

石墨烯-纳米探针相互作用有限元准静态计算*

张保磊[†] 王家序 肖科 李俊阳

(机械传动国家重点实验室, 重庆大学, 重庆 400038)

(2014年1月17日收到; 2014年3月5日收到修改稿)

纳米尺度探针是研究纳米薄膜材料的重要工具. 针对纳米探针和石墨烯相互作用有限元模型静态计算中难以收敛的困难, 应用动态显式算法通过间歇式探针进给方式进行能量耗散, 得出静态计算结果. 模型中界面作用力由界面黏结能和原子间作用势导出并植入Abaqus软件中界面作用子程序, 实现对石墨烯、探针, 基体系统内相互作用的仿真计算. 通过对比计算结果和实验数据, 对实验结果给出了一致性解释.

关键词: 石墨烯, 有限元, 界面作用力, 原子间作用势

PACS: 46.15.-X, 46.36.+X, 46.55.+D

DOI: 10.7498/aps.63.154601

1 引言

作为世界上已知强度最高的材料, 石墨烯(graphene)一经出现即吸引了材料和物理学界的极大关注^[1]. 石墨烯独特的电学、热学、力学, 和摩擦学性能, 使其在诸多领域展现出诱人的应用潜力. 其潜在应用包括透明电极^[2], 超高频晶体管^[3], 防渗化学屏障^[4-7], 和微纳机电系统^[8]等. 近年来, 大量的研究被投向石墨烯的电学^[9,10]和热学性能^[11], 一些极具潜力的应用研究也已展开.

Morozov等研究了石墨烯的量子干涉现象, Recher等通过实验在石墨烯环上观察到Aharonov-Bohm效应^[12]. 石墨烯的电子传输特性可使其被用于从单分子探测到自旋注入的多种应用, 其弹道电传导特征可被用来做p-n结、p-n-p结等场效应器件^[13-15]. Qin等^[16]研究了氢卤酸还原复合热处理法制得的石墨烯膜的导电性能, Zhang等^[17]研究了石墨烯一维超晶格的电子特征. 基于还原方法制得的石墨烯, 其半导体性能和鲁棒特性已可用于制造宏观尺度的薄膜电子装置^[18,19]和高性能电子谐振器^[20]. 由于石墨烯高导电性和石墨烯膜的大展弦比^[21,22], 石墨烯基的高分子复合材

料展现出特低的电渗流阈值(0.1 vol%). Sakhaee-Pour研究了单层石墨烯的振动行为, 及其作质量传感器、原子尘探测器^[23], 和应变传感器^[24]的潜力. Hou等^[25]用Green's函数方法对扶手椅形石墨烯带在磁场和单轴向应变情况下的自旋输运性能进行了计算, 高^[26]基于密度泛函理论计算了用硼、氮、硅、磷元素替代氟化石墨烯中少量碳原子后原子片的磁性和电子性质. Hui等^[27]用分子动力学方法研究了单层和双层硅功能化石墨烯的导热性能, Yang等^[28]用分子动力学方法研究了石墨烯诱导聚合物结晶的分子机理. Huang等^[29]对外延石墨烯和生长基体之间进行了其他金属元素的嵌入, Li等^[30]用激光辅助在聚合物支撑的石墨烯膜上进行了纳米结构制造, Huang等^[31]合成了三维石墨烯泡沫.

力学方面的研究相对较少, 但这些研究证实了石墨烯具有独特的力学和摩擦学特征. 分子动力学仿真显示单层和多层石墨烯自由状态下表面产生轻微褶皱^[32], 用多种方法制作的石墨烯也均呈现出比块状石墨低的摩擦系数^[33,34], 展示了其未来可被用作固体润滑材料的潜力. 根据Lee等在纳米尺度上所做的测量, 机械剥离法制得的石墨烯是已知的强度最高的材料^[35], CVD方法制得的石墨烯

* 国家自然科学基金(批准号: 51375506)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: blzhangphilly@gmail.com

强度有轻微降低^[36]. Filletter等证明由外延法制的石墨烯单层比双层具有更高的摩擦系数^[37], 这种现象也被Lee等^[38]在其他二维材料中观察到. 从而, 从单层到多层摩擦系数单调降低被认为可能是当基底材料黏结不强时二维材料的普遍特征. 这种摩擦性能对厚度的依赖被猜测可能是薄膜褶皱的原因, 较薄的膜层比较厚的膜层更易产生面外变形, 在黏结力作用下产生环绕探针的面外变形, 产生更大的接触面积和摩擦力.

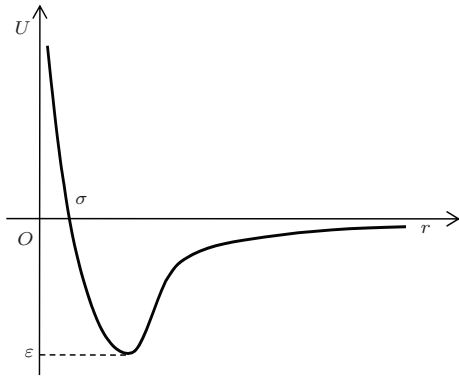


图1 原子间势能和距离关系示意图

在石墨烯力学性能测试中, 以原子力(AFM)显微镜探针为代表的纳米探针, 是测试中和石墨烯直接作用的部件. 研究此类纳米探针和石墨烯之间的力和接触关系, 从计算中分析探针黏结力和石墨烯层数的关系, 对石墨烯的后续研究具有重要意义. 但由于探针和石墨烯之间作用力的强烈非线性, 在有限元静态计算中常遇到收敛困难, 致使无法顺利求解. 本文尝试用有限元动态显式算法, 结合探针间歇式进给方式进行能量耗散, 即准静态算法, 得出静态解. 并将计算结果和试验数据进行对比分析.

2 模型

2.1 界面作用力

为定义石墨烯和其他作用体之间的作用函数, 用两原子间作用势, 如图1所示, 对石墨烯膜层之间、石墨烯与其他块状材料之间、块状材料与块状材料之间, 进行作用势和作用力的推导.

如图2(a), (b), (c)所示, 模型中共有三类相互作用, 即石墨烯与石墨烯之间、石墨烯与块体之间、块体与块体之间. 假设材料间距为 h , 对上层材料取一无穷小面积 dA , 设石墨烯原子密度为

ρ_g , 图2(b)中块体材料原子密度为 ρ_b , 图2(c)中两块体材料原子密度分别为 ρ_{m1} 和 ρ_{m2} . 并设参数 $\delta = \sqrt{x^2 + y^2}$, $r = \sqrt{z^2 + \delta^2}$, 原子间势函数为 $U(r)$, 则图2(a)中所示两石墨烯膜层相互作用时, dA 面积上总原子间势能为

$$d\Phi_{\text{gra-gra}} = 2\pi\rho_g^2 dA \int_0^{+\infty} U(r)\delta d\delta. \quad (1)$$

同理, 图2(b)中通过对势能函数进行 $-Z$ 向积分, 可得石墨烯与块体材料相互作用时 dA 面积上的总原子间势能为

$$\begin{aligned} d\Phi_{\text{gra-bulk}} &= \int_{V_{\text{bulk}}} \rho_g dA \cdot U(r) \cdot \rho_b dV_{\text{bulk}} \\ &= 2\pi\rho_g\rho_b dA \int_{-\infty}^{-h} dz \int_0^{+\infty} V(r)\delta d\delta. \end{aligned} \quad (2)$$

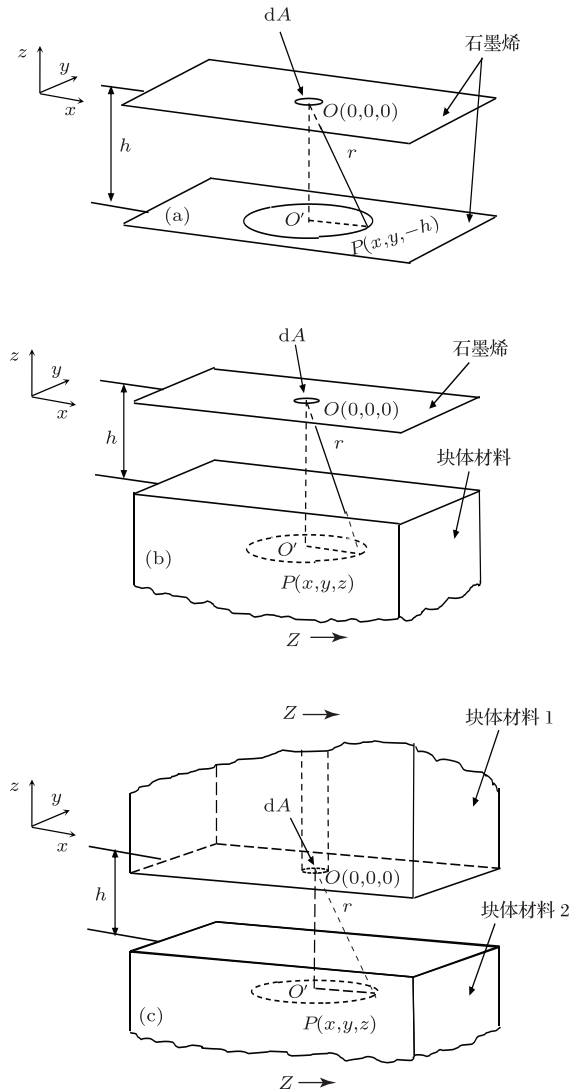


图2 石墨烯自身之间、石墨烯与块体、块体与块体之间势能推导示意图 (a) 石墨烯之间; (b) 石墨烯与块体之间; (c) 块体与块体之间

(1), (2) 式所得势能均为距离 h 的函数, 为求两块体间的势能函数, 将 (2) 式中密度值分别换为两块体材料密度值 ρ_{m1} 和 ρ_{m2} , h 用 h' 代替, 并以 h' 作为自变量在 $(h, +\infty)$ 区间积分, 得距离为 h 的两块体材料相互作用时图中 dA 面积上的势能函数:

$$\begin{aligned} d\Phi_{\text{mat1-mat2}} &= 2\pi\rho_{m1}\rho_{m2}dA \int_h^{+\infty} dh' \int_{-\infty}^{-h'} dz \\ &\times \int_0^{+\infty} U(r)\delta d\delta. \end{aligned} \quad (3)$$

则图 2 中 (a), (b), (c) 三种情形下两相互作用体在不同距离处单位面积上的作用力为

$$f = \frac{\partial (d\Phi/dA)}{\partial h}. \quad (4)$$

根据各界面力函数, 通过编制 Abaqus 软件中 VUINTER 子程序进行有限元仿真计算.

2.2 势函数选择

本文中, 势函数选用 Lennard-Jones 势

$$U(r) = 4\epsilon \left(\frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6} \right), \quad (5)$$

其中, 参数 ϵ 为两原子间势阱深度, σ 为零势能原子间距, r 为两原子间实际距离. 对任意两个界面, 通过黏结能数值结合前述黏结能 (1), (2), (3) 式, 据物质元素组成加权确定 σ , 进而求得参数 ϵ .

2.3 等效弹性壳

只有一层碳原子构成的石墨烯, 可被近似看作只有面内刚度 C 和抗弯刚度 D 两个弹性参数的均匀壳体, C, D 值可分别取 59 eV/atom, 0.8 eV^[39]. 由单晶石墨弹性常量测试可得石墨烯泊松比值 $\nu = 0.19$ ^[39]. 设与石墨烯力学性能等效的弹性壳厚度为 H , 杨氏模量为 Y , 由 $D = YH^3/(1 - \nu^2)$ 和 $C = YH$, 可解得 $Y = 5.5$ TPa, $H = 0.066$ nm^[39].

2.4 刚体弹性壳弹性体模型

因石墨烯的只有一个碳原子尺寸的厚度, 与可看作三维块体材料的探针相比, 其刚度较小, 故模型中将探针视作刚体, 用一刚体半球建模. 与支撑石墨烯的基体一起组成刚体-弹性壳-弹性体模型.

2.5 探针进给方式

如图 3 所示, 探针进给过程被分为多个进给周期, 每个进给周期分为进给和悬停两部分, 在悬停

时段内探针保持静止, 石墨烯和基体以设定阻尼进行能量耗散, 使结果达到稳态值. 如图中第 n 个进给周期, T_{nL} 和 T_{nH} 分别对应加载和悬停两个阶段, 载荷幅值分别为 1 和 0.

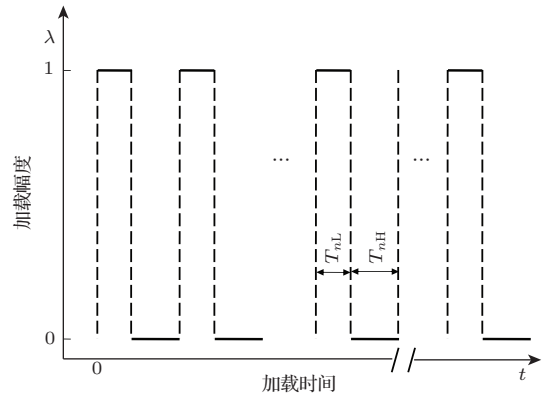


图 3 加载幅度-时间示意图

2.6 两类模型结构

石墨烯实际层间摩擦状况, 尚无明确理论和确凿实验数据, 但层间摩擦无限大和零摩擦作为两种极限情况, 对研究其力学特征无疑具有重要意义. 本文针对石墨烯层间摩擦无限大和零摩擦两种极限情况分别进行建模.

模型 I 假定石墨烯层间摩擦系数为无限大, 即受力过程中层间无任何相对滑动. 材料从一层至多层可通过简单增加弹性壳厚度实现, 但由于弹性壳厚度为对石墨烯力学性能进行等效计算后得出的等效值, 所以程序运行中力作用距离和实际距离数值不同. 故由增加层引起的作用力增加值, 按层间标准距离值进行计算后累加至壳体界面. 如对两层石墨烯, 弹性壳厚度增加为原来两倍, 则界面作用力为 $f_1 + f_2$, 其中 f_2 为基于石墨烯层间实际距离 (本文中取 0.34 nm) 计算后, 第二层石墨烯所受作用力. 不同厚度石墨烯界面作用力大小具体如表 1 所示. 模型结构如图 4 所示.

表 1 层间无滑动模型不同厚度石墨烯壳体总表面作用力

模型	表面作用力
1 层	f_1
2 层	$f_1 + f_2$
...	...
N 层	$f_1 + f_2 + \dots + f_n$

模型 II 假定石墨烯层间摩擦系数为零, 材料从一层至多层通过增加相应数目的弹性壳实现. 每

一层壳体与其他层和基体、探针的作用力分别计算. 模型结构如图 5 所示.

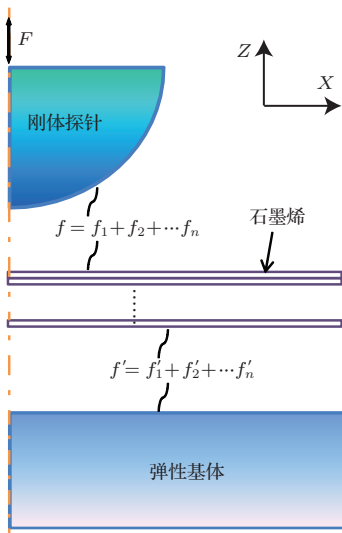


图 4 模型 I 示意图

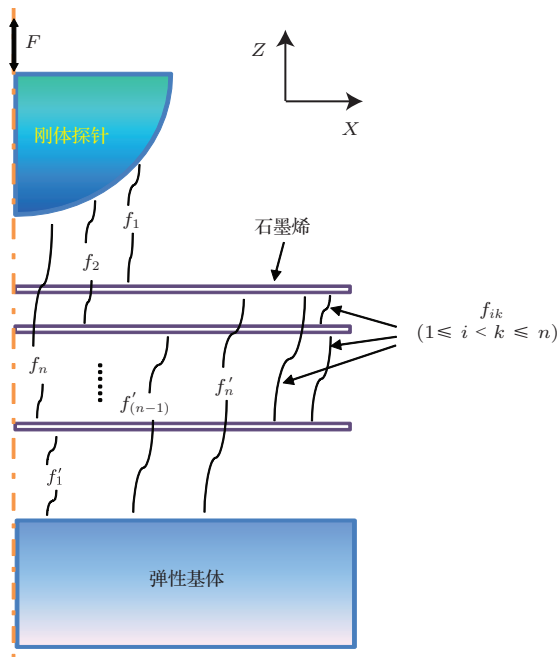


图 5 模型 II 示意图

2.7 基体表面粗糙度影响

Tevis 原子力显微镜探针黏结实验显示^[40], 探针与对偶面轻微的表面粗糙度变化即可对黏结力产生明显影响. 本模型中为表示基体表面粗糙度对石墨烯和基体作用力的影响, 引入参数 K_s , K_s 取 1 对应基体为理想平面, K_s 取 0 相应于基体作用力降低至零. 本文中 K_s 值从大到小依次取 0.8, 0.5, 0.3, 0.1, 代表基体表面从光滑到粗糙, 基体-石墨烯、基

体-探针间作用力依次减小.

3 模型赋值和试运算

3.1 模型物理参数确定

为和实验数据对比, 模型以硅探针和放置于硅基体上的石墨烯为仿真对象, 石墨烯碳原子密度取 $\rho_{\text{gra}} = 36.6 \times 10^{18} / \text{nm}^2$; 试验中探针和基体表面氧化层厚度分别约为 2 nm 和 300 nm, 故探针原子密度 ρ_{pro} 和基体原子密度 ρ_{sub} 均取 SiO_2 晶体中平均原子密度, 即将硅、氧原子看作同一种物质取平均原子密度 $\rho_{\text{pro}} = \rho_{\text{sub}} = 6.62 \times 10^{28} / \text{nm}^3$.

为计算探针和石墨烯、石墨烯与基体、探针与基体间作用力对应的 ε , σ 值. 两个硅氧化物表面之间黏结能按两二氧化硅固体表面黏结能数值取 $W_{\text{pro-sub}} = 315 \text{ mJ/m}^2$ ^[41]. 石墨烯和硅氧化物间黏结能基于石墨和二氧化硅各自黏结能数值取 $W_{\text{gra-pro}} = W_{\text{gra-sub}} = 275 \text{ mJ/m}^2$ ^[41]. 石墨烯和基体、探针间 σ 值, 按碳-硅、碳-氧原子间数值进行 1 : 2 加权计算, $\sigma_{\text{gra-sub}} = \sigma_{\text{gra-pro}} = 0.31 \text{ nm}$. 探针和基体间 σ 值, 先分别计算硅、氧原子与对偶材料作用的 σ 值, 再按 1:2 进行插值, 得 $\sigma_{\text{pro-sub}} = 0.33 \text{ nm}$. 根据黏结能和 (2), (3) 式, 并代入相应 σ 值, 得 $\varepsilon_{\text{gra-sub}} = \varepsilon_{\text{gra-pro}} = 2.1 \times 10^{-21} \text{ J}$, $\varepsilon_{\text{pro-sub}} = 6.6 \times 10^{-22} \text{ J}$.

石墨烯厚度取从一层至四层. 硅氧化物和石墨烯 Rayleigh 阻尼系数均取 $\alpha = 0.1$, $\beta = 0.033$. 硅氧化物基体杨氏模量和泊松比, 按 SiO_2 材料对应值, 分别取 70 MPa 和 0.17.

3.2 模型尺寸确定

根据探针常规尺寸, 本模型中取探针半径为 30 nm. 基于基体变形区域尺寸和基体总尺寸相比尽可能小的要求, 同时不使模型规模过大, 本模型中石墨烯和基体半径、基体厚度均取 200 nm.

3.3 探针运行方式

对一至四层厚度的石墨烯, 初始时探针表面最低点距石墨烯上表面均为 21 nm, 探针向石墨烯和基体按进给-悬停模式垂直下行 23 nm, 即石墨烯被向基体内部方向压入 2 nm, 而后探针按同样返回上行, 顺次经受斥力和吸附力, 直至和石墨烯脱黏分离.

4 结果讨论

探针所受力和探针与石墨烯接触面积均取每一周期经能量耗散后结果值. 图6为运算过程中探针受力和时间的关系示意图. 每一周期内, 探针受力先在进给过程中达到一峰值, 随后在悬停过程中经能量耗散达到稳定值, 如图6中虚线所示.

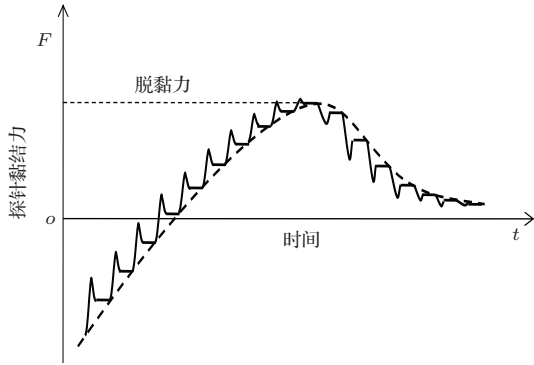


图6 探针黏结力和时间关系示意图

4.1 I类模型

从图7结果看出, 对于I类模型, 随材料层数的增加, 无论 K_s 值大小, 石墨烯脱黏力均呈增大趋势.

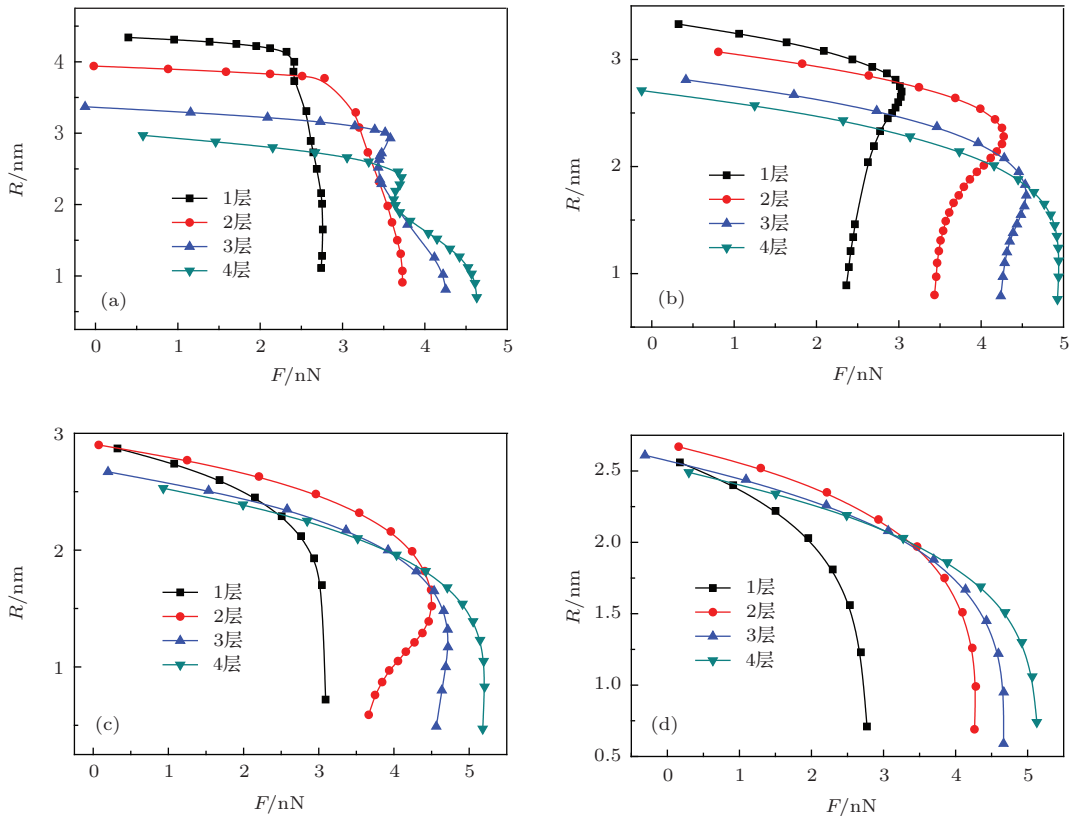


图7 层间无滑动模型取不同基底影响系数时探针受力和接触半径关系 (a) $K_s = 0.1$; (b) $K_s = 0.3$; (c) $K_s = 0.5$; (d) $K_s = 0.8$

势. 其中, 从一层增加至两层过程中, 脱黏力增加幅度最大. 从两层厚度增加至四层厚度过程中, 脱黏力呈小幅增加. 在作用力和接触面积的关系方面, 图7(c), (d)中显示, 当 K_s 取0.8, 0.5时, 随层数的增加, 同等作用力对应的接触面积数值较为接近. 但随 K_s 值降至0.3, 0.1后, 随层数的增加, 同等作用力对应的接触面积逐渐减小.

4.2 II类模型

对于II类模型, 从图8看出, 随材料叠加层数的增加, 单原子层材料脱黏力总体呈增加态势, 在 K_s 取0.1, 0.3时, 从一层至四层脱黏力逐层增加, 且增加幅度依次递减. 但 K_s 取0.5, 0.8时, 脱黏力在三层时达到最大, 至四层厚度时, 脱黏力出现小幅减小.

在作用力和接触面积的关系方面, II类模型和I类模型表现出类似趋势, 即 K_s 取值较小时, 也即基体作用影响较小时, 材料层数愈少, 同样的作用力对应愈大的接触面积. K_s 取值较大, 如图8(c), (d)所示, 取值为0.8和0.5时, 材料层数愈少, 同等作用力对应的接触面积愈小.

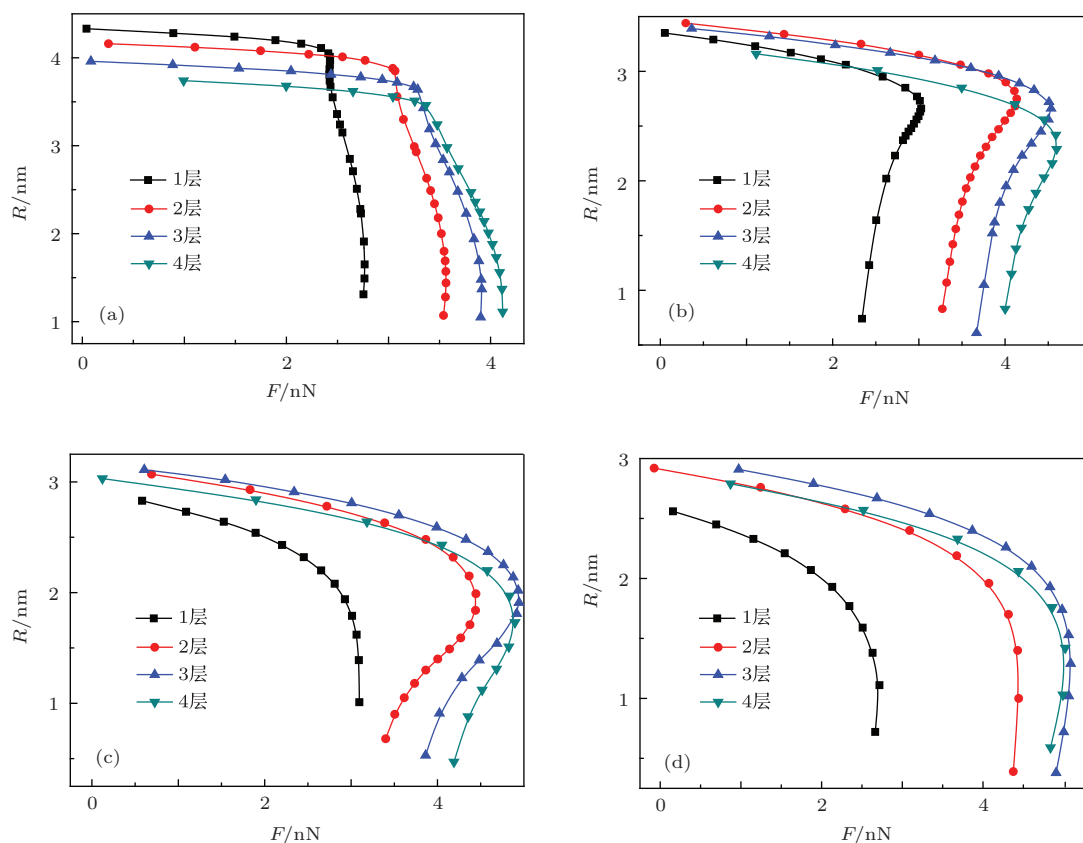


图8 层间零摩擦模型取不同基底影响系数时探针受力和接触半径关系 (a) $K_s = 0.1$; (b) $K_s = 0.3$; (c) $K_s = 0.5$; (d) $K_s = 0.8$

4.3 数据对比

综合I, II两类模型结果, 无论石墨烯层间摩擦是无限大还是零摩擦, 在材料层数从1层增加至多层的过程中, 脱黏力都会增大. 但会在达到一极限值后开始下降, 并随材料变厚而下降至一稳定值. 材料层数愈多, 也即愈厚的材料, 每增加一层, 作用力的变化, 无论从绝对数值还是百分比方面都呈现出变化愈小的趋势. 根据此趋势可以推理, 随材料层数的继续增加, 脱黏力最终达到一稳定数值. 这一结果和块状材料的脱黏力数值稳定这一基本现象符合. 在接触面积方面, 可以看出, 在 K_s 取值从大到小的过程中, 作用力和接触面积的关系呈现出重要的不同. 即当基体影响降低至一定数值后, 同样作用力条件下, 相对薄的材料对应较大的接触面积. 由于纳米摩擦状态下, 接触面积和摩擦力直接正相关, 所以考虑摩擦因素后将可导致更大的摩擦力, 结果与Lee等^[38]所做AFM摩擦实验结果相符, 即更薄的石墨烯产生更大的摩擦力.

图9所示为用原子力显微镜测试石墨烯脱黏力试验结果归一化后的数值. 从图9中可见, 石墨

烯从一层增加至四层过程中, 脱黏力并没有明显增加或减小的趋势, 而是在 $\pm 10\%$ 左右的范围内跳动. 但本文中模型计算结果均显示两层至多层厚度的石墨烯比一层石墨烯脱黏力有显著增加. 差异原因应是由于模型中探针为理想光滑平面, 但实际探针平面为不规则崎岖表面. 由于较薄的石墨烯更易于变形, 在探针崎岖表面获得更大实际接触面积, 所以受到更大吸附力, 使一层厚度的脱黏力和二至四层厚度的脱黏力相比没有明显差别.

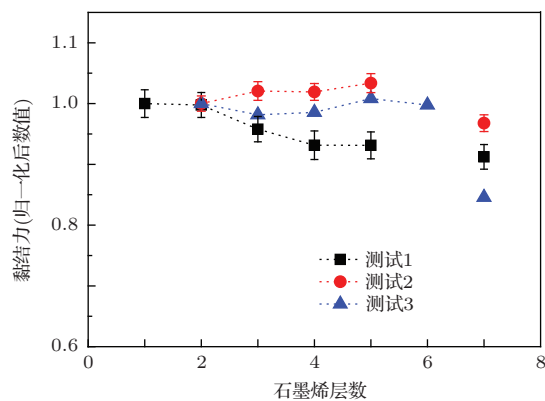


图9 不同层数石墨烯脱黏力测量归一化后数值

对于二至四层厚度的石墨烯,第I类模型中各基体影响参数下最大脱黏力相对于两层厚度脱黏力增加范围为4.4%至20.6%;而第II类模型中对应增加范围为1.4%至6.9%,更接近于实验值.

所以, Lee等^[38]实验中随石墨烯厚度增加探针脱黏力无明显变化但摩擦力明显变小的现象,是接触面积和石墨烯厚度互动变化的结果.即石墨烯从薄变厚过程中,探针和石墨烯接触面积逐渐变小,而且滑动时会产生更小比例的针尖前端褶皱,造成摩擦力的减小.但随石墨烯层数的增加,虽然接触面积变小,但新增石墨烯层和探针之间的吸附力也施加于探针,使探针脱黏力没有因接触面积减小而呈现明显变化.随着新增石墨烯层和探针之间的距离超出范德华(van der Waals)力作用距离后,摩擦力和脱黏力均趋于稳定,探针所受作用力呈现出和石墨固体作用时的力学特征.

5 结 论

应用显式动态解法结合间歇式进给模式进行能量耗散,可避开探针、石墨烯、基体有限元计算中复杂非线性作用力导致的求解困难,取得静态求解效果.应用黏结能结合Lennard-Jones势推导石墨烯、探针、基体体系之中相互作用力,建立层间无限大摩擦和层间无摩擦两类模型,利用有限元方法,可对纳米探针和石墨烯相互作用过程进行仿真.基体表面对石墨烯作用的强弱对探针和石墨烯间的力—接触关系具有重要影响.基体和石墨烯间相互作用足够弱时,相同大小作用力条件下,较薄的石墨烯对应较大的接触面积.

感谢美国宾夕法尼亚大学(University of Pennsylvania)Robert W. Carpick教授、John L. Bassani教授, Qunyang Li博士的悉心指导,感谢博士生Xin Z. Liu在本文试验中给予的所有帮助.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Sci.* **306** 666
- [2] Bae S, Kim H, Lee Y, Xu X, Park J S, Zheng Y, Balakrishnan J, Lei T, Kim H R, Song Y I 2010 *Nature Nanotech.* **5** 574
- [3] Lin Y M, Dimitrakopoulos C, Jenkins K A, Farmer D B, Chiu H Y, Grill A, Avouris P 2010 *Sci.* **327** 662

- [4] Koenig S P, Wang L, Pellegrino J, Bunch J S 2012 *Nature Nano.* **7** 728
- [5] Jiang D E, Cooper V R, Dai S 2009 *Nano Lett.* **9** 4019
- [6] Han Y, Xu Z, Gao C 2013 *Adv. Funct. Mater.* **23** 3693
- [7] Bunch J S, Verbridge S S, Alden J S, van der Zande A M, Parpia J M, Craighead H G, McEuen P L 2008 *Nano Lett.* **8** 2458
- [8] Bunch J, van der Zande A, Verbridge S, Frank I, Tanenbaum D, Parpia J, Craighead H, McEuen P 2007 *Sci.* **315** 490
- [9] Castro N A H, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [10] Novoselov K S, Morozov S V, Mohinddin T M G, Ponomarenko L A, Elias D C, Yang R, Barbolina I I, Blake P, Booth T J, Jiang D, Giesbers J, Hill E W, Geim A K 2007 *Phys. Status. Solidi. B* **244** 4106
- [11] Chen S, Wu Q, Mishra C, Kang J, Zhang H, Cho K, Cai W, Balandin A A, Ruoff R S 2012 *Nat. Mater.* **11** 203
- [12] Russo S, Oostinga J B, D Wehenkel, H B Heersche, S S Sobhani, L M K Vandersypen, A. F. Morpurgo 2007 *e-print arXiv: 0711 1508*
- [13] Cheianov V V, Fal'ko V I 2006 *Phys. Rev. B* **74** 041403
- [14] Cheianov V V, V Fal'ko, Altshuler B L 2007 *Sci.* **315** 1252
- [15] Ossipov A, Titov M, Beenakker C W J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 241401
- [16] Qin M M, Ji W, Feng Y Y, Feng W 2014 *Chin. Phys. B* **23** 028103
- [17] Zhang Y P, Yin Y H, Lü H H, Zhang H Y 2014 *Chin. Phys. B* **23** 027202
- [18] Eda G, Fanchini G, Chhowalla M 2008 *Nat. Nanotech-nol.* **3** 270
- [19] Robinson J T, Perkins F K, Snow E S, Wei Z, Sheehan P E 2008 *Nano. Lett.* **8** 3137
- [20] Robinson J T, Zalalutdinov M, Baldwin J W, Snow E S, Wei Z, Sheehan P, Houston B H 2008 *Nano Lett.* **8** 441
- [21] Stankovich S, Dikin D A, Dommett G H B, Kohlhaas K M, Zimney E J, Stach E A, Piner R D, Nguyen S T, Ruoff R S 2006 *Nat.* **442** 282
- [22] Liu N, Luo F, Wu H, Liu Y, Zhang C, Chen J 2008 *Adv. Funct. Mater.* **18** 1518
- [23] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Sci.* **306** 666
- [24] Stankovich S, Dikin D A, Dommett G H B, Kohlhaas K M, Zimney E J, Stach E A, Piner R D, Nguyen S T, Ruoff R S 2006 *Nat.* **442** 282
- [25] Hou H P, Xie Y E, Chen Y P, Ou Y T, Ge Q X, Zhong J X 2013 *Chin. Phys. B* **22** 087303
- [26] Gao T H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 046102 (in Chinese) [高潭华 2014 物理学报 **63** 046102]
- [27] Hui Z X, He P F, Dai Y, Wu A H 2014 *Acta. Phys. Sin.* **63** 074401 (in Chinese) [惠治鑫, 贺鹏飞, 戴瑛, 吴艾辉 2014 物理学报 **63** 074401]
- [28] Yang J S, Huang D H, Cao Q L, Li Q, Wang L Z, Wang F H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 098101
- [29] Huang L, Xu W Y, Que Y D, Mao J H, Meng L, Pan L D, Li G, Wang Y L Du, S X, Liu Y Q, Gao H J 2013 *Chin. Phys. B* **22** 096803

- [30] Li Z J, Li Q, Cheng Z G, Li H B, Fang Y 2014 *Chin. Phys. B* **23** 028102
- [31] Huang W B, Wang G L, Gao F Q, Qiao Z T, Wang G, Chen M J, Tao L, Deng Y, Sun L F 2014 *Chin. Phys. B* **23** 046802
- [32] Han T W, He P F 2010 *Acta. Phys. Sin.* **59** 3408 (in Chinese) [韩同伟, 贺鹏飞 2010 物理学报 **59** 3408]
- [33] Shin Y J, Stromberg R, Nay R, Huang H, Wee A T S, Yang H, Bhatia C S 2011 *Carbon* **49** 4070
- [34] Kim K S, Lee H J, Lee C, Lee S K, Jang H, Ahn J H, Kim J H, Lee H J 2011 *ACS Nano* **5** 5107
- [35] Lee C, Wei X, Kysar J, Hone J 2008 *Sci.* **321** 385
- [36] Lee G H, Cooper R C, An S J, Lee S, van der Zande A, Petrone N, Hammerberg A G, Lee C, Crawford B, Oliver W, Kysar J W, Hone J 2013 *Sci.* **340** 1073
- [37] Filleter T, McChesney J L, Bostwick A, Rotenberg E, Emtsev K V, Seyller T, Horn K, Bennewitz R 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 086102
- [38] Lee C, Li Q, Kalb W, Liu X, Berger H, R W Carpick, Hone J 2010 *Sci.* **328** 76
- [39] B I Yakobson, C J Brabec, J Bernholc 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 14
- [40] Jacobs T D B, Ryan K E, Keating P L, Grierson D S, Lefever J A, Turner K T, Harrison J A, Carpick R W 2013 *Tribol. Lett.* **50** 81
- [41] Staszczuk P, Janczuk B, Chibowski E 1985 *Mater. Chem. Phys.* **12** 469

Quasi-static finite element calculation of interaction between graphene and nanoprobe*

Zhang Bao-Lei[†] Wang Jia-Xu Xiao Ke Li Jun-Yang

(The State Key Laboratory of Mechanical Transmission, Chongqing University, Chongqing 400038, China)

(Received 17 January 2014; revised manuscript received 5 March 2014)

Abstract

Probes of nano scale are a type of important tools for the study on nano-film material. Dynamic explicit method accompanied by the intermittent feeding of probe to dissipate the energy is applied to avoid the difficulty of convergence in the finite element model for a system of probe, graphene, and substrate. And the results of a static state are obtained from this strategy. The functions of interface interaction forces are deduced from adhesion energy and the potential between atoms. The force functions are implanted into subroutines in Abaqus code to simulate the interactions among graphene layers, probe, and substrate. Results of simulations show good consistency with the data of experiments.

Keywords: graphene, finite element method, interface interaction, potential energy among atoms

PACS: 46.15.-X, 46.36.+X, 46.55.+D

DOI: 10.7498/aps.63.154601

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51375506).

† Corresponding author. E-mail: blzhangphilly@gmail.com