

碳纳米管包裹的硅纳米线复合结构的热稳定性研究

卢顺顺 张晋敏 郭笑天 高廷红 田泽安 何帆 贺晓金 吴宏仙 谢泉

Thermal stability of compound structure of silicon nanowire encapsulated in carbon nanotubes

Lu Shun-Shun Zhang Jin-Min Guo Xiao-Tian Gao Ting-Hong Tian Ze-An He Fan He Xiao-Jin
Wu Hong-Xian Xie Quan

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 65, 116501 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.116501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.116501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I11>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

类金刚石薄膜在硅基底上的沉积及其热导率

[Deposition and thermal conductivity of diamond-like carbon film on a silicon substrate](#)

物理学报.2016, 65(9): 096501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.096501>

异质结碳纳米管的热整流效率

[Thermal rectification of heterojunction nanotubes](#)

物理学报.2015, 64(21): 216501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.216501>

多约束纳米结构的声子热导率模型研究

[A model for phonon thermal conductivity of multi-constrained nanostructures](#)

物理学报.2015, 64(14): 146501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.146501>

基于稳态电热拉曼技术的碳纳米管纤维导热系数测量及传热研究

[Thermal characterization of carbon nanotube fibers based on steady-state electro-Raman-thermal technique](#)

物理学报.2015, 64(12): 126501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126501>

考虑界面散射的金属纳米线热导率修正

[Thermal conductivities of metallic nanowires with considering surface and grain boundary scattering](#)

物理学报.2013, 62(18): 186501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.186501>

碳纳米管包裹的硅纳米线复合结构的热稳定性研究*

卢顺顺 张晋敏[†] 郭笑天 高廷红 田泽安 何帆 贺晓金
吴宏仙 谢泉

(贵州大学大数据与信息工程学院, 新型光电子材料与技术研究所, 贵阳 550025)

(2016年1月6日收到; 2016年3月10日收到修改稿)

采用经典分子动力学方法模拟一定直径[111]晶向的硅纳米线填充不同扶手椅型单壁碳纳米管复合结构的加热过程, 通过可视化和能量分析的方法判断复合结构中硅纳米线和碳纳米管的热稳定性. 通过讨论碳纳米管的空间限制作用和分子间相互作用力的关系, 对碳纳米管和硅纳米线的热稳定性变化进行初步解释. 研究发现碳纳米管中硅纳米线的热稳定性和碳纳米管的直径关系密切: 当管径较小时, 硅纳米线的热稳定性有所提高, 当管径增大到一定大小时, 硅纳米线的热稳定性会突然显著地下降, 直到硅纳米线与管壁不存在分子间相互作用力, 硅纳米线的热稳定性才会恢复. 而硅纳米线填充到碳纳米管中对碳纳米管的热稳定性有着明显的降低作用.

关键词: 分子动力学模拟, 单壁碳纳米管, 硅纳米线, 热稳定性

PACS: 65.80.-g

DOI: 10.7498/aps.65.116501

1 引言

自从富勒烯和碳纳米管(CNT)被发现后, 这类具有优美结构的纳米材料给世界带来层出不穷的惊喜. 碳纳米管是一种性能优越的新型功能材料和结构材料, 其中单壁碳纳米管(SWCNT)具有非常好的电学、热学特性, 对它的研究一直是纳米材料研究的焦点^[1-3]. 而且人们也关注到了单壁碳纳米管和多壁碳纳米管性质存在的差异, 使人们对碳纳米管内部空间充满着好奇. 自碳纳米管发现以来, 关于利用碳纳米管内部空间的研究层出不穷, 已有大量的理论研究工作关注在碳纳米管中填充金属^[4-8]、水分子^[9,10]、有机物^[11,12]、碳^[13]、半导体材料^[14-16]等, 实验上采用化学气相沉积的方法在碳纳米管中制备金属及金属合金纳米线, 以

防止纳米线被氧化和控制纳米线的直径^[17,18]. 另外, 硅纳米线(SiNW)由于尺寸效应、边界效应和表面效应表现出独特的量子限制效应和电子传输效应等, 在微电子器件的应用上有非常重要的地位^[19-21]. 在科研工作者心中渴望了解碳纳米管与硅纳米线构成的复合材料会有什么新奇的表现. 值得注意的是, Yu等^[2]采用化学气相淀积制备出非晶态硅纳米粒子填充的碳纳米管复合材料, 以此作为锂电池的阳极, 表现出很高的可逆的锂存储容量和令人满意的高效性能. 这是人们对碳纳米管包裹硅纳米线复合结构从理论研究向实际应用迈出的重要一步. SiNW的结构有很多种, 计算机模拟产生了polyicosahedral结构的SiNW和富勒烯结构的SiNW^[14,22]; 也有研究人员采用密度泛函理论研究了不同晶向立方钻石结构SiNW的稳定性^[23,24].

* 国家自然科学基金(批准号: 61264004)、贵州省国际科技合作项目(批准号: 黔科合外G字[2012]7004)、贵州省高层次创新人才培养项目(批准号: 黔科合人才[2015]4015)和贵州省自然科学基金(批准号: 黔科合J字[2013]2119)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: jmzhang@gzu.edu.cn

孟利军等^[25]已经用经典分子动力学方法研究过富勒笼型 SiNW 在 SWCNT 中 SiNW 的热稳定性. 本文用一定直径 [111] 晶向的硅纳米线 ([111]-SiNW) 填充到扶手椅型 SWCNT 中, 采用经典分子动力学的方法模拟对其加热的过程, 通过 Ovito^[26] 可视化和能量分析的方法研究了此复合结构中 SiNW 和 SWCNT 的热稳定性. 为了进行对比, 自由空间中的 SiNW 和 SWCNT 也进行了同样的模拟.

2 模拟方案

扶手椅型碳纳米管的手性矢量为 (n, n) , 在 n 为 13, 14, 15, 17, 18, 19, 22, 24, 25 的扶手椅型 SWCNT 中心填充沿着块体硅 [111] 晶向截取出来的一定直径的硅纳米线, 在这里将复合结构简记为 $[111]@(n)$. 九种扶手椅型 SWCNT 都采用 191 个周期, 长度 46.9766 nm, 管的直径大小分别为 1.7628, 1.8984, 2.034, 2.3052, 2.4408, 2.5764, 2.9832, 3.2544, 3.39 nm, SiNW 的原子数为 3100 个, 直径为 1.29 nm. 此结构可以保证 SWCNT 和 SiNW 在采用周期性边界条件时能够很好地过渡, 如图 1 所示. 对九种 SiNW@SWCNT 模型和 n 为 13, 14, 15, 19, 25 五种扶手椅型 SWCNT 模型以及自由空间中 SiNW 模型采取同样的模拟方法: 使用经典分子动力学模拟软件 LAMMPS 进行运算, 在非轴向预留有足够的真空层, 都采用同样的盒子大小, 在三个方向上都采用周期性边界条件, 选取 Tersoff 势函数^[27,28], 时间步长为 0.5 fs, 先采用 NPT 系综在 100 K 等温弛豫 0.5 ns, 再采用 NVT 系综从 100 K 升温到 6500 K, 升温时间 5 ns.

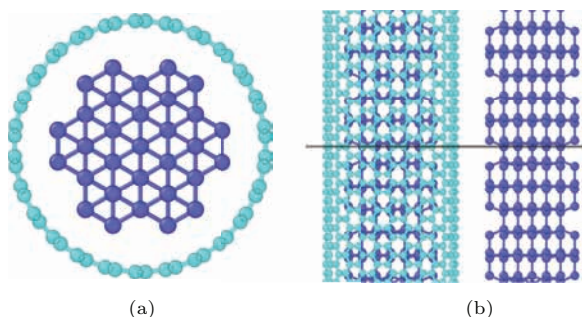


图 1 (网刊彩色) 硅纳米线填充碳纳米管模型示意图 (a) 俯视图; (b) 轴向边界处的连接图
Fig. 1. (color online) The model of [111]-SiNW@SWCNT: (a) Top view; (b) graph of period boundary in axial.

3 模拟结果与讨论

3.1 自由空间中 SiNW 模拟结果

通过可视化方法观察到 [111]-SiNW 在 100 K 等温弛豫得到的结构如图 2(a). 结合图 3 中 SiNW 的平均势能的变化发现, 在 200—700 K 阶段, 为 SiNW 表面重构的阶段, 使径向截面更接近圆形, 如图 2(b); 之后热振动越来越明显, 在 2000 K 处的拐点 [111]-SiNW 结构完全发生了改变; 在接近 2300 K 的拐点处, SiNW 发生断裂, 然后逐渐螺旋式收缩聚集成球状团簇, 形成球状团簇时对应图 3 中 2500 K 的拐点. 之后球状团簇随机转动, 继续升温到 2900 K 时, 有硅原子从球状团簇中逃逸出来, 此温度的总能量大小和 2300 K 处的拐点的能量大小相同. 最后硅原子均匀分散到空间. 硅纳米线结构完全发生改变时硅原子的平均势能值为 -3.67 eV.

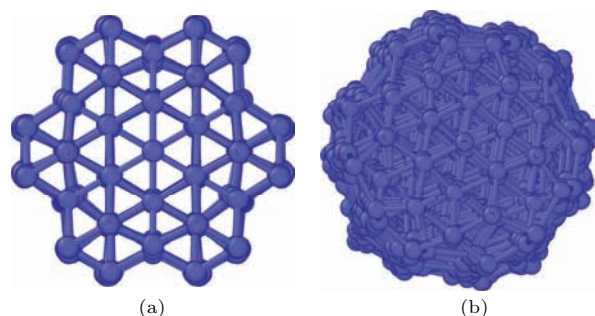


图 2 (网刊彩色) 自由空间 SiNW 两种结构的顶视图 (a) 100 K 等温弛豫; (b) 表面重构
Fig. 2. (color online) Top view structure of SiNW: (a) Relaxed in 100 K; (b) surface reconstruction.

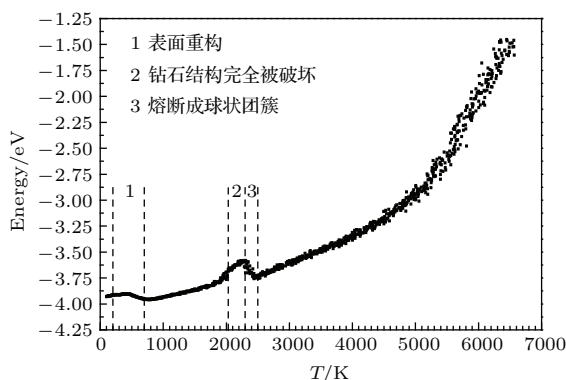


图 3 自由空间中加热硅纳米线的平均势能变化
Fig. 3. Si average potential energy with temperature in free space.

3.2 自由空间中SWCNT的模拟结果

通过可视化方法观察(13, 13) SWCNT加热到5800 K附近开始有碳原子从碳纳米管中脱离,(14, 14), (15, 15), (19, 19), (25, 25) SWCNT加热到5700 K附近开始有碳原子脱离碳纳米管;但是从图4中的总势能的拐点来看,(13, 13) SWCNT的拐点温度在5800 K, (14, 14), (15, 15), (19, 19), (25, 25) SWCNT的拐点温度分别在5900, 6000, 6000, 6100 K. 这和Zhang等^[29]用不同温度等温弛豫的方法对(5, 5) SWCNT熔点的研究结果相差甚远. 但是经过过热修正, 结果就很接近了^[30].

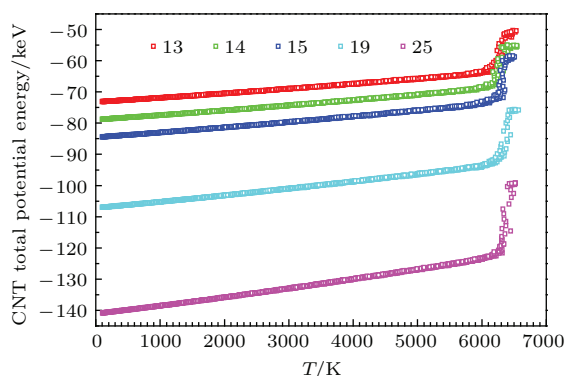


图4 (网刊彩色) 五种碳纳米管加热过程中的总势能变化
Fig. 4. (color online) SWCNT total potential energy with temperature.

3.3 SiNW@SWCNT的模拟结果

通过可视化方法观察可以发现, 图5中除了[111]@(25)复合结构体系在100 K等温弛豫得到

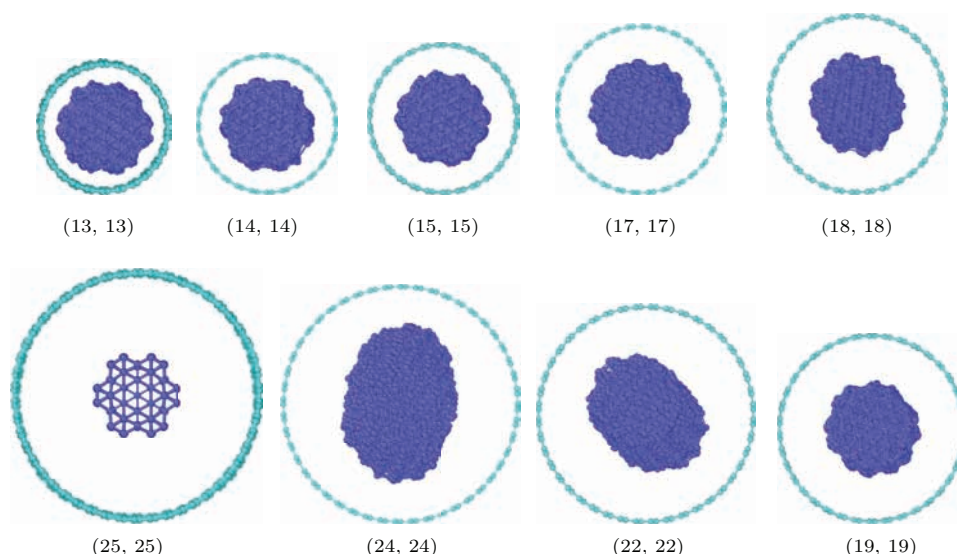


图5 (网刊彩色) 不同管径的CNT中[111]-SiNW在100 K等温弛豫后的结构
Fig. 5. (color online) The structure of [111]-SiNW @SWCNT relaxed in 100 K.

的结构和自由空间SiNW一样, 如图2(a)的结构, 其他都是如图2(b)的结构. 这是由于(25, 25) SWCNT的管壁和SiNW相距大于1 nm, 管壁与SiNW不存在范德瓦耳斯力.

从图6中硅原子的平均势能变化可以发现, 对于[111]@(13)到[111]@(24)的复合体系中, 能量变化的第一峰值随着管径的增大而增大, 在[111]@(18)管开始, 能量的峰值超过-3.67 eV, 这正是自由空间中硅纳米线的结构完全发生改变的能量, 通过可视化观察发现, 当硅原子平均势能达到-3.67 eV以上, 复合体系中硅纳米线的结构都完全发生了改变. 由此, 以Si平均势能为-3.67 eV时对应的温度点作为SiNW热稳定性的标准, 可以绘制关于碳纳米管管径与SiNW热稳定性的变化图, 如图7所示.

通过可视化观察和图6(a)中硅原子的平均势能可以发现在加热开始时, [111]@(13), [111]@(14), [111]@(15), [111]@(17)复合结构Si的平均势能会发生起伏波动, 但没有明显的结构改变, 在SiNW结构完全发生改变之后, [111]@(13)复合结构体系的能量平滑增长, 而[111]@(14), [111]@(15), [111]@(17)复合结构的能量在增长过程中出现了一个阶梯, 这是由于[111]@(13)中SiNW在碳纳米管破坏前未发生断裂, 而[111]@(14), [111]@(15), [111]@(17)在此过程的发生断裂, 它们对应的熔断温度分别为2850, 2700, 2700 K. 而对于图6(b)中[111]@(18)体系在第一峰500 K处SiNW结构完全发生改变后, SiNW出现径向收缩, 有部位被拉

细, 直到 1900 K 附近开始出现断裂, 在 2700 K 的台阶处完全断裂形成 4 个稳定的团簇. 对于 [111]@ (19) 体系, 在 410 K 处 SiNW 结构完全发生改变后在 650 K 的拐点处开始熔断, 然后收缩, 在 1100 K 处的拐点形成稳定的两段, 之后能量逐渐平滑上升, 在上升的过程中也有一个阶梯产生, 是由于之前分裂开的两段中有一段发生了断裂所造成的, 断裂发生在阶梯左边邻近的拐点处, 温度为 2750 K. 对于图 6 (c) 中, [111]@ (22) 在 380 K

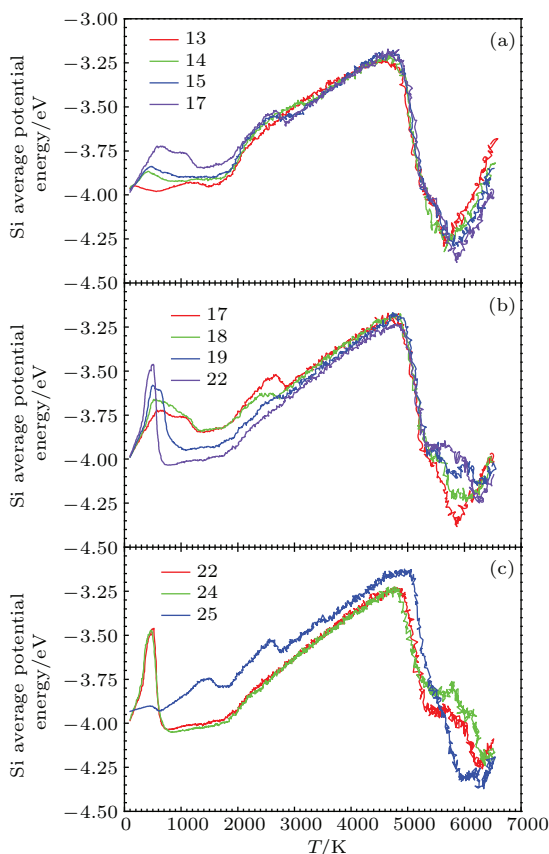


图 6 (网刊彩色) 复合结构中硅的平均势能变化

Fig. 6. (color online) Si average potential energy with temperature in SiNW@SWCNT.

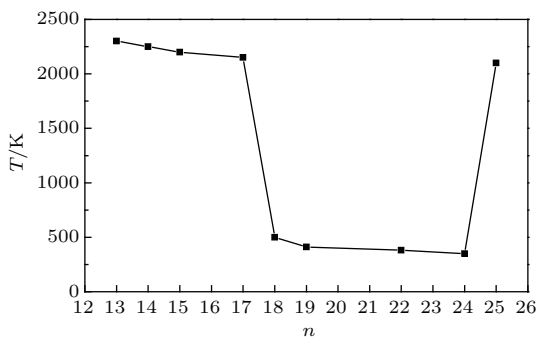


图 7 [111]-SiNW@SWCNT 中 SiNW 热稳定性与扶手椅型 SWCNT 管径的关系

Fig. 7. The thermal stability of SiNW in CNT with the diameter of CNT.

处 SiNW 结构完全改变后在第一峰就开始出现断裂, 然后向两端收缩, 在 2100 K 的拐点处形成两个稳定的团簇; 图 6 (c) 中 [111]@ (24) 在 350 K 处 SiNW 结构完全改变后在第一峰开始收缩, 形成一个稳定的团簇, 在 2200 K 的拐点处, 团簇的长度最短. 对于 [111]@ (25) 复合结构体系, SiNW 和管壁相距为 1.05 nm, 和自由空间的 SiNW 类似, 前期是 SiNW 的表面重构, 发生在 450 K 到 600 K 这一段, 之后能量一直增加, 并且有一段的能量起伏, 在 2100 K 处 SiNW 结构完全发生改变, 之后能量继续上升, 在此过程中出现了两个阶梯, 第一个阶梯处 SiNW 发生熔断, 逐渐形成了 5 个球状团簇, 第二个阶梯处发生了两个球状团簇的融合.

图 6 中 SiNW 能量在上升到 5000 K 附近都会急剧下降, 且对应图 8 中 SWCNT 能量急剧上升处, 这是由于此时 SWCNT 发生了熔化. 可以发现管径越小, 对应的 SWCNT 越容易发生熔化. 对比未填充的 SWCNT 的热稳定性, 填充 SiNW 的 SWCNT 的复合体系中 SWCNT 的热稳定性下降得特别明显. 对 [111]@ (13), [111]@ (14), [111]@ (15), [111]@ (19), [111]@ (25) 复合体系的模拟情况请见表 1.

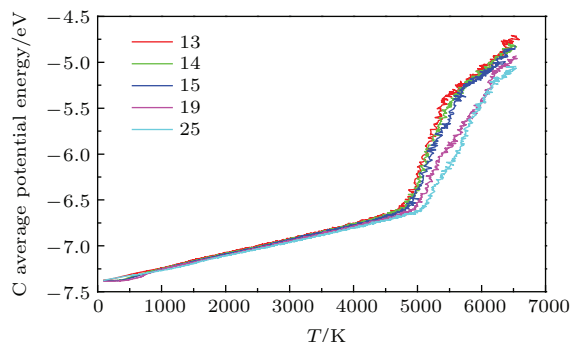


图 8 (网刊彩色) 五种复合结构中碳的平均势能变化

Fig. 8. (color online) C average potential energy with temperature in SiNW@SWCNT.

从上述的表述可以发现 (13, 13), (14, 14), (15, 15), (17, 17), (25, 25) 管中 SiNW 的结构改变和熔断的温度都高于自由空间的 SiNW; 而从 (18, 18) 管开始, (19, 19), (22, 22) 和 (24, 24) 管中的 SiNW 结构改变和熔断的温度都明显低于自由空间的 SiNW. 除了 (25, 25) 管, 可以发现随着管径的增大, SiNW 热稳定性一直在下降, 而且在 (18, 18) 管会发生阶跃性的突变. 而 SWCNT 中的 SiNW 会明显降低碳纳米管的热稳定性, 且管径越小, 热稳定性越差.

表1 SiNW@SWCNT 复合结构加热过程的具体情况

Table 1. Thermal properties of SiNW@SWCNT in heat process.

碳纳米管	SiNW 结构完全改变	SiNW 开始熔断	Si 逃逸到 CNT 表面	Si 逃逸到 CNT 外部	SWCNT 熔化
(13,13)	2300 K	无	3850 K	4150 K	4750 K
(14,14)	2250 K	2850 K	3950 K	4150 K	4800 K
(15,15)	2200 K	2700 K	4000 K	4250 K	4800 K
(19,19)	410 K	650 K	4050 K	4500 K	5000 K
(25,25)	2100 K	2550 K	4200 K	4300 K	5100 K

3.4 对模拟结果的讨论

由于硅不与石墨烯表面发生反应^[31], 而CNT是由石墨烯卷曲而成的, 可以认为CNT管壁对硅也是呈现出化学惰性的, 即很难发生形成化学键的相互作用. 因此可以认为SWCNT对SiNW只存在空间限制作用和分子间相互作用的范德瓦耳斯力. 由以上分析可以推断空间限制作用有利于提高SiNW的热稳定性^[25]; 而范德瓦耳斯力不利于SiNW的热稳定性, 因为CNT管壁对SiNW表面的范德瓦耳斯力是一种吸引力, 在热振动的过程中倾向于让SiNW远离其平衡位置. 对于[111]@(13), [111]@(14), [111]@(15), [111]@(17), 空间限制作用和范德瓦耳斯力都很强, 但是空间限制作用占据优势, 所以增强了SiNW的热稳定性, 对于[111]@(18), [111]@(19), [111]@(22), [111]@(24), 空间限制作用和范德瓦耳斯力都很弱, 但是空间限制的有利作用随着管径增大下降得更快, 从而范德瓦耳斯力占优势, 这就明显降低了SiNW的热稳定性. 对于[111]@(25), 可以说只存在微弱的空间限

制作用, 这就有利于提高SiNW的热稳定性. 对比内部未填充的SWCNT, 复合体系中SWCNT热稳定性明显降低, 主要是因为随着温度的升高, 碳纳米管中的Si原子最终会连续不断地碰撞碳纳米管的管壁, 对管壁产生向外的压强, 再加上碳纳米管自身的热振动, 沸腾的硅原子很容易具有足够的能量去破坏掉被热振动削弱的C—C键, 从而导致碳纳米管熔化. 而且SWCNT管径越小, 硅原子对管壁的碰撞越激烈, 空间限制作用就会越大, 所以更容易发生毁坏. 如图9所示, SWCNT出现明显破裂的位置就在Si原子聚集的位置.

4 结 论

通过经典分子动力学模拟方法对[111]-SiNW@SWCNT复合结构的热稳定性进行了研究. 研究表明, 碳纳米管中硅纳米线的热稳定性随碳纳米管直径的变化是阶跃性的, 存在一个阈值. 这种影响是由于碳纳米管对硅纳米线的空间限制作用和分子间相互作用力引起的: 当空间限制作用和分子间相互作用力都比较大的时候对硅纳米线的热稳定性起到促进作用; 当空间限制作用和分子间相互作用力都比较弱的时候对硅纳米线的热稳定性起到破坏作用; 当只存在比较弱的空间限制作用而没有相互作用力的时候, 对硅纳米线的热稳定性是有利的. 另一方面, 碳纳米管中的硅纳米线会明显降低碳纳米管的热稳定性. 此结果提醒我们不纯净的碳纳米管在实际使用中的热稳定性可能会与预想的大不相同, 且在使用硅和碳纳米管制作器件时, 此研究对器件的可靠性和稳定性有参考价值.

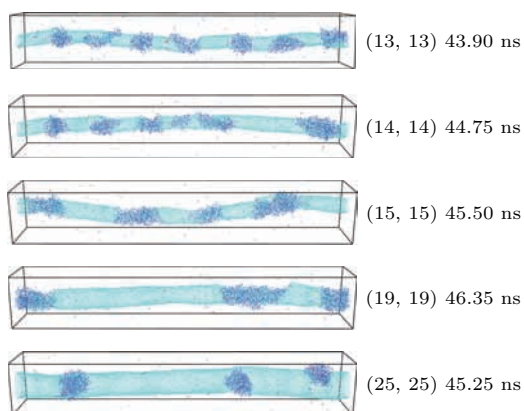


图9 (网刊彩色) SiNW@SWCNT 复合体系中SWCNT 崩塌示意图

Fig. 9. (color online) Graph of crash of SWCNT in SiNW@SWCNT.

参考文献

[1] Sridhar S, Tiwary C, Vinod S, Taha-Tijerina J J, Sridhar S, Kalaga K, Sirota B, Hart A H C, Ozden S, Sinha

- R K, Harsh, Vajtai R, Choi W, Kordas K, Ajayan P M 2014 *ACS Nano* **8** 7763
- [2] Yu W J, Liu C, Hou P X, Zhang L, Shan X Y, Li F, Cheng H M 2015 *ACS Nano* **9** 5063
- [3] Cao Q, Han S J, Tersoff J, Franklin A D, Zhu Y, Zhang Z, Tulevski G S, Tang J, Haensch W 2015 *Science* **350** 68
- [4] Lusk M T, Hamm N 2007 *Phys. Rev. B* **76** 125422
- [5] Fang R R, He Y Z, Zhang K, Li H 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 7622
- [6] Sun F, Li H, Liew K M 2010 *Carbon* **48** 1586
- [7] Esfarjani K, Farajian A A, Hashi Y, Kawazoe Y 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 79
- [8] Li S L, Zhang J M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 078801 (in Chinese) [李姝丽, 张建民 2011 物理学报 **60** 078801]
- [9] Koga K, Gao G, Tanaka H, Zeng X C 2001 *Nature* **412** 802
- [10] Takaiwa D, Koga K, Tanaka H 2007 *Molec. Simulat.* **33** 127
- [11] Mahdizadeh S J, Goharshadi E K 2013 *J. Nanoparticle Res.* **15** 1393
- [12] Zhou Z, Wang J, Zhu X, Lu X, Guan W, Yang Y 2015 *J. Mol. Model* **21** 2564
- [13] Hodak M, Girifalco L A 2003 *Phys. Rev. B* **67** 075419
- [14] Nishio K, Ozaki T, Morishita T, Mikami M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 201401
- [15] Zhang X Q, Li H, Liew K M 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 073709
- [16] Zou X C, Wu M S, Liu G, Ouyang C Y, Xu B 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 107101 (in Chinese) [邹小翠, 吴木生, 刘刚, 欧阳楚英, 徐波 2013 物理学报 **62** 107101]
- [17] Jeong N, Yeo J G 2012 *Nanotechnology* **23** 285604
- [18] Liu Q, Zou R, Bando Y, Golberg D, Hu J 2015 *Prog. Mater. Sci.* **70** 1
- [19] Zhang X, Zeng X, Zhang S, Liu F 2016 *Mater. Sci. Semicond. Process.* **41** 457
- [20] Tsai J Y, Hu H H, Wu Y C, Jhan Y R, Chen K M, Huang G W 2014 *IEEE Electron Device Lett.* **35** 366
- [21] Li J, Pud S, Petrychuk M, Offenhausser A, Vitusevich S 2014 *Nano Lett.* **14** 3504
- [22] Nishio K, Morishita T, Shinoda W, Mikami M 2006 *J. Chem. Phys.* **125** 074712
- [23] Vo T, Williamson A J, Galli G 2006 *Phys. Rev. B* **74** 045116
- [24] Hever A, Bernstein J, Hod O 2012 *J. Chem. Phys.* **137** 214702
- [25] Meng L J, Xiao H P, Tang C, Zhang K W, Zhong J X 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7781 (in Chinese) [孟利军, 肖化平, 唐超, 张凯旺, 钟建新 2009 物理学报 **58** 7781]
- [26] Stukowski A 2010 *Modell. Simulat. Mater. Sci. Engineer.* **18** 015012
- [27] Tersoff J 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 632
- [28] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [29] Zhang K, Stocks G M, Zhong J 2007 *Nanotechnology* **18** 285703
- [30] Belonoshko A B, Skorodumova N V, Rosengren A, Johansson B 2006 *Phys. Rev. B* **73** 012201
- [31] Marsen B, Sattler K 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11593

Thermal stability of compound structure of silicon nanowire encapsulated in carbon nanotubes*

Lu Shun-Shun Zhang Jin-Min[†] Guo Xiao-Tian Gao Ting-Hong Tian Ze-An He Fan
He Xiao-Jin Wu Hong-Xian Xie Quan

(*Institute of New Optoelectronic Materials and Technology, College of Electronic Information, Guizhou University,
Guiyang 550025, China*)

(Received 6 January 2016; revised manuscript received 10 March 2016)

Abstract

To guide the experiment research, the thermal stability of composite silicon nanowire encapsulated in carbon nanotubes is investigated by computer simulation. The cubic-diamond-structured silicon nanowires with the same diameter and [111] orientation are filled in some armchaired single-walled carbon nanotubes. The heat process of compound structure of silicon nanowire encapsulated in carbon nanotubes is simulated by classical molecular dynamic method. Through the visualization and energy analysis method, the thermal stability of composite structure is studied. The changes in the thermal stability of silicon nanowires and carbon nanotubes are explained by the relationship between carbon nanotube space constraint and van der Waals force. It is found that the diameter of the carbon nanotubes is closely related to the thermal stability of silicon nanowires inside. When the nanotube diameter is small, thermal stability of silicon nanowires increases; when the nanotube diameter increases up to a certain size, the thermal stability of silicon nanowires will suddenly drop significantly: until the distance between silicon nanowires and the wall of carbon nanotube is greater than 1 nm, the thermal stability of silicon nanowires will be restored. On the other hand, silicon nanowires filled into the carbon nanotubes have an effect of reducing the thermal stability of carbon nanotubes.

Keywords: molecular dynamics simulation, single-wall carbon nanotube, silicon nanowire, thermal stability

PACS: 65.80.-g

DOI: [10.7498/aps.65.116501](https://doi.org/10.7498/aps.65.116501)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61264004), International Science and Technology Cooperation Project of Guizhou Province, China (Grant No. [2012]7004), High Level Creative Talents Training Project of Guizhou Province, China (Grant No. [2015]4015), the Natural Science Foundation of Guizhou Province, China (Grant No. [2013]2119).

[†] Corresponding author. E-mail: jmzhang@gzu.edu.cn