

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАПРАВЛЕНИЯ СДВИГА НА ТРЕНИЕ Ni И Ag НАНОЧАСТИЦ

Хоменко А.В., *проф.*; Проданов Н.В., *аспирант*;
Ляшенко Я.А., *ст. преп.*; Щербак Ю.В., *студент*

В последние годы довольно быстро развивается новая область нанотехнологии – нанотрибология, рассматривающая трение и износ поверхностей на атомарном уровне. При исследовании нанотрибологических явлений требуются атомарно-гладкие поверхности трения, поэтому в их качестве используется графит, который позволяет относительно легко получить атомарно-гладкие поверхности.

Работа посвящена компьютерному моделированию трения, возникающего при движении металлических наночастиц по поверхности графена, методом молекулярной динамики при периодических граничных условиях с использованием технологий параллельного вычисления NVIDIA® CUDA™. Рассмотрено движение Ni и Ag наночастиц по поверхности графена, представляющего один атомный слой графита.

Цель изучения – выявить влияние угла поворота на нанотрибологические свойства металлических наночастиц для углов сдвига 0, 22.5, 45, 67.5, 90 градусов.

Приближение модели к экспериментальным условиям обусловило использование реалистичных потенциалов для межатомных взаимодействий [1]. Ковалентные атомные связи в слое графена описываются гармоническим потенциалом, для металлических наночастиц используется потенциал, основанный на методе внедренного атома (embedded atom method, EAM). Взаимодействие между атомами графена и наночастицы металла описываются потенциалом Леннарда-Джонса.

Результаты проведенного компьютерного моделирования показывают, что при усреднении по времени, сила трения растет линейно с площадью взаимодействия для обоих металлов. При этом для Ni присущий больший разброс данных.

1. А.В. Хоменко, Н.В. Проданов, *Ж. Нано- Электрон. Физ.* **3** №2, 36 (2011).

