

不同晶面银纳米晶高温熔化的各向异性

卢敏 黄惠莲 余冬海 刘维清 魏望和

Anisotropy of melting of Ag nanocrystal with different crystallographic planes at high temperature

Lu Min Huang Hui-Lian Yu Dong-Hai Liu Wei-Qing Wei Wang-He

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 106101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.106101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.106101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

SiC 纳米纤维/C/SiC 复合材料拉伸行为的分子动力学研究

Molecular dynamics study on tensile behavior of SiC nanofiber/C/SiC nanocomposites

物理学报.2015, 64(11): 117101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.117101>

单一晶相氧化锰纳米颗粒的交换偏置效应

Exchange bias effect in single crystalline phase MnO nanoparticles

物理学报.2013, 62(17): 176102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.176102>

纳米 Ni 在 77 K 温度下压缩行为的研究

Compression behavior of nanocrystalline nickel at 77 K

物理学报.2013, 62(14): 147102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.147102>

Pt-Au 核-壳结构纳米粒子热稳定性的分子动力学研究

Molecular dynamics investigation of thermal stability of Pt-Au core-shell nanoparticle

物理学报.2013, 62(12): 126101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.126101>

Au-Pd 共晶纳米粒子熔化行为的分子动力学研究

Melting behavior of Au-Pd eutectic nanoparticle: A molecular dynamics study

物理学报.2012, 61(16): 166102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.166102>

不同晶面银纳米晶高温熔化的各向异性*

卢敏[†] 黄惠莲 余冬海 刘维清 魏望和

(江西理工大学理学院, 赣州 341000)

(2014年11月4日收到; 2014年12月5日收到修改稿)

采用嵌入原子势, 使用分子动力学方法, 模拟研究了银纳米晶高温弛豫过程中的热稳定性和熔化机制, 并引入均方位移和稳定寿命来分析它的结构和形状的演化过程. 结果表明: 对于沿相互垂直 $\{110\}$, $\{211\}$ 和 $\{111\}$ 面切割形成的近正方体截面纳米晶, 高温弛豫熔化存在明显的各向异性行为; $(1\bar{1}2)$ 面热稳定性最低, 最易熔化, 其次是 (110) 面, 热稳定性最高的是 $(1\bar{1}\bar{1})$ 面, 最难熔化; 三个不同晶面的最外层和次外层原子的稳定寿命极短, 且三个不同晶面之间相差很小, 没有明显差异; 对于具有相同晶面指数的晶面, 第三层及其以内的稳定寿命较长, 且依次微量增长, 但不同晶面第三层及其以内的寿命相差明显.

关键词: 纳米晶, 分子动力学, 高温熔化, 各向异性

PACS: 61.46.Df, 71.15.pd

DOI: 10.7498/aps.64.106101

1 引言

近年来, 金属纳米晶由于量子限域效应, 其性能异于常规体材, 以其独特的磁、光、电等特性引起了人们的极大关注. Stranski-Krastanov 生长模式^[1]和应变自组装制备技术^[2]的发展, 使得纳米晶可以通过表面生长制备而得到更加有效的应用. 它们不仅可以提高器件的性能, 并可望创造出新的纳电子和光电子器件^[3,4].

熔化是材料科学研究中一个重要的相变过程, 一直是人们研究的重点之一. 大量理论与实验证实, 由于极高的比表面积, 低维金属纳米材料的熔化行为与体材料显著不同^[5-14]. 例如纳米材料的熔融温度较其体材显著降低^[5,6]. 表面原子具有更少的最近邻原子和更弱键的作用, 熔化从表面开始^[7-9], 并逐步向内部发展, 且已被纳米粒子熔化实验所证实^[10-12]. 这些研究中, 纳米晶模型一般为球形, 但研究均表明, 当粒子的粒径小到一定程度时, 呈多边形的更为稳定^[13,14]. 近年来使用分子动力学方法, 对材料熔化模拟研究, 一般采用低密

勒指数 $\{100\}$ 面和 $\{111\}$ 面构成的多面体晶体结构模型^[15]. 而采用较高指数面切割的晶体结构作为模型研究的尚很缺乏. 目前并未对不同晶面构成的纳米晶在不同温度下的微结构变化和稳定性展开系统的研究. 本文以 $\{110\}$, $\{211\}$, $\{111\}$ 面为截面的银纳米晶为研究对象, 采用分子动力学模拟方法, 结合 Finnis-Sinclair 型多体势, 采用等温加热方式, 模拟研究体系在高温弛豫过程的热稳定性、形状演变和熔化特性.

2 模拟方法与模型

以面心立方金属银为研究对象. 采用经典力学计算体系中原子的运动轨迹, 原子间的相互作用采用适合于单晶金属的 Finnis-Sinclair 型多体势^[16,17], 它拟合了银原子的晶格常数、结合能、表面能和弹性模量, 已成功地运用于纳米材料结构稳定性等^[18,19]研究中.

系统的总势能表示为

$$U = -\sqrt{\rho_i} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}), \quad (1)$$

* 江西省教育厅科学技术研究项目 (批准号: GJJ11469) 和国家自然科学基金 (批准号: 11262006) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: lumin641122@126.com

其中, ρ_i 是除第 i 个原子以外的所有其他原子的核外电子在第 i 个原子处产生的电子云密度之和, 可表示为 $\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij})$.

$$\rho_j(r_{ij}) = \sum_{k=1}^2 A_k (R_k - r_{ij})^3 H(R_k - r_{ij}), \quad (2)$$

$$\phi_{ij}(r_{ij}) = \sum_{k=1}^6 a_k (r_k - r_{ij})^3 H(r_k - r_{ij}), \quad (3)$$

其中 $\rho_j(r_{ij})$ 是第 j 个原子的核外电子在第 i 个原子处贡献的电荷密度, r_{ij} 为第 i 个原子与第 j 个原子间的距离, 式中势的有效作用范围通过函数 $H(x)$ 来体现, 当 $x > 0$ 时, $H(x) = 0$; 当 $x < 0$ 时, $H(x) = 1$; A_k, R_k, a_k, r_k 为常数, 且有 $R_1 > R_2, r_1 > r_2 > \dots > r_6$. 很多体势的参数参见文献 [17].

银纳米晶模型设置如图 1. 纳米晶为沿相互垂直的 $\{110\}, \{211\}$ 和 $\{111\}$ 面切割完整晶体形成的近正方体截面晶. 由图 1 可见, 纳米晶各个面为矩形, X, Y, Z 坐标轴分别对应体系的 $[110], [1\bar{1}2], [1\bar{1}\bar{1}]$ 晶向. 模型共有原子数为 2685, 银的晶格常数 a_0 取 0.4086 nm, 模型尺寸约为 $3.52 \text{ nm} \times 3.56 \text{ nm} \times 3.59 \text{ nm}$. 银原子量为 107.868. 模型外表面为自由边界条件, 不加任何外力约束.

虽然由自发生长而成的纳米晶未必形成这样的外形, 并以这样的晶面为表面, 但是从微纳电子工艺的不断发来看, 微刻蚀尺度已经开始进入纳米量级 [20], 这种“切割”将会有一定的物理背景 [21].

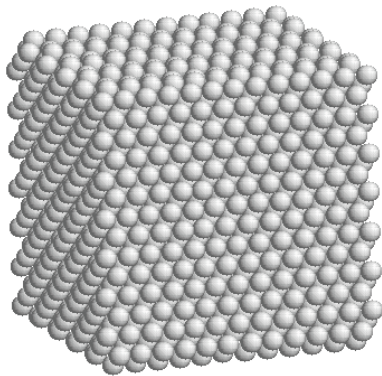


图 1 银纳米晶的初始结构模型

Fig. 1. Initial atomic configuration of Ag nanocrystalline.

模拟从预设纳米晶结构开始, 首先采用分子静力学方法结合共轭梯度算法 [22] 在绝对零度下将它弛豫到能量极小态. 经过充分弛豫后, 体系处在基态下的稳定状态. 为了研究银纳米晶在高温下的熔

化特性, 对在绝对零度下弛豫得到的体系采用分子动力学模拟加热. 由于模拟体系较大, 为节省计算时间, 同时又不影响研究其熔化规律, 我们选定等温加热, 温度为 1400 K, 在此温度下保持恒温一段时间, 观测分析这一过程中结构的变化, 并跟踪模拟过程中体系的能量和原子坐标的改变, 至体系能量和结构保持较长一段时间不发生明显变化为止. 研究中采用准分子静力学方法, 分析退火过程中不同时刻体系的结构和能量, 即将各时刻不同组态的体系通过一定的算法淬冷至 0.01 K 以下, 再考察该体系的结构和能量, 以消除原子热运动对体系结构和能量造成的波动. 模拟采用 Langevin 方法对体系进行恒温控制. 用 Raman-Parrinello 方法 [23] 保持体系压强为零, 相当于真空环境. 运用四阶 Predict-Correct 算法 [24] 求解体系运动方程, 时间步长为 10^{-15} s .

3 结果分析与讨论

3.1 Ag(110), (1 $\bar{1}2$), (1 $\bar{1}\bar{1}$) 面弛豫不同时刻的结构演变

图 2 示出了体系在 1400 K 退火过程中不同时刻结构在 (110) 面的投影. 弛豫开始时, 体系的结构和形状基本保持不变. 从图 2(b) 表观来看, 相对于初始结构, 只是角上的少量原子发生了扩散和迁移. 随着弛豫时间增加, 观察到体系左右两端面区域为高度无序态, 这说明垂直 (110) 的左右两端面外层原子已处于熔融态, 但体系上下两端面区域及中央仍然保持良好晶态结构 [图 2(c), (d)]. 再随着时间增加, 熔化过程从两端面触发逐渐向体系中央区域推进 [图 2(e)]. 至 150 ps 时, 体系形成了一个熔融球状团簇 [图 2(f)]. 易确定, 垂直 (110) 面左右两端面为 (1 $\bar{1}2$) 面, 垂直 (110) 的上下两端面为 (1 $\bar{1}\bar{1}$) 面. 上述结构演变结果表明: (1 $\bar{1}2$) 外层原子面原子先于 (110), (1 $\bar{1}\bar{1}$) 面熔化.

图 3 示出了体系在 1400 K 退火时不同时刻结构在 (1 $\bar{1}2$) 面的投影. 弛豫开始时, 体系的结构和形状也基本保持不变. 从图 3(b) 来看, 相对于初始结构, 也只是角上的少量原子发生了扩散和迁移. 随着弛豫时间增加, 很快观察到体系靠近上下两端面区域为高度无序态, 这说明垂直 (1 $\bar{1}2$) 的上下两端面外层原子已处于熔融态, 但体系左右两端面区域及中央仍然保持良好晶态结构 [图 3(c), (d)]. 再随着时间增加, 熔化过程从两

端面触发逐渐向体系中央区域推进[图3(e)]. 至150 ps时, 体系形成了一个熔融球状团簇[图3(f)]. 易确定, 垂直(112)的左右两端面为(111)面, 垂

直(112)的上下两端面为(110)面. 上述结构演变结果表明: (110)外层原子面原子先于(111)面熔化.

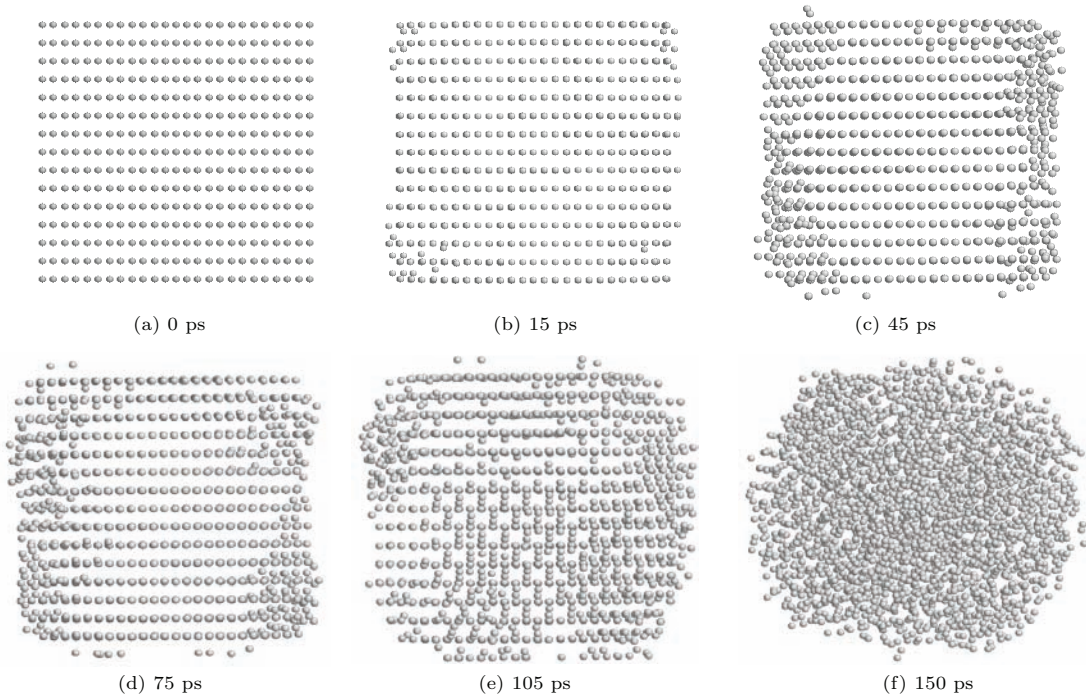


图2 体系在1400 K不同时刻的结构在(110)面的投影
Fig. 2. Configuration projection on Ag(001) facet (at 1400 K).

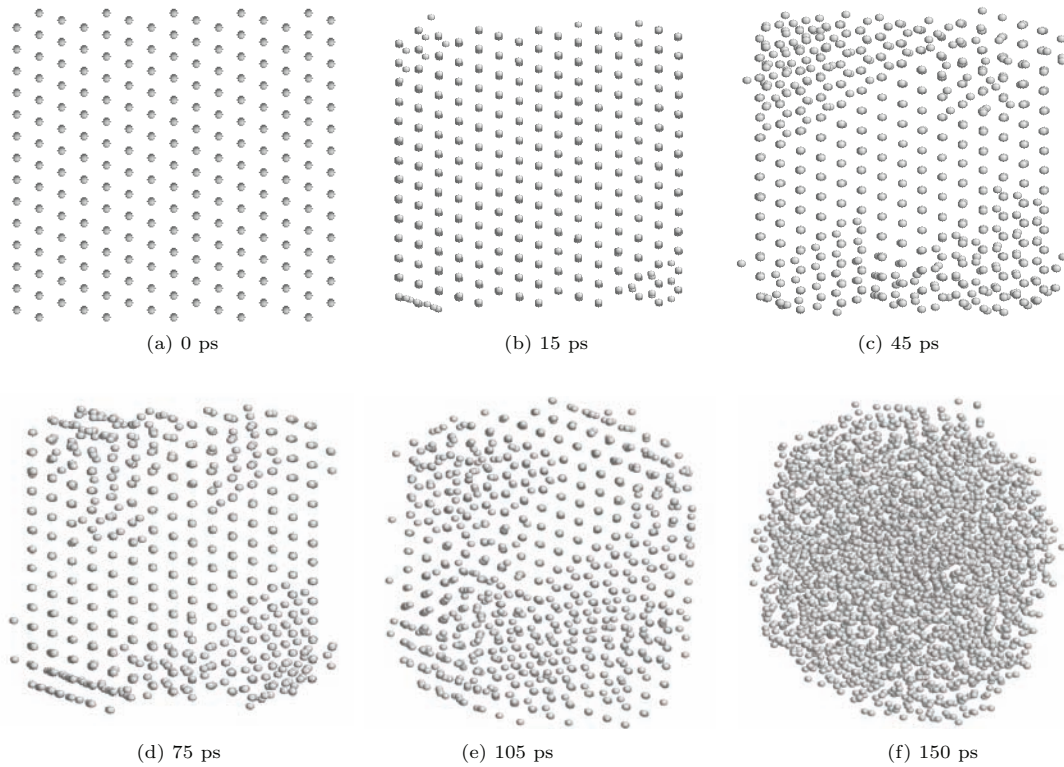


图3 体系在1400 K不同时刻的结构在(112)面的投影
Fig. 3. Configuration projection on Ag(112) facet (at 1400 K).

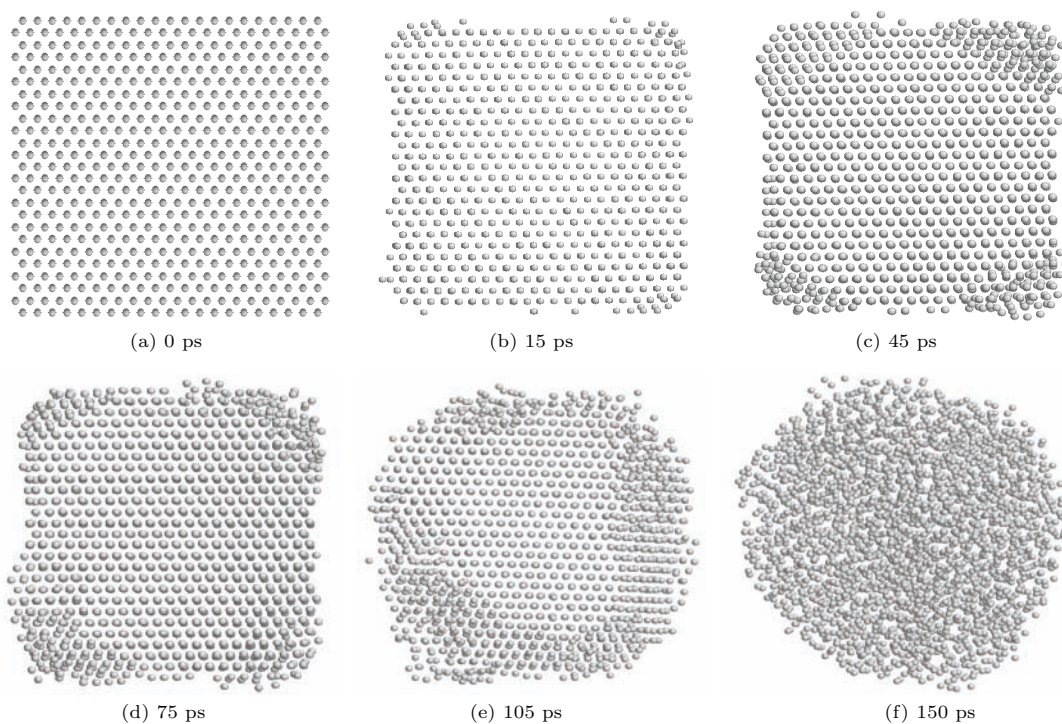


图4 体系在 1400 K 不同时刻的结构在 (111) 面的投影

Fig. 4. Configuration projection on Ag(111) facet (at 1400 K).

图4示出了体系在1400 K退火时不同时刻结构在(111)面的投影. 该面弛豫刚开始及结尾时段结构演变与前两个相似. 刚开始时段, 只是角上的少量原子发生了扩散和迁移如图4(b). 在结尾段, 熔化过程从端面触发快速向体系中央区域推进[图4(e), 最终体系形成了一个熔融球状团簇(图4(f)). 所不同的是, 在中间段, 观察到体系上下左右四周区域为高度无序态, 这说明垂直于(110)的上下左右四面外层原子已处熔融态. 显然, 垂直于(111)面的(110), (112)外层原子面原子先于(111)面熔化.

3.2 Ag(110), (112), (111)面不同层原子面的均方位移

为了进一步研究纳米晶不同晶面原子熔化的过程, 本工作引进了均方位移. 均方位移(mean square displacement, MSD)是用来表征粒子在给定系统中平均扩散距离的物理量. 定义如下: 动力学过程中体系内原子自起始位置起不停移动, 每一瞬间各原子的位置皆不相同, 粒子位移平方的平均值称为MSD. MSD由下式给出:

$$MSD = \langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)|^2 \rangle, \quad (4)$$

$\mathbf{r}(0)$, $\mathbf{r}(t)$ 分别为体系中任一原子在初始时刻和 t 时刻的位置矢量, 其中 $\langle \rangle$ 是对组内的所有原子进行平均.

如果只是计算一个原子, MSD的计算公式可以简化为

$$MSD = |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)|^2. \quad (5)$$

体系(110)面共有15层, 由于体系的对称性, 选择从外到中间7层作为研究对象, 依次编号为1至7. 为了便于比较, 体系(112), (111)面从外到里也选择了7层原子面, 依次编号为1至7, 其中1, 2, 3分别代表最外层、次外层和第三层, 4, 5, 6等间距选择, 7代表最靠近中间层. 图5—图7分别示出了1400 K下, Ag(110), (112), (111)面不同层原子面的MSD随时间的演化曲线. 从图5—图7中可以看出, 三图中MSD变化趋势基本上相一致, 各层的MSD随时间的增加而增加. 最外层曲线(即图中曲线1)在弛豫一开始MSD快速增加, 曲线较陡, 而曲线2经过一小段时间后才开始变陡, 曲线3, 4, 5, 6, 7前大半段较平坦, 经过较长时间后才有显著变化. 这一结果表明: 最外层原子扩散迁移最快, 也就是说, 最外层原子最先处于熔融状态, 其次是次外层经一小段时间后开始熔化, 再经过一段较长时间后, 第3, 4, 5, 6, 7层原子依次熔化, 且它

们之间熔化时间相差很短. 再仔细观察图5—图7, 发现3, 4, 5, 6, 7曲线开始显著变化的时间有明显不同, 其中(112)面的最短, 其次是(110)面, 最长的是(111)面. 这表明: 体系(112)面第三层后的原子最先处于熔融态, 其次是(110)面的, 最后处于熔融态的是(111)面.

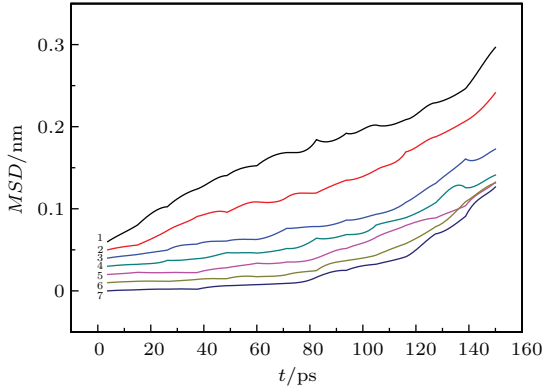


图5 1400 K下Ag (110)面不同层原子面的MSD
Fig. 5. MSD of different atomic facet of Ag (110) (at 1400 K).

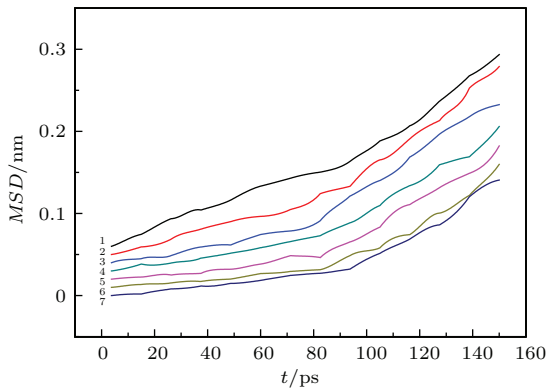


图6 1400 K下Ag (112)面不同层原子面的MSD
Fig. 6. MSD of different atomic facet of Ag (112) (at 1400 K).

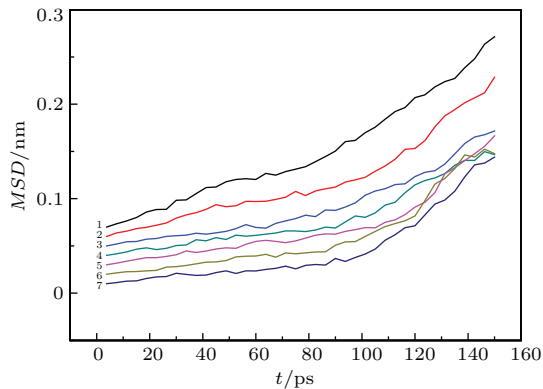


图7 1400 K下Ag (111)面不同层原子面的MSD
Fig. 7. MSD of different atomic facet of Ag (111) (at 1400 K).

图8示出了1400 K下Ag(110), (112), (111)面最外原子面MSD (a1, b1, c1) 随时间的变化曲线. 从图中可以看出, a1, b1, c1曲线开始时段随时间的增加而近似线性变化, 但三曲线的斜率不一样, a1的最大, c1最小, 到中间段b1曲线斜率先显著变化(b1曲线中的A点). 这表明: 体系在弛豫一开始, 三个不同面的最外层原子开始熔化, 在开始段, (110)面的扩散和迁移幅度最大, (111)面的最小, 但到中间段后, (112)面最外层原子扩散迁移幅度最大, 说明其最外层最先处于完全熔融态, 其次是(110)面, 最后处于完全熔融态的是(111)面.

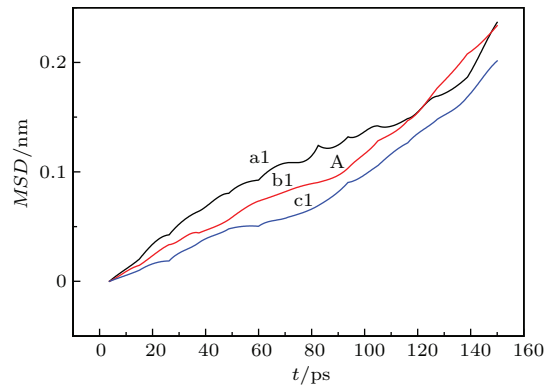


图8 1400 K下Ag (110), (112), (111)面最外层原子面MSD (a1, b1, c1) 随时间的变化
Fig. 8. MSD of outmost atomic facet of Ag (110), (112), (111) as a function of time (at 1400 K).

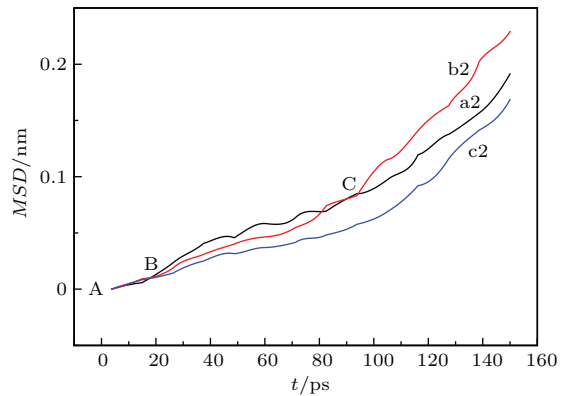


图9 1400 K下Ag (110), (112), (111)面次外层原子面MSD (a2, b2, c2) 随时间的变化
Fig. 9. MSD of next outmost atomic facet of Ag(110), (112), (111) as a function of time (at 1400 K).

图9示出了1400 K下Ag(110), (112), (111)面次外层原子面MSD (a2, b2, c2) 随时间的变化曲线. 三曲线开始段(A, B段)几乎完全重叠且平坦, 表明三个不同面次外层原子在弛豫刚开始时保持原晶体结构(约20 ps), 没有原子熔化. B点之后, 次外层原子开始熔化. 至C(约95 ps)点, b2曲线与a2, c2相比开始显著变化. 这也表明, (112)面次

外层最先处于完全熔化态, 其次是(110)面, 最后是(111)面.

图 10 示出了 1400 K 下 Ag(110), (112), (111) 面外第三层原子面 MSD (a3, b3, c3) 随时间的变化曲线. 图 10 曲线与图 9 的变化趋势相似, 但图 10 开始平坦段时间远远长于图 9, 这表明体系不同面第三层原子在很长一段时间保持原晶状结构. 不同晶面完全熔化的变化规律与次外层的完全相同. 不同晶面第四至第七层的熔化规律与第三层的几乎完全一样, 只是同一晶面各层保持原晶状结构时间随层数增加而微小增加.

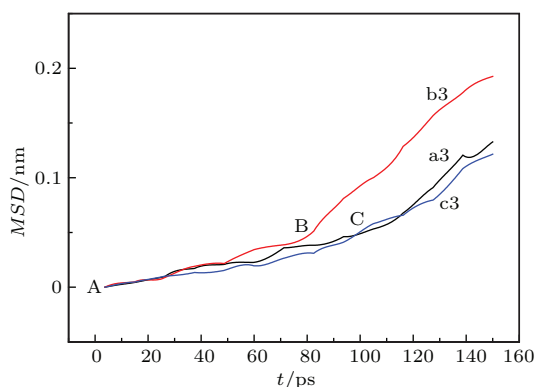


图 10 1400 K Ag(110), (112), (111) 面外第三层原子面 MSD (a3, b3, c3) 随时间的变化

Fig. 10. MSD of the third atomic facet of Ag (110), (112), (111) as a function of time (at 1400 K).

3.3 不同晶面的稳定寿命

前面定性地分析了三个不同晶面的熔化规律, 为了更深入地分析, 下面引入纳米晶原子结构的稳定寿命概念. 纳米晶原子在发生熔融之前保持结构稳定的时间, 称之为纳米晶原子的稳定寿命. 根据定义, 计算了不同晶面的稳定寿命. 图 11 示出了 Ag (110), (112), (111) 面稳定寿命 (a, b, c) 随层数的变化. 由图 11 可以看出, 三个不同晶面相同层数的平均稳定寿命, (112) 面最短, 最先熔化, 其次是(110)面, 最长的是(111)面, 热稳定性最高; 最外层和次外层的稳定寿命极短, 约 20 ps, 且三个不同晶面的相差很小, 看不出明显差别; 对于同一晶面, 第三层以内的稳定寿命较长, 且依次微量增长, 几乎看不出变化, 但不同晶面第三层以内的寿命相差较大, 如(112)面的稳定寿命约为 80 ps, (110)面的约为 105 ps, (111)面的约为 115 ps.

熔化是晶格弹性失稳, 是体系原子间长程关联的破缺, 或者说是点阵排布关系瓦解. 对于纳米晶而言, 原子间的这种长程关联是有限的, 并且随着

体系尺寸的减少, 这种关联程度急剧减小. 处于体系最外层和次外层原子具有更少的最近邻原子和更弱键的作用, 在高温下具有了更大的跨越晶格势垒、摆脱晶格束缚的能力. 当体系弛豫到某一时刻, 原子便摆脱长程关联的束缚, 从而呈现熔融状态发生相变. 由前面的分析及文献 [6—9] 可知, 金属纳米晶的熔化是从表面开始, 逐步向内部发展. 但由于体系不同位置的原子所受束缚的不均衡性, 导致纳米晶不同晶面沿轴向熔化推进的速度明显不一致. 不一致的原因可能是由于不同晶面原子的能量及致密度不同而引起, 其熔化机理尚有待进一步研究.

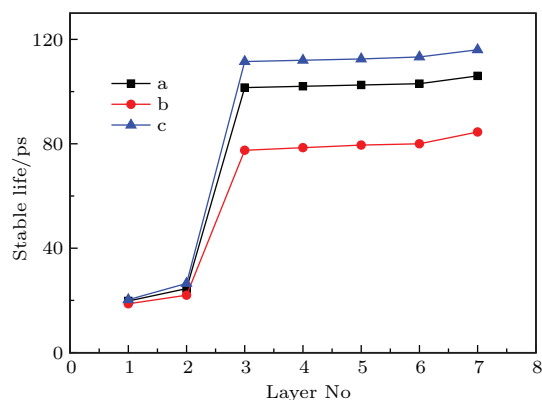


图 11 Ag(110), (112), (111) 面稳定寿命 (a, b, c) 随层数的变化

Fig. 11. Stable lifetime of facet of Ag (110), (112), (111) variation with layers.

4 结 论

采用分子动力学模拟方法, 选用 Finnis-Sinclair 型多体势, 计算了原子之间作用力, 模拟研究了银纳米晶在高温弛豫不同时刻结构的演变过程. 模拟显示: 纳米晶的高温熔化可分三个阶段: 即很短时间的表面预熔, 较长时间的表面原子无序和重排, 迅速地全面熔化. 这与文献 [25] 结果一致. 引入均方位移和稳定寿命来分析它的结构和形状的演化过程. 结果表明: 对于沿相互垂直 {110}, {211} 和 {111} 面切割形成的近正方体截面纳米晶, 高温弛豫熔化存在明显的各向异性行为. (112) 面热稳定性最低, 最先熔化, 其次是(110)面, 热稳定性最高的是(111)面, 最后熔化; 三个不同晶面的最外层和次外层原子的稳定寿命极短, 弛豫一开始, 最外层原子就开始熔化, 过一小段时间后次外层原子开始熔化, 且三个不同晶面的相差很小, 看不出明显差异; 对于同一晶面, 第三层以内的稳定寿命

较长, 且依次微量增长, 几乎看不出变化, 也就是说, 经过一段较长时间后, 第三层及以内原子才开始熔化, 几乎是同步的; 但对于不同晶面, 第三层及以内的稳定寿命差异较大, (1 $\bar{1}$ 2) 面最短, (110) 面居中, (1 $\bar{1}\bar{1}$) 面最长.

参考文献

- [1] Gilmer G H, Huang H, Roland C 1998 *Comput. Mater. Sci.* **12** 354
- [2] Seifert W, Carlsson N, Miller M, Pistol M E, Samuelson L, Wallenberg L R 1996 *Prog. Cryst. Growth Charact. Mater.* **33** 423
- [3] Sarkar J, Khan G G, Basumallick A 2007 *Bull. Mater. Sci.* **30** 271
- [4] Craihead H G 2000 *Science* **290** 1532
- [5] Goldstein A N, Echer C M, Alivisatos A P 1992 *Science* **256** 1425
- [6] Wen Y H, Zhu Z Z, Zhu R, Shao G F 2004 *Physica E* **25** 47
- [7] Liu Z, Sakamoto Y, Ohsuna T, Hiraga K, Terasaki O, Ko C H, Shin H J, Ryoo R 2000 *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **39** 3107
- [8] Xia Y, Yang Y, Sun Y, Wu Y, Mayers B, Gates B, Yin Y, Kim F, Yan H 2003 *Adv. Mater.* **15** 353
- [9] Bilalbegovic G 2000 *Solid State Commun.* **115** 73
- [10] Wang B L, Wang G H, Chen X S 2003 *Phys. Rev. B* **67** 193403
- [11] Link S, Wang Z L, El-Sayed M A 2000 *J. Phys. Chem. B* **104** 7867
- [12] Wang J L, Chen X S, Wang G H, Wang B L, Wei L, Zhao J J 2002 *Phys. Rev. B* **66** 085408
- [13] Wen Y H, Zheng Y, Zhu Z Z, Sun S G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2585
- [14] Tian H C, Liu L, Wen Y H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4080
- [15] He A M, Qin C S, Shao J L, Wang P 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2667 (in Chinese) [何安民, 秦承森, 邵建立, 王裴 2009 物理学报 **58** 2667]
- [16] Finnis M W, Sinclair J E 1984 *Philos. Mag. A* **50** 45
- [17] Ackland G J, Vitek V 1990 *Phys. Rev. B* **41** 10324
- [18] Lu M, Liu W Q, Luo F, Wei W H 2009 *Chin. J. Comput. Phys.* **26** 121 (in Chinese) [卢敏, 刘维清, 罗飞, 魏望和 2009 计算物理 **26** 121]
- [19] Lu M, Xu W B, Liu W Q, Hou C J, Liu Z Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6377 (in Chinese) [卢敏, 许卫兵, 刘维清, 侯春菊, 刘志勇 2010 物理学报 **59** 6377]
- [20] Nakamura K, Kitagawa T, Osari K, Takahashi K, Ono K 2006 *Vacuum* **80** 761
- [21] Zhou L, Zhou N G, Song Z D 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 34 (in Chinese) [周浪, 周耐根, 宋照东 2008 金属学报 **44** 34]
- [22] Leach A R 2001 *Molecular Modelling: Principles and Applications* (London: Prentice-Hall) p36
- [23] Parrinello M, Rahman A 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 7182
- [24] Gear C W 1971 *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equation Englewood Cliffs* (NJ: Prentice-Hall) p54
- [25] Liu H B, Ascencio J A, Perez-Alvarez 2001 *Surf. Sci.* **491** 88

Anisotropy of melting of Ag nanocrystal with different crystallographic planes at high temperature*

Lu Min[†] Huang Hui-Lian Yu Dong-Hai Liu Wei-Qing Wei Wang-He

(Faculty of Science, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou 341000, China)

(Received 4 November 2014; revised manuscript received 5 December 2014)

Abstract

The thermal-stability and melting mechanism of the Ag nanocrystalline in the process of high-temperature relaxation are investigated with embedded atomic method and molecular dynamics simulations. The dynamic evolution of the crystalline's morphology is revealed based on the analyses of mean square displacement and lifetime of the stability. It is concluded that there are obviously anisotropic behaviors in the process of high-temperature relaxation in the quasi-cubic nanocrystal which is cut along the inter-perpendicular facet of $\{110\}$, $\{211\}$ and $\{111\}$. The thermal-stability decreases in the sequence of facet $(1\bar{1}\bar{1})$, facet (110) , and facet $(1\bar{1}2)$. The lifetimes of the first outmost and the second outmost atoms in those three different facets are extremely short and show no evidently difference from each other. However considering the facets with the same crystal plane indices, the lifetimes are longer within the third atom layer and subtly increase with the increase of the number of atom layers. However, the lifetimes are distinctly different from each other among the three different facets within the third atom layer.

Keywords: nanocrystal, molecular dynamics, melting at high temperature, anisotropy

PACS: 61.46.Df, 71.15.pd

DOI: 10.7498/aps.64.106101

* Project supported by the Science and Technology Research Project in Jiangxi Province Department of Education, China (Grand No. GJJ11469) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11262006).

[†] Corresponding author. E-mail: lumin641122@126.com