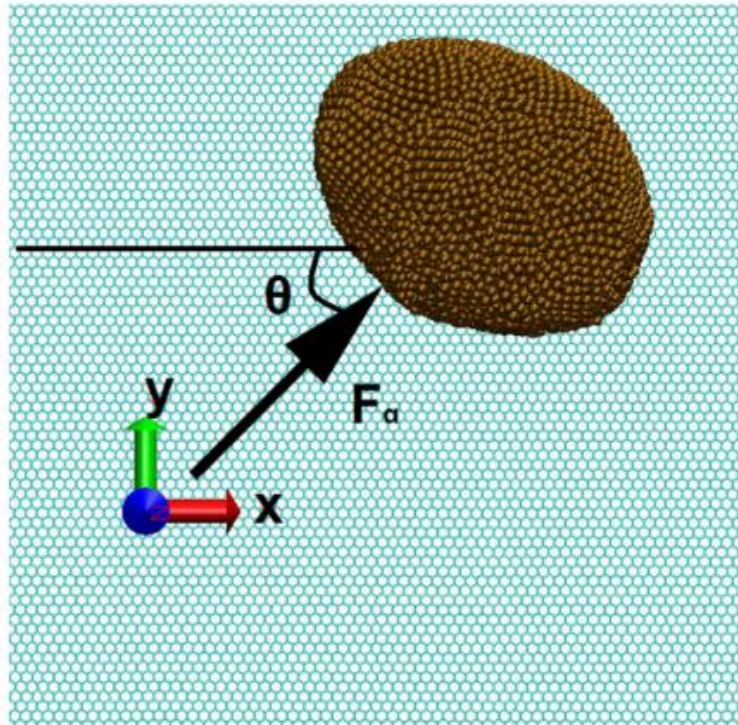


Рис. 2.4 - Верхній вид системи з наночастинкою Al, що містить 10000 атомів при $F_a = 45$ nN.

У наших розрахунках методом молекулярної динаміки наночастинки прискорюються, оскільки застосована сила взагалі не дорівнює силі підкладки. У статті [31] виявлено, що анізотропія тертя з періодом 180 зменшується зі збільшенням нормального навантаження через скручування графену. Порівняно з попереднім дослідженням наночастинок Ag та Ni [32], ми збільшили розмір сектора застосування сили F_a з 90 до 180 градусів, щоб зменшити деформацію наночастинки. Крім того, в даній роботі анізотропія розглядалась для 24 температур замість 7, та взято 8 кутів замість 7.

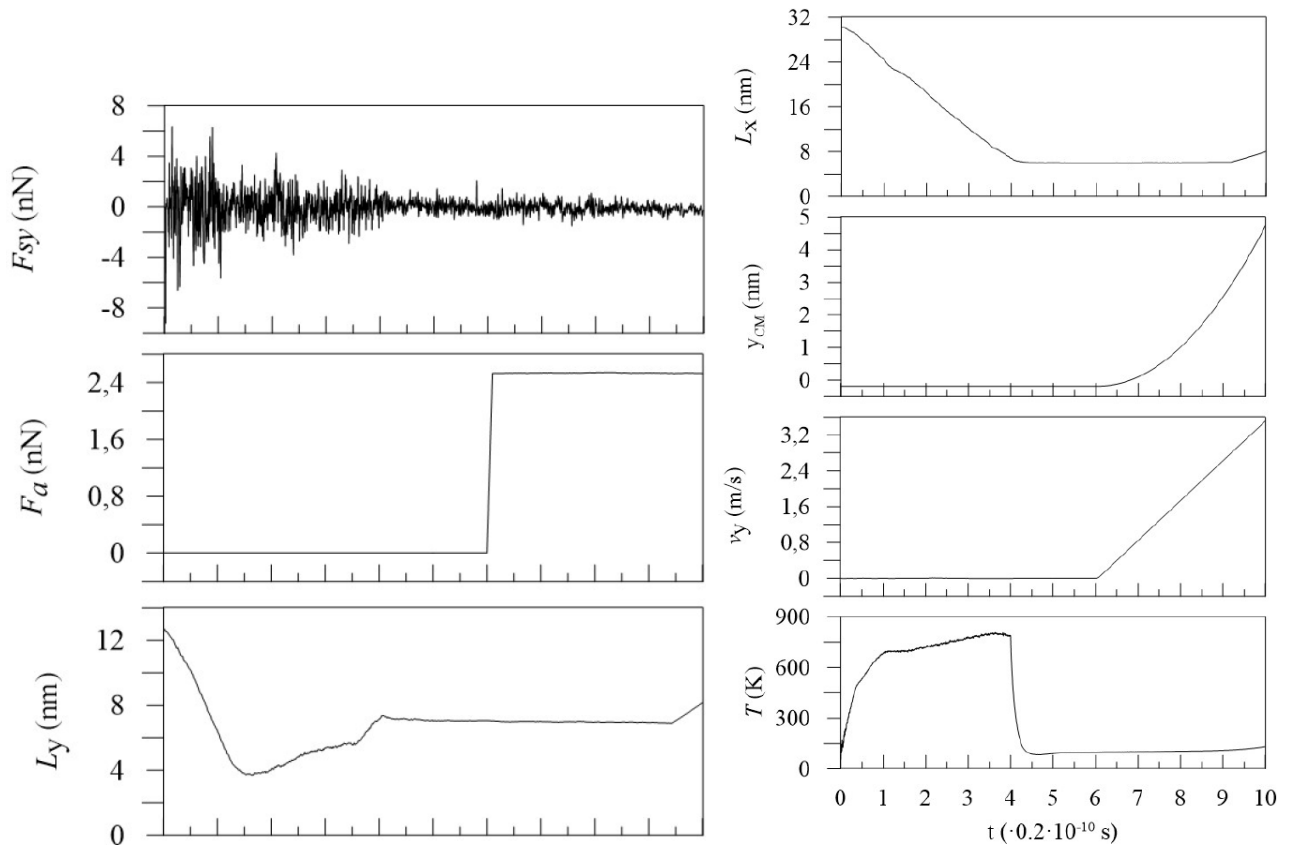


Рис. 2.5 - Залежності від часу величин.

Залежності від часу величин, виміряних для наночастинки платини з 10000 атомів при куті рівному 45 та зазначеній температурі 100 К: F_{sy} є силою підкладки; F_a - застосована сила; L_x , L_y - бічні розміри наночастинки в напрямках x ; y ; y_{CM} , v_y - компоненти розташування та швидкість центру мас наночастинки відповідно до напрямку y ; T - температура системи.

Використовувалися три різних інтервали. Ми вибрали маленький інтервал 0,5 К для статистики та для різних початкових умов. У зв'язку з відхиленням у $T=0,5$ К, ми обрахували середнє значення сили тертя оптимальну кількість разів з нашої точки зору (статистичні показники). Ми проводили симуляцію при $T=100, 200, 300$ К, але при 100 К середньоквадратичне відхилення коливань

температури після попередньої еквілібрації завжди менше за 0,5 К. Результати при $T = 100, 200, 300$ К кількісно та якісно співпадають. При 100 К система стабільніша щодо теплових коливань. Кожна точка на графіках - це середнє значення сили тертя протягом усього зсуву, а лінії є кубічними апроксимаціями відносно тільки сформованої наночастинки зі змінною контактною поверхнею. Це призводить до зміни тертя, але загальна тенденція залишається. Під загальною тенденцією ми маємо на увазі, наприклад, що у випадку наночастинки платини при 100 К сила тертя для 5 з 8 кутів змінюється в діапазоні від 0,175 nN до 0,189 nN, або у випадку наночастинки алюмінію при 100,5 К сила тертя для 4 з 8 кутів змінюється в діапазоні від 0,197 nN до 0,218 nN. Ці розрахунки показують, що сила тертя коливається близько деяких значень. Результати симуляції якісно збігаються з результатами He and Robbins [33,34]. Крім того, було виявлено аналогічний факт: на високих швидкостях руху, тертя, в основному, не залежить від кута, що більший за звукову швидкість твердого мастила. Тим не менш, ми можемо зауважити, що для платини мінімальні значення сил тертя наступні: 1) 0,1206 nN для 100 К під кутом 37,5; 2) 0,1353 nN для 100,5 К біля 22,5; 3) 0,1521 nN для 99,5 К під кутом 15. Мінімальні значення сили тертя для наночастинок алюмінію такі: 1) 0,0883 nN при 30 для 100 К; 2) 0,0987 nN при 15 для 99,5 К; 3) 0,1244 nN при 15 для 100,5 К. Для паладію спостерігаються наступні мінімальні сили тертя: 1) 0,091 nN біля кута 22,5 для 100 К; 2) 0,1096 nN при 22,5 для 100,5 К; 3) 0,1734 nN між 22,5 та 30 для 99,5 К.

У багатьох аналітичних теоріях, числових та напівчислових моделях досліджується роль структури поверхонь для тертя [3,7,36,37]. Зокрема, передбачається, що щільне тертя відбувається при терті упорядкованих співмірних поверхонь, подекуди повзучим рухом. Варто відзначити, що для трьох розглянутих типів наночастинок ([15,16]), реалізовані області

упорядкованих атомів («зерен»). Оскільки атоми металу взаємодіють значно сильніше за металеві та вуглецеві атоми графену, то бажано, щоб позначені поверхні металевих атомів не були співмірними з решіткою графену протягом всього руху. Області упорядкованих атомів повинні мати не співмірні поверхні вздовж площини зсуву.

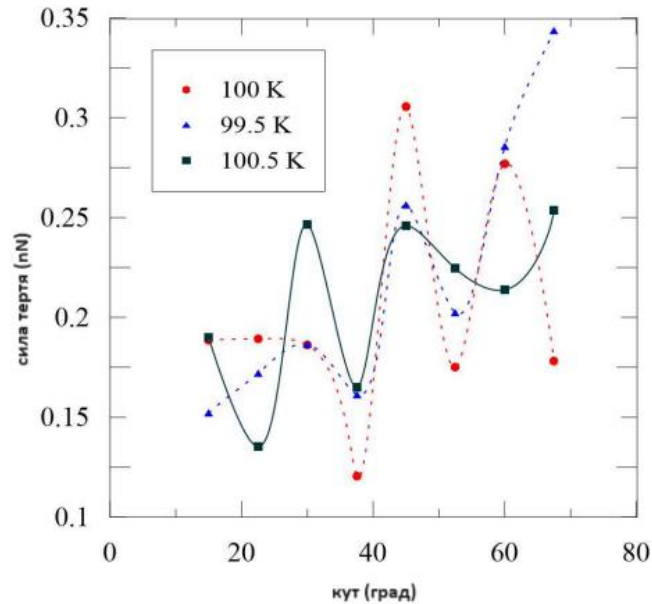


Рис. 2.6 - Анізотропія наночастинок платини, які містять 10000 атомів, при температурах 99,5, 100, 100,5 К.

Упорядковані атоми на нижній поверхні наночастинок розміщені випадково на контактній області і розділені безладними областями атомів. Вони можуть реконструюватися під час руху наночастинок. Кожна "зерниста" область може бути досліджена як заблоковані атоми і може призводити до флуктуацій тертя на атомному рівні. Тому ми можемо зробити висновок, що різні розташування кластерів на графеновій підкладці спричиняють різні енергії взаємодії і є причиною відсутності вираженої анізотропії тертя наночастинок. Спостерігається деякий локальний порядок на межі між підкладкою та наночастиною. Наноостровки впорядкованих атомних структур також доступні для наночастинок алюмінію та паладію. Варто також зазначити,

що впорядковані області металевих атомів не є співмірними з графеновою решіткою в будь-який момент зсуву.

У цій роботі описано та обговорено тертя наночастинок металів на графеновій підкладці. Можна зробити висновок, що при високих швидкостях руху сила тертя майже не залежить від кута зсуву. Візуальне оглядове дослідження нижніх поверхонь наночастинок Pt, Al та Pd показує, що вони є безладними та мають різноорієнтовані "зернисті" області з локальним атомним порядком. З цього випливає, що взагалі поверхні графену та наночастинок для трьох розглянутих металів є не співмірними, а великопросторовий порядок всередині "зерен" на поверхні наночастинок та решітці графену не може призвести до виразної залежності сили тертя від напрямку зсуву.

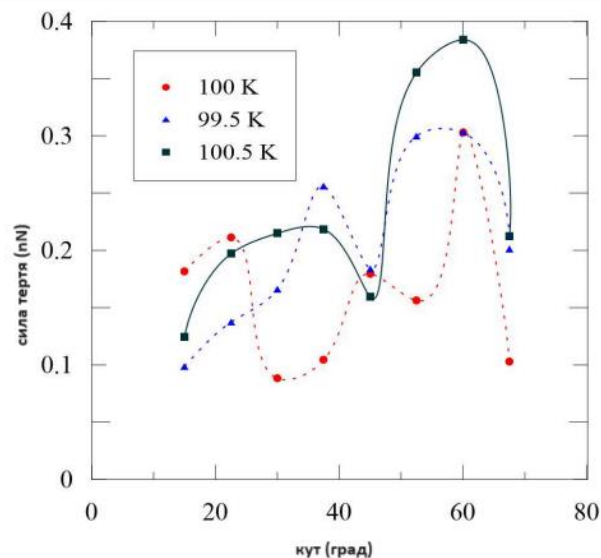


Рис. 2.7 - Анізотропія наночастинок алюмінію, що містять 10000 атомів, при температурах 99,5, 100, 100,5 К.

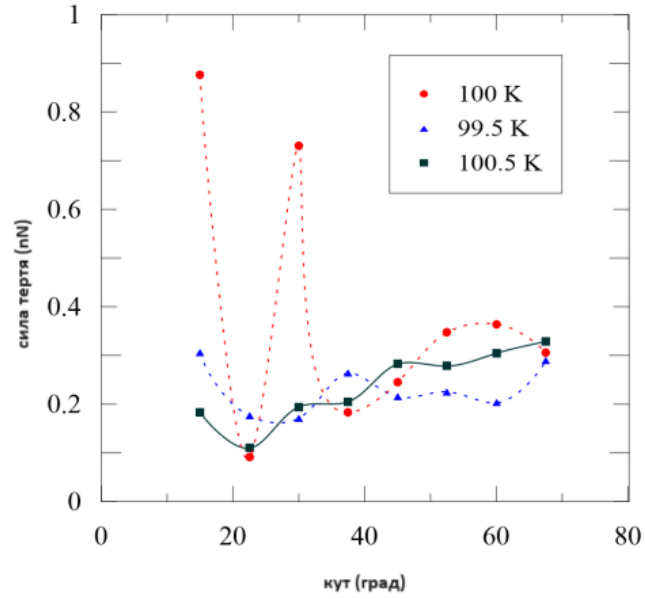


Рис. 2.8 - Анізотропія наночастинок паладію, які містять 10000 атомів, при температурах 99,5, 100, 100,5 К.

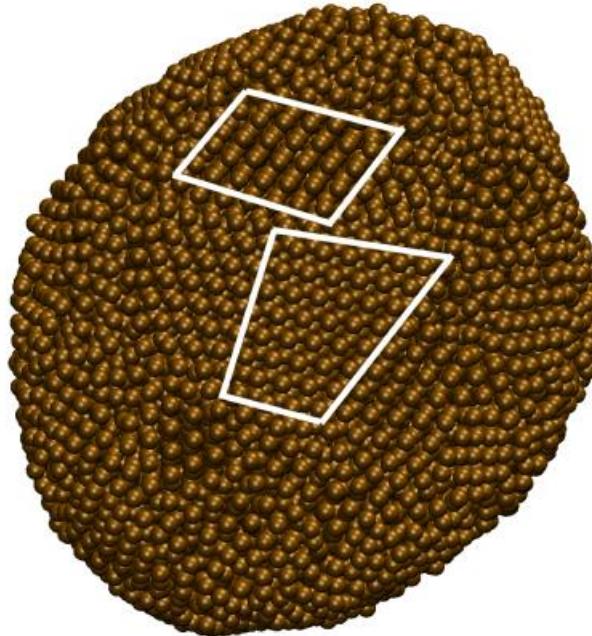


Рис. 2.9 - Вид знизу наночастинки платини, яка містить 10000 атомів при куті рівному 45 та температурі 100 К. Наноостровки з локальним порядком виділені білим контуром.

ВИСНОВКИ

1. Проведено моделювання методом класичної молекулярної динаміки тертя Pt, Al та Pd наночастинок, які адсорбовані на графені та піддані постійній зовнішній силі. Результати, отримані в цій роботі, підтверджують раніше одержані висновки про значну роль ближнього порядку атомів, які розташовані на поверхні наночастинок.

2. При високих швидкостях руху, тертя стає майже незалежним від кута зсуву. Візуальний огляд нижніх поверхонь наноострівців Pt, Al та Pd свідчить про те, що вони неупорядковані, тобто мають різно орієнтовані "зерна" з локальним атомним порядком. З цього випливає, що взагалі поверхні графену та наночастинок для трьох розглянутих металів несумірні, а дальній порядок всередині "зерен" на поверхнях наночастинок та решітці графену може не приводити до вираженої залежності сили тертя від напрямку ковзання.

3. Впорядковані домени атомів можуть бути джерелом локальної взаємодії третьових поверхонь, що приводить до пилкоподібної залежності сили підкладки від координати центра мас наночастинок. Функція сили підкладки має "тонку структуру", тобто вищі піки розщеплюються на набір високочастотних піків, що узгоджується з експериментальними результатами.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Pietruszczak, S.: On inelastic behaviour of anisotropic frictional materials. *Mech. Cohes.-Frict. Mat.* 4, (1999).
2. Chen, L., Wang, Y., Bu, H., Chen, Y.: Simulations of the anisotropy of friction force between a silicon tip and a substrate at nanoscale. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part N: Journal of Nanoengineering and Nanosystems* 227, (2013).
3. He, G., Muser, M.H., Robbins, M.O.: Adsorbed layers and the origin of static friction. *Science* 284, (1999).
4. Depondt, P., Ghazali, A., Levy, J.C.S.: Self-locking of a modulated single overlayer in a nanotribology simulation. *Surf. Sci.* 419, (1998).
5. Almeida, C., Prioli, R., Fragneaud, B., Cancado, L., Paupitz, R., Galvao, D., De Cicco, M., Menezes, M., Achete, C., Capaz, R.: Giant and tunable anisotropy of nanoscale friction in graphene. *Scientific Reports.* 6, (2016).
6. Gnecco, E., Meyer, E. (eds.): *Fundamentals of Friction and Wear on the Nanoscale*, 2 edn. Springer, Berlin (2015).
7. Kumar, D., Jain, J., Gosvami, N.N.: Anisotropy in nanoscale friction and wear of precipitate containing AZ91 magnesium alloy. *Tribol. Lett.* 67, (2019).
8. Pogrebnjak, A.D., Ponomarev, A.G., Shpak, A.P., Kunitskii, Y.A.: Application of micro- and nanoprobes to the analysis of small-sized 3d materials, nanosystems, and nanoobjects. *Phys.-Usp.* 55, (2012).
9. Feldmann, M., Dietzel, D., Tekiel, A., Topple, J., Grutter, P., Schirmeisen, A.: Universal aging mechanism for static and sliding friction of metallic nanoparticles. *Phys. Rev. Lett.* 117, (2016).
10. Vanossi, A., Dietzel, D., Schirmeisen, A., Meyer, E., Pawlak, R., Glatzel, T., Kisiel, M., Kawai, S., Manini, N.: Recent highlights in nanoscale and mesoscale friction. *Beilstein J. Nanotechnol.* 9, (2018).

11. Ye, Z., Martini, A., Thiel, P., Lovelady, H.H., McLaughlin, K., Rabson, D.A.: Atomistic simulation of frictional anisotropy on quasicrystal approximant surfaces. *Phys. Rev. B* 93, (2016).
12. Castro-Neto, A.H., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S., Geim, A.K.: The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* 81, (2009).
13. Khomenko, A.V., Prodanov, N.V.: Study of friction of Ag and Ni nanoparticles: An atomistic approach. *J. Phys. Chem. C* 114, (2010).
14. Khomenko, A.V., Prodanov, N.V., Persson, B.N.J.: Atomistic modelling of friction of Cu and Au nanoparticles adsorbed on graphene. *Condens. Matter Phys.* 16, (2013).
15. Khomenko, A., Zakharov, M., Boyko, D., Persson, B.N.J.: Atomistic modeling of tribological properties of Pd and Al nanoparticles on a graphene surface. *Beilstein J. Nanotechnol.* 9, (2018).
16. Khomenko, A.V., Yushchenko, O.V.: Solid-liquid transition of ultrathin lubricant film. *Phys. Rev. E* 68, (2003)
17. Khomenko, A.V., Lyashenko, I.A.: Hysteresis phenomena during melting of an ultrathin lubricant film. *Phys. Solid State* 49, (2007)
18. Khomenko, A., Lyashenko, I.: Melting of ultrathin lubricant film due to dissipative heating of friction surfaces. *Tech. Phys.* 52, (2007).
19. Khomenko, A.V., Lyashenko, I.A.: Phase dynamics of a thin lubricant film between solid surfaces at the deformational defect of shear modulus. *J. Phys. Stud.* 11, (2007).
20. Fessler, G., Sadeghi, A., Glatzel, T., Goedecker, S., Meyer, E.: Atomic friction: Anisotropy and asymmetry effects. *Tribol. Lett.* 67, (2019).
21. Khomenko, A.V., Boyko, D.V., Zakharov, M.V., Khomenko, K.P., Khyzhnya, Y.V.: Molecular dynamics of aluminum nanoparticles friction on graphene. In:

- Proceedings of the IEEE 7th International Conference on Nanomaterials: Application Properties (IEEE, USA) 6, (2017).
22. Khomenko, A.V., Zakharov, M.V., Khomenko, K.P., Khyzhnya, Y.V., Trofimenko, P.E.: Atomistic modeling of friction force dependence on contact area of metallic nanoparticles on graphene. In: Proceedings of the IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Application Properties (IEEE, USA) 4, (2018).
 23. Sasaki, N., Kobayashi, K., Tsukada, M.: Atomic-scale friction image of graphite in atomic-force microscopy. *Phys. Rev. B.* 54, (1996).
 24. Zhou, X., Wadley, H., Johnson, R., Larson, D., Tabat, N., Cerezo, A., Petford-Long, A., Smith, G., Clifton, P., Martens, R., Kelly, T.: Atomic scale structure of sputtered metal multilayers. *Acta Mater.* 49, (2001).
 25. Khomenko, A.V., Prodanov, N.V.: Molecular dynamics of cleavage and flake formation during the interaction of a graphite surface with a rigid nanoasperity. *Carbon* 48, (2010).
 26. Prodanov, N.V., Khomenko, A.V.: Computational investigation of the temperature influence on the cleavage of a graphite surface. *Surf. Sci.* 604, (2010).
 27. Rapaport, D.C.: *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2 edn. Cambridge University Press, Cambridge (2004).
 28. Berendsen, H.J.C., Postma, J.P.M., van Gunsteren, W.F., DiNola, A., Haak, J.R.: Molecular dynamics with coupling to an external bath. *J. Chem. Phys.* 81, (1984).
 29. Humphrey, W., Dalke A., Schulten, K.: VMD: Visual molecular dynamics. *J. Mol. Graphics.* 14, (1996).
 30. Choi, J.S., Kim, J.-S., Byun, I.-S., Lee, D.H., Lee, M.J., Park, B.H., Lee, C., Yoon, D., Cheong, H., Lee, K.H., Son, Y.-W., Park, J.Y., Salmeron, M.:

- Friction anisotropy–driven domain imaging on exfoliated monolayer graphene. *Science*. 333, (2011).
31. Khomenko, A.V., Prodanov, N.V., Khomenko, M.A., Krasulya, B.O.: Frictional anisotropy of metal nanoparticles adsorbed on graphene. *J. Nano-Electron. Phys.* 5, (2013).
 32. He, G., Robbins, M.O.: Simulations of the static friction due to adsorbed molecules. *Phys. Rev. B* 64, (2001).
 33. He, G., Robbins, M.O.: Simulations of the kinetic friction due to adsorbed surface layers. *Tribol. Lett.* 10(1), (2001).
 34. Braun, O.M., Manini, N.: Dependence of boundary lubrication on the misfit angle between the sliding surfaces. *Phys. Rev. E* 83, (2011).
 35. Dietzel, D., Feldmann, M., Schwarz, U.D., Fuchs, H., Schirmeisen, A.: Scaling laws of structural lubricity. *Phys. Rev. Lett.* 111, (2013).
 36. Matsushita, K., Matsukawa, H., Sasaki, N.: Atomic scale friction between clean graphite surfaces. *Sol. State Commun.* 136 (1), (2005).

Додаток А
Код програми

```

import matplotlib.pyplot as plt
from math import sqrt
import numpy as np

n=1000000
m=100
g=0.05
Te=20
h=0.01
delta=0.000001
eps_0 = g/2+sqrt((g/2)**2-(Te-(1+(1/g))))
sig_0 = g*eps_0*((2*g*(eps_0)**2+1+Te)/(1+g*(eps_0)**2))
T_0 = (Te+g*(eps_0)**2)/(1+g*(eps_0)**2)
De = 0.4
Ds = 0.2
Dt = 0.2
tau = 0.15
d = 0.15

A=[]
def fillEPS(A): # заповняємо матрицю початковими та граничними умовами
    znach = -eps_0 #2.18 та 2.19
    #znach = 0 # 2.20 та 2.21
    for i in range(0,n):
        A.append([])
        for j in range(0,m):
            if j == 0:
                A[i].append(-eps_0) #2.18 та 2.19
                #A[i].append(0) #2.20 та 2.21
            else:
                if j ==m-1:
                    A[i].append(eps_0) #2.18 та 2.19
                    #A[i].append(eps_0) #2.20 та 2.21
                else:
                    if i==0:
                        znach+=2*eps_0/m #2.18 та 2.19
                        #znach += eps_0 / m #2.20 та 2.21
                        A[i].append(znach)
                    else:
                        A[i].append(0)

EPS=[]
fillEPS(EPS)

def fillSIG(A): # заповняємо матрицю початковими та граничними умовами
    znach = -sig_0 #2.18 та 2.19
    #znach = 0 #2.20 та 2.21
    for i in range(0,n):
        A.append([])
        for j in range(0,m):

```

```

if j == 0:
    A[i].append(-sig_0) #2.18 ma 2.19
    #A[i].append(0) #2.20 ma 2.21
else:
    if j ==m-1:
        A[i].append(sig_0) #2.18 ma 2.19
        #A[i].append(eps_0) #2.20 ma 2.21
    else:
        if i==0:
            znach+=2*sig_0/m #2.18 ma 2.19
            #znach += eps_0 / m #2.20 ma 2.21
            A[i].append(znach)
        else:
            A[i].append(0)

SIG=[]
fillSIG(SIG)

def fillT(A): # заповняємо матрицю початковими та граничними умовами
    znach = T_0
    for i in range(0,n):
        A.append([])
        for j in range(0,m):
            if j == 0:
                A[i].append(T_0)
            else:
                if j ==m-1:
                    A[i].append(T_0)
                else:
                    if i==0:
                        znach=T_0
                        A[i].append(znach)
                    else:
                        A[i].append(0)

T=[]
fillT(T)

for j in range(0,n-1):
    for i in range(1,m-1):
        EPS[j+1][i] = EPS[j][i] + delta*(De*(EPS[j][i+1] - 2.0*EPS[j][i] + EPS[j][i-1])
+ h*h*(-EPS[j][i] + SIG[j][i]))/(h*h)
        SIG[j+1][i] = SIG[j][i] + delta*(Ds*(SIG[j][i+1] - 2.0*SIG[j][i] + SIG[j][i-1])
+ h*h*(-SIG[j][i] + g*EPS[j][i]*T[j][i] - g*EPS[j][i]))/(tau*h*h)
        T[j+1][i] = T[j][i] + delta*(Dt*(T[j][i+1] - 2.0*T[j][i] + T[j][i-1]) + h*h*(Te-
T[j][i]-SIG[j][i]*EPS[j][i]))/(d*h*h)

E0=[]
S0=[]
T0=[]
for i in range(0,m):
    chisl=EPS[0][i]
    E0.append(chisl)
    chisl = SIG[0][i]
    S0.append(chisl)
    chisl = T[0][i]
    T0.append(chisl)

```

```

E500=[]
S500=[]
T500=[]
for i in range(0,m):
    chisl = EPS[4999][i]
    E500.append(chisl)
    chisl = SIG[4999][i]
    S500.append(chisl)
    chisl = T[4999][i]
    T500.append(chisl)
E2500=[]
S2500=[]
T2500=[]
for i in range(0,m):
    chisl = EPS[69999][i]
    E2500.append(chisl)
    chisl = SIG[69999][i]
    S2500.append(chisl)
    chisl = T[69999][i]
    T2500.append(chisl)
E50000=[]
S50000=[]
T50000=[]
for i in range(0,m):
    chisl = EPS[999999][i]
    E50000.append(chisl)
    chisl = SIG[999999][i]
    S50000.append(chisl)
    chisl = T[999999][i]
    T50000.append(chisl)
y = np.linspace(0, 1, 100)
fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(y, E0, "--", color="blue")
ax.plot(y, E500, color="red")
ax.plot(y, E2500, color="green")
ax.plot(y, E50000, color="black")
plt.xlabel("y", fontsize=15)
plt.ylabel("Epsilon", fontsize=15)
plt.show()
fig1, ax1 = plt.subplots()
ax1.plot(y, S0, "--", color="blue")
ax1.plot(y, S500, color="red")
ax1.plot(y, S2500, color="green")
ax1.plot(y, S50000, color="black")
plt.xlabel("y", fontsize=15)
plt.ylabel("Sigma", fontsize=15)
plt.show()
fig2, ax2 = plt.subplots()
ax2.plot(y, T0, "--", color="blue")
ax2.plot(y, T500, color="red")
ax2.plot(y, T2500, color="green")
ax2.plot(y, T50000, color="black")
plt.xlabel("y", fontsize=15)
plt.ylabel("T", fontsize=15)
plt.show()

```