

# 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\*

袁剑辉<sup>†</sup> 雷钦文 刘其城<sup>‡</sup>

(长沙理工大学物理与电子科学学院, 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410114)

(2019年1月24日收到; 2019年6月17日收到修改稿)

采用分子动力学方法分别对管内充以铝原子碳纳米管(CNT)与氮化硼纳米管(BNNT)进行了结构性能研究. 优化结果显示: (5, 5) CNT和BNNT内均能形成一束一维铝纳米线(AINW); (10, 10)管内形成的是多束AINW, 其中(10, 10) CNT内形成的是11束高度轴对称一维AINW, 而(10, 10) BNNT内形成的是5束螺旋结构形状的AINW. 进一步分析表明: CNT内的AINW具有比BNNT内的AINW较大的原子分布线密度, 但大管径(10, 10)型BNNT内的螺旋状AINW可以具有比相同管径CNT内纳米线更高的结晶性. 通过对其轴向压缩模拟及其能量分析, 可以发现AINW@CNT复合结构的屈曲应变明显大于AINW@BNNT, 且同类型复合结构, 屈曲应变随管径增大而减小, 故较小管径的AINW@CNT具有更强轴向抗压能力. 能量分析结果表明 van der Waals 能是维系复合纳米管结构稳定, 增大抗压能力的主要原因.

**关键词:** 铝纳米线, 碳纳米管与氮化硼纳米管, 分子动力学, 抗压特性

**PACS:** 61.46.Km, 61.46.Np, 47.11.Mn, 51.35.+a

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190137

## 1 引言

近年来人们已发现填充金属的碳纳米管(CNT)在力学性质方面能表现出与单独金属和纳米管极大不同<sup>[1-5]</sup>. 如Wang等<sup>[6]</sup>计算了填充金属原子(Ni, Pt)的CNT的屈曲应变, 并发现填充金属原子的CNT临界应变比空心CNT更大. Soldano和Mariscal<sup>[7]</sup>使用修正的嵌入原子模型方法研究了CNT内Fe纳米线的基本晶体结构形态及其力学性能. Guo等<sup>[8]</sup>研究了填充Au原子CNT复合结构(AuNW@CNT)轴向压缩形变, 发现其抗屈服强度明显高于中空管CNT, 填充Au原子明显有助于CNT的碳原子的坍塌. 然而, 在各种纳米管及不同管径纳米管里形成的金属与半导体纳米线却

鲜有报道<sup>[9,10]</sup>, 由于尺寸效应和表面重构, 金属与半导体纳米线在自由空间显示出与块体材料很大的不同, 包括量子限域效应和单电子传输效应等. 但是, 这些自由空间的金属与半导体纳米线受各种环境影响, 性能极不稳定, 如侧压变形、氧化腐蚀等. 因此, 如果能在这些自由空间的金属与半导体纳米线外包覆一层惰性原子, 如结构持续稳定的抗氧化纳米管, 那么就能有效防止纳米线被氧化, 抑制纳米线原子 $sp^3$ 杂化及共价键的形成等, 从而使纳米线结构更加稳定. 这种由纳米线构成的复合结构将有更稳定的物理性能, 其纳米线材料将在微-纳米电子学方面得到更广泛的应用.

金属纳米材料是纳米材料的一个重要分支, 是目前热门研究之一<sup>[11-13]</sup>. 特别是其一维纳米结构的金属或半导体可能在微纳电子器件中有很多潜

\* 国家自然科学基金(批准号: 61771076, 21276028, 21506259)资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: [wxdxyjh@163.com](mailto:wxdxyjh@163.com)

<sup>‡</sup> 通信作者. E-mail: [743542590@qq.com](mailto:743542590@qq.com)

在的应用,人们对多种自由空间结构的金属与半导体纳米线已经开展了系统深入的研究,并获得许多重要成果<sup>[14–19]</sup>.如铜纳米线、银纳米线和铝纳米线(AINW)已经成为微机电系统(MEMS)和小型机械系统的重要组成部分<sup>[20]</sup>.特别是还发现AINW可应用于火箭推进剂、火炸药及太阳能电池铝背场等重要领域,对于国家的军事和经济发展具有非常重要的意义.如铝纳米材料还可使导弹和鱼雷在目标采取规避措施前就以极快的速度进行攻击,并能使发射药燃烧率达到现有发射药的10倍,使子弹的攻击速度更快.因铝具有许多优良的物理化学性能,如质轻密度小、电导率高和延展性好,表面易形成致密的氧化物保护膜,从而具有耐腐蚀可抵抗各种恶劣环境等性质.特别是铝质器件具有好的成型工艺和较低的制备成本等优势,已在国民经济各部门和国防工业中得到了广泛的应用.在纳米研究领域,AINW已初步显现出广泛的潜在应用前景.如透明电极<sup>[21]</sup>、铝空气电池<sup>[22]</sup>、铝离子电池<sup>[23]</sup>、锂离子电池<sup>[24]</sup>、晶体管<sup>[25]</sup>、瞬态能量设备和高能器件<sup>[26]</sup>等.人们也期望AINW在三维微型电池的电流收集器<sup>[27]</sup>、纳米电子器件中的超导体<sup>[28]</sup>以及潜在的场发射候选材料<sup>[29]</sup>方面发挥重要作用.特别是近年来已有众多制备AINW的研究报道,如通过原子迁移物理制备方法成功制备多种铝微纳米材料,包括铝微米线<sup>[30]</sup>和铝微米球<sup>[31]</sup>等.特别是鹿业波等<sup>[20]</sup>成功地利用电迁移在局部区域实现了AINW阵列的制备,并通过分析其制备机理,提出应力迁移难以制备AINW的基本原因,为利用原子迁移实现工业化制备AINW阵列提供了一定的理论和实验基础.最近,Wang和Li<sup>[32]</sup>通过二维纳米膜的电沉积、三维纳米核的电化学形成和最终一维纳米线的生长三个阶段成功地从室温离子液体中直接电沉积出AINW.Chen等<sup>[33]</sup>在还原氧化石墨烯(RGO)衬底上一步原位合成单晶AINW.Azuma等<sup>[34]</sup>以苯乙烯纳米纤维为掩膜材料通过对铝金属化聚酯薄膜进行湿法蚀刻方法合成了AINW.

氮化硼纳米管(BNNT)结构与CNT结构很相似,它们表现出许多类似的物理和化学性质<sup>[35–37]</sup>.然而,与CNT比较,BNNT在高温下有更好的力学性能、更好的热稳定性和抗氧化性<sup>[38]</sup>.因而,CNT与BNNT在不同条件下均可提供一个有效的抗氧化屏障.如能将AINW包覆在CNT与BNNT内,可实现增强高温抗氧化能力,抵抗外来侵蚀,

使其结构保持相对稳定.特别是BNNT具有高温稳定和高绝缘特征<sup>[39–44]</sup>,使得其在纳米电子器件和纳米结构陶瓷材料方面有潜在的应用前景.因此,AINW@BNNT复合结构也可能在技术应用中有着显著的优势.Kumar等<sup>[45]</sup>采用分子动力学模拟方法,研究了封装在单壁CNT中的银纳米线的结构形貌.发现单壁纳米管的直径是控制银纳米线基本形貌的主要因素之一,为金属纳米线合成的固态物理现象提供了理论指导,提高了人们对金属纳米线合成固态物理现象的认识.我们近期已研究过多种CNT及BNNT内嵌原子或纳米管复合结构的稳定性及其抗压特性<sup>[46–50]</sup>,也对石墨烯及硼墨烯纳米片复合结构的相关特性进行了研究<sup>[51–54]</sup>,本文在此基础上进一步通过分子动力学方法来研究AINW@CNT( $n, n$ )与AINW@BNNT( $n, n$ )( $n=5, 10$ )复合结构及其AINW基本结构特性;通过对复合结构的轴向压缩模拟及其能量分析来研究复合结构抗压能力及维系纳米复合结构稳定的基本原因.

## 2 计算模型与方法

首先构建由20个重复单元组成的管长为4.919 nm的CNT(5, 5)CNT(10, 10)和BNNT(5, 5)BNNT(10, 10)纳米管,然后在管内充以足量的铝原子,采用基于Universal Force Field(UFF)理论的分子动力学方法对其进行结构优化<sup>[55,56]</sup>,得到稳定的AINW@CNT(5, 5),AINW@CNT(10, 10)与AINW@BNNT(5, 5),AINW@BNNT(10, 10)复合体.采用径向分布函数(radial distribution function, RDF)对形成的AINW晶体结构特性进行单点数据分析<sup>[57]</sup>.RDF是目前广泛使用且精度较高的体系结构分析方法,其图谱通常表现为由若干分离锐峰或谱峰组成,晶格结构特性主要由这些峰的峰间距、半高宽与峰值高度所决定.RDF的各峰位值相应于晶格原子与参考原子间的各级近邻间距.为模拟研究其抗压性能,对其复合结构进行分步轴向压缩方式(步长为0.5 Å),相继对其几何结构进行优化.在此优化过程中,因每步对纳米管两端部分原子采取事先固定模式,故AINW@CNT和AINW@BNNT有效长度分别为4.515与4.610 nm.几何结构优化使得模型结构原子按一定规则发生几何转动与相对位移等,逐

步使其应变势能趋于最小的平衡态结构体系. 最后, 依据 UFF 基本理论, 获取每步形变状态下的应变能.

UFF 力场方法也是一种精度较高且计算量相对较小的普遍适用的结构优化技术, 基本上可对周期表上所有元素进行计算. 特别适应于周期表主族元素、过渡金属无机物及有机金属化合物等. 其相互作用总势能可归为成键与非成键两类多项之和:

$$E = E_R + E_\theta + E_\tau + E_\omega + E_{\text{vdW}} + E_{\text{el}},$$

其中, 反映键长伸展的键能  $E_R$ , 反映角度弯曲的角能  $E_\theta$ , 反映面间角扭曲的扭曲能  $E_\tau$  及反演项  $E_\omega$  为成键类相互作用; van der Waals 相互作用势  $E_{\text{vdW}}$  与静电相互作用势  $E_{\text{el}}$  为非成键相互作用, 其具体表达形式及相关参量参见文献 [55, 56, 58].

### 3 结果与讨论

#### 3.1 AlNW 的形成

纳米管的模拟研究大多采用典型扶手椅型或锯齿型进行研究 [37,46–49], 为问题研究简洁性且具代表性, 本文选择扶手椅型 CNT ( $n, n$ ) 和 BNNT ( $n, n$ ) 进行研究. 因  $n$  不同, 扶手椅型纳米管管径不同, 为反映明显的管径影响效果,  $n$  选取差别较大的 5 和 10 进行计算. 本文对充以足量铝原子的 CNT (5, 5), CNT (10, 10) 与 BNNT (5, 5), BNNT (10, 10) 纳米管进行整体结构优化, 其优化过程中微结构演变模型如图 1 所示. 因铝原子在管内具有较高的起始分布密度, 原子间表现出较大的相互排斥作用, 故在结构达到平衡状态前优化过程中, 管中铝原子密度自然大于两头, 其原子逐渐从纳米管两头逸出, 直到平衡稳定结构形成. 图 2 给出了 AlNW@CNT ( $n, n$ ) 和 AlNW@BNNT ( $n, n$ ) ( $n = 5, 10$ ) 最后达到平衡状态的几何优化结构, 其中图 2(a)—图 2(d) 左、右图分别表示其正视图与侧视图. 为更清楚地观察 AlNW 原子的分布状况, 在侧视图中, 其纳米管仅以框架显示, 且对铝原子尺寸采取适当放大. 从模拟结果可发现: 对于  $n = 5$  的小管径纳米管内铝原子均匀分布在纳米管轴线上, 呈现出一列稳定结构的一维纳米线; 对于  $n = 10$  的大管径 CNT 与 BNNT 内铝原子表现出不同的结构特征, CNT 内形成 11 束关于轴对称分布的稳定结构的一维纳米线, BNNT 内形成的是 5 束螺旋结构形状的纳米线. 研究结果可为不同微纳器

件中所需不同结构形状的纳米线提供设计方法, 如实现能量的存储与释放的纳米弹簧、纳米螺旋线管等.

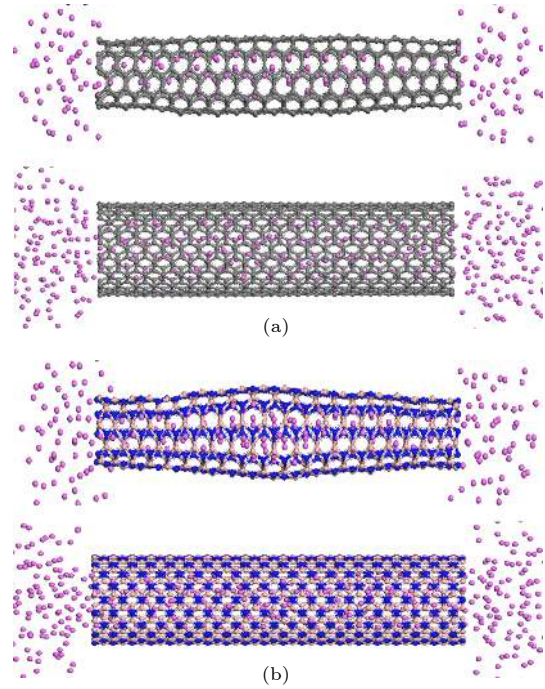


图 1 铝原子在 CNT ( $n, n$ ) 和 BNNT ( $n, n$ ) 纳米管内微结构演变模型 (a) CNT (5, 5) 和 CNT (10, 10); (b) BNNT (5, 5) 和 BNNT (10, 10)

Fig. 1. Models of the microstructure evolution of the aluminum atoms filled in CNT ( $n, n$ ) and BNNT ( $n, n$ ) nanotubes: (a) CNT (5, 5) and CNT (10, 10); (b) BNNT (5, 5) and BNNT (10, 10).

为进一步反映在不同管内 AlNW 的形成差异, 对 AlNW@BNNT ( $n, n$ ) 与 AlNW@CNT ( $n, n$ ) ( $n = 5, 10$ ) 内 AlNW 进行了 RDF 数据量化分析 (图 3). 从图 3(a) 可看到, CNT(5, 5) 管内 AlNW 的 RDF 峰值相对较强, 各峰分布较锐, 表明结晶性相对更佳. CNT (5, 5) 管内 AlNW 的前三个主峰分别位于 0.421, 0.843 与 1.263 nm 处. BNNT (5, 5) 管内 AlNW 的前三个主峰分别位于 0.439, 0.879 与 1.319 nm 处, 各峰相对较弱且有少许分布宽度. 由此说明, AlNW@CNT (5, 5) 内 AlNW 的一维性、原子分布均匀性略优于 AlNW@BNNT (5, 5) 内的 AlNW, 其主要原因可归于构成外管原子性质的差异. CNT 只有一种 C 原子构成, 对内部 Al 原子作用是均一的, 而 BNNT 是由两种不同原子 B, N 构成, 对内部 Al 原子作用可能造成差异. 通过图 3 发现, AlNW@CNT (5, 5) 内 AlNW 的 RDF 第一峰位置及峰间距小于 AlNW@BNNT (5, 5). 因此,

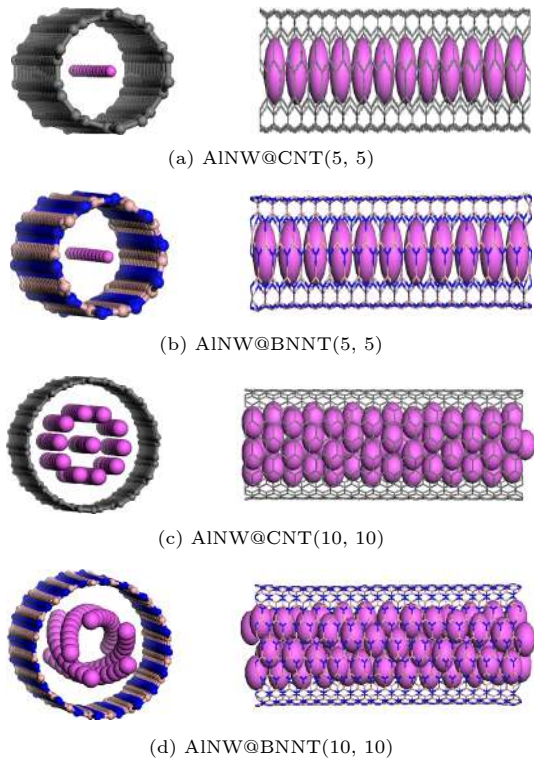


图 2 优化后的 AINW@CNT 和 AINW@BNNT 复合结构 (a) AINW@CNT (5, 5); (b) AINW@BNNT (5, 5); (c) AINW@CNT (10, 10); (d) AINW@BNNT (10, 10)

Fig. 2. Structure of the optimized AINW@CNT and AINW@BNNT: (a) AINW@CNT (5, 5); (b) AINW@BNNT (5, 5); (c) AINW@CNT (10, 10); (d) AINW@BNNT (10, 10).

与 AINW@BN (5, 5) 相比, AINW@CNT (5, 5) 内 AINW 的具有较小的原子近邻距离, 原子分布密度相对较大. 因原子距离较近, 各原子的电子能级可能重叠区域增大或通过原子轨道组合成新的分子轨道, 其能量将大大降低, 更有利于原子间形成  $\sigma$  键, 增大结构稳定性和力学性能. 从图 3(b) 可看出, BNNT (10, 10) 管内 AINW 的 RDF 峰值相对较强, 各峰峰形较尖锐, 表明结晶性能相对更高.

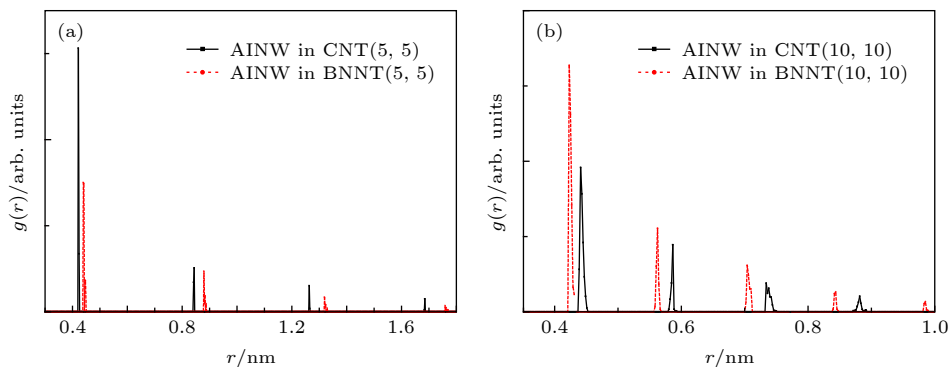


图 3 在 CNT ( $n, n$ ) 与 BNNT ( $n, n$ ) 中 AINW 的 RDF (a)  $n = 5$ ; (b)  $n = 10$

Fig. 3. RDF of AINW in CNT ( $n, n$ ) and BNNT ( $n, n$ ): (a)  $n = 5$ ; (b)  $n = 10$ .

BNNT (10, 10) 管内 AINW 的前三个主峰分别位于 0.423, 0.564 与 0.705 nm 处, 相应 CNT (10, 10) 管内 AINW 主峰位置别位于 0.441, 0.588 与 0.735 nm 处, AINW 在 CNT 管内比在 BNNT 管内的各峰相对较弱且有较大分布宽度. 由此说明, BNNT (10, 10) 内形成的 5 束螺旋结构形状的 AINW 具有较好的原子分布, 其整体结晶性更佳. CNT 内虽可形成 11 束关于轴对称分布的稳定结构的一维纳米线, 但由于中心轴位置的 AINW 与非中心轴 10 束 AINW 存在差异导致整体 AINW 结晶性欠佳. 另外, 当管径较大时, CNT 中碳原子对内部铝原子的横向均一约束作用减弱, 铝原子与 CNT 轴向非均匀作用增强所致. BNNT 中两种不同原子 B, N 对内部 Al 原子虽表现出轴向差异性, 但随管径增大这种作用会适当减弱, 同时本身螺旋结构特征的 BNNT 自然对内沿螺旋方向分布的 Al 原子的作用可能表现出较好的均匀性.

### 3.2 AINW@CNT ( $n, n$ ) 与 AINW@BNNT ( $n, n$ ) ( $n = 5, 10$ ) 的抗压性能

按前述压缩模拟基本方法, 对 AINW@CNT ( $n, n$ ) 与 AINW@BNNT ( $n, n$ ) ( $n = 5, 10$ ) 复合结构进行了不同轴向压缩应变 ( $\epsilon$ ) 条件下的结构优化, 其受压屈曲前后内外结构状况如图 4 和图 5 所示. 在压缩开始阶段, AINW@CNT ( $n, n$ ) 与 AINW@BNNT ( $n, n$ ) 随应变均表现为均匀弹性行为, 没有明显管形变化. 从图 4 可看到, 当压缩应变分别达到 11.1% 与 7.0% 时, AINW@CNT (5, 5) 与 AINW@BNNT (5, 5) 均发生明显侧向屈曲, 纳米管发生扭曲, 纳米管内的 AINW 原子被分成二段, 铝原子分布差异性不大. 从图 5 可看到, 当压

缩应变分别达到 8.9% 与 6.6% 时, AINW@CNT (10, 10) 与 AINW@BNNT (10, 10) 发生明显内陷屈曲, 纳米管发生扭曲, 纳米管内的 AINW 原子表现出中部紧缩迹象, 且可看到 CNT 内 AINW 仅一处紧缩, 而 BNNT 表现两处紧缩. 当压缩应变分别进一步增加到 11.1% 与 8.9% 时, CNT 内的 AINW 表现出中部断裂, 分成二段, 而 BNNT 内 AINW 中部表现出二处断裂, 分为三段. 模拟结果显示, 相同管长的 AINW@CNT ( $n, n$ ) 的屈曲应变明显大于 AINW@BNNT ( $n, n$ ). 同类型纳米管, 管径越大, 屈曲应变明显减小. 这说明 AINW@CNT ( $n, n$ ) 复合结构抗压强度高于 AINW@BNNT ( $n, n$ ), CNT 对内部 AINW 抗屈曲保护保护效应强于 BNNT, 特别是较小管径复合纳米管. 其结果可归因于: 1) AINW 在 CNT 管内拥有相对较大的 Al 原子线密度, 有利于形成增大结构稳定性和力学性能  $\sigma$  键, 对增强抗压性能起了决定性作用; 2) 大管径 CNT 管内 AINW 是轴向一维分布的, 而大管径 BNNT 内的 AINW 是螺旋结构形状的, 更多铝原子分布于横截面方向, 相对减少了轴向承压原子数目; 3) 同类型纳米管, 管径越小, 轴向承压时由于管壁对面六边形相距较近, 相互作用较大, 更有利于抵抗横向内陷. 研究结果可为不同

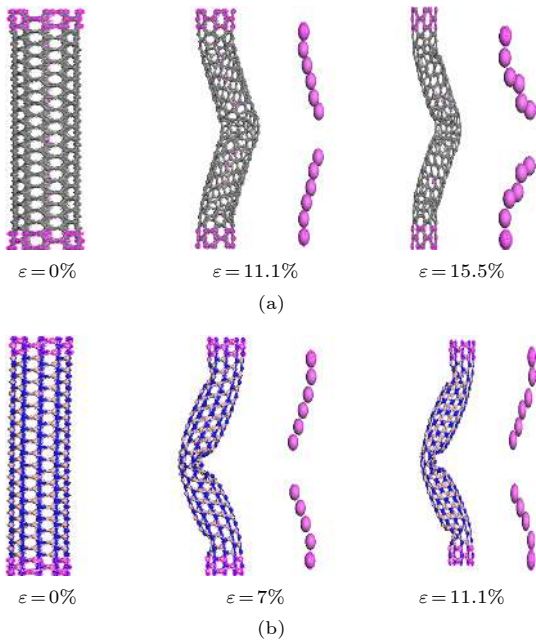


图 4 屈曲前后的 (a) AINW@CNT (5, 5) 与 (b) AINW@BNNT (5, 5) 结构

Fig. 4. (a) AINW@CNT (5, 5) and (b) AINW@BNNT (5, 5) nanotubes before and after buckling.

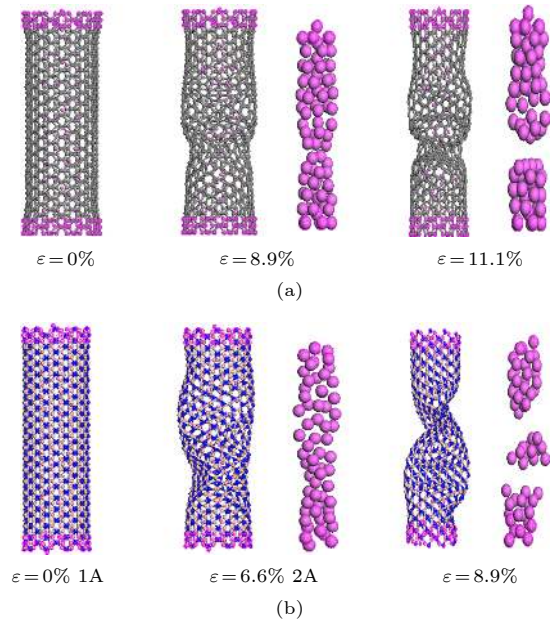


图 5 屈曲前后的 (a) AINW@CNT (10, 10) 与 (b) AINW@BNNT (10, 10) 结构

Fig. 5. (a) AINW@CNT (10, 10) and (b) AINW@BNNT (10, 10) nanotubes before and after buckling.

应用条件下 (如高温、高压、抗氧化等) 选择不同 AINW 增强复合结构提供参考.

为揭示上述现象的原因, 选取 AINW@CNT (10, 10) 与 AINW@BNNT(10, 10) 在不同应变条件下的键能 ( $E_B$ )、角能 ( $E_A$ )、扭曲能 ( $E_T$ )、van der Waals 能 ( $E_V$ ) 及总势能 ( $E_{TP}$ ) 进行了计算分析.  $E_B$ ,  $E_A$  及  $E_T$  相应于键长、键角及管形变化引起的势能.  $E_V$  主要源于管壁间相互作用势. 屈曲主要表明大的管形变化, 同时必然引起内部纳米线与外管间距的较大变化, 故通常表现为  $E_T$  明显增大与  $E_V$  明显减小基本规律. 并依其具体破坏情形, 可伴随着键、角能的不同变化趋势. AINW@CNT (10, 10) 与 AINW@BNNT (10, 10) 的具体计算结果如图 6 所示, 可以看出, AINW@CNT 与 AINW@BNNT 的各种能量变化规律具有相似性. 屈曲前, 总势能随应变基本保持较好的抛物线形, 这是材料发生弹性形变的基本特征. 当压缩应变超过屈曲应变后, 其能量将发生较大突变. 主要表现为  $E_B$ ,  $E_V$  明显下降,  $E_T$  增大, 相对较小的  $E_A$  变化不是很明显. 仔细观察可发现, AINW@BNNT 的  $E_B$  在屈曲后下降到比  $E_A$  还小. 这说明屈曲发生时, BNT 键长与管型已发生较大变化, 但管壁六边形形状变化不大. 通过比较图 6(a) 与图 6(b) 也可以看到 AINW@CNT 的  $E_V$  明显高于 AINW@BNNT, 且

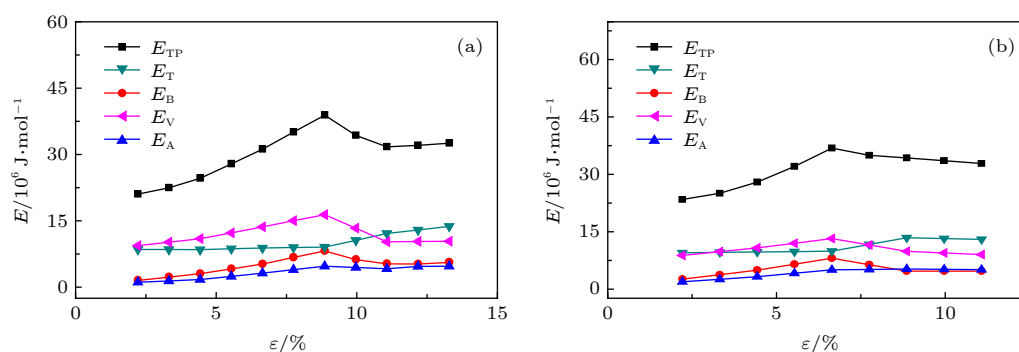
图6 (a) AlNW@CNT (10, 10) 与 (b) AlNW@BNNT (10, 10) 的能量与压缩应变  $\varepsilon$  的关系

Fig. 6. Energy of a (a) AlNW@CNT (10, 10) and (b) AlNW@BNNT (10, 10) as a function of the compression strain.

随应变增大也相对明显,说明较大的 van der Waals 能可起到维持外管管形、保护内部 AlNW 的作用. 因此,较大的 van der Waals 能是维系复合纳米管结构稳定、增大抗压能力的主要原因. 铝原子在两种不同纳米管内表现出不同的阵列方式,其差异由纳米管的差异引起. 这些不同阵列方式反过来对 CNT 和氮化硼复合结构抗压性能产生一定程度的影响,其一般的力学性能主要来源于纳米管的贡献,管内铝原子主要通过 van der Waals 作用传递影响其复合结构的结构稳定性.

## 4 结 论

通过对管内充以一定数量铝原子的 CNT 和 BNNT 进行结构优化发现:当系统达到平衡时,管内铝原子整齐排列成各种纳米线形状;(5, 5) 和 (10, 10) 型 CNT 和 BNNT 内分别形成一束一维 AlNW 和多束 AlNW,其中 (10, 10) 型 CNT 内形成 11 束高度轴对称一维 AlNW,而 BNNT (10, 10) 内形成 5 束螺旋结构形状的 AlNW. 其 RDF 数据分析表明: CNT 内的 AlNW 具有比 BNNT 内的 AlNW 较大的原子分布线密度,但大管径 BNNT 内的螺旋状 AlNW 可以具有比相同管径 CNT 内的 AlNW 更高的结晶性. 该结果对不同应用条件下选用 AlNW 具有重要意义. 通过对 AlNW@CNT 和 AlNW@BNNT 复合结构轴向压缩模拟与能量分析发现: AlNW@CNT 复合结构的抗屈曲应变能力明显强于 AlNW@BNNT,且屈曲应变随管径增大而减小. 即较小管径的 AlNW@CNT 具有较强轴向抗压能力. 能量分析表明:较大的 van der Waals 相互作用是维系复合纳米管结构稳定、增大抗压能力的主要原因.

## 参考文献

- [1] Zhang J M, Wang S F, Xu K W, Ji V 2010 *J. Nanosci. Nanotechnol.* **10** 840
- [2] Arcidiacono S, Walther J H, Poulikakos D, Passerone D, Koumoutsakos P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 105502
- [3] Hudziak S, Darfeuille A, Zhang R, Peijs T, Mountjoy G, Bertoni G, Baxendale M 2010 *Nanotechnology* **21** 125505
- [4] Zhao D L, Zhang J M, Li X, Shen Z M 2010 *J. Alloys Compd.* **505** 712
- [5] Xiao J, Ryu S Y, Huang Y, Hwang K C, Paik U, Rogers J A 2010 *Nanotechnology* **21** 085708
- [6] Wang L, Zhang H W, Zhang Z Q, Zheng Y G, Wang J B 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 051122
- [7] Soldano G, Mariscal M M 2009 *Nanotechnology* **20** 165705
- [8] Guo S H, Zhu B E, Ou X D, Pan Z Y, Wang Y X 2010 *Carbon* **48** 4129
- [9] Zhang X Q, Li H, Liew K M 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 073709
- [10] Nishio K, Ozaki T, Morishita T, Mikami M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 201401
- [11] Lü Z Y, Hu Q K, Xu Z X, Wang J J, Chen Z H, Wang Y, Chen M, Zhou K, Zhou Y, Han S T 2019 *Adv. Electron. Mater.* **5** 1800793
- [12] Cui Z, Han Y W, Huang Q J, Dong J Y, Zhu Y 2018 *Nanoscale* **10** 6806
- [13] Wang W H, Zhang N 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 247302 (in Chinese) [王文慧, 张霁 2018 *物理学报* **67** 247302]
- [14] Chen R, Hochbaum A I, Murphy P, Moore J, Yang P D, Majumdar A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 105501
- [15] Wu Z G, Neaton J B, Grossman J C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 246804
- [16] Blasé X, Fernandez-Serra M V 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 046802
- [17] Durgun E, Cakir D, Akman N, Ciraci S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 256806
- [18] Leu P W, Svizhenko A, Cho K 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235305
- [19] Sorokin P B, Avramov P V, Kvashnin A G, Kvashnin D G, Ovchinnikov S G, Fedorov A S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235417
- [20] Lu Y B, Gu J M, Liu C H, Peng W L 2016 *Semicond. Optoelectron.* **37** 370 (in Chinese) [鹿业波, 顾金梅, 刘楚辉, 彭文利 2016 *半导体光电* **37** 370]
- [21] Hu L, Wu H, Cui Y 2011 *MRS Bull.* **36** 760
- [22] Cho Y J, Park I J, Lee H J, Kim J G 2015 *J. Power Sources* **277** 370
- [23] Lin M C, Gong M, Lu B, Wu Y, Wang D Y, Guan M, Angell M, Chen C, Yang J, Hwang B J, Dai H 2015 *Nature* **520** 324

- [24] Li S, Niu J, Zhao Y C, So K P, Wang C, Wang C A, Li J 2015 *Nat. Commun.* **6** 7872
- [25] Ju S, Li J, Liu J, Chen P C, Ha Y G, Ishikawa F, Chang H, Zhou C, Facchetti A, Janes D B, Marks T J 2008 *Nano Lett.* **8** 997
- [26] Fu K K, Wang Z, Dai J, Carter M, Hu L 2016 *Chem. Mater.* **28** 3527
- [27] Shaijumon M M, Perre E, Daffos B, Taberna P L, Tarascon J M, Simon P 2010 *Adv. Mater.* **22** 4978
- [28] Das A, Ronen Y, Most Y, Oreg Y, Heiblum M, Shtrikman H 2012 *Nat. Phys.* **8** 887
- [29] Li L, Xu X, Chew H, Huang X, Dou X, Pan S, Li G, Zhang L 2008 *J. Phys. Chem. C* **112** 5328
- [30] Lu Y, Tohyoh H, Saka M 2012 *Thin Solid Films* **520** 3448
- [31] Sun Y X, Tohmoh H, Saka M 2009 *J. Nanosci. Nanotechnol.* **9** 1972
- [32] Wang H, Li B 2018 *J. Electrochem. Soc.* **165** D641
- [33] Chen Y, Wang Y, Zhu S, Chen C, Danner V A, Li Y, Dai J, Li H, Fu K K, Li T, Liu Y, Hu L 2019 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** 6009
- [34] Azuma K, Sakajiri K, Okabe T, Matsumoto H, Kang S, Watanabe J, Tokita M 2017 *Jpn. J. Appl. Phys.* **56** 095002
- [35] Chen Y, Zou J, Campbell S J, Le Caer G 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 2430
- [36] Yuan J H, Liew K M 2009 *Carbon* **47** 713
- [37] Yuan J H, Liew K M 2009 *Carbon* **47** 1526
- [38] Jing L, Tay R Y, Li H L, Tsang S H, Huang J F, Tan D L, Zhang B W, Teo E H T, Tok A I Y 2016 *Nanoscale* **8** 11114
- [39] Xu F F, Bando Y, Golberg D, Hasegawa M, Mitome M 2004 *Acta Mater.* **52** 601
- [40] Golberg D, Bando Y, Mitome M, Fushimi K, Tang C C 2004 *Acta Mater.* **52** 3295
- [41] Ashrafi B, Jakubinek M B, Martinez-Rubi Y, Rahmat M, Djokic D, Laqua K, Park D, Kim K S, Simard B, Yousefpour A 2017 *Acta Astronaut.* **141** 57
- [42] Xu X J G, Gilburd L, Bando Y, Golberg D, Walker G C 2016 *J. Phys. Chem. C* **120** 1945
- [43] Tokoro H, Fujii S, Oku T 2005 *Solid State Commun.* **133** 681
- [44] Yuan J H, Liew K M 2010 *J. Comput. Theor. Nanosci.* **7** 1878
- [45] Kumar S, Srivastava V C, Mandal G K, Pattanayek S K, Sahoo K L 2017 *J. Phys. Chem. C* **121** 20468
- [46] Yuan J H, Huang W H, Shi X H, Yang C H 2013 *Rare Metal. Mat. Eng.* **42** 297 (in Chinese) [袁剑辉, 黄维辉, 史向华, 杨昌虎 2013 *稀有金属材料与工程* **42** 297]
- [47] Yuan J H, Huang W H, Shi X H, Zhang Z H 2012 *Chin. J. Inorg. Chem.* **28** 125 (in Chinese) [袁剑辉, 黄维辉, 史向华, 张振华 2012 *无机化学学报* **28** 125]
- [48] Yuan J H, Liew K M 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 431
- [49] Yuan J H, Liew K M 2011 *Nanotechnology* **22** 085701
- [50] Yuan J H, Liew K M 2011 *Carbon* **49** 677
- [51] Yuan J H, Zhang L W, Liew K M 2017 *Computat. Mater. Sci.* **133** 130
- [52] Yuan J H, Zhang L W, Liew K M 2016 *Current Nanosci.* **12** 636
- [53] Yuan J H, Zhang L W, Liew K M 2015 *RSC Adv.* **5** 74399
- [54] Yuan J H, Liew K M 2014 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** 88
- [55] Rappe A K, Casewit C J, Colwell K S, Goddard W A, Skiff W M 1992 *J. Am. Chem. Soc.* **114** 10024
- [56] Rappe A K, Colwell K S, Casewit C 1993 *J. Inorg. Chem.* **32** 3438
- [57] Srivastava D, Menon M, Cho K 1999 *J. Phys. Rev. Lett.* **83** 2973
- [58] Casewit C, J, Colwell K S, Rappe A K 1992 *J. Am. Chem. Soc.* **114** 10046

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

Yuan Jian-Hui<sup>†</sup> Lei Qin-Wen Liu Qi-Cheng<sup>‡</sup>

(Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering, School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)  
( Received 24 January 2019; revised manuscript received 17 June 2019 )

## Abstract

To know the basic configuration and application characteristics of aluminum (Al) nanostructure, the structure performances of carbon nanotube (CNT) and boron-nitride NT (BNNT) filled with Al atoms are studied through molecular dynamics. Optimization results show that the Al atoms in the tube are arranged neatly into various shapes of nanowires. A bunch of one-dimensional (1D) Al nanowires (AlNWs) is formed in (5, 5) CNT and BNNT, and large beams of AlNWs are formed in (10, 10) NT, including 11 beams of 1D AlNWs with highly axial symmetry in (10, 10) CNT and 5 beams of spiral AlNWs in BNNT (10, 10). Further data analysis for radical distribution function (RDF) shows that AlNWs inside CNT have larger atomic distribution density, but those inside BNNT with larger diameter have better crystallinity than those with similar size inside the CNT. These results can provide a method of designing the nanowires with different structures and shapes in different micro-nano devices (such as nanospring, nanosolenoid, and others). Comparison of the axial compression behaviors of the composite NTs and their energy analysis reveal that the critical buckling strain of AlNW@CNT is significantly larger than that of AlNW@BNNT. For the same type of compound structure, the buckling strain decreases with NT diameter increasing. Therefore, smaller AlNW@CNT has stronger axial compressive resistance. The main reasons are as follows: 1) The AlNW in carbon NTs has a relatively large Al atomic distribution in the axial direction, which is conducive to the formation of  $\sigma$  bond to increase structural stability and mechanical performance. It also plays a decisive role in enhancing compressive performance. 2) The AlNW in the large-diameter boron nitride NTs is helical in shape, and more Al atoms are distributed in the direction of the cross section, thereby relatively reducing the number of axial pressure-bearing atoms. In addition, for the same type of nanotube, a tube with a small diameter results in closer hexagons to the tube wall and larger interaction. These conditions are more conducive to resisting the transverse subsidence under axial pressure. The energy analysis results indicate that the van der Waals force is one of the main causes for NT composite stability and increasing compressive strength. These results can provide a reference for selecting different Al nanowire-reinforced composite structures under different application conditions, such as high temperature, high pressure, oxidation resistance, and others.

**Keywords:** aluminum nanowires, carbon nanotube and boron-nitride nanotube, molecular dynamics, compressing property

**PACS:** 61.46.Km, 61.46.Np, 47.11.Mn, 51.35.+a

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190137

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61771076, 21276028, 21506259).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [wxyjh@163.com](mailto:wxyjh@163.com)

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: [743542590@qq.com](mailto:743542590@qq.com)