

应变石墨烯纳米带谐振特性的分子动力学研究*

顾芳^{1)†} 张加宏²⁾ 杨丽娟³⁾ 顾斌¹⁾

1)(南京信息工程大学数理学院, 南京 210044)

2)(南京信息工程大学电子与信息工程学院, 南京 210044)

3)(宿迁学院基础部, 宿迁 223800)

(2010年7月20日收到; 2010年8月26日收到修改稿)

从动能转换与守恒原理出发,在微正则(NVE)系综下,采用COMPASS力场对石墨烯纳米带及其应变传感器的谐振特性进行了分子动力学模拟.研究发现,非线性响应主导了石墨烯纳米带的动态行为,而其超高的基波频率则与长度和边界条件密切相关;单轴拉伸应变对石墨烯纳米带基波频率的影响显著且强烈依赖于边界条件,四边固支型应变石墨烯纳米带具有更高的频移,其灵敏度可高达7800 Hz/nanostrain,远大于相同长度碳纳米管应变传感器的灵敏度;石墨烯纳米带及其应变传感器的谐振特性均与手性无关.本文所得结果表明,由于超低的密度、超高的基波频率与灵敏度且无需考虑手性的影响,通过适当地裁剪尺寸和设定边界条件,石墨烯纳米带可用于设计新一代的纳机电系统(NEMS)高频谐振器与应变传感器.

关键词: 石墨烯纳米带, 分子动力学, 应变, 基波频率

PACS: 61.64.-w, 71.15.Pd, 68.35.Gy, 06.30.Ft

1. 引言

石墨烯作为一种性能优异的新型碳基纳米材料^[1],新奇的力、电、光、磁特性决定了它在纳电子、光电子、磁电子器件^[2-9]以及NEMS^[10-12]等领域有着广泛的应用前景.因而,继2004年Novoselov等人^[1]利用机械劈裂力学微加工方法制备出石墨烯之后,关于石墨烯及其纳米带(具有开放边的带状石墨烯^[13-20])的研究越来越成为人们关注的热点.其中焦点之一是研究石墨烯及其纳米带的谐振行为^[10-12, 21-26],这是因为它涉及到纳米尺度系统中特殊的谐振规律,并对基于石墨烯纳米材料的NEMS谐振器与传感器的未来应用有着重要的影响.实验方面,Bunch等人^[10]率先制备出了长宽均为微米尺寸、基波频率在MHz量级的石墨烯机械谐振器.而令人感兴趣的是,Chen等人^[12]在研究类似的石墨烯机械谐振器时发现,由于吸附微小质量时石墨烯谐振器内建应变的变化显著改变了它的基波频率,因而有望用它作为高灵敏的NEMS质量探

测器.理论方面,Atalaya等人^[22]采用连续弹性模型研究了无缺陷四边固支型石墨烯谐振器的动态特性,指出弯曲挠度极值(石墨烯中央位置的原子偏离平衡位置的最大幅度)大于0.05nm时,非线性响应将主导石墨烯谐振器的动态行为.而最近,Sakhaee-Pour等人^[23, 24]则采用分子结构力学方法探讨了石墨烯纳米带作为质量探测器与应变传感器的潜在应用性,并观察到以下谐振规律:石墨烯纳米带谐振器的基波频率与长宽比及手性无关,但在吸附质量或施加应变的条件下,长宽比的变化却对频率有所影响.显而易见,上述这些富有成效的实验和理论研究为基于石墨烯材料的谐振器与传感器的设计与优化提供了不少有益指导,然而,迄今为止关于石墨烯纳米带谐振特性的研究尚不多见.鉴于从实验上表征石墨烯纳米带的谐振特性还相当困难,相关的理论研究是非常重要且尤为迫切的.

但是值得指出的是,由于石墨烯边缘原子和内部原子所处的环境不同(边缘效应),直接导致它们具有不同的性质^[27, 28],因而上述的理论研究中如何

* 国家自然科学基金(批准号:10847147),南京信息工程大学科研基金(批准号:20080296),东南大学MEMS教育部重点实验室开放研究基金和南京信息工程大学微纳电子创新团队基金(批准号:N0575003411)资助的课题.

† E-mail: gfnuist@yahoo.cn

有效准确地包含边缘效应的影响仍是一个有待解决的难题. 除此之外, 应变石墨烯内部的晶格弛豫^[29]也会对其谐振特性产生不可或缺的影响(原子之间的相互束缚减小, 使得原子除了上下运动以外, 还存在平面内的运动, 从而导致频率发生变化). 对于石墨烯纳米带而言, 这些因素的影响只会更加显著, 因此采用上述理论方法来研究石墨烯纳米带的谐振特性可能会导致较大的误差. 我们注意到分子动力学模拟方法^[30-32]能够避免了上述的问题, 这主要归因于它能够在模拟的过程中自动地包含边缘效应和内部晶格弛豫效应的影响. 尽管如此, 据我们所知, 采用分子动力学方法模拟石墨烯纳米带的谐振行为目前还未见报道. 为了探索石墨烯纳米带及其应变传感器的谐振规律, 基于动势能转换与守恒原理, 本文运用分子动力学方法系统地研究了不同边界条件下, 挠度极值、尺寸与手性对

石墨烯纳米带谐振频率的影响, 并且着重探讨了应变与石墨烯纳米带基波频率及其频移(基波频率变化)之间的关系. 这些研究结果对于更好地理解应变石墨烯纳米带的动态特性是有益的.

2. 计算模型与方法

本文计算所用的具有不同边界条件的石墨烯纳米带如图 1 所示, 图中 l 和 w 分别表示其长度与宽度, 实心的三角形部分表示被固定的边界原子. 鉴于在这类具有开放边的 sp^2 碳网状体系中, 拓扑结构(手性)可能对其机械谐振特性起着不可或缺的作用, 我们在计算时考虑了扶手型(具有 armchair 边缘)与锯齿型(具有 zigzag 边缘)石墨烯纳米带, 如图 1(a) 与 (b) 所示, 由于研究机械谐振响应特性, 边缘原子的悬挂键没有用氢原子进行饱和.

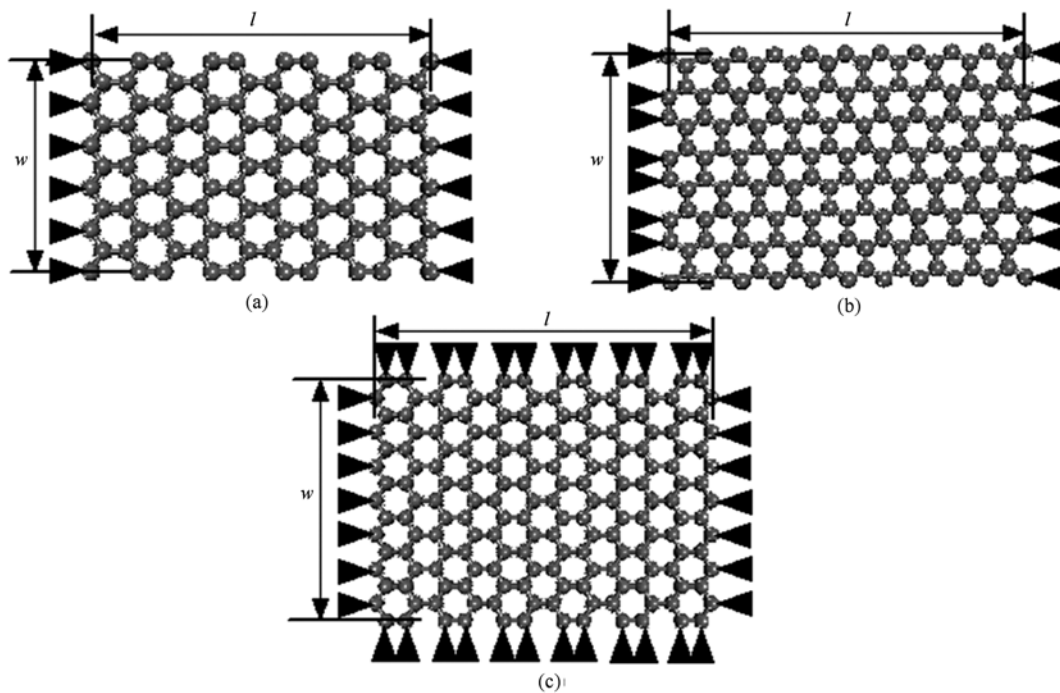


图 1 不同边界条件下石墨烯纳米带的几何模型示意图 (a) 双端固支扶手型; (b) 双端固支锯齿型; (c) 四边固支型

分子动力学能够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, 因而被广泛地用来研究纳米材料的力学性能及其变形机理^[29-32]. 本文采用著名商用计算软件包 Material Studio 中基于分子动力学方法的 Forcite 模块研究石墨烯纳米带及其应变传感器的谐振行为. 这里以双端固支扶手型石墨烯纳米带为例, 具体的

模拟细节如下: 首先, 应用 Material Studio 软件包中 Visualizer 模块的超元胞与切割技术构造具有 armchair 边缘的石墨烯纳米带, 并且沿宽度方向对其两端的原子进行固定, 见图 1(a). 同时在纳米带的中央位置选取一排原子, 下移一定的距离(挠度极值)并固定. 然后采用 Forcite 模块对纳米带进行几何结构优化, 在经过充分弛豫之后获取初始构型. 此时整个纳米带会发生形变而向下弯曲, 如图 2

(a)中插图所示,这相当于给纳米带一个初始的形变势能.接着去除中央位置原子的约束并在常温下进行分子动力学模拟,计算精度选用超好,时间步长设为 1 fs,NVE 模拟时间为 20 ps.分子动力学计算的一个关键是原子势函数的选取,本文采用最为精确的 COMPASS 力场,力场截断半径取 1.85 nm.如图 2(a)所示,在模拟谐振的过程中,NVE 系综保证纳米带的总能量守恒.图中非键能包括所有非成键原子之间的相互作用,可以看到它几乎不随时间

变化,于是谐振的过程中只有动能和势能之间进行相互转化,换言之,纳米带的谐振过程与动势能的转换过程是相对应的.因此,假设动能和势能转换的周期为 T ,则不难得到纳米带的振动周期为 $2T$.最后,基于上述的动势能转换与守恒原理,选取动能或势能随时间的变化曲线进行傅里叶变换可以获得相应的幅频特性,如图 2(b)所示,假设得到的频率为 f ,从而能够求得石墨烯纳米带的谐振频率为 $f/2$.

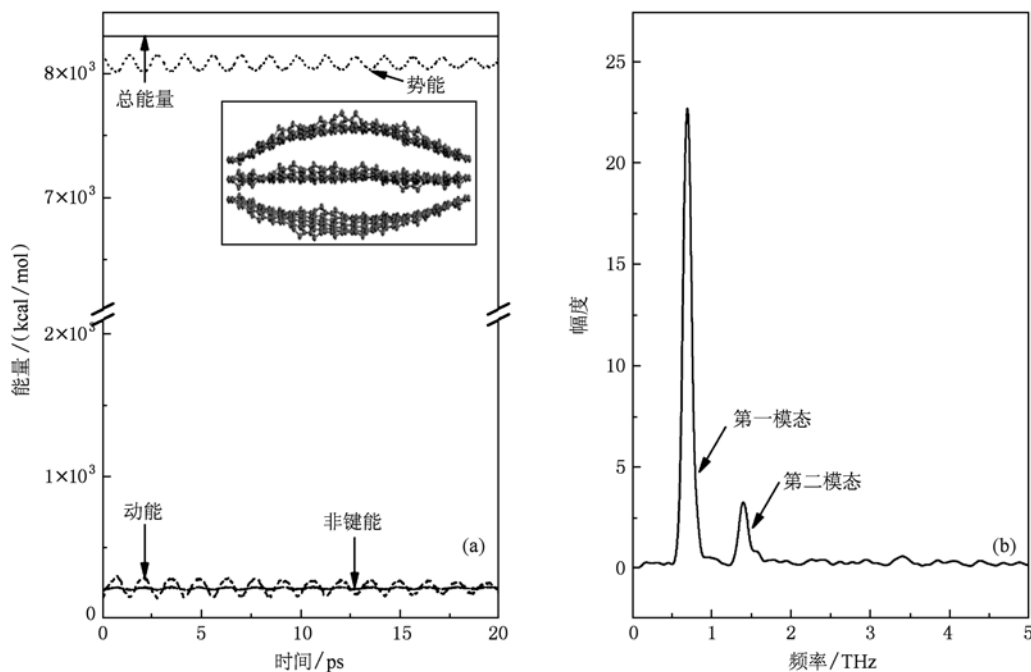


图 2 石墨烯纳米带谐振过程中 (a) 能量随时间的变化曲线,插图描述了其在不同时刻的振动状态,(b) 势能随时间的变化曲线所对应的幅频特性

值得注意的是,如果对石墨烯纳米带进行拉伸或压缩,其谐振频率均会发生明显变化.通过测量应变前后的频率,能够获得频移与应变的函数关系,从而可以构造出基于石墨烯纳米带的应变传感器.而为了能够从理论上模拟与分析石墨烯纳米带应变传感器,在进行上述模拟步骤之前,需要在石墨烯纳米带的长度方向引入应变

$$\varepsilon_l = (l_\varepsilon - l) / l, \quad (1)$$

其中, l_ε 为施加应变 ε_l 时纳米带的长度, l 为初始纳米带的长度.

3. 计算结果与讨论

根据已有的文献报道^[22],当挠度极值大于 0.05 nm 时,非线性响应就开始主导四边固支石墨

烯谐振器的动态行为.然而石墨烯纳米带谐振器是否遵循类似的谐振规律呢?这是一个值得考虑的问题.运用上述的分子动力学方法,我们首先探讨了挠度极值对石墨烯纳米带谐振行为的影响,计算所用的不同长宽比石墨烯纳米带的几何尺寸见表 1.

图 3 则描述了这些石墨烯纳米带的基波频率随挠度极值的变化关系.一方面,与碳纳米管的情况类似^[33],分子动力学模拟结果表明石墨烯纳米带具有超高的谐振频率,例如,计算得到纳米带的基波频率均超过了 100 GHz,因此有望用来制作高频谐振器.另一方面,从图 3 可以看到,随着挠度极值增加纳米带的基波频率并非一直保持不变,而是整体上呈现出增大的趋势.这说明当挠度极值超过了某一超小值(与尺寸和边界条件有关)时,非线性效应

表1 不同边界条件下,不同手性石墨烯纳米带的几何尺寸

石墨烯纳米带	l/nm	w/nm	l/w
双端固支扶手型 A	6.2492	1.2300	5.08
双端固支扶手型 B	10.0840	1.7220	5.86
双端固支扶手型 C	16.9013	1.7220	9.81
双端固支锯齿型 A	8.1180	1.5632	5.19
双端固支锯齿型 B	15.7440	2.4155	6.52
双端固支锯齿型 C	18.0811	1.9884	9.09
四边固支型 A	15.0060	2.8406	5.28
四边固支型 B	15.7440	2.4145	6.52
四边固支型 C	20.2951	1.9884	10.21

会主导石墨烯纳米带的动态行为,根本原因在于纳米带在谐振过程发生了非线性形变.如图3(a),(b)所示,当挠度极值超过了0.3 nm和0.5 nm时,非线性效应分别主导了双端固支扶手型和锯齿型石墨烯纳米带的动态行为.有趣的是,随着挠度极值增加,它们的基波频率并非单调递增,而是呈现出明显的台阶状.图3(c)则反映在所选取的挠度极

值范围内(0.1—0.6 nm),基波频率一直在单调递增,表明非线性效应在挠度极值极小时(小于0.1 nm)就开始主导着四边固支型石墨烯纳米带的动态行为,这与四边固支石墨烯的情况类似^[22].实际上,根据薄板理论,只有当挠度极值远小于薄板厚度时,线性(纯弯曲、小挠度)理论才可能有效准确地描述薄板的机械响应过程^[22].对于单层石墨烯纳米带而言,其厚度仅为0.335 nm^[31],因而其线性响应区域非常小,换言之,非线性响应将主导了它的动态行为.此外从图3还可以看出,不同边界条件下挠度极值对基波频率的影响程度也存在明显的差异.与四边固支型石墨烯纳米带相比,双端固支石墨烯纳米带的挠度极值对基波频率的影响要小得多,说明在同样的挠度极值下它们经历了较小的非弹性变形.同时由图3我们还不难发现,不同边界条件下,不同手性石墨烯纳米带的挠度极值对其基波频率的影响与长宽比没有必然的关联.因此,为了便于对应比较,在本文下面的计算中纳米带的挠度极值统一设定为0.3 nm.

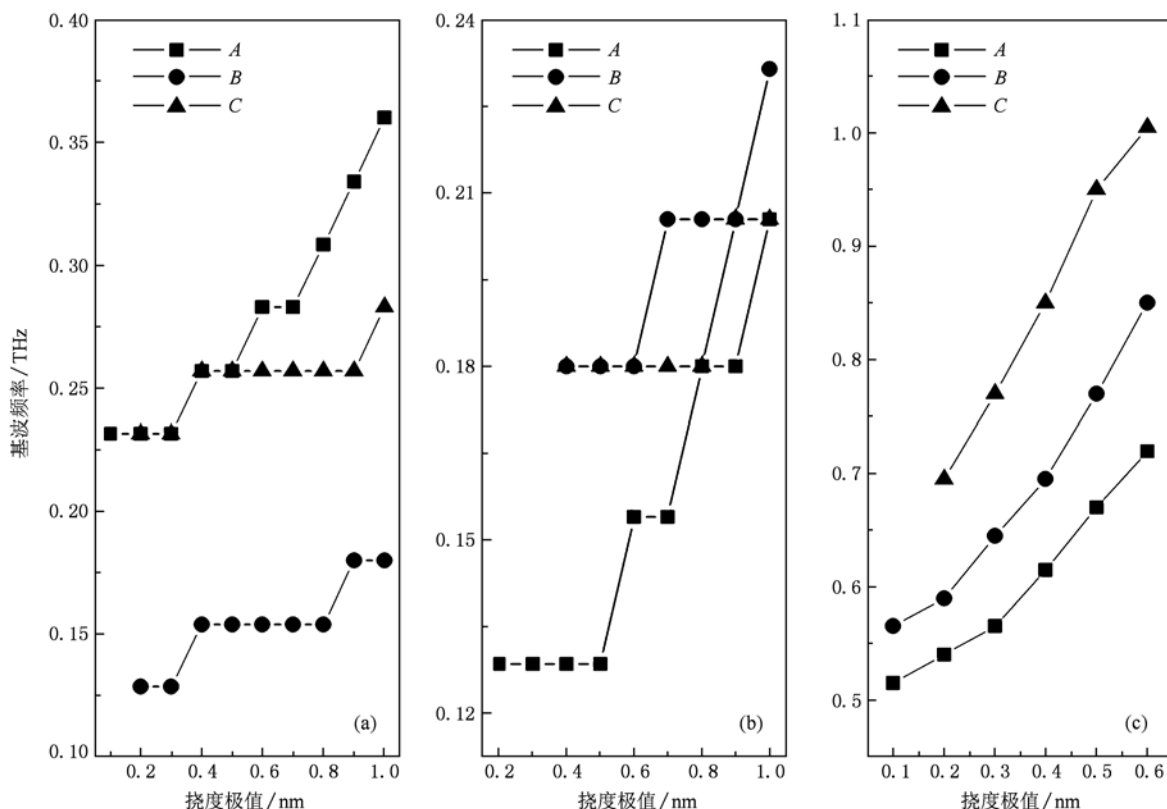


图3 石墨烯纳米带基波频率随挠度极值变化的关系曲线 (a) 双端固支扶手型;(b) 双端固支锯齿型,(c) 四边固支型

众所周知,石墨烯纳米带的电学特性与其尺寸及手性密切相关.考虑到这些因素可能对石墨烯纳

米带的机械谐振特性产生重要的影响,图4给出了不同边界条件下,不同手性石墨烯纳米带的基波频

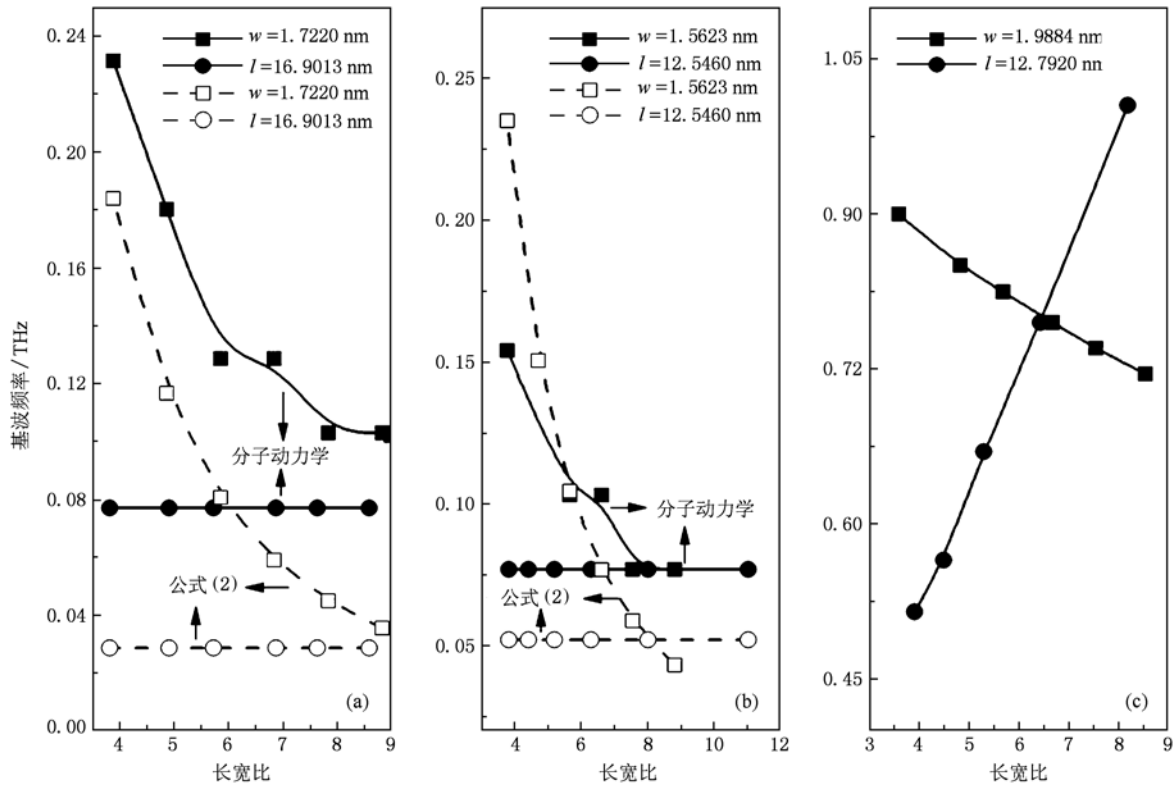


图4 石墨烯纳米带的基波频率随长宽比变化的关系曲线 (a) 双端固支扶手型; (b) 双端固支锯齿型; (c) 四边固支型

率随长宽比的变化关系. 根据欧拉-伯努利梁理论, 对于宏观系统中受均匀应力 σ 作用的双端固支梁其谐振频率^[10, 31]为

$$f = \left\{ \left[\frac{At}{l^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \right]^2 + \frac{0.57A^2\sigma}{\rho l^2 wt} \right\}^{1/2}$$

$$= \left\{ \left[\frac{At}{l^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \right]^2 + \frac{0.57A^2(E\varepsilon_l + D\varepsilon_l^2)}{\rho l^2 wt} \right\}^{1/2}, \quad (2)$$

其中 E, D, ρ, l, w, t 分别为梁的杨氏模量、三阶弹性模量、密度、长度、宽度和厚度, 在本文的计算中, $E = 1.24 \text{ TPa}$ ^[31], $\rho = 2200 \text{ kg/m}^3$ ^[10, 11]; A 为一常数, 取值为 1.03 ^[10]. 显然, 由(2)式可知, 无应变作用时石墨烯纳米带的基波频率与宽度无关, 而是随长度的增加逐渐减小. 如图4(a), (b)所示, 不同手性的双端固支石墨烯纳米带均反映了这一变化趋势, 表明石墨烯纳米带的谐振规律对手性并不敏感. 然而从图4(a), (b)中不难看出, 由(2)式得到的双端固支纳米带的基波频率均明显偏离了分子动力学模拟的结果, 这暗示纳米尺寸体系的谐振行为不同于宏观体系的谐振行为, 由此可见(2)式虽然能够给出定性的结论, 但是并不能直接用来精确地描述石墨烯纳米带的谐振特性. 有趣的是, 对于四边固支型石墨烯纳米带而言, 与长度的作用类似, 宽度对

其谐振频率的影响也非常显著. 如图4(c)所示, 随着宽度的减小, 纳米带的谐振频率在显著地单调递增, 这主要归因于沿宽度方向的两边也被固定, 从而使得宽度方向和长度方向具有类似的性质, 这意味着石墨烯纳米带的基波频率随长宽比的变化关系与边界条件密切相关. 因而由前面的分析可知, 长度和边界条件对石墨烯纳米带的基波频率起着决定性的作用.

对纳米材料施加应变是研究其特性的一个重要的手段^[24, 33]. 为了研究应变石墨烯纳米带的谐振特性及其作为应变传感器的性能, 图5和图6分别给出了不同长宽比石墨烯纳米带的基波频率及其频移随应变的变化关系. 类似地, 由(2)式可以定性地知道, 单轴拉伸应变能够增加双端固支石墨烯纳米带的基波频率. 如图5所示, 不同边界条件石墨烯纳米带的基波频率均随着长度方向应变的增加而单调递增. 例如, 10%的单轴应变使得双端固支石墨烯纳米带的基波频率增大了约2—3.25倍, 同时使得四边固支石墨烯纳米带的基波频率增大了约1.7倍. 由(2)式还可定性地判断, 当应变为零时纳米带的长度不同(相同)会导致不同(相同)的基波频率, 图5(a), (b), (c), (d)中的分子动力学模拟的结

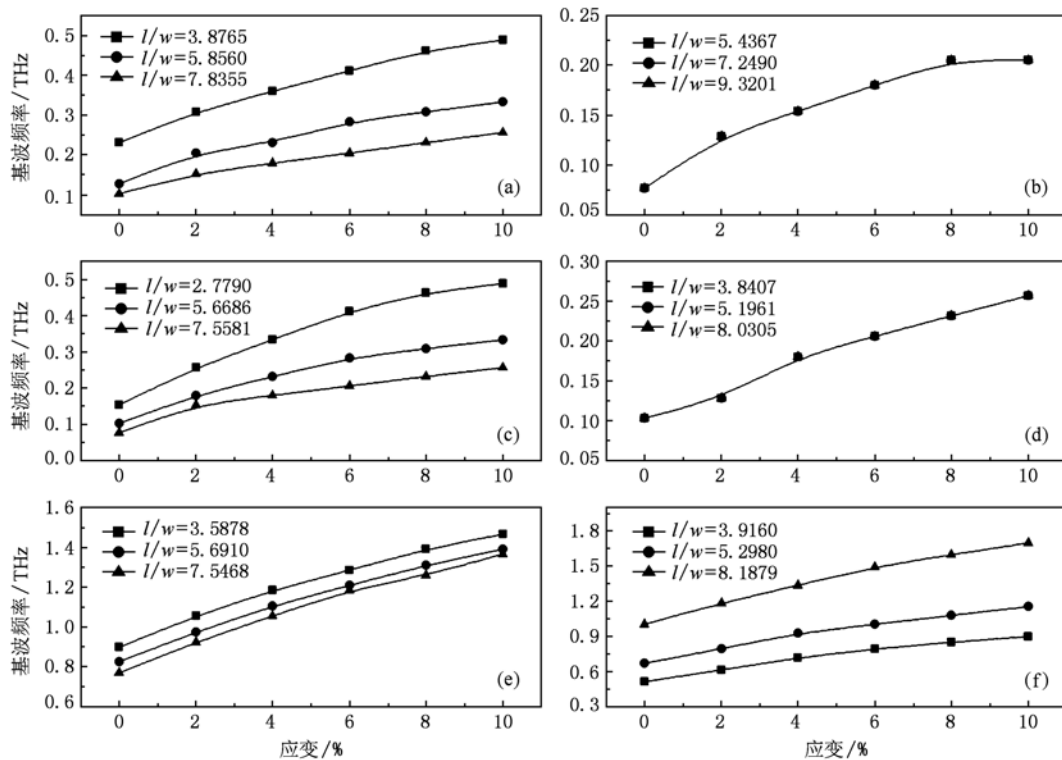


图5 石墨烯纳米带的基波频率随应变的变化曲线 (a) 双端固支扶手型, $w = 1.722 \text{ nm}$; (b) 双端固支扶手型, $l = 16.9013 \text{ nm}$; (c) 双端固支锯齿型, $w = 1.5623 \text{ nm}$; (d) 双端固支锯齿型, $l = 12.546 \text{ nm}$; (e) 四边固支, $w = 1.9884 \text{ nm}$; (f) 四边固支型, $l = 12.792 \text{ nm}$

果证实了这一点. 但有趣的是, 如图 5(f) 所示, 当长度相同时, 四边固支石墨烯纳米带的基波频率在应变为零时并不相同, 根本原因在于其沿宽度方向的两边被固定, 从而使得宽度方向和长度方向具有类似的性质, 换言之, 宽度不同也会导致不同的基波频率. 由此可见, 石墨烯纳米带的基波频率随应变的变化关系也是与边界条件密切相关的. 当施加了单轴应变之后, 从图 5(a), (c) 可以看出, 长度变化 (引起长宽比不同) 对双端固支纳米带基波频率随应变的变化关系有显著影响, 相反, 宽度变化 (引起长宽比不同) 的影响则可忽略不计, 这是因为图 5(b), (d) 中不同长宽比的曲线均重合在一起. 而由图 5(e), (f) 则可知, 相比于长度变化对四边固支纳米带基波频率随应变的变化关系的影响, 宽度变化的影响则更为显著. 值得注意的是由图 5(a), (b), (c), (d) 还不难发现, 手性对纳米带基波频率随应变的变化关系的影响可以忽略不计.

从图 6 则可以清楚地看到, 单轴拉伸应变与频移的关系曲线基本上呈现非线性特征, 但是与文献 [24] 的计算结果相比, 分子动力学模拟的应变与频移关系曲线的线性度要好很多. 一般而言, 应变传

感器的灵敏度可以定义为频移与应变变化的比值. 这里定义频移 $\Delta f = |f_0 - f_\varepsilon|$, 其中 f_0 和 f_ε 分别为应变前后的基波频率. 由图 6(a), (b), (c), (d) 可知, 双端固支纳米带应变传感器的灵敏度与手性无关. 尽管如此, 同样归因于边界条件的不同, 双端固支和四边固支石墨烯纳米带应变传感器的灵敏度却存在显著的差异, 不难发现, 四边固支石墨烯纳米带应变传感器具有更高的灵敏度. 如图 6(e) 所示, 当宽度恒定且长度变化时, 四边固支纳米带的灵敏度基本无变化, 约为 $7800 \text{ Hz/nanostrain}$ (应变 $\varepsilon_l = 10^{-9}$ 定义为 nanostrain), 这远高于相同长度碳纳米管应变传感器的灵敏度^[33]; 而如图 6(f) 所示, 当长度保持不变且宽度变化时, 长宽比越大的石墨烯纳米带应变传感器的灵敏度则越大, 表明可以通过适当地减少四边固支石墨烯纳米带的宽度来获取更高灵敏度的应变传感器. 这与双端固支的情况刚好相反, 如图 6(a), (b), (c), (d) 所示, 双端固支石墨烯纳米带的灵敏度约为 $1500\text{--}3000 \text{ Hz/nanostrain}$. 当纳米带长度恒定时, 由于图 6(b), (d) 中不同长宽比的曲线均重合在一起, 这表明其灵敏度保持不变; 而当宽度恒定时, 如图 6(a), (c)

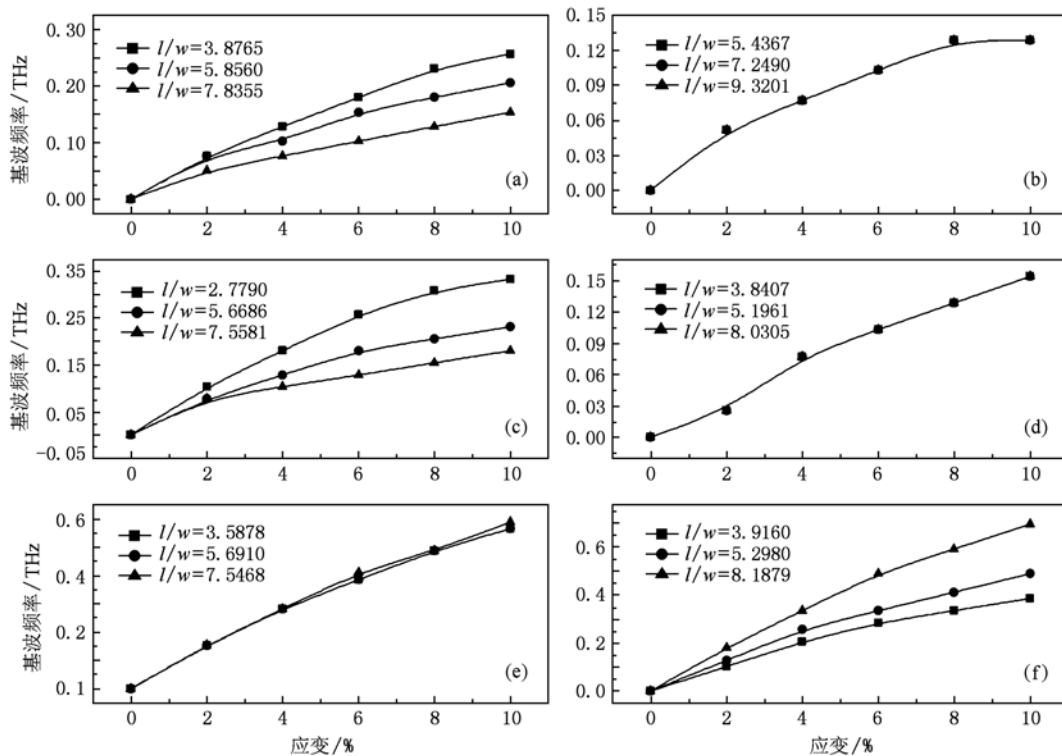


图6 石墨烯纳米带的频移随长度方向应变的变化曲线 (a) 双端固支扶手型, $w = 1.722$ nm; (b) 双端固支扶手型, $l = 16.9013$ nm; (c) 双端固支锯齿型, $w = 1.5623$ nm; (d) 双端固支锯齿型, $l = 12.546$ nm; (e) 四边固支, $w = 1.9884$ nm; (f) 四边固支型, $l = 12.792$ nm

所示,其灵敏度则随着长宽比的减小而不断增大.由此可见我们可以通过减小长度增加双端固支纳米带应变传感器的灵敏度.总而言之,结合本文上述的分析可知,由于石墨烯纳米带具有超低的密度、超高的基波频率与灵敏度且无需考虑手性,通过合理地设定其尺寸和边界条件,石墨烯纳米带可用于制作新一代的 NEMS 谐振器与应变传感器.

4. 结 论

本文运用分子动力学方法系统地研究了不同边界条件下,挠度极值、尺寸以及手性对石墨烯纳米带基波频率的影响,并且着重探讨了应变与石墨

烯纳米带基波频率及其频移之间的关系.研究结果表明:石墨烯纳米带及其应变传感器呈现非线性响应特性,且均对手性不敏感.而尺寸与应变对石墨烯纳米带基波频率的影响则强烈依赖于边界条件.对于双端固支型石墨烯纳米带应变传感器而言,长度对其频移与应变的关系起决定性的作用,因而可以通过减小长度增加其灵敏度.对于四边固支型石墨烯纳米带应变传感器而言,则可以通过减小宽度增加其灵敏度.可见通过适当地设定边界条件和裁剪尺寸,可以获得基于石墨烯纳米带的高频谐振器和高灵敏应变传感器.

本文的部分计算工作在东南大学 MEMS 教育部重点实验室的高性能计算机上完成,谨表谢意.

[1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
 [2] Du X, Skachko I, Barker A, Andrei E Y 2008 *Nature Nanotech.* **3** 491

[3] Meric I, Han M Y, Young A F, Ozyilmaz B, Kim P, Shepard K L 2008 *Nature Nanotech.* **3** 654
 [4] Darancet P, Olevano V, Mayou D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 136803

- [5] Wang F, Zhang Y, Tian C, Girit C, Zettl A, Crommie M, Shen Y R 2008 *Science* **320** 206
- [6] Liao W, Zhou G, Xi F 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 126105
- [7] Liu J, Wright A R, Zhang C, M Z 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 041106
- [8] Chang C P, Lu C L, Shyu F L, Chen R B, Fang Y K, Lin M F 2004 *Carbon* **42** 2975
- [9] Abanin D A, Levitov L S 2007 *Science* **317** 641
- [10] Bunch J S, van der Zande A M, Verbridge S S, Frank I W, Tanenbaum D M, Parpia J M, Craighead H G, McEuen P L 2007 *Science* **315** 490
- [11] Garcia-Sanchez D, van der Zande A M, San Paulo A, Lassagne B, McEuen P L, Bachtold A 2008 *Nano Lett.* **8** 1399
- [12] Chen C Y, Rosenblatt S, Bolotin K I, Kalb W, Kim P, Kymissis I, Stormer H L, Heinz T F, Hone J 2009 *Nature Nanotech.* **4** 861
- [13] Liu S P, Zhou F, Jin A Z, Yang H F, Ma Y J, Li H, Gu C Z, Lü L, Jiang B, Zheng Q S, Wang S, Peng L M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4251 (in Chinese) [刘首鹏、周 锋、金爱子、杨海方、马拥军、李 辉、顾长志、吕 力、姜 博、郑泉水、王 胜、彭练矛 2005 物理学报 **54** 4251]
- [14] Ci L J, Xu Z P, Wang L L, Gao W, Ding F, Kelly K F, Yakobson B I, Ajayan P M 2008 *Nano Res* **1** 116
- [15] Jia X T, Hofmann M, Meunier V, Sumpter B G, Campos-Delgado J, Romo-Herrera J M, Son H, Hsieh Y P, Reina A, Kong J, Terrones M, Dresselhaus M S 2009 *Science* **323** 1701
- [16] Gunlycke D, White C T 2008 *Phys. Rev. B* **77** 115116
- [17] Sun L, Li Q X, Ren H, Su H B, Shi Q W, Yang J L 2008 *J. Chem. Phys.* **129** 074704
- [18] Ouyang F P, Xu H, Lin F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4132 (in Chinese) [欧阳方平、徐慧、林 峰 2009 物理学报 **58** 4132]
- [19] Hu H X, Zhang Z H, Liu X H, Qiu M, Ding K H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7156 (in Chinese) [胡海鑫、张振华、刘新海、邱 明、丁开和 2009 物理学报 **58** 7156]
- [20] Zhou B H, Duan Z G, Zhou B L, Zhou G H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 037204
- [21] Sakhaee-Pour A, Ahmadian M T, Naghdabadi R 2008 *Nanotechnology* **19** 085702
- [22] Atalaya J, Isacsson A, Kinaret J M 2008 *Nano Lett.* **8** 4196
- [23] Sakhaee-Pour A, Ahmadian M T, Vafai A 2008 *Solid State Commun.* **145** 168
- [24] Sakhaee-Pour A, Ahmadian M T, Vafai A 2008 *Solid State Commun.* **147** 336
- [25] Dai M D, Eom K, Kim C W 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 203104
- [26] Sadeghi M, Naghdabadi R 2010 *Nanotechnology* **21** 105705
- [27] Girit Ç O, Meyer J C, Erni R, Rossell M D, Kisielowski C, Yang L, Park C, Crommie M F, Cohen M L, Louie S G, Zettl A 2009 *Science* **323** 1705
- [28] Ritter K A, Lyding J W 2009 *Nature Mater.* **8** 235
- [29] Zhou J, Huang R 2008 *J. Mech. Phys. Solids* **56** 1609
- [30] Zhao H, Min K, Aluru N R 2009 *Nano Lett.* **9** 3012
- [31] Bu H, Chen Y F, Zou M, Yi H, Bi K D, Ni Z H 2009 *Phys. Lett. A* **373** 3359
- [32] Pei Q X, Zhang Y W, Shenoy V B 2010 *Nanotechnology* **21** 115709
- [33] Li Y, Qiu X M, Yang F, Wang X S, Yin Y J 2008 *Nanotechnology* **19** 165502

Molecular dynamics simulation of resonance properties of strain graphene nanoribbons^{*}

Gu Fang^{1)†} Zhang Jia-Hong²⁾ Yang Li-Juan³⁾ Gu Bin¹⁾

1) (College of Math & Physics, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044, China)

2) (College of Electronic & Information Engineering, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210044, China)

3) (Department of Basic Courses, Suqian College, Suqian 223800, China)

(Received 20 July 2010; revised manuscript received 26 August 2010)

Abstract

Starting from the energy conversion and energy conservation law in the constant-NVE ensemble, the molecular dynamics method using the COMPASS force field was applied to investigate the dynamic properties of graphene nanoribbons (GNRs) together with the GNR-based strain sensors. The following results were obtained: (a) the nonlinear response dominates the dynamic behavior of GNRs, and their ultra-high fundamental frequencies are closely related with the length and boundary conditions; (b) the effect of uniaxial tensile strain on the fundamental frequencies of GNRs is significant and strongly depends on boundary conditions, and the GNR-based strain sensor clamped on four edges has a higher frequency shift, and its sensitivity is up to 7800 Hz / nanostrain, much higher than that of carbon nanotube-based strain sensor with the same length; (c) the resonant characteristics of GNRs and GNR-based strain sensors are insensitive to the chirality. The obtained results suggest that, through cutting the appropriate size and setting the boundary conditions, the GNRs could be used to design a new generation of nanoelectromechanical system (NEMS) resonators and strain sensors, owing to their ultra-low density and ultra-high fundamental frequencies as well as ultra-high sensitivity without considering the impact of chirality.

Keywords: graphene nanoribbon, molecular dynamics, strain, fundamental frequency

PACS: 61.64.-w, 71.15.Pd, 68.35.Gy, 06.30.Ft

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10847147), the Scientific Research Foundation of Nanjing University of Information Science & Technology (Grant No. 20080296), the Open Research Fund of Key Laboratory of MEMS of Ministry of Education, Southeast University and the Foundation for Micro-nano Electronic Innovation Team of Nanjing University of Information Science & Technology (Grant No. N0575003411).

[†] E-mail: gfnuist@yahoo.cn