



一种新型的三壁碳纳米管螺旋振荡器:分子动力学模拟

陈玉江 江五贵 林演文 郑盼

A novel triple-walled carbon nanotube screwing oscillator: a molecular dynamics simulation

Chen Yu-Jiang Jiang Wu-Gui Lin Yan-Wen Zheng Pan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 228801 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20200821

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200821>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

石墨烯碳纳米管复合结构渗透特性的分子动力学研究

Molecular dynamics study on permeability of water in graphene-carbon nanotube hybrid structure

物理学报. 2018, 67(5): 056102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172424>

界面接枝羟基对碳纳米管运动和摩擦行为影响的分子动力学模拟

Influence of hydroxyls at interfaces on motion and friction of carbon nanotube by molecular dynamics simulation

物理学报. 2017, 66(4): 046101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.046101>

纳米多孔银力学性能表征分子动力学模拟

Characterization of nanoporous silver mechanical properties by molecular dynamics simulation

物理学报. 2018, 67(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172193>

碳纳米管与氮化硼纳米管内铝纳米线的形成及其复合结构抗压特性的模拟研究

Simulation research on formation and compressive properties of aluminum nanowires inside carbon nanotubes and boron-nitride nanotubes

物理学报. 2019, 68(18): 186101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190137>

水滴撞击结冰过程的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of freezing process of water droplets impinging on cold surface

物理学报. 2018, 67(5): 054702 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172174>

循环载荷下纳米铜/铝薄膜孔洞形核、生长及闭合的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of void nucleation, growth and closure of nano-Cu/Al films under cyclic loading

物理学报. 2019, 68(13): 133101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181901>

一种新型的三壁碳纳米管螺旋振荡器： 分子动力学模拟*

陈玉江 江五贵[†] 林演文 郑盼

(南昌航空大学航空制造工程学院, 南昌 330063)

(2020年5月31日收到; 2020年6月28日收到修改稿)

本文提出了一种新型的三壁碳纳米管螺旋振荡器, 通过对内管施加轴向激励和中管施加旋转激励的方式, 来同时获得内管和中管的螺旋信号输出. 采用分子动力学方法研究了该振荡器在拉转耦合下的振荡行为. 在模拟过程中, 固定的外管充当振荡器定子的作用, 内管和中管在分别施加一定的初始激励后保持自由振荡. 模拟结果表明, 在内管拉出距离一定的情况下, 内管的自激发旋转频率随着中管初始旋转激励频率的增加而增加, 且最终趋于一个稍低于旋转激励的稳定值. 当施加的初始旋转频率在 400 GHz 以内时, 内管达到稳定的旋转频率 ω_1 与旋转激励频率 ω_{M0} 的关系为 $\omega_1 = 46e^{0.0045\omega_{M0}}$. 尽管提高初始旋转激励频率可以提高内管的旋转频率, 但随着中管初始旋转频率的增加内管的轴向性能下降, 不稳定振荡加剧. 同时中管轴向振荡的稳定性与施加在其上面的初始旋转激励的频率有关, 过高的初始旋转频率不仅会加大非轴向摆动距离, 导致轴向振荡性能下降, 而且旋转损耗比也将随着初始旋转频率的增加而增加. 因此, 合理的控制初始旋转频率的幅值是设计低损耗三壁碳纳米管螺旋振荡器的关键.

关键词: 三壁碳纳米管, 螺旋运动, 拉转耦合, 分子动力学

PACS: 88.30.rh, 43.58.Wc, 87.15.ap

DOI: 10.7498/aps.69.20200821

1 引言

自 1991 年日本学者 Iijima^[1] 首次发现碳纳米管 (CNT) 以来, CNT 一直是国内外学者研究的热门领域. 由于其独特的光学、电学以及力学特性, CNT 在当今新型的微纳机电系统领域有着非凡的潜在应用优势^[2]. 这些独特的机械性能已被用于构建多种类型的纳米器件, 如纳米轴承^[3]、纳米电机^[4]、纳米开关^[5]、谐振器^[6] 和千兆赫兹振荡器^[7,8] 等. Legoas 等^[9] 指出在双壁碳纳米管 (DWCNT) 中, 一个拉出的内管能够在范德华力的作用下自动来回振荡, 且当其内外管的半径差值在 0.34 nm 时, 其振荡频率最佳. 利用碳管这种自动收缩的特性把

碳管两端都打开制成碳纳米管振荡器. 自 Cumings 和 Zettl^[10] 通过实验发现多壁碳纳米管 (MWCNT) 具有超低的摩擦特性以后, 基于碳纳米管作为高频吉兆赫兹 (GHz) 振荡器的开发受到了人们的广泛关注, 碳纳米管优异的振荡行为得益于管间较弱的范德华力^[11]. 此后, 围绕高频 GHz 碳纳米管振荡器研究其振荡特性以及旋转特性的工作也逐一开始展开^[12,13].

在碳纳米管振荡器的相关研究中, 大多数学者^[9,14] 认为内管的振荡行为依赖于两管间的间距以及体系的温度. 紧随其后, Zhao 等^[15] 指出碳纳米管振荡器在轴向振荡过程中, 内管不仅发生轴向运动, 也会发生非轴向的摇摆运动, 摩擦效应的大小与偏轴摆动的剧烈程度有紧密联系, 偏轴摆动程

* 国家自然科学基金 (批准号: 11772145) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: jiangwugui@nchu.edu.cn

度不仅影响其振荡行为的稳定性,而且是影响振荡器振荡过程中能量损耗的原因. Guo 等^[16]指出了高频多壁碳纳米管振荡器的能量耗散与碳管结构有关,发现非公度性碳管结构的能量耗散率小于共度性的碳管结构. Kang 等^[17]设计了一个 (5, 5)@(10, 10)@(15, 15) 的三壁碳纳米管 (TWCNT) 振荡器,其中外管固定,中管在内外管的范德华作用下保持平衡,只对内管施加一定速度的拉出激励,研究结果发现内管的初速度从 0.1 nm/ps 增加到 0.3 nm/ps 时,内管的轴向振荡频率增加,而初速度大于 0.4 nm/ps 后,其轴向频率反而减小. Liu 等^[18,19]设计了一种 TWCNT 模型,其中中管和外管的两端都打开且管长保持一致,内管两端闭合且长度远小于中管和外管. 在内管拉出一定距离的情况下,研究内管的轴向振荡行为与管间距、外管螺旋角度、内管拉出距离以及外管长度之间的关系.

以上研究内容多侧重单一激励,即只对内管施加一定的拉出距离,内管在回复力的作用下往复运动,产生高频 GHz 的谐振信号. Chen 等^[20]首先提出双壁碳纳米管螺旋振荡器模型,其中 DWCNT 的外管固定,对内管施加旋转激励和轴向激励使内管产生往复的螺旋运动,并结合理论方法和分子动力学方法研究了 DWCNT 螺旋运动的耦合效应. 这种旋转-振荡组合而成的振荡器可以实现旋转和轴向谐振两种信号的同时输出. 如果将螺旋振荡器置于磁场中,相比于传统的双壁碳纳米管振荡器,该振荡器可以同时输出谐振和旋转两种信号,旋转的内管将切割磁感线,从而产生感应电动势. 随后

Lin 等^[21]设计了一种碳纳米管/MoS₂ 纳米管 (CNT@MST) 螺旋振荡器,对作为内管的 CNT 施加旋转激励信号和轴向激励信号,来获取螺旋振子的双信号输出研究其振荡性能. 随着后摩尔时代的到来,机电元器件必向微纳化和多功能化发展. 为此,本文提出了一种新型的 TWCNT 螺旋振荡器模型,外管固定,分别对中管和内管施加一个旋转激励和拉出激励,同时实现内外管旋转和振荡四个信号的同时输出,并通过分子动力学模拟分析多信号螺旋振荡器的振荡性能,为后续多信号螺旋振荡器的实际开发和研制提供必要的理论基础.

2 模型与方法

图 1 是拉转耦合运动下的 TWCNT 螺旋振荡器模型的示意图, Z_{10} 和 ω_{M0} 分别代表内管初始拉出长度和中管初始旋转激励频率. 内管、中管和外管的两端开口,外管在模拟中始终保持固定且三管沿轴向对称分布. 管与管之间的间距大致在 0.34 nm 左右,这是基于低摩擦振荡的考虑^[22]. 利用手性指标参数 (n, m) 可以建立不同结构特征的碳纳米管. 当 $n = m$ 时,为扶手椅型碳纳米管结构;当 $n > m$ 且 $m = 0$ 时,为锯齿型碳纳米管结构. 考虑到非公度性碳管结构振荡过程中能量耗散低于共度性碳管结构^[16],在此次建模过程中,内管、中管和外管分别为 (9, 9) 扶手椅型碳管, (24, 0) 锯齿型碳管和 (19, 19) 扶手椅型碳管. 我们模拟了外管为 4 nm, 中管为 6 nm 的情况下,内管长度分别为 2, 4, 6 和 8 nm 时,振荡器的振荡性能,结果表明内管长

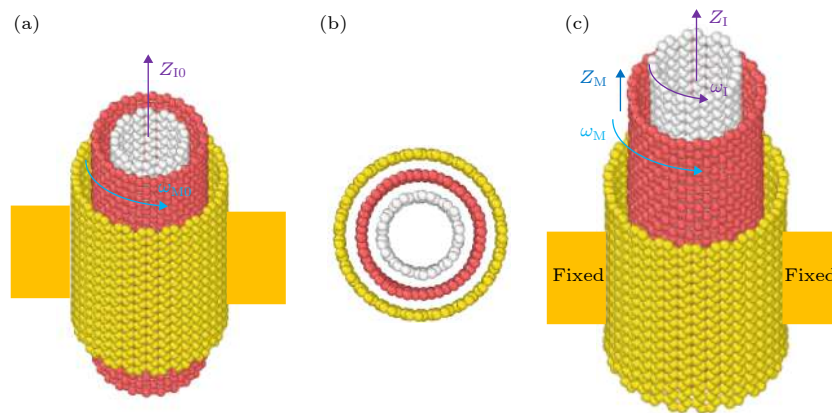


图 1 三壁碳纳米管振荡器模型示意图 (a) 三视图; (b) 俯视图; (c) 螺旋运动示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the triple-walled carbon nanotubes oscillator model: (a) Three view; (b) vertical view (c) screwing motion.

表 1 碳纳米管的几何参数

Table 1. Geometric parameters of the carbon nanotubes.

碳管手性(n, m)@(n, m)@(n, m)	管长/nm	管半径/nm	管间距/nm	原子数
(9, 9)@(24, 0)@(19, 19)	6/6/4	1.220/1.879/2.576	0.329/0.349	864/1344/1216

度为 6 nm 时 TWCNT 具有最佳的振荡性能. 所以本文只考虑了内管长度为 6 nm 的情况. 详细的 TWCNT 参数见表 1.

对于 TWCNT 模型, 碳原子之间的相互作用势采用经验键序势函数 (adaptive intermolecular reactive empirical bond order, AIREBO)^[23,24], 它可以同时描述碳原子之间共价键的相互作用和长程范德华相互作用, 其表达式为

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{\text{REBO}} + E_{ij}^{\text{LJ}} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{\text{TORSION}} \right], \quad (1)$$

其中 E_{ij}^{REBO} 描述碳纳米管内部原子之间的相互作用; $E_{kijl}^{\text{TORSION}}$ 为描述碳纳米管各种二面角的作用势; 而碳管之间非键的相互作用, 主要体现在长程的范德华力势场和静电力势场. Zou 等^[25] 研究表明, 在多壁碳纳米管的管间相互作用中, 与范德华力势相比, 静电力势非常弱, 所以本文忽略静电力场的相互作用势, 仅采用长程的 Lennard-Jones (LJ) 12-6 势函数来描述碳管之间的相互作用势. LJ 12-6 势函数的表达式为

$$E_{ij}^{\text{LJ}} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (r_{ij} \leq r_c), \quad (2)$$

式中, ϵ 和 σ 分别是势阱深度参数和作用势等于 0 时原子间的距离参数, $\epsilon = 0.0029$ eV, $\sigma = 0.34$ nm. 截断系数 r_c 一般取 2.2σ 的长度或更长^[26], 模拟中取 $r_c = 1$ nm, r_{ij} 是原子之间的距离. 在模拟起初阶段, 整个体系经过能量最小化后, 利用 Nosé-Hoover 热浴法使整个体系在 1 K 的温度下弛豫 20 ps, 此时整个体系的原子数、体积、温度保持恒定状态, 这一阶段体系处于正则系综 (NVT) 条件下. 然后在此温度下, 给内管施加一个大小为 0.1 nm/ps 的拉出速度, 时间为 20 ps, 拉出距离 Z_{10} 为 2 nm, 之后撤除内管的拉出激励, 随后对中管施加不同的初始旋转频率 ω_{M0} , 保持旋转激励 20 ps, 最后撤去中管的激励, 让整个体系处于微正则系综 (NVE) 条件下自由运动. 模拟中时间分析步长选为 1 fs, 总共的模拟时长为 2 和 6 ns. 所有的分子动力学模拟均基于大规模原子分子并行模拟器 (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator,

LAMMPS^[27]). 邹航^[28] 的研究表明激励条件的先后顺序对多壁碳纳米管振荡器的振荡性能影响较小, 我们也做了类似的分析, 结果与邹航^[28] 的结论一致. 所以本文只对上述加载顺序进行了分析.

3 结果与讨论

图 1(c) 是 TWCNT 振荡器模型在 NVE 下的螺旋运动示意图. 为叙述方便起见, 用 Z_I, ω_I 表示内管轴向振荡幅值和旋转频率, Z_M, ω_M 表示中管轴向振荡幅值和旋转频率. 内管为 6 nm 的 TWCNT 振荡器模型在经过初始激励后, 体系的内管和中管在范德华力作用下将分别产生自激发的拉转耦合螺旋运动, 从而实现多个信号的输出.

与 DWCNT 振荡器一样, TWCNT 振荡器在轴向自由振荡的同时, 也会伴随着非轴向的摆动, 而非轴向摆动使得振荡器在轴向振荡过程中获得一定的旋转频率, 旋转频率的施加又对非轴向摆动产生影响. 初始旋转激励频率施加对 TWCNT 的振荡行为有一定的影响, 非轴向摆动幅度的大小直接影响 TWCNT 振荡器振荡行为的稳定性. 本文对 CNT(9, 9)CNT@(24, 0)CNT@(19, 19) 振荡器中管施加了不同的初始旋转激励频率, 研究初始旋转激励频率对 TWCNT 螺旋振荡性能的影响.

3.1 中管的螺旋振荡性能

中管质心位置随时间的变化图能直观地反映中管的振荡行为, 对 TWCNT 振荡器的内管施加初始拉出距离 Z_{10} 恒为 2 nm, 中管施加的初始旋转激励频率 ω_{M0} 分别为 100, 200, 400 和 600 GHz. 图 2 为中管在螺旋运动下的轴向振荡幅度情况. 中管的轴向振荡是在内管激励下发生的, 当 ω_{M0} 在 400 GHz 以下时, 中管质心位置在沿轴向振荡过程中都能表现出稳定持续的振荡; 振荡的幅度为 1.5 nm, 稍小于内管的振荡幅度, 一方面是因为中管的轴向振荡是由内管激发, 另一方面中管的原子数多于内管, 中管质量重, 同时中管还受到外管的约束力. 中管的轴向振荡频率约为 22—20 GHz, 初始旋转频率的提高几乎不会影响中管的轴向振

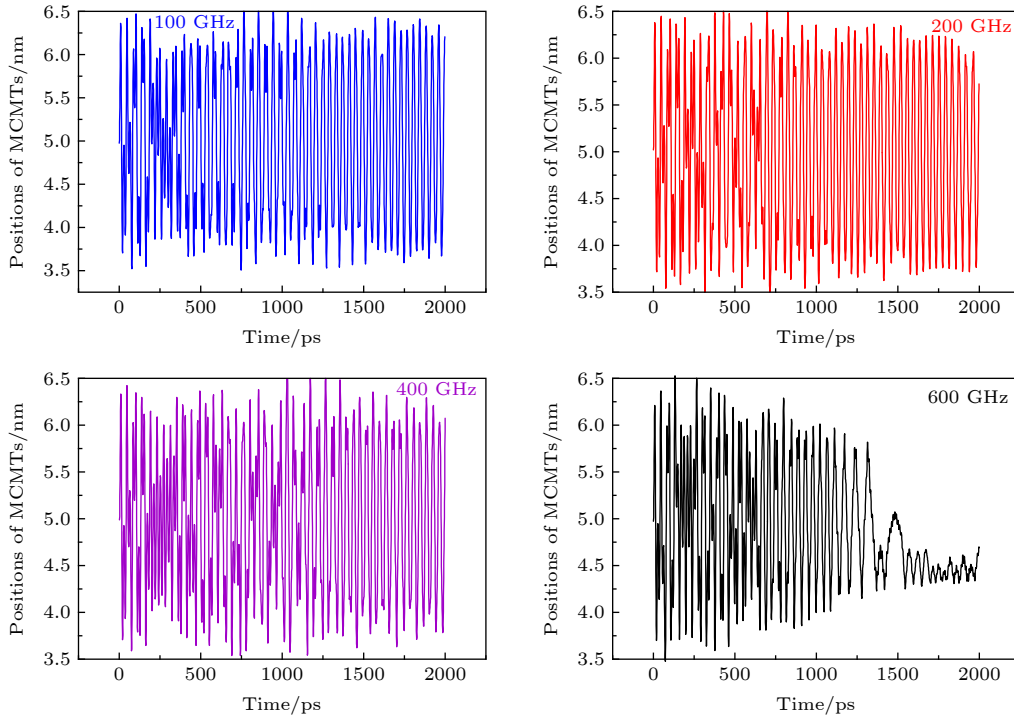


图 2 NVE 过程中不同 ω_{M0} 下的中管质心位置的历程图

Fig. 2. Histories of position of mass center of middle tubes (MCMTs) with different ω_{M0} during the NVE process.

荡性能 (ω_{M0} 在 100—400 GHz 这一范围). 当 ω_{M0} 增加为 600 GHz 时, 中管的振荡幅度在振荡过程中逐渐变小, 且由于旋转频率太快导致非轴向摆动变得特别剧烈, 管的轴向振荡已表现出不稳定的振荡状态, 最终导致碳管两端受力不平衡而无法持续振荡. 故初始旋转激励频率的施加对中管轴向振荡的稳定性产生影响.

图 3 为中管在不同初始旋转频率下中管非轴向摆动剧烈程度, 当 ω_{M0} 为 100 GHz 时, 中管的偏轴距离几乎为零; 随着初始旋转频率的增大, 管的偏轴距离也越大; 当 ω_{M0} 为 600 GHz 时, 管的偏轴距离大幅度增加, 最大偏轴距离可达 0.1 nm 以上. 与 ω_{M0} 为 100 GHz 的偏轴距离相比, 旋转频率为 600 GHz 的偏轴距离是它的 50 倍以上. 而与 ω_{M0} 为 200 和 400 GHz 的偏轴距离相比, ω_{M0} 为 600 GHz 的偏轴距离仍是它们的 10 倍以上. 因此, 初始旋转频率过高会导致管的非轴向摆动的加剧, 最终使中管的轴向振荡变得不稳定而无法持续振荡. 过高的旋转频率不仅对振荡过程中振幅产生衰减, 而且对自身旋转频率的损耗产生较大的影响.

图 4 为中管初始旋转激励频率在螺旋运动过程中的损耗情况, 为方便比较, 用 ω_M/ω_{M0} 表示任意时刻旋转频率的剩余百分比, 其中 ω_M 为在不同的

初始旋转激励频率下, 任意时刻的中管旋转频率. 从图中可以看出, 当 ω_{M0} 为 100 和 200 GHz 时, 旋转频率损耗量在 20% 以内; 随着 ω_{M0} 增加到 400 GHz 中管在螺旋运动过程中旋转频率损耗百分比也相应地增加; 当 ω_{M0} 达到 600 GHz 时, 中管在轴向振荡过程中的旋转频率衰减加剧, 自由振荡 2000 ps 后, 旋转频率损耗约 40%. 随着初始旋转激励频率的增加, 中管在螺旋运动过程中损耗的旋转频率越大, 因此合理控制初始旋转激励频率是设计低损耗振荡器关键的一环.

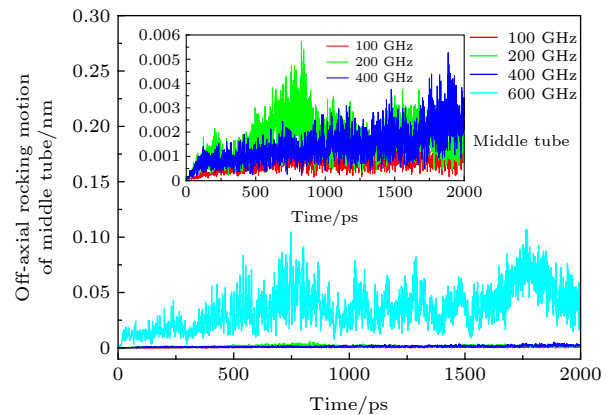


图 3 NVE 过程中不同 ω_{M0} 下中管的偏轴距离

Fig. 3. The off-axis rocking motion distance of the MCMTs with different ω_{M0} during the NVE process.

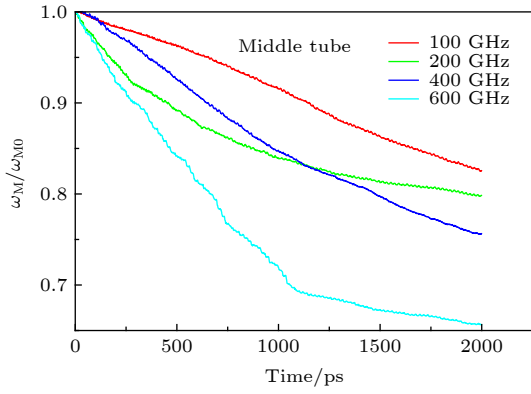


图 4 中管 ω_{M0} 在螺旋运动过程中的损耗情况

Fig. 4. Rotational frequency dissipation of the MCMTs with different ω_{M0} during the screwing motion.

3.2 内管的螺旋振荡性能

通过模拟发现, 施加的 ω_{M0} 会刺激内管产生旋转运动, 且会对内管的轴向振荡产生影响. 在内管拉出长度为 2 nm 的前提下, 对中管施加 100, 150, 200, 250, 300, 350, 和 400 GHz 的初始旋转激励频率, 研究不同初始旋转激励频率下内管的螺旋振荡性能. 图 5 为 NVE 过程中不同 ω_{M0} 下内管质心位置的变化情况. 当施加的 ω_{M0} 小于 400 GHz 时, 内管质心在轴向振荡中都能表现出持续稳定的振荡, 如图 5(a) 所示. 图 5(b) 是内管轴向振荡的频率 (f_{ZI}) 与 ω_{M0} 之间的关系, 结果表明, 随着施加在

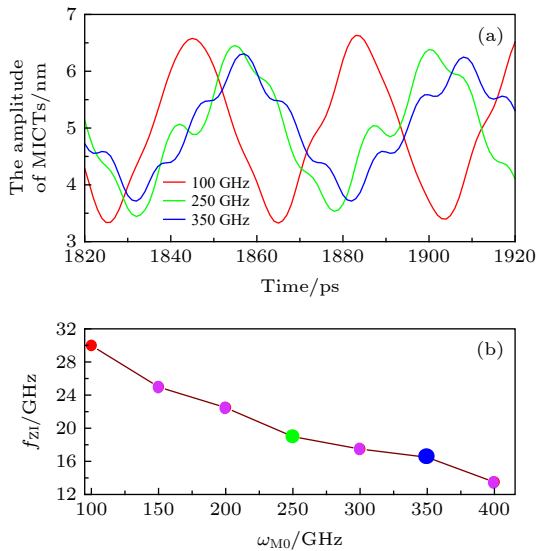


图 5 内管的轴向振荡 (a) NVE 过程中不同 ω_{M0} 下的内管质心位置变化曲线; (b) 内管平均振荡频率 f_{ZI} 随 ω_{M0} 的变化

Fig. 5. Axial oscillations of the inner tube: (a) Changes of the position of mass center of inner tubes(MCITs) with different ω_{M0} in the NVE process; (b) f_{ZI} with respect to ω_{M0} .

中管上的 ω_{M0} 的增加, 内管轴向振荡在 2 ns 内的平均振荡频率 f_{ZI} 越小. 特别注意的是, 当中管的初始旋转激励 ω_{M0} 超过 250 GHz 后, 由于内管的质量小于中管, 其偏轴振荡更加严重 (如图 6 所示), 导致内管的振荡频率和振幅的衰减都大于中管.

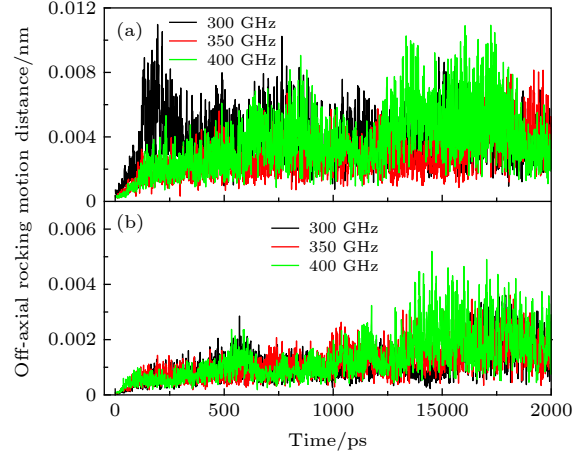


图 6 NVE 过程中不同 ω_{M0} 下两管质心的偏轴距离 (a) 内管质心; (b) 中管质心

Fig. 6. The Off-axis rocking motion distance of mass center of (a) inner tube and (b) middle tube with different ω_{M0} during the NVE process.

图 7 为不同初始旋转激励频率下的内管旋转频率. 内管的激发旋转频率会随着初始旋转激励频率的增加而增加, 激发频率的大小略低于中管的旋转频率, 且内管受激发的旋转频率会随着模拟时间的延长达到某一稳定值. 当 ω_{M0} 在 250 GHz 时, 内管产生的旋转运动其速度在 2000 ps 将会达到稳定值; 当施加的 ω_{M0} 超过 250 GHz 时, 内管的旋转频率达到稳定的时间将延长; 在 350 GHz 达到稳定转速所需的时间为 4000 ps, 在 400 GHz 时, 内

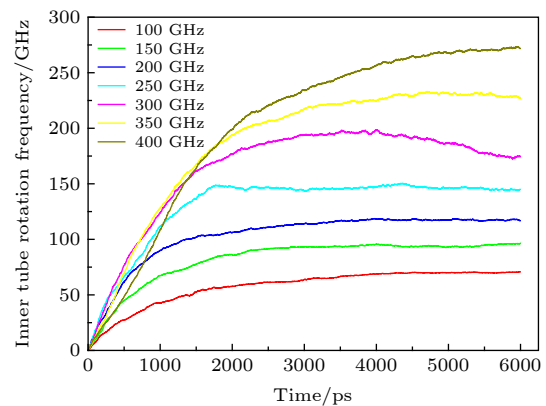


图 7 NVE 过程中 ω_{M0} 下内管的旋转频率

Fig. 7. Rotation frequency of the inner tube with different ω_{M0} during the NVE process.

管的旋转速度达到稳定的时间至少要 6000 ps. 结果显示, 内管旋转频率会随着初始旋转激励频率的增加而增大, 并且内管达到稳定转速的时间将相应延长. 图 8 为内管的旋转频率与中管初始旋转激励频率的关系图. 当初始旋转频率低于 400 GHz 时, 内管稳定的旋转频率 ω_1 与施加的初始旋转激励频率 ω_{M0} 可表示为

$$\omega_1 = 46e^{0.0045\omega_{M0}}. \quad (3)$$

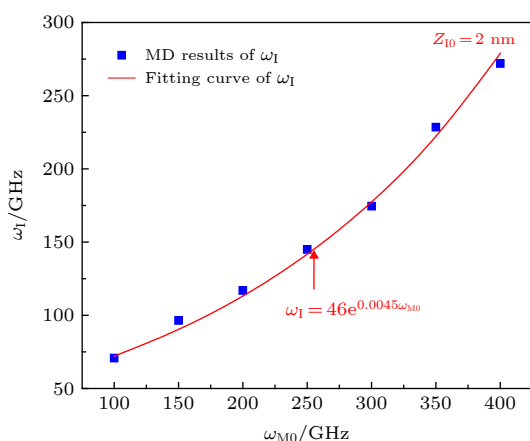


图 8 ω_1 与 ω_{M0} 的关系曲线
Fig. 8. Change of ω_1 as a function of ω_{M0} .

4 结 论

本文通过分子动力学方法, 提出了一种可以输入简单的拉长和旋转激励, 可以同时输出四种信号的三壁碳纳米管螺旋振荡器, 并对该类 TWCNT 振荡器的振荡行为进行了研究. 在模拟过程中发现, 内管轴向振荡同时也会激励中管产生轴向振荡, 中管在旋转运动过程中也会激发内管产生一定的激励频率, 且内管旋转频率的方向与中管方向一致. 当中管的旋转激励频率 ω_{M0} 小于 400 GHz 时, 中管在整个振荡过程中的轴向性能都能表现出的稳定持续的振荡, 而当 ω_{M0} 达到 600 GHz 后, 中管由于偏轴距离太大而无法持续振荡. 过高的初始旋转频率将增加偏轴摆动距离, 导致其自激发的轴向振荡性能下降, 同时旋转频率的损耗也随之增大. 内管的旋转频率随着中管初始旋转激励频率的增加而增加, 最终内管的旋转速度会达到稳定状态, 达到稳定转速的时间也会随着初始旋转频率的增加而相应延长, 因此, 合理控制初始旋转激励频率

的大小可以减少内管旋转频率达到稳定转速所需的时间. 在内管拉出距离为 2 nm 且施加在中管上的初始旋转频率低于 400 GHz 时, 内管达到稳定的旋转频率与初始旋转频率的关系为 $\omega_1 = 46e^{0.0045\omega_{M0}}$. 同时随着中管旋转激励频率的增加, 内管轴向振荡在 2 ns 内的平均振荡频率变小. 因此, 合理的控制中管初始旋转激励频率的大小是设计低损耗三壁碳纳米管振荡器关键的因素.

参考文献

- [1] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56
- [2] Zou J, Ji B, Feng X Q, Gao H J 2006 *Nano Lett.* **6** 430
- [3] Huang Z 2008 *Nanotechnology* **19** 045701
- [4] Bailey S W D, Amanatidis I, Lambert C J 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 256802
- [5] Yang W D, Wang X, Fang C Q 2015 *Composites Part B* **82** 143
- [6] Chiu H Y, Hung P, Postma H W C, Bockrath M 2008 *Nano Lett.* **8** 4342
- [7] Qin Z, Zou J, Feng X Q 2008 *J. Comput. Theor. Nanosci.* **5** 1403
- [8] Legoas S B, Coluci V R, Braga S F, Coura P Z, Dantas S O, Galvão D S 2004 *Nanotechnology* **15** S184
- [9] Legoas S B, Coluci V R, Braga S F, Coura P Z, Dantas S O, Galvao D S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 055504
- [10] Cummings J, Zettl A 2000 *Science* **289** 602
- [11] Zheng Q, Liu J Z, Jiang Q 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245409
- [12] Cai K, Yin H, Qin Q H, Li Y 2014 *Nano Lett.* **14** 2558
- [13] Servantie J, Gaspard P 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 13831
- [14] Cook E H, Buehler M J, Spakovszky Z S 2013 *J. Mech. Phys. Solids.* **61** 652
- [15] Zhao Y, Ma C C, Chen G, Jiang Q 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 175504
- [16] Guo W L, Guo Y F, Gao H J, Zheng Q S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 125501
- [17] Kang J W, Lee J H 2008 *Nanotechnology* **19** 285704
- [18] Liu P, Zhang Y W, Lu C 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 014301
- [19] Liu P, Zhang Y W, Lu C J 2006 *Carbon* **44** 27
- [20] Chen L, Jiang W G, Zou H, Feng X Q, Qin Q H, Li X 2019 *Phys. Lett. A.* **383** 2309
- [21] Lin Y W, Jiang W G, Qin Q H, Chen Y J 2019 *Appl. Phys. Express.* **12** 065001
- [22] Voter A F, Doll J D 1984 *J. Chem. Phys.* **80** 5832
- [23] Harrison J A, White C T, Colton R J, Brenner D W 1992 *Phys. Rev. B.* **46** 9700
- [24] Brenner D W, Shenderov O A, Harrison J A, Stuart S J, Ni B, Sinnott S B 2002 *J. Phys. Condens. Matter* **14** 783
- [25] Zou J, Ji B H, Feng X Q, Gao H J 2006 *Small* **2** 1348
- [26] Doll J D 1982 *J. Chem. Phys.* **77** 479
- [27] Lammmps molecular dynamics simulator, <http://lammmps.sandia.gov>, 2014 [2020-5-31]
- [28] Zhou H 2019 *M. S. Thesis* (Nanchang: Nanchang Hangkong University) (in Chinese) [邹航2019 硕士学位论文 (南昌: 南昌航空大学)]

A novel triple-walled carbon nanotube screwing oscillator: a molecular dynamics simulation*

Chen Yu-Jiang Jiang Wu-Gui[†] Lin Yan-Wen Zheng Pan

(School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

(Received 31 May 2020; revised manuscript received 28 June 2020)

Abstract

A novel triple-walled carbon nanotube (TWCNT) screwing oscillator is proposed, in which screwing motion signals of both inner tube and middle tube are outputted simultaneously by applying an axial excitation to the inner tube and a rotating excitation to the middle tube. The molecular dynamic method is used to investigate the oscillatory behavior of the TWCNT oscillator under screwing motion. In the simulation process, the fixed outer tube acts as the oscillator stator, while the inner tube and the middle tube keep free oscillation after applying a certain initial excitation respectively. The simulation results show that the rotation frequency of the inner tube increases with the increase of the initial rotation excitation frequency of the middle tube when the inner tube is pulled out at a certain distance, and eventually tends to a stable value slightly lower than the rotation excitation. When the applied initial rotation frequency is within 400 GHz, the self-excited stable rotation frequency (ω_1) of the inner tube can be expressed as a function of the initial rotation excitation frequency (ω_{M0}), $\omega_1 = 46e^{0.0045\omega_{M0}}$. Although increasing the initial rotation excitation frequency can enhance the rotation frequency of the inner tube, as the initial rotation frequency of the middle tube increases, the axial performance of the inner tube is degraded and the unstable oscillations is aggravated. At the same time, the stability of the axial oscillation of the middle tube is related to the frequency of the initial rotational excitation applied to it. Too high an initial rotational frequency will not only increase the off-axis rocking motion distance, resulting in a degradation in axial oscillation performance, but also the rotation loss will increase as the initial rotation frequency increases. Therefore, a reasonable control of the amplitude of the initial rotation frequency is the key to designing a low-loss TWCNTs screwing oscillator.

Keywords: triple-walled carbon nanotube, screwing motion, pull-rotate coupling, molecular dynamics

PACS: 88.30.rh, 43.58.Wc, 87.15.ap

DOI: 10.7498/aps.69.20200821

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11772145).

[†] Corresponding author. E-mail: jiangwugui@nchu.edu.cn