

# 新型纳米输运机理的分子动力学分析

王帅<sup>1,4</sup>, 王超<sup>1</sup>, 陈少华<sup>2,3\*</sup>

<sup>1</sup>(中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190)

<sup>2</sup>(北京理工大学先进结构技术研究院, 轻量化多功能复合材料与结构北京市重点实验室, 北京 100081)

<sup>3</sup>(北京理工大学北京电动车辆协同创新中心, 北京 100081)

<sup>4</sup>(中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049)

## Abstract

本文通过分子动力学方法, 基于单层石墨烯板建立了一种新型纳米运输方案, 在我们的模型中, 我们考虑了预拉伸应变, 滑动速度, 滑片种类以及尺寸等多种影响因素并进行了详细讨论。我们发现, 基底与滑块之间的平面间作用力的最大值随着基底预拉伸应变的增大而增大, 并在基底预拉伸应变大于 0.1 时小于驱动块对滑块的驱动力。当驱动块在预拉伸应变为 0.2 的基底下以小于 120m/s 的速度滑动并经过小滑块时, 在基底上方尺寸为 2nm 的小滑块会随着驱动块的运动而运动, 但是当驱动块的速度远大于 120m/s 时, 小滑块只会运动一个很小的距离并很快停止下来。当驱动块以 160m/s 的速度运动并经过小滑块时, 只有尺寸为 1nm 的小滑块会随着驱动块的运动而运动, 而更大尺寸的小滑块只会运动一个较小的距离, 甚至几乎不动。因此, 类似的方案可以被用在同种类型但尺寸不同的滑片按照尺寸大小的不同的筛选模型中, 同时, 本方案也可以扩展到碳纳米管中杂质的清除工作。本文的结果对于纳米尺度下单层石墨烯板上颗粒的运输、分离和筛选具有一定的指导意义。

## Keywords

纳米运输, 纳米筛选, 范德华力, 单层石墨烯板, 分析动力学

---

\* Corresponding author, e-mail: [chenshaohua72@hotmail.com](mailto:chenshaohua72@hotmail.com)

## 1. Introduction

纳米操控，尤其是纳米颗粒的运输、筛选、固定和运动一直是自上而下或者自下而上建立纳米设备和系统的关键技术。近年来，由于其在 DNA 分析设备[1]、芯片实验室技术 [2, 3]、纳米机电设备 [4, 5] 和医疗科学 [6] 中的广泛应用而受到越来越多的关注。

关于纳米尺度下颗粒的操控，国内外学者提出了不同的力学方法和技术。其中一类典型的方法是利用具有梯度变化场性质的功能基底来达到运输微纳米颗粒的目的，已有的研究包括浸润性 [7-9]，曲率 [10]，温度 [11]，刚度 [12] 或者应变 [13] 等多种方面。也有学者采用扫描隧道显微镜 (STM) [14] 尖端与摩擦力显微镜 (FFM) [15] 或者微夹钳 [16] 等技术来进行纳米尺度下的机械操控。其他学者则提出采用电的方法来提取和释放带电纳米颗粒到金电极表面上 [17]。在这些方法中，被操控的颗粒要与驱动设备紧密接触，称之为接触式操控，但是在某些应用中，或许要采用非接触式的操控方法，比如碳纳米管中杂质的清除或者大量相同纳米颗粒的分离。

研究人员采用磁场，电场或者光学等方法实现了微纳米尺度下颗粒的非接触式操控。Fennimore [5] 等人以多臂碳纳米管为元件建立了一种自动的电子机械传动器，或者通过电泳的方法来操控单壁碳纳米管中沉淀物的操控 [18]。而对于磁颗粒，可以采用微米电磁铁来精确的控制和操控纳米颗粒 [19]。使用光镊系统可以实现不带电纳米颗粒 [20, 21]，金属纳米颗粒 [22] 甚至 DNA 分子 [23, 24] 的操控。

需要指出的是这些技术还处在实验室研究阶段，远远不能达到在工业上广泛应用的地步。这些技术需要专业的技术人员以及长时间的训练才可以掌握。所以纳米尺度下颗粒的运输、分离以及杂质清除等方面还需要更进一步的研究以获得更多操控方法来为科研人员以及技术人员提供帮助。

人们已经可以合成完美的单层石墨烯[25]，并且可以采用一定的实验技术来把它切割成特定的形状和尺寸[26]，拉伸成特定的应变[27]、弯曲[28]，研究其超润滑效应[15]，把石墨烯和 CNT 连接[29]或者与金属[30]连接。这些技术使得采用石墨烯建立复杂的系统并实现各种功能成为可能。在纳米尺度下，范德华力是影响结构演变[31]和不同系统下宏观性质[32]的一种重要因素。

童年时代我们或许都玩过这样的小游戏，拿一个磁铁在一张纸的下方滑动，纸上面的磁颗粒会随着磁铁的运动而运动，基于这样的小游戏，采用范德华力作为驱动力，石墨烯为基底，铜为驱动块，石墨烯滑片为被驱动的纳米颗粒，我们提出了一种纳米颗粒运输的新方案。与直接操控纳米颗粒相比，操控尺寸较大形状较规则的驱动块相对简单，这样的思路使得纳米颗粒的操控变得容易许多。该方案也可以用于纳米尺度下杂质的清除以及不同尺寸下纳米颗粒的清除工作。

本文将按照如下思路安排，第二节介绍我们的运输模型和关键影响因素，第三节提出了一种分离不同尺寸的纳米颗粒的一种应用和方案。最后给出了结论。

## 2. 数值模型和参数分析

### 2.1 数值模型

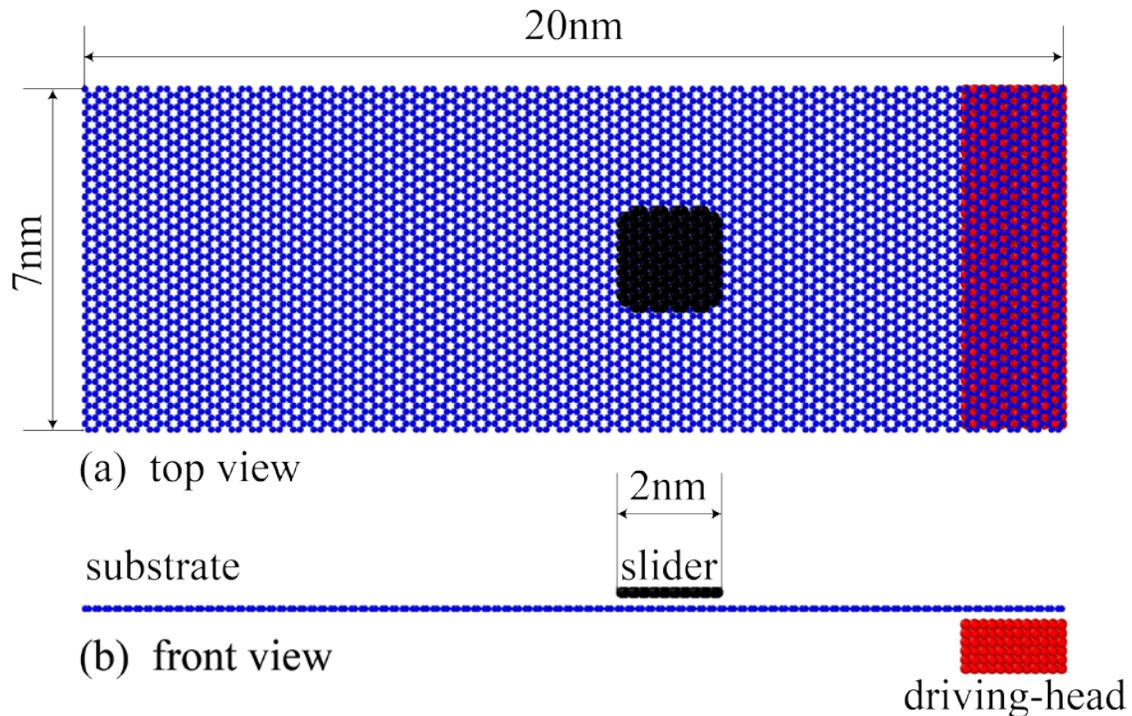


图 1. 数值模型的(a)俯视图和(b)正视图。

图 1 是本文纳米运输方案的分子动力学模型。其中蓝色原子表示基底，采用了尺寸为  $20 \times 7$  单层石墨烯平板来模拟。在基底上方和下方是纳米滑片和驱动块，其中驱动块由尺寸为  $2 \times 7 \times 1 \text{ nm}$  的可以在基底下方向来移动的铜来模拟，基底上方黑色原子表示由单层石墨烯组成的尺寸为  $2 \times 2 \text{ nm}$  滑片。在我们的模拟中，石墨烯内的 C-C 相互作用力（基底内和滑片内）以及驱动块里面的 Cu-Cu 相互作用力分别采用 AIREBO 势函数 [33] 和 EAM 势函数 [34]，用参数为  $\epsilon=2.968 \text{ meV}$ ， $\sigma=0.3407 \text{ nm}$  和  $\epsilon=19.996 \text{ meV}$ ， $\sigma=0.3225 \text{ nm}$  的 Lennard-Jones 势函数来分别刻画滑片-基底之间的 C-C 相互作用和石墨烯板、滑片与基底之间的 C-Cu 相互作用。在本模拟中，截断半径和时间步长分别采用  $1 \text{ nm}$  和  $1 \text{ fs}$ ，为了刻画由于缺陷等引起的能量耗散，我们引入正比于滑片速度的粘性阻

尼力  $F_{viscous} = \gamma v_{slider}$  来消耗滑片的动能。其中阻尼系数  $\gamma$  为  $0.03\text{eVps/nm}^2$ 。我们所有的模拟采用开源软件 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [37]来完成。

## 2.2 参数分析

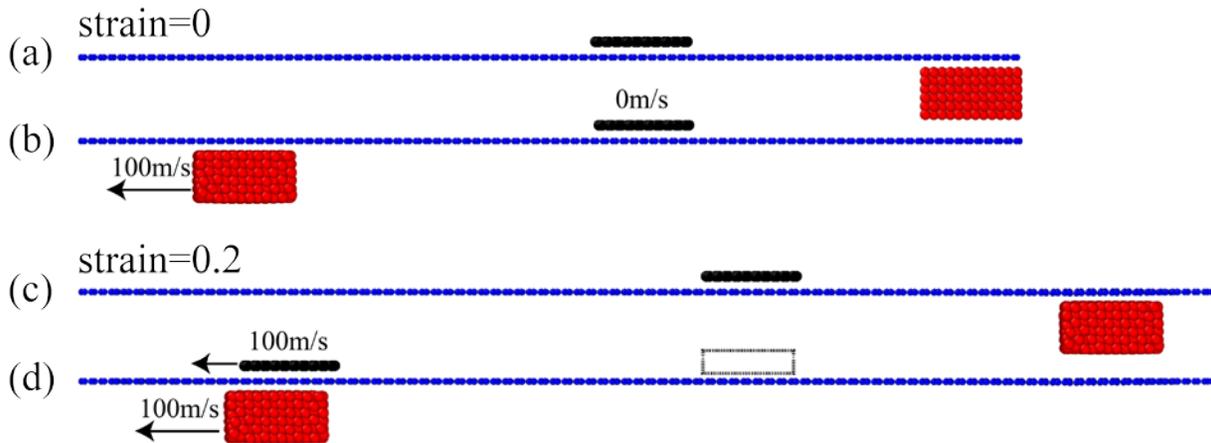


图 2. 预拉伸应变对输运行为的影响. (a-b) 我们分别研究了预拉伸等于(a-b)和(c-d)0.2 的模型。其中(a)和(c)分别是这两种形式的初始模型。这里(d)图中黑色的矩形表示驱动块的初始位置。

我们的模型采用 NVT 系统并控制温度为 1K。基底假设为平整且刚性的，以此来消除石墨烯褶皱的影响。研究表明当驱动块沿着基底运动时，基底的预拉伸应变会很明显的影响滑片的运动行为。图 2 给出了当驱动块沿着基地从右向左运动并经过滑片时，基底在没有预拉伸应变(a,b)以及有 0.2 的拉伸应变(c,d)的情况下的运动行为。在基底没有预拉伸应变[图 2a]时，滑片不会随着驱动块的运动而向左移动[图 2b]，但是当给基底一个 0.2 的预拉伸应变[图 2c]时，滑片会随着驱动块的移动而向左边移动[图 2d]。

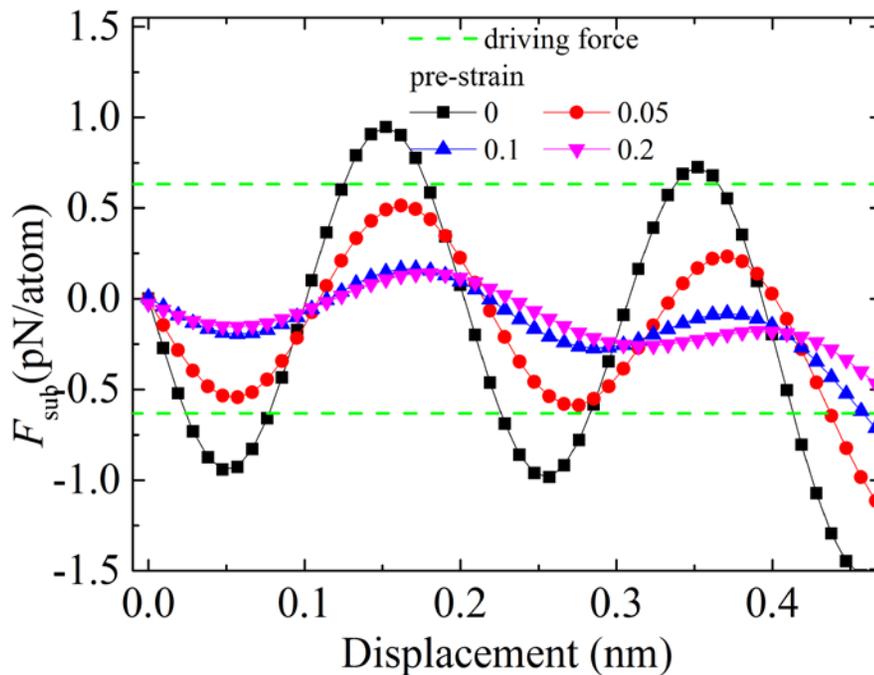


图 3. 在不同的预应变下基底与滑片之间的平面间作用力以及驱动块与滑片之间的驱动力。

如图 3 所示，为了研究基底预拉伸应变对于运输行为的影响，我们计算了基底在一系列预拉伸应变的情况下基底与滑片之间的平面间作用力，并且把这些平面间作用力和最大驱动力画在同一张图中。已有大量的研究人员研究了多层石墨烯之间的平面间作用力[38, 39]，他们提出可以非公度状态下石墨烯之间的平面间作用力要远远小于共度状态下的平面间作用力，也就是所谓的石墨烯的超润滑效应。在他们的研究中公度以及非公度状态是通过石墨烯基底和滑片之间采用 AB 堆垛结构或者在 AB 堆垛结构的基础上转动  $90^\circ$  来达到的。这里我们表明，类似于前述工作人员研究的超润滑效应也可以通过基底拉伸来获得。当基底的预拉伸应变从 0 逐渐增加到 0.2 时，平面间作用力的最大值也会逐渐减小，我们通过一系列的数值模拟获知当预拉伸应变大于 0.1 时多层石墨烯间的相互作用力会小于驱动力。

图 4 表明，滑片的驱动行为也受到驱动块速度的影响。图 4a 是该模型的初始构型，当基底下方的驱动块沿着基底从右向左以不同的速度运动时滑片会有不同的运动行为，当驱动块的速度为 100m/s 的时候，尺寸为 2nm 的滑片会随着驱动块的运动而运动，但是当驱动块的速度较大，比如以 200m/s 的速度运动时，滑片只会随着驱动块运动一个很小的距离，然后其速度由于粘性阻力的存在迅速的衰减并停止下来。一系列的研究表明，只有当驱动块的速度小于 120m/s 的时候，滑片才会随着驱动块的运动而运动。我们称这里需要的使驱动块可以驱动滑片的最大速度为临界速度，我们经过一系列的研究发现，针对于不同尺寸下的滑片，都对应一个驱动块的临界速度。如图 5 所示是不同尺寸滑片所需要的驱动块的临界速度，从图可知临界速度随着滑片尺寸的增大而减小，也就是说为了驱动尺寸较大的滑片，需要驱动块以更小的速度沿着基底滑动。另外我们研究了在不同粘性阻力系数(0.03, 0.05 and 0.07 eVps/nm<sup>2</sup>)下滑片运动所需要的临界速度，来表明在不同的环境下的规律，更多的信息在附录材料中。

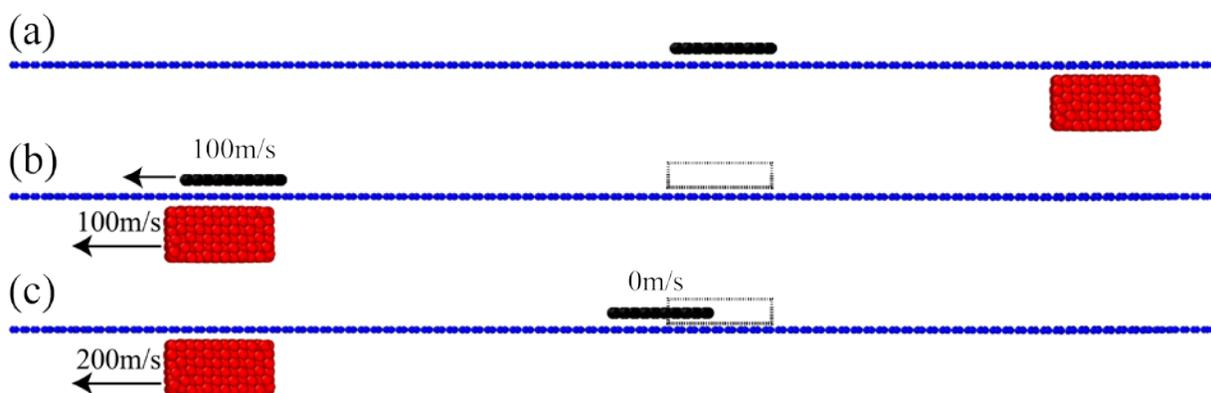


图 4. 驱动块速度对于滑片运动行为的影响。(a) 初始构型，驱动块的速度设置为 (b) 100 m/s 或 (c) 200 m/s。图中黑色矩形框表示滑片的初始位置。

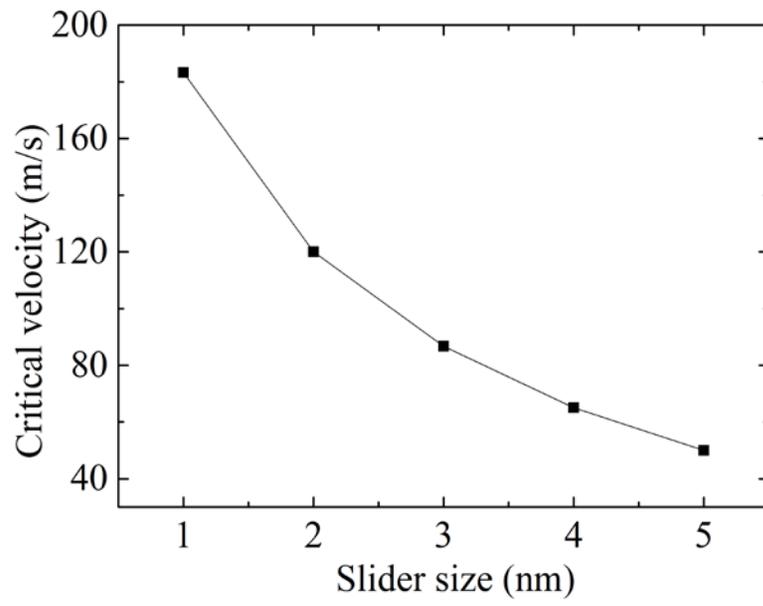


图 5. 驱动块临界速度与滑片尺寸之间的关系, 这里我们采用粘性系数  $\gamma=0.03 \text{ eVps/nm}^2$ 。

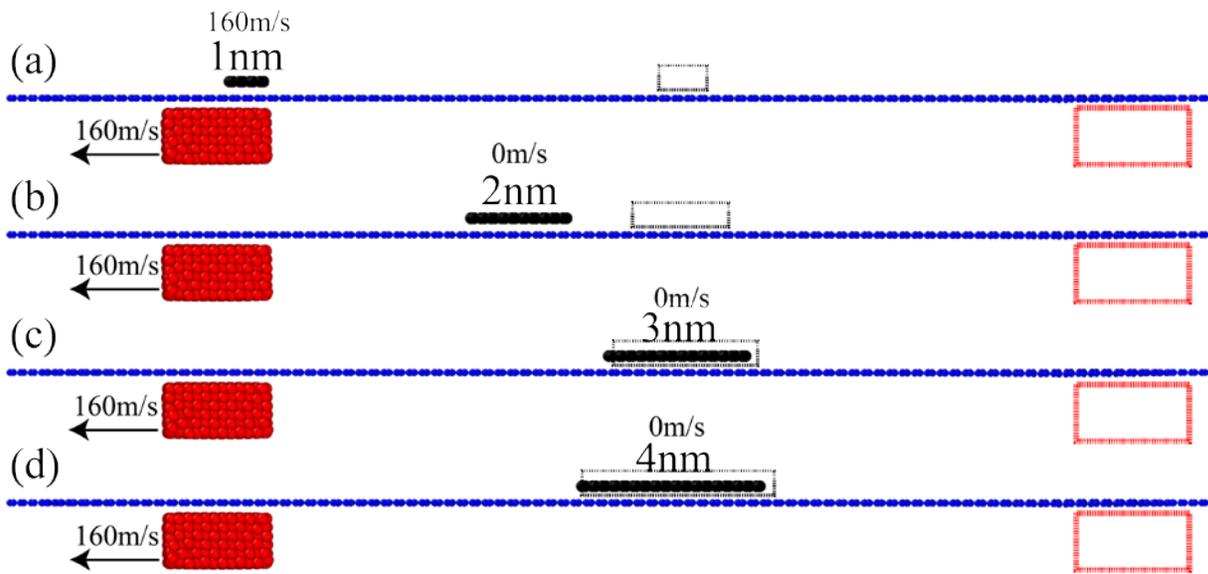


图 6. 滑片尺寸对运输行为的影响。这里我们采用 (a) 1, (b) 2, (c) 3 and (d) 4nm 等多种不同的滑片尺寸来研究尺寸对于运输行为的影响。这里黑色和红色矩形框分别表示滑片与驱动块的初始位置。

如图 6 所示，滑片的驱动行为也受到滑片尺寸的影响。当驱动块以 160m/s 的速度从右向左运动时，只有尺寸最小的滑片(1nm)会随着驱动块的运动而运动，而除了 2nm 的滑片会随着驱动块的运动而向左运动一小段距离，但是对于更大的尺寸(3nm 和 4nm)滑片，在驱动块以 160m/s 运动并经过滑片时，滑片几乎没有移动。这个现象可以由动量理论来简单的解释，当驱动块以一定的速度经过滑片时会给滑片提供一定的动量，对于尺寸为 1nm 的滑片，其获得的速度已经达到了与驱动块相同的速度。而对于尺寸较大的滑片，由于其质量较大所获得的速度将明显小于尺寸较小的滑片，因此很难达到和驱动块一样的速度，进而只会运动一小段距离甚至几乎不动。需要指出的是，在之前我们采用的驱动速度超过 100m/s，这在工业上甚至是实验室都很难达到，而驱动块只能以较小的速度运动，所以尺寸较小的滑片在现有实验条件下只能随着驱动块的运动而运动。但图 5 表明临界速度随着尺寸的增大而明显减小，当滑片尺寸的增加到几十个 nm 时，

临界速度将有可能达到实验上容易达到的几米每秒的速度，而在实验或工业中，纳米颗粒一般也在几十个纳米量级。在这里，由于分子动力学计算规模有限，我们采用较大的速度以及较小的尺寸来研究这种行为，以此来增加计算效率。而对于滑片尺寸增加到几十个纳米量级，由于计算规模明显增大，难以用分子动力学计算，但是在实验室中却更容易实现。

我们的模型也可以用在纳米管中杂质的清除，详细的讨论可以参考补充材料。

### 3. 纳米筛选中的应用

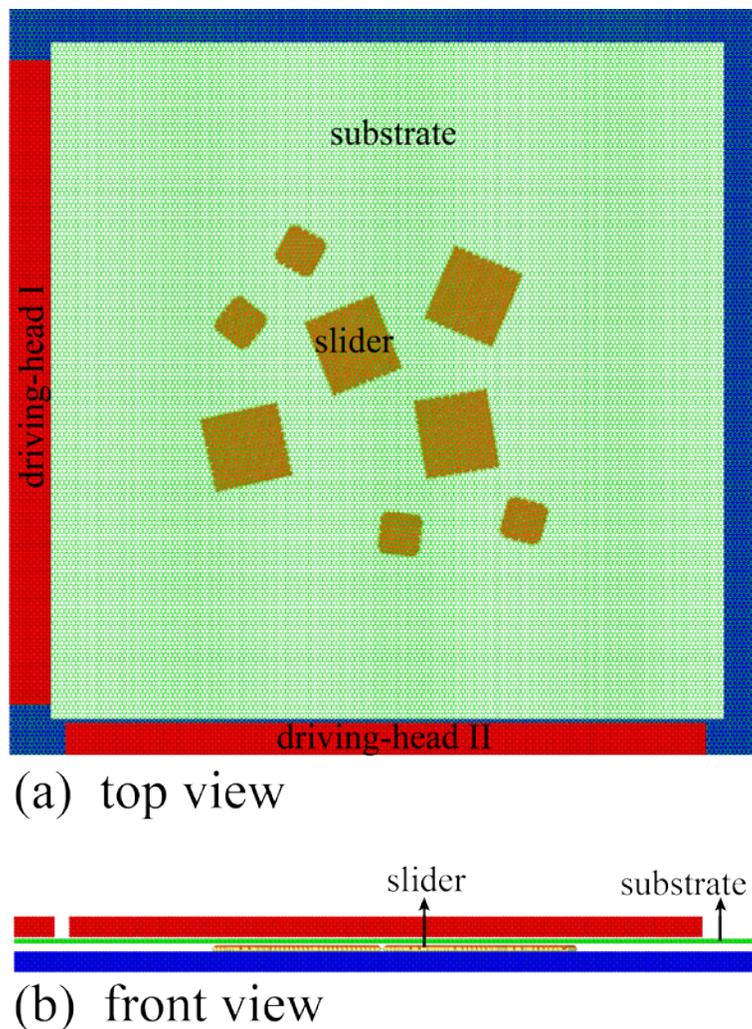


图 7. 纳米筛选模型的初始构型，这里两个红色的长条表示驱动块，八个矩形的是边长为 2nm 和 4nm 的纳米滑片。

基于上述研究的结果，我们可以把运输模型扩展到对于不同尺寸滑片的筛选方案中。图 7 所示是我们纳米筛选模型的初始构型。不同于之前图 1 所示的运输模型，我们在筛选模型中采用尺寸为 40nm 矩形的石墨烯板作为基底，同时在平行于平面的两个方向上都添加预拉伸应变。在基地上方随机分布八个大小不一样的滑片，其尺寸分别是 2nm 和 4nm，滑片边界氢化处理以防止滑片相互之间的吸附[40]。两个红色的长条是驱动块，下方边界处的绿色原子表示吸附层，是为了吸附和收集运动到边界的滑片。

筛选系统中的 C-C, C-Cu, Cu-Cu 等相互作用力与之前运输模型采用相同的势函数，滑片中 C-H 相互作用我们采用 REBO 势函数来描述，而氢原子与其他原子之间的作用力则忽略。

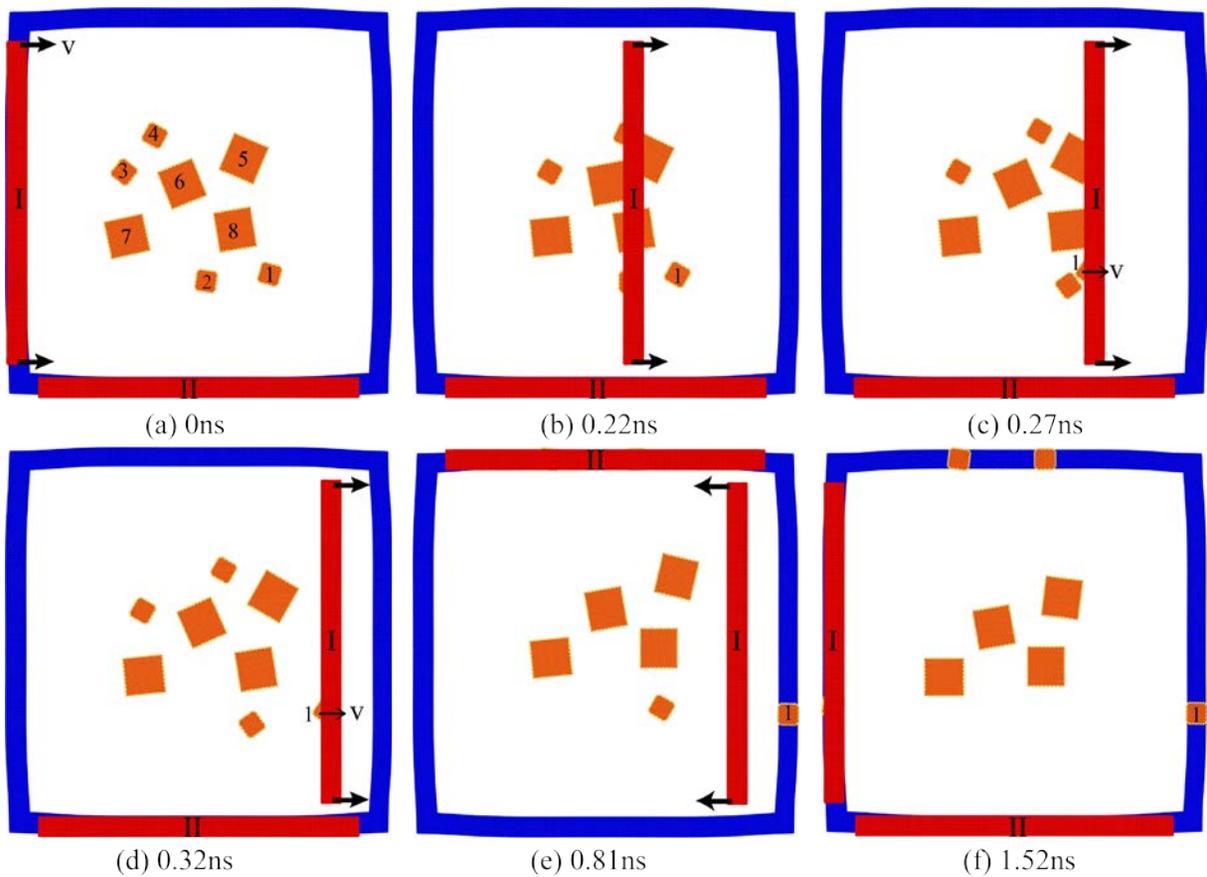


图 8. 纳米筛选的典型过程分析。(a)初始构型；(b-d)垂直的驱动块以 100m/s 的速度从左向右运动 0.22, 0.27 or 0.32 ns；(e)垂直的驱动块从右向左运动，其中一个较小的滑片吸附在吸附层上；(f)经过多次筛选后的最终构型。

图 8 给出了对于不同尺寸的滑片的筛选过程分析。我们在前述图 6 中已经说明，在相同速度下，较小尺寸的滑片会随着驱动块运动而较大的滑片会被留下，在图 8 中，可以清晰的看到尺寸为 2nm 的滑片会随着驱动块的运动而被移动到边界上，在边界上则由于边界吸附层的存在而吸附在边界上。在整个过程中，驱动块的速度始终是 100m/s。

我们也考虑了同样的模型在驱动块采用不同速度时的筛选情况。图 9 表明当驱动块采用不同的速度时，经过多个筛选过程得到的结果。如果驱动块的速度小于 60m/s，在基底中央的所有滑片都会被移动到边界，当驱动块的速度大于 150m/s 的时候，所有的驱动块都会留在中心，当驱动块的速度结余 60m/s 和 150m/s 之间时，只有较小尺寸的滑片会被移动到边界。因此我们可以采用 100m/s 的速度来对 2nm 和 4nm 尺寸的滑片进行筛选。

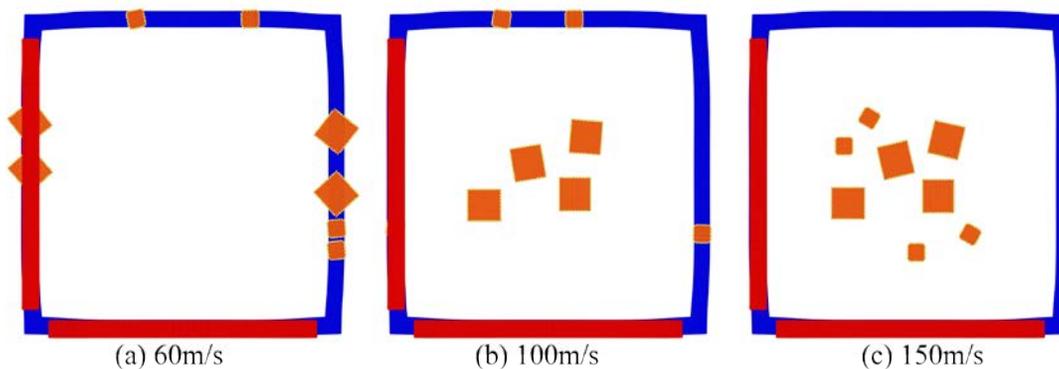


图 9. 当驱动块的速度是(a) 60, (b) 100 and (c) 150 m/s 时滑片的筛选效应。

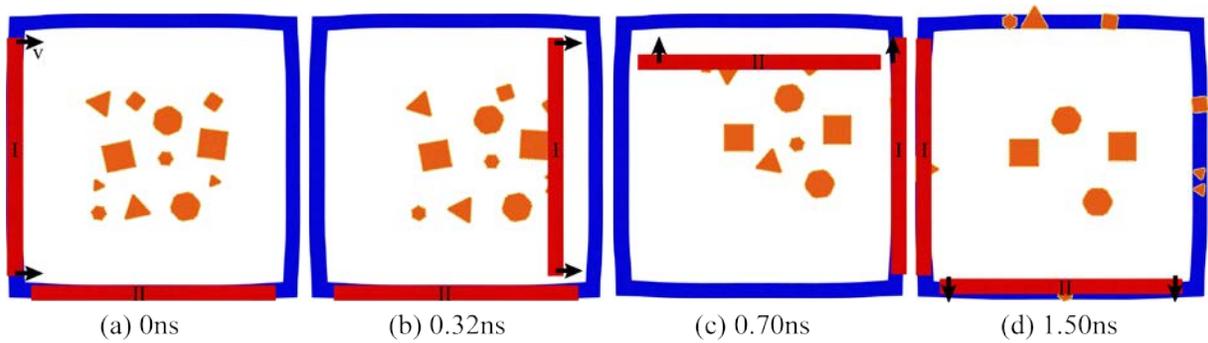


图 10. (a)滑片形状的影响。(b-d)表示初始状态，分别表示驱动块运动 0.32, 0.7 and 1.5ns, 时的状态。这里驱动块运动的速度是 100m/s。

我们最后研究了滑片形状对于其筛选过程的影响，本文考虑了圆形、矩形、三角形等不同形状对筛选过程的影响。结果表明滑片的形状对于筛选过程并没有明显的影响，经过驱动块多次运动，不论是什么样的形状，最终还是只有尺寸较小的滑片会被移动到边界。实际上，对于某一特定尺寸和形状的滑片，都有一个对应的临界速度，不论是怎样的形状和尺寸，当驱动块的速度小于其对应的临界速度时滑片会随着驱动块的移动而移动，但是当驱动块的速度大于临界速度时则滑片不会随着驱动块的运动而运动。

#### 4. 结论

在工业和实验上纳米颗粒的运输和筛选受到人们越来越广泛的关注，但是直接运输较小颗粒的纳米颗粒，筛选不同尺寸的纳米颗粒或者从碳纳米管中清除杂质还面临一定的挑战。

在一个拉伸过的基底上的滑片会受到基底下方的驱动块的驱动力，但是滑片也许会由于基底和滑片之间的平面间作用力而无法驱动。研究表明，当基底有 0.2 的预拉伸应变时，2nm 的滑片会随着以 100m/s 的速度运动的驱动块的运动而运动，但是当基底没有预拉伸应变时，驱动块不会运动。基底预拉伸应变对于滑片运动行为的影响主要是由于基底和滑片之间的平面间作用力引起的。更多的研究表明驱动块的滑动速度也会明显的影响滑片的运输行为，当驱动块的速度较小时，滑片会被驱动，但是当驱动块的速度较大时，滑片并不会随着驱动块的运动而运动。同样的，滑片的尺寸也是一个重要的影响因素，驱动块以同样的速度沿着基底运动时，只有尺寸较小的滑片会随着驱动块的运动而运动，较大尺寸的滑片会被留下。同时也研究了滑片形状对于运输行为的影响，但滑片的形状对于运输行为并没有明显的影响。更多的研究表明对于每一种形状和尺寸的滑片都对应某一特定的临界速度，当驱动块速度小于这个临界速度时，滑片会随着驱动块的运动而运动，但是当驱动块的速度大于临界速度时，滑片不会随着驱动块的运动而运动。这些研究表明我们可以对不同尺寸的滑片进行筛选，或者也可以清除碳纳米管中的杂质。这些结果对于平面上纳米颗粒的运输和筛选，碳纳米管中杂质的清除等具有重要的意义。

## 致谢

国家自然科学基金项目（No. 11372317, 11532013, 11402270）及北京理工大学科研创新计划资助

## 参考文献

1. Burns, M.A., et al., *An Integrated Nanoliter DNA Analysis Device*. Science, 1998. **282**(5388): p. 484-487.
2. Stone, H.A., A.D. Stroock, and A. Ajdari, *Engineering flows in small devices: microfluidics toward a lab-on-a-chip*. Annu. Rev. Fluid Mech., 2004. **36**: p. 381-411.
3. Velev, O.D., B.G. Prevo, and K.H. Bhatt, *On-chip manipulation of free droplets*. Nature, 2003. **426**(6966): p. 515-516.
4. Postma, H.W.C., et al., *Carbon nanotube single-electron transistors at room temperature*. Science, 2001. **293**(5527): p. 76-79.
5. Fennimore, A.M., et al., *Rotational actuators based on carbon nanotubes*. Nature, 2003. **424**(6947): p. 408-10.
6. Bushko, R.G., *Future of health technology*. Vol. 80. 2002: IOS Press.
7. Chaudhury, M.K. and G.M. Whitesides, *How to make water run uphill*. Science, 1992. **256**(5063): p. 1539-41.
8. Subramanian, R.S., N. Moumen, and J.B. McLaughlin, *Motion of a drop on a solid surface due to a wettability gradient*. Langmuir, 2005. **21**(25): p. 11844-11849.
9. Halverson, J.D., et al., *A molecular dynamics study of the motion of a nanodroplet of pure liquid on a wetting gradient*. Journal of Chemical Physics, 2008. **129**(16): p. 164708-164708-12.
10. Lv, C., et al., *Substrate curvature gradient drives rapid droplet motion*. Phys Rev Lett, 2014. **113**(2): p. 026101.
11. Becton, M. and X. Wang, *Thermal Gradients on Graphene to Drive Nanoflake Motion*. J Chem Theory Comput, 2014. **10**(2): p. 722-30.
12. Chang, T., et al., *Nanoscale directional motion towards regions of stiffness*. Physical review letters, 2015. **114**(1): p. 015504.
13. Wang, C. and S. Chen, *Motion Driven by Strain Gradient Fields*. Sci Rep, 2015. **5**: p. 13675.
14. Eigler, D.M. and E.K. Schweizer, *Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope*. Nature, 1990. **344**(6266): p. 524-526.
15. Feng, X., et al., *Superlubric sliding of graphene nanoflakes on graphene*. Acs Nano, 2013. **7**(2): p. 1718.
16. Mølhave, K., et al., *Pick-and-place nanomanipulation using microfabricated grippers*. Nanotechnology, 2006. **17**(10): p. 2434-41.
17. Reyes, D.R., et al., *Trapping and release of citrate-capped gold nanoparticles*. Applied Surface Science, 2011. **257**(20): p. 8373-8377.
18. Krupke, R., et al., *Simultaneous deposition of metallic bundles of single-walled carbon nanotubes using ac-dielectrophoresis*. Nano Letters, 2003. **3**(8): p. 1019-1023.
19. Lee, C., H. Lee, and R. Westervelt, *Microelectromagnets for the control of*

- magnetic nanoparticles*. Applied physics letters, 2001. **79**(20): p. 3308-3310.
20. Pauzauskie, P.J., et al., *Optical trapping and integration of semiconductor nanowire assemblies in water*. Nature materials, 2006. **5**(2): p. 97-101.
  21. Tan, S., et al., *Optical trapping of single-walled carbon nanotubes*. Nano Letters, 2004. **4**(8): p. 1415-1419.
  22. Svoboda, K. and S.M. Block, *Optical trapping of metallic Rayleigh particles*. Optics letters, 1994. **19**(13): p. 930-932.
  23. Bustamante, C., Z. Bryant, and S.B. Smith, *Ten years of tension: single-molecule DNA mechanics*. Nature, 2003. **421**(6921): p. 423-427.
  24. Perkins, T.T., D.E. Smith, and S. Chu, *Relaxation of a single DNA molecule observed by optical microscopy*. Science, 1994. **264**(5160): p. 822-6.
  25. Novoselov, K.S., et al., *Two-dimensional atomic crystals*. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2005. **102**(30): p. 10451-10453.
  26. Campos, L.C., et al., *Anisotropic etching and nanoribbon formation in single-layer graphene*. Nano Letters, 2009. **9**(9): p. 2600-2604.
  27. Zhang, P., et al., *Fracture toughness of graphene*. Nature Communications, 2014. **5**(4): p. 3782.
  28. Rasuli, R., Z.A. Iraj, and M.M. Ahadian, *Mechanical properties of graphene cantilever from atomic force microscopy and density functional theory*. Nanotechnology, 2010. **21**(18): p. 185503.
  29. Chuvilin, A., et al., *Self-assembly of a sulphur-terminated graphene nanoribbon within a single-walled carbon nanotube*. Nature materials, 2011. **10**(9): p. 687-692.
  30. Mattevi, C., H. Kim, and M. Chhowalla, *A review of chemical vapour deposition of graphene on copper*. Journal of Materials Chemistry, 2011. **21**(10): p. 3324-3334.
  31. Zhang, C., Z. Peng, and S. Chen, *Chirality-controlled carbon nanotubes fabricated by self-assembly of graphene nanoribbons*. The Journal of Physical Chemistry C, 2014. **118**(33): p. 19477-19483.
  32. Autumn, K., et al., *Evidence for van der Waals adhesion in gecko setae*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2002. **99**(19): p. 12252-12256.
  33. Stuart, S.J., A.B. Tutein, and J.A. Harrison, *A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions*. Journal of Chemical Physics, 2000. **112**(14): p. 6472-6486.
  34. Sheng, H., et al., *Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals*. Physical Review B, 2011. **83**(13): p. 134118.
  35. Dai, C., et al., *Nanoscale Linear-to-Linear Motion Converter of Graphene*. Nanoscale, 2016.
  36. Fuentes-Cabrera, M., et al., *Molecular dynamics study of the dewetting of copper on graphite and graphene: Implications for nanoscale self-assembly*. Physical Review E, 2011. **83**(4): p. 041603.
  37. Plimpton, S., *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics*.

- Journal of Computational Physics, 1993. **117**(1): p. 1-19.
38. Guo, Y., W. Guo, and C. Chen, *Modifying atomic-scale friction between two graphene sheets: A molecular-force-field study*. Physical Review B, 2007. **76**(15).
  39. Shibuta, Y. and J.A. Elliott, *Interaction between two graphene sheets with a turbostratic orientational relationship*. Chemical Physics Letters, 2011. **512**(4-6): p. 146-150.
  40. Wang, T., C. Zhang, and S. Chen, *Mechanical behaviors of carbon nanoscrolls*. Journal of nanoscience and nanotechnology, 2013. **13**(2): p. 1136-1140.