

# 双壁碳纳米管电浸润现象的分子动力学模拟<sup>\*</sup>

王 磊 张忠强 张洪武<sup>†</sup>

(大连理工大学运载工程与力学学部, 工程力学系, 工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116024)

(2006 年 11 月 14 日收到, 2008 年 5 月 13 日收到修改稿)

在单壁碳纳米管电浸润现象原子模拟的基础上, 对双壁碳纳米管的电浸润现象进行了计算机模拟. 运用经典分子动力学方法结合一个宏观的电毛细管模型模拟了双壁碳纳米管在水银中的电浸润过程, 对不同内管尺寸情况下的浸润现象作了研究和比较. 计算结果表明双壁碳管和单壁碳管的电浸润过程存在很大的不同, 双壁碳管的内管在电浸润过程中起到重要的作用. 当改变双壁碳管中内管的尺寸时, 浸润现象会产生很大的改变.

关键词: 双壁碳纳米管, 电浸润, 分子动力学

PACC: 6148, 6810, 6185

## 1. 引 言

自从 1993 年发现单壁碳纳米管以来<sup>[1-3]</sup>, 这种新材料在纳米技术应用领域中的巨大潜能不断在实验中得到证实. 其中包括分子电子学<sup>[4]</sup>, 储氢媒介<sup>[5-7]</sup> 和显微镜尖端的扫描探针<sup>[8]</sup> 等. 近年来, 随着人们对更快、更小、更精确的生物分析设备的兴趣与日俱增, 纳米流体系统已经备受关注<sup>[9, 10]</sup>. 这些系统在耗费少量试剂的情况下, 就能快速地产生分子级精度的结果. 碳纳米管以其几乎没有缺陷的通道结构、特殊的电子、力学和化学特性, 尤其是不活泼的化学性质成为纳米流体系统的理想选择<sup>[11]</sup>. 例如, Miller 和 Martin 通过实验研究了碳管薄膜的电渗透传输<sup>[12]</sup>. 他们发现电渗透传输可以用来提高碳管薄膜中的流体传输效率. 然而, 仍然需要对碳纳米管的电渗透传输过程有一个更为详细的理解, 以推动用于电渗透传输的纳米流体系统的研究和应用. 吴子华等人对多壁碳纳米管的湿敏特性进行了研究<sup>[13]</sup>, 结果表明修饰的多壁碳纳米管对湿度非常敏感, 可以开发应用于精密电子元件、高空气象探测等.

纳米管的内部空心部分为纳米管道内的液体流动研究<sup>[14]</sup> 和胶囊状纳米纤维的电磁性态研究<sup>[15, 16]</sup> 提供了机会. 填充的碳纳米管比空心的碳纳米管有

更好的稳定性, 并且可以通过它们不同的物理化学特性来区分它们. 碳纳米管的分子吸附可以受到外部电压的影响, 因此, 纳米管也可以用来制作纳米容器. 同时, 碳层还可以去除, 只保留由填充材料组成的纳米纤维. 这样, 就可以合成具有新颖的电、光、磁和超导特性的纳米纤维. 在研发这些新颖应用的过程中, 化学和物理过程是非常关键的<sup>[17]</sup>. 这些应用需要在对纳米管的流体浸润行为进一步研究的基础上进行改进.

众所周知, 当液体的表面张力足够低(液体的表面张力低于浸润的允许值)时, 碳纳米管在毛细力的作用下可以被液体填充<sup>[15]</sup>. 当液体的表面张力大于 180 mN/m 时, 碳纳米管不能被浸润<sup>[18]</sup>. 也就是说纳米管的浸润仅限于表面张力较低的液体, 这就依赖于液体本身的物理属性. 为了使表面张力较大的液体能够浸润到碳纳米管中, 可以采用施加外部电压以降低表面张力的方法. 此外, 给液体施加外部压力也可以使其浸入到纳米管内部. 所以, 有两种方法可以使具有较高表面张力的液体浸入到碳纳米管的内部: 1) 对液体施加足够大的外部压力<sup>[19-21]</sup>; 2) 施加外部电压以减小液体本身的表面张力<sup>[22]</sup>. 在本文中, 采取后一种方法.

单壁纳米管在外加电压作用下被水银浸润、填充的现象已经在实验中得到证实<sup>[23]</sup>. 在这个实验

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10721062, 10640420176, 50679013, 10728205), 国家重点基础研究发展规划(批准号: 2005CB321704) 以及教育部引智计划(批准号: B08014) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: zhanghw@dlut.edu.cn

中, 纳米管被附着在带有金涂层的显微探针上, 形成“纳米探针”<sup>[24]</sup>, 并且开口的一端浸入到水银液滴中. 将较小的电压施加在浸入到水银中的碳纳米管上时, 导电率会有很大的提高. 这是因为接触角的变化、碳纳米管被水银填充以及金属纳米纤维的形成引起的<sup>[23]</sup>. 水银在电驱动作用下沿着纳米管内部空腔和外管壁传输到顶端, 导致金涂层分解并从探针针尖上脱落下来. 而当纳米管从水银液体中拔出时, 水银又会从管中流回到容器中. 这一实验不仅可以给纳米流体传输的研究提供有益的启示, 还可以用来生成连续的低熔点金属纳米纤维.

利用经典分子动力学模拟和一个宏观的电毛细管模型, Kutana 和 Giapis 完成了单壁碳纳米管在水银中电浸润现象的原子模拟<sup>[25]</sup>. 该研究一方面用来解释他们的实验结果<sup>[23]</sup>, 即附在探针尖上的金涂层被溶解掉, 而在从水银液滴中取出的纳米管内部却找不到水银原子. 模拟结果表明电毛细管现象可以产生一个很大的驱动力, 从而使碳纳米管内部得到浸润; 由外部施加电压引起的电毛细作用力以及碳纳米管吸入水银的速度都和电压值成二次函数的关系. 同样是利用分子动力学方法, 曹炳阳<sup>[26]</sup>等研究了液态氦在铂纳米通道内的流动, 获得了流体和通道表面之间浸润性质不同时的滑移现象. 结果显示通道的亲水性或疏水性对液体的传输性质会有重要影响.

本文在 Kutana 和 Giapis 工作的基础上, 利用分子动力学模拟研究双壁碳纳米管在水银中的电浸润现象. 计算结果表明内管对整个双壁碳纳米管的浸润性质具有非常重要的影响.

## 2. 方法和模型

### 2.1. 势函数的选择

碳原子之间的相互作用考虑与否对模拟结果的影响很小. 因此, 为了提高计算效率, 我们在模拟中忽略了管壁上碳碳间的相互作用, 而把碳纳米管看作刚性管. 水银原子和碳原子之间的相互作用采用如下形式的 LJ 势来描述:

$$U_{\text{LJ}}(r) = 4\epsilon((\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6), \quad (1)$$

其中,  $\sigma$  和  $\epsilon$  是势能参数,  $r$  是两原子之间的距离.  $\sigma_{\text{HgC}} = 3.321\text{\AA}$  (采用 Lorentz-Berthelot 混和准则), 第二个参数  $\epsilon_{\text{HgC}}$  是由  $\epsilon_{\text{HgC}}/k_B = 14.7\text{K}$  决定的<sup>[25, 27]</sup>, 其中  $k_B$  是 Boltzman 常数. 水银原子和碳原子之间的截

断半径取为  $8.3\text{\AA}$ , 间距超过此距离的原子间作用将不予考虑.

水银原子之间的相互作用势函数采用如下的多项式形式<sup>[25, 28]</sup>, 这个势函数可以很好地描述水银的一些基本特性, 如熔点和温度为 300 K 时的密度等. 其函数形式如下:

$$U_s^*(r) = \sum_{j=3}^9 a_{2j}^* r^{-2j}, \quad (2)$$

其中, 参数  $a_{2j}^*$  在表 1 中列出.

表 1 水银原子间相互作用势函数的参数

$a_{2j}^*$	参数值
$a_6^*$	$-1.036542 \times 10^2$
$a_8^*$	$-1.539877 \times 10^3$
$a_{10}^*$	$4.271609 \times 10^4$
$a_{12}^*$	$-2.975002 \times 10^5$
$a_{14}^*$	$9.965436 \times 10^5$
$a_{16}^*$	$-1.633356 \times 10^6$
$a_{18}^*$	$1.049907 \times 10^6$

### 2.2. 电浸润模型

根据 Lippmann 模型<sup>[29, 30]</sup>, 电场作用的有效区域沿碳纳米管内外壁呈双层轴对称分布. 有效作用区域内的所有水银原子会受到电场作用力, 作用力沿管壁的法线方向且指向纳米管壁, 作用力大小可以用以下公式计算<sup>[25]</sup>:

$$F_{\text{ex}}(r) = \begin{cases} F_0, & 0 < r < a \\ 0, & r \geq a, r \leq 0, \end{cases} \quad (3)$$

其中,  $r$  是水银原子距离纳米管管壁的法向距离,  $a = 3.5\text{\AA}$  是内外两层电场作用域的厚度,

$$F_0 = \Delta E_e / a, \quad (4)$$

$$\Delta E_e = -cV^2/2\rho_s, \quad (5)$$

其中,  $V$  为所施加的外部电压值,  $\rho_s = 11.82\text{nm}^{-2}$  为水银的面密度,  $c$  为圆柱表面单位面积的电容,

$$c = \left( \frac{\epsilon_0}{r_1 \ln(r_2/r_1)} \right), \quad (6)$$

$r_1$  和  $r_2$  是纳米管内外液柱的半径, 介电常数  $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}\text{F/m}$ .

### 2.3. 分子动力学模拟方法

整个模拟体系包含 17280 个水银原子, 尺寸为  $65.82\text{\AA} \times 65.82\text{\AA} \times 82.27\text{\AA}$ , 在  $x$  和  $y$  两个方向上施加周期性边界条件, 碳原子数随不同碳纳米管的几

何尺寸而定. 在  $z$  方向上最底层的水银原子被固定. 时间步长取  $0.001 \text{ ps}$  ( $1 \text{ ps} = 1.0 \times 10^{-12} \text{ s}$ ). 开始时, 水银液体自由弛豫足够长的时间以达到初始平衡态, 然后碳纳米管以  $0.01 \text{ nm/ps}$  的速度从水银液面的上方竖直插入水银液体里, 至距水银底部  $26 \text{ \AA}$  时停止插入并开始加电. 整个插入过程中, 体系温度始终保持在  $300 \text{ K}$ . 外部电压施加后, 体系温度自由变化而不再受约束.

### 3. 结果和讨论

#### 3.1. 单、双壁纳米管的插入过程模拟

首先, 我们对 SWCNT10 (SWCNT $n$  是指手性指标为  $(n, n)$  的单壁碳纳米管) 和 DWCNT10, 15 (DWCNT $m, n$  是指由手性指标为  $(m, m)$  的碳管和指标为  $(n, n)$  的碳管组成的双壁管) 的插入过程进行了模拟, 体系构型如图 1 所示 (为方便观察, 图中只取了一个片层). 由于水银具有较高的表面张力, 所以在整个插入过程中, 无论单壁还是双壁碳纳米管, 都没有水银原子进入到其内部空腔.

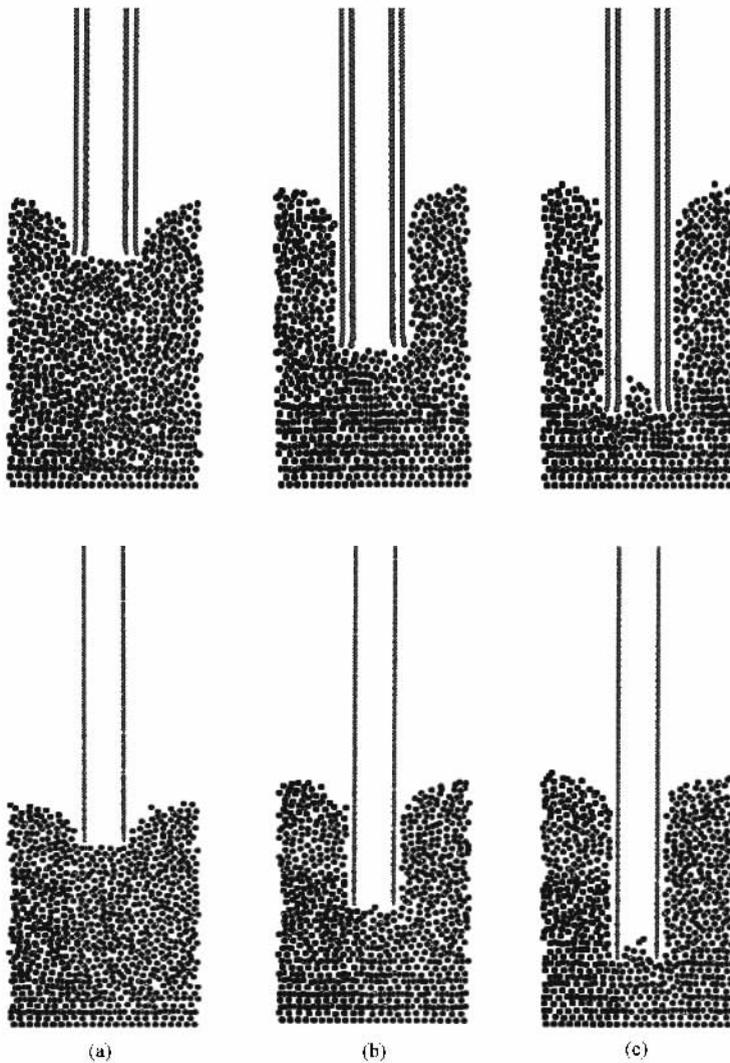


图 1 DWCNT10,15 和 SWCNT10 的插入过程 (a) 插入深度为  $2 \text{ nm}$  (b) 插入深度为  $5 \text{ nm}$  (c) 插入深度为  $7 \text{ nm}$

#### 3.2. 单壁纳米管的电浸润过程模拟及数值模型验证

为了验证本文数值模型的合理性, 并与后面双

壁管的浸润模拟作比较, 先取长度同为  $13.562 \text{ nm}$  且末端开口的 SWCNT10 和 SWCNT15 进行模拟. 当对单壁碳纳米管施加  $4.5 \text{ V}$  电压之后, 经过一段时

间都发生了电浸润现象,如图 2 所示.比较发现,本文的结果与文献 [25] 中给出的浸润现象是类似的,验证了本文模型的可靠性.图 3 给出了 SWCNT10 和 SWCNT15 在加电后不同时间点上的内部浸润原子数. SWCNT15 在施加外部电压 20 ps 和 50 ps 后分别

有 28 和 68 个水银原子浸入其内部空腔.这个数目明显多于 SWCNT10 在相同时间点上的浸润原子数.说明在相同电压下, SWCNT15 吸入液体原子的效率比 SWCNT10 要高,这是由于前者的半径大于后者<sup>[23]</sup>所致.由图 3 中的变化曲线可以看出,浸润原

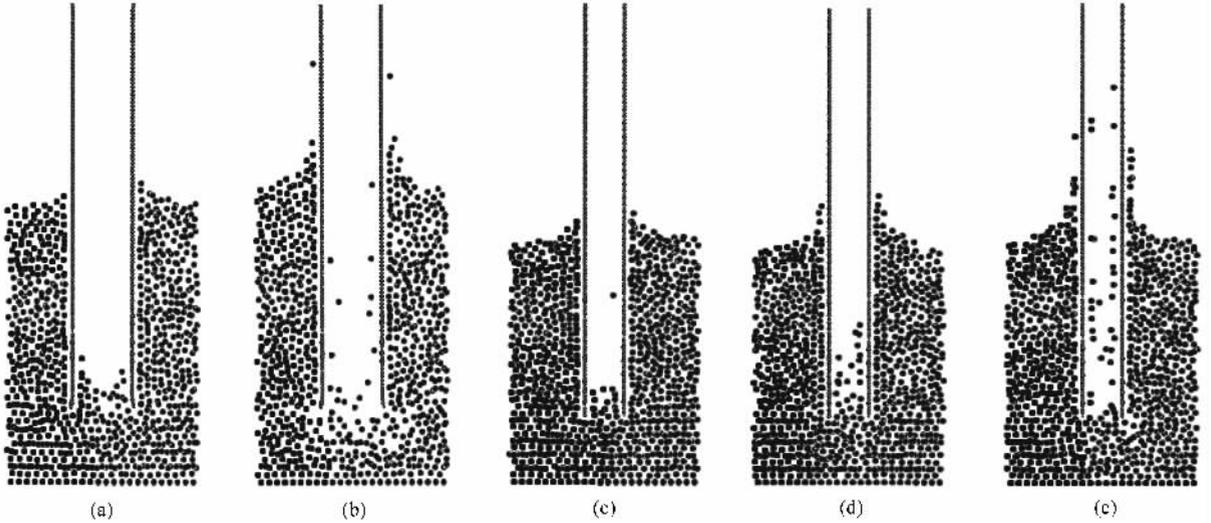


图 2 施加 4.5 V 的电压后不同时刻单壁碳纳米管 SWCNT10 和 SWCNT15 的浸润情况 (1) SWCNT15 : (a) 20 ps , (b) 50 ps (2) SWCNT10 : (c) 20 ps , (d) 50 ps , (e) 85 ps

子数与时间近似成线性关系.由于在 85 ps 时 SWCNT15 算例中水银的温度超出沸点而失去意义,因此没有给出.

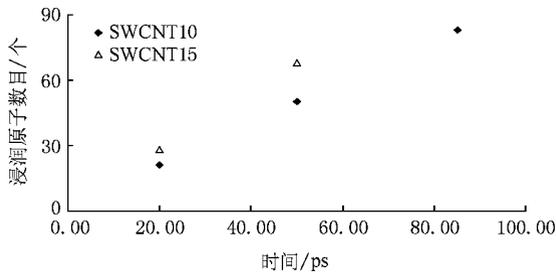


图 3 浸入 SWCNT15 和 SWCNT10 单壁碳纳米管内部的水银原子数目随时间的变化

### 3.3. 双壁碳纳米管的电浸润过程模拟

在双壁碳纳米管电浸润的模拟中,我们分别考虑了不同内管尺寸和不同加电方式对浸润过程的影响.首先,我们模拟了 DWCNT10,15 和 DWCNT12,15 双壁管外管加电的情况.图 4 描述了 DWCNT10,15 和 DWCNT12,15 在加电 20 ps, 50 ps 和 85 ps 后的浸润情况.从图中可以看出,随着加电时间的推移,水

银原子逐渐浸入到内管的内部,而且在外管的外壁上也逐渐形成了一层水银薄膜,但内管和外管中间的区域始终没有浸润现象发生.不同的是,水银原子在双壁纳米管内部的浸润量有差别,如图 5 所示,明显可以看出,经过相同加电时间,DWCNT12,15 内管的水银浸润量要大于 DWCNT10,15.在 85 ps 时,前者的浸润量几乎是后者的两倍.内管内部的水银浸润量都与时间近似成线性关系,这与单壁管的浸润规律一致.

现在我们对双壁碳纳米管和单壁碳纳米管经过相同加电时间后的液体浸润量作一个比较.从图 3 和图 5 可以看出,在 20 ps 和 50 ps 时,DWCNT10,15 的内管浸入原子数分别为 25 和 65,与 SWCNT15 在相同时间的浸入原子数几乎相等;而远大于 SWCNT10 在相同时间的浸入原子数.换言之,外管 (15,15) 对内管 (10,10) 的起到了加速浸润的作用.

然后,我们继续减小内管的尺寸,对 DWCNT5,15 的电浸润过程进行了模拟,如图 6 所示.在外管壁上加电后,外管外壁与水银之间的凹液面随着时间的推移而逐渐消失,但是既没有原子浸入到内管的内部空腔,也没有液体薄膜在外管的外壁上产生.可见,管径较小的 (5,5) 内管阻碍了浸润现象的发

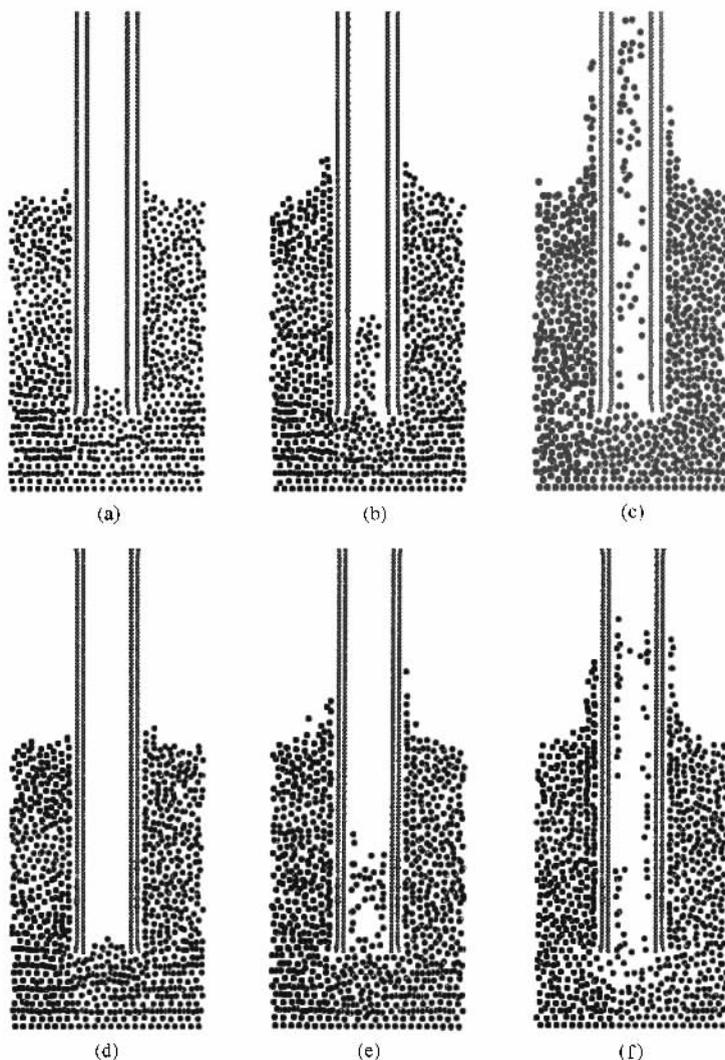


图4 电压加在外管上时双壁碳管在不同时刻的浸润情况 (1) DWCNT10,15 : (a) 20 ps , (b) 50 ps ,(c) 85 ps (2) DWCNT12,15 : (d) 20 ps ,(e) 50 ps ,(f) 85 ps

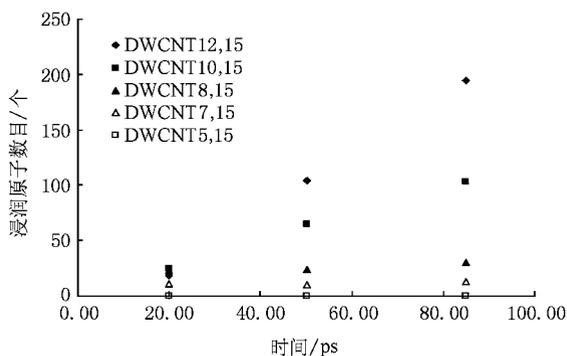


图5 浸入双壁管内部空腔的水银原子数目随时间的变化

润过程进行了模拟,同样是将电压施加在外管壁上.进入内部空腔的水银原子数目随时间的变化在图5中给出.从图中可以看到,在DWCNT8,15情形下,浸润原子的数目随时间的变化关系基本上是线性的;而在DWCNT7,15情形下,则只有很少量的原子浸入到内部空腔中,并且浸润原子数目几乎不随时间的推进而增加.由此,我们可以认为DWCNT7,15是浸润现象发生与否的临界点.

既然图5中多数情形下浸润原子数目随时间的变化呈现线性关系,于是我们可以获得这些线性变化的斜率即浸润率.浸润率与内管横截面积的关系如图7所示.当内管半径较小时,浸润率变化非常平缓;从DWCNT8,15开始,浸润率急剧增大.换言之,内管半径的大小对双壁碳管浸润率的影响非常明

生.为了找到从浸润到非浸润的内管尺寸的临界点,我们又对DWCNT7,15和DWCNT8,15双壁管的电浸

显.另外,从该图中也可以再次确认 DWCNT7,15 是由非浸润到浸润的临界内外管组合.

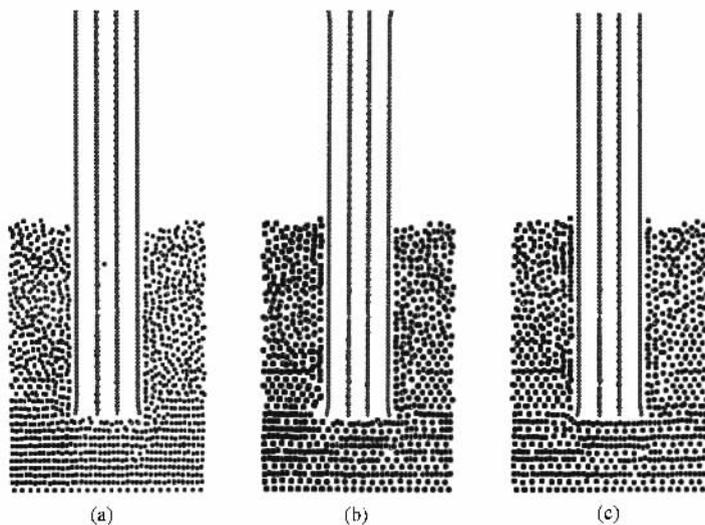


图 6 电压加在外管上时,DWCNT5,15 双壁管在不同时刻的浸润情况 (a) 20 ps ;(b) 50 ps ;(c) 85 ps

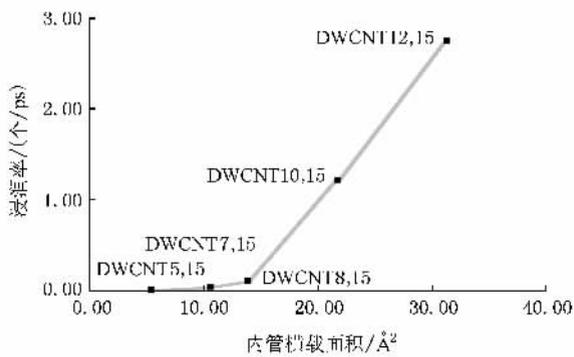


图 7 双壁碳管的浸润率与内管横截面积的关系

当外部电压施加在内管上时,浸润情况与前面描述的情形相比有很大的差别.图 8 给出了电压加在双壁管 DWCNT10,15 和 DWCNT12,15 的内管上一定时间后的浸润情况,所施加的电压大小仍为 4.5 V.两个双壁管的内管空腔均没有浸润原子出现.所不同的是,在 DWCNT12,15 中,初始围绕在外管周围的凹液面在加电后逐渐变平,这与将电压加在 DWCNT5,15 外管上的浸润效果类似;而在 DWCNT10,15 中,凹液面则没有明显的变化.出现这种差异是因为在 DWCNT10,15 中内外管间距较大,以致电场的作用范围达不到外管周围的水银原子.

图 9 给出了加电后 SWCNT10 单壁管和 DWCNT10,15 双壁管(外管加电)在轴向上受到的来

自水银的作用力随浸润过程的进行而发生的变化.从图中可以看出,在加电后随着浸润原子数目的不断增加,碳管受到的轴向作用力基本上随时间增加按线性关系下降.

### 4. 结 论

在本文中,利用分子动力学模拟和一个宏观的电毛细管模型,模拟了双壁碳纳米管的电浸润现象.水银原子和碳原子间的相互作用采用 LJ 势来描述,而水银原子间的相互作用则用一个多项式形式的势函数来模拟.主要的计算结果如下:

1)当电压加在 DWCNT10,15 和 DWCNT12,15 双壁管的外壁上时,外管壁周围的凹液面逐渐消失并沿管壁形成一层水银薄膜;内部空腔也有水银原子浸入,浸润原子数目基本上随时间线性变化,并且 DWCNT12,15 的浸润效果要优于 DWCNT10,15.

2)当电压加在 DWCNT10,15 双壁管的外壁上时,其内部空腔的浸润行为与 SWCNT15 单壁管类似,水银原子的浸润速率也基本上相等;而与 SWCNT10 单壁管相比则有很大差异,双壁管的浸润效果更好,换言之,(15,15)外壁管的存在加速了(10,10)管内部空腔的电浸润.

3)将电压加在双壁管的外管壁上时,对相同的(15,15)外管而言,(7,7)碳管作为内管是电浸润发

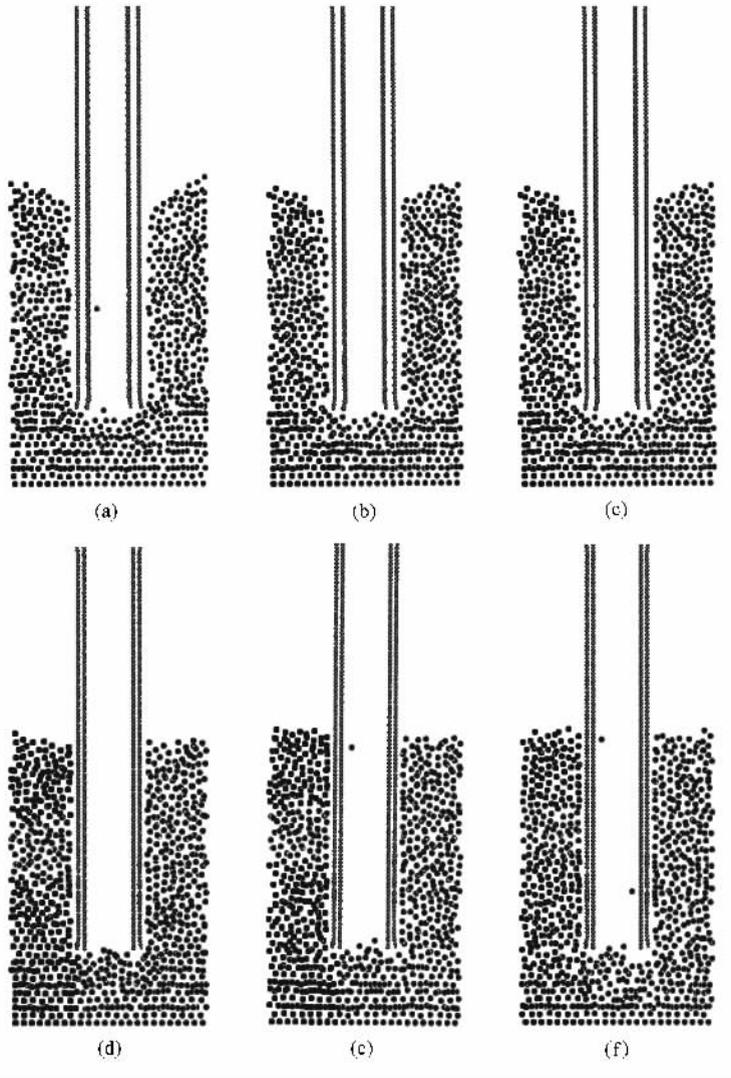


图 8 电压加在内管上时双壁管的浸润情况 (1) DWCNT10,15 : (a) 20 ps ,(b) 50 ps ,(c) 85 ps (2) DWCNT12,15 : (d) 20 ps ,(e) 50 ps ,(f) 85 ps

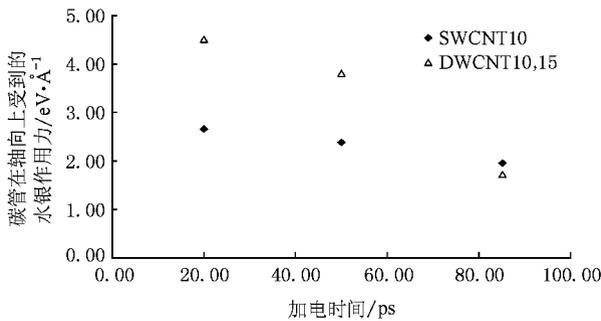


图 9 加电后单壁管和双壁管在轴向上受到的水银作用力随时间的变化

生与否的临界组合. 只有内管尺寸比 (7,7) 碳管更大



时浸润才可以顺利发生.

4) 双壁管内部空腔的浸润率主要依赖于内管半径. 当内管半径较小时, 浸润率很低且随半径的增大变化平缓; 当内管半径比 (8,8) 碳管半径更大时, 浸润率迅速增大, 且随内管半径的变化非常剧烈.

5) 当电压加在各个双壁管的内管上时, 均没有水银原子浸润到内管空腔.

6) 不论电压加在双壁管的内壁还是外壁上, 内外管间的空间均不能被水银原子浸润.

7) 不论是单壁管还是双壁管, 加电后碳管在其轴向上受到的来自水银的作用力随着浸润过程的进行而逐渐减小, 而且这种变化基本上是线性的.

- [ 1 ] Iijima S , Ichihashi T 1993 *Nature* **363** 603
- [ 2 ] Bethune D S , Kiang C H , de Vries M S , Gorman G , Savoy R , Vazquez J , Beyers R 1993 *Nature* **363** 605
- [ 3 ] Kiang C H , Goddard W A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2515
- [ 4 ] Tans S J , Verschueren A R M , Dekker C 1998 *Nature* **393** 49
- [ 5 ] Dillon A C , Jones K M , Bekkedahl T A , Kiang C H , Bethune D S , Heben M J 1997 *Nature* **386** 377
- [ 6 ] Zheng H , Wang S H , Cheng H M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4852 ( in Chinese ) [ 郑 宏、王绍青、成会明 2005 物理学报 **54** 4852 ]
- [ 7 ] Tang Y H , Lin L W , Guo C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4197 ( in Chinese ) [ 唐元洪、林良武、郭 池 2006 物理学报 **55** 4197 ]
- [ 8 ] Wong S S , Joselevich E , Woolley A T , Cheung C L , Lieber C M 1998 *Nature* **394** 52
- [ 9 ] Kemery P J , Steehler J K , Bohn P W 1998 *Langmuir* **14** 2884
- [ 10 ] Kuo T C , Sloan L A , Sweedler J V , Bohn P W 2001 *Langmuir* **17** 6292
- [ 11 ] Qiao R , Aluru N R 2003 *Nano Lett.* **3** 1013
- [ 12 ] Miller S A , Martin C R 2002 *J. Electroanal. Chem.* **522** 66
- [ 13 ] Wu Z H , Wang W L , Liao K J , Wang Y T , Hu C G , Fu G Z , Wan B Y , Yu P 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3462 ( in Chinese ) [ 吴子华、王万录、廖克俊、王永田、胡陈果、付光宗、万步勇、余鹏 2004 物理学报 **53** 3462 ]
- [ 14 ] Gogotsi Y , Libera J A , Yazicioglu A G , Megaridis C M 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 1021
- [ 15 ] Ajayan P M , Iijima S 1993 *Nature* **361** 333
- [ 16 ] Guerret-Plecourt C , Le Bouar Y , Loiseau A , Pascard H 1994 *Nature* **372** 76
- [ 17 ] Kiang C H , Choi J S , Tran T T , Bacher A D 1999 *J. Phys. Chem. B* **103** 7449
- [ 18 ] Dujardin E , Ebbesen T W , Hiura H , Tanigaki K 1994 *Science* **265** 1850
- [ 19 ] Ebbesen T W 1996 *J. Phys. Chem. Solids* **57** 951
- [ 20 ] Zhang H W , Zhang Z Q , Wang L , Zheng Y G , Wang J B , Wang Z K 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 144105
- [ 21 ] Zhang Z Q , Zhang H W , Zheng Y G , Wang J B , Wang L 2008 *Curr. Appl. Phys.* **8** 217
- [ 22 ] Ajayan P M , Ebbesen T W 1997 *Rep. Prog. Phys.* **60** 1025
- [ 23 ] Chen J Y , Kutana A , Collier C P , Giapis K P 2005 *Science* **310** 1480
- [ 24 ] Hafner J H , Cheung C L , Oosterkamp T H , Lieber C M 2001 *J. Phys. Chem. B* **105** 743
- [ 25 ] Kutana A , Giapis K P 2006 *Nano Lett.* **6** 656
- [ 26 ] Cao B Y , Chen M , Guo Z Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5305 ( in Chinese ) [ 曹炳阳、陈 民、过增元 2006 物理学报 **55** 5305 ]
- [ 27 ] Supplemental online material of [ 23 ] , accessible through : [www.sciencemag.org](http://www.sciencemag.org).
- [ 28 ] Schwerdtfeger P , Wesendrup R , Moyano G E 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 7401
- [ 29 ] Lippmann G 1875 *Ann. Chim. Phys.* **5** 494
- [ 30 ] Mugele F , Baret J C 2005 *J. Phys. Cond. Matter.* **17** 705

# Electrowetting in double-walled carbon nanotubes : molecular dynamics simulations \*

Wang Lei Zhang Zhong-Qiang Zhang Hong-Wu<sup>†</sup>

( *Faculty of Vehicle Engineering and Mechanics , Department of Engineering Mechanics , State Key Laboratory of  
Structural Analysis for Industrial Equipment , Dalian University of Technology , Dalian 116024 , China* )

( Received 14 November 2006 ; revised manuscript received 13 May 2008 )

## Abstract

On the basis of the atomistic simulations of electrowetting of single-walled carbon nanotubes by mercury , the electrowettings in double-walled carbon nanotubes are studied. Classical molecular dynamics simulations in conjunction with a macroscopic electrocapillarity model are carried out to clarify the effect of inner tube 's size on electrowetting. Results show that there is a great difference between electrowetting in single-walled and double-walled carbon nanotubes . The inner tube plays a key role in the electrowetting of double-walled carbon nanotube. Very different phenomenon occurs when the size of the inner tube is changed.

**Keywords** : double-walled carbon nanotube , electrowetting , molecular dynamics

**PACC** : 6148 , 6810 , 6185

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China( Grant Nos. 10721062 , 10640420176 , 50679013 , 10728205 ) , the National Key Basic Research Special Foundation of China( Grant No. 2005CB321704 ) and the 111 Project( Grant No. B08014 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail zhanghw@dlut.edu.cn