

V. Исследование самоорганизации наноструктур графена с помощью модуля «Молекулярная наномеханика»

Целью работы является выяснение особенностей структуры наночастиц графена как результата неравновесного процесса самоорганизации монослоя в определенном температурном режиме эволюции.

Порядок выполнения работы

1. Запустите программу «*NanoEvolver*» — *Dissipative* (версия 4.2).
2. При необходимости ознакомьтесь с руководством по основам работы с программой. Для этого вызовите команду *Index* из меню *Help*, или же нажмите клавишу **F1**. Вы можете всякий раз обращаться к руководству при возникновении затруднений.
3. Загрузите из внешнего файла модель структуры графена. Загрузка осуществляется посредством команды *Load structure...* из меню *File*. В диалоговом окне открытия файла найдите директорию *Structures* и в ней — файл **Graphene.nev**. Если файл не отображается, смените тип отображаемых файлов, используя выпадающий список в нижней части диалогового окна.

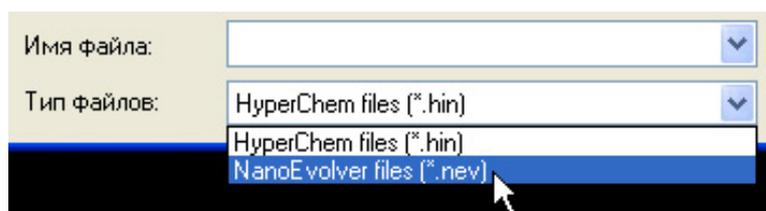
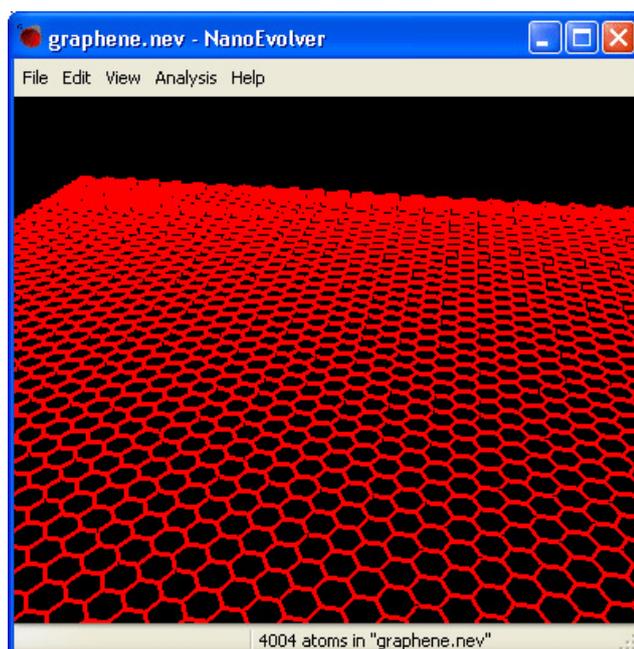


Рис. 29. Смена типа отображаемых файлов

4. Расположите модель на экране так, чтобы обеспечить удобство ее обзора. Используйте клавиши $\leftarrow \uparrow \downarrow \rightarrow$ для вращения модели в пространстве; **Insert/Delete** — для приближения/отдаления; **Page Up/Page Down** — для перемещения по вертикали; **Home/End** — для перемещения по горизонтали.



5. В «NanoEvolver» используются аппроксимирующие парные потенциалы в форме функции Морзе. Параметры потенциалов — D_0 (энергия диссоциации), R_0 (равновесное расстояние) и ω (частота колебаний) — чаще всего рассчитываются неэмпирическими методами *ab initio*. Указание параметров потенциалов, а также некоторых важных опций и параметров, влияющих на ход расчетной процедуры, производится в диалоговом окне *Settings* (см. рис. 31), вызвать которое можно с помощью команды *Set parameters...* меню *Edit*.

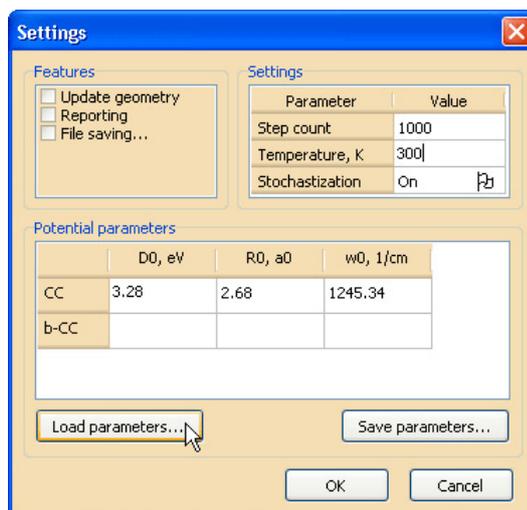


Рис. 31. Диалоговое окно выставления опций и параметров

Установите параметры, как показано на рис. 31. Параметры межатомных потенциалов введите нажав на кнопку *Load parameters...*, загрузите эти данные из внешнего файла параметров **Potential_params.txt**, который расположен в той же папке, что и загруженная структура.

6. Сохраните отчет во внешнем файле. Для этого вызовите команду *Save report as...* из меню *File*. Укажите путь и разумное имя файла (например, **GrapheneInit300K.htm**), нажмите *Сохранить*. «NanoEvolver» сохраняет отчеты в удобном формате гипертекста, можете сейчас просмотреть сохраненный на диске отчет, используя любой установленный на компьютере браузер. Анализируя отчет, обратите внимание на единицы измерения и порядок величин. Не закрывайте пока открытый отчет.
7. Вернитесь к окну «NanoEvolver». Выполните оценку ближнего порядка в начальной идеальной структуре графена. Оценить ближний порядок позволяет *парная корреляционная функция*, или *радиальная функция распределения $g(R)$* . Средства расчета и построения функции $g(R)$ доступны при вызове команды *Radial distribution function...* из меню *Analysis* (см. рис. 32).

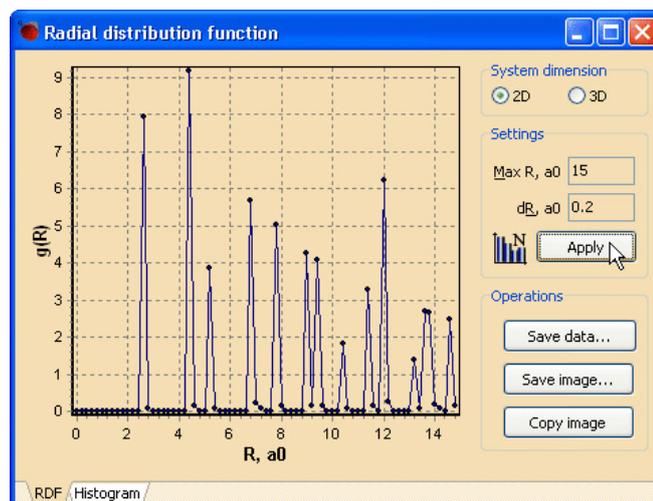
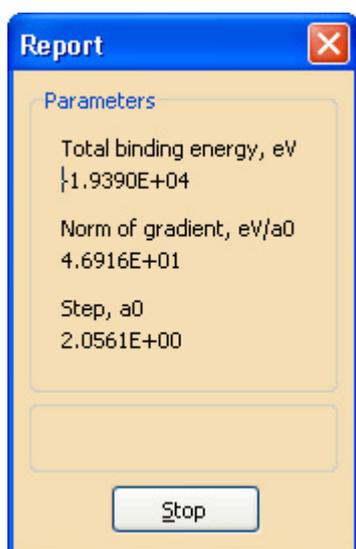


Рис. 32. Радиальная функция распределения «идеального» планарного графенового монослоя

Начальные настройки окна *Radial distribution function* требуют корректировки в случае графена. Все опции доступны для изменения на панели справа от графика. Установите все необходимые значения в соответствии с рис.32. и нажмите кнопку *Apply* для применения измененных настроек и пересчета графика. Проведите оценку степени разброса длин связей и степени регулярности идеальной начальной структуры. Нажатием на кнопку *Save image...* сохраните графическое изображение для последующего сравнительного анализа.

8. Закройте окно *Radial distribution function* и приступайте к следующему — основному — этапу лабораторной работы. Раскройте меню *Edit* главного окна программы «*NanoEvolver*» и выберите пункт *Evolve*. В зависимости от количества итераций, выставленного в окне *Settings*, а также от размеров выбранного для расчетов образца, процедура моделирования процесса самоорганизации может занять несколько минут.



9. Рис. 33. Окно с кратким отчетом при завершении расчетной процедуры

По завершении первого проведения процедуры отметьте (запомните или запишите) текущее значение полной энергии связи.

10. Оцените визуально изменения, которые произошли в геометрии монослоя. Для получения наиболее отчетливой картины деформаций поверхности вы можете вращать и перемещать модель в пространстве, а также подобрать другие цвета для атомов структуры и для фона.

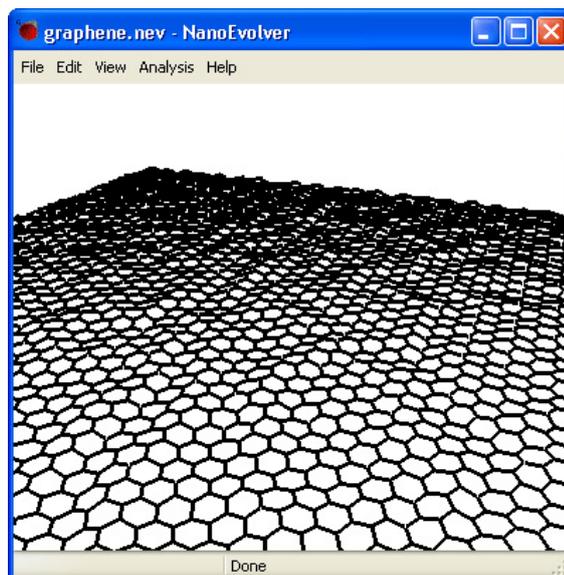


Рис. 34. Геометрия графенового монослоя при температуре $T = 300$ К как результат расчетов в программе «NanoEvolver»

11. Сохраните отчет (*File* → *Save report as...*) для полученной в результате структуры (назовите файл, например, **GrapheneFin300K.htm**). Обратите внимание на изменение полной энергии связи. Соплассуется ли наличие «шероховатости» поверхности графена со значением энергии изгибных деформаций для конечной структуры?
12. Постройте график радиальной функции распределения для конечной структуры (*Analysis* → *Radial distribution function...*).
13. Вызвав команду *Height distribution...* из меню *Analysis*, вы можете запустить утилиту «hPlot» для построения диаграммы распределения высот нормальных отклонений Δz атомов в монослое графена (см. рис. 35).

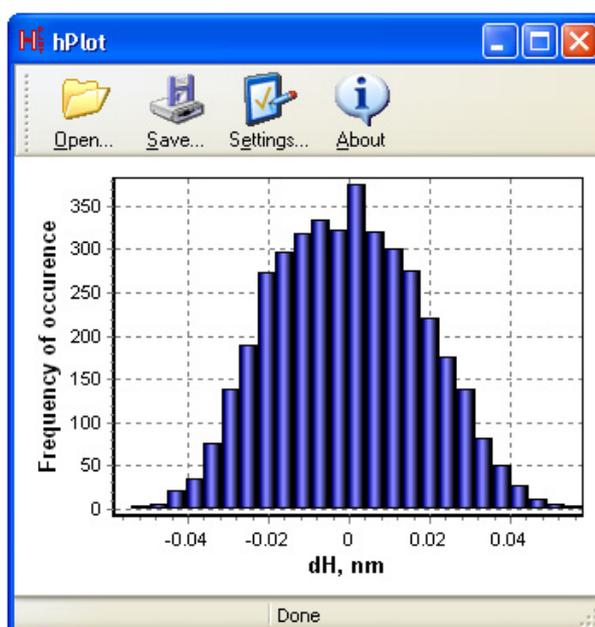


Рис.35. Распределение высот нормальных отклонений Δz атомов в монослое графена

14. Выполните аналогичные расчеты для температур 1000К и 3000К (число итераций 500) и постройте график радиальной функции распределения для конечной структуры и диаграммы распределения высот нормальных отклонений Δz атомов в монослое графена.

Рекомендации по оформлению отчета.

Название работы

Цель работы:

Заполните таблицу

| Температура моделирования | Изображение структуры | Вид радиальной функции распределения | Вид диаграммы распределения высот нормальных отклонений Δz атомов в монослое графена |
|---------------------------|-----------------------|--------------------------------------|--|
| Начальная структура | | | - |
| 300К | | | |
| 1000К | | | |
| 3000К | | | |

Сделайте вывод о выполненной работе. Ответьте на вопросы:

- ✓ Согласуется ли наличие «шероховатости» поверхности графена со значением энергии изгибных деформаций для конечной структуры?
- ✓ Имеются ли изменения в строении ближнего порядка по сравнению с идеально плоским монослоем? Если да, в чем это выражается?
- ✓ Можно ли сказать, что полученное вами распределение атомных смещений от базовой плоскости удовлетворительно описывается гауссовой кривой?
- ✓ Обратите внимание на диапазон варьирования высот, то есть на максимальную амплитуду внеплоскостных деформаций поверхности.