

# Design of Material Mechanics Experiment Simulation Course Based on Molecular Dynamics Method Using TiO<sub>2</sub> Nanotubes as Carrier

Kang Yang, Shiwei Lin\*, Liang Yang\*

College of Materials and Chemical Engineering, Hainan University, Haikou Hainan  
Email: \*yl5923@sina.com.cn

Received: Nov. 22<sup>nd</sup>, 2018; accepted: Dec. 6<sup>th</sup>, 2018; published: Dec. 13<sup>th</sup>, 2018

---

## Abstract

Material mechanics is a very important basic course for material specialty. The quality of the corresponding experiment directly affects the quality of students. In order to improve the ability of analyzing the micro-mechanism of mechanical tensile experiment, in this article, the tensile properties of titanium dioxide nanotubes at different temperatures were simulated by molecular dynamics LAMMPS software and the stress-strain diagram is obtained. When the temperature is 100 K, the tensile strength of TiO<sub>2</sub> nanotubes is the highest. The tensile strength decreases when the temperature changes from 100 K to 500 K. With the increase of temperature from 500 K to 2500 K, the tensile strength of TiO<sub>2</sub> nanotubes increases gradually. In addition, the changes of tensile morphology are simulated and analyzed by Ovito software, and the distribution of atoms and the force of atoms are analyzed. Therefore, the mechanical stretching of nanotubes at different temperatures by molecular dynamics can cultivate students' basic research quality and the ability of micro-analysis of mechanical properties of materials.

## Keywords

Molecular Dynamics, TiO<sub>2</sub> Nanotubes, Tensile Deformation

---

# 基于分子动力学方法以TiO<sub>2</sub>纳米管为载体的材料力学实验仿真课程设计

杨康, 林仕伟\*, 杨亮\*

海南大学材料与化工学院, 海南 海口  
Email: \*yl5923@sina.com.cn

\*通讯作者。

收稿日期：2018年11月22日；录用日期：2018年12月6日；发布日期：2018年12月13日

## 摘要

材料力学课程为材料专业十分重要的基础课程，其相应课程实验的质量直接影响培养学生的质量，为提高学生力学拉伸实验的微观机理分析能力，通过分子动力学LAMMPS软件模拟出TiO<sub>2</sub>纳米管在不同温度下的拉伸性能，得到了应力-应变图。温度在100 K的时候，TiO<sub>2</sub>纳米管的抗拉强度最大，温度从100 K变化到500 K，抗拉强度减小。随着温度从500 K升高到2500 K，TiO<sub>2</sub>纳米管的抗拉强度逐渐增大，另外并通过Ovito软件形象地模拟分析了拉伸形态的变化，分析了原子的分布以及原子受力的情况。因此，通过分子动力学对不同温度纳米管的力学拉伸，可培养学生基本的研究素质及材料力学性质的微观分析能力。

## 关键词

分子动力学，TiO<sub>2</sub>纳米管，拉伸变形

Copyright © 2018 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

材料力学课程是材料类专业、机械类专业及土木类专业的一门重要的基础课，材料力学性质的微观机理及表征一般采用多媒体方法向学生展示，学生无法进行实验验证及深层分析，大大限制了学生的学习积极性、求知欲。TiO<sub>2</sub>是一基本的化工原料，其结构在固体物理类课程中为典型晶体结构，TiO<sub>2</sub>纳米管以其独特的物理、化学及结构性质已经被广泛地应用于多相催化反应、气敏传感性[1]、染料敏华电池[2]、生物材料[3]及储氢材料[4]等多个领域。目前，二氧化钛纳米管的制备方法主要有水热合成法[5]及电化学阳极氧化法[6]，两种方法制备纳米管的机理不同。纳米TiO<sub>2</sub>主要有两种结晶形态：一种是锐钛型，另一种是金红石型，随着温度的升高，TiO<sub>2</sub>主要以金红石型为主[7]，并且金红石型的TiO<sub>2</sub>更加稳定和致密，所以其拉伸性能等物理化学性质都相对突出[8]。

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [9]是由美国国家能源部下的Sandia 国家实验室开发的基于牛顿力学的经典分子动力学模拟的开源软件，可以模拟液体、固体或气态的粒子集合，它可以使用各种力场和边界条件来模拟原子、聚合物、生物、金属、颗粒和粗粒度系统，更适合金属及金属氧化物力学性质预测。本文主要模拟TiO<sub>2</sub>纳米管分别在100 K、500 K、1000 K、1500 K、2000 K和2500 K的不同温度下拉伸的力学性质，在NPT系综下采用z轴方向单轴拉伸方法。

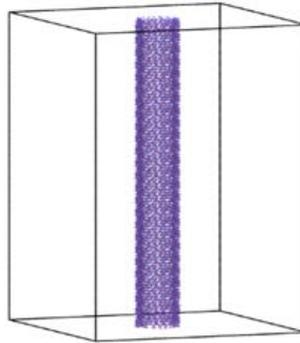
## 2. 建立模型

通过LAMMPS内建模型处理命令建立一个圆筒模型，将锐钛矿相TiO<sub>2</sub>块体材料除去外径3.0 nm以外的原子及内径2.0 nm以内的所有原子形成圆筒外径为3.0 nm，内径为2.0 nm，管壁厚度为0.5 nm的TiO<sub>2</sub>纳米管，如图1所示。该模型的纳米管共有48,000个原子，其中16,000为钛原子，按化学计量比的氧原子数为32,000个。通过Ovito软件对模拟结果进行三维可视化及数据分析，对其建立共价键连接氧原子和钛原子，改变原子的半径大小，最后得出的TiO<sub>2</sub>纳米管的效果如图1。其中蓝色表示氧原子，红色表示钛原子。建模过程应用了大量晶体学知识，将所学的晶体学与材料力学有机的联系在一起，有利于促使学生所学专业知识的融会贯通。

结合理论物理及固体学知识可以，分子动力学计算需要选择必要的势函数来对模型进行描述，计算采用势函数的 Buckingham 势函数[10]，此函数的表达式为：

$$E = Ae^{-r/\rho} - \frac{C}{r^6} \quad r < r_c \quad (1)$$

其中  $\rho$  是离子对依赖长度参数，而  $r_c$  是截断距离，当原子间的距离超过  $r_c$  时，认为原子间的相互作用为 0。势函数中的  $\rho$  必须大于零，系数  $A$ 、 $\rho$  和  $C$  可以被写成  $\varepsilon$  和  $\sigma$  的解析表达式，可类比于 Lennard-Jones 势函数[11]的表达。式中  $A$  表示能量单位， $\rho$  表示距离单位， $C$  表示能量距离单位的 6 次方。

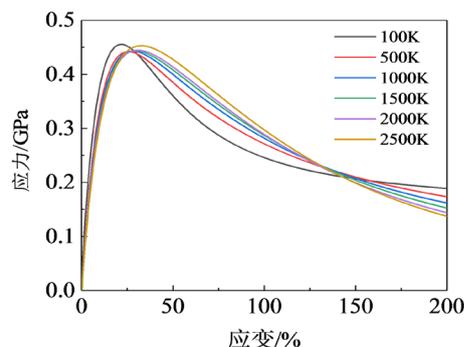


**Figure 1.** TiO<sub>2</sub> nanotube model built by Lammmps command  
**图 1.** 采用 Lammmps 内建命令所建立的 TiO<sub>2</sub> 纳米管模型

### 3. 实验过程

#### 3.1. 温度与抗拉强度的关系

众所周知，材料的力学性质受温度影响很大，利用传统的万能材料测试机进行实验不能研究材料的温度影响，目前市售的材料力学仿真软件一般采用植入数据方法也不能研究温度对材料性能的影响，而本文采用分子动力学方法研究材料的拉伸性质可实现在精确的环境温度下进行模拟计算，所获得结果真实可靠。如图 2 和图 3 中所示，当模拟温度在 100 K 时，随材料应变量的增大，材料表现出的应力迅速上升，达到峰值后快速下降，该应力应变规律与利用万能材料实验机所获数据十分相似，该曲线可替代真实材料拉伸实验中应力曲线的获得及分析；此外通过分析不同温度对 TiO<sub>2</sub> 纳米管抗拉强度影响可知：温度从 100 K 升高到 500 K，抗拉强度减小；随着温度从 500 K 上升到 2500 K，TiO<sub>2</sub> 纳米管的抗拉强度又逐渐增大。实验结果显示，温度为 100 K 时材料的应力为 0.456 GPa 略大于 2500 K 时的 0.453 GPa。



**Figure 2.** Tensile stress-strain diagrams of TiO<sub>2</sub> nanotubes at different temperatures

**图 2.** 不同温度下 TiO<sub>2</sub> 纳米管拉伸应力-应变图

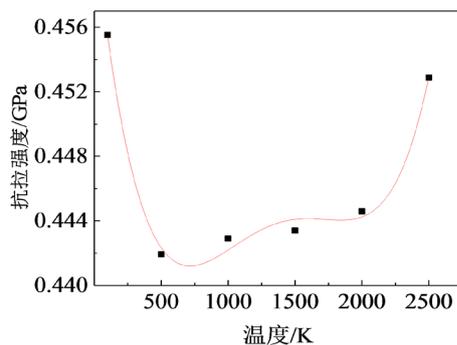
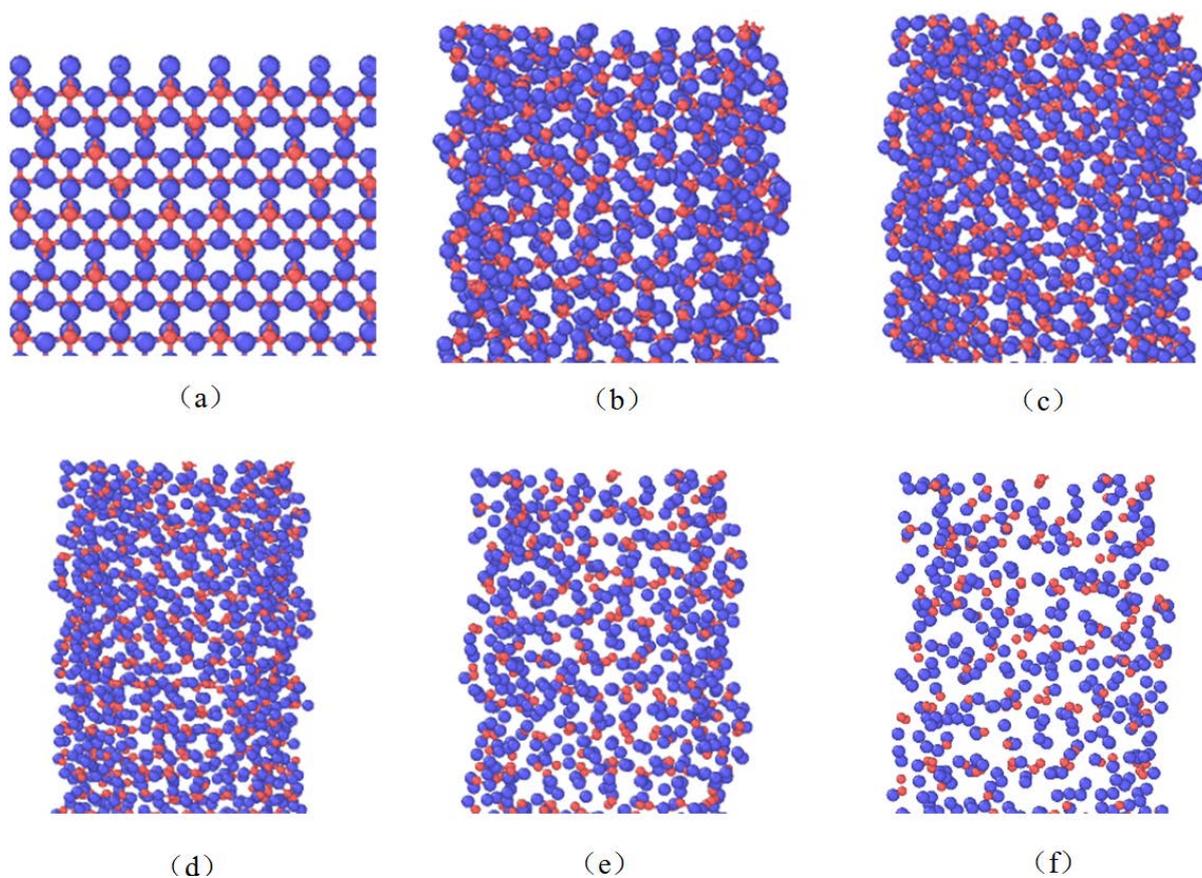
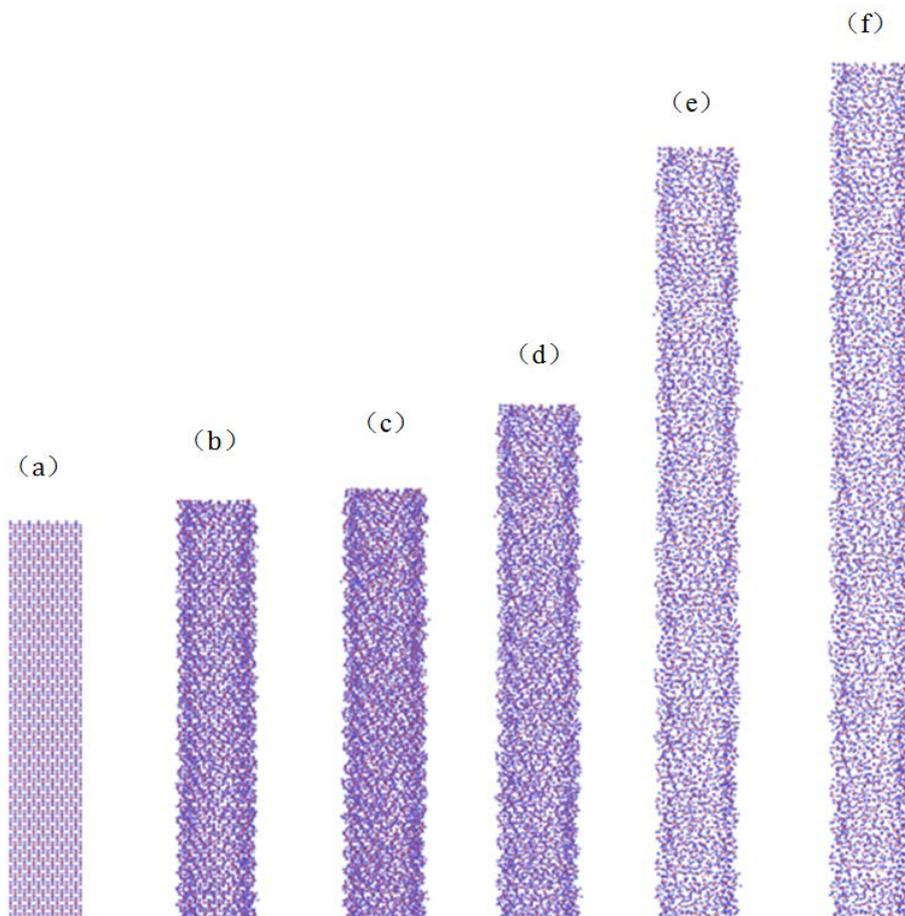


Figure 3. Relationship between tensile strength and temperature  
图 3. 抗拉强度与温度关系图

### 3.2. 拉伸形态以及受力分析

将分子动力学应用于教学过程的另一魅力在于可以通过三维可视化软件观察材料拉伸过程中每个原子的变化及受力，给合晶体学知识及力学知识找出拉伸实验应力变化的根源。本实验通过 Ovito 开源软件进行模拟过程可视化，如图 4 所示。以 2500 K 时  $\text{TiO}_2$  纳米管的拉伸过程的变化为例进行演示，观察到拉伸应变小于 0.5 时， $\text{TiO}_2$  纳米管变形量较小，原子之间的成键相对稳定，但由于键长伸长，表现为原子之间的吸引力，宏观表现为应力迅速增加；当拉伸应变超过 0.5 时，部分原子之间的键出现断裂，宏观表现为应力快速下降；由于部分化学键断裂使原子向管内发生位移表现为宏观的颈缩现象。





**Figure 4.** The strains of titanium dioxide nanotubes during tensile deformation at 2500 K are: (a) 0; (b) 0.5; (c) 1.0; (d) 1.2; (e) 1.5; (f) 2.0, respectively

**图 4.** 2500 K 下二氧化钛纳米管拉伸变形过程中应变分别为: (a) 0; (b) 0.5; (c) 1.0; (d) 1.2; (e) 1.5; (f) 2.0

为定量表达拉伸过程中原子之间的距离变化, 引入径向分布函数[12] (radial distribution function, RDF) 又称“对相关函数” (pair correlation function), 其主要表征流体和非晶态固体结构, 用于表示与某个粒子距离为  $r$  到  $r + \Delta r$  之间的粒子的平均数, 定义为:

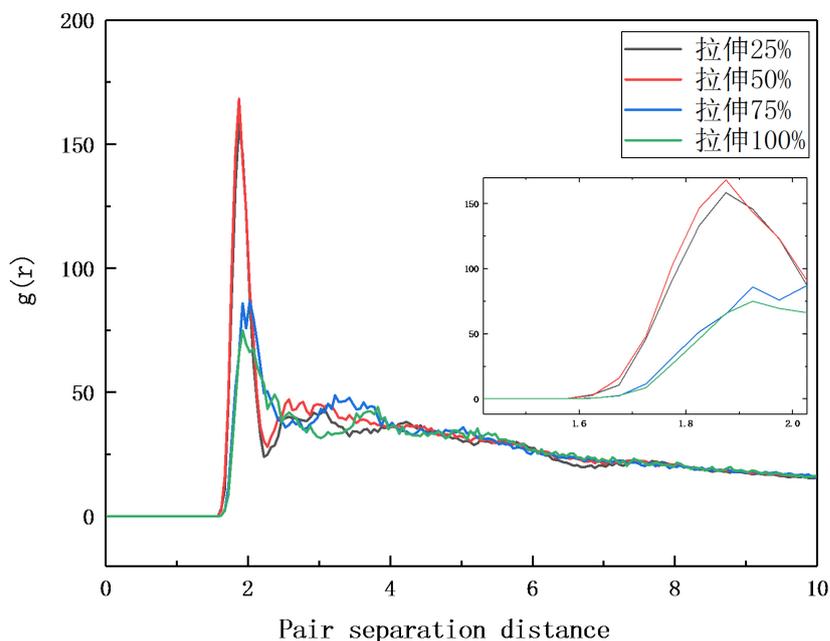
$$g_{ij}(r) = \frac{V}{N_i \cdot N_j} \frac{\langle n(r, r + \Delta r) \rangle}{4\pi r^2 \Delta r} \quad (2)$$

式中:  $N_i$ 、 $N_j$  分别为  $i$  原子在系统中的总数;  $V$  为总体积;  $\langle n(r, r + \Delta r) \rangle$  表示以  $i$  类粒子为中心, 从  $r$  到  $r + \Delta r$  之间壳层类的  $j$  原子总数。

由径向分布函数定义可知, 该函数为热力学统计物理课程的概念, 通过大量原子的行为进行系综平均, 该函数实际上表征了系统内粒子的分布情况, 或局部结构与总体结构的差异。如果系统粒子的分布是完全随机的, 不存在任何距离内的有序性, 则径向分布函数应处处为 1, 而真实体系的径向分布函数往往在一个较短距离内有若干起伏的峰值, 随距离的增大最后稳定到 1, 这正是非理想流体与非晶固体的短程有序、长程无序的结构特征。

2500 K 下  $\text{TiO}_2$  纳米管在截断半径为 1 nm 的径向分布函数随应变的变化如图 5 所示, 结果表明  $\text{TiO}_2$  纳米管被逐渐拉伸的过程, 相邻原子之间距离约 0.19 nm, 也就说明了钛原子和氧原子之间的距离在 0.19 nm 左右, 与文献[13]所得的结果相符合。从图中也可以看出随着应变的逐渐增大, 第一峰

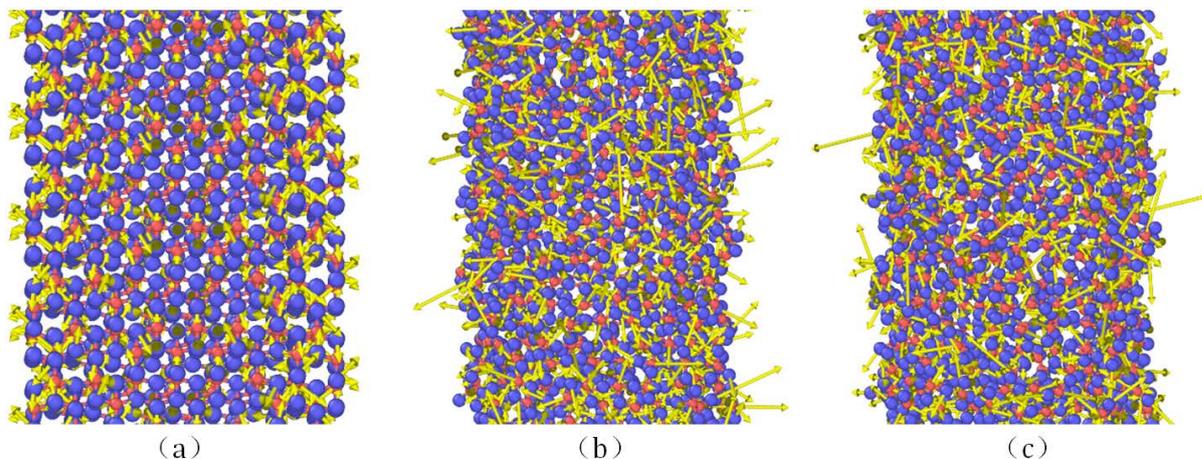
峰位也逐渐向右移动，即钛原子和氧原子的距离增大。通过观察局部放大径向分布函数图可以看出拉伸前 50%  $\text{TiO}_2$  纳米管没有较大的变形，结构较为稳定，当拉伸超过 50% 后， $\text{TiO}_2$  纳米管开始逐渐变形，结构稳定性下降。这也印证了图 4 中  $\text{TiO}_2$  不同拉伸应变的结果，当应变超过了 1.0 后，纳米管稳定性逐渐降低。

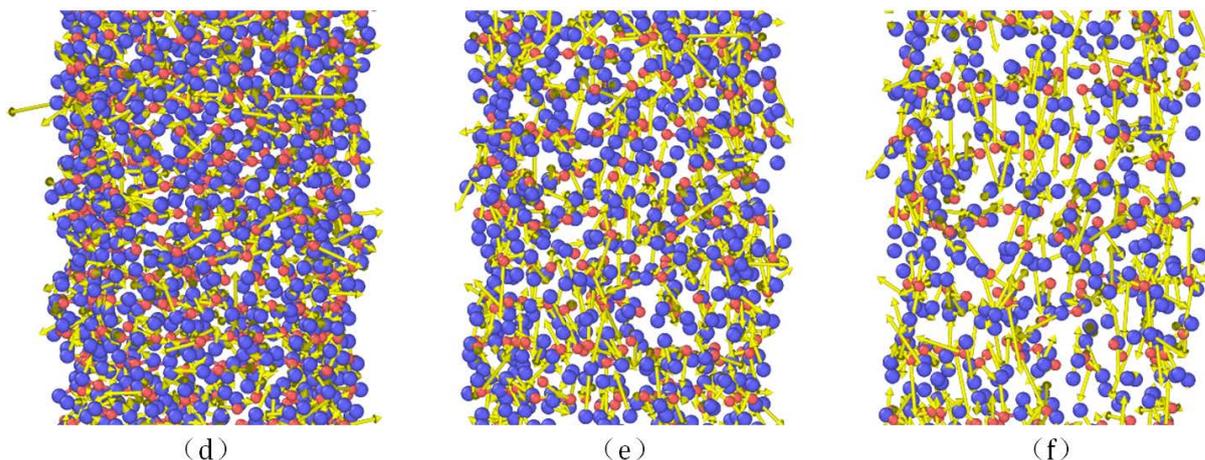


**Figure 5.** Radial distribution function diagram and partial enlargement diagram of 2500 K  $\text{TiO}_2$  nanotubes under different tensile states

**图 5.** 2500 K  $\text{TiO}_2$  纳米管不同拉伸状态下径向分布函数图及其局部放大图

利用 Ovito 软件将 2500 K 下  $\text{TiO}_2$  纳米管每个原子的受力进行显示， $\text{TiO}_2$  纳米管在未受应力时，每个原子受力很小，且指向化学键的方向，该力主要是克服由于温度造成的原子在平衡位移的振动；当  $\text{TiO}_2$  纳米管发生应变时，每个原子的所受力的方向和大小开始发生剧烈变化，随着  $\text{TiO}_2$  纳米管逐渐被拉伸，每个原子所受到的力都变得没有规律，每个原子受到力的方向也不断变化，正是由于这些看似杂乱的力使材料产生了宏观应力及颈缩效应；当应变达到某一临界值时，材料内部大量化学键断裂，如图 6(d)~图 6(f)所示，部分原子处于不受力的自由状态，使材料表现为宏观应力下降。





**Figure 6.** Atomic force analysis of TiO<sub>2</sub> nanotubes under different tensile strains at 2500 K; (a) strain 0; (b) strain 0.5; (c) strain 1; (d) strain 1.2; (e) strain 1.5; (f) strain 2

**图 6.** 2500 K 下 TiO<sub>2</sub> 纳米管不同拉伸应变下原子受力分析; (a) 应变 0; (b) 应变 0.5; (c) 应变 1.0; (d) 应变 1.2; (e) 应变 1.5; (f) 应变 2.0

#### 4. 总结

通过本教学项目的实施, 学生可以通过构建出 48,000 个原子组成的 TiO<sub>2</sub> 纳米管, 熟悉和应用晶体学知识; 通过对不同温度下拉伸曲线的分析使学生认识材料在不同温度下的力学性质变化规律; 通过对不同应变下材料的微观结构受力分析, 可以使学生对固体物理、晶体学知识与材料力学知识系统的认识, 并能获得由理论向实践、由微观向宏观的思想升华; 通过对关联函数的分析, 可以将热力学统计概念引入到材料力学实验, 有利于扩大学生视野, 提高学生的学习思维。总之, 通过分子动力学方法来仿真材料力学基本实验可以有效提高学生的科学素养, 提高学生科学素质。

#### 基金项目

海南大学教育教学改革项目(项目编号: hdjy1911); 海南大学材料与化工学院教育教学改革项目(项目编号: Chjy1802)。

#### 参考文献

- [1] 朱佩. 二氧化钛纳米管的制备及气敏性研究[D]: [博士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨理工大学, 2011.
- [2] 胡芸菲, 徐刚, 梁宗存. 二氧化钛纳米染料敏化电池研究动态[J]. 材料科学与工程学报, 2006(3): 456-461.
- [3] 高钰寒, 王胜男, 王彪彪. 二氧化钛纳米管生物透析膜的生物相容性[J]. 中国组织工程研究, 2017, 21(26): 4167-4171.
- [4] 杨维虎, 奚兴凤, 方佳佳, 等. 二氧化钛纳米管储氢能力的分子动力学研究[J]. 化学研究与应用, 2012, 24(2): 309-313.
- [5] 王芹, 陶杰, 翁履谦, 等. 氧化钛纳米管的水热法合成机理研究[J]. 南京航空航天大学学报, 2005(1): 130-134.
- [6] 宁成云, 王玉强, 郑华德, 等. 阳极氧化法制备二氧化钛纳米管阵列的研究[J]. 化学研究与应用, 2010, 22(1): 14-17.
- [7] 孙丽萍, 高山, 赵辉, 等. 纳米二氧化钛的晶型转变及光催化性能研究[J]. 功能材料, 2004(5): 632-634.
- [8] 符春林, 魏锡文. 二氧化钛晶型转变研究进展[J]. 材料导报, 1999(3): 37-38 + 47.
- [9] Plimpton, S. (1995) Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117, 1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
- [10] Dongol, R., Wang, L., Cormack, A.N. and Sundaram, S.K. (2018) Molecular Dynamics Simulation of Sodium Alumi-

---

nosilicate Glass Structures and Glass Surface-Water Reactions Using the Reactive Force Field (ReaxFF). *Applied Surface Science*, **439**, 1103-1110.

- [11] 刘艳侠, 孙佳佳, 高岩, 等. 关于 Lennard-Jones 型势函数参数的几种拟合方法[J]. 辽宁大学学报(自然科学版), 2008(3): 206-209.
- [12] 张朝晖, 吴波, 叶卫平, 等. 计算机在材料科学与工程中的应用[M]. 湖南: 中南大学出版社, 2008.
- [13] 陈书鸿, 付川, 傅杨武. 用密度泛函理论研究三价铁掺杂锐钛矿二氧化钛[J]. 计算机与应用化学, 2006(10): 983-985.

#### 知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>  
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2331-799X, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>  
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: [ces@hanspub.org](mailto:ces@hanspub.org)