

碳纳米管内 Ni 纳米线的螺旋度与热稳定性研究*

杜玉光 张凯旺[†] 彭向阳 金福报 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)

(2011 年 12 月 29 日收到; 2012 年 2 月 29 日收到修改稿)

本文采用分子动力学模拟方法研究了扶手型碳纳米管包裹 Ni 纳米线的复合结构, 主要讨论内部 Ni 纳米线的螺旋度和热稳定性. 结果表明, Ni 纳米线为多壳层螺旋结构, 各壳层是由多条 Ni 原子链螺旋而成, 不同层的螺旋度不同, 内层的螺旋度明显大于外层. 当每层的 Ni 原子链条数为 3 的整数倍时, 其螺旋度最大. Ni 纳米线的螺旋度与碳纳米管的管径相关, 各层螺旋度的大小随管径的增加有明显的周期性变化. 碳纳米管对 Ni 纳米线有很好的保护作用, 即使是高温对 Ni 纳米线的结构及螺旋度也影响很小.

关键词: Ni 纳米线, 碳纳米管, 分子动力学

PACS: 61.46.Km, 61.46.Fg, 65.80.-g

1 引言

自 1993 年实现碳纳米管 (carbon nanotubes, CNTs) 的填充以来^[1], 实验分析和理论模拟表明, 在碳纳米管量子空腔中填充其他物质所得复合结构体系具有独有的结构和物化性质, 能够明显地改善碳纳米管的电导、热导和机械性能等^[2-4], 且能增强抗氧化性, 还可用做扫描探针材料或者应用于高端精密仪器的制备. 填充磁性金属物质的复合结构在电子应用、数据存储、生物技术和信号传输领域也有很大的发展空间. 人们已经发明很多方法来实现碳纳米管的填充, 如毛细填充法^[1]、电弧放电法^[5,6]、催化热解法^[7]、湿化学法^[8-10]、模板法^[11]及有机物热解法^[12]等.

人们已经对独立的金属纳米线和碳纳米管包裹金属纳米线的复合结构进行了广泛的计算模拟研究, Tosatti 等^[13,14]采用分子动力学模拟方法对超细 Al 和 Pb 纳米线的非晶结构进行了研究, 发现当纳米线直径降低到一个临界值后, 金属纳米线的结构是一种多层壳层螺旋结构. 在实验中, Kondo 和 Takayanagi^[15]用电子束轰击 Au 薄膜制备出直

径在 0.6 nm 至 1.3 nm, 长度为 3 nm 至 15 nm 的 Au 纳米线, 并观测到这些纳米线为多层壳层螺旋结构. 张凯旺等^[16]采用分子动力学模拟方法研究了碳纳米管内 Au 纳米线的结构和热稳定性. Kosmider 等^[17]对氩团簇在不同类型碳纳米管内的结构进行了分子动力学模拟, 发现氩团簇在 (10, 10) 和 (15, 15) 碳纳米管内形成了含有中心原子链的多层壳层结构, 而在 (20, 0) 碳纳米管内中心的原子链是双螺旋链结构. 张建民等^[18]采用密度泛函理论对 (10, 0) 内填充的 FeCo 纳米线的输运性质进行了详细的分析. Li 等^[19]采用蒙特卡罗方法对碳纳米管填充 Ni 纳米线进行了研究, 主要讨论了碳原子吸附 Ni 原子的过程, 发现 Ni 原子要经过团聚 — 进入 — 扩散过程直到与管内壁接触, 而且只有在碳纳米管的直径大于 0.76 nm 时, Ni 原子才能被吸入碳纳米管内形成多层壳层螺旋结构. 显然若能对这类结构的内部细节进行分析将非常有实验指导作用. 这种结构与螺旋的纳米条带相类似, 能有效的阻止声子的输运从而抑制体系的热导率^[20], 为设计特定功能的量子器件提供新的思路.

本文主要讨论扶手型碳纳米管内 Ni 纳米线的螺旋情况, 采用键对分析技术和径向分布函数分析

* 国家自然科学基金 (批准号: 10974166, 10774127) 和湖南省教育厅重点项目 (批准号: 09A094, 10A118) 资助的课题.

[†] E-mail: kwzhang@xtu.edu.cn

碳纳米管内 Ni 纳米线的结构热稳定性, 结果表明, 碳纳米管包裹的 Ni 纳米线为多壳层螺旋结构, 其螺旋度与碳纳米管的管径相关, 且随着碳纳米管管径的增加 Ni 纳米线的螺旋度呈周期变化, 同时碳纳米管对 Ni 纳米线有很好的保护作用. 我们的模拟结果对实验上制备金属纳米线及发现它们新的应用具有一定的指导意义.

2 模型与计算方法

本文的研究方法是, 在不同管径的扶手椅型碳纳米管端口放置一定原子数的 Ni 纳米团簇, 采用分子动力学方法^[21-23]模拟 Ni 纳米团簇在高温下由于毛细作用吸入碳纳米管内, 再经退火形成稳定碳纳米管包裹 Ni 纳米线复合结构的行为, 并考查碳纳米管包裹的 Ni 纳米线结构的螺旋度情况. 模拟过程存在三种原子间的相互作用: C-C, Ni-Ni 和 C-Ni. 其中 C-C 的相互作用由 Tersoff 势^[24,25]来描述, Tersoff 按照 Abell 的泛函势模型形式给出了 Morse 型的 Tersoff 势函数, 这是一个键合强度依赖于周围原子配置的多体势函数, 可以很好地描述表面重构能, 能比较好地描述碳纳米管性质而被广泛应用^[16,23,26]. Ni-Ni 的相互作用由 Tight Binding 势来描述^[21], Tight Binding 势是从第一性原理出发, 以局域密度近似和二阶动量矩近似为基础, 在处理 d 态电子的过渡金属晶体结构中表现出很大的优势^[27,28]. 采用 Lennard-Jones 势来描述 C-Ni 的互相作用, Lennard-Jones 势因其计算简单而被广泛用于描述凝聚态物质之间的相互作用, 可以很好的描述碳纳米管与 Ni 原子的相互作用^[16,19,23]. 其表达式为

$$V = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \\ (\sigma = 0.357\text{nm}, \epsilon = 0.0688\text{eV})^{[29,30]}. \quad (1)$$

分子动力学模拟采用正则系综 (NVT), 自由边界条件, 运动方程的数值求解使用 Gear 五阶预测校正算法, 截断半径是 1.0 nm, 模拟步长是 0.5 fs. 我们在碳纳米管开口端放置 Ni 纳米团簇后进行 1200 K 高温弛豫 20 万步 (100ps), Ni 纳米团簇在毛细作用下缓慢被吸入碳纳米管内形成纳米线, 然后以 25 K/ps 的速率高温退火至室温 300 K 得到稳定复合结构. 碳纳米管在弛豫和退火的过程中另一端被固定, 仅考虑碳纳米管对 Ni 纳米线的作用.

3 计算结果与讨论

3.1 碳纳米管内 Ni 纳米线的结构与螺旋度

采用分子动力学模拟方法分别得到 (5, 5) 至 (22, 22) 共 18 种扶手椅型碳纳米管填充 Ni 纳米线形成的复合结构, 经过高温弛豫和退火至室温的过程, 实现碳纳米管对 Ni 纳米线的包裹, 复合结构我们简单记作 Ni@CNT (m, m). 图 1 为不同管径扶手椅型碳纳米管包裹 Ni 纳米线的复合结构模拟结果. 模拟计算发现, Ni 原子不能通过毛细引力作用被吸入 CNT (5, 5) 或更小管径的扶手椅碳纳米管内, CNT (5, 5) 的管径为 0.67 nm, 小于 0.76 nm, 验证了 Li 等^[19]的结论; CNT (6, 6) 的管径为 0.81 nm, 大于 0.76 nm, 碳纳米管的中心轴上形成 1 条 Ni 原子链, Tapia^[2]、张建民^[31]等对这类结构的能带和态密度进行了计算. 随着碳纳米管管径的增大, 碳纳米管内的 Ni 纳米线为多层壳层螺旋结构, 很多研究组做了相关的研究^[14,32-34]. 细致地分析我们的模拟结果发现, CNT (7, 7) 内的 Ni 纳米线是由 3 条原子链螺旋构成的壳层结构, 原子链的螺旋程度较大. CNT (8, 8) 内的 Ni 纳米线是 5 条 Ni 原子链螺旋构成的壳层结构. CNT (9, 9) 内的 Ni 纳米线是 6 条 Ni 原子链壳层螺旋结构的中心又加 1 条 Ni 原子链, 我们记作 (6/1)Ni 纳米线. CNT (10, 10) 内的 Ni 纳米线是 2 壳层螺旋结构, 内层是 3 条螺旋 Ni 原子链, 外层是 9 条螺旋 Ni 原子链, 我们记作 (9/3)Ni 纳米线. CNT(11, 11) 内的 Ni 纳米线是 2 壳层螺旋 (11/5) Ni 纳米线, CNT(12, 12) 则包裹 (11/6) Ni 纳米线, CNT (13, 13) 包裹 3 壳层螺旋 (13/8/3) Ni 纳米线. CNT(14, 14) 包裹的 Ni 纳米线也貌似壳层螺旋结构, 但仔细观察发现, Ni 纳米线中的每条 Ni 原子链的螺旋度很小, 与 Ni 金属的晶体 (1, 0, 0) 方向的结构相似. CNT(15, 15) 包裹的是 3 壳层螺旋加中心 1 条原子链的 (16/11/6/1) Ni 纳米线. CNT(16, 16) 包裹 4 壳层螺旋 (19/14/8/3) Ni 纳米线. CNT(17, 17) 包裹的 Ni 纳米线与 CNT (14, 14) 所包裹的 Ni 纳米线结构相似. CNT(18, 18) 包裹的 Ni 纳米线是 4 壳层螺旋与中心一条原子链的结构. CNT(19, 19) 包裹的 Ni 纳米线也是多壳层螺旋结构, 但是每层上的 Ni 原子链的螺旋度降低, 而且各层中的 Ni 原子链螺旋程度基本一致. CNT(20, 20), (21, 21) 和 (22, 22) 包裹的 Ni 纳米线和 CNT (14, 14) 包裹的 Ni 纳米线的结构相似.

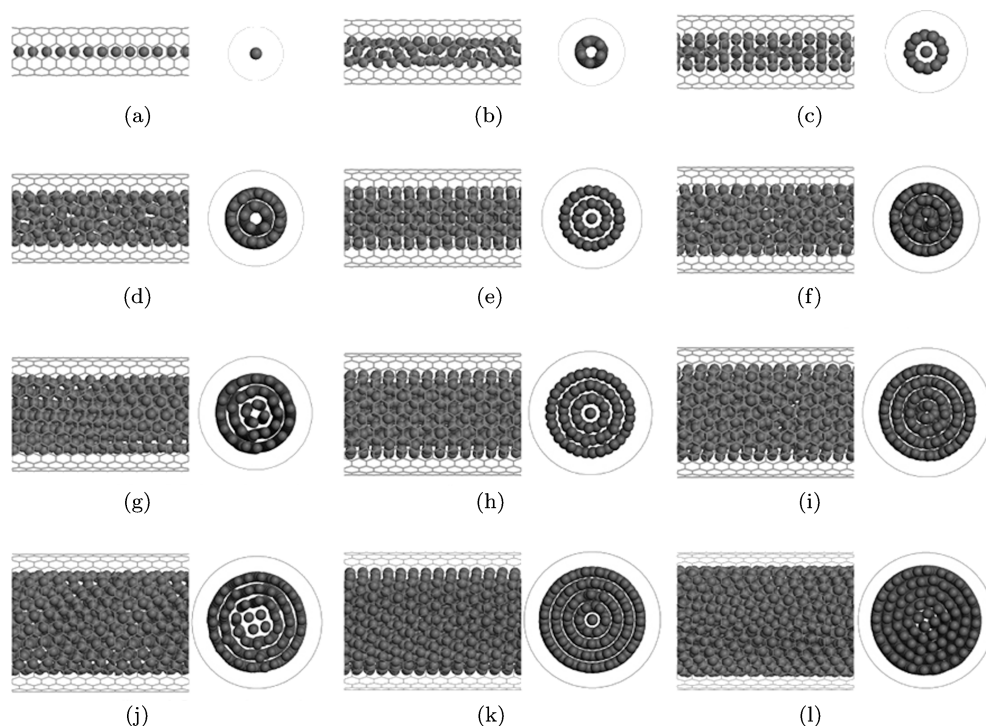


图1 扶手椅型碳纳米管包裹 Ni 纳米线的复合结构

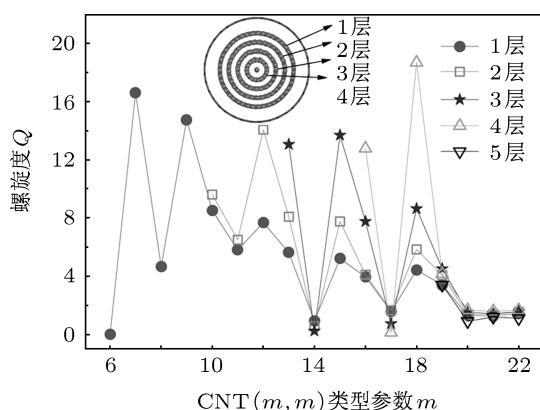


图2 不同管径碳纳米管中 Ni 纳米线的螺旋度, 上部小图是复合结构的横截图

为了对 Ni 原子链的螺旋程度进行量化, 我们定义 Ni 纳米线的螺旋度

$$Q = \frac{\theta}{L}, \quad (2)$$

螺旋度能够描述各壳层结构中 Ni 原子链绕 CNT 轴向的螺旋程度, 其中 θ 为 Ni 原子链沿 CNT 轴向延伸时所绕过的角度, L 为 Ni 原子链沿 CNT 轴向延伸的长度. 为叙述简练, 我们省略 θ 的量纲单位, θ 值的大小表示 Ni 原子链沿 CNT 轴向绕过角度的度数, 则螺旋度 Q 是每 0.1 nm 的长度绕过角度的度数.

我们对各壳层结构的螺旋度进行了比较. 图 2 为不同管径的扶手椅型碳纳米管中 Ni 纳米线的螺旋度. 为方便表述, 我们将壳层从外层到内层用数字进行标记, 最外层为 1 层. 从图 2 中可以看出, 不同类型的碳纳米管内 Ni 原子链的螺旋度也不同, 同种管型碳纳米管内 Ni 纳米线各壳层结构中 Ni 原子链的螺旋度也有很大的差别. 我们以 CNT (13, 13) 内的 Ni 纳米线为例加以说明, 1 层、2 层及 3 层的螺旋度 (Q) 分别为 5.63, 8.08, 13.06, 内层的螺旋度明显大于外层, 其他的复合结构也有同样的规律. 还可发现螺旋度有明显的起伏周期性, CNT(7, 7), (9, 9), (12, 12), (13, 13), (16, 16) 和 (18, 18) 所包裹的 Ni 纳米线最内层的螺旋度是起伏的最大值, 且这些内层的 Ni 原子链条数均为 3 的整数倍 $3n$ 条 (n 为整数), 即当单层中 Ni 原子链的条数是 $3n$ 条时, 其螺旋度最大. CNT (14, 14) 和 (17, 17) 内的 Ni 纳米线的结构中每条 Ni 原子链的螺旋度都很小, 从 CNT 轴向观察, 类似于 Ni 金属晶体结构 (1, 0, 0) 方向的结构. 当碳纳米管的管径大到一定程度时, 这种螺旋度的周期起伏将会消失, 如 CNT(20, 20), (21, 21) 和 (22, 22) 内的 Ni 纳米线仍是多壳层螺旋结构, 但各层中 Ni 原子链的螺旋度都很低且数值基本相同, Ni 纳米线的结构类似于

晶体结构, C 原子与管内的 Ni 原子之间的距离增大, 之间的相互作用力减小, 管壁对 Ni 纳米线结构的约束力明显降低. 所以随着管径的增加, 碳纳米管内的 Ni 纳米线的金属结构越来越明显.

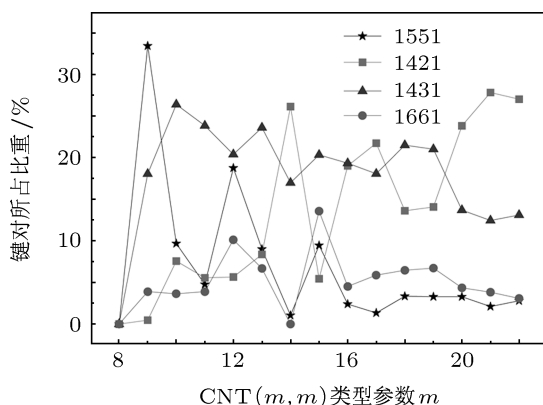


图3 不同管径碳纳米管包裹的 Ni 纳米线的键对比重

为研究 Ni 纳米线的短程结构, 我们采用键对分析技术^[35,36]对 Ni 纳米线的结构进行讨论. 键对分析能够反映出晶体的细微结构, 通常 fcc 结构的特征键是 1421, 在 hcp 结构中含有等量的 1422 和 1421 键对, bcc 结构的特征键对是 1441 和 1661 键对, 1551 键对可以表征二十面体结构, 1541 键表征一种扭曲的五重对称结构, 是缺陷二十面体的特征键对, 1201 和 1311 键对是菱形对称结构的特征键对, 1431 键对表征一定程度上的无序性. 图 3 是 CNT (8, 8) 至 CNT (22, 22) 内 Ni 纳米线结构中主要的键对所占比重. CNT (6, 6) 包裹的 Ni 纳米线仅有一条 Ni 原子链, 在 (7, 7) 和 (8, 8) 内的 Ni 纳米线主要有三种键对: 1211, 1311 和 1312, 说明此 Ni 纳米线的结构以菱形对称为主. CNT(9, 9) 包裹的 Ni 纳米线中, 键对 1321 和 1551 所占的比例分别是 39.94%和 33.40%, 表明 Ni 纳米线以菱形结构为主. 在 CNT (14, 14), (17, 17), (20, 20), (21, 21) 和 (22, 22) 包裹的 Ni 纳米线中, fcc 结构的特征键对 1421 所占的比例最大, 与此类碳纳米管内 Ni 纳米线的螺旋度几乎接近于零是相符合. Ni 纳米线的结构受碳纳米管空腔的影响, 会产生很多无序的结构, 所以说在不同的 Ni 纳米线中键对 1431 的比例都较高, 随着管径的增加, 碳纳米管对内部 Ni 纳米线的影响降低, 管径较大的 Ni 纳米线中键对 1431 所占的比例会有所降低. Ni 纳米线中键对 1551 和 1661 的比例曲线的波动较大. 但是键对 1321 在不同碳纳米管包裹的 Ni 纳米线中所占

比例变化较小, 表明不同类型碳纳米管内 Ni 纳米线中所含的菱形结构基本相同. 碳纳米管包裹的 Ni 纳米线与独立 Ni 纳米线的结构^[36]明显不同. 碳纳米管对内部包裹的 Ni 纳米线的结构有很大的影响, 不同管径内 Ni 纳米线结构存在着很大的不同之处.

由于碳纳米管对 Ni 纳米线的束缚作用, 导致 Ni 原子在有限的空间内结构优化形成螺旋纳米线, Ni 纳米线螺旋度随碳纳米管管径周期性起伏也可以从键对结构的起伏分析中得到验证. Ni 纳米线的键对结构也伴随碳纳米管管径的增加而起伏变化. 由图 3 可以看出, CNT (14, 14), (17, 17) 等管内 Ni 纳米线中表征 fcc 结构的 1421 键对所占的比重最大, 主要为金属的晶体结构, 表现出 Ni 纳米线的螺旋度接近于零. 碳纳米管内 Ni 纳米线中表征二十面体的 1551 和 bcc 结构的 1661 键对所占的比例的起伏变化与螺旋度的变化也有对应关系, 比例很大时 Ni 纳米线的螺旋度也较大. 可以说所含键对的类型和比例与 Ni 纳米线的螺旋度有密切的关系. 随 Ni 纳米线的螺旋度呈现起伏的变化.

3.2 碳纳米管内 Ni 纳米线的热稳定性

为了研究碳纳米管内 Ni 纳米线的稳定性, 进一步讨论在不同温度时 Ni 纳米线的结构, 周国荣等人^[36]采用键对分析技术对 Ni 纳米线的凝固过程进行分析, 发现 Ni 纳米线的结构在 1000—1200 K 左右发生明显的变化, 几乎各种键对都有急剧的变化, 我们也采用键对分析技术对碳纳米管内 Ni 纳米线的热稳定性进行了分析, 发现不同管径碳纳米管包裹的 Ni 纳米线随温度的变化规律均类似, 我们以 Ni@CNT (9, 9) 和 Ni@CNT (12, 12) 为例进行讨论.

图 4 是 Ni@CNT (9, 9) 和 Ni@CNT (12, 12) 内的 Ni 纳米线随温度变化主要键对的比重. 可以看出温度为 0—1400 K 时各键对所占比重几乎不变, 在 1400—2400 K 时有不同程度的变化, 这是由于 1400 K 时碳纳米管包裹的 Ni 纳米线由固态转化为液态所致, 此温度高于 Ni 金属的固液转化温度 1200 K^[36]. 说明碳纳米管内的 Ni 纳米线的固液转化温度有明显的提高.

为了解碳纳米管对 Ni 纳米线的稳定性所起的作用, 我们将 Ni@CNT (m, m) 复合结构去除 CNT 后的 Ni 纳米线在常温下做平衡弛豫. 图 5 分别为 Ni@CNT (10, 10) 和 Ni@ (13, 13) 的复合结构脱

去 CNT 后的 Ni 纳米线在常温 300 K 下的平衡弛豫结果. 可以发现, 脱去 CNT 后的 Ni 纳米线在常温下很快的变形, 结构不再保持原来的多层螺旋的结

构. 分析表明碳纳米管对 Ni 纳米线特殊的结构起到了保护作用. 张凯旺等^[16]对 CNT 包裹 Au 纳米线的热稳定性做过类似的讨论.

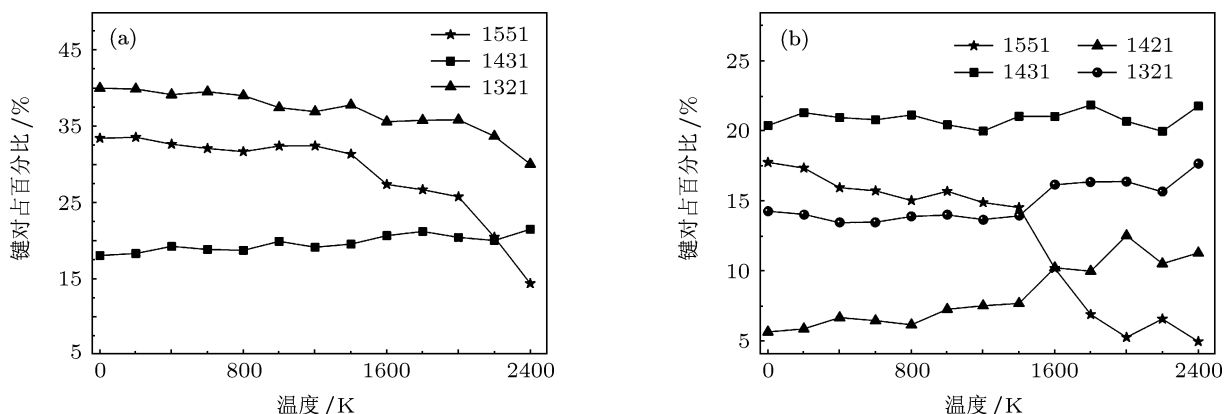


图 4 碳纳米管包裹的 Ni 纳米线随温度变化主要键对的比重 (a) Ni@CNT (9, 9); (b) Ni@CNT (12, 12)

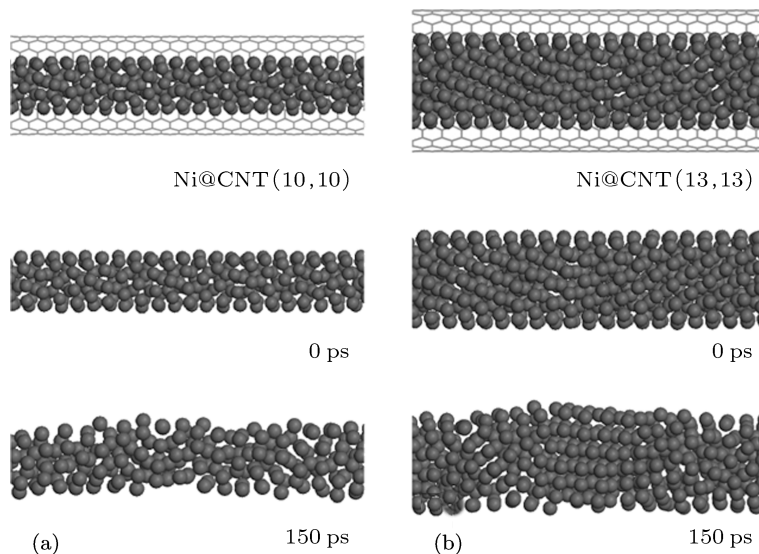


图 5 脱去 CNT 后 Ni 纳米线在 300 K 下的弛豫结果 (a) Ni@CNT (10, 10); (b) Ni@CNT (13, 13)

我们还发现不同管径扶手椅碳纳米管所包裹 Ni 纳米线的径向分布函数随温度的变化规律也是类似的. 以 Ni@CNT (10, 10) 为例进行讨论, 图 6 给出了 CNT (10, 10) 内的 Ni 纳米线在不同温度下的径向分布函数, 第一峰谷值由 200 K 的 0.325 nm 渐增到 2400 K 的 0.345 nm, 第二波峰值由 200 K 的 0.425 nm 渐增为 2400 K 的 0.44 nm. 随着温度的升高, 碳纳米管内 Ni 纳米线的有序度明显降低, Ni 原子周围近邻配位层的范围呈现扩大趋势. 碳纳米管内的 Ni 纳米线在 1400 K 时第二峰开始劈裂, 这是 Ni 纳米线熔化所致.

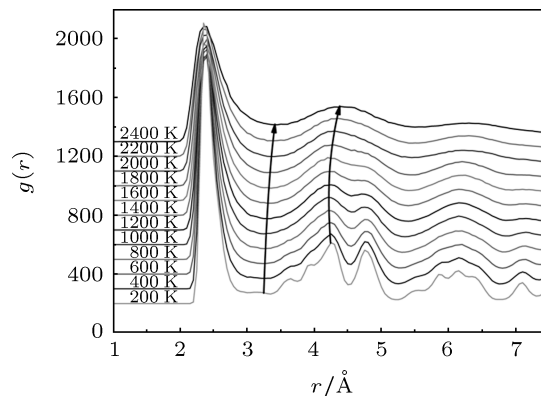


图 6 (10, 10) 碳纳米管包裹的 Ni 纳米线在不同温度时的径向分布函数

4 结论

我们采用分子动力学模拟方法研究了扶手型 CNT (m, m) 包裹 Ni 纳米线的复合结构. 当 $m < 6$ 时, 不能通过毛细引力作用实现碳纳米管对 Ni 纳米线的包裹. 当 $6 < m < 20$ 时, 可通过毛细引力作用实现碳纳米管对 Ni 纳米线的包裹, CNT(6, 6) 包裹的 Ni 纳米线是一种单链结构, 随着管径的增加碳纳米管包裹的 Ni 纳米线主要有两种结构: 一种是多壳层螺旋结构, 另外一种是多壳层螺旋加中间一条 Ni 原子链的结构, 这两种结构交替出现, 其中各壳层的 Ni 原子链的螺旋度不同, 内层的 Ni 原子链的螺旋度明显大于外层, 当每层的 Ni 原子链的条数为 $3n$ 条时螺旋度最高. 当 $m > 20$ 时, 碳纳米管包裹的 Ni 纳米线也是多壳

层螺旋结构, 但是每层中 Ni 原子链的螺旋度很低而且每条原子链的螺旋度基本相同.

碳纳米管的管径决定着内部 Ni 纳米线的结构, 影响了 Ni 纳米线壳层的螺旋度. 不同管径碳纳米管内 Ni 纳米线的螺旋度明显不同, 同种管型内 Ni 纳米线内层 Ni 原子链的螺旋度明显大于外层. 随着管径的增加, 碳纳米管对内部 Ni 纳米线的影响降低, 当碳纳米管的管径足够大时, 内部的 Ni 纳米线类似于金属晶体结构. 碳纳米管内 Ni 纳米线的熔化温度为 1400 K, 高于 Ni 金属的熔化温度. 碳纳米管对 Ni 纳米线的结构有很好的调控作用, 对 Ni 纳米线的特殊结构起到了很好保护作用, 可以设想用不同管径的碳纳米管制备不同类型的 Ni 纳米线, 不同类型的 Ni 纳米线将具有各自独特的电磁性质, 这为设计新型的电子器件提出了新的思路.

- [1] Ajayan P M, Iijima S 1993 *Nature* **361** 333
- [2] Tapia A, Aguilera L, Cab C, Medina-Esquivel R A, Coss R, Canto G 2010 *Carbon* **48** 4057
- [3] Sun F W, Li H, Liew K M 2010 *Carbon* **48** 1586
- [4] Guo S H, Zhu B E, Ou X D, Pan Z Y, Wang Y X 2010 *Carbon* **48** 4129
- [5] Ruoff R S, Lorents D C, Chan B 1993 *Science* **259** 346
- [6] Guerret C, Bouar L Y, Loseau A 1994 *Nature* **372** 761
- [7] Grobert N, Hsu W K, Zhu Y Q, Hare J P, Kroto H W, Terrones M, Terrones H, Redlich P, Ruhle M, Escudero R, Morales F 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 3363
- [8] Tsang S C, Chen Y K, Harris P J F 1994 *Nature* **372** 159
- [9] Arcidiacono S, Walther J H, Poulidakos D, Passerone D, Koumoutakos P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 105502
- [10] Xiao Y, Zhu B E, Guo S H, Wang Y X, Pan Z Y 2009 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **267** 3067
- [11] Bao J C, Tie C Y, Xu Z 2002 *Adv. Mater.* **14** 1483
- [12] Liang C H, Meng C W, Zhang L D 2000 *J. Cryst. Growth* **218** 136
- [13] Gülsüren O, Ercolessi F, Tosatti E 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3775
- [14] Ge Y, Fa W, Zhou J, Dong J M 2010 *Phys. Lett. A* **374** 3258
- [15] Kondo Y, Takayanagi K 2000 *Science* **289** 606
- [16] Zhang K W, Meng L J, Liu W L, Tang Y, Zhong X J 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]
- [17] Kosmider M, Dendzik Z, Pallucha S 2004 *J. Molecu. Struct.* **704** 197
- [18] Xie Y, Zhang J M 2011 *Chin. Phys. B* **20** 127302
- [19] Li H Y, Ren X B, Guo X Y 2007 *Chem. Phys. Lett.* **437** 108
- [20] Jin W, Hui N J, Qu Sh X 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 016301 (in Chinese) [金蔚, 惠宁菊, 屈世显 2011 物理学报 **60** 016301]
- [21] Massobrio C, Pontilis V, Martin G 1990 *Phys. Rev. B* **41** 10486
- [22] Zhang K W, Stocks G M, Zhong J X 2007 *Nanotechnology* **18** 285703
- [23] Zhang K W 2008 *Natur Sci. J. Xiangtan Univ.* **30** 43 (in Chinese) [张凯旺 2008 湘潭大学自然科学学报 **30** 43]
- [24] Tersoff J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2879
- [25] Tersoff J, Ruoff R S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 676
- [26] Zhang K W, Zhong J X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3679 (in Chinese) [张凯旺, 钟建新 2008 物理学报 **57** 3679]
- [27] Antonis N A, Madhu M, George F 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3193
- [28] Amara H, Bichara C, Ducastelle F 2006 *Phys. Rev. B* **73** 113404
- [29] Song X H, Gan Z Y 2009 *J. Comput. Phys.* **106** 104308
- [30] Banerjee S, Puri I K 2008 *Nanotechnology* **19** 155702
- [31] Li S L, Zhang J M 2011 *Acta Phys. Sin.* **7** 078801 (in Chinese) [李姝丽, 张建民 2011 物理学报 **7** 078801]
- [32] Guo Y F, Guo W L 2006 *Nanotechnology* **17** 4726
- [33] Arcidiacono S, Walther J H, Poulidakos D, Passerone D, Koumoutakos P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 105502
- [34] Ge H, Fa W, Zhou J, Dong J M 2010 *Phys. Lett. A* **374** 3258
- [35] Honeycutt J D, Anderson H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [36] Zhou G R, Gao Q M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1499 (in Chinese) [周国荣, 高秋明 2007 物理学报 **56** 1499]

Helicities and thermostabilities of Ni nanowires in the carbon nanotubes*

Du Yu-Guang Zhang Kai-Wang[†] Peng Xiang-Yang Jin Fu-Bao Zhong Jian-Xin

(Faculty of Materials, Optoelectronics and Physics, Institute for Quantum Engineering and Micro-Nano Energy Technology,
Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

(Received 29 December 2011; revised manuscript received 29 February 2012)

Abstract

Molecular dynamics calculations are performed to study the structures of armchair carbon nanotubes (CNTs) encapsulating Ni nanowires and their helicities and thermal stabilities are discussed. It is found that Ni nanowires are of multiple helical tubular structure and each layer is composed of several Ni atom chains. Different layers of Ni nanowires have different helicities and the helicities of Ni nanowires in the inner layer are greater than those of the outer one. What is more, the helicity will be greatest when the number of the Ni atom chains is an integer multiple of three. As the increases of the diameters of the CNTs, the helicities of Ni nanowires change periodically. The structure and helicity only have tiny variations even at high temperature as the CNTs can protect the Ni nanowire.

Keywords: Ni nanowires, carbon nanotubes, molecular dynamics

PACS: 61.46.Km, 61.46.Fg, 65.80.-g

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974166, 10774127), and the Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province, China (Grant Nos. 09A094, 10A118).

[†] E-mail: kwzhang@xtu.edu.cn