

Molecular Dynamics Simulation of Effect of Interlayer Spacing on Oscillate Behavior of Graphite Oscillator*

Shufang Geng, Jiangang Xu

School of Science, Xi'an University of Posts and Telecommunications, Xi'an
Email: gsf288@163.com

Received: Nov. 23rd, 2013; revised: Dec. 9th, 2013; accepted: Dec. 14th, 2013

Copyright © 2013 Shufang Geng, Jiangang Xu. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited. In accordance of the Creative Commons Attribution License all Copyrights © 2013 are reserved for Hans and the owner of the intellectual property Shufang Geng, Jiangang Xu. All Copyright © 2013 are guarded by law and by Hans as a guardian.

Abstract: The oscillate behavior of graphite oscillators with different interlayer spacing was presented by molecular dynamics simulation method. The interaction force between carbon atoms was modeled by using the Tersoff-Brenner potential coupled with the Lennard-Jones potential. The results show that the effect of interlayer spacing on oscillate behavior of graphite oscillator is very obvious, and with the increase of interlayer spacing, the energy dissipation of graphite oscillator gradually decreases. When the interlayer spacing of graphite is 0.32 nm, the vibration amplitude of graphite oscillator decreases rapidly due to higher interlayer friction. In addition, the oscillation frequency of graphite oscillator decreases with increasing interlayer spacing when the interlayer spacing is bigger than 0.32 nm. The general conclusions derived from this work may provide a guideline for the design of high performance oscillator.

Keywords: Molecular Dynamics Simultaion; Graphite; Oscillator

层间距对石墨振荡器振荡行为影响的分子动力学模拟*

耿淑芳, 徐建刚

西安邮电大学理学院, 西安
Email: gsf288@163.com

收稿日期: 2013 年 11 月 23 日; 修回日期: 2013 年 12 月 9 日; 录用日期: 2013 年 12 月 14 日

摘要: 用分子动力学方法研究了层间距对石墨振荡器振荡性质的影响。在分子动力学模拟中, 采用 Tersoff-Brenner 势结合 Lennard-Jones 势描述碳原子之间的相互作用。计算结果表明: 层间距对石墨振荡器振荡性质的影响非常明显, 随着层间距的增大石墨振荡器振荡的能量损耗越来越小。当石墨层间距为 0.32 nm 时, 由于石墨层间摩擦力的急剧增大, 石墨振动振幅迅速减低。当石墨层间距大于 0.32 nm 时, 石墨振荡器的振荡频率随着层间距的增大而减少。研究结果为设计高性能的振荡器提供了一定的理论依据。

关键词: 分子动力学模拟; 石墨; 振荡器

1. 引言

随着纳米材料、新兴纳米理论及纳器件结构的快速发展, 纳机电系统(NEMS)被认为是 21 世纪广泛应用的新兴技术。纳机械振荡器是 NEMS 中最重要的基

本器件之一。多年来人们致力于制造高频率纳米振荡器, 然而要获得 10 亿赫兹机械振荡器仍是一个挑战。实验发现^[1,2], 多壁碳纳米管的管间摩擦力很小, 且将内管抽出并释放后内管可以自动缩回。Zheng 等^[3,4]人在此基础上, 提出了利用多壁碳纳米管制作 10 亿

*资助信息: 国家自然科学基金(10902083)的资助。

赫兹机械振荡器的理论预测。随后,国内外学者对碳纳米管高频振荡器的相关领域进行了广泛研究^[5-10]。Guo 等人^[11]用分子动力学模拟方法研究了双壁碳纳米管振荡器的能量耗散,并对其微观机理进行了分析。谢芳等人^[12]模拟了三种碳纳米管振荡器内管的振动运动,并对内管的运动举止进行了详细的描述和分析。Song 等人^[13]研究了 C60 在单壁碳纳米管中的振荡举止,并揭示了碳纳米管的半径和缺陷对其振荡性质影响的微观机制。

当前,研究人员主要集中在对碳纳米管高频振荡器的研究,而对同样具有抽片和自缩现象的单晶材料石墨的相关研究仍然不多^[14]。本文采用分子动力学模拟方法研究了层间距对石墨振荡器振荡行为的影响,并对计算结果进行了详细的分析和讨论。

2. 模拟方法和模拟过程

采用分子动力学模拟方法进行计算机模拟,其结果是否准确的关键在于原子间相互作用势函数的选取。在模拟计算中,本文采用第二代 Tersoff-Brenner 势^[15]结合 Lennard-Jones 势^[16]描述碳原子之间的相互作用。有 N 个原子组成的系统,其总能量为:

$$V_{tot} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} (E_{ij}^{Tersoff-Brenner} + E_{ij}^{LJ}) \quad (1)$$

其中 $E_{ij}^{Tersoff-Brenner}$ 用来描述碳原子间的共价键相互作用,其具体形式为:

$$E_{ij}^{Tersoff-Brenner} = \frac{1}{2} \sum_{ij} f_c(r_{ij}) [V_R(r_{ij}) + \bar{b}_{ij} V_A(r_{ij})] \quad (2)$$

式中 $f_c(r_{ij})$ 为碳原子相互作用截断函数,用于控制计算过程中计算域的大小。 $V_R(r_{ij})$ 、 $V_A(r_{ij})$ 分别为 i 粒子和 j 粒子相互作用的排斥势和吸引势。 \bar{b}_{ij} 是一个与碳原子键角有关的函数。

而 E_{ij}^{LJ} 用来描述碳原子间的非共价键相互作用,其形式为:

$$E_{ij}^{LJ} = 4\varepsilon \left[-\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 + \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} \right], \quad (3)$$

其中,参数 ε 和 σ 分别为 4.2038×10^{-3} eV 和 0.34 nm。在模拟中,只有当碳原子间共价键相互作用为零的时候,才考虑原子间的非共价键相互作用。

分子动力学模拟选用微正则系综(NVE)。模拟算法采用 Verlet 蛙跳法,该算法的优点是使用简便,占用存储量少。模拟采用我们用 C 语言结合 OpenMP 编制的并行代码。在模拟中,时间步长设定为 0.5 fs。石墨的初始模型为 5 层的圆柱形结构,每层石墨的直径为 3.2 nm。为了研究层间距对石墨振荡器振荡行为的影响,本文研究了层间距在 0.32~0.45 nm 范围内的 10 个模型。初始模型如图 1 所示。模拟过程为:先对初始结构进行无约束弛豫,使系统达到稳定的自由态;固定上下各两层碳原子,把中间层原子沿着 x 轴正方向抽出 0.55 nm 后从静止开始释放,然后弛豫 100,000 步。

3. 模拟结果与讨论

图 2 显示了石墨层间距为常规间距 0.34 nm 时,石墨振荡器动能和势能随着振荡时间的变化曲线。

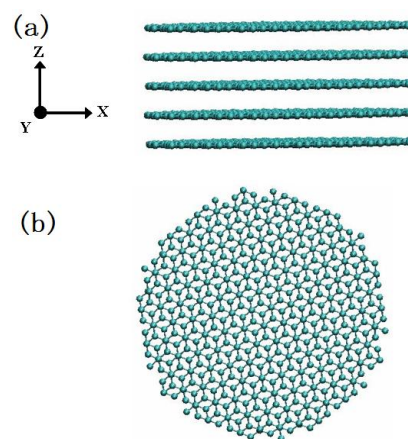


Figure 1. Computational model: (a) Side view; (b) Vertical view
图 1. 计算模型: (a) 侧视图; (b) 俯视图

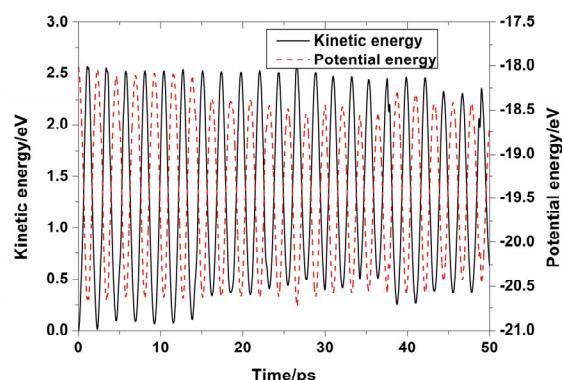


Figure 2. Variation of the kinetic energy and potential energy of the oscillatory with time
图 2. 石墨振荡器动能和势能随时间的变化曲线

从图 2 可以看出, 石墨振荡器动能和势能的振幅随着振荡时间逐渐减少。这是由于在振荡中, 石墨中间层的一部分动能和势能不可避免的要转化为随机的热振荡能, 从而导致了石墨振荡器能量的耗散。从图 2 可以看出, 振荡器的动能和势能均有严格的对应的关系: 动能最大时对应势能最低, 动能最小时对应势能最高, 即动能和势能做交替变化和互换的过程。

为了研究层间距对石墨振荡器振荡行为的影响, 图 3 显示了层间距为 0.32 nm, 0.34 nm, 0.36 nm, 0.45 nm 的四个石墨模型, 中间层在 x 方向的质心位置随振荡时间的变化曲线。从图可以看出, 层间距对石墨振荡行为的影响非常明显。当石墨层间距为 0.32 nm 时, 石墨振荡器的能耗耗散非常明显, 石墨振荡器振幅迅速变小, 而且振幅的变化没有规律。这主要由于石墨层常规间距约为 0.34 nm, 当层间距小于 0.34 nm 后, 层间摩擦力急剧增加使得中间层石墨的滑行阻力增加, 导致了能量的严重耗散, 从而使得石墨振荡器振幅下降。而当层间距大于 0.34 nm 后, 由于层间摩擦力的减少, 使得石墨振荡器的能量衰减不明显, 其振荡振幅基本保持不变。而且从图 3 可以发现, 当石墨层间距大于 0.36 nm 后, 随着层间距的增加, 石墨振荡器的能量衰减幅度变化不大。

图 4 显示了层间距为 0.32 nm、0.34 nm、0.36 nm、0.45 nm 的四个石墨模型, 中间层在 y 方向的质心位置随振荡时间的变化曲线。从图 4 可以看出, 当层间距等于 0.36 nm 和 0.45 nm 时, 石墨振荡器在 y 方向的侧滑幅度非常小。而当层间距为 0.32 nm 和 0.34 nm 时, 中间层在 y 方向的侧滑则非常明显, 这也是层间

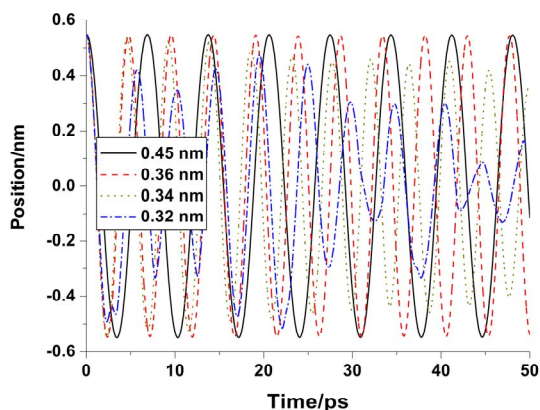


Figure 3. Variation of the x centroid position of the oscillatory with time
图 3. 振荡器中间层在 x 方向的质心位置随时间的变化曲线

距为 0.32 nm 和 0.34 nm 时, 石墨振荡器中间层在 x 方向振幅衰减较快的另一个重要原因。

从图 3 也可以看出, 当层间距大于 0.32 nm 后, 随着层间距的增大, 石墨振荡器的振荡频率逐渐减少。由模拟数据可计算出层间距为 0.34 nm, 0.36 nm, 0.45 nm 的石墨振荡器振荡频率分别为 220.3 GHz, 209.8 GHz 和 145.8 GHz。为了解释这种现象, 图 5 给出了层间距为 0.36 nm 和 0.45 nm 的石墨振荡器其中间层在 x 方向的受力随时间的变化曲线。从图 5 可以看出, 层间距为 0.36 nm 和 0.45 nm 的石墨振荡器中间层的最大力分别为 1.13 nN 和 0.57 nN。这种力来源于上下层原子对中间层原子的范德华力。从我们模拟的 10 组数据可以得出, 随着层间距的增大, 上下层原子对中间层在 x 方向的最大范德华力逐渐减小。这是随着层间距的增大, 石墨振荡器振荡频率减小的根本原因。

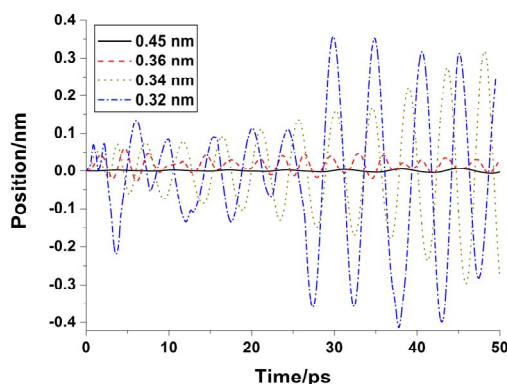


Figure 4. Variation of the y centroid position of the oscillatory with time
图 4. 振荡器中间层在 y 方向的质心位置随时间的变化曲线

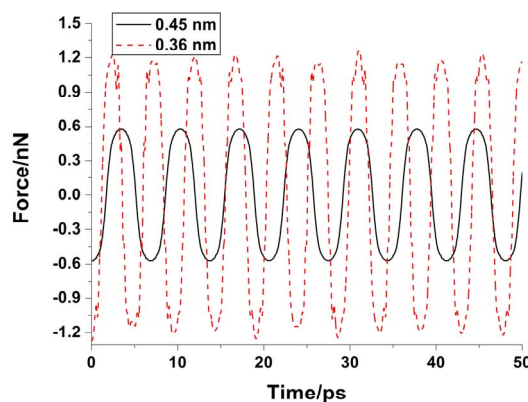


Figure 5. Variation of the force in x direction of the oscillatory with time
图 5. 振荡器中间层在 x 方向的受力随时间的变化曲线

4. 结论

本文用分子动力学模拟方法研究了层间距对石墨振荡器能量耗散和振荡频率的影响。模拟过程中, 采用 Tersoff-Brenner 和 Lennard-Jones 势函数相结合描述原子间的相互作用。研究结果表面: 常规层间距的石墨振荡器的振动频率可达 220.3 GHz; 当层间距小于 0.34 nm 时, 振荡器的能量耗散非常明显, 而当层间距大于 0.34 nm 后, 随着层间距的增大, 石墨振荡器的能量耗散幅度变化不大; 当层间距大于 0.32 nm 后, 随着层间距的增大, 石墨振荡器的振荡频率逐渐减小。本文的研究结果为设计纳米级高频振荡器提供了一定的理论依据。

参考文献 (References)

- [1] J. J. Cumings and A. Zettl (2000) Low-friction nanoscale linear bearing realized from multiwall carbon Nanotubes. *Science*, **289**, 602-604.
- [2] M. F. Yu, O. Lourie, M. J. Dyer, et al. (2000) Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load. *Science*, **287**, 637-640.
- [3] Q. S. Zheng and Q. Jiang (2002) Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators. *Physical Review Letters*, **88**, Article ID: 045503.
- [4] Q. S. Zheng, J. Liu and Q. Jiang (2002) Excess van der Waals interaction energy of a multiwalled carbon nanotube with an extruded core and the induced core oscillation. *Physical Review B*, **65**, Article ID: 245409.
- [5] H. Su, W. A. Goddard, Y. Zhao (2006) Dynamic friction force in a carbon peapod oscillator. *Nanotechnology*, **17**, 5691-5695.
- [6] J. W. Kang, Q. Jiang and H. J. Hwang (2006) A double-walled carbon nanotube oscillator encapsulating a copper nanowire. *Nanotechnology*, **17**, 5485-5489.
- [7] W. L. Guo, W. Y. Zhong and Y. T. Dai (2005) Coupled defect-size effects on interlayer friction in multiwalled carbon nanotubes. *Physical Review B*, **72**, Article ID: 075409.
- [8] J. W. Kang and J. H. Lee (2008) Frequency characteristics of triple-walled carbon nanotube gigahertz devices. *Nanotechnology*, **19**: Article ID: 285704.
- [9] Y. Zhao, C. C. Ma, G. H. Chen, et al. (2003) Energy dissipation mechanisms in carbon nanotube oscillators. *Physical Review Letters*, **91**, Article ID: 175504.
- [10] P. Liu, H. J. Gao and Y. W. Zhang (2008) Effect of defects on oscillation characteristics and instability of carbon nanotube-based oscillators. *Applied Physics Letters*, **93**, Article ID: 083107.
- [11] W. Guo, Y. Guo Y, H. Gao, et al. (2003) Energy dissipation in gigahertz oscillators from multiwalled carbon nanotubes. *Physical Review Letters*, **91**, Article ID: 125501.
- [12] 谢芳, 朱亚波, 张兆慧 (2008) 碳纳米管振荡的分子动力学模拟. *物理学报*, **9**, 5833-5837.
- [13] H. Y. Song and X. W. Zha (2009) Molecular dynamics study of effects of radius and defect on oscillatory behaviors of C60-nanotube oscillators. *Physics Letters A*, **373**, 1058-1061.
- [14] Z. Liu, J. R. Yang, F. Grey, et al. (2012) Observation of micro-scale superlubricity in graphite. *Physical Review Letters*, **108**, Article ID: 205503.
- [15] D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison, et al. (2002) A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **14**, 783-802.
- [16] S. P. Xiao and W. Y. Hou (2009) Fracture of vacancy-defected carbon nanotubes and their embedded nanocomposites. *Physical Review B*, **73**, Article ID: 115406.