

金属纳米薄膜在石墨基底表面的动力学演化

李艳茹 何秋香 王芳 向浪 钟建新 孟利军

Dynamical evolution study of metal nanofilms on graphite substrates

Li Yan-Ru He Qiu-Xiang Wang Fang Xiang Lang Zhong Jian-Xin Meng Li-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 036804 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.036804

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.036804>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I3>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

温度和应变速率耦合作用下纳米晶 Ni 压缩行为研究

Compressive behavior of nanocrystalline nickel at various temperatures and strain rates

物理学报.2015, 64(13): 137103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.137103>

石墨烯等离激元的光学性质及其应用前景

Optical properties of graphene plasmons and their potential applications

物理学报.2015, 64(10): 106801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.106801>

硅晶体表面石墨烯褶皱形貌的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics study of ripples in graphene monolayer on silicon surface

物理学报.2015, 64(1): 016804 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016804>

入射能量对 Au/Au(111) 薄膜生长影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of the effect of incident energy on the growth of Au/Au (111) thin film

物理学报.2014, 63(12): 126801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.126801>

Be 原子在 Be 基底上的沉积过程研究

Atomistic study of deposition process of Be thin film on Be substrate

物理学报.2012, 61(9): 096801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.096801>

金属纳米薄膜在石墨基底表面的动力学演化*

李艳茹¹⁾ 何秋香¹⁾ 王芳¹⁾ 向浪¹⁾ 钟建新¹⁾²⁾ 孟利军^{1)2)†}

1)(湘潭大学物理与光电工程学院, 湘潭 411105)

2)(微纳能源材料与器件湖南省重点实验室, 湘潭 411105)

(2015年5月19日收到; 2015年10月26日收到修改稿)

采用分子动力学方法研究了金属 Au 和 Pt 纳米薄膜在石墨(烯)基底表面的动力学演化过程, 探讨了金属薄膜和石墨(烯)基底间的相互作用对金属纳米薄膜在固态基底表面的去湿以及脱附的动力学演化的影响. 研究表明, 在高温下, 相同层数的 Au 和 Pt 纳米薄膜在单层石墨基底表面上存在不同的去湿现象, 主要表现为厚度较小的 Pt 纳米薄膜在去湿过程中有纳米空洞形成, 而同样厚度的 Au 薄膜在去湿过程中没有形成空洞. Au 和 Pt 两种金属薄膜在高温下都去湿形成纳米液滴, 这些液滴最终都以一定的速度脱离基底. 在模拟的薄膜厚度范围内(0.2—2.3 nm), Au 和 Pt 纳米液滴脱离基底的速度随厚度增加表现出不同的变化规律. Pt 纳米液滴的脱离速度随薄膜初始厚度的增加先增加后减少, 而 Au 脱离速度随厚度的增加先减少, 达到一个临界厚度后脱离速度突然迅速增加. 利用薄膜与基底间相互作用的不同导致去湿过程中的黏滞耗散不同, 定性分析了这种变化规律的原因. 此外, 进一步研究还发现金属液滴的脱离时间与薄膜厚度和模拟温度的依赖关系, 发现脱离时间随薄膜厚度的增加而增加, 随模拟温度的升高而减小. 这些研究结果可以为金属镀膜、浮选、表面清洁、器件表面去湿等工业生产过程提供理论指导.

关键词: 分子动力学模拟, 纳米薄膜, 石墨, 纳米液滴

PACS: 68.65.Pq, 68.55.J-, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.65.036804

1 引言

薄膜在固体表面的浸润性和非浸润性在化工领域具有非常重要的作用, 如污水的处理、表面的润滑、汽车零部件的镀膜、表面清洁等^[1-4]. 研究表明: 薄膜在较厚时(一般大于 100 nm), 因重力作用可以稳定存在; 而在薄膜较薄时(一般小于 100 nm), 薄膜由于存在表面张力梯度使得液膜变形或破裂, 造成去湿现象^[5]. 近年来, 国内外学者对影响薄膜去湿动力学的因素进行了大量的理论和实验研究, 这些影响因素归纳起来包括三个方面: 1) 薄膜本身, 不同的薄膜成分和元素比例, 将导致不同的去湿动力学过程, 譬如金属薄膜和高分子有机材料在固态基底上表现出不同的去湿动力学^[6]; 2) 基底, 由于基底与薄膜之间存在相互作用,

不仅基底的种类会影响薄膜的生长和去湿过程, 而且基底的厚度同样对薄膜的动力学过程有重要的影响, 譬如同样的金属薄膜在 SiO₂ 基底和石墨基底上将表现出不同的去湿动力学过程, 不同厚度的石墨基底也将对薄膜产生不同的黏性耗散作用^[7]; 3) 外界环境, 由于原子之间的相互作用力与原子种类和原子间距等因素有关, 因此, 当外界环境存在杂质原子时, 会改变原子之间的相互作用, 而当外界温度和压力发生改变时, 原子间距一般会发生改变, 也会改变原子之间的作用力, 从而进一步影响薄膜的去湿和脱附过程^[8]. 实验上, 金属纳米薄膜在固态基底上的演化过程一般是: 纳米薄膜受热开始熔化, 表面张力导致薄膜收缩, 由于薄膜收缩不均匀, 较薄的纳米膜会破裂形成纳米洞, 通过质量和能量的传递纳米洞逐渐融合、生长, 最后消失, 形成纳米液滴, 而较厚的纳米膜将直接形成纳米液

* 国家自然科学基金青年基金(批准号: 11204261, 11204260)和长江学者和创新团队发展计划(批准号: IRT13093)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ljmeng@xtu.edu.cn,

滴. 这些形成的纳米液滴最终可能由于基底的黏性相互作用较强而沉积在基底表面, 也可能由于动能足够大而摆脱基底的黏性吸引作用脱离基底表面 [4,9–11]. 研究这种多重因素影响的复杂动力学过程, 一般先抽出单一因素而固定其他因素, 弄清楚每一个因素对动力学过程的影响; 然后研究两种或多种因素共同影响下其动力学过程的变化. 这样做一方面可以从理论上加深对薄膜去湿和脱离过程的理解, 从而为建立基本的去湿和脱附动力学模型提供理论参考; 另一方面实际过程往往是多重因素的综合作用结果, 通过理解单一因素的影响, 将有助于理解实际的动力学过程, 并为进一步在实际中控制薄膜的生长和演化提供理论指导.

本文通过分子动力学方法模拟了高温条件下 Au 和 Pt 的纳米圆盘薄膜在固态石墨烯基底上去湿过程, 分析了薄膜和基底之间的相互作用对薄膜去湿的影响, 并进一步从能量角度对去湿过程进行了讨论.

2 计算方法和模型

建模晶格常数分别为 4.08 \AA 和 3.92 \AA 的 Au 和 Pt 的面心立方 (FCC) 块体结构, 从它们的块体结构中沿 (100) 方向截取不同层数金属纳米圆盘结构, 然后置于单层或三层石墨基底上, 作为分子动力学模拟的初始结构模型. Au 和 Pt 的金属纳米圆盘结构的半径都为 8 nm , 圆盘面积约为 20106.2 \AA^2 , 初始纳米结构原子层数范围在 1–11 层, 其厚度约为 $0.2\text{--}2.3 \text{ nm}$. 金属原子层与基底表面的初始距离约为 3.0 \AA . 石墨烯基底的尺寸为 $295.14 \text{ \AA} \times 306.72 \text{ \AA}$ (包含 34560 个碳原子), 石墨基底的尺寸为 $213.05 \text{ \AA} \times 209.10 \text{ \AA}$ (包含 51000 个碳原子), 基底尺寸都远大于金属圆盘的半径, 因而可以忽略近邻模拟单胞中金属薄膜之间的相互作用. 计算模型如图 1 所示.

分子动力学方法可以从原子尺度上获得关于体系随时间演化的动力学信息, 我们采用国际上广泛使用的分子动力学模拟的开源软件包 LAMMPS 来模拟 Au 和 Pt 纳米薄膜在固态石墨基底上的动力学演化过程 [12,13]. 在分子动力学模拟中, 最重要的是选择合适的能描述原子之间相互作用的势函数. 对于金属原子之间的相互作用, 国内外学者普遍采用嵌入原子势 (embedded-atom method, EAM) [14]. 大量的计算模拟表明, 嵌入原子势能够很好地描述金属元素在不同温度和压强下的动力

学过程, 对于本文所模拟的两种金属元素 Au-Au 和 Pt-Pt 之间的相互作用势选用 EAM 势. 单层石墨烯基底 C-C 原子之间的相互作用采用 Tersoff 势进行描述. 三层石墨基底 C-C 之间的相互作用采用 AIREBO (adaptive intermolecular reactive empirical bond order) 势来描述 [15]. 而金属 Au, Pt 和基底 C 原子之间的相互作用采用国际上广泛用于描述金属和碳元素之间相互作用的勒让德-琼斯 (LJ) 势 [14–16]. Au-C 体系的 LJ 参数为 $\epsilon = 0.01273 \text{ eV}$, $\sigma = 2.9943 \text{ \AA}$ [16], 其中, ϵ 代表势阱深度, σ 代表截断半径. 而 Pt-C 体系的 LJ 参数 $\epsilon = 0.04092 \text{ eV}$, $\sigma = 2.936 \text{ \AA}$ [17]. ϵ 越大, 说明薄膜和基底的相互作用越强. 我们预测不同的金属材料, 由于其势阱深度的不同, 其去湿现象也会不同.

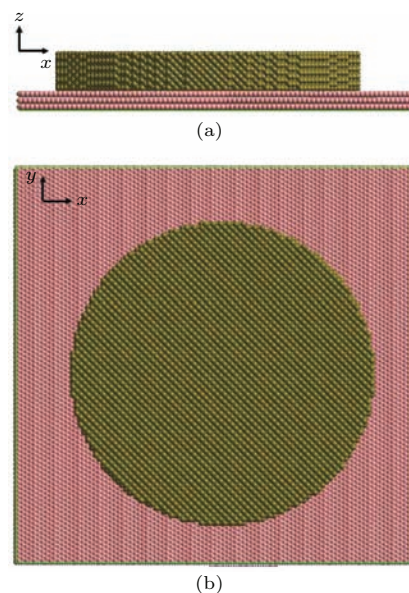


图 1 (网刊彩色) 计算模型: 半径为 80 \AA 的 8 层 Au 纳米圆盘置于三层石墨基底上, Au 原子有 25130 个, 基底 C 原子有 51000 个, 基底 C 原子层与 Au 原子层之间的初始距离约为 3.0 \AA . (a) 侧面模型图; (b) 俯视模型图

Fig. 1. (color online) Simulation model: an eight-layer Au nanodisk with radius of 80 \AA positioned on a three-layer graphite, the atom total number are 25130 and 51000 for Au and C atoms, respectively, the initial distance is about 3.0 \AA between C atom layer of substrate and Au atom layer: (a) Side view; (b) top view.

实验上, 一般通过纳秒脉冲激光器照射基底表面 (主要为石墨烯或 SiO_2) 的金属薄膜研究其去湿演化的动力学过程. 在脉冲激光照射过程中, 薄膜的动力学演化过程由于受电子显微镜的时间和空间分辨率的限制, 并不能很清楚地获得原子演化的动力学信息, 而这些信息对于建立完整的固态基底薄膜去湿和脱离理论可以提供重要的参考. 采用

分子动力学模拟方法不仅可以获得金属纳米薄膜去湿过程的整体特征信息(如脱离时间, 脱离速度等), 而且同样可以获得体系原子水平的动力学信息(如空洞形成). 在脉冲激光照射过程中, 体系一般存在一个升温-恒温-降温的过程, 从而使得金属薄膜存在一定的温度梯度, 但由于我们模拟的模型其薄膜厚度远小于脉冲激光的波长, 可以近似认为在一个脉冲激光照射下, 其薄膜温度迅速升高到一定的温度, 从而实现其去湿过程. 因此, 在所有模拟过程中采用正则系综(NVT)在恒定温度下进行模拟. 在分子动力学模拟中, 首先对体系进行了能量极小化处理, 以达到零温度下体系低能状态. Au块体的熔点为1337 K, 沸点为3243 K, Pt晶体的熔点为2045 K, 沸点为4100 K. 而纳米级的金属颗粒其熔沸点一般要低于其块体的熔沸点^[18]. 因此, 我们模拟的温度范围对于Au薄膜选在1000—2500 K之间, 而Pt薄膜选在2800—4000 K之间, 这些模拟温度都没有超过体系的熔化温度. 分子动力学模拟中, 模型在X, Y方向上采取周期性边界条件, Z方向上采取非周期性边界条件. 单层石墨烯基底完全固定, 而对于三层石墨烯基底则只固定底层原子, 其他原子层不固定. 模拟的时间步长为1 fs^[16].

为了研究金属纳米液滴从石墨(烯)基底表面的脱离过程, 我们计算了纳米液滴的脱离速度和脱离时间. 液滴在Z轴方向上的速度为 $v_z = dz_{cm}/dt$, 其中 Z_{cm} 为液滴质心在Z轴方向上的位置, t 为液态薄膜弛豫后恒温下演化的时间^[16]. v_z 为液滴在Z轴方向上的宏观运动速度. 分子动力学模拟中, 原子的初始速度是采用速度标度方法按高斯分布随机产生, 由于我们是在恒定的温度下进行模拟, 原子随机速度产生的动能在初始时刻和终止时刻是近似相同的, 因此在分析纳米液滴的定向运动时, 主要考虑表面能的减小导致的纳米液滴定向运动的动能. 液滴脱离基底表面后由于与基底的相互作用很小, 可以忽略. 液滴脱离基底表面后由于惯性运动将会以恒定的速度在Z轴方向上运动, v_z 刚开始保持恒定时对应的时刻即为脱离时间 t_d , 对应的恒定速度即为脱离速度 v_d (也称为发射速度).

3 结果与讨论

通过计算金属纳米液滴的脱离速度, 我们发现Au和Pt的脱离速度随薄膜层数的变化规律完全不同. 在我们模拟的薄膜厚度范围内(0.2—2.3 nm),

Pt纳米液滴的脱离速度随薄膜层数的增加变化趋势是先增加后减小, 而Au纳米液滴的脱离速度随薄膜层数的增加变化趋势是先减小, 然后迅速增加, 如图2所示.

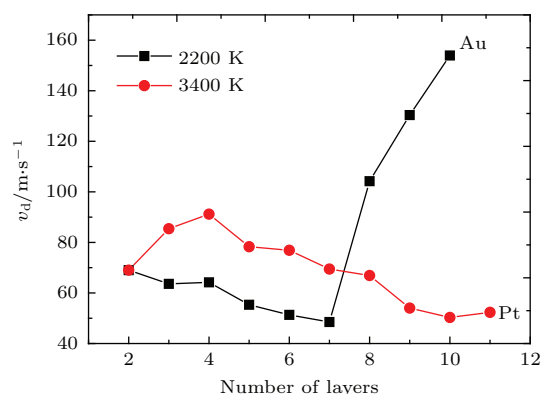


图2 金属Au和Pt纳米液滴的脱离速度与金属薄膜初始层数的关系

Fig. 2. The detachment velocity of Au and Pt nanodroplets versus the initial layer number of film.

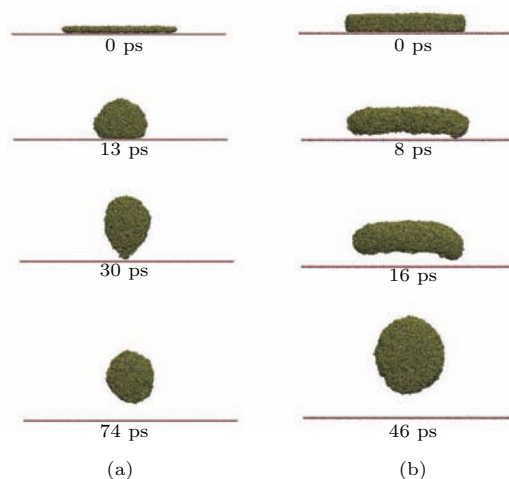


图3 (网刊彩色)2200 K温度下, (a) 3层和(b) 8层Au纳米薄膜在单层石墨基底表面的动力学演化过程

Fig. 3. (color online) The dynamical evolution of the Au nanofilm with thickness of three-layers (a) and eight-layers (b) on a single-layer graphene substrate at temperature 2200 K.

对于初始结构小于7层(厚度小于1.23 nm)的Au的纳米薄膜在恒温下的去湿过程如图3(a)所示: 开始时固态纳米圆盘在高温下迅速熔化形成液态圆盘, 然后由于表面张力的作用圆盘从边缘开始快速收缩, 形成“球冠”状的纳米液滴, 由于刚性基底的限制, 纳米液滴获得了一个垂直基底方向的速度, 液滴形状在Z轴方向上拉长, 形成倒挂的水滴一样的形状, 最终形成球形液滴脱离基底表面. 在金属纳米圆盘收缩为纳米液滴的过程中, 其表面积大大减小, 使得表面能大幅降低, 这些减少的表面

能一部分补偿了由于基底黏性相互作用而损失的耗散能, 另外一部分转化为液滴 Z 方向上的动能, 从而使得纳米液滴以一定的脱离速度离开基底表面. 对于初始层数多于3层(厚度大于0.4 nm)的Pt纳米圆盘薄膜, 其去湿过程与上述情况类似, 最终形成的纳米液滴其脱离速度同样是随厚度的增加而减小. Habenicht等^[4]通过脉冲激光照射固态基底表面的金纳米薄膜, 从而使Au薄膜去湿形成纳米液滴而脱离基底, 实验结果发现最终Au纳米液滴的脱离速度随薄膜初始厚度的增加而减少. 我们的模拟结果与Habenicht等^[4]人的实验结果定性相符, 表明通过去湿形成的纳米液体的脱离速度与初始纳米薄膜的厚度有重要的依赖关系^[19].

我们还比较了薄的Pt和Au纳米圆盘的去湿过程, 发现两者的去湿过程存在重要的差别: 层数较少的Pt纳米薄膜在去湿过程中形成了纳米空洞^[19], 而Au纳米薄膜没有形成纳米空洞, 如图4所示. 纳米空洞的形成不仅与金属原子之间的相互作用有关, 同时与金属-基底之间的相互作用有关. 正是由于纳米空洞的形成, 使得纳米液滴在厚度较小时的脱离速度 v_d 表现出不同的变化

趋势^[19]. 对于层数较少的Pt纳米圆盘(少于4层), 由于纳米空洞的形成, 其等效接触面积迅速减小, 导致了脱离速度的降低, 而层数较低的Au纳米薄膜在单层石墨基底上的去湿过程中没有纳米空洞的形成, v_d 随薄膜层数的增加直接减小, 没有出现Pt纳米薄膜的 v_d 随薄膜厚度先增加后减小的变化趋势.

对于初始层数大于7层(厚度约为1.23 nm)的Au纳米薄膜的去湿过程, 如图3(b)所示. 可以看到, 在Au薄膜的去湿过程中, 纳米金属薄膜熔化后由于表面张力的作用, 薄膜边缘迅速收缩, 但因为Au与基底碳原子之间的相互作用很弱(势阱深度 $\varepsilon = 0.01273$ eV^[18]), 收缩过程中液膜离开基底表面越来越远, 在还没有形成球形液滴时, 液膜形成了中部凹陷而周围凸出的类似“圆帽”形的结构. 这种特殊的结构最终由于表面张力的作用收缩为“卵形”的纳米液滴, 以较快的速度脱离基底. 脱离速度 v_d 显著增加的, 可能原因是Au薄膜在去湿收缩过程中很快离开基底, 从而减小了基底的黏性耗散损耗, 相应地增加了表面能向动能的转化率, 从而使得脱离速度 v_d 增加.

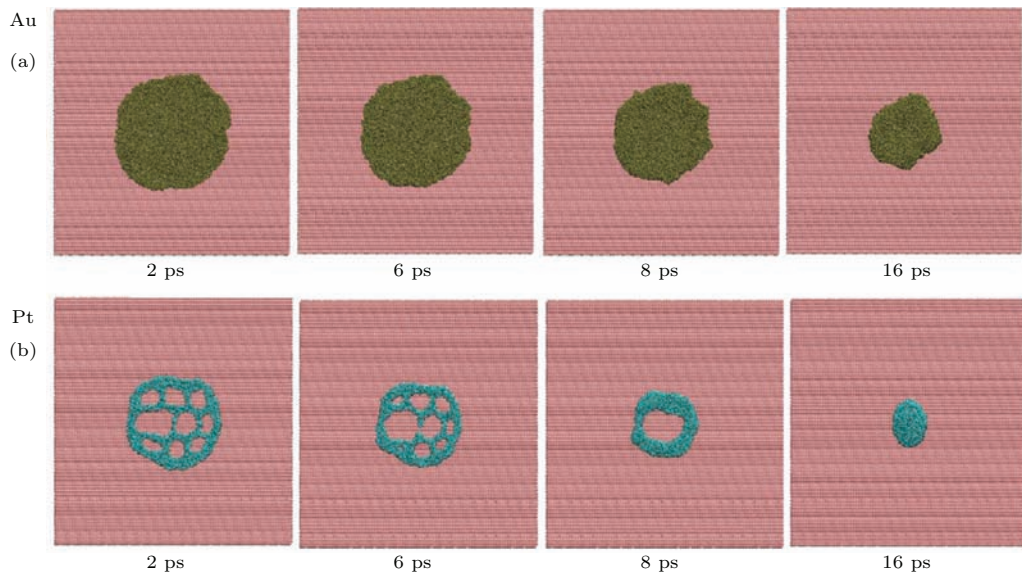


图4 (网刊彩色) 石墨烯基底上金属薄膜的动力学演化过程 (a) 单层 Au 纳米薄膜, 温度 2200 K; (b) 单层 Pt 纳米薄膜, 温度 3800 K.

Fig. 4. (color online) The dynamical evolution of (a) a single-layer Au film and (b) a single-layer Pt film on a graphene substrate at temperature 2200 K and 3800 K, respectively.

为了进一步弄清基底黏性相互作用对脱离速度的影响, 我们还模拟了Pt纳米薄膜在石墨烯基底和三层石墨基底上的去湿和脱离过程, 结果如图5所示. 通过计算石墨烯和三层石墨基底上纳米

液滴的脱离速度 v_d , 发现同一模拟温度和金属薄膜厚度条件下, 石墨烯基底上纳米液滴的脱离速度 v_d 要大于三层石墨基底上的脱离速度 v_d . 这是因为减少石墨基底的层数导致基底和纳米薄膜之间的

相互作用降低,使得石墨烯基底比三层石墨基底上的黏滞损耗减小,从而相应地增加了石墨烯基底上金属薄膜表面能向动能转化的效率,最终导致石墨烯基底上Pt纳米液滴的脱离速度比三层石墨上Pt纳米液滴的脱离速度大.

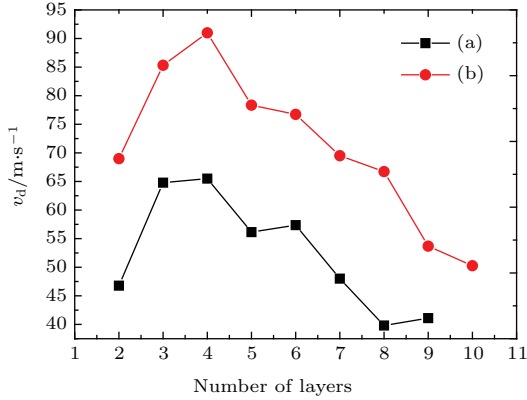


图5 脱离速度随薄膜层数的变化关系 (a) 三层石墨基底; (b) 石墨烯基底; 温度 3400 K
Fig. 5. The detachment velocity of Pt film versus the number of layers on (a) three-layers graphite substrate and (b) single-layer graphene at temperature 3400 K.

此外,我们还计算了Pt纳米液滴的脱离时间 t_d . 脱离时间是从金属液膜开始演化到液滴从基底上脱离出去的时间,它可以反映纳米薄膜收缩成核的快慢. 通过分析脱离时间,可以得到纳米薄膜在刚性基底上成核的收缩速度. t_d 越长,从液膜到液滴的收缩速度就越慢,反之 t_d 越短,收缩速度就越快. Pt纳米薄滴的脱离时间 t_d 随层数和温度的变化如图6和图7所示. 模拟结果表明,脱离时间 t_d 随薄膜厚度的增加而增加. 图7中显示了初始Pt薄膜厚度为3层、6层、9层条件下,脱离时间 t_d 随温度的增加而减少.

从图6和图7中可以看出:随着薄膜层数的增加Pt纳米薄膜的脱离时间 t_d 逐渐增加,表明在相同温度条件下,半径相同的Pt纳米薄膜,初始厚度越大,收缩速度越小. 而脱离时间 t_d 随温度升高而稍微减小,表明随着温度的升高,Pt液态薄膜的收缩稍微加快. 我们用流体力学里面的规律来试着解释金属液膜的收缩速度随厚度和温度的变化规律. 忽略黏滞耗散和动态传播参数的影响,金属薄膜边缘的收缩速度可以通过 Taylor-Culik 速度估算^[4,20],其表达式为

$$V_i = \sqrt{\frac{2S}{\rho \cdot d}}, \quad (1)$$

其中 S 为液态膜的传播参数, ρ 为体液密度, d 为薄

膜厚度. 传播参数 S 的表达式为

$$S = \gamma_{sg} - (\gamma_{sl} + \gamma_{gl}), \quad (2)$$

$\gamma_{sg}, \gamma_{sl}, \gamma_{gl}$ 分别代表固-气,固-液,气-液之间的表面张力系数.

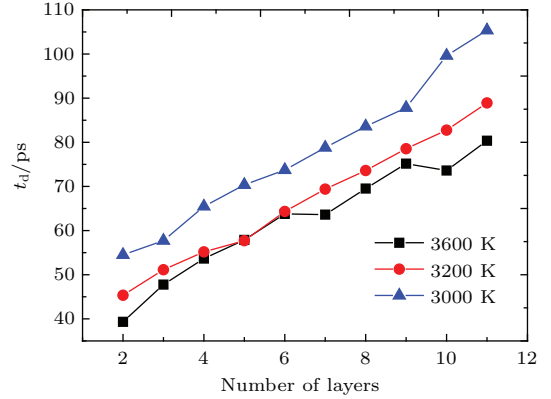


图6 金属Pt纳米液滴的脱离时间 t_d 与初始薄膜层数的变化关系
Fig. 6. The detachment time t_d of Pt nanodroplet as a function of the initial number of layers.

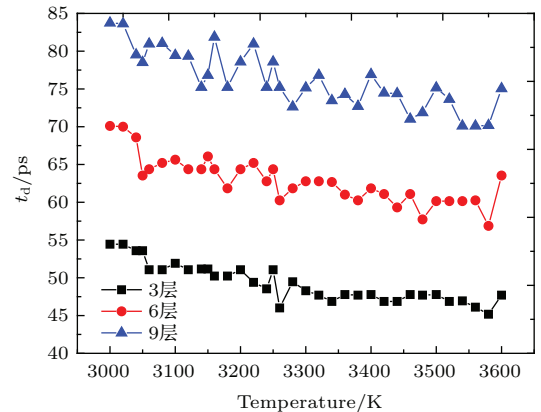


图7 金属Pt纳米液滴的脱离时间 t_d 与温度的变化关系
Fig. 7. The detachment time t_d of Pt nanodroplet as a function of temperature.

由(1)式可知:当薄膜的厚度 d 增大时,收缩速度减小,薄膜需要更长的时间才能收缩成液滴,从而导致脱离时间 t_d 增加,这个结论与我们的模拟结果一致. 当改变模拟温度时,虽然收缩速度并不明显依赖于时间,但由于温度影响传播参数 S 和液体密度 ρ ,因而也会导致收缩速度和 t_d 的变化. 当温度升高时,一方面由于 ρ 减小,从而直接导致收缩速度增加, t_d 减少. 另一方面,由于温度升高薄膜与固态基底之间的黏性力(摩擦力)减小,黏性系数和表面张力系数 γ_{sl} 都减小,从而导致传播参数 S 增加,最终同样导致收缩速度增加,脱离时间 t_d 减少. 基于这两方面的原因,使得纳米液膜的收缩速

度会随温度的增加而增加, 脱离时间随温度的升高而减少. 因此, 分子动力学的模拟结果与我们根据收缩速度公式分析的结果是一致的.

4 结 论

本文通过分子动力学方法模拟了 Au 和 Pt 两种金属纳米薄膜在石墨(烯)固态基底上去湿和脱离过程, 着重探讨了金属薄膜与基底之间相互作用对金属薄膜去湿和脱离动力学的影响. 当薄膜的厚度和大小在纳米尺度时, 表面张力和来自基底的黏性力对薄膜的去湿动力学变得相当重要, 这些因素不仅使得金属纳米薄膜在固态基底上去湿过程表现出复杂的动力学过程, 同时也使纳米液滴的脱离速度 v_d 随薄膜初始厚度的变化表现出不同的变化规律. 模拟结果表明 Au 和 Pt 纳米薄膜在石墨(烯)基底表现出了不同的去湿和脱离的动力学过程. 首先, Pt 在去湿过程中出现纳米空洞, 而 Au 在去湿过程中没有形成纳米空洞. 其次, Pt 纳米液滴的脱离速度 v_d 随薄膜初始厚度的增加先增加后减少, 而 Au 液滴的脱离速度 v_d 随厚度的增加先减少, 达到一个临界厚度后 v_d 突然迅速增加, 表现出完全不同于 Pt 纳米薄膜脱离速度的变化关系. 通过与基底的黏性相互作用和表面能与动能的转化效率对 Pt 和 Au 两种金属薄膜不同的去湿动力学进行了定性分析. 此外, 计算了 Pt 纳米液滴的脱离时间 t_d 随薄膜厚度和温度的变化关系, 发现液滴的 t_d 随厚度的增加而增加, 随温度的增加而减少. 对这一模拟结果, 我们基于流体动力学中的液膜收缩速度进行了分析, 得到了定性一致的结论. 这些结论为更好地理解纳米薄膜的去湿机理提供了重要的参考 [5,6,21].

参考文献

- [1] Li H, Zeng X C 2012 *ACS Nano* **6** 2401
- [2] Severin N, Lange P, Sokolov I M 2012 *Nano Lett.* **12** 774
- [3] Galashev A Y, Rakhmanova O R 2015 *Chin. Phys. B* **24** 020701
- [4] Habenicht A, Olapinski M, Burmeister F 2005 *Science* **309** 2043
- [5] Afsar-Siddiqui A B, Luckham P F, Matar O K 2003 *Adv. Colloid Interf.* **106** 183
- [6] Afkhami S, Kondic L 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 034501
- [7] Roy S, Mukherjee R 2012 *ACS Appl. Mater. Interf.* **4** 5375
- [8] Liu C Q, Chen C Z, Qiu S, Wu Y D, Li P, Yu C Y 2008 *Funct. Mater.* **39** 1853 (in Chinese) [刘翠青, 陈城钊, 邱胜, 吴燕丹, 李平, 余楚迎 2008 功能材料 **39** 1853]
- [9] Rack P D, Guan Y, Fowlkes J D 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 223108
- [10] Wu Y, Fowlkes J D, Rack P D 2010 *Langmuir* **26** 11972
- [11] Jin R, Cao Y C, Hao E 2003 *Nature* **425** 487
- [12] Wu X, Zhao H, Zhong M 2014 *Carbon* **66** 31
- [13] Yuan Q, Zhao Y P 2013 *J. Fluid Mech.* **716** 171
- [14] Li X, He Y, Wang Y 2014 *Sci. Rep.* **4** 3938
- [15] Nguyen T D, Fuentes-Cabrera M, Fowlkes J D 2012 *Langmuir* **28** 13960
- [16] Fuentes-Cabrera M, Rhodes B H, Baskes M I 2011 *ACS Nano* **5** 7130
- [17] Sankaranarayanan S K R S, Bhethanabotla V R, Joseph B 2005 *Phys. Rev. B* **72** 195405
- [18] Arcidiacono S, Walther J H, Poulikakos D 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 105502
- [19] Li Y, Tang C, Zhong J, et al. 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 064304
- [20] Fuentes-Cabrera M, Rhodes B H, Fowlkes J D 2011 *Phys. Rev. E* **83** 041603
- [21] Wei Q, E W J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 160508 (in Chinese) [魏琪, 鄂文汲 2012 物理学报 **61** 160508]

Dynamical evolution study of metal nanofilms on graphite substrates*

Li Yan-Ru¹⁾ He Qiu-Xiang¹⁾ Wang Fang¹⁾ Xiang Lang¹⁾
Zhong Jian-Xin¹⁾²⁾ Meng Li-Jun^{1)2)†}

1) (Faculty of Physics and Optoelectronic Engineering, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

2) (Hunan Key Laboratory for Micro-Nano Energy Materials and Devices, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

(Received 19 May 2015; revised manuscript received 26 October 2015)

Abstract

The dynamical evolution process of nanoscaled film on a solid substrate depends on many factors, such as the properties of thin film, the characteristics of the substrate, and the external environment. It is essential to elucidate the influences of these factors for our understanding self-organized growth of nanoparticles and the dewetting/detachment mechanism of nanofilm on a solid substrate. In the present paper, we investigate the dynamical dewetting/detachment of metal Au and Pt nanofilm on a graphene/graphite substrate at high temperature by using the molecular dynamics simulation technique. We discuss the influences of metal-substrate interaction, temperature and thickness of film on the dewetting dynamics. Our results reveal that the Au and Pt nanofilms with the same initial thickness on graphene substrates manifest different dewetting dynamical processes at high temperatures. Some nanoscale holes are formed randomly during the dewetting of Pt nanofilm with a thickness of less than 0.6 nm because of the strong interaction between the Pt films and substrate. In contrast, no hole is observed and a nanodroplet is formed directly by high temperature dewetting for Au nanofilm with the same initial thickness as that of Pt nanofilm. The resulting Au and Pt nanodroplets move in the vertical direction due to the surface tension and the constraint of the solid substrate. A high-temperature nanodroplet will be detached from the graphene substrate surface at a constant speed. Interestingly, the values of detachment velocity (v_d) of nanodroplets show different dependences on initial thickness for Au and Pt nanofilm, respectively. In a thickness range of 0.2–2.3 nm, the v_d of Pt nanodroplet increases and then decreases as the thickness of nanofilm increases. However, the v_d of Au nanodroplet decreases gradually and then increases steeply as the Au nanofilm turns thicker. The different thickness dependences of v_d for Au and Pt nanofilms are analyzed qualitatively by considering different metal-substrate viscous dissipations. In addition, the detachment time (t_d) of a dewetting metal film is also related to the temperature and the thickness of substrate. Our results demonstrate that the t_d decreases monotonically with the decrease of film thickness and the raise of temperature. These results provide a theoretical guideline for industrial production processes, such as metal coating, flotation, and the surface cleaning.

Keywords: molecular dynamics simulation, nanofilm, graphite, nanodroplet

PACS: 68.65.Pq, 68.55.J-, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.65.036804

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11204261, 11204260), and the Program for Changjiang Scholars and Innovative Research Team in University, China (Grant No. IRT13093).

† Corresponding author. E-mail: ljmeng@xtu.edu.cn,