

多壁碳纳米管外壁高温蒸发的分子动力学模拟*

王 伟 张凯旺[†] 孟利军 李中秋 左学云 钟建新

(湘潭大学材料与光电物理学院, 量子工程与微纳能源技术研究所, 湘潭 411105)

(2009 年 7 月 3 日收到; 2009 年 7 月 21 日收到修改稿)

采用经典分子动力学(MD)方法,使用 EDIP(environment-dependent interatomic potential)势描述 C 纳米管内 C 原子之间相互作用,对多壁 C 纳米管由于 Stone-Wales 缺陷引起外层管高温剥落蒸发现象进行了计算模拟. 研究结果表明,高温下多壁 C 纳米管外层管 Stone-Wales 缺陷处 C 原子剧烈振动导致 C—C 键断裂形成悬键,并逐渐向四周扩散导致外层管剥落蒸发. 利用 Lindemann 指数作为判据,得出多壁 C 纳米管外层管出现剥落蒸发的温度为 2290 K 左右,与 Huang Jianyu 等实验中观测到多壁 C 纳米管外层管剥落蒸发现象产生的温度 2000 °C 基本一致.

关键词: 多壁 C 纳米管, 分子动力学, Stone-Wales 缺陷, 剥落蒸发

PACC: 6148, 7115Q, 6550

1. 引 言

C 纳米管是一种性能优越的新型功能材料和结构材料,可分为多壁 C 纳米管(multi-walled carbon nanotubes, MWCNTs)和单壁 C 纳米管(single-walled carbon nanotubes, SWCNTs). MWCNTs 相对于 SWCNTs 具有独特复杂的多层结构,这些单层、多层结构的物质表现出不同的奇特性质^[1-4]. 最近许多研究者对 MWCNTs 的热学性质及高温应用进行了深入的探索和研究. 例如在实验方面, Begtrup 等^[5,6]通过测定 MWCNTs 周围不同大小金颗粒的熔化温度,得出 MWCNTs 可以稳定至 3200 K. 在高温情况下,相邻的双层 C 纳米管熔合形成新颖的偏心同轴 C 纳米管结构^[7]. 真空中使用高温退火的方法可以除去 MWCNTs 中的金属催化剂杂质,使其提纯到 99.9%,同时还可以修复 MWCNTs 上的微观结构缺陷以提高其稳定性^[8,9]. 因此,通过使用高温退火方法可以大大改善 C 纳米管的结构性能和电子性质. 特别是 Huang 等^[10,11]对高温下 MWCNTs 的性质及结构变化进行了深入的实验观察和研究:通过加高偏电压获得 Joule 热将 MWCNTs 加热到大约 2000 °C,不加催化剂, MWCNTs 层与层之间发生自我修复生长以及错位环的生长;在加高偏电流情况下,

MWCNTs 出现从内到外或从外到内或从中间某层管壁逐层脱落的现象^[12]. Huang 等^[13]还发现高温下 MWCNTs 剥落蒸发现象:在高温 2000 °C 左右真空环境下, MWCNTs 最外层管由缺陷形成空位洞,空位洞周围成为悬键的 C 原子不断向外扩展蒸发,直到整个外层管剥落蒸发.

为探索 C 纳米管高温热学性质,人们也尝试了许多计算模拟工作. 张凯旺等^[14]使用经典分子动力学方法(MD)研究了 SWCNTs 的熔化与预熔化; Kowaki 等^[15]研究得出 SWCNTs 随着管径的增大其熔点也随之升高; Tang 等^[16]模拟研究了高温下 C 纳米管的超塑性等. 然而,关于高温下缺陷 MWCNTs 的结构和性质的模拟研究还很少报道. 目前实验制备中几乎无法获得完美的 C 纳米管, C 纳米管中不可避免地含有各种各样的缺陷,例如原子空位缺陷和替位缺陷,特别是 Stone-Wales 缺陷普遍存在于 C 纳米管中,并且在这些拓扑缺陷中具有奇异回路电流现象^[1]. 热运动或应力的拉伸就有可能使一个 C—C 键发生 90° 的旋转而形成 Stone-Wales 缺陷^[17,18]. 高温下,这些缺陷对 C 纳米管的热稳定性势必造成一定程度的影响. 张凯旺等^[19]通过研究不同缺陷 SWCNTs 的热稳定性,发现具有 Stone-Wales 缺陷的 SWCNTs 局部预融化温度为 2600 K,具有空位缺陷的 SWCNTs 和 Si 替位缺陷的

* 国家自然科学基金(批准号: 10774127, 10974166)、教育部科技创新工程重大项目培育资金(批准号: 708068)和湖南省教育厅重点项目(批准号: 09A094)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: kwzhang@xtu.edu.cn

SWCNTs 分别在 3200 K 以下和 3800 K 以下. 可见 Stone-Wales 缺陷是引起 C 纳米管预熔化的主要因素. 因此, 本文将研究具有 Stone-Wales 缺陷的 MWCNTs 在高温下外层管壁剥落蒸发现象.

本文利用经典 MD 方法, 研究了具有 Stone-Wales 缺陷的 MWCNTs 外层管在高温下的结构改变及热稳定性.

2. 结构模型与理论方法

2.1. 结构模型

首先构建一个 (15,15)@(20,20)@(25,25) 三种扶手椅型单壁 C 纳米管构成的完美 MWCNTs 结构模型. 然后再构造一个外层管具有一个 Stone-Wales 缺陷的 MWCNTs 模型进行模拟研究, 内层管 (15,15) 扶手椅型 C 纳米管设为刚体, 其结构模型如图 1 所示. 从内到外依次标记为第 1 层、第 2 层、第 3 层, 其直径依次为 20.664, 27.502, 34.340 Å, C—C 原子键长为 $d_{CC} = 1.440$ Å. 第 1 层与第 2 层、第 2 层与第 3 层之间的距离接近石墨片间距 3.40 Å. 采用周期性边界条件, 原胞 X 轴 Y 轴方向留有足够的真空层. 在长宽高分别为 $L_x = L_y = 100$ Å, $L_z = 22.446$ Å 的模拟原胞中有 2160 个 C 原子.

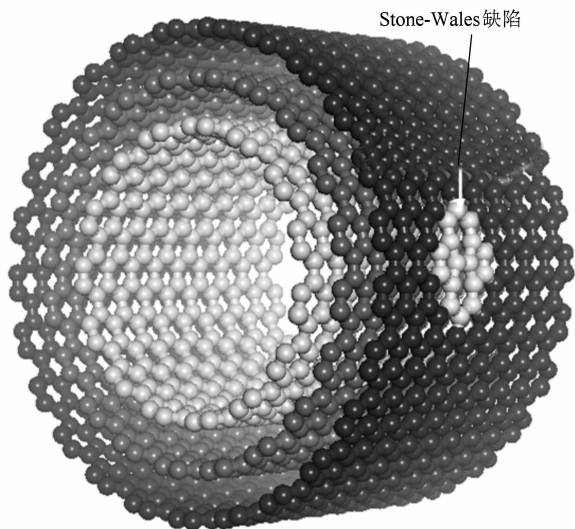


图 1 具有 Stone-Wales 缺陷的 MWCNTs 结构模型

2.2. 模拟方法

MD 作为一种重要的计算机模拟手段, 广泛应

用于研究纳米尺度下的 C 纳米管体系^[19-24]. 本文采用经典 MD 方法进行模拟研究. 考虑了 MWCNTs 的 C 纳米管层与层之间和 C 纳米管内 C 原子 C—C 之间的两种不同的相互作用.

MWCNTs 层与层之间的长程非成键相互作用, 采用 Lennard-Jones 势描述, 其表达式为:

$$E = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

其中 r 为非成键作用 C 原子间距离; ε 为势阱深, σ 为长度参数, 其值分别为 $\varepsilon = 2.964$ meV, $\sigma = 3.407$ Å^[25].

采用 EDIP^[26-28] (environment-dependent interatomic potential) 势来描述 MWCNTs 各层管内 C—C 相互作用. EDIP 势最初由 Justo 提出且适用于 Si 体系^[29], 后来由 Marks 发展到 C 体系^[26]. Marks 使用第一性原理数据确定广义坐标方程参数. EDIP 势相比 Tersoff 势不仅描述了 sp^2 和 sp^3 成键, 而且考虑了 π 键作用, 使得描述的体系更加符合物理微观真实情况. EDIP 势函数表达式是每个原子能量的合计, 可以表示为

$$U_i = \sum_j U_2(r_{ij}, Z_i) + \sum_{j < k} U_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}, Z_i),$$

方程包括相互作用的两体项 $U_2(r_{ij}, Z_i)$ 和三体项 $U_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}, Z_i)$. 两体项 $U_2(r_{ij}, Z_i)$ 在短程时类似于 Stillinger-Weber 势, 表示的是原子 i 和 j 之间的两体作用势能. 三体项 $U_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}, Z_i)$ 使用 Stillinger-Weber 形式, 表征的是原子 i, j, k 之间的三体相互作用势能. i 原子是基原子, j 和 k 是相邻原子. Z_i 为截断功能函数, 判断两体项和三体项, 二面旋转, 以及 π 排斥键出现的位置. Kowaki 等^[15] 利用 EDIP 势进行 MD 研究得到了不同管径 SWCNTs 的熔点变化情况. Lau 等^[30,31] 也使用 EDIP 势通过高温 4000 K 退火无定形碳结构转变为洋葱结构, 结果与实验现象一致. 5000 K 下, 使用 EDIP 势模拟液态碳结构的结果和第一性原理计算的结果一致^[26]. 因此, 我们认为由 Marks 发展的 EDIP 势进行 MD 模拟能较好地描述高温下 MWCNTs 的物理性质.

在模拟计算过程中, 我们采用正则系综 (NVT), 运动方程的数值积分采用 5 阶 Gear 预测校正算法, 截断半径为 10 Å, 温度控制采用速度标度法, 模拟步长为 0.5 fs, 模拟步数为 5×10^4 步 (25 ps).

2.3. 热稳定性判据

为量化 MWCNTs 发生剥落蒸发的温度和破坏程度,我们使用 Lindemann 指数作为热稳定性判据. 原子数为 N 的系统,在模拟温度 T 下,每个原子的 Lindemann 指数和整个系统的平均 Lindemann 指数定义为^[32,33]

$$\delta_i = \frac{1}{N-1} \sum_{j(i \neq j)} \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle_T - \langle r_{ij} \rangle_T^2}}{\langle r_{ij} \rangle_T},$$

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_i \delta_i,$$

其中 δ_i 是第 i 个原子的 Lindemann 指数, δ 是系统平均的 Lindemann 指数, $\langle \cdot \rangle_T$ 表示温度 T 下的平均, r_{ij} 是第 i 个原子与第 j 个原子间的距离, N 是体系总原子数.

Lindemann 指数对熔化温度特别敏感. 张凯旺等^[14,19]使用 Lindemann 指数对 C 纳米管的熔化温度进行了判断, C 纳米管在未达到熔点时 Lindemann 指数保持很好的线性关系,当 Lindemann 指数达到 0.03 熔化温度 2600 K 时,指数曲线偏离原来的线性关系而迅速增大. 本文使用 Lindemann 指数对

MWCNTs 的热稳定性及外层管剥落蒸发进行判断.

3. 结果与讨论

3.1. Stone-Wales 缺陷的形成

高温下,完美 MWCNTs 由于最外层管剧烈的热运动,会导致 C 原子剧烈震荡,极容易形成 5-5-7-7 结构的 Stone-Wales 缺陷. 对完美 MWCNTs 结构模型在 2700 K 高温下弛豫,弛豫时间到 7.35 ps 时,发现 MWCNTs 外层管形成 5-5-7-7 结构的 Stone-Wales 缺陷,其形成过程如图 2 所示. 在高温下,由于中间管与外层管间的 Lennard-Jones 相互作用,使得 MWCNTs 外层管上的 C 原子剧烈上下振动. 如图 2(a) 所示, a, b 两 C 原子上下振动,当 a, b C 原子分别振动到 C 纳米管上下面时,就形成了如图 2(b) 的结构. 这时开始形成了两个 5 边形. a, b C 原子分别在其两边 C 原子的作用下恢复平衡位置, a C 原子向下运动, b C 原子向上运动,这时 a, f 两 C 原子成键, b, f 两 C 原子键断裂. 最终形成如图 2(c) 所示的 5-5-7-7 结构的 Stone-Wales 缺陷.

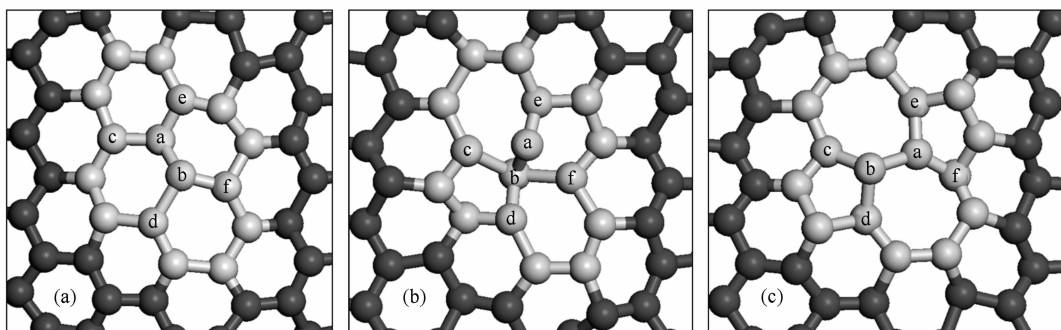


图 2 2700 K 温度下, MWCNTs 的外层管在热振动下形成 Stone-Wales 缺陷过程 (a) 7.20 ps 时刻, (b) 7.30 ps 时刻, (c) 7.35 ps 时刻

3.2. 剥落蒸发温度判断

为进行比较,分别对具有 Stone-Wales 缺陷的 MWCNTs 和完美 MWCNTs 结构模型在不同温度下进行 MD 模拟,并计算其 Lindemann 指数,判定 MWCNTs 外层管出现剥落蒸发的温度. 具有 Stone-Wales 缺陷和完美 MWCNTs 外层管在不同温度下的 Lindemann 指数曲线如图 3(a) 所示.

从图 3(a) 中可以看出,具有一个 Stone-Wales 缺陷的 MWCNTs 的外层管平均 Lindemann 指数在

模拟温度 2290 K 之前保持很好的线性关系,在 2290 K 左右发生明显的上升现象. 结合模拟结果观察可知,2290 K 时 MWCNTs 外层管出现剥落蒸发. 而完美外层管在升温阶段保持线性稳定直到 2700 K 时 Lindemann 指数出现明显上升现象,说明完美外层管在 2700 K 出现剥落蒸发. 在 300—2290 K 之间,具有一个 Stone-Wales 缺陷的外层管体系平均 Lindemann 指数随着模拟温度的上升呈现非常平稳的状态, Lindemann 指数变化很小说明 MWCNTs 外层管中的 C 原子及 Stone-Wales 缺陷处 C 原子均在

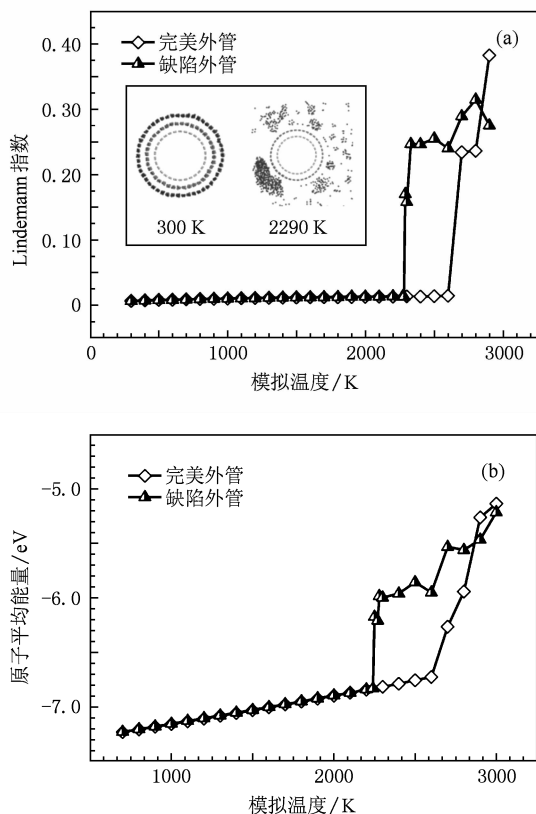


图3 MWCNTs 外层管蒸发温度判断 (a)具有 Stone-Wales 缺陷和完美 MWCNTs 外层管不同温度的 Lindemann 指数曲线,内插图分别为 300 K 时 MWCNTs 具有的稳定结构和 2290 K 时 MWCNTs 外管 C 原子剥落蒸发形貌,(b)具有 Stone-Wales 缺陷和完美 MWCNTs 外层管 C 原子平均内能随模拟温度变化曲线

初始位置附近做着典型的热振动并保持 C 纳米管的稳定结构;在 2290 K 左右,外层管上缺陷处的 C—C 键发生断裂,C 原子从外层管上剥落蒸发下来.而完美 MWCNTs 外层管的 Lindemann 指数在 2290 K 温度点仍保持原来稳定的线性关系,直到 2700 K 左右时指数才开始迅速上升.图 3(a)内插图所示的是,300 K 时 MWCNTs 具有的稳定结构和 2290 K 时 MWCNTs 外管 C 原子剥落蒸发形貌.从 Lindemann 指数变化的曲线中可以观察到曲线具有明显变化的点为剥落蒸发点.张凯旺等利用 Lindemann 指数判断具有 Stone-Wales 缺陷的 SWCNTs 其局部预熔化温度为 2600 K,与本文获得的外层管 C 原子剥落蒸发温度基本相符,也与 Huang 等^[13]实验研究发现 MWCNTs 外层管出现 C 原子剥落蒸发现象的 2000 °C 左右温度一致.

王保林等^[34]根据原子平均内能随模拟温度的变化判断出不同层螺旋超薄 Ti 纳米线的熔点.MWCNTs 外管出现剥落蒸发的温度也可以从 C 原

子平均内能随模拟温度变化的关系中得到.具有 Stone-Wales 缺陷和完美 MWCNTs 外层管 C 原子平均内能随模拟温度变化曲线如图 3(b)所示,C 原子平均内能随着模拟温度的升高呈线性上升,这是由于温度的升高使得 C 原子动能增加,导致 C 原子内能绝对值减小.但具有 Stone-Wales 缺陷和完美 MWCNTs 外层管 C 原子平均内能曲线分别在 2290 和 2700 K 左右迅速上升偏离原来的线性关系.说明缺陷外层管和完美外层管分别在 2290 和 2700 K 左右 C—C 键发生断裂,以致 C 原子平均内能绝对值急剧减小.这与 Lindemann 指数判据得到的结论一致.

3.3. 剥落蒸发形貌分析

我们仔细观察 2290 K 时的模拟结果,以分析 C 原子剥落蒸发时 MWCNTs 的形貌演化.2290 K 时具有 Stone-Wales 缺陷的 MWCNTs 不同时刻模拟结果如图 4 所示.从图 4(a)—(f)可看出,MWCNTs 外层管上的 Stone-Wales 缺陷在高温下形成空洞和外层管由空洞处开始剥落蒸发的过程.从图 4(a)—(f)中观察发现,中间管由于受到内层管的支撑,处于稳定结构,每个 C 原子仍然维持在平衡位置附近做热运动,碳管形状变化不大.

为了研究 Stone-Wales 缺陷的各个 C 原子的稳定性,我们计算了 Stone-Wales 缺陷处每个 C 原子的势能,得到如图 5 所示等势线图.发现旋转产生 Stone-Wales 缺陷的两个 C 原子及与其构成五边形的 C 原子的势能要比其周围的 C 原子势能的绝对值低,从而说明缺陷处两个五边形上 C 原子的稳定性要比其周围 C 原子稳定性弱些. Ding 等^[35]曾经研究了从 C 纳米管不同部位移除 C 原子的能量势垒,发现移除 5—7 缺陷中五边形处的 C 原子要比移除 C 纳米管完美处 C 原子的能量低.表明两个五边形中的 C 原子在高温热运动中更容易剥落蒸发.外层管上的 Stone-Wales 缺陷 C 原子相对其周围 C 原子做热运动且具有更高的能量,高温下剧烈振动使得它们从外层管上挣脱(如图 4(b)所示),导致 Stone-Wales 缺陷处形成空洞,空洞周围形成的许多悬键致使空洞周围结构变得更不稳定,断键逐渐增多,空洞沿轴方向和环方向向四周扩展,外层管上的 C 原子逐渐剥落蒸发,最终整个最外层管从 MWCNTs 上完全剥落蒸发掉.这些模拟中的现象和结果与 Huang 等实验所得的一致.

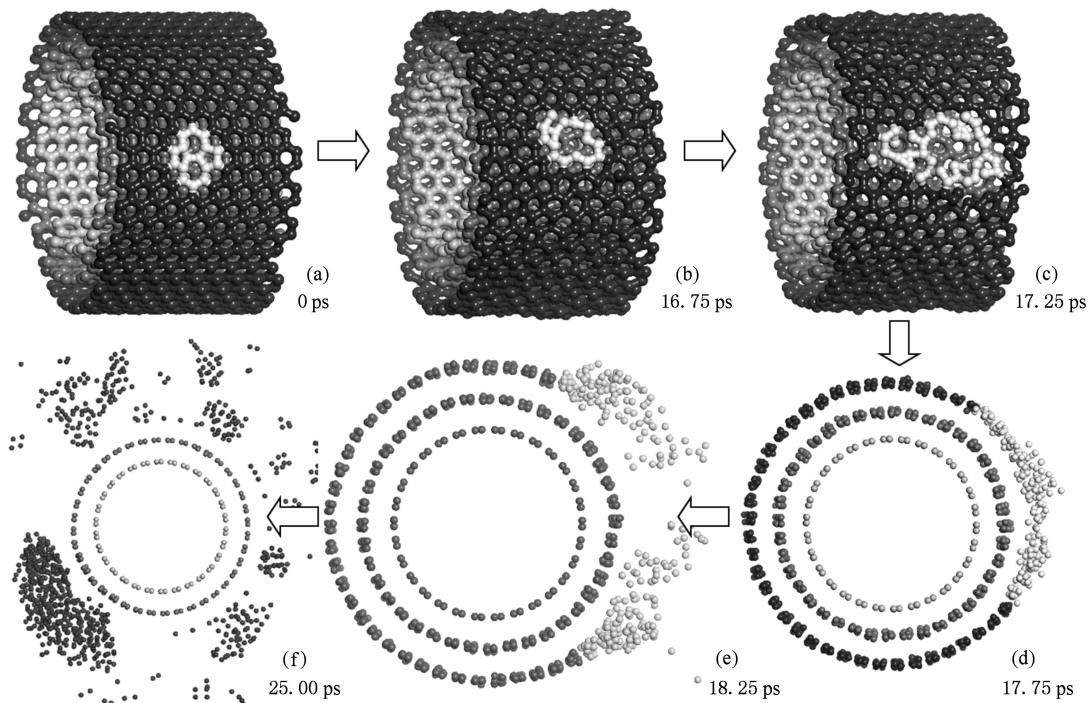


图4 2290 K 时具有缺陷 MWCNTs 不同时刻模拟结果 (a)0 ps 时, (b)16.75 ps 时, (c)17.25 ps 时, (d)17.75 ps 时, (e)18.25 ps 时, (f)25.00 ps 时

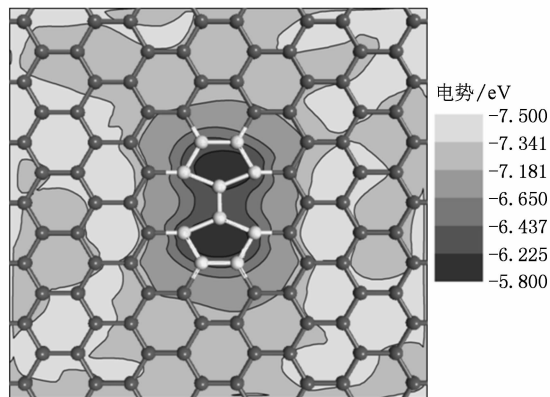


图5 Stone-Wales 缺陷等势线图

3.4. 局部研究

利用局部 Lindemann 指数对缺陷 MWCNTs 外层管上的完美局部和缺陷局部在蒸发温度下的稳定性做进一步的探讨. 具有 Stone-Wales 缺陷 MWCNTs 完美局部和缺陷局部的 Lindemann 指数在 2290 K 时随着模拟时间变化曲线如图 6 所示. 从图 6 可以看出 Stone-Wales 缺陷局部曲线在 20 ps 时其 Lindemann 指数超过 0.1, 其 C 原子六环结构已经被破坏变为无序, 而完美局部 Lindemann 指数曲线在 20 ps 之前变化相对要小很多, 说明完美局部相对于

缺陷局部还处于较有序的结构形貌. 由此也可以说明外层管发生 C 原子剥落蒸发是从 Stone-Wales 缺陷处开始的, 并导致整个外层管结构不稳定.

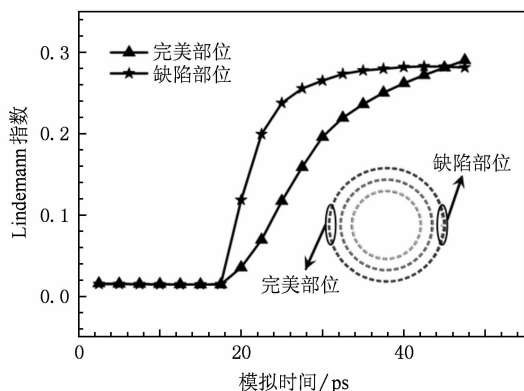


图6 2290 K 时缺陷局部和完美局部在不同时刻 Lindemann 指数变化曲线

4. 结 论

基于经典 MD 研究方法, 模拟研究了由 (15, 15)@ (20, 20)@ (25, 25) 构成的 MWCNTs 在高温下的结构改变和热稳定性质. 根据 Lindemann 指数和 C 原子平均内能随温度变化情况得出: 具有一个

Stone-Wales 缺陷的 MWCNTs 其外层管出现剥落蒸发的温度为 2290 K, 与 Huang 等^[13] 实验中观察到的现象和实验温度基本一致, 完美 MWCNTs 在 2290 K 仍然保持原来的稳定结构, 直到 2700 K 才出现外层管剥落蒸发. 2700 K 时, 完美 MWCNTs 由于外层管剧烈的热运动, 导致 C 原子剧烈震荡, 极容易形成 5-5-7-7 结构的 Stone-Wales 缺陷. 由于 Stone-Wales 缺陷处 C 原子在高温下剧烈上下振动的影响,

MWCNTs 外层管从缺陷处开始出现 C 原子挣脱形成空洞并逐渐导致外层管 C 原子剥落蒸发, 同时在外层管发生 C 原子剥落蒸发的某一时刻缺陷局部的 Lindemann 指数要高于完美局部的 Lindemann 指数, 即缺陷局部的稳定性要低于完美局部. C 纳米管普遍存在的 Stone-Wales 缺陷对高温下多壁管的稳定性有着很大影响. 所得结果对实验中高温下 MWCNTs 出现剥落蒸发的现象给出了很好的解释.

- [1] Zhang Y Y, Hu J P, Bernevig B A, Wang X R, Xie X C, Liu W M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 155413
- [2] Zhang Y Y, Hu J, Bernevig B A, Wang X R, Xie X C, Liu W M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 106401
- [3] Zheng G P, Liang J Q, Liu W M 2009 *Phys. Rev. B* **79** 14415
- [4] He P B, Li Z D, Pan A L, Wan Q, Zhang Q L, Wang R X, Wang Y G, Liu W M, Zou B S 2008 *Phys. Rev. B* **78** 54420
- [5] Begtrup G E, Ray K G, Kessler B M, Yuzvinsky T D, Garcia H, Zettl A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 155901
- [6] Begtrup G E, Ray K G, Kessler B M, Yuzvinsky T D, Garcia H, Zettl A 2007 *Phys. Status Solidi. B* **244** 3960
- [7] Muramatsu H, Hayashi T, Ahm K Y, Terrones M, Endo M 2006 *Chem. Phys. Lett.* **432** 240
- [8] Andrews R, Jacques D, Qian D, Dickey E C 2001 *Carbon* **39** 1681
- [9] Huang W, Wang Y, Luo G, Wei F 2003 *Carbon* **41** 2585
- [10] Huang J Y, Ding F, Yakobson B I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 35503
- [11] Huang J Y, Ding F, Jiao K, Yakobson B I 2007 *Small* **3** 1735
- [12] Huang J Y, Chen S, Jo S H, Wang Z, Han D X, Chen G, Dresselhaus M S, Ren Z F 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 236802
- [13] Huang J Y, Ding F, Yakobson B I 2008 *Phys. Rev. B* **78** 155436
- [14] Zhang K W, Stocks G M, Zhong J X 2007 *Nanotechnology* **18** 285703
- [15] Kowaki Y, Harada A, Shimojo F, Hoshino K 2007 *J. Phys. : Condens. Mater.* **19** 436224
- [16] Tang C, Guo W, Chen C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 175501
- [17] Ebbesen T W, Takada T 1995 *Carbon* **33** 973
- [18] Stone A J, Wales D J 1986 *Chem. Phys. Lett.* **128** 501
- [19] Zhang K W, Zhong J X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3679 (in Chinese) [张凯旺、钟建新 2007 物理学报 **57** 3679]
- [20] Xie F, Zhu Y B, Zhang Z H, Zhang L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5833 (in Chinese) [谢芳、朱亚波、张兆慧、张林 2008 物理学报 **57** 5833]
- [21] Meng L J, Zhang K W, Zhong J X 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1010 (in Chinese) [孟利军、张凯旺、钟建新 2007 物理学报 **56** 1010]
- [22] Bao W X, Zhu C C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3552 (in Chinese) [保文星、朱长纯 2006 物理学报 **55** 3552]
- [23] Zhang K W, Meng L J, Li J, Liu W L, Tang Y, Zhong J X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4347 (in Chinese) [张凯旺、孟利军、李俊、刘文亮、唐翌、钟建新 2008 物理学报 **57** 4347]
- [24] Li J, Zhang K W, Meng L J, Liu W L, Zhong J X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 0382 (in Chinese) [李俊、张凯旺、孟利军、刘文亮、钟建新 2008 物理学报 **57** 0382]
- [25] Vodenitcharova T, Zhang L C 2004 *Phys. Rev. B* **69** 115410
- [26] Marks N A 2000 *Phys. Rev. B* **63** 35401
- [27] Marks N 2002 *J. Phys. : Condens. Mat.* **14** 2901
- [28] Marks N A, Cooper N C, McKenzie D R 2002 *Phys. Rev. B* **65** 075411
- [29] Justo J F, Bazant M Z, Kaxiras E, Bulatov V V, Yip S 1998 *Phys. Rev. B* **58** 2539
- [30] Lau D W M, McCulloch D G, Marks N A, Madsen N R, Rode A V 2007 *Phys. Rev. B* **75** 233408
- [31] Powles R C, Marks N A, Lau D W M 2009 *Phys. Rev. B* **79** 075430
- [32] Zhou Y, Karplus M, Ball K D, Berry R S 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 2323
- [33] Ding F, Bolton K, Rosen A 2005 *Eur. Phys. J. D* **34** 275
- [34] Wang B L, Wang G H, Chen X S, Zhao J J 2003 *Phys. Rev. B* **67** 193403
- [35] Ding F, Jiao K, Lin Y, Yakobson B I 2007 *Nano Lett.* **7** 681

Molecular dynamics simulation of the evaporation of the surface wall of multi-wall carbon nanotubes at high temperature^{*}

Wang Wei Zhang Kai-Wang[†] Meng Li-Jun Li Zhong-Qiu Zuo Xue-Yun Zhong Jian-Xin
(*Faculty of Materials, Optoelectronics and Physics, Institute for Quantum Engineering and Micro-Nano Energy Technology,
Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*)

(Received 3 July 2009; revised manuscript received 21 July 2009)

Abstract

We have used molecular dynamics (MD) simulation to investigate the evaporation of the surface wall of multi-wall carbon nanotubes (MWCNTs) at high temperature, using the environment dependent interatomic potential (EDIP) to describe the C—C interaction in carbon nanotube. The simulation results show that the Stone-Wales defect in the surface wall of a multi-wall carbon nanotube vibrates violently, which causes C—C bond breaking and evaporation of atoms along the circumferential directions of the nanotube. The formation of Stone-Wales defect is attributed to the atomic thermal motion or tensile strain. Using the Lindemann index as a criterion, we found that the surface wall of MWCNT evaporates around 2290 K. Our simulation results agree very well with the observation of the surface wall evaporation of the MWCNT at 2000 °C.

Keywords: multi-wall carbon nanotubes, molecular dynamics, Stone-Wales defects, evaporation

PACC: 6148, 7115Q, 6550

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10774127, 10974166), the Cultivation Fund of the Key Scientific and Technical Innovation Project, Ministry of Education of China (Grant No. 708068) and the Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province, China (Grant No. 09A094).

[†] Corresponding author. E-mail: kwzhang@xtu.edu.cn