

碳纳米管内金纳米线的结构与热稳定性*

张凯旺[†] 孟利军 李 俊 刘文亮 唐 翌 钟建新

(湘潭大学物理系 湘潭 411105)

(2007 年 9 月 18 日收到 2007 年 11 月 14 日收到修改稿)

采用分子动力学模拟方法,研究了填充在(8,8)单壁碳纳米管内的 Au 纳米线的结构和热稳定性.研究表明,经高温退火至室温,Au 在碳纳米管内能生成多样而稳定的结构上明显区别于自由状态 Au 纳米线的壳层螺旋结构 Au 纳米线,其螺旋结构会随着温度的变化而转变.束缚在碳纳米管内的壳层螺旋结构 Au 纳米线有非常好的热稳定性,稳定温度高于块体 Au 晶体的熔化温度.

关键词:纳米线,碳纳米管,热稳定性,分子动力学模拟

PACC: 6146, 6185, 6550

1. 引 言

碳纳米管中填充各种材料形成奇特的结构,引起了人们普遍的关注.通过填充碳纳米管的一维空腔,可有效调控碳纳米管的电性、磁性、热传导性、光学及力学性能.碳纳米管中填充各种金属制成新奇的材料成为开发一维纳米导线的有效途径.在碳纳米管的一维限域空腔内,填充物原子在碳纳米管内部的排列方式不同,金属纳米导线将具有奇异的电性质.利用碳纳米管的纳米级空腔作为模板制备一维金属纳米线,可以制作纳米电路和纳米电子器件.这种碳纳米管包裹着的金属线由于有碳外壳抗氧化的保护而有长期稳定的金属芯^[1-5].人们使用不同的方法已经成功地将各种金属或金属材料^[3-11]填充到碳纳米管中.1992年,Broughton等^[6]利用计算机模拟从理论上验证了物质填入碳纳米管的可行性.1993年Ajayan和Iijima^[3]将碳纳米管与Pb一起高温退火,熔融的Pb因毛细管作用而填充进管内,得到了填充有Pb的多壁碳纳米管.碳纳米管的填充方法主要有固相熔融法^[1,3,4]、液相湿化学法^[5,7]、电弧放电法^[8,9]、催化热解法^[10,11]等.依据不同的填充机理,纳米管填充方法可以分两大类.第一类,最初碳纳米管两端是开口的,随后熔化的金属通过毛细管作用或者金属氧化物通过湿化学法

填充到碳纳米管中,比如固相熔融法、液相湿化学法.第二类,是原位填充方法,碳纳米管的填充过程和生长过程同步进行,即直接制备碳纳米管包裹金属或金属复合材料,比如电弧放电法、催化热解法.

独立的纳米线已经得到广泛的计算模拟研究^[12-21].Tosatti等人^[17]采用分子动力学模拟研究超细Al和Pb纳米线的非晶结构,发现当纳米线直径减小到一个临界值后,纳米线为一种新颖的壳层螺旋结构.由于Au良好的化学稳定性,Au纳米线的结构得到广泛的研究.Bilalbegovic^[18]通过分子动力学模拟发现超细Au纳米线在室温下也有稳定的壳层螺旋结构.Kondo和Takayanagi^[22]在超高真空环境下,用电子束辐射在Au薄膜上,制备出直径在0.6至1.3nm之间,长度为3至15nm的Au纳米线,并观测到这些纳米线为壳层螺旋结构.Wang等人^[19]计算模拟了无限长Au纳米线的结构,发现不同直径D的Au纳米线有不同的结构类型, $D < 0.6$ nm为螺旋结构, $1.0\text{ nm} < D < 2.2\text{ nm}$ 为壳层圆柱体结构,而 $D > 2.2\text{ nm}$ 为类面心体结构.Wang等人^[20]和Bilalbegovic^[21]分别利用分子动力学模拟研究了多层圆柱体Au纳米线的热稳定性,发现Au纳米线熔化温度低于Au块体的熔化温度但高于Au纳米颗粒的熔化温度,他们的分子动力学模拟结果得出Au纳米线的熔化温度为 $1000 \pm 100\text{ K}$.而块体Au晶体的熔化温度为 1357 K ^[23,24].纳米管填充各

* 湖南省教育厅重点项目(批准号:05A005)和长江学者奖励计划资助的课题.

[†] E-mail: kwzhang@xtu.edu.cn

种金属材料的计算模拟研究也引起人们广泛的重视^[25-33]. Poulidakos 等人^[33]通过分子动力学模拟研究了 Au 纳米颗粒在碳纳米管中的凝固及其结构,发现碳纳米管中的 Au 纳米颗粒也为壳层螺旋结构, Au 纳米颗粒的凝固温度大于独立的 Au 纳米颗粒的熔化温度但小于块体的 Au 晶体的熔化温度,碳纳米管中的 Au 纳米颗粒的凝固温度依赖于 Au 纳米颗粒的长度,长度越大凝固温度越高.

对于纳米材料微观结构的研究,第一性原理计算只能限于一些简单的系统,而无序纳米材料的短程结构及其冷却过程中的结构演化信息又很难由实验直接获得.这样,分子动力学模拟便成为一种在原子尺度上理解和预测纳米材料性质的重要辅助手段.本文以(8,8)碳纳米管中填充 Au 纳米线为研究对象,以分子动力学模拟为手段,研究了碳纳米管中不同密度的 Au 原子经过高温退火到室温而凝固形成的新颖微观结构,并讨论了这些结构的热稳定性.

2. 势能模型

分子动力学模拟广泛应用于纳米尺度下材料的结构和物理过程的数值模拟研究^[14-21, 27-33].分子动力学模拟的关键是原子势能模型的选取.模拟碳纳米管中填充 Au 纳米线的结构涉及三种相互作用:C-C, Au-Au 和 C-Au 相互作用.

C-C 相互作用由 Tersoff 势^[34-36]描述. Tersoff 按照 Abell 的泛函数势模型形式给出了 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^[36-38]. Au-Au 相互作用由 Tight Binding 势^[39]描述. Tight Binding 模型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,在处理含 d 态电子的过渡金属晶体结构中表现出很大的优势.使用 Tight Binding 势, Ju 等人^[40, 41]模拟了 7-1 和 14-7-1 型壳层螺旋结构 Au 纳米线的拉伸行为, Coura 等人^[42]模拟 Au 纳米线拉伸得到了与实验一致的结果. C-Au 相互作用选用 Lennard-Jones 势,其形式为

$$E = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (\epsilon = 0.01273 \text{ eV}, \\ \sigma = 0.29943 \text{ nm})^{[43]}.$$

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. Lennard-Jones 势成功地描述了 Au 颗粒在石墨片上的扩散行为^[43],

Poulidakos 等人^[33]在进行了两种 Lennard-Jones 势计算比较的基础上成功地用其描述了碳纳米管内 Au 颗粒的结构性质.

通过比较 Poulidakos 等人^[33]发现的碳纳米管(30,0)内 775 个 Au 原子颗粒的结构特征,我们对本文的势能选取方式进行了测试.我们构造 10.23 nm 长的(30,0)碳纳米管单胞,碳纳米管内放 7.0 nm 长无定形 Au 圆柱体,采用周期边界条件在常温 300 K 下分子动力学模拟达到平衡,得到长约 4.2 nm 的 4 层壳层螺旋结构 Au 纳米线.所得到的壳层螺旋结构和 Poulidakos 等人^[33]的结果一致,表明我们采用的势能形式是可靠的.

3. 计算方法

我们采用正则系综(NVT),运动方程的数值积分使用 Gear 五阶预测矫正算法,截断半径为 1 nm,模拟步长为 1 fs,温度控制使用速度标度法.模拟单胞为包含 768 个 C 原子的(8,8)碳纳米管,采用周期性边界条件.初始状态碳纳米管中放入一定数量随机分布的 Au 原子,我们记做 Au_N ,其中 N 为 Au 原子数量.为方便讨论,我们定义碳纳米管中 Au 原子密度 ρ 为碳纳米管内单位体积平均粒子数(粒子数/ nm^3).对每种结构,我们先做 1000 步(1 ps)的松弛,再在 1500 K ($N > 380$ 时为 1200 K,以免因高温引起碳纳米管破裂.)高温下稳定 1 万步(10 ps)后开始退火,退火速率为 20 K/ps,退火到室温 300 K 后做 2 万步(20 ps)平衡以便获得稳定的结构.

4. 计算结果与讨论

4.1. (8,8)碳纳米管填充 Au 的壳层螺旋结构

对(8,8)碳纳米管内不同 Au 原子数的多种情况,分别进行高温退火至室温,得到稳定的壳层螺旋结构,图 1 为碳纳米管内不同密度 Au 纳米线结构.考虑到退火速率可能影响模拟结果,我们做了不同退火速率下的计算模拟,退火速率为 10 K/ps, 40 K/ps 和 80 K/ps,模拟结果与退火速率为 20 K/ps 的情形一致.

从模拟结果得知,当 Au 原子密度 ρ 较低时($\rho < 17.56$),碳纳米管内的 Au 形成纳米颗粒,仔细观察可以发现 Au 纳米颗粒为壳层螺旋结构,从截面

看 Au 纳米颗粒为外层 6 个原子内层 1 个原子的 6-1 结构, 图 1(a)(b) 的 Au_{72} 和 Au_{88} 就是 6-1 型颗粒. 当 Au 原子密度增大时 ($17.56 < \rho < 36.22$), Au 在碳纳米管内生成单螺旋壳层内单线的 Au 纳米线, 图 1(d) 的 Au_{154} 为 6-1 型, 图 1(e) 的 Au_{176} 为 7-1 型. 当 Au 原子密度再增大时 ($36.22 < \rho < 68.41$), Au 在碳纳米管内生成单螺旋壳层内多线的 Au 纳米线, 图 1(g) 的 Au_{220} 为 8-2 型, 图 1(h) 的 Au_{264} 为 8-3 型, 图 1(i) 的 Au_{308} 为 10-4 型, 图 1(j) 的 Au_{352} 为 11-5 型. 当 $68.41 < \rho < 72.43$ 时, Au 在碳纳米管内生成

双螺旋壳层内单线的 3 层结构的 Au 纳米线, 图 1(l) 的 Au_{390} 为 11-6-1 型. 当 $\rho \geq 72.43$ 时, 碳纳米管破裂. 当 Au 原子密度处在两种结构类型之间时, Au 纳米线为两种类型的结合体, 图 1(c) 的 Au_{96} 为有缺失的 6-1 型, 图 1(f) 的 Au_{198} 中心层一部分为单线一部分为双线, 图 1(k) 的 Au_{374} 有的部分为 2 层结构有的部分为 3 层结构. 对各种 ρ 的情形模拟后发现, (8, 8) 碳纳米管中 6-1, 7-1, 8-2, 8-3, 10-4, 11-5 和 11-6-1 型等壳层螺旋结构 Au 纳米线在室温稳定存在.

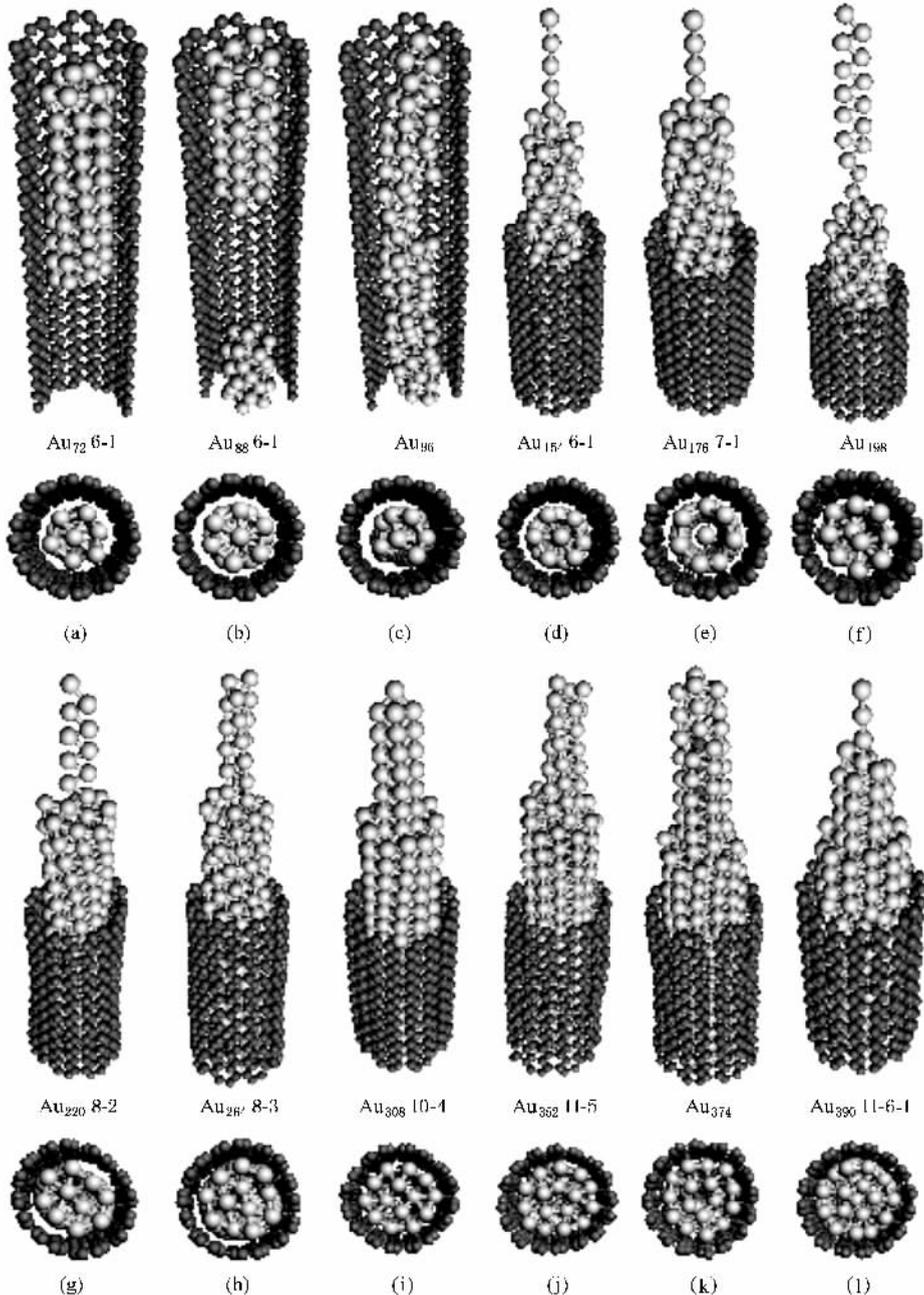


图 1 碳纳米管内不同密度 Au 纳米线结构

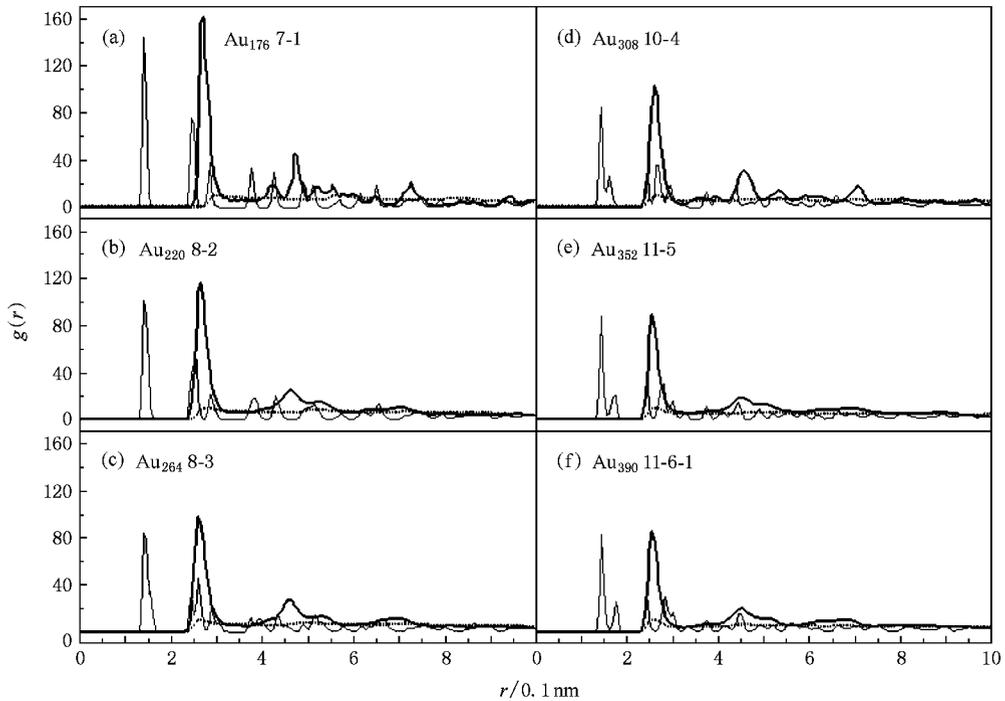


图2 碳纳米管内壳层螺旋结构 Au 纳米线的径向分布函数(C-C 为细实线, Au-Au 为粗实线, C-Au 为虚线)

为进一步了解纳米管内壳层螺旋 Au 纳米线的结构,我们列出 6 种典型结构的径向分布函数 $g(r)$ 如图 2 所示,图 2 中 C-C, Au-Au 和 C-Au 间的 $g(r)$ 分别用细实线,粗实线和虚线表示. Au 原子密度 ρ 由小到大,碳纳米管由略微收缩很快转为径向膨胀, C-C 的 $g(r)$ 第 1 峰位置在 1.40—1.46 Å 的范围,随 Au 原子密度 ρ 增加有细微的后移. 同时,随 ρ 的增加,碳纳米管的径向尺度增大, C-C 的 $g(r)$ 第 1 峰会逐渐分裂出 1 个小峰,第 2 峰也会分裂出 1 个小峰,最后导致碳纳米管破裂. 不同的 ρ , Au-Au 的 $g(r)$ 第 1 峰均在 2.6 Å 左右,其他峰的分布不尽相同,表现出不同的结构形态. 不同的 ρ , C-Au 的 $g(r)$ 第 1 峰均在 2.55—2.85 Å 间,碳纳米管与 Au 纳米线间保持固定的距离. Au 原子密度 ρ 很小时,碳纳米管与 Au 纳米线的相互作用使得碳纳米管略有收缩而 Au 原子间距较大. Au 原子密度 ρ 较大时, Au 原子拥挤而间距稍微减小,同时导致碳纳米管膨胀而 C 原子间距增大.

4.2. 剥离碳纳米管保护后 Au 壳层螺旋结构的稳定性

通过高温退火在碳纳米管内获得的壳层螺旋结构 Au 纳米线,当失去碳纳米管的保护后是否依然稳定呢?我们将碳纳米管内壳层螺旋结构 Au 纳米

线剥离 C,在室温(300 K)的条件下做 5 万步的弛豫. 图 3 为剥离碳纳米管的 6 种典型结构 Au 纳米线室温下弛豫前后的结构. 模拟结果发现,在失去碳纳米管的保护后,室温条件下壳层螺旋结构 Au 纳米线将失去同轴对称的完美结构,不再保持原有的结构形态, Au 原子会重新整型成不规则的壳层螺旋结构或类面心体结构纳米线. 其中图 3(d)的 Au_{308} 为 10-4 型结构,中心 4 条线的 Au 原子呈类面心体结构,当剥离碳纳米管约束后, Au 纳米线在略微膨胀的基础上通过位错滑移来继续保持类面心体刚性的稳定结构. 而其他类型的 Au 纳米线则通过重构,扭曲和滑移等变形成新的不规则壳层螺旋结构.

图 4 为剥离碳纳米管后 Au 纳米线室温下弛豫前后的径向分布函数,弛豫前为粗实线,弛豫后为细实线. 从整体看,各典型结构 Au 纳米线的径向分布函数 $g(r)$ 第 1 峰位置均出现在 2.55—2.69 Å 之间, Au 原子密度 ρ 越大第 1 峰越靠前,即原子间距越小. 而失去碳纳米管的保护后,各典型结构 Au 纳米线的 $g(r)$ 第 1 峰位置均有所后移,即原子间距增大,由于纳米线轴向尺度受限,纳米线很难再保持原有的完美结构. 仔细观察,6-1, 7-1 和 10-4 型 Au 纳米线的 $g(r)$ 有较多的小峰出现,表现出一

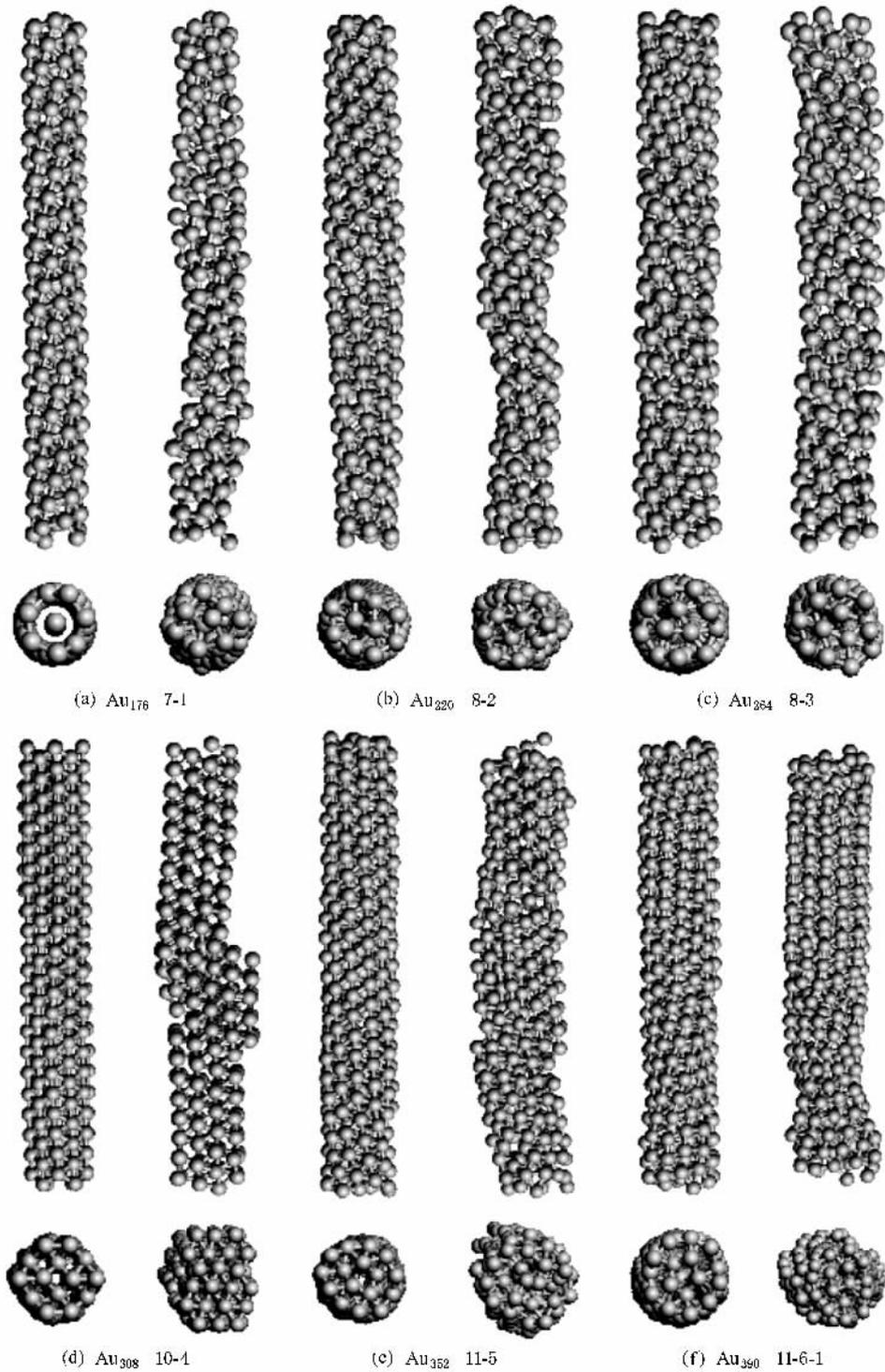


图3 剥离碳纳米管后 Au 纳米线室温下弛豫前后的结构(左边为弛豫前, 右边为弛豫后)

些长程序的性质. 而 8-2, 8-3, 11-5 和 11-6-1 等其他型 Au 纳米线的 $g(r)$ 表现出短程序的非晶结构. 6-1 和 7-1 型在剥离 C 保护后退化为典型的非晶结构. 10-4 型剥离 C 保护后, Au-Au 间距略有增大, $g(r)$ 曲线向后移且峰值降低并稍展宽, 形状基本不变.

综上所述认为, 碳纳米管内可以稳定存在一些结构特别的纳米线, 这些结构特别的纳米线在自由状态并不存在, 填充到碳纳米管中的 Au 纳米线的结构发生了明显的改变, 这为进一步设计和调控纳米线的结构提供了新的途径.

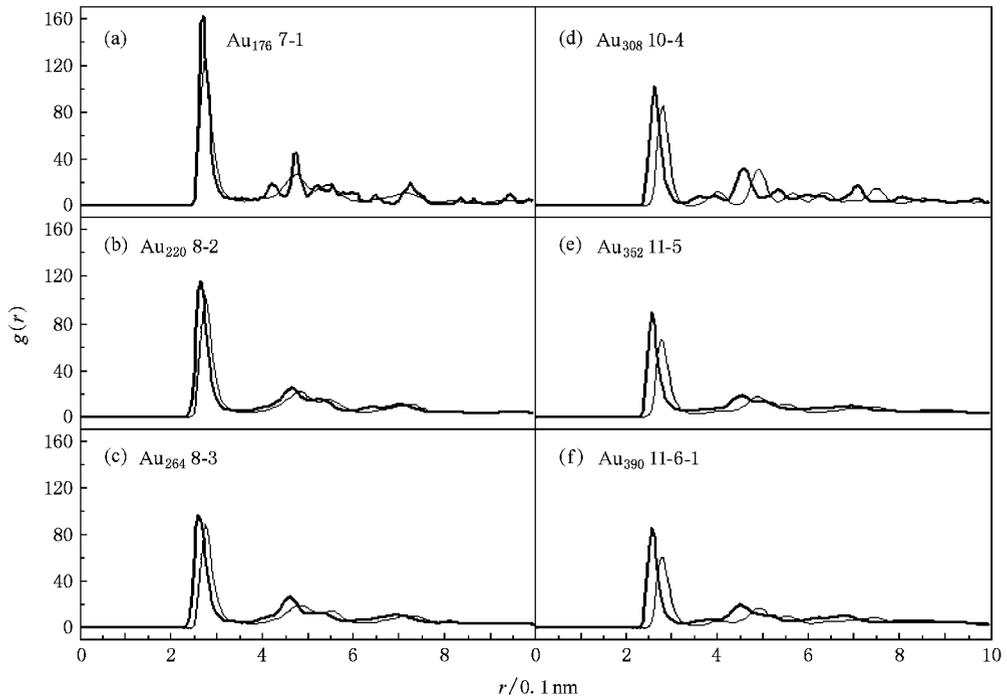


图 4 剥离碳纳米管后 Au 纳米线室温下弛豫前后的径向分布函数(弛豫前为粗实线,弛豫后为细实线)

4.3. (8,8) 碳纳米管内壳层螺旋结构 Au 纳米线的热稳定性

现在来考察纳米管内壳层螺旋 Au 纳米线的热稳定性. 图 5 是五种典型纳米管内壳层螺旋结构 Au 纳米线在不同温度下的模拟结果. 碳纳米管内壳层螺旋结构 Au 纳米线表现出非常好的热稳定性, 在 1500 K 时仍能很好地保持其初始结构, 在 2000 K, 6-1, 7-1, 8-2, 8-3 和 10-4 型纳米线仍很稳定, 11-5 和 11-6-1 型纳米线因碳纳米管破裂而分别在 2000 K 和 1500 K 不能稳定存在. 碳纳米管内壳层螺旋结构 Au 纳米线由于碳纳米管的保护作用, 其稳定温度高于块体 Au 晶体的熔化温度.

图 6 是 8-2 型碳纳米管内 Au 纳米线不同温度模拟结果. 我们发现, 随着模拟温度的不同, 碳纳米管内 Au 纳米线会发生结构的转变. 模拟温度在 1500 K 以下时, 中心层的两条 Au 线呈双绞线状两两绞合, 而当模拟温度为 1500 K 时, 中心层的两条 Au 线在轴向相互平行, 当模拟温度大于 1500 K 时, 中心层的两条 Au 线又呈双绞线状. 这种结构的改变可能引起纳米线的力学和电学性质的改变, 这为设计和研制新型的热敏材料提供了新的思路.

5. 结 论

我们采用分子动力学模拟方法对 (8,8) 碳纳米管内填充不同密度 Au 原子进行高温退火, 在室温 (300 K) 得到了稳定的壳层螺旋结构 Au 纳米线. 研究表明, 当碳纳米管内 Au 原子密度较低时, 碳纳米管内的 Au 为 6-1 型壳层螺旋结构的纳米颗粒, 当 Au 原子密度增大时, Au 在碳纳米管中形成单螺旋壳层内单线的 Au 纳米线, 当 Au 原子密度再增大时, Au 在碳纳米管中生成单螺旋壳层内多线的 Au 纳米线, 当 Au 原子密度进一步增大时, Au 在碳纳米管中为螺旋双壳层内单线的 3 层结构 Au 纳米线. 具体来说, Au 纳米线在 (8,8) 型碳纳米管中具有 6-1, 7-1, 8-2, 8-3, 10-4, 11-5 和 11-6-1 型等 7 种壳层螺旋稳定结构. 在失去碳纳米管的保护后, 室温条件下壳层螺旋结构 Au 纳米线将失去同轴对称的完美结构, 不再保持原有的结构形态, Au 原子会重新整形成不规则的壳层螺旋结构或类面心体结构的纳米线. 碳纳米管内壳层螺旋 Au 纳米线表现出非常好的热稳定性, 在 1500 K 时仍能很好地保持其初始结构, 纳米管内壳层螺旋结构 Au 纳米线由于碳纳米管的保护作用, 其稳定温度高于块体 Au 晶体的熔化温度. 随着温度的不同, 一些碳纳米管内的 Au 纳米线会发生明显的结构转变.

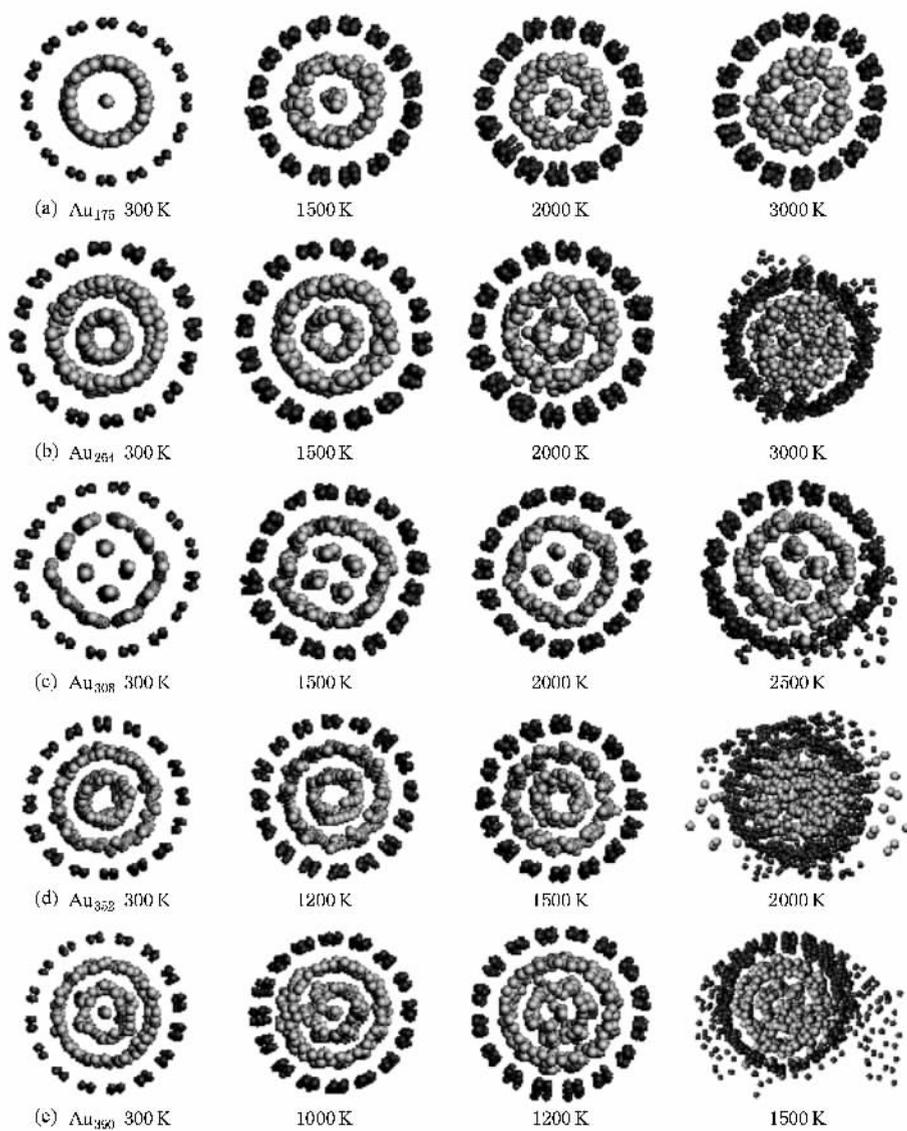


图5 碳纳米管内壳层螺旋结构 Au 纳米线不同温度模拟结果

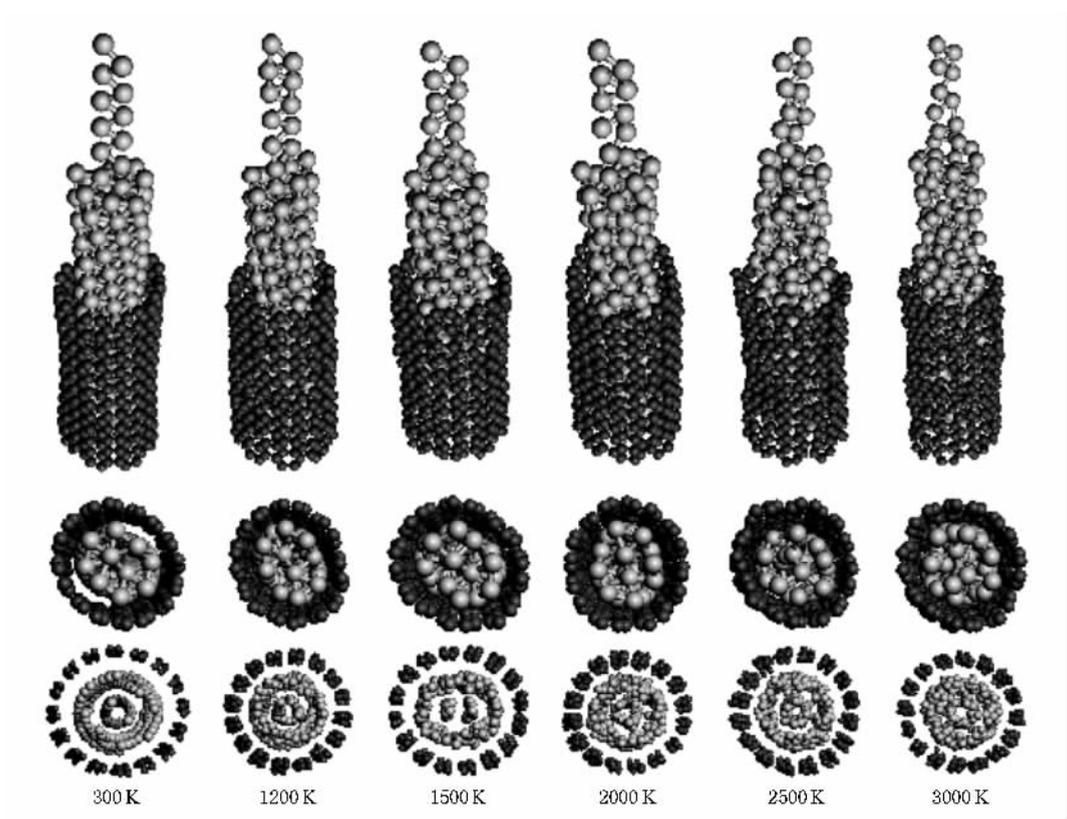


图 6 8-2 型碳纳米管内 Au 纳米线不同温度模拟结果

- [1] Ajayan M and Iijima S 1993 *Nature* (London) **361** 333
- [2] Tsang S C , Harris P J F , Green M L H 1993 *Nature* (London) **362** 520
- [3] Ajayan P M , Ebbesen T W , Ichihashi T , Iijima S , Tanigaki K , Hiura H 1993 *Nature* (London) **362** 522
- [4] Ajayan P M , Stephan O , Redlich P , Colliex C 1995 *Nature* (London) **375** 564
- [5] Tsang S C , Chen Y K , Harris P J F , Green M L H 1994 *Nature* (London) **372** 159
- [6] Pederson M R , Broughton J Q 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2689
- [7] Ugarte D , Chatelain A , de Heer W A 1996 *Science* **274** 1897
- [8] Ruoff R S , Lorents D C , Chan B 1993 *Science* **259** 346
- [9] Guerret C , Bouar L Y , Loseau A 1994 *Nature* (London) **372** 761
- [10] Mayne M , Grobert N , Terrones M , Kamalakaran R , Rühle M , Kroto H W , Walton D R M 2001 *Chem. Phys. Lett.* **338** 101
- [11] Grobert N , Hsu W K , Zhu Y Q , Hare J P , Kroto H W , Terrones M , Terrones H , Redlich P , Rühle M , Escudero R , Morales F 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 3363
- [12] Senger R T , Dag S , Ciraci S 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 196807
- [13] Yang J , Zhang W Q 2007 *Acta. Phys. Sin.* **56** 4017 (in Chinese)
[杨 炯、张文清 2007 物理学报 **56** 4017]
- [14] Lin J S , Ju S P , Lee W J 2005 *Phys. Rev. B* **72** 85448
- [15] Wu H A , Ni X G , Wang Y , Wang X X 2002 *Acta. Phys. Sin.* **51** 1412 (in Chinese) [吴恒安、倪向贵、王 宇、王秀喜 2002 物理学报 **51** 1412]
- [16] 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]
- [17] Gülseren O , Ercolessi F , Tosatti E 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3775
- [18] Bilalbegović G 1998 *Phys. Rev. B* **58** 15412
- [19] Wang B L , Yin S Y , Wang G H , Buldum A , Zhao J J 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2046
- [20] Wang J L , Chen X S , Wang G H , Wang B L , Lu W , Zhao J J 2002 *Phys. Rev. B* **66** 85408
- [21] Bilalbegović G 2000 *Solid State Comm.* **115** 73
- [22] Kondo Y , Takayanagi K 2000 *Science* **289** 606
- [23] Ercolessi F , Tosatti E , Parrinello M 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 719
- [24] Carnevali P , Ercolessi F , Tosatti E 1987 *Phys. Rev. B* **36** 6701
- [25] Weissmann M , García G , Kiwi M , Ramírez R , Fu C C 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125435
- [26] Li H Y , Ren X B , Guo X Y 2007 *Chem. Phys. Lett.* **437** 108
- [27] Choi W Y , Kang J W , Hwang H J 2003 *Phys. Rev. B* **68** 193405
- [28] Kang J W , Hwang H J 2004 *Nanotechnology* **15** 115
- [29] Kang J W , Jiang Q , Hwang H J 2006 *Nanotechnology* **17** 5485
- [30] Hwang H J , Kwon O K , Kang J W 2004 *Solid State Comm.* **129** 687

- [31] Schoen P A E , Walther J H , Poulidakos D , Koumoutsakos P 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 253116
- [32] Wang L , Zhang H W , Zhang Z Q , Zheng Y G , Wang J B 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 51122
- [33] Arcidiacono S , Walther J H , Poulidakos D , Passerone D , Koumoutsakos P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 105502
- [34] Tersoff J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2879
- [35] Tersoff J 1992 *Phys. Rev. B* **46** 15546
- [36] Tersoff J , Ruoff R S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 676
- [37] Berber S , Kwon Y K , Tománek D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4613
- [38] Schelling P K , Keblinski P 2003 *Phys. Rev. B* **68** 35425
- [39] Cleri F , Rosato V 1993 *Phys. Rev. B* **48** 22
- [40] Ju S P , Lin J S , Lee W J 2004 *Nanotechnology* **15** 1221
- [41] Ju S P , Weng M H , Sun S J , Lin J S , Lee W J 2007 *Nanotechnology* **18** 205706
- [42] Coura P Z , Legoas S B , Moreira A S , Sato F , Rodrigues V , Daniel S O , Ugarte D , Galvão D S 2004 *Nano. Lett.* **4** 1187
- [43] Luedtke W D , Landman U 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 3835

Structure and thermal stability of gold nanowire encapsulated in carbon nanotube *

Zhang Kai-Wang[†] Meng Li-Jun Li Jun Liu Wen-Liang Tang Yi Zhong Jian-Xin

(Department of Physics , Xiangtan University , Xiangtan 411105 , China)

(Received 18 September 2007 ; revised manuscript received 14 November 2007)

Abstract

The structure and thermal stability of gold nanowire encapsulated in single-walled carbon nanotube (SWCNT) were studied by molecular dynamics simulations. A (8,8) SWCNT was used as a model system and the simulated annealing method was employed to find the stable structure of the gold nanowire at room temperature. Our results show that the gold nanowire encapsulated in a (8,8) SWCNT has a cylindrical shape and a helical shell structure. The helical-shell nanowire is thermally stable at temperatures much higher than the melting temperature of its bulk counterpart and is different from the gold nanowire formed in free space without the nanotube envelope. We also found that the spiral nanowire undergoes structural changes at higher temperatures.

Keywords : nanowire , carbon nanotube , thermal stability , molecular dynamics simulation

PACC : 6146 , 6185 , 6550

* Project supported by the Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province (Grant No. 05A005) and the Cheung Kong Scholars Programme of China.

[†] E-mail : kwzhang@xtu.edu.cn