

Nghiên cứu tính chất cơ học của sợi nanô Si/Ge (Ge/Si) cấu trúc core-shell: Một nghiên cứu bằng phương pháp động lực học phân tử

Vương Văn Thanh^{1,*}, Trần Thế Quang¹, Nguyễn Tuấn Hưng², Vũ Lê Huy³, Đỗ Văn Trường¹



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

TÓM TẮT

Các sợi nanô ngày càng được ứng dụng nhiều trong thực tế, nguyên nhân bởi các tính cơ học, lý và hóa học nổi trội của chúng. Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng phương pháp động lực học phân tử (MD) để nghiên cứu tính chất cơ học của các sợi nanô (Si/Ge, Ge/Si) có cấu trúc lõi vỏ (core-shell) có tiết diện vuông dưới biến dạng kéo dọc trục theo phương $\langle 100 \rangle / \{100\}$. Kết quả thu được của nghiên cứu chỉ ra rằng độ bền, biến dạng phá hủy và mô đun đàn hồi của các sợi nanô Ge/Si và Si/Ge phụ thuộc vào thành phần và kích thước của tiết diện lõi/vỏ. Độ bền và biến dạng phá hủy của Ge/Si giảm khi kích thước tiết diện lõi tăng, nguyên nhân bởi sự trượt mạng tinh thể trên bề mặt chung giữa hai lớp vật liệu lõi/vỏ. Mô đun đàn hồi của sợi nanô Ge/Si tăng khi kích thước tiết diện lõi tăng, ngược lại mô đun đàn hồi của Si/Ge giảm theo kích thước tiết diện lõi. Ngoài ra, độ bền và mô đun đàn hồi của các sợi nanô Ge/Si giảm khi nhiệt độ tăng. Thêm vào đó, chúng tôi cũng khảo sát ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến tính chất cơ học của sợi nanô Ge/Si. Kết quả thu được của nghiên cứu đã chỉ ra thuộc tính bên trong của sợi nanô cấu trúc lõi vỏ, đồng thời giúp ích trong việc thiết kế và chế tạo các thiết bị điện tử và quang học dựa trên cấu trúc vật liệu Ge/Si cấu trúc lõi vỏ.

Từ khoá: Sợi nanô Si/Ge core-shell, động lực học phân tử, tốc độ biến dạng

GIỚI THIỆU

Cấu trúc vật liệu bán dẫn nanô một chiều (1D), như các sợi nanô (NWs) đã thu hút sự chú ý ngày càng tăng trong những năm gần đây bởi các ứng dụng liên quan của chúng trong các thiết bị vi cơ điện tử (NEMS, MEMS) ¹⁻³. Gần đây, vật liệu Si và Ge NWs được sử dụng nhiều trong các thiết bị nhiệt điện, pin năng lượng mặt trời và pin lithium-ion, nguyên nhân bởi chúng có các tính chất điện tử và quang học nổi trội ⁴⁻⁹. Do tính chất cơ học của các NWs ảnh hưởng đến độ tin cậy, cũng như tuổi thọ của các thiết bị, nên việc nghiên cứu và xác định các tính chất cơ học của các NWs là một việc làm cần thiết.

Đã có nhiều nghiên cứu bao gồm cả lý thuyết và thực nghiệm để cập đến tính chất cơ học của Si và Ge NWs ¹⁰⁻¹³. T. Kizuka và cộng sự ¹⁴ đã sử dụng kính hiển vi lực nguyên tử (AFM) để xác định mô đun đàn hồi E với [100] Si NWs có đường kính nhỏ hơn 10 nm, $E = 18 \pm 2$ GPa. Với [111] Si NWs có đường kính từ 100 đến 200 nm, $E = 124.5$ GPa, xấp xỉ với mô đun đàn hồi của vật liệu Si khối ¹⁵. Trong một nghiên cứu bằng thực nghiệm khác ¹⁶, thiết bị kiểm tra tinh diện được sử dụng để kéo sợi Si NWs có kích thước tiết diện là 190 nm², kết quả thu được chỉ ra độ bền kéo của Si NWs bằng 2.6 GPa. Ngoài thực

nghiệm, tính toán nguyên lý đầu (*ab initio*) và mô phỏng động lực học phân tử (MD) cũng được sử dụng để xác định tính chất cơ học của NWs. Tính chất cơ học của $\langle 110 \rangle$ và $\langle 111 \rangle$ Si NWs ¹⁷, [001] Si NWs ¹⁸ và Ge NWs ¹⁹ với các đường kính khác nhau đã được khảo sát bằng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT). J. Yuhang và cộng sự ²⁰ đã sử dụng hàm thế Stillinger-Weber (SW) ²¹ để nghiên cứu độ bền phá hủy và sự tan chảy của Si NWs. Tính chất cơ học của Si và Ge NWs cũng đã được làm rõ bằng phương pháp MD dựa trên một vài hàm thế ²². Tuy nhiên, do sự phát triển và tích hợp ngày càng cao của các thiết bị nanô, các NWs riêng lẻ (đơn) không phát huy được hết khả năng ứng dụng ^{23,24}. Gần đây, vật liệu Si/Ge (Ge/Si) NWs có cấu trúc lõi vỏ (core-shell) được quan tâm nhiều trong các nghiên cứu bao gồm cả lý thuyết và thực nghiệm, nguyên nhân bởi chúng có một vài tính chất nổi trội hơn so với các sợi nanô đơn chất như tính dẫn điện tốt hơn ²⁵. Vật liệu Si/Ge core-shell NWs đã được sử dụng rộng rãi trong việc chuyển hóa và lưu trữ năng lượng ²⁶⁻²⁸ và trong các ứng dụng quang điện ²⁹. Trong một thực nghiệm gần đây, Si/Ge core-shell NWs đã được tổng hợp bằng phương pháp lắng đọng hóa học ³⁰⁻³³. Tính chất điện tử của Si/Ge NWs cũng đã được một vài nghiên cứu lý thuyết DFT để

¹Viện Cơ Khí - Trường Đại học Bách khoa Hà Nội, Việt Nam

²Viện Nghiên cứu Liên ngành - Trường Đại học Tohoku, Nhật Bản

³Khoa Cơ khí - Cơ Điện Tử-Trường Đại học Phenikaa, Việt Nam

Liên hệ

Vương Văn Thanh, Viện Cơ Khí - Trường Đại học Bách khoa Hà Nội, Việt Nam

Email: thanh.vuongvan@hust.edu.vn

Lịch sử

- Ngày nhận: 24-3-2020
- Ngày chấp nhận: 23-12-2020
- Ngày đăng: 31-1-2021

DOI: 10.32508/stdjet.v3i4.800



Bản quyền

© ĐHQG Tp.HCM. Đây là bài báo công bố mở được phát hành theo các điều khoản của the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



Trích dẫn bài báo này: Thanh V V, Quang T T, Hưng N T, Huy V L, Trường D V. **Nghiên cứu tính chất cơ học của sợi nanô Si/Ge (Ge/Si) cấu trúc core-shell: Một nghiên cứu bằng phương pháp động lực học phân tử.** *Sci. Tech. Dev. J. - Eng. Tech.*; 3(4):620-630.

cập³⁴⁻⁴³. Ứng suất nhiệt và sự mất ổn định của Si/Ge NWs cũng đã được D. Suvankar và đồng nghiệp⁴⁴ khảo sát bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử. Tuy nhiên, các nghiên cứu trên chủ yếu tập trung đến tính chất điện tử mà chưa đề cập nhiều đến tính chất cơ học của Si/Ge NWs.

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử để khảo sát các tính chất cơ học của Ge/Si (Si/Ge) NWs với các thành phần, kích thước tiết diện lõi/vỏ (core/shell), nhiệt độ và tốc độ biến dạng khác nhau dưới biến dạng kéo dọc trục. Bài báo gồm các phần sau đây. Phần 2 trình bày chi tiết thủ tục mô phỏng tính toán MD. Phần 3 trình bày mô đun đàn hồi, độ bền lý tưởng, ảnh hưởng của kích thước tiết diện lõi/vỏ, tốc độ biến dạng và nhiệt độ đến tính chất cơ học của Si/Ge (Ge/Si) NWs dưới biến dạng kéo. Phần 4 tổng hợp và kết luận.

PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

Hình 1 biểu diễn mô hình mô phỏng của Ge/Si (Si/Ge) NWs dưới biến dạng kéo dọc trục $\langle 001 \rangle / [001]$ với tiết diện mặt cắt ngang có chiều rộng D . Vật liệu hướng $[100]$ theo trục Z được chọn trong nghiên cứu vì trong thực tế nó thích hợp cho các thiết bị NEMS⁴⁵. Trong nghiên cứu này, chúng tôi tiến hành khảo sát Ge/Si NWs có các kích thước tiết diện lần lượt bằng $2.2 \times 2.2 \text{ nm}^2$; $3.3 \times 3.3 \text{ nm}^2$ và $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$, kích thước tiết diện lõi là $1.1 \times 1.1 \text{ nm}^2$ (Hình 2). Ngoài ra, Ge/Si (Si/Ge) NWs có kích thước tiết diện $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$ với các kích thước tiết diện lõi khác nhau cũng được khảo sát (Hình 3). Hàm thế Tersoff⁴⁶ được sử dụng trong nghiên cứu để miêu tả các tương tác giữa các nguyên tử Si-Si, Si-Ge và Ge-Ge trong NWs⁴⁷⁻⁵². Tất cả các mô phỏng bằng được thực hiện bằng phần mềm LAMMPS⁵³, thuật toán Verlet được sử dụng để giải phương trình chuyển động của hệ các nguyên tử với bước thời gian là 0.001 ps . Bán kính $R_{cut-off}$ lấy bằng 3.1 \AA ²², nhiệt độ bằng 300°K và tốc độ biến dạng bằng $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. Điều kiện biên chu kỳ được áp dụng cho tất cả các phương. Tổng số nguyên tử trong hệ bằng 21800 nguyên tử. Ban đầu tất cả các mô hình được cân bằng năng lượng theo thuật toán cg ⁵⁴ để tìm ra vị trí cân bằng của các nguyên tử trong hệ. Nhiệt độ trong hệ được điều khiển bởi việc điều chỉnh vận tốc của các nguyên tử⁵⁵. Sau đó, cân bằng NVE, NPT và NVT được thực hiện. Cấu trúc tinh thể được quan sát bằng phần mềm OVITO⁵⁶.

Biến dạng kéo theo phương dọc trục được định nghĩa như sau:

$$\epsilon_{zz} = \Delta L / L_0 \quad (1)$$

trong đó, L_0 là chiều dài của ô mạng sau khi được cân bằng và ΔL là bước tăng của chiều dài dưới biến dạng kéo. Mô đun đàn hồi của NWs được xác định dựa vào quan hệ giữa ứng suất-biến dạng trong vùng tuyến tính (biến dạng từ -2% đến 2%) theo phương trình:

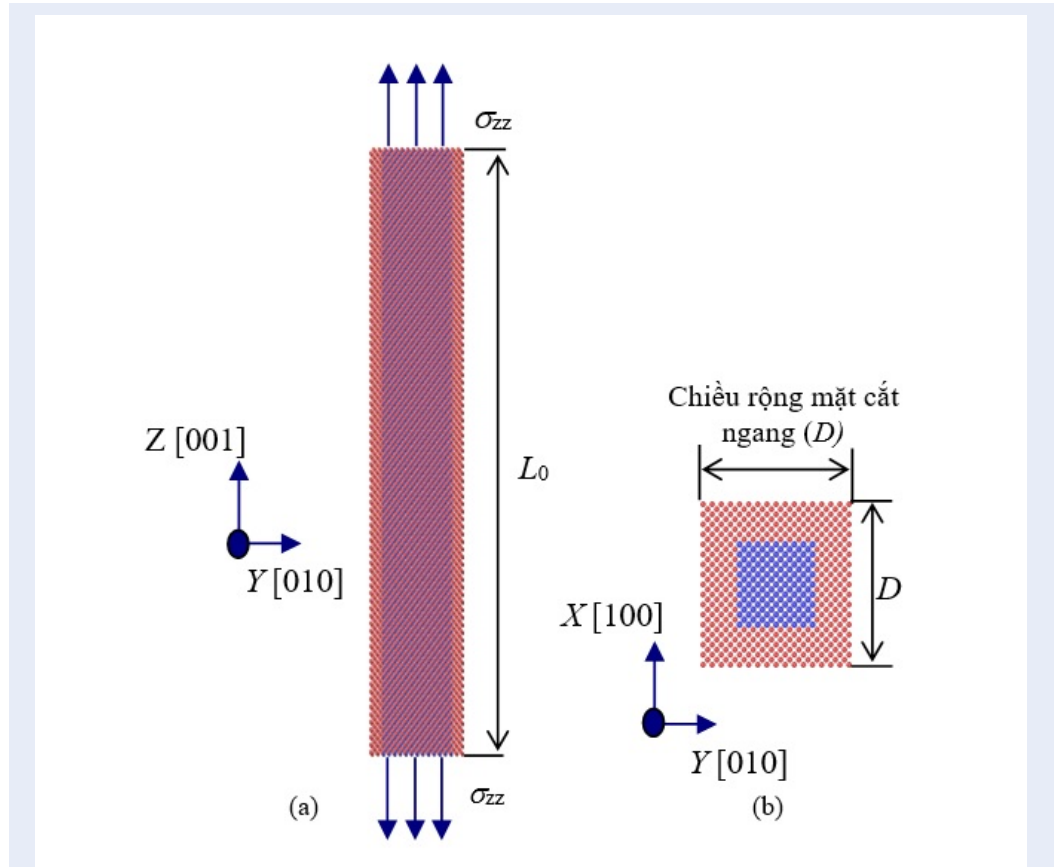
$$\sigma_{zz} = E \cdot \epsilon_{zz} \quad (2)$$

ở đây, E là mô đun đàn hồi; ϵ_{zz} là biến dạng theo phương kéo Z . σ_{zz} là ứng suất kéo theo phương Z .

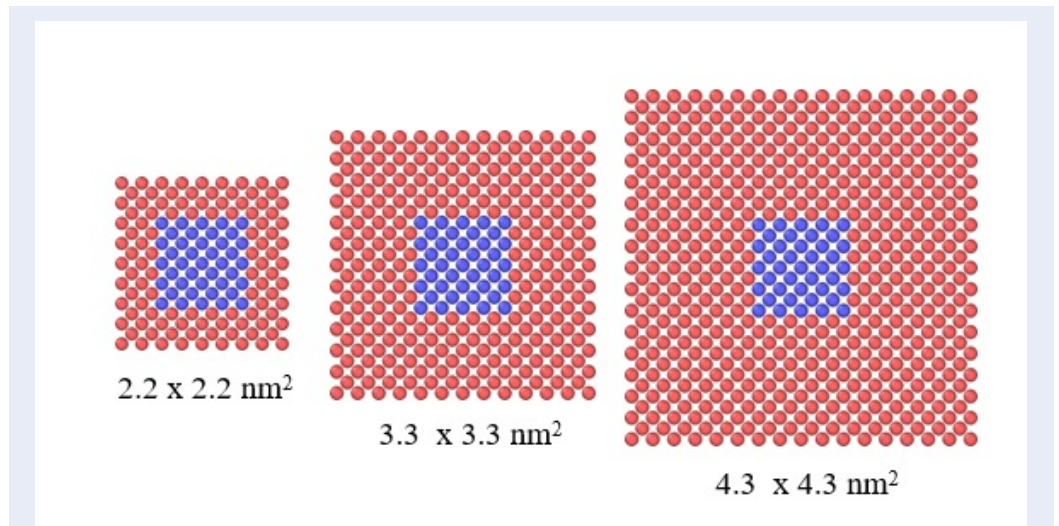
KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hình 4 biểu diễn quan hệ giữa ứng suất-biến dạng của Ge-core/Si-shell NWs kích thước tiết diện mặt cắt ngang bằng $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$ với kích thước tiết diện lõi khác nhau ở nhiệt độ $T = 300^\circ\text{K}$ và tốc độ biến dạng là $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. Kết quả nghiên cứu thu được chỉ cho thấy độ bền phá hủy của Ge/Si NWs phụ thuộc vào kích thước tiết diện lõi. Độ bền phá hủy của NWs giảm khi kích thước tiết diện lõi tăng. Cụ thể là độ bền phá hủy của Ge/Si NWs với kích thước tiết diện $0.53 \times 0.53 \text{ nm}^2$ có giá trị bằng 19.44 GPa ở biến dạng 0.266 , trong khi đó độ bền phá hủy của Ge/Si NWs là 17.04 GPa với biến dạng bằng 0.247 ứng với kích thước tiết diện lõi $3.3 \times 3.3 \text{ nm}^2$. So sánh với độ bền phá hủy của Si NWs²² (độ bền phá hủy bằng 26.3 GPa) và Ge NWs (độ bền phá hủy bằng 5 GPa ⁵⁷, 15 GPa ⁵⁸), kết quả chỉ cho thấy độ bền phá hủy của Ge/Si nhỏ hơn so với Si NWs và lớn hơn so với Ge NWs. Các kết quả này cho thấy sự ảnh hưởng của thành phần vật liệu (tỷ lệ số nguyên tử lõi/tổng số nguyên tử của NWs) và sự trượt mạng tinh thể trên bề mặt chung giữa hai lớp vật liệu lõi/vỏ đến tính chất cơ học của các sợi nano có cấu trúc lõi vỏ^{44,59}.

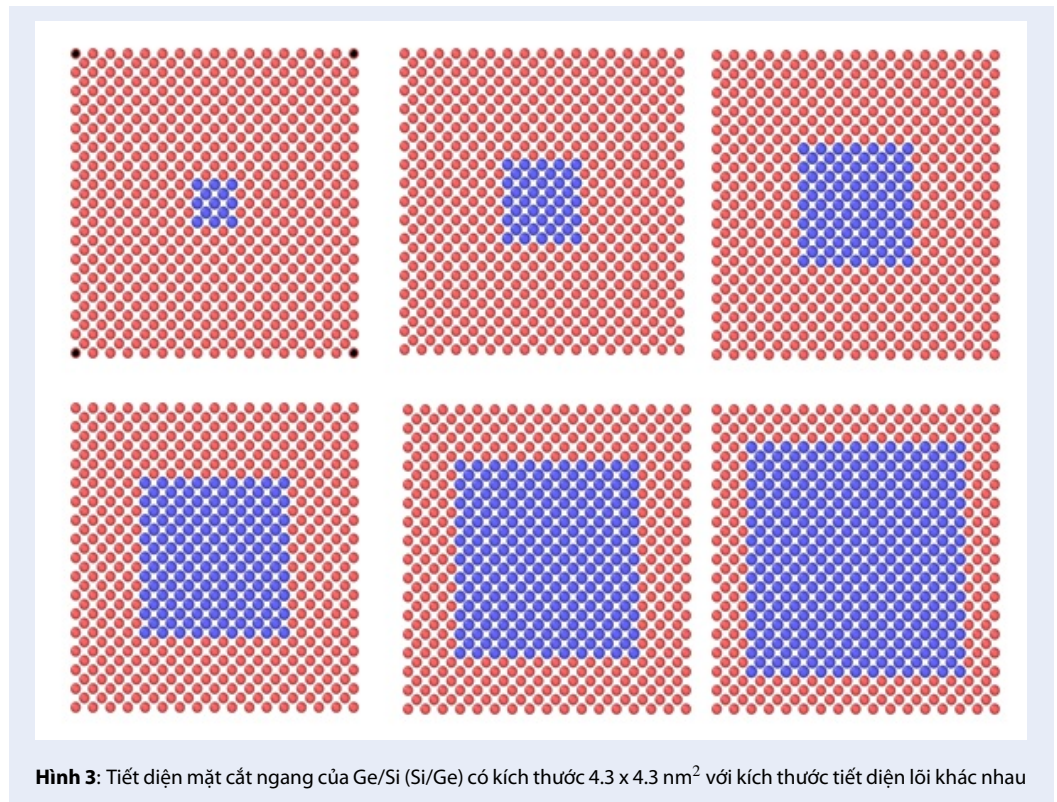
Hình 5 biểu diễn quan hệ giữa mô đun đàn hồi của Ge/Si (Si/Ge) NWs có kích thước tiết diện bằng $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$ với các kích thước tiết diện lõi Ge (Si) khác nhau. Kết quả thu được chỉ cho thấy mô đun đàn hồi của NWs phụ thuộc vào thành phần và kích thước tiết diện lõi. Mô đun đàn hồi của Ge/Si NWs tăng theo kích thước tiết diện lõi. Ngược lại, mô đun đàn hồi của Si/Ge giảm khi kích thước tiết diện lõi tăng. Mô đun đàn hồi của Ge/Si và Si/Ge NWs bằng nhau khi kích thước tiết diện lõi của NWs xấp xỉ bằng $2.7 \times 2.7 \text{ nm}^2$, nguyên nhân là do tỷ lệ số nguyên tử giữa lõi/vỏ của NWs bằng nhau. Kết quả này khác so với các kết quả thu được của các nghiên cứu lý thuyết trước^{44,57}. Đối với $\langle 111 \rangle$ và $\langle 110 \rangle$ Si/Ge (Ge/Si) NWs tiết diện tròn đường kính 10 nm sử dụng hàm thế Tersoff⁴⁶, mô đun đàn hồi của Si/Ge tăng khi đường kính lõi tăng, ngược lại mô đun đàn hồi của Ge/Si giảm khi đường kính lõi tăng⁴⁴. Si/Ge (Ge/Si) NWs có tiết diện hình lục giác, sử dụng hàm thế SW²¹ thì mô đun đàn



Hình 1: (a) Mô hình mô phỏng Ge/Si (Si/Ge) NWs dưới biến dạng kéo dọc trục theo phương Z. (b) Tiết diện mặt cắt ngang của NWs



Hình 2: Tiết diện mặt cắt ngang của Ge-core/Si-shell NWs với các kích thước tiết diện khác nhau, kích thước tiết diện lõi bằng $1.1 \times 1.1 \text{ nm}^2$.



Hình 3: Tiết diện mặt cắt ngang của Ge/Si (Si/Ge) có kích thước $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$ với kích thước tiết diện lõi khác nhau

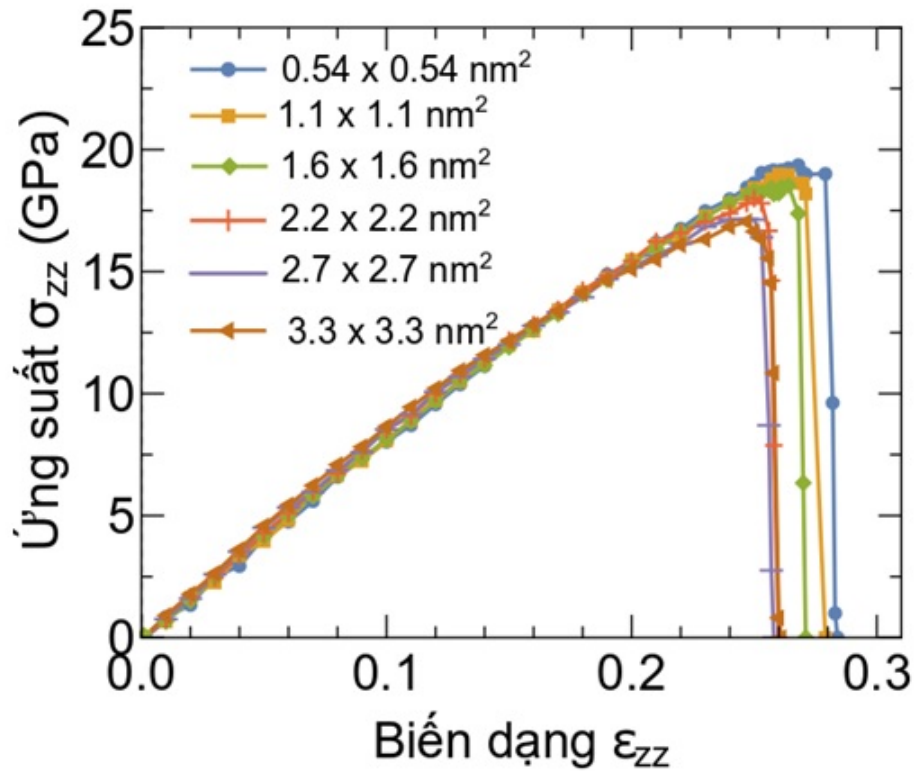
hồi của Si/Ge NWs tăng theo kích thước tiết diện lõi, mô đun đàn hồi của Ge/Si NWs tăng sau đó lại giảm khi kích thước tiết diện lõi tăng⁵⁷. Sự khác nhau giữa các kết quả này là do NWs có hình dáng, kích thước tiết diện, hướng tinh thể và hàm thể tương tác giữa các nguyên tử khác nhau dẫn đến tính chất cơ học của các NWs cũng khác nhau.

Hình 6 biểu diễn quan hệ giữa ứng suất-biến dạng của Ge-core/Si-shell với kích thước tiết diện lần lượt là $2.2 \times 2.2 \text{ nm}^2$, $3.3 \times 3.3 \text{ nm}^2$ và $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$, kích thước tiết diện lõi bằng $1.1 \times 1.1 \text{ nm}^2$. Kết quả thu được chỉ cho thấy độ bền phá hủy của NWs phụ thuộc vào kích thước tiết diện NWs. Độ bền và biến dạng phá hủy của NWs tăng khi kích thước tiết diện tăng. Độ bền phá hủy của Ge/Si NWs tăng từ 15 GPa đến 18 GPa tương ứng với kích thước tiết diện tăng từ $2.2 \times 2.2 \text{ nm}^2$ đến $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$. Mô đun đàn hồi của Ge/Si NWs cũng tăng khi từ 64.2 GPa lên 81.8 GPa tương ứng với kích thước tiết diện là $2.2 \times 2.2 \text{ nm}^2$ và $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$ (Hình 7). Kết quả này phù hợp với kết quả nghiên cứu lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) trước đó Ge/Si⁴⁵.

Hình 8 biểu diễn quan hệ ứng suất-biến dạng của Ge/Si NWs có kích thước tiết diện ngoài bằng $2.2 \times 2.2 \text{ nm}^2$, kích thước tiết diện lõi bằng $1.63 \times 1.63 \text{ nm}^2$ ở các nhiệt độ khác nhau (nhiệt độ thay đổi trong

khoảng từ 100°K đến 600°K với bước nhiệt độ là 100°K). Kết quả thu được chỉ cho thấy độ bền và biến dạng phá hủy phụ thuộc vào nhiệt độ. Ở nhiệt độ $T = 100^\circ\text{K}$, ứng suất lớn nhất bằng 18.9 GPa ở giá trị biến dạng là 0.313. Trong khi đó, ở $T = 600^\circ\text{K}$, ứng suất lớn nhất bằng 2.16 GPa ở giá trị biến dạng 0.034. Thêm vào đó, mô đun đàn hồi cũng được chứng minh là phụ thuộc vào nhiệt độ, mô đun đàn hồi của Ge/Si giảm khi nhiệt độ tăng, ở $T = 100^\circ\text{K}$ và 600°K , mô đun đàn hồi tương ứng bằng 94.2 GPa và 57.7 GPa. Kết quả trên được giải thích là khi nhiệt độ tăng, khoảng cách cân bằng của vị trí các nguyên tử tăng lên. Điều này gây ra sự suy giảm của ứng suất, biến dạng phá hủy và mô đun đàn hồi của NWs. Do đó, cùng với sự biến thiên của đường cong quan hệ ứng suất-biến dạng và của mô đun đàn hồi chỉ cho thấy sự kém ổn định của cấu trúc mạng tinh thể trong vật liệu NWs khi nhiệt độ tăng. Tính chất này cũng giống với tính chất của sợi nano kim loại Nickel NWs⁵⁸ và Cu NWs⁶⁰.

Hình 9 (a) và (b) biểu diễn ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến tính chất cơ học của Ge/Si có kích thước tiết diện ngoài và lõi lần lượt là $3.3 \times 3.3 \text{ nm}^2$ và $0.54 \times 0.54 \text{ nm}^2$ ở nhiệt độ $T = 300^\circ\text{K}$. Kết quả thu được cho thấy đường cong ứng suất-biến dạng và mô đun đàn hồi của NWs phụ thuộc vào tốc độ biến dạng. Độ bền phá hủy của NWs tăng từ 15.22 GPa đến 19.16 GPa ứng



Hình 4: Đường cong quan hệ ứng suất-biến dạng của Ge/Si có kích thước tiết diện $4.3 \times 4.3 \text{ nm}^2$ với kích thước tiết diện lõi khác nhau

với tốc độ biến dạng tăng từ $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ đến $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. Ngược lại, mô đun đàn hồi của NW giảm từ 91.4 GPa xuống 50.6 GPa khi tốc độ biến dạng tăng từ $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ đến $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. Kết quả thu được cho thấy tốc độ biến dạng lớn thì độ bền phá hủy của Ge/Si tăng, trong khi đó mô đun đàn hồi của Ge/Si giảm.

KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, tính chất cơ học của Ge/Si NWs cấu trúc lõi vỏ được nghiên cứu bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử. Kết quả thu được chỉ ra độ bền, biến dạng phá hủy và mô đun đàn hồi của NWs phụ thuộc vào kích thước tiết diện, thành phần vật liệu lõi/vỏ, nhiệt độ và tốc độ biến dạng. Độ bền phá hủy của Ge/Si giảm khi kích thước lõi tăng. Mô đun đàn hồi của Ge/Si tăng theo kích thước tiết diện lõi. Ngược lại, mô đun đàn hồi của Si/Ge giảm khi kích thước tiết diện lõi tăng. Tính chất cơ học của NWs khác nhau, nguyên nhân là do ảnh hưởng của cấu trúc vật liệu vật liệu dẫn đến sự trượt mạng trên bề mặt chung giữa hai lớp vật liệu lõi/vỏ. Ngoài ra, nhiệt độ tăng làm độ bền phá hủy và mô đun

đàn hồi của NWs giảm. Độ bền phá hủy của Ge/Si NWs tăng khi tốc độ biến dạng tăng. Với các kết quả thu được của nghiên cứu giúp hiểu rõ hơn tính chất cơ học của các sợi nano có cấu trúc lõi/vỏ, điều này giúp ích trong việc thiết kế, cũng như chế tạo các thiết bị vi cơ điện tử trong tương lai.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển Khoa học và Công nghệ Quốc gia (NAFOSTED), mã số: 107.02- 2016.18.

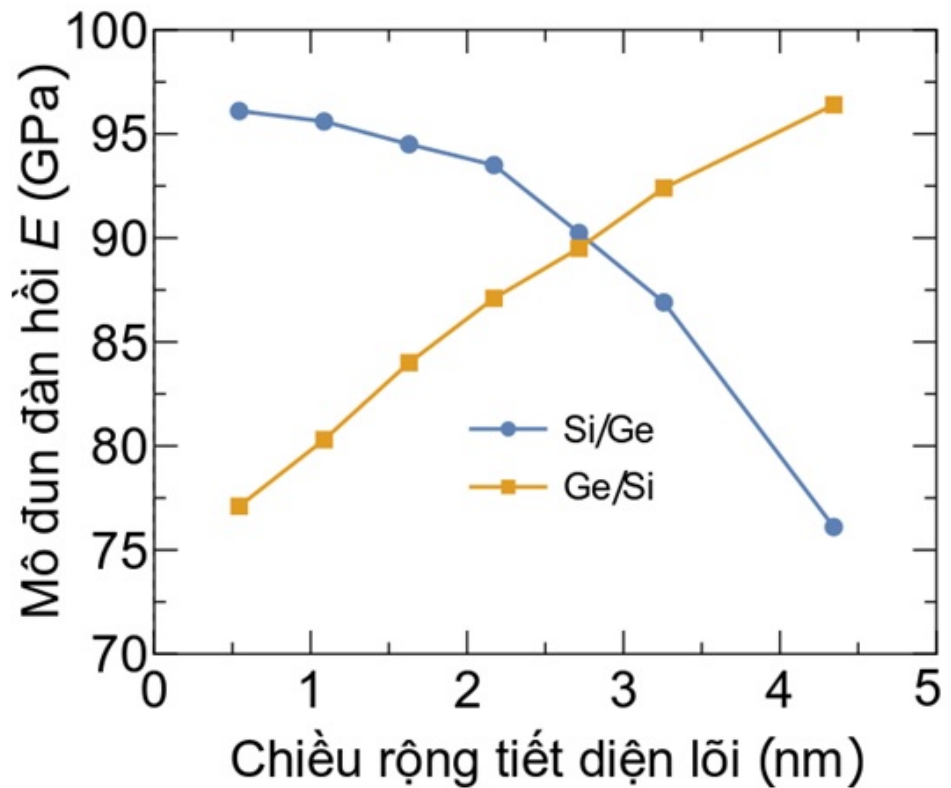
XUNG ĐỘT LỢI ÍCH

Nhóm tác giả xin cam đoan rằng không có bất kỳ xung đột lợi ích nào trong công bố bài báo.

ĐÓNG GÓP CỦA TÁC GIẢ

Vương Văn Thanh tham gia vào việc đưa ra ý tưởng viết bài, biểu diễn kết quả và viết bản thảo.

Trần Thế Quang xây dựng mô hình mô phỏng và thu thập dữ liệu.



Hình 5: Ảnh hưởng của thành phần và kích thước tiết diện lõi đến mô đun đàn hồi của Ge/Si

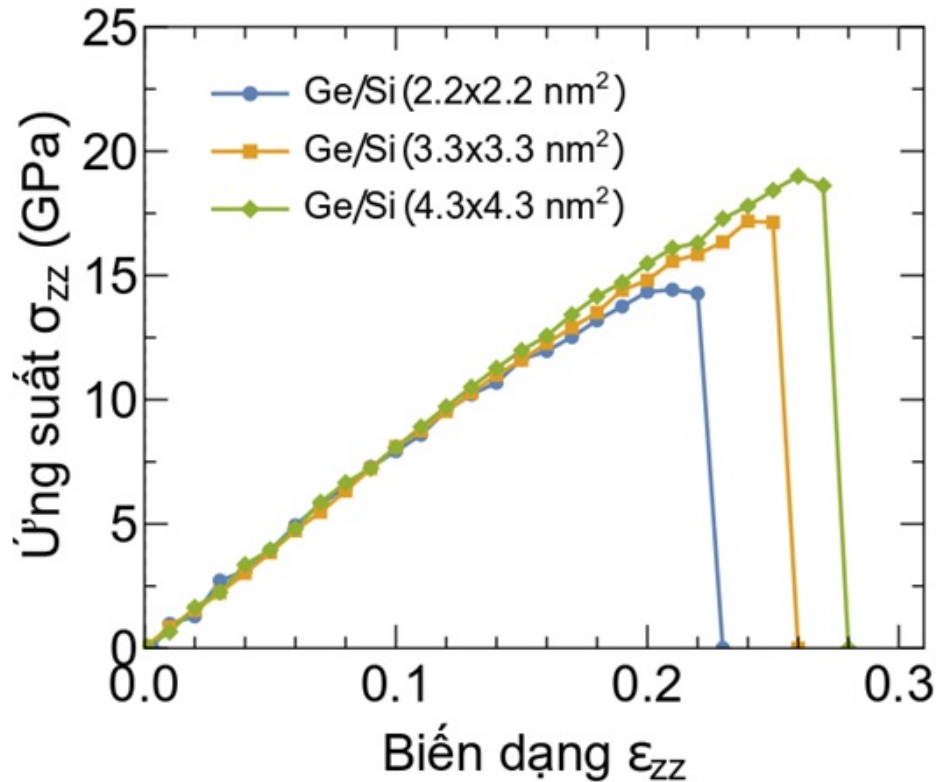
Nguyễn Tuấn Hưng tham gia vào việc đưa ra ý tưởng viết bài, và kiểm tra lại bài viết.

Vũ Lê Huy đã đóng góp giải thích dữ liệu và kiểm tra lại bài viết.

Đỗ Văn Trường đã góp ý và kiểm tra lại bài viết.

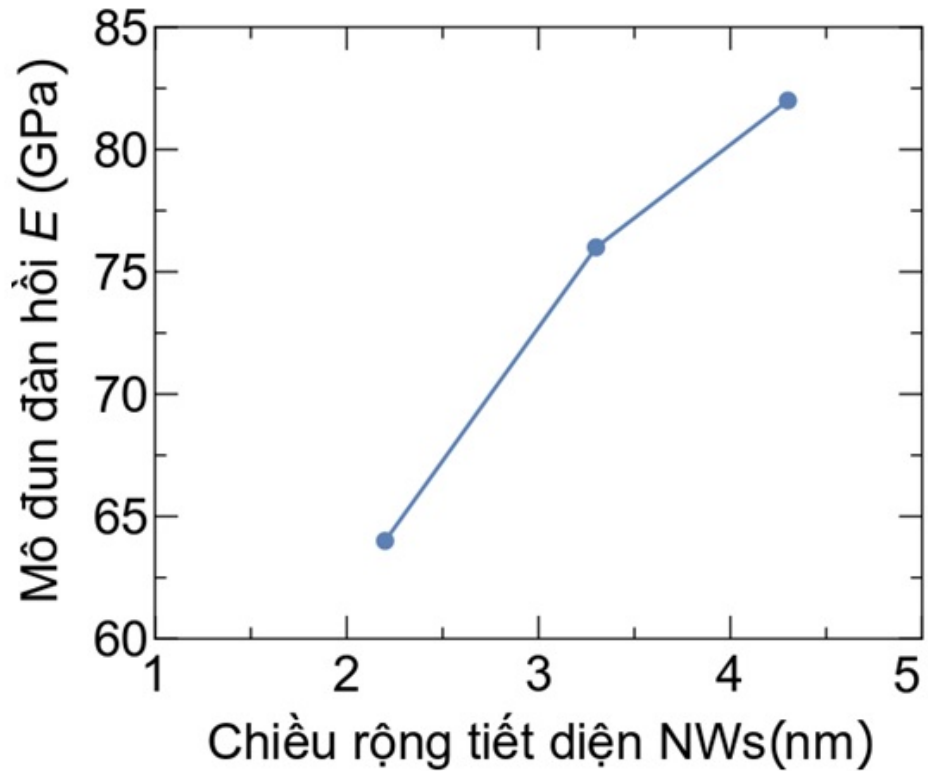
TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Xia YN, et al. One-Dimensional Nanostructures: Synthesis, Characterization, and Applications. *Adv. Mater.* 2003;15(5):353–389. Available from: <https://doi.org/10.1002/adma.200390087>.
- Yan RX, Gargas D, Yang PD. Nanowire photonics. *Nat. Photonics.* 2009;3:569–576. Available from: <https://doi.org/10.1038/nphoton.2009.184>.
- Wan YT, et al. Nanodevices based on silicon nanowires. *Recent Pat. Nanotechnol.* 2009;3(1):1–9. PMID: 19149750. Available from: <https://doi.org/10.2174/187221009787003348>.
- Yu L, et al. Plasma-enhanced low temperature growth of silicon nanowires and hierarchical structures by using tin and indium catalysts. *Nanotechnology.* 2009;20:225604. PMID: 19436096. Available from: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/20/22/225604>.
- Bae J, et al. Si nanowire metal-insulator-semiconductor photodetectors as efficient light harvesters. *Nanotechnology.* 2010;21:095502. PMID: 20130349. Available from: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/21/9/095502>.
- Wu R, et al. Growth of Tapered SiC Nanowires on Flexible Carbon Fabric: Toward Field Emission Applications. *J. Phys. Chem. C.* 2012;116(23):12940–12945. Available from: <https://doi.org/10.1021/jp3028935>.
- Wang X, et al. Vertically arrayed Si nanowire/nanorod-based core-shell p-n junction solar cells. *J. Appl. Phys.* 2010;108(12):124303–124303. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.3520217>.
- Cui LF, Ruffo R, et al. Crystalline-amorphous core-shell silicon nanowires for high capacity and high current battery electrodes. *Nano Lett.* 2009;9(1):491–495. PMID: 19105648. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl8036323>.
- Wu Y, Fan R, Yang P. Block-by-Block Growth of Single-Crystalline Si/SiGe Superlattice Nanowires. *Nano Lett.* 2002;2(2):83–86. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl0156888>.
- Wu Y, Cui Y, et al. Controlled Growth and Structures of Molecular-Scale Silicon Nanowires. *Nano Lett.* 2004;4(3):433–436. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl035162i>.
- Durandurdu M. Ab initio modeling of small diameter silicon nanowires. *Phys. stat. sol.* 2006;243(2):R7–R9. Available from: <https://doi.org/10.1002/pssb.200541524>.
- Zhang H, et al. Approaching the ideal elastic strain limit in silicon nanowires. *Sci. Adv.* 2016;2:e1501382. PMID: 27540586. Available from: <https://doi.org/10.1126/sciadv.1501382>.
- Kizuka T, Takatani Y, Asaka K, Yoshizaki R. Measurements of the atomistic mechanics of single crystalline silicon wires of nanometer width. *Phys. Rev.* 2005;72(3):035333. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.035333>.
- Paulo AS, et al. Mechanical elasticity of single and double clamped silicon nanobeams fabricated by the vapor-liquid-solid method. *Appl. Phys. Lett.* 2005;87:053111. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.1881111>.



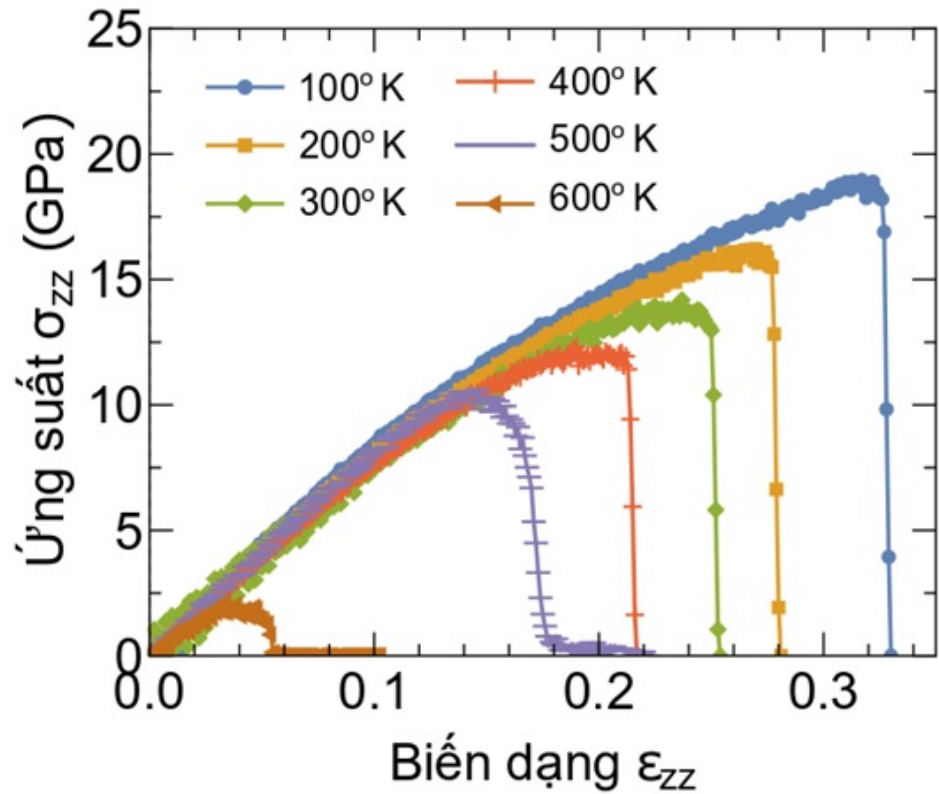
Hình 6: Ảnh hưởng của kích thước tiết diện đến độ bền phá hủy của Ge/Si

- from: <https://doi.org/10.1063/1.2008364>.
- Tsuchiya T, et al. Tensile fracture of integrated single-crystal silicon nanowire using MEMS electrostatic testing device. *Procedia Structural Integrity Procedia*. 2016; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2016.06.178>.
 - Leu PW, et al. Ab initio calculations of the mechanical and electronic properties of strained Si nanowires. *PHYSICAL REVIEW B*. 2008;77:235305. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.235305>.
 - Lee B, Rudd RE. First-principles study of the Young's modulus of Si $\langle 001 \rangle$ nanowires. *PHYSICAL REVIEW B*. 2007;75:041305. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.041305>.
 - Lee AJ, et al. Mechanical and electronic properties of strained Ge nanowires using ab initio real-space pseudopotentials. *PHYSICAL REVIEW B*. 2012;86:115331. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.115331>.
 - Yuhang J, et al. Atomistic simulations of the tensile and melting behavior of silicon nanowires. *Journal of Semiconductors*;30(6):062003–062001. Available from: <https://doi.org/10.1088/1674-4926/30/6/062003>.
 - Stillinger FH, Weber TA. Computer simulation of local order in condensed phase of silicon. *Phys. Rev. B*. 1985;31:5262–5271. PMID: 9936488. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.5262>.
 - Kang K, Cai W. Brittle and ductile fracture of semiconductor nanowires molecular dynamics simulations. *Philosophical Magazine*. 2007;87:14–15. Available from: <https://doi.org/10.1080/14786430701222739>.
 - Liu C, Li F, et al. Advanced Materials for Energy Storage. *Adv. Mater.* 2010;22:E28–E62. PMID: 20217798. Available from: <https://doi.org/10.1002/adma.200903328>.
 - Fu LJ, et al. Surface Modifications of Electrode Materials for Lithium Ion Batteries. *Solid State Sciences*. 2006;8(2). Available from: <https://doi.org/10.1016/j.solidstatedciences.2005.10.019>.
 - Fukata N, et al. Characterization of Impurity Doping and Stress in Si/Ge and Ge/Si Core-Shell Nanowires. *ACS Nano*. 2012;6(10):8887–8895. PMID: 22947081. Available from: <https://doi.org/10.1021/nn302881w>.
 - Jiang X, et al. InAs/InP Radial Nanowire Heterostructures as High Electron Mobility Devices. *Nano Lett.* 2007;7(10):3214–3218. PMID: 17867718. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl072024a>.
 - Noborisaka J, Motohisa J, Fukui T. Fabrication and characterization of freestanding GaAs/AlGaAsGaAs/AlGaAs core-shell nanowires and AlGaAs nanotubes by using selective-area metalorganic vapor phase epitaxy. *Appl. Phys. Lett.* 2005;86:093109. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.2035332>.
 - Prete P, Marzo F, Paiano P, et al. Luminescence of GaAs/AlGaAs core-shell nanowires grown by MOVPE using tertiarybutylarsine. *Journal of Crystal Growth*. 2008;310(23):5114–5118. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2008.08.039>.
 - Sides CR, et al. A High-Rate, Nanocomposite LiFePO₄/Carbon Cathode. *Electrochem. Solid State Lett.* 2005;8:A484–A487. Available from: <https://doi.org/10.1149/1.1999916>.
 - Lauhon LJ, et al. Epitaxial core-shell and core-multishell nanowire heterostructures. *Nature*. 2002;420. PMID: 12422212. Available from: <https://doi.org/10.1038/nature01141>.
 - Jones AC, O'Brien P. CVD of Compound Semiconductors: Precursor Synthesis, Development and Applications. ; Available from: <https://doi.org/10.1002/9783527614639.ch1>.



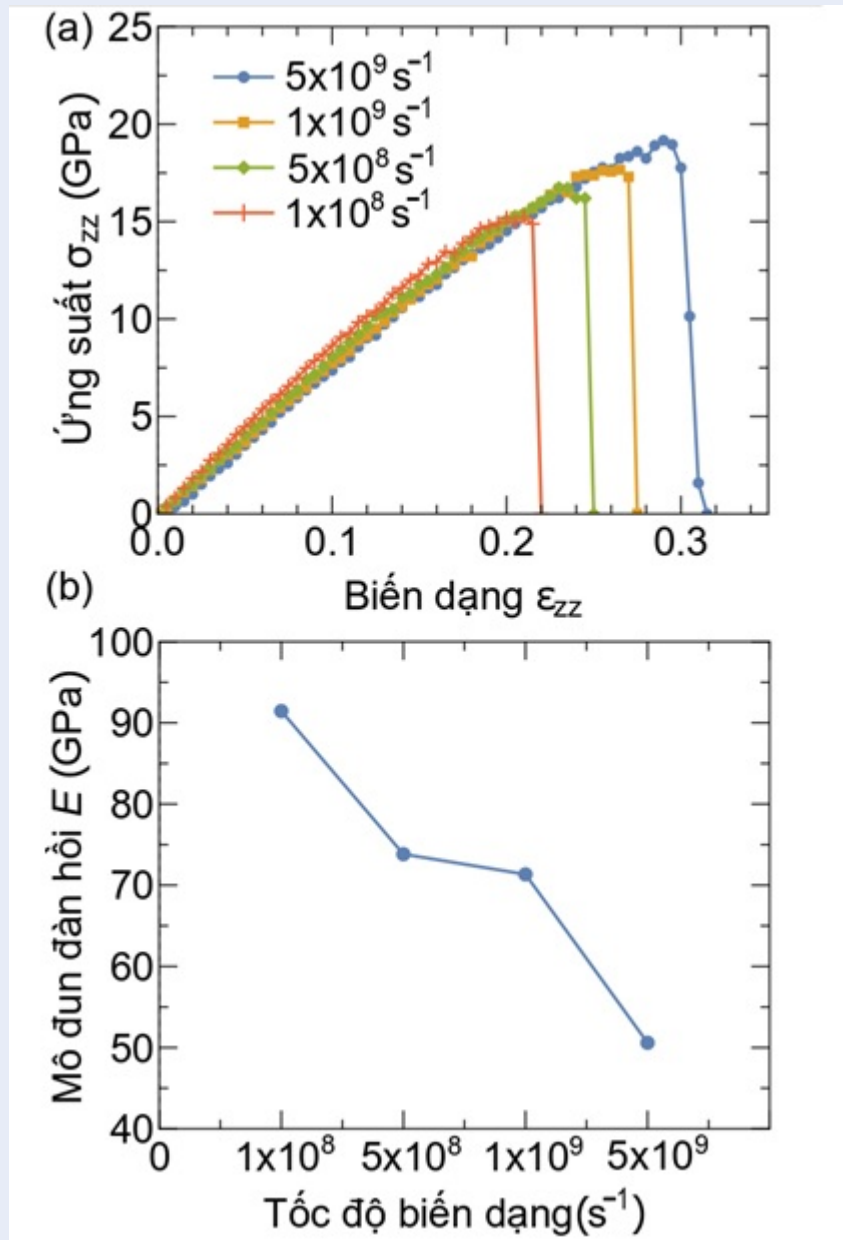
Hình 7: Ảnh hưởng của kích thước tiết diện đến mô đun đàn hồi của Ge/Si

31. Yang JE, et al. Band-gap modulation in single-crystalline Si_{1-x}Ge_x nanowires. *Nano Lett.* 2006;6(12):2679–2684. PMID: 17163687. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl0614821>.
32. Varahramyan KM, et al. Band engineered epitaxial Ge₆Si₄Ge_{1-x} core-shell nanowire heterostructures. *Appl. Phys. Lett.* 2009;95:033101–033103. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.3173811>.
33. Lu W, et al. One-dimensional hole gas in germanium/silicon nanowire heterostructures. *Proc Natl Acad Sci U S A.* 2005;102(29):10046–10051. PMID: 16006507. Available from: <https://doi.org/10.1073/pnas.0504581102>.
34. Musin RN, Wang XQ. Structural and electronic properties of epitaxial core-shell nanowire heterostructures. *Phys. Rev. B.* 2005;71:155318. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.155318>.
35. Musin RN, Wang XQ. Quantum size effect in core-shell structured silicon-germanium nanowires. *Phys. Rev. B.* 2006;74:165308. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.165308>.
36. Lee B, Rudd RE. First-principles calculation of mechanical properties of Si <001> nanowires and comparison to nanomechanical theory. *Phys. Rev.* 2007;75:195328. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.195328>.
37. Nduwimana A, et al. Spatial Carrier Confinement in Core–Shell and Multishell Nanowire Heterostructures. *Nano Lett.* 2008;8(10):3341–3344. PMID: 18754645. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl8017725>.
38. Migas DB, et al. Structural, electronic, and optical properties of (001)-oriented SiGe nanowires. *Phys Rev B.* 2007;76:035440. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.035440>.
39. Yang L, et al. Quantum confinement effect in Si/Ge core-shell nanowires: First-principles calculations. *Phys. Rev. B.* 2008;77:195325. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.195325>.
40. Amato M, et al. SiGe nanowires: Structural stability, quantum confinement, and electronic properties. *Phys. Rev. B.* 2009;80:235333. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.235333>.
41. Liu N, et al. Strain Effects in Ge/Si and Si/Ge Core/Shell Nanowires. *J Phys Chem C.* 2011;115:15739–15742. Available from: <https://doi.org/10.1021/jp110379n>.
42. Peng X, et al. First Principles Study of Si/Ge Core-Shell Nanowires Structural and Electronic Properties; Available from: <https://doi.org/10.5772/16298>.
43. Das S, et al. Simulation of thermal stress and buckling instability in Si/Ge and Ge/Si core/shell nanowires. *Beilstein J. Nanotechnol.* 2015;6:1970–1977. PMID: 26665068. Available from: <https://doi.org/10.3762/bjnano.6.201>.
44. Cleland N, Roukes ML. Fabrication of high frequency nanometer scale mechanical resonators from bulk Si crystals. *Appl. Phys. Lett.* 1996;69(18):2653–2655. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.117548>.
45. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems. *Phys. Rev. B*;39:5566–5568. PMID: 9948964. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.5566>.
46. Hu M, Poulidakos D. Si/Ge Superlattice Nanowires with Ultralow Thermal. *Nano Lett.* 2012;12(11):5487–5494. PMID: 23106449. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl301971k>.
47. He Y, Donadio D, Galli G. Morphology and temperature dependence of the thermal conductivity of nanoporous SiGe. *Nano Lett.* 2011;11(9):3608–3611. PMID: 21859096. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl201359q>.
48. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J. Comput. Phys.* 1995;117:1–19. Available from:



Hình 8: Ảnh hưởng của nhiệt độ đến đường cong ứng suất-biến dạng

- <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
49. Haskins JB, et al. Thermal conductivity of Si-Ge quantum dot superlattices. *T. Nanotechnology*. 2011;22:155701. PMID: 21389580. Available from: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/22/15/155701>.
 50. Samvedi V, Tomar V. The role of straining and morphology in thermal conductivity of a set of Si-Ge superlattices and biomimetic Si-Ge nanocomposites. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2010;43:135401. Available from: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/43/13/135401>.
 51. Donadio D, Galli G. Temperature Dependence of the Thermal Conductivity of Thin Silicon Nanowires. *Nano Lett.* 2010;10(3):847–851. PMID: 20163124. Available from: <https://doi.org/10.1021/nl903268y>.
 52. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*. 1995;117:1–19. Available from: <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
 53. Sheppard D, et al. Optimization methods for finding minimum energy paths. *J Chem Phys*. 2008;128:134106. PMID: 18397052. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.2841941>.
 54. Hans CA. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *Journal of Chemical Physics*. 1980;72(4):2384–2393. Available from: <https://doi.org/10.1063/1.439486>.
 55. Stukowski A, et al. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool, Modelling Simul. *Mater. Sci. Eng.* 2010;18:015012. Available from: <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>.
 56. Liu XW, Hu J, Pan BC. The composition-dependent mechanical properties of Ge/Si core-shell nanowires. *Physica E*. 2008;40:3042–3048. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.physe.2008.03.011>.
 57. Kizuka T, Takatani Y, Asaka K, Yoshizaki R. Measurements of the atomistic mechanics of single crystalline silicon wires of nanometer width. *Phys. Rev. B*. 2005;72:035333. Available from: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.035333>.
 58. Weidong W, Chenglong Y, Kangqi F. Molecular dynamics study on temperature and strain rate dependences of mechanical tensile properties of ultrathin nickel nanowires. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*. 2013;23(11):3353–3361. Available from: [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(13\)62875-7](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(13)62875-7).
 59. Grow R, Dai H. Unpublished results on Ge nanowire bending test. 2005;.
 60. Wu HA. Molecular dynamics study on mechanics of metal nanowire. *Mechanics Research Communications*. 2006;33:9–16. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2005.05.012>.



Hình 9: (a) Ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến quan hệ ứng suất- biến dạng của Ge/Si. (b) Ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến mô đun đàn hồi của Ge/Si

Investigate the mechanical properties of Si/Ge (Ge/Si) core-shell nanowires: A molecular dynamics study

Vuong Van Thanh^{1,*}, Tran The Quang¹, Nguyen Tuan Hung², Vu Le Huy³, Do Van Truong¹



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

ABSTRACT

Nanowires (NWs) have been used increasingly in practice due to their outstanding mechanical, physical, and chemical properties. In this paper, we use the molecular dynamics (MD) method to investigate the mechanical properties of NWs (Si/Ge, Ge/Si) with a core-shell structure under the axial tensile strain along the $\langle 100 \rangle / \{100\}$ direction. Our results show that the strength and elastic modulus of Ge/Si and Si/Ge NWs depend on the composition and size of the core/shell cross-section. The strength and strain of Ge/Si NW decrease with increasing the size of the core cross-section because of the lattice mismatch between two layers of core/shell materials. The elastic modulus of Ge/Si NWs increases with the increasing the size of the core cross-section, while the elastic modulus of the Si/Ge NW decreases. In addition, the theoretical strength and elastic modulus of Ge/Si NWs reduce with the growth of the temperature. Furthermore, we also investigate the effect of strain rate on the mechanical properties of the Ge/Si NWs. The obtained results of the study provide the intrinsic properties of the core-shell NWs and also help in the design and fabrication of electronic and optical devices based on the Ge/Si NWs.

Key words: Core-shell structure, Molecular dynamics method, Strain rate

¹School of Mechanical Engineering, Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

²Frontier Research Institute for Interdisciplinary Sciences, Tohoku University, Sendai 980-8578, Japan

³Faculty of Mechanical Engineering and Mechatronics, Phenikaa University, Hanoi, Vietnam

Correspondence

Vuong Van Thanh, School of Mechanical Engineering, Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Vietnam

Email: thanh.vuongvan@hust.edu.vn

History

- Received: 24-3-2020
- Accepted: 23-12-2020
- Published: 31-1-2021

DOI : 10.32508/stdjet.v3i4.800



Copyright

© VNU-HCM Press. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



Cite this article : Thanh V V, Quang T T, Hung N T, Huy V L, Truong D V. Investigate the mechanical properties of Si/Ge (Ge/Si) core-shell nanowires: A molecular dynamics study. *Sci. Tech. Dev. J. – Engineering and Technology*; 3(4):620-630.