



厚德博学 崇实求新

纳米材料的理论预测



单 位：石家庄学院



讲座内容

一、纳米材料简介

二、理论预测纳米材料的方法简介

三、分子动力学简介

3.1 牛顿第二定律 $F=ma$

3.2 双原子体系的计算与模拟

3.3 多原子体系的理论模拟

四、分子动力学在纳米材料预测中应用

五、与分子动力学相关的科研平台简介

六、致谢



一、纳米材料简介

纳米材料是指在三维空间中至少有一维处于纳米尺寸(1-100nm)或由它们作为基本单元构成的材料,这大约相当于 10^3 到 10^4 个原子紧密排列在一起的尺度

由于纳米材料的尺寸已经接近电子的相干长度,它的性质因为强相干所带来的自组织使得纳米材料性质发生很大变化



一、纳米材料简介




- 但是物理实验上能够达到原子尺度分辨率的科研实验仪器价格昂贵，且需要专业的操作技术，人民大众难以在正常生活直接观测到纳米材料。但随着计算机的快速发展，将计算机的计算能力和物理理论相结合的计算凝聚态物理可在一定范围内从理论出发勾勒出纳米材料的预测构型，进而直观的体现材料在纳米尺度时的特性。



石家庄学院
SHIJIAZHUANG UNIVERSITY

物理学院
机电学院

理论预测纳米材料的方法

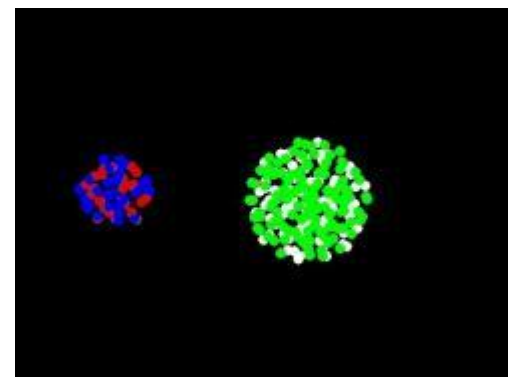
- 以量子力学为基础研究电子相互作用的第一性原理计算（密度泛函理论）A background image for the first bullet point showing a molecular dynamics simulation with blue and white spheres representing atoms and a red hexagonal grid pattern.
- 以经典物理中的牛顿力学为基础，研究原子之间的相互作用的分子动力学模拟A background image for the second bullet point showing a molecular dynamics simulation with blue and white spheres representing atoms and a red hexagonal grid pattern.
- 以经典物理中的牛顿力学为基础，研究有限元之间的相互作用的有限元分析A background image for the third bullet point showing a 3D finite element analysis model of a mechanical part with a color gradient from blue to red.



三、分子动力学简介 $F=ma$

- 分子动力学方法主要是依靠牛顿力学来模拟材料体系中原子的运动，在不同状态中抽取样本，通过统计平均分析从而计算材料的热力学量和其他可观测的宏观物理性质。
- 在分子动力学模拟中，原子是最基本的粒子单位，其运动遵循牛顿运动方程。

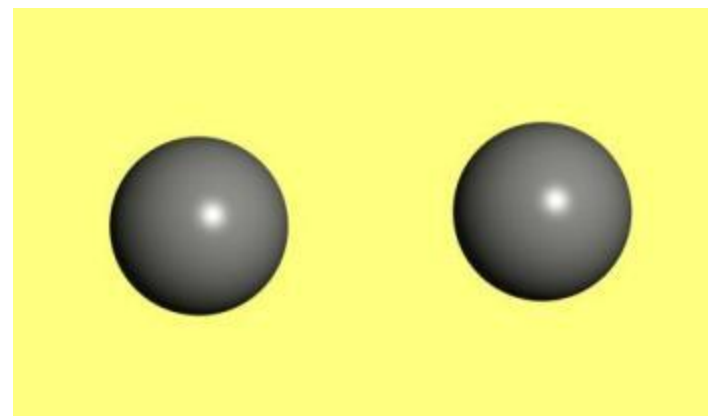
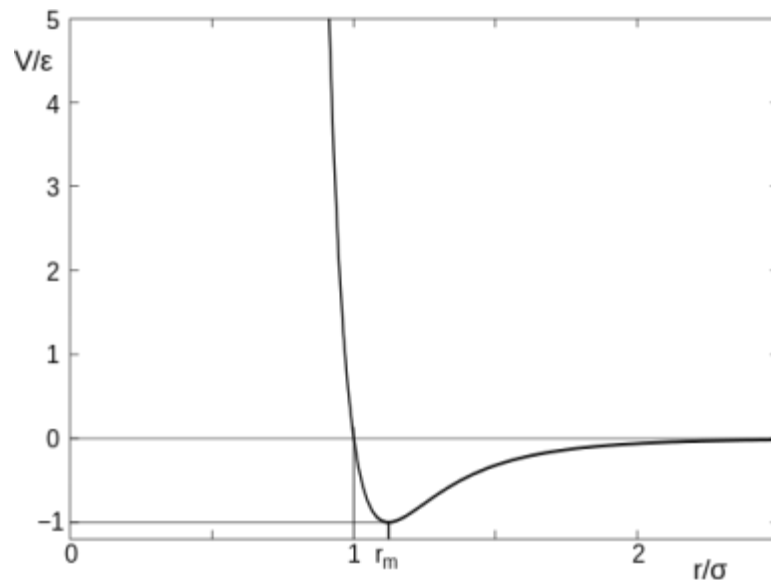
即牛顿第二定律 $F=ma$





3.2 双原子体系的计算与模拟

- 两原子之间受力与原子之间距离相关，即知道两原子之间的距离，即可获得两原子之间的相互作用力

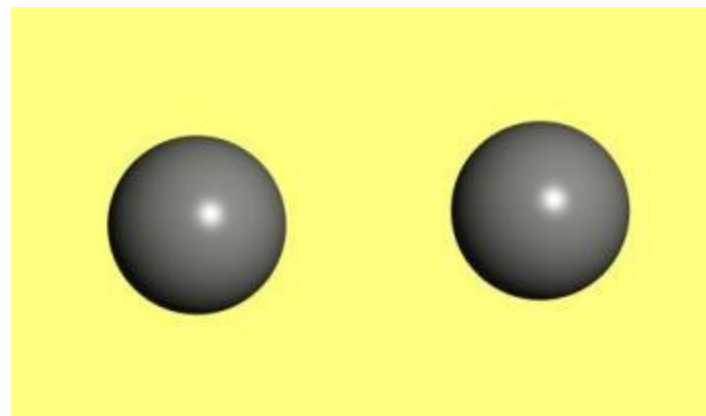
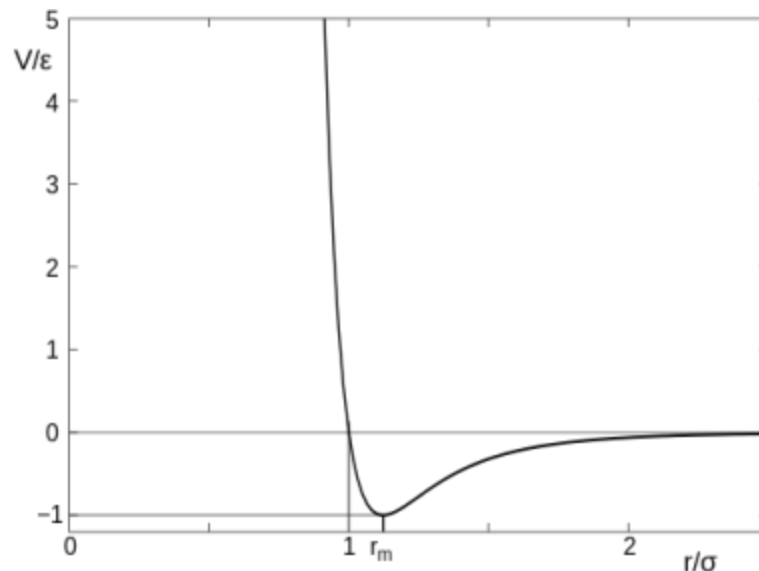


- $\vec{F} = f(r)$
- 则利用牛顿第二定律可求得各个原子的加速度
- $\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m}$



3.2 双原子体系的计算与模拟

- 原子在初始时刻的速度和位置需要提前设定好分别为 v_0, x_0 。
- 那么经过1ns的时间后原子的速度和位置分别为
- $v = v_0 + at$,
- $x = x_0 + \frac{v_0 + v}{2} t$
- 其他时刻依次类推，即可获得任意时刻原子的速度和位置

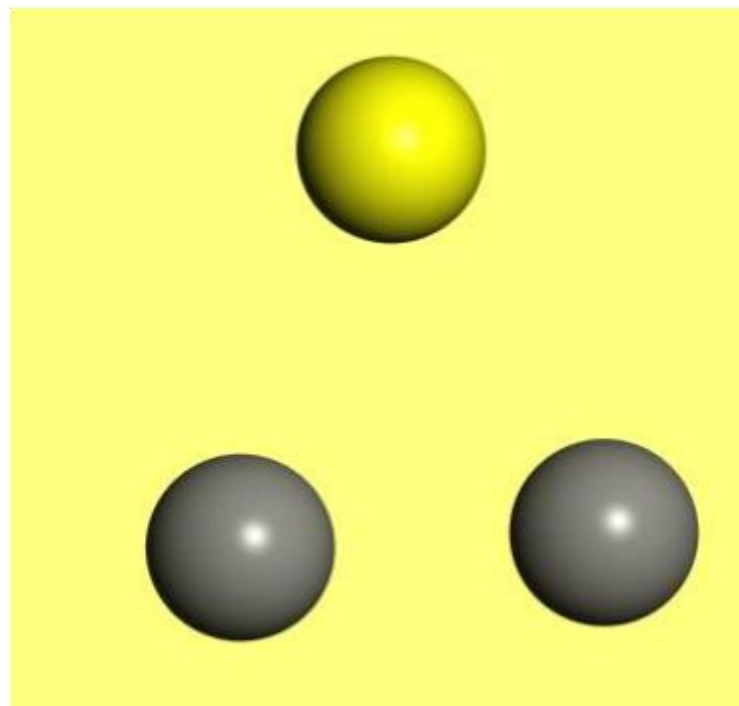
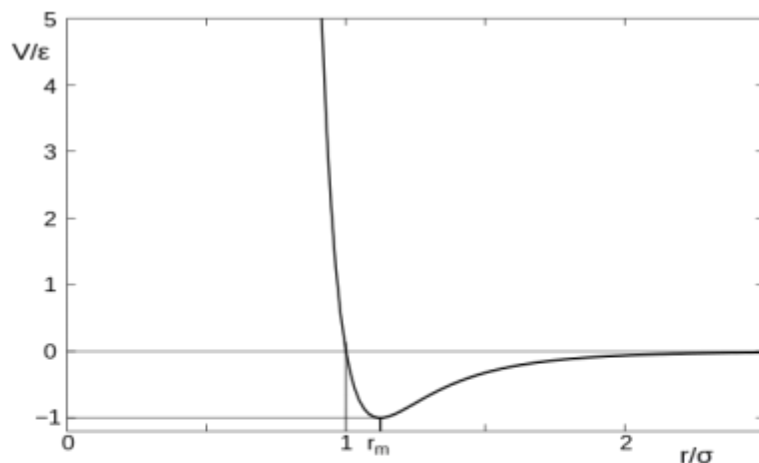




3.3 多原子体系的计算与模拟

- 多原子体系跟双原子体系类似，如果给定初始时刻各个原子之间的位置和速度，即可根据位置求出各个原子之间的距离，进而求出各个原子所受到其他原子的作用力。再根据牛顿第二定律 $F=ma$ ，

$v = v_0 + at$, $r = r_0 + \frac{v_0 + v}{2}t$ 可求得任意时刻任意原子的位置和速度

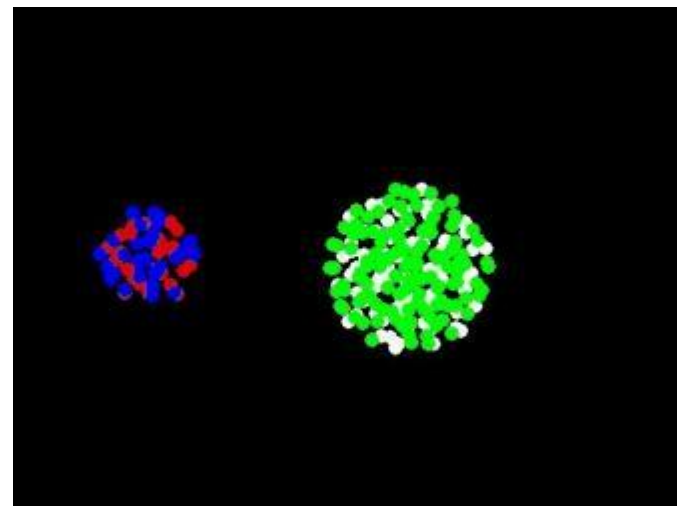




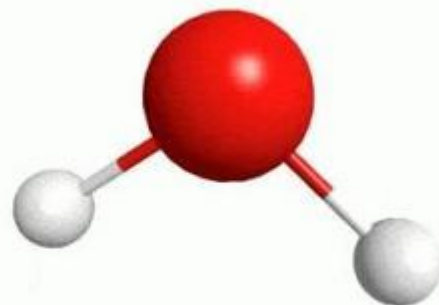
3.3 多原子体系的计算与模拟

对于多原子体系任意时刻任意原子的位置和速度求解出来后

可利用物理学中的统计平均分析原理，计算体系的热力学量和其他可观测的宏观物理性质。



例如原子团簇的碰撞



单个水分子的动力学模拟

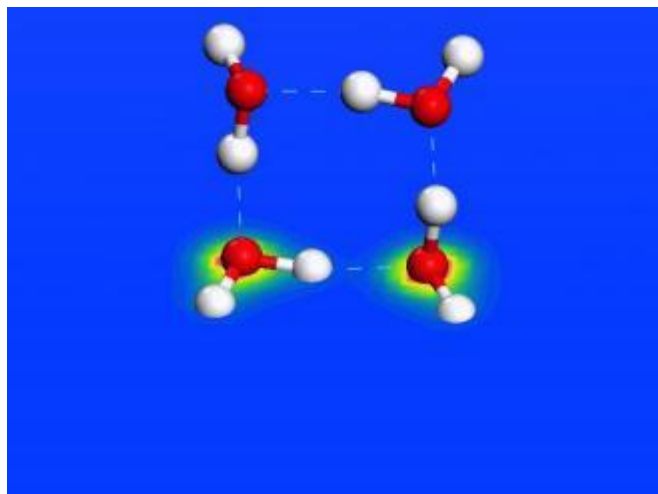


石家庄学院
SHIJIAZHANG UNIVERSITY

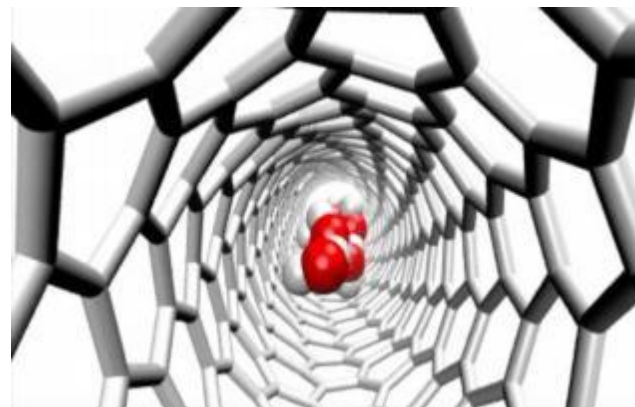
物理学院
机电学院

四分子动力学对纳米材料预测

利用分子动力学观察纳米材料的运行与特性



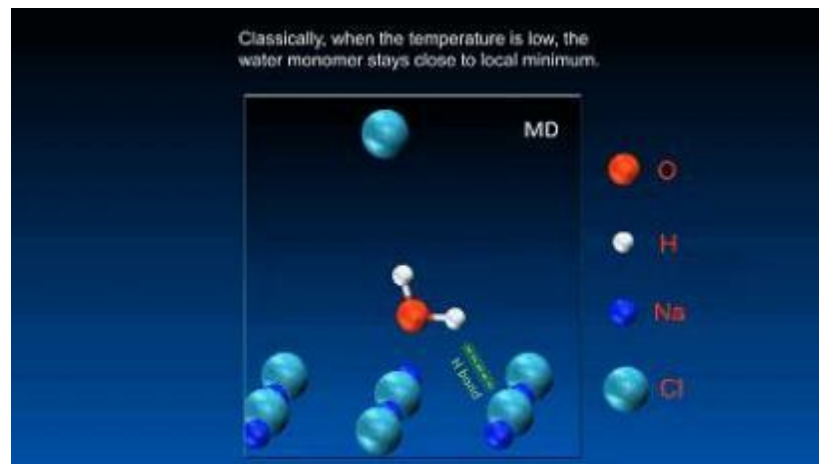
冰中水分子的运动



水在碳纳米管中的运动



水分子的流动



水分子在食盐表面吸附

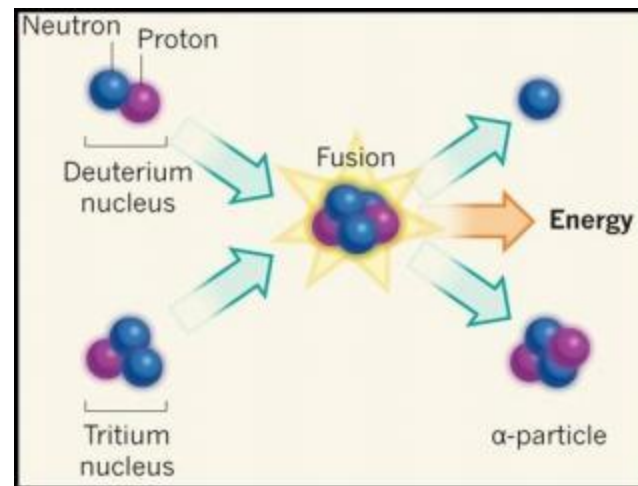


石家庄学院
SHIJIAZHANG UNIVERSITY

物理学院
机电学院

四分子动力学的科研应用

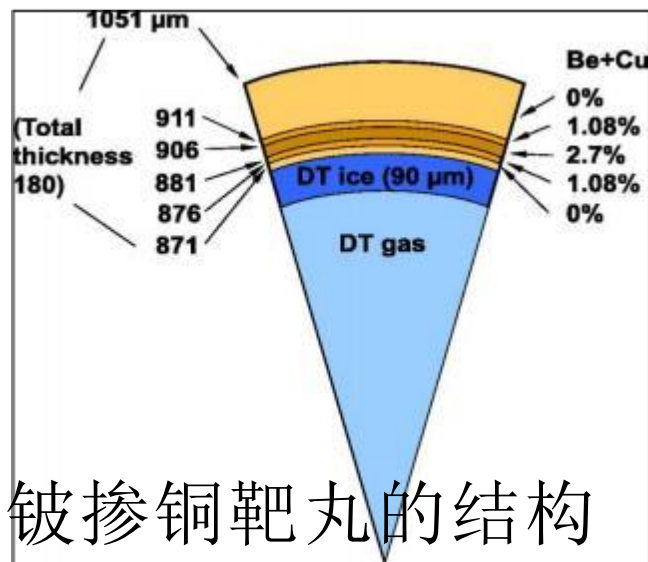
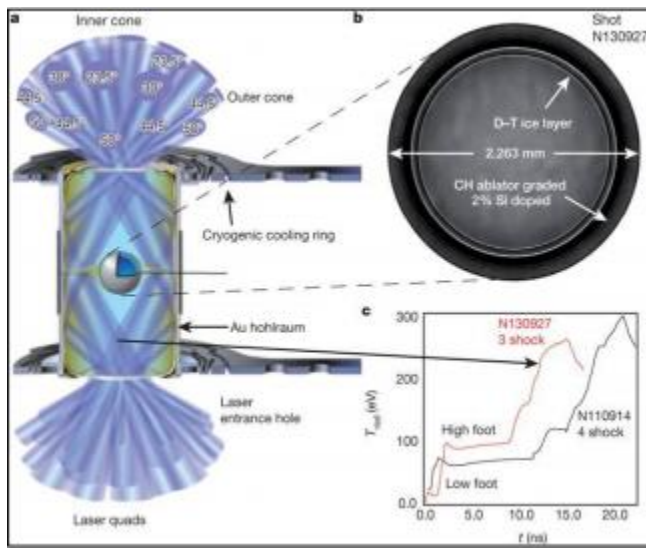
核聚变：是一种清洁的能源，由氘和氚聚变产生稳定的氦并释放大量能量，核聚变小型化是当前研究重点。惯性约束核聚变(inertial confinement fusion ICF)：把几毫克的氘和氚的混合气体或固体装入直径约几毫米的靶丸内，通过激光束或热辐射迅速加热毫米级的氘氚靶丸，靶丸向内爆炸压缩，形成高温、高密度等离子体，在自身惯性作用的约束下，在极短时间内点燃内部燃料，进而引发热核聚变反应



核聚变反应机理

- Be材料是制备靶丸壁的一种理想备选材料
- 制备铍靶丸的现用技术是 磁控溅射

核聚变小型化用靶丸



铍掺铜靶丸的结构



石家庄学院
SHIJIAZHANG UNIVERSITY

物理学院
机电学院

四分子动力学对纳米材料预测

实验主要研究

氩气压力、

基底温度、

溅射功率

等溅射条件对Be

薄膜结构和形貌

的影响

实验存在一定局限

性：磁控溅射实验

中所观测的空间尺

度都在几十纳米以

上，材料的微观物

理现象（特别是在

原子尺度的物理现

象）难以观测；实

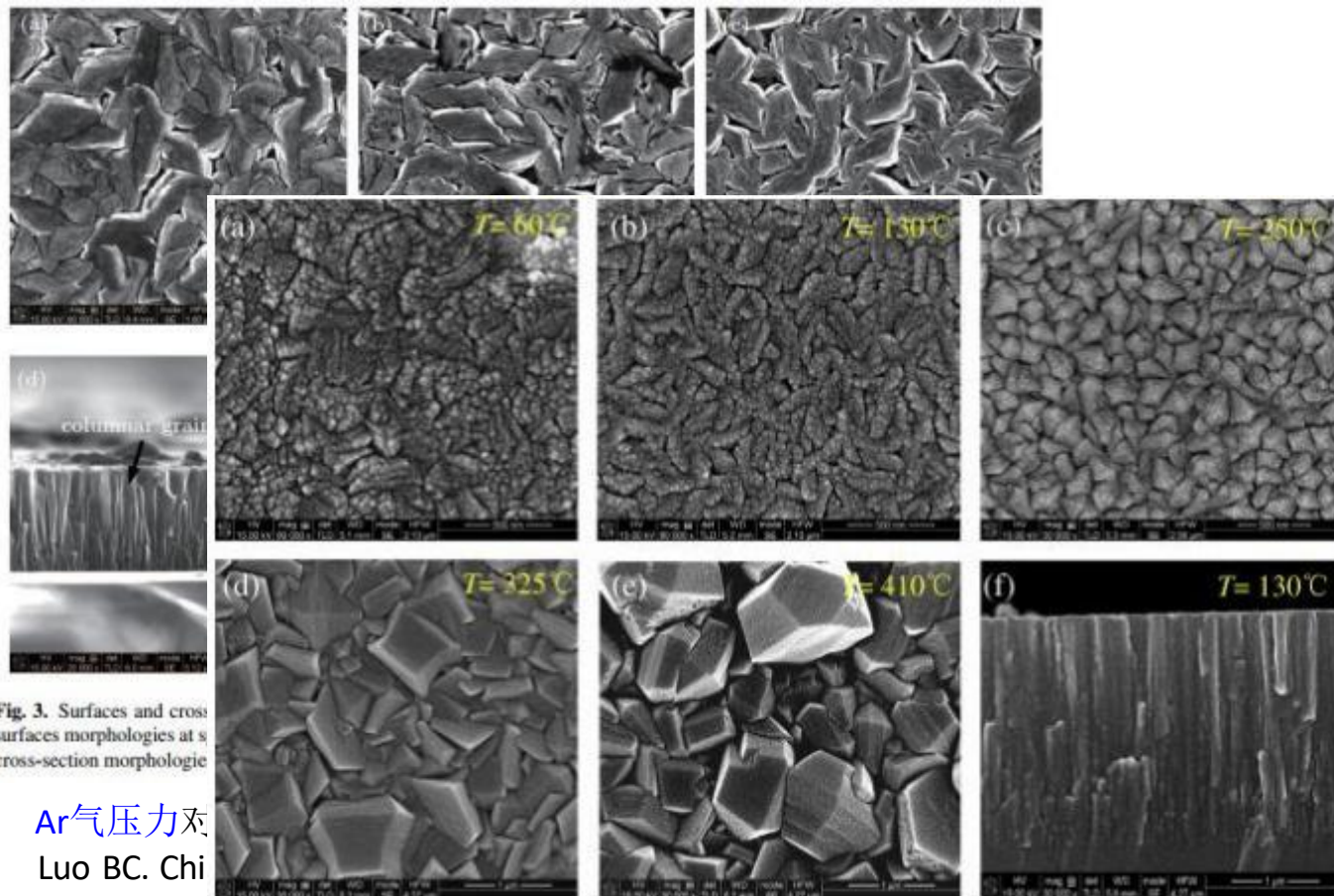
验过程中并不能实

时监测薄膜的生长

过程。铍元素有毒

，且价格昂贵，都

限制了实验的进展



基底温度对铍薄膜结构和形貌的影响

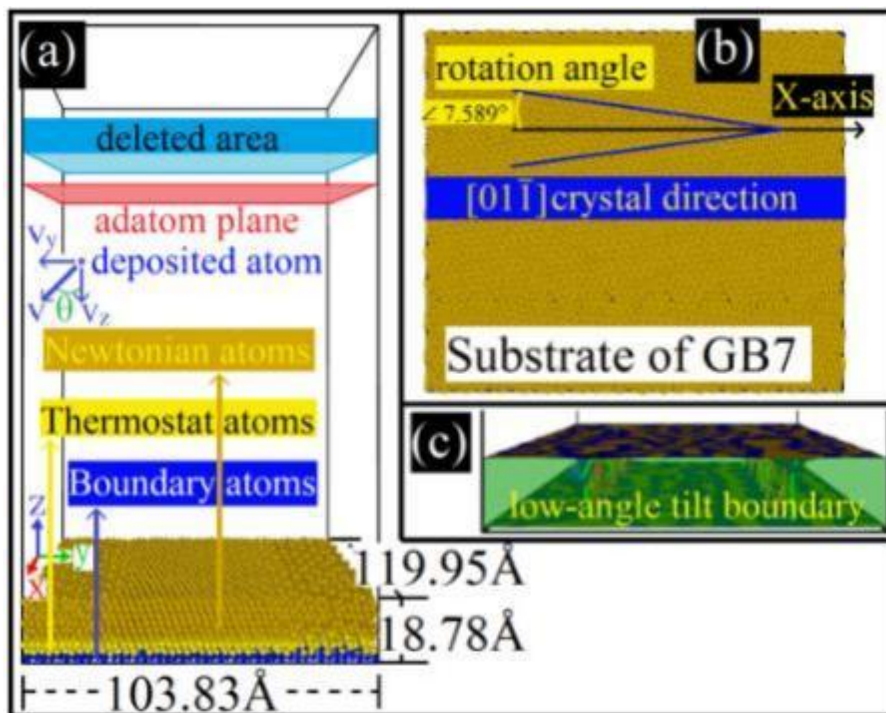
B.C. Luo et al. / Journal of Alloys and Compounds 607 (2014) 150–156



四分子动力学对纳米材料预测

Atomsk软件构建基底模型步骤，

- 1, 创建来晶
- 2, 设定真空层
- 3, 设定不同层的原子类型
- 4, 修改测试模型准确性

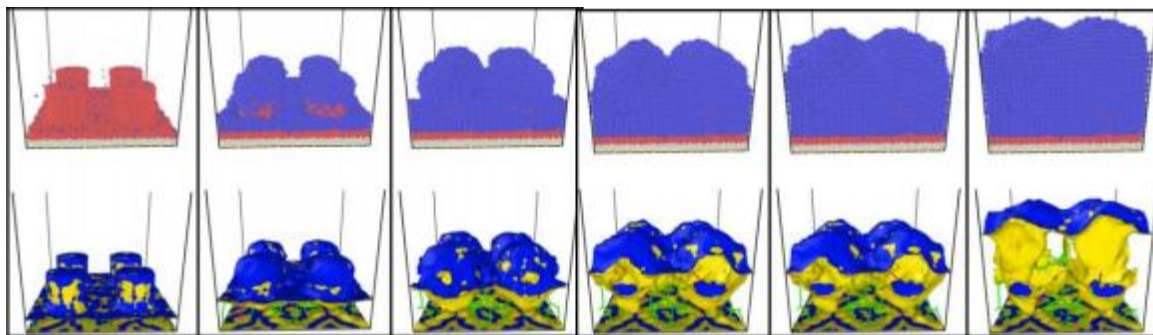




四分子动力学对纳米材料预测

lammps软件模拟生长步骤，

- 1, 写（修改）in文件（控制温度等基本设定的文件）
- 2, windows下测试文件，服务器测试文件
- 3, 结果下载和分析
- 4, ovitio软件使用方法概述



在包含晶界和多个圆柱表面生长