

Študija vpliva neurejenih lupin na mehanske lastnosti nanožic iz SiC

Bin Zheng* – Huiling Du

Znanstveno-tehniška univerza Xi'an, Šola za materiale in inženiring, Xi'an 710054, Kitajska

Simulacije molekularne dinamike (MD) so bile uporabljene za izvedbo enoosne deformacije v simuliranih kvazistatičnih pogojih in ugotavljanje mehanskih lastnosti neurejenih nanožic SiC vrste jedro-lupina. Postavljen je bil model nanožic z jedrom premera 1 nm, 1,3 nm in 1,7 nm ter neurejeno lupino debeline 0,3 nm, 0,6 nm in 0,9 nm. Optimizacija atomskih položajev v začetnem modelu je bila opravljena po metodi minimizacije energije s pomočjo algoritma konjugiranega gradienta (CG). Notranje napetosti v začetni nanostrukturi so bile sproščene z relaksacijo pri konstantnem atmosferskem tlaku in temperaturi 300 K. Struktura je bila postopoma obremenjena v aksialni smeri s periodičnimi robnimi pogoji. Enoten odmik pri vsakem koraku je bil 0,1 nm, relaksacijski čas pri konstantni temperaturi pa je znašal 500 pikosekund. Tako je bila dosežena ekvivalentna hitrost deformiranja 0,2 m/s (0,002 % ps⁻¹).

Objavljene napetosti so bile izračunane kot vsota napetostnega tenzorja vseh atomov v smeri deformiranja, deljena s prostornino sistema. Pri stopnji deformacije od -3 % do 3 % so bile uporabljene linearna regresija in krivulje odvisnosti deformacije od napetosti za ocenjevanje modula elastičnosti (Y). Ugotovljeno je bilo, da je modul elastičnosti golih nanožic večji od modula pri žicah, prevlečenih z neurejenimi sloji. Porazdelitev atomskih napetosti v nanožicah je bila uporabljena za analizo trdnosti žic, prevlečenih z neurejeno lupino. Izkazalo se je, da je večina atomov v goli nanožici v stanju pod napetostjo, medtem ko pri nanožicah vrste jedro-lupina atomi neurejene lupine na vmesniku nasitijo proste vezi v površini jedra SiC in se napetost na vmesniku zaradi neujemanj rešetke skoraj povsem sprosti. Nanožice SiC vrste jedro-lupina slabo prevzemajo zunanje obremenitve, kar je tudi glavni razlog za majhno trdnost žic, prevlečenih z neurejeno lupino.

Zanimivo je tudi opažanje, da so nanožice SiC-d-C in SiC-d-Si bolj toge zaradi velikega kristalnega jedra pri fiksni debelini neurejene lupine. Modul elastičnosti jedra je za dva- do trikrat večji od modula elastičnosti lupine, kar kaže na pomembnejšo vlogo jedra pri trdnosti žic vrste jedro-lupina. To potrjuje tudi pojav nateznega napetostnega stanja v jedru ter ničelnih napetosti v jedru pod vplivom zunanje natezne sile.

S spremljanjem razvoja strukture pod obremenitvijo na atomski ravni so bile pridobljene informacije o plastičnih deformacijah nanožic SiC. V golih žicah SiC se niso pod kritično stopnjo deformacije (31 %) ob dodatni kompresiji pojavile nobene napake v strukturi. Ko je kritična stopnja deformacije presežena, nenadna prekinitev vezi Si-C zunaj območja vzvoja in nato čisti zlom nakazuje krhko vedenje. Pri nanožicah vrste jedro-lupina nasprotno med deformiranjem ni bil opažen čist zlom v izoliranem jedru in lupini, kot kažejo plastične deformacije nanožic SiC zaradi neurejene plasti. Primerjava konfiguracije gole žice in izoliranega jedra pokaže, da je struktura slednjega bolj neurejena. Avtorji verjamejo, da je amorfizacija jedra, ki jo povzroči neurejena lupina, glavni krivec za duktilne lastnosti nanožic vrste jedro-lupina.

Mehanske lastnosti nanožic vrste polprevodniško jedro-lupina so odvisne od vrste in debeline neurejene lupine, kar je treba upoštevati pri snovanju nanonaprav za določeni namen uporabe. Vmesnik jedro-lupina vpliva na trdnost s prerazdelitvijo atomskih napetosti v nanožicah. Rezultati raziskave osvetljujejo funkcijo tanke neurejene plasti v nanostrukturi, ki je sicer ni težko razkriti z eksperimentom, vendar je pogosto prezrta.

Ključne besede: nanožica vrste jedro-lupina, mehanske lastnosti, modul elastičnosti, vpliv velikosti, duktilnost, simulacija molekularne dinamike