

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

Допущено до захисту

Завідувач кафедри ПМ та МСС

\_\_\_\_\_ Коплик І.В.  
(підпис)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2021 р.

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА**

на здобуття освітнього ступеня «бакалавр»

спеціальність 113 «Прикладна математика»

освітньо-професійна програма «Прикладна математика»

тема роботи **«КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МЕТАЛЕВИХ  
НАНОЧАСТИНОК АДСОРБОВАНИХ НА ПОВЕРХНЯХ»**

**Виконавець**

студент факультету ЕЛІТ

Котляр Наталія Григорівна \_\_\_\_\_  
(прізвище, ім'я, по батькові) (підпис)

**Науковий керівник**

професор, доктор фіз.-мат. наук  
(науковий ступінь, вчене звання)

Хоменко Олексій Віталійович \_\_\_\_\_  
(прізвище, ім'я, по батькові) (підпис)

Суми – 2021 р

# СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

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

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ПМ та МСС

Коплик І.В. \_\_\_\_\_

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2021 р.

## З А В Д А Н Н Я

### НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧУ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Котляр Наталії Григорівні

1. Тема роботи Комп'ютерне моделювання металевих наночастинок адсорбованих на поверхнях  
Керівник роботи Хоменко О.В., професор, доктор фіз.-мат. наук  
затверджено наказом по факультету ЕлІТ від «14» квітня 2021 р. № 0180-VI
2. Термін подання роботи студентом «25» травня 2021р.
3. Вихідні данні до роботи 1) Метод молекулярної динаміки; 2) Теоретичні та експериментальні відомості про наночастинок та графен.
4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити) Дослідження впливу параметрів системи на комп'ютерну модель напилення атомів, опис спільної поведінки експериментів та впливу наночастинок на підкладку. Написання коду для модифікації існуючої програми.
5. Перелік графічного матеріалу
  - 1) Схема зондового давача;
  - 2) Схема оптичної реєстрації вигину консолі зондового давача;
  - 3) Знімки напилення в режимі «Surface Growth»;

- 4) Поведінка повної та потенціальної енергій в часі;  
 5) Поведінка температури, імпульсу, сили підкладки, латерального положення центру мас в часі;  
 6) Залежність сили підкладки від латерального положення центру мас наночастинок.
6. Консультанти до проекту (роботи), із значенням розділів проекту, що стосується їх

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв

7. Дата видачі завдання «03» травня 2021 р.

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Найменування роботи, заходи	Термін виконання	Примітка
1	Провести досліди, компіляцію програми з розрахунками комп'ютерних моделювань напилень атомів металів (Al, Pd, Co, Au, Ni) на підкладку графена.	03.05 - 10.05	Виконано
2	Провести аналіз отриманих напилень та літератури за даною темою.	09.05 - 13.05	Виконано
3	Проаналізувати та описати спільну поведінку експериментів. Побудувати графіки, що описують систему.	13.05 - 17.05	Виконано
4	Дослідити поведінку наночастинок.	17.05 - 21.05	Виконано
5	Дослідити вплив налаштувань параметрів на поведінку змодульованої системи. Оформити роботу.	21.05 - 25.05	Виконано

Здобувач вищої освіти

Керівник роботи

\_\_\_\_\_  
(підпис)

\_\_\_\_\_  
(підпис)

Котляр Н.Г

Хоменко О.В.

## РЕФЕРАТ

**Кваліфікаційна робота:** 47 с., 25 рисунків, 1 таблиця і 29 джерел.

**Мета роботи:** дослідження поведінки та впливу напилюваних атомів металів на одношарову підкладку графена за допомогою комп'ютерного моделювання.

**Об'єкт дослідження:** процес напилення металевих наночастинок на одношарові поверхні.

**Предмет дослідження:** комп'ютерна модель напилення наночастинок методом молекулярної динаміки і реалізована з використанням технології NVIDIA ® CUDA™.

**Методи навчання:** принципи молекулярної динаміки та методи, які використовуються в програмі SurfaceGrowth.

У результаті досліджень розглянуто комп'ютерно змодельовану систему, яка розраховує бомбардування атомними частинками одношарової підкладки. За результатами обчислень моделі досліджено загальну поведінку системи.

Проведені експерименти, що досліджували напилення атомів різних матеріалів (Al, Pd, Co, Au, Ni) за різних початкових умов системи. На основі даних напилень проаналізована поведінка під час початку взаємодії напилюваних атомів з підкладкою. Порівняно отримані графіки латерального положення центру мас наночастинок та сили взаємодії підкладки на протязі усього експерименту для різних напилюваних матеріалів. Досліджено поведінку повної та потенціальної енергій, температури та імпульсу моделі, а також вплив початкових налаштувань моделі на подальшу її поведінку.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ, НАПИЛЕННЯ, ГРАФЕН, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, НАНОЧАСТИНКА, АТОМНО-СИЛОВА МІКРОСКОПІЯ.

## ЗМІСТ

ВСТУП.....	6
РОЗДІЛ 1. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК АДСОРБОВАНИХ НА ПОВЕРХНЯХ .....	7
1.1. Атомно-силова мікроскопія, принцип дії та методи досліджень .....	7
1.2 Актуальність дослідження графену .....	13
1.3. Принцип роботи програми SurfaceGrowth.....	14
РОЗДІЛ 2. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ РЕЗУЛЬТАТИ ПРОВЕДЕННЯ ДОСЛІДЖЕНЬ .....	19
2.1. Опис програми та аналіз отриманих напилень.....	19
2.2. Поведінка моделі системи .....	22
2.3. Вивчення поведінки наночастинок Al та Pd: атомістичний підхід .....	26
2.4 Вплив температури, енергії атомів та кількості напилення на поведінку параметрів експериментів.....	29
2.5. Функція підкладки для дослідження зразка методом атомно-силової мікроскопії.....	38
ВИСНОВКИ .....	41
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....	42
ДОДАТОК А .....	45

## ВСТУП

Сучасна наука і техніка ставлять перед собою цілі розвитку та створення нових високоефективних матеріалів та технологій (наноматеріалів, нанотехнологій) і технологічного обладнання на основі фундаментальних фізичних законів взаємодії мікро- і наночастинок, що визначають структуру і властивості конструкційних матеріалів деталей техніки в умовах експлуатації [1-20]. Фізика, вивчаючи процеси і явища, що відбуваються в різних реальних системах з великої кількості тіл і в окремих тілах, розглядає структуру і властивості твердих тіл як деякі змінні характеристики.

З часів відкриття графену двовимірні матеріали все більше привертають увагу науковців усього світу. Підвищена зацікавленість цими матеріалами зумовлена їх унікальною структурою, адже ці зразки мають товщину в декілька атомних шарів, що так само визначає їх унікальні властивості, а отже, відкриває широкий потенціал їх застосування в багатьох галузях науки й техніки. Дослідження параметрів двовимірних наноматеріалів експериментальними методами є значно складнішим завданням, саме тому в такій ситуації доцільно використовувати комп'ютерне моделювання.

Крім того, в літературі спостерігається зростання інтересу, спрямованого на взаємодію графенового листа з різними нанооб'єктами, що підтверджує актуальність роботи. Отримані результати та напрацювання можуть бути використанні в подальших теоретичних та експериментальних дослідженнях. Також відомо, що наночастинки можуть впливати на електронні та структурні властивості вуглецю, що може посприяти винаходу та вдосконаленню нанопристроїв у майбутньому.

# РОЗДІЛ 1

## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК АДСОРБОВАНИХ НА ПОВЕРХНЯХ

### 1.1. Атомно-силова мікроскопія, принцип дії та методи досліджень

Винайдення атомної та фрикційної силової мікроскопії (АСМ і ФСМ), дозволило вивчати трибологічні явища в сухих наноконтактах. За допомогою методик АСМ і ФСМ існує можливість ставити експерименти над ними. Експериментальне дослідження мікроконтактів поверхонь, розділених тонкою плівкою рідини, здійснюється за допомогою апарату поверхневих сил (АПС). Часто, в якості матеріалів для робочих поверхонь, в АСМ і ФСМ використовують графіт, а в АПС слюду. Дані матеріали мають шарувату структуру, що дає можливість отримувати атомарно-гладкі поверхні [1].

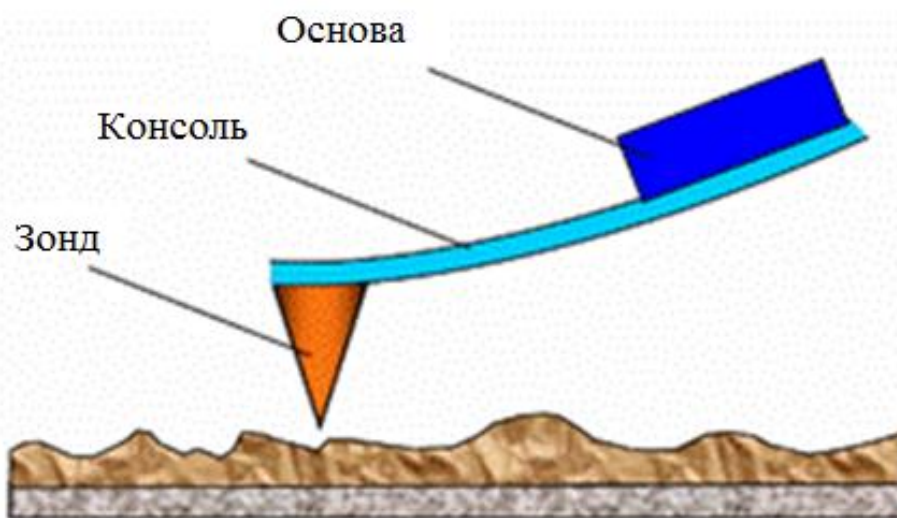


Рис. 1.1. Схема зондового датчика на основі [2]

АСМ винайдено в 1986 році. Його робота базується на силевій взаємодії зонда та поверхні, для реєстрації даної взаємодії використовують спеціальні зондові датчі (рис.1.1). Сила, яка діє на зонд з боку поверхні, змушує консоль вигинатися. При реєстрації величини вигину є можливість контролювати силу взаємодії між зондом та поверхнею [2].

Розглянемо діючі сили, завдяки яким працює мікроскоп. Сили взаємодії між зондом та зразком, це короткодійні сили Ван-дер-Ваальса. Вони включають складові різних знаків і на великих відстанях забезпечують притягання, а на малих - відштовхування. Найчастіше енергія ван-дер-ваальсової взаємодії, що з'являється між двома атомами на відстані  $r$ , апроксимується 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) перший доданок характеризує далекодіюче притягання, а другий – відштовхування атомів, що знаходяться на малих відстанях. Параметр  $r_0$  є рівноважною відстанню між атомами,  $U_0$  – значення енергії у мінімумі.

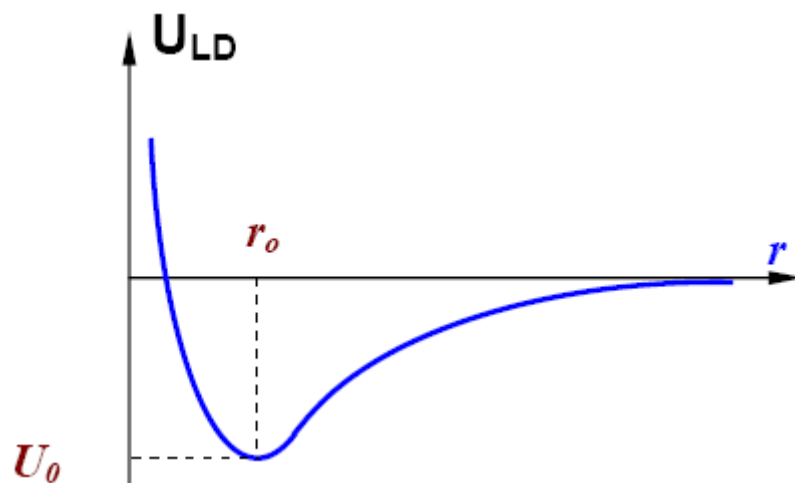


Рис. 1.2. Якісний вигляд потенціалу Леннарда-Джонса [2]

Потенціал Леннарда-Джонса дає можливість оцінити силу взаємодії між зондом та зразком. Повна енергія системи може бути отримана шляхом підсумовування елементарних взаємодій для кожного атома зонда і зразка. Таким чином для енергії взаємодії отримуємо:

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



У формулі (1.2)  $n_p(r)$  і  $n_s(r')$  – густини атомів, які містяться в матеріалах зразка і зонда. А силу, яка впливає на зонд із боку поверхні, можна обчислити у такий спосіб:

$$\vec{F}_{PS} = -\text{grad } W_{PS}. \quad (1.3)$$

Взаємодія зонда зі зразком в АСМ має складніший характер, але в будь-якому випадку незмінно, що зонд АСМ притягається до зразка на більших дистанціях і відштовхується на менших. Реєстрація невеликих вигинів пружної консолі зондового давача проводиться на основі оптичних методів (рис.1.3).

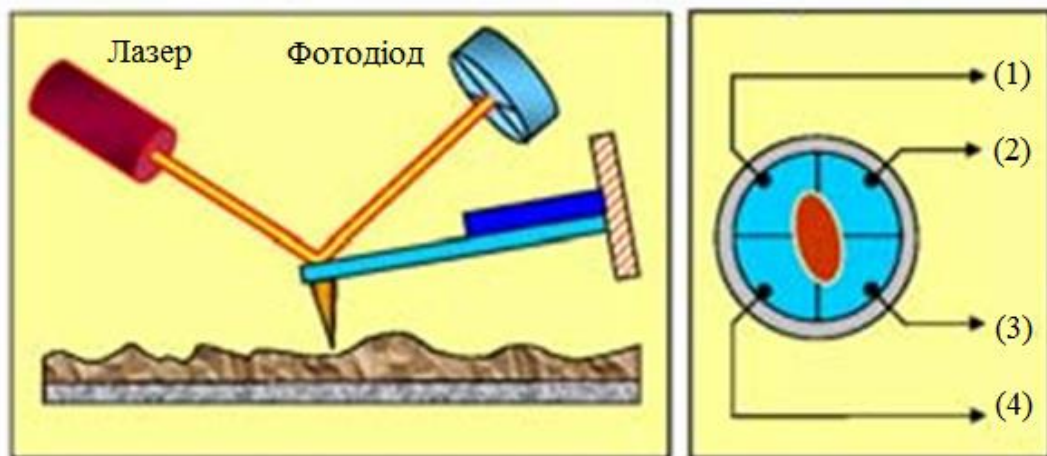


Рис. 1.3. Схема оптичної реєстрації вигину консолі зондового давача АСМ [2]

Оптична система АСМ налаштована таким чином, щоб випромінювання напівпровідникового лазера сфокусовувалося на консолі датчика зонда, а відбитий промінь потрапляв у центр фоточутливої області фотодетектора. Чотирьохсекційні напівпровідникові фотодіоди використовуються в якості позиційно-чутливих фотоприймачів.

Також варто зазначити, що матеріал підкладки та плівки, напиленої на неї, буде мати значний вплив. Отже в різних експериментах та дослідженнях доцільно використовувати різні підкладки, залежно від їх хімічної структури.

Матеріал підкладки та її структурний стан також суттєво впливають на анізотропію тертя [3], магніторезистивні [4], магнітооптичні властивості та дифузійні процеси у плівкових системах. Наприклад, при орієнтованому вирощуванні на монокристалі MgO(100), система Au(2)/Co(30)/Fe(30)/MgO проявляє суттєву анізотропію магнітоопору та коерцитивної сили (збільшується у 2 рази при повороті зразка на 45°) [5].

Дослідження електродів у яких поверхні модифіковано алмазоподібними плівками (АПП), методами АСМ, показали, що матеріал підкладки має значний вплив на структуру осадженої плівки. Так, електроди з платини, які модифіковані АПП можна використовувати в мікроелектродній аналітичній системі, де дефекти покриття будуть незначними. Використання ж скловуглецевих електродів, вкритих АПП, що леговані азотом, після осадження з вакуумно-дугової плазми, дало кращі результати. Дані електроди доцільно буде використовувати під час ЕХ-досліджень. Такі електродні системи характеризуються наступними перевагами: біосумісність, широке вікно робочих потенціалів, особливо у водних розчинах, низькі фонові струми, можливість подальшої очистки поверхні, а також тривалий термін експлуатації [6].

Розглянемо існуючі методи дослідження зразка за допомогою АСМ.

Безконтактний метод дослідження поверхні зразка має унікальні можливості порівняно з іншими методами зондової мікроскопії, такими як контактна силова скануюча мікроскопія (ССМ) і скануюча тунельна мікроскопія (СТМ) [7]. Відсутність сил відштовхування в безконтактній скануючій силевій мікроскопії дає змогу використовувати її в дослідженнях "м'яких зразків", при цьому в безконтактній мікроскопії, на відміну від СТМ, немає потреби в наявності провідних зразків.

Безконтактна мікроскопія використовує принцип визначення "модуляції амплітуди". Відповідна схема виміру використовує амплітудні зміни. Коливання кантелівера  $A$ , обумовлені взаємодією зонда із зразком. За методом безконтактну мікроскопію можна описати в термінах градієнтно-силової моделі. Згідно з цією моделлю, в межі малих  $A$  при наближенні кантелівера до

зразка резонансна частота кантелівера  $f_0$  зрушується на величину  $df$  до нового значення за виразом:

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

У формулі (1.4)  $f_{eff}$  – це нова величина резонансної частоти кантелівера з номінальним значенням жорсткості  $k_0$ , а  $F'(z)$  – градієнт сили взаємодії кантелівера із зразком. Величина  $z$  є ефективним зазором зонд-зразок, у випадку сили тяжіння величина  $df = f_{eff} - f_0$  від’ємна.

Якщо збуджуюча частота коливань кантелівера  $f_{eff} > f_0$ , то зменшення резонансної частоти викликає зменшення амплітуди коливань  $A_{set}$  кантелівера з частотою  $f_{set}$  при наближенні до зразка. Такі зміни амплітуди  $A$  використовуються як вхідний сигнал до системи зворотного зв'язку. Щоб отримати зображення, що сканує, за безконтактним методом необхідно насамперед вибрати деяку амплітуду  $A_{set}$ , при чому  $A_{set} < A(f_{set})$  коли кантелівер знаходиться на значній дистанції від поверхні зразка. Система зворотного зв'язку переміщає кантелівер ближче до поверхні, доки його миттєва амплітуда  $A$  не буде дорівнювати амплітуді  $A_{set}$  за вказаної частоти збудження коливань  $f_{set}$ . Починаючи з цієї точки, може розпочатися сканування зразка в площині  $xu$  з утриманням системою зворотного зв'язку  $A = A_{set} = const$  для отримання зображення. Система зворотного зв'язку переміщає кантелівер до зразка, при зменшенні  $A_{set}$  в якій-небудь точці, і відсовує кантелівер від зразка, якщо  $A_{set}$  збільшується. Загалом, як наслідок викладеної вище моделі в межах малих  $A$  зображення, що сканується, можна розглядати як рельєф постійного градієнта сили взаємодії зонд-зразок.

Метод безконтактної мікроскопії має перевагу в тому, що зонд не контактує із зразком, а отже не руйнує його та не спотворює зображення. Це може мати важливе значення під час дослідження біологічних зразків.

Метод дослідження поверхні зразка модуляції частоти. Під час використання безконтактного і переривчасто-контактного методів кантелівер приводиться в коливальний стан за постійної резонансної частоти збудження,

при цьому градієнти сил визначаються, як зміни амплітуди або фази коливань кантелівера [8]. Відповідно до такої схеми відношення сигнал-шум для заданої ширини смуги може бути підвищено збільшенням добротності  $Q$  коливань кантелівера. Проте збільшення  $Q$  одночасно зменшує максимально можливу ширину смуги системи. Ця обставина стає особливо важливою при роботі у вакуумі. У вакуумі добротність кантелівера  $Q$  може стати більше 50 000. Такі високі значення  $Q$  забезпечують високу чутливість, але незначну ширину смуги (менше 1 Гц), обумовлюючи дуже малі швидкості сканування ССМ для більшості вживань.

Для підвищення чутливості ССМ при збільшенні  $Q$  без обмежень ширини смуги пропускання або динамічного діапазону запропоновано альтернативний метод детектування – так званий метод модуляції частоти. У частотно-модуляційній системі детектування високодобротні резонансні коливання кантелівера є частотно-певним компонентом осцилятора, який коливається з постійною амплітудою. Зміни градієнтів сил обумовлюють миттєві зміни частоти коливань осцилятора, які визначаються частотно-модуляційним демодулятором. Кантелівер підтримується вживанням позитивного зворотного зв'язку, що коливається при його резонансній частоті, за допомогою підсилювача, що управляє.

Метод дослідження поверхні зразка статичної магнітно-силової мікроскопії. Цей метод являє собою ефективний засіб для дослідження магнітних структур на субмікронному рівні. Отримане за допомогою магнітно-силової мікроскопії зображення є просторовим розподілом певного параметра, що характеризує магнітну взаємодію зонда і зразка. Магнітний кантелівер є стандартним кремнієвим зондовим давачем, що покритий плівкою з магнітного матеріалу [9]. Магнітно-силова мікроскопія робить можливим дослідження магнітних доменних структур із високим просторовим дозволом запису і читання інформації в магнітному середовищі, процесів перемагнічування.

## 1.2 Актуальність дослідження графену

Ще з часів відкриття графену виконано величезний обсяг фундаментальних, експериментальних і теоретичних досліджень. Даний матеріал має надзвичайно велику область використання. Завдяки високій електро- і теплопровідності графен можна застосовувати в різних електронних пристроях, особливо якщо враховувати його гнучкість і повну оптичну прозорість. Вуглець є перспективним матеріалом для реалізації мікросхем, вимірювальних пристроїв, біодатчиків, ультраконденсаторів, гнучких дисплеїв на його основі [10]. Графен може бути також ефективним газовим сенсором, який відчуває присутність навіть однієї молекули газу на своїй поверхні [11].

Унікальні електричні властивості роблять графен одним з найперспективніших матеріалів в області наноелектроніки та приладів спінтроніки. У даний час ведуться розробки застосування графену по таких напрямках: високочастотні транзистори, мікросхеми пам'яті, електроди для суперконденсаторів, недорогі дисплеї для портативних пристроїв, акумулятори для автомобілів на водневому пальному, датчики для діагностики захворювань, охолодження електронних схем.

Двовимірні (2D) матеріали все більше привертають увагу науковців усього світу. Підвищена зацікавленість цими матеріалами зумовлена їх унікальною структурою, адже ці зразки мають товщину в декілька атомних шарів, що так само визначає їх унікальні властивості, а отже, відкриває широкий потенціал їх застосування в багатьох галузях науки й техніки [12].

Дослідження параметрів двовимірних наноматеріалів експериментальними методами є значно складнішим завданням, порівняно зі зразками звичайних розмірів. Така ситуація обумовлена атомарно тонкою структурою двовимірних наноматеріалів, до того ж їхня поверхня зазвичай містить функціональні групи, що ще більш ускладнює вивчення механічних властивостей. Значно спростити завдання з розрахунку механічних параметрів дозволяє чисельне моделювання та побудова феноменологічних моделей з подальшим дослідженням динамічних залежностей.

Крім того, в літературі спостерігається зростання інтересу, спрямованого на взаємодію графенового листа з різними наноб'єктами, оскільки вони можуть змінювати електронні та структурні властивості цього матеріалу, що може вплинути в майбутньому на винахід та вдосконалення нанопристроїв [13-15].

### 1.3. Принцип роботи програми SurfaceGrowth

У даному розділі представлені особливості моделі, які лежать в основі роботи SurfaceGrowth.

У класичній молекулярній динаміці (МД) ключову роль для моделювання того чи іншого матеріалу грає потенціальна енергія взаємодії атомів  $V$ . Для металів в SurfaceGrowth використовується емпіричний багаточастинковий потенціал, заснований на методі впровадженого атома (embedded atom method, EAM) і реалізований в роботі [16]. Він розроблений для моделювання сплавів і повністю виражений через аналітичні функції на відміну від перших версій EAM, де для функції занурення (embedding function) використовувалися кубічні сплайни [17]. У EAM потенціальна енергія  $V$  кристала може бути виражена наступним чином [16]:

$$V_{eam} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1.5)$$

де  $\phi_{ij}$  представляє собою парну енергію між атомами  $i$  та  $j$ , розділеними відстанню  $r_{ij}$ , а  $F_i$  означає енергію занурення, необхідну, щоб помістити атом  $i$  в локальну позицію з електронною густиною  $\rho_i$ , що розраховується таким чином:

$$\rho_i = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} f_j(r_{ij}), \quad (1.6)$$

де  $f_j(r_{ij})$  – електронна густина в місці розташування атома  $i$ , що походить від атома  $j$  на відстані  $r_{ij}$ .

Узагальнений парний потенціал має вигляд:

$$\phi(r) = \frac{A \exp \left[ -\alpha \left( \frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left( \frac{r}{r_e} - \kappa \right)^{20}} - \frac{B \exp \left[ -\beta \left( \frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left( \frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}, \quad (1.7)$$

де  $r_e$  - рівноважна відстань між найближчими сусідами,  $A$ ,  $B$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  - підігнані параметри і  $\kappa$ ,  $\lambda$  - два додаткові параметри для відсічки.

Функція електронної густини має таку ж форму, як і член притягання в парному потенціалі з тими ж значеннями  $\beta$  і  $\lambda$ , тобто:

$$f(r) = \frac{f_e \exp \left[ -\beta \left( \frac{r}{r_e} - 1 \right) \right]}{1 + \left( \frac{r}{r_e} - \lambda \right)^{20}}. \quad (1.8)$$

Щоб функція занурення  $F$  працювала для широкого діапазону значень електронної густини, використовуються три рівняння для кожного з наступних інтервалів:  $\rho < \rho_n$ ,  $\rho_n \leq \rho < \rho_o$  і  $\rho_o \leq \rho$ . Використовуючи  $\rho_n = 0,85\rho_e$ , де  $\rho_e$  - рівноважна електронна густина, можна бути впевненим, що всі рівноважні властивості можуть бути отримані в діапазоні електронної густини  $\rho_n \leq \rho < \rho_o$ . Для плавної зміни енергії впровадження потрібні рівняння, що дають однакові значення функції та її похідної на межах інтервалів. Ці рівняння мають вигляд:

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_{ni} \left( \frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \rho_n = 0.85\rho_e, \quad (1.9)$$

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_i \left( \frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_o, \rho_o = 1.15\rho_e, \quad (1.10)$$

$$F(\rho) = F_e \left[ 1 - \ln \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \left( \frac{\rho}{\rho_e} \right)^\eta, \quad \rho_o \leq \rho. \quad (1.11)$$

Значення параметрів, що входять в усі виписані рівняння, для 16 металів можна знайти в роботі [16], або для шести металів – у кодї SurfaceGrowth. Величини густини і мас металів в SurfaceGrowth взяті з книги [18], де також можна знайти інші характеристики металів.

Сила, що діє на атом  $k$  з боку інших атомів металу, подається виразом:

$$f_k = -\frac{\partial V_{eam}}{\partial r_k} = \sum_{j \neq k} \frac{d\phi(r_{kj})}{dr} \hat{r}_{kj} - \sum_{i=1}^{N_m} \frac{\partial F_i}{\partial \rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial r_k}, \quad (1.12)$$

де  $N_m$  – повне число атомів металу,  $r_{kj}$  – одиничний вектор, спрямований від атома  $j$  до атому  $k$ . Вирази для похідних в (1.12) мають вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{dr} = & -\frac{A \exp\left[-\alpha \left(\frac{r}{r_e} - 1\right)\right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \kappa\right)^{20}} \left[ \alpha + \frac{20 \left(\frac{r}{r_e} - \kappa\right)^{19}}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \kappa\right)^{20}} \right] \frac{1}{r_e} + \\ & + \frac{B \exp\left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1\right)\right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda\right)^{20}} \left[ \beta + \frac{20 \left(\frac{r}{r_e} - \lambda\right)^{19}}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda\right)^{20}} \right] \frac{1}{r_e}, \end{aligned} \quad (1.13)$$

$$\sum_{i=1}^{N_m} \frac{\partial F_i}{\partial \rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial r_k} = \sum_{i=1, i \neq k}^{N_m} \frac{df(r_{ki})}{dr} \left( \frac{\partial F_i}{\partial \rho_i} + \frac{\partial F_k}{\partial \rho_k} \right) \hat{r}_{ki}, \quad (1.14)$$

$$\frac{df}{dr} = -\frac{f_e \exp\left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1\right)\right]}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda\right)^{20}} \left[ \beta + \frac{20 \left(\frac{r}{r_e} - \lambda\right)^{19}}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda\right)^{20}} \right] \frac{1}{r_e}, \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho_n} \left[ F_{n1} + 2F_{n2} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1\right) + 3F_{n3} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1\right)^2 \right], \rho < \rho_n, \rho_n = 0.85\rho_e, \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho_e} \left[ F_1 + 2F_2 \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1\right) + 3F_3 \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1\right)^2 \right], \rho_n \leq \rho < \rho_0, \rho_0 = 1.15\rho_e, \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \rho} = -\frac{F_e \eta}{\rho_e} \left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^{\eta-1} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^\eta, \rho_0 \leq \rho. \quad (1.18)$$



Оскільки вираз для потенціальної енергії металу (5) і сили, що діє на атом металу (12), складаються з двох частин – парної, залежності від відносного положення атомів, і ЕАМ частині, що залежить від електронної густини всіх атомів, відмінних від даного, то розрахунок  $V_{eam}$  і сили проводиться в два етапи. Спочатку розраховується електронна густина для кожного атома, а потім – зазначені величини.

Потенціальна енергія  $V_C$  взаємодії атомів вуглецю в шарі графена описується пружинним потенціалом з роботи [19] такого вигляду:

$$V_C = \frac{1}{2} \sum_{i-j} \mu_r (r_{ij} - r_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i-j-k} \mu_\theta r_0^2 (\theta_{ijk} - \theta_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i-(j,k,l)} \mu_p \left( \delta z_i - \frac{\delta z_j + \delta z_k + \delta z_l}{3} \right)^2 \quad (1.19)$$

Сума проводиться за найближчими сусідами, їх парами і триплетами, а значення параметрів можна знайти в [19]. Напишемо вираз для сили, що діє на атом вуглецю і з боку інших атомів у шарі вуглецю:

$$f_i = - \sum_{i-j} \mu_r (r_{ij} - r_0) \frac{r_{ij}}{r_{ij}} + \sum_{j \neq i, k \neq i} \mu_\theta r_0^2 (\theta_{jik} - \theta_0) \left[ 1 - \left( \frac{r_{ij} r_{ki}}{r_{ji} r_{ki}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \times \frac{\left( 1 - \frac{r_{ji}}{r_{ki}} \cos \theta_{jik} \right) r_{ik} + \left( 1 - \frac{r_{ki}}{r_{ji}} \cos \theta_{jik} \right) r_{ij}}{r_{ji} r_{ki}} + \sum_{j \neq i, k \neq i} \mu_\theta r_0^2 (\theta_{ijk} - \theta_0) \left[ 1 - \left( \frac{r_{ij} r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \times \left[ \frac{r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}} - \frac{(r_{ij} r_{kj})}{r_{ij}^3 r_{kj}} r_{ij} \right] - \sum_{j,k,l} \frac{2}{3} \mu_p [2\delta z_i - (\delta z_j + \delta z_k + \delta z_l)] - \frac{1}{9} \mu_p \sum_{m,n} (\delta z_m + \delta z_n). \quad (1.20)$$

В останній сумі індекси  $m$ ,  $n$  означають сусідів атома  $i$ , наступних за найближчими. Таким чином, при розрахунку сили з пружинного потенціалу потрібно розглядати не тільки трьох найближчих сусідів у шарі графену, а й сусідів найближчих сусідів, що враховано в коді програми.

Взаємодія метал-вуглець описується потенціалом Леннарда-Джонса:

$$V_{LJ} = \begin{cases} 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right], & r < r_c, \\ 0, & r \geq r_c. \end{cases} \quad (1.21)$$

де за замовчуванням значення параметрів  $\varepsilon$  і  $\sigma$  обрані як в роботі [19], однак інтерфейс програми дозволяє задавати ці величини. Відстань відсічки дорівнює  $r_c = 2,5\sigma$ . Відзначимо, що для ЕАМ потенціалу використовується відстань відсічки  $r_c = 1,45a$ ,  $a$  – постійна решітки металу.

## РОЗДІЛ 2

### ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ РЕЗУЛЬТАТИ ПРОВЕДЕННЯ ДОСЛІДЖЕНЬ

#### 2.1. Опис програми та аналіз отриманих напилень

У програмі SurfaceGrowth моделювання проводиться в трьох режимах: «Bulk», «Surface Growth», «Shear». Вони відрізняються між собою змістом атомів, їх початковим положенням, ходом розрахунків і можливостями змін.

В режимі «Surface Growth» можна дослідити напилення атомів вибраного металу на шар графену із налаштуванням енергії напилення атомів металу, температури, густини потоку напилюваних атомів і від параметрів взаємодії метал-вуглець. Алгоритм розрахунків у режимі «Surface Growth» виглядає наступним чином. Задаються розміри графенового листа і кількість атомів металу. Спочатку в моделюванні областей є лише шар графену, розміщений паралельно площині  $xy$ , а атоми металу знаходяться в області моделювання та не взаємодіють між собою. Періодичні межі прикладені в площині  $xy$ . Крайні атоми по периметру в графеновій підкладці жорстко закріплені, так щоб шар не зміщувався у вертикальному напрямку, паралельному осі  $z$ . Після періоду врівноваження, тривалість якого задається користувачем і під час якого досягається задане значення температури шару графену, через указане користувачем число часових кроків, відбувається введення атомів металу в область моделювання над шаром графена групами, розмір яких також задається.

Введені атоми мають випадкові координати в площині  $xy$ , їх координата  $z$  визначається розмірами області моделювання. Компоненти  $x$ ,  $y$  початкових швидкостей, впроваджених атомів металу рівні 0, а  $z$  компонента спрямована до шару графена (проти осі  $z$ ) і її значення визначається виразом:

$$v_{0z} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{dep}}{m}} \quad (2.1)$$

де  $\varepsilon_{dep}$  – енергія напилюваних атомів, що задається користувачем,  $m$  - маса атома металу.

У режимі «Surface Growth» можна проводити вимірювання загальних параметрів. Відзначимо, що термостат Берендсена, який використовується для відводу тепла, прикладається тільки до атомів вуглецю і занадто інтенсивне бомбардування шару графену призведе до його перегріву та руйнування. Тому даний режим вимагає дуже ретельного підбору значень параметрів, оскільки високі значення енергії атомів або густини потоку призводять до руйнування шару графена [20].

У додатку можна робити виміри різних параметрів системи: загальних параметрів і характеристик наночастинки. Якщо користувач зробив відповідний вибір, то загальні параметри виводяться в текстовий файл через вказане користувачем число часових кроків. Це число також визначає інтервал, за яким здійснюється усереднення величин. Використовуючи текстовий файл з даними, можна будувати графіки залежності величин за допомогою різних програм (Grapher, Origin, Sigma Plot і т.д.). До загальних параметрів належать:

- `stepCnt` – кількість часових кроків, які пройшли з початку моделювання;
- `impulse` – повний імпульс системи;
- `totEn (eV)`, `totEn.rms (eV)` – повна енергія системи і її середньоквадратичне відхилення (в електрон-вольтах) за період усереднення. Повна енергія дорівнює сумі потенціальної та кінетичної енергій всіх атомів;
- `potEn (eV)`, `potEn.rms (eV)` – потенціальна енергія системи і її середньоквадратичне відхилення (в електрон-вольтах). Дорівнює сумі потенціальних енергій всіх атомів;
- `Temp (K)`, `T.rms (K)` – температура системи і її середньоквадратичне відхилення (в градусах Кельвіна) за період усереднення. Розраховується, виходячи з кінетичної енергії атомів. У режимі Shear при розрахунку суми квадратів швидкостей віднімається швидкість центру мас з швидкості кожного атома металу, щоб виключити цей внесок в температуру;
- `oneStep (ms)` – середня тривалість розрахунку часового кроку в мілісекундах.

Велика частина характеристик наночастинки виводиться в той же текстовий файл, що і загальні параметри. До характеристик відносяться:

- $Veloc_{CM}$  – швидкість центру мас (ЦМ) наночастинки вздовж осі  $x$ ;
- $X_{CM}$  (angstr) - координата ЦМ наночастинки вздовж напрямку  $x$  (в ангстремах). Початок координат знаходиться в центрі області моделювання;
- friction (nN) – сила підкладки, що діє на частинку (в наноньютонах). Вона дорівнює  $x$  компоненті сили, що діє на атоми металу з боку атомів вуглецю [21].

Модель розглядає підкладку, що складається із двовимірного графенового шару, який піддається низькоенергетичному бомбардуванню атомними частинками. Нами були досліджені такі матеріали напилення, як атоми Al, Pd, Pt, Au, Co та Ni . Процедура напилення була змодельована за допомогою програми SurfaceGrowth. Основні параметри налаштування:

1. Режим роботи – «Surface Growth».
2. Вибраний матеріал напилення (всі перелічені раніше).
3. Розмір підкладки – 32x32 «бджолиних стільників».
4. Температура – 100 К.
5. Число атомів, що напилюються – 10 000.
6. Кількість кроків напилення – 1 500 000.

Напилювані атоми, направлені до поверхні, могли взаємодіяти між собою, перед наближенням до поверхні.

Приблизно на половині змодельованого напилення в 1 500 000 кроків можна спостерігати нерівномірність розміщення атомів. Наприкінці ми спостерігаємо атомістичні зображення, на яких атоми згруповуються. Такі утворення помітні як над підкладкою, так і після проходження через неї. При наближенні атомів до графенового шару більшість безперешкодно проходить крізь нього, решта – затримуються на поверхні. Крім того, при бомбардуванні графенового шару атомами, можна спостерігати деформацію, але руйнування підкладки не спостерігається. При зростанні температури підкладка буде руйнуватися за менших значень енергії бомбардуючих частинок [22]. Тобто, збільшення температури зменшує стійкість листа вуглецю до пошкодження.

## 2.2. Поведінка моделі системи

Розуміння тертя і зношуваності графену, що взаємодіє з різними матеріалами корисне, оскільки ці процеси часто пов'язані з виробництвом. Одним із таких застосувань вуглецю є датчики, що можуть виявити тип і концентрацію отруйних газів, які необхідні в різного роду середовищах та галузях [23]. Чистий графен є хорошим провідником, але неактивний для сорбції газу, оскільки на його поверхні є лише кілька функціональних груп, що обмежує хемосорбцію молекули газу [24]. Відновлений оксид графену (rGO) має швидку і високу реакцію на молекули газу за кімнатної температури [25]. Але недоліком таких датчиків газу rGO є довгий час відновлення через високу силу зв'язку між молекулами газу та графеновим матеріалом [26]. Напівпровідники з оксиду металу (MOS), які оздоблені благородними металами, такими як Pd або Pt, покращує чутливість, час відновлення та робочу температуру систем MOS / rGO [27, 28].

Тож для дослідження властивостей та нових сфер використання графену проведемо аналіз впливу низькоенергетичного бомбардування атомами різних матеріалів поверхні підкладки. Розглянемо зміни в системі для кожного з напилень у момент, коли атоми долітають до підкладки.

В ході експериментів зберігаються ідеальні умови вакууму. Ми розглядаємо графеновий лист, що лежить у площині  $xy$  (рис.2.1). Знімки для рис.2.1 були зроблені за допомогою програми Visual Molecular Dynamics. Для крайових атомів вуглецю встановлені жорсткі умови, тобто вони залишаються нерухомими протягом усього процесу моделювання. Загальна кількість атомів, що приймає участь у дослідженні становить 12 236. З яких 10 000 число напилюваних атомів, а решта входять до складу графенового листа (32x32 стільники).

В програмі SurfaceGrowth використовуються емпіричні потенціали, в яких передбачається, що потенціальна енергія атомів може бути представлена як функція тільки їх відносних положень. Для металів в SurfaceGrowth використовується емпіричний багаточастинковий потенціал, заснований на

методі зануреного атома (embedded atom method, EAM). Він розроблений для моделювання сплавів і повністю виражений через аналітичні функції.

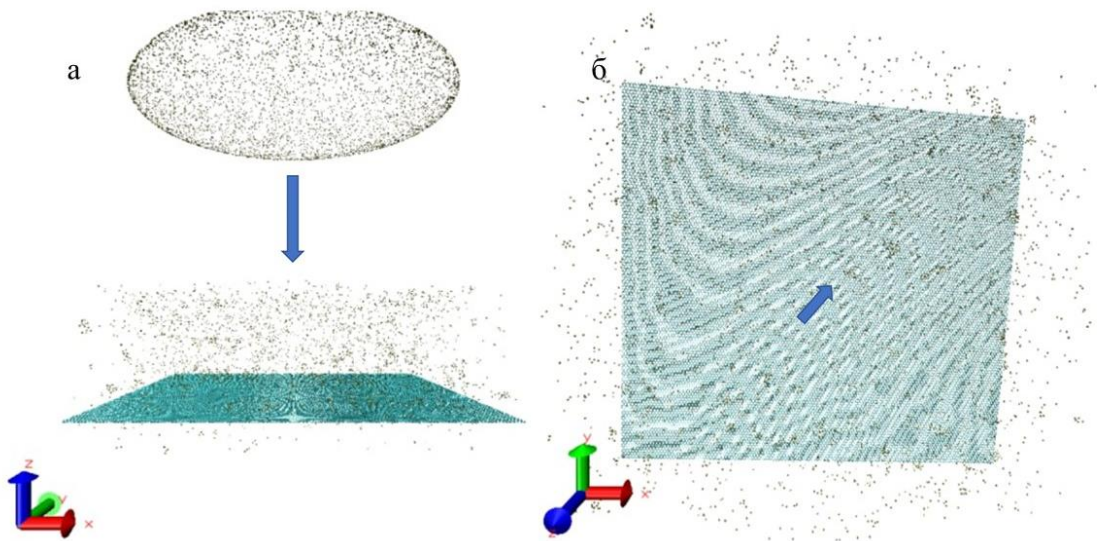


Рис. 2.1. Знімки отриманого напилення в режимі «Surface Growth», що містить 10 000 атомів паладію при температурі 100 К : а) у площині  $xy$ ; б) зверху.

Після 400 000 кроків в усіх напиленнях спостерігається "стрибок" повної енергії, після якого і потенціальна, і повна енергії починають плавно знижуватись (рис. 2.2). У цей момент усі змінні починають відхилятися від порівняно стійких попередніх значень. Температура різко зростає на величину від 10 К до 50 К (рис. 2.3), що становить від 10% до 75% заданої температури експерименту. Зростання температури для кожного з дослідів описані в табл. 2.1. Але після різкого збільшення, температура повертається до попереднього значення, а подальше її наростання відбувається через тривалий часовий проміжок і з меншими темпами див. рис. 2.3.

Сила підкладки неоднорідна. До часового проміжку в 400 000 кроків – значення рівне нулю. Але надалі спостерігається чергування нульового значення і відхилень див. рис. 2.3. Поведінка латерального положення центру мас, після моменту відхилення від початкового значення (у більшості випадків  $0,148 \text{ \AA}$  або  $1,48 \cdot 10^{-2} \text{ нм}$ ), для кожного дослідів унікальна див. рис. 2.3.

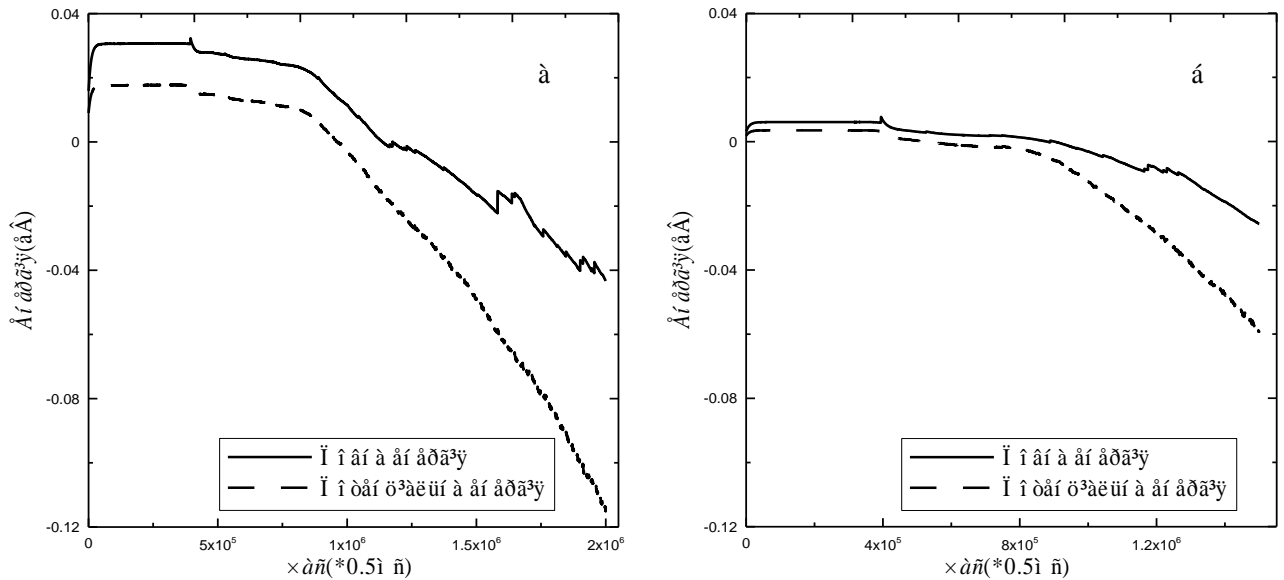


Рис. 2.2. Поведінка повної та потенціальної енергій від часу: а) Pd, при напыленні 10 000 атомів за температури 100 К; б) Pd, при напыленні 10 000 атомів за температури 20 К.

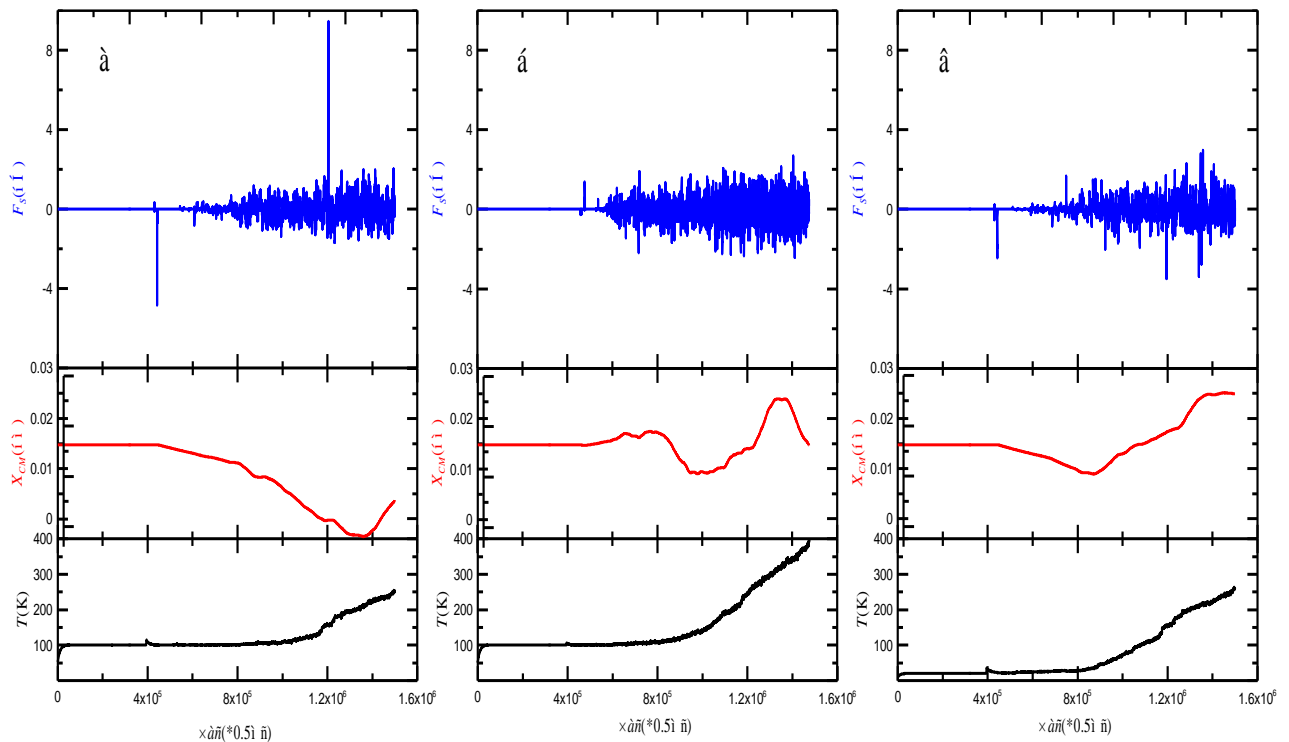


Рис. 2.3. Залежності температури, латерального положення  $X_{CM}$ , сили підкладки  $F_s$  від часу: а) Al, при напыленні 10 000 атомів; б) Pd, при напыленні 10 000 атомів за температури 100 К; в) Pd, при напыленні 10 000 атомів за температури 20 К.



### Порівняння росту температури для експериментів.

Дослід	Початкова температура, К	Збільшення температури, К
Al	100	10
Au	100	20
Co	100	35
Ni	100	20
Pd1	100	40
Pd2	100	50
Pd3	20	15
Pd4	100	15
Pd5	100	15

Пояснення до таблиці:

- Pd1 – дослід зі стандартними налаштуваннями напilenня паладію;
- Pd2 – з налаштуванням розміру підкладки 16x16;
- Pd3 – з налаштуванням температури 20 К;
- Pd4 – з налаштуванням кількості напилюваних атомів 25 000;
- Pd5 – з налаштуванням енергії атомів 0,6 еВ.

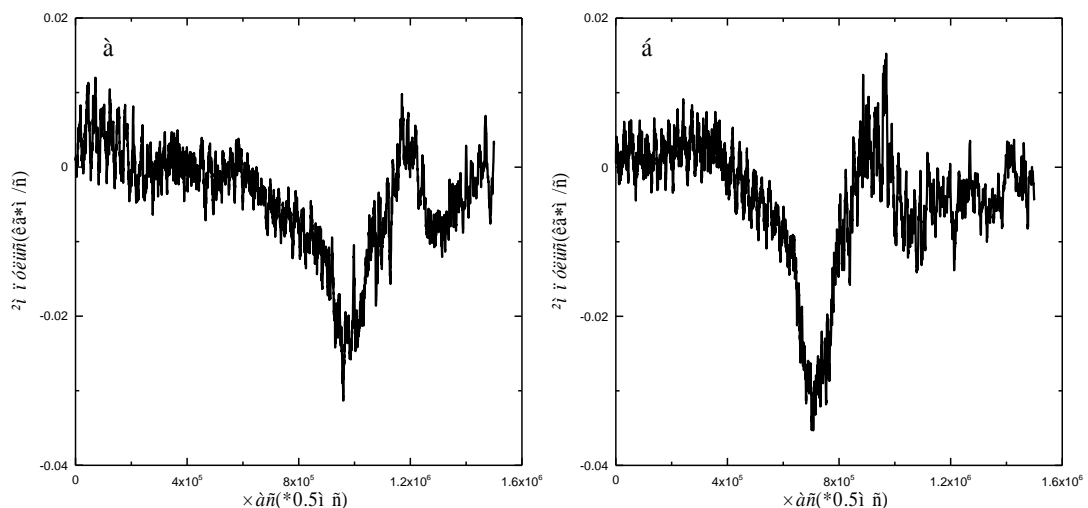


Рис. 2.4. Поведінка імпульсу від часу : а) Pd з кількістю напилюваних атомів 25 000; б) Pd з енергією атомів 0,06 еВ.

Подібна поведінка (як для  $X_{CM}$ ) спостерігається також і для – координати центру мас наночастинки вздовж осі  $y$  –  $Y_{CM}$ , швидкості центру мас

наночастинки вздовж осі  $x - Vel_{X_{CM}}$  та  $y - Vel_{Y_{CM}}$ . Траєкторія пилкоподібного графіку імпульсу починає коливатись зі зниження (рис. 2.4).

Описані зміни системи спостерігаються приблизно у період, коли атоми долітають до графенового листа. Крім того, для кожного матеріалу та при корекції налаштувань дослідів спостерігається подібність поведінки.

### 2.3. Вивчення поведінки наночастинок Al та Pd: атомістичний підхід

У даній роботі було проведено комп'ютерне моделювання у режимі «Surface Growth» для вивчення сили атомарного тертя наночастинок Pd та Al, із кількістю напилювання 10 000 атомів, на листі графену. Ми порівнюємо отримані дані для напилення паладію при різних температурах. Ці експерименти проводяться з метою вивчення сили підкладки і розуміння поведінки атомів, що може надати корисну інформацію про трибологічні процеси. Також корисне глибше розуміння тертя і зношуваності графену, що взаємодіє з різними матеріалами, оскільки ці процеси часто пов'язані з виробництвом.

У процесі моделювання були обчислені такі величини, як температура  $T$  системи, латеральне положення  $X_{CM}$ , а також сила підкладки  $F_s$ , що визначається як сума складових сил, що діють на атоми металів з боку вуглецю. Наш код дозволив нам напилювати атоми металу на графеновий лист, що полегшило трудомісткий підхід у проведенні дослідів.

Рис. 2.3 показує типову залежність від часу загальних величин для напилення Al з 10 000 атомів. Як було сказано в попередньому підрозділі, після початку напилення  $X_{CM}$  тимчасово стабільне, але потім спостерігаємо несиметричні відхилення від значення  $1,5 \cdot 10^{-2}$  нм. Дані відхилення змінюють знак подібно синусоїді з наростанням амплітуди. При чому  $X_{CM}$  не виходить із діапазону значень від  $9 \cdot 10^{-3}$  нм до  $2,5 \cdot 10^{-2}$  нм. Сила підкладки  $F_s$ , що діє на наночастинку, не є однорідною. Часова частота стрибків може свідчити про переривчасте ковзання руху контакту.

Щоб з'ясувати поведінку сили підкладки, розглянемо рис. 2.5 та 2.6, на яких зображено залежності  $F_s$  від  $X_{CM}$  для декількох напилень Al та Pd. Рис. 2.5 показує залежність сили підкладки від латерального положення центру мас наночастинок. Рис. 2.6 порівнює дані залежності між собою, накладаючи їх таким чином: а) Pd з 10 000 та Al з 10 000 атомами; б) Pd при температурі 100 К та 20 К. Також на виносках зображені збільшені ділянки з інтервалом накладання графіків. Можна помітити, що для Pd при 100 К, різниця між значеннями середньої амплітуди та глобальним максимумом значно більша ніж для інших досліджень. Така ж ситуація спостерігається і при різниці між значеннями середньої амплітуди та глобальним мінімумом.

Для залежності  $F_s$  від  $X_{CM}$  Pd при температурі 20 К сила підкладки має нерегулярну форму і шипи  $F_s$  розподілені нерівномірно, а для 100 К сила підкладки має пилкоподібну форму та більш рівномірне розподілення шипів. Для Pd спостерігається нерегулярна форма з нерівномірними шипами, а також затухаюча амплітуда з меншим діапазоном значень. Модуль вектору решітки в графені дорівнює 2,46 Å, що може свідчити про вплив графенової решітки на поведінку досліду. Зверніть увагу, що спостерігаються позитивні значення  $F_s$ , тобто сила підкладки змінює напрямок протягом напилення. Це свідчить, що взаємодія окремих атомів із шаром графену відбувається в різних напрямках. У середньому при температурі 100 К амплітуда піків для Al більше, ніж для Pd. А при порівнянні Pd за різних температур можна зазначити, що частота шипів нерегулярна. При 100 К вона незначною мірою більша, а також спостерігається затухаюча амплітуда. Для 20 К модуль значень піків має більший діапазон і наростає, оскільки амплітуда збільшується. Спостерігається симетрія значень  $F_s$  відносно осі абсцис. Що говорить про рівномірність взаємодії атомів із графеном в обох напрямках. Повертаючись до частоти коливань сили підкладки  $F_s$ , можна сказати, що на неї впливає деформація підкладки. Тобто при напиленні Pd при 100 К графеновий лист зазнаватиме більше деформацій ніж при інших описаних експериментах.

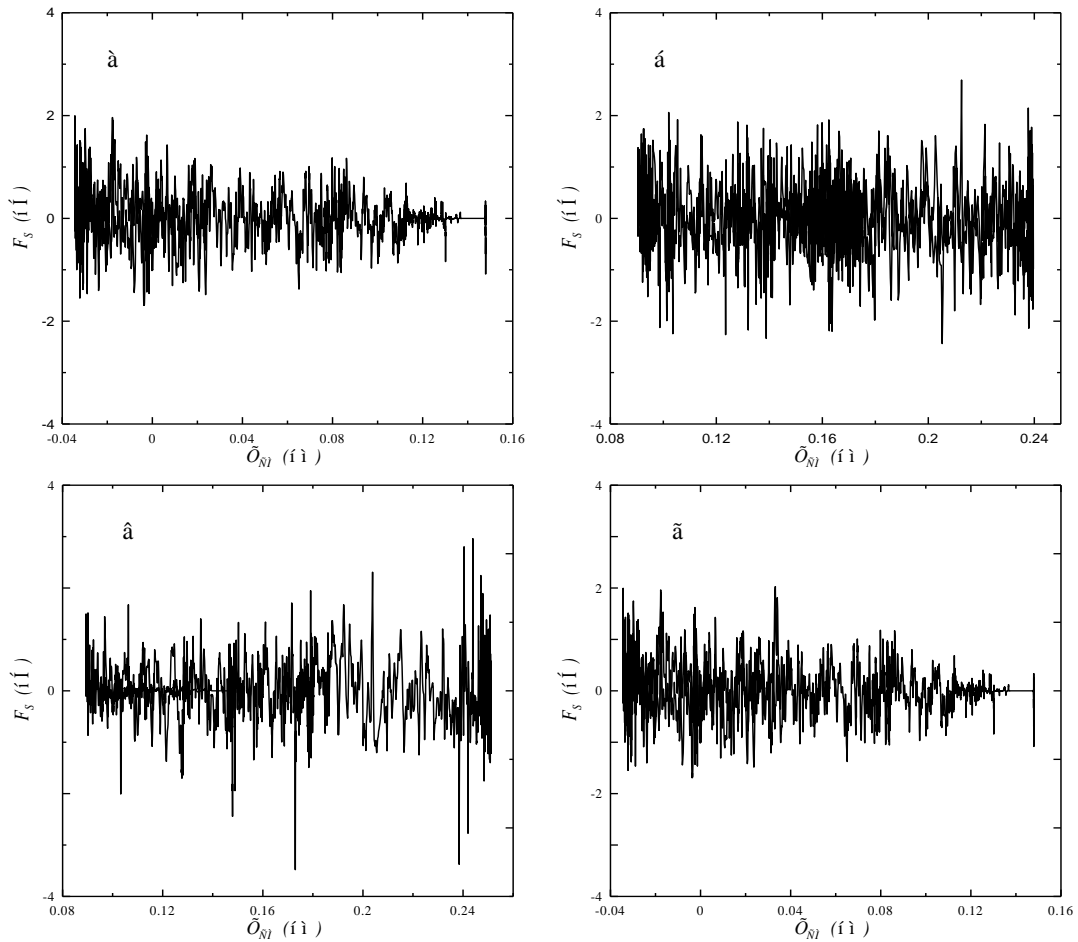


Рис. 2.5. Залежність сили підкладки від латерального положення центру мас наночастинок: а) Pd з наповненням 10 000 атомів; б) Al з наповненням 10 000 атомів; в) Pd при температурі 20 К ; г) Pd при температурі 100 К.

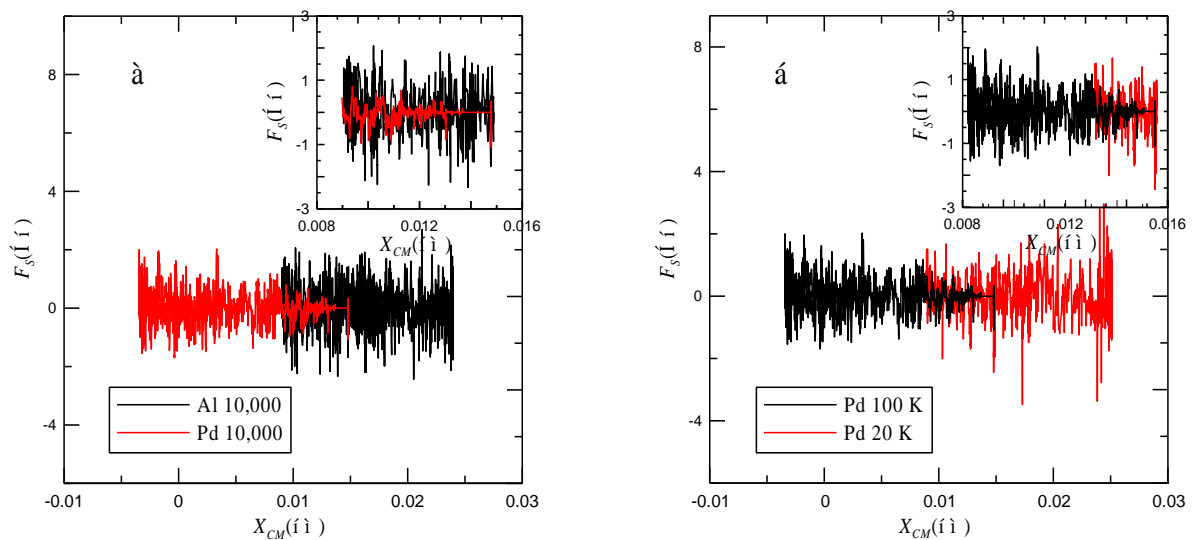


Рис. 2.6. Залежність сили підкладки від латерального положення центру мас наночастинок: а) Pd з 10 000 та Al з 10 000 атомами; б) Pd при температурі 100 К та 20 К. На рисунках також зображені виноски з накладанням графіків.

## 2.4 Вплив температури, енергії атомів та кількості напилення на поведінку параметрів експериментів

У даному підрозділі порівняно поведінку комп'ютерної моделі у режимі «Surface Growth» для декількох експериментів з метою вивчення впливу таких початкових параметрів системи як енергія напилюваних наночастинок, їх температура та кількість напилених атомів. Для того, щоб з'ясувати як енергія атомів впливає на процес роботи комп'ютерної моделі попарно порівняно експерименти, в яких розглядалися напилення алюмінію та паладію зі значеннями 0,03 еВ та 0,06 еВ.

У ході роботи, порівнявши такі параметри як імпульс, температура, латеральне положення центру мас, повна і потенціальна енергії та сила підкладки, вдалося прослідкувати, що при збільшенні енергії атомів на 0,03 еВ спостерігаються наступні зміни:

- Екстремуми пилкоподібної функції імпульсу змістилися таким чином, що траєкторія стала більш похилою. Ми можемо спостерігати, що мінімум і максимум встановилися приблизно на 500 часових кроків раніше для Al і на 1000 часових кроків для Pd (рис 2.7);
- Повна та потенціальна енергії, під час взаємодії атомів з підкладкою, знизилися в середньому приблизно на 0,005 еВ (рис 2.8);
- Максимум температури збільшився на 13 К для напилення Al і на 17 К для Pd (рис 2.9);
- Латеральне положення центру мас має більший діапазон значень. Причому зі збільшенням енергії атомів можемо спостерігати загальне стрімке зростання латерального положення ЦМ за відношенням до часу (рис 2.10);
- Поведінка сили підкладки змінюється за відношенням до часу. А саме, у момент досягнення підкладки першими атомами значно зменшуються шипи в напиленні Pd або зовсім зникають для Al (рис 2.11);
- Сила підкладки за відношенням до латерального положення ЦМ має більшу кількість шипів (рис 2.12).

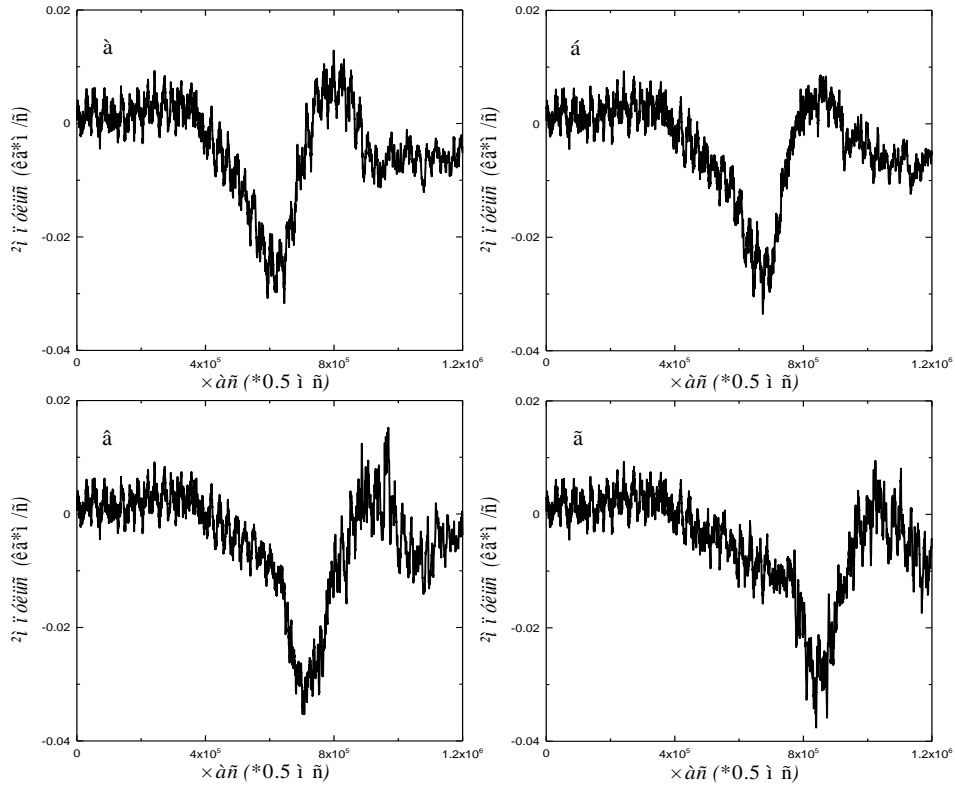


Рис. 2.7. Порівняння поведінки імпульсу від часу: а) Al, при енергії атомів 0,06 еВ; б) Al, при енергії атомів 0,03 еВ; в) Pd, при енергії атомів 0,06 еВ; г) Pd, при енергії атомів 0,03 еВ.

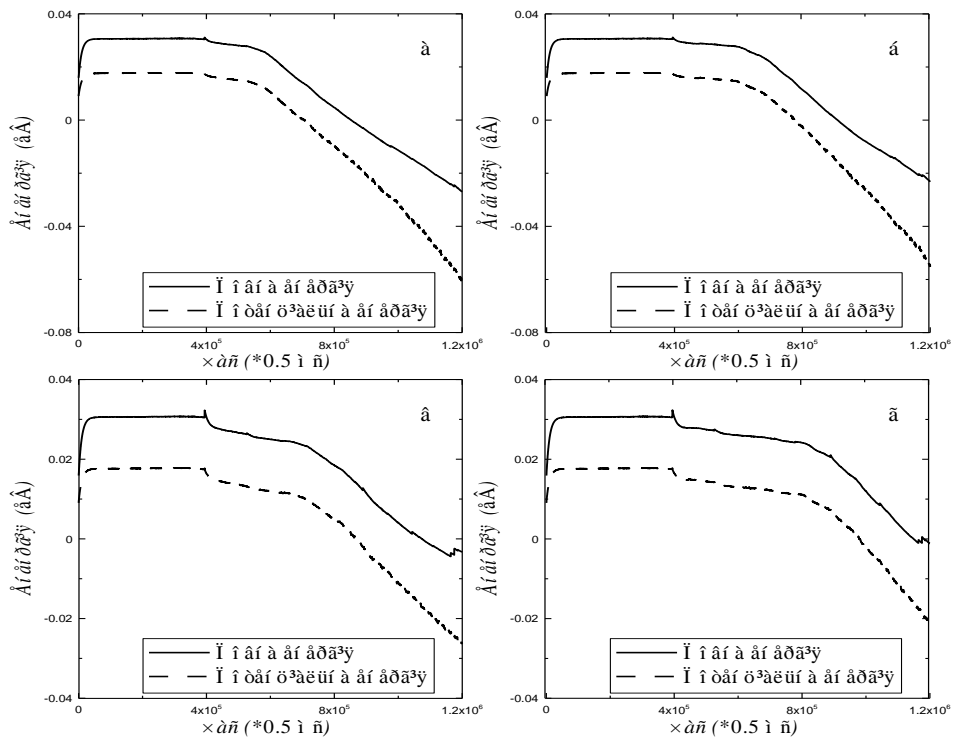


Рис. 2.8. Порівняння поведінки повної та потенціальної енергій від часу: а) Al, при енергії атомів 0,06 еВ; б) Al, при енергії атомів 0,03 еВ; в) Pd, при енергії атомів 0,06 еВ; г) Pd, при енергії атомів 0,03 еВ.

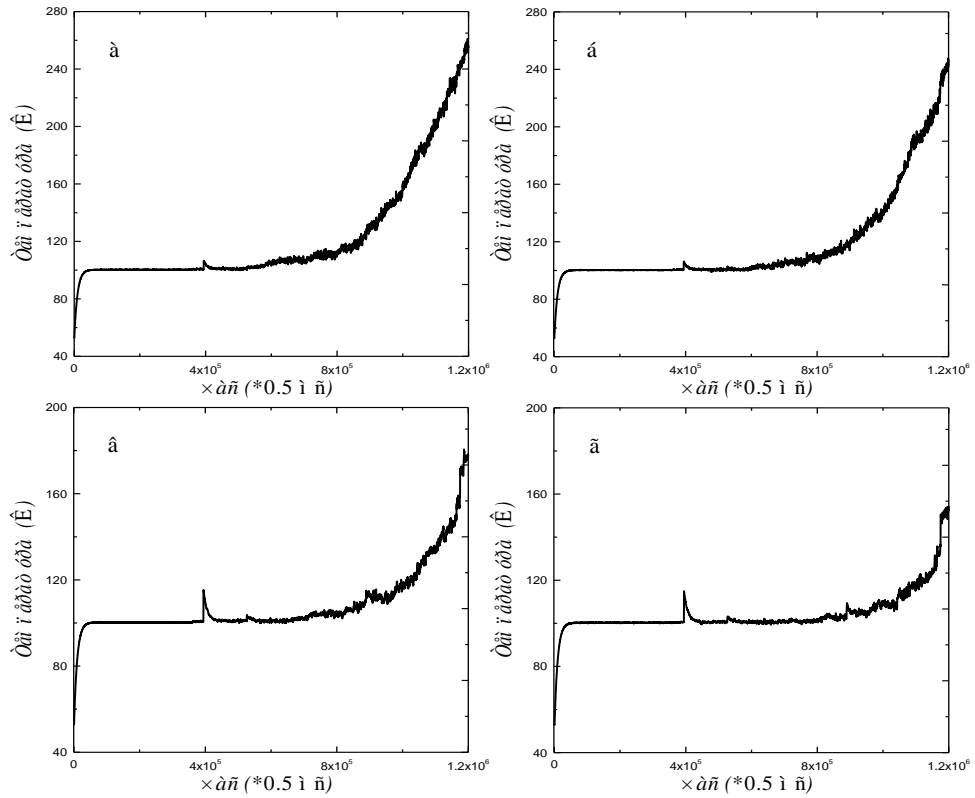


Рис. 2.9. Порівняння поведінки температури від часу: а) Al, при енергії атомів 0,06 еВ; б) Al, при енергії атомів 0,03 еВ; в) Pd, при енергії атомів 0,06 еВ; г) Pd, при енергії атомів 0,03 еВ.

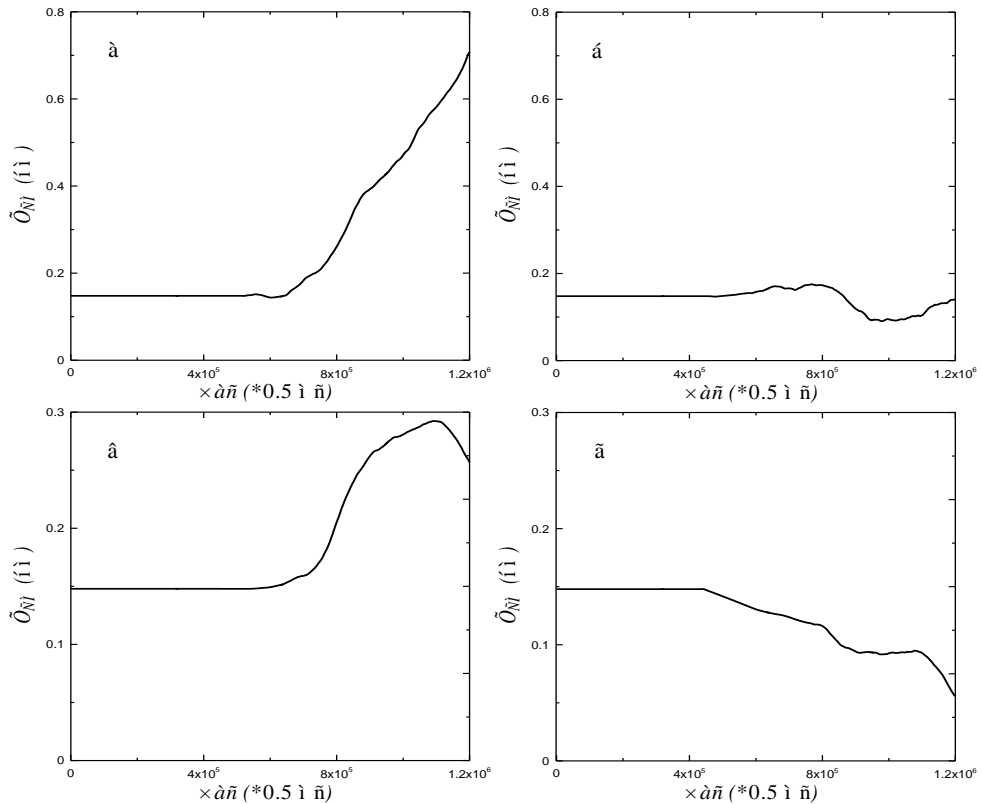


Рис. 2.10. Порівняння поведінки латерального положення ЦМ від часу: а) Al, при енергії атомів 0,06 еВ; б) Al, при енергії атомів 0,03 еВ; в) Pd, при енергії атомів 0,06 еВ; г) Pd, при енергії атомів 0,03 еВ.

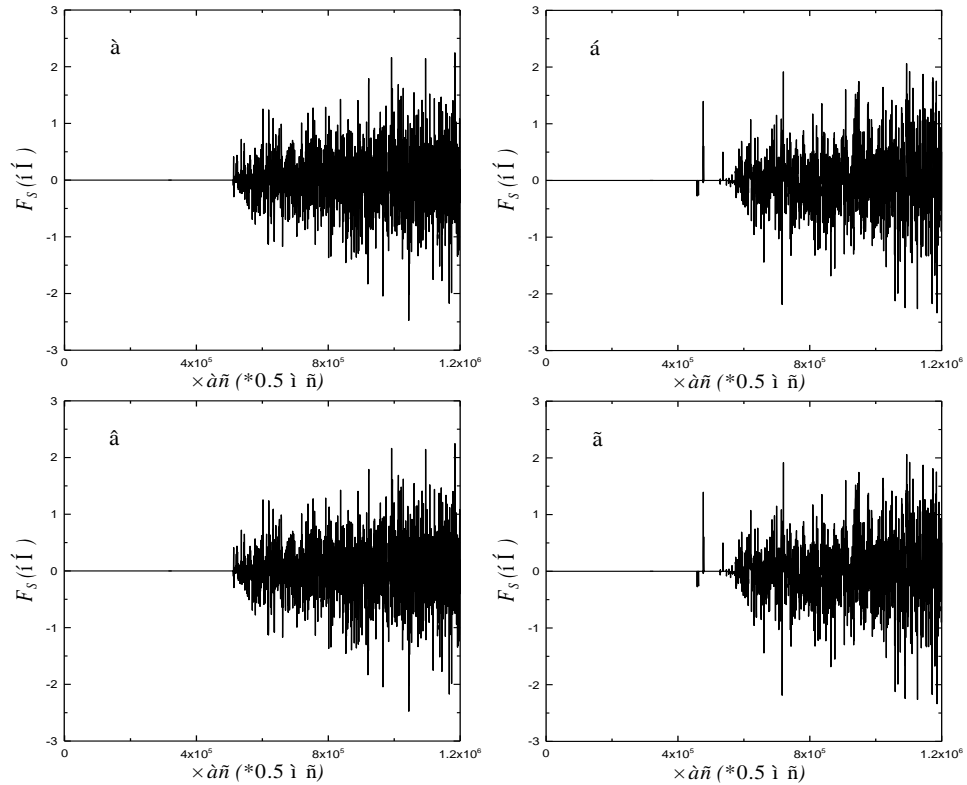


Рис. 2.11. Порівняння поведінки сили підкладки від часу: а) Al, при енергії атомів 0,06 еВ; б) Al, при енергії атомів 0,03 еВ; в) Pd, при енергії атомів 0,06 еВ; г) Pd, при енергії атомів 0,03 еВ.

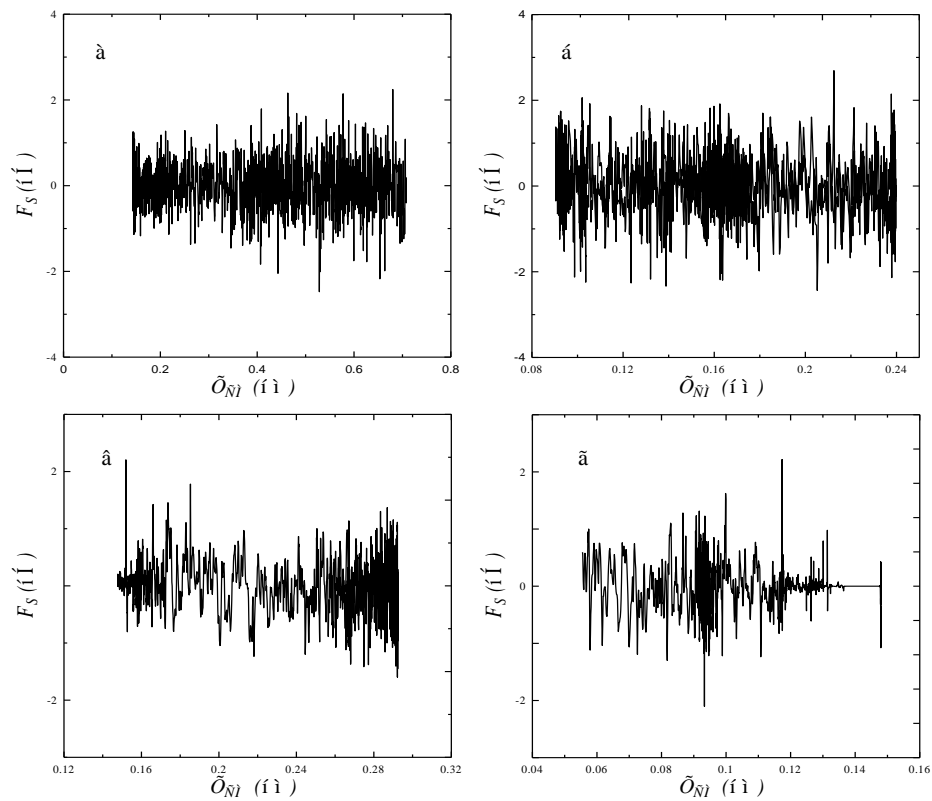


Рис. 2.12. Порівняння поведінки сили підкладки від латерального положення ЦМ: а) Al, при енергії атомів 0,06 еВ; б) Al, при енергії атомів 0,03 еВ.



Для того, щоб з'ясувати, як початкова температура впливає на процес напилення комп'ютерної моделі було попарно порівняно експерименти, які досліджували бомбардування графену частинками алюмінію за температури 100 К та 250 К та паладію за температури 20 К та 100 К.

У ході роботи, порівнявши такі параметри як імпульс, температура, латеральне положення центру мас та повна й потенціальна енергії, вдалося прослідкувати, що при збільшенні початкової температури дослідів на 150 К для Al та на 80 К для Pd спостерігаються наступні зміни:

- Нерівномірне збільшення амплітуди шипів пилкоподібного графіка імпульсу (рис 2.13);
- Зростають значення екстремумів графіка імпульсу, а траєкторія має більш похилу форму див. рис. 2.13;
- Зростають значення повної та потенціальної енергій. Для Al максимум загальної енергії зріс на 0,047 еВ, а потенціальної – на 0,027 еВ. Мінімум збільшився на 0,022 еВ та 0,016 еВ відповідно. Для Pd максимум повної енергії зріс на 0,025 еВ, а потенціальної – на 0,0023 еВ, мінімум збільшився на 0,014 еВ та 0,007 еВ відповідно (рис 2.14);
- Графіки енергій мають більш гладку траєкторію див. рис. 2.14;
- Наростання температури під час дослідів обернено пропорційне початковій температурі (рис 2.15). Тобто якщо зменшити  $T_0$  вдвічі, то швидкість росту температури в кінці дослідів збільшиться приблизно у 2 рази. Але це не означає, що при будь-якому початковому значенні  $T_0$  кінцева температура буде однакою для всіх експериментів. У нашому випадку кінцеве значення для Al збільшилося на 6 К, а для Pd зменшилося на 3 К.
- Незначне зростання діапазону значень для латерального положення ЦМ для Pd (0,0085 нм) та значне для Al (1,081 нм) (рис 2.16).

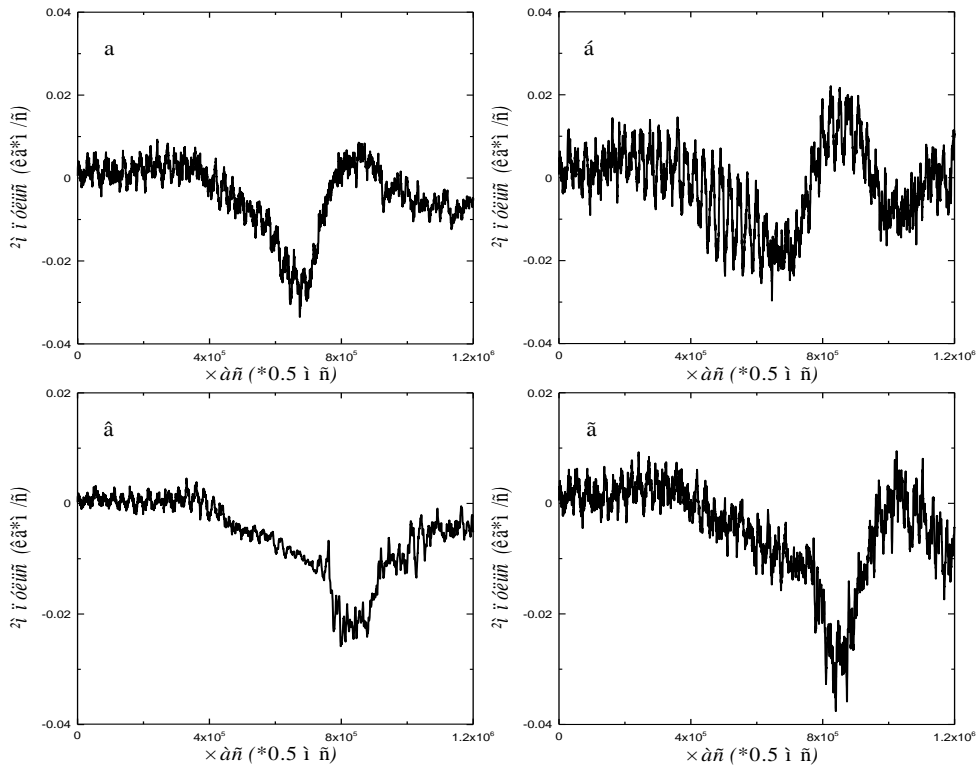


Рис. 2.13. Порівняння поведінки імпульсу від часу: а) Al, при температурі 100 К; б) Al, при температурі 250 К; в) Pd, при температурі 20 К; г) Pd, при температурі 100 К.

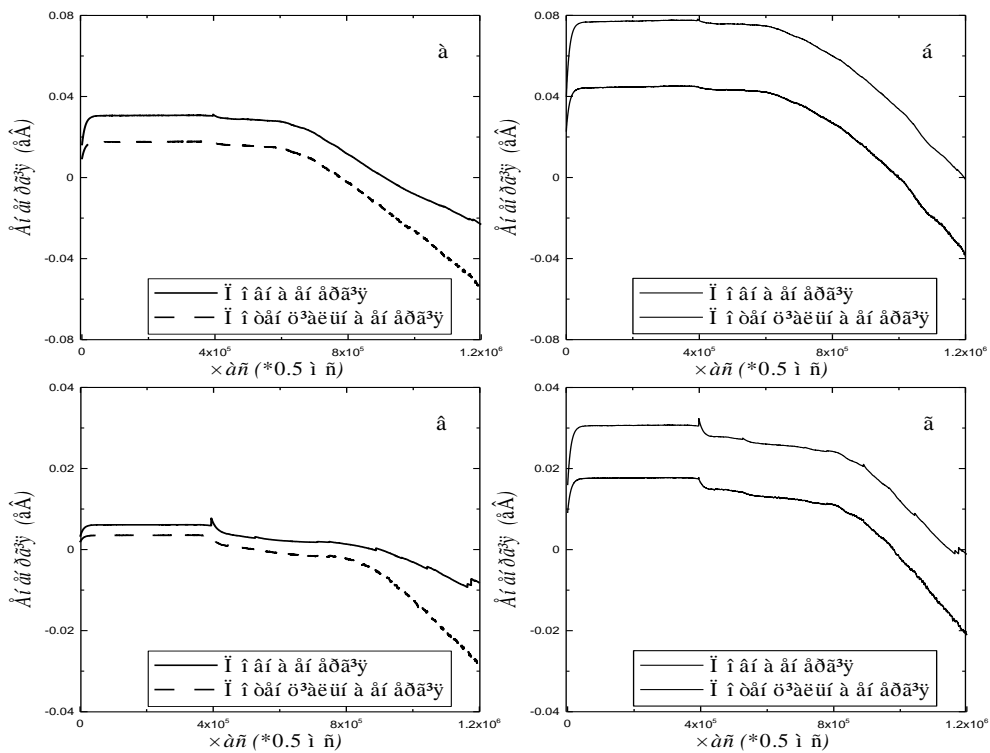


Рис. 2.14. Порівняння поведінки повної та потенціальної енергій від часу: а) Al, при температурі 100 К; б) Al, при температурі 250 К; в) Pd, при температурі 20 К; г) Pd, при температурі 100 К.

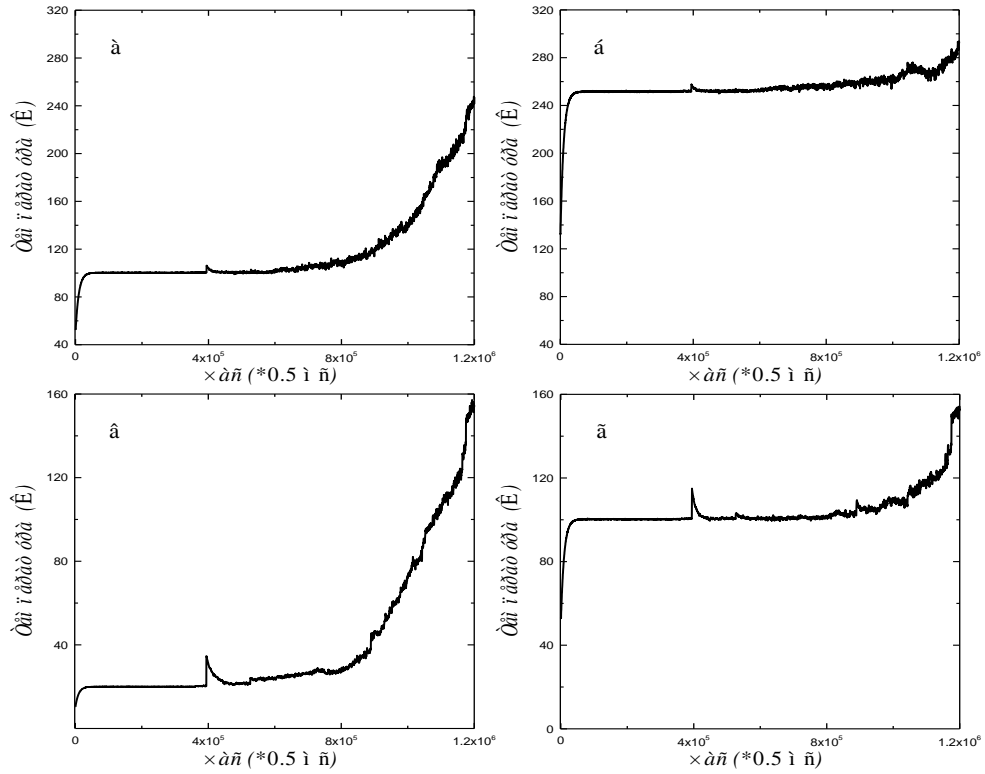


Рис. 2.15. Порівняння поведінки температури від часу: а) Al, при температурі 100 К; б) Al, при температурі 250 К; в) Pd, при температурі 20 К; г) Pd, при температурі 100 К.

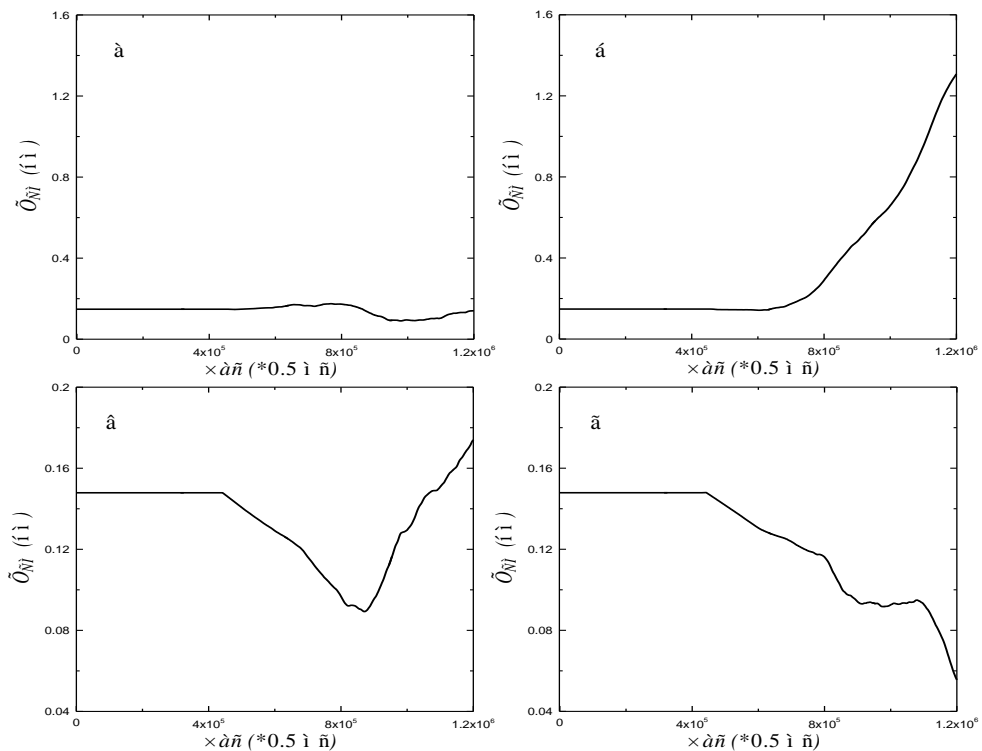


Рис. 2.16. Порівняння поведінки латерального положення ЦМ від часу: а) Al, при температурі 100 К; б) Al, при температурі 250 К; в) Pd, при температурі 20 К; г) Pd, при температурі 100 К.

Для дослідження впливу кількості напилюваних наночастинок були порівняні напилення Al з 10 та 20 тисячами атомів та Pd з 10 та 25 тисячами. Таким чином, вдалося прослідкувати, що при збільшенні кількості напилюваних атомів (для Al на 10 000, для Pd на 15 000) спостерігаються зміни:

- Екстремуми графіка імпульсу стали менше виражені, а траєкторія має більш полого форму (рис 2.17);

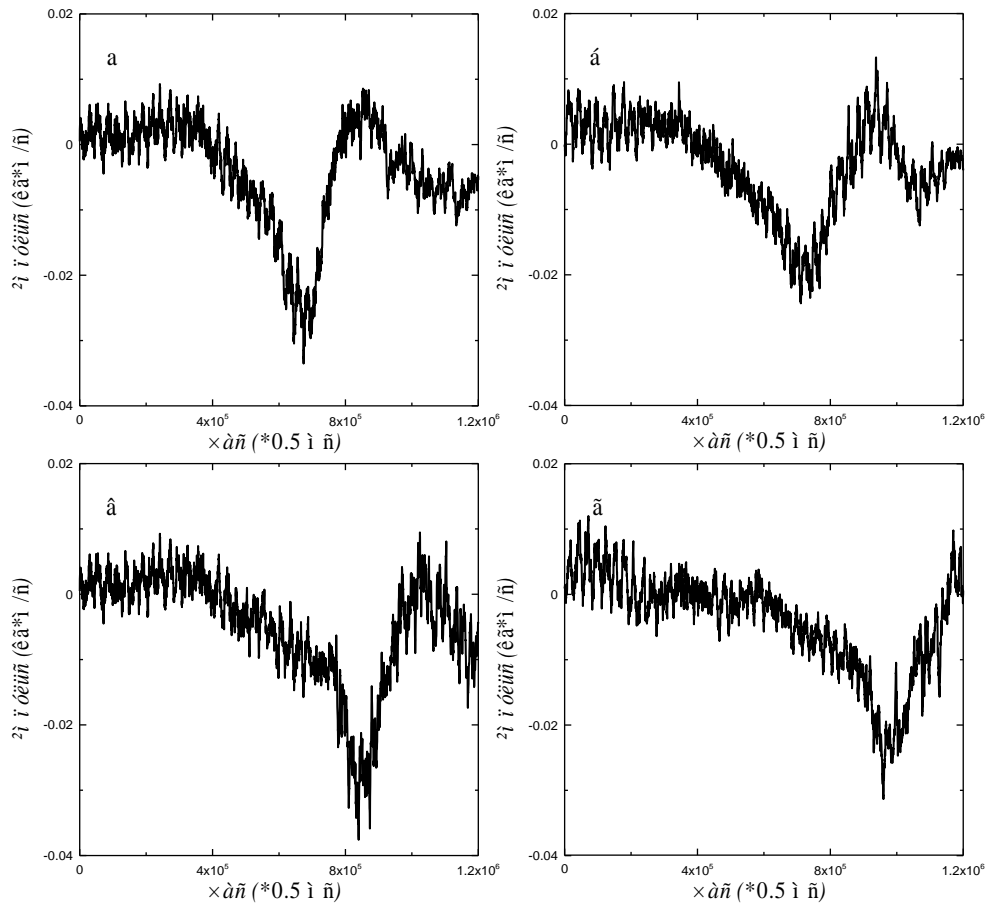


Рис. 2.17. Порівняння поведінки імпульсу від часу: а) Al, при напиленні 10 000 атомів; б) Al, при напиленні 20 000 атомів; в) Pd, при напиленні 10 000 атомів; г) Pd, при напиленні 25 000 атомів.

- Енергія має менший діапазон значень, а саме для Al максимум залишається незмінним, а мінімум повної енергії збільшився на 0,0125 eV, потенціальної – на 0,02 eV. Для Pd збільшення мінімуму повної енергії становить 0,01 eV, потенціальної – 0,03 eV (рис 2.18);
- Для температури теж властиве зменшення діапазону значень. Так для Al максимум зменшився на 70 K, а для Pd – на 36 K (рис 2.19);

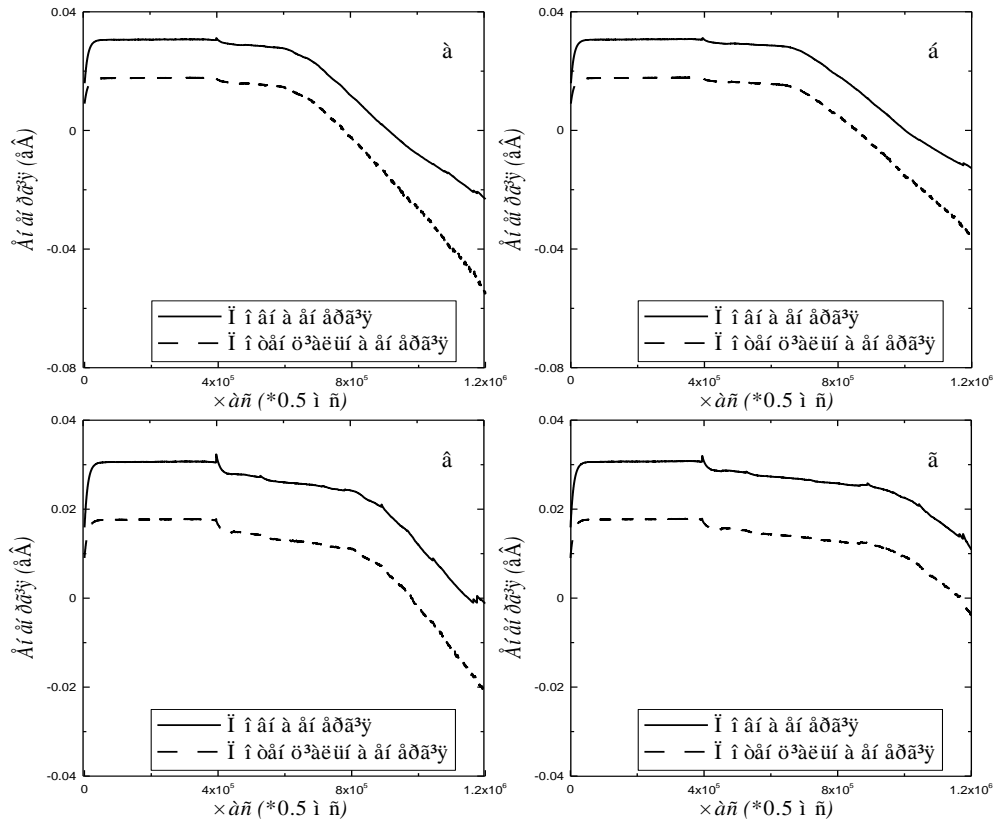


Рис. 2.18. Порівняння поведінки повної та потенціальної енергій від часу: а) Al, при напыленні 10 000 атомів; б) Al, при напыленні 20 000 атомів; в) Pd, при напыленні 10 000 атомів; г) Pd, при напыленні 25 000 атомів.

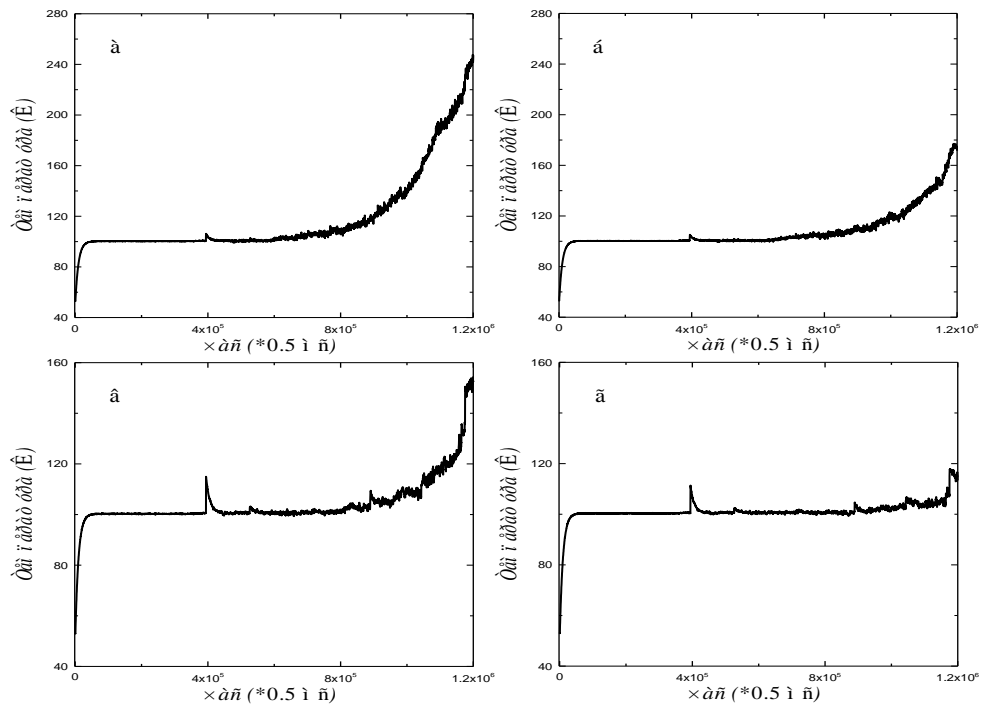


Рис. 2.19. Порівняння поведінки температури від часу: а) Al, при напыленні 10 000 атомів; б) Al, при напыленні 20 000 атомів; в) Pd, при напыленні 10 000 атомів; г) Pd, при напыленні 25 000 атомів.

- Поведінка сили підкладки за відношенням до часу змінюється, а саме значно зростають шипи у момент долітання перших атомів до підкладки (рис 2.20);
- Також спостерігалось більш рівномірне розподілення сили підкладки за відношенням до латерального положення ЦМ.

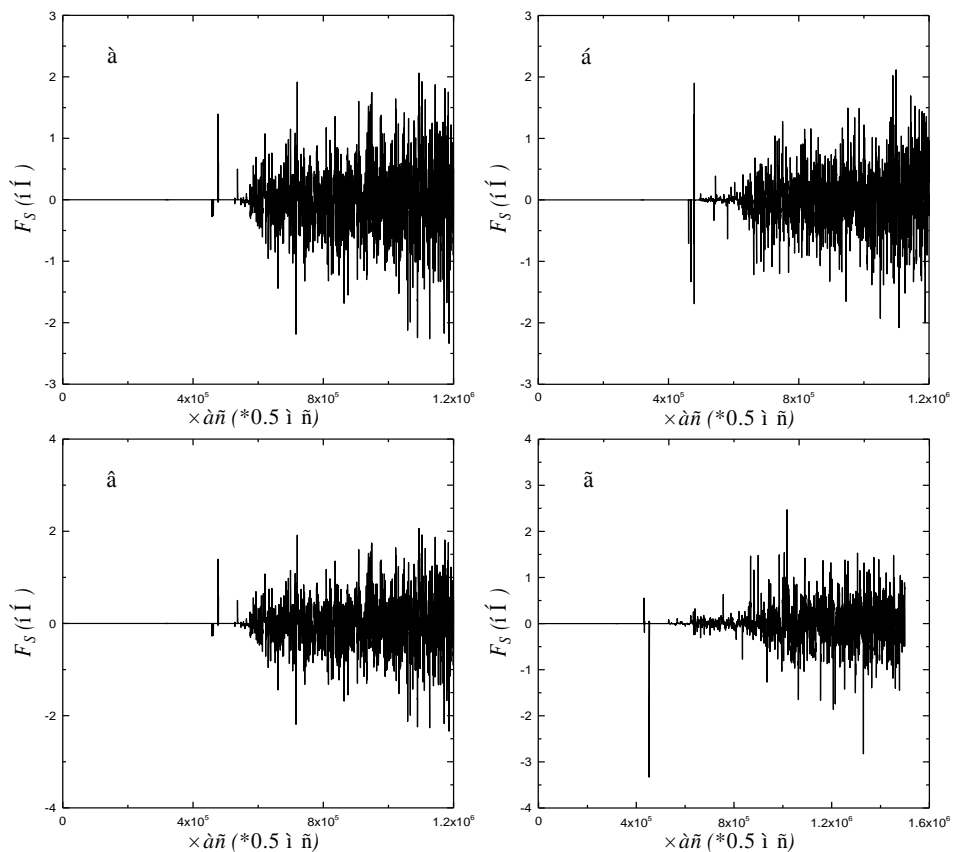


Рис. 2.20. Порівняння поведінки сили підкладки від часу: а) Al, при напыленні 10 000 атомів; б) Al, при напыленні 20 000 атомів; в) Pd, при напыленні 10 000 атомів; г) Pd, при напыленні 25 000 атомів.

## 2.5. Функція підкладки для дослідження зразка методом АСМ

У цьому розділі ми розглянемо програмну реалізацію моделі, що стосується однієї з функцій. Вона відповідає за нумерацію атомів у матеріалі підкладки та їх координати. Код розміщений у додатку А. Варто зазначити, що функція є універсальною, оскільки підходить для гранецентрованої (ГЦК) та об'ємноцентрованої (ОЦК) кубічних решіток. У зв'язку з тим, що

спостереження відбувається під кутом  $90^\circ$ , то для обох видів решіток ми спостерігаємо однакову картину (рис. 2.21б).

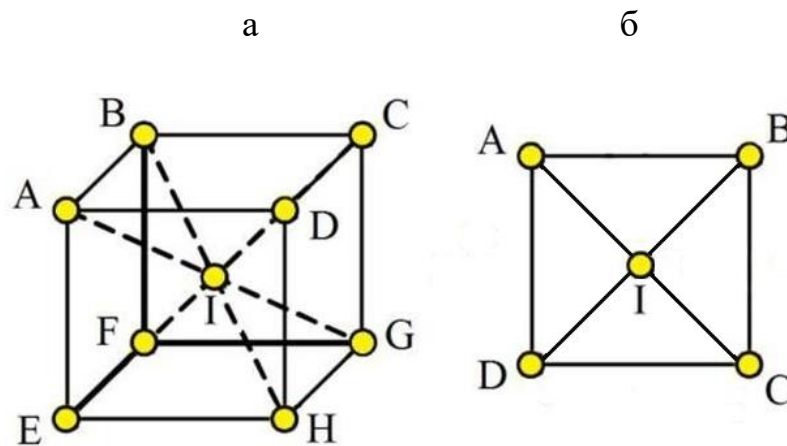


Рис. 2.21. Схема розміщення атомів ОЦК решітки: а) загальний вигляд молекули; б) вигляд зверху, під кутом до нормалі.

У нашій програмі блоки мають розмір по 32 атоми, які складаються за даною схемою. Ми розіб'ємо блок на чотири фрагменти, кожен з яких складається з 8-ми атомів. Пронумеруємо їх наступним чином. Атом В приймає нульовий номер, атом С приймає перший номер, атом І – 2-й, атом D – 3-й і так далі.

Тепер задаємо зміщення  $dx$  та  $dy$ , яке обмежує розміри секції. У нашому випадку  $dx=dy=2$ . Додатковий зсув  $sx$  та  $sy$  дає можливість розбити всю підкладку на секції та пронумерувати їх. Таким чином  $sx$  відповідає за номер атома, а  $sy$  – за номер секції до якої належить фрагмент.

Наступним кроком знайдемо координати атомів. Візьмемо довжину грані сітки рівною одиниці. При накладанні фрагмента на осі координат зможемо знайти їхнє розміщення. У коді програми це задається у такий спосіб:

```
switch(sx) {
    case 0:
        x = 1.f;
        y = 0.f;
        break;
    case 1:
```

```

x = 0.f;
y = 0.f;
break.

```

(2.2)

Важливим теж є розміщення фрагмента на осі координат. На рис. 2.22 зображено так, як це описано у програмі. Крім того, В має координати (1; 0), С має координати (0; 0), I – (0,5; 0,5), D – (0; 1), А – (1; 1) і так далі.

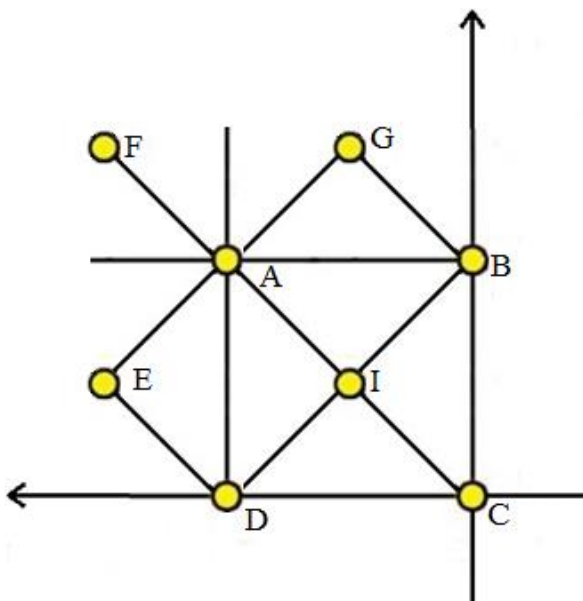


Рис. 2.22. Схема розміщення атомів на осях координат.

Далі задаємо додатковий зсув:

```

if( cy == 1 )      dx += 4.f;
else if( cy == 2 )  dy += 4.f;
else if( cy == 3 )
{ dx += 4.f;
  dy += 4.f; }.

```

(2.3)

Переміщаємо початок координат у центр шару, тобто там, де відбулося напилення та зберігаємо отримані координати [29].



## ВИСНОВКИ

1. Зроблені числові розрахунки напилень атомів металів на підкладку графену за допомогою комп'ютерного моделювання методом молекулярної динаміки.
2. Досліджено поведінку наночастинок з метою аналізу взаємодії між графеном та напилюваними атомами. Показано, що відбувається стрибок повної енергії та температури, а також зміна поведінки імпульсу та сили підкладки при досягненні атомами графену для всіх напилень.
3. Описано загальну поведінку часових залежностей енергії, температури, імпульсу та сили підкладки, яка є спільною для всіх експериментів.
4. Показано, як початкові параметри (температура, енергія наночастинок, кількість напилюваних атомів) впливають на поведінку комп'ютерно змодульованої системи.
5. Написано функцію для комп'ютерної програми для зміни кристалічної решітки підкладки на ГЦК та ОЦК.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Хоменко А.В., Трибологические свойства наноразмерных систем, содержащих углеродные поверхности / Хоменко А., Проданов Н., Хоменко Е., Трощенко Д. // Журнал нано- та електронної фізики. – 2014. – Т. 6, № 1.
2. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии : учебное пособие для студентов старших курсов высших учебных заведений. – 2004. – с. 62-65.
3. Хоменко О. В., Гончаренко Н. Г., Прояви та причини анізотропії тертя вуглецевих та металевих матеріалів і льоду // Матеріали науково-технічної конференції «Інформатика, математика, автоматика». - Суми, 2020. - С.225-226.
4. Литвиненко Я.М. Фізичні процеси в приладових структурах з перпендикулярною магнітною анізотропією : дис. ... канд. фіз.-мат. наук : 01.04.01. Суми, 2016. 154 с.
5. Федченко О., Вплив матеріалу підкладки на магніторезистивні та магніто-оптичні властивості плівкової системи Co/Fe / Федченко О., Салтикова А., Проценко С. // Журнал нано- та електронної фізики. – 2012. – Том 4, № 3.
6. Семеній О., Вплив матеріалу підкладки електродів для нанесення алмазоподібних плівок на якість біоаналізу / Семеній О., Рожицький М. // Східно-Європейський журнал передових технологій ISSN 1729-3774 . – 2013. – Том 4, №8. – с. 38-42.
7. Binnig G. Scanning tunneling microscopy / G. Binnig, H. Rohrer // Helvetica Physica Acta. – Vol. 55(1982). – 726 p.
8. 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.

9. 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.
10. Проценко І.Ю. Наноматеріали і нанотехнології в електроніці [Текст] : підручник / І. Ю. Проценко, Н. І. Шумакова. – Суми : СумДУ, 2017. – с.38-39.
11. I. Simon, A. Savitsky, R. Mülhaupt, V. Pankov, C. Nickel nanoparticle-decorated reduced graphene oxide/WO<sub>3</sub> nanocomposite – a promising candidate for gas sensing // Beilstein J. Nanotechnol. – 2021. – Vol. 12, No. 28. – P. 343-353.
12. Борисюк В. М. Механічні властивості та фазові переходи в  $Ti_{n+1}C_n$  максенах і металевих наноматеріалах під дією зовнішнього впливу деформації та температури: дис. ... канд. фіз.-мат. наук : 01.04.07 / Сумський Державний ун-т. Суми, 2021. 1с.
13. Shibuta, Y.; Elliott, J. A. Chem. Phys. Lett. 2006, 427, 365–370.
14. Neek-Amal, M.; Asgari, R.; Tabar, M. R. R. Nanotechnology 2009, 20, 135602.
15. Crespi, V. H. Nature 2009, 462, 858–859.
16. M. Griebel, S. Knapek, G. Zumbusch, Numerical Simulation in Molecular Dynamics, Springer, Berlin, Heidelberg, 2007 (<http://wissrech.ins.uni-bonn.de/research/projects/tremolo/>).
17. X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson, D.J. Larson, N. Tabat, A. Cerezo, A.K. Petford-Long, G.D.W. Smith, P.H. Clifton, R.L. Martens, T.F. Kelly, Acta Mater. 49 (2001) 4005.
18. ASM Handbook, Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials, V. 2, ASM International, 1992.
19. N. Sasaki, K. Kobayashi, M. Tsukada, Phys. Rev. B 54 (1996) 2138.
20. H. Berendsen, J. Postma, W. van Gunsteren, A. Di Nola, J. Haak, J.Chem. Phys. 81 (1984) 3684.
21. Проданов Н. SurfaceGrowth: модель, структура кода, інструкція користувачу. – 2010. – с. 12-21.

22. Хоменко А.В., Численное исследование облучения пластинки графена пучком атомов углерода / Хоменко А., Проданов Н., Щербак.Ю. // Журнал нано- та електронної фізики. – 2009. – Т. 1, № 2.
23. Tian, W.; Liu, X.; Yu, W. *Appl. Sci.* 2018, 8, 1118–1138. doi:10.3390/app8071118
24. Vasilopoulou, M.; Palilis, L. C.; Georgiadou, D. G.; Douvas, A. M.; Argitis, P.; Kennou, S.; Sygellou, L.; Papadimitropoulos, G.; Kostis, I.; Stathopoulos, N. A.; Davazoglou, D. *Adv. Funct. Mater.* 2011, 21, 1489–1497. doi:10.1002/adfm.201002171
25. Li, Q.; Liu, W.; Cao, G.; Li, X.; Wang, X. *Appl. Phys. Lett.* 2016, 108, 221604–221607. doi:10.1063/1.4952619
26. Yin, P. T.; Shah, S.; Chhowalla, M.; Lee, K.-B. *Chem. Rev.* 2015, 115, 2483–2531. doi:10.1021/cr500537t
27. Mirzaei, A.; Kim, S. S.; Kim, H. W. *J. Hazard. Mater.* 2018, 357, 314–331. doi:10.1016/j.jhazmat.2018.06.015
28. Ghosal, S.; Bhattacharyya, P. *CSI Trans. ICT* 2020, 8, 117–122. doi:10.1007/s40012-020-00299-z
29. Котляр Н. Моделювання формування металевих наночастинок на поверхні срібла: матеріали міжнар. наук.-техн. конф., м. Суми, 19-23 квіт. 2021 р. Суми, 2021. С. 186–187 .

## ДОДАТОК А

Програмна реалізація функцій, яка відповідає за нумерацію атомів у матеріалі підкладки та їх координати

```

__global__ void InitGrapheneCoordsK(float4 *pos)
{
//Це нумерація атомів (повернена на 90 проти годинникової стрілки).
//      6 X   |   7 X   |
//      ___\|5_/___\| 0
//      / |   \ / |
//      4X   |   2 X   |
//      ___\|3_/___\|1      // Осі: у справа наліво, x знизу вгору на цьому
малюнку.

    real dx, dy, x, y;
    int   n, cx, cy;

//Знайти індекс атома
n = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x; // blockDim.x is assumed == 32

if( n < (dparams.nMol-dparams.nMolMe) )
{
    // Знайти 2D-індекс блоку в сітці блоків.
    cy = blockIdx.x / dparams.initUcell.x;
    cx = blockIdx.x - cy * dparams.initUcell.x;

    // Усі координати в блоці зміщуються на наступні величини.
    dx = cx*4.f; // Тут має бути * a = 1,42 ангстрем, але це = 1 в наших
одиницях.
    dy = cy*4.f;

    // Знайдіть індекс потоку в 2D-сітці потоків blockDim.x.

```

```
cy = threadIdx.x / 8.f; // Кожна клітина обробляє 8 атомів, є  
blockDim.x / 8 комірок.
```

```
cx = 0threadIdx.x - cy*8.f;
```

```
// Подивіться, який у нас атом.
```

```
switch(cx) {
```

```
case 0:
```

```
    x = 1.f;
```

```
    y = 0.f;
```

```
    break;
```

```
case 1:
```

```
    x = 0.f;
```

```
    y = 0.f;
```

```
    break;
```

```
case 2:
```

```
    x = 0.5f;
```

```
    y = 0.5f;
```

```
    break;
```

```
case 3:
```

```
    x = 0.f;
```

```
    y = 1.f;
```

```
    break;
```

```
case 4:
```

```
    x = 0.5f;
```

```
    y = 1.5f;
```

```
    break;
```

```
case 5:
```

```
    x = 1.f;
```

```
    y = 1.f;
```

```
    break;
```

```
case 6:
```

```
x = 1.5f;
y = 1.5f;
break;
```

case 7:

```
x = 1.5f;
y = 0.5f;
break;
}
```

// Додатковий зсув залежно від номера їх сітки завдяки різьбі.

```
if( cy == 1 )
    dx += 4.f;
else if( cy == 2 )
    dy += 4.f;
else if( cy == 3 ) {
dx += 4.f;
dy += 4.f;
}
```

// Зсуньте початок координат у центр шару.

```
dx = dx + 0.5f*(1.f - dparams.region.x);
dy = dy + 0.5f*(1.f - dparams.region.y);
```

// Збереження координат pos [n + dparams.nMolMe] .x = x + dx;

```
pos[n + dparams.nMolMe].x = x + dx; // !! Зміщення
```

індексів за рахунок металу.

```
pos[n + dparams.nMolMe].y = y + dy;
pos[n + dparams.nMolMe].z = dparams.z_0;
```