

УДК 538.975,530.182,621.89.012

УКПП

№ держреєстрації 0118U003584

Інв. №

Міністерство освіти і науки України
Сумський державний університет (СумДУ)
40007, м. Суми, вул. Р.-Корсакова, 2: тел. (0542) 33-41-08,
Факс (0542) 33-40-49

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з наукової роботи
д-р фіз.-мат. наук, проф.

_____ А.М. Черноус

**ЗВІТ
ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ
АТОМІСТИЧНЕ ТА СТАТИСТИЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ
ФОРМУВАННЯ ТА ТЕРТЯ НАНОРОЗМІРНИХ СИСТЕМ**

(проміжний)

Науковий керівник НДР

д-р фіз.-мат. наук, проф.

О.В. Хоменко

Суми - 2019

Рукопис закінчено 25 грудня 2019 р.

Результати роботи розглянуто на засіданні наукової ради СумДУ, протокол
№ 5 від 26.12.2019

СПИСОК АВТОРІВ

Керівник НДР, головний науковий співробітник, д-р фіз.-мат. наук, професор (25.12.2019)	О. В. Хоменко (розд. 1, 2, 3)
Відповідальний виконавець, провідний науковий співробітник, канд. фіз.-мат. наук, доцент (25.12.2019)	О. В. Ющенко (розд. 1, 2, 3)
Виконавці: лаборант, аспірант (25.12.2019)	Д. В. Бойко (розд. 2)
Лаборант, аспірант (25.12.2019)	М. В. Захаров (розд. 2, 3)
Лаборант, аспірант (25.12.2019)	Д. М. Крекшин (розд. 3)
Лаборант, канд. техн. наук, старший викладач (25.12.2019)	В. В. Фалько (розд. 3)
Лаборант, студент (25.12.2019)	Д. Т. Логвиненко (розд. 2)
Лаборант, студент (25.12.2019)	О. Ю. Шикура (розд. 3)
Лаборант, студент (25.12.2019)	Д. С. Лаврик (розд. 3)

РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 36 с., 14 рисунків, 29 джерел.

НАНОЧАСТИНКИ, САМООРГАНІЗАЦІЯ, АНІЗОТРОПІЯ, ФЛУКТУАЦІЇ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, ТРИБОЛОГІЯ, МІЖАТОМНІ ПОТЕНЦІАЛИ ВЗАЄМОДІЇ.

Об'єкт дослідження – структурні та трибологічні процеси у нанорозмірних системах, самоорганізація, кінетика, тертя під час руху металевих наночастинок.

Мета роботи – встановлення закономірностей структурних, трибологічних та кінетичних явищ на атомарному та макроскопічному рівнях при русі наночастинок, зокрема, які адсорбовані на поверхні графену.

Методи дослідження – чисельний метод Верле, метод молекулярної динаміки.

Досліджено збільшення сили тертя із зростанням площі контакту. Встановлено, що сила тертя стає максимальною при характерній температурі, яка збільшується зі збільшенням швидкості ковзання. Виявленні області локального впорядкування атомів на нижній поверхні металевих наночастинок.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	5
1 МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ФОРМУВАННЯ ТА РУХУ НАНОЧАСТИНОК.....	7
1.1 Основні принципи молекулярної динаміки	7
1.2 Міжатомні потенціали взаємодії.....	9
1.3 Безрозмірні одиниці	13
1.4 Контроль температури	13
2 АТОМІСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАЛЕЖНОСТІ СИЛИ ТЕРТЯ ВІД ПЛОЩІ КОНТАКТУ Al, Pd НАНОЧАСТИНОК	16
3 ФРИКЦІЙНА АНІЗОТРОПІЯ Al, Pd, Pt НАНОЧАСТИНОК	25
ВИСНОВКИ.....	33
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ.....	34

ВСТУП

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

Експерименти з вивчення тертя графіту на нанорівні відкрили ряд цікавих явищ [4]. Відзначимо лише дослід, який має безпосереднє значення для розрахунків: в роботі [5] досліджується тертя металевих (Sb) наночастинок (НЧ), утворених на поверхні високоорієнтованого піролітичного графіту (ВОПГ).

Відсутність в літературі достовірного пояснення фрикційної дуальності вказує на необхідність теоретичного дослідження тертя металевих наночастинок по поверхні графіту. Складність і багатофакторність нанотрибологічних завдань робить практично неможливою побудову достовірної аналітичної теорії явищ, які розглядаються. Тому комп'ютерне моделювання, зокрема метод молекулярної динаміки (МД), є незамінним інструментом теоретичного вивчення тертя і зносу на атомарному рівні [2, 6].

Останнє десятиліття в області нанотрибології відбувається стрімке накопичення експериментальних досліджень, що обумовлено розвитком скануючого електронного мікроскопа (SEM), скануючого тунельного мікроскопа (STM) і т.д. Дослідники сходяться на думці, що трибологічні властивості нанорозмірних систем не підпорядковуються відомим макроскопічним законам, а тому їх теоретичний аналіз потребує подальшого розвитку [1-6]. Зокрема, атомістичне моделювання тертя, у випадку металевих НЧ на графітовій поверхні, знаходиться на початковому етапі.

На сьогоднішній день є актуальним дослідження нанорозмірних систем і, зокрема, їх трибологічних властивостей. Це пов'язано з тим, що реальна поверхня має неоднорідну структуру, яку необхідно враховувати, що досягається за допомогою дослідження тертя НЧ. Основною слабкістю феноменологічних моделей є те, що для їх застосування необхідні припущення, що можуть призвести до некоректних результатів. Крім того, феноменологічний підхід, як правило, дає лише якісний опис нанотрибологічних процесів. Комп'ютерне моделювання методом МД є альтернативним методом для теоретичного дослідження процесів тертя на атомарному рівні, оскільки подає компроміс між аналітичними моделями й експериментальними умовами і дуже широко використовується для розв'язання нанотрибологічних задач. Зважаючи на те, що в експерименті наноб'єктам часто неможливо нав'язати потрібну поведінку, особливої актуальності в наш час набувають теоретичні методи аналізу, що дозволяють прогнозувати еволюцію властивостей НЧ, колективні процеси їх самоорганізації в наноструктури, режими руху НЧ, їх взаємодію з навколишнім середовищем і т. і.

1 МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ФОРМУВАННЯ ТА РУХУ НАНОЧАСТИНОК

1.1 Основні принципи молекулярної динаміки

Сутність атомістичного комп'ютерного моделювання методом класичної молекулярної динаміки досить проста: маючи набір початкових умов і спосіб опису міжатомних сил, необхідно проінтегрувати ньютонівські класичні рівняння руху одним з декількох стандартних методів. Рівняння Ньютона, що дають прискорення кожного атома у відповідь на дію прикладеної до нього сили, мають вид:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}, \quad (1.1)$$

$$-\nabla V = m(\partial^2 \mathbf{r} / \partial t^2), \quad (1.2)$$

де \mathbf{F} - сила, що діє на кожен атом, m - маса атома, \mathbf{a} - прискорення атома, V - потенціальна енергія атома, \mathbf{r} - просторова координата атома і t - час. На початку моделювання обчислюються сили, що діють на кожен атом. Потім атоми рухаються малий проміжок часу Δt (званий часовим кроком) у відповідь на дію додаткових сил, що супроводжується зміною атомних координат, швидкостей і прискорень. Описаний процес повторюється для визначеного числа часових кроків, обраного користувачем.

Перевага цього методу в тому, що він дає можливість стежити за індивідуальним рухом всіх атомів в режимі реального часу. Недоліком є те, що часові масштаби дуже обмежені (від піко- до наносекунд). До того ж розміри системи, які можна розглядати на даний момент, обмежені порядком в $10^6 - 10^8$ атомів, який все ще далекий від реальних систем, що містять 10^{23} атомів і більше. Отже, хоча МД моделювання використовуються для вивчення тертя на атомарному рівні і виконує достатньо роботи для забезпечення розуміння цього процесу, проте цей метод все ще обмежений просторовими і часовими масштабами, які значно менші більшості експериментальних значень. Інтенсивний розвиток паралельних обчислень, зокрема з використанням графічних процесорів (GPU), може значно послабити зазначені вище обмеження.

Для атомістичного моделювання матеріалу необхідні математичні вирази його потенціальної енергії V . В роботі використовуються емпіричні потенціали, в яких передбачається, що потенціальна енергія атомів може бути представлена як функція тільки їх відносних положень. Внаслідок відсутності далекодіючих внесків для багатьох потенціалів можна опустити розгляд віддалених сусідів для обраного атома, і часто вводиться радіус відсічення. Атоми, відстань до яких менша r_c , дають внесок в енергію і силу для атома, що розглядається, а решта атомів – не дає. Однак простий перебір всіх атомів і порівняння відстані до них з r_c - так званий метод всіх пар (ліве зображення на рисунку 1.1) – приводить до того, що кількість необхідних обчислень зростає пропорційно N^2 , де N - число атомів. Це робить метод всіх пар непридатним для великих систем.

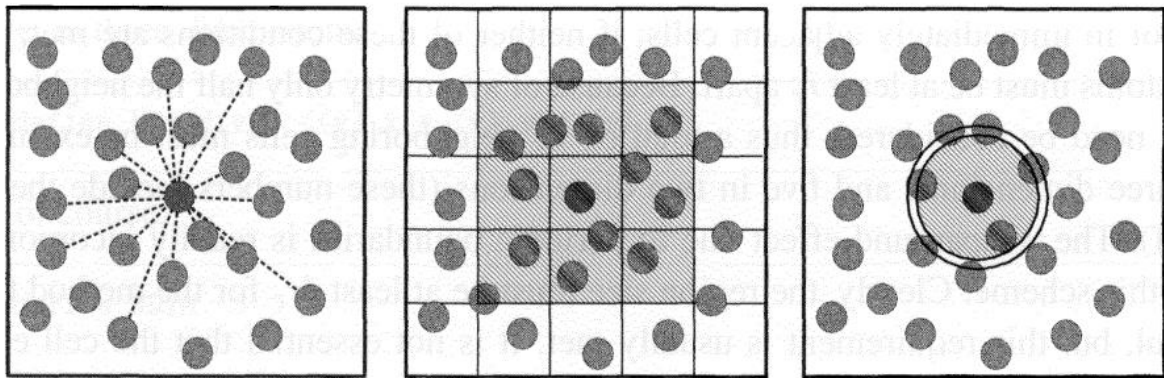


Рисунок 1.1 – Схематичне зображення підходів до розрахунку взаємодій: метод всіх пар, поділ на комірки, список сусідів [7].

Розроблені інші методики, зокрема метод комірок і використання списку сусідів (відповідно центральне і праве зображення на рисунку 1.1), що дають лінійне зростання обчислювальних витрат N .

В першому методі область моделювання розбивається на комірки розміром не менше r_c . Тоді, якщо атоми потрапляють в комірку виходячи з їх поточних координат, то очевидно, що взаємодії можливі тільки між атомами, що знаходяться або в одній комірці, або в безпосередньо сусідніх. Якщо жодна з цих

умов не задовольняється, то відстань між атомами дорівнює як мінімум r_c , і такі атоми не дають внеску в силу і енергію, і їх можна не розглядати.

В методі списку сусідів враховується те, що тільки мала частина атомів, яка перебирається в методі комірок, лежить всередині радіусу взаємодії. Тому спочатку, використовуючи метод комірок, будується список пар сусідів, не тільки, що дають внесок в силу і енергію, але також і деякого числа атомів, що лежать безпосередньо поза радіусом взаємодії. Для цього радіус відсічення r_c при порівнянні міжатомних відстаней замінюється на:

$$r_n = r_c + \Delta r. \quad (1.3)$$

А далі, ґрунтуючись на тому, що мікроскопічне середовище змінюється повільно, даний список використовується протягом декількох послідовних часових кроків. Список сусідів залишається придатним протягом зазвичай 10 - 20 часових кроків, навіть для відносно невеликих Δr . Той факт, що список містить пари атомів, що лежать поза радіусом взаємодії, гарантує, що протягом цієї послідовності часових кроків не можуть з'явитися нові взаємодіючі пари, які не занесені до списку сусідів. Один з можливих критеріїв оновлення списку може бути створений на спостереженні за максимальною швидкістю атомів на кожному кроці, чекаючи, поки не виконається умова:

$$\sum_{steps}(\max_i |\mathbf{v}_i|) > \frac{\Delta r}{2\Delta t}, \quad (1.4)$$

після чого проводиться оновлення списку. Важливо відзначити, що оскільки список оновлюється не кожен крок, то зазвичай використання списку сусідів дає приріст продуктивності в кілька разів в порівнянні з методом комірок.

1.2 Міжатомні потенціали взаємодії

Як зазначалося вище, в класичній МД ключову роль для моделювання того чи іншого матеріалу грає потенціальна енергія взаємодії атомів V . Для металів в роботі використовується емпіричний багаточастинковий потенціал, заснований на методі зануреного атома (ЕАМ) і реалізований в роботі [8]. Він розроблений для

моделювання сплавів і повністю виражений через аналітичні функції на відміну від перших версій ЕАМ, де для функції занурення використовувалися кубічні сплайни [9].

У ЕАМ потенціальна енергія V кристала може бути виражена таким чином [8]:

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

де ϕ_{ij} представляє парну енергію між атомами i і j , розділеними відстанню r_{ij} , а F_i означає енергію занурення, необхідну, щоб помістити атом i в локальну позицію з електронної густиною ρ_i . Величина ρ_i розраховується наступним чином:

$$\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_i(r_{ij}), \quad (1.6)$$

де $f_i(r_{ij})$ - електронна густина в місці розташування атома i , що повстає від атома j на відстані r_{ij} .

Узагальнений парний потенціал має вид:

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

де r_e - рівноважна відстань між найближчими сусідами, A і B , α , β - підгоночні параметри, κ , λ - параметри для відсічення.

Функція електронної густини має вид:

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

Щоб функція занурення F працювала для широкого діапазону значень електронної густини, використовуються три рівняння для кожного з наступних інтервалів: $\rho < \rho_n$, $\rho_n \leq \rho < \rho_o$, $\rho_o \leq \rho$. Використовуючи $\rho_n = 0.85\rho_e$, де ρ_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 гладкої зміни енергії занурення потрібні рівняння, що дають однакові значення функції і її похідної на границях інтервалів. Ці рівняння мають вид:

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

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

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

Значення параметрів, що входять в усі виписані рівняння, для 16 металів можна знайти в роботі [8]. Величини густини і мас металів в роботі взяті з книги [10], де також можна знайти інші характеристики металів. Сила, що діє на металевий атом k з боку інших атомів металу, дається виразом:

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

де N_m - повне число атомів металу, $\hat{\mathbf{r}}_{kj}$ - одиничний вектор, спрямований від атома j до атому k . Вирази для похідних в (1.12) мають вид:

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

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

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

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

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

$$\frac{dF}{d\rho} = -\frac{F_e \eta}{\rho_e} \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\eta-1} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^\eta, \rho_o \leq \rho. \quad (1.18)$$

Оскільки вираз для потенціальної енергії металу і сили, що діє на атом металу, складаються з двох частин - парної, що залежить від відносного положення атомів, і ЕАМ частини, що залежить від електронної густини всіх атомів, відмінних від даного, то розрахунок $V_{ЕАМ}$ 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 [11] такої форми:

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

Сумування проводиться за найближчими сусідами, їх парами і триплетами, а значення параметрів можна знайти в [11]. Тут тільки впишемо вираз для сили, що діє на атом i вуглецю з боку інших атомів вуглецю в шарі:

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

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 сусіда в шарі графена, 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 ε і σ обрані як в роботі [12]. Відстань відсічення $r_c = 2.5\sigma$. Відзначимо, що для ЕАМ потенціалу використовується відстань відсічення $r_c = 1.45a$, a - постійна решітки металу.

Для вказаних вище потенціалів використовуються такі значення параметрів: для алюмінію - $r_e = 2.8862$, $f_e = 1.3923$, $\rho_e = 20.2265$, $\alpha = 6.9424$, $\beta = 3.7026$, $A =$

0.2515, $B = 0.3134$, $\kappa = 0.3951$, $\lambda = 0.7903$, $F_e = -2.8294$; для паладію - $r_e = 2.7509$, $f_e = 1.5954$, $\rho_e = 22.7706$, $\alpha = 7.605$, $\beta = 4.056$, $A = 0.3854$, $B = 0.545$, $\kappa = 0.4256$, $\lambda = 0.8512$, $F_e = -2.36260$ [8].

1.3 Безрозмірні одиниці

У роботі використовуються наступні одиниці виміру:

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

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

час $t_0 = 0.2$ пс;

енергія $\varepsilon_0 = \frac{m_0 a^2}{t_0^2} = 6.275049 \cdot 10^{-2}$ еВ;

1 К безрозмірної температури дорівнює 0.001373;

1 нН безрозмірної сили дорівнює 14.123984.

1.4 Контроль температури

Звичайна МД відрізняється від більшості експериментальних досліджень тим, що в моделюванні фіксованими є повна енергія E і об'єм V , а не температура T і тиск P . У термінах статистичної механіки звичайна МД дає середні за мікροканонічним ансамблем NVE (N - кількість молекул), в той час як експерименти з постійною температурою відповідають канонічному ансамблю NVT .

Для проведення моделювань, близьких до експериментів, необхідно використовувати канонічний ансамбль, і, отже, підтримувати постійну температуру. Оскільки зовнішніми силами над системою виконується робота, то підтримка постійної температури означає вибір способу відведення надлишку тепла або з'єднання системи з термостатом. У роботі використовується термостат Берендсена [13], який хоча і не дає траєкторії істинного канонічного ансамблю, однак простий в реалізації.

Термостат Берендсена передбачає, що температура T системи експоненціально наближається до необхідної температури T_0 з часом релаксації τ_T :

$$\frac{dT}{dt} = \frac{T_0 - T}{\tau_T}. \quad (1.22)$$

У дискретній формі (1.22) має вид:

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{h} = \frac{T^n}{\tau_T} \left(\frac{T_0}{T^n} - 1 \right), \quad (1.23)$$

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

$$T = \frac{2}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2}, \quad (1.24)$$

тут N - число частинок, k_B - стала Больцмана, m_i і v_i - відповідно маса і швидкість частинки. Позначаючи швидкість частинки на поточному та на наступному кроці через \mathbf{v}_i^n і \mathbf{v}_i^{n+1} , і підставляючи рівняння (1.24) в (1.23), отримуємо (припускаючи частинки одного сорту):

$$\frac{\sum_{i=1}^N (\mathbf{v}_i^{n+1})^2 - \sum_{i=1}^N (\mathbf{v}_i^n)^2}{h} = \sum_{i=1}^N \frac{(\mathbf{v}_i^n)^2}{\tau_T} \left(\frac{T_0}{T^n} - 1 \right), \quad (1.25)$$

$$(\mathbf{v}_i^{n+1})^2 = (\mathbf{v}_i^n)^2 \left[1 + \frac{h}{\tau_T} \left(\frac{T_0}{T^n} - 1 \right) \right]. \quad (1.26)$$

Таким чином, реалізація термостата Берендсена зводиться до перемасштабування швидкостей, тобто $v_i^{n+1} = \beta v_i^n$. Однак множник β не є постійним, а залежить від поточного значення температури:

$$\beta = \sqrt{1 + \gamma \left(\frac{T_0}{T^n} - 1 \right)}, \quad (1.27)$$

де $\gamma = \frac{h}{\tau_T} \in [0; 1]$. Якщо поточна температура T^n вище необхідної T_0 , то $\beta < 1$ і v_i^{n+1} зменшується. А якщо $T^n < T_0$, то $\beta > 1$ і v_i^{n+1} збільшується. Відзначимо, що γ характеризує швидкість дисипації тепла. Чим ближче γ до 1, тобто чим менше τ_T , тим швидше тепло дисипується і, отже, сильніше зв'язок системи з тепловою ванною. У роботі вибрано значення $\gamma = 0.005$, відповідне відносно слабкому зв'язку з термостатом.

Варто відзначити, що масштабування швидкостей може вплинути на розподіл енергії в системі. Щоб зменшити цей вплив у роботі використовується реалізація термостата Берендсена, описана в роботі [13]. Рівняння руху інтегруються методом Верле, описаним в [7].

2 АТОМІСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАЛЕЖНОСТІ СИЛИ ТЕРТЯ ВІД ПЛОЩІ КОНТАКТУ Al, Pd НАНОЧАСТИНОК

Було проведено розрахунки МД для ковзання алюмінієвих і паладієвих наночастинок на графені. Розміри x, y графену складають від 30×8 нм до 30×25 нм. Розміри L_x, L_y, L_z наночастинок металу вздовж осей x, y, z визначаються як різниця між координатами атомів металів з максимальними та мінімальними значеннями вздовж осей x, y, z . Повна кількість атомів в системі складає від 37 768 атомів у випадку алюмінієвих наночастинок до 54 768 атомів у випадку паладієвих наночастинок. Початкова температура системи при моделюванні задається від 50 К до 297 К. Тривалість моделювань складає від 300 000 до 400 000 часових кроків.

На початку моделювання атоми металів розміщуються у вершинах гранецентрованої кубічної решітки, розташованої над графеном, початкові швидкості атомів дорівнюють нулю. Далі атоми металу перебудовуються в конфігурацію, що відповідає мінімуму потенціальної енергії, при цьому відбувається нагрівання системи внаслідок виділення енергії зв'язку. Якщо взаємодія метал-графен набагато слабша, ніж метал-метал, то конфігурація з мінімальною енергією має форму шару. Для відводу надлишку тепла застосовується термостат Берендсена.

Після вимкнення термостату прикладена сила діє на утворену наночастинку. В маніпуляційних експериментах з атомно-силовим мікроскопом наночастинка завжди штовхається, але не тягнеться. Для імітації штовхання в нашій системі прикладена сила діє вздовж зигзагоподібного краю графена (що збігається з y -напрямком) для всіх атомів металу із значеннями координат, що менше, ніж координати центра мас наночастинок. Максимальна прикладена сила для наночастинок алюмінію та паладію становить 40 нН і 18.14 нН відповідно. Протягом всього етапу ковзання наночастинок рухаються з постійним прискоренням. Максимальна швидкість алюмінієвих і паладієвих наночастинок, що складаються з 20 000 атомів, дорівнює 9.83 м/с та 3.31 м/с відповідно.

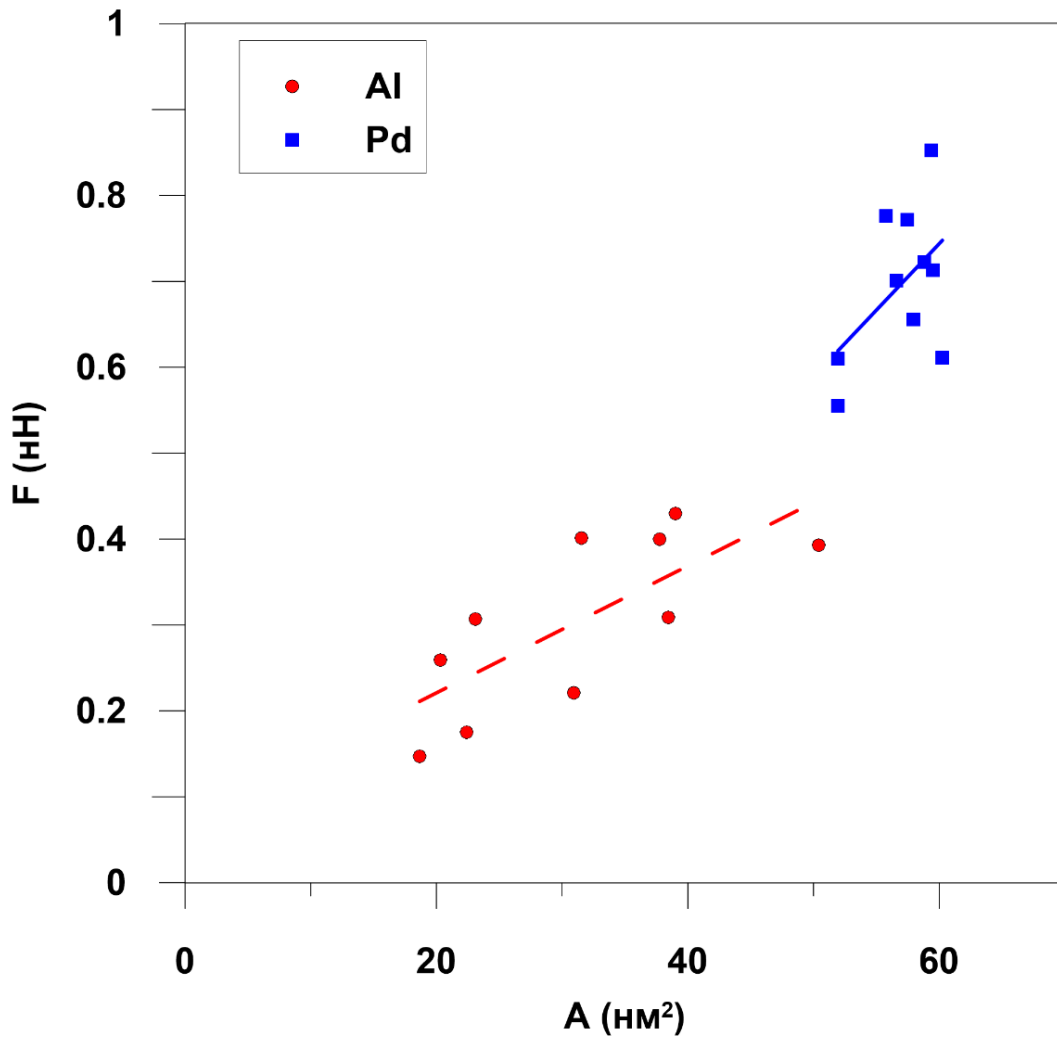


Рисунок 2.1 – Залежність сили тертя алюмінієвих і паладієвих наночастинок від площі контакту при температурі 300 К.

Залежність сили тертя від площі контакту була розрахована для наночастинок алюмінію (утворених з 5-20 тисяч атомів) і для наночастинок паладію (утворених з 13-22 тисяч атомів). Сила тертя усереднюється протягом загального періоду часу моделювання, виключаючи етап формування наночастинок. Рисунок 2.1 показує, що сила тертя збільшується приблизно лінійно зі зростанням площі контакту. Кут нахилу апроксимації напруження зсуву для алюмінієвих наночастинок складає $tg \gamma = 0.007$, для паладієвих - $tg \gamma = 0.015$. Сума квадратів помилок прогнозу для алюмінію складає $RSS = 0.0410497$, для паладію - $RSS = 0.0547083$. Коефіцієнт детермінації для алюмінію дорівнює $R^2 = 0.556983$ для паладію - $R^2 = 0.258488$.

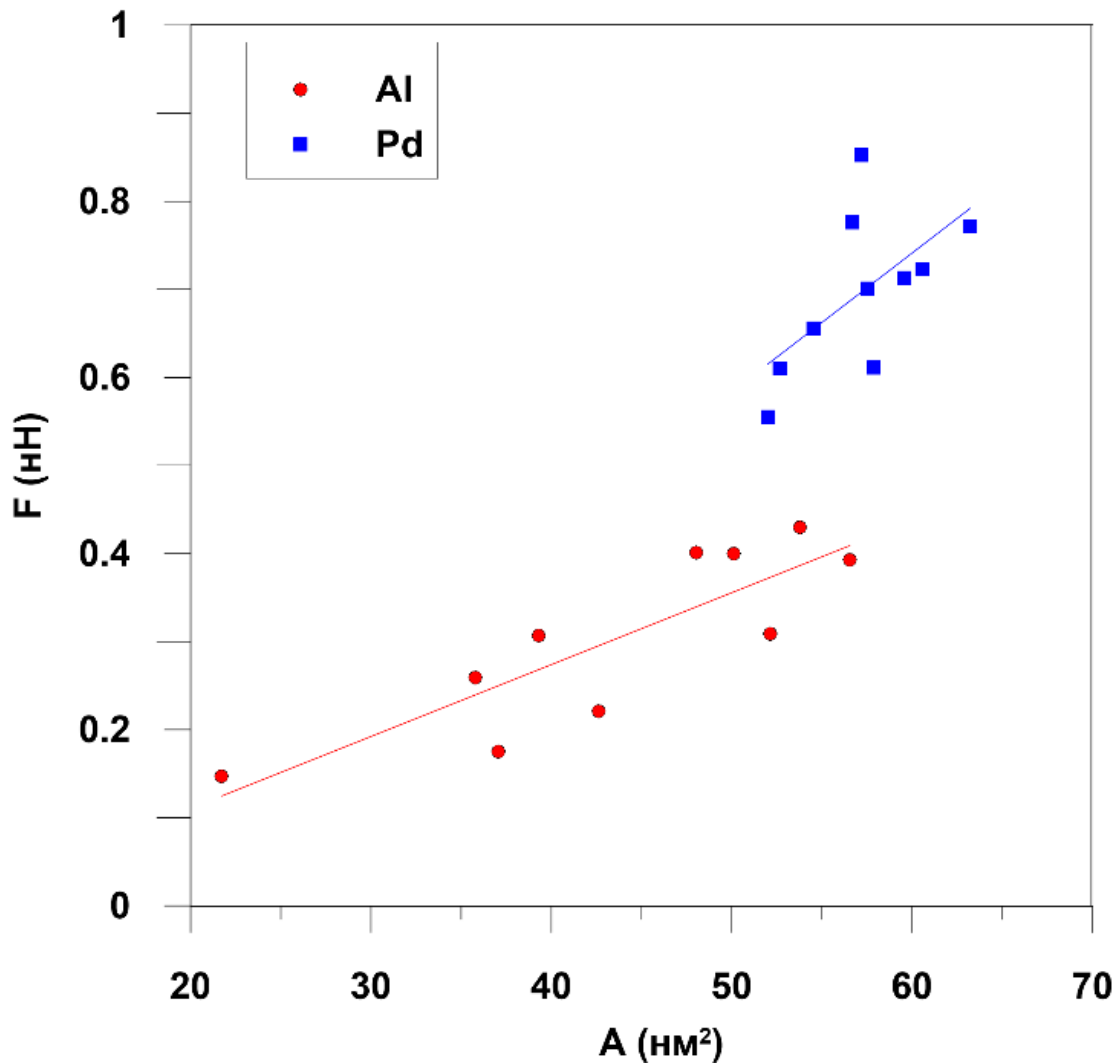


Рисунок 2.2 – Залежність сили тертя алюмінієвих і паладієвих наночастинок від площі контакту розрахованої за еліпсом.

В порівнянні з роботою [14] (рисунок 2.2) площа контакту розраховується у новий спосіб. Площа контакту A визначається наступним чином: $A = n \cdot \pi \cdot R^2$, де n - кількість атомів металу "у контакті", для яких відстань між атомами вуглецю та металу менша, ніж 0,5 нм, R – радіус атома металу. Майже у всіх випадках, площа контакту розрахована за новим методом менша ніж площа розрахована по еліпсу, а в деяких випадках алюмінієвої НЧ площа набагато менша, майже в два рази. У нашому підході ми враховуємо, що НЧ не ідеально гладка і не має форму еліпса.

Площа контакту повинна бути менша площі еліпса навіть якщо НЧ і еліпс збігаються візуально. На рисунку 2.7 (А, В) можна побачити, що НЧ по краях

піднята і може ніяк не взаємодіяти з підкладкою, якщо рахувати площу по еліпсу в площині XU ця обставина ніяк не враховується. В новому підході площа розраховується у просторі XYZ і вищезазначені зазори зменшують площу.

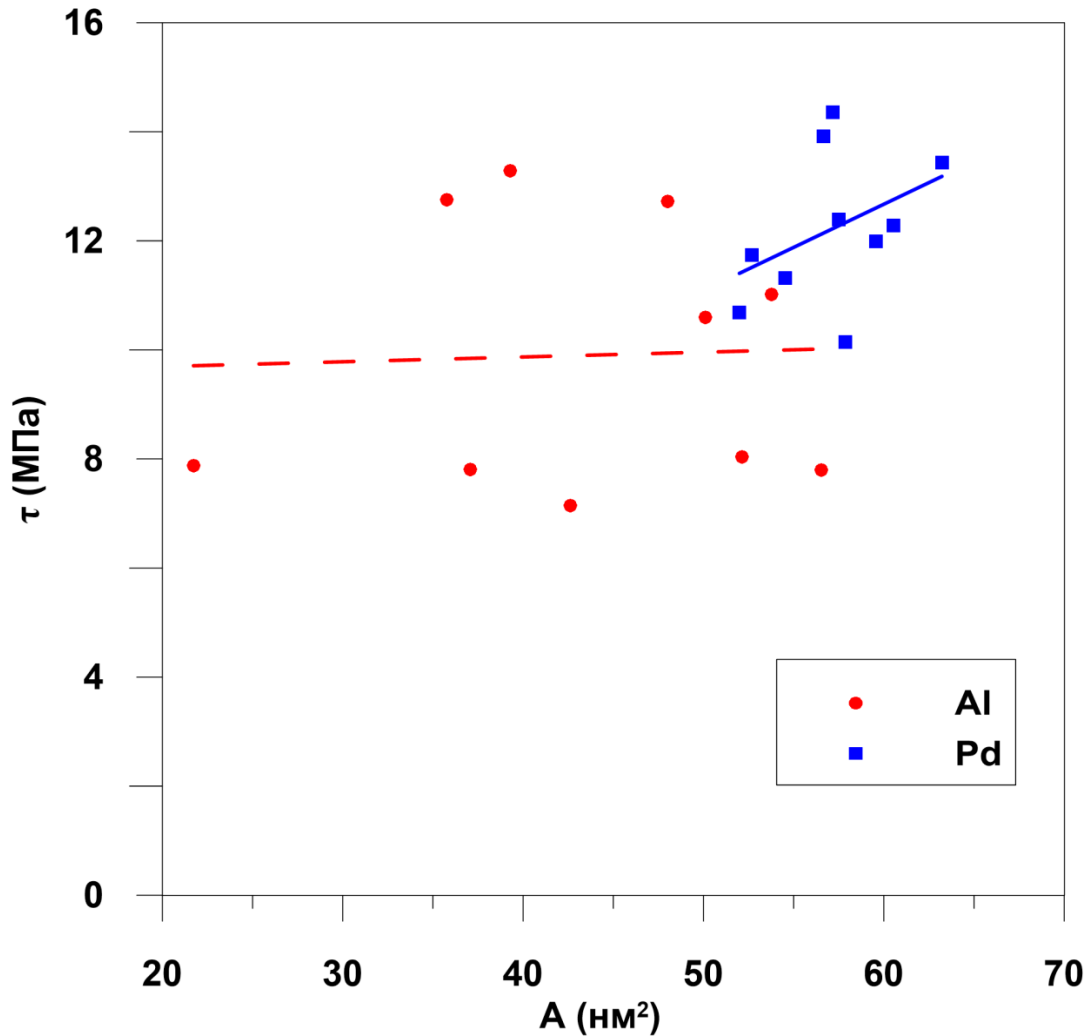


Рисунок 2.3 – Залежність напруження зсуву алюмінієвих і паладієвих наночастинок від площі контакту.

Кут нахилу апроксимації напруження зсуву для алюмінієвих наночастинок складає $tg \gamma = 0.008$, для паладієвих - $tg \gamma = 0.158$. Сума квадратів помилок прогнозу для алюмінію складає $RSS = 53.1811$, для паладію - $RSS = 13.9859$. Коефіцієнт детермінації для алюмінію дорівнює $R^2 = 0.00146388$, для паладію - $R^2 = 0.163058$.

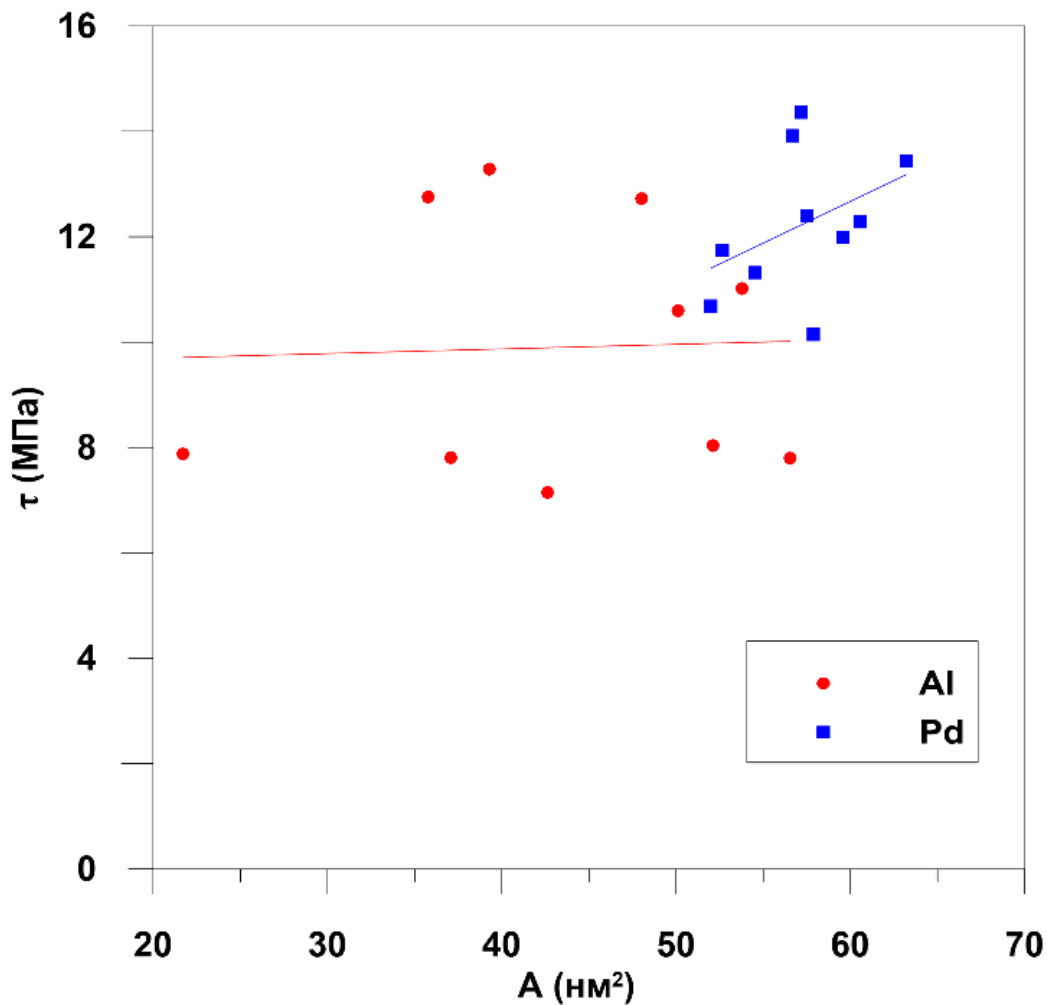


Рисунок 2.4 – Залежність напруження зсуву алюмінієвих і паладієвих наночастинок від площі контакту розрахованої за еліпсом.

На рисунках 2.3, 2.4 зображено напруження зсуву τ як функцію, залежну від площі контакту. Середнє напруження зсуву $\tau \approx 9.9$ МПа для алюмінієвих наночастинок та $\tau \approx 12.2$ МПа для НЧ паладію. В експериментах [12] напруження зсуву зменшується лінійно з площею контакту, тоді як в даній роботі було виявлено, що τ майже не залежить від цього. Це може бути результатом різних порядків розмірів площі контакту, а саме $10^4 - 10^5$ нм² - в експериментах проти ~ 10 нм² в наших розрахунках, а також через різні потенціали взаємодії та різні часові тривалості експериментів.

Сила тертя залежна від температури в обох випадках спершу збільшується, а потім досягає максимуму при $T \approx 170$ К. Необхідно звернути увагу, що частинки паладію мають більшу силу тертя, навіть якщо площа контакту з графеном

однакова. Це відбувається завдяки різним константам кристалічних решіток металів та розташуванню атомів у наночастинках алюмінію та паладію.

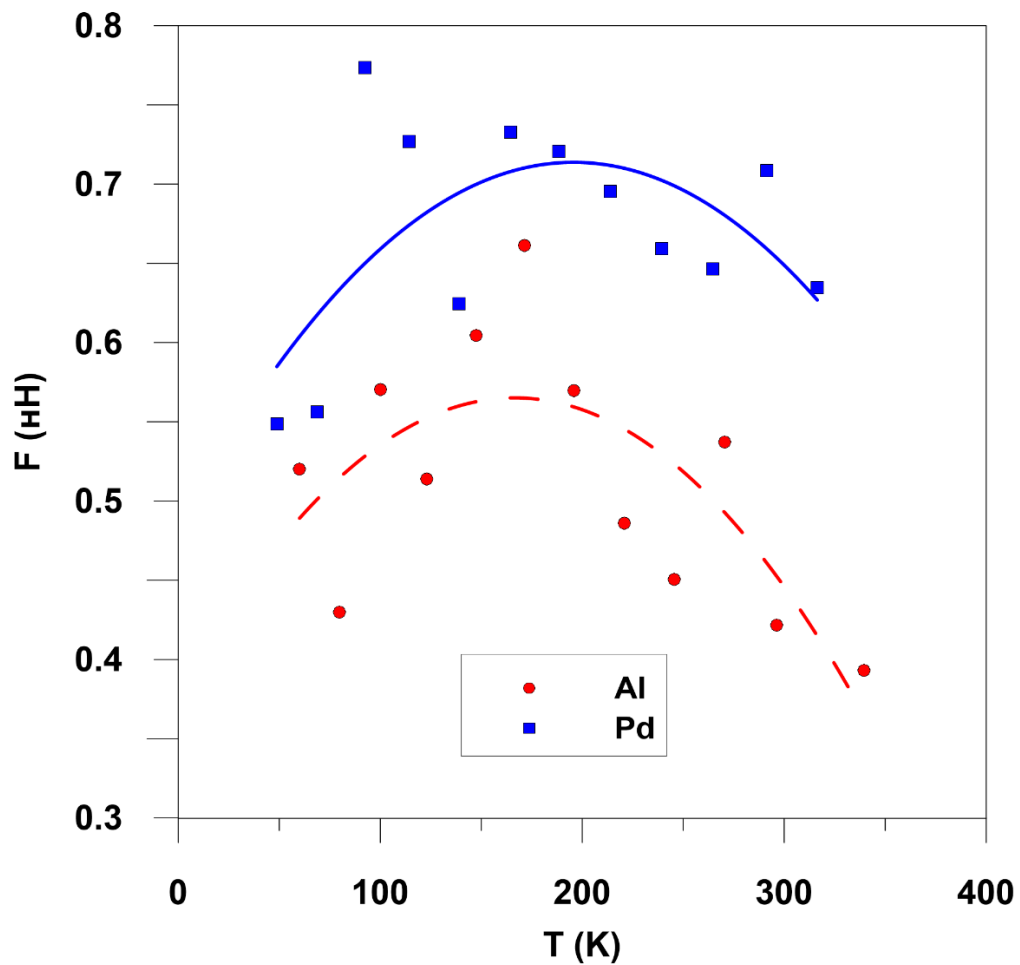


Рисунок 2.5 – Залежність сили тертя алюмінієвих і паладієвих наночастинок від температури.

Подібна немонотонна поведінка сили тертя спостерігається для гексадеканетіолу самоорганізованих моношарів на золотій підкладці [15] та NaCl (001) у надвисокому вакуумі [16]. Температурна залежність сили тертя, показана на рисунку 2.5, може бути пояснена наступним чином: при високій температурі сила тертя зменшується із зростанням температури через термічні флуктуації, допомагаючи рухатись наночастинкам над енергетичними бар'єрами, які відбуваються під час ковзання. Це визначається як термічно-активовані, напружено-допоміжні процеси. При низькій температурі сила тертя може

зменшуватися зі зменшенням температури. Це пов'язано з тим, що теплові збудження (термічно збуджені флуктуації) необхідні для того, щоб частинка "знайшла" велику конфігурацію енергії зв'язку вздовж шляху ковзання. В результаті при низькій температурі контакт стає більше несумірним, що приводить до потенціалу взаємодії, який демонструє меншу енергію взаємодії вздовж зсувного шляху, а також зниження тертя. Таким чином, очікується, що сила тертя стає максимальною при характерній температурі (яка збільшується зі збільшенням швидкості ковзання).

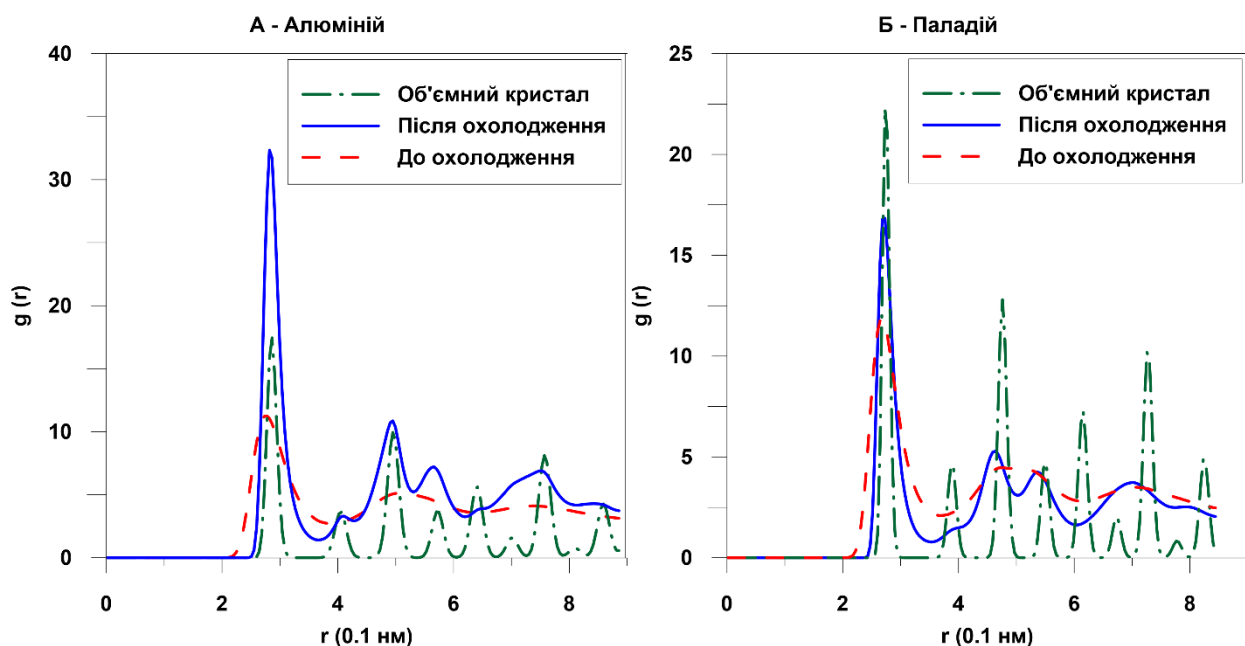


Рисунок 2.6 – Функція радіального розподілу алюмінієвих і паладієвих наночастинок із 20 000 атомів.

Дальній порядок атомів може привести до співрозмірності поверхонь і до пилоподібної формі залежностей сили тертя. Однак НЧ має невпорядковану структуру, що виражено в розмитих піках функції радіального розподілу (рисунок 2.6). Після охолодження відбувається деяке впорядкування, в результаті чого утворюється вищий перший пік функції радіального розподілу, який розташований на відстані найближчих сусідів в об'ємному стані (2,863 Å для Al та 2,729 Å для Pd). Тим не менш, піки набагато ширші, ніж для ідеального

об'ємного кристала, вказуючи, що НЧ аморфна або має полікристалічну структуру.

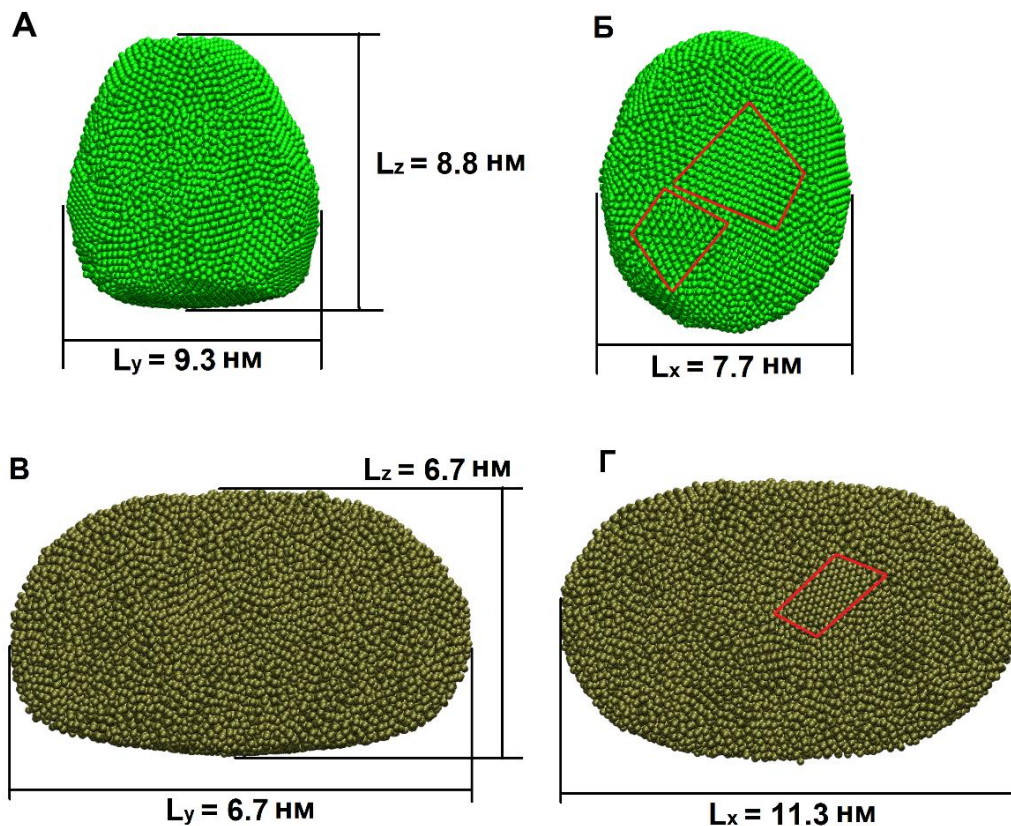


Рисунок 2.7 – Вид збоку (А, В) та знизу (Б, Г) алюмінієвих (А, Б) і паладієвих (В, Г) наночастинок із 20 000 атомів. Області локального впорядкування обмежені червоними контурами.

На межі графен-метал спостерігаються області локального впорядкування атомів обох типів металевих наночастинок, але більш виражені для Al (рисунок 2.7). Оскільки внутрішній зв'язок атомів в металевих кластерах є набагато сильнішим (особливо для кластера Pd), ніж потенціал взаємодії між атомами металу та атомами вуглецю графену, цілком імовірно, що упорядковані домени атомів металів не є співрозмірними з решіткою графену в будь-який момент під час ковзання. Тим не менш, різні орієнтації і положення металевих

частинок на графеновій поверхні будуть генерувати різні енергії взаємодії з поверхнею графена.

3 ФРИКЦІЙНА АНІЗОТРОПІЯ Al, Pd, Pt НАНОЧАСТИНОК

Система, яка моделювалась в даному розділі складається з ковзаючої по графеновій підкладці металевої наночастинки з 10 000 атомами, яка складається з 64×64 елементарних комірок, або $64 \times 64 \times 32 = 65536$ атомів вуглецю. Тривалість моделювань складає від 900 000 до 1 200 000 часових кроків. Для потенціалу Леннард-Джонса (ЛД) були прийняті параметри енергії $\varepsilon_0 = 0.24945$ еВ та параметр довжини $\sigma = 0.008738$ нм для представлення міжатомної енергії між атомами металу наночастинки та графеновою підкладкою. Потенціал ЛД еквівалентний для різних атомів металу. Параметри потенціалу були взяті з попереднього дослідження [12]. У роботі, вказаній вище, зазначено, що потенціал взаємодії при даних параметрах дуже добре описує амплітуду гофрування графіту атомно-силовим мікроскопом. Крім того, під час різних спроб моделювання було виявлено, що зміна параметрів енергії та радіусу не приводить якісних змін результатів. Це може бути пов'язано з тим, що діаметри атомів металів коливаються від 0.137 до 0.143 нм, вуглецю - 0.077 нм, а довжина радіусу відсікання дорівнює 0.622 нм.

Сила зсуву прикладається до кожного атома, розташованого у виділеному секторі на рисунку 3.1, вздовж напрямку, визначеного кутом, який відкладається від напрямку x . Сектори утворені і розділені діагональною лінією F_a , а кути $\alpha = \beta = 90^\circ$ містять приблизно однакову кількість атомів у кожній половині сектора, розташованого симетрично до напрямку від прикладеної сили F_a . Загальна результуюча сила тертя, що діє на наночастинку, визначається наступним чином:

$$F = \sqrt{F_x^2 + F_y^2}, \quad (3.1)$$

де F_x і F_y – компоненти сили тертя вздовж відповідної осі. Сила тертя вимірялась для наступних кутів: 15° , 22.5° , 30° , 37.5° , 45° , 52.5° , 60° , і 67.5° .

Типовий знімок системи молекулярної динаміки зроблений за допомогою програмного забезпечення Visual Molecular Dynamics показано на рисунку 3.2 [17]. Швидкість наночастинок змінюється у діапазоні від 1 до 9.8 м/с в x і y напрямках. Сила, що прикладається до наночастинки F_a змінюється від 2.4 до 2.9

нН. Розміри наночастинок: для алюмінію приблизно $6.0 \times 7.8 \times 6.4$ нм (для $L_x \times L_y \times L_z$ відповідно), для паладію $7.4 \times 6.3 \times 5.8$ нм, для платини $6.0 \times 6.9 \times 6.5$ нм. Типові часові залежності різні характеристики зображено на рисунку 3.3.

На рисунках 3.4 – 3.6 подано сили тертя для трьох значень температури під різними кутами прикладеної сили. Зауважимо, що протягом усього руху наночастинок прикладена сила F_a є постійною, як показано на рисунку 3.3. Наприклад, у випадку наночастинок паладія при 100 К і куті 45° $F_a = 2.51$ нН. У наших розрахунках методом МД, наночастинка прискорюється з моменту прикладення сили F_a . Порівняно з попереднім дослідженням наночастинок Ag та Ni [18], було збільшено розмір сектора застосування сили F_a з 90° до 180° для зменшення деформації наночастинок. Моделювання проводилось при $T = 100, 200$ та 300 К, але при 100 К середньоквадратичне відхилення коливань температури після моменту рівноваги завжди менше 0.5 К. Середнє значення сили тертя обчислено, з нашої точки зору, оптимальне число разів завдяки відхиленню в $T = 0.5$ К (статистична вибірка). Результати при $T = 100, 200$ та 300 К кількісно та якісно збігаються. При 100 К система є більш стійкою щодо коливань тепла. Кожна точка на рисунках - це середнє значення сили тертя протягом усього ковзання, а лінії - кубічні сплайні для новостворених наночастинок з різними поверхнями контакту. Природно, що це приводить до зміни сили тертя, але при цьому зберігається загальна тенденція. Під загальною тенденцією мається на увазі, що, наприклад, у випадку платинової наночастинок при температурі 100 К сила тертя 5 із 8 кутів змінюється в межах від 0.175 до 0.189 нН, або у випадку алюмінієвої наночастинок при 100.5 К - сила тертя для 4 з 8 кутів коливається в межах від 0.197 до 0.218 нН. Ці розрахунки демонструють, що сила тертя коливається поблизу певних значень. Результати моделювання якісно узгоджуються з результатами Хе і Роббінса [19, 20]. Крім того, аналогічний факт був знайдений у роботі [21], згідно з яким тертя в основному не залежить від θ при високих швидкостях руху (більших за швидкість звуку в твердоподібному мастилі).

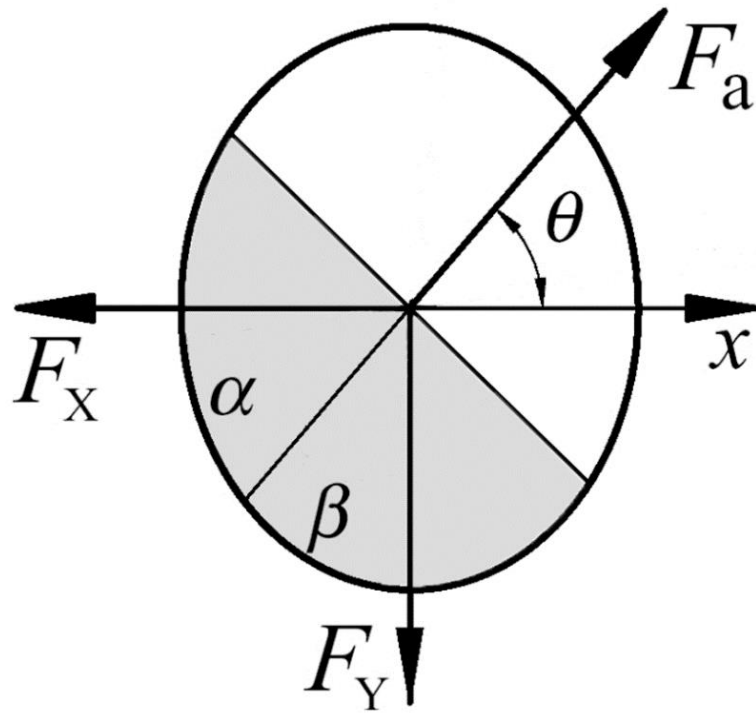


Рисунок 3.1 – Схема сил, що діють на наночастинку протягом ковзання по графенівій підкладці.

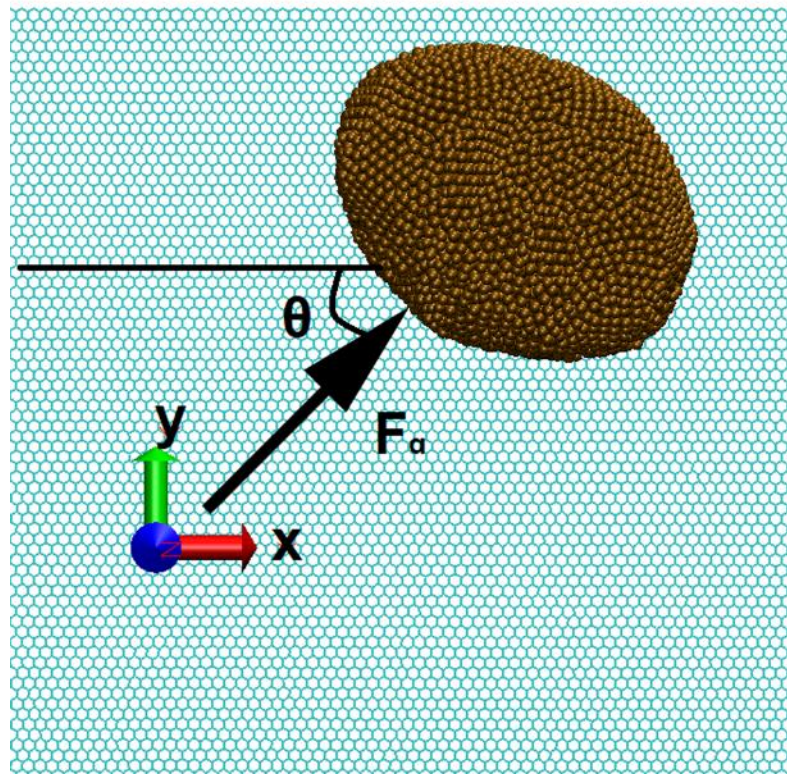


Рисунок 3.2 – Вид зверху на систему з вмістом наночастинок Al 10 000 атомів при $\theta = 45^\circ$.

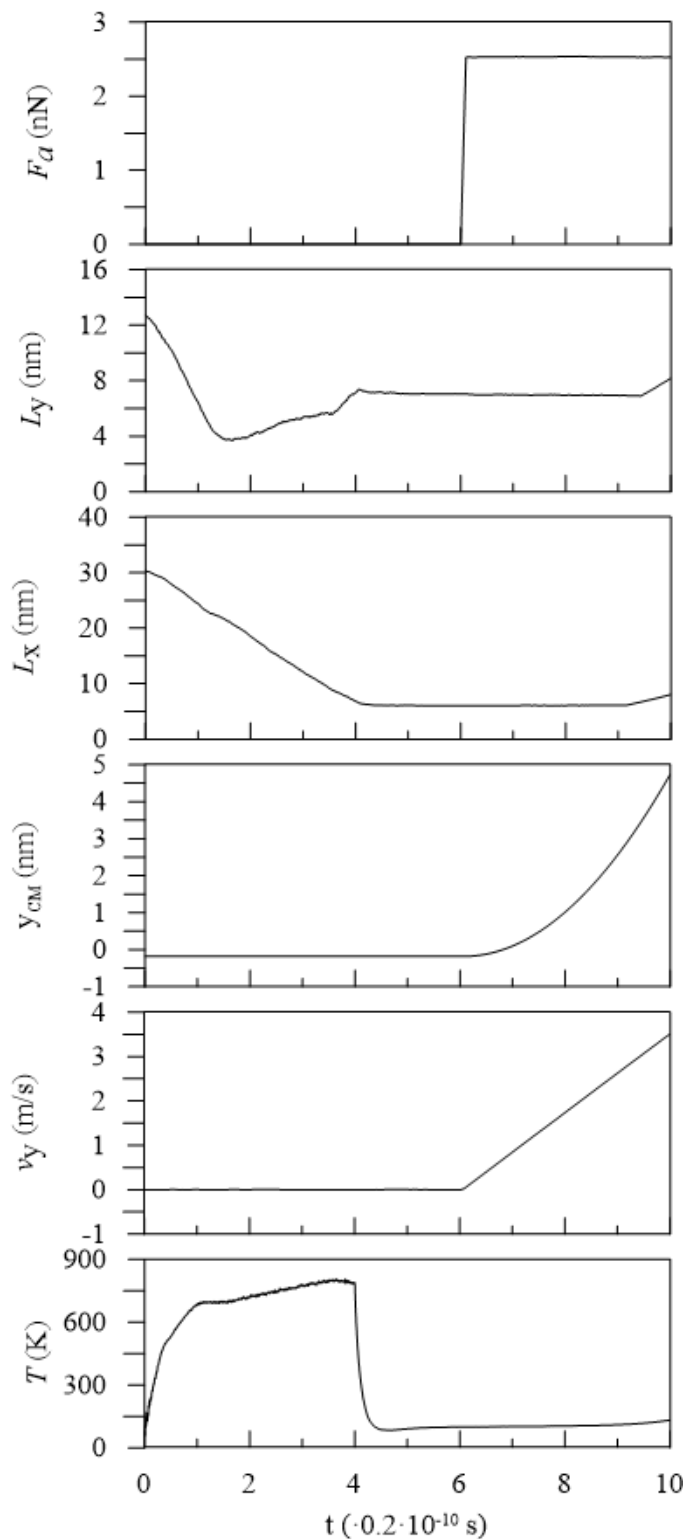


Рисунок 3.3 – Часові залежності величин, виміряних для наночастинок платини з 10000 атомами при $\theta = 45^\circ$ та за заданою температурою 100 К: F_a – прикладена сила; L_x і L_y - латеральні розміри наночастинок відповідно в x і y напрямках; y_{CM} і v_y – y -компоненти положення та швидкості центру мас НЧ, відповідно; T - температура системи.

Тим не менш, можна зазначити, що для платини мінімальна сила тертя така: 0.1206 нН при температурі 100 К і куті 37.5° , 0.1353 нН при 100.5 К і 22.5° , 0.1521 нН при 99.5 К і 15° (рисунок 3.4). Мінімальні значення сили тертя для алюмінієвих наночастинок: 0.0883 нН при 100 К і 30° , 0.0987 нН при 99.5 К для кута 15° , 0.1244 нН при 100.5 К для 15° (рисунок 3.5). Для паладію спостерігаються такі мінімальні значення сили тертя: 1) 0.091 нН поблизу кута 22.5° для 100 К; 2) 0.1096 нН при 22.5° для 100.5 К; 3) 0.1734 нН між 22.5° та 30° для 99.5 К (рисунок 3.6). У багатьох аналітичних теоріях та чисельних моделях передбачається, що структура поверхонь відіграє ключову роль для тертя [3, 22, 23, 24]. Зокрема, передбачається, що тертя впорядкованих співрозмірних поверхонь відбуватиметься як переривчастий рух [24], в той же час, для неспіврозмірних неупорядкованих поверхонь режим прилипання-ковзання не передбачається. Варто зазначити, що області локального впорядкування (зерна) реалізовані для трьох розглянутих типів НЧ [25-29]. Оскільки атоми в металі взаємодіють набагато сильніше, ніж металеві та графенові атоми вуглецю, переважно поверхневі "зерна" атомів металу не є співрозмірними з графеновою решіткою протягом усього руху.

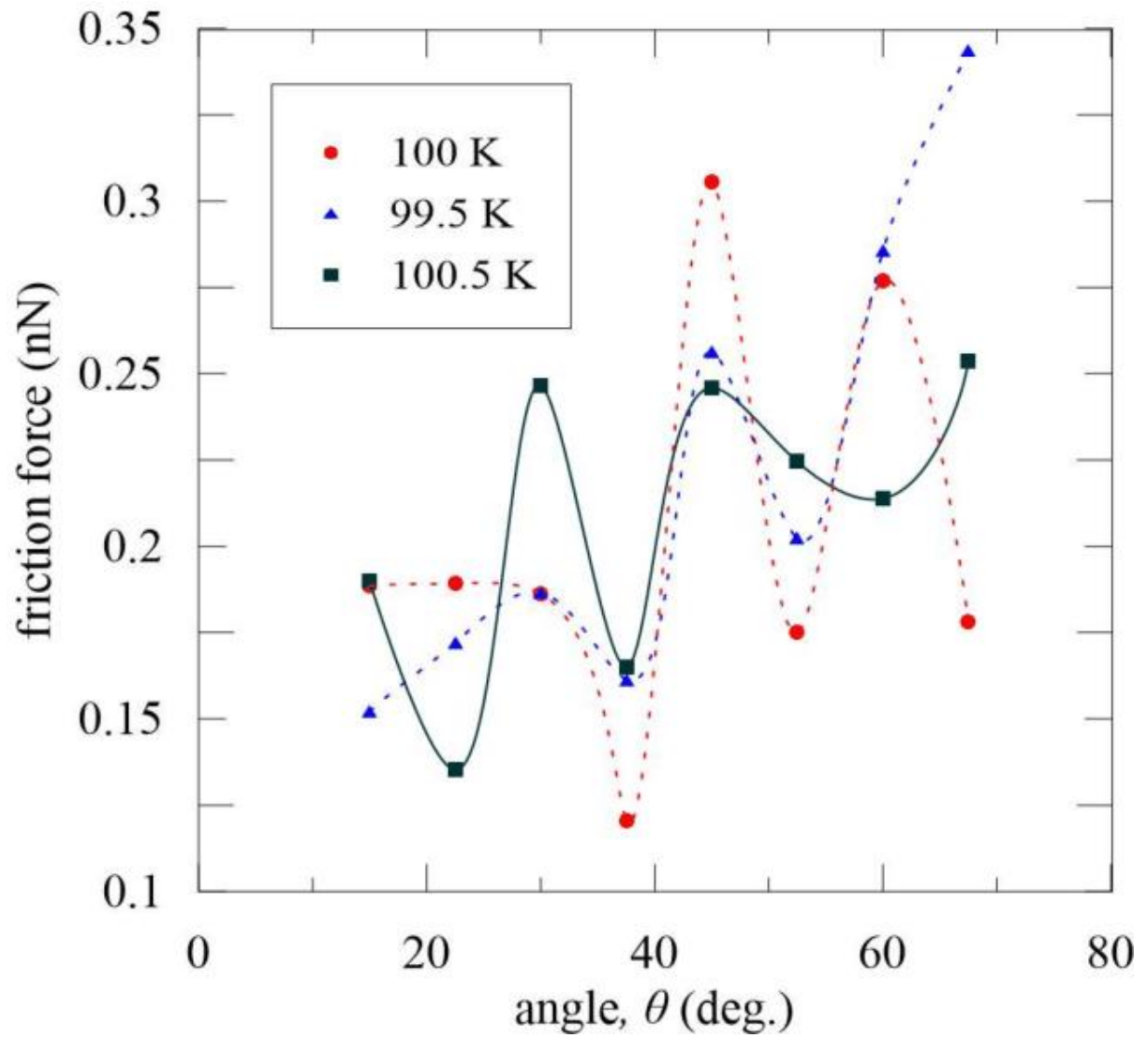


Рисунок 3.4 – Анізотропія платинових наночастинок, що містять 10 000 атомів при температурах 99.5, 100 та 100.5 К.

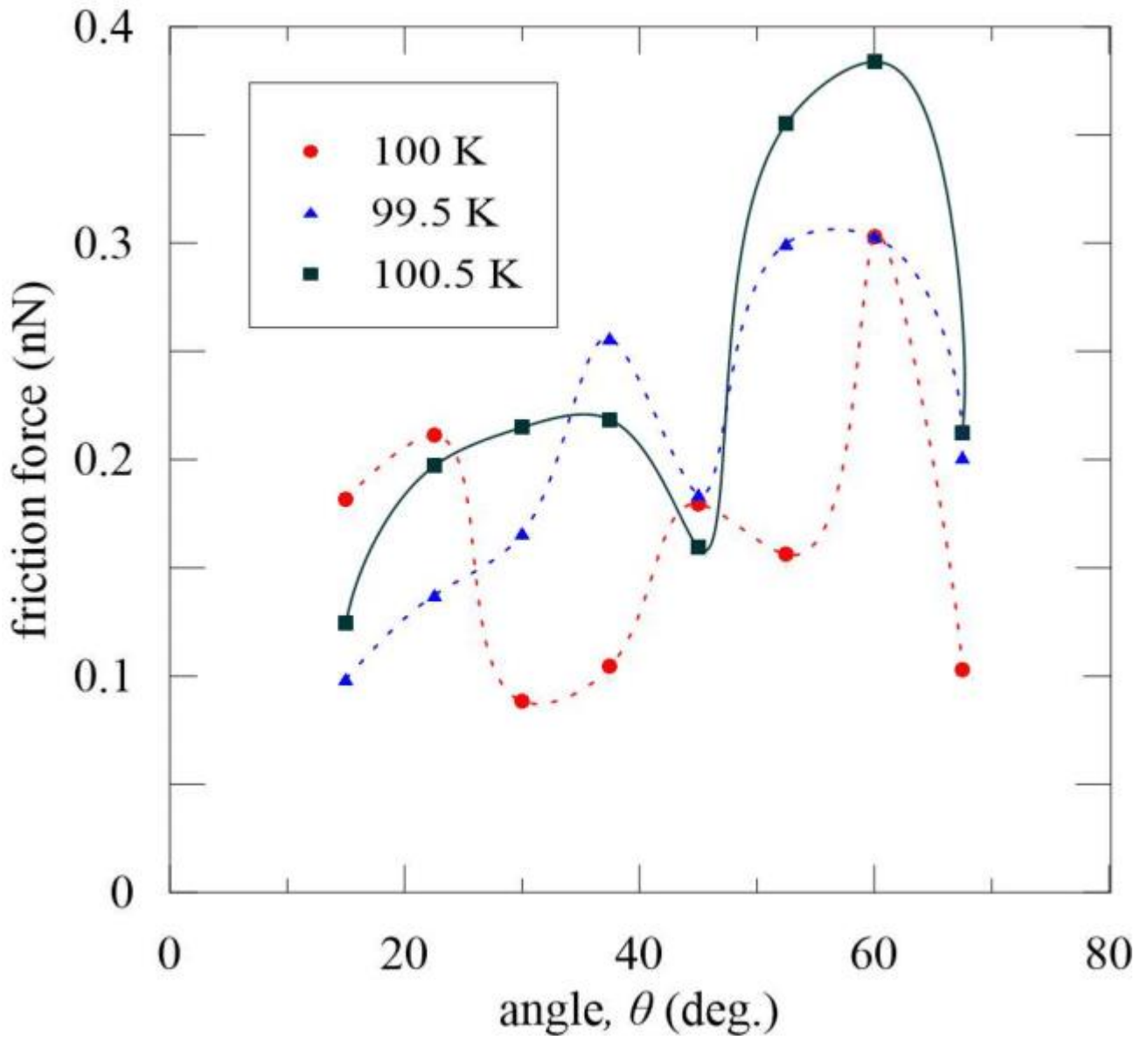


Рисунок 3.5 – Анізотропія алюмінієвих наночастинок, що містять 10 000 атомів при температурах 99.5, 100 та 100.5 К.

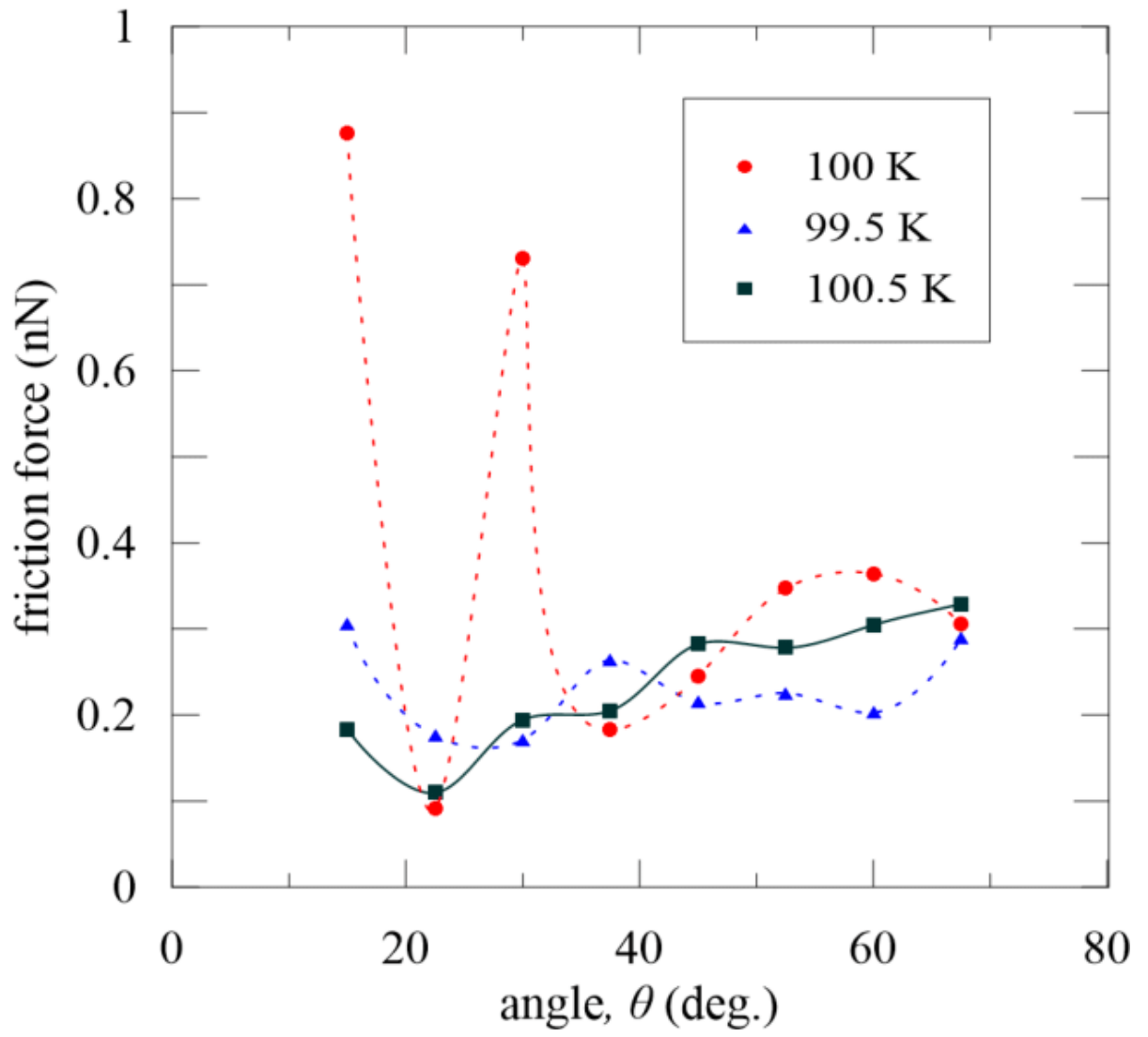


Рисунок 3.6 – Анізотропія паладієвих наночастинок, що містять 10 000 атомів при температурах 99.5, 100 та 100.5 К.

ВИСНОВКИ

З проведеного в роботі дослідження можна зробити наступні висновки. Встановлено, що трибологічні властивості металевих наночастинок значно залежать від матеріалу. Виявлено, що сила тертя зростає приблизно лінійно із зростанням площі контакту, а також сила тертя стає максимальною при характерній температурі (яка збільшується зі збільшенням швидкості ковзання). Піки функції радіального розподілу розмиті, і можна зробити висновок, що дальній атомний порядок відсутній, а наночастинок аморфні або мають полікристалічний порядок. Спостерігаються області локального порядку атомів на нижній поверхні наночастинок. Різні орієнтації і положення металевих частинок на графеновій поверхні генерують різні енергії взаємодії з поверхнею графена. Зроблено висновок, що при високих швидкостях руху сила тертя стає майже незалежною від кута зсуву.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. B. Bhushan, Springer Handbook of Nanotechnology, (Springer, Berlin, 2004).
2. B. Bhushan, Introduction – measurement techniques and application, (Springer, Berlin, 2005).
3. E. Gnecco, E. Meyer, Fundamentals of Friction and Wear on the Nanoscale, (Springer, Berlin, 2007).
4. Molecular dynamics of cleavage and flake formation during the interaction of a graphite surface with a rigid nanoasperity / A.V. Khomenko, N.V. Prodanov // Carbon. - 2010. - V. 48. - P. 1234 (10).
5. Frictional Duality Observed during Nanoparticle Sliding / D. Dietzel, C. Ritter, H. Fuchs, A. Schirmeisen, U.D. Schwarz // Phys. Rev. Lett. - 2008. - V. 101. - P.125505.
6. Molecular dynamics simulations of ultrathin water film confined between flat diamond plates / A.V. Khomenko, N.V. Prodanov // Condens. Matter Phys. - 2008. - V. 11, № 4(56). - P. 615 (12).
7. D.C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation, 2nded. (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
8. Atomically-Precise Methods for Synthesis of Solid Catalysts / X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson, D.J. Larson, N. Tabat, A.K. Cerezo, G.D.W. Petford-Long, P.H. Smith, R.L. Clifton // Acta Mater. - 2001. - V. 49. - P. 4005.
9. M. Griebel, S. Knapek, G. Zumbusch, Numerical Simulation in Molecular Dynamics (Springer, Berlin, 2007).
10. ASM Handbook, Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials. - V. 2. (ASM International, 1992).
11. Limitations of Structural Superlubricity: Chemical Bonds versus Contact Size / D. Dietzel, J. Brndiar, I. Stich, A. Schirmeisen // ACS Nano. - 2017. - V. 11 (8). - P. 7642 (6).
12. Atomic-scale friction image of graphite in atomic-force microscopy / N. Sasaki, K. Kobayashi, M. Tsukada // Phys. Rev. B. - 1996. - V. 54. - P. 2138.

13. Molecular dynamics with coupling to an external bath / H. Berendsen, J. Postma, W. Gunsteren, J. Haak // *Chem. Phys.* - 1984. - V. 81. - P. 3684.
14. Study of friction of Ag and Ni nanoparticles: an atomistic approach / A.V. Khomenko, N.V. Prodanov // *J. Phys. Chem C.* - 2010. - V. 114. - P. 19958 (8).
15. Nanotribological Properties of Hexadecanethiol Self-Assembled Monolayers on Au(111): Structure, Temperature, and Velocity / T. Marx, X. Shen, D. Dietzel, A. Schirmeisen // *Langmuir.* - 2017. - V. 33 (24). - P. 6005 (6).
16. Time Strengthening of Crystal Nanocontacts / J. J. Mazo, D. Dietzel, A. Schirmeisen, J. G. Vilhena, E. Gnecco // *Phys. Rev. Lett.* - 2017. - V. 118. - P. 246101.
17. VMD: visual molecular dynamics / W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten // *J. Mol. Graph.* - 1996. - V. 14 (1). - P. 33 (6).
18. Frictional anisotropy of metal nanoparticles adsorbed on graphene / A.V. Khomenko, N.V. Prodanov, M.A. Khomenko, B.O. Krasulya // *J. Nano-Electron. Phys.* - 2013. - V. 5 (3). - P. 03018 (8).
19. Simulations of the static friction due to adsorbed molecules / G. He, M.O. Robbins // *Phys. Rev. B.* - 2001. - V. 64. - P. 035413.
20. Simulations of the kinetic friction due to adsorbed surface layers / G. He, M.O. Robbins // *Tribol. Lett.* - 2001. - V. 10(1). - P. 7 (8).
21. Dependence of boundary lubrication on the misfit angle between the sliding surfaces / O.M. Braun, N. Manini // *Phys. Rev. E.* - 2011. - V. 83. - P. 021601.
22. Simulations of the anisotropy of friction force between a silicon tip and a substrate at nanoscale / L. Chen, Y. Wang, H. Bu, Y. Chen // *Proc. Inst. Mech. Eng.* - 2013. - № 227 (3). - P. 130 (5).
23. Scaling laws of structural lubricity / D. Dietzel, M. Feldmann, U.D. Schwarz, H. Fuchs, A. Schirmeisen // *Phys. Rev. Lett.* - 2013. - V. 111. - P. 235502.
24. Atomic scale friction between clean graphite surfaces / K. Matsushita, H. Matsukawa, N. Sasaki // *Sol. State Commun.* - 2005. - V. 136 (1). - P. 51(5).
25. Atomistic modelling of friction of Cu and Au nanoparticles adsorbed on graphene / A.V. Khomenko, N.V. Prodanov, B.N.J. Persson // *Condens. Matter Phys.* -

2013. - V. 16. - P. 33401.

26. Atomistic modeling of tribological properties of Pd and Al nanoparticles on a graphene surface / A. Khomenko, M. Zakharov, D. Boyko, B.N.J. Persson. // Beilstein J. Nanotechnol. - 2018. - V. 9. - P. 1239(8).
27. Frictional anisotropy of Al, Pt and Pd nanoparticles on a graphene substrate / A. Khomenko, M. Zakharov, B.N.J. Persson // Tribology Letters. – 2019. – V. 67 (4). – Art. 113.
28. Atomistic modeling of friction force dependence on contact area of metallic nanoparticles on graphene / A. Khomenko, M. Zakharov, K. Khomenko, Ya. Khyzhnya, P. Trofymenko // In: Proceedings of the IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Applications and Properties (NAP'18). - 2018.- V. 4. – P. 04NNLS15-1-4.
29. Correlation anisotropy of friction force during sliding of metallic nanoparticles on graphene / A. Khomenko, M. Zakharov, B.N.J. Persson, Ya. Khyzhnya, P. Trofymenko, D. Logvinenko // In: Proceedings of the IEEE 9th International Conference on Nanomaterials: Application Properties (NAP'19). - 2019. - V. 1. - P. 01SSI05-1-4.