

# 碳纳米管熔接金电极的分子动力学模拟\*

左学云 李中秋 王伟 孟利军 张凯旺† 钟建新

(湘潭大学材料与光电物理学院,湘潭 411105)

(2010年5月16日收到;2010年9月30日收到修改稿)

利用分子动力学模拟方法,研究了单壁碳纳米管与 Au 电极的高温熔接. 模拟结果表明,用端口吸附了 Au 团簇的碳纳米管在高温下能很好地与 Au 电极熔接. 首先将 Au 团簇放置于碳纳米管开口处进行高温退火,退火温度在 1100 K 左右, Au 团簇部分 Au 原子进入碳纳米管内,吸入碳纳米管中的 Au 原子形成壳层螺旋结构的 Au 纳米线,管外 Au 团簇呈无定形结构. 然后将吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极进行熔接,高温退火后,碳纳米管与 Au 电极表面之间形成了稳固的熔接,熔接最佳温度在 800 K 左右.

**关键词:** 碳纳米管, 金电极, 分子动力学模拟

**PACS:** 61.48.De, 61.46.Df, 65.80.+n

## 1. 引言

使用碳纳米管构造纳米电子器件具有尺寸小、功耗少、造价低和速度快等优势,它有望替代硅材料成为后摩尔时代的重要电子材料<sup>[1,2]</sup>. 然而利用碳纳米管构造纳米电子器件面临着许多技术难题,碳纳米管与金属电极之间的连接就是制作碳纳米管电子器件需要克服的众多技术难题之一. 不论是测量碳纳米管的电子输运性质,还是构筑基于碳纳米管的纳米电子器件,大多是先将碳纳米管分散在基底表面上,再利用电子束刻蚀或其他微加工方法沉积金属电极. 近年来,碳纳米管与金属电极的熔接实验上已有了广泛的研究. Li 等<sup>[3]</sup>使用了一种碳纳米管与金属电极相连接的处理方法,首先进行碳纳米管溶液制备,然后将碳纳米管溶液加载于金属电极上,再采用介电电泳方法排布碳纳米管,最后通过直流退火完成处理. Yu 等<sup>[4,5]</sup>采用扫描电子显微镜内部一个聚焦的电子束将少量碳氢杂质沉积在碳纳米管上,结果碳纳米管被粘附在原子力显微镜的探针上. 这样的点焊技术已被用于碳纳米管与多晶硅表面的电子和机械连接. Madsen 等<sup>[6]</sup>报道

了一种将碳纳米管粘附到金属电极上形成高导电性电极的方法,通过聚焦电子束系统将具有良好导电性的 Au-C 复合物沉积到金属电极上的碳纳米管上. Chen 等<sup>[7]</sup>使用次兆声波超高频微幅振动压头对处于金属表面的碳纳米管施压,成功地将碳纳米管埋入和焊接到金属电极上,形成可靠的电接触连接和键合,实验证明这种碳纳米管与金属电极之间的纳米焊接处有较强的机械强度. 上述方法都是间接地将碳纳米管压接或粘附在金属上,难以达到最紧密的结合. 本文试图通过分子动力学模拟的方法寻找一种碳纳米管与金属电极紧密熔接的方法.

碳纳米管与金属电极连接的计算模拟研究也有报道. Seo 等<sup>[8]</sup>利用分子动力学方法研究了不同类型碳纳米管表面的 Au 团簇和 Pt 团簇的扩散性质,研究发现团簇与碳纳米管的接触面相匹配以及团簇底层线性原子排列是影响团簇扩散行为的主要因素. Andriotis 等<sup>[9,10]</sup>研究了金属焊接碳纳米管多端结的电子输运性质. Menon 等<sup>[11]</sup>对金属与碳纳米管的连接进行了理论分析,用紧束缚分子动力学方法计算了 Ni 在单壁碳纳米管管壁的成键方式,同 Ni 在石墨烯片上的成键方式进行了比较.

由于碳纳米管与金属电极接触的复合结构以及冷却过程中的结构演化信息很难由实验直接获

\* 国家自然科学基金(批准号: 10974166, 10774127)、教育部科技创新工程重大项目培育基金(批准号: 708068)和湖南省教育厅重点项目(批准号: 09A094)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: kwzhang@xtu.edu.cn

得,而采用第一性原理计算局限于一些简单的系统,因此采用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. 因为碳纳米管与金属电极直接熔接有困难,本文采用端口吸附了金属团簇的碳纳米管在高温下与金属电极熔接,碳纳米管与金属电极容易实现可靠的熔接. 我们采用(7,7), (8,8), (9,9)等扶手椅型碳纳米管和(14,0)锯齿型碳纳米管与 Au 电极进行熔接模拟. 研究表明, Au 团簇的部分 Au 原子高温下可吸入碳纳米管内,碳纳米管外的 Au 团簇呈无定形结构,这种端口吸附了 Au 团簇的碳纳米管能与 Au 电极在高温下紧密地熔接. 经高温退火至室温 300 K,碳纳米管与 Au 电极表面之间形成了稳固的熔接,吸入碳纳米管内的 Au 原子形成壳层螺旋结构的 Au 纳米线,熔接处的 Au 原子与 Au 电极表面完全熔合形成稳定的台阶状面心立方结构原子层.

## 2. 势能模型与计算方法

分子动力学模拟是在原子和分子水平上求解多体问题的重要计算机模拟手段,在研究纳米材料的结构、表面性质、热力学性质中被广泛应用<sup>[12-21]</sup>. 分子动力学模拟的关键是原子间相互作用势的选取. 模拟碳纳米管高温熔接 Au 电极涉及 C-C, C-Au 和 Au-Au 等 3 种原子间的相互作用.

C-C 相互作用由 Tersoff 势<sup>[22-24]</sup>描述, Tersoff 势能很好地描述表面重构能,较好地描述碳纳米管性质而被广泛应用<sup>[24-26]</sup>. Au-Au 相互作用由紧束缚(TB)模型势描述<sup>[27,28]</sup>, TB 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 d 态电子的过渡金属晶体结构中表现出很大的优势. 使用 TB 势, Ju 等<sup>[29,30]</sup>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<sup>[31]</sup>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

$$V = \sum_{i < j} 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right],$$

其中  $\epsilon = 0.01273$  eV,  $\sigma = 0.29943$  nm<sup>[32]</sup>.

Lennard-Jones 势因其计算简单而被广泛用于描述凝聚态物质之间相互作用. Lennard-Jones 势成功地描述了 Au 纳米颗粒在石墨片上的扩散行为<sup>[32]</sup>, Arcidiacono 等<sup>[33]</sup>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 纳米颗粒的结构性质.

本文采用正则系综(NVT)进行分子动力学模拟,运动方程的数值积分使用 5 值 Gear 预测-校正算法,截断半径为 1 nm,温度控制采用速度标度法,使用周期性边界条件,在碳纳米管周围留有足够的真空层,模拟步长为 1.0 fs. 对碳纳米管与 Au 团簇接触的初始结构,先做  $10^4$  步(10 ps)的松弛,再在高温下稳定弛豫  $10^6$  步(1 ns)后开始退火,退火速率为 20 K/ps,退火到室温 300 K 后再做  $2 \times 10^4$  步(20 ps)弛豫以便获得稳定的结构. 对吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极表面原子层接触的初始结构,先做  $10^4$  步(10 ps)的松弛,再在高温下稳定弛豫  $10^5$  步(100 ps)后开始退火,退火速率为 20 K/ps,退火到室温 300 K 后再做  $2 \times 10^4$  步(20 ps)弛豫以便获得稳定的结构. 对于端口吸附了 Au 团簇的碳纳米管熔接 Au 电极的初始结构,将碳纳米管和 Au 电极非接触两端的两层 C 原子和两层 Au 原子分别加以固定. 为了讨论方便,将碳纳米管与 Au 团簇熔接的复合结构记为  $Au_N @ CNTs(n, m)$ , 其中  $n, m$  为碳纳米管的指数,  $N$  为 Au 团簇中包含的 Au 原子数. 将吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极熔接的复合结构记为  $Au_N @ CNTs(n, m) @ MAu$ , 其中  $M$  为 Au 电极的原子层数.

## 3. 计算结果与讨论

### 3.1. 碳纳米管高温吸附 Au 团簇

首先构造(8,8)碳纳米管与包含不同原子数的 Au 团簇接触复合结构模拟元胞,其中 C—C 键长为 0.1421 nm,碳纳米管轴向长度为 9.968 nm. 将分别包含 20, 60, 80, 100, 140, 142, 144, 148, 160 个 Au 原子无定形分布的 Au 团簇放置于(8,8)碳纳米管的管口处,采用分子动力学模拟方法在 1100 K 弛豫后退火至室温 300 K 得到碳纳米管吸附 Au 团簇的稳定复合结构.

图 1 为 1100 K 高温退火, (8,8)碳纳米管端口分别吸附 20, 60, 80, 100, 140, 142, 144, 148, 160 个原子 Au 团簇的复合结构. 为考察其稳定性,我们将这些复合结构在室温下弛豫  $10^6$  步(1 ns), 其结构无明显变化,说明这些结构在室温下是稳定的. 从图 1 模拟结果中可以发现:当 Au 团簇较小( $N < 100$ )时, Au 原子会全部吸入碳纳米管内. 当 Au 团簇增大( $100 \leq N \leq 142$ )时, Au 团簇被吸入碳纳米管

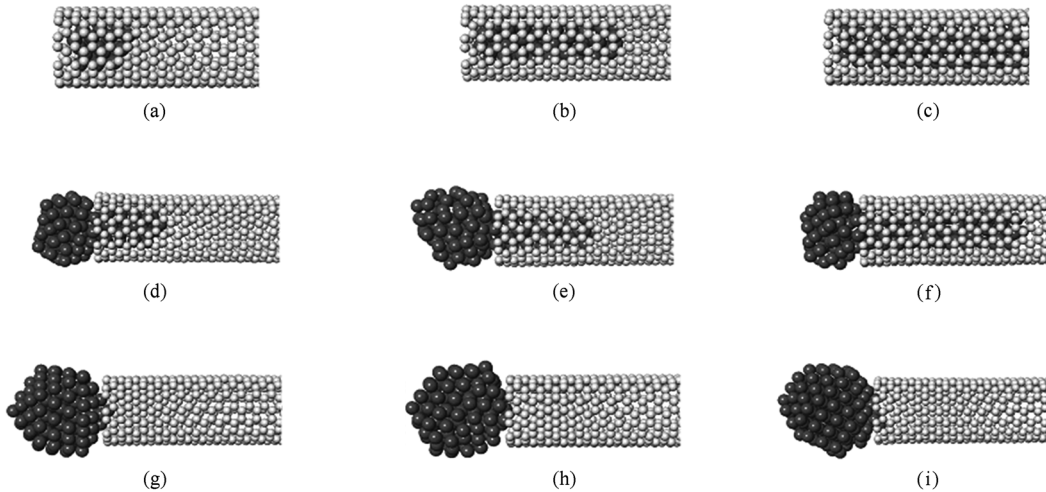


图1  $Au_N@CNTs(8,8)$  复合结构高温退火后的稳定结构. (a)  $N=20$ , (b)  $N=60$ , (c)  $N=80$ , (d)  $N=100$ , (e)  $N=140$ , (f)  $N=142$ , (g)  $N=144$ , (h)  $N=148$ , (i)  $N=160$

内的进程变得缓慢,一般情况下 Au 团簇部分进入碳纳米管内而部分留在管口外,也有可能全部进入碳纳米管内. 本文更感兴趣的是 Au 团簇部分吸入碳纳米管中的情形,这种情况下高温退火后进入碳纳米管中的 Au 原子形成壳层螺旋结构的 Au 纳米线,碳纳米管管外的 Au 团簇呈无定形结构. 当 Au 团簇过大 ( $N > 142$ ) 时, Au 原子不会进入碳纳米管内而是吸附在碳纳米管的管口, Au 团簇呈现有序的面心结构. 可以认为,只有大小合适的 Au 团簇才有利于形成稳固的复合结构.

我们注意到碳纳米管的能量基本保持不变,也就是碳纳米管在整个过程中形变能变化不大, Au 与碳纳米管的相互作用能随进入碳纳米管内 Au 原子数的不同而有所波动,且与碳纳米管和 Au 团簇的能量相比是很小的. 由于体系中 Au 原子数的变化引起体系结构的变化, Au 团簇总能量的变化趋势能反映体系总能量的变化趋势, Au 原子结合能能够较好地反映出 Au 团簇中原子结合的紧密程度. 本文重点计算了  $Au_N@CNTs(8,8)$  复合结构高温弛豫后稳定结构中 Au 团簇结合能随 Au 团簇大小的变化,结果如图 2 所示.

从图 2 我们得知, Au 团簇平均结合能的大小随 Au 团簇原子数的增大而增大, Au 团簇总结结合能随 Au 团簇增大呈线性增长趋势. Au 原子可以吸入碳纳米管内的最大 Au 团簇为  $N = 142$ , 这点从系统的能量变化关系中有明显体现.  $N$  较小时, Au 团簇单原子平均结合能与团簇的大小呈指数增长趋势.  $N \geq 100$  时结合能在  $3.46 \text{ eV}$  左右波动,  $N > 142$  时迅

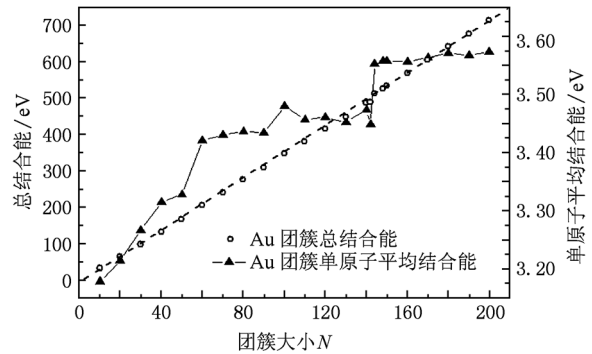


图2 高温退火后的稳定结构中  $Au_N$  团簇结合能随团簇大小的变化 ( $10 \leq N \leq 200$ )

速增大. 研究表明,当  $N < 100$  时, Au 团簇中 Au 原子会全部吸入碳纳米管内,管内的 Au 随着  $N$  的增加结构更加稳定,致使 Au 团簇单原子平均结合能趋向一个稳定的值. 随着 Au 团簇原子数  $N$  的增加,当  $100 \leq N \leq 142$  时会有部分 Au 原子留在管口处,呈无定形结构,使得 Au 团簇单原子平均结合能不够稳定. 而当  $N > 142$  时, Au 原子不会吸入碳纳米管内,结构向有序化转变, Au 团簇单原子平均结合能也随之迅速增大. 做一条 Au 团簇总结结合能随团簇大小线性增长的辅助线,仔细观察 Au 团簇总结结合能的变化可以发现,  $N \leq 142$  时 Au 团簇总结结合能相对要低一些. 为此我们将  $N = 140, 142, 144$  的复合结构中的碳纳米管脱离,将留下的 Au 团簇在  $1100 \text{ K}$  退火至常温  $300 \text{ K}$ , 并计算 Au 团簇单原子平均结合能分别为  $3.545, 3.543$  和  $3.549 \text{ eV}$ , 相差很

小. 与复合结构中 Au 团簇单原子平均结合能 3.474, 3.449 和 3.553 eV 进行比较可知,  $N = 140, 142$  时两者相差约 0.08 eV, 而  $N = 144$  两者几乎相等, 由此我们推测  $N > 142$  时单原子平均结合能迅速增大是由于碳纳米管的束缚被释放所致. 我们还计算了  $\text{Au}_N @ \text{CNTs}(14,0)$  和  $\text{Au}_N @ \text{CNTs}(9,9)$  复合结构, 都有相同的情形. 其中  $\text{Au}_N @ \text{CNTs}(14,0)$  能吸入碳纳米管内最大 Au 团簇为  $N = 148$ , Au 团簇单原子平均结合能在 3.47 eV 左右波动后迅速增大.

$\text{Au}_N @ \text{CNTs}(9,9)$  能吸入碳纳米管内最大 Au 团簇为  $N = 152$ , Au 团簇单原子平均结合能在 3.50 eV 左右波动后迅速增大. 只有 Au 团簇的尺寸较小时, Au 原子才能吸入碳纳米管内, 能吸入碳纳米管内最大 Au 团簇的尺寸与碳纳米管的管径有关, 碳纳米管的管径越大, 能吸入碳纳米管内最大 Au 团簇就越大.

图 3 给出了不同 Au 原子数的  $\text{Au}_N @ \text{CNTs}(8,8)$  高温熔接复合结构中 Au 原子的径向分布函数  $g(r)$ .

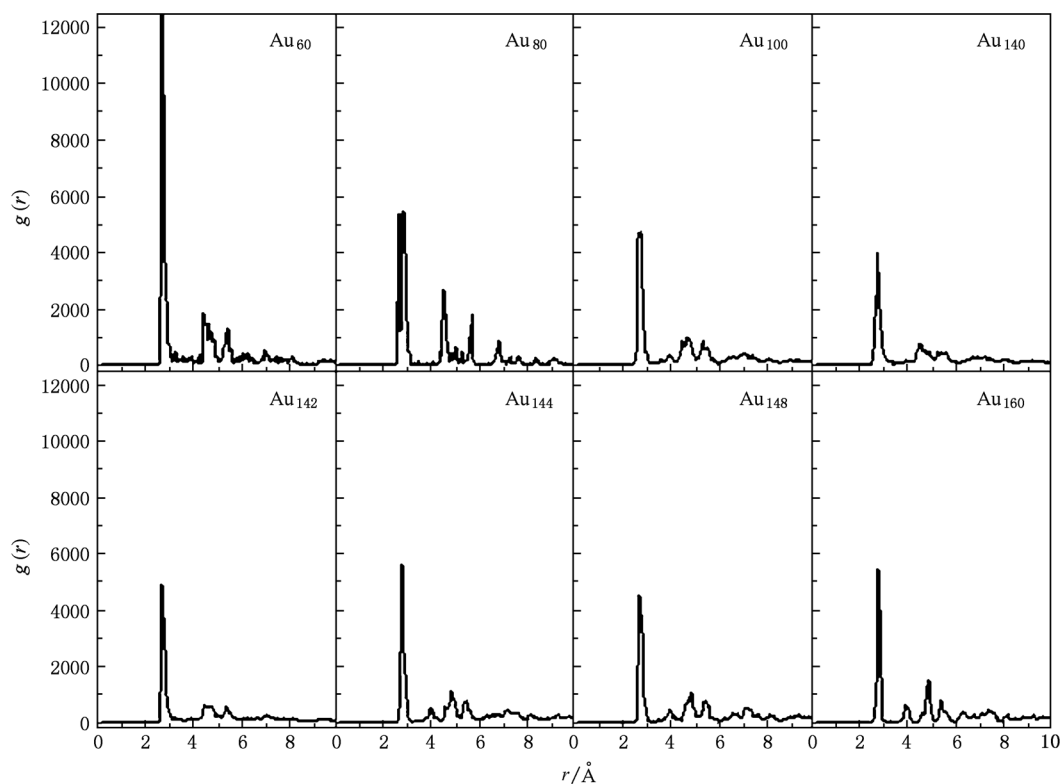


图 3 高温退火后  $\text{Au}_N @ \text{CNTs}(8,8)$  复合结构中 Au 原子的径向分布函数  $g(r)$

由图 3 可以看出,  $\text{Au}_{60}$  和  $\text{Au}_{80}$  中 Au 原子分布整齐. 它们的径向分布函数具有共同特点, 都存在一个位于 0.275 nm 处的尖锐孤立峰和许多峰值远小于第一峰并且分布尖锐的长程峰. 此时, Au 团簇中的 Au 原子全部吸入碳纳米管内, 高温退火后进入碳纳米管内的 Au 原子会形成壳层螺旋结构的 Au 纳米线.  $\text{Au}_{100}$ ,  $\text{Au}_{140}$  和  $\text{Au}_{142}$  中, 部分 Au 原子吸入碳纳米管内, 管外 Au 原子呈无定形结构. 它们的径向分布函数具有共同特点, 都存在一个位于 0.275 nm 处的尖锐孤立峰和许多峰值远小于第一峰并且分布平展的长程峰. 对于  $\text{Au}_{144}$ ,  $\text{Au}_{148}$  和  $\text{Au}_{160}$ , 径向分布函数的第一峰值位于 0.28 nm, 第二峰值位于 0.40 nm, 以后依次为

0.48, 0.55 nm 等, 清晰明显, 表现出晶态特征. 从 Au 团簇的结构看, 排列整齐有序.

另外, 我们又对 (8,8), (14,0) 和 (9,9) 碳纳米管吸附不同大小 Au 团簇的模拟结果进行了比较, 其中 C—C 键长为 0.1421 nm, 碳纳米管轴向长度分别为 10.2607, 10.5154, 10.5834 nm. 将不同大小的 Au 团簇分别放置于 (8,8), (14,0) 和 (9,9) 碳纳米管的管口处, 在 1100 K 弛豫后高温退火至室温 300 K 得到碳纳米管高温熔接 Au 团簇的稳定复合结构.

图 4 为不同类型的碳纳米管吸附 Au 团簇的高温退火后稳定结构. 模拟退火温度为 1100 K, (8,8), (14,0) 和 (9,9) 碳纳米管分别吸附  $N = 130, 140, 150$

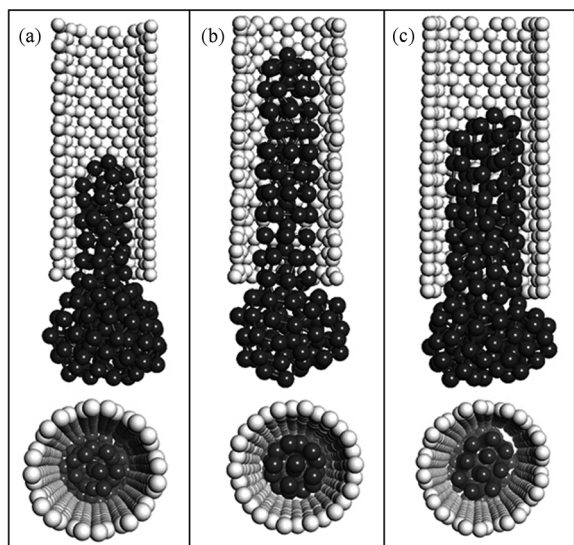


图4 高温退火后不同类型碳纳米管吸附 Au 团簇的稳定结构 (a)  $\text{Au}_{130}@\text{CNTs}(8,8)$ , (b)  $\text{Au}_{140}@\text{CNTs}(14,0)$ , (c)  $\text{Au}_{150}@\text{CNTs}(9,9)$

的 Au 团簇. 从图4 模拟结果可以看出, 当 Au 团簇大小适当时, 不同类型的碳纳米管都可能有一部分 Au 原子被吸入碳纳米管内, 高温退火后进入碳纳米管内的 Au 原子形成壳层螺旋结构的 Au 纳米线; 管外的 Au 原子呈无定形的结构.

### 3.2. 吸附了 Au 团簇的碳纳米管高温熔接 Au 电极

现在讨论吸附了 Au 团簇的碳纳米管高温熔接

Au 电极的情形. 将  $\text{Au}_{140}@\text{CNTs}(8,8)$  复合结构置于包括 10 层原子的 Au 电极表面的上方, 分别在不同温度下模拟熔接, 再退火至室温 300 K, 得到其稳定的结构.

图5 为模拟温度为 300, 600, 800, 1000, 1100 K 的  $\text{Au}_{140}@\text{CNTs}(8,8)$  与 Au 电极表面高温熔接稳定复合结构的截面剖视图. 模拟结果表明, 800 K 左右, 吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极表面原子层很好地熔接, 熔接处的 Au 团簇形成一个稳定有序结构的 Au 岛, 碳纳米管内的 Au 原子仍保持为壳层螺旋结构的 Au 纳米线. 如图 5(a) 和 (f) 所示, 温度较低 (300 K) 时, 与 Au 电极表面的原子层相熔接的 Au 团簇未能形成稳固的面心立方结构原子层. 如图 5(e) 和 (j) 所示, 温度过高 (1100 K) 时, 碳纳米管内的 Au 原子可能溢出碳纳米管, 碳纳米管与 Au 电极熔接不够稳固. 如图 5(b), (g), (c), (h), (d), (i) 所示, 分别为退火温度为 600, 800, 1000 K 时, 吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极表面原子层熔接处形成较稳固的台阶状面心立方结构原子层. 经比对后发现, 吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极表面的原子层熔接形成结构有序的台阶状原子层的最佳退火温度为 800 K 左右.

同时, 我们计算了不同温度 (300, 400, 600, 800, 1000, 1100 K) 下  $\text{Au}_{140}@\text{CNTs}(8,8)@10\text{Au}$  复合结构中的 Au 原子的径向分布函数  $g(r)$ , 结果如图 6 所示.

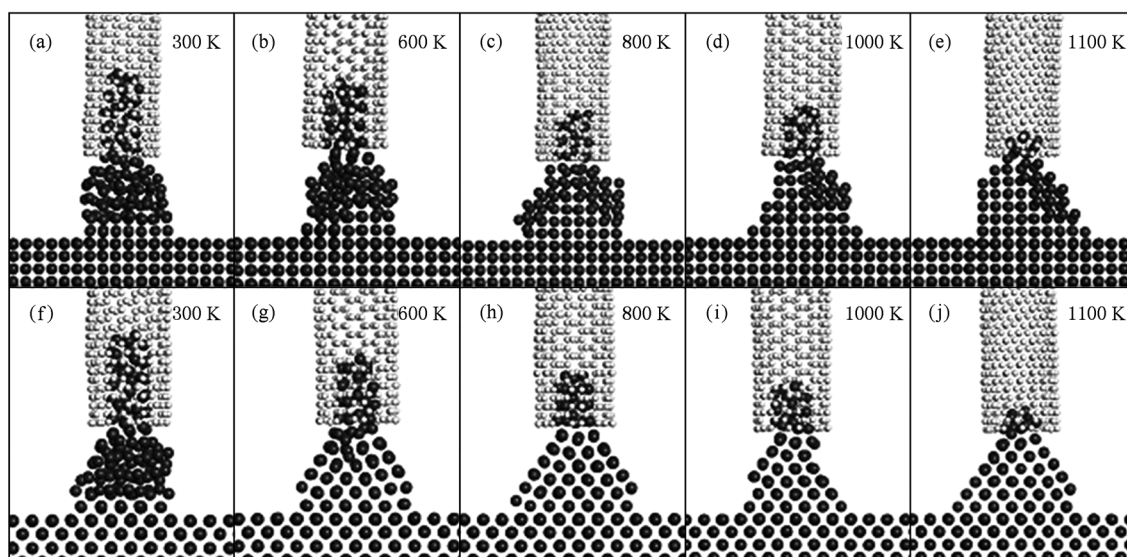


图5 不同退火温度  $\text{Au}_{140}@\text{CNTs}(8,8)@10\text{Au}$  复合结构 (a) 和 (f) 300 K, (b) 和 (g) 600 K, (c) 和 (h) 800 K, (d) 和 (i) 1000 K, (e) 和 (j) 1100 K, (a) — (e) 为沿着平行于 (100) 表面的截面剖视图, (f) — (j) 为沿着平行于 (110) 表面的截面剖视图

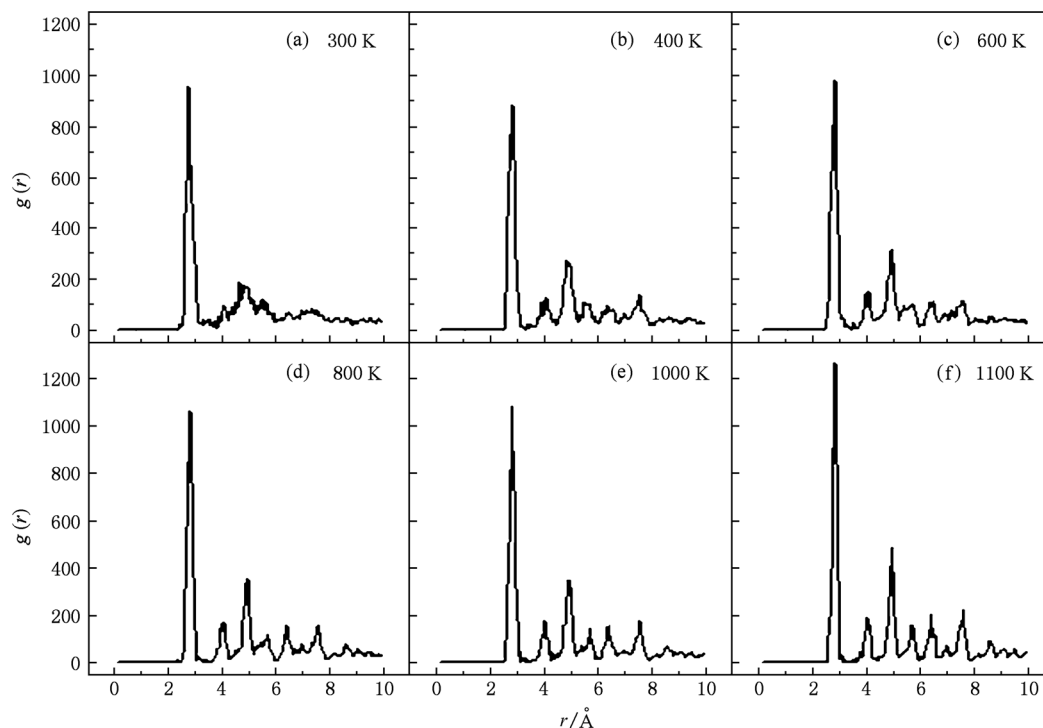


图6 不同退火温度下  $Au_{140}@CNTs(8,8)@10Au$  复合结构中 Au 原子的径向分布函数  $g(r)$  (a)300 K, (b)400 K, (c) 600 K, (d)800 K, (e) 1000 K, (f) 1100 K

图 6(a) 中, 存在一个尖锐的孤立峰和分散且较宽的近邻峰; 图 6(b), (c), (d), (e), (f) 中, 径向分布函数的第一峰值位于 0.285 nm, 第二峰值位于 0.405 nm, 以后依次为 0.495, 0.550 nm 等, 表现出较好的规则性. 常温 300 K 下碳纳米管与 Au 电极表面熔接处的结构呈现无序, 没有形成稳定的面心立方结构. 而模拟退火温度为 400, 600, 800, 1000, 1100 K 时, 形成的复合结构有序, 熔接处的 Au 原子与 Au 电极表面完全熔合形成稳定的台阶状面心立方结构原子层.

为讨论退火温度对形成碳纳米管与 Au 电极复合结构的影响, 我们还模拟了  $Au_{130}@CNTs(8,8)@10Au$ ,  $Au_{140}@CNTs(14,0)@10Au$  以及  $Au_{150}@CNTs(9,9)@10Au$  复合结构在不同模拟温度弛豫后分别退火至室温 300K 的稳定结构截面剖视图, 如图 7 所示.

从图 7 模拟结果得知, 高温退火后, 吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极表面原子层之间形成了稳固的熔接, 碳纳米管内的 Au 原子形成壳层螺旋结构的 Au 纳米线. 熔接处的 Au 团簇形成一个稳定有序结构的 Au 岛, 最佳退火温度为 800 K 左右.

#### 4. 结 论

采用分子动力学方法模拟了碳纳米管高温下吸附 Au 团簇以及吸附了 Au 团簇的碳纳米管高温熔接 Au 电极的生长过程, 分析了获得的稳定接触结构中 Au 原子的基本结构. 研究表明, 用端口吸附了 Au 团簇的碳纳米管高温熔接 Au 电极, 碳纳米管与 Au 电极的连接处形成了较稳固的台阶状面心立方结构的熔接原子层. 首先将 Au 团簇放置碳纳米管开口处进行高温退火, 退火温度在 1100 K 左右, Au 团簇部分 Au 原子进入碳纳米管内, 由于 Au 原子和碳纳米管之间的相互作用, 进入碳纳米管内 Au 原子形成壳层螺旋结构的 Au 纳米线, 留在碳纳米管外 Au 原子呈现无定形结构. 然后将吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极进行熔接, 高温退火后, 吸附了 Au 团簇的碳纳米管与 Au 电极表面原子层熔接, 碳纳米管与 Au 电极表面之间形成了稳固的熔接, 碳纳米管内的 Au 原子形成壳层螺旋结构的 Au 纳米线, 熔接处的 Au 团簇形成稳定有序结构的 Au 岛. 退火温度是影响 Au 原子自组织形成稳定的台阶状 Au 岛的重要因素之一, 熔接最佳温度在

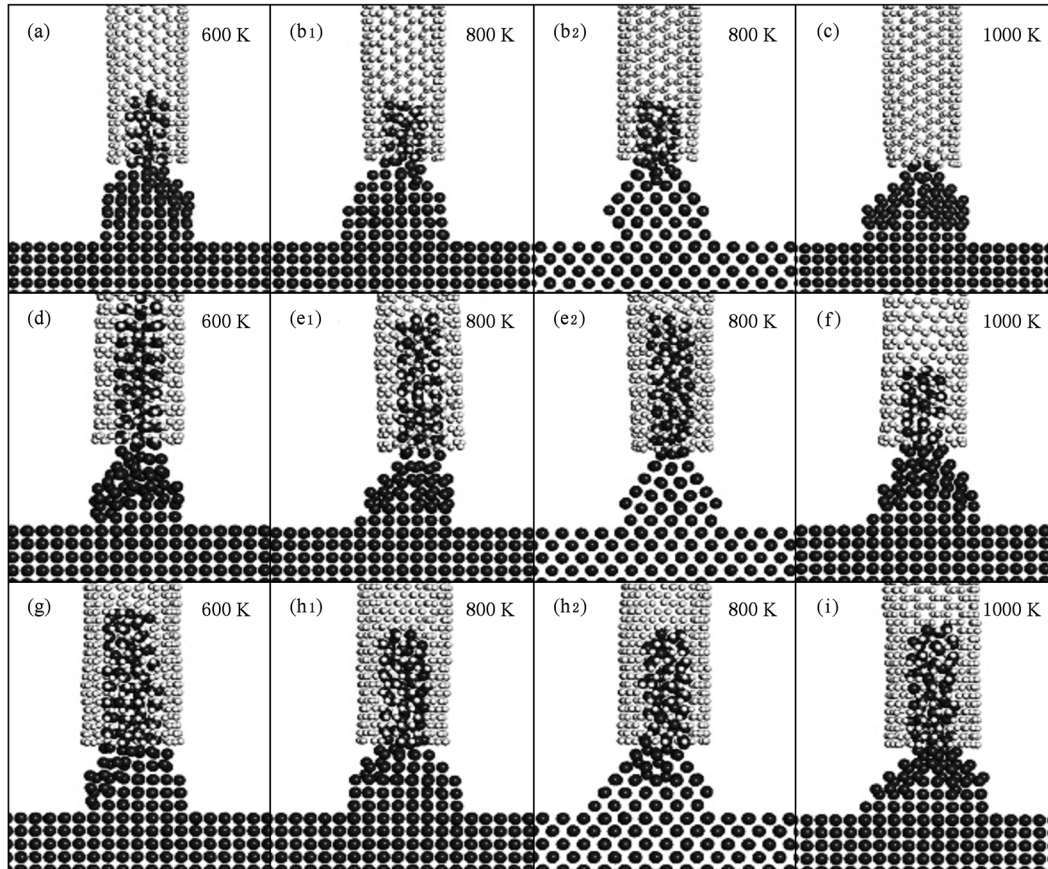


图7 不同温度退火下  $Au_N@CNTs(n,m)@10Au$  复合结构 (a)600 K, (b1)800 K, (b2)800 K, (c)1000 K, (d)600 K, (e1)800 K, (e2)800 K, (f)1000 K, (g)600 K, (h1)800 K, (h2)800 K, (i)1000 K, (a—c)  $Au_{130}@CNTs(8,8)@10Au$  的截面剖视图. (d—f)  $Au_{140}@CNTs(14,0)@10Au$  的截面剖视图. (g—i)  $Au_{150}@CNTs(9,9)@10Au$  的截面剖视图

800 K 左右. 这些原子尺度上的研究,有助于人们理解碳纳米管与 Au 电极连接的生长模式和形成机

理,对控制碳纳米管连接 Au 电极生长的实验研究提供重要的理论依据.

- [1] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56
- [2] Saito R, Dresselhaus G, Dresselhaus M 1999 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (London: Imperial College Press) p2
- [3] Li J, Zhang Q, Peng N, Zhu Q 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 153116
- [4] Yu M, Lourie O, Dyer M, Moloni K, Kelly T, Ruoff R 2000 *Science* **287** 637
- [5] Yu M, Dyer M, Skidmore G, Rohrs H, Lu X, Ausman K, Ehr J, Ruoff R 1999 *Nanotechnology* **10** 244
- [6] Madsen D, Mlhavé K, Mateiu R, Rasmussen A, Brorson M, Jacobsen C, Bggild P 2003 *Nano Lett.* **3** 47
- [7] Chen C, Yan L, Kong E, Zhang Y 2006 *Nanotechnology* **17** 2192
- [8] Seo D, Kim H, Ryu J, Lee H 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 10416
- [9] Andriotis A, Menon M, Gibson H 2008 *IEEE Sens. J.* **8** 910
- [10] Andriotis A, Menon M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 235415
- [11] Menon M, Andriotis A, Froudakis G 2000 *Chem. Phys. Lett.* **320** 425
- [12] 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]
- [13] Zhu Y B, Bao Z, Cai C J, Yang Y J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7833 (in Chinese) [朱亚波、鲍振、蔡存金、杨玉杰 2009 物理学报 **58** 7833]
- [14] Meng L J, Zhang K W, Zhong J X 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1009 (in Chinese) [孟利军、张凯旺、钟建新 2007 物理学报 **56** 1009]
- [15] Li J, Zhang K W, Meng L J, Liu W L, Zhong J X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 382 (in Chinese) [李俊、张凯旺、孟利军、刘文亮、钟建新 2008 物理学报 **57** 382]

- [16] Bao W X, Zhu C C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3552 (in Chinese)  
[保文星、朱长纯 2006 物理学报 **55** 3552]
- [17] Zhang K W, Meng L J, Li J, Liu W L, Tang Y, Zhong J X 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]
- [18] Chen Z H, Yu Z Y, Lu P F, Liu Y M 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4591
- [19] Gong X J, Fang H P 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2739
- [20] Li R, Hu Y Z, Wang H, Zhang Y J 2008 *Chin. Phys. B* **17** 4253
- [21] Xie F, Zhu Y B, Zhang Z H, Zhang L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5833 (in Chinese) [谢芳、朱亚波、张兆慧、张林 2008 物理学报 **57** 5833]
- [22] Tersoff J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2879
- [23] Tersoff J 1992 *Phys. Rev. B* **46** 15546
- [24] Tersoff J, Ruoff R 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 676
- [25] Berber S, Kwon Y, Tomanek D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4613
- [26] Schelling P, Koblinski P 2003 *Phys. Rev. B* **68** 35425
- [27] Cleri F, Rosato V 1993 *Phys. Rev. B* **48** 22
- [28] Massobrio C, Pontikis V, Martin G 1990 *Phys. Rev. B* **41** 10486
- [29] Ju S, Lin J, Lee W 2004 *Nanotechnology* **15** 1221
- [30] Ju S, Weng M, Sun S, Lin J, Lee W 2007 *Nanotechnology* **18** 205706
- [31] Coura P, Legoas S, Moreira A, Sato F, Rodrigues V, Dantas S, Ugarte D, Galvo D 2004 *Nano Lett.* **4** 1187
- [32] Luedtke W, Landman U 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 3835
- [33] Arcidiacono S, Walther J, Poulidakos D, Passerone D, Koumoutsakos P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 105502

## Nanowelding of contact between carbon nanotubes and gold electrodes \*

Zuo Xue-Yun Li Zhong-Qiu Wang Wei Meng Li-Jun Zhang Kai-Wang<sup>†</sup> Zhong Jian-Xin

(*Faculty of Materials, Optoelectronics and Physics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*)

(Received 16 May 2010; revised manuscript received 30 September 2010)

### Abstract

We report on the results of molecular dynamics simulations of nanowelding at high temperature between the gold electrodes and single-walled carbon nanotubes (SWNTs). We find that SWNTs with gold nanoclusters absorbed on their tips can build an excellent welding contact with gold electrodes. First, gold clusters are placed on open tips of SWNTs and are annealed at 1100 K. Gold atoms enter into the SWNTs and a shell-like helical structure inside the SWNTs and an amorphous structure outside of the SWNTs. Furthermore, the SWNTs absorbed with gold cluster are then placed on surfaces of gold electrodes. After annealing at high temperature, gold atoms absorbed in the SWNTs are redistributed on the surface of the gold electrodes and form excellent welding contact with the electrodes. The best annealing temperature for welding is about 800 K.

**Keywords:** carbon nanotubes, gold electrode, molecular dynamics simulation

**PACS:** 61.48. De, 61.46. Df, 65.80. + n

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974166, 10774127), the Cultivation Foundation of the Major Program of Science and Technology Innovation of Ministry of Education, China (Grant No. 708068), and the Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province, China (Grant No. 09A094).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: kwzhang@xtu.edu.cn