МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Сумський державний університет

Факультет електроніки та інформаційних технологій

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

_____ Ігор КОПЛИК

(підпис) (Ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

____ _____ 20__ р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня бакалавр

(бакалавр / магістр)

зі спеціальності 113 Прикладна математика,

(код та назва)

освітньо- професійної програми Наука про дані та моделювання складних систем

(освітньо-професійної / освітньо-наукової) (назва програми)

на тему: Атомістичне моделювання фрикційної анізотропії наночастинок паладію на графені

Здобувача групи ПМ-01 Малютіна Владислава Олександровича

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

(підпис)

Владислав Малютін

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)

Керівник професор, доктор фіз.-мат. наук, професор, Олексій ХОМЕНКО

(посада, науковий ступінь, вчене звання, Ім'я та ПРІЗВИЩЕ) (підпис)

Суми – 2024

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет **електроніки та інформаційних технологій**

Кафедра **прикладної математики та моделювання складних систем**

Рівень вищої освіти _____бакалавр_____

(перший (бакалавр) або 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 ПМтаМСС
Коплик І. В. _____
«___» _____20__ р.

І Н Д И В І Д У А Л Ь Н Е З А В Д А Н Н Я
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧЕВІ ВИЩОЇ ОСВІТИ

_____Малютіна Владислава Олександровича_____

(прізвище, ім'я, по батькові)

Тема роботи Атомістичне моделювання фрикційної анізотропії_____ наночастинок паладію на графені_____

Керівник роботи Хоменко Олексій Віталійович, доктор фіз.-мат. наук,_____ професор, професор_____

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання, посада)

затверджено наказом по факультету ЕлІТ від «05» 04 2024 р. № 0349-VI

2. Термін подання роботи здобувачем «02» червня 2024 р.

3. Вихідні дані до роботи: _1) Теоретичні та експериментальні дані про анізотропію тертя. 2) Модель системи: наночастинка, що складається з атомів паладію і рухається по поверхні графену, який складається із заданого числа комірок і атомів вуглецю.

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, для розроблення): 1) Визначення мети роботи, об'єкту і предмету дослідження. 2) Збір, систематизація й узагальнення матеріалу . 3) Розроблення практичних рекомендацій. 4) Розширення моделі Хоменка-Захарова, та її аналіз. 5) Оформлення кваліфікаційної роботи.

В роботі вивчена модель Хоменка-Захарова. Модель Хоменка-Захарова розширена: моделюється система – наночастинка, що складається з 15000 атомів паладію і рухається по поверхні графену, який складається з 96 × 96 комірок і 98304 атомів вуглецю._____

5. Перелік графічного матеріалу: Рушійні сили, що діють на наночастинку під час ковзання по графеновій підкладці і вигляд зверху системи з ковзанням наночастинки; Часові залежності величин для наночастинки; Залежності площі контакту від швидкості по осях; Анізотропія тертя наночастинок при різних температурах.

6. Консультанти проєкту (роботи) із зазначенням розділів проєкту, що їх стосується:

7. Дата видачі завдання «06» травня 2024 р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Назва етапів кваліфікаційної роботи	Термін виконання роботи	Примітка
1	Провести досліди. Компіляцію програми з розрахунками комп'ютерних моделювань напилень атомів металів (Al, Pd, Co, Au, Ni) на підкладку графена.	06.05-10.05	
2	Провести аналіз літератури за даною темою.	11.05-14.05	
3	Вивчити методологію розрахунків за допомогою програми, створеної в середовищі розробки Microsoft Visual Studio 2008 з використанням технології паралельних обчислень Nvidia CUDA.	15.05-18.05	
4	Провести аналіз додаткових комп'ютерних експериментів.	19.05-22.05	
5	Проаналізувати та описати спільну поведінку експериментів. Побудувати графіки, що описують систему.	26.05-28.05	
6	Розширити модель Хоменка-Захарова, та зробити її аналіз.	29.05-02.06	

Здобувач вищої освіти Малютін В.О.
(підпис) (прізвище та ініціали)

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

АНОТАЦІЯ

Кваліфікаційна робота: 53 с., 11 рисунків, 1 таблиця, 37 джерел.

Мета роботи: Розширити модель фрикційної анізотропії наночастинок паладію на графені, яка побудована О.В. Хоменком та М.В. Захаровим.

Об'єкт дослідження: процес фрикційної взаємодії поверхонь з анізотропною шорсткістю.

Предмет дослідження: математична модель процесу фрикційної взаємодії поверхонь з анізотропною шорсткістю.

Методи навчання: моделюється система: наночастинка, що складається з атомів паладію і рухається по поверхні графену. Розрахунки проводять за допомогою програми, створеної в середовищі розробки Microsoft Visual Studio 2008 з використанням технології паралельних обчислень Nvidia CUDA.

Зроблено огляд літератури за темою дослідження. Наведені формули, які описують дану модель, а також рисунки, які пояснюють аналіз моделі фрикційної анізотропії наночастинок паладію на графені. Вивчена модель Хоменка-Захарова фрикційної анізотропії наночастинок паладію на графені. Розширено модель Хоменка-Захарова, та зроблено її аналіз.

Ключові слова: КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ, НАПИЛЕННЯ, ГРАФЕН, ОДНОШАРОВА ПІДКЛАДКА, НАНОЧАСТИНКА, АТОМНО-СИЛОВА МІКРОСКОПІЯ, МОДЕЛЬ ХОМЕНКА-ЗАХАРОВА.

ЗМІСТ

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН **4**

АНОТАЦІЯ **5**

ВСТУП **7**

РОЗДІЛ 1 - Огляд літератури **9**

1.1. Принципи дії та методи досліджень атомно-силової мікроскопії. 9

1.2. Поняття анізотропії тертя. 20

1.3. Анізотропія тертя графену. 23

1.4 Актуальність дослідження графену. 29

РОЗДІЛ 2 - Модель фрикційної анізотропії наночастинок паладію на графені **32**

2.1. Вступ. 32

2.2. Методика. 33

2.3. Модель Хоменка – Захарова. 35

РОЗДІЛ 3 - Розширена модель Хоменка - Захарова фрикційної анізотропії наночастинок паладію на графені **38**

3.1. Програма SurfaceGrowth. 38

3.2. Параметри. 39

3.3 Результати для *Bulk* Al 40

3.4 Результати для Surface Growth Al 42

3.5 Результати для Shear Al 42

ВИСНОВКИ **45**

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ **46**

Додаток А - Код програми 50

ВСТУП

Процеси і явища, що відбуваються в системах, де тіла контактують один з одним при взаємному переміщенні і терті, мають цілий ряд особливостей і є об'єктом вивчення нового напряму фізики – трибофізики.

Дисципліна «Трибофізика», поряд з фізикою, хімією та фізичним матеріалознавством, становить основу фундаментальної природничої підготовки фахівців у галузі машинобудування. Це нова дисципліна, її поява обумовлена підвищенням ролі конструкційних матеріалів триботехнічного призначення у забезпеченні надійності та довговічності вузлів тертя (трибосистем) машин у різних галузях сучасної техніки у зв'язку зі збільшенням питомих навантажень та посиленням умов експлуатації.

Завдання трибофізики виходять за межі класичної фізики і матеріалознавства, оскільки вона розглядає весь комплекс явищ і процесів в трибосистемах в особливих умовах зовнішнього енергетичного впливу (деформаційних, теплофізичних, дифузійних тощо), що викликають структурно-фазові перетворення, іноді до руйнування поверхонь тертя твердих тіл. Це дозволяє визначити трибофізику в якості одного з напрямків трибології – науки про тертя твердих тіл і рідин та процеси, що супроводжують тертя.

Щоб отримати уявлення про фундаментальне походження тертя ковзання, фрикційні властивості наночастинок розглядалися багатьма авторами. Зазначимо такі імена: О. Хоменко, М. Захаров, Д. Бойко, Бо Персон. У роботах цих авторів за допомогою молекулярної динаміки було досліджено фрикційні властивості наночастинок алюмінію та паладію, нанесених на шар графену. Вивчено еволюцію загального імпульсу системи в часі, повну та потенційну енергію, температуру, швидкість і положення центру мас, розміри наночастинки, а також сили тертя та підкладки, що діють на частинку. Також розглядалося, як сила тертя залежить від площі контакту наночастинки з графеном та температури. На основі цих досліджень було зроблено висновок, що трибологічні властивості наночастинок сильно залежать від матеріалів: частинки рухаються нерегулярно (пилкоподібно). Усереднена сила тертя залежить майже

лінійно від площі контакту та немонотонно від температури. Спостерігалися впорядковані кристалічні домени атомів на нижній поверхні металевих частинок, але піки радіального розподілу розмиті, вказуючи на те, що наночастинки є аморфними або полікристалічними.

В нашій роботі ми вивчаємо розширену модель Хоменка – Захарова: у розрахунках моделюється система: наночастинка, що складається з атомів паладію і рухається по поверхні графену, що складається з атомів вуглецю.

Положення, що виноситься на захист – розширена модель Хоменка – Захарова, в якій моделюється система зі збільшеним числом наночастинок, атомів паладію та комірок атомів вуглецю.

РОЗДІЛ 1 - ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1. Принципи дії та методи досліджень атомно-силової мікроскопії.

Створення фрикційної та атомної силової мікроскопії (ФСМ та АСМ) дало можливість вивчати трибологічні явища у сухих наноконтактах. Методики АСМ та ФСМ дозволяють проводити експерименти над трибологічними явищами у сухих наноконтактах. Постановка експериментів для дослідження мікроконтактів поверхонь, які розділені тонкою плівкою рідини проводиться з використанням апарату поверхневих сил (АПС). Як правило, в таких експериментах для робочих поверхонь, в АСМ та ФСМ застосовується графіт, а в АПС використовують слюду. Оскільки такі матеріали мають шорстку структуру, то це дозволяє в експериментах використовувати атомарно-гладкі поверхні.

В роботі [1] розглядаються трибологічні властивості граничних плівок вуглеводів і води, укладених між атомарно гладкими і шорсткими поверхнями. Як теорія, так і експеримент показують, що ультратонка плівка рідини товщиною менше шести молекулярних діаметрів, обмежена малими об’ємами, є твердоподібною. Такий стан характеризується зменшенням рухливості молекул, пов’язаним із збільшенням часу релаксації та зменшенням коефіцієнта дифузії. Крім того, з’являються квазідискретні шари молекул і відбувається впорядкування шарів у площині. Атомна шорсткість стінок руйнує порядок молекул. Також описано експериментальні дослідження тертя графіту на атомному рівні. Експерименти свідчать про принципову можливість надзмащування для вольфрамового наконечника мікроскопа із силою тертя, зрізаного на поверхні графіту. Можливе пояснення цього явища полягає в існуванні графітової нанолуски, прикріпленої до вістря. Однак достовірне підтвердження цієї гіпотези в літературі відсутнє. Також розглядаються способи отримання графену шляхом відшарування зразка графіту та утворення дефектів у графені в результаті його опромінення різними частинками. Описано експериментальний метод вимірювання тертя ковзання металевих наночастинок по поверхні графіту. Основні переваги цього підходу порівняно з відомими

методами та подвійність тертя в цих системах. Огляд свідчить про необхідність подальшого комплексного теоретичного дослідження тертя металевих наночастинок, адсорбованих на атомарно гладких поверхнях.

Атомно-силовий мікроскоп був створений у 1982 році Гердом Біннігом, Кельвіном Куейтом та Крістофером Гербером у Цюріху (Швейцарія), як модифікація винайденого раніше скануючого тунельного мікроскопа. Принцип роботи атомно-силового мікроскопа ґрунтується на реєстрації силової взаємодії між поверхнею досліджуваного зразка та зондом. Як зонд використовується нанорозмірне вістря, що розташовується на кінці пружної консолі, яка називається кантилевером. Сила, що діє на зонд з боку поверхні, призводить до згинання консолі. Поява височин або западин під вістрям призводить до зміни сили, що діє на зонд, а значить, і зміни величини вигину кантилевера. Таким чином, реєструючи величину вигину, можна зробити висновок про рельєф поверхні.

Під силами, що діють між зондом і поверхнею зразка, мають на увазі дальнодіючі сили Ван-дер-Ваальса, які при малих відстанях є силами відштовхування, а при подальшому збільшенні відстані переходять у сили тяжіння. Залежно від відстані та виду сил між кантилевером та поверхнею зразка можна розділити три режими роботи атомно-силового мікроскопа:

Контактний (англ. contact mode).

Безконтактний (англ. non-contact mode).

Напівконтактний (англ. semi-contact mode або англ. tapping mode).

На наведеному рисунку (рис.1.1) відстань прийнята за нуль відповідає нульовій відстані між ядрами поверхневих атомів і атома кантилевера, що найбільш виступає. Тому точка рівноваги з мінімумом потенційної енергії знаходиться на кінцевій відстані, що відповідає «межі» електронних оболонок атомів.

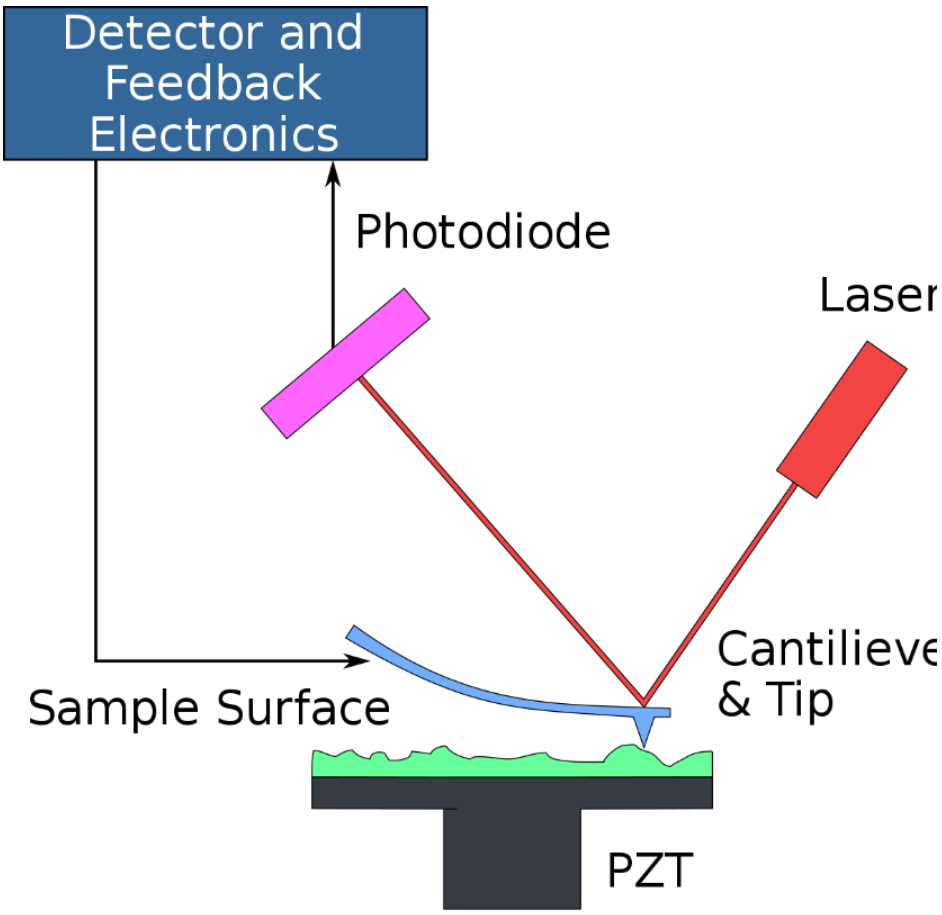

Рис. 1.1. Схема роботи атомно-силового мікроскопа.

Розглянемо три види сил, під дією яких працює мікроскоп.

Контактний режим роботи атомно-силового мікроскопа.

При перекритті оболонок атомів, що виникає при контактному режимі роботи атомно-силового мікроскопа, виникає відштовхування, аналогічне режиму роботи профілометра. Найбільш виступаючий атом кантилевера знаходиться у безпосередньому контакті з поверхнею. Зворотний зв'язок дозволяє здійснювати сканування в режимі постійної сили, коли система підтримує постійну величину вигину кантилевера. При дослідженні чистої поверхні з перепадами висот близько 10^{-10}м можна використовувати сканування при постійній середній відстані між зондом та поверхнею зразка. Рух кантилевера, у разі відбувається на середній висоті над поверхнею зразка. Вигин кантелевера Z, який пропорційний силі, що діє на зонд, вимірюється для кожної точки. А зображення у цьому режимі показує просторовий розподіл сили взаємодії зонда з поверхнею.

Можна виділити кілька переваг методу:

1) Найбільша, порівняно з іншими методами, стійкість до перешкод;
2) Найбільша досяжна швидкість сканування;
3) Забезпечує найкращу якість сканування поверхонь із різкими перепадами рельєфу.

А також вказати недоліки методу:

1) Наявність артефактів, пов'язаних з наявністю сил, спрямованих вздовж поверхні біля щаблів;
2) При скануванні повітря на зонд діють також капілярні сили через неминучу присутність на поверхні атомарного шару води;
3) Практично непридатний щодо вивчення форми біологічних об'єктів і органічних матеріалів.

Безконтактний режим роботи атомно-силового мікроскопа.

При роботі в безконтактному режимі зонд знаходиться на відстані де діють сили притягання. П'єзокераміка збуджує резонансні коливання зонда. При цьому особливості поверхні за допомогою сил Ван-дер-Ваальса призводять до зсуву амплітудно-частотної та фазово-частотної характеристик коливань. Можна також вимірювати зміну вищих гармонік сигналу.

Завдяки зворотному зв'язку підтримується постійна амплітуда коливань зонда і вимірюється частота і фаза в кожній точці поверхні. В іншому режимі можна використовувати зворотний зв'язок для підтримки постійної величини частоти або фази коливань.

Виділяють такі переваги методу:

1) Відсутня дія зонда на досліджувану поверхню.

А до недоліків відносять:

1) Вкрай чутливий до всіх зовнішніх шумів;

2) Найменший дозвіл;

3) Найменша швидкість сканування;

4) Функціонує лише за умов вакууму, коли відсутній адсорбований шар на поверхні води;

5) Забруднення кантилевера під час сканування змінює його частотні властивості.

У зв'язку з численністю складнощів і недоліків методу цей режим роботи АСМ не знайшов широкого застосування.

Напівконтактний режим роботи атомно-силового мікроскопа.

При роботі в напівконтактному режимі кантилевер також коливається. У нижньому напівперіоді коливань кантилевер знаходиться в області відштовхувальних сил. Тому цей метод займає проміжне положення між контактом та безконтактним методами.

Серед переваг методу можна виділити:

1) Універсальність у порівнянні з іншими методами АСМ, що дозволяє на більшості досліджуваних зразків отримувати роздільну здатність 10^{-5} нм.

2) Латеральні сили, що діють на зонд з боку поверхні, мінімізовані, що спрощує інтерпретацію одержуваних результатів.

Недолік методу:

Максимальна швидкість сканування поступається контактному режиму.

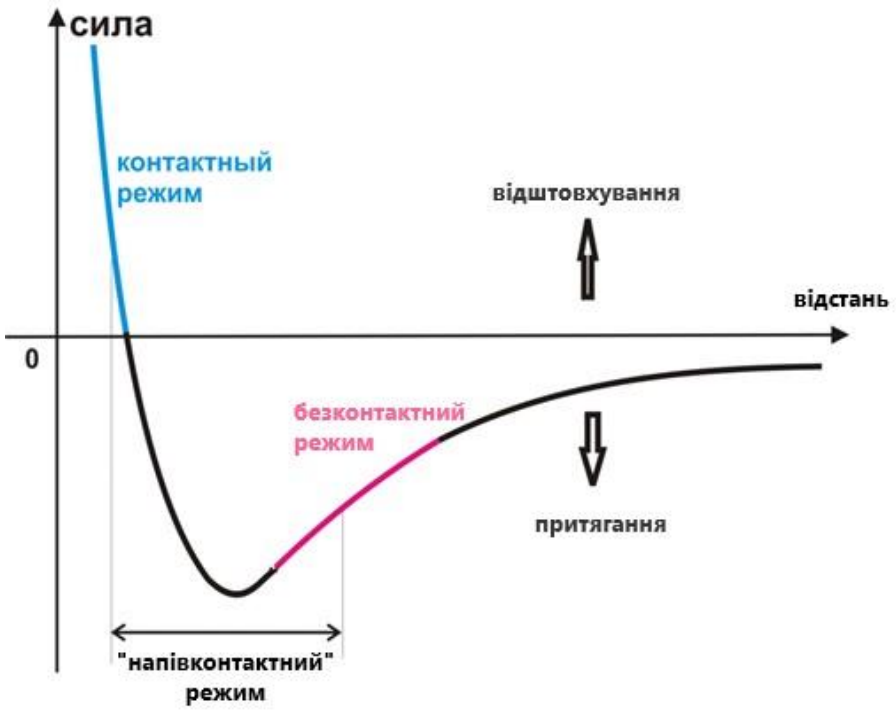

Рис. 1.2. Графік залежності сили Ван-дер-Ваальса від відстані між кантилевером та поверхнею зразка [2].

Нехай два атоми перебувають на відстані r одне від одного, r_0 – рівноважна відстань між атомами, U_0 – значення енергії у мінімумі. Як правило, енергію ван-дер-ваальсової взаємодії цих двох атомів апроксимують степеневою функцією потенціалом Леннарда-Джонса (рис.1.2):

$$U_{LD} = U_0\left[-2\left(\frac{r_0}{r}\right)^6 + \left(\frac{r_0}{r}\right)^{12}\right]. \quad (1.1)$$

У формулі (1.1) доданок $-2\left(\frac{r_0}{r}\right)^6$ характеризує далекодіюче притягання, а доданок $\left(\frac{r_0}{r}\right)^{12}$ – відштовхування атомів на малих відстанях.

Формула (1.1) дозволяє оцінити силу взаємодії зонда зі зразком. Підсумовуючи елементарні взаємодії кожного з атомів зонда та зразка, можна отримати загальну енергію системи. Нехай $n_p(r)$ і $n_s(r')$ – густини атомів матеріалу зразка і зонда. Тоді енергія взаємодії зразка та зонда обчислюється за формулою:

$$W = \int_{V_P}\int_{V_S} U_{LD}(r - r')n_p(r)n_s(r')dVdV' . \quad (1.2)$$

Звідси отримуємо, сила, що діє на зонд з боку поверхні, визначається рівністю:

$$\overrightarrow{F_{PS}} = -\text{grad}\, W_{PS}. \quad (1.3)$$

Інші сили.

Незважаючи на те, що при опису роботи атомно-силового мікроскопа дуже часто згадуються лише сили Ван-дер-Ваальса, насправді з боку поверхні діють такі сили, як пружні сили, сили адгезії, капілярні сили. Їх внесок особливо очевидний при роботі в напівконтактному режимі, коли внаслідок «прилипання» кантилевера до поверхні виникає гістерезис, які можуть суттєво ускладнювати процес отримання зображення та інтерпретацію результатів. Таким чином,

взаємодія зонда зі зразком має більш складний характер. На практиці реєстрація малих вигинів пружної консолі зондового датчика проводиться за допомогою оптичних методів (рис.1.3).

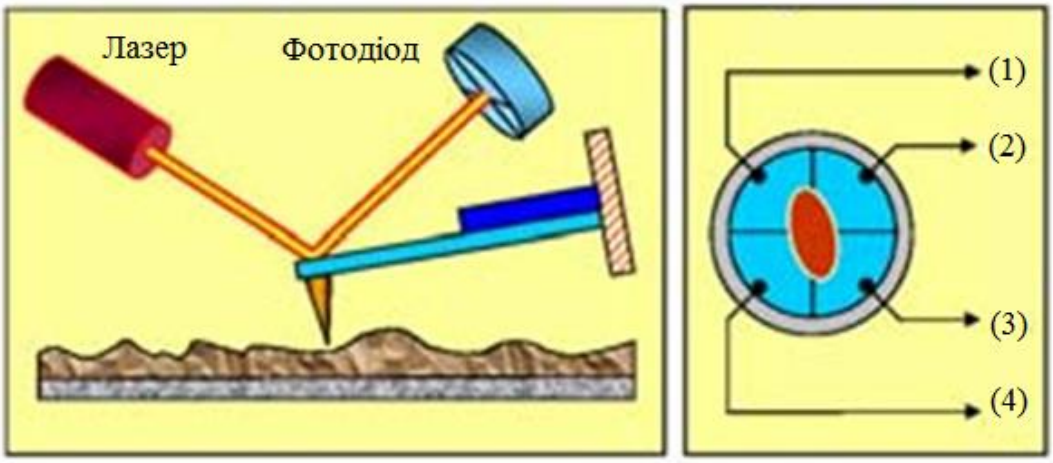

Рис. 1.3. Оптична реєстрації вигину консолі зондового датчика АСМ [2]

При юстуванні оптичної системи АСМ випромінювання напівпровідникового лазера фокусується на консолі зондового датчика, а відбитий жмуток потрапляє до центру фоточутливої області фотоприймача. При цьому використовуються чотирисекційні напівпровідникові фотодіоди як позиційно-чутливі фотоприймачі.

Дисертацію [3] присвячено комплексному дослідженню структурних, магнітних та магніторезистивних властивостей тонкоплівкових систем з перпендикулярною магнітною анізотропією: мультишарів Co/Ni, спін-вентилів та магнітних тунельних переходів на їх основі, а також епітаксійних тунельних переходів на основі Fe та MgO. У роботі визначені оптимальні умови формування плівкових систем з ПМА та досліджена їх кристалічна структура. Вперше досліджено магнітні та магніторезистивні властивості тунельних переходів на основі мультишарів [Co/Ni]n та аморфного бар'єру Al_2O_3 у випадку паралельної та ортогональної орієнтації спонтанної намагніченості електродів. Аналіз результатів дослідження тунельних переходів V/Fe/MgO/Fe/Co дозволив визначити умови виникнення явища квантової ями на інтерфейсі V/Fe,

встановити залежність ПМА ультратонкого шару Fe від полярності та значення напруги зміщення. Для магнітних тунельних переходів на основі Fe та MgO з ортогональною орієнтацією намагніченості електродів досліджено залежність опору від часу дії напруги та встановлено фактори, що викликають нестабільність опору.

На магніторезистивні, магнітооптичні властивості та дифузійні процеси у плівкових системах впливають також матеріал підкладки та її структурний стан. В роботі [4] показано, що при орієнтованому вирощуванні на монокристалі MgO(100), в системі Au(2)/Co(30)/Fe(30)/MgO анізотропія магнітоопору та коерцитивної сили збільшуються у 2 рази при повороті зразка на 45°)

В роботі [5] обговорюється теорія течії, яка описує текучість анізотропних фрикційних матеріалів. Розробка включає спрямований розподіл пустот як міру мікроструктури матеріалу. Умови відмови визначаються за допомогою набору скалярних функцій, що представляють просторову зміну основних параметрів матеріалу. Правило потоку узагальнено, щоб включити ефект початкової структури матеріалу. Формулювання ілюструється кількома числовими прикладами, що демонструють спрямовану залежність характеристик навантаження-деформації.

Безконтактний метод дослідження поверхні зразка розглядається у роботі [6]. Коли атомарно заточений наконечник наближається до поверхні зразка, наприклад, ~1 нм, під дією напруги зміщення між наконечником і зразком, між ними починає проходити невеликий електричний струм, перш ніж вони стикаються. Це так званий ефект квантового тунелювання; автори називають струм тунельним струмом. Тунельний струм різко зростає зі зменшенням відстані між кінчиком і зразком. І навпаки, можна точно оцінити зміну поділу, вимірявши тунельний струм. Таким чином, якщо сканується кінчик над поверхнею зразка, зберігаючи тунельний струм постійним, рух кінчика відображає рельєф поверхні, оскільки відстань між вершиною кінчика та поверхнею зразка завжди постійна. Це основна ідея розробки нового мікроскопа

для зображення поверхні з атомною роздільною здатністю, тобто скануючої тунельної мікроскопії.

При безконтактній мікроскопії використовується метод "модуляції амплітуди". Вимірювальна схема застосовує коливання амплітуди. При взаємодії зонда із зразком відбуваються коливання кантелівера. При використанні безконтактного методу мікроскопія описується у термінах градієнтно-силової моделі. У цій моделі при наближенні кантилевера до зразка резонансна частота кантилевера f_o змінюється на приріст $\underline{df}$. Нове значення f_{eff} резонансної частоти кантелівера з номінальною величиною шорсткості k_o, обчислюється за формулою

$$f_{eff} = \frac{f_0\left(1-\frac{F\prime(z)}{k_0}\right)}{2}. \quad (1.4)$$

Тут $F'(z)$ – градієнт сили взаємодії кантилевера із зразком. Змінна z – це ефективний зазор зонд-зразок, для випадку сил тяжіння, приріст $\underline{df} = f_{eff} - f_0$ м – від'ємна величина.

Якщо $f_{eff} > f_0$, тобто збуджуюча частота коливань кантилевера більша початкової резонансної частоти кантилевера f_0, то зменшення резонансної частоти кантилевера призводить до зменшення його амплітуди коливань A_{set} з частотою f_{set} у разі його наближення до зразка. Такі зміни амплітуди A при дослідженнях використовують як вхідний сигнал у процесі зворотного зв'язку. Щоб отримати скановане зображення при використанні безконтактного методу, спочатку вибирають початкову амплітуду A_{set} як вставку, при цьому $A_{set} < A(fset)$, якщо відстань від кантилевера до поверхні зразка досить велика. Зворотній зв'язок наближає кантилевер ближче до поверхні, до тих пір, поки при заданій частоті збудження коливань f_{set} його миттєва амплітуда A не буде дорівнювати амплітуді A_{set}. З цього моменту починається сканування зразка (x,y) площині зі збереженням зворотного зв'язку $A = A_{set} = \text{const}$, щоб отримати зображення. Зворотній зв'язок наближає кантилевер ближче до зразка, у разі

зменшення A_{set} у якійсь точці, і відсуває його від зразка у разі збільшення A_{set}. Таким чином, якщо амплітуда A досить маленька, то зображення можна розглядати як рельєф постійного градієнта сили взаємодії зонда зі зразком.

В роботі [7] автори пропонують просту модель для опису взаємодії вимушеного коливання кантилевера зі зразком в експерименті зі скануючим силовим мікроскопом у режимі натискання, щоб зробити приблизну оцінку сил, що впливають на поверхню з кожним торканням кінчика. Припускаючи слабке демпфування кантилевера (коефіцієнт якості кантилевера між 100 і 1000) і поверхні, можна оцінити сили в діапазоні сил у контактному режимі. Ці сили можуть змінюватися на порядки величини, наприклад від 10^{-6} до 10^{-11} Н. Для зменшення сили взаємодії запропоновано сканування на низькочастотній стороні резонансної частоти безконтактного коливання кантилевера. Збільшення різниці фаз між безконтактним коливанням кантилевера в повітрі та коливанням під час контакту вносить сильні варіації сили. Покращення роздільної здатності, якої можна досягти для м’яких зразків за допомогою системи режиму постукування, є результатом усунення зсувних зусиль і можливості мінімізації сили на поверхні шляхом зміни заданої точки амплітуди сканування. Зусилля, що діють на підкладку, посиляться великою жорсткістю підкладки. Під час використання безконтактного і переривчасто-контактного методів кантилевер приводиться в коливальний стан при постійній резонансній частоті збудження, при цьому градієнти сил детектуються, як зміни амплітуди або фази коливань кантилевера [7]. Відповідно до такої схеми відношення сигнал-шум для заданої ширини смуги може бути підвищено збільшенням добротності Q коливань кантилевера. Проте збільшення Q одночасно зменшує максимально можливу ширину смуги системи. Ця обставина стає особливо важливою при роботі у вакуумі. У вакуумі добротність кантилевера Q може стати більше 50000. Такі високі значення Q забезпечують високу чутливість, але малу ширину смуги (менше 1 Гц), використовуючи дуже малі швидкості сканування ССМ для більшості застосувань. Якщо використовуються безконтактний та переривчасто-контактний методи, то кантилевер, при постійній резонансній частоті збудження,

приходить у коливальний стан. У цьому випадку градієнти сил детектуються як зміни амплітуди чи фази коливань кантилевера. Відношення сигнал-шум при заданій ширині смуги підвищується, якщо коливання Q кантилевера збільшуються. При цьому збільшення Q зменшує максимально можливу ширину смуги системи. Цей факт важливий під час роботи у вакуумі. Автори зауважують, що у вакуумі добротність кантилевера Q може стати більше 50000. Високе значення Q позитивно впливає на високу чутливість, одночасно використовуючи малі швидкості сканування ССМ, забезпечує малу ширину смуги (менше 1 Гц). Щоб збільшити чутливість ССМ у разі збільшення Q без обмежень на ширину смуги пропускання або динамічного діапазону, автори пропонують альтернативний метод детектування, який вони називають методом модуляції частоти. У цьому випадку високодобротні резонансні коливання кантилевера, при використанні частотно-модуляційної системи детектування, описуються, при постійній амплітуді осцилятора, що коливається, його частотно-визначеним компонентом. На миттєві зміни частоти коливань осцилятора впливають зміни градієнтів сил. При цьому миттєві зміни частоти коливань осцилятора детектуються частотно-модуляційним демодулятором. За рахунок зворотного зв'язку, що коливається при резонансній частоті кантилевера, кантилевер підтримується за допомогою підсилювача, що управляє.

У роботі [8] вдосконалено техніку роботи скануючого силового мікроскопа в динамічному безконтактному режимі (динамічна силова мікроскопія). Використовувалися прилади власного виробництва, засновані на схемі відхилення оптичного променя в двох різних середовищах. Два силових мікроскопи працювали в навколишньому повітрі та в надвисокому вакуумі відповідно. Для керування коливальним кантилевером були застосовані різні методи: виявлення нахилу (підсилювач синхронізації, перетворювач RMS-to-DC) і метод частотної модуляції (FM). Переваги цієї неруйнівної методики продемонстровано на різних зразках, таких як м’яка органічна речовина (гексагонально упакований проміжний шар, плівка Ленгмюра-Блоджетта),

шарувато-структуровані сполуки (CdI2), n-легований Si(111) і сегнетоелектричні кристали [тригліцин сульфат (TGS), гуанідіній алюміній сульфат гексагідрат (GASH)]. На гранях розщеплення TGS і GASH можна відобразити сегнетоелектричні домени та доменні стінки. З експериментальних даних може бути визначена просторова роздільна здатність приблизно 10^{-5} нм у бічних і >0,1 нм у вертикальних напрямках.

1.2. Поняття анізотропії тертя.

Сила тертя має велике значення як у повсякденному житті людини, так і в техніці. Без неї неможливі жодні технологічні процеси Такий же широкий спектр застосування тертя і в нанобіотехнологіях [9]. Вуглецеві нанотрубки (ВНТ) добре відомі своїми винятковими тепловими, механічними та електричними властивостями. Для багатьох застосувань ВНТ надзвичайно важливо знати їхні фрикційні властивості. Однак, дуже мало відомо про сили тертя між окремою нанотрубкою та підкладкою або наконечником. У цій роботі представлено комбіноване теоретичне та експериментальне дослідження сил тертя, з якими стикається нанорозмірний наконечник, що ковзає поверх багатошарової ВНТ на основі опори вздовж напрямку, паралельного або поперечного до осі ВНТ. Автори знаходять вищий коефіцієнт тертя в поперечному напрямку порівняно з паралельним напрямком. Така поведінка пояснюється симуляцією, яка показує, що поперечне тертя викликає м’яке «утруднене кочення» трубки та розсіювання від тертя, яке відсутнє або частково відсутнє для хіральних ВНТ, коли кінчик ковзає паралельно осі ВНТ. Ці висновки можуть допомогти в розробці кращих стратегій для великомасштабного збирання та сортування ВНТ на поверхні.

Анізотропія тертя визначається як залежність тертя від відносної орієнтації двох кристалічних поверхонь, що утворюють суцільно-твердий інтерфейс. Такий процес важко спостерігати в більшості інженерних застосуваннях, але він все ж залишається фундаментальним трибологічним явищем. Новітні технології, такі як мікроелектромеханічні системи, потребують точного контролю тертя на молекулярному рівні, тому що мастильні плівки та покриття, які

використовуються в цих програмах, мають товщину лише декількох молекулярних шарів. Тертя між поверхнями в ковзаючому контакті залежить від структури поверхні та їх орієнтації відносно одна одної та відносно напрямку ковзання. Анізотропію тертя можна досліджувати, змінюючи напрямок зсуву двох поверхонь при фіксованій відносній орієнтації, або фіксуючи напрямок зсуву та змінюючи відносну кристалографічну орієнтацію двох поверхонь Металеві поверхні зазнають пластичної деформації в умовах контакту. Дослідження анізотропії тертя між пластично деформуючими поверхнями монокристалічних металів дозволяють припустити, що ефекти співмірності поверхневих решіток не є основною причиною анізотропії тертя. Натомість саме об'ємні властивості кристалічних решіток, такі як орієнтація площин ковзання або анізотропія механічних властивостей об'єму, призводять до анізотропії тертя. Виникає припущення, що анізотропія тертя переважно викликана переміщенням атомних площин ковзання в основній частині кристала і не була обумовлена подібністю поверхневої решітки [10].

Широкий спектр використання анізотропії фізичних властивостей кристалів - це її використання в техніці, що базується на застосуванні монокристалів (напівпровідникова електроніка, електро- і радіотехніка, кристалооптика) [11].

Анізотропія в монокристалах обумовлена будовою монокристалів, властивостями їх молекул, атомів, іонів, ін., специфікою їх розташування. Анізотропія є характерною особливістю кристалів. Оскільки швидкості росту кристалів у різних кристалографічних напрямках розбіжні, кристали виростають у формі правильних багатогранників. Нагрівання сфери, виготовленої з ізотропної речовини, зумовлює її рівномірне розширення в усіх напрямках та збереження сфероїдної форми. При цьому кристалічна сфера з анізотропної речовини, внаслідок нагрівання, може змінювати форму. Тому при нагріванні кристалічна сфера може розширюватися в одному напрямку й стискатися в іншому, поперечному до попереднього.

У роботі [12] показано, що полікристалічні матеріали або сплави, що утворюються з безліч дрібних кристаликів (кристалітів), орієнтованих вільно в просторі, у цілому ізотропні або майже ізотропні. Анізотропія таких матеріалів проявляється в результаті механічної обробки, що може призводити до переважної орієнтації кристалітів в одному певному напрямку. Анізотропія також властива деяким некристалічним речовинам з природною або штучною текстурою, наприклад, деревині.

При контакті двох поверхонь вони зазнають або пружної, або пластичної деформації. Загалом анізотропія є двох типів, притаманна та індукована. У роботі [13] показано, що перша, як правило, є результатом осідання частинок, тоді як друга утворюється в процесі пластичної деформації внаслідок, наприклад, структурних змін матеріалу або утворення орієнтованих мікротріщин.

Анізотропія тертя також присутня і в неметалевих твердих речовинах (наприклад, в таких як алмаз і сапфір). Для таких тіл спостерігаються великі ширини колій та високі коефіцієнти тертя, тоді як для металів притаманні вузькі колії.

Анізотропія має дві проблеми пов’язані з товщиною дуги. По-перше, ширина доріжки, викликана тертям, не може бути виміряна точно; по-друге, «ефект оранки» не сприймався як причина анізотропії, хоча радіуси використовуваних повзунків завжди були дуже малими. Якщо не брати до уваги нагрівання тертя, то тертя опору вважається складеним із двох частин:

1) опір міжфазного зсуву між поверхнею тертя та повзунком;
2) опір, що виникає через зсув повзунка.

У зв’язку з цим, як показано у [14], такі механічні характеристики, як твердість і міцність на зріз є дуже важливими при будь-якій інтерпретації механізму тертя між твердими поверхнями. При невеликих навантаженнях (порядку 10^{-8} Н) деформація твердих поверхонь зводиться до мінімуму. Але якщо дане навантаження зменшити на стільки, що пружна деформація перестане спостерігатися, то анізотропія тертя зникне. Тобто анізотропію тертя можна

спостерігати між поверхнями, які зазнають пружної деформації під час ковзання [10].

Якщо тиск контакту перевищує критичне значення, то виникає фрикційна анізотропія. Дане явище значною мірою пояснюється пошкодженням поверхні та підповерхні, що утворюються в кращих кристалографічних напрямках самим процесом ковзання. Є можливість, що в доріжці тертя відбувається деяка пластична канавка, незважаючи на те, що тиск у 20 ГПа для цього занадто малий. З іншого боку, може бути задіяна деяка мікропластична деформація, що сприяє розсіюванню енергії, але головний фактор, передбачає розтріскування під поверхнею, яке утворюється, коли тиск контакту перевищує деяке критичне значення [15].

1.3. Анізотропія тертя графену.

У роботі [16] наведено огляд трибологічних властивостей граничних плівок вуглеводнів та води, стиснутих між атомарно-гладкими та шорсткими поверхнями. Показано, що ультратонка плівка рідини завтовшки менше шести молекулярних діаметрів, обмежена в малих обсягах, є твердоподібною. Такий стан характеризується зниженням рухливості молекул, пов'язаним із збільшенням часів релаксації та зменшенням коефіцієнта дифузії. При цьому утворюються квазідискретні шари молекул і реалізується впорядкування в площині шарів. Упорядкованість молекул порушується під впливом атомарного рельєфу стін. Описано експерименти вивчення тертя графену на атомарному рівні. Показано принципову можливість реалізації суперзмащування для вольфрамового зонда фрикційного силового мікроскопа, що зсувається по графену поверхні. Також розглядаються методики отримання графену при розшаруванні графітового зразка та утворення дефектів у графіті при його опроміненні різними частинками. Описується експериментальна методика вимірювання тертя металевих наночастинок поверхнею графену. Розглянуто основні переваги цього підходу порівняно з відомими способами та фрикційна дуальність у цих системах. Показано необхідність подальшого всебічного

теоретичного дослідження тертя металевих наночастинок, адсорбованих на атомарно-гладких поверхнях.

Модифікація електричних властивостей оксиду графену засобами скануючої зондової мікроскопії розглядається у роботі [17].

У роботі [18] розглядається модифікація електричних властивостей оксиду графену засобами скануючої зондової мікроскопії.

У роботі [19] Досліджено анізотропію тертя між двома поверхнями монокристалів Pd(100), що ковзають у середовищі надвисокого вакууму. Вимірювання тертя проводили з використанням інтерфейсів Pd(100)/Pd(100), модифікованих шляхом адсорбції октану в межах від 4 до 40 молекулярних моношарів (ML). Відносну кристалографічну орієнтацію двох поверхонь Pd(100) систематично змінювали, і вимірювання тертя проводили в кожній орієнтації як функцію октанового числа. Ці вимірювання виявили, що тертя є анізотропним відносно орієнтації решітки Pd(100). Коли поверхні були вирівняні, утворюючи співмірну межу розділу, і зрізані вздовж напрямку ⟨110⟩ з 4 мл октану на межі розділу, коефіцієнт статичного тертя становив мкс > 8,0 ± 2,0. Мінімум статичного коефіцієнта тертя був отриманий, коли дві поверхні Pd(100) з 4 мл октану на межі розділу були розорієнтовані на θ = 45°. За цих умов коефіцієнт статичного тертя ковзання вздовж напрямку ⟨110⟩ нерухомої поверхні становив μs = 4,0 ± 2,0. Вищі показники октанового числа зменшили тертя, але анізотропія тертя зберігалася для покриттів октанового числа до 20 мл на межі розділу. На обох поверхнях спостерігалися сліди зносу, що вказує на те, що під час ковзання відбулася пластична деформація. Спостереження анізотропії тертя за наявності невпорядкованих накладних шарів октану та під час зсуву поверхонь, які пластично деформуються, свідчить про те, що анізотропія тертя походить із властивостей об’ємних кристалічних ґраток, а не співмірності поверхневої ґратки. Ці результати підтверджують висновки попереднього дослідження анізотропії тертя між поверхнями Ni(100).

У роботі [4] встановлено, що при орієнтованому вирощуванні плівкової системи на кристалі MgO(100) спостерігається суттєва магнітна анізотропія, що

проявляється у збільшенні коерцитивної сили (Вс) у 2 рази та значній зміні магнітоопору при різних кутах повороту зразка. АСМ – дослідження показали, що шорсткість поверхні для системи Au(2 нм)/Co(30 нм)/Fe(30 нм)/MgO у чотири рази нижча порівняно зі зразком на аморфній підкладці (у невідпаленому стані). Крім того, у системах на підкладці з монокристалу оксиду магнію дифузійні процеси протікають менш інтенсивно ніж у випадку підкладки SiO_2/Si.

У роботі [13] проведено дослідження по визначенню впливу матеріалу підкладки для нанесення алмазоподібних плівок на подальшу поведінку зразка як електроду в електрохімічному сенсорі для аналізу біорідин. Проведені експериментальні дослідження електрохімічних властивостей електроду та проведена реконструкція поверхні завдяки атомно-силовій мікроскопії. Показана можливість використання напівпровідникових та провідникових алмазоподібних структур у сенсорних пристроях для біоаналізу.

У роботі [6] представлено історичний розвиток скануючої тунельної мікроскопії.

У роботі [7] запропоновано просту модель для опису взаємодії вимушеного коливання кантилевера зі зразком в експерименті зі скануючим силовим мікроскопом у режимі постукування, щоб зробити приблизну оцінку сил, що впливають на поверхню при кожному торканні кінчика. Припускаючи слабке демпфування кантілевера (коефіцієнт якості кантілевера між 100 і 1000) і поверхні, можливо оцінити сили в діапазоні сил у контактному режимі. Ці сили можуть змінюватися на порядки величини, напр. від 10^{-6} до 10^{-11} Н. Для зменшення сили взаємодії пропонується сканування на низькочастотній стороні резонансної частоти безконтактного коливання кантилевера. Збільшення різниці фаз між безконтактним коливанням кантилевера в повітрі та коливанням під час контакту вносить сильні варіації сили. Покращення роздільної здатності, якого можна досягти для м’яких зразків за допомогою системи режиму постукування, є результатом усунення зсувних зусиль і можливості мінімізації сили на поверхні шляхом зміни заданої точки амплітуди сканування. Зусилля, що діють на підкладку, посиляться великою жорсткістю підкладки.

У роботі [8] удосконалено техніку роботи скануючого силового мікроскопа в динамічному безконтактному режимі (динамічна силова мікроскопія). Для керування коливальним кантилевером були застосовані різні методи: виявлення нахилу (підсилювач синхронізації, перетворювач RMS-to-DC) і метод частотної модуляції (FM). Переваги цієї неруйнівної методики продемонстровано на різних зразках, таких як м'яка органічна речовина (гексагонально упакований проміжний шар, плівка Ленгмюра-Блоджетта), шарувато-структуровані сполуки (CdI2), n-легований Si(111) і сегнетоелектричні кристали [тригліцин сульфат (TGS), гуанідіній алюміній сульфат гексагідрат (GASH)]. На гранях розщеплення TGS і GASH можна відобразити сегнетоелектричні домени та доменні стінки. З експериментальних даних можна визначити просторову роздільну здатність приблизно 10^{-5} нм у бічних напрямках і >0,1 нм у вертикальному напрямку.

У роботі [16] представлено комбіноване теоретичне та експериментальне дослідження сил тертя, з якими стикається нанорозмірний наконечник, що ковзає поверх багатошарової ВНТ на основі опори вздовж напрямку, паралельного або поперечного до осі ВНТ. Знайдено більший коефіцієнт тертя в поперечному напрямку порівняно з паралельним напрямком. Така поведінка пояснюється симуляцією, яка показує, що поперечне тертя викликає м'яке «утруднене кочення» трубки та розсіювання від тертя, яке відсутнє або частково відсутнє для хіральних ВНТ, коли кінчик ковзає паралельно осі ВНТ.

У роботі [20] досліджено анізотропію тертя між двома поверхнями монокристалів Pd(100), що ковзають у середовищі надвисокого вакууму. Вимірювання тертя проводили з використанням інтерфейсів Pd(100)/Pd(100), модифікованих шляхом адсорбції октану в межах від 4 до 40 молекулярних моношарів (ML). Відносну кристалографічну орієнтацію двох поверхонь Pd(100) систематично змінювали, і вимірювання тертя проводили в кожній орієнтації як функцію октанового числа. Ці вимірювання виявили, що тертя є анізотропним відносно орієнтації решітки Pd(100). Коли поверхні були вирівняні, утворюючи співмірну межу розділу, і зрізані вздовж напрямку $\langle 110 \rangle$ з 4 мл октану на межі розділу, коефіцієнт статичного тертя становив мкс > 8,0 ± 2,0. Мінімум

статичного коефіцієнта тертя був отриманий, коли дві поверхні Pd(100) з 4 мл октану на межі розділу були розорієнтовані на $\theta = 45°$. За цих умов коефіцієнт статичного тертя ковзання вздовж напрямку ⟨110⟩ нерухомої поверхні становив $\mu s = 4{,}0 \pm 2{,}0$.

У роботі [21] розвинуто підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки. Це допомагає описати процеси дефектоутворення в адіабатичному наближенні. Система основних рівнянь залежить від початкового розподілу дефектів (дислокацій і меж зерен). Визначено фазову діаграму з областями реалізації різних типів граничних структур. За внутрішньою енергією досліджено вплив взаємодії кількох типів дефектів на формування граничної структури. Знайдено умови утворення двох граничних структур. В рамках адіабатичного наближення досліджено кінетику встановлення стаціонарних значень щільності дефектів. Показано, що розміри зерен у граничних структурах зменшуються зі збільшенням пружних деформацій.

У роботі [22] проведено порівняльний аналіз мікроструктури та властивостей покриттів на основі тугоплавких сполук залежно від умов осадження (температура та потенціал підкладки, парціальний тиск робочого газу). Виявлено загальні закономірності, що полягають у наявності стовпчастої структури та текстури росту для твердих та надтвердих наноструктурованих (нанокомпозитних) покриттів. Як показано, існує два можливих напрямки зростання <111> і <100> для карбідних і нітридних покриттів перехідних металів; для диборидних покриттів перехідних металів таким напрямком є <0001>. Проаналізовано вплив структурного стану на зміну фізико-механічних властивостей нанокристалічних покриттів на основі нітридів, карбідів і боридів перехідних металів.

У роботі [23] методом молекулярної динаміки досліджено анізотропію тертя металевих наночастинок. Розрахунки анізотропії проведено для наночастинок алюмінію, паладію та платини, що містять 10 000 атомів. Анізотропія досліджується при високих швидкостях ковзання наночастинок по поверхні графіту. Вплив несумірності і ближній порядок контактних поверхонь

наночастинок призводить до відсутності вираженої кутової залежності сили тертя.

У роботі [24] за допомогою моделювання класичної молекулярної динаміки досліджено силу тертя, що діє на наночастинки срібла та нікелю, зрізані на графеновому листі в різних бічних напрямках. Результати показують існування анізотропії тертя для обох металів. У більшості випадків максимальне значення сили тертя приблизно в два рази перевищує мінімальне. Форма залежностей миттєвих значень компонент сили тертя від відповідних бічних складових положення центру мас нанооострівців сильно залежить від напрямку ковзання, змінюючись між пилкоподібним і нерегулярним. Запропоновано якісне пояснення результатів на основі моделі «патч».

У роботі [25] методом класичної молекулярної динаміки досліджено механічне відшарування графенової поверхні з адгезивною нанонерівністю за різних температур від 298 К до 2 К. Досліджено два типи міжшарової взаємодії. Для попарного потенціалу Леннарда-Джонса повне видалення верхнього шару графену під час втягування нанонерівності відбувається у всьому діапазоні розглянутих температур. Результати, отримані з використанням залежного від реєстру потенціалу, який враховує внесок електронної делокалізації, окрім ван-дер-ваальсової, демонструють більш виражену температурну залежність. У цьому випадку відшарування відбувається при температурах вище 16 К, але починаючи з 8 К і до 2 К поведінка системи проявляє якісні зміни з відсутністю розколу зразка. Аналітичні оцінки в поєднанні з результатами моделювання показують, що внесок перекривання пі-орбіталей атомів вуглецю відіграє важливу роль у відшаруванні графіту.

У роботі [26] представлено класичні молекулярно-динамічні розрахунки поведінки наночастинок міді та золота на графеновому листі, зрізаному постійною прикладеною силою Fa. Сила Fs, що діє на частинку з боку підкладки, залежить від матеріалу наночастинок (Au або Cu) і демонструє пилкоподібну залежність від часу, яку ми приписуємо локальній співмірності між положеннями атомів на поверхні металевих наночастинок із решітками графіту.

Усереднене за часом значення Fs (сила тертя), що діє на наночастинки Au, лінійно зростає з площею контакту, маючи нахили, близькі до експериментально спостережуваних. Для пояснення отриманих результатів пропонується якісна модель.

1.4 Актуальність дослідження графену.

Графену приписують безліч найрізноманітніших практичних застосувань. Його можна використовувати для створення імплантів для мозку, він може застосовуватися в системі охолодження для супутників, графен можна перетворити на надпровідник; корисний і в побуті: наприклад, як фарба для волосся. Вже сьогодні графен застосовується в електроніці, медицині: роботи з нейродевайсів та біосенсорів ведуться з 2008 року — але коли графенову біоелектроніку почнуть масово застосовувати на практиці, поки важко сказати. Цей матеріал особливо цінується за його міцність та пружність. А ще графен дуже прозорий: його прозорість складає 97%. Наразі є багато ідей про те, як можна застосовувати графен. Були ідеї, що вдасться його використовувати як транзистор як заміну елементної бази сучасної електроніки. Але це, наскільки я знаю, не пішло і тепер намагаються використати його пружні властивості. Якщо порівняти атомарний шар вуглецю (чим за своєю суттю графен і є) та атомарний шар, скажімо, алюмінію, то ми побачимо, що жорсткість графену буде як мінімум у десять разів вищою. Так як графен одноатомний, він спокійно пропускає світло, тобто ви бачите через нього все. З іншого боку, він досить міцний, щоб забезпечити необхідний захист від якихось механічних впливів. Тому графен можна застосовувати як прозорий, але міцний екран для запобігання рідкокристалічних дисплеїв, наприклад. Його міцність може бути корисною для створення гнучких екранів, що не б'ються, міських будівель та ін., можливо, він стане майбутнім будівельним матеріалом для космічних кораблів, громадського транспорту тощо. Деякі експерти вважають, що графен навіть може спровокувати новий стрибок у розвитку людської цивілізації. Кремнієва ера скоро закінчиться, кажуть вчені, адже крем'яна елементна база, на якій

створюється сучасна техніка, вже підходить до своєї технологічної та фізичної межі, і в цьому сенсі графен може стати відмінною альтернативою. Використання графена в електроніці допоможе створити більш потужні комп'ютери та системи. У світі його вже використовують для створення гнучких мобільних телефонів [27]. Свого часу освоєння металів кардинально змінило життя людей - ту ж долю пророкують графену, називаючи його найзагадковішим і багатообіцяючим новим матеріалом майбутнього, який здатний зробити революцію в енергетиці. Графен дає можливість отримувати енергію новим способом. Цей матеріал має можливість пропускати позитивно заряджені атоми водню, при тому, що він непроникний для інших газів, у тому числі і для самого водню. Це відкриває перед вченими неймовірні перспективи створення паливних елементів на основі водню. Так, наприклад, можна буде збирати в таких елементах водень з повітря, а потім отримувати за допомогою графену електрику і воду, практично не породжуючи жодних відходів. Минулого року фізики зі США показали, що графен можна використовувати для збору енергії: він здатний виробляти енергію за допомогою навколишнього середовища. Вченими з Університету Арканзасу було розроблено схему, здатну вловлювати тепловий рух графена і перетворювати його на електричний струм. Енергозберігаюча схема, заснована на графені, може бути вбудована в чіп для забезпечення чистої, безмежної, низьковольтної енергії для невеликих пристроїв або датчиків", - зазначив Пол Тібадо, професор фізики, який брав участь в експерименті. Графен може бути використаний для створення квантових комп'ютерів, завдяки цьому матеріалу такі комп'ютери можуть стати компактнішими. У графена можуть бути більш загальнодоступні застосування, наприклад в дизайні одягу. Речі з графену, легкі та щільні, вже сьогодні можна знайти на світових ринках.

У роботі [28]. вперше зазначено про легування чутливих елементів WO_3 вуглецевим композитом неблагородного металу, а саме композитом наночастинки металевого нікелю та вуглецю (NirGO).

Останнім часом вивчення взаємодії графенового листа з різними нанооб'єктами, оскільки можуть змінювати електронні і структурні властивості цього матеріалу, привертає увагу багатьох дослідників. Про це свідчать численні публікації у наукових журналах [29-37].

РОЗДІЛ 2 - МОДЕЛЬ ФРИКЦІЙНОЇ АНІЗОТРОПІЇ НАНОЧАСТИНОК ПАЛАДІЮ НА ГРАФЕНІ

2.1. Вступ.

Анізотропія тертя - це залежність тертя від відносної орієнтації двох кристалічних поверхонь, що створюють суцільний інтерфейс. Це важко спостерігати в більшості інженерних застосувань, але це фундаментальні трибологічні явища. Нові технології, такі як мікромеханічні системи, вимагають точного контролю тертя на молекулярному рівні, оскільки мастильні плівки та покриття, що використовуються в цій техніці, мають ширину кількох молекулярних шарів. Сила тертя між поверхнями в контакті ковзання є залежною від їх структури і орієнтації відносно один одного і напрямку ковзання. Фрикційну анізотропію можна досліджувати, змінюючи напрямок зсуву двох поверхонь із фіксованою відносною орієнтацією або шляхом фіксації напрямку зсуву та зміни відносної кристалографічної орієнтації двох поверхонь. Дві поверхні, що контактують одна з одною, можуть піддаватися пружній або пластичній деформації [20]. Загалом, анізотропія буває двох типів: власна і індукована. Перша, зазвичай, є результатом осідання частинок, а друга утворюється в процесі пластичної деформації, наприклад, у процесі зміни структури матеріалу або утворення орієнтованих мікротріщин [32]. Зазвичай металеві поверхні піддаються пластичній деформації в контактних умовах. Дослідження фрикційної анізотропії між пластично деформованими поверхнями монокристалічних металів свідчить про те, що ефекти співмірності поверхні решітки не є його основною причиною. Є припущення, що, в основному, анізотропія тертя зумовлена ковзанням атомних площин в об'ємі кристала і не обумовлена сумірністю поверхні решітки [20]. Анізотропія тертя також присутня в неметалевих твердих тілах, таких як алмаз або сапфір. Такі матеріали демонструють значну ширину доріжки та високі коефіцієнти тертя, тоді як для металів – вузькі доріжки. У літературі можна знайти дві проблеми, пов’язані з шириною сліду анізотропії. По-перше, ширина колії вимірюється неточно; по-друге, термін орання теорії адгезії не сприймається як причина анізотропії, хоча

розміри використовуваних наконечників завжди були дуже малими. Якщо нагрівання тертям не враховується, опір тертю вважається утвореним з двох частин: міжфазного опору зсуву між поверхнею тертя та блоком ковзання та опору в результаті ковзної оранки. У зв'язку з цим механічні характеристики, такі як твердість, текучість і напруження розтягу дуже важливі для будь-якої інтерпретації механізму тертя між твердими тілами [21]. За допомогою малих навантажень порядку 10^{-8} Н деформація твердих поверхонь мінімізується. Проте, якщо навантаження зменшиться настільки, що пружна деформація перестане спостерігатися, тоді анізотропія тертя зникне. Тобто анізотропію тертя можна спостерігати між пружними поверхнями деформується при ковзанні [20]. Коли контактний тиск перевищує критичне значення, виникає анізотропія тертя. Це явище пояснюється поверхневим і підповерхневим руйнуванням, яке утворюється переважно в кристалографічних напрямках під час ковзання [22]. Можливе утворення деякої пластичної борозенки трек тертя, хоча тиск у 20 ГПа здається для цього занадто низьким. З іншого боку, деформація мікропластику може сприяти розсіюванню енергії, але основним фактором є утворення підповерхневих тріщин коли контактний тиск перевищує деяке критичне значення [22]. У попередніх роботах [23, 24] на основі класичної молекулярної динаміки описано анізотропію тертя наночастинок алюмінію, платини, паладію, срібла та нікелю, адсорбованих на графеновій поверхні. Модель Хоменко - Захарова присвячена аналізу цього явища для наночастинок паладію та різні коливання температури.

2.2. Методика.

Розрахунки проводять за допомогою програми, створеної в середовищі розробки Microsoft Visual Studio 2008 з використанням технології паралельних обчислень Nvidia CUDA. У розрахунках моделюється система: наночастинка, що складається з 10000 атомів паладію і рухається по поверхні графену, який складається з 64 × 64 комірок і 65536 атомів вуглецю. Графенова підкладка зафіксує ребра зигзагом і креслить уздовж осей *x* і *y* і паралельні площини *x* і *y*

(рис. 2.1). Протягом моделювання підкладка залишається нерухомою лише по краях.

Потенціал моделі вбудованого атома використовується для опису взаємодії атомів паладію [34]. Сили взаємодії вуглецю в графеновій підкладці представлені гармонійним потенціалом [35]. Потенціал Леннарда–Джонса з параметрами енергії, що дорівнює 0,008738 еВ та параметром довжини σ=0,24945 нм відображає міжатомну енергію між атомами паладію наночастинки та атомами вуглецю графенової підкладки [24–26]. Розрахунки проводяться в 3 етапи. На першому етапі відбувається руйнування гранецентрованої кубічної решітки одного шару атомів паладію в результаті нагрівання. Метал стає аморфним.

Наступний крок – утворення наночастинки. Наночастинка охолоджується за допомогою термостата Берендсена, за допомогою якого відводиться надлишкове тепло і досягається задана температура [36]. При цьому відбувається формування полікристалічної структури наночастинок [37–39]. Останнім кроком є рух наночастинки за допомогою сили *F*.

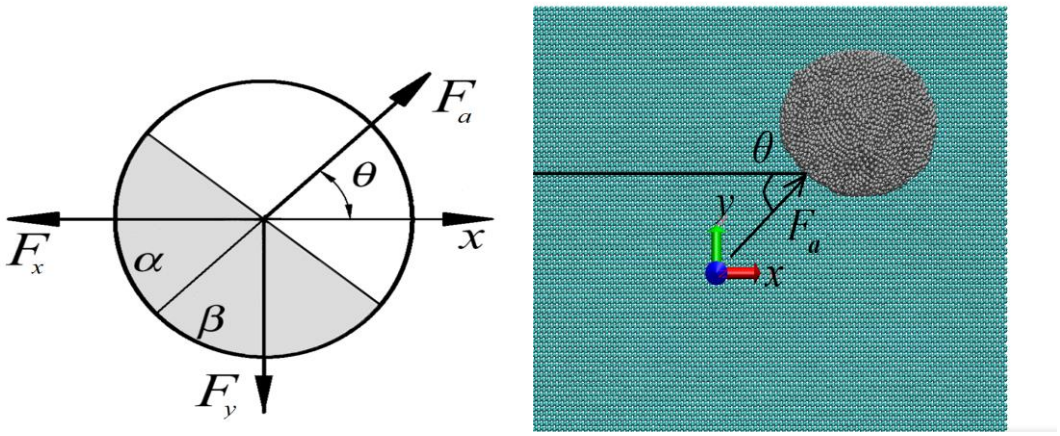

Рис. 2.1. Рушійні сили, що діють на наночастинку під час ковзання по графеновій підкладці (ліворуч) і зверху вигляд системи з ковзанням наночастинки при θ = 45◦ (праворуч).

Сила зсуву прикладена до кожного атома, розташованого у вибраному секторі на рисунку 1, у напрямку, визначеному кутом θ, відрахованим від напрямку x. Сектори утворюються і діляться діагоналлю. Пряма *Fa* та кути α = β = 90◦ містять приблизно однакову кількість атомів у кожній половині сектора, який симетричний до напрямку прикладеної сили *Fa*. Нульовий крутний момент відносно центру маси наночастинки в площині *xOy* забезпечується геометрією, описаною вище, що запобігає обертанню наночастинки в цій площині. Ми не моделюємо обертання наночастинки в порядку забезпечення прямолінійного руху вздовж поверхні графену. Загальна результуюча діюча сила тертя на наночастинку визначається таким чином:

$$F = \sqrt{F_x^2 + F_y^2}\ , \qquad (2.1)$$

де *Fx* і *Fy* – складові сили тертя вздовж відповідних осей. Сила тертя вимірюється для таких кутів: 15◦, 22,5◦, 30◦, 37,5◦, 45◦ і 60◦.

2.3. Модель Хоменка – Захарова.

На рис. 2.2 зображено стадію руху наночастинки під кутом 45◦ і температурою 80 К.

Максимальна температура системи під час моделювання становить 645 К, що приблизно втричі нижче ніж температура плавлення паладію (1828 К). На стадії формування та охолодження наночастинок, швидкість наночастинок дорівнює нулю. Швидкість зростає протягом усього руху. Контакт площа *A* на рис. 2.3 змінюється незалежно від швидкості через прогин підкладки під наночастинкою. Якщо ми вимкнемо застосування сили і наночастинка не рухається, площа не зміниться при відсутності деформації підкладки.

Порівняно з роботами [23, 24] обрано значно більший температурний крок і діапазон, щоб зрозуміти, як залежить сила тертя від кута прикладеної сили і як змінюється в залежності від вибору температури. Маркери на рис. 2.4

відповідають розрахованим середнім значенням сили тертя за повним рухом, а суцільні лінії є кубічні сплайни збільшенням кута. З рисунка видно, що при кутах 22,5° і 30° більшість наночастинок при різних температурах мають приблизно однакову силу тертя. У більшості випадків максимальне значення сили тертя приблизно в два рази перевищує мінімальне. Залежності сили тертя при температурах 80 і 90 К разом характеризуються мінімумом під кутом 45° і починаючи з цього значення *F* стрибкоподібно зростає до максимальної величини зі збільшенням кута. Крива, що описує анізотропію при 90 К, також має мінімум під кутом 22,5 градусів. При температурах 80 і 130 К мінімальне значення сили тертя спостерігається під кутом 15°. Коли система має температуру 120 К, мінімум тертя спостерігається під кутом 37,5°. Криві сили тертя при 120, 130 і 110 К показують подібну поведінку, де сила тертя спочатку зростає, а потім зменшується після кутів 22,5 і 30 градусів і починає знову рости після кута 37,5° і 45°. Усі залежності на рис. 2.4 мають схожу немонотонність поведінки.

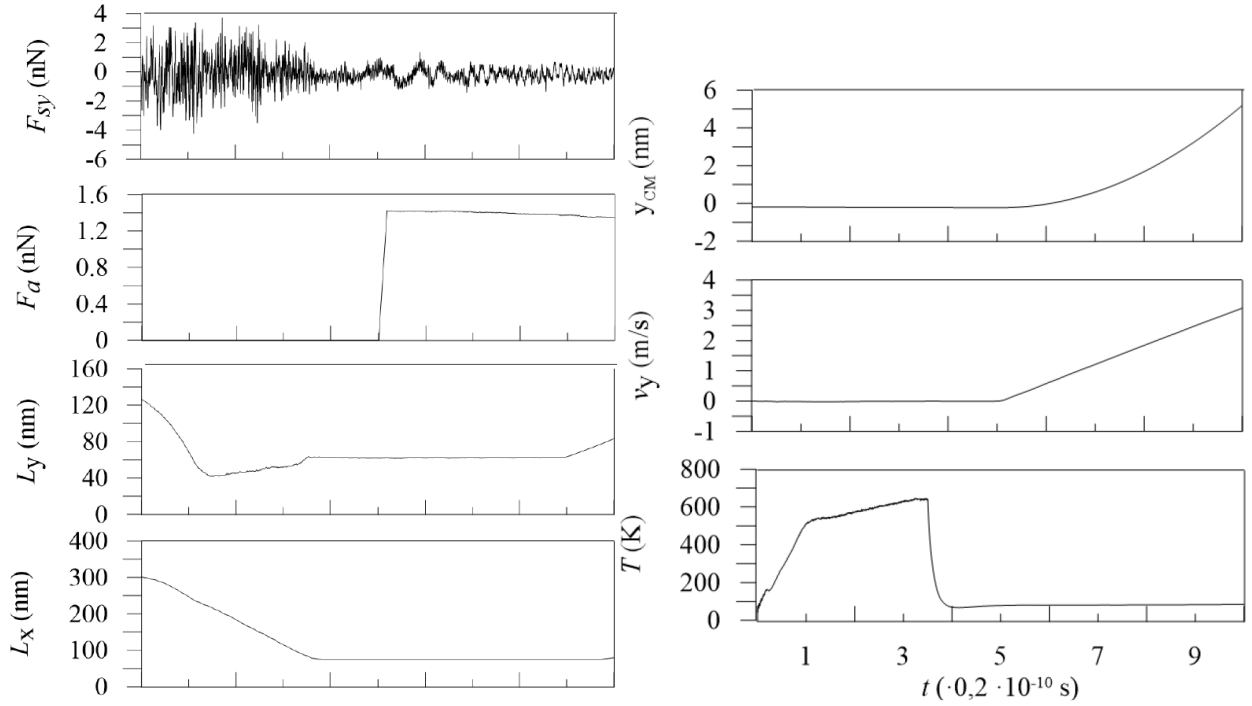

Рисунок 2.2. Часові залежності величин для наночастинки при θ = 45° та при заданій температурі 80 *K*: *Fsy* – сила субстрату; *Fa* - прикладена сила; *Lx* і *Ly* — бічні розміри наночастинок у *x*- і *y*-напрямах відповідно; y_{CM} і v_y є

компонентами у позиції та швидкості центр мас наночастинки відповідно; T – температура системи.

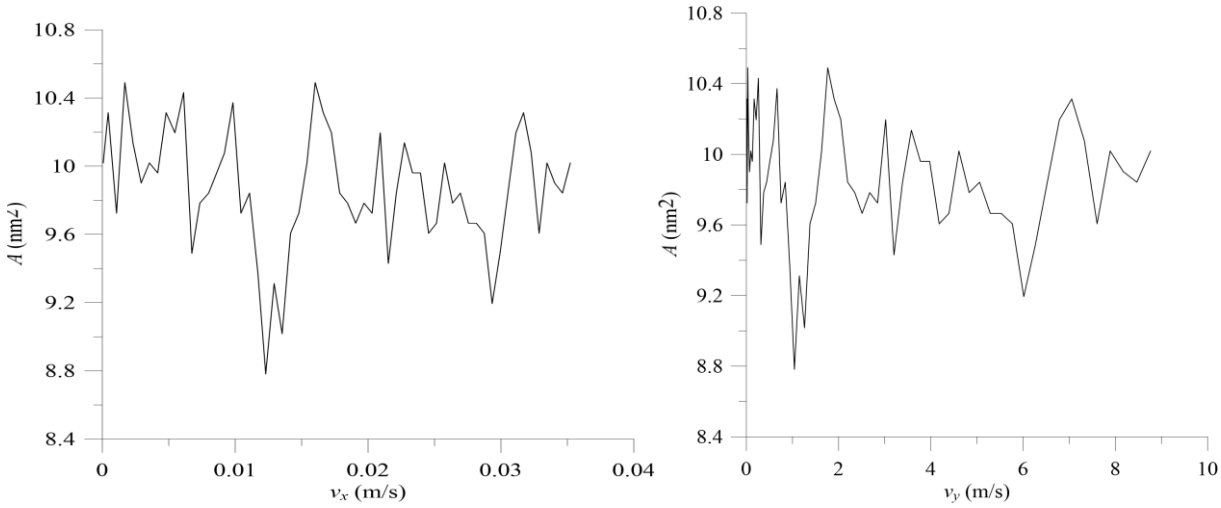

Рис. 2.3. Залежності площі контакту від швидкості по осях x (ліворуч) та y (праворуч).

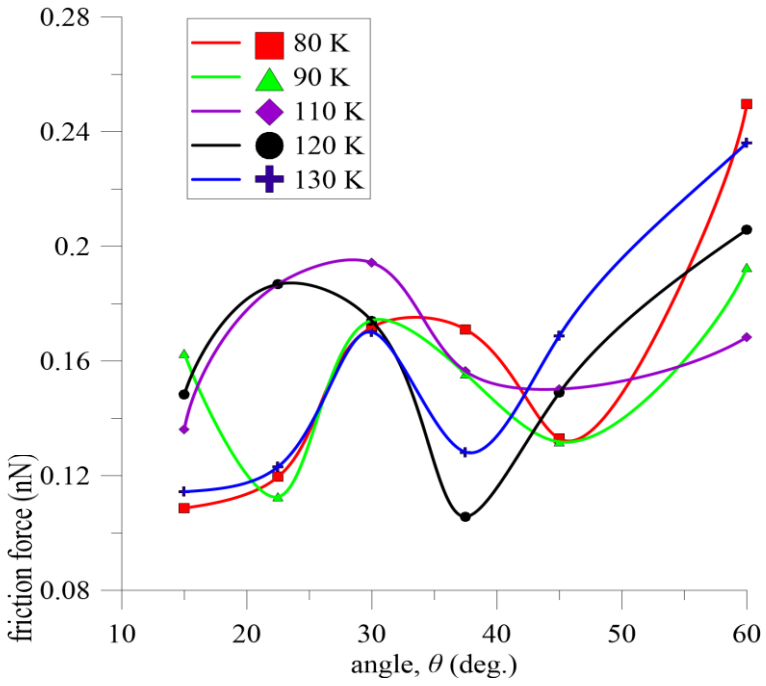

Рис. 2.4. Анізотропія тертя наночастинок при температурах 80, 90, 110, 120 і 130 К.

РОЗДІЛ 3 - РОЗШИРЕНА МОДЕЛЬ ХОМЕНКА - ЗАХАРОВА ФРИКЦІЙНОЇ АНІЗОТРОПІЇ НАНОЧАСТИНОК ПАЛАДІЮ НА ГРАФЕНІ

3.1. Програма SurfaceGrowth.

SurfaceGrowth [24] надає можливість вивчення руху металевих наночастинок по поверхні графену - одного шару атомів вуглецю, упакованих у ґратки, складених з "бджолиних сот". Не дивлячись на те, що графіт складається з нескінченного числа шарів графену, розгляд одного шару може бути корисним в якості першого наближення для дослідження тертя наночастинок на поверхні графіту. SurfaceGrowth надає вибір одного з шести металів, що мають гранецентровану кубічну (ГЦК) гратку в об'ємному стані (за нормальних умов): міді (Cu), срібла (Ag), золота (Au), нікелю (Ni), алюмінію (Al) та свинцю (Pb). У процесі моделювання зсуву частинок, що складаються з атомів вибраного металу, проводиться вимірювання різних параметрів: повного імпульсу системи, повної та потенціальної енергій, температури, швидкості та положення центру мас, розмірів наночастинки, сил тертя і зсуву, що діють на частинку, а також функції радіального розподілу, що дозволяє стежити за структурою наночастинки. Крім того, систему можна візуалізувати вбудованими інструментами або з використанням програми Visual Molecular Dynamics (VMD) [38].

Крім зсуву в SurfaceGrowth передбачені режими моделювання об'ємних властивостей обраного металу (режим "Bulk"), а також напилення на графен (режим "Surface Growth"). Перший режим призначений для перевірки правильності розрахунків для металів, зокрема значень енергії, повного імпульсу та атомної структури. Другий режим є першим кроком на шляху повного відтворення експериментів, в яких наночастинки отримують напиленням. У цій реалізації SurfaceGrowth в режимі Surface Growth проводиться просто спостереження за процесом напилення атомів металу на шар графену без можливості подальшого зсуву отриманих структур.

3.2. Параметри.

Існують параметри, загальні для всіх трьох режимів, а деякі параметри потрібні лише у кожному режимі. Задавати параметри можна лише до початку обчислень.

Приклад вхідних параметрів:

```
0               # regime, 0 - bulk, 1 - surface growth, 2 - shear          1
1               # metal Cu(0), Ag(1), Au(2), Ni(3), Al(4), Pb(5)           2
12              # unit cells in x                                          3
12              # unit cells in y                                          4
12              # unit cells in z                                          5
300             # temperature                                              6
25000           # number of metal atoms (if regime is not bulk)           7
0.0087381       # epsilon for metal-carbon LJ interaction                  8
2.4945          # sigma for metal-carbon LJ interaction                    9

# time parameters
100000          # step limit                                               10
0.001           # time step                                                11
20              # averaging                                                12
10              # equilibration                                            13

# shear parameters
0.0001          # increment of shear                                       14
120000          # cool interval                                            15

# surface growth parameters
0.03            # energy of deposited atoms                                16
40              # deposit by groups, containing this number of atoms       17
1100            # deposit after this number of time steps                  18

# data handling
1000            # create pdb file after this number of steps               19
50              # compute rdf after this number of steps                   20
0               # create backup, 0 - no, 1 - yes                           21
0               # start from backup                                        22
```

3.3 Результати для *Bulk* Al

У цьому розділі описані результати моделювання системи в режимі Bulk, що складається з 32 × 32 × 32 елементарних комірок або 131072 атомів алюмінію, розглянутої протягом 100000 часових кроків. Миттєвий знімок системи дано на рис. 3.1, частина результатів з файлу представлена на рис. 3.2. У цьому режимі перша частина імені файлу результатів за замовчуванням має вигляд "sg_blk__", а потім ім'я містить число елементарних комірок, кількість атомів металу, період усереднення, частоту генерації pdb файлів, початкову температуру і тип металу.

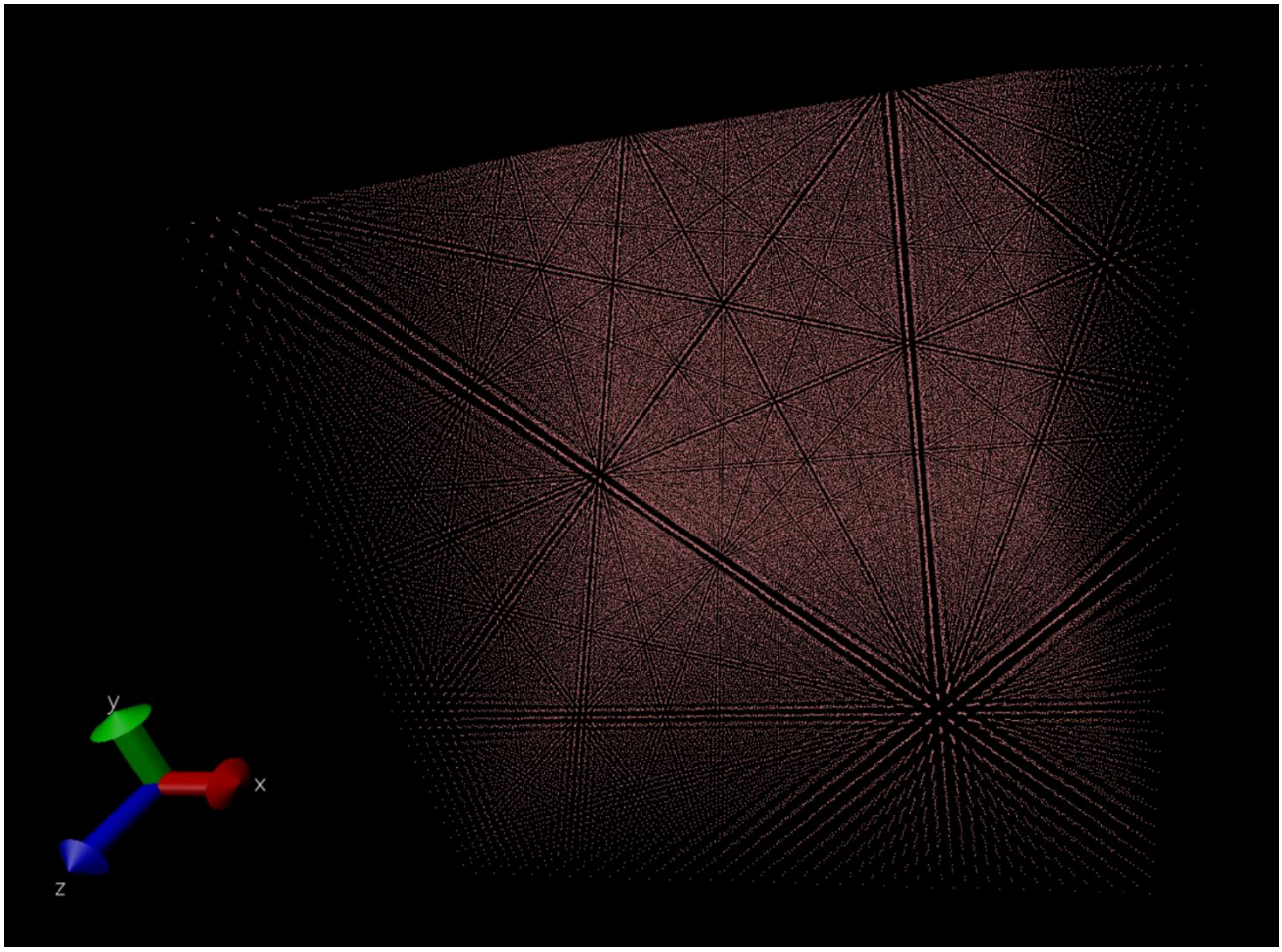

Рис. 3.1: Миттєвий знімок 131072 атомів алюмінію в режимі Bulk.

З рис. 3.2 видно, що повний імпульс системи (impulse)

1) протягом початку моделювання дорівнює нулю, що може свідчити про правильність розрахунків. Зазначимо, що внаслідок накопичення помилок округлення після 20000 кроків імпульс починає незначно відхилятися від 0. Повна енергія системи (totEn(eV),
2) також зберігає своє значення з гарною точністю (до п'ятого знака після коми включно), що і має бути в мікроканонічному ансамблі. Значення потенціальної енергії (potEn(eV),
3) відображає енергію зв'язку металу. Зазначимо, що температура (Tempr(K)) значно знизилася відносно заданого значення 298 К, що пов'язано з переходом частини кінетичної енергії атомів у потенціальну в NVE ансамблі.

stepCnt	impulse	totEn(eV)	totEn.rms(eV)	potEn(eV)	potEn.rms(eV)	Tempr(K)
20	0.0000000	-3.5343690	0.0000000	-3.5766864	0.0006420	327.3724976
40	0.0000000	-3.5343690	0.0000000	-3.5747969	0.0016875	312.7601013
60	0.0000000	-3.5343690	0.0000000	-3.5712919	0.0009712	285.6405334
80	0.0000000	-3.5343690	0.0000000	-3.5665801	0.0019199	249.1914978
100	0.0000000	-3.5343685	0.0008767	-3.5611994	0.0023409	207.5682068
120	0.0000000	-3.5343659	0.0003934	-3.5557365	0.0018385	165.3299561
140	0.0000000	-3.5343592	0.0014156	-3.5507550	0.0013951	126.8386078
160	0.0000000	-3.5343530	0.0000000	-3.5467234	0.0010125	95.7005997
180	0.0000000	-3.5343473	0.0014177	-3.5439575	0.0009332	74.3433762
200	0.0000000	-3.5343430	0.0020028	-3.5425870	0.0011746	63.7747612
220	0.0000000	-3.5343416	0.0000000	-3.5425575	0.0004363	63.5604553
240	0.0000000	-3.5343409	0.0000000	-3.5436497	0.0012691	72.0193634
260	0.0000000	-3.5343409	0.0000000	-3.5455334	0.0000000	86.5916367
280	0.0000000	-3.5343411	0.0007927	-3.5478239	0.0000000	104.3028488
300	0.0000000	-3.5343416	0.0016210	-3.5501435	0.0000000	122.2379456
320	0.0000000	-3.5343442	0.0000000	-3.5521755	0.0020775	137.9498749
340	0.0000000	-3.5343459	0.0000000	-3.5537033	0.0003767	149.7526398
360	0.0000000	-3.5343480	0.0000000	-3.5546257	0.0000000	156.8728485
380	0.0000000	-3.5343492	0.0000000	-3.5549607	0.0013726	159.4554291
400	0.0000000	-3.5343499	0.0020401	-3.5548308	0.0000000	158.4365692
420	0.0000000	-3.5343523	0.0000000	-3.5544279	0.0000000	155.3093414
440	0.0000000	-3.5343535	0.0000000	-3.5539775	0.0019843	151.8192749
460	0.0000000	-3.5343542	0.0017115	-3.5536971	0.0000000	149.6369781
480	0.0000000	-3.5343556	0.0000000	-3.5537527	0.0006002	150.0591736
500	0.0000000	-3.5343568	0.0000000	-3.5542352	0.0013333	153.7857513
520	0.0000000	-3.5343573	0.0000000	-3.5551441	0.0009853	160.8085480
540	0.0000000	-3.5343575	0.0029094	-3.5563881	0.0019200	170.4269562
560	0.0000000	-3.5343595	0.0000000	-3.5578053	0.0002362	181.3824005
580	0.0000000	-3.5343602	0.0000000	-3.5591893	0.0008253	192.0833740
600	0.0000000	-3.5343602	0.0017106	-3.5603268	0.0000000	200.8782349
620	0.0000000	-3.5343606	0.0013599	-3.5610313	0.0000000	206.3294373
640	0.0000000	-3.5343606	0.0016181	-3.5611763	0.0000000	207.4467163
660	0.0000000	-3.5343602	0.0000000	-3.5607104	0.0000000	203.8460236
680	0.0000000	-3.5343602	0.0000000	-3.5596707	0.0019581	195.8133240
700	0.0000000	-3.5343587	0.0017552	-3.5581779	0.0000000	184.2667999
720	0.0000000	-3.5343575	0.0012423	-3.5564139	0.0000000	170.6247864
740	0.0000000	-3.5343568	0.0014160	-3.5545995	0.0007172	156.5983582
760	0.0000000	-3.5343564	0.0000000	-3.5529625	0.0000000	143.9394684
780	0.0000000	-3.5343561	0.0000000	-3.5517004	0.0011247	134.1830139
800	0.0000000	-3.5343542	0.0022883	-3.5509553	0.0000000	128.4228516
820	0.0000000	-3.5343542	0.0017115	-3.5507920	0.0000000	127.1587677
840	0.0000000	-3.5343542	0.0014698	-3.5511892	0.0014374	130.2397766
860	0.0000000	-3.5343542	0.0014698	-3.5520523	0.0000000	136.9110870
880	0.0000000	-3.5343542	0.0017115	-3.5532207	0.0014340	145.9537048
900	0.0000000	-3.5343556	0.0000000	-3.5545058	0.0002111	155.8889771

Рис. 3.2: Частина результатів, отриманих в режимі Bulk для 131072 атомів алюмінію.

3.4 Результати для Surface Growth Al

Коротко розглянемо результати моделювання невеликої системи в режимі Surface Growth, що складається з 11 × 11 елементарних комірок графену (або 11 × 11 × 32 = 3872 атомів вуглецю), на який напилюється 2000 атомів алюмінію.

Для цього режиму дуже важливо правильно підібрати параметри. Ми використовували такі параметри: енергія напилення 0.03 eV, параметри ЛД потенціалу: epsilonLJ = 0.05 eV, sigmaLJ = 2.49450 angstrom. Атоми напилювалися групами із 20 штук через 5000 часових кроків. Це обумовило те, що групи генерувалися 2000/20 = 100 разів, і тривалість напилення склала 5000×100 = 500000 часових кроків. Ми не будемо детально описувати результати вимірювань. Зазначимо, що задавши ненульове число атомів металу, імпульс не буде дорівнювати нулю, оскільки лише крайні атоми графену закріплені. Як зазначалося, RDF у нашому випадку особливого сенсу протягом більшої частини періоду моделювання не має, тому тут не наводиться. Зазначимо, що в результаті напилення утворилися острівці алюмінію напівсферичної форми. Це вказує на те, що для обраних параметрів напилення відбувається за механізмом Вольмера-Вебера. Частина атомів також осідає під шаром графену через періодичні граничні умови.

3.5 Результати для Shear Al

Розглянемо результати моделювання системи в режимі Shear, що складається з 22 × 22 елементарних комірок графену (або 22 × 22 × 32=15488 атомів вуглецю), на якому знаходяться 10000 атомів алюмінію, так що загальний розмір системи 25488 атомів. Зазначимо, що обрані значення параметрів достатні для дослідження тільки початку зсуву.

Розглянемо детальніше деякі вимірювання. На рис. 3.3 представлені часові залежності швидкості і координати центру мас (ЦМ) наночастинки, температури, сил тертя і зсуву, які діють на частинку. Можна зазначити, що залежність сили тертя, яка діє на частинку, від часу має пилоподібний вигляд, що є характерним для так званого переривчастого руху (stick-slip motion), часто спостережуваного в нанотрибологічних експериментах. Цей режим також проілюстровано на рис. 3.4, де показано залежність сили тертя від координати ЦМ. Причина переривчастого тертя не є очевидною, і необхідні подальші дослідження, щоб її з'ясувати.

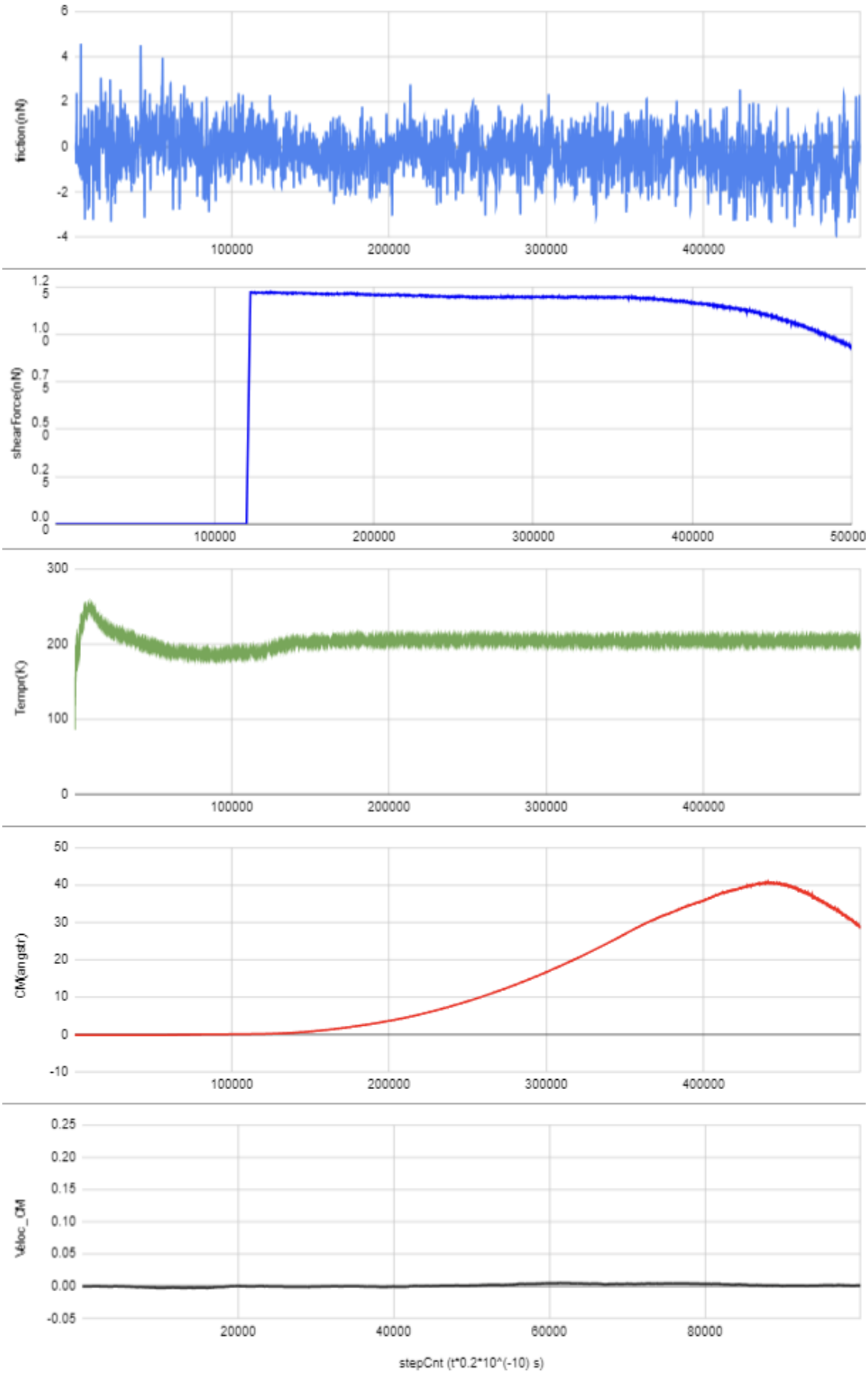

Рис. 3.3: Часові залежності різних величин, отримані при моделюванні в режимі Shear для алюмінію.

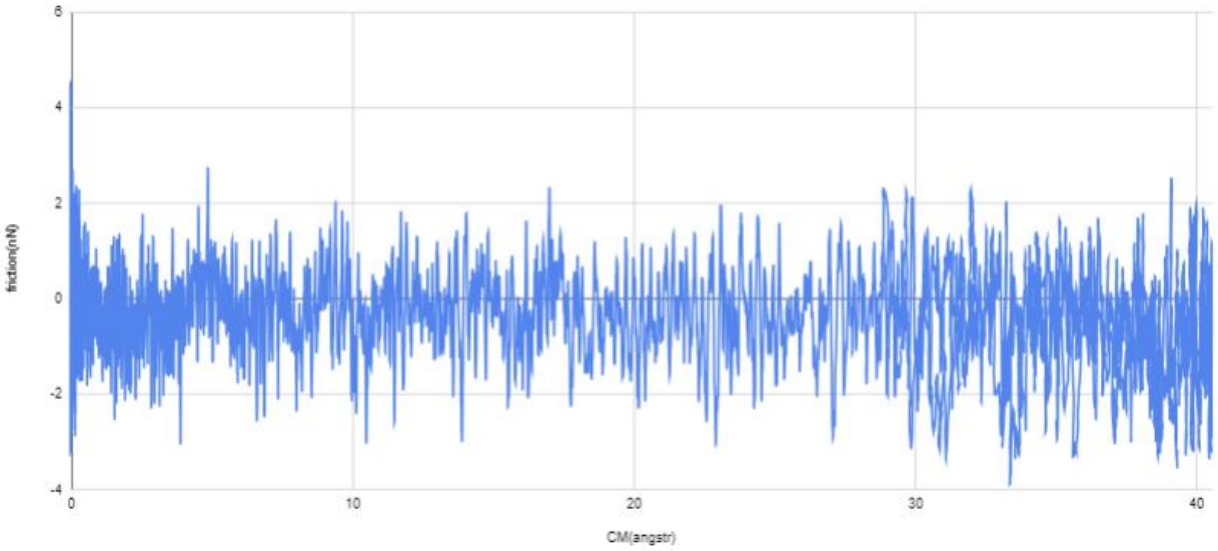

Рис. 3.4: Залежності сили тертя від положення центру мас наночастинки в режимі Shear для алюмінію.

ВИСНОВКИ

1. Проведено моделювання методом класичної молекулярної динаміки тертя Pd, 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. Можна зробити висновок, що анізотропія тертя значною мірою залежить від поверхневої і підповерхневої деформації, які відбуваються в обраних напрямках під час процесу ковзання. Також мікропластичні деформації на межі розділу наночастинка-графен може бути причиною розсіювання енергії, але основний фактор, очевидно, пов'язаний з поверхневим натягом, який виникає під контактним тиском.
3. Можна також зробити висновок що поведінка анізотропії також залежить від вибору температури. Іншими словами, у структурних надмастильних контактах сили тертя регулюються компенсаціями, пов’язаними з слабо податливими ідеально кристалічними несумірними поверхнями, що приводять до появи муарових зразків. Такі закономірності пов'язані зі зміною дотичних сил, зокрема, під час зсуву наночастинок на поверхні. При цьому тертя задається в основному граничними нескомпенсованими областями солітонного типу, які розташовані біля країв наночастинок. Вищезазначені особливості визначають фундаментальні та загальні властивості структурної змащувальної здатності, а саме слабку залежність від контактної площі та комплексні ефекти контактної форми та розташування.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Хоменко А. Трибологические свойства наноразмерных систем, содержащих углеродные поверхности / А. Хоменко, Н. Проданов, Е. Хоменко, Д. Трощенко // Журнал нано- та електронної фізики. – 2014. – Т. 6, № 1. – С. 0112-1 – 0112-9.
2. Osmokrovic P. The influence of the low-voltage capacitor dielectric material on the capacitive probe response in the nanosecond range / P. Osmokrovic, A. Vasic, M. Vujisic // Journal of optoelectronics and advanced materials. – Vol. 8, No. 1 – 2006. – P. 319 - 323.
3. Литвиненко Я. М. Фізичні процеси в приладових структурах з перпендикулярною магнітною анізотропією : дис. ... канд. фіз.-мат. наук: 01.04.01. Суми, 2016. 154 с.
4. Федченко О. Вплив матеріалу підкладки на магніторезистивні та магніто-оптичні властивості плівкової системи Co/Fe / О. Федченко, А. Салтикова, С. Проценко // Журнал нано- та електронної фізики. – 2012. – Том 4, № 3. - С. 0117-3 – 0117-11.
5. Pietruszczak S. On inelastic behaviour of anisotropic frictional materials / S. Pietruszczak // Mechanics of cohesive-frictional materisls, – 1999. – V. 4. – P. 281-293.
6. Binnig G. Scanning tunneling microscopy / G. Binnig, H. Rohrer // Helvetica Physica Acta. – Vol. 55(1982). – 726 p.
7. Spatz J.P. Forces affecting the substrate in resonant tapping force microscopy / J.P. Spatz, S. Sheiko, M. Moller, R.G. Winkler, P. Reineker, O. Marti // Nanotechnology. – 1995. – Vol. 6. – 44 p.
8. Luthi R. Progress in noncontact dynamic force microscopy / R. Luthi, E. Meyer, L. Howald, H. Haefke, D. Anselmetti, M. Dreier, M. Ruetschi, T. Bonner, R.M. Overney, J. Frommer, H.-J. Guntherodt // J. Vac. Sci. Technol. – 1994. – Vol. 3 B12. – 1673 p.

9. Lucas M. Hindered rolling and friction anisotropy in supported carbon nanotubes / M. Lucas, X. Zhang, I. Palaci, K. Christian // Nature materials. – 2009. – V.8. – P.876-881.
10. C. Mancinelli. Friction anisotropy at Pd(100)/ Pd(100) interfaces / Mancinelli C., Gellman A. // Langmuir, – 2004. – V.20. – P.1680-1687.
11. Гладишевський Є. І., Анізотропія ґриссталів. Збірник учнівських наукових тез. Львів. – 2019.– С. 12.
12. Баранський П. І. Анізотропія у фізиці // Велика українська енциклопедія. URL: https://vue.gov.ua/Анізотропія_у_фізиці (дата звернення: 22.05.2024).
13. Семеній О., Вплив матеріалу підкладки електродів для нанесення алмазоподібних плівок на якість біоаналізу / Семеній О., Рожицький М. // Східно-Европейський журнал передових технологій ISSN 1729-3774. – 2013. – Том 4, №8. – с. 38-42.
14. H. Shindo. Frictional force microscopic observation of anisotropy at corrugated CaSO4(001) surface / Shindo H., Namai Y. // Advance Article on the web. – 2002.
15. Y. Emonoto. The frictional anisotropy of diamond / Emonoto Y. // Nature. – 1980. – V. 283. –P. 51-52.
16. С.В. Малюта. Модифікація електричних властивостей оксиду графену засобами скануючої зондової мікроскопії : магістерс. дис. Київ, 2018.91с.
17. Литвиненко Я. М. Фізичні процеси в приладових структурах з перпендикулярною магнітною анізотропією : дис. ... канд. фіз.-мат. наук : 01.04.01. Суми, 2016. 154 с.
18. M. Lucas. /Lucas M., Zhang X., Palaci I., Klinke C., Tosatti E., Riedo E. // Nat. Mater. – 2009. – V. 8, No. 11. – P. 876–881, doi:10.1038/nmat2529
19. C.M. Mancinelli. / Mancinelli C.M., Gellman A.J. // Langmuir. – 2004. – V. 20, No. 5. – P. 1680–1687, doi:10.1021/la034764e

20. A.V. Khomenko. / Khomenko A.V., Troshchenko D.S., Metlov L.S. // Condens. Matter Phys. – 2015. – V. 18, No. 3. – P. 33004: 1-14, doi:10.5488/CMP.18.33004.
21. A. Pogrebnjak. / Pogrebnjak A., Goncharov A. // Metallofiz. Noveishie Tekhnol. – 2016. – V. 38. – P. 1145–1166, doi:10.15407/mfint.38.09.1145.
22. A. Khomenko. / Khomenko A., Zakharov, M., Persson B.N.J. // Tribol. Lett. – 2019. – V. 67. – P. 113, doi:10.1007/s11249-019-1226-z.
23. A.V. Khomenko. / Khomenko A.V., Prodanov N.V., Khomenko M.A., Krasulya B.O. // J. Nano- Electron. Phys. – 2013. – V. 5, No. 3. – P. 03018.
24. N.V. Prodanov. Surf. Sci. / Prodanov N.V., Khomenko A.V. // 2010. – V. 604, No. 7–8. – P. 730–740, doi:10.1016/j.susc.2010.01.024.
25. A.V. Khomenko. / Khomenko A.V., Prodanov N.V., Persson B.N.J. // Condens. Matter Phys. – 2013. –V. 16. – P. 33401: 1–8, doi:10.5488/CMP.16.33401.
26. Проценко І.Ю. Наноматеріали і нанотехнології в електроніці [Текст] : підручник / І. Ю. Проценко, Н. І. Шумакова. – Суми : СумДУ, 2017. – с. 38-39.
27. I. Simon. Nickel nanoparticle-decorated reduced graphene oxide/WO3 nanocomposite – a promising candidate for gas sensing / Simon I., Savitsky A., Mülhaupt R., Pankov V. Beilstein C. // J. Nanotechnol. – 2021. – Vol. 12, No. 28. – P. 343-353.
28. Y. Shibuta. / Shibuta Y., Elliott J. A. // Chem. Phys. Lett. – 2006. – V. 427. – P. 365–370.
29. M. Neek-Amal. / Neek-Amal M., Asgari R., Tabar M. R. // Nanotechnology. – 2009. – V. 20. – P. 135602.
30. V. H. Crespi. / Crespi, V. H. // Nature. – 2009. – V. 462. – P. 858–859.
31. S. Pietruszczak. / Pietruszczak S. // Mech. Cohes. Frict. Mat. – 1999. – V. 4, No. 3. – P. 281–293, doi:10.1002/(SICI)1099-1484(199905)4:33.0.CO;2-M.

32. X Zhou. / Zhou X., Wadley H., Johnson R., Larson D., Tabat N., Cerezo A., Petford-Long A., Smith G., Clifton P., Martens R., Kelly T. // Acta Mater. – 2001. – V. 49, No. 19. – P. 4005–4015, doi:10.1016/S1359-6454(01)00287-7.
33. N.Sasaki. / Sasaki N., Kobayashi K., Tsukada M. // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54, No. 3. – P. 2138–2149, doi:10.1103/PhysRevB.54.2138.
34. H.J.C. Berendsen. / Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. // J. Chem. Phys. – 1984. – V. 81, No. 8. – P. 3684– 3690, doi:10.1063/1.448118.
35. O.I. Olemskoi. / Olemskoi O.I., Yushchenko O.V., Zhylenko T.I. // Ukr. J. Phys. – 2011. – V. 56, No. 5. – P. 474–483.
36. O.Yu. Mazur. / Mazur O.Yu., Stefanovich L.I. // Phys. Solid State. – 2019. – V. 61, No. 8. – P. 1420–1424, doi:10.1134/S1063783419080183.
37. A. Vanossi. / Vanossi A., Dietzel D., Schirmeisen A., Meyer E., Pawlak R., Glatzel T., Kisiel M., Kawai S., Manini N., Beilstein J. // Nanotechnol. – 2018. – V. 9. – P. 1995–2014, doi:10.3762/bjnano.9.190.
38. W. Humphrey. / Humphrey W., Dalke A., Schulten K. // J. Molec. Graphics. – 1996. – V. 14, No 33, (http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/).

Додаток А - Код програми

Заголовний файл з об’явами та визначеннями, що використовуються у програмі.

```
// Array of structures with data for materials (metals) (from Zhou et al.).
MATERIAL Material [] =
{
    // copper Cu(0)
    // szName,  re,         fe,         rhoe,         alpha,     beta,      A,        B,
    TEXT("Cu"), 2.556162, 1.554485,  22.150141,  7.669911,  4.090619,  0.327584, 0.468735,
    // kappa,   lambda,     Fn[0],      Fn[1],       Fn[2],     Fn[3],
    0.431307,   0.86214,  -2.176490, -0.140035,  0.285621,  -1.750834,
    // F[0],     F[1],      F[2],       F[3],       eta          Fe,       massMe,   density
    -2.19,       0,        0.702991,   0.683705,   0.921150,  -2.191675,  63.54,    8930,

    // silver Ag(1)
    // szName,  re,         fe,         rhoe,         alpha,     beta,      A,        B,
    TEXT("Ag"), 2.891814, 1.106232,  15.539255,  7.944536,  4.237086,  0.266074, 0.386272,
    // kappa,   lambda,     Fn[0],      Fn[1],       Fn[2],     Fn[3],
    0.425351,   0.850703, -1.729619, -0.221025,  0.541558,  -0.967036,
    // F[0],     F[1],      F[2],       F[3],       eta          Fe,       massMe,   density
    -1.75,       0,        0.983967,   0.520904,   1.149461,  -1.751274,  107.868,  10490,

    // gold Au(2)
    // szName,  re,         fe,         rhoe,         alpha,     beta,      A,        B,
    TEXT("Au"), 2.885034, 1.529021,  21.319637,  8.086176,  4.312627,  0.230728, 0.336695,
    // kappa,   lambda,     Fn[0],      Fn[1],       Fn[2],     Fn[3],
    0.420755,   0.841511, -2.930281, -0.554034,  1.489437,  -0.886809,
    // F[0],     F[1],      F[2],       F[3],       eta          Fe,       massMe,   density
    -2.98,       0,        2.283863,   0.494127,   1.286960,  -2.981365,  196.9665,  19302,

    // nickel Ni(3)
    // szName,  re,         fe,         rhoe,         alpha,     beta,      A,        B,
    TEXT("Ni"), 2.488746, 2.007018,  27.984706,  8.029633,  4.282471,  0.439664, 0.632771,
    // kappa,   lambda,     Fn[0],      Fn[1],       Fn[2],     Fn[3],
    0.413436,   0.826873, -2.693996, -0.066073,  0.170482,  -2.457442,
    // F[0],     F[1],      F[2],       F[3],       eta          Fe,       massMe,   density
    -2.70,       0,        0.282257,   0.102879,   0.509860,  -2.700493,  58.71,    8902,

    // aluminium Al(4)
    // szName,  re,         fe,         rhoe,         alpha,     beta,      A,        B,
    TEXT("Al"), 2.886166, 1.392302,  20.226537,  6.942419,  3.702623,  0.251519, 0.313394,
    // kappa,   lambda,     Fn[0],      Fn[1],       Fn[2],     Fn[3],
    0.395132,   0.790264, -2.806783, -0.276173,  0.893409,  -1.637201,
    // F[0],     F[1],      F[2],       F[3],       eta          Fe,       massMe,   density
    -2.83,       0,        0.929508,   -0.682320,   0.779208,  -2.829437, 26.98154,  2698.9,

    // lead Pb(5)
    // szName,  re,         fe,         rhoe,         alpha,     beta,      A,        B,
    TEXT("Pb"), 3.499723, 0.647872,  8.906840,   8.468412,  4.516486,  0.134878, 0.203093,
    // kappa,   lambda,     Fn[0],      Fn[1],       Fn[2],     Fn[3],
    0.425877,   0.851753, -1.419644, -0.228622,  0.630069,  -0.560952,
    // F[0],     F[1],      F[2],       F[3],       eta          Fe,       massMe,   density
    -1.44,       0,        0.921049,   0.108847,   1.172361,  -1.440494, 207.19,    11300
};
```

Основна логіка моделювання зростання поверхні.

```
void AllocArrays () // Allocate host memory. (CUT OUT)

void FreeArrays ()  // Free global memory on host and close files. (CUT OUT)

// Must be called before SetupJob.
int SetParams()
{
    // Define units of measurements.
    g_hSimParams.temperatureU = 298/0.409246;
    g_hSimParams.enU = 0.06275049;
    g_hSimParams.kB = 0.99999793;
    g_hSimParams.lengthU = g_ha0;
    g_hSimParams.forceU = 14.1239836;       // 1 nN dimensionless.
    g_hSimParams.massU = 12.0107;           // Carbon mass in amu.

    g_hSimParams.iRegime = giRegime;        // Save regime.
    g_hSimParams.iMaterial = giMaterial;
    lstrcpy(g_hSimParams.szNameMe, Material[giMaterial].szName);

    // Check values of number of cells. (CUT OUT)

    // Define number of atoms. (CUT OUT)

    EamInit();          // Initialize eam parameters.
    GrapheneInit();     // Graphene initialization.

    // Define region size. (CUT OUT)

    // Save data in SimParams structure.
    VCopy(g_hSimParams.initUcell, g_hinitUcell);
    VCopy(g_hSimParams.region, g_hregion);
    // This is inverse width of a cell.
    VDiv (g_hSimParams.invWidth, g_hSimParams.cells, g_hSimParams.region);
    g_hSimParams.cellShiftZ = g_hcellShiftZ;
    // Save initial z coordinate of carbon atoms. (CUT OUT)

    // Dimensionless temperature.
    if(g_hTemperature <=0)
        g_hTemperature = 298;
    g_hSimParams.temperature = g_hTemperature / g_hSimParams.temperatureU;

    if(g_hstepAvg <=0)
        g_hstepAvg = 1;

    g_hSimParams.stepLimit = g_hStepLimit;
    g_hSimParams.stepAvg = g_hstepAvg;
    g_hSimParams.stepEquil = g_hstepEquil;
    g_hSimParams.stepPdb = g_hstepPdb;
    g_hSimParams.moreCycles = 1;
    g_hSimParams.deltaT = g_hdeltaT;
    g hSimParams.rNebrShell = g hrNebrShell;

    g_hSimParams.blockSize = g_hBlockSize;

    // This is the size of CELL array, it takes into account that there can be
    // blockSize atoms per cell.
    g hSimParams.maxMol =
        g_hSimParams.cells.x * g_hSimParams.cells.y * g_hSimParams.cells.z *
        g_hSimParams.blockSize;

    // Number of blocks is equal to the number of cells.
    g_hSimParams.gridSize = g_hSimParams.cells.x * g_hSimParams.cells.y * g_hSimParams.cells.z;

    // If grid size is larger than device capabilities, then exit.
    if( g_hSimParams.gridSize > (uint)g_hDeviceProp.maxGridSize[0] )
        return 0;

    g_hSimParams.rrNebr = Sqr (g_hSimParams.rCutEam + g_hSimParams.rNebrShell);
    g_hSimParams.iNebrMax = g_hiNebrMax;    // Maximum number of neighbors per atom.

    g_hSimParams.bPdb = g_bPdb;
    g_hSimParams.bResult = g_bResult;

    // Thermostat.
```

```
    g_hSimParams.stepThermostat = g_hstepThermostat;
    g_hSimParams.gammaBerendsen = g_hgammaBerendsen;

    // For surface growth stepCool == stepLimit. (CUT OUT)

    // Increment of shear force
    // dimensionless = pN*unit[nN]/1000
    g_hSimParams.deltaF = g_hdeltaF*g_hSimParams.forceU*0.001;
    g_hSimParams.shear = 0.f;

    // Deposition.
    // Set deposition velocity.
    g_hSimParams.velMagDepos =
        sqrt(2*g_hDeposEnergy / (g_hSimParams.enU * g_hSimParams.massMe));
    g_hSimParams.stepDeposit = g_hstepDeposit;
    g_hSimParams.nMolToDeposit = g_hnMolToDeposit;
    // If not SG then nMolDeposited == nMolMe. (CUT OUT)

    // Magnitude of initial velocities.
    if( g_hSimParams.iRegime == 0)                      // For metal use mass.
        g_hvelMag = sqrt (NDIM * (1. - 1./g_hSimParams.nMol)*
        g_hSimParams.kB*g_hSimParams.temperature/g_hSimParams.massMe);
    else if( g_hSimParams.iRegime != 0)                 // For carbon mass == 1.
        g_hvelMag = sqrt (NDIM*(1. -1./(g_hSimParams.nMol))
        *g_hSimParams.kB*g_hSimParams.temperature *
        g_hSimParams.nMol/(g_hSimParams.nMol - g_hSimParams.nMolMe));

    g_hSimParams.velMag = g_hvelMag;

    // rdf variables.
    g_hSimParams.rangeRdf = 1.5*g_hSimParams.rCutEam; //g_hrangeRdf;
    g_hSimParams.limitRdf = g_hlimitRdf;
    g_hSimParams.sizeHistRdf = g_hsizeHistRdf;
    g_hSimParams.stepRdf = g_hstepRdf;
    g_hSimParams.countRdf = 0;
    g_hSimParams.intervalRdf = g_hSimParams.sizeHistRdf / g_hSimParams.rangeRdf;
    g_hSimParams.bRdf = g_bRdf;
    lstrcpy(g_hSimParams.szRdfPath, g_szRdf);

    // Backup. (CUT OUT)

    // Zero duration of the simulation.
    g_hSimParams.totalTime= 0.f;

    // Diffusion variables.
    g_hSimParams.nValDiffuse = g_hnValDiffuse;
    g_hSimParams.nBuffDiffuse = g_hnBuffDiffuse;
    g_hSimParams.stepDiffuse = g_hstepDiffuse;
    g_hSimParams.limitDiffuseAv = g_hlimitDiffuseAv;
    g_hSimParams.countDiffuseAv = g_hcountDiffuseAv;

    // Set seed for random numbers, it is in params structure.
    InitRand(0, &g_hSimParams);
    // Copy parameters to the device, global variable dparams in const mem is initialized.
    SetParametersW(&g_hSimParams);          // Wrapper from .cu file.

    return 1;       // All right.
}

// Make preliminary work. (CUT OUT)

// Initialize parameters for EAM potential.
void EamInit()
{
    // Define dimensionless parameters for EAM potential from Zhou et al.
    // double eV = 1.60219 / pow(10.0, 19.0);              // 1 electron - volt
    // unit of length = 1.42 angstrom, so dimensionless length = length (angsrom) / 1.42
    // energy unit 6.275049 * 10^(-2)eV


    // Parameters for metal.
    g_hSimParams.re = Material[g_hSimParams.iMaterial].re / g_ha0;// Nearest neighbors.

    g_hSimParams.a = g_hSimParams.re*sqrt(2.);      // elementary translation / g_ha0;

    g_hSimParams.fe = Material[g_hSimParams.iMaterial].fe;
    g_hSimParams.rhoe = Material[g_hSimParams.iMaterial].rhoe;
    g_hSimParams.alpha = Material[g_hSimParams.iMaterial].alpha;
    g_hSimParams.beta = Material[g_hSimParams.iMaterial].beta;
```

```
    g_hSimParams.A = Material[g_hSimParams.iMaterial].A / g_hSimParams.enU;
    g_hSimParams.B = Material[g_hSimParams.iMaterial].B / g_hSimParams.enU;

    g_hSimParams.kappa = Material[g_hSimParams.iMaterial].kappa;
    g_hSimParams.lambda = Material[g_hSimParams.iMaterial].lambda;

    g_hSimParams.Fn[0] = Material[g_hSimParams.iMaterial].Fn[0] /g_hSimParams.enU;
    g_hSimParams.Fn[1] = Material[g_hSimParams.iMaterial].Fn[1] /g_hSimParams.enU;
    g_hSimParams.Fn[2] = Material[g_hSimParams.iMaterial].Fn[2] /g_hSimParams.enU;
    g_hSimParams.Fn[3] = Material[g_hSimParams.iMaterial].Fn[3] /g_hSimParams.enU;

    g_hSimParams.F[0] = Material[g_hSimParams.iMaterial].F[0] /g_hSimParams.enU;
    g_hSimParams.F[1] = Material[g_hSimParams.iMaterial].F[1] /g_hSimParams.enU;
    g_hSimParams.F[2] = Material[g_hSimParams.iMaterial].F[2] /g_hSimParams.enU;
    g_hSimParams.F[3] = Material[g_hSimParams.iMaterial].F[3] /g_hSimParams.enU;

    g_hSimParams.eta = Material[g_hSimParams.iMaterial].eta;

    g_hSimParams.Fe = Material[g_hSimParams.iMaterial].Fe /g_hSimParams.enU;

    g_hSimParams.massMe = Material[g_hSimParams.iMaterial].massMe / g_hSimParams.massU;
    // Dimensionless density == density * lengthU^3 [m^3] / massU[kg]
    g_hSimParams.density = Material[g_hSimParams.iMaterial].density * 0.1435655 * 0.001; //1.27802;

    // Set cutoff distance, it defines number of BLOCK SIZE,
    // e.g. for 1.5 BLOCK_SIZE should be 96 for lead, but for Ni it can be 48.
    g_hSimParams.rCutEam = 1.45 * g_hSimParams.a;
    g_hSimParams.rrCutEam = g_hSimParams.rCutEam * g_hSimParams.rCutEam;

    // Inverse values.
    g hSimParams.rei = 1 / g hSimParams.re;
    g_hSimParams.rhoei = 1 / g_hSimParams.rhoe;
}

void GrapheneInit()
{
    // Define dimensionless parameters for graphite potential from Sasaki et al.
    g_hSimParams.mu_r = 41.881*g_ha0*g_ha0 / g_hSimParams.enU;      // 41.881 eV / angsrom^2
    g_hSimParams.theta_0 = 2.*M_PI/3.;                              // 2*M_PI/3, dimensionless
    g_hSimParams.mu_theta = 2.9959*g_ha0*g_ha0 / g_hSimParams.enU;  // 2.9959 eV / angstrom^2
    g_hSimParams.mu_p = 18.225*g_ha0*g_ha0 / g_hSimParams.enU;      // 18.225 eV / angstrom^2
    g_hSimParams.rCutC = 1.2;                                   // cutoff = 1.42*1.2 angstrom
    g_hSimParams.rrCutC = g_hSimParams.rCutC * g_hSimParams.rCutC;
    // LJ parameters.
    g_hSimParams.epsLJ = g_hepsilon / g_hSimParams.enU;             // 0.87381*10^(-2) eV
    g_hSimParams.sigmaLJ = g_hsigma / g_ha0;                        // 2.4945 angstrom
    g_hSimParams.rCutLJ = 2.5*g_hSimParams.sigmaLJ;
    g_hSimParams.rrCutLJ = g_hSimParams.rCutLJ*g_hSimParams.rCutLJ;
}
```