

通量可控的双壁碳纳米管水分子泵

曹平 罗成林 陈贵虎 韩典荣 朱兴凤 戴亚飞

Flux controllable pumping of water molecules in a double-walled carbon nanotube

Cao Ping Luo Cheng-Lin Chen Gui-Hu Han Dian-Rong Zhu Xing-Feng Dai Ya-Fei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 116101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.116101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.116101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I11>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

(n, n)-(2n, 0) 碳纳米管异质结的扭转力学特性

Torsional mechanical properties of (n, n)-(2n, 0) carbon nanotubes heterojunction

物理学报.2015, 64(10): 106102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.106102>

单壁碳纳米管膜及其三聚氰胺甲醛树脂复合材料的光电特性

Opto-electronic properties of the single-walled carbon nanotube film and melamine formaldehyde resin composite

物理学报.2014, 63(10): 106101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.106101>

缺陷对碳纳米管摩擦与运动行为的影响

Influence of defects on friction and motion of carbon nanotube

物理学报.2014, 63(5): 056101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.056101>

碳纳米管对接成异质结器件的计算模拟

Formation of all carbon heterojunction: through the docking of carbon nanotubes

物理学报.2013, 62(10): 106101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.106101>

Kondo 效应对磁杂质碳纳米管电输运特性的影响

Kondo effect on the electrical transport properties of carbon nanotubes

物理学报.2013, 62(9): 096101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.096101>

通量可控的双壁碳纳米管水分子泵*

曹平¹⁾ 罗成林^{1)2)†} 陈贵虎¹⁾ 韩典荣¹⁾³⁾ 朱兴凤¹⁾ 戴亚飞¹⁾

1)(南京师范大学, 物理科学与技术学院, 南京 210023)

2)(江苏省光电科学技术重点实验室, 南京 210023)

3)(江苏第二师范学院, 物理与电子工程学院, 南京 210013)

(2014年11月19日收到; 2014年12月25日收到修改稿)

以双壁碳纳米管作为基本单元设计了一种新型纳米机械水泵, 其内管固定作为水分子通道, 外管做活塞式轴向运动. 分子动力学计算表明, 水分子净通量及管内水分子电偶极矩分布均与外管运动速率有强烈耦合效应. 该设计可以实现水分子的高效单向运输, 且运输效率可以通过外管活塞运动的速率进行调控. 这些发现可为未来实用纳米分子泵器件的设计提供新的思路.

关键词: 碳纳米管, 分子动力学, 纳米泵, 输运性质

PACS: 61.48.De, 02.70.Ns, 66.10.Ed

DOI: 10.7498/aps.64.116101

1 引言

在众多生物体系中, 水分子在纳米尺度管道中的输运过程对生命组织的存活起着至关重要的作用^[1-3]. 碳纳米管由于有很好的疏水性, 作为人造纳米管道和离子通道, 可以用来模拟细胞中的膜结构^[4-7]. 纳米碳管内表面十分光滑, 且进入管中的水排列有序, 这为分子级别水输运泵^[8]的设计提供了可能性. 研究这种纳米水泵不仅对药物输送、分子医学等领域有重要意义, 而且可以为海水淡化、污水处理、传感器等^[9]纳米器件的设计提供理论依据.

如何在纳米尺度下获的可控、单向、持续的水输运是当前很活跃的研究课题. Duan和Wang^[10]用一段预先扭曲的单壁碳纳米管作为能量泵并通过其释放应力在管内驱动水分子运动, 通过分子动力学模拟发现, 水分子在管内的输运效率与预扭曲碳管的长度有关, 较短的预扭曲长度在释放应力时对管内水分子有更强的驱动力, 水分子输运效率较

高. Gong等^[11]采用电荷驱动方案, 通过调整电荷大小及正负类型到碳纳米管的不同邻近位置, 从而实现水分子在碳纳米管中的单向传输, 最大净通量约为 2.8 ns^{-1} . 然而, Zuo等^[12]利用同样的模型, 计算得到的净通量却小一个量级, 显示无明显的单向水流, 此类方案的效果尚存争议. Su等^[13]则研究了碳管轴向上含均匀电场的情况, 由于电场的作用, 碳纳米管内水分子的电偶极矩沿电场方向择优排列. 计算结果显示在水分子电偶极矩的择优方向, 水分子有更大的通量, 从而产生沿电偶极矩方向的净通量. 而Wang等^[14]进一步发现线性梯度电场可以明显提高管内水分子的定向传输效率. 近期, Li等^[15]用分子动力学模拟证实可利用绕碳管轴向旋转的电场与磁场相结合的方式, 使水分子中电荷受旋转磁场所产生的轴向洛伦兹力, 从而实现水分子的连续单向运动.

到目前为止, 多数相关研究主要集中在电驱动方式及单壁碳纳米管上. 然而, 实验表明多壁碳纳米管相对于单壁碳纳米管显现出更低的细胞毒性^[16]. 这对于碳纳米管在生物医学以及生物技术

* 国家自然科学基金青年基金(批准号: 21203097), 江苏省高校自然科学研究项目(批准号: 14KJB140006)和江苏高校优势学科建设工程资助的课题.

† 通信作者. E-mail: clluo@njnu.edu.cn

领域的运用至关重要^[17-21]. 同时, 在实际运用中, 多壁碳纳米管也可能更易制备和使用^[22-24]. 因此, 基于多壁碳纳米管设计的水传输通道对于生物体更具意义和应用价值.

2000年, Cuming和Zettl^[25]实现了将两端开口的多壁碳管中的内管抽出一段距离然后释放的纳米操纵, 对这一过程的观察发现, 抽出的内管以多壁碳管中心位置为对称点形成持续稳定的超高频振荡, 这一研究是纳米高频振荡功能器件领域的开创性工作. 之后, Legoas等^[26]通过计算指出内外管壁半径差为3.4 Å的碳管能在400 K温度以下发生千兆赫兹频率以上的持续振荡, 且这种振荡与碳管类型无关. 受到上述研究结果的启发, 我们拟利用抽离多壁碳管一定距离后的单管会以多壁管质心为对称点振荡的特性, 构思一种基于两端开口的双壁碳纳米管的机械分子泵(如图1). 通过对双壁管的外管进行纳米操纵, 触发外管的持续活塞式运动从而产生泵水动力, 实现水分子在内管中连续可控的单向运输.

2 模型和模拟方法

系统模型如图1(a)所示, 一个两端开口的双壁碳纳米管(6, 6)@(11, 11)被用来作为水的传输通道沿 z 轴放置, 其中心置于 $x = 0$ nm, $y = 0$ nm, $z = 0$ nm. 内管(6, 6)的长度和半径分别为16.4 Å和8.1 Å, 外管长度和半径分别为13.4 Å和11.5 Å, 内外管管壁之间距离为3.4 Å. 外管较内管稍短. 为了模拟生物体内输水膜的生物通道, 将碳管嵌在 xy 平面上分别固定于 $z = -8.2$ Å和 $z = 8.2$ Å处的两块石墨片之间, 这两块石墨片将水浴分成相同大小的两部分, 每部分大小为5.0 nm × 5.0 nm × 2.88 nm, 各包含2395个水分子, 使得水浴内水分子密度约为1.0 g/cm³. 模拟单元总的尺寸为5.0 nm × 5.0 nm × 7.4 nm.

所有计算采用分子动力学模拟软件NAMD (Nanoscale Molecular Dynamics)^[27]在NVT系综下进行, 计算中, 通过Langevin方程耦合使系统温度保持在300 K并在所有三个方向上应用周期性边界条件. 水分子采用常用的TIP3P^[28]模型, C-O原子间的相互作用使用CHARMM力场, 其Lennard-Jones相互作用势参数为 $\sigma_{co} = 0.335$ nm, $\epsilon_{co} = 0.431$ kJ/mol^[4], 截断半径为1.0 nm, 长程静

电相互作用采用PME(Particle Mesh Ewald)^[29]法计算. 为了获得可靠的水通量数据, 对每一种情况都模拟3次, 而每次模拟时间为110 ns, 前10 ns用于初始系统状态的弛豫, 以使系统达到热平衡状态, 在这段时间内, 碳纳米管保持不动, 如图1(b). 然后使双壁碳管中的外管沿着碳管轴向做活塞运动, 即以一定速率向上拉出(图1(c)), 当外管下部到达内管顶部位置时, 再以同样速率向下推回到原来位置(图1(d)). 整个过程中计算步长为2 fs, 每隔1 ps对水分子位置、速度等信息进行记录以用于数据统计和分析.

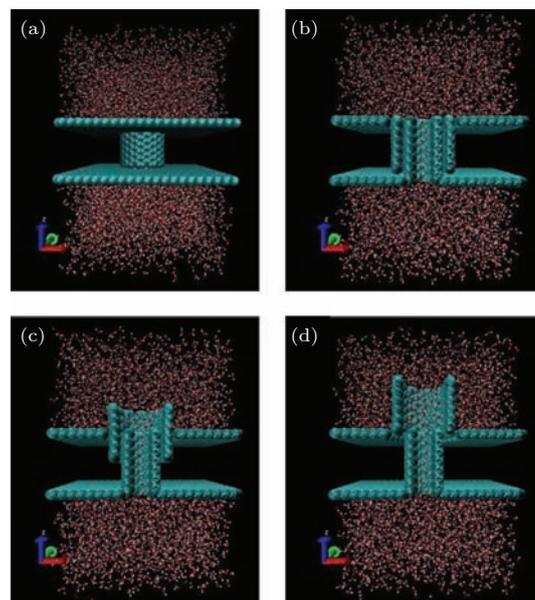


图1 水泵模拟过程图示 (a) 系统初始状态, 蓝色小球代表碳原子, 红色和白色小球分别代表水分子中的氧原子和氢原子; (b) 经过热平衡后的侧视图; (c) 外管向上拉出0.6 nm时的侧视图; (d) 外管拉出1.34 nm时的侧视图

Fig. 1. Snapshots of the water pump system simulation process: (a) the initial state, carbon atoms rendered by blue balls, the oxygen and hydrogen atoms of the water molecules are shown by red balls and white balls; (b) side view of the model at thermal equilibrium; (c) side view of the system after the outer tube out of 0.6 nm; (d) side view of the system after the outer tube out of 1.34 nm.

3 结果分析与讨论

3.1 水分子平均净通量(flux)的统计

与其他相关研究类似, 定义水分子的净通量为每纳秒内沿碳管一特定方向流出的水分子个数与沿相反方向流出的水分子个数的差值^[12,30-32]. 在模拟过程中, 我们使外管在0.10 Å/ps的最大速率

范围内, 分别以不同速率做往复式的活塞运动来考察系统中水的运输状况. 这个最大速率相当于外管以 10 m/s 的速率往复运动. 初看起来, 这是一个很大的速率, 在纳米尺度上以这样快的速率操纵碳管的移动似乎很难实现. 实际上, 根据 Cuming 和 Zettl [25] 以及 Legoas 等 [26] 的研究, 可以确认, 一旦碳管沿轴向被拉出一段距离, 当释放后, 由于管间存在的范德瓦尔斯力的吸引作用, 将使拉出的碳管趋于回到原来平衡位置而形成相对于平衡位置的振荡运动, 这个振荡运动的频率可高达几十 GHz. Legoas 等 [26] 估算出这种碳管振荡运动的极限速率高达 1370 m/s. Zou 等 [33] 曾用分子动力学研究了两根共轴放置、长度均为 4.79 nm 且近邻端口相距 0.2 nm 的 (5,5), (10,10) 碳管在水中的自组装过程, 发现它们在 500 ps 内就可形成稳定的 (5, 5)@(10, 10) 双壁管. 这个结果意味着碳管间的范德瓦尔斯吸引作用可使 (5, 5) 碳管在水中以约 0.1 Å/ps 的速率自发嵌入到 (10, 10) 碳管中而完成自组装. 因此, 在我们的模型中, 以 0.10 Å/ps 速率驱动外管做活塞运动具有合理性和可行性. 图 2 给出了外管速率与水分子平均净通量关系的计算结果, 其中也包含了外管保持不动, 即外管未做活塞运动的平均净通量结果. 从图中可以看出, 当外管速率为零时, 对应的平均净通量值并不为零, 约为 0.2 ns^{-1} . 这个净通量的方向具有随机性, 其产生原因是由于 100 ns 的统计时间还不够长, 不足以平衡净通量在方向上的统计误差. 理论上而言, 这个净通量值在无限长时间范围内的平均值应等于零. 此数据也说明, 对于外管做活塞运动时, 在 100 ns 时长内所得到的水分子平均净通量值应存在 $\pm 0.2 \text{ ns}^{-1}$ 的方向统计误差值. 但是一旦外管的活塞运动开始, 所产生的水分子平均净通量均是沿 z 轴正向, 即外管拔出方向. 当外管移动速率 v 小于 0.05 Å/ps 时, 水分子平均净通量随外管移动速率单调上升, 直至外管移动速率为 $v = 0.05 \text{ Å/ps}$ 时达到最大值 2.02 ns^{-1} . 这个平均净通量值约是生物仿真水通道中平均净通量值 ($\sim 0.28 \text{ ns}^{-1}$) [12] 的 7 倍, 与实验得到的低渗透压下生物水通道蛋白 (aquaporin channels) 中的净通量值 1.8 ns^{-1} [34,35] 相当, 比用轴向均匀电场引发的单向平均水通量值 ($\sim 1.1\text{--}1.2 \text{ ns}^{-1}$) [13] 高 70%. 当外管以更大速率运动时, 净通量却随速率增加而单调递减. 但不管外管速率如何, 其所引发的平均净通量值总是大于外管不动时的净通量值.

这些结果表明, 外管的活塞运动总是有利于单向水流的产生, 通过调控外管的运动速率可以在一定程度上实现对水通量大小的调控, 更大的外管速率并不总是更加高效, 而对应于最大单向水通量, 外管活塞运动速率存在一个最优值.

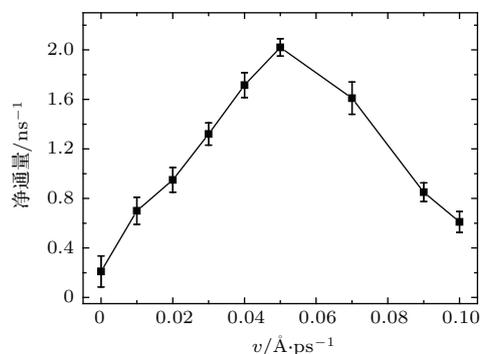


图 2 (6, 6)@(11, 11) 碳纳米管中外管不同移动速率下水的净通量

Fig. 2. The water flux across various piston rates considered for (6, 6)@(11, 11) pumping system.

传统活塞式机械水泵的工作原理是利用大气压强实现水流的运输, 而本文的双壁碳管泵水系统虽然在工作形态上与传统机械式水泵类似, 但由于碳管两端的水浴具有相同的水分子密度, 碳管两端并不存在压强差, 所以其产生单向水通量的物理机理与传统机械水泵的机理有本质不同. 在本系统中, 水分子受力的来源只有碳管上的碳原子对水分子的范德瓦尔斯力、水分子间的范德瓦尔斯力和水分子间的长程静电力. 明显的, 形成单向水流的动因来源于外管的活塞式运动, 水分子间的范德瓦尔斯力及静电力只对水的结构起关键作用, 对水的运输它们属于内力, 不会起主要和实质性的作用. 因此, 细致分析碳原子对水分子范德瓦尔斯作用的变化可以帮助我们理解水分子单向运输的机理. 最初, 碳管内部没有水分子且外管静止, 但由于碳原子对水分子的范德瓦尔斯吸引, 水分子很快从两端进入双壁碳管的内管, 形成一维水链结构, 系统达到准平衡状态. 此时水分子只有随机热运动, 净通量理论上应等于零, 但在有限时间尺度内, 可在统计涨落意义上存在指向某一方向的小的净通量. 而范德瓦尔斯力的平衡点处于体系质心 $z = 0$ 处, 即处于平衡点位置的水分子所受碳原子的范德瓦尔斯力为零, 平衡点以外的水分子受到的力则沿轴向指向 $z = 0$ 位置. 当外管移动时, 此平衡点随外管向上拔出而跟随着向 z 轴正向移动, 当外管推回到原位时, 此平衡点也再度回到 $z = 0$ 处. 无论是拉

出外管还是推回外管的过程, 系统范德瓦尔斯力的平衡点始终处于 $z \geq 0$ 位置. 通过细致研究内管中在 $z = 0$ 处的水分子所受外管轴向范德瓦尔斯力随外管移动位置变化的关系, 可以明显的发现外管的移动确实增加了范德瓦尔斯力在轴向上的合力, 并且轴向上增大的力有一个先增大后减小的趋势, 最大增加的力为 $2.632 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{nm}^{-1}$ 是位于外管移出平衡点 0.736 nm (内管顶部附近) 位置处. 所以, 伴随着外管的活塞运动, 其总的效果是系统内水分子具有一个向 $+z$ 方向的定向加速过程. 进一步对这种外管活塞式运动的拉出和推进的过程进行多个周期的考察, 发现两个方向上的水通量总体都沿着 $+z$ 方向, 而且并没有明显的差异, 只存在统计上的涨落. 这是因为碳管两端并不存在压强差 (两端水浴具有相同的水分子密度), 并且计算发现在拉和推的过程中内管中水分子所受外管的范德瓦尔斯力轴向的合力大小变化几乎是一致的, 进而两过程水流无明显差异. 因此, 外管上移的过程中, 不仅增加了内管水分子的加速距离 (越过原平衡点 $z = 0$ 后还继续加速), 同时还增加了范德瓦尔斯力在轴向上的合力, 这构成了外管活塞运动时导致水分子产生向上净通量的根本原因. 然而并不是外管移动速率越大就越有利于水的定向移动, 外管速率增大虽然对水分子运动的加速有利, 但同时对外管加速运动作用的时间却变短. 因此, 要获得最大的定向水通量, 就必须在外管移动速率与水分子被加速的时间上取得平衡. 在我们的模拟系统中, 这一平衡点就是外管速率 $0.05 \text{ \AA}/\text{ps}$, 对应于这一速率, 可以获得最大的平均水通量.

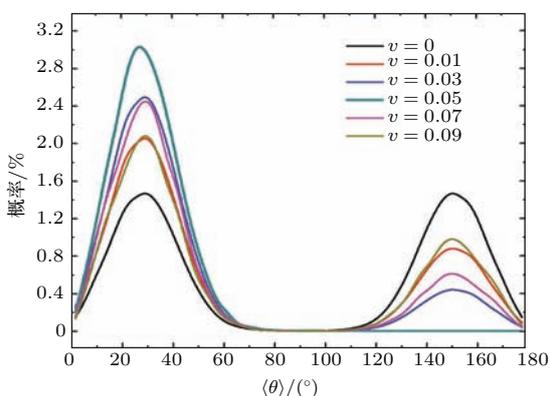


图3 不同外管移动速率的系统中, 管内水分子的电偶极矩取向分布

Fig. 3. Probability distributions of the average dipole orientation of the water molecules inside the inner tube for various piston rates.

3.2 水分子平均偶极矩取向分布

已有的一些研究^[12-14]发现碳管内水通量与管内水分子的电偶极矩取向有很强关联. 为此, 我们对外管不同移动速率情况下管内水分子平均电偶极矩取向分布进行了统计, 结果如图3所示, $\langle \theta \rangle$ 表示处于碳管内的水分子电偶极矩方向与 z 轴夹角的平均值. 当 $0 < \langle \theta \rangle < 90^\circ$ 时, 称为正偶极态, 当 $90^\circ < \langle \theta \rangle < 180^\circ$ 时, 称为负偶极态^[15]. 显然, $\langle \theta \rangle$ 主要分布在 $0-60^\circ$ 和 $120^\circ-180^\circ$ 这两个范围之间, 电偶极矩方向分布的两个极大值分别位于 30° 和 150° . 这与其他研究结果一致^[36-38]. 有趣的是, 管内水分子电偶极矩的分布与外管速率有强烈耦合效应, 且这种耦合关联并不是单调变化的. 当 $v = 0$, 即外管静止时, 系统关于碳管中心镜像对称, 故管内水分子的偶极矩分布相对于 $\langle \theta \rangle = 90^\circ$ 对称, 体现为正偶极态和负偶极态等权重分布. 而有外管活塞运动时, 正偶极态分布权重总是大于负偶极态分布权重, 说明外管的运动使管内水分子电偶极矩在更多的时间范围内沿 z 轴正向排列. 由于本文研究的系统, 外管总是沿 z 轴正向拉出, 这也意味着外管拉出的方向实际上也是管内水分子电偶极矩的择优方向. 在外管速率达到 $0.05 \text{ \AA}/\text{ps}$ 之前, 正偶极态份额随着外管运动速率单调上升, 负偶极态份额单调下降, 当外管速率为 $0.05 \text{ \AA}/\text{ps}$ 时, 管内水分子几乎全部转为正偶极态而负偶极态消失, 正偶极态分布与负偶极态分布差异也达到最大值. 值得注意的是, 这个速率正好对应于最大的水流净通量. 进一步增加外管速率后, 正偶极态权重从其峰值单调回落, 而负偶极态则持续上升, 水流净通量也随之下降. 这些结果说明, 管内水分子电偶极矩取向排列越有序, 越有利于水分子定向运输, 且这种定向运输的方向与正偶极态方向一致. 此外, 外管的运动一方面改变了碳管原子对水分子范德瓦尔斯作用的平衡位置从而使水分子获得加速, 另一方面还可以调控管内水分子电偶极矩排列的有序程度, 这两种效应的共同作用是提高水分子单向运输效率的关键因素.

作为对比, 图4给出了外管不同移动速率下内管中水分子平均偶极矩取向与时间的关系. 当外管速率 $v = 0$ 时, 管内水分子 $\langle \theta \rangle$ 频繁地在正偶极态和负偶极态之间发生翻转, 正偶极态与负偶极态份额在总体上相当, 与图3中偶极矩分布呈现两个对

称峰的情形相对应. 在 300 ns 时间内, 平均偶极矩共发生了 69 次翻转, 翻转周期约为 $T_{\text{flip}} = 4.34$ ns, 这与 Su 等在零电场下的结果 $T_{\text{flip}} = 4.26$ ns 相近^[13]. 当外管开始运动后, 正偶极态份额明显增加, 在外管速率 $v < 0.05$ Å/ps 时, 翻转频率随着速率的增加单调下降, 正偶极态越来越多. 特别的, 当外管速率达到 $v = 0.05$ Å/ps 时, 水分子几乎完全处于正偶极态, 翻转频率为零, 偶极矩不再发生翻转. 而进一步增加外管速率, 翻转频率又从零开始随速率的增加而增大, 正偶极态份额逐渐下降, 负偶极态份额依次增加. 这些现象再次说明管内水分子电偶极矩的双取向不利于水分子的单向输运, 与 Wan 等的结论^[36] 相同. 至于为什么恰巧是外管速率 $v = 0.05$ Å/ps 时, 系统能获得最大净通量、管内水分子偶极矩最有序, 目前还不是很清楚. 根据我们的计算, 有迹象表明当外管速率 $v = 0.05$ Å/ps 时, 管内水分子的平均迁移速率也几乎为 0.05 Å/ps, 而外管速率为其他值时, 管内水分子的平均迁移速率则与外管速率偏离较大, 或许正是这种水分子迁移速率与外管运动速率的完全匹配是导致最大水通量的原因, 相关研究目前正在进行中.

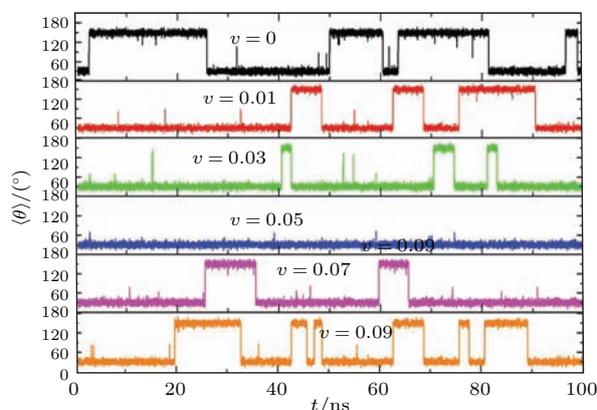


图 4 外管不同移动速率下, 内管水分子平均偶极矩取向随时间的关系

Fig. 4. Evolution of the average dipole orientation of the water molecules inside the inner tube for various piston rates.

4 结 论

本文构思了一种基于双壁碳纳米管(6, 6)@(11, 11)的纳米机械水泵, 水分子单向输运的驱动力来源于碳原子与水分子之间的范德瓦尔斯力. 利用分子动力学方法, 我们系统计算了外管以不同

速率进行活塞式运动时系统内水分子在碳管中的单向输运行为. 分析发现, 外管的活塞式运动有利于水分子的单向输运, 水分子净通量方向与外管拔出方向一致且这一方向也是管内水分子电偶极矩分布的择优方向. 管内水的净通量、水分子电偶极矩分布与外管速率有强烈耦合效应, 对应于最大净通量, 外管运动速率有一确定值, 管内水分子电偶极矩全部沿净通量方向排列. 在此速率以下, 水分子净通量及电偶极矩取向有序度随外管速率单调增加, 而在此速率之上, 净通量及电偶极矩取向有序度却随外管速率单调下降.

上述结果表明我们所提出的纳米机械水泵可以有有效的实现水分子单向传输, 其传输效率比均匀电场调控的纳米水泵效率更为高效, 且传输效率可以通过改变外管运动的活塞运动速率加以调控, 这为未来相关纳米水运输器件的设计提供了新的思路.

参考文献

- [1] de Groot B L, Grubmüller H 2001 *Science* **294** 2353
- [2] Carrero-Sanchez J C, Elias A L, Mancilla R, Arrellin G, Terrones H, Laclette J P, Terrones M 2006 *Nano Lett.* **6** 1609
- [3] Yang Y L, Li X Y, Jiang J L, Du H L, Zhao L N, Zhao Y L 2010 *ACS Nano* **4** 5755
- [4] Zhu F, Schulten K 2003 *Biophys. J.* **85** 236
- [5] Kalra A, Garde S, Hummer G 2003 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **100** 10175
- [6] Xu K, Wang Q S, Tan B, Chen M X, Miao L, Jiang J J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 096101 (in Chinese) [徐葵, 王青松, 谭兵, 陈明璇, 缪灵, 江建军 2012 物理学报 **61** 096101]
- [7] Shen L, Xu Z, Zhou Z W, Hu G H 2014 *Chin. Phys. B* **23** 118201
- [8] Kral P, Tomanek D 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 5373
- [9] Insepov Z, Wolf D, Hassanein A 2006 *Nano Lett.* **6** 1893
- [10] Duan W H, Wang Q 2010 *ACS Nano* **4** 2338
- [11] Gong X J, Li J Y, Lu H J, Wan R Z, Li J C, Hu J, Fang H P 2007 *Nature Nanotechnology* **2** 709
- [12] Zuo G C, Shen R, Ma S J, Guo W L 2010 *ACS Nano* **4** 205
- [13] Su J Y, Guo H X 2011 *ACS Nano* **5** 351
- [14] Wang Y, Zhao Y J, Huang J P 2011 *J. Phys. Chem. B.* **115** 13275
- [15] Li X P, Kong G P, Zhang X, He G W 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 143117
- [16] Jia G, Wang H F, Yan L, Wang X, Pei R J, Yan T, Zhao Y L, Guo X B 2005 *Environ. Sci. Technol.* **39** 1378
- [17] Chen X, Kis A, Zettl A, Bertozzi C R 2007 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **104** 8218

- [18] Lacerda L, Raffa S, Prato M, Bianco A, Kostarelos K 2007 *Nano Today* **2** 38
- [19] Bianco A, Kostarelos K, Prato M 2005 *Curr. Opin. Chem. Biol.* **9** 674
- [20] Heister E, Lamprecht C, Neves V, Tilmaciu C, Datas L, Flahaut E, Soula B, Hinterdorfer P, Coley H M, Silva S R P, McFadden J 2010 *ACS Nano* **4** 2615
- [21] Prato M, Kostarelos K, Bianco A 2008 *Acc. Chem. Res.* **41** 60
- [22] 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]
- [23] Wang J L, Xiong G P, Gu M, Zhang X, Liang J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4536 (in Chinese) [王建立, 熊国平, 顾明, 张兴, 梁吉 2009 物理学报 **58** 4536]
- [24] Zhang K W, Li Z Q, Wu J, Peng X Y, Tan X J, Sun L Z, Zhang J X 2012 *Chin. Phys. B* **21** 106102
- [25] Cumings J, Zettl A 2000 *Science* **289** 602
- [26] Legoas S B, Coluci V R, Brage S F, Coura P Z, Dantas S O, Galvao D S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 055504
- [27] Phillips J C, Braun R, Wang W, Gumbart J, Tajkhorshid E, Villa E, Chipot C, Skeel R D, Kale L, Schulten K 2005 *J. Comput. Chem.* **26** 1781
- [28] Jorgensen W L, Chandrasekhar J, Madura J D, Impey R W, Klein M L 1983 *J. Chem. Phys.* **79** 926
- [29] Essmann U, Perera L, Berkowitz M L, Darden T, Lee H, Pedersen L G 1995 *J. Chem. Phys.* **103** 8577
- [30] Hummer G, Rasiah J C, Nowortya J 2001 *Nature* **414** 188
- [31] Wan R Z, Li J Y, Lu H J, Fang H P 2005 *J. Am. Chem. Soc.* **127** 7166
- [32] Li J Y, Gong X J, Lu H J, Li D, Fang H P, Zhou R H 2007 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **104** 3687
- [33] Zou J, Ji B, Feng X Q, Gao H 2006 *Small* **2** 1348
- [34] Heymann J B, Engel A 1999 *News. Physiol. Sci* **14** 187
- [35] Walz T, Smith B L, Zeidel M L, Engel A, Agre P 1994 *J. Biol. Chem.* **269** 1583
- [36] Wan R Z, Lu H J, Li J Y, Bao J D, Hu J, Fang H P 2009 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11** 9898
- [37] Joseph S, Aluru N R 2008 *Nano Lett.* **8** 452
- [38] Joseph S, Aluru N R 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 064502

Flux controllable pumping of water molecules in a double-walled carbon nanotube*

Cao Ping¹⁾ Luo Cheng-Lin^{1)2)†} Chen Gui-Hu¹⁾ Han Dian-Rong¹⁾³⁾
 Zhu Xing-Feng¹⁾ Dai Ya-Fei¹⁾

1) (School of Physics and Technology, Nanjing normal University, Nanjing 210023, China)

2) (Jiangsu Key Laboratory on Optoelectronic Technology, Nanjing 210023, China)

3) (School of Physics and Electronic Engineering, Jiangsu Second Normal University, Nanjing 210013, China)

(Received 19 November 2014; revised manuscript received 25 December 2014)

Abstract

A water pumping system model has been designed based on the double-walled carbon nanotube. In this system, the inner tube is fixed as the water channel, while the exterior one can move, similar to the piston motion along the axial direction, to create a pumping force. Molecular dynamics simulations confirm that both the water flux and the water dipole orientation are sensitive to the velocity of motions of the outer tube so that a controllable unidirectional water flow can be achieved in this system by varying the velocity. Its pumping ability comes mainly from the carbon-water van der Waals driving forces of the exterior tube. The piston motion of the outer tube changes the position of the vdW balance point, which not only leads to the increase of vdW force on the water molecules already residing in the inner tube, but also enlarges their accelerated distance. Meanwhile, the orientation of water molecules inside the inner tube is strongly coupled to the water flux, the probability of +dipole states attains unity at $v = 0.05 \text{ \AA}/\text{ps}$, where the water flux reaches its maximum value (2.02 ns^{-1}). Compared to the pump which is controlled by uniform electric field, the transmission efficiency of our mechanical pump is higher. This design may open a new way for water pumping in the field of nanodevices.

Keywords: carbon nanotube, molecular dynamics simulation, water pumping system, transport property

PACS: 61.48.De, 02.70.Ns, 66.10.Ed

DOI: [10.7498/aps.64.116101](https://doi.org/10.7498/aps.64.116101)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 21203097), the Natural Science Foundation of the Jiangsu Higher Education Institutions of China (Grant no. 14KJB140006), and the Priority Academic Program Development of Jiangsu Higher Education Institutions(PAPD).

† Corresponding author. E-mail: c_luo@njnu.edu.cn