

## 研究论文

### 接枝羧基对单壁碳纳米管弹性性质的影响

袁剑辉; 程玉民

上海大学上海市应用数学和力学研究所, 上海 200072; 2长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙410076

#### 摘要:

采用分子动力学方法对端口接枝不同数量羧基的扶手椅型和锯齿型单壁碳纳米管弹性模量进行了模拟研究. 结果表明, 扶手椅型(5, 5)、(10, 10)管和锯齿型(9, 0)、(18, 0)管在未接枝状态下杨氏模量分别为948、901 GPa和804、860 GPa. 在接枝2-8个羧基情况下, 扶手椅型单壁碳纳米管拉伸杨氏模量基本不随接枝数量的增加而发生变化, 而锯齿型单壁碳纳米管则不同, 接枝状态下的弹性模量比未接枝状态小很多, 但随接枝数量的增加又呈略增趋势. 分别从接枝后碳纳米管变形电子密度等值线结构变化、键长变化和系统势能变化规律等方面, 对单壁碳纳米管弹性模量的接枝效应进行了分析.

关键词: 碳纳米管 分子动力学 接枝效应 羧基 杨氏模量

收稿日期 2007-01-02 修回日期 2007-02-06 网络版发布日期 2007-04-27

通讯作者: 程玉民 Email: ymcheng@staff.shu.edu.cn

#### 本刊中的类似文章

1. 褚道葆;尹晓娟;冯德香;林华水;田昭武.乙醇在Pt/nanoTiO<sub>2</sub>-CNT复合催化剂上的电催化氧化[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1238-1242
2. 窦文龄;辛霞;徐桂英.两亲分子对碳纳米管的分散稳定作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 382-388
3. 周振华;武小满;王毅;林国栋;张鸿斌.氢气在碳纳米管基材料上的吸附-脱附特性[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 692-698
4. 周龙梅;刘宏英;李凤生.Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>纳米粒子/碳纳米管复合体的制备及其催化高氯酸铵热分解[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 627-630
5. 易双萍;张海燕;裴磊;胡寿乐;曾国勋;陈进.氮气热处理对CNTs-LaNi<sub>5</sub>电极电化学性能的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 436-440
6. 张宇;吴汜昕;张鸿斌;林国栋;袁友珠;蔡启瑞.碳纳米管负载铈催化剂上丙烯氨甲酰化[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1057-1060
7. 南小林;张锦;刘忠范;施祖进;顾镇南.单壁碳纳米管在金表面的图形化组装[J]. 物理化学学报, 2001,17(05): 393-396
8. 褚道葆;张莉艳;张金花;张秀梅;尹晓娟.NanoTiO<sub>2</sub>-CNT复合膜电极在DMF溶液中对糠醛的异相电催化还原[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 373-377
9. 吕建中;朱雷;宋捷;李郁芬;黄丰;黄荣彬;郑兰荪.碳纳米管激光等离子体的质谱研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 9-11
10. 边成香;徐学诚;余维;陈奕卫;成荣明;石岩;李相美;晋圣松.磺化聚苯乙烯/多壁碳纳米管复合材料导电机理研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1185-1190
11. 江奇;卢晓英;赵勇;朱晓彤;蔡玉冬;钱兰.活化条件对活性碳纳米管比表面积的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 43-47
12. 陈灿辉;李红;朱伟;张全新.二茂铁及其与DNA复合物的电化学行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1067-1072
13. 陈煜;唐亚文;孔令涌;刘长鹏;邢巍;陆天虹.碳纳米管表面修饰程度对碳纳米管载Pt电催化性能的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 119-123
14. 徐斌;吴锋;陈人杰;陈实;王国庆.碳纳米管在室温熔盐中的电容特性[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1164-1168
15. 周晓龙;柴扬;李萍剑;潘光虎;孙晖;申自勇;张琦锋;吴锦雷.多壁碳纳米管的掺氮改性及场效应管特性研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1127-1131
16. 李娟;方征平;王建国;顾媛娟;佟立芳;刘芙.碳纳米管在接枝二元胺过程中微结构的变化[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1244-1248

扩展功能

本文信息

PDF(1169KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 碳纳米管

▶ 分子动力学

▶ 接枝效应

▶ 羧基

▶ 杨氏模量

本文作者相关文章

▶ 袁剑辉

▶ 程玉民

17. 李志; 巩前明; 梁吉; 黄启忠; 黄白云. 新型ACNT/C纳米复合材料氧化性能的初步研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 316-321
18. 王罗新, 易长海, 邹汉涛, 许杰, 徐卫林. 椅式(8,8)单壁碳纳米管内偶氮苯的顺反异构化[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 149-154
19. 张增富; 罗国华; 范壮军; 项荣; 周丽; 魏飞. 不同结构碳纳米管的电磁波吸收性能研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 296-300
20. 黄祥平; 吕海峰; 黄新堂. 聚乙烯醇用于碳纳米管的开口及修饰研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(10): 1242-1244
21. 李玉平; 曹宏斌; 张懿. 血红蛋白在碳纳米管修饰碳糊电极上的直接电化学行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 187-181
22. 朱海滨; 李振华; 刘子阳; 王凤飞; 王新庆; 王淼. 利用无水乙醇分解制备碳纳米管[J]. 物理化学学报, 2004,20(02): 191-193
23. 牛佳莉; 邹红玲; 张锦; 刘忠范. 单壁碳纳米管氧化过程的银纳米粒子跟踪[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 1-4
24. 王海芳; 邓小勇; 王竞; 高兴发; 邢更妹; 施祖进; 顾镇南; 刘元方; 赵宇亮. XPS研究单壁碳纳米管(SWNTs)上碳与碘形成的共价键[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 673-675
25. 江奇; 卢晓英; 赵勇; 于作龙. 碳纳米管微结构的改变对其容量性能的影响[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 546-549
26. 张琦锋; 于洁; 宋教花; 张耿民; 张兆祥; 薛增泉; 吴锦雷. 碳纳米管阵列的气相沉积制备及场发射特性[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 409-413
27. 李欢军; 官轮辉; 施祖进; 顾镇南. 豆荚型纳米材料C<sub>60</sub>@SWNTs的制备和表征[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 373-376
28. 韦进全; 江斌; 李延辉; 吴德海. 碳化硼纳米线的制备和结构[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 256-259
29. 陈代武; 谢青季; 蒋雪琴; 姚守拙. 槲皮素与酪蛋白和牛血清白蛋白的相互作用及共存碳纳米管的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 379-387
30. 陈雨婷; 张海燕; 张国庆; 陈易明; 朱清峰. 储氢合金电极中添加碳纳米管对SC型高功率电池性能的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 527-532
31. 曹灵超; 刘云圻; 王钰; 魏大程; 付磊; 胡平安; 张洪亮; 黄丽平; 于贵. 湿法纯化碳纳米管阵列及其对碳纳米管阵列形貌的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 951-954
32. 李世鸿 张永平 李丽英. 铬酸及硝酸混合液处理以增强碳纳米管场发射[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1411-1416
33. 张旭志; 焦奎. 单壁碳纳米管和室温离子液体胶修饰电极[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1439-1444
34. 马若彪 付延鲍 马晓华. 二氧化锡填充多壁碳纳米管材料的制备及电化学性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 441-445
35. 张华; 陈小华; 张振华; 邱明. 接枝羟基对有限长碳纳米管电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1101-1105
36. 王晓峰; 王大志; 梁吉. 载氧化钨碳纳米管超级电容器电极[J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 509-513
37. 王进; 陈鸿博; 云虹; 林敬东; 易军; 张鸿斌; 廖代伟. 合成甲醇的催化剂Rh-ZnO/MWNTs的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 65-69
38. 刘霁欣; 谢有畅. W-Fe-MgO催化分解CH<sub>4</sub>制备单壁碳纳米管[J]. 物理化学学报, 2003,19(11): 1093-1096
39. 朱素冰; 孙思修; 周薇薇; 许军舰; 李彦. 以吡啶为原料制备氮掺杂碳纳米管[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1320-1323
40. 王晓峰; 王大志; 梁吉. 超细氢氧化亚镍的溶胶凝胶法制备及其准电容特性[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 117-122
41. 王育煌; 张强; 刘朝阳; 黄荣彬; 郑兰荪. 脉冲激光溅射下固液界面生长的碳纳米管及其机理初探[J]. 物理化学学报, 1996,12(10): 905-909
42. 曹优明 王志永 施祖进 顾镇南. Pd/SWNTs负载型催化剂的制备及其催化性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 825-828
43. 吴彬, 白录, 巩前明, 梁吉. 非离子表面活性剂对多壁碳纳米管在乙醇中高浓度分散的作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1065-1069
44. 朱玉振; 王胜; 魏贤龙; 丁力; 张志勇; 梁学磊; 陈清; 彭练矛. 多壁碳纳米管互连的单壁碳纳米管晶体管的频率特性[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2122-2127
45. 陈西良; 马明旺; 杨小敏; 杨康; 吉特; 吴胜伟; 朱智勇. MWNTs/HDPE复合体系在太赫兹波段的光电性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1969-1974
46. 张维; 崔晓莉; 江志裕. 复合方式对MWCNTs/TiO<sub>2</sub>纳米复合薄膜光电化学性能的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1975-1980

47. 傅坚亮; 张兴旺; 雷乐成. Fe修饰多壁碳纳米管电极高效产 $H_2O_2$  [J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1157-1162
48. 陈昕; 张漪丽; 苏育华; 孟文华; 谢青季; 姚守拙. 镀金和碳纳米管修饰金电极上吸附态葡萄糖氧化酶比活性的EQCM研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1201-1206
49. 叶超; 巩前明; 卢方平; 梁吉. 中分子毒素在碳纳米管上的吸附[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1321-1324
50. 邱汉迅; 王志永; 施祖进; 顾镇南; 邱介山. 二茂铁填充的双壁碳纳米管的合成与红外光谱表征[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1451-1453
51. 李国华; 田伟; 汤俊艳; 马淳安. WC/CNT纳米复合材料制备及其对甲醇氧化的电催化性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1370-1374
52. 吴玉程; 刘晓璐; 叶敏; 解挺; 黄新民. 碳纳米管负载纳米 $TiO_2$ 复合材料的制备及其性能[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 97-102
53. 许兴中; 杨建锋; 李小年; 严新焕. 激光溅射法制备Pt/CNTs催化剂用于邻氯硝基苯的液相加氢反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 121-126
54. 支少锋; 张振华; 邱明; 彭景翠. 单壁碳纳米管的电子速度及有效质量[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 275-280
55. 郑海涛; 李永亮; 梁剑莹; 沈培康. 甲醇在Pd基电催化剂上的氧化[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 993-996
56. 王锐; 徐化明; 李聃; 梁吉. 定位生长法制备AFM单壁碳纳米管针尖[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 565-568
57. 钟起玲; 张兵; 丁月敏; 饶贵仕; 王国富; 蒋玉雄; 任斌; 田中群. 微波法在碳纳米管上负载铂纳米粒子[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 429-432
58. 邹红玲; 杨延莲; 武斌; 卿泉; 李清文; 张锦; 刘忠范. CVD法制备单壁碳纳米管的纯化与表征[J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 409-413
59. 梁遼; 陈艾; 冯哲圣; 叶芝祥. 碳纳米管电极超大容量离子电容器交流阻抗特性 [J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 381-384
60. 魏忠; 陈言; 刘忠范. 单壁碳纳米管的CVD合成及管径分布 [J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 718-722
61. 魏忠; 陈言; 刘忠范. 单壁碳纳米管短管的制备 [J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 687-691
62. 李秀兰; 刘惟敏; 薛增泉; 李建昌; 侯士敏; 张灶利; 彭练矛; 施祖进; 顾镇南. 碳纳米管向金刚石纳米晶粒的转变[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 772-775
63. 刘赛锦; 申自勇; 侯士敏; 顾镇南; 薛增泉. 用原子力显微镜操纵碳纳米管的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 233-236
64. 朴玲钰; 李永丹. 气凝胶催化剂上甲烷裂解制备的碳纳米管结构特征[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 347-351
65. 王垚; 王昊; 魏飞; 金涌. 破碎-絮凝法分离细长碳纳米管与碳纤维[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 376-379
66. 郑青榕; 顾安忠; 林文胜; 李明; 鲁雪生. 氢在多壁碳纳米管上吸附行为研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 139-143
67. 邓梅根; 张治安; 胡永达; 汪斌华; 杨邦朝. 活化和表面改性对碳纳米管超级电容器性能的影响[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 432-435
68. 李瑞芳; 尚贞锋; 许秀芳; 王贵昌. 扶手椅型单壁碳纳米管生长机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1388-1392
69. 裘凯栋; 黎维彬. 水溶液中六价铬在碳纳米管上的吸附[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1542-1546
70. 吕亚芬; 印亚静; 吴萍; 蔡称心. 肌红蛋白在碳纳米管修饰电极上的直接电化学和电催化性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 5-11
71. 杨闵昊; 梁涛; 彭宇才; 陈清. 碳纳米管/ZnO纳米复合体的制备和表征[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 145-151
72. 卢月美, 巩前明, 梁吉. 碳纳米管/活性炭复合微球的制备及其对 $VB_{12}$ 的吸附应用[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1697-1702
73. 傅清宾, 高博, 苏凌浩, 原长洲, 卢向军, 张校刚. 氢键诱导的聚吡咯/苯磺酸功能化多壁碳纳米管的制备及其电化学行为[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2199-2204
74. 李振华, 姜源, 赵沛, 尚学府, 杨辉, 王淼. 电弧放电法制备大面积高纯单壁碳纳米管薄膜[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2395-2398
75. 曹永, 矫庆泽, 赵芸. Fe/MgO催化合成碳纳米管和氮掺杂碳纳米管[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2380-2384
76. 臧杨, 郝晓刚, 王忠德, 张忠林, 刘世斌. 碳纳米管/聚苯胺/铁氰化镍复合膜的电化学共聚制备与电容性能[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
77. 伍英蕾, 杨军, 王久林, 尹利超, 努丽燕娜. 高性能锂-硫电池用复合正极构造与粘结剂的研究[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
78. 王罗新, 许杰, 邹汉涛, 易长海. 硝基甲烷受限单壁碳纳米管内的热解反应: 手性和尺寸的影响[J]. 物理化学

