

碳纳米管-硅纳米线复合结构的形成和热稳定性*

孟利军^{1,2)} 肖化平^{1,2)} 唐超^{1,2)} 张凯旺¹⁾ 钟建新^{1,2)}

1) 湘潭大学量子工程与微纳能源技术研究所, 湘潭 411105)

2) 湘潭大学物理系, 湘潭 411105)

(2008 年 12 月 19 日收到, 2009 年 3 月 13 日收到修改稿)

通过分子动力学方法模拟了在碳纳米管内填充一定数目的半导体元素硅形成碳纳米管-硅纳米线复合结构的过程, 并采用 Lindemann 指数研究了这种复合结构的热稳定性. 计算结果表明, 当考虑碳纳米管和硅纳米线轴方向的周期性边界条件之后, 在 $C(13, 0)$ 和 $C(14, 0)$ 碳纳米管内能够形成亚稳结构的硅纳米线 $Si_{16}NW$ 和 $Si_{20}NW$, 从而获得一种碳纳米管-硅纳米线的新型复合结构. 通过计算这种复合结构的 Lindemann 指数, 可以看到由于碳纳米管的保护作用, 碳纳米管包裹的硅纳米线的熔点远高于自由空间中相同尺寸的硅纳米线熔点. 而通过硅纳米线团簇和不同管径的碳纳米管相互作用能的计算, 我们发现 $C(14, 0)$ 纳米管除了对 $Si_{20}NW$ 有一种限制性保护作用之外, 对硅纳米线还存在一种径向应力(径向压缩), 这种应力使碳纳米管内的 $Si_{20}NW$ 具有更高的熔点, 而当 $Si_{20}NW$ 轴向方向为自由边界条件时, 这种径向应力将通过硅纳米线的形变而释放出来, 从而使碳纳米管内的硅纳米线团簇的熔点降低更多.

关键词: 复合结构, 纳米线, 碳纳米管, 分子动力学

PACC: 6146, 6185, 6550

1. 引言

近年来, 人们对金属填充的碳纳米管进行了广泛的研究, 取得了许多重要的进展, 发现金属填充的碳纳米管能够极大的改变金属和碳纳米管的电学性质、磁学性质和力学性质等^[1-8]. 例如, 用不同填充比例的铜填充的纳米管能够作为纳米尺度的开关或可变电阻器^[7], 而用镍纳米线填充的纳米管可能具有超导电性等^[8]. 由于半导体一维纳米结构在纳米电子学和微电子器件方面具有潜在的应用价值, 人们对自由空间中各种结构的半导体纳米线进行了深入系统的研究, 并且获得了很多有意义的研究成果^[9-14], 然而对碳纳米管内填充半导体材料而形成半导体纳米线的研究却很少^[15-18]. 自由空间中的半导体纳米线由于尺寸效应和表面重构而呈现出显著的不同于块体材料的奇特性质, 如量子限制效应、单电子传输效应等. 然而, 这种半导体纳米线一方面由于容易氧化而严重地改变其性质, 另一方面由于硅倾向于以 sp^3 杂化形成共价键, 所以纯净的硅纳米

线本身不稳定, 对小直径硅纳米线尤其如此. 因此如果能够能够在硅纳米线表面包裹一层具有惰性的原子层, 如碳纳米管, 那么不仅能有效防止硅纳米线的氧化, 而且有可能使得硅纳米线更加稳定, 并且这种由碳纳米管和硅纳米线构成的复合材料可能具有更加丰富的物理性质, 从而在将来的微纳电子学中具有重要的应用前景. 最近, Zhang 等人^[15]通过结构优化方法研究了碳纳米管内锗纳米线的结构, 发现随碳纳米管管径的增加, 锗纳米线结构从单原子链转变为螺旋形结构, 再转变为多壳层同轴圆柱形结构, 并且研究了这种碳纳米管-锗纳米线复合结构的物理性质, 如态密度, 透射函数, 电流电压特性, 电导谱等. 通过对硅原子的空间限制, 采用分子动力学方法, 人们发现存在各种各样的基本单元链接而成的硅纳米线, 如富勒笼 Si_{16} , 富勒笼 Si_{20} , Si_4 环, Si_5 环, Si_6 环连接成的硅纳米线等^[16-19]. 如, Bai 等人^[17]通过在刚性圆柱形空间内冷冻液态硅的长时间分子动力学模拟, 发现冷冻液态硅能自组织形成硅纳米线. 通过第一性原理计算发现由 Si_6 环堆积而成的硅纳米线具有金属性质. 碳纳米管管壁上 C-C 原子之间

* 国家自然科学基金面上项目(批准号: 10774127)和湖南省教育厅项目(批准号: 07C753)资助的课题.

† E-mail: ljmeng@xtu.edu.cn

形成强的相互作用 σ 键,而在垂直管壁的方向为弱的 π 键相互作用,使得 C-Si 之间相互作用很弱,因而碳纳米管在低温下可以作为硅的惰性容器,从而也可以作为合成硅纳米线的模板.最近, Kengo 等人^[16]利用碳纳米管作为惰性限制模板,通过在直径为 1.03 nm 的(13,0)型和 1.11 nm 的(14,0)碳纳米管内冷冻硅的经典分子动力学模拟分别获得了由富勒笼 Si_{16} 链接而成的硅纳米线(Si_{16}NW)和富勒笼 Si_{20} 链接而成的硅纳米线(Si_{20}NW).第一性原理计算发现自由空间中 Si_{16}NW 呈金属性,而 Si_{20}NW 呈半导体性质.由于他们的研究没有考虑硅纳米线和碳纳米管轴向方向的晶格匹配问题,因而并不是一种典型的碳纳米管和硅纳米线的复合材料.

2. 计算方法和势模型

本文通过经典分子动力学方法,研究了在(13,0)和(14,0)型碳纳米管内填充一定数目的硅原子,然后高温冷冻形成碳纳米管-硅纳米线复合结构的形成过程及其这种复合结构的热稳定性.分子动力学方法是在原子、分子水平上求解多体问题的重要模拟方法,不仅可以获得已有的纳米材料的许多性质,并得到与实验结果相符合或可比拟结果,而且可以通过计算直接预测许多新型纳米结构,为实验上合成新的纳米材料提供重要的指导作用.本文采用经验多体势 Tersoff^[20-22]势函数描述 C-C, C-Si, Si-Si 之间的相互作用. Tersoff 势函数被广泛应用于碳、硅纳米管和碳硅体系的结构、力学以及热学性质等方面的理论计算和模拟研究,并取得了一系列与实验相符的结果^[22-24].因此,对于 C-Si 体系的模拟研究, Tersoff 势能形式是可靠的.本文使用可升级的大型分子动力学模拟软件 Materials Explore 3.0(Ultra Version)进行分子动力学模拟;采用 NTV 系统;使用 5 阶 Gear 预测修正算法进行运动方程积分;应用速度标度方法控制温度;模拟步长为 0.5 fs,截断半径为 1 nm.

3. 计算结果和讨论

3.1. 碳纳米管-硅纳米线复合结构的形成

Kengo 等人^[16]通过分子动力学模拟发现限制在碳纳米管内的液态硅冷冻后能够形成亚稳结构的硅

纳米线,他们的计算结果表明在管径为 1.03 nm 的(13,0)型和 1.11 nm 的(14,0)型碳纳米管内分别形成了由 Si_{16} 富勒笼和 Si_{20} 富勒笼连接而成的硅纳米线.通过第一性原理方法计算发现 Si_{16}NW 单胞(24 个硅原子)长度近似为 1.048 nm,而 Si_{20}NW 单胞(30 个硅原子)长度近似为 1.068 nm.而采用 Tersoff 势计算结果则分别为 1.08 nm 和 1.07 nm.他们的模拟由于没有考虑硅纳米线轴向方向的周期性,因而形成硅纳米线可以看作有限长度的硅纳米线团簇(SiNWC).由于 Si_{16}NW 和 Si_{20}NW 四倍的单胞长度近似为 4.32 nm 和 4.28 nm,与 10 倍锯齿形碳纳米管单胞长度近似相等(4.30 nm).因此我们计算采用单胞为 $30 \text{ \AA} \times 30 \text{ \AA} \times 43.0 \text{ \AA}$,使得在轴向方向碳纳米管和硅纳米线都近似满足周期性边界条件,而垂直轴向方向最近原子距离大于截断距离,避免了相邻管之间由于存在相互作用而引起的误差.

首先在(13,0)和(14,0)碳纳米管内分别随机置入 96 个和 120 个硅原子,然后在 2200 K 温度下进行 100 ps 的恒温弛豫,让硅原子在管内完全处于液态,然后将体系从 2200 K 缓慢退火到低于硅晶体的融化温度 1800 K,冷冻退火率为 1 K/ps.高温冷冻之后将体系快速退火至 0 K,退火率为 10 K/ps,得到体系最终结构.模拟结果显示,碳纳米管内的液态硅经过高温冷冻之后,(13,0)和(14,0)碳纳米管内分别形成了 Si_{16}NW 和 Si_{20}NW .计算得到的平均每个原子的势能随时间的变化曲线如图 1.从图 1 可以看到大约在 400 ps(500 ps)左右,势能曲线有显著跃变,表明体系结构发生了重要转变.由于碳纳米管具有高的热稳定性(熔点约为 $4800 \text{ K}^{[24]}$),因此整个模拟过程中,碳纳米管的结构基本保持完好,能量的显著变化来自管内硅原子的重新排列,在管内由于空间限制硅原子自组织形成了稳定的硅纳米线结构,整个体系最终形成了稳定碳纳米管-硅纳米线复合结构((13,0)@ Si_{16}NW 和 (14,0)@ Si_{20}NW).通过计算硅原子的径向分布函数,图 2,我们同样可以看到,初始结构硅原子处于一种无序态,径向分布函数的第二峰和第三峰为长程宽峰,而退火之后,第二峰和第三峰都变得尖锐,表明硅原子处于一种更加的有序结构.

3.2. 碳纳米管-硅纳米线复合结构的热稳定性

自由空间中 Si_{16}NW 和 Si_{20}NW 的直径约为 0.53 nm 和 0.65 nm,这种小直径硅纳米线,一方面由于硅

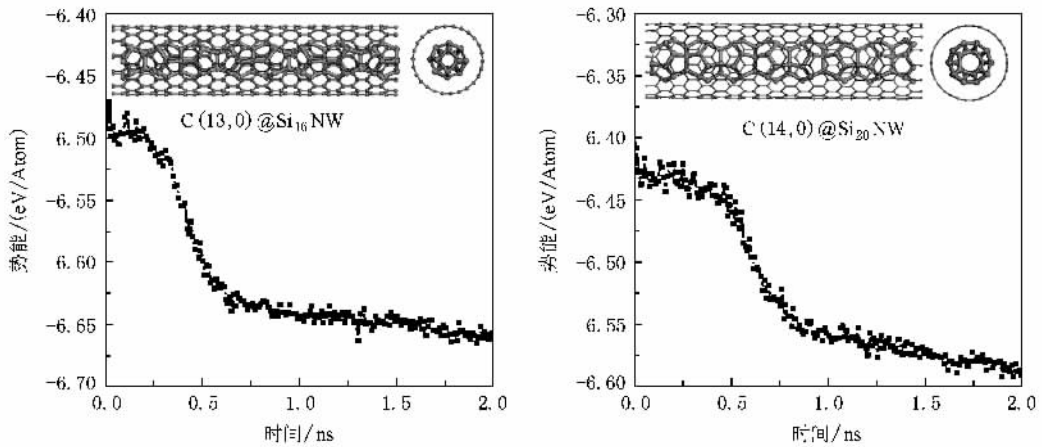


图1 冷冻过程中平均原子势能随时间的变化曲线

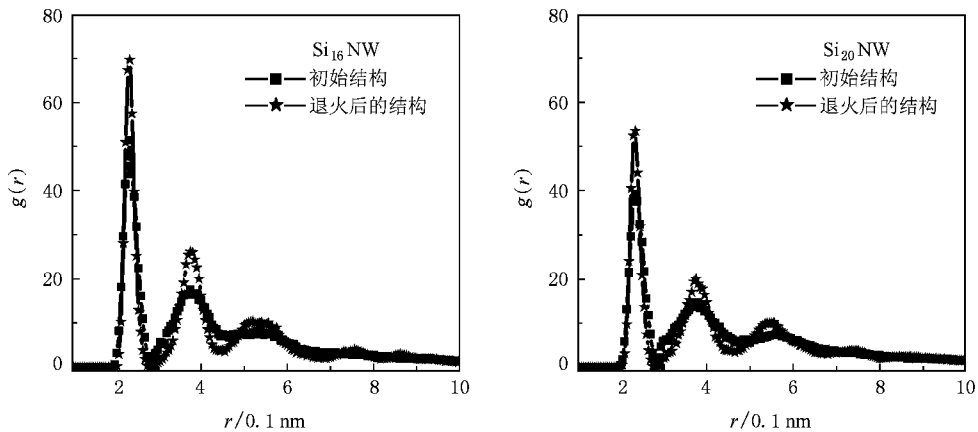


图2 两种体系的径向分布函数

原子偏离 sp^3 杂化键而不够稳定,另一方面由于直接暴露在空气中硅原子容易氧化,从而影响其物理性质.对于碳纳米管-硅纳米线复合结构,由于硅纳米线外包裹了一层碳原子层,能有效防止硅纳米线在空气中氧化,并且由于碳原子层的保护作用,预计能显著增加硅纳米线的热稳定性.

为了进一步计算这种复合结构的稳定性,我们引入 Lindemann 指数作为衡量体系是否融化的标准^[25,26].单个原子 Lindemann 指数定义为

$$\delta_i = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} \sqrt{\frac{r_{ij}^2(T) - r_{ij}^2(T_0)}{r_{ij}^2(T_0)}}$$

整个体系的平均 Lindemann 指数为

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_i \delta_i$$

其中 r_{ij} 表示第 i 原子和第 j 原子之间的距离, \dots, T 表示对温度 T 求热平均.大量的研究表明,对于纳米尺度的体系(如纳米颗粒,纳米管等)Lindemann

指数的临界值为 0.03—0.05,并且在低于融化温度下,Lindemann 指数随温度增加成线性关系的增加.因此,当 Lindemann 指数显著偏离线性增加而突然增大时表明体系已经开始融化.我们这里选 Lindemann 指数值 0.04 作为判断体系是否融化的参考值.

为了获得 $C(13,0)@Si_{16}NW$ 和 $C(14,0)@Si_{20}NW$ 两种复合结构的融化温度,我们计算了这两种体系在不同温度下的 Lindemann 指数.我们选择的温度范围在 1500—2800 K 之间,这个温度范围远低于碳纳米管融化温度(4800 K 左右),因此整个模拟过程中除了由于温度引起的热扰动之外,碳纳米管结构基本保持完好.在这个温度范围内我们每隔 50 K 的温度(熔点处为 10 K)进行了 1×10^6 步的恒温模拟.模拟时间为 500 ps.然后取 1000 组数据进行热平均,分别计算了碳纳米管($C(13,0)$ 和 $C(14,0)$),硅纳米线($Si_{16}NW$ 和 $Si_{20}NW$)和整个体系(C

($13,0$)@ Si_{16}NW 和 ($14,0$)@ Si_{20}NW) 的 Lindemann 指数. 计算结果如图 3 所示. 从计算结果可以看到, 整个温度范围内两种体系的碳纳米管 Lindemann 指数都小于 0.03, 说明在整个温度范围内, 碳纳米管都保持完好的热稳定性. 对于 ($13,0$)@ Si_{16}NW 体系, Si_{16}NW 的 Lindemann 指数在 2350 K 左右偏离原来线性增加的趋势, 开始急剧增大, 表明此时 Si_{16}NW 已经开始融化, 整个体系的 Lindemann 指数也超过 Lindemann 指数的临界值 0.04, 因此 ($13,0$)@ Si_{16}NW 复合结构的熔点约为 2350 K. 为了了解碳纳米管对硅纳米线的保护作用, 我们采用同样的计算步骤计算了自由空间中 Si_{16}NW 在不同温度下的 Lindemann 指数, 其结果如图 3 所示. 计算发现, 自由空间中 Si_{16}NW 的融化温度远低于被碳纳米管包裹的 Si_{16}NW 的熔点, 约为 1700 K. 由于碳原子和硅原子的相互作用比较弱, 因此我们认为这种保护作用应该来自于碳纳米管对 Si_{16}NW 的空间限制作用.

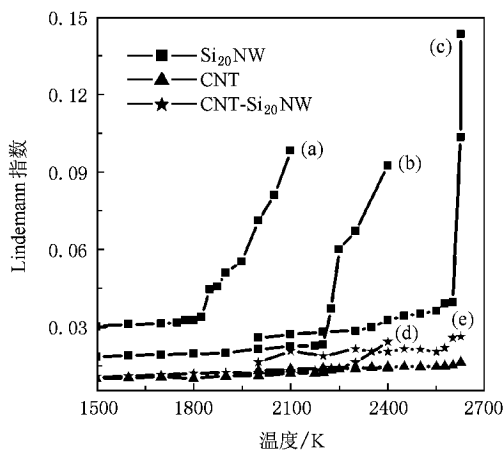
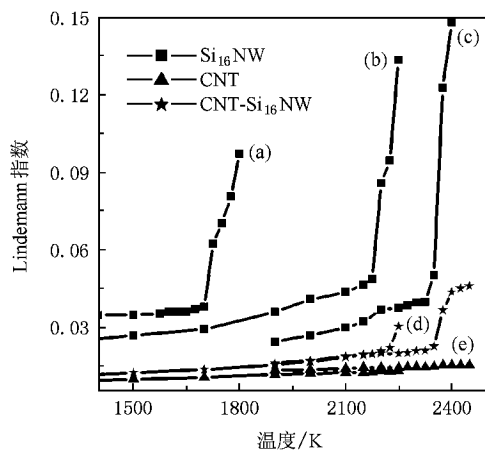


图 3 两种体系的 Lindemann 指数 (a)自由空间 Si_{16}NW (b)碳纳米管内 Si_{16}NW 团簇 (c)碳纳米管内完整 Si_{16}NW (d)碳纳米管与 Si_{16}NW 团簇体系 (e)碳纳米管与 Si_{16}NW 复合结构体系

对于 ($14,0$)@ Si_{20}NW 复合结构, 我们同样计算了自由空间中 Si_{20}NW , 碳纳米管内 Si_{20}NW 团簇和 ($14,0$)@ Si_{20}NW 复合结构的 Lindemann 指数(图 3), 发现在自由空间中 Si_{20}NW 熔点在 1800 K 左右, 而被碳纳米管包裹的硅纳米线团簇和完整硅纳米线熔点分别为 2225 K 和 2600 K. 碳纳米管包裹的 Si_{20}NW 团簇的融化温度要比碳纳米管包裹的完整 Si_{20}NW 融化温度低约 375 K, 远大于 ($13,0$)@ Si_{16}NW 和 ($13,0$)@ Si_{16}NWC 复合结构中融化温度的差值, 在其原因可能除了两端为自由边界条件引起的熔点降低外, 还存在碳纳米管径向方向对硅纳米线的挤

为了进一步了解这种限制作用的保护机理, 我们同样计算了有限长度的硅纳米线团簇置于碳纳米管内时的融化情况, 此时 Si_{16}NW 轴向方向不再满足周期性, 两端为自由边界条件. 我们将由 96 个硅原子构成的有限长度的硅纳米线 Si_{16}NW 团簇(长度为 4.30 nm), 置于单胞轴向长度为 4.6 nm 的 ($13,0$)碳纳米管内的中部, 碳纳米管轴向方向满足周期性边界条件, 相邻 Si_{16}NW 团簇之间的最近原子距离大于 1.0 nm, 以保证相邻硅纳米线团簇之间无相互作用. 采用同样的模拟方法计算了碳纳米管, Si_{16}NW 团簇和整个体系的 Lindemann 指数, 发现 Si_{16}NW 团簇的融化温度要低于在轴向方向满足周期性的 Si_{16}NW 融化温度, 约为 2200 K(图 3 左(c)). 这两中体系中硅纳米线结构的融化温度相差 150 K, 其原因可能是, 当硅纳米线轴向方向为自由边界条件时, 两端的硅原子结构更容易融化, 从而降低纳米线团簇的融化温度.

压应力, 从而对 Si_{20}NW 起到一种压缩保护的作用, 使这种复合结构中硅纳米线的熔点更高. 而当硅纳米线为自由边界条件, 这种径向应力将通过促使硅纳米线产生形变而释放出来, 从而使熔点降得更多.

为了证实这种压缩保护机理, 以进一步探讨碳纳米管对硅纳米线的保护作用, 我们计算了硅纳米线团簇与碳纳米管的相互作用能. 将分别包含 96 个原子的 Si_{16}NWC 和包含 120 个硅原子的 Si_{20}NWC 置于不同直径的纳米管中部, 在 0.1 K 下进行 10000 步的松弛, 以避免原子之间存在重叠, 然后在 0 K 下分别计算碳纳米管总势能 $E(\text{CNT})$, 硅纳米线团簇总

势能 $E(\text{SiNW})$ 以及整个体系的总势能 $E(\text{CNT}@\text{SiNW})$, 从而计算出碳纳米管和硅纳米线团簇之间的相互作用能:

$\Delta E = E(\text{CNT}@\text{SiNW}) - E(\text{CNT}) - E(\text{SiNW})$, 计算结果如图 4 所示. 从图中可以看出, 在 0 K 下, 两中复合结构中, 碳纳米管在一定的管径范围内, 随着管径的增大, 相互作用能急剧的降低. 不同管径的碳纳米管内放置 Si_{16}NW 团簇时, 当管径达到临界管径 10.08 Å ($\text{C}(8,8)$) 时, 碳纳米管与 Si_{16}NWC 之间的相互作用变得很小, 约为 8.74 eV (0.091 eV/Si), 而 $\text{C}(13,0)$ 型碳纳米管管径为 10.39 Å, 大于临界管径, 此时相互作用能比较小, 碳纳米管对硅纳米线径向应力比较小, 因而碳纳米管对 Si_{16}NW 只起到一种空间限制的保护作用. 而在 0 K 下不同管径的碳纳米管内放置 Si_{20}NWC 的计算结果表明, 只有当管径达到 11.53 Å ($\text{C}(12,4)$) 时, 相互作用能才很小, 约为 10.77 eV (0.09 eV/Si), 而 Si_{20}NW 在 $\text{C}(14,0)$ 型碳纳米管内相互作用能比较大, 达到 53.8 eV (0.45 eV/Si), 这时碳纳米管表现为对 Si_{20}NW 施加了一种径向应力, 从而对 Si_{20}NW 产生微小的压缩, 由于限制

保护和压缩保护同时存在, 所以 $\text{C}(14,0)@\text{Si}_{20}\text{NW}$ 复合结构熔点较高, 而当硅纳米线两端为自由边界条件, 这种径向压缩将通过对硅纳米线团簇产生形变而释放出来, 从而也降低了硅纳米线团簇的熔点.

4. 结 论

本文通过分子动力学方法模拟了在碳纳米管内填充一定数目的半导体元素硅形成碳纳米管-硅纳米线复合结构的过程, 并采用 Lindemann 指数研究了这种复合结构的热稳定性. 计算结果表明, 当考虑碳纳米管和硅纳米线轴向方向的周期性边界条件之后, 在 $\text{C}(13,0)$ 和 $\text{C}(14,0)$ 碳纳米管内能够形成亚稳结构的硅纳米线 Si_{16}NW 和 Si_{20}NW , 从而获得一种碳纳米管-硅纳米线的新型复合结构. 通过比较自由空间中硅纳米线 (Si_{16}NW 和 Si_{20}NW)、碳纳米管-硅纳米线团簇 ($\text{C}(13,0)@\text{Si}_{16}\text{NWC}$ 和 $\text{C}(14,0)@\text{Si}_{20}\text{NWC}$) 以及碳纳米管-硅纳米线复合结构 ($\text{C}(13,0)@\text{Si}_{20}\text{NW}$ 和 $\text{C}(13,0)@\text{Si}_{16}\text{NW}$) 的 Lindemann 指数, 我们发现由于碳纳米管的限制型保护作用, 碳纳米管包裹的硅纳米线的熔点 (~2350 K 和 ~2600 K) 远高于自由空间中相同尺寸的硅纳米线熔点 (~1700 K 和 ~1800 K), 表明这种限制的硅纳米线具有更高的热稳定性. 而通过硅纳米线团簇 (Si_{16}NWC 和 Si_{20}NWC) 和不同管径的碳纳米管相互作用能的计算, 我们发现 $\text{C}(14,0)$ 纳米管除了对 Si_{20}NW 有一种限制性保护作用之外, 对硅纳米线还存在一种径向应力, 这种应力使碳纳米管内的 Si_{20}NW 具有更高的熔点, 而当 Si_{20}NW 两端为自由边界条件时, 这种径向应力将通过硅纳米线的形变而释放出来, 从而使碳纳米管内的硅纳米线团簇的熔点降低更多. 总之, 由于碳纳米管-硅纳米线复合材料具有更高的热稳定性, 预计将来在纳米电子学和微电子器件中将有潜在的应用价值.

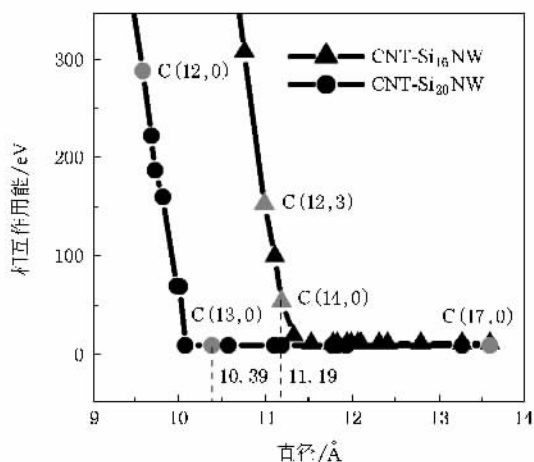


图 4 碳纳米管与硅纳米线团簇之间的相互作用能

[1] Ajayan M, Iijima S 1993 *Nature* (London) **361** 333
 [2] Tsang S C, Harris P J F, Green M L H 1993 *Nature* (London) **362** 520
 [3] Ajayan P M, Stephan O, Redlich P, Colliex C 1995 *Nature* (London) **375** 564
 [4] Tsang S C, Chen Y K, Harris P J F, Green M L H 1994 *Nature* (London) **372** 159

[5] Zhang K W, Meng L J, Li J, Liu W L, Tang Y, Zhong J X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4347 (in Chinese) [张凯旺、孟利军、李俊、刘文亮、唐翌、钟建新 2008 物理学报 **57** 4347]
 [6] Arcidiacono S, Walther J H, Poulikakos D, Passerone D, Koumoutsakos P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 105502
 [7] Golberg D, Costa P M F J, Mitome M, Hampel S, Haase D,

- Mueller C, Leonhardt A, Bando Y 2007 *Adv. Mater.* (Weinheim, Ger.) **19** 1937
- [8] Tit N, Dharma-wardana M W C. 2003 *Europhys. Lett.* **62** 405
- [9] Chen R K, Hochbaum A I, Murphy P, Moore J, Yang P D, Majumdar A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 105501
- [10] Wu Z G, Neaton J B, Grossman J C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 246804
- [11] Blase X, Fernández-Serra Phys M V 2008 *Rev. Lett.* **100** 046802
- [12] Durgun E, Çakır D, Akman N, Ciraci S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 256806
- [13] Leu P W, Svizhenko A, Cho K 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235305
- [14] Sorokin P B, Avramov P V, Kvashnin A G, Kvashnin D G, Ovchinnikov S G, Fedorov A S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 235417
- [15] Zhang X Q, Li H, Liew K M 2007 *Journal of Applied Physics* **102** 073709
- [16] Kengo N, Taisuke O, Tetsuya M, Masuhiro M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 201401
- [17] Bai J, Zeng X C, Tanaka H, Zeng J Y 2004 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **101** 2664
- [18] Xu B, Pan B C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6526 (in Chinese) [徐波、潘必才 2008 物理学报 **57** 6526]
- [19] Kengo N, Tetsuya M, Wataru S, Masuhiro M 2006 *Journal of Chemical Physics* **125** 074712
- [20] Tersoff J 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 632
- [21] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [22] Tersoff J, Ruoff R S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 676
- [23] Zang J, Treibergs A, Han Y, Liu F 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 105501
- [24] Zhang K W, Stocks G M, Zhong J X 2007 *Nanotechnology* **18** 285703
- [25] Zhou Y, Karplus M, Ball K D, Berry R S 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 2323
- [26] Ding F, Bolton K, Rosen A 2005 *Eur. Phys. J. D* **34** 275

Formation and thermal stability of compound structure of carbon nanotube and silicon nanowire^{*}

Meng Li-Jun^{1,2†} Xiao Hua-Ping^{1,2} Tang Chao^{1,2} Zhang Kai-Wang¹ Zhong Jian-Xin^{1,2}

¹ *Institute for Quantum Engineering and Micro-Nano Energy Technology, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*

² *Department of Physics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*

(Received 19 December 2008 ; revised manuscript received 13 March 2009)

Abstract

We have studied the formation process of carbon nanotube-silicon nanowire compound structures by using empirical molecular dynamics method and their thermal stability by employing Lindemann index. Our results show that, in some cases, liquid Si encapsulated in (13 Å) and (14 Å) carbon nanotubes can crystallize into nanowires composed of linked Si₁₆ and Si₂₀ fullness cages, respectively. The Si nanowire inside the carbon nanotube has higher melting temperature than the Si nanowire in free space. By calculating interaction potential energy between SiNW clusters and carbon nanotubes with different diameters, we have found that the radial stress on Si₂₀NW induced by the carbon nanotube can increase melting temperature of Si₂₀NW. For Si₂₀NW under free boundary condition, this radial stress can be released by the deformation of Si₂₀NW which results in decrease of the melting temperature of Si₂₀NW cluster.

Keywords : compound structure, nanowire, carbon nanotube, molecular dynamics simulation

PACC : 6146, 6185, 6550

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774127) and the Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province, China (Grant No. 07C753).

[†] E-mail : ljmeng@xtu.edu.cn