

超细 Pt 纳米线结构和熔化行为的分子动力学模拟研究

夏冬 王新强[†]

(重庆大学物理学院, 重庆 401331)

(2011年7月12日收到; 2011年11月28日收到修改稿)

基于 EAM 原子嵌入势, 对临界尺寸下的自由 Pt 纳米线的奇异结构和熔化行为进行分子动力学模拟. 模拟结果显示, 超细 Pt 纳米线的熔点随直径向尺寸和结构的不同而发生明显改变; 引入林德曼因子, 令其临界值为 0.03, 以此得到对应熔点值大小与通过势能 - 温度变化曲线找出的一致, 又比较了纳米线各层粒子平均林德曼指数的大小, 对各层纳米结构的热稳定性进行定量标度; 综合分析发现螺旋结构纳米线的熔化从内核开始, 而多边形结构的纳米线的熔化从外壳层开始.

关键词: Pt 纳米线, 奇异结构, 熔化行为, 分子动力学模拟

PACS: 05.70.-a, 31.15.Qg

1 引言

金属纳米线作为纳米材料中的重要一员, 表现出不同于在块体材料的力、热、光、电和磁学性质^[1-4], 在未来的微纳电子器件中具有极其重要的应用价值, 自由的奇异结构可为电导量子化和尺寸效应等提供理想的模型^[5].

目前, 金属纳米线的结构特征和性质得到广泛研究^[6-18]. 实验上通过多种方法能制备出直径在几个纳米尺度下足够长的金属纳米线, 如用扫描隧道显微镜挑起原子或机械式接点断裂分离原子的方法^[19,20]. 对金属纳米线的理论研究, 如分子动力学 (MD) 模拟能帮助我们研究纳米线的结构, 观察结构随时间的演变以及对其各种热力学性质进行计算和预测. 基于 MD 方法, 大量工作得以展开^[6-33]. 如 Tosatti 等人用分子动力学结合胶水势, 模拟了超细的 Pb 和 Al 金属纳米线的多层螺旋结构^[23]. Kang 和 Hwang 等人研究了超细 Cu 纳米线多层螺旋结构特性、稳定性和熔化行为等^[24], 王广厚小组也对 Au, Ti 和 Zr 多层螺旋结构纳米线的振动谱, 电学和传导性质进行了研究^[25,26].

由于金属纳米线的尺寸和结构将影响到纳米线的性质, 如金属纳米线的熔化温度随半径的减小而降低, 表现出很强的尺寸效应. 大量实验研究和理论计算表明, 纳米线的熔化始于外表面, 这是由于外表面上的原子具有较小的配位数和较弱的原子键能^[27,28], 然而有人对 Au, Pd 和 Zr 纳米线的分子动力学模拟, 却发现了熔化开始于内部粒子的反常现象^[29].

基于分子动力学的方法, 我们主要研究了直径在几个纳米量级下的超细 Pt 纳米线的奇异结构稳定性和热稳定性, 以及在升温熔化过程中的位形和体相的演变过程. 通过比较纳米线各层粒子平均林德曼指数的大小, 直观形象地反映出纳米线熔化行为的内在机理, 更能解释 Pt 纳米线的熔化是始于内核先还是外层的差异. 研究这些性质的变化规律将有助于我们对金属纳米线进行构造和制备.

2 模拟方法

EAM 势已被证实能有效模拟出金属单质原子所构成的团簇、纳米线升温熔化行为^[30-32], 在我

[†] E-mail: xqwang@cqu.edu.cn

们的研究中,采用 EAM 势对 Pt 纳米线进行分子动力学模拟,也得到了规则而稳定的多层螺旋纳米结构,与相关的研究相似^[28-32].为此,我们又进一步研究了超细 Pt 纳米线奇异结构的熔化行为.

先采用 NPT 系综对单晶 Pt 进行模拟,我们得到单晶铂的熔点为 2050 K,此理论计算值与实验结果 2045 K 很好的符合.在此基础上,来研究 Pt 纳米线的升温熔化行为.我们根据遗传算法得到了一系列稳定且规则排列的纳米线,线长为 11.8890 个晶格常数,即 4.66 nm,约 17 个 Pt 原子的长度.为了模拟无限长自由纳米线的结构和性质,在轴线方向加上周期性边界条件.最后采用正则系综 (NVT) 进行模拟,时间步长选定为 2 fs (2×10^{-15} s),其小于晶格振动周期,且能在 1 万步以内达到平衡状态,这样的时间步长既能清楚的显示出位形的演变过程,又能保证计算效率.由于所建模型的初态不影响物质的热平衡性质,因此开始时在室温 (300 K) 下运行 10000 步,让系统充分弛豫;再进行退火模拟,先逐步升温至熔点附近使其结构充分的弛豫,然后再降温至 0 K,这样符合实验中的退火过程,能得到体系能量较低的纳米线的稳定结构.

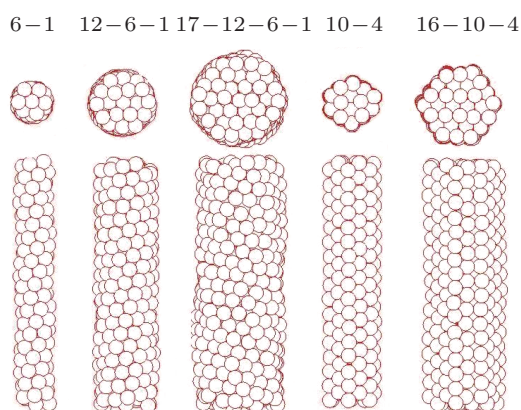


图 1 Pt 纳米线的几种构型 (6-1, 12-6-1, 17-12-6-1, 10-4 和 16-10-4)

3 结果与分析

3.1 纳米线的结构

众多研究表明,当金属纳米线的径向尺寸降低到某一临界值以下时,将表现出不同于块体密堆积的奇异结构,如多层螺旋柱状结构.我们用 $n_1-n_2-n_3-n_4$ 的格式来表示这些多层螺旋结构, n_1, n_2, n_3, n_4 分别表示每个层上原子链数, n_1 为最外层原子链数, n_4 为最内层原子链数.通过对 Pt 纳米线的

分子动力学模拟,我们得到了螺旋多层圆柱体结构如: 6-1, 12-6-1, 17-12-6-1 等和类似块体 fcc 多边形结构如: 10-4, 16-10-4, 其结构如图 1 所示.模拟研究发现 8-2 型纳米线既能表现为螺旋结构又可以是类似块体的多边形结构,这是由于超晶胞长度对纳米线结构的形成也有作用,周期边界条件的引入如同对纳米线的两端加了外力约束,超晶胞长度不同,约束力大小也不相同,从而影响纳米线结构的构造^[33,34].

3.2 熔点

分子动力学可以模拟出纳米线的升温熔化行为,而熔点又可以根据一些热力学参量如势能和热容得出.在一般温度下,热容与势能呈如下变化关系^[27,29]:

$$Cv(T) = \frac{dU}{dT} + \frac{3}{2}R_{gc}, \quad (1)$$

$R_{gc} = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$ 为一定值.因此,求出势能关于温度的导数值,就可以找出热容的突变点,从而确定纳米线的熔点.

在模拟纳米线升温熔化之前,我们先对纳米线进行退火处理,使其结构优化,再采用 NVT 系综,时间步长为 2 fs,步数为 10000 步,从 300 K 开始,先每隔 100 K 升温至熔点附近,再以 20 K 的间隔升温,时间步长和模拟步数保持不变,直至熔化,以便较准确的找到纳米线的熔点;为了对应实验中等温等压的外部环境,对单晶 Pt 用 NPT 系综进行模拟.通过模拟一系列奇异结构纳米线升温熔化过程,得到各自纳米线的势能随温度的变化关系.图 2 为结构相似的一组纳米线: 6-1, 12-6-1, 17-12-6-1 以及 Pt 块体的原子平均势能随温度的变化关系图像.

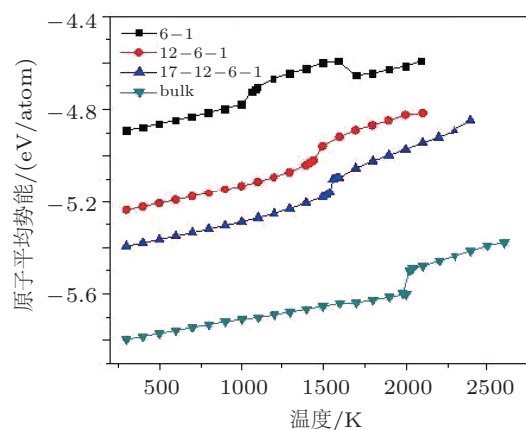


图 2 原子平均势能 - 温度曲线

从图中可以看出, 温度较低时原子平均势能随温度升高而线性增加, 当温度达到一定值时, 平均势能发生跃变, 即纳米线开始发生熔化现象, 出现相变. 在同一温度下, 原子平均势能随纳米线的直径增加逐渐减小, 熔点降低. 其中明显发现 6-1 纳米线在达到熔点之后, 随着温度持续升高, 势能出现不升反降的反常现象, 这是由于 Pt 纳米线在高温下发生断裂所致 [35]. 模拟得到单晶铂的熔点为 2050 K, 此理论计算值与实验结果 2045 K 基本符合. 纳米线的熔化温度比块体要低 500 K 左右, 势能温度曲线表明纳米线具有与块体不同的特征, 表现出很强的尺寸效应, 这是由于纳米线具有较大的表体比, 纳米线越细, 其表体比越大, 纳米线整体熔化的温度就越低, 因此具有较低的热稳定性 [36].

表 1 不同径向尺寸 Pt 纳米线的熔点

结构	粒子数	直径/nm	熔点/K
6-1 ○	130	0.5070	1080
8-2 ○	183	0.6159	1150
9-3 ○	218	0.7120	1250
10-4 □	238	0.7574	1310
12-6-1 ○	341	0.9493	1410
14-8-2 ○	418	1.072	1420
15-9-3 ○	475	1.165	1400
16-10-4 □	510	1.203	1480
17-12-6-1 ○	655	1.409	1550
20-14-8-2 ○	751	1.534	1600

表 1 为同一超晶胞长度下不同径向尺寸奇异结构纳米线的粒子数、直径大小和熔点, 其中 ○ 代表螺旋结构, □ 表示的是类块体多边形结构. 可以看出随纳米线径向尺寸的增加, 熔点大体呈上升趋势; 其中发现 15-9-3 型纳米线的熔点略低于 14-8-2 型, 表现出随径向尺寸增大, 熔点反而降低的反常现象, 可能是 15-9-3 型具有较松弛的内部结构, 因此表现出偏离线性关系的特点 [33,37]. 为了描述纳米线熔点随尺寸的依赖关系, 我们一般认为纳米线的熔点基本与其直径的倒数成线性变化关系 [38-40]. 具体表达式为

$$T_m = T_0 - \eta/D. \quad (2)$$

图 3 为各纳米线的熔点与其直径的倒数 $1/D$ 的变化关系, 对拟合后的直线求出其比例系数 η 的值大小为 379.43 K·nm, $T_0 = 1796$ K, 为外推直径无限大铂纳米线的熔化温度, 低于计算出的块体熔

点 2050 K, 这是由于纳米线的表面效应的影响, 即表面原子所占比例较大, 活性较高, 从而降低了整个纳米线的熔点 [10]. 其中发现结构相似的一组纳米线: 6-1, 12-6-1, 17-12-6-1 的线性相关性符合很好, 而其他结构稍稍偏离线性关系, 这体现了熔点不光取决于纳米线的径向尺寸, 也与纳米线的结构有关.

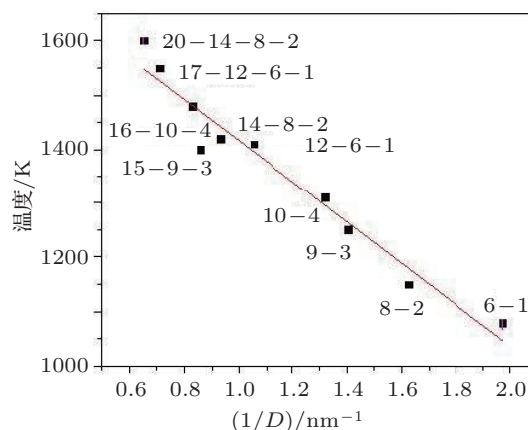


图 3 熔点与直径的倒数 $1/D$ 的函数关系图

3.3 热稳定性

为了更直观形象的描述各温度下纳米线熔化机理, 我们引入了林德曼指数来作具体的分析 [41-43], 由于林德曼指数中包含了位均方根的概念, 所以能考察粒子的运动状况; 指数越高, 说明粒子的运动越无序, 具有较高的流动性, 粒子所在位置就越不稳定.

林德曼指数的表达式定义如下, δ_i 为 N 粒子系统中第 i 个粒子的林德曼指数:

$$\delta_i = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} \frac{\sqrt{(\langle R_{ij}^2 \rangle - \langle R_{ij} \rangle^2)}}{\langle R_{ij} \rangle}, \quad (3)$$

整个系统的平均指数为 N 个粒子的平均

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_i \delta_i, \quad (4)$$

其中, R_{ij} 是第 i 个粒子到第 j 个粒子的距离. 林德曼指数通常用来研究晶体的熔化行为, 熔化开始时临界指数大小一般在 0.1—0.15 左右, 因材料的不同, 指数值也会有所不同 [41], 而纳米线的临界指数约为 0.03 [41,43].

我们计算了在临界尺寸以下, 所得到的可能奇异结构的纳米线在各温度下的林德曼指数, 并观察其指数大小随温度变化的规律, 图 4 为纳米线奇异

结构 17-12-6-1 的 δ 随温度的变化曲线, 从图中可以看出 δ 在 1550 K 附近有一个明显的跃变, 对应的 δ 值大致为 0.03, 说明纳米线在此温度下发生了固液相变, 粒子运动变的无序紊乱, 并发生大规模扩散和迁移. 该图像的跃变点与此前势能随温度变化的函数图像一样几乎发生在同一温度, 因此得到的熔点也近乎相同.

为了更进一步分析纳米线的热力学性质, 更直观的了解各纳米线在升温熔化过程中的特点, 我们将其分为位于不同壳层上的粒子, 通过计算各层上粒子的在不同温度下的平均林德曼指数, 得到各层纳米粒子的热稳定性质. 如表 2 所示, 我们列举了 300 K, 500 K, 900 K, 1200 K, 1500 K 下不同纳米

线各层上粒子平均林德曼指数值.

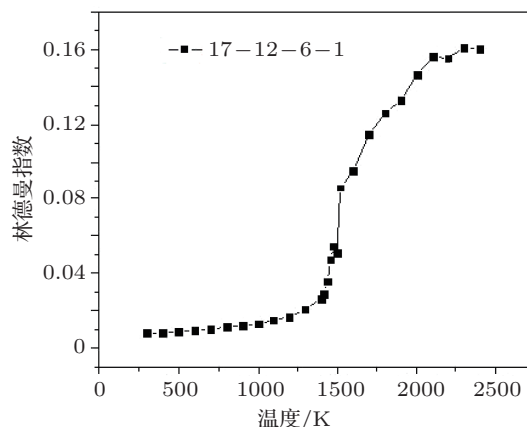


图 4 Pt 纳米线的林德曼指数随温度的变化关系

表 2 不同温度下纳米线各层粒子的平均林德曼指数值

结构	粒子位置		林德曼指数 (δ)				
	壳层	半径/ a_0	300 K	600 K	900 K	1200 K	1500 K
6-1○	1	0.0630	0.0083	0.01415	0.01715	0.04735	0.07085
	2	0.5070	0.00665	0.0133	0.0146	0.04885	0.0729
8-2○	1	0.3463	0.00769	0.01215	0.0156	0.03045	0.06595
	2	0.8221	0.00722	0.01135	0.01485	0.0321	0.066
9-3○	1	0.3723	0.0085	0.015	0.01695	0.02175	0.06545
	2	0.9075	0.0074	0.0147	0.01505	0.02125	0.06535
10-4□	1	0.4261	0.004835	0.0071	0.0092	0.0164	0.063
	2	0.9653	0.004855	0.0072	0.0094	0.0165	0.06415
12-6-1○	1	0.0260	0.0092	0.01405	0.01785	0.02125	0.0687
	2	0.6545	0.00695	0.00965	0.01305	0.0175	0.05875
	3	1.2100	0.0067	0.0092	0.01255	0.01675	0.05685
14-8-2○	1	0.3120	0.0064	0.0101	0.01375	0.01795	0.04115
	2	0.8127	0.0063	0.0098	0.01355	0.017	0.04115
	3	1.3714	0.00615	0.00955	0.01315	0.01675	0.03975
15-9-3○	1	0.3667	0.0079	0.01095	0.01455	0.0173	0.0412
	2	0.9098	0.00675	0.00965	0.01315	0.0161	0.0408
	3	1.4852	0.00645	0.00915	0.0126	0.01555	0.0406
16-10-4□	1	0.4327	0.004235	0.00695	0.0087	0.012	0.02625
	2	0.9892	0.004185	0.0068	0.0086	0.0119	0.0268
	3	1.5470	0.00427	0.00695	0.0088	0.01215	0.0296
17-12-6-1○	1	0.0519	0.007855	0.01455	0.013272	0.01555	0.02765
	2	0.6448	0.007585	0.010675	0.013271	0.0158	0.0254
	3	1.2213	0.006725	0.009625	0.012337	0.01485	0.02465
	4	1.7964	0.006455	0.00925	0.011785	0.01435	0.02485
20-14-8-2○	1	0.3423	0.00619	0.00925	0.013115	0.014985	0.0225
	2	0.8366	0.00616	0.009235	0.012675	0.01485	0.0219
	3	1.3997	0.005945	0.00895	0.012325	0.01456	0.02185
	4	1.9552	0.005715	0.0087	0.01195	0.01436	0.02175

表中, a_0 为晶格常数; $a_0 = 3.923 \text{ \AA}$

从表 2 中可以看出 6-1 等螺旋结构纳米线的内层具有较高的值, 这说明纳米线的内核的熔化温度比外壳及整体熔化温度低, 内部将优先熔化, 熔化过程是从内部开始向表面层发展的, 这与 Ti 纳米线的熔化先从内部开始, 然后扩展到表面的模拟结果相似^[33], 而以 10-4 为代表的多边形类块体柱状结构纳米线的外层具有较大的林德曼指数, 因此这种纳米线的外层就优先熔化, 熔化过程是从外部开始向内层发展的. 这与 Au 纳米线的熔化行为相似^[37]. 我们认为这两种不同的熔化特点, 既与组成纳米线的具体金属材料有关, 又决定于纳米线上粒子的不同排布. 螺旋壳层没有界面交界能, 密集排列降低了纳米线的表面能; 而多边形类块体纳米线具有较为紧实的内部结构, 能使整个纳米线内部能量降低, 而牺牲一部分表面能. 两方面的竞争是临界尺寸下纳米线奇异结构和不同熔化行为产生的主要原因.

3.4 结构的演变

在模拟纳米线升温过程中, 我们考察了纳米线在不同温度下结构的演变行为, 这就需要查看粒子扩散和运动的细节. 在较低的温度下, 纳米线的结构稳定, 原子的排布比较规则. 当温度达到熔点附近时, 粒子的位置开始变的无序, 纳米线出现了位错现象和扩散现象. 为了更进一步研究螺旋结构纳米线的熔化过程, 我们以 17-12-6-1 结构的纳米线为例做一说明.

如图 5 所示, 初始 300 K 时, 17-12-6-1 纳米线的粒子被四种不同的颜色标记并位于各自层上. 在 1400 K 以前, 纳米线一直保持螺旋结构, 纳米线在不断的受热膨胀. 在 1440 K 时, 纳米线的内核原子开始熔化, 最里层原子出现了断裂, 断裂部位的出现原子融合. 1480 K 的原子扩散加剧, 外层粒子开始渗入内部, 说明熔化已由内到外的延伸, 内部

原子的熔化引起外部原子的坍塌而加速了各层粒子的融合过程, 这与前面用林德曼指数来分析螺旋结构纳米线的熔化特点一致. 在 1550 K 时, 可以看到纳米线中的原子已经偏离初始的规则位置, 排列变得不整齐, 所有原子的排列都变得杂乱无章. 此时整个纳米线全部熔化. 因此我们总结出螺旋结构纳米线的熔化是由内向外发展的.

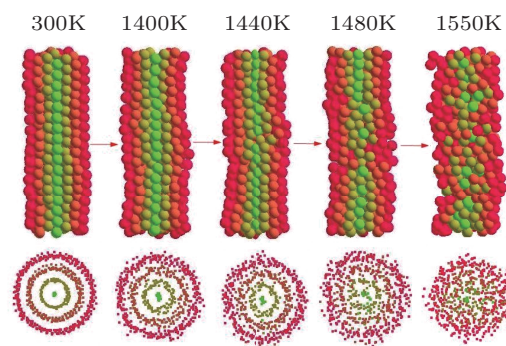


图 5 17-12-6-1 型纳米线的位形随温度升高演变图

4 结论

本文基于 EAM 势对临界尺寸以下的 Pt 纳米线的结构和熔化行为进行分子动力学模拟, 得到一系列稳定而规则的自由 Pt 纳米线奇异结构, 计算各纳米线的熔点, 发现 Pt 纳米线具有很强的尺寸效应, 纳米线的熔点随直径的减小而呈现降低趋势. 为了更进一步描述 Pt 纳米线的熔化特征, 我们引入了林德曼指数对纳米线升温过程中的热稳定性进行定量标度; 令林德曼因子为 0.03, 对应于 Pt 纳米线的熔点与通过势能 - 温度曲线得到的一致. 在升温过程中计算不同纳米线各层上的林德曼指数, 发现螺旋结构纳米线的内层指数较高, 外层较低, 表明这种构型纳米线的熔化是有内向外展开的; 而类块体多边形结构的纳米线的熔化进行方向相反. 这些信息将有助于我们对 Pt 纳米线的构造和制备.

- [1] Koh S J A, Lee H P, Lu C, Cheng Q H 2005 *Phys. Rev. B* **72** 085414/1
 [2] Zhou J, Jin C, Seol J H, Li X, Shi L 2005 *Phys. Rev. B* **71** 133109/1
 [3] Li L, Zhang Y, Yang Y W, Huang X H, Li G H, Zhang L D 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 031912
 [4] Wen Y Y, Zhou F B, Liu R W 2001 *Advances In Mechanics* **2** 47 (in Chinese) [王玉华, 周富倍, 刘日武 2001 力学进展 **2** 47]
 [5] Lieber C 2003 *M. MRS Bull* **28** 486

- [6] Kondo Y, Takayanagi K 2000 *Science* **289** 606
 [7] Wang B L 2001 *M. S. Dissertation* (Nanjing: Nanjing University) (in Chinese) [王保林 2001 金属纳米线奇异结构和物理性质的理论研究 硕士学位论文 (南京: 南京大学)]
 [8] Erts D, Polyakov B, Dalry B, Morris M A, Ellingboe S, Boland J, Holmes J D 2006 *J. Phys. Chem. B* **110** 820
 [9] Zhong F X, Zong R L, Zhu Y F 2009 *J. Nanosci. Nanotechnol.* **9** 2437

- [10] Zhang X Y, Zhang L D, Lei Y, Zhao L X, Mao Y Q 2001 *J. Mater. Chem.* **11** 1732
- [11] Cai L T, Skulason H, Kushmerick J G, Pollack S K, Naciri J, Shashidhar R, Allara D L, Mallouk T E, Mayer T S 2004 *J. Phys. Chem. B* **108** 2827
- [12] Chu S Z, Inoue S, Wada K, Kanke Y, Kurashima K J 2005 *Electrochem. Soc.* **42** 152
- [13] Wu B, Heidelberg A, Boland J J 2005 *Nat. Mater.* **4** 525
- [14] Liu J, Duan J L, Toimil-Molares E, Karim S, Cornelius T W, Dobrev D, Yao H J, Sun Y M, Hou M D, Mo D, Wang Z G, Neumann R 2006 *Nanotechnology* **17** 1922
- [15] Erts D, Polyakov B, Dalry B, Morris M A, Ellingboe S, Boland J, Holmes J D 2006 *J. Phys. Chem. B* **110** 820
- [16] Tan L K, Chong A S M, Tang X S E, Gao H 2007 *J. Phys. Chem. C* **111** 4964
- [17] Sun S, Yang D, Zhang G, Sacher E, Dodelet J P 2007 *Chem. Mater.* **19** 6376
- [18] Liu L, Lee W, Huang Z, Scholz R, Gosele U 2008 *Nanotechnology* **19** 335604
- [19] Landman U, Luedtke W D, Burnham N A, Colton R J 1990 *Science* **248** 454
- [20] Yanson A I, Yanson I K, van Ruitenbeek J M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 216805
- [21] Diao J K, Gall K, Dunn M L 2004 *J. Mech. Phys. Solids* **52** 1935
- [22] Li H, Pederiva F, Wang G H, Wang B L 2003 *Chem. Phys. Lett.* **94** 381
- [23] Gulseren O, Ercolessi F, Tosatti E 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3775
- [24] Kang J W, Seo J J, Hwang H J 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 2629
- [25] Wang B L, Yin S Y, Wang G H, Buldum A, Zhao J J 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2046
- [26] Wang B L, Wang G H, Zhao J J 2002 *Phys. Rev. B* **65** 235406
- [27] Qi Y, Cagin T, Johnson W L, Goddard W A 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 385
- [28] Wang X W, Fei G T, Zheng K, Jin Z, Zhang L D 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 173114
- [29] Hui L, Wang B L, Wang J L, Wang G H 2004 *Chem. Phys. Lett.* **20** 399
- [30] Finnis M W, Sinclair J E 1984 *Philosophic Magazine A* **50** 0045
- [31] Ackland G J, Vitek V 1990 *J. Phys. Rev. B* **41** 223
- [32] Ackland G J, Tichy G, Vitek V 1987 *J. Philosophic Magazine A* **56** 735
- [33] Wang B L, Wang G H, Chen X S 2003 *Phys. Rev. B* **67** 193403
- [34] Zhang H Y, Gu X, Zhang X H, Ye X, Gong X G 2004 *Phys. Lett. A* **331** 332
- [35] Wen Y H, Zhang Y, Zheng J C, Zhu Z Z 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 20611
- [36] Zeng Q M, Zhou N G, Zhou T 2008 *Chinese Ceramics* **44** 23 (in Chinese) [曾庆明, 周耐根, 周浪 2008 中国陶瓷 **44** 23]
- [37] Bilalbegovic G 2000 *Solid State Commun.* **115** 73
- [38] Pawlow P Z 1909 *Phys. Chem. Stoichiom. Verwandtschaftsrl* **65** 545
- [39] Peng C X 2009 *M. S. Dissertation* (Jinan: Jinan University) (in Chinese) [彭传校 2009 镍纳米线的结构及其力学性能 硕士学位论文 (济南: 山东大学)]
- [40] Cheng D M 2006 *M. S. Dissertation* (Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China) (in Chinese) [程登木 2006 Ni₃Al 纳米材料热力学性质的分子动力学模拟 硕士学位论文 (成都: 电子科技大学)]
- [41] Wang B L, Zhao J J, Wang G H 2005 *Progress In Physics* **25** 0317 (in Chinese) [王保林, 赵纪军, 王广厚 2005 物理学进展 **25** 0317]
- [42] Stillinger F H, Weber T A 1980 *Phys. Rev. B* **22** 3790
- [43] Zhou Y Q, Karplus M, Ball K D, Berry R S 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 2323

Structures and melting behaviors of ultrathin platinum nanowires

Xia Dong Wang Xin-Qiang[†]

(Department of Physics, Chongqing University, Chongqing 401331, China)

(Received 12 July 2011; revised manuscript received 28 November 2011)

Abstract

The amorphous-like structures and melting behaviors of ultrathin platinum nanowires are studied by EAM potential by using empirical molecular-dynamic simulation and the dependence of nanowire melting temperature on size is examined. When the Lindeman criterion is 0.03, we find that the melting temperature for Pt nanowires is well consistent with the result obtained from the potential energy. Through comparing the Lindemann indexes on each shell, the thermal stability is studied. The results indicate that melting of the cylindrical helical structures starts from the interior atoms and that of the bulklike rectangular structure starts from the surface. We also observe the positions of the atoms at different temperatures to obtain the atomic diffusion and mobility.

Keywords: platinum nanowires, amorphous-like structures, melting behavior, molecular dynamic simulations

PACS: 05.70.-a, 31.15.Qg

[†] E-mail: xqwang@cqu.edu.cn