

# SiC 纳米杆的弛豫性能研究\*

田建辉<sup>1)</sup> 韩旭<sup>1)†</sup> 刘桂荣<sup>1)</sup> 龙述尧<sup>2)</sup> 秦金旗<sup>2)</sup>

1) 湖南大学汽车车身先进设计制造国家重点实验室,长沙 410082)

2) 湖南大学力学与航空航天学院,长沙 410082)

(2006 年 5 月 24 日收到,2006 年 6 月 19 日收到修改稿)

采用 Tersoff 势对 SiC 弛豫性能进行了分子动力学模拟.模拟了 SiC 在弛豫过程中的动态平衡变化过程,研究了表面效应和小尺寸效应对原子位置、原子能量分布的影响.模拟结果表明, SiC 纳米杆受表面效应和小尺寸效应的影响很大,在不加外载和约束的情况下,出现了不同于宏观 SiC 杆的弯扭屈伸现象,最终形成了带有一定扭转曲量、总能量达到最低的稳定状态.

关键词: SiC 纳米杆,分子动力学,表面效应,小尺寸效应

PACC: 0300, 6146, 6185, 6200

## 1. 引 言

微机械(MEMS)的发展以及纳米机械(NEMS)的发展<sup>[1]</sup>对基本纳米器件的研究提出了更深的要求.基本的纳米器件材料的研究是从纳米杆、纳米丝<sup>[2]</sup>的研究开始的.由于纳米器件体积小、比表面大、结构的力学性能随尺度的改变而改变,因此纳米尺度的力学性能和结构研究是超微型纳米器件设计的基础,而纳米杆和纳米丝作为纳米器件的基本构件,对其力学行为进行详细探讨具有十分重要的理论意义和应用价值.科学技术的进步以及扫描隧道显微镜(STM)和原子力显微镜(AFM)的出现,极大的推动了纳米尺度下材料测试技术的发展,也为纳米尺度下的力学实验提供了一个有力的武器<sup>[3]</sup>.但是纳米材料的许多力学特性目前还是很难通过实验手段获得,所以分子动力学(MD)模拟<sup>[4-6]</sup>技术被广泛采用.利用分子动力学模拟,可以了解纳米材料的一些力学性能.本文采用分子动力学方法,模拟研究了 SiC 纳米杆的弛豫性能,对弛豫过程进行了跟踪分析.

在纳观结构里面,由于表面效应和小尺寸效应的影响,导致纳米器件初始便存在本征应力,对纳米器件进行计算前的弛豫研究就显得非常重要.不同材料由于本身构型不同,导致弛豫现象不同,纳米铜

杆在弛豫过程中出现了长度缩短截面增大现象<sup>[6]</sup>,而本文研究的 SiC 纳米杆弛豫却出现了弯扭屈伸现象.

分子动力学方法通过直接计算原子间的作用力,跟踪体系的原子运动过程,从而了解体系的演化发展.在分子动力学的计算中,势函数的选取直接影响原子作用力的计算,从而影响体系的原子运动,所以,势函数的选取尤为重要.势函数可以采用对势、镶嵌原子方法(EAM)<sup>[7]</sup>、Finnis-Sinclair 方法<sup>[8]</sup>、有效介质理论(EMT)<sup>[9]</sup>及 Glue 势<sup>[10]</sup>方法等.本文采用 Tersoff 提出的 Tersoff 作用势<sup>[11,12]</sup>.

## 2. SiC 弛豫过程的分子动力学模拟

### 2.1. SiC 纳米杆模型的建立

SiC 基本模型是由以下形状的晶胞构成,每个晶胞里面含有 C—Si 键四对,C 原子和 Si 原子各自按面心立方晶格排列,元胞中的 C—Si 键也按面心立方晶格构成(图 1).

由以上晶胞作为基本晶胞形成 SiC 原子模型,图 1 中  $x, y, z$  坐标轴分别对应晶胞的 [100] [010], [001] 晶向.纳米杆由  $4 \times 4 \times 24$  个晶胞组成,共有原子 3072 个,其中 C 原子和 Si 原子各一半共 1536 个.

\* 国家自然科学基金(批准号:30372031)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: hanxu@hnu.cn

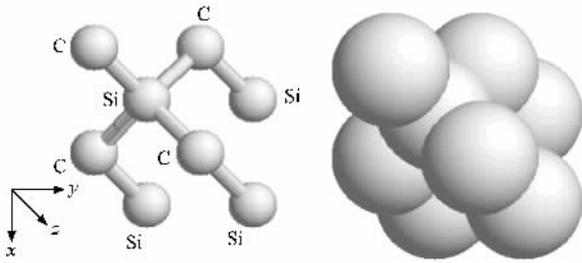


图1 单个晶胞内的 SiC 基本构成 (两种表示方式:带键表示和不带键表示)

SiC 的晶格常数  $a_0$  取 0.432 nm, 则纳米杆的实际尺寸为  $1.782 \text{ nm} \times 1.782 \text{ nm} \times 10.368 \text{ nm}$ , 其基本模型如图 2 所示.

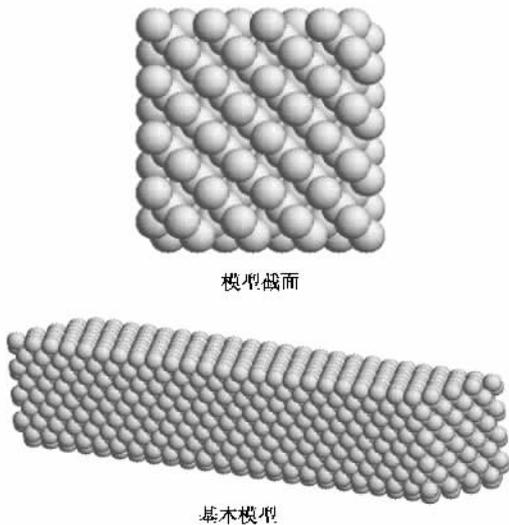


图2 SiC 纳米杆的初始模型

## 2.2. 模拟方法及过程

模拟时分子作用势选取适合于 C—Si 键组合的 Tersoff 作用势函数. Tersoff 势是一个三体势函数, 此势函数一般用于 Si, C, Ge 等, 表示形式为<sup>[11]</sup>

$$E = \sum_i E_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad (1)$$

其中

$$V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})], \quad (2)$$

这里势能分解为场能  $E_i$  和键能  $V_{ij}$ ,  $r_{ij}$  是原子  $i$  和原子  $j$  的距离,  $f_A$  和  $f_R$  分别是对势的吸引项和排斥项,  $f_C$  是光滑截断函数, 其具体表示形式见文献 [11].

模型中 C 原子的质量取 12.01, Si 原子的质量取 28.086, 外表面为自由边界条件, 不加任何外力和

约束. 为避免热激活引起的原子复杂效应, 将温度控制在 0.01 K, 采用 Nose-Hoover 方法<sup>[13]</sup> 进行等温模拟. 时间步长取 0.8 fs, 整个计算模拟过程弛豫  $6 \times 10^5$  步 (0.48 ns). 运动方程采用速度形式的 Verlet 方法<sup>[4]</sup> 求解. SiC 纳米杆内部由于无位错缺陷, 表面原子数目比例相对变大, 有很高的表面过剩能, 表面原子对纳米力学性能有举足轻重的影响, 加上小尺寸效应的影响, 使开始不受外力和约束的纳米杆出现了和宏观尺度下 SiC 杆不同的力学特性.

## 3. 结果分析与讨论

### 3.1. 总能量变化及弯扭屈伸现象

对 SiC 纳米杆进行  $6 \times 10^5$  步 (0.48 ns) 的弛豫计算, 图 3 给出了每弛豫  $1 \times 10^4$  步输出纳米杆的总能量. 从弛豫过程的能量-时间图 (图 3) 上可以看出, 模型初始弛豫时, 由于表面原子数目比例相对较大, 有很高的表面过剩能, 原子极不稳定, 为了达到较低的能量状态, 原子向能量较低的区域运动, 从而出现能量的剧烈波动, 波动幅值范围达到了  $7 \times 10^{-23} \text{ J}$ . 随着弛豫的进行, 能量波动幅度慢慢减小, 弛豫进行到  $4.0 \times 10^5$  步 (0.32 ns) 时, 波动幅值范围仅有  $5 \times 10^{-24} \text{ J}$ , 为开始波动幅值范围的 7%, 能量大小基本已经稳定在  $-8.87732 \times 10^{-19} \text{ J}$  左右, 此时可视为能量已经处于稳定状态. 直到弛豫进行到  $6 \times 10^5$  步, 能量都在  $-8.87732 \times 10^{-19} \text{ J}$  左右波动. 由此可见, 当弛豫到  $4.0 \times 10^5$  步 (0.32 ns) 时, SiC 纳米杆达到稳定状态.

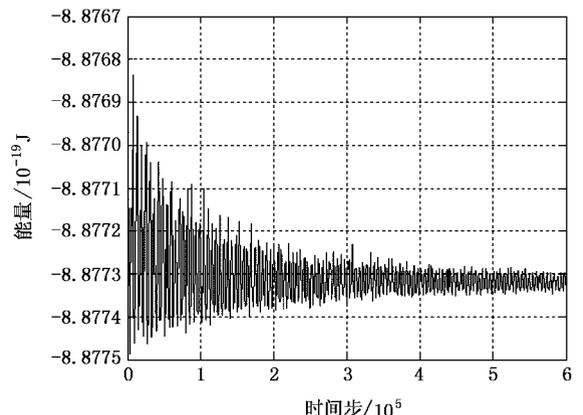


图3 能量-时间步图

由总能量变化得出的结论也可以通过跟踪原子

绝对位移量得到. 取近端面 2 个原子为跟踪原子, 跟踪原子 1 和 2 的绝对坐标分别为(0.81, 0.81, 9.666)和(0.81, 0.81, 10.098), 考察原子在弛豫过程中的  $x$  和  $y$  方向的绝对位移量(图 4(a))(b)). 由图 4 可知, 前 0.32 ns 内跟踪原子绝对位移量变化比较剧烈, 出现很大的位移波动, 两个原子间的相对位移也变化剧烈, 说明纳米杆此时处于极不稳定状态. 到 0.32 ns 时, 两个原子的绝对位移量开始稳定, 跟踪原子 1 在  $x$  和  $y$  方向的位移量基本在 0.023 nm 上下微幅波动, 跟踪原子 2 在  $x$  和  $y$  方向的位移量基本在 0.04 nm 上下微幅波动, 而且两个跟踪原子在 0.32 ns 后的相对位置几乎不发生变化, 这说明在 0.32 ns 后纳米杆已经处于稳定平衡状态. 由跟踪原子得出的稳定平衡时刻及相关结论与能量变化得出的结论相吻合.

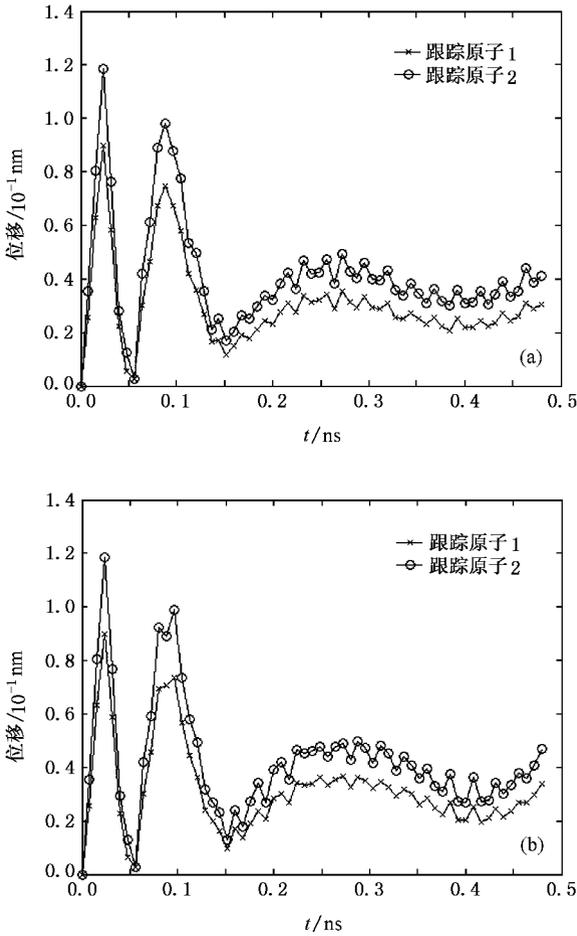


图 4 跟踪原子位移-时间图 (a)跟踪原子在  $x$  方向的绝对位移 (b)跟踪原子在  $y$  方向的绝对位移

由图 4 的跟踪原子绝对位移图可以发现当纳米杆弛豫到  $3 \times 10^4$  步(0.024 ns),  $1.2 \times 10^5$  步(0.096 ns)的时候原子的绝对位移量出现最大, 此时应该是

SiC 纳米杆变形最大的时候, 当纳米杆弛豫到  $7 \times 10^4$  步(0.056 ns),  $1.9 \times 10^5$  步(0.152 ns)的时候原子的绝对位移量出现最小, 甚至在  $7 \times 10^4$  步(0.056 ns)时近乎为零, 此时纳米杆的变形最小. 取这四种状态及 0.48 ns 时的准平衡状态来观察 SiC 纳米杆的弯扭屈伸现象.

为了更好的观察弯扭屈伸现象, 对于变形量剧烈的原子构型图给出了变形状态的两个观察方位图. 而对于变形量最小的原子构型图, 则给出了初始模型, 以便与之比较. 可以发现, 当模型弛豫到  $3 \times 10^4$  步(0.024 ns)时(图 5(a)),  $x$  和  $y$  方向已经出现了很大的弯曲, 弯曲的同时也出现了扭转现象, 弯曲并不是两个方向的纯弯曲, 这是由于小尺寸效应和表面效应所导致的结果; 当模型继续弛豫到  $7 \times 10^4$  步(0.056 ns)(图 5(b))时, 此时的弯曲和扭转减小,

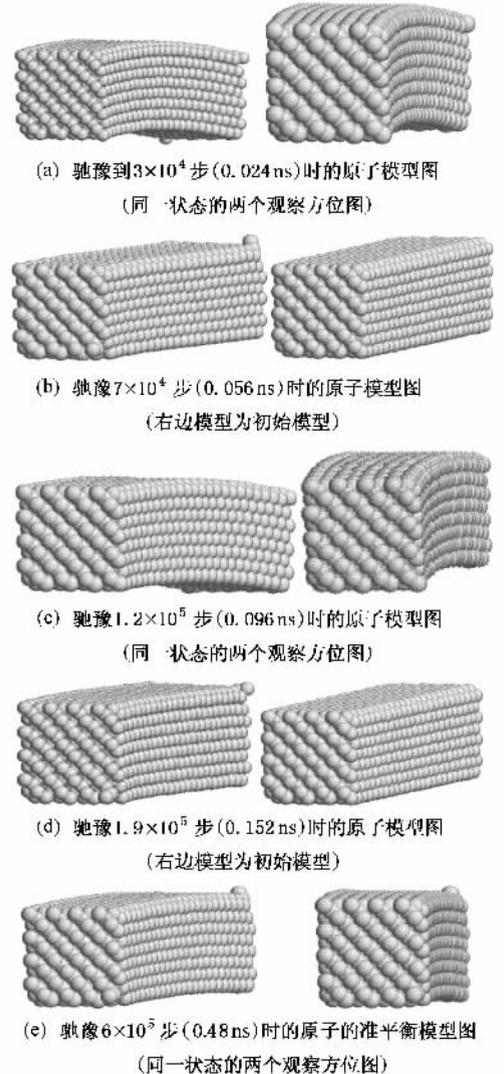


图 5 弛豫过程中的纳米杆的弯扭屈伸变化图

甚至消失,模型出现了“复原现象”,近似回到了初始模型阶段,这个阶段过后,弯曲扭转现象再次开始出现,并且急剧增大,弛豫到  $1.2 \times 10^5$  步 ( $0.096 \text{ ns}$ ) (图 5(c))时,两个方向的弯曲扭转再次达到一个峰值,在此阶段后,模型的扭转弯曲量反向开始减小,直到  $1.9 \times 10^5$  步 ( $0.152 \text{ ns}$ ) (图 5(d))时,模型再次出现了“复原现象”,从弛豫  $1.9 \times 10^5$  步 ( $0.152 \text{ ns}$ ) 后,模型的扭转弯曲再次开始增大到一定的状态后,不再出现反复扭转弯曲现象,而是保持一定弯曲量和扭转量进入最后的稳定成形状态 (图 5(e)).

整个弛豫过程中 SiC 纳米杆出现了扭转弯曲,反扭转弯曲,复原,再次扭转弯曲,反扭转弯曲,再次复原,扭转弯曲,最后形成带有一定扭转弯曲量的稳定成形模型.

随着弛豫时间的不同 SiC 纳米杆出现两次周期性的弯扭屈伸回复现象,并且这种弯扭屈伸的强度随时间在减弱,在足够长时间内会收敛于稳定状态.这种现象是由于纳米杆的小尺寸效应和表面效应作用的结果.

### 3.2. 截面原子位置及截面能量分布图

研究发现,在弛豫过程中,C—Si 键始终作为一个整体键在运动,也就是 C—Si 键中 C 原子和 Si 原子的相对距离在弛豫过程中始终不变,从而 C—Si 键的运动轨迹和单独的 C 原子或 Si 原子的运动轨迹是相同的.取 C—Si 或 C 原子或 Si 原子进行运动轨迹的研究其结果是等同的,基于这一点就可以简化我们所研究的问题.这里以 C 原子作为研究对象.取弛豫末  $6 \times 10^5$  步 ( $0.48 \text{ ns}$ ) 纳米杆的始-中-末三个截面,做出原子位置变化图 (图 6) 和截面能量分布图 (图 7).

在图 6 中,空心圆代表截面原子初始位置,实心圆点代表弛豫末  $6 \times 10^5$  步 ( $0.48 \text{ ns}$ ) 的原子位置,箭头代表原子从初始位置运动到弛豫末位置的轨迹方向.由原子位置截面图可以看出,纳米杆两端面原子在弛豫过程中,在弛豫时间内总体的原子运动轨迹是向沿对角线方向运动,纳米杆中部原子的运动则出现正好和杆端原子运动完全相反的方向,沿反对角线方向运动.纳米杆中原子的这种运动,导致了扭转弯曲现象中弯曲效应的产生.研究还发现,靠近纳米杆上下表面的原子运动方向与杆内原子的运动方向有所不同,其方向与对角线成一定的夹角而不是对角线方向,纳米杆中部的近表面原子甚至出现了

沿表面方向运动的趋势,这是由于纳米尺度下的小尺寸效应所引起的,这样的原子运动,导致了弯扭屈伸现象中扭转效应的产生.两种现象共同作用,最终形成了带有一定扭转弯曲量的稳定成形模型.

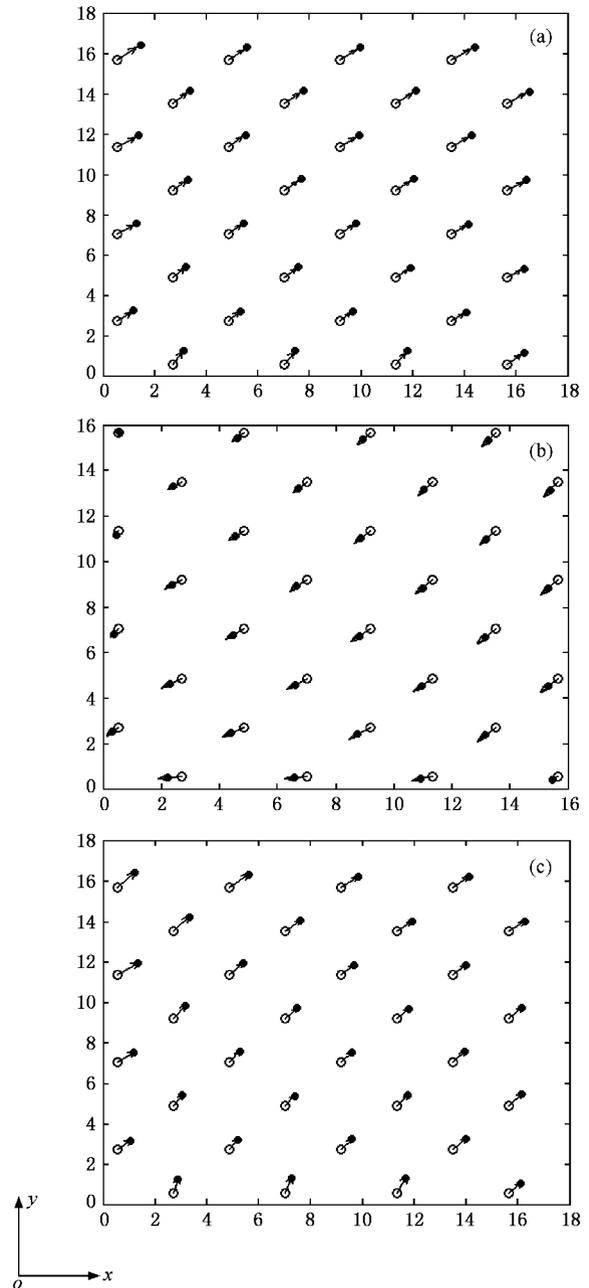


图 6 弛豫前后纳米杆始-中-末三截面原子位置变化图 (a) 始端 (b) 中端 (c) 末端

对于任何形态的稳定状态,总是遵守能量最低原理,对于 SiC 纳米杆,小尺寸与相对表面比较大形成了小尺寸效应和表面效应,相对表面比较大导致了表面很高的断键过剩能,从而形成能量的相对不

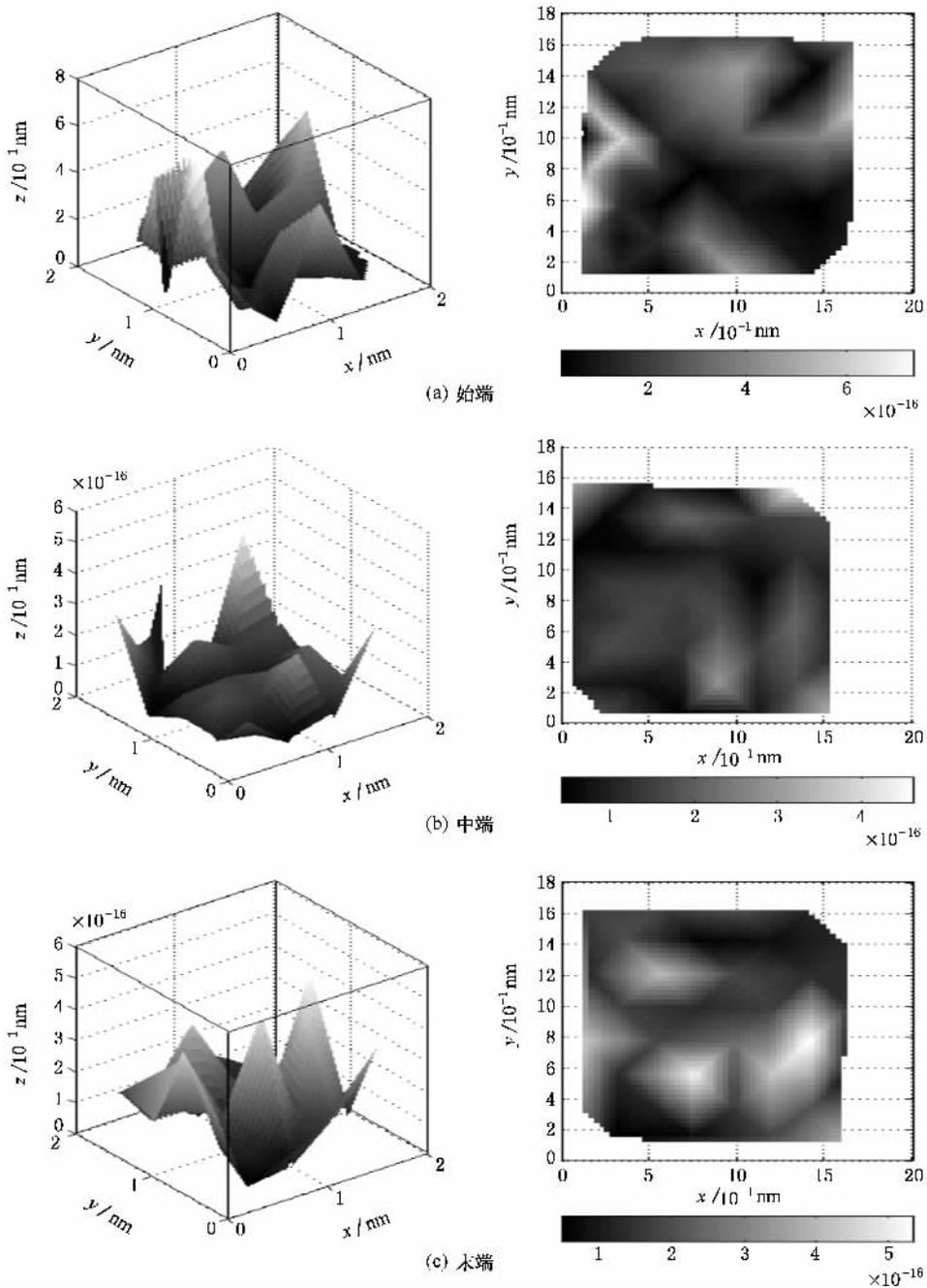


图7 弛豫后纳米杆三个截面能量分布图(三维及平面图形显示)

稳定<sup>[6]</sup>随着弛豫的进行,能量要向稳定的最低能量状态进行.一定程度的弯曲扭转状态正是最低能量的稳定状态.此状态是表面能量的重新分配和转移的结果.很高的表面能使初始的SiC分子发生运动,以便达到纳米杆总体能量最低状态.到弛豫末纳米杆稳定成形时,由纳米杆杆端截面能量分布图(图7)可以看出,原子的高表面能已经分散到杆内不同的区域,达到了总体能量的最低,纳米杆中部截面的能量除角点能量偏高外其他区域的能量近乎平

均分配.从总体来看, SiC 纳米杆的弛豫使每个原子获得更理想的电子云密度<sup>[14]</sup>,从而使杆的总能量趋向最低.

## 4. 结 论

纳观结构由于本身的小尺寸以及相对大表面,导致了不加载时已经有本征应力的存在,要进一步研究其他力学性能进行弛豫显得非常重要. SiC 纳

米杆由于小尺寸效应和表面效应的影响,在不受外力和约束的情况下进行弛豫,出现了不同于宏观SiC杆的弯扭屈伸现象.SiC纳米杆弛豫过程中,杆端原子总体运动方向沿对角线方向,中部原子运动沿反对角线方向,靠近纳米杆上下表面的原子运动方向与对角线成一定的夹角,纳米杆中部的近表面

原子出现了沿表面方向运动的趋势.从能量最低角度看,在弛豫过程中,SiC纳米杆每个原子为了获得更理想的电子云密度,达到纳米杆总体最低能量分布状态,则会产生原子运动,出现弯扭屈伸现象,寻求能量最低是产生弯扭屈伸的直接原因.

- [ 1 ] Craihead H G 2000 *Science* **290** 1532 ( in Chinese ] 梁海弋、倪向贵、王秀喜 2001 *金属学报* **37** 833 ]
- [ 2 ] Zhang L D , Mou J M 2001 *NanoMaterial and Nanostructure* ( Beijing : Science Press ) ( 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 ) ]
- [ 3 ] Fu M , Wang H C , Hong Y S 2000 *Adv. in Mech.* **30** 391 ( in Chinese ) [ 傅 敏、王全才、洪友士 2000 *力学进展* **30** 391 ]
- [ 4 ] Allen M P , Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* ( Oxford : Clarendon Press )
- [ 5 ] Rapaport D C 1995 *The Art of Molecular Dynamics Simulation* . UK ( Cambridge : Cambridge University Press ) p42
- [ 6 ] Liang H Y , Ni X G , Wang X 2001 *Acta Metall. Sin.* **37** 833
- [ 7 ] Masao D 1997 *Nano Struct. Mater.* **9** 689
- [ 8 ] Finnis M W , Sinclair J E 1984 *Phil. Mag. A* **50** 45
- [ 9 ] Jacobsen K W , Norskov J K , Puska M J 1987 *Physical Review B* **35** 7423
- [ 10 ] Ercolessi F , Parrinello M , Tosatti E 1988 *Philosophical Magazine A* **58** 216
- [ 11 ] Tersoff J 1988 *Phys. Rev. B* **37** 6991
- [ 12 ] Tang M J , Yip S 1995 *Phys. Rev. B* **52** 15150
- [ 13 ] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
- [ 14 ] Cammarata R C 1994 *Prog. in Surf. Sci.* **46** 1

## Investigation of the SiC nano-bar relaxation characteristics<sup>\*</sup>

Tian Jian-Hui<sup>1)</sup> Han Xu<sup>1)†</sup> Liu Gui-Rong<sup>1)</sup> Long Shu-Yao<sup>2)</sup> Qin Jin-Qi<sup>2)</sup>

1 ) *State Key Laboratory of Advanced Design and Manufacture for Vehicle Body , Hunan University , Changsha 410082 , China* )

2 ) *College of Mechanics and Aerospace , Hunan University , Changsha 410082 , China* )

( Received 24 May 2006 ; revised manuscript received 19 June 2006 )

### Abstract

The SiC nano-bar relaxation has been investigated using MD method. The Tersoff potential is adopted as the potential function. The characteristic of the homeostasis of SiC nano-bar relaxation is demonstrated. The nano-bar is affected by the strong surface effect and small size effect. The phenomena of torsion and bending is observed during the relaxation.

**Keywords :** SiC nano-bar , MD method , surface effect , small size effect

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

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10372031 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : hanxu@hnu.cn