

Au-Ag 合金纳米管填充碳纳米管特性的第一性原理研究

孙亚茹, 马良财

(宁夏大学物理与电子电气工程学院, 银川 750021)

摘要: 基于密度泛函理论框架下的第一性原理计算, 研究了 Au-Ag 合金纳米管同轴填充不同线径锯齿型($n, 0$)碳纳米管所形成复合系统的稳定性、电子特性和力学性能. 结果表明, 内、外管间距约为 4.20 Å 的 $\text{Au}_x\text{Ag}_{4-x}@(15, 0)$ 复合系统为具有较大填充率的最稳定结构. 能带结构分析表明, 相对于自由 Au-Ag 合金纳米管复合系统的量子电导有所增加, 电子态密度分析表明复合系统中的传导电子主要来源于内部 Au 原子和 Ag 原子的 s 电子以及外部 C 原子的 p 电子. 相对于自由金属纳米管而言, 碳纳米管的包裹使得金属纳米管的轴向拉伸临界应变和理想强度大大增加, 有效地提高了其力学性能.

关键词: Au-Ag 合金纳米管; 碳纳米管; 结构稳定性; 电子特性; 第一性原理

中图分类号: O562 **文献标识码:** A **DOI:** 10.19907/j.0490-6756.2021.035001

First-principles study of the properties of Au-Ag nanotube encapsulated into carbon nanotube

SUN Ya-Ru, MA Liang-Cai

(School of Physics and Electronic-Electrical Engineering, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

Abstract: By using first-principles calculation based on density-functional theory, we have systematically investigated the stability, electronic and mechanical properties of (4, 2) Au-Ag alloy nanotubes encapsulated in a series of zigzag ($n, 0$) carbon nanotubes with various diameters. The most stable combined system with larger filling rate is $\text{Au}_x\text{Ag}_{4-x}@(15, 0)$ with an optimal tube-tube distance of about 4.20 Å. The analysis of band structure shows that the quantum conductance of the composite system is much higher than that of the corresponding isolated alloy nanotubes. The energy states near the Fermi level are mainly attributed to the s electrons of the inner Au and Ag atoms as well as the p electrons of the outer C atoms. The critical strains and the ideal strengths of the combined systems are remarkably higher than those of the freestanding alloy nanotubes, suggesting that the mechanical properties of the alloy nanotubes are significantly enhanced by the carbon nanotube coating.

Keywords: Au-Ag alloy nanotubes; Carbon nanotubes; Structural stability; Electronic properties; First-principles

收稿日期: 2019-12-11

基金项目: 国家自然科学基金(11664032); 宁夏自然科学基金(2019AAC03035)

作者简介: 孙亚茹(1996—), 女, 山东菏泽曹县人, 硕士研究生, 主要从事低维材料微观结构和特性的研究.

通讯作者: 马良财. E-mail: maliangcai@126.com

1 引言

近年来,金属纳米管和纳米线由于其独特的电子、热学、光学和力学性能以及其在纳米电子器件中的潜在应用而备受关注^[1-10]. 其中,一维贵金属金、银和铜纳米材料在实验和理论方面得到了广泛的研究^[2-8]. 实验上常用以下三种方法来制备超细金属纳米管和纳米线:机械可控裂结法(MCJB)、高分辨率透射电子显微镜(HR-TEM)技术和碳纳米管(CNTs)填充方法. 例如, Oshima 研究组利用超高真空电子显微镜成功制备了(5, 3)单壁金纳米管(AuNT)^[2];随后, Lagos 等人利用透射电子显微镜技术观测到了(4, 4)银纳米管(AgNT)的形成^[3], 且 Autreto 等人的研究表明该中空结构 AgNT 的稳定性为其固有特性, 而非轻杂质原子吸附或掺杂所致^[4]. 此外, 实验上也成功制备了铜纳米管(CuNT)^[9]. 然而, 实验研究表明即使在超高真空环境下金属纳米线和纳米管也只是短暂存在^[10], 随着碳纳米管(CNTs)在实验上的成功制备^[11-12], 在性能稳定的 CNTs 内部填充金属纳米材料成为获取一维金属纳米材料的新途径^[13-17].

人们在对单金属纳米材料研究的同时, 对合金纳米材料也展开了研究. 然而, 由于纳米材料中存在着所谓的“自净效应(Self-purification effect)”^[18], 使得“杂质原子”被排斥在外, 因此限制了可控掺杂二元合金纳米材料的制备. 但在 2006 年, Bettini 等人首次在实验上通过机械拉伸合金纳米结而获得了悬空 Au-Ag 合金单原子链^[19], 且相比于纯 Au 和 Ag 单原子链, 合金单原子链的强度更高. 最近, Lagos 等人基于 HR-TEM 实验也成功制备了悬空 Au-Cu 合金单原子链^[20]. 合金单原子链在实验上的成功制备意味着纳米材料中的“自净效应”是可以被抑制的. (4, 2) 贵金属合金纳米管作为超细金属纳米管的典型代表, 其结构特性、稳定性、振动特性和光学特性得到了系统的研究^[5, 21], 分子动力学模拟研究表明纯(4, 2) Au、Ag、Cu 及其合金纳米管在 CNTs 中也可稳定形成^[13-15]. 基于上述研究背景, 本文应用第一性原理计算方法, 以(4, 2) Au-Ag 合金纳米管为例, 研究将其填充到一系列不同管径 CNTs 中所形成复合结构的稳定性、电子特性和力学性能, 以期为实验制备稳定存在的 Au-Ag 二元合金纳米管提供理论指导.

2 计算方法与模型

本文基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算, 采用 VASP 程序包^[22-23], 电子与离子实之间的相互作用选择投影缀加波方法(PAW), 电子间的交换关联势采用广义梯度近似(GGA)下的 PBE 函数^[24], 平面波截断能为 450 eV. 计算模型被构造在一个四方形超胞中, 所有结构周期沿 Z 方向, 在 X、Y 方向添加厚度为 15 Å 的真空层, 以避免计算模型与其镜像间的相互作用. 布里渊区积分采用以 Gamma 点为中心的 Monkhorst-Pack 方法^[25], 经过收敛性测试后, 金属纳米管取 $1 \times 1 \times 21$ 的 k 点网格, 复合结构取 $1 \times 1 \times 13$ 的 k 点网格. 原子弛豫采用共轭梯度算法, 当能量收敛值小于 10^{-4} eV、且原子受力收敛小于 0.01 eV/Å 时, 结构优化停止. Au、Ag 和 C 原子的价电子结构为 $5d^{10}6s^1$ 、 $4d^{10}5s^1$ 和 $2s^22p^2$.

初始纯贵金属(4, 2)纳米管可通过卷曲对应贵金属(111)晶面单层来获得^[5-8, 13-15, 21], 其单胞内包含 A、B 两个原子层, 每个原子层有两个原子, B 原子层相对于 A 原子层以纳米管轴线为轴旋转了 $\pi/2$, 这种交错结构有较高的稳定性^[26]. Ag-Au 合金 NT 可在纯 AgNT 中用 Au 原子取代 Ag 原子来获取. 根据合金浓度的不同, 考虑了 5 种(4, 2)金属纳米管, 标识为 Au_xAg_{4-x} ($x=0, 1, 2, 3, 4$). 当 $x=0$ 和 4 时, 分别对应纯 Ag_4 和 Au_4 纳米管; 研究表明具有更多异核键(Au-Ag 键)的异构体更稳定^[15, 21], 因此本文当 $x=2$ 时只考虑图 1(a)所示的具有更多异核键的 Au_2Ag_2 纳米管.

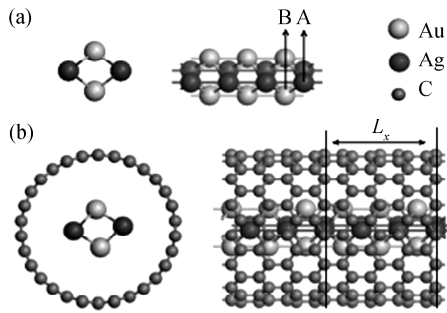


图 1 (a) Au_2Ag_2 (4, 2) 纳米管和 (b) $Au_2Ag_2@ (15, 0)$ 复合结构的俯视图和侧视图

Fig. 1 The top views and side views of the optimized geometric structures of (a) Au_2Ag_2 (4, 2) NTs and (b) $Au_2Ag_2@ (15, 0)$ combined system

首先对 Au_xAg_{4-x} 纳米管的轴向晶格常数 c_m 进行了优化计算, 计算结果如表 1 所示. 计算结果表明, Au_xAg_{4-x} 纳米管的晶格常数 c_m 在 $2.71 \sim$

2.81 Å 之间(与前人计算结果^[5-6, 13-14, 21]基本一致). 对于外部的 CNTs, 本文采用了一系列不同线径的锯齿型($n, 0$) CNTs ($n=12\sim 17$), 其轴向晶格常数 c_c 均为 4.27 Å, 与前人计算结果 4.26 Å^[27]符合较好. 上述计算结果的一致性表明本文所采用的计算方法是可行的. 考虑到计算过程中外部 CNTs 和内部金属纳米管的晶格匹配, 我们以两个单胞的 CNTs 建立一个超胞, 该超胞的晶格常数 L_z 为 8.54 Å ($L_z=2c_c$), 其内部轴向放置包

表 1 (4, 2)金属纳米管的晶格常数 c_m 和直径 D_{M0}
Tab.1 The lattice constants (c_m) and diameters (D_{M0}) of optimized (4, 2) alloy nanotubes

System	$c_m/\text{\AA}$	$D_{M0}/\text{\AA}$
Ag ₄	2.81 (2.82 ^[5-6] , 2.81 ^[21])	3.48(3.49 ^[5] , 3.50 ^[6] , 3.50 ^[13] , 3.48 ^[21])
Au ₁ Ag ₃	2.80 (2.80 ^[21])	3.47
Au ₂ Ag ₂	2.77 (2.78 ^[21])	3.47
Au ₃ Ag ₁	2.74 (2.74 ^[21])	3.52
Au ₄	2.71 (2.73 ^[5] , 2.72 ^[21])	3.55 (3.54 ^[15] , 3.57 ^[5] , 3.55 ^[21])

括三个周期($3c_m$)的(4, 2)金属纳米管, 通过轴向拉伸内部金属纳米管使得内、外管达到晶格匹配, 此时, 内部金属纳米管的轴向晶格常数沿轴向拉伸的范围为 1.1%~5.0%, 在可以接受的范围之内^[28], Jo 运用同样的方法, 将 Fe-Co 合金纳米线的轴向晶格常数拉伸 14%后填充到(6, 6) CNTs

中^[29]. 将合金纳米管填充到 CNTs 中形成复合系统[标记为 $Au_xAg_{4-x}@ (n, 0)$], CNTs 超胞内包含六层金属原子, 图 1(b)中以(15, 0) CNT 为例, 给出了 Au_2Ag_2 合金纳米管填充其中后所形成 $Au_2Ag_2@(15, 0)$ 复合系统的结构俯视图和侧视图.

3 结果与讨论

3.1 复合系统的弛豫结构及其稳定性

对于 $Au_xAg_{4-x}@ (n, 0)$ 复合结构, 通过对金属纳米管在 CNTs 内的位置进行弛豫, 发现偏离 CNTs 中心轴放置的金属纳米管在优化后会自发地返回共轴位置, 即内、外管共轴放置时复合系统能量最低. 所有复合系统结构优化后其管状几何构型基本保持不变. 为了研究 $Au_xAg_{4-x}@ (n, 0)$ 复合系统中内部金属纳米管和外部 CNTs 间的相互作用, 我们将弛豫后复合系统组成成分(金属纳米管和 CNTs)的直径分别与对应自由金属纳米管和纯 CNTs 的直径进行了比较, 定义 D_M 和 D_{M0} (见表 1)分别为复合体系中内部金属纳米管直径和相应自由金属纳米管的直径, D_C 和 D_{C0} 分别为复合体系中 CNTs 的直径和相应纯 CNTs 的直径, 据此定义, 图 2(a)和(b)中分别给出了金属纳米管直径差值(D_M-D_{M0})和 CNTs 直径差值(D_C-D_{C0})随着($n, 0$) CNTs 参数 n 的变化趋势.

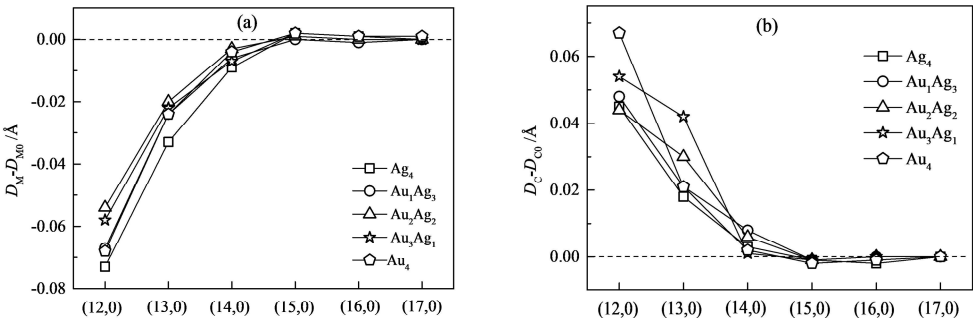


图 2 (a)金属纳米管直径差值(D_M-D_{M0})和(b) CNTs 直径差值(D_C-D_{C0})随着($n, 0$) CNTs 参数 n 的变化趋势
Fig.2 (a) The diameters difference (D_M-D_{M0}) of corresponding metal nanotubes and (b) the diameters difference (D_C-D_{C0}) of corresponding ($n, 0$) CNTs as a function of n

从图 2 我们可以看出, 当外部($n, 0$) CNTs 管径较小时($n<15$), (D_M-D_{M0})为负值, 而(D_C-D_{C0})为正值, 即复合结构中内部金属纳米管直径小于对应自由金属纳米管的直径, 同时外部 CNTs 直径大于相应纯 CNTs 的直径, 表明复合结构中内、外管间存在斥力相互作用; 相反的, 当外部($n, 0$) CNTs 线径较大时($n\geq 15$), (D_M-D_{M0})为正值, 而

(D_C-D_{C0})为负值, 即内部金属纳米管的直径略大于对应自由金属纳米管的直径, 而外部 CNTs 直径略小于对应纯 CNTs 的直径, 表明复合结构中内外管间存在较小的引力相互作用. 同时, 可以看出随着 CNTs 管径的增加, (D_M-D_{M0})和(D_C-D_{C0})均趋近于零, 表明复合系统中金属纳米管和 CNTs 的直径分别逐渐接近于自由金属纳米管和纯

CNTs 的直径,即当外部 CNTs 管径足够大时,内、外管间相互作用可以忽略不计。此外,Ag₄@(12, 0)复合结构中内部 Ag₄纳米管的直径为 3.39 Å,与前人利用分子动力学模拟得到 Ag₄@(7, 7)复合系统中内部的 Ag₄纳米管的直径 3.34 Å^[13]基本一致,这是由于锯齿型(12, 0)和扶手椅型(7, 7)CNTs 的管径大小基本相等;Au₂Ag₂@(12, 0)复合系统内部金属纳米管直径为 3.38 Å,与前人分子动力学模拟结果 3.24 Å^[15]相差不大。

为了分析 Au_xAg_{4-x}@(n, 0)复合系统的稳定性,我们计算了其形成能 E_f,形成能 E_f定义为:

$$E_f = (E_{MNTs@CNTs} - E_{MNTs} - E_{CNTs}) / 12$$

其中 E_{MNTs@CNTs}、E_{MNTs}和 E_{CNTs}分别为复合系统、自由金属纳米管和纯 CNTs 的总能量,数字 12 为一个超胞内的贵金属原子数,计算结果见表 2。

表 2 Au_xAg_{4-x}@(n, 0)复合体系的形成能 E_f
Tab. 2 The formation energies (E_f) for Au_xAg_{4-x}@(n, 0) combined systems

E _f /eV	(12,0)	(13,0)	(14,0)	(15,0)	(16,0)	(17,0)
Ag ₄	0.118	0.025	-0.007	-0.014	-0.013	-0.010
Au ₁ Ag ₃	0.125	0.025	-0.006	-0.015	-0.011	-0.008
Au ₂ Ag ₂	0.134	0.029	-0.005	-0.018	-0.014	-0.011
Au ₃ Ag ₁	0.138	0.028	-0.007	-0.025	-0.017	-0.014
Au ₄	0.134	0.015	-0.024	-0.044	-0.033	-0.029

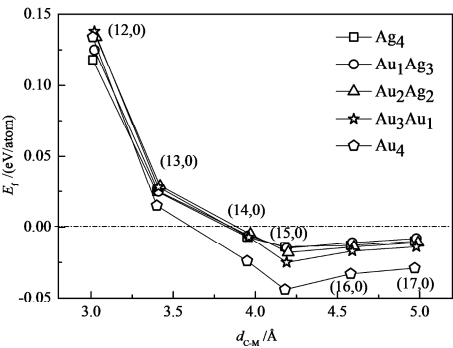


图 3 复合系统的形成能随着内-外管间距的变化趋势
Fig. 3 The formation energies (E_f) as a function of the distances (d_{C-M}) between the inner metal nanotubes and outer CNTs

为直观描述复合系统形成能的变化趋势,图 3 给出了复合系统的形成能 E_f随着内、外管间距 (d_{C-M},外部 CNTs 与内部金属纳米管半径之差)的变化规律,其整体变化趋势与两个大分子间相互作用变化趋势相似^[30]。随着内、外管间距的逐渐增大,形成能变化不是单调减小,当 d_{C-M}<3.95 Å 时,E_f为正值,表明复合系统形成过程是吸热过程。

当 d_{C-M}>3.95 Å 时,形成能为较小的负值,表明复合系统的形成过程是放热过程,Au-Ag (4, 2)金属纳米管能够稳定的存在于 n≥14 的锯齿型(n, 0)CNT 内部。此外,从图 3 也可看出,五种金属纳米管填充到线径为 11.82 Å 的(15, 0)CNT 中形成复合结构 Au_xAg_{4-x}@(15, 0)时形成能最小,即该复合结构是最稳定的结构,此时内外管间距 d_{C-M}约为 4.20 Å。这与 Bi 纳米线填充 CNTs 的研究结果类似^[31]。随着内、外管间距的进一步增大,形成能 E_f缓慢增大,可以推测当外部 CNTs 管径足够大时,复合系统的形成能将趋近于零,即内部金属纳米管与外部 CNTs 间相互作用可以忽略不计。最后,从表 2 和图 3 中可以看出 Au_xAg_{4-x}@(15, 0)复合系统的形成能值随着 Au 浓度的增加而逐渐减小,表明复合系统 Au_xAg_{4-x}@(15, 0)的稳定性随着 Au 浓度的增加而增大,即 Au₄@(15, 0)复合系统为最稳定结构。

3.2 Au_xAg_{4-x}@(15, 0)复合系统的电子结构

由于较高稳定性,我们以 Au_xAg_{4-x}@(15, 0)为例研究了复合系统的电子特性,图 4 给出了纯(15, 0)CNT、自由 Au_xAg_{4-x}纳米管和 Au_xAg_{4-x}@(15, 0)复合结构的能带结构。从能带结构可以看出纯(15, 0)CNT 表现为具有较小带隙(0.031 eV)的半导体特性,这与 Gülseren 等人的 DFT-GGA 计算结果(0.028 eV)^[32-33]一致。而从自由金属纳米管和 Au₂Ag₂@(15, 0)复合结构的能带结构中均有能带穿过费米能级,因此均表现出金属性特性,其中双筒并能带穿过费米能级处用黑色圆点标记。根据 Landauer 公式^[34],理想状态下体系电子能带结构中穿过费米能级的能带数目等于以 G₀=2e²/h 为单位的量子电导 G 的大小。从图 4 中可以看出自由 Au_xAg_{4-x}纳米管的能带结构中均有 3 条能带穿过费米能级,因此其量子电导均为 3G₀,而 Au_xAg_{4-x}@(15, 0)复合系统的能带结构中均有 5 条能带穿过费米能级,因此其量子电导均为 5G₀,相对于自由金属纳米管而言,复合系统的量子电导均增加了 2G₀。因此,金属纳米管填充到 CNTs 中形成复合系统使得复合系统的电子传输性能大大增强。此外,从复合系统的能带结构可以看出,其费米能级附近的能带并非金属纳米管和 CNT 能带结构的简单叠加,这进一步表明金属纳米管和 CNT 间存在一定的相互作用,从而导致复合结构费米能级附近的能带结构发生变化。

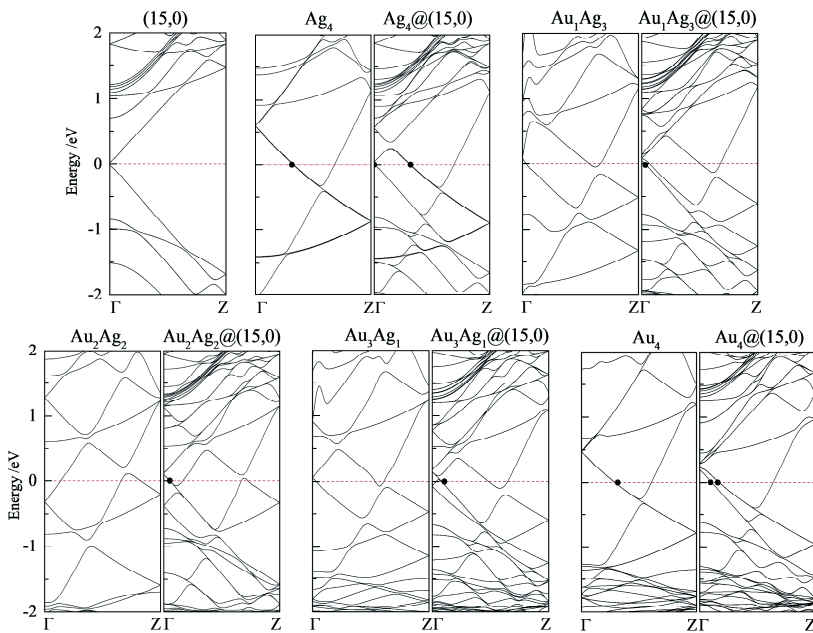


图 4 纯(15, 0)CNT、自由 Au_xAg_{4-x} 纳米管和 $Au_xAg_{4-x}@(15, 0)$ 复合结构的能带结构
黑色圆点所在能带为双简并能带, 费米能级在零能量处并用水平虚线表示.

Fig. 4 Band structures of pristine (15, 0) CNT, free-standing Au_xAg_{4-x} (4, 2) nanotube and $Au_xAg_{4-x}@(15, 0)$ combined system Black dots represent double degenerate bands
The Fermi level is set at zero energy and is indicated by horizontal dashed lines.

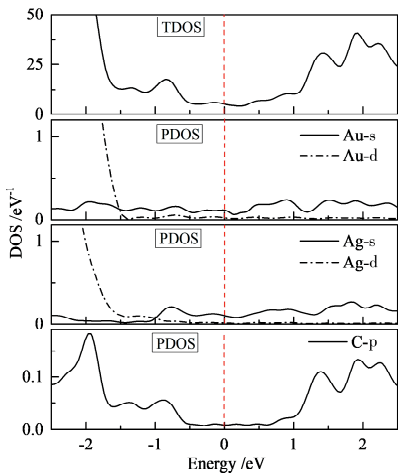


图 5 $Au_2Ag_2@(15, 0)$ 复合系统的态密度(DOS)
费米能级在零能量处并用竖虚线表示.
Fig. 5 The densities of states (DOSs) of $Au_2Ag_2@(15, 0)$ combined system
The Fermi level is set at zero energy and is indicated by vertical dashed lines.

为具体分析复合系统能带结构中费米能级附近的电子态,且由于不同合金浓度复合系统电子特性的相似性,图 5 中仅以 $Au_2Ag_2@(15, 0)$ 复合系统为例给出了其态密度(DOS)分布,复合系统总态密度(TDOS)分布中费米能级附近具有较大的态密度值,表明系统具有金属特性. 从内部 Au 原子和 Ag 原子以及外部近邻 C 原子的投影态密度(PDOS)可以看出,复合系统中穿越费米能级的能

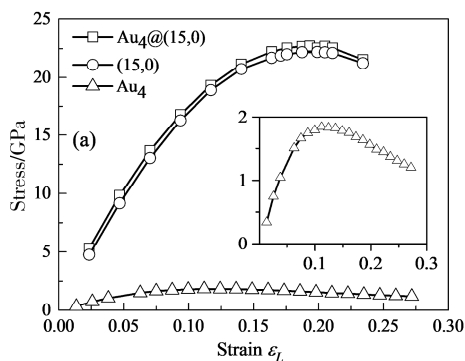
带主要来源于 Au 原子和 Ag 原子的 s 电子态以及 C 原子的 p 电子态,而 Au 原子和 Ag 原子的 d 电子由于其闭壳层结构,在费米能级附近几乎没有贡献,而是主要位于费米能级以下(<-1 eV).

3.3 力学性能

复合系统所能承受的最大应力(即理想强度)对描述其力学性能具有重要的参考作用. 在此,我们计算了复合系统轴向拉伸过程中的应力-应变关系曲线,曲线峰值所对应的应变即为临界应变,而临界应变所对应的应力即为复合系统的轴向理想拉伸强度. 在此,复合系统的应变为: $\epsilon_L = (L_z - L_{z0})/L_{z0}$,其中, L_{z0} 和 L_z 分别为复合系统的平衡态晶格常数和轴向拉伸后的晶格常数. 由于复合系统应力-应变关系的相似性,我们以 $Au_4@(15, 0)$ 、 $Au_2Ag_2@(15, 0)$ 复合系统为例,计算所得的应力-应变关系曲线如图 6(a)和 6(b)所示.

图 6 也给出了相应自由金属纳米管和纯 CNTs 的应力-应变关系曲线. 可以看出,自由 Au_4 和 Au_2Ag_2 纳米管的临界应变分别为 11% 和 10%,对应的理想拉伸强度分别为 1.84 和 1.51 GPa. Kapoor 等人的计算结果表明 Au-Ag 六边形合金纳米线的临界应变约为 15%,所对应的理想拉伸强度在 1.8 GPa 左右^[35]. (15, 0) CNTs 的临界应变约为 20%,所对应的理想拉伸强度为 22.21 GPa,与前人临界应变计算结果 19% 基本一致^[36].

$\text{Au}_4@ (15, 0)$ 和 $\text{Au}_2\text{Ag}_2@ (15, 0)$ 复合系统的应力-应变曲线与纯 $(15, 0)$ CNTs 的应力-应变曲线类似,其理想拉伸强度略高于 CNTs 的理想拉伸强度



度. 因此,相对于自由金属纳米管而言,CNTs 的包裹使得金属纳米管的轴向拉伸临界应变和理想强度大大增加,有效提高了其力学性能.

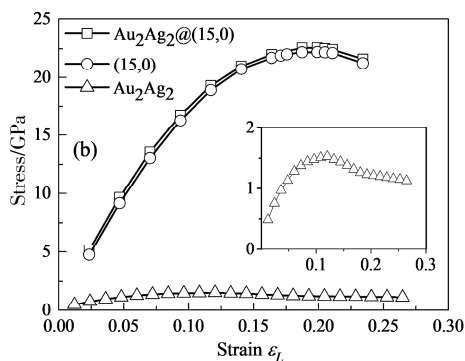


图 6 (a) $\text{Au}_4@ (15, 0)$ 和(b) $\text{Au}_2\text{Ag}_2@ (15, 0)$ 复合系统以及对应自由金属纳米管和 CNT 的应力-应变关系曲线
Fig. 6 The stress-strain relationships of (a) $\text{Au}_4@ (15, 0)$ and (b) $\text{Au}_2\text{Ag}_2@ (15, 0)$ combined systems as well as their corresponding components

4 结 论

基于第一性原理计算方法,研究了 $(4, 2)$ $\text{Au}_x\text{Ag}_{4-x}$ ($0 \leq x \leq 4$) 合金纳米管填充一系列不同线径锯齿型 $(n, 0)$ 碳纳米管 ($12 \leq n \leq 17$) 所形成复合系统的稳定性、电子特性和力学性能,结论如下:

(1) 所有复合系统其管状几何构型基本保持不变,当外部碳纳米管管径较小时 ($n=12, 13$),复合系统的形成过程为吸热过程,而当外部碳纳米管管径较大时 ($n \geq 14$),复合系统的形成过程为放热过程,内、外管间距约为 4.20 \AA 的 $\text{Au}_x\text{Ag}_{4-x}@ (15, 0)$ 复合系统为最稳定的结构,且随着 Au 浓度的增加复合系统稳定性逐渐增加.

(2) 能带结构分析表明复合系统的量子电导相对于自由 Au-Ag 合金纳米管的量子电导有所增加,所以复合系统的电子传输性能大大增加,电子态密度分析表明复合系统中的传导电子主要来源于内部 Au 和 Ag 原子的 s 电子态以及外部 C 原子的 p 电子.

(3) 复合系统应力-应变曲线的计算结果表明,相对于自由金属纳米管,CNTs 的包裹使得金属纳米管的轴向拉伸临界应变和理想强度大大增加,有效地提高了其力学性能.

参考文献:

[1] Xia Y N, Yang P D, Sun Y G, *et al.* One-dimensional nanostructures: synthesis, characterization, and applications [J]. *Adv Mater*, 2003, 15: 353.
[2] Oshima Y, Onga A. Helical gold nanotube synthesized at 150 K [J]. *Phys Rev Lett*, 2003, 91: 205503.

[3] Lagos M J, Sato F, Bettini J, *et al.* Observation of the smallest metal nanotube with a square cross-section [J]. *Nature Nanotech*, 2009, 4: 149.
[4] Autreto P A S, Lagos M J, Sato F, *et al.* Intrinsic stability of the smallest possible silver nanotube [J]. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 065501.
[5] Yang A P, Li D M, Chen G X, *et al.* First-principles investigation on vibrational properties of coinage metal $(4, 2)$ nanotubes [J]. *Comput Theor Chem*, 2017, 1117: 285.
[6] Yang A P, Li X W, Guo P. Vibrational properties of single-walled silver nanotubes studied from first principles [J]. *Physica E*, 2015, 74: 310.
[7] Senger R T, Dag S, Ciraci S. Chiral single-wall gold nanotubes [J]. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 196807.
[8] Elizondo S L, Mintmire J W. *Ab initio* study of helical silver single-wall nanotubes and nanowires [J]. *Phys Rev B*, 2006, 72: 045431.
[9] Meng F, Jin S. The solution growth of copper nanowires and nanotubes is driven by screw dislocations [J]. *Nano Lett*, 2012, 12: 234.
[10] Ohnishi H, Kondo Y, Takayanagi K. Quantized conductance through individual rows of suspended gold atoms [J]. *Nature*, 1998, 395: 780.
[11] Iijima S, Ichihashi T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter [J]. *Nature*, 1993, 363: 603.
[12] Bethune D S, Klang C H, Vries M S, *et al.* Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls [J]. *Nature*, 1993, 363: 605.
[13] Han Y, Li R, Dong J M. Growth of single-walled Ag and Cu nanotubes confined in carbon nanotubes

- studied by molecular dynamics simulations [J]. J Appl Phys, 2013, 113: 3258.
- [14] Han Y, Hu T, Dong J M. Growth of single-walled gold nanotubes confined in carbon nanotubes, studied by molecular dynamics simulations [J]. Phys Lett A, 2013, 47: 122.
- [15] Han Y, Zhou J, Dong J M, *et al.* Formation of single-walled bimetallic coinage alloy nanotubes in confined carbon nanotubes: molecular dynamics simulations [J]. Phys Chem Chem Phys, 2013, 15: 17171.
- [16] 佟永纯, 王清云, 闫益吉, 等. Si-CNT 循环催化 N_2 O 与 CO 反应的理论研究[J]. 原子与分子物理学报, 2019, 36: 380.
- [17] 刘扬, 安立宝, 龚亮. Au 掺杂 CNT 吸附 NO 的第一性原理研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2018, 35: 761.
- [18] Erwin S C, Zu L J, Haftel M I, *et al.* Doping semiconductor nanocrystals [J]. Nature, 2005, 436: 91.
- [19] Bettini J, Sato F, Coura P Z, *et al.* Experimental realization of suspended atomic chains composed of different atomic species [J]. Nature Nanotech, 2006, 1: 182.
- [20] Lagos M J, Autreto P A S, Bettini J, *et al.* Surface effects on the mechanical elongation of AuCu nanowires: De-alloying and the formation of mixed suspended atomic chains [J]. Appl Phys, 2015, 117: 094301.
- [21] Wang X Z, Ma L C, Ma L, *et al.* Structural stability and electronic and optical properties of coinage-metal (4,2) alloy nanotubes: a first-principles study [J]. J Korean Phys Soc, 2019, 74: 555.
- [22] Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. Phys Rev B, 1996, 54: 11169.
- [23] Kresse G, Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method [J]. Phys Rev B, 1999, 59: 1758.
- [24] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple [J]. Phys Rev Lett, 1996, 77: 3865.
- [25] Monhorst H J, Pack J D. Spatial points for Brillouin-zone integrations [J]. Phys Rev B, 1979, 13: 5188.
- [26] Ma L C, Ma L, Lin X L. First-principles study of the structural and electronic properties of ultrathin silver nanowires [J]. Eur Phys J B, 2015, 88: 343.
- [27] Zhang J M, Liang R L, Xu K W. Effect of uniaxial strain on the band gap of zigzag carbon nanotubes [J]. Physica B, 2010, 405: 1329.
- [28] Ma L C, Zhao H S, Yan W J. Structural, electronic and magnetic properties of linear monoatomic chains adsorption on beryllium oxide nanotube: first-principles study [J]. J Magn Magn Mater, 2013, 330: 174.
- [29] Jo C. Magnetic properties of $Fe_{(1-x)}Co_x$ nanowires inside a (6,6) carbon nanotube [J]. J Phys D: Appl Phys, 2009, 42: 105008.
- [30] Ma L C, Zhang J M, Xu K W. Structural and electronic properties of copper nanowire encapsulated into BeO nanotube: first-principles study [J]. Physica B, 2012, 407: 784.
- [31] Lee C H, Yang C K. Structural and electronic properties of bismuth and lead nanowires inside carbon nanotubes [J]. J Phys Chem C, 2011, 115: 10524.
- [32] Gulseren O, Yildirim T, Ciraci S. Systematic *ab initio* study of curvature effects in carbon nanotubes [J]. Phys Rev B, 2002, 65: 153405.
- [33] Ouyang M, Huang J L, Cheung C L, *et al.* Energy gaps in “metallic” single-walled carbon nanotubes [J]. Science, 2001, 292: 702.
- [34] Zhao J J, Buia C L, Han J, *et al.* Quantum transport properties of ultrathin silver nanowires [J]. Nanotechnology, 2003, 14: 501.
- [35] Kapoor P, Kumar A, Sharma M, *et al.* Materials science and engineering b-advanced functional solid-state materials [J]. Mat Sci Eng B, 2018, 228: 84.
- [36] Baykasoglu C, Kirca M, Mugan A. Nonlinear failure analysis of carbon nanotubes by using molecular-mechanics based models [J]. Compos Part B: Eng, 2013, 50: 150.

引用本文格式:

中 文: 孙亚茹, 马良财. Au-Ag 合金纳米管填充碳纳米管特性的第一性原理研究[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2021, 58: 035001.

英 文: Sun Y R, Ma L C. First-principles study of the properties of Au-Ag nanotube encapsulated into carbon nanotube [J]. J Sichuan Univ: Nat Sci Ed, 2021, 58: 035001.