

$(n, n)$ - $(2n, 0)$  碳纳米管异质结的扭转力学特性

韩典荣 王璐 罗成林 朱兴凤 戴亚飞

Torsional mechanical properties of  $(n, n)$ - $(2n, 0)$  carbon nanotubes heterojunction

Han Dian-Rong Wang Lu Luo Cheng-Lin Zhu Xing-Feng Dai Ya-Fei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 106102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.106102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.106102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I10>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

通量可控的双壁碳纳米管水分子泵

Flux controllable pumping of water molecules in a double-walled carbon nanotube

物理学报.2015, 64(11): 116101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.116101>

单壁碳纳米管膜及其三聚氰胺甲醛树脂复合材料的光电特性

Opto-electronic properties of the single-walled carbon nanotube film and melamine formaldehyde resin composite

物理学报.2014, 63(10): 106101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.106101>

缺陷对碳纳米管摩擦与运动行为的影响

Influence of defects on friction and motion of carbon nanotube

物理学报.2014, 63(5): 056101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.056101>

碳纳米管电缆式复合材料的热导率

Thermal conductivity of carbon nanotube cable type composite

物理学报.2013, 62(22): 226102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.226102>

碳纳米管对接成异质结器件的计算模拟

Formation of all carbon heterojunction: through the docking of carbon nanotubes

物理学报.2013, 62(10): 106101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.106101>

# $(n, n)$ - $(2n, 0)$ 碳纳米管异质结的扭转力学特性\*

韩典荣<sup>1)3)</sup> 王璐<sup>1)</sup> 罗成林<sup>1)2)†</sup> 朱兴凤<sup>1)</sup> 戴亚飞<sup>1)</sup>

1) (南京师范大学物理科学与技术学院, 南京 210023)

2) (江苏省光电科学技术重点实验室, 南京 210023)

3) (江苏第二师范学院物理与电子工程学院, 南京 210013)

(2014年11月7日收到; 2014年12月15日收到修改稿)

相近直径的锯齿型和扶手椅型碳纳米管可以共轴组合形成5—7碳环交替出现的柱形对称异质结. 本文利用分子动力学方法研究了直径相近且等长锯齿型和扶手椅型碳纳米管形成的 $(n, n)$ - $(2n, 0)$ 结在扭转过程中的扭矩和轴向应力随扭转角度的变化规律以及应力传递过程. 研究发现,  $(n, n)$ - $(2n, 0)$ 结扭转应变在达弹性限度内不会产生轴向应力, 该效应对基于碳纳米管扭转特性的纳米振荡器件的设计具有重要意义.

**关键词:** 碳纳米管, 异质结, 扭转力学, 分子动力学

**PACS:** 61.48.De, 02.70.Ns, 81.70.Bt

**DOI:** 10.7498/aps.64.106102

## 1 引言

自1991年发现碳纳米管以来<sup>[1]</sup>, 其独特的力学特性和电学特性引起了广泛的关注<sup>[2-7]</sup>, 特别是在纳米机电器件方面, 人们已能设计和制造基于单壁、多壁碳管的纳米激励系统、谐振器和传感器等<sup>[8-10]</sup>. 碳纳米管在这些器件中常常作为轴承器件、弹簧器件等使用, 例如: 纳米机电振荡器的一般构造就是把碳纳米管作为转轴, 将其两端嵌入硅基片中, 然后在管中部沉积金属形成固定于碳管中部的金属电浆. 工作时, 以电浆作为杠杆, 通过外加电场或原子力显微镜 (AFM) 对电浆施加使碳管扭转的应力<sup>[9]</sup>. 纳米机电振荡器可用于光学扫描切换、微流体检测和传感等方面<sup>[10]</sup>. 理论和实验表明, 碳纳米管的力学形变对其物理性质有明显影响<sup>[11-13]</sup>, 其扭转力学特性对相关纳米功能器件的设计有重要意义, 得到了广泛研究. 如: 理论计算发现碳纳米管的杨氏模量约为1 TPa<sup>[14,15]</sup>; Williams等<sup>[16]</sup>利用机电驱动扭转振荡方法研究碳

纳米管的扭转弹性常数, 发现碳纳米管有效剪切模量最大值与理论值接近, 并且多壁碳纳米管多次扭转会出现“加工硬化”(work hardening)现象; Cohen-Karni等<sup>[17]</sup>在实验中观测到纳米管在扭转过程中电导率、扭矩随扭转角度 $\theta$ 的变化情况, 发现了碳管从金属到半导体周期转换的振荡行为; Rochefort等<sup>[18]</sup>的研究指出, 在扭转作用下, 扶手椅型碳纳米管会出现缺陷, 该缺陷的不稳定程度与扭转角度呈线性关系, 并存在一个临界扭转角度, 当扭转角度超过这个临界值时, 碳管结构被破坏; Chang<sup>[19]</sup>的研究表明手性单壁碳纳米管由于结构的不对称性, 其扭转力学特性受扭转方向的影响, 一个扭转方向的临界屈服切应变(the critical buckling shear strain)比相反扭转方向高出1.8倍.

在基于碳管扭转振荡特性的相关纳米器件中, 精确控制振荡频率是设计此类器件的关键, 因此, 准确控制碳管的转动惯量尤为重要. 研究表明, 单壁碳纳米管的扭转和轴向的应变存在耦合效应<sup>[20-22]</sup>. 例如, Zhao等<sup>[22]</sup>通过分子动力学计算发现碳管扭转时将引发轴向的应变, 且应力方向与

\* 国家自然科学基金青年基金(批准号: 21203097)、江苏省高校自然科学研究项目(批准号: 14KJB140006)和江苏高校优势学科建设工程项目资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [clluo@njnu.edu.cn](mailto:clluo@njnu.edu.cn)

碳管结构强烈相关, 在弹性限度内, 扶手椅型碳管在扭转过程中收缩, 锯齿型碳管在扭转过程中伸长. 当碳管两端固定时, 锯齿型碳管将出现扭致弯曲的现象, 即在纳米尺度上也会出现宏观材料在扭转时导致长度变化的坡印亭效应<sup>[23]</sup>. 这种在扭转过程中出现的收缩或伸长现象的原子机理源于碳管结构对称性的破坏. 为了清晰地解释这个观点, 可以考察在碳管受轴向应力时, 其切向的扭力响应情况. 有研究证实<sup>[20]</sup>, 手性碳管在受到轴向张力后会引发切向的扭力响应, 而非手性管则不出现切向的扭力响应, 这表明结构对称性对是否产生切向扭力响应至关重要. 与之相反, 也有证据表明<sup>[22]</sup>, 不论碳管手性如何, 碳管的扭转必定引发轴向的应变, 只是应变方向与手性强烈相关. 需要进一步说明的是, 轴向应力引发扭转与扭转引发轴向应变表面上看似是可逆耦合过程, 实际上由于应力分布和能量结构差异, 它们是有很大区别的两种耦合过程, 是不可逆的, 但共同的一点是应变响应的大小及方向均源于碳管局部结构对称性改变之后所导致的原子受力响应. 碳管的扭致弯曲使得碳管在扭转过程中转动惯量不断变化, 因此有可能对纳米扭转器件振荡频率的精确控制形成障碍. 此外, 对一些不需要轴向耦合效应的基于普通碳管扭转特性的纳米器件中, 扭转过程中在轴向上产生的持续应力将使器件易于疲劳, 导致器件结构变化而失效. 因此, 如何避免碳管在扭转过程中引发轴向应变而导致弯曲甚至从根本上消除轴向应力是本研究的动因所在. 考虑到扶手椅型碳管和锯齿型碳管在扭转过程中引发的轴向应力方向相反, 我们尝试将等长且直径相近的扶手椅型碳管和锯齿型碳管沿轴向共轴组合成碳管异质结, 并利用分子动力学计算其扭转性质. 计算结果表明, 这种异质结碳管确实可以明显减小扭转所引发的轴向引力, 从而消除扭致弯曲现象.

## 2 计算方法和模型

我们用LAMMPS软件进行分子动力学计算, 碳原子间的相互作用势采用AIREBO<sup>[24]</sup>(adaptive intermolecular reactive empirical bond order potential)势函数, 这一势函数可以很好地模拟碳材料在各种环境下的相互作用<sup>[25-27]</sup>, 它包含了REBO势、Lennard-Jones相互作用和Torsion作用三项. REBO势是一个多体势, 描述C—C的相互

作用, 包括键长、键角、键能和键的断裂重组等动态行为. Lennard-Jones (LJ) 势描述原子间的长程相互作用. Torsion 势描述二面角变化, 碳纳米管扭转过程中的行为主要由它来体现. 在模拟过程中, LJ 势的截断半径参数取为 10.2 Å.

计算模型如图1所示, 该模型分别由长度为 100 Å 的  $(n, n)$  型碳管和 100 Å 的  $(2n, 0)$  碳管共轴结合而成, 总长为 200 Å. 这种异质结模型最早由Treboux等<sup>[28]</sup>于1998年首次提出并建立, 其特点是5原子碳环与7原子碳环相邻并且交替出现, 围绕碳纳米管一周形成环状结构, 具有很高的对称性. 这两种类型的碳纳米管在力学和电学特性上有明显不同的性质<sup>[29]</sup>, 而由它们组成的异质结可能有新的重要特性. Treboux等<sup>[28]</sup>的研究就指出, 在电学性质上, 由金属性扶手椅型碳管和半导体性锯齿型碳管组成的这种结, 电荷可以从金属性部分传到半导体性部分, 但沿轴向的静电势的分布是不对称的. 这种特性可以用于制造整流器. 为了方便描述, 我们在此后的描述中将此异质结简称为“ $(n, n)$ - $(2n, 0)$  结”.

计算模型的系统单元大小为  $50 \text{ Å} \times 50 \text{ Å} \times 300 \text{ Å}$ ,  $(n, n)$ - $(2n, 0)$  结沿  $z$  轴放置, 其中心与单元中心重合并采用周期性边界条件. 由于单元的尺寸足够大, 各单元内  $(n, n)$ - $(2n, 0)$  结不会发生相互作用. 扭转操作是将  $(n, n)$ - $(2n, 0)$  结一端的两层碳原子完全固定, 另一端的两层碳原子绕管轴发生转动, 从而带动整根碳纳米管发生扭转. 作为对比, 我们还对普通  $(n, n)$  型及  $(2n, 0)$  型碳管进行了同样的计算.

计算采用 Nose-Hoover<sup>[30,31]</sup> 热浴在 NVT 系综中进行, 时间步长为 0.8 fs, 温度控制在 300 K. 为了维持模型在准平衡状态, 我们保持扭转角速度为每运行一万步, 碳纳米管扭转  $1^\circ$ . 实际计算表明, 系统确实可在整个扭转过程中保持准平衡过程.

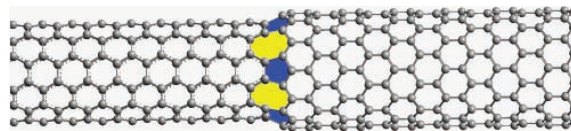


图1 计算模型

Fig. 1. Computational model.

## 3 计算结果与讨论

图2和图3给出了长度均为 200 Å 的  $(6, 6)$ ,  $(12, 0)$  碳纳米管以及由 100 Å 的  $(6, 6)$  碳纳米管与

100 Å 的 (12, 0) 碳纳米管组合而成的 (6, 6)-(12, 0) 结这三种碳管结构在扭转时其扭矩  $T$  和轴向应力  $F_z$  随着扭转角度  $\theta$  变化的曲线.

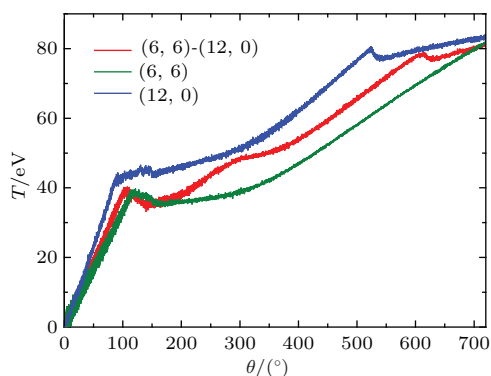


图2 (网刊彩色) 三种碳纳米管结构扭矩  $T$  随扭转角度  $\theta$  的变化

Fig. 2. (color online) Torque with the torsion angle for three CNTs.

### 3.1 三种碳纳米管扭转过程中扭矩的变化

从图2可以看出三种碳纳米管的主要扭转特性: 1) 在发生扭转的起始阶段, 即在弹性限度内 (对应的扭转角度小于  $100^\circ$  的区间), 其扭矩和扭转角度之间均呈线性增长关系, 曲线斜率  $K = \frac{T}{\theta}$  反映了材料的扭转刚度, 显然, (12, 0) 碳纳米管扭转刚度最大, (6, 6) 碳纳米管的扭转刚度最小, (6, 6)-(12, 0) 结的扭转刚度则介于 (12, 0) 管和 (6, 6) 管之间, 且与 (6, 6) 碳纳米管的刚度更为接近; 在扭转角为  $100^\circ$  附近, 开始分别体现出明显的塑性屈服和强化阶段, 根据单壁碳管沿半径方向切变模量的计算公式<sup>[32]</sup>  $G = \frac{T}{2\pi t R^3 \theta}$ , 其中  $T$  为扭矩,  $t$  为碳管厚度, 一般取为  $0.34 \text{ nm}$ ,  $R$  为碳管半径,  $\theta$  为扭转角度, 可计算出 (6, 6)-(12, 0) 结的切变模量值约为  $2 \text{ GPa}$ , 这个值比理想单壁碳管的轴向弹性模量要小三个量级, 显然, 扭转相较于拉伸更易于使碳管断裂; 2) 三种碳管结构的扭矩在扭转角度为  $200^\circ$  以后, 扭矩曲线虽略有起伏, 但总体都呈现上升的趋势, 特别是当扭转角达到  $700^\circ$  后, 扭矩趋于一致, 表明此时的扭矩特性不再敏感于碳管的初始结构, 体现出对初始结构的失忆性; 3) 弹性屈服点<sup>[19]</sup> (buckling point, 在以后均简称为屈服点) 对应的扭转角度与扭转刚度相关, 刚度越大, 屈服点所对应的扭转角越小, (12, 0) 管的屈服点出现最早, 而 (6, 6) 管的屈服点出现最迟; 4) 在屈服点附近, 碳纳米管的扭矩变化趋势不同, 在越过屈服点之后, (12, 0) 管曲线斜率依然为正, 但斜率减小,

而 (6, 6) 管扭矩立即下降, 曲线斜率变为负, 反映出碳管扭转角在第一个屈服点附近, 其扭矩特性与碳管初始结构密切相关; 对于 (6, 6)-(12, 0) 结而言, 从图2可清楚地看到, 其扭矩变化特性在整体上与 (6, 6) 管类似, 表明 (6, 6)-(12, 0) 结在扭转过程中其扭转特性更多地取决于其中扭转刚度较小的 (6, 6) 管.

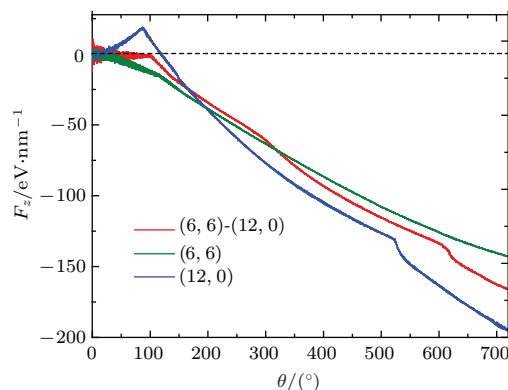


图3 (网刊彩色) 三种碳纳米管轴向应力  $F_z$  随扭转角度  $\theta$  的变化

Fig. 3. (color online) Torsion-induced axial stress response for the three CNTs.

### 3.2 三种碳纳米管在扭转过程中轴向应力变化的分析

图3描述了各碳纳米管的轴向应力  $F_z$  随着碳纳米管扭转角度  $\theta$  的变化关系. 在图中, 指向结构内部的应力设为负值, 而指向结构外部的应力设为正值. 显然, (12, 0) 管与 (6, 6) 管在开始扭转后分别展现出大于零和小于零的轴向应力, 表明它们在扭转时均会发生坡印亭效应, 只是 (12, 0) 的效果是伸长, 而 (6, 6) 管的效果则是收缩. 扭转开始后, (12, 0) 管轴向应力先是单调递增, 当扭转角度达到第一个屈服点时, 轴向应力达到极大值, 继续增大扭转角度, 轴向应力持续降低至零并进而转为负值, 方向发生变化. 在这个过程中, (12, 0) 管先伸长后缩短, 即在其轴向应力变为零之前始终都在伸长, 而当轴向应力变为负值后, (12, 0) 管开始缩短. 相反, (6, 6) 管的轴向应力始终小于零, 表明在扭转过程中, (6, 6) 管沿轴向收缩, 并且扭转角度越大, 收缩力越大, 与 (12, 0) 管的特性明显不同. 这个结果与文献<sup>[22]</sup> 的结论完全一致.

值得注意的是, (6, 6)-(12, 0) 结在开始扭转后直到第一个屈服点对应的扭转角之前, 其轴向应力并不随扭转角度的变化而变化, 几乎一直保持为零, 表明其既不伸长也不收缩, 体现出与正常碳管



明显不同的轴向应力特性. 显然, 对于 (6, 6)-(12, 0) 结, 在其扭转过程中, (12, 0) 管的伸长效应几乎被 (6, 6) 管的收缩效应完全抵消, 使得 (6, 6)-(12, 0) 结在扭转角度还未达到第一个屈服点之前, 不产生轴向应力. 当扭转角度继续增大, 超越第一个屈服点对应的角度以后, 轴向应力才变为负值, 碳纳米管开始发生收缩. 所以, 只要在线性弹性限度以内扭转时, (6, 6)-(12, 0) 结可以消除轴向应力, 长度并不发生变化, 使得其在扭转过程中不会出现弯曲现象. 这一结果完全达到了我们模型设计的初衷, 因为通常的纳米摆器件总是工作于其弹性限度内, 在这一限度内扭转而同时保持零轴向应力将非常有利于精确控制纳米摆器件的转动惯量, 从而达到精准控制纳米摆振荡频率的目的.

### 3.3 (6, 6)-(12, 0) 结的扭转形态及应力传递分析

为了更清晰地描述 (6, 6)-(12, 0) 结在扭转时的形态及应力分布, 我们计算了扭转过程中每个原子的应力大小, 并按照每个原子的应力值对碳原子进行着色, 发现扭转形态和应力传递变化与固定哪一端无关, 即无论是固定锯齿型碳管端口两层原子扭转扶手椅型碳管端口两层原子, 还是反之, 扭转形态和应力传递变化完全一致. 图 4 给出了 (6, 6)-(12, 0) 结左端固定右端扭转的应力分布图.

图 4 中各种颜色所对应的应力大小分布值域如图中右下角所示: 用蓝色标记的应力最小, 用红色标记的应力最大. 从图中可以看出, 应力传递的总体趋势是由结的中部向两端进行传递. 最初应力集中在 5—7 碳环所在的位置, 5—7 碳环首先发生形变, 两边的碳管形变不明显, 表明在整个结构中, 5—7 碳环处是刚度最弱的地方. 当扭转角度达到  $110^\circ$  左右, 即第一个屈服点时, 左端的 (6, 6) 管部分已经形成扭结, 但此时右端的 (12, 0) 管一端几乎没有形变. 这个现象可以解释为 (6, 6) 管的刚度小于 (12, 0) 管, 所以 (6, 6) 管部分先于 (12, 0) 管部分发生形变, 这与图 2 中体现的扭转刚度的结果是一致的. 此时, (6, 6)-(12, 0) 结的扭转特性主要决定于 (6, 6) 管. 随着扭转角度的增大, 应力由中部的 5—7 碳环处向两端传播, 向 (6, 6) 管部分传播的速度远大于向 (12, 0) 管部分传播的速度, 从图 4 中可以看出 (6, 6) 管部分的扭转形变远远大于 (12, 0) 管部分. 当扭转角度达到  $130^\circ$  时, (6, 6) 管部分在靠近 5—7 碳环处的位置形成了完整的扭结, 对照

图 2 这是第二个屈服点对应的角度, 而此时 (12, 0) 一端的形变依然很弱. 继续扭转, 扭结的数量增加, 伴随着 (6, 6) 管部分形成的扭结向左传递, 其扭转刚度也在增加. 当扭转角度达到  $270^\circ$  时, 已形成三个扭结的 (6, 6) 管部分的刚度开始超过形变较小的 (12, 0) 管部分的刚度, 此时, (12, 0) 管部分才开始发生明显的形变. 结合图 2 可知这一角度附近正是 (6, 6)-(12, 0) 结扭矩曲线有小幅增加的阶段. (12, 0) 管部分的形变最初集中在 5—7 碳环处; 扭转角度达到  $270^\circ$  时, 其在靠近 5—7 碳环处的位置首先形成扭结. 在接下来的扭转过程中, 除了扭结的数量随扭转角度增大而增大之外, 扭结产生的位置也发生了变化, 由原来在 5—7 碳环处向右发展. 当扭转角度达到  $620^\circ$ , 即第三个屈服点对应的角度时, 整个 (6, 6)-(12, 0) 结已呈现出六个扭结, 第七个扭结开始出现. 当扭转到  $720^\circ$  时, 刚度较弱 (6, 6) 管部分形成了 4 个扭结, 刚度较强的 (12, 0) 管部分形成了 3 个扭结. 说明刚度大的部分要形成完整的扭结, 所需的长度也更大. 在整个扭转过程中, 始终未出现扭致弯曲现象.

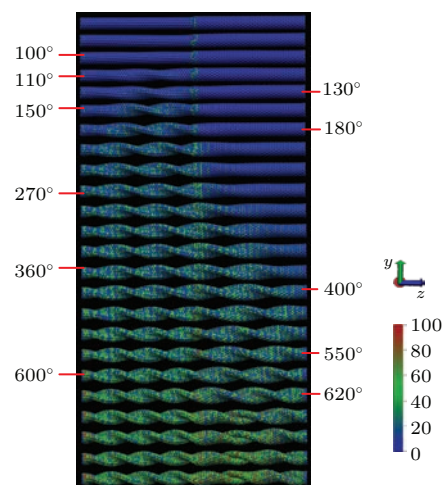


图 4 (网刊彩色) (6, 6)-(12, 0) 结扭转过程中形态及应力传递变化图

Fig. 4. (color online) Snapshots of the stress transfer and structural change of (6, 6)-(12, 0) heterojunction in torsion process.

通过对整个 (6, 6)-(12, 0) 结扭转形态和应力传递的分析可知: 1) (6, 6)-(12, 0) 结中部 5—7 碳环处是碳管刚度最弱的部分, 扭转时最先受力发生形变; 2) 扭转过程中, 应力由中部 5—7 碳环处向异质结两端传递, 但传递速度不同, 刚度弱的部分传递速度较快, 致使其先发生扭转, 刚度强的部分后发生扭转; 3) 在弹性限度内, 没有坡印亭效应发生;

4) 在大的扭转角度下, 刚度较弱部分形成的扭结数大于刚度较强的部分.

为了证实  $(n, n)-(2n, 0)$  结上述特性的普遍性, 我们还对相同长度组合的  $(4, 4)-(8, 0)$ ,  $(5, 5)-(10, 0)$ ,  $(7, 7)-(14, 0)$ ,  $(8, 8)-(16, 0)$  以及  $(9, 9)-(18, 0)$  5 组含 5—7 碳环的碳纳米管结构的扭矩特性及轴向应力特性进行了系统计算, 它们的扭转性质与本文细致描述的  $(6, 6)-(12, 0)$  结的相关特性非常相似, 只是管径粗的组合其弹性屈服点所对应的扭转角较小. 表明由等长的锯齿型和扶手椅型碳纳米管组成的含 5—7 碳环  $(n, n)-(2n, 0)$  结构在扭转时, 在其弹性限度内, 可避免或消除轴向应力的产生. 因此, 在扭转时不产生坡印亭效应是一种普遍的结果.

## 4 结 论

研究表明, 由直径相近且等长的锯齿型和扶手椅型碳纳米管共轴组成的含 5—7 碳环  $(n, n)-(2n, 0)$  异质结在扭转时有以下主要特性: 1) 在相同长度下, 管径越大, 屈服点出现越早, 保持弹性形变的扭转角度越小; 2) 在弹性限度内轴向应力几乎为零, 可以避免或消除普通碳纳米管扭转时出现的坡印亭效应, 从而易于实现对相关纳米扭转器件振荡频率的精确控制. 这些研究结果可对实际纳米器件的设计提供重要的参考.

## 参考文献

- [1] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56
- [2] Golberg D, Costa P M F J, Mitome M, Bando Y 2009 *J Mater. Chem.* **19** 909
- [3] Wang J N, Luo X G, Wu T, Chen Y 2014 *Nature Commun.* **5** 3848
- [4] Schneider B H, Etaki S, van der Zant H S, Steele G A 2012 *Sci. Rep.* **2** 599
- [5] Huang J Y, Chen S, Wang Z Q, Kempa K, Wang Y M, Jo S H, Chen G, Dresselhaus M S, Ren Z F 2006 *Nature* **439** 281
- [6] Ouyang Y, Peng J C, Wang H, Yi S P 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 0615
- [7] Zhang Y, Cao J X, Yang W 2008 *Chin. Phys. B* **17** 1881
- [8] Karimov Kh S, Tariq Saeed Chani M, Ahmad Khalid F, Khan A, Khan R 2012 *Chin. Phys. B* **21** 016102
- [9] Evoy S, Carr D W, Sekaric A, Parpia J M, Craighead H G 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 6072
- [10] Fennimore A M, Yuzvinsky T D, Han W Q, Fuhrer M S, Cumings J, Zettl A 2003 *Nature* **424** 408
- [11] Tomblor T W, Zhou C, Alexseyev L, Kong J, Dai H, Liu L, Jayanthi C S, Tang M, Wu S Y 2000 *Nature* **405** 769
- [12] Gartstein Y N, Zakhidov A A, Baughman R H 2003 *Phys. Rev. B* **68** 115415
- [13] Ni X G, Wang Y, Zhang Z, Wang X X 2006 *Chin. J. Chem. Phys.* **19** 194
- [14] Lu J P 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 1297
- [15] Gupta S, Dharamvir K, Jindal V K 2005 *Phys. Rev. B* **72** 165428
- [16] Williams P A, Papadakis S J, Patel A M, Falvo M R, Washburn S, Superfine R 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 255502-1
- [17] Cohen-Karni T, Segev L, Srur-Lavi O, Cohen S R, Joselevich E 2006 *Nature Nanotech.* **1** 36
- [18] Rochefort A, Avouris P, Lesage F, Salahub D R 1999 *Phys. Rev. B* **60** 13824
- [19] Chang T C 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 201910
- [20] Liang H Y, Upmanyu M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 165501
- [21] Zhang H W, Wang L, Wang J B, Zhang Z Q, Zheng Y G 2008 *Phys. Lett. A* **372** 3488
- [22] Zhao R J, Luo C L 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 231904
- [23] Poynting J H 1909 *Proc. R. Soc. A* **82** 546
- [24] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 6472
- [25] Wang Z, Devel M, Langlet R, Dulmet B 2007 *Phys. Rev. B* **75** 205414
- [26] Ni B, Sinnott S B, Mikulski P T, Harrison J A 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 205505
- [27] Chang X 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 086102 (in Chinese) [常旭 2014 物理学报 **63** 086102]
- [28] Treboux G, Lapstun P, Silverbrook K 1999 *J. Phys. Chem. B* **103** 1871
- [29] O'Connell M J, Eibergen E E, Doom S K 2005 *Nature Mater.* **4** 412
- [30] Nosé S 1984 *Mol. Phys.* **52** 255
- [31] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
- [32] Shen L, Li J 2004 *Phys. Rev. B* **69** 045414

# Torsional mechanical properties of $(n, n)$ - $(2n, 0)$ carbon nanotubes heterojunction\*

Han Dian-Rong<sup>1)3)</sup> Wang Lu<sup>1)</sup> Luo Cheng-Lin<sup>1)2)†</sup> Zhu Xing-Feng<sup>1)</sup> Dai Ya-Fei<sup>1)</sup>

1) (School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

2) (Jiangsu Key Laboratory on Optoelectronic Technology, Nanjing 210023, China)

3) (School of Physics and Electronic Engineering, Jiangsu Second Normal University, Nanjing 210013, China)

( Received 7 November 2014; revised manuscript received 15 December 2014 )

## Abstract

A coaxial cylindrical heterojunction of carbon tubes, which consists of alternant bands of 5- and 7-membered rings, can be formed by one armchair  $(n, n)$  carbon nanotube and one zigzag  $(2n, 0)$  carbon nanotube. The torsional mechanical properties of this kind of  $(n, n)$ - $(2n, 0)$  heterojunction constructed by the same length of armchair and zigzag nanotubes are studied by using molecular dynamics method. In order to make a comparison, the relations of the torque and axial stress to torsional angle of  $(n, n)$  and  $(2n, 0)$  carbon tubes are also systemically calculated. Moreover, the transfer process of torsional stress in the  $(n, n)$ - $(2n, 0)$  heterojunction is analyzed. Some important conclusions are obtained. Firstly, the torsional angle corresponding to the buckling point of carbon nanotubes is closely related to their torsional stiffness. The buckling angle decreases monotonically with torsional stiffness. Secondly, as the torsion develops, the torsional stress appears from the joint position due to the fact that the junction part in the  $(n, n)$ - $(2n, 0)$  heterojunction has the smallest torsional stiffness and then transfers from the joint position to both ends. The propagation velocity of the torsional stress in  $(n, n)$  nanotube which has smaller stiffness is faster than that in  $(2n, 0)$  nanotube with bigger stiffness. Finally, for the process of torsion within the elastic limit, no axial stress is produced in  $(n, n)$ - $(2n, 0)$  heterojunction during the torsion. This effect is of great significance for designing the carbon nanotube-based nano-oscillator devices.

**Keywords:** carbon nanotube, heterojunction, torsional mechanical properties, molecular dynamics

**PACS:** 61.48.De, 02.70.Ns, 81.70.Bt

**DOI:** 10.7498/aps.64.106102

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 21203097), the Natural Science Foundation of the Jiangsu Higher Education Institutions of China (Grant No. 14KJB140006), and the Priority Academic Program Development of Jiangsu Higher Education Institutions.

† Corresponding author. E-mail: [c\\_luo@njnu.edu.cn](mailto:c_luo@njnu.edu.cn)