

# Symulacja grafenu na powierzchni miedzi w pakiecie oprogramowania LAMMPS

Szymon Romanowski  
Student 3-go roku Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej

[szymon1874@gmail.com](mailto:szymon1874@gmail.com)

Praca wykonana we wrześniu 2016 w ramach praktyk studenckich w Laboratorium Badań Materiałowych Narodowego Centrum Badań Jądrowych w Otwock-Świerk.

## Wygrzewanie.

Symulacje wykonano w programie LAMMPS. Oddziaływania pomiędzy atomami zostały zdefiniowane jako hybrydowe, tzn. skorzystano z różnych potencjałów dla różnych atomów.

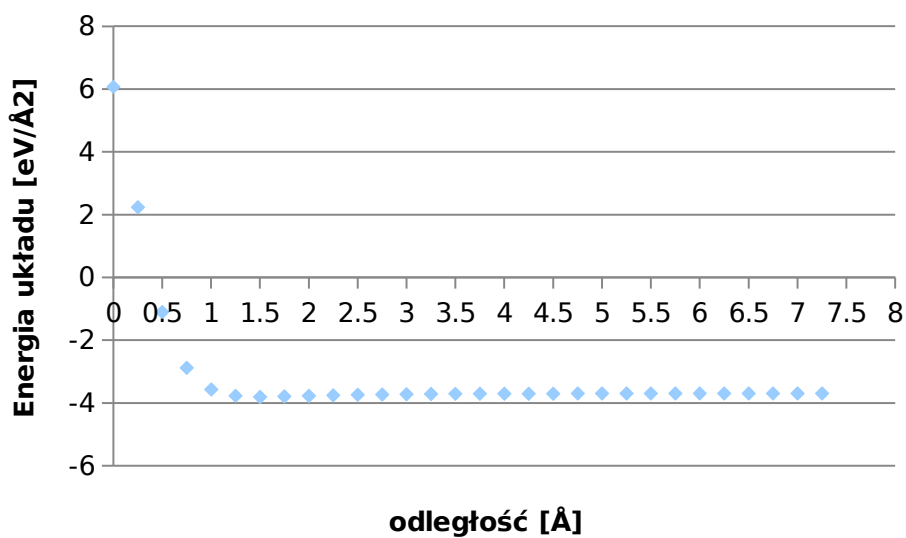
Parametry symulacji:

- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ )
- sieć grafenu otrzymano nakładając na siebie 2 warstwy heksagonalne atomów węgla (finalna stała sieci  $a=2.952$ )
- grafen umieszczono na podłożu Cu o stałej (pochodzącej z potencjału) równej 3.6150 i orientacji 111
- układ został poddany minimalizacji, a następnie wygrzewaniu w  $T=300\text{K}$  bez aktualizacji pozycji (brak trybu npt, nve itp.)

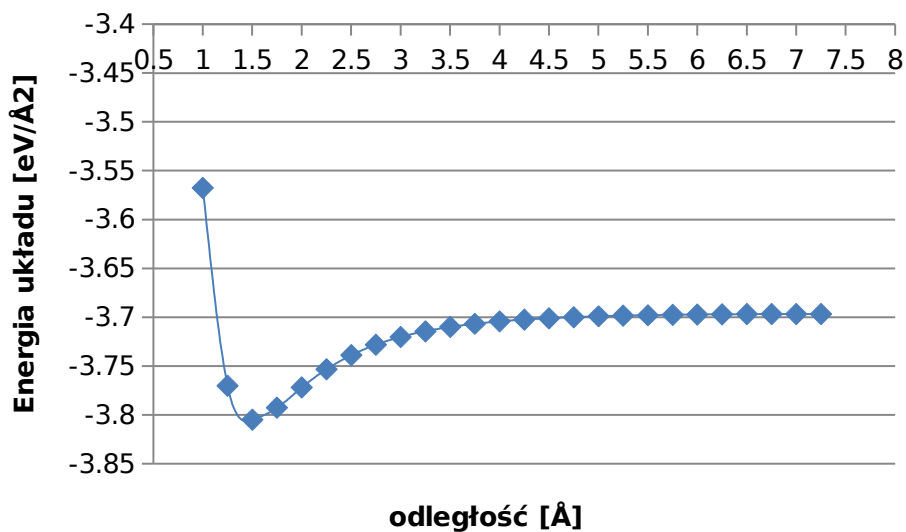
## Energia adhezji

W celu wykonania wykresu zależności sił przyciągania/odpychania od odległości monowarstwa grafenu była przybliżana do powierzchni miedzi co  $0.25\text{\AA}$

Wyniki:



W tej formie wykresu widać jedynie wzrost energii przy zbliżaniu. Jednak jeśli pominiemy wartości, które różnią się o więcej niż 1 to możemy zaobserwować minimum funkcji w odległości 1,5Å

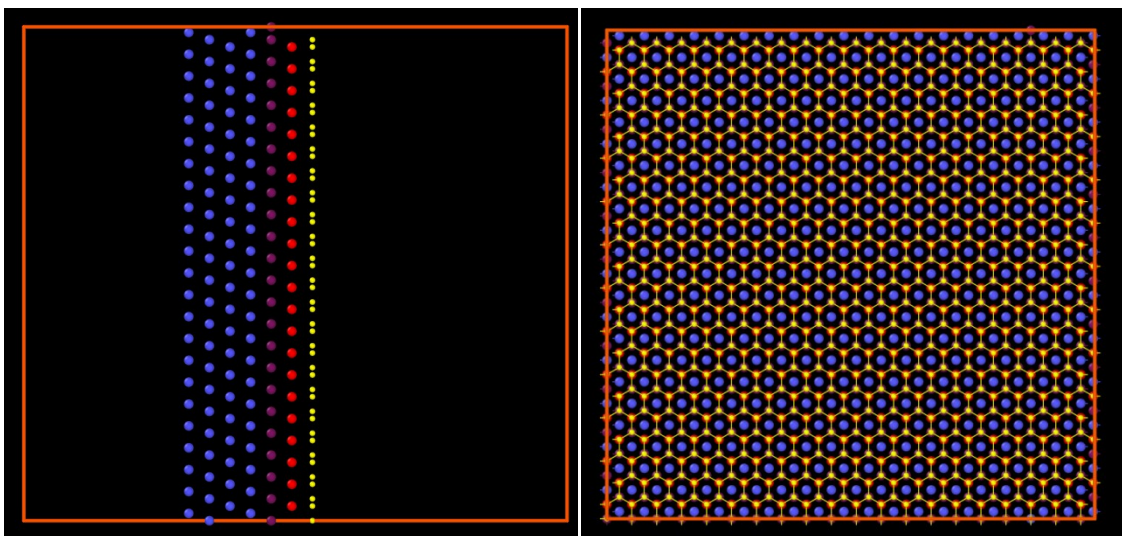


Energia adhezji grafenu na podłożu miedzianym wynikająca z wykresu wynosi  $-0,10839 \text{ eV}/\text{Å}^2$ .

## Wyrzwanie

Przed bombardowaniem każdy układ został wyrzany przez **100 tyś. kroków** i zapisany w formie pliku restart. Wyrzane zostały 4 układy:

- A. **grafen na podłożu miedzianym** zawierający 3598 atomów w tym 900 atomów grafenu
- B. **grafen na podłożu miedzianym** zawierający 10800 atomów w tym 2700 atomów grafenu
- C. **grafen** zawierający 2700 atomów
- D. **grafen** zawierający 2345 atomów **pozbawiony** periodyczności w każdym kierunku



Powyższe rysunki przedstawiają strukturę wejściową. Oznaczenia:

żółty- atomy grafenu, czerwony - 1 warstwa atomów miedzi, fioletowy - 2 warstwa atomów miedzi, niebieski - 3 i dalsze warstwy atomów miedzi.

Z literatury wynika, że ułożenie atomów grafenu najkorzystniejsze jest w przypadku, gdy znajdują się one nad 1 i 3 warstwą, a w drugiej kolejności ułożenie nad 1 i 2 warstwą miedzi. W naszym przypadku najkorzystniejsza okazała się struktura, w której grafen znajduje się nad 1 i 2 warstwą.

### A) Opis symulacji

- symulacja w 3 wymiarach, układ **periodyczny** w osi **y** i **z**
- sieć grafenu otrzymano nakładając na siebie 2 warstwy heksagonalne atomów węgla o stałej sieci  $3.6150/\sqrt{2}$
- grafen umieszczono na podłożu Cu o stałej (pochodzącej z potencjału) równej **3.6150** i orientacji **111**
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania

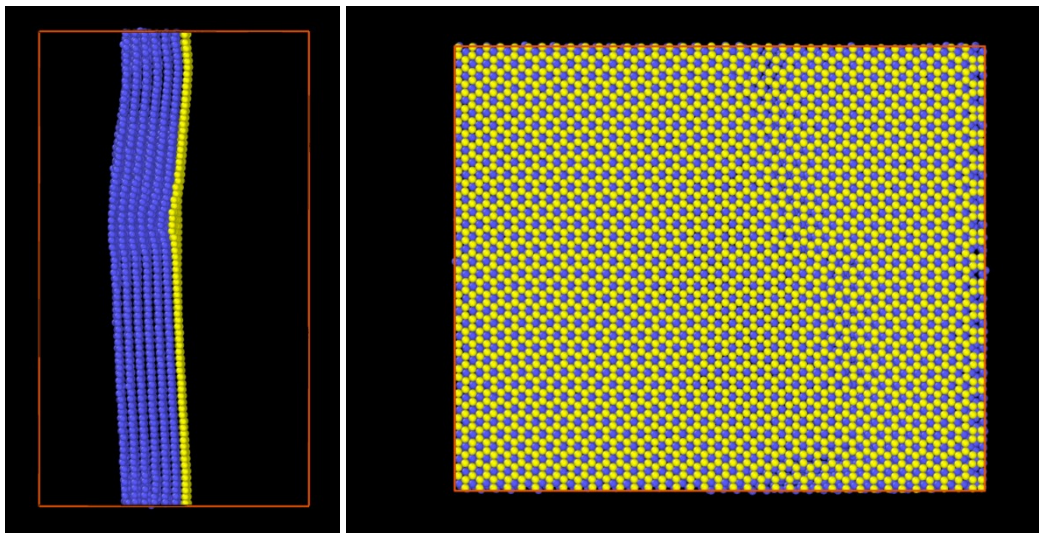
**Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$

- masy **Cu=63.55 g/mol** i **C=12.01g/mol**
- układ został poddany wygrzewaniu w **T=300K** w trybie **nvt** z **Tdump=0.1** przez **100 tyś kroków**
- wyniki symulacji zostały zapisane w formie pliku **restart**

## B. Opis symulacji

**Układ różni się od układu A jedynie rozmiarem obszaru symulacji. Zawiera ok. 3 razy więcej atomów.**

- symulacja w 3 wymiarach, układ **periodyczny** w osi **y** i **z**
- sieć grafenu otrzymano nakładając na siebie 2 warstwy heksagonalne atomów węgla o stałej sieci  $3.6150/\sqrt{2}$
- grafen umieszczono na podłożu Cu o stałej (pochodzącej z potencjału) równej **3.6150** i orientacji **111**
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$
- masy **Cu=63.55 g/mol** i **C=12.01g/mol**
- układ został poddany wygrzewaniu w **T=300K** w trybie **nvt** z **Tdump=0.1** przez **100 tyś kroków**
- wyniki symulacji zostały zapisane w formie pliku **restart**

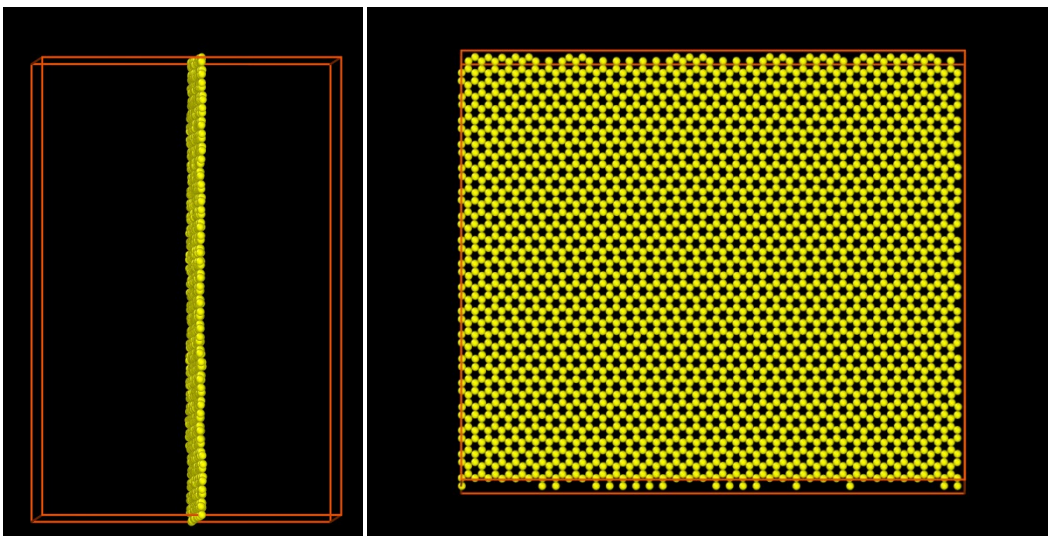


Powyższe rysunki przedstawiają strukturę po wygrzaniu.

## C. Opis symulacji

**Układ różni się od układu B tym, że nie zostało zastosowane podłoże miedziane. Grafen trzyma się ze względu na warunki brzegowe (periodyczność sieci grafenu w osi y i z)**

- symulacja w 3 wymiarach, układ **periodyczny** w osi **y** i **z**
- sieć grafenu otrzymano nakładając na siebie 2 warstwy heksagonalne atomów węgla o stałej sieci  $3.6150/\sqrt{2}$
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$
- masy **Cu=63.55 g/mol** i **C=12.01g/mol**
- układ został poddany wygrzewaniu w **T=300K** w trybie **nvt** z **Tdump=0.1** przez **100 tyś kroków**
- wyniki symulacji zostały zapisane w formie pliku **restart**

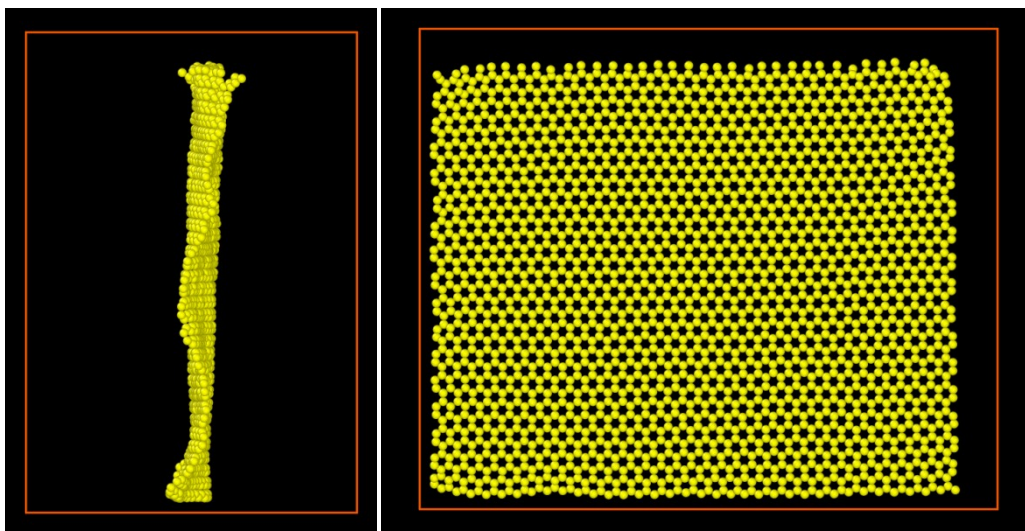


Powyższe rysunki przedstawiają strukturę po wygrzaniu.

#### D. Opis symulacji

***Układ różni się od układu C tym, że grafen został pozbawiony periodyczności oraz nie dotyka ścianek obszaru symulacji.***

- symulacja w 3 wymiarach, układ **nie periodyczny**
- sieć grafenu otrzymano nakładając na siebie 2 warstwy heksagonalne atomów węgla o stałej sieci  $3.6150/\sqrt{2}$
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$
- masy **Cu=63.55 g/mol** i **C=12.01g/mol**
- układ został poddany wygrzewaniu w **T=300K** w trybie **nvt** z **Tdump=0.1** przez **100 tyś kroków**
- wyniki symulacji zostały zapisane w formie pliku **restart**



Powyższe rysunki przedstawiają strukturę po wygrzaniu. Animacja z przebiegu wygrzewania w pliku **wygrzewanie\_C\_nonperiodic.mp4**

Tak przygotowane pliki z danymi do restartu zostały wykorzystane do bombardowania jonami.

## Bombardowanie jonami

Bombardowanie zostało przeprowadzone w następujących wariantach:

- A. bombardowanie układu z **grafenem na podłożu miedzianym** zawierającym 3598 atomów w tym 900 atomów grafenu (wygrzewanie A) cząstkami o energii zgodnej z rozkładem Gaussa
- B. bombardowanie układu z **grafenem na podłożu miedzianym** zawierającym 10800 atomów w tym 2700 atomów grafenu (wygrzewanie B) cząstkami o energii zgodnej z rozkładem Gaussa
- C. bombardowanie **grafenu** zawierającego 2700 atomów (wygrzewanie C) cząstkami o energii zgodnej z rozkładem Gaussa
- D. bombardowanie **grafenu** zawierającego 2345 atomów, który został **pozbawiony** periodyczności w każdym kierunku (wygrzewanie D) cząstkami o energii zgodnej z rozkładem Gaussa
- E. bombardowanie układu z **grafenem na podłożu miedzianym** zawierającym 10800 atomów w tym 2700 atomów grafenu (wygrzewanie B) cząstkami o energii zmieniającej się skokowo w zakresie **8.5 do 25.4 eV**
- F. bombardowanie **grafenu** zawierającego 2700 atomów (wygrzewanie C) cząstkami o energii zmieniającej się skokowo w zakresie **8.5 do 25.4 eV**

## A. Opis symulacji

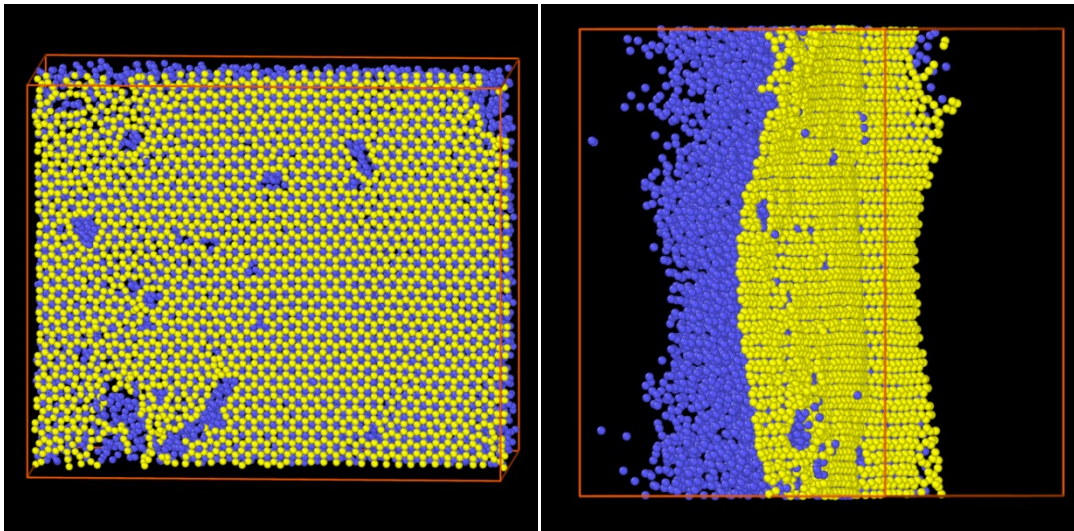
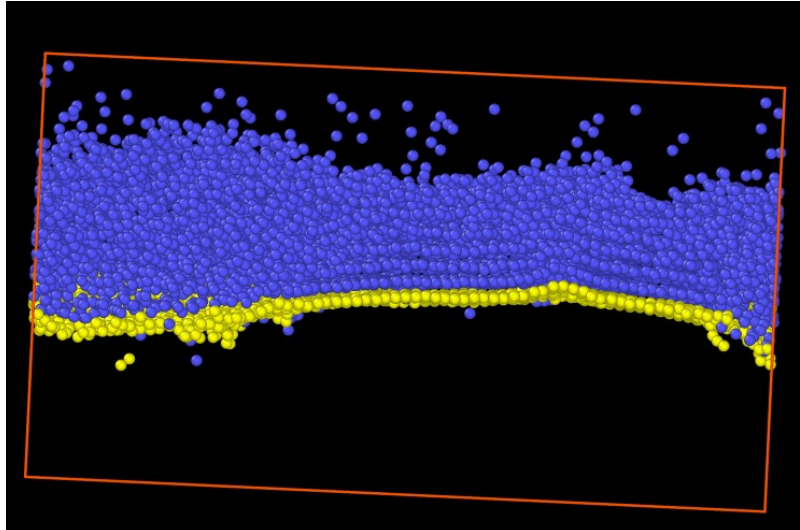
- wczytany plik restart wygrzewanie A

- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$ , oddziaływania **R-Cu, R-C** zostały zdefiniowane tak samo jak Cu-C, tzn. **lj/cut  $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$  odcięcie  $7\text{\AA}$  (R-cząstka bombardująca)**
- masy **Cu=63.55 g/mol, C=12.01g/mol, R=1g/mol**
- pozycja początkowa atomu na **osi x** była **stała**, natomiast na **osi y oraz z losowa**
- prędkość była zgodna z **rozkładem Gaussa**
- położenie było aktualizowane w trybie **nve**
- ignorowane było opuszczanie symulacji przez atomy
- w jednej symulacji następowało kolejno po sobie 50 bombardowań z odstępem 80 kroków czasowych

## B. Opis symulacji

**Symulacja różni się od symulacji A jedynie wczytanym plikiem restartowym.**

- wczytany plik restart wygrzewanie B
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$ , oddziaływania **R-Cu, R-C** zostały zdefiniowane tak samo jak Cu-C, tzn. **lj/cut  $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$  odcięcie  $7\text{\AA}$  (R-cząstka bombardująca)**
- masy **Cu=63.55 g/mol, C=12.01g/mol, R=1g/mol**
- pozycja początkowa atomu na **osi x** była **stała**, natomiast na **osi y oraz z losowa**
- prędkość była zgodna z **rozkładem Gaussa**
- położenie było aktualizowane w trybie **nve**
- ignorowane było opuszczanie symulacji przez atomy
- w jednej symulacji następowało kolejno po sobie 50 bombardowań z odstępem 80 kroków czasowych



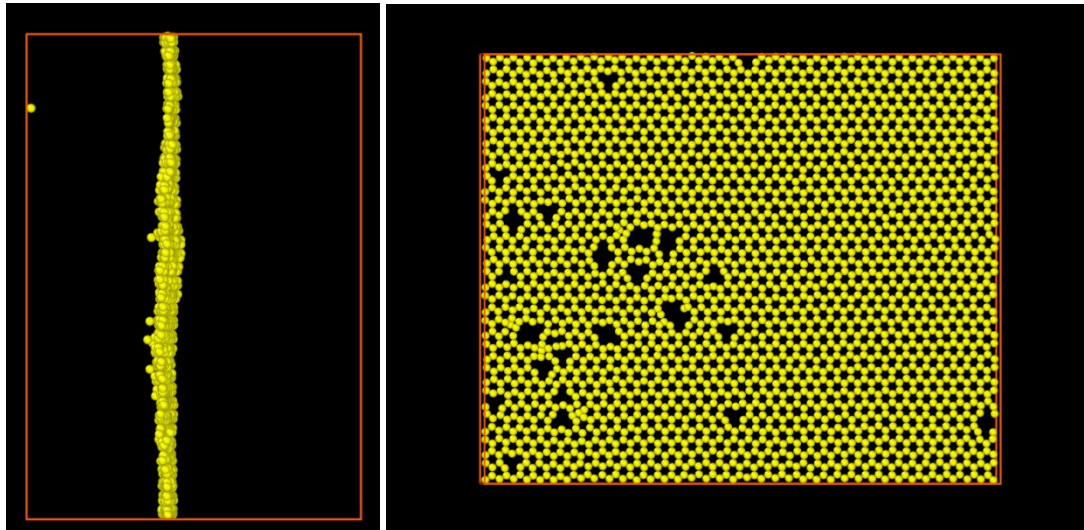
Powyższe rysunki przedstawiają strukturę po bombardowaniu. Animacja z przebiegu bombardowania w pliku **bombardowanie\_CuC\_10800at**

### C. Opis symulacji

**Symulacja różni się od symulacji A jedynie wczytanym plikiem restartowym.**

- wczytany plik restart wygrzewanie C
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$ , oddziaływania **R-Cu, R-C** zostały zdefiniowane tak samo jak Cu-C, tzn. **lj/cut  $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$  odcięcie  $7\text{\AA}$  (R-cząstka bombardująca)**
- masy **Cu=63.55 g/mol, C=12.01g/mol, R=1g/mol**

- pozycja początkowa atomu na **osi x** była **stała**, natomiast na **osi y oraz z losowa**
- prędkość była zgodna z **rozkładem Gaussa**
- położenie było aktualizowane w trybie **nve**
- ignorowane było opuszczanie symulacji przez atomy
- w jednej symulacji następowało kolejno po sobie **50 bombardowań** z odstępem **80 kroków czasowych**



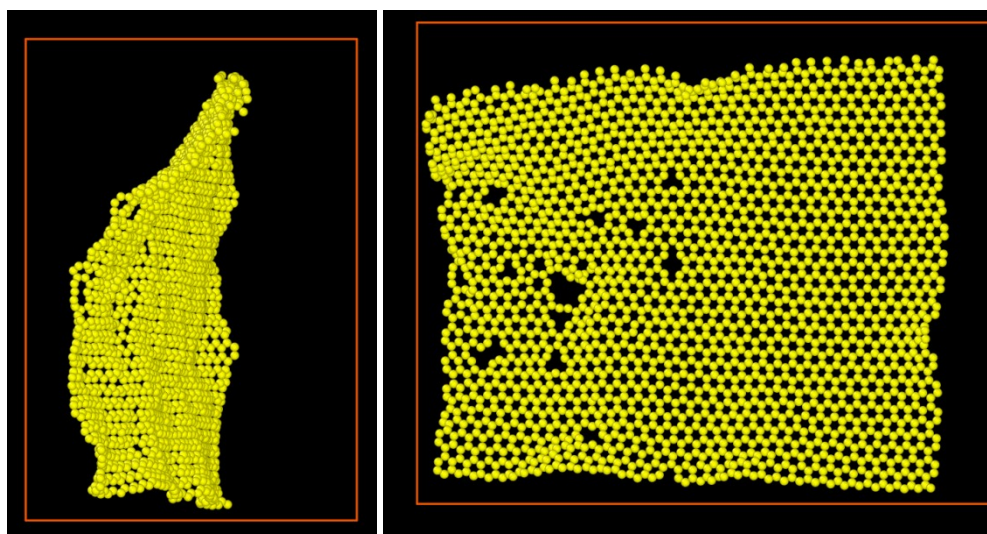
Powyższe rysunki przedstawiają strukturę po bombardowaniu. Animacja z przebiegu bombardowania w dwóch wersjach energetycznych w plikach **bombardowanie\_C\_higherenergy\_2700at** oraz **bombardowanie\_C\_lowerenergy\_2700at**

#### D. Opis symulacji

**Symulacja różni się od symulacji A jedynie wczytanym plikiem restartowym.**

- wczytany plik restart wygrzewanie D
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.alloy, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$ , oddziaływania **R-Cu, R-C** zostały zdefiniowane tak samo jak Cu-C, tzn. **lj/cut  $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$  odcięcie  $7\text{\AA}$  (R-cząstka bombardująca)**
- masy **Cu=63.55 g/mol, C=12.01g/mol, R=1g/mol**
- pozycja początkowa atomu na **osi x** była **stała**, natomiast na **osi y oraz z losowa**
- prędkość była zgodna z **rozkładem Gaussa**
- położenie było aktualizowane w trybie **nve**
- ignorowane było opuszczanie symulacji przez atomy

- w jednej symulacji następowało kolejno po sobie 50 bombardowań z odstępem 80 kroków czasowych



Powyższe rysunki przedstawiają strukturę po bombardowaniu. Animacja z przebiegu bombardowania w pliku **bombardowanie\_C\_nonperiodic**

### E. Opis symulacji

***Symulacja różni się od symulacji B skokową zmianą energii bombardującej cząstki oraz tym, że każde bombardowanie jest oddzielną symulacją - bombardowania nie mają wpływu na siebie. Pozwala to zaobserwować graniczną energię cząstki potrzebną do tworzenia się defektów.***

- wczytany plik restart wygrzewanie B
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał **FeC.tersoff**, Cu-Cu oddziaływania **eam/alloy** wykorzystując gotowy potencjał **Cu\_mishin1.eam.alloy**, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$ , oddziaływania **R-Cu**, **R-C** zostały zdefiniowane tak samo jak Cu-C, tzn. **lj/cut  $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$  odcięcie  $7\text{\AA}$  (R-cząstka bombardująca)**
- masy **Cu=63.55 g/mol**, **C=12.01g/mol**, **R=1g/mol**
- pozycja początkowa atomu na **osi x** była **stała**, natomiast na **osi y oraz z losowa**
- prędkość była zmieniana skokowo **od 405 do 700  $\text{\AA}/\text{ps}$  co 5  $\text{\AA}/\text{ps}$**  (a więc energia atomu zmieniała się **od 8.5 do 25.4 eV** )
- położenie było aktualizowane w trybie **nve**
- ignorowane było opuszczanie symulacji przez atomy
- bombardowanie trwało 90 kroków czasowych, po każdorazowym bombardowaniu układ był generowany ponownie w celu usunięcia wpływu poprzedniego bombardowania na kolejne
- liczba bombardowań 60

Animacja z przebiegu bombardowania w pliku  
**bombardowanie\_energiagraniczna\_CuC\_405-700krok5**

## F. Opis symulacji

**Symulacja różni się od symulacji E jedynie wczytanym plikiem restartowym.**

- wczytany plik restart wygrzewanie C
- oddziaływania hybrydowe: C-C oddziaływania **Tersoff** wykorzystując gotowy potencjał FeC.tersoff, Cu-Cu oddziaływania **eam/ally** wykorzystując gotowy potencjał Cu\_mishin1.eam.ally, Cu-C oddziaływania **Lenarda-Jones'a** korzystając z danych literaturowych ( $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$ ) oraz odcięcie  $7\text{\AA}$ , oddziaływania **R-Cu, R-C** zostały zdefiniowane tak samo jak Cu-C, tzn. **lj/cut  $\epsilon=0.415\text{eV}$   $\sigma=2.2277\text{\AA}$  odcięcie  $7\text{\AA}$  (R-cząstka bombardująca)**
- masy **Cu=63.55 g/mol, C=12.01g/mol, R=1g/mol**
- pozycja początkowa atomu na **osi x** była **stała**, natomiast na **osi y oraz z losowa**
- prędkość była zmieniana skokowo **od 405 do 700 Å/ps co 5 Å/ps** (a więc energia atomu zmieniała się **od 8.5 do 25.4 eV** )
- położenie było aktualizowane w trybie **nve**
- ignorowane było opuszczanie symulacji przez atomy
- bombardowanie trwało 90 kroków czasowych, po każdorazowym bombardowaniu układ był generowany ponownie w celu usunięcia wpływu poprzedniego bombardowania na kolejne
- liczba bombardowań 60

Animacja z przebiegu bombardowania w pliku  
**bombardowanie\_energiagraniczna\_C\_405-700krok5**