

石墨烯层间纳米摩擦性质的第一性原理研究*

王建军 王飞 原鹏飞 孙强 贾瑜[†]

(郑州大学物理工程学院, 郑州大学能源与量子结构中心, 郑州 450001)

(2011年8月15日收到; 2011年10月19日收到修改稿)

基于密度泛函理论的第一性原理计算方法研究了纳米尺度下石墨烯层间摩擦现象, 探讨了对称和非对称两种情况下双层石墨烯层间沿不同方向的摩擦性质. 研究发现对于对称的双层石墨烯, 层间摩擦沿不同方向同性; 摩擦因数依赖于正压力, 随正压力增大, 摩擦因数的变化曲线分为三个阶段, 在较小以及较大压力下, 摩擦因数遵循 Amonton 法则不随压力变化而变化; 而在中间 3—6 nN 阶段, 摩擦因数随压力增加线性增加. 整个研究压力范围内摩擦因数在 0.05—0.25 之间. 对于非对称性双层石墨烯层间摩擦, 不同压力下摩擦因数在 0.006 上下波动, 摩擦因数较两层对称性石墨烯大大降低. 上述研究结果与实验一致.

关键词: 密度泛函理论, 石墨烯, 纳米摩擦

PACS: 68.35.Af, 71.15.Mb

1 引言

石墨具有层状结构, 层间作用很弱, 相对滑动时具有很小的摩擦及磨损, 是一种非常重要的固体润滑剂. 石墨烯由单层或几层石墨组成, 具有良好的热导、电导以及力学性能. 目前工业上通过物理及化学方法已经实现了石墨烯的批量生产, 可以期待石墨烯在新能源以及新材料领域必将得到广泛应用. 在石墨烯的应用过程中, 摩擦行为是影响其性能的一个重要因素, 因此研究石墨烯的摩擦性质具有重要的现实意义.

摩擦是生产生活中常见的一种现象, 一方面摩擦会浪费能源、磨损机器; 另一方面, 摩擦在生活中又不可或缺, 离开摩擦人们将寸步难行. 因此有必要认识各个尺度下的摩擦现象所表现出的物理规律, 从而合理地控制摩擦. 但是长期以来, 人们对于摩擦的认识十分有限, 仅停留在宏观层次上, 对宏观摩擦的微观机制了解很少. 直到原子力显微镜^[1]、摩擦力显微镜^[2]等微观探测工具的出现, 人类对于摩擦的认识才逐步深入到了分子、原子层次, 相应地产生了纳米摩擦学这一新兴学科. 目前, 摩擦力、原子力显微镜已经成功应用于金刚石

以及石墨等材料的表面摩擦研究, 为人们理解原子尺度下的摩擦提供了直接图像^[3]. 随着实验对于摩擦认识的不断深入, 纳米摩擦的理论研究也取得了很大的进展, 其中纳米摩擦的谐振子模型得到了普遍认可^[4,5]. 具体方法上, 经验的分子动力学方法是研究原子尺度下纳米摩擦的一种常用方法, 但这种方法依赖于经验势. 相对于经验的分子动力学方法, 第一性原理方法计算更为准确. 基于谐振子模型思想, 文献^[6—8]通过把谐振子之间的弛豫能量近似等于界面滑动过程中最大和最小势能之间势垒的近似, 应用第一性原理方法研究了原子尺度的摩擦, 得到了可以与实验比较的结果. 但目前第一性原理方法对于摩擦的研究还很有限, 仅研究了少数几个体系.

经验的分子动力学方法对碳基材料的摩擦性质进行了广泛的研究^[9—11], 具体到石墨及石墨烯, Bonelli 等^[12]应用半经验的紧束缚方法研究了界面的对称情况对摩擦的影响; Guo 等^[13]应用半经验的分子力场方法研究了缺陷对摩擦的影响, 发现了超低摩擦现象. 经验模型方面, Verhoeven 等^[14]基于 Tomlinson 模型应用经验势方法研究了对称性对纳米摩擦的影响. 量子化学方面, Neitola 等^[15]

* 国家自然科学基金 (批准号: 10974182) 和河南省自然科学基金 (批准号: 112300410149) 资助的课题.

[†] E-mail: jiaju@zsu.edu.cn

应用量子化学从头算方法 (HF) 在 3—21 G 和 6—31 G* 的基组水平上究了不同大小的片状石墨烯层间摩擦性质; Matsuzawa 和 Kishii^[16] 应用量子化学从头算方法 (MP2) 在 6—31 G* 和 6—311 G* 的基组水平上计算了氢分子在片状石墨烯上滑动的摩擦性质. 上述研究中, 经验、半经验方法依赖于经验参数, 而量子化学从头算方法对石墨烯的片段化处理忽略了石墨烯的周期性, 不能体现周期性对摩擦的影响. 基于以上分析, 本文运用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 研究周期性的对称以及非对称性石墨烯层间摩擦性质, 探讨正压力以及滑动方向与摩擦因数之间的关系.

2 计算模型与计算方法

2.1 计算模型

石墨烯由单层或很少几层石墨构成, 石墨烯层间纳米摩擦性质主要取决于双层石墨烯沿滑动路

径不同位置处的势能差别. 计算所取的双层石墨烯模型以及滑动路径如图 1 所示. 图 1(a) 表示滑动的起始位置, 其中浅色原子为上层 C 原子, 深色原子为下层 C 原子. 在起始位置, 上层 C 原子均处于下层 C 原子的顶部, 为表述方便, 定义滑动的起始位置为叠位. 图中虚线箭头表示两条滑动路径. 图 1(b) 为叠位置的侧视图. 图 1(c) 为路径 I 的末位置, 此时上层每一个 C 原子均处于下层两个 C 原子中间, 定义此位置为桥位. 图 1(d) 为路径 II 的末位置, 此时上下两层石墨烯均有半数 C 原子分别位于相对层的碳环中心, 定义为错位. 对于 I 路径, 从叠位到桥位沿滑动路径均匀取 6 个位置, 相邻位置间距离为 0.244 Å. 对于 II 路径, 从叠位到错位也均匀取 6 个位置, 由于 II 路径滑动周期较长, 相邻位置间距离为 0.282 Å. 对于滑动路径上的每个选取位置, 计算出两层石墨烯不同层间高度对应的吸附能, 最终由文献 [6] 的方法得到沿不同滑动路径的摩擦因数.

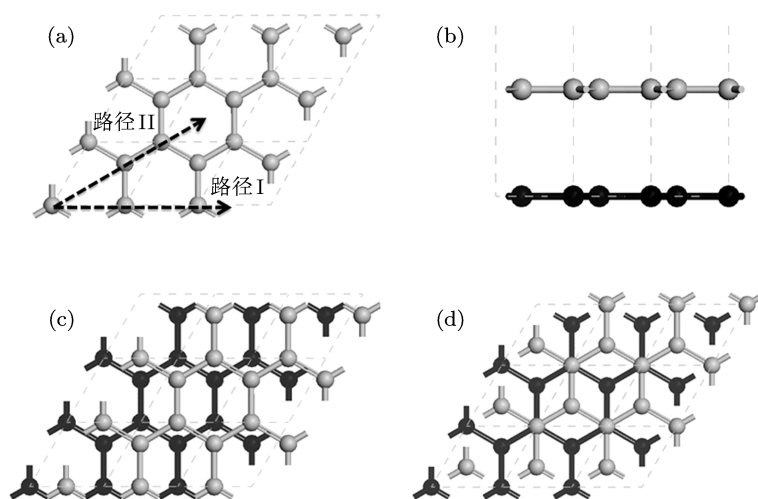


图 1 摩擦采用的计算模型及滑动路径 (a) 双层石墨烯摩擦起始位置的俯视图, 定义为叠位, 两条虚线箭头表示两条相对滑动路径; (b) 起始位置的侧视图, 深色球代表下层 C 原子, 浅色球代表上层 C 原子; (c) I 路径的末位置, 定义为桥位; (d) II 路径的末位置, 定义为错位

2.2 计算方法

本文采用以密度泛函理论^[17,18] 平面波赝势方法为基础的 VASP 软件包^[19] 进行计算. 对于石墨, 层间作用为 van der Waals 弱相互作用. 虽然 VASP 中的赝势描述 van der Waals 相互作用比较困难, 但文献表明局域密度近似 (LDA)^[20] 能够很好地描述石墨层间距离以及层间相互作用^[21,22]. 另外也有研究指出: 当两层石墨的间距小于其相应平衡距离

的 1.15 倍时, van der Waals 作用可以忽略^[23]. 本文研究的是压力作用下的石墨烯层间摩擦性质, 考虑到压力作用下石墨烯层间距离小于其平衡距离, 因此无须考虑 van der Waals 相互作用的修正. 计算中选取 LDA 描述电子 - 电子间的交换关联作用, 采用超软赝势 (USPP)^[24] 描述离子实与价电子之间的相互作用. 平面波展开的截断能取为 220 eV. 倒空间中 Brillouin 区的 k 点由 Monkhorst-Pack 方法产生^[25], 对于对称性石墨烯, Brillouin 区 k 点取样

为 $21 \times 21 \times 1$, 对以上所选参数进行了测试, 保证了计算的精度. 对称性石墨烯采用 1×1 的超原胞, 真空层厚度约为 20 \AA ($1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$).

3 结果与讨论

3.1 石墨烯层间相互作用

计算得到的石墨烯层内 C—C 键长为 1.42 \AA , 与理论计算及实验值一致 [20,26]. 本文主要考虑原子层间电子作用引起的摩擦力大小, 不考虑晶格振动声子摩擦部分. 石墨烯层间相互作用主要用吸附能来表示, 吸附能计算方法如:

$$E_{\text{ab}} = E_{\text{total}} - 2E_{\text{graphene}}, \quad (1)$$

式中 E_{ab} 为吸附能, E_{total} 为体系总能量, E_{graphene} 是孤立的单层石墨烯的能量. 在每条摩擦路径的 6 个选取位置处, 沿石墨烯表面法线方向, 以 0.05 \AA 为步长间隔, 将两层石墨烯的层间距从 3.65 \AA 逐步压缩到 1.4 \AA , 静态计算压缩过程中每一个步点位置的吸附能, 如图 2 所示. 图 2 中 1—6 表示滑动路径上选择的 6 个位置. 研究发现: 从 3.65 \AA 开始压缩, 吸附能逐渐减小, 在 3.5 \AA 附近达到最小值, 此时石墨烯层间吸引力最大, 这一距离即是两层石墨烯间的平衡距离; 接着压缩, 引力逐渐减小, 斥力逐渐增大, 当吸附能达到 0 eV 位置时, 引力和斥力平衡; 继续压缩, 斥力开始起主要作用并且随层间距减小迅速增加, 这一阶段两层石墨烯具有排斥作用.

由图 2 中插图可见, 滑动路径上不同位置处两层石墨烯之间的吸附能大小随层间距变化出现了一个反转点, 压力很小时, 石墨烯被轻微压缩, 从叠位到桥位 (错位), 在相同的压缩距离下, 吸附能逐渐减小, 即叠位置处层间距不容易压缩. 在 1.8 \AA 附近, 吸附能曲线发生反转, 叠位置处两层石墨烯之间的吸附能由最大逐渐变为最小, 而桥位 (错位) 则由最小变为最大, 即在较大的压缩量下, 桥位 (错位) 相对于叠位不易压缩. 吸附能的反转与不同压力下两层石墨烯原子之间的相互作用有关, 距离较远时, 叠位置处石墨烯层间两对顶原子为最近邻原子, 而桥位 (错位) 置处石墨烯层间最近邻原子距离大于叠位置处两对顶原子间距离, 因此叠位置处两层石墨烯之间相互作用较大, 比较难压缩. 当层间距压缩到反转距离以后, 虽然桥位 (错位) 置最近邻原子距离仍比较远, 但是有相互作用的最近邻原子数目桥位 (错位) 要多于叠位, 总体上桥位 (错位) 处

的相互作用开始强于叠位, 因此出现了吸附能的反转, 吸附能曲线的反转说明不同位置处石墨烯层间的相互作用关系随着压力的变化而变化.

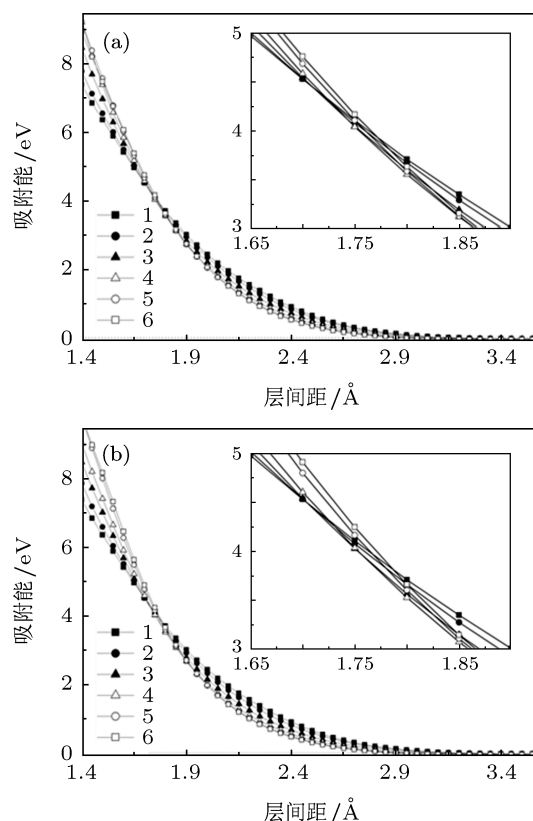


图 2 滑动路径上不同位置处的吸附能随层间距离变化, 插图表示反转点附近情况. 1—6 代表滑动路径上均匀选取的 6 个位置, 其中 1 步代表起始位置叠位, 6 代表滑动路径的末位置桥位 (错位); (a) 表示路径 I; (b) 表示路径 II

通过吸附能对层间距的微分可以求出不同层间距对应的正压力

$$f_{\text{N}} = -\partial E_{\text{ab}}(z) / \partial z, \quad (2)$$

式中 f_{N} 表示正压力, 计算摩擦时正压力的施加就是通过压缩石墨烯之间的层间距等效实现的. 由 (2) 式求出两层石墨烯沿两条路径在不同压力下不同位置处的层间距离, 如图 3 所示. 为了能够完整地显示一个周期内的石墨烯层间相对滑动的计算结果, 图 3 和图 4 均是根据对称性补充了另外半个周期后的图形.

由图 3 可见, 不施加正压力 (0 nN) 时, 叠位处两层石墨烯层间距离最大, 桥位 (错位) 处层间距离最小. 这由不同位置处石墨烯层间原子排斥力不同所致. 在叠位处, 上下两层 C 原子离得较近, 排斥力大, 而错位时 C 原子离得较远, 排斥力小. 随着压力增大, 两层石墨烯层间距逐渐减小, $1—5 \text{ nN}$ 压力较小时, 层间距变化趋势和平衡吸附 (0 nN) 时趋势相同,

正压力逐渐增大到 6 nN 后, 叠位和桥位 (错位) 压缩难易度发生了反转, 桥位 (错位) 的层间距比叠位的层间距更难压缩, 发生反转的原因和吸附能发生反转的原因相同.

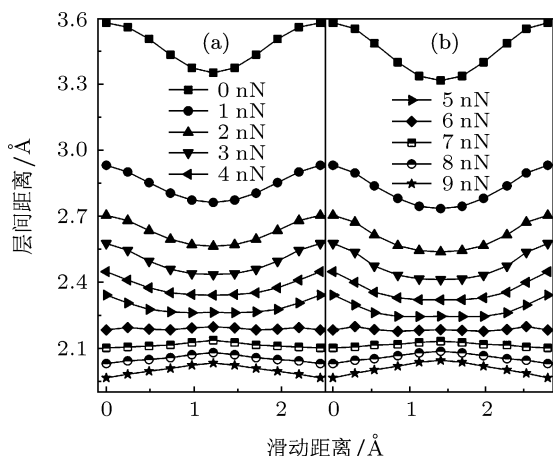


图3 不同压力下双层石墨烯沿滑动路径不同位置处的层间距
0 nN 表示平衡吸附位置; (a) 表示沿路径 I; (b) 表示沿路径 II

3.2 双层石墨烯之间的摩擦现象

根据文献 [6] 的方法, 由 (3) 式可以求出滑动路径上不同位置处的势能

$$V(x, f_N) = E_{ab}(x, z(x, f_N)) + f_N z(x, f_N) - V_0(x, f_N), \quad (3)$$

式中 $V(x, f_N)$ 为滑动路径上不同位置处不同压力下的相对势能, $E_{ab}(x, z(x, f_N))$ 表示沿滑动路径不同位置处正压力作用下的吸附能, $f_N z(x, f_N)$ 表示不同位置处正压力压缩石墨烯所做的功, 式中最后一项是整个滑动路径上的最小势能, 减去这一项是为了求出滑动路径上各位置的相对势能. (3) 式表明滑动路径某一点的势能只和此点位置以及正压力有关. 由各点势能给出了 1—9 nN 的势能曲线关系, 如图 4 所示.

由图 4 可见, 两条滑动路径的势能曲线非常相近. 整体趋势来看, 从叠位到桥位 (错位), 势能呈现出逐渐下降的趋势, 桥位 (错位) 的势能最小. 随着压力的增大, 两层石墨烯逐渐靠近, 相互作用变强, 势能差别也逐渐增大. 这与不同压力下原子间的作用密切相关. 同时发现 6 nN 时叠位置的势能与其相邻位置势能的大小关系发生改变, 即在 6 nN 之前, 叠位置势能比相邻位置势能小, 而 6 nN 之后, 叠位置势能比相邻位置势能大, 这与吸附能的反转有关.

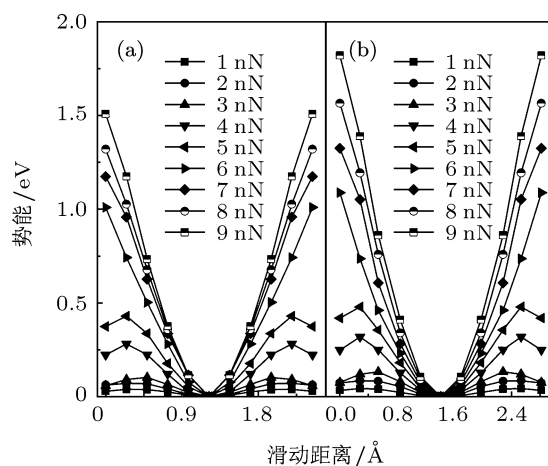


图4 不同压力下滑动路径上各个位置的相对势能曲线
(a) 表示路径 I; (b) 表示路径 II

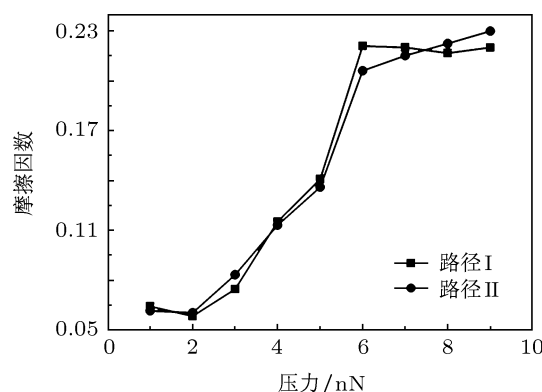


图5 不同压力下的摩擦因数

系统在相对滑动过程中必须要克服界面之间的势垒, 由谐振子模型知道, 势垒在数值上等于克服摩擦力所做的功. 摩擦力可以通过 (4) 式求出:

$$f_f(x, f_N) = \partial V(x, f_N) / \partial x, \quad (4)$$

式中 $f_f(x, f_N)$ 表示正压力作用下滑动路径上某位置的摩擦力. 正压力作用下整个滑动路径的最大势垒为

$$\Delta V_{\max}(f_N) = V_{\max}(f_N) - V_{\min}(f_N), \quad (5)$$

式中 $V_{\max}(f_N)$ 为滑动路径上最大势能, $V_{\min}(f_N)$ 为滑动路径上最小势能, 则 ΔV_{\max} 是两层石墨烯发生相对滑动时必须克服的势垒. 在滑动过程中克服摩擦力做功为

$$\Delta E_f = \langle f_f \rangle \Delta x = \Delta V_{\max}, \quad (6)$$

式中 ΔE_f 为克服摩擦力所做的功, $\langle f_f \rangle$ 为平均摩擦力, Δx 为滑动路径上最大势能位置与最小势能位置间的距离. 最后由平均摩擦力求出正压力作用下的平均摩擦因数

$$\mu = \frac{\langle f_f \rangle}{f_N} = \frac{\Delta V_{\max}}{f_N \Delta x}, \quad (7)$$

依据 (7) 式计算出沿两条路径不同压力下的摩擦因数, 如图 5 所示.

由图 5 可知, 整个研究压力范围内石墨烯层间摩擦因数在 0.05—0.25 之间. 实验上测得的石墨烯摩擦因数并不是一个确定值, 因为摩擦因数与表面结构、表面的粗糙程度以及表面所处环境均有关系, 各种实验测到的石墨烯的摩擦因数大致在 0.006—0.45 之间 [27–29]. 经验分子动力学计算的结果为 0.15 [30] 和 0.1 [31], 量子化学从头算方法计算的结果为 0.05—0.16 [15]. 计算方面与我们模型最接近的是文献 [15], 该文献应用 HF 在 3—21 G 和 6—31 G* 的基组水平上研究了周围氢钝化的片状石墨烯层间的纳米摩擦. 文献 [15] 指出: 在较小压力下, 随着石墨烯片段增大, 石墨烯层间摩擦因数逐渐减小. 文献 [15] 研究的最大片段为 $C_{150}H_{30}/C_{96}H_{24}$, 作用于该片段的正压力范围为 120—200 nN (平均每个原子受压力约为 1—2 nN), 该文献给出此片段在 120 nN 正压力下的摩擦因数为 0.06, 200 nN 正压力下的摩擦因数为 0.05. 本文计算的周期性石墨烯 (可以看作石墨烯片段趋于无穷大的情形) 在 2 nN 正压力 (平均每个原子受压力为 1 nN) 下摩擦因数约为 0.05, 4 nN 正压力 (平均每个原子受压力为 2 nN) 下摩擦因数约为 0.1. 对比可见: 在 1 nN 较小压力下, 本文的计算结果与文献 [15] 的计算结果一致, 在 2 nN 较大压力下与文献 [15] 的计算结果相差较大. 这归因于片状石墨烯在不同压力下边界效应的差别, 即压力较小时, 石墨烯层间距大, 边界效应不显著; 压力较大时, 石墨烯层间距较小, 边界效应显著. 由图 5 可以发现石墨烯层间摩擦因数随正压力变化曲线可以划分为三段: 在 1—2 nN 较小压力下, 摩擦因数随正压力增加变化不明显, 遵循 Amonton 法则 [32]; 在 3—6 nN 阶段, 摩擦因数随正压力增大线性增加; 压力继续增加达到 6—9 nN 较大压力时, 摩擦因数随正压力增加趋于平缓, 这一阶段也遵循 Amonton 法则. 从计算所得的沿滑动方向势能变化可看出, 在较小和较大压力范围, 势能沿移动方向呈现近似线性变化, 压力增加, 曲线的斜率 (摩擦力) 也增加, 但斜率与正压力的比值保持不变, 也即摩擦因子保持不变. 而在中间压力范围, 在某一压力下势能沿滑动方向的变化不再是线性的, 不同压力下摩擦力与正压力的比值 (摩擦因子) 也不再保持不变. 从图 5 还可以发现两条曲线几乎完全重合, 说明沿两条滑动路径, 石墨烯层间摩擦因数同性. 这与图 4

所示的势能曲线一致, 图 4(b) 的势垒高于图 4(a), 但图 4(b) 路径较长, 由 (7) 式可知, 两条路径的摩擦因数应该接近. 总之, 石墨烯层间摩擦因数依赖于正压力, 且各向同性. 但是, 本文针对对称性石墨烯层间摩擦的计算, 还不能够对实验上测到的 0.01 以下的摩擦因数给出解释.

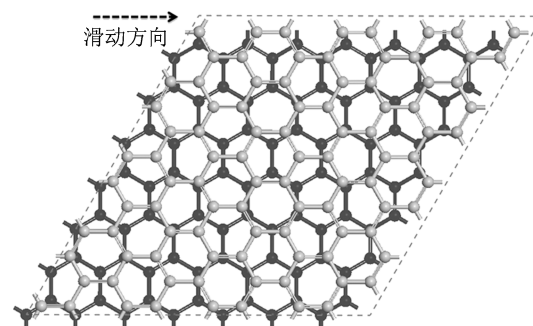


图 6 非对称性石墨烯之间的摩擦结构模型, 其超原胞为 $(4\sqrt{3} \times 4\sqrt{3})/(7 \times 7)$. 黑色原子表示下层 C 原子, 浅色原子表示上层 C 原子, 虚线箭头表示滑动方向

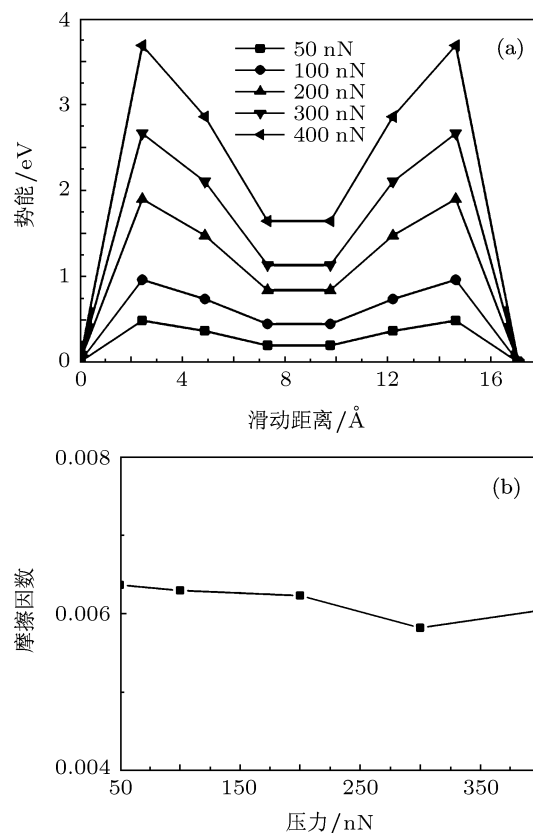


图 7 双层非对称性石墨烯之间的势能曲线及摩擦因数 (a) 滑动路径上不同压力下的势能曲线; (b) 不同压力下的摩擦因数

3.3 非对称石墨烯层间的摩擦现象

实验研究发现, 非对称的相对滑动界面, 摩擦

因数大大降低^[33,34], 半经验方法对非对称性石墨烯层间摩擦性质的研究也指出: 非对称性能够显著降低体系的摩擦因数^[13]. 接下来希望通过非对称性石墨烯层间纳米摩擦的计算, 解释实验上发现的超低摩擦因数. 在原来对称的双层石墨烯模型的基础上, 让上层石墨烯顺时针旋转 30° 即为本部分的计算模型, 超原胞如图 6 所示, 它是上层石墨烯 ($4\sqrt{3} \times 4\sqrt{3}$) 表面原胞放置在下层石墨烯 (7×7) 原胞上构成的超原胞, 其失配度很小, 约为 1%, 上层石墨烯的超原胞边长拉长了约 0.17 \AA . 超原胞的厚度为 25 \AA , 其中真空层约为 20 \AA . 图 6 中虚线箭头为石墨烯层间相对滑动路径. 对于非对称性石墨烯层间摩擦的计算, 由于选取的超原胞较大, Brillouin 区 k 点取样为 Γ 点.

采用计算对称性石墨烯摩擦因数的计算方法, 同样可以对非对称性石墨烯层间纳米摩擦进行计算. 计算选取的正压力范围为 $50\text{--}400 \text{ nN}$ (每个原子平均受力范围约为 $0.5\text{--}4 \text{ nN}$). 沿石墨烯滑动方向, 计算得到不同压力下的势能曲线如图 7(a) 所示, 滑动路径上的最大势垒约为 4 eV , 但平均到每个 C 原子仅为 0.04 eV , 而对称性系统滑动路径上每个 C 原子的最大平均势垒约为 0.8 eV , 非对称性石墨烯的最大势垒仅为对称性石墨烯最大势垒的 $1/20$, 由此可见非对称性大大降低了体系的滑动势垒. 通过势能曲线求出摩擦因数, 如图 7(b) 所示, 发现不同正压力下的摩擦因数基本相同, 在 0.006 上下波动, 这一摩擦因数不随压力变化的规律遵循 Amonton

法则. 可见非对称性可以大大减小石墨烯的层间摩擦因数, 这与实验一致. 对此现象给出简单的解释: 由图 6 可知, 沿滑动路径的不同位置, 所有原子不再整体地处于叠位或错位, 每个位置的叠位和错位的数量大致相等, 因此在滑动路径上, 不同位置的势能差别被抹平, 体系表现出较低的摩擦因数. 非对称性极大降低了石墨烯的层间摩擦因数, 说明可以通过旋转、掺杂以及制造缺陷来降低体系的对称性, 从而减小体系的摩擦.

4 结论

本文基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 计算了周期性双层石墨烯层间的滑动摩擦性质, 得到与实验以及其他理论计算相一致的结果. 关于摩擦因数与滑动路径之间关系的研究表明, 双层石墨烯层间摩擦各向同性. 关于摩擦因数与正压力之间关系的研究表明, 摩擦因数依赖于外加正压力, 对称的双层石墨烯层间摩擦因数随正压力增大可以分为三个阶段, 在较大以及较小压力时, 遵循 Amonton 法则, 摩擦因数不随压力改变; 而在中间的 $3\text{--}6 \text{ nN}$ 阶段, 摩擦因数随压力增大线性增加. 对非对称性石墨烯层间摩擦性质的研究发现: 非对称性可以降低体系沿滑动路径不同位置处的势能差别, 从而大大降低体系的摩擦因数. 以上研究对于了解纳米摩擦的机制以及从微观上控制摩擦提供了新的认识.

- [1] Binnig G, Rohrer H, Gerber C, Weibel E 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 57
- [2] Binnig G, Quate C F, Gerber C 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 930
- [3] Mate C M, McClelland G M, Erlandsson R, Chiang S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 1942
- [4] Tomlinson G A 1929 *Philos. Mag.* **7** 905
- [5] Weiss M, Elmer F 1996 *Phys. Rev.* **B 53** 7539
- [6] Zhong W, Tománek D 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 3054
- [7] Overney G, Zhong W, Tománek D 1991 *J. Vac. Sci. Technol.* **B 9** 479
- [8] Tománek D, Zhong W, Thomas H 1991 *Europhys. Lett.* **15** 887
- [9] Ni B, Sinnott S B 2001 *Surf. Sci.* **487** 87
- [10] Ni B, Sinnott S B, Mikulski P T, Harrison J A 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 205505
- [11] Servantie J, Gaspard P 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 185503
- [12] Bonelli F, Manini N, Cadelano E, Colombo L 2009 *Eur. Phys. J.* **B 70** 449
- [13] Guo Y, Guo W, Chen C 2007 *Phys. Rev.* **B 76** 155429
- [14] Verhoeven G S, Dienwiebel M, Frenken J W M 2004 *Phys. Rev.* **B 70** 165418
- [15] Neitola R, Ruuska H, Pakkanen T A 2005 *J. Phys. Chem.* **B 109** 10348
- [16] Matsuzawa N N, Kishii N 1997 *J. Phys. Chem.* **A 101** 10045
- [17] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **137** A1697
- [18] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** A1133
- [19] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev.* **B 54** 11169
- [20] Ceperley D M, Alder B J 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566
- [21] Trickey S B, Müller-Plathe F, Diercksen G H F, Boettger J C 1992 *Phys. Rev.* **B 45** 4460
- [22] Ooi N, Rairkar A, Adams J B 2006 *Carbon* **44** 231
- [23] Girifalco L A, Hodak M 2002 *Phys. Rev.* **B 65** 125404
- [24] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev.* **B 41** 7892
- [25] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev.* **B 13** 5188
- [26] McKie D, McKie C 1986 *Essentials of Crystallography* (Oxford: Oxford Press) pp6–8
- [27] Ruan J, Bhushan B 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 8117

- [28] Sugishita J, Fujiyoshi S 1981 *Wear* **68** 7
- [29] Zaidi H, Csapo E, Nery H, Paulmier D, Mathia T 1993 *Surf. Coat. Technol.* **62** 388
- [30] Matsushita K, Matsukawa H, Sasaki N 2005 *Solid State Commun.* **136** 51
- [31] Zaidi H, Paulmier D, Jeanmaire A, Nery H 1991 *Surf. Sci.* **251** 778
- [32] Müser M H, Wenning L, Robbins M O 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1295
- [33] Maier S, Pfeiffer O, Glatzel T, Meyer E, Filleter T, Bennewitz R 2007 *Phys. Rev. B* **75** 195408
- [34] Maier S, Gnecco E, Baratoff A, Bennewitz R, Meyer E 2008 *Phys. Rev. B* **78** 045432

First-principles study of nanoscale friction between graphenes*

Wang Jian-Jun Wang Fei Yuan Peng-Fei Sun Qiang Jia Yu[†]

(School of Physics and Engineering, Center for Energy and Quantum Structures, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

(Received 15 August 2011; revised manuscript received 19 October 2011)

Abstract

Using the first-principles calculations within the density functional theory, we study the nanofriction between two graphene layers. The result shows that the friction of the graphene is isotropic, and the relationship between the load and the friction factor can be divided into three phases. For the smaller and larger loads, the friction factor does not increase as the load increases, which follows the Amonton's law; for the middle phase, with the increase of the load, the friction factor increases linearly. However, the nanofriction characteristics between the two incommensurate graphenes show that the incommensurate structure can reduce the friction factor between graphenes greatly, which is in agreement with experimental result. These studies provide a fundamental understanding about the nanofriction phenomenon between the graphene layers.

Keywords: density functional theory, graphene, nanofriction

PACS: 68.35.Af, 71.15.Mb

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10974182) and the Natural Science Foundation of Henan Province, China (Grant No. 112300410149).

[†] E-mail: jiaju@zzu.edu.cn