



氮掺杂对石墨烯摩擦学特性影响的分子动力学模拟

刘青阳 徐青松 李瑞

Effect of N-doping on tribological properties of graphene by molecular dynamics simulation

Liu Qing-Yang Xu Qing-Song Li Rui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 146801 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20212309

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212309>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于分子动力学模拟的石墨烯镁基复合材料力学行为

Mechanical behavior of graphene magnesium matrix composites based on molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(8): 086201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211753>

石墨烯表面的特征水分子排布及其湿润透明特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of characteristic water molecular arrangement on graphene surface and wetting transparency of graphene

物理学报. 2019, 68(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182307>

速度对聚四氟乙烯摩擦系数影响的分子动力学模拟

Effect of velocity on polytetrafluoroethylene friction coefficient using molecular dynamics simulation

物理学报. 2019, 68(17): 176801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190495>

纳米尺度硼烯与石墨烯的相互作用

Interaction between borophene and graphene on a nanoscale

物理学报. 2019, 68(18): 186801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190692>

悬浮石墨烯摩擦特性

Friction properties of suspended graphene

物理学报. 2021, 70(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201796>

退火温度调控多层折叠石墨烯力学性能的分子动力学模拟

Manipulations on mechanical properties of multilayer folded graphene by annealing temperature: a molecular dynamics simulation study

物理学报. 2020, 69(19): 196102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200836>

氮掺杂对石墨烯摩擦学特性影响的分子动力学模拟*

刘青阳 徐青松 李瑞†

(北京科技大学机械工程学院, 北京 100083)

(2021年12月14日收到; 2022年3月9日收到修改稿)

掺氮石墨烯具有良好的应用前景, 但其摩擦学特性的研究仍较为缺乏. 本文采用分子动力学方法研究了氮掺杂对石墨烯摩擦学特性的影响. 结果表明在公度、非公度的界面结构下, 氮掺杂对石墨烯摩擦学特性的影响呈现相反的趋势. 界面结构为公度状态时, 氮原子的引入导致了局部非公度状态, 因而界面势垒降低、摩擦减小. 界面非公度性的改变、层间氮原子和碳原子的范德瓦耳斯力作用对界面摩擦的影响相反, 在二者的共同作用下, 随氮掺杂比例的升高, 掺氮石墨烯体系的界面摩擦力呈现先增大再减小的趋势. 界面结构为非公度状态时, 氮原子的引入对界面摩擦的影响主要体现在原子类型的变化, 界面摩擦随氮掺杂比例的增大而增大. 存在空位缺陷的石墨烯体系的摩擦最大, 掺氮原子对于降低缺陷石墨烯体系的摩擦具有积极意义.

关键词: 石墨烯, 氮掺杂, 摩擦, 分子动力学模拟**PACS:** 68.35.Af, 81.05.ue**DOI:** 10.7498/aps.71.20212309

1 引言

自2004年 Geim 等^[1]剥离出石墨烯以来, 石墨烯因其优异的力学、电学特性、大比表面积等特点吸引了众多研究者的关注^[2,3]. 目前的研究表明石墨烯零带隙的性质制约了其应用, 采用原子级修饰进行化学掺杂是调控石墨烯性质的一种有效手段. 通过化学掺杂, 例如氮 (N)、硼 (B) 元素的掺杂, 能够有效地调节石墨烯费米面的位置. 一些研究者已经开展了此方面的研究. 如 Martins 等^[4]研究了 B 原子掺杂石墨烯纳米带的电子结构和输运性质. Dutta 等^[5]和 Biel 等^[6]分别研究了 N, B 共掺杂后石墨烯纳米带的电子结构. Kandezi 等^[7]采用通过分子动力学 (MD) 方法研究了在电场辅助下 N, B 掺杂的纳米多孔石墨烯片选择性分离离子的特性. N 掺杂石墨烯也已用于超电容器^[8]、锂电池^[9]

和场效应晶体管^[10]等.

虽然氮掺杂石墨烯的电学特性已经得到了研究者的关注, 但氮掺杂对石墨烯摩擦行为的影响研究鲜见报道. 近年来对石墨烯摩擦行为的研究主要集中于石墨烯界面间的超滑行为, 以及层数、层间距和表面基团等对石墨烯摩擦的影响. 在石墨烯超滑行为的研究方面, Dienwiebel 等^[11]研究了石墨烯与石墨基底间摩擦, 结果表明当界面结构为非公度状态时, 摩擦力几乎为零, 表现出结构超滑的现象. Zheng 等^[12]发现通过摩尔纹晶格失配可实现石墨烯的超低摩擦. Leven 等^[13]研究了石墨烯在六方氮化硼 (h-BN) 表面的滑动行为, 结果表明足够大的石墨烯片在 h-BN 表面滑动时将出现稳定的超滑行为. Liu 等^[14]实现了微米尺度石墨烯与 h-BN 异质界面在大气环境下的可靠超低摩擦. 陈勇等^[15]发现石墨烯与硼烯体系的势能起伏小于石墨烯与六方氮化硼, 表明石墨烯与硼烯界面摩擦力可能更

* 中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: FRF-IDRY-20-008) 和国家自然科学基金 (批准号: 51475039) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liru@ustb.edu.cn

小. Wang 等^[16]通过在石墨烯基底上施加单轴或双轴应变实现了超滑,并将其归因于拉伸后石墨烯基底晶格常数的变化导致了界面的不相称结构. Liu 等^[17]采用分子动力学模拟研究了石墨烯片在石墨表面的超滑行为,结果表明石墨烯片在滑动过程的旋转破坏了超滑状态,原因在于界面的晶格适配增大了摩擦^[11,18]. 在层数、间距对石墨烯摩擦的影响方面, Lee 等^[19]发现随着石墨烯层数的减少,界面摩擦力增大,原因在于褶皱效应^[20]. Ye 等^[21]研究了底层固定的双层石墨烯及悬空单层石墨烯表面的摩擦行为,发现双层石墨烯的摩擦力随载荷近似线性增大,而悬空石墨烯表面的摩擦力却为非单调函数. Guo 等^[22]模拟了层间距对石墨烯摩擦的影响,指出随着层间距的减小,摩擦力增大. 化学改性对石墨烯的摩擦行为影响显著,目前研究者主要研究了 H、F、羟基等表面基团对石墨烯摩擦行为的影响,如 Dong 等^[23]指出氢化导致的原子级粗糙度的增加是氢化石墨烯摩擦力增大的主要原因. Li 等^[24]比较了氟化石墨烯和石墨烯的摩擦学性能,指出氟化石墨烯的摩擦大于石墨烯的原因在于官能团的引入导致了界面相互作用的增强和表面粗糙度的增大. Li 等^[25]通过分子动力学模拟研究了接枝羟基对石墨烯摩擦的影响,明确了氢键作用、范德瓦耳斯力和库仑力对摩擦力的贡献. Shen 等^[26]通过引入不同的官能团改变石墨烯电子的分配状态,调控层间或者层与对副间的相互作用力,成功调控了材料的摩擦学性能.

由上述研究可以看出,研究者对基团影响石墨烯的探讨主要集中在面上基团的引入,仅 Zhang 等^[27]采用第一性原理方法研究了面内掺杂对石墨烯摩擦性能的影响,但也只考虑了公度情况,面内掺杂对石墨烯摩擦的影响仍需进一步探讨. 氮掺杂石墨烯具有良好的应用前景,有必要对其摩擦学行为开展研究. 因此本文采用分子动力学方法建立了石墨烯与掺氮石墨烯组成的模拟体系,探讨了氮掺杂对石墨烯摩擦行为的影响,以期推动石墨烯摩擦的研究进程.

2 模型和方法

本文的模拟体系如图 1 所示. 图中上层为六边形石墨烯片,下层为双层石墨烯基底,其中上层石墨烯片为理想、掺杂氮原子或者存在空位缺陷的石墨

片,下层为理想石墨片,并且为了模拟基底的支撑作用,将下层石墨片固定. 六边形石墨烯片原子数为 864,基底原子数为 12094. 上层六边形石墨烯片的质心通过水平弹簧与一个虚拟 Si 原子连接,以模拟原子力显微镜中针尖的推动作用,弹簧刚度 $k = 36.3 \text{ nN/nm}$. 模拟方法为分子动力学,系综为 NVT,采用 Nosé-Hoover 方法控制体系温度为常温 300 K,沿 x, y 轴方向施加周期性边界条件. 石墨烯层内 C—C 原子的相互作用采用 AIREBO 势^[27]描述. 掺杂石墨烯面内 C—N 原子间和 C—C 原子间的相互作用由 Tersoff 势^[28]描述. C—N 与 C—C 间的范德瓦耳斯力采用 Lennard-Jones 12-6 势描述^[29,30]. 模拟过程应用 LAMMPS 实现.

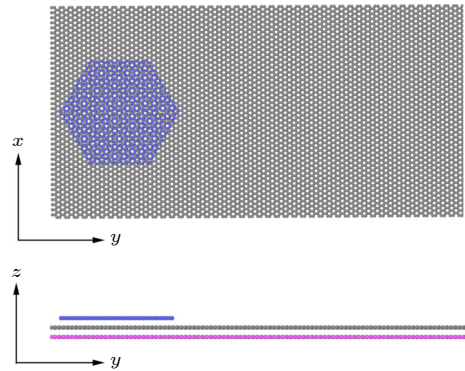


图 1 石墨烯片在石墨烯基底上的模型

Fig. 1. The illustration of hexagonal graphene sheet on graphene substrate.

模拟过程如下: 首先进行体系能量最小化,其次弛豫 10 ps 使体系平衡,之后对石墨片加载,并在加载完成后使体系弛豫平衡. 体系平衡后虚拟原子以 10 m/s 的速度沿 y 方向运动,虚拟弹簧带动六边形石墨烯片滑动,进而研究六边形石墨烯片的运动和摩擦行为. 通过绕 z 轴旋转六边形石墨烯片实现公度、非公度的界面结构.

3 结果与讨论

3.1 界面为公度结构时掺氮石墨烯的摩擦学行为

本文界面的公度状态由对上层的石墨烯片旋转 30° 后实现. 当界面结构为公度状态时,石墨烯纳米片的运动存在黏滑现象. 图 2(a) 显示了在 0.5 nN 载荷下石墨烯所受的侧向力曲线. 本文采用黏滑周期内摩擦力的变化值来比较石墨烯和掺氮石墨烯

的摩擦,即采用一个黏滑周期内的最大摩擦力与最小摩擦力间的差值来表征界面摩擦的大小,并对多个黏滑周期内的数值取平均,定义该数值为平均黏滑摩擦.图 2(b)所示为不同载荷下六边形石墨烯片所受的平均黏滑摩擦随基底 N 原子掺杂比例的变化曲线.结果表明当基底掺杂 N 原子后,无论 N 掺杂比例的高低,六边形石墨烯片所受的摩擦均小于基底未掺杂 N 原子的情况,且黏滑摩擦随 N 掺杂比例的增大先增大后减小,当掺杂比例为 7.5% 时,黏滑摩擦为局部最大值.在同样的掺杂比例下,六边形石墨烯片所受的摩擦随载荷的增大而增大.理想石墨烯体系的界面摩擦随着载荷的增大急剧增大,而基底掺杂 N 原子的石墨烯体系的摩擦对载荷变化的敏感度明显减小.当载荷较大时,基底为掺杂 2.5% 和 10% 的 N 原子的石墨烯体系的界面摩擦远小于基底为理想石墨烯的体系.

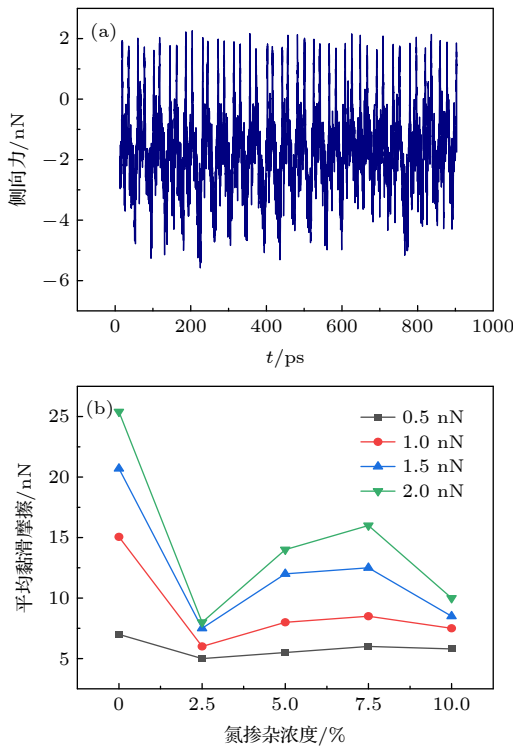


图 2 (a) 石墨烯在 0.5 nN 载荷下的黏滑摩擦力曲线; (b) 不同载荷下界面平均摩擦力随 N 掺杂比例的变化
Fig. 2. (a) Viscous slip friction curve of graphene under 0.5 nN load; (b) the average friction between interfaces with nitrogen-doped (N-doped) ratio under different loads.

为了分析掺杂 N 原子后体系界面摩擦力变化的原因,本文分别计算了基底为掺杂 N 原子的石墨烯和理想石墨烯两种体系的势能面 PES (potential energy surface),如图 3 所示.对于基底为理想

石墨烯的体系,势能面呈现明显的周期性,势垒的最大值约为 51.2 eV.而基底在掺杂 N 原子后,界面势垒的最大值为 16.3 eV,势垒大大降低,因此六边形石墨烯片滑动时需要克服的摩擦力明显减小.

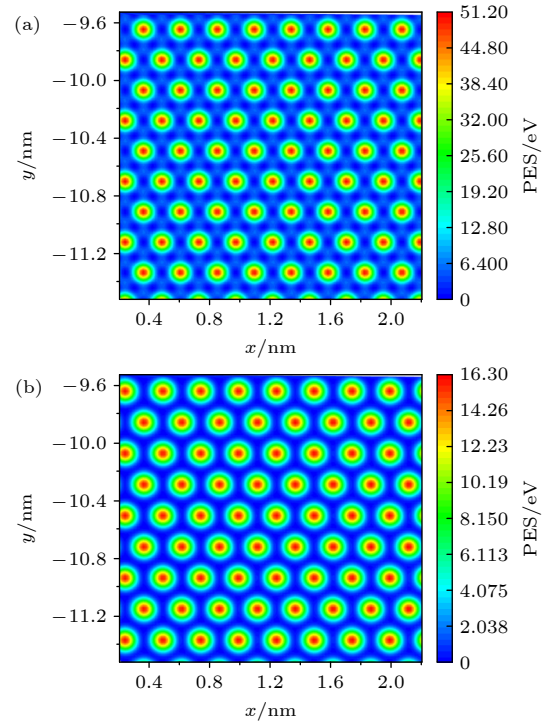


图 3 公度时两种体系界面的 PES (a) 基底为石墨烯; (b) 基底为氮掺杂石墨烯
Fig. 3. PES between interfaces of two simulation systems in a commensurate state: (a) The substrate is graphene; (b) the substrate is N-doped graphene.

为进一步探究基底掺杂 N 原子后势垒降低的原因,本文观察了掺杂 N 原子和理想石墨烯的基底结构,如图 4 所示.可以看出,掺杂 N 原子后,C—N 键与 C—C 键的差异导致掺杂位置附近的六元环变形,即相对于理想六元环结构,掺杂 N 原子后基底结构产生了晶格畸变,并从其几何构型可以看出其晶格畸变程度.对于理想六元环来说,C—C 键键长为 1.42 nm,键角为 120°.当掺杂氮原子之后,对于图 4(a) 中第 1 个六边形区域,C—C 键键长为 1.42 nm,C—N 键键长为 1.46 nm,键角分别为 115°,121°,130°,116°,124°,114°.对于图 4(a) 中第 2 个六边形区域,其键角分别为 118,127°,121°,118°,122°,114°,同理对于图 4(a) 中第 3 个六边形区域,其键角分别为 119°,120°,124°,119°,118°,120°.对于掺杂引起晶格畸变的量化表达,也可参考 Zhang 等^[31]的做法,将晶格畸变描述为缺

陷能量, 缺陷能量与键长和键角变化直接相关. 掺杂 N 原子后的晶格畸变导致了六边形石墨烯滑片与掺杂石墨烯基底间产生了局部晶格失配, 从而降低了界面势垒.

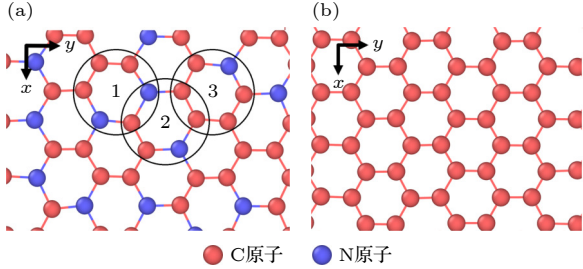


图 4 (a) 氮掺杂石墨烯的原子结构; (b) 理想石墨烯的原子结构
Fig. 4. (a) Atomic structure of N-doped graphene; (b) atomic structure of ideal graphene.

当基底石墨烯中掺杂 N 原子后, 界面间的相互作用受晶格失配和原子类型变化两方面的影响.

界面非公度性状态增强将减小摩擦. 但对界面势能的计算表明, N—C 原子间的范德瓦耳斯力相互作用比 C—C 原子间强, 因而可能增大摩擦. 在 N 掺杂比例很低或较高时, 界面非公度性的变化占主导作用, 摩擦减小, 但 N 掺杂比例处于中间态时, 掺杂后原子类型变化的影响较为明显, 因此在二者的共同作用下, 界面摩擦力随 N 掺杂比例的升高先增大后减小.

3.2 界面结构为非公度状态

当界面结构为非公度状态时, 摩擦力很小, 上层六边形石墨烯片基本为匀速运动, 不同载荷下界面平均摩擦力随 N 掺杂比例的变化如图 5 所示. 结果表明摩擦力随 N 掺杂比例的增大而增大. 当掺杂比例较低时, 体系的摩擦力与理想体系的相当. 在高载荷下, 掺 N 后石墨烯的界面摩擦力远大于理想石墨烯体系. 图 5(b) 为含有点缺陷的石墨

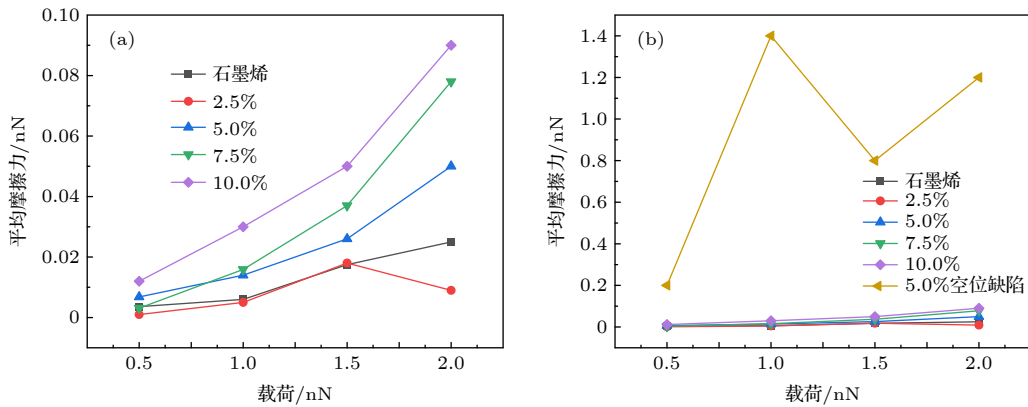


图 5 (a) 非公度时不同载荷下石墨烯的平均摩擦力随氮掺杂比例的变化; (b) 存在 5% 空位缺陷的石墨烯与 N 掺杂石墨烯的平均摩擦力
Fig. 5. (a) Average friction on N-doped graphene with different N-doping ratio under different loads when interface is in incommensurate state; (b) average friction on graphene with 5% vacancy defects compared with N-doped graphene.

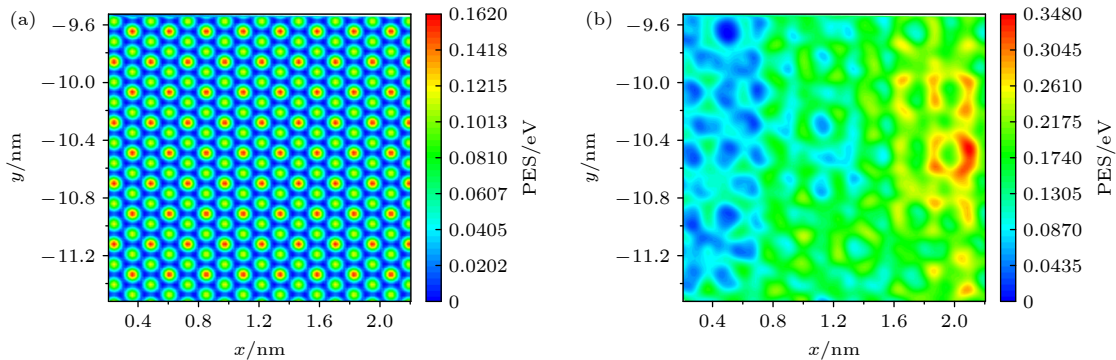


图 6 非公度时两种体系界面的 PES (a) 基底为石墨烯; (b) 基底为 N 掺杂的石墨烯

Fig. 6. PES between interfaces of two simulation systems in an incommensurate state: (a) The substrate is graphene; (b) the substrate is N-doped graphene.

烯体系、掺 N 石墨烯体系、理想石墨烯体系的摩擦力随载荷变化的曲线图。可以看出, 界面结构为非公度状态时, 含有缺陷的石墨烯体系的摩擦力远高于另外两种情况, 即掺杂对于减小缺陷石墨烯体系的摩擦具有积极意义。

基底为掺 N 石墨烯和理想石墨烯的体系的势能面分别如图 6(a), (b) 所示。基底为理想石墨烯、掺 N 石墨烯体系的势能面起伏的最大值分别为 0.16, 0.35 eV, 即掺 N 石墨烯体系的界面势垒大于理想石墨烯体系。与界面结构为公度状态时相比, 掺杂 N 原子后界面势能面的变化呈现相反的趋势。原因在于界面结构为公度状态时, 掺杂 N 原子引起的界面局部非公度性对摩擦的影响占据主导地位, 从而导致摩擦力减小。而界面结构为非公度状态时, 层间已呈现完全的晶格失配, 层间 N-C 原子范德瓦耳斯力作用的影响占据了主导地位, 因此掺杂体系的界面摩擦比理想石墨烯体系大。

4 结 论

本文采用分子动力学模拟方法, 研究了界面结构为公度、非公度状态下掺杂 N 原子对石墨烯摩擦性能的影响, 主要结论如下。

1) 在界面结构为公度状态时, 掺杂 N 原子后界面摩擦力比理想石墨烯体系小, 并且随 N 掺杂比例的增大摩擦力呈现先增大后减小的趋势。原因在于掺杂 N 原子后, N 原子周围的六边形晶格产生了畸变, 进而导致了界面间的局部非公度结构, 降低了摩擦。界面间摩擦受晶格失配和原子类型由 C 变为 N 两方面的影响。晶格失配的增强将降低摩擦, 而层间 N—C 原子的范德瓦耳斯力作用增大摩擦, 二者对摩擦的影响趋势相反。当 N 掺杂比例很低或较高时, 界面非公度性状态的变化占主导作用, 因此摩擦力呈现先增大后减小的趋势。与理想石墨烯体系相比, 氮掺杂石墨烯体系能够承载大的载荷并保持良好的摩擦性能。

2) 当界面结构为非公度状态时, N 掺杂石墨烯体系的界面摩擦力大于理想石墨烯体系。原因在于界面结构为非公度状态时, 影响界面摩擦的主导因素为基底中原子类型的改变, 随着 N 掺杂比例的增大, 层间相互作用增强, 摩擦变大。缺陷石墨

烯体系的界面摩擦最大, N 掺杂倾向于吸附在石墨烯缺陷位置, 对于减小缺陷石墨烯体系的摩擦具有积极意义。

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 *Science* **306** 666
- [2] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [3] Geim A K 2009 *Science* **324** 1530
- [4] Martins T B, Miwa R H, da Silva A J R, Fazzio A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 196803
- [5] Dutta S, Manna A K, Pati S K 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 096601
- [6] Biel B, Blase X, Triozon F, Roche S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 096803
- [7] Kamal Kandezi M, Shadman Lakmehsari M, Matta C F 2020 *J. Mol. Liq.* **302** 112574
- [8] Lin T T, Lv Q F 2015 *J. Func. Mater.* **46** 5007 (in Chinese) [林婷婷, 吕秋丰 2015 *功能材料* **46** 5007]
- [9] Wang G, Wang B, Wang X, Park J, Dou S, Ahn H, Kim K 2009 *J. Mate. Chem.* **19** S378
- [10] Kwon O S, Park S J, Hong J-Y, Han A R, Lee J S, Lee J S, Oh J H, Jang J 2012 *ACS. Nano.* **6** 1486
- [11] Dienwiebel M, Verhoeven G S, Pradeep N, et al. 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 126101
- [12] Zheng X, Gao L, Yao Q, et al. 2016 *Nat. Commun.* **7** 13204
- [13] Leven I, Krepel D, Shemesh O, Hod O 2013 *J. Phys. Chem. Lett.* **4** 115
- [14] Liu S W, Wang H P, Xu Q, et al. 2017 *Nat. Commun.* **8** 14029
- [15] Chen Y, Li R 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 186801 (in Chinese) [陈勇, 李瑞 2019 *物理学报* **68** 186801]
- [16] Wang K, Ouyang W, Cao W, Ma M, Zheng Q 2019 *Nanoscale* **11** 2186
- [17] Liu Y, Grey F, Zheng Q 2014 *Sci. Rep.* **4** 4875
- [18] Biswas S K 2008 *Tribol Lett* **30** 159
- [19] Lee C, Li Q, Kalb W, Liu X Z, Berger H, Carpick R W, Hone J 2010 *Science* **328** 76
- [20] Li S, Li Q, Carpick R W, Gumbsch P, Liu X Z, Ding X, Sun J, Li J 2016 *Nature* **539** 541
- [21] Ye Z, Martini A 2014 *Langmuir* **30** 14707
- [22] Guo Y, Guo W, Chen C 2007 *Phys. Rev. B* **76** 155429
- [23] Dong Y, Wu X, Martini A 2013 *Nanotechnology* **24** 375701
- [24] Gao L, Chen X, Yan Y, Liu Y, Song A, Ma T, Hu Y, Su Y, Qiao L 2018 *Comput. Mater. Sci.* **147** 28
- [25] Li R, Song C 2018 *Crystals* **8** 167
- [26] Shen Y, Wang Y, Zhou Y, Shi A, Hu J, Zhang Y 2016 *J. Phys. D* **49** 415303
- [27] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 6472
- [28] Kinacı A, Haskins J B, Sevik C, Çağm T 2012 *Phys. Rev. B* **86** 115410
- [29] Lennard-Jones J E 1931 *Proceed. Phys. Soc.* **43** 461
- [30] Leven I, Maaravi T, Azuri I, Kronik L, Hod O 2016 *J. Chem. Theory Comput.* **12** 2896
- [31] Zhang W, Lu W C, Zhang H X, Ho K M, Wang C Z 2016 *Carbon* **110** 330

Effect of N-doping on tribological properties of graphene by molecular dynamics simulation*

Liu Qing-Yang Xu Qing-Song Li Rui[†]

(School of Mechanical Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

(Received 14 December 2021; revised manuscript received 9 March 2022)

Abstract

Graphene has attracted a lot of attention due to its excellent electrical properties, however, the gapless nature of graphene limits its further applications. Doping is an effective way to open the bandgap, in which nitrogen-doped (N-doped) graphene has potential applications, but the study of its tribological properties is still lacking. In this work, the effects of nitrogen doping on the tribological properties of graphene under different interfacial structures are investigated by molecular dynamics simulation. The simulation models include a hexagonal graphene sheet, graphene or N-doped graphene substrate. The results show that the nitrogen doping has different effects on friction when interface structure is in a commensurate state and an incommensurate state. In a commensurate state, N-doping reduces the friction between interfaces in all cases, but the friction first goes up and then decreases with the increase of doping ratio of nitrogen. The local maximum value of friction occurs at a doping ratio of 7.5%. This phenomenon results from the interface structure and the change of van de Waals force between interfaces. The introduction of nitrogen atoms causes the lattice of graphene to distort, which results in the formation of local incommensurate state, thus reducing the interfacial potential barrier and friction. However, the van der Waals force between nitrogen atom and carbon atom between layers is stronger than that between carbon atoms and carbon atoms, which causes the friction to increase. When the doping ratio is low or high, lattice distortion plays more important role. The friction of N-doped graphene shows much smaller increase with load than that of ideal graphene, which indicates that the N-doped graphene possesses a better performance under high load. When the interface structure is in an incommensurate state, the introduction of nitrogen atoms shows slight influence on lattice mismatch, therefore, the change of atomic type plays a dominant role in determining the friction between interfaces, which goes up with the increase of N-doping ratio. When the substrate is graphene with vacancy defects, the value of friction between interfaces is larger than the ideal graphene substrate or N-doped graphene substrate, which indicates that the doping of nitrogen atoms has positive effect on reducing the friction of graphene with defects.

Keywords: graphene, N-doped, friction, molecular dynamics simulation

PACS: 68.35.Af, 81.05.ue

DOI: 10.7498/aps.71.20212309

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities of the Ministry of Education of China (Grant No. FRF-IDRY-20-008) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51475039).

[†] Corresponding author. E-mail: lirui@ustb.edu.cn