

面向质量探测的单层金刚石片振动的分子动力学研究^{*}

邓枫昱 郑卓群 王立峰[†]

(南京航空航天大学 航空航天结构力学及控制全国重点实验室, 南京 210016)

摘要 单层金刚石作为近年来新合成的二维纳米材料具有优异的物理性能,在纳米质量传感器方面有巨大的应用前景.本文采用分子动力学模拟和连续介质理论方法系统研究了带附着质量的单层金刚石片的振动特性,并与单层石墨烯板的结果进行对比.结果表明,单层金刚石和单层石墨烯的固有频率随附着质量的增大而减小.相同尺寸下,单层金刚石比单层石墨烯具有更高的质量灵敏度.预应变会对材料的固有频率产生较大的影响,增加预应变可以显著提高单层金刚石的固有频率,并提升单层金刚石的灵敏度.附着质量的位置也会对固有频率产生影响,当靠近中间时,频移会达到最大值,而附着质量靠近固支边缘时,几乎不会对固有频率产生影响.

关键词 单层金刚石, 质量探测, 分子动力学, 振动

中图分类号:O369

文献标志码:A

Molecular Dynamics Study on the Vibrations of Diamane Nanosheet for Mass Detection^{*}

Deng Fengyu Zheng Zhuoqun Wang Lifeng[†]

(State Key Laboratory of Mechanics and Control for Aerospace Structures, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract Diamane, as a recently synthesized two-dimensional nanomaterial, has excellent physical properties and enormous application prospects in the field of nano mass sensors. Based on molecular dynamics simulations and continuum theory, this article systematically studied the vibration characteristics of diamane nanosheet with attached mass. The results are compared with those of single-layer graphene nanosheet. It is found that the natural frequencies of diamane and single-layer graphene decrease with increasing attached mass. Under the same size, diamane has higher mass sensitivity than single-layer graphene. Pre-strain has a significant impact on the natural frequency of the structure. Increasing pre-strain can significantly increase the natural frequency of diamane and enhance their sensitivity. The position of the attached mass also affects the natural frequency. When it is close to the middle, the frequency shift reaches its maximum value, while when the attached mass is close to the fixed edge, it has almost no effect on the natural frequency.

Key words diamane, mass detection, molecular dynamics, vibration

引言

近年来,微纳技术的进步^[1,2]促进了微纳机电系统的发展,相关成果受到了科学界的极大关注,如纳米质量传感器^[3-5]等.纳米质量传感器的传感原理是检测周围外来原子或分子在传感器表面吸附而引起的共振频率的移位.由于一定尺寸的纳米材料的质量处于原子级水平,因此即使周围环境中少量的外来原子或分子也会引起纳米传感器中的频率变化^[6,7].

纳米共振质量传感器具有巨大的发展潜力,许多专家学者针对不同的材料和结构进行设计和研究. Sakhaee-Pour 等^[3]采用了悬臂和桥搭边界条件下的锯齿型和扶手椅型模型,考虑了点质量和原子尘埃对基频的影响,发现主频率对 1zg(仄克, 1zg = 1×10^{-21} g)量级的附加质量高度敏感. Joshi 等^[4]采用原子有限元方法对具有手性的单壁碳纳米管进行了动力学分析. Hu 和 Wang^[8]建立了单壁纳米碳管分子动力学模型,提出采用非局部弹性理论研究碳纳米管的动力学问题. Liu 和 Wang^[9]采用连续介质理论与分子动力学模拟相结合的方法,研究了氧化锌纳米线的振动问题. Kim 和 Park^[10]利用经典分子动力学研究了单层石墨烯的质量传感潜力,并以金作为吸附原子,发现单层石墨烯在较高温度下的质量传感能力会下降,其次发现虽然在石墨烯单层中引入单个空位阻止了吸附原子的扩散,但由于品质因子的降低,在较高温度下,质量传感分辨率仍然会大幅下降. Joshi 等^[11]研究了基于手性单壁碳纳米管的质量传感器,发现由于刚度变化较大,当空位靠近固定端时,固有频率下降幅度最大. Yoon 和 Hwang^[12]研究了悬臂式(3,3)碳纳米管谐振腔封装有限长度的纳米粒子,提出了一种建模技术并进行有效的分子动力学模拟,以获得封装有限纳米颗粒的悬臂式单壁碳纳米管谐振器的基频移动. Kwon 等^[13]采用分子动力学方法模拟了悬浮石墨烯谐振器在恒定温度下吸附有限质量的振动行为,发现石墨烯谐振器的质量灵敏度能达到 1yg(幺克, 1yg = 1×10^{-24} g). Lei 等^[6]基于连续介质弹性模型和瑞利能量法,建立了一种具有原子分辨率纳米力学质量传感器的模型,研究了单个单层石墨烯片制造原子级质量传感器的潜力. Jalali 等^[14]利用分子动力学和非局部弹性方法,研究了

单层石墨烯片作为共振传感器在超纳米粒子检测中的应用. Duan 等^[15]通过分子动力学方法报道了金刚石纳米线不仅具有超高的质量灵敏度,而且具有非常高的品质因子.一方面,所研究的金刚石纳米线显示出 0.58yg 极高的质量分辨率,另一方面,金刚石纳米线具有非常低的内在能量耗散,因此具有高品质因子. Xiao 等^[16]通过分子动力学模拟,证明了边长为 10nm 的外周夹紧拉伸正方形单层石墨烯片可以制作原子尺度质量传感的谐振器,并开发了一种利用前三种共振模式测定质量的新方法,发现提高石墨烯中的拉伸预应力可以显著提高质量灵敏度.

单层金刚石层间有 sp^3 碳-碳键,可以通过化学官能化双层石墨烯获得^[17,18]. Zheng 等^[19]利用分子动力学模拟,研究了金刚石纳米带谐振器的振动特性,发现金刚石纳米带谐振器具有很高的固有频率和高达 10^5 数量级的品质因子,同时不同的材料堆积构型和随机分布的表面氢化区域对金刚石纳米带谐振器振动特性的影响可以忽略不计. Wu 等^[20]基于原子模拟,研究了单层金刚石在拉伸和弯曲变形下的力学性能,发现层序对金刚石力学性能的影响可以忽略不计,还发现单层金刚石具有很高的弹性模量和抗弯刚度. Zhan 等^[21]研究了超细金刚石纳米线的物理性能,发现其不仅具有优异的扭转变形能力,而且具有优异的界面载荷传递效率.鉴于如此优异的性质,单层金刚石是纳米传感器潜在制造材料. Zhao 等^[22]采用分子动力学模拟方法系统研究了金刚石纳米带的振动响应,发现在不同附着质量下,金刚石纳米带的固有频率约为相同尺寸的双层石墨烯纳米带的 3 倍,此外,金刚石纳米带比双层石墨烯纳米带具有更高的质量分辨率,可以检测到较小的附着质量.鉴于此,有必要构建探测质量附着于单层金刚石片模型,并由分子动力学模拟附着质量对单层金刚石片模型振动特性的影响.

因此,本文采用分子动力学模拟的方法研究单层金刚石片在质量探测方面的振动特性.为研究附着质量对单层金刚石片模型的影响,分别考虑附着质量大小、单层金刚石片尺寸长短、预应变大小以及附着质量位置的改变与频率变化的关系,并采用理论推导和数值拟合的方法预测了单层金刚石片和单层石墨烯的灵敏度和探测范围.

1 建模与研究方法

1.1 分子动力学模拟

图1为含附着质量的矩形单层金刚石片模型的示意图. 该模型包含6912个原子, 长度为7.6nm(扶手椅方向), 宽度为7.8nm(锯齿方向), 仅考虑AB堆垛的单层金刚石. C-C和C-H原子之间的相互作用可以由广泛采用的自适应分子间反应经验键序势(AIREBO)描述, 该势准确地描述了碳结构中的 $sp-sp^2-sp^3$ 键杂化, 可以很好地代表典型碳材料(如碳纳米管^[23-25]和石墨烯^[26-28])的结合能和弹性势能^[21,29,30], 包含短程相互作用、长程范德华力相互作用和二面角项.

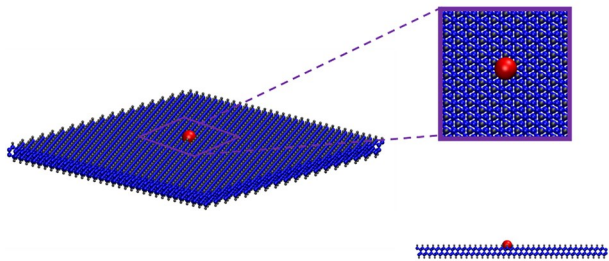


图1 带附着质量的矩形单层金刚石片模型的分子模型示意图
Fig. 1 Molecular model diagram of rectangular single-layer diamond with attached mass

首先采用能量最小化将单层金刚石样品弛豫到能量最小状态, 生成模型, 修改模型的原子质量. 在这里需要说明, 将外部质量沉积在单层金刚石谐振器的特定原子上, 除了这些特定的原子质量增加以外, 其它原子保持不变. 接下来, 对单层金刚石进行热振动分析, 系统采用NVT系综和Nose-Hoover控温器将温度控制在5K进行分子动力学模拟, 目的是防止附着原子或分子质量较大时温度过高导致结构在振动时发生破坏, 固定四周最外层原子, 模拟时间为4ns, 时间步长为1fs, 每隔100步输出一次原子坐标, 并由快速傅里叶变换得到相应模型的固有频率.

1.2 理论模型

如图2所示, 外加质量附着在四边固支的单层金刚石片的中心. 理论上, 单层金刚石片可以等效为各向同性的弹性薄板. 基于Kirchhoff薄板理论^[31], 质量附着在单层金刚石片的动力学方程为

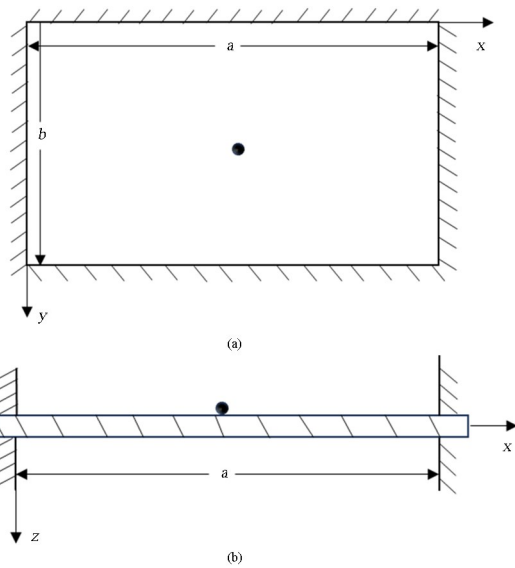


图2 四边固支边界下附着质量的单层金刚石片模型示意图
Fig. 2 Schematic diagram of a single-layer diamond with attached mass under four edges clamped

$$D \nabla^4 w(x, y, t) + \left[\rho h + \Delta m \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \delta\left(y - \frac{b}{2}\right) \right] \frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

其中, $\nabla^4 = (\partial^4/\partial x^4) + 2(\partial^4/\partial x^2 \partial y^2) + (\partial^4/\partial y^4)$ 是拉普拉斯算子, $\delta(x - a/2)$ 和 $\delta(y - b/2)$ 是狄拉克 δ 函数, Δm 是外加质量, $D = Eh^3/12(1 - \mu^2)$ 是单层金刚石片的弯曲刚度. 其中, E 是等效杨氏模量, h 是等效厚度, μ 是泊松比. 四边固支的边界条件可表示为

$$\begin{aligned} w(0, y, t) = w(a, y, t) = 0, \\ \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial x} \Big|_{x=a} = 0, \\ w(x, 0, t) = w(x, b, t) = 0, \\ \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial y} \Big|_{y=b} = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

为了满足四边固支的边界条件, 单层金刚石片的挠度可假设为:

$$w(x, y, t) = W(x, y) e^{i\omega t} = A \sin^2 \frac{\pi x}{a} \sin^2 \frac{\pi y}{b} e^{i\omega t} \quad (3)$$

其中, $i \equiv \sqrt{-1}$, ω 是附着质量的单层金刚石片的一阶固有频率, A 是待定系数. 将式(3)代入式(1)可得

$$D \nabla^4 W(x, y) + \left[\rho h + \Delta m \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \delta\left(y - \frac{b}{2}\right) \right] W(x, y) \omega^2 = 0 \quad (4)$$

令 $L = D \nabla^4 W(x, y) + [\rho h + \Delta m \delta(x - a/2) \delta(y - b/2)] W(x, y) \omega^2$, 使用伽辽金方法求解上述方程有

$$\int_0^a \int_0^b L \sin^2 \frac{\pi x}{a} \sin^2 \frac{\pi y}{b} dy dx = 0 \quad (5)$$

进一步代入求解可得

$$\frac{16\pi^4 D}{3} \left(\frac{1}{a^4} + \frac{2}{3a^2b^2} + \frac{1}{b^4} \right) A - \left[\rho h + \frac{64\Delta m}{9ab} \int_0^a \int_0^b \delta \left(x - \frac{a}{2} \right) \delta \left(y - \frac{b}{2} \right) \times \sin^4 \frac{\pi x}{a} \sin^4 \frac{\pi y}{b} dy dx \right] A \omega^2 = 0 \quad (6)$$

因此可得附着质量的单层金刚石片的一阶固有频率为

$$\omega = \sqrt{\frac{16\pi^4 D}{3} \left(\frac{1}{a^4} + \frac{2}{3a^2b^2} + \frac{1}{b^4} \right) / \left(\rho h + \frac{64M}{9ab} \right)} \quad (7)$$

其中, $\rho h ab$ 即为单层金刚石片的质量, 可记为 M . 附着质量的单层金刚石片一阶固有频率的公式可整理为

$$\omega = k \sqrt{\frac{D}{9M + 64\Delta m}} \quad (8)$$

其中, $k = 4\pi^2 \sqrt{(3a^4 + 2a^2b^2 + 3b^4) / a^3b^3}$.

当 $\Delta m = 0$ 时, 未附着质量的单层金刚石片一阶固有频率 $\omega_0 = k \sqrt{D/9M}$, 因此可得附着质量单层金刚石片的无量纲频率为

$$\bar{\omega} = \frac{\omega}{\omega_0} = \sqrt{\frac{9M}{9M + 64\Delta m}} \quad (9)$$

根据之前工作的结果^[32], 取面密度 $\rho h = 1.5055 \times 10^{-6} \text{ kg/m}^2$, 抗弯刚度 $D = 76.52 \times 10^{-19} \text{ N} \cdot \text{m}$. 可得未附着质量的单层金刚石片的一

阶固有频率为 225.4GHz, 与分子动力学模拟结果 204GHz 存在 10% 左右的误差, 这是由于所选取的挠度函数只存在三角函数的平方项, 形式过于简单所造成的误差.

图 3 展示了无量纲频率 $\bar{\omega}$ 随附着质量变化的关系. 随着附着质量的增大, 无量纲频率 $\bar{\omega}$ 逐渐减小. 当附着质量达到 50zg 时, $\bar{\omega}$ 约为未带附着质量的单层金刚石的 45%. 理论结果能与分子动力学模拟结果很好地吻合.

2 结果与讨论

2.1 附着质量对固有频率的影响

纳米质量传感器的原理是检测由于周围外来原子或分子在传感器表面吸附而引起的固有频率的移位. 单层金刚石作为纳米传感器的检测能力取决于其随附加质量变化而产生的频移. 图 4 展示了 6 个附着质量分别为 0, 4.98zg, 9.96zg, 16.6zg, 33.2zg 和 49.8zg 的幅值-频率图, 分别对应 199.99GHz, 172.74GHz, 152.74GHz, 133.49GHz, 105.24GHz 和 89.24GHz 的频率. 研究发现附着质量在 1zg~50zg 范围内可以检测到明显的频移.

为了研究附着质量的大小对于单层金刚石一阶固有频率的影响, 选取了从 0 到 49.8zg 总计 13 个不同的附着质量, 并对边长为 7.6nm 和 7.8nm 的单层金刚石进行分子动力学模拟. 由于单层金刚石是通过外表面氢化化学诱导的相变方法从石墨烯发展而来, 因此选用相同尺寸的单层石墨烯板模型(简称 SLGS)作为对比.

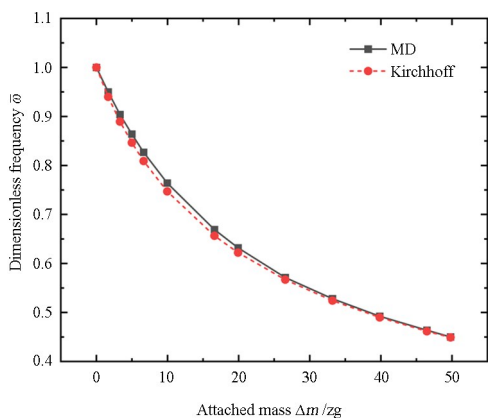


图 3 无量纲频率 $\bar{\omega}$ 随附着质量变化的关系曲线

Fig. 3 The relationship of dimensionless frequency $\bar{\omega}$ as a function of the attached mass

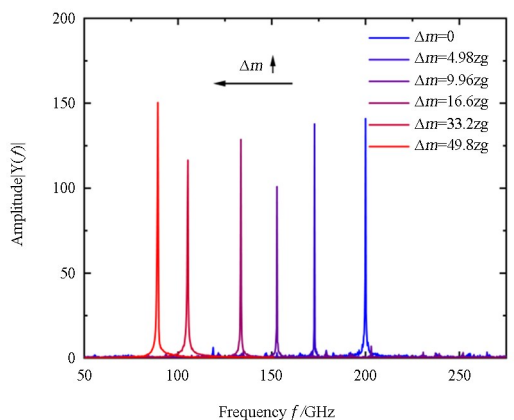


图 4 附着质量分别为 0, 4.98zg, 9.96zg, 16.6zg, 33.2zg, 49.8zg 的频谱图

Fig. 4 Frequency spectrum plots with attached mass of 0, 4.98zg, 9.96zg, 16.6zg, 33.2zg, 49.8zg

图 5 展示了单层金刚石和单层石墨烯的第一阶固有频率和附着质量的关系。结果可得,随着附着质量的增加,单层金刚石和单层石墨烯的一阶固有频率随之减小。在相同的附着质量下,与单层石墨烯相比,单层金刚石具有更大的一阶频率。当附着质量小于 5zg 时,单层金刚石一阶频率的下降速率大于单层石墨烯,这表明单层金刚石谐振器在该区域比单层石墨烯对于质量具有更高的灵敏度,且探测范围更广。

质量灵敏度是指最小可探测质量,它是指附着在谐振器上引起特定频移的质量。在此,将频移定义为 $\Delta f = f_0 - f$ 。图 6 展示了基于分子动力学模拟得到的不同附着质量下单层金刚石的频移变化的关系曲线。当附着质量小于 100yg 时,固有频率几乎不受附着质量变化的影响,这说明单层金刚石在该区域内对于附着质量没有检测能力。

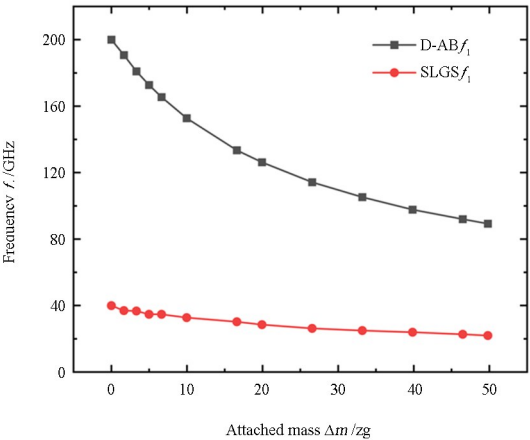


图 5 单层金刚石和单层石墨烯的第一阶固有频率和附着质量的关系曲线
Fig. 5 Relationship curve between first order frequency of diamane/graphene and attached mass

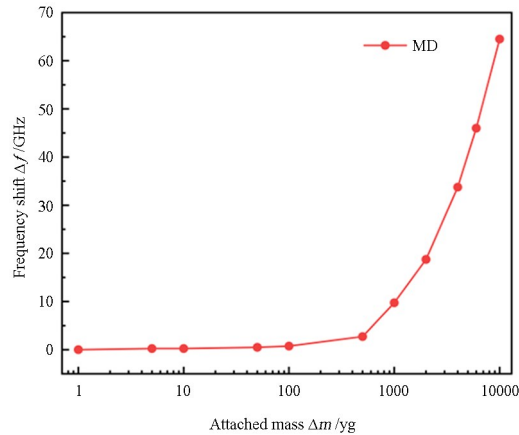


图 6 不同附着质量下单层金刚石的频移变化的关系曲线
Fig. 6 The relationship of frequency shift changes of diamane as a function of different attached mass Δm

当附着质量大于 100yg 时,频移随附着质量增大而增大。选取 1GHz 频移作为预测质量分辨率的标准,根据理论计算,可以得到单层金刚石的质量分辨率约为 145.7yg。

2.2 尺寸对固有频率的影响

在本小节中,为研究单层金刚石片尺寸对于一阶固有频率的影响,在长度一定时,分别选取宽度为 7.8nm,8.8nm,9.8nm,10.8nm,11.8nm 的单层金刚石片模型,并改变附着质量的大小进行分子动力学模拟,同时,将分子动力学结果和理论结果进行了对比,结果如图 7 所示。

从图 7 可以看出,各尺寸下的单层金刚石矩形板一阶固有频率都随着附着质量增加而下降。随着宽度的增加,不同附着质量下的频率都出现了降低的现象,即宽度为 7.8nm 时,频率最高;宽度为 11.8nm 时,频率最低。未附着质量时,尺寸对于单层金刚石频率影响较大,当附着质量增大到 50zg 时,尺寸对于频率的影响变得很小。

图 8 展示了基于分子动力学模拟和 Kirchhoff 薄板理论不同宽度下无量纲频率 $\bar{\omega}$ 随附着质量变化,其中曲线代表理论结果,散点代表分子动力学模拟结果。由图可得,各宽度下的无量纲频率 $\bar{\omega}$ 都随着附着质量的增大而减小。随着宽度的增加,分子动力学模拟和 Kirchhoff 薄板理论得到的无量纲频率 $\bar{\omega}$ 都逐渐增大。同尺寸下的分子动力学结果和 Kirchhoff 薄板理论结果吻合较好。

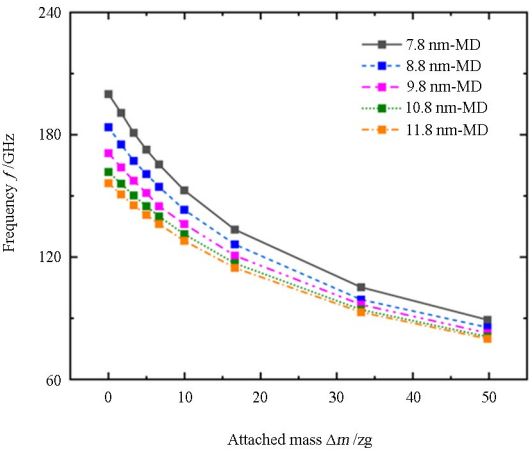


图 7 基于分子动力学模拟不同宽度下单层金刚石的一阶频率随附着质量变化的关系曲线
Fig. 7 The relationship of the first order frequency of diamane with different widths varying with the attached mass based on MD simulations

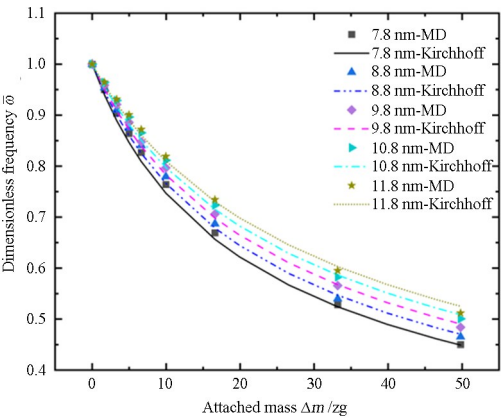


图 8 基于分子动力学模拟和 Kirchhoff 薄板理论不同宽度下无量纲频率随附着质量变化的关系曲线

Fig. 8 The relationship of dimensionless frequency of diamane with different widths as a function of the attached mass based on MD simulation and Kirchhoff model

2.3 面内预应变对固有频率及灵敏度的影响

面内预应变在微纳米机电系统中会产生较大影响. 通过施加不同预应变, 会显著改变微纳米材料的物理性质, 从而影响其在动力学中的振动响应. 本小节得到了不同预应变下单层金刚石和单层石墨烯固有频率和附着质量之间的关系式, 从而预测两者的灵敏度, 以分析预应变的影响和在质量探测应用中的优劣.

为了研究面内预应变对固有频率的影响, 首先建立 $7.6\text{ nm}\times7.8\text{ nm}$ 的附着质量从 0 到 $50z\text{g}$ 共 9 个的单层金刚石和单层石墨烯板模型, 通过能量最小化达到稳定后沿扶手椅方向拉伸到预期的应变值并固定, 再进行充分的弛豫. 固定四边最外层原子, 温度控制在 5K, 在 NVT 系综中进行分子动力学模拟. 模拟时间设置为 4ns, 时间步长为 1fs, 每隔 1000 步输出一次原子的位置坐标信息, 通过快速傅里叶变换得到结构的固有频率.

图 9 展示了单层金刚石和单层石墨烯在不同拉伸预应变下固有频率与附着质量的关系, 其中频率的基本公式 $f = \sqrt{1/(c_1 + c_2 \Delta m)}$ 是根据式 (8) 演化而来, 其中系数 c_1 和 c_2 待定, 这是由于随着初始预应变, 弯曲刚度也随之改变, 无法准确地测定. 通过两者的对比, 可以发现结果吻合得很好, 这说明该理论不仅不受限于材料的不同, 同时适用于施加预应变的情况. 随着附着质量增加, 固有频率逐渐降低. 对于相同的附着质量而言, 固有频率随着面内预应变增加而增大.

图 10 展示了不同预拉应变下, 单层金刚石的

无量纲频率随附着质量的变化规律. 随着附着质量增大, 无量纲频率减小. 当附着质量小于 $5z\text{g}$ 时, 预应变的改变对于无量纲频率的影响并不明显, 当附着质量等于 $5z\text{g}$ 时, 频率约为未附着质量的单层金刚石矩形板一阶频率的 86%. 当质量大于 $5z\text{g}$ 时, 随着附着质量的增加, 在同一附着质量下, 增大预应变会使得无量纲频率减小.

表 1 预测了不同预应变下单层金刚石和单层

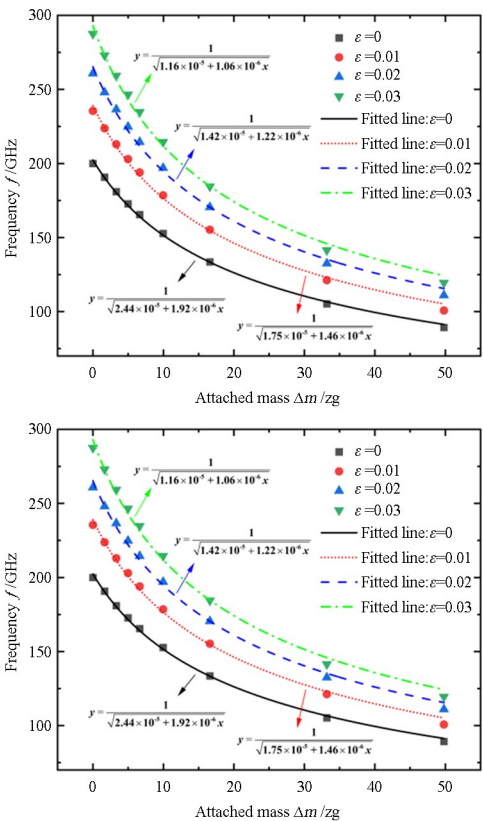


图 9 不同拉伸预应变下固有频率与附着质量的关系:
(a) 单层金刚石; (b) 单层石墨烯

Fig. 9 Natural frequencies as a function of the attached mass for different pre-tensile strain: (a) Diamane; (b) SLGS

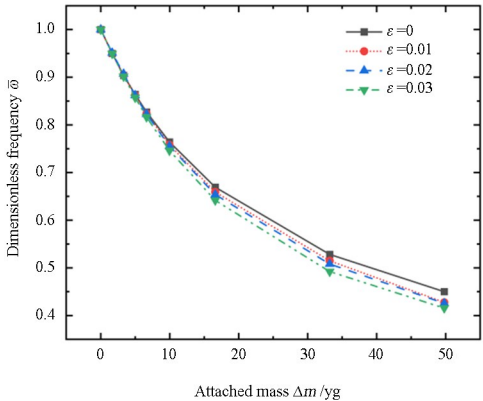


图 10 不同预拉应变下, 单层金刚石的无量纲频率随附着质量的变化曲线

Fig. 10 The relationship of dimensionless frequency of diamane as a function of the attached mass for different pre-tensile strain

表1 不同预应变下单层金刚石和单层石墨烯的质量分辨率
Table 2 Mass resolution of diamane and SLGS under different pre-strain

Materials	$\epsilon=0$	$\epsilon=0.01$	$\epsilon=0.02$	$\epsilon=0.03$
D-AB(yg)	127.2	100.4	88.4	75.1
SLGS(yg)	151.06	68.54	39.5	28.68

石墨烯的质量分辨率. 当 $\epsilon=0$ 时, 单层石墨烯的质量分辨率略大于单层金刚石的质量分辨率, 随着预应变的增加, 单层金刚石和单层石墨烯的质量分辨率逐渐减小. 对于单层石墨烯而言, $\epsilon=0$ 时的质量分辨率约为 $\epsilon=0.01$ 的2倍, 这说明单层石墨烯对初始条件非常敏感. 而单层金刚石相对于单层石墨烯而言更为稳定. 质量分辨率随预应变的增加而降低, 这说明预应变的增加会使得单层金刚石具有更高的灵敏度. 为了降低预应变对于灵敏度变化的影响, 单层金刚石是更好的选择.

2.4 附着质量位置对固有频率的影响

为了进一步讨论在四边固支条件下附着质量位置对于单层金刚石频移变化的影响, 分别选取了沿 x 方向和沿 y 方向各7个点, 总计49个点, 并施加质量为 $3.32zg$ 的附着质量, 结果如图11所示. 当附着质量位置接近板中间时, 频移达到最大. 随着附着质量位置向两边靠近, 频移逐渐减小. 当接近于离边缘 $1/3$ 的位置时, 频移变化率出现较大改变, 这说明在离边缘 $1/3$ 到板中间这片区域时, 单层金刚石对于附着质量的变化都较为敏感, 且在中间位置时具有最强的检测能力. 当附着质量靠近边缘时, 单层金刚石的固有频率几乎不发生改变, 对质量不再具有灵敏度. 因此在设计纳米传感器时,

应尽量使外来附着质量靠近板中间, 避免被吸附到边缘处.

3 总结

本文基于分子动力学模拟系统地研究了单层金刚石作为质量传感器的振动行为, 推导了质量附着于单层金刚石的理论模型, 研究了在不同拉伸预应变下单层金刚石片一阶固有频率随附着质量变化的规律, 结果如下:

- (1)通过分析单层金刚石和单层石墨烯的固有频率和附着质量大小的关系, 发现随着附着质量的增加, 单层金刚石和单层石墨烯的固有频率都随之减小, 在 $1zg\sim50zg$ 范围内可以检测到明显的频移.
- (2)建立了质量一薄板系统的理论模型, 计算了该系统的一阶固有频率. 同尺寸下, 理论计算所得的无量纲频率与分子动力学模拟结果吻合得较好.
- (3)对单层金刚石和单层石墨烯施加不同的拉伸预应变, 发现对于相同的附着质量而言, 固有频率随着面内预应变增加而增大. 相比于单层石墨烯, 拉伸预应变对单层金刚石质量灵敏度的影响较小.
- (4)当附着质量位置靠近边缘时, 附着质量的大小对单层金刚石固有频率的影响很小, 中间位置时影响最大.

参考文献

[1] 刘志强, 夏磊, 张猛, 等. MEMS 力平衡加速度传感器以测量误差最小为目标的控制算法[J]. 动力学与控制学报, 2022, 20(6): 94–100.
LIU Z Q, XIA L, ZHANG M, et al. Control algorithm of a mems force-balance accelerometer for minimizing the measurement error [J]. Journal of Dynamics and Control, 2022, 20(6): 94–100. (in Chinese)

[2] 周泽宇, 胡开明, 屠尔琪, 等. 车载环境下 MEMS 微镜长期可靠性及控制方法[J]. 动力学与控制学报, 2024, 22(2): 23–52.
ZHOU Z Y, HU K M, TU E Q, et al. Long-term reliability and control methods of MEMS micromirror in automobile environment [J]. Journal of Dynamics and Control, 2024, 22(2): 23–52. (in Chinese)

[3] SAKHAE-POUR A, AHMADIAN M T, VAFAI A. Applications of single-layered graphene sheets as

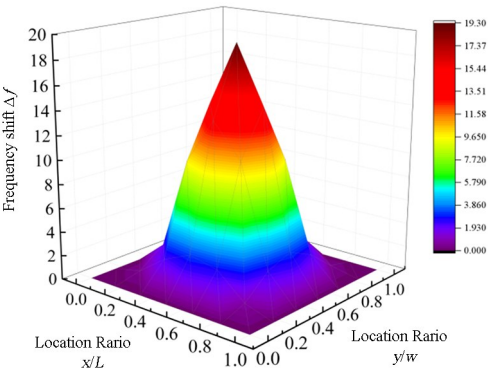


图11 不同位置下单层金刚石在附着质量为 $3.32zg$ 时频移变化的三维曲线图
Fig. 11 Three dimensional curve of frequency shift changes of diamane at different positions with an attachment mass of $3.32zg$

- mass sensors and atomistic dust detectors [J]. *Solid State Communications*, 2008, 145(4): 168–172.
- [4] JOSHI A Y, HARSHA S P, SHARMA S C. The dynamic behaviour of chiral, fixed-free, single-walled carbon nanotube-based nanomechanical mass sensors due to atomic vacancies [J]. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part N: Journal of Nanoengineering and Nanosystems*, 2009, 223(2): 45–56.
- [5] EOM K, PARK H S, YOON D S, et al. Nanomechanical resonators and their applications in biological/chemical detection: Nanomechanics principles [J]. *Physics Reports*, 2011, 503(4/5): 115–163.
- [6] LEI X W, NATSUKI T, SHI J X, et al. An atomic-resolution nanomechanical mass sensor based on circular monolayer graphene sheet: theoretical analysis of vibrational properties [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 113(15): 154313.
- [7] ZHANG J, WANG C Y. Beat vibration of hybrid boron nitride-carbon nanotubes—A new avenue to atomic-scale mass sensing [J]. *Computational Materials Science*, 2017, 127: 270–276.
- [8] 胡海岩, 王立峰. 纳米碳管的若干动力学问题[J]. *动力学与控制学报*, 2003, 1(1): 14–19.
- HU H Y, WANG L F. Dynamic problems of carbon nanotubes [J]. *Journal of Dynamics and Control*, 2003, 1(1): 14–19. (in Chinese)
- [9] 刘赛赛, 王立峰. 氧化锌纳米线振动问题研究[J]. *动力学与控制学报*, 2017, 15(4): 373–380.
- LIU S S, WANG L F. Vibration of zinc oxide nanowires [J]. *Journal of Dynamics and Control*, 2017, 15(4): 373–380. (in Chinese)
- [10] KIM S Y, PARK H S. On the utility of vacancies and tensile strain-induced quality factor enhancement for mass sensing using graphene monolayers [J]. *Nanotechnology*, 2010, 21(10): 105710.
- [11] JOSHI A Y, SHARMA S C, HARSHA S P. Effect of chirality and atomic vacancies on dynamics of nanoresonators based on SWCNT [J]. *Sensor Review*, 2011, 31(1): 47–57.
- [12] YOON J W, HWANG H J. Molecular dynamics modeling and simulations of a single-walled carbon-nanotube-resonator encapsulating a finite nanoparticle [J]. *Computational Materials Science*, 2011, 50(9): 2741–2744.
- [13] KWON O K, KIM K S, PARK J, et al. Molecular dynamics modeling and simulations of graphene-nanoribbon-resonator-based nanobalance as yoctogram resolution detector [J]. *Computational Materials Science*, 2013, 67: 329–333.
- [14] JALALI S K, NAEI M H, PUGNO N M. Graphene-based resonant sensors for detection of ultra-fine nanoparticles: molecular dynamics and nonlocal elasticity investigations [J]. *Nano*, 2015, 10(2): 1550024.
- [15] DUAN K, LI Y J, LI L, et al. Diamond nanothread based resonators: ultrahigh sensitivity and low dissipation [J]. *Nanoscale*, 2018, 10(17): 8058–8065.
- [16] XIAO X, FAN S C, LI C, et al. Stress-insensitive resonant graphene mass sensing via frequency ratio [J]. *Sensors*, 2019, 19(13): 3027.
- [17] CHERNOZATONSKII L A, SOROKIN P B, KVASHNIN A G, et al. Diamond-like C₂H nanolayer, diamane: simulation of the structure and properties [J]. *JETP Letters*, 2009, 90(2): 134–138.
- [18] LAVINI F, REJHON M, RIEDO E. Two-dimensional diamonds from sp²-to-sp³ phase transitions [J]. *Nature Reviews Materials*, 2022, 7: 814–832.
- [19] ZHENG Z Q, ZHAN H F, NIE Y H, et al. Single layer diamond—A new ultrathin 2D carbon nanostructure for mechanical resonator [J]. *Carbon*, 2020, 161: 809–815.
- [20] WU Y C, SHAO J L, ZHENG Z Q, et al. Mechanical properties of a single-layer diamane under tension and bending [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2021, 125(1): 915–922.
- [21] ZHAN H F, ZHANG G, TAN V B C, et al. The best features of diamond nanothread for nanofibre applications [J]. *Nature Communications*, 2017, 8: 14863.
- [22] ZHAO D M, WANG J W, HAO P, et al. A molecular dynamics simulation on the atomic mass sensor made of monolayer diamond [J]. *Nanotechnology*, 2021, 32(47): 475501.
- [23] JEONG B W, LIM J K, SINNOTT S B. Elastic torsional responses of carbon nanotube systems [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 101(8): 084309.
- [24] ZHANG Y Y, WANG C M, XIANG Y. A molecular dynamics investigation of the torsional responses of defective single-walled carbon nanotubes [J]. *Carbon*, 2010, 48(14): 4100–4108.
- [25] XIA Z H, GUDURU P R, CURTIN W A. Enhanc-

cing mechanical properties of multiwall carbon nanotubes via sp^3 interwall bridging [J]. Physical Review Letters, 2007, 98(24): 245501.

[26] ZHANG Y Y, WANG C M, CHENG Y, et al. Mechanical properties of bilayer graphene sheets coupled by sp^3 bonding [J]. Carbon, 2011, 49(13): 4511—4517.

[27] NIKIFOROV I, HOURAHINE B, FRAUENHEIM T, et al. Formation of helices in graphene nanoribbons under torsion [J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2014, 5(23): 4083—4087.

[28] SHA Z D, PEI Q X, LIU Z S, et al. Is the failure of large-area polycrystalline graphene Notch sensitive or insensitive? [J]. Carbon, 2014, 72: 200—206.

[29] XIA K, ZHAN H F, HU D A, et al. Failure mechanism of monolayer graphene under hypervelocity impact of spherical projectile [J]. Scientific Reports, 2016, 6: 33139.

[30] ZHAN H F, ZHANG G, TAN V B C, et al. From brittle to ductile; a structure dependent ductility of diamond nanothread [J]. Nanoscale, 2016, 8(21): 11177—11184.

[31] LING X Q, ZHANG Y Q, XU F. Dynamic characteristics of rectangular single-layered black phosphorus-based mass sensor [J]. Physica Scripta, 2023, 98(6): 065945.

[32] ZHENG Z Q, DENG F Y, SU Z, et al. Analysis of the vibrational characteristics of diamane nanosheet based on the Kirchhoff plate model and atomistic simulations [J]. Discover Nano, 2023, 18(1): 108.