

螺旋上升对自激发锯齿型双壁碳纳米管振荡行为的影响

曾永辉 江五贵 Qin Qing-Hua

Influence of helical rise on the self-excited oscillation behavior of zigzag @ zigzag double-wall carbon nanotubes

Zeng Yong-Hui Jiang Wu-Gui Qin Qing-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 148802 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.148802

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.148802>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphys.ac.cn/CN/Y2016/V65/I14>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

研究激光激发的声表面波与材料近表面缺陷的振荡效应

Research on the oscillation effect of near-surface metal defect based on laser-generated acoustic surface wave

物理学报.2015, 64(13): 134302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.134302>

高绒度掺硼氧化锌透明导电薄膜用作非晶硅太阳能电池前电极的研究

Study of boron-doped zinc oxide film serving as front contact with high haze used in amorphous silicon thin film solar cells

物理学报.2014, 63(2): 028801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.028801>

铜基碳纳米管薄膜的制备及其强流脉冲发射特性研究

Synthesis of CNT film on Cu and its intense pulsed emission characteristics

物理学报.2013, 62(15): 158801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.158801>

一维亥姆霍兹共振腔声子晶体中缺陷模式的实验研究

Experiments on defect mode of one-dimensional phononic crystal containing Helmholtz resonators

物理学报.2013, 62(9): 094304 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.094304>

单壁碳纳米管低温及常温下储氢行为的模拟计算研究

The grand canonical Monte Carlo simulation of hydrogen physisorption on single-walled carbon nanotubes at the low and normal temperatures

物理学报.2013, 62(3): 038801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.038801>

螺旋上升对自激发锯齿型双壁碳纳米管 振荡行为的影响*

曾永辉¹⁾ 江五贵^{1)†} Qin Qing-Hua²⁾

1) (南昌航空大学航空制造工程学院, 南昌 330063)

2) (Research School of Engineering, the Australian National University, Acton ACT 2601, Australia)

(2016年3月15日收到; 2016年4月28日收到修改稿)

运用分子动力学方法模拟了锯齿型双壁碳纳米管体系的振荡行为, 其中旋转的内管施加了不同大小的螺旋上升长度. 不同于以前关于扶手椅型碳纳米管的工作 (Zeng Y H, *et al.* 2016 *Nanotechnology* **27** 95705), 锯齿型的内管在施加了不同大小的螺旋上升长度之后, 其管壁结构会产生畸变或缺陷. 模拟过程中, 锯齿型内管在施加一定的旋转速度以后保持自由, 而固定的外管为无任何缺陷的理想锯齿型碳纳米管. 分子动力学模拟结果显示锯齿型内管的轴向振荡行为与内管施加的螺旋上升长度密切相关. 内管的振荡频率随着内管螺旋上升长度的增加而增加. 但当内管的螺旋上升长度较大时, 由于螺旋上升所引起的内管缺陷结构造成整个内管的破裂, 从而导致其无法进行稳定的轴向振荡. 模拟结果还显示, 对于无螺旋上升的理想锯齿型碳管, 虽然其轴向振荡效果非常微弱, 但却可以作为一种具有恒定旋转频率的旋转致动器. 此外, 对螺旋上升长度为 0.5 nm 的内管在不同温度下的振荡性能进行了模拟分析, 结果表明内管振荡的幅度随温度的升高而相应地增加, 但当温度超过一定的临界值后, 内管不能保持稳定的振荡.

关键词: 碳纳米管, 螺旋上升, 缺陷, 分子动力学

PACS: 88.30.rh, 43.58.Wc, 87.15.ap

DOI: 10.7498/aps.65.148802

1 引言

由于其独特的光学、电学以及力学特性, 碳纳米管 (CNT) 在当今新型的微纳机电系统领域有着非凡的潜在应用优势^[1-3]. 自 Cumings 和 Zettl^[4] 通过实验发现多壁碳纳米管具有超低的摩擦特性以来, 基于碳纳米管的吉兆赫兹 (GHz) 振荡器的开发受到了人们的广泛关注. Legoas 等^[5] 指出, 在双壁碳纳米管中, 一个拉出的内管能够在范德瓦耳斯力的作用下自动来回振荡, 且其振荡频率能达到 38 GHz. 最近, 基于碳纳米管的旋转致动装置也通过实验方法得以证实^[6]. 此后, 有许多围绕碳纳米管振荡以及旋转特性的研究工作也逐一开始展开^[7,8]. 外界认为碳纳米管优异的振荡行为得益于

管间较弱的范德华力^[9]. 但回顾以往对双壁碳纳米管振荡行为的研究, 许多学者采用的碳纳米管都是无任何缺陷的理想碳管. 在这些无缺陷的碳纳米管振荡器的相关研究中, 大多数学者^[5,10,11] 认为内管的振荡行为依赖于两管间的间距、碳管结构的公度性以及体系的温度. 而在实际生产中碳管易受到外界环境的影响而造成管壁的畸变或缺陷^[12,13], 之前一些学者在对一个有缺陷结构的内管的共轴双壁碳纳米管体系的振荡行为研究中指出, 内管缺陷的存在会显著影响内管振荡的稳定性和振荡的幅度^[14,15]. 而这些研究也仅仅局限于内管的平动, 对于一个旋转的内管, 当其管壁有畸变或缺陷结构存在时, 其振荡行为究竟如何却鲜有报道. 最近, Zeng 等^[16] 研究了一个扶手椅和锯齿型组合的双

* 国家自然科学基金 (批准号: 11162014, 11372126) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jiangwugui@nchu.edu.cn

壁碳纳米管体系的振荡行为, 其中扶手椅型的内管是旋转的且施加了螺旋上升长度, 他们发现扶手椅型的内管在施加了螺旋上升长度后可以改善其轴向的振荡行为, 但在他们给扶手椅型的内管施加了螺旋上升长度之后内管管壁并没有出现任何的缺陷结构. 在这篇文章中, 我们利用螺旋上升的方法, 给锯齿形的内管施加不同大小的螺旋上升长度, 锯齿形的内管在施加了螺旋上升长度后其管壁会产生畸变或缺陷结构. 然后, 通过分子动力学模拟的方法研究了一个旋转的锯齿型内管在管壁存在畸

变或缺陷结构的状态下其振荡行为的特性.

2 建模和模拟方法

图1是旋转的双壁碳纳米管振荡器模型的概念图, 其中内外管的两端都是开口的, 且外管在模拟中始终都是固定的, 此外内外管都是沿轴向对称分布. 两管之间的管间距为0.34 nm左右, 这是基于低摩擦振荡要求的考虑^[5,17]. 更多内外管的具体几何参数见表1.

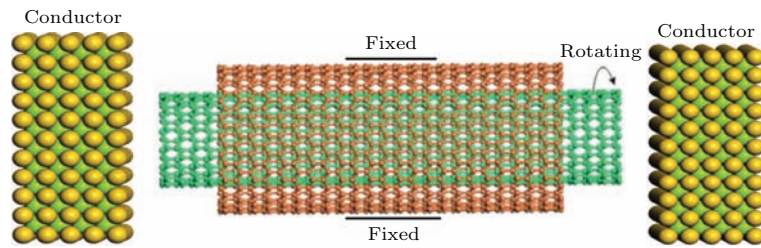


图1 (网刊彩色) 双壁碳纳米管振荡器模型示意图

Fig. 1. (color online) Simulation model of oscillator based on double-walled carbon nanotubes.

表1 碳纳米管的几何参数

Table 1. Geometric parameters of the carbon nanotubes.

| 碳管手性 (n, m)@(n, m) | 管长 0.1 nm | 管半径 0.1 nm | 管间距 0.1 nm | 螺旋上升长度 0.1 nm | 原子数 |
|-------------------------------|---------------|---------------|---------------|------------------|----------|
| (15, 0)@(24, 0) | 69.622/49.730 | 5.96/9.53 | 3.57 | 0/0 | 990/1152 |
| (15, 0)@(24, 0) | 69.572/49.730 | 5.96/9.53 | 3.57 | 5/0 | 983/1152 |
| (15, 0)@(24, 0) | 69.556/49.730 | 5.96/9.53 | 3.57 | 10/0 | 983/1152 |
| (15, 0)@(24, 0) | 69.643/49.730 | 5.96/9.53 | 3.57 | 15/0 | 983/1152 |

图2(a)是锯齿型的内管在施加螺旋上升长度后的形貌图, 这里我们将内管施加了螺旋上升长度后其两端交错的长度定义为螺旋上升长度, 为方便叙述起见, 用 h 表示螺旋上升长度, 且在模拟中删去螺旋上升长度的那部分原子, 如图2(a)的虚线框所示. 双壁碳纳米管的每根碳管的内部结构是由手性指标(n, m)参数决定的, 此次模拟选取的外管都是(24, 0)的锯齿型碳管, 内管是(15, 0)的锯齿型碳管. 图2(b)—图2(e)是施加了不同 h 的(15, 0)锯齿型碳管的管壁形貌图以及被标记原子区域的键角图, 其中图2(b)是理想的碳管结构. 我们发现, 当(15,0)的锯齿型碳管其 $h = 0.5$ nm时, 管壁的正六边形结构会产生畸变, 见图2(c). 当(15,0)的锯齿型碳管施加的 h 较大时, 比如 $h = 1$ nm或

$h = 1.5$ nm, 其管壁会有三角成键的拓扑结构以及其他缺陷结构, 如图2(d)—图2(e)所示, 类似的这些缺陷结构在之前的一些研究中已有所报道^[18].

此次模拟中, 我们通过分子动力学模拟的方法来分析旋转的双壁碳纳米管体系的振荡行为. 对于模拟的双壁碳纳米管模型, 系统内的相互作用势函数采用的是经验键序势函数 (adaptive intermolecular reactive empirical bond order)^[19,20], 它可以同时描述碳原子之间共价键的相互作用和以长程范德瓦耳斯力相互作用的力场, 其表达式如下:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{\text{REBO}} + E_{ij}^{\text{LJ}} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{\text{TORSION}} \right], \quad (1)$$

其中 E_{ij}^{REBO} (其中 REBO 是 reactive empirical bond order 的缩写) 是碳纳米管内部原子之间的相互作用; $E_{ijkl}^{\text{TORSION}}$ 是碳纳米管各种二面角的作用势; Lennard-Jones (LJ) 势函数描述内外碳管上原子间的范德瓦耳斯力的作用, 表达如下:

$$E_{ij}^{LJ} = 4\varepsilon[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6], \quad r_{ij} \leq r_c, \quad (2)$$

式中的 ε 和 σ 分别是势阱深度参数和作用势等于 0 时原子间的距离参数, $\varepsilon = 0.0029$ eV, $\sigma = 0.34$ nm. 截断系数 r_c 一般取 2.2σ 的长度或更长 [21,22], 模拟中取 $r_c = 0.1$ nm, r_{ij} 是原子之间的距离. 在

模拟起初阶段, 整个体系经过能量最小化后, 利用 Nosé-Hoover 热浴法使整个体系在室温 300 K 的温度下弛豫 60 ps, 这一阶段体系处于正则系综 (NVT) 条件下. 然后在此温度下, 给内管施加一个大小为 30 eV 的扭矩, 使内管的初始旋转频率达到 300 GHz 左右后撤掉该扭矩, 让整个体系处于微正则系综 (NVE) 条件下. 模拟中时间分析步长选为 0.001 ps, 总共的模拟时长为 3000 ps. 所有的分子动力学模拟均基于大规模原子分子并行模拟器 (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator [23]).

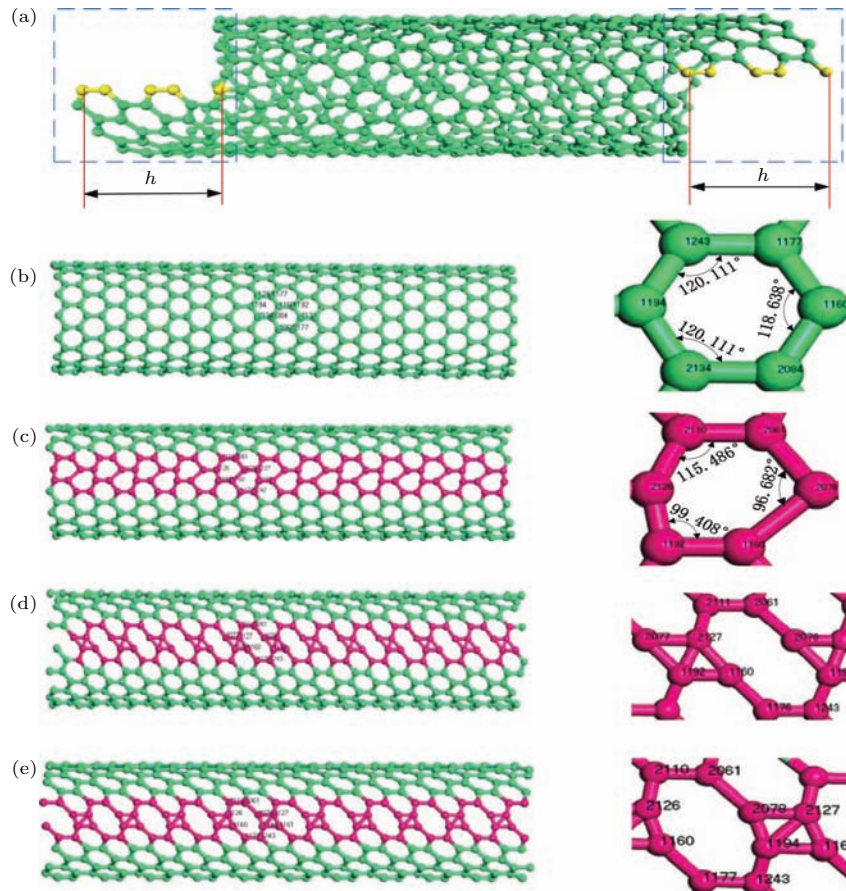


图2 (网刊彩色) 不同螺旋上升长度 (h) 的 (15, 0) 的锯齿型碳管形貌图 (a) 施加了 h 的碳管; (b) 无 h 的理想碳管; (c) $h = 0.5$ nm 的碳管; (d) $h = 1$ nm 的碳管; (e) $h = 1.5$ nm 的碳管
 Fig. 2. (color online) Schematics of the (15, 0) tubes with different length of helical rise (h): (a) The tube with helical rise; (b) the tube with $h = 0$ nm; (c) the tube with $h = 0.5$ nm; (d) the tube with $h = 1$ nm; (e) the tube with $h = 1.5$ nm.

3 结果与讨论

图3是施加不同 h 的 (15, 0) 锯齿型内管质心在 NVE 之前的位移历程图. 对于四种不同 h 的双壁碳纳米管模型, 内管在能量最小化过程中, 它们

的质心位置大致相同, 这一过程是为了使得整个体系保持在最稳定的状态. 之后整个双壁碳纳米管体系在 NVT 条件下, 经过 Nosé-Hoover 热浴体系温度保持在室温 300 K 左右, 此时, 由于原子的热运动, 内管质心的位置会随时间的变化而波动. 随后给内管施加 30 eV 的扭矩, 使内管的初始旋转频率

稳步地达到300 GHz左右,在给内管施加扭矩的过程中,内管沿轴向的运动会被限制,见图3的扭矩阶段.经过上述这几个阶段后,在内管以300 GHz左右的初始旋转频率下,让整个体系处于NVE的条件下考察旋转的内管其自激发的轴向振荡行为.图4和图5是NVE过程中不同 h 的内管其质心位置随时间变化的历程图.在图4中,对于具有 h 的内管,其质心的位置随时间的变化呈现周期性的简谐波动;但对于 $h = 0$ nm的内管,其质心的位置几乎没有发生变化.如果内管施加的 h 较大($h = 1.5$ nm),内管质心的位置随时间的变化呈现非常杂乱无章的波动,如图5所示.

为此,我们在模拟中特别考察了内管在刚开始模拟时($t = 0$ ps)以及刚进入NVE条件下

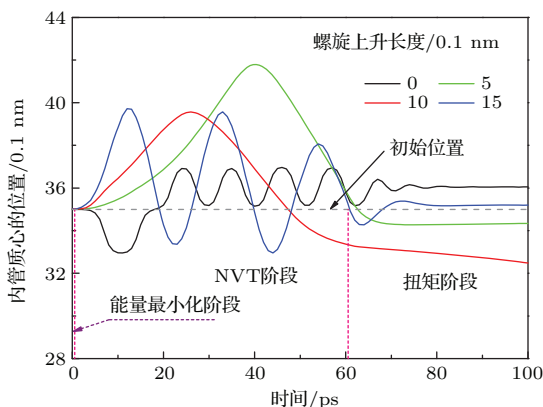


图3 (网刊彩色) NVE之前不同 h 的内管质心位置的历程图

Fig. 3. (color online) Histories of position of mass center of inner tubes (MCITs) with different h before NVE.

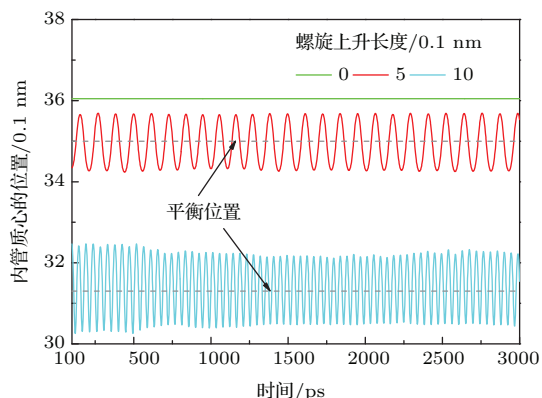


图4 (网刊彩色) NVE过程中不同 h 的内管质心位置的历程图

Fig. 4. (color online) The MCITs of the inner tubes with different h during the NVE.

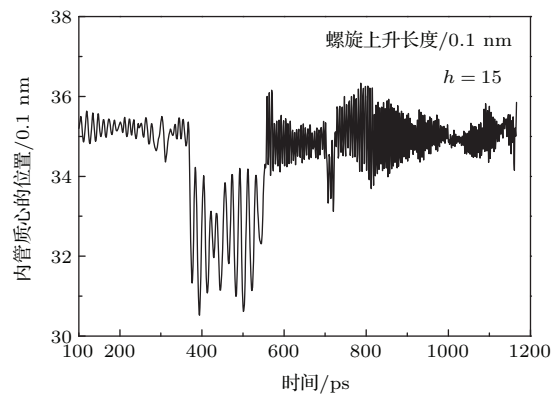


图5 NVE过程中 $h = 1.5$ nm的内管质心位置的历程图

Fig. 5. The MCITs of the inner tube with $h = 1.5$ nm during the NVE.

($t = 100$ ps)内管管壁结构的变化情况.图6是不同 h 的内管管壁被标记原子区域的键角图.如图6(a)所示,对于 $h = 0$ nm的理想碳管, $t = 0$ ps时管壁六边形结构的键角基本在 120° ;当 $t = 100$ ps时,其键角也在 120° 左右,其中最大与最小的键角差值为 0.714° ,这说明内管刚进入NVE环境时,此时 $h = 0$ nm的内管其管壁的畸变程度很小依然保持着与初始时相一致的理想结构.当内管的 $h = 0.5$ nm时(见图6(b)),内管管壁的六边形结构在 $t = 0$ ps时畸变程度很严重;但在 $t = 100$ ps时,内管管壁六边形结构的畸变程度有所缓轻,这主要是由于体系在NVT下原子的热运动缓解了内管由螺旋上升所造成的扭曲状态,但此时的内管相比于 $h = 0$ nm的理想碳管,其管壁还是存在较大程度的畸变,其中最大与最小的键角差值为 7.037° .图6(c)和图6(d)分别是 $h = 1$ 和 1.5 nm的内管管壁键角图,我们发现内管在较大的 h 下,其管壁都会出现缺陷结构($t = 0$ ps);所不同的是, $h = 1$ nm的内管在 $t = 100$ ps时,内管管壁的缺陷结构与初始时相比并没有向周围扩展,但对于 $h = 1.5$ nm的内管在刚进入NVE时($t = 100$ ps),其管壁的缺陷结构已向周围扩展得较为严重.图7是以 $h = 0.5$ nm的内管为例分析其轴向受力的情况,内管在施加了螺旋上升长度之后,整个内管的管壁结构处于一种非匀称的结构状态,即内管的管壁结构有理想的六边形管壁结构区域以及畸变状态下的管壁结构区域,这种非匀称结构的内管其轴向的合力要大于 $h = 0$ nm的理想内管,对于 $h = 1$ 和 1.5 nm的内管其轴向的受力亦是如此.因此,在处于NVE的条件下时,体系在没有任何外部能量的输入下, $h = 0$ nm的理想内管要想突破两端较强

的边界阻碍 [24,25] 而产生轴向的振荡就变得较为困难, 这也即图 4 中 $h = 0$ nm 的内管, 其振荡幅度几乎为 0. 但对于 $h \neq 0$ nm 的内管, 其本身非匀称结构的管壁在较大的轴向合力下可以打破边界的阻碍而产生较小幅度的轴向振荡; 然而, 如果内管的 h 较大时, 比如 $h = 1.5$ nm 的内管, 其管壁的破坏程度随着模拟的进行会变得越来越严重, 直至最后因整根内管的破裂而模拟终止, 在图 5 中我们也可以看到内质心的位置非常杂乱无章. 显然, 不同大小的螺旋上升长度对内管的轴向振荡有很大的影响. 从内管的振荡频率来看, $h = 0.5$ 和 1 nm 的内管, 它们振荡频率的大小分别为 8.97 和 22.41 GHz, 但对于 $h = 1.5$ nm 的内管由于在整个模拟过程中

内管不稳定地振荡, 其振荡频率已无法确定. 虽然 $h = 1$ nm 的内管振荡频率要大于 $h = 0.5$ nm 的内管, 但 $h = 0.5$ nm 的内管振荡的平衡位置 (见图 4) 与初始时的位置 (见图 3) 相一致, 而 $h = 1$ nm 的内管平衡位置却始终偏离初始位置的一侧. 与之前的研究 [16] 相比, $h = 0.5$ 和 1 nm 的锯齿形内管在 NVE 下能一直保持稳定的振荡, 而施加了 h 的扶手椅型内管开始稳定振荡的时间要晚于锯齿形的内管. 此次研究, 我们也是首次通过螺旋上升的方法给锯齿形的内管施加螺旋上升长度使内管的管壁产生畸变或缺陷结构, 在 NVE 条件下考察畸变或缺陷结构的内管的轴向振荡行为.

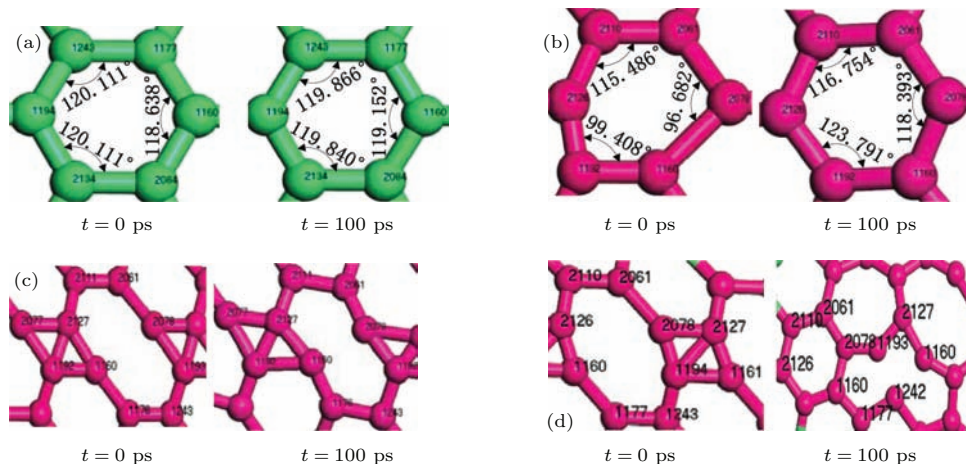


图 6 (网刊彩色) 不同 h 的内管管壁被标记原子区域的键角图 (a) 无 h 的理想碳管; (b) $h = 0.5$ nm 的碳管; (c) $h = 1$ nm 的碳管; (d) $h = 1.5$ nm 的碳管

Fig. 6. (color online) The labeled shell structure of four inner tubes vary with time: (a) The tube with $h = 0$ nm; (b) the tube with $h = 0.5$ nm; (c) the tube with $h = 1$ nm; (d) the tube with $h = 1.5$ nm.

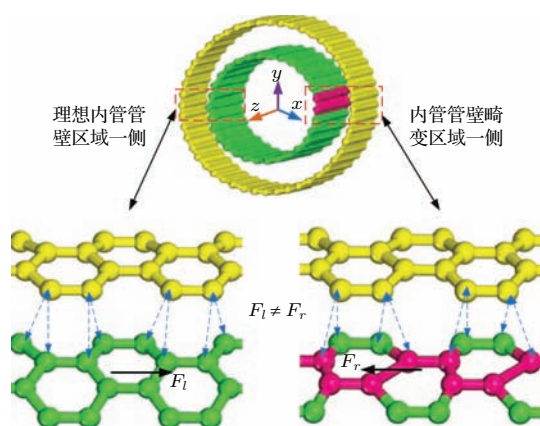


图 7 (网刊彩色) 内管 $h = 0.5$ nm 的轴向受力分析

Fig. 7. (color online) The axial force of the inner tube with $h = 0.5$ nm.

此外, 我们还考察了四种不同 h 的双壁碳纳米管模型, 研究了它们旋转频率的变化情况. 图 8 是

不同 h 的内管旋转频率的变化曲线图, 可以看出 $h = 0$ 和 0.5 nm 的内管其旋转频率几乎没有下降, 而 $h = 1$ nm 的内管旋转频率有较大幅度的下降, 这主要是因为 $h = 0$ 和 0.5 nm 的内管, 在模拟中它们的管壁都没有产生缺陷结构且振荡的幅度都比较小, 尤其是 $h = 0$ nm 的内管, 其振荡幅度几乎为 0; 但对于 $h = 1$ nm 的内管, 在模拟中其管壁的缺陷结构会使内管的能量产生较大的损耗, 所以其旋转频率会有一定幅度的衰减. 之前, 也有学者 [26,27] 指出当碳纳米管有缺陷结构存在时, 内管在振荡过程中会产生较大的能量损耗. 特别是对于 $h = 1.5$ nm 的内管, 如图 9 所示, 由于管壁的缺陷结构会不断向周围扩展, 其旋转频率的衰减更为显著, 直至因整根内管的破裂而导致模拟的结束 (见图 9 中的插图).

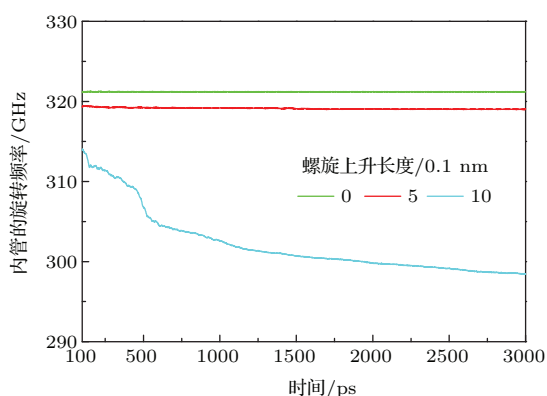


图8 (网刊彩色) NVE过程中不同 h 的内管的旋转频率曲线

Fig. 8. (color online) Rotational frequencies of the inner tubes with different h during the NVE.

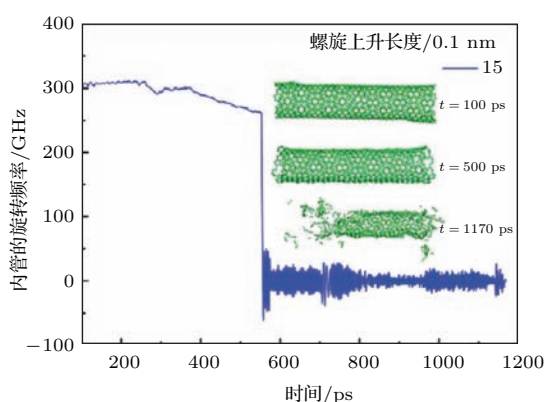


图9 NVE过程中 $h = 1.5$ nm的内管的旋转频率曲线

Fig. 9. Rotational frequency of the inner tube with $h = 1.5$ nm during the NVE.

Hou等[28]通过分子动力学模拟了温度对内管固定而外管自由旋转的理想双壁碳纳米管体系的影响,他们发现当体系的温度高于临界温度后,外管的运动具有很大的随机性,但当体系的温度低于这个临界温度时,外管运动的方向具有可操控性.基于此,我们以 $h = 0.5$ nm的内管的双壁碳纳米管的旋转系统为例,模拟了内管在不同温度下的自激发振荡行为.图10显示了内管在不同温度下其质心位置随时间变化的情况.从图10中可以看出温度由200 K上升至400 K时,内管稳定振荡的幅度随着温度的升高而相应地增加,这是由于随着温度的升高两管之间形成的势垒对其内管轴向振荡的阻碍影响相应地减弱[28].但随着温度的进一步升高(600 K时),内管在高温高速的旋转下,由于碳原子热振动振幅的增大和高能量声子的激发导致内管质心的位置非常的随机,导致内管在整个振动的过程中表现得很不稳定.

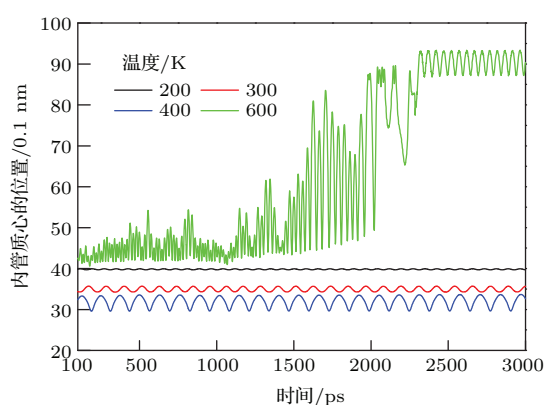


图10 (网刊彩色) NVE过程中 $h = 0.5$ nm的内管在不同温度下其质心位置的变化情况

Fig. 10. (color online) Influence of temperature on the MCITs of the inner tube with $h = 0.5$ nm during the NVE.

4 结 论

本文通过分子动力学方法模拟了旋转的双壁碳纳米管体系的振荡行为,其中锯齿型内管是旋转的,且施加了不同大小的螺旋上升长度.当锯齿型的碳管施加不同大小的螺旋上升长度时,其管壁结构会产生畸变或缺陷.模拟结果显示,内管的振荡行为对螺旋上升长度非常敏感.对于无螺旋上升的理想碳管,虽然其轴向振荡效果非常微弱,但它却可以作为一个以恒定旋转频率旋转的理想致动装置.当内管施加的螺旋上升长度为0.5和1 nm时,旋转的双壁碳纳米管体系可以充当一个稳定振荡的吉兆赫兹振荡器.但如果当锯齿型的碳管施加的螺旋上升长度较大时,比如1.5 nm,在模拟过程中内管会因管壁缺陷的扩展而导致破裂.此外,对于螺旋上升长度为0.5 nm的内管在不同体系温度下的振荡行为,也进行了相应的模拟,结果表明内管稳定振荡的幅度随温度的升高而相应地增加,但温度过高时内管的振荡变得很不稳定.

参考文献

- [1] Zou J, Ji B H, Feng X Q, Gao H J 2006 *Nano Lett.* **6** 430
- [2] Qin Z, Zou J, Feng X Q 2008 *J. Comput. Theor. Nanos.* **5** 1403
- [3] Zou J, Ji B H, Feng X Q, Gao H J 2006 *Small* **2** 1348
- [4] Cumings J, Zettl A 2000 *Science* **289** 602
- [5] Legoas S B, Coluci V R, Braga S F, Coura P Z, Dantas S O, Galvao D S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 055504

- [6] Fennimore A, Yuzvinsky T, Han W, Fuhrer M, Cumings J, Zettl A 2003 *Nature* **424** 408
- [7] Cai K, Yin H, Qin Q H, Li Y 2014 *Nano Lett.* **14** 2558
- [8] Servantie J, Gaspard P 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 13831
- [9] Zheng Q, Liu J Z, Jiang Q 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245409
- [10] Guo W L, Guo Y F, Gao H J, Zheng Q S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 125501
- [11] Cook E H, Buehler M J, Spakovszky Z S 2013 *J. Mech. Phys. Solids*. **61** 652
- [12] Peng D F, Jiang W G, Peng C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 146102 (in Chinese) [彭德锋, 江五贵, 彭川 2012 物理学报 **61** 146102]
- [13] Zhang L J, Hu H F, Wang Z Y, Chen N T, Xie N, Lin B B 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 077209 (in Chinese) [张丽娟, 胡慧芳, 王志勇, 陈南庭, 谢能, 林冰冰 2011 物理学报 **60** 077209]
- [14] Liu P, Gao H J, Zhang Y W 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 083107
- [15] Li J 2011 *Adv. Mater. Res.* **308** 584
- [16] Zeng Y H, Jiang W G, Qin Q H 2016 *Nanotechnology* **27** 095705
- [17] Legoas S B, Coluci V R, Braga S F, Coura P Z, Dantas S O 2004 *Nanotechnology* **15** 184
- [18] Iijima S 1993 *Mat. Sci. Eng. B* **19** 172
- [19] Brenner D W 1992 *Phys. Rev. B* **46** 9458
- [20] Brenner D W, Shenderova O A, Harrison J A, Stuart S J, Ni B, Sinnott S B 2002 *J. Phys. -Condens. Mat.* **14** 783
- [21] Voter A F, Doll J D 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 5832
- [22] Doll J D, McDowell H K 1982 *J. Chem. Phys.* **77** 479
- [23] Lammmps molecular dynamics simulator, <http://lammmps.sandia.gov> 2014
- [24] Guo Z, Chang T, Guo X, Gao H 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 105502
- [25] Guo Z, Chang T, Guo X, Gao H 2012 *J. Mech. Phys. Solids* **60** 1676
- [26] Song H Y, Zha X W 2009 *Phys. Lett. A* **373** 1058
- [27] Guo W L, Zhong W Y, Dai Y T, Li S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 075409
- [28] Hou Q W, Cao B Y, Guo Z Y 2009 *Nanotechnology* **20** 495503

Influence of helical rise on the self-excited oscillation behavior of zigzag @ zigzag double-wall carbon nanotubes*

Zeng Yong-Hui¹⁾ Jiang Wu-Gui^{1)†} Qin Qing-Hua²⁾

1) (School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

2) (Research School of Engineering, the Australian National University, Acton ACT 2601, Australia)

(Received 15 March 2016; revised manuscript received 28 April 2016)

Abstract

Oscillation behaviors of oscillators consisting of defect-free multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) have been extensively studied, owing to the operating frequency of the nanotubes being able to reach up to gigahertz. However, there exist defects in most carbon nanotubes, which will affect the friction force between the walls of nanotubes. It is therefore critical to investigate the oscillation characteristics of the MWCNT-based oscillators containing a distorted or defective rotating tube, for the design of MWCNTs-based oscillators.

Unlike the case in the armchair carbon nanotubes (Zeng Y H, *et al.* 2016 *Nanotechnology* **27** 95705), the existence of the helical rise in the zigzag-type nanotubes can induce aberrant or defective shell structures. In this paper, the oscillatory behaviors of zigzag@zigzag double-wall carbon nanotubes containing a rotating inner tube with different helical rises are investigated using the molecular dynamics method. In all the simulation modes, the adaptive intermolecular reactive empirical bond order potential is used in this work for both the covalent bond between carbon atoms and the long-range van der Waals interaction of the force field. The perfect zigzag outer tube is assumed to be fixed while the zigzag inner tube is free after it has been rotated by a torque. At the beginning of the simulation, the whole system is heat bathed at a temperature around 300 K for 60 ps, to gently increase the whole system temperature to around 300 K after the energy minimization. The total number of particles, the system volume, and the absolute temperature are kept unchanged for 60 ps. Then we apply a torque of 30 eV to the inner tube under the constant temperature. After the rotation frequency of the inner tube reaches around 300 GHz, we remove the torque of inner tube and let the whole system be under a constant energy condition. The time steps for all simulations are all chosen to be 1 fs. The total time for the simulation is 3000 ps.

It is found that the oscillatory behavior of the inner tube is dependent on the helical rise. The simulation results show that the oscillation frequency of the inner tube increases with the length of helical rise increasing. However, as the helical rise is further increased, the oscillation becomes awful because of the breakage of the inner tube with defects. Moreover, the zigzag@zigzag double-wall carbon nanotubes without any helical rise may be used as an ideal rotating actuator because the inner tube can rotate at an approximately constant rotational frequency. The influence of the system temperature on the oscillatory behavior of inner tube with a helical rise of 0.5 nm is also investigated. The results show that the oscillation amplitude of the inner tube increases with temperature increasing, but the oscillation of the inner tube is extremely unstable if the temperature is higher than a critical value.

Keywords: carbon nanotube, helical rise, defect, molecular dynamics

PACS: 88.30.rh, 43.58.Wc, 87.15.ap

DOI: 10.7498/aps.65.148802

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11162014, 11372126).

† Corresponding author. E-mail: jiangwugui@nchu.edu.cn