

# 金属纳米棒弯曲力学行为的分子动力学模拟\*

吴恒安 倪向贵 王 宇 王秀喜

(中国科学技术大学力学和机械工程系, 合肥 230026)

(2001 年 9 月 30 日收到, 2001 年 12 月 3 日收到修改稿)

纳米结构的力学性能是纳米超微型器件设计的基础, 分子动力学是研究纳米结构力学行为的有效方法. 本文采用镶嵌原子方法模拟金属铜纳米棒的弯曲力学行为. 计算结果表明由于尺寸效应和表面效应的影响, 在纳观尺度下纳米结构表现出与宏观尺度下完全不同的力学特征. 金属纳米棒弯曲力学过程分为初始变形迟滞阶段、线弹性变形阶段和塑性变形阶段. 塑性变形阶段表现出“刚化”、“台阶”和较强的延性等特征.

关键词: 纳米结构, 纳米棒, 弯曲性能, 分子动力学

PACC: 0300, 6146, 6185, 6200

## 1. 引 言

纳米技术和纳米材料科学是 20 世纪 80 年代末发展起来的新兴学科. 由于纳米材料具有许多传统材料无法媲美的奇异特性和非凡的特殊功能, 因此在各行各业中都有空前的应用前景, 它将成为 21 世纪新技术革命的主导中心. 纳米结构是以纳米尺度的物质单元为基础, 按照一定规律构筑或营造一种新的体系, 它包括一维的、二维的和三维的体系, 这些物质单元包括纳米微粒、稳定的团簇或人造超原子、纳米管、纳米棒、纳米丝以及纳米尺寸的空洞. 纳米结构具有纳米微粒的特性, 如量子效应、小尺寸效应、表面效应等, 同时又具有由纳米结构组合引起的新效应, 如量子耦合效应、协同效应<sup>[1]</sup>. 纳米结构体系能方便地通过外加电场、磁场、光场实现对其性能的控制, 这是纳米超微型器件的设计基础. 准一维实心的纳米结构中纵横较小的一般称为纳米棒或杆, 纵横较大的称为纳米丝或线, 二者并无严格的区分<sup>[1]</sup>. 近年来, 纳米机械制造技术迅速发展, 已经可以制造具有空间三维结构的纳米电机系统.

纳米棒(丝)是纳米机械的重要组成部分, 所以纳米棒(丝)的力学性能研究具有十分重要的理论意义和应用价值. 目前, 对此已经开始了实验和理论(数值模拟)方面的研究和探讨. 准一维结构的金属纳米丝纳米棒具有很好的热稳定性和结构稳定

性<sup>[2-4]</sup>, 是纳米机械系统(NEMS)<sup>[5]</sup>的基本元件. 分子动力学模拟结果表明纳米丝、纳米薄膜、纳米单晶块体的拉伸性能存在较大差异<sup>[6]</sup>. 表面原子弛豫降低了纳米丝初始阶段的拉伸弹性模量, 明显影响截面应力的发展与分布<sup>[7]</sup>. 纳米丝的受拉屈服和断裂机理与其尺寸、原子结构和温度密切相关<sup>[8]</sup>. 纳米机械中, 纳米棒受到静电力或其他作用会产生弯曲<sup>[9]</sup>.

分子动力学方法能通过原子运动描述来了解结构变形演化细节, 因而在纳米尺度下物理过程数值模拟中得到了广泛应用<sup>[10-16]</sup>. 本文采用分子动力学方法模拟了纳米棒在横向力作用下的弯曲力学行为, 目的是探讨纳米尺度下结构力学行为与宏观尺度下的差异, 以此指导纳米机械设计.

## 2. 计算方法与模型

分子动力学方法通过原子间的相互作用势, 按照经典牛顿运动定律求出原子运动轨迹及其演化过程, 有助于在原子尺寸了解物质运动变形的细节. 分子动力学计算的一个关键是原子势函数的选取, 简单的对势不能有效模拟金属的力学行为, 必须使用多体势以反映原子的多体作用本质. 常用的多体势方法有镶嵌原子方法(EAM)<sup>[17]</sup>、Finnis-Sinclair 方法<sup>[18, 19]</sup>、有效介质理论(EMT)方法<sup>[20]</sup>和 Glue 势方法<sup>[21]</sup>. 本文采用 EAM, EAM 等方法较之对势不同在于考虑了原子在局域背景电子云密度环境下的结合

\* 国家自然科学基金(批准号: 10172081)及材料力学行为和设计重点实验室资助的课题.

能. EAM 势函数数据由实验参数拟合, 拟合参数包括结合能、玻恩稳定性、弹性常数 ( $C_{11}, C_{12}, C_{44}$ )、空位形成能、堆垛层错能等<sup>[22]</sup>.

时间积分格式采用 Verlet 蛙跳法的速度形式<sup>[23]</sup>, 如图 1 所示, 该算法的一个优点是只需要在内存中存储一个时刻的变量.

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \mathbf{a}(t)\Delta t^2/2, \\ \mathbf{v}(t + \Delta t/2) &= \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}(t)\Delta t/2, \\ \mathbf{a}(t + \Delta t) &= -\nabla E(\mathbf{r}(t + \Delta t))/m, \\ \mathbf{v}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}(t + \Delta t/2) + \mathbf{a}(t + \Delta t)\Delta t/2. \end{aligned} \quad (1)$$

方形纳米棒初始构形按照理想晶格点阵排列, 如图 1 所示.  $x, y, z$  坐标轴分别对应面心立方晶体的  $[100][010][001]$  晶向. 由于是模拟有限长度的纳米棒的力学行为, 故三个方向都不采用周期边界条件, 而在模拟纳米丝的力学行为时, 一般在长度方向采用周期边界条件<sup>[23]</sup>, 以模拟无限长的情况. 采用 Nose-Hoover 方法进行等温调节<sup>[24]</sup>, 温度控制在 0.01K, 以避免热激活的复杂影响. 铜的晶格常数  $a = 0.361\text{nm}$  ( $10^{-10}\text{m}$ ). 本文计算了 4 个不同细长比的纳米棒 (对应宏观的梁结构), 参数分别为 (1)  $10a \times 10a \times 33a$  (2)  $10a \times 10a \times 63a$  (3)  $10a \times 10a \times 103a$  (4)  $10a \times 10a \times 153a$ , 原子个数分别为 13200, 25200, 41200, 61200. 模拟过程为先对初始构型进行无约束弛豫, 表面原子将发生弛豫运动, 使得系统能量降低, 达到稳定的自由初态. 载荷和边界条件如图 1 所示, 弛豫后固定下端的三层原子不动, 对上端两层每个原子 (共 800 个) 施加横向力, 横向力逐步施加, 每步增量为  $20\text{pN}$  ( $\text{atom} \cdot 20\text{ps}$ ), 每个模型施加 400 个载荷增量步, 其他表面原子边界条件为自由 (无约束) 边界.

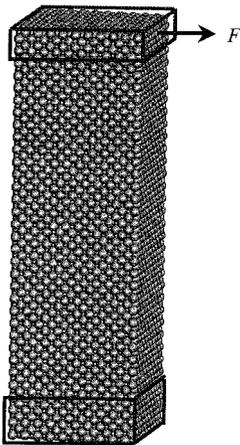


图 1 纳米棒原子模型

### 3. 计算结果与分析

计算模型类似于连续介质力学中的悬臂梁, 一端固支, 另一端受到横向作用力, 纳米棒产生弯曲变形. 图 2 为模型 3 施加 100 个载荷增量步时的变形情况. 采用上端截面中心原子的横向位移作为此弯曲变形的量度. 图 3 为 4 个模型的位移-载荷曲线.

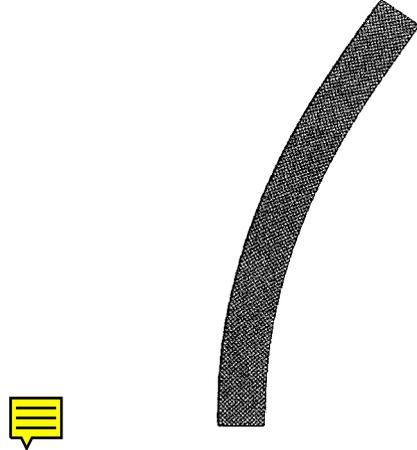


图 2 纳米棒弯曲原子构型

为了揭示结构在宏观大尺寸和纳观微尺寸下不同的力学行为表现, 采用连续介质理论计算了梁弹性弯曲的理论解, 用有限元软件 ABAQUS 计算了梁弹塑性弯曲的数值解. 图 4 为悬臂梁弯曲计算模型, 梁长  $L$ , 横截面  $b \times b$ , 弹性模量  $E$ . 弹性弯曲自由端挠度的材料力学解为

$$w = PL^3/3EI = 4PL^3/Eb^4. \quad (2)$$

图 5 为用 ABAQUS 模拟弹塑性弯曲的数值结果. 由于只是定性对比, 图 5 未标出具体数值, 拐点处即表示进入塑性阶段.

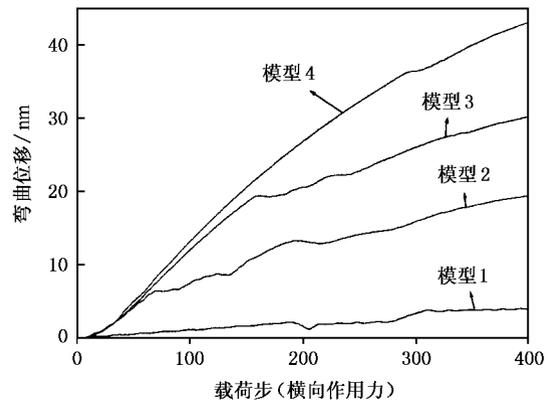


图 3 位移-载荷曲线

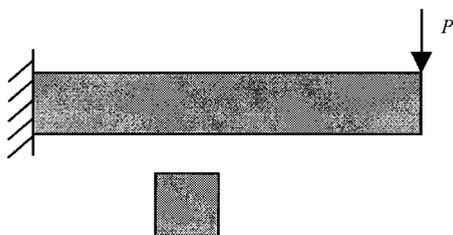


图 4 悬臂梁弯曲力学模型

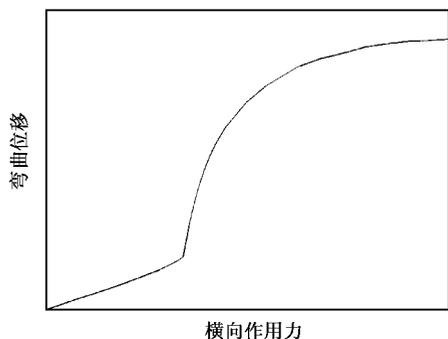


图 5 悬臂梁弹塑性弯曲解

整个加载变形过程的初始阶段,纳米棒随着横向外力作用发生弯曲,但原子仍位于规则的晶格点阵排列.随着变形逐步增大,在纳米棒靠近固支端的外表面出现位错,纳米棒表面能量高是导致位错发自自由表面的原因<sup>[7]</sup>.位错区域不断扩大,根部少量金属原子间断键形成缺口.最后,即便发生几乎 $90^\circ$ 的弯曲,纳米棒仍未完全断裂,表现出良好的延性.

研究纳米棒的弯曲力学过程和行为,可以发现与宏观尺度连续介质理论下的梁的力学行为存在较大差异,表现出显著的尺寸效应.

图 6 为初始阶段的位移-载荷曲线,可以观察到一个有趣的现象——初始变形迟滞,即当横向外力未达到一定数值时几乎没有横向的位移.这可以从纳米棒晶体原子结构得到解释:当外作用力不是足够大时,可以通过弛豫来调整局部原子之间的距离,这样不平衡的内力部分可以与外作用力相平衡,而不会产生整体的位移.由此可以预知,引起整体变形的“起动力”将只与局部晶格结构有关.计算结果表明 4 个不同长细比模型的“起动力”相同,验证了这一点.另外纳米棒端部自由表面存在较大的表面应力,导致局部晶格畸变,可能也是产生这一现象的原因之一.

当作用力逐步增大超过“起动力”以后,进入线弹性阶段.按照连续介质理论,由(2)式得到位移-载

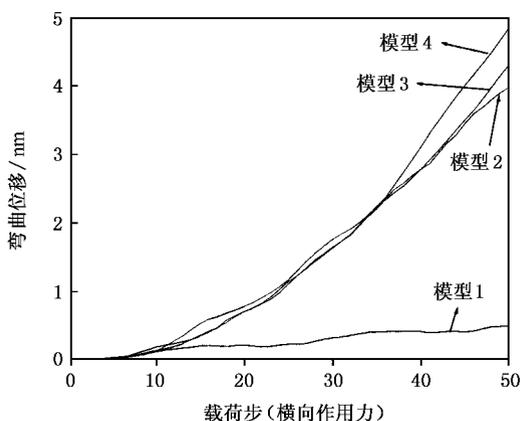


图 6 位移-载荷曲线(初始)

荷曲线的斜率应该与梁长度的三次方成正比.但在纳观尺度下,纳米棒表现出完全不同的特征.由图 3 可以看出,在线弹性阶段,不同模型的曲线斜率只有很小的差别.这充分证明在纳观尺度下对于纳米结构而言,宏观连续介质理论已经完全失效,一些由连续介质理论导出的定性的物理规律也同样失效.

随着作用力不断增加,位错开始产生、运动,并不断增多,纳米棒进入塑性阶段,位移载荷曲线不再为线性.模型(1)(2)(3)(4)位移载荷曲线的拐点所对应的载荷步分别为 16, 71, 158, 298, 长梁柔性较大,能承受更大的弹性变形,故较迟进入塑性,这点与连续介质理论定性符合.注意到图 5 的拐点处,进入塑性后按照连续介质理论,塑性刚度比弹性刚度要小,所以更容易变形,故曲线斜率增大,而此曲线斜率在随后减小是因为计算考虑了大变形的结果.而图 3 则表明纳米棒在进入塑性后出现“刚化”,这也是小尺寸的特征结果.位错阻碍了原子的运动和变形,小尺寸纳米结构变形空间有限,而固支端也必然对整个纳米棒的变形产生约束.塑性阶段的位移-载荷曲线还表现为“台阶”状,这是由于不同体系的位错不断产生和运动的结果.

## 4. 结 论

金属纳米棒弯曲的分子动力学模拟表明,在纳米尺度下纳米结构的力学行为与宏观尺度下结构力学行为存在本质的差异,连续介质理论已经完全失效,一些从连续介质理论导出的定性的物理规律也不再适用.金属纳米棒弯曲力学过程分为初始变形迟滞阶段、线弹性变形阶段和塑性变形阶段.塑性变

形阶段表现出“刚化”、“台阶”和较强的延性等特征。力学性能是纳米机械设计的基础之一,分子动力学

是研究力学性能的有效方法,纳米结构这些特有的力学性能将用于指导纳米机械设计。

- [ 1 ] Zhang L D and Mou J M 2001 *NanoMaterial and NanoStructure*( Beijing Science Press ) p12 ( in Chinese ) [ 张立德、牟季美 2001 纳米材料和纳米结构(北京 科学出版社)第 12 页 ]
- [ 2 ] Tosatti E *et al* 2001 *Science* **291** 288
- [ 3 ] Torres J A *et al* 1999 *Surf. Sci.* **426** 1441
- [ 4 ] Jiang Q , Zhang Z and Wang Y W 2000 *Mat. Sci. Eng. A-Struct.* **286** 139
- [ 5 ] Craighead H G 2000 *Science* **290** 1532
- [ 6 ] Liang H Y , Wang X X , Wu H A and Wang Y 2001 *J. Univ. Sci. Technol. China* **31** 454 ( in Chinese ) [ 梁海弋、王秀喜、吴恒安、王宇 2001 中国科学技术大学学报 **31** 454 ]
- [ 7 ] Liang H Y , Ni X G and Wang X X 2001 *Acta Metall. Sin.* **37** 833 ( in Chinese ) [ 梁海弋、倪向贵、王秀喜 2001 金属学报 **37** 833 ]
- [ 8 ] Mehrez H and Ciraci S 1997 *Phys. Rev. B* **56** 12632
- [ 9 ] Poncharal P , Wang Z L , Ugarte D and Heer W A 1999 *Science* **283** 1513
- [ 10 ] Dai Y B *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 244 ( in Chinese ) [ 戴永兵等 2001 物理学报 **50** 244 ]
- [ 11 ] Chang M , Sun W , Xing J H and Wang Y M 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 1319 ( in Chinese ) [ 常明、孙伟、邢金华、王煜明 1997 物理学报 **46** 1319 ]
- [ 12 ] Chang M , Sun W , Guo C H and Yang B H 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 1326 ( in Chinese ) [ 常明、孙伟、郭长海、杨保和 1997 物理学报 **46** 1326 ]
- [ 13 ] Sun W , Chang M and Yang B H 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 591 ( in Chinese ) [ 孙伟、常明、杨保和 1998 物理学报 **47** 591 ]
- [ 14 ] Chang M , Yang B H and Chang H 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1215 ( in Chinese ) [ 常明、杨保和、常皓 1999 物理学报 **48** 1215 ]
- [ 15 ] Wen Y H , Zhou F X and Liu Y W 2001 *Chin. Phys.* **10** 407
- [ 16 ] Ye Z Y and Zhang Q Y 2001 *Chin. Phys.* **10** 329
- [ 17 ] Daw M S and Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [ 18 ] Finnis M W and Sinclair J E 1984 *Phil. Mag. A* **50** 45
- [ 19 ] Xu Y , Pan Z Y and Wang Y X 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 88 ( in Chinese ) [ 徐毅、潘正瑛、王月霞 2001 物理学报 **50** 88 ]
- [ 20 ] Jacobsen K W , Norskov J K and Puska M J 1987 *Phys. Rev. B* **35** 7423
- [ 21 ] Ercolossi F , Parrinello M and Tosatti E 1988 *Phil. Mag. A* **58** 216
- [ 22 ] Doyama M and Kogure Y 1999 *Comp. Mat. Sci.* **14** 80
- [ 23 ] Allen M P and Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* ( Oxford :Clarendon Press ) p78
- [ 24 ] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695

## Molecular dynamics simulation on bending behaviour of metal nanorod<sup>\*</sup>

Wu Heng-An Ni Xiang-Gui Wang Yu Wang Xiu-Xi

( Department of Mechanics and Mechanical Engineering , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China )

( Received 30 September 2001 ; revised manuscript received 3 December 2001 )

### Abstract

The mechanical behaviour of nanostructure is the basis of nanodevice design , and molecular dynamics method is a valid method for investigating this behaviour. Bending behaviour of Cu nanorod is simulated by the embedded atom method. The simulation results show that the mechanical behaviour in nanoscale is very different from that in macroscale. This difference results from the size effect and surface effect. The bending procedure of a metal nanorod consists of three steps : initial deformation delay , line elastic deformation , plastic deformation. In the plastic stage , there appear some characteristic behaviours such as rigidity reinforcement , step up , and considerable ductility to be seen.

**Keywords :** nanostructure , nanorod , bending behaviour , molecular dynamics

**PACC :** 0300 , 6146 , 6185 , 6200

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10172081 ) , and the Foundation of the State Key Laboratory of Mechanical Behaviour and Design of Materials , China.