

Чернаков Антон Павлович

**КРУГОВЫЕ ПРИЗМАТИЧЕСКИЕ ДИСЛОКАЦИОННЫЕ ПЕТЛИ И
РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ
НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ**

Специальность: 1.1.8 – Механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург, 2022

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией механики наноматериалов и теории дефектов ИПМаш РАН
Гуткин Михаил Юрьевич

Научный консультант: доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории механики наноматериалов и теории дефектов ИПМаш РАН
Колесникова Анна Львовна

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор кафедры математики СПбТУ (ТИ)
Груздков Алексей Андреевич

доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительных методов механики деформируемого тела СПбГУ
Пронина Юлия Григорьевна

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук»

Защита состоится 27 декабря 2022 года в 16:00 на заседании диссертационного совета 24.1.097.01 на базе Института проблем машиноведения Российской Академии Наук по адресу: 199178, Санкт-Петербург, Васильевский остров, Большой проспект, д. 61.

С диссертацией можно ознакомиться в ОНТИ Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем машиноведения Российской академии наук и на сайте <http://www.ipme.ru/>

Автореферат разослан «__» _____ 2022 года.

Ученый секретарь

Диссертационного Совета 24.1.097.01

Доктор технических наук, доцент



Е.Б. Сedaкова

Общая характеристика работы

Актуальность работы

Одномерные композитные наноструктуры обладают рядом уникальных свойств, что привлекает все большее внимание к их производству и изучению. В настоящее время они находят применение в электронике, оптоэлектронике, фотонике, катализе, медицине, и во многих других областях науки. Промышленность также предъявляет значительный спрос на такие функциональные материалы для использования их в различных устройствах.

Свойства большинства композитных наноструктур сильно зависят от наличия в них дефектов и упругих деформаций, вызванных несоответствием параметров атомных решёток материалов, входящих в состав наноструктуры, и разницей в их коэффициентах линейного теплового расширения. Релаксация напряжений несоответствия, возможная при выполнении определенных условий, снижает полную энергию наноструктуры, но сопровождается появлением в ней разнообразных дефектов. Процессы релаксации напряжений несоответствия с образованием таких дефектов активно исследуется применительно к различным видам наноструктур и дефектов. Например, имеется большое количество работ по дислокациям несоответствия в плоских наногетероструктурах (эпитаксиальных слоях на подложках). Значительно меньше работ посвящено релаксации напряжений несоответствия в сферически симметричных композитных наночастицах и в квазиодномерных наногетероструктурах – композитных нанопроволоках.

В современной научной периодике среди всех квазиодномерных наногетероструктур наиболее широко представлены композитные нанопроволоки типа «ядро-оболочка», сегментированные нанопроволоки (называемые также продольными свёрхрешётками) и нанотрубки (рис. 1).

Нанопроволоки типа «ядро-оболочка» неоднородны в радиальном направлении и отличаются большим разнообразием используемых пар материалов (кристалл-кристалл, кристалл-нанокристаллический слой, кристалл-графит, кристалл-аморфный слой, аморфное ядро-кристалл). Полупроводниковые нанотрубки также являются частицами с радиальной неоднородностью, однако в отличие от нанопроволок «ядро-оболочка» место ядра в них занимает полость. В данной работе рассматриваются нанотрубки, внедрённые в матрицу. Сегментированные нанопроволоки представляют собой последовательность состыкованных между собой монокристаллов металлов или полупроводников.

Все три перечисленных вида квазиодномерных наногетероструктур по мере релаксации напряжений несоответствия заполняются дефектами. По имеющимся данным, одним из наиболее предпочтительных (энергетически выгодных) типов таких дефектов являются круговые призматические дислокационные петли (ПДП), показанные на рис. 2. Несмотря на то, что исследования, посвящённые зарождению

ПДП в подобных частицах, уже существуют, можно утверждать, что релаксация напряжений несоответствия в квазиодномерных наногетероструктурах изучена лишь частично.

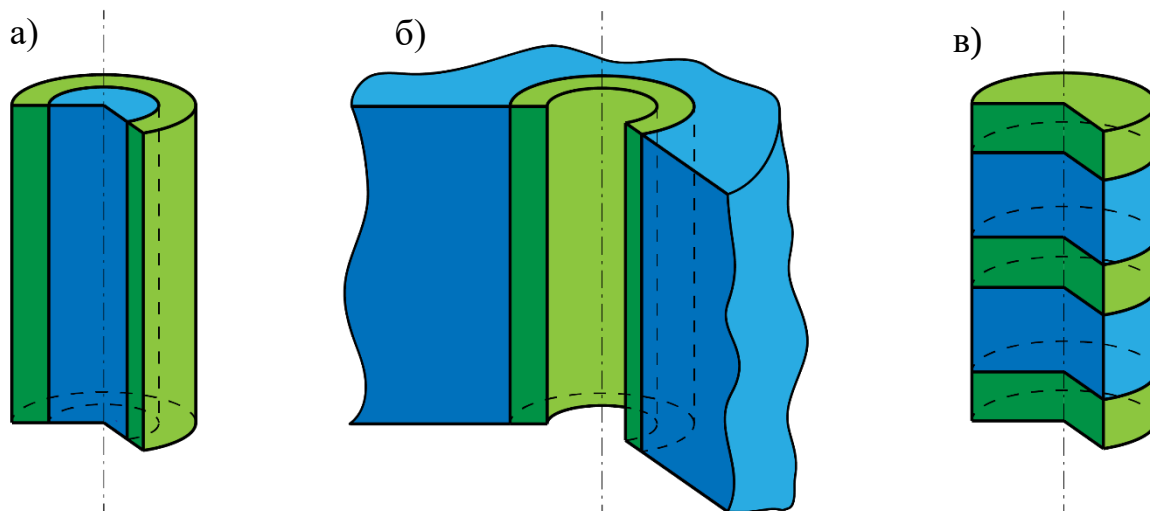


Рис. 1. Квазиодномерные наногетероструктуры в разрезе: а) нанопроволока «ядро-оболочка», б) внедрённая нанотрубка, в) сегментированная нанопроволока. Различные цвета соответствуют различным материалам.

Цель работы

Целью данной работы был анализ условий и особенностей релаксации напряжений несоответствия за счет формирования ПДП в наноразмерных композиционных материалах: нанопроволоках типа «ядро-оболочка», внедрённых нанотрубках и сегментированных нанопроволоках.

Задачи работы

Для достижения указанной цели необходимо было решить ряд задач:

- 1) Получить в удобном виде аналитические решения для полей напряжений, создаваемых ПДП в бесконечном упругом цилиндре со свободной поверхностью, а также выражения для соответствующей упругой энергии ПДП;
- 2) С использованием полученных решений определить критические условия начала релаксации напряжений несоответствия в нанопроволоке типа «ядро-оболочка» за счет образования первой ПДП;
- 3) Найти энергию взаимодействия двух ПДП в цилиндре и равновесный период бесконечного периодического ряда ПДП;
- 4) Получить аналитические решения для полей напряжений и упругой энергии ПДП, расположенной вокруг цилиндрического канала в бесконечном упругом пространстве;

- 5) Пользуясь этими решениями, найти критические условия формирования ПДП на границе матрицы и погружённой в неё нанотрубки;
- 6) Вычислить энергию образования ПДП вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке;
- 7) Определить и исследовать критические условия образования ПДП в такой системе.

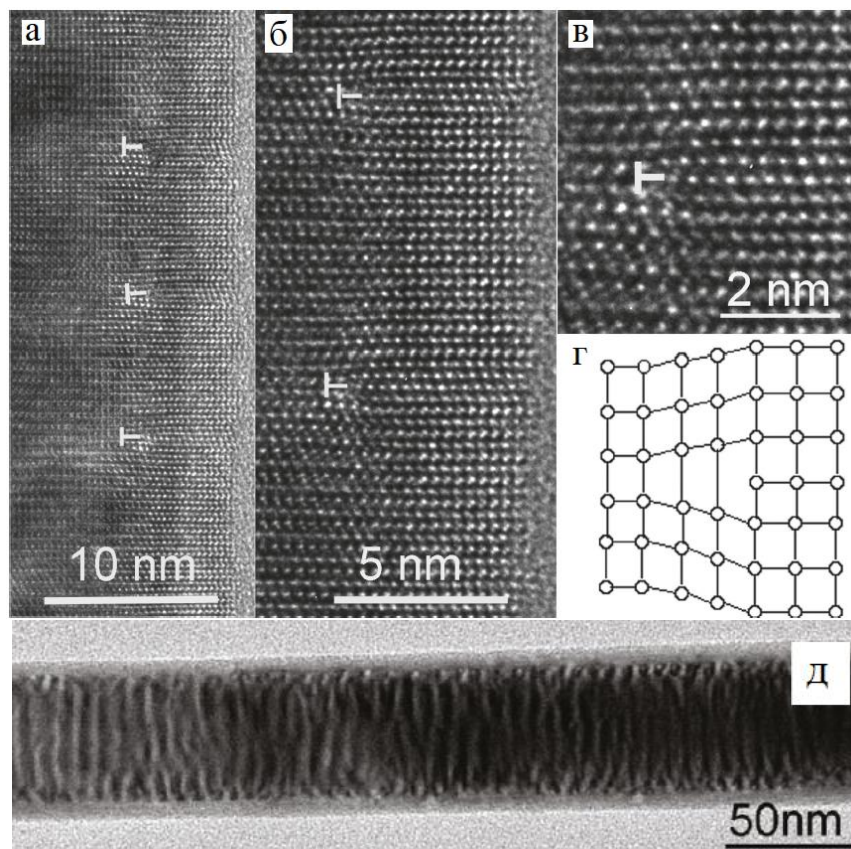


Рис. 2. Петли дислокаций несоответствия в нанопроволоке InAs-GaAs типа «ядро-оболочка»: а–в) электронно-микроскопические изображения межфазной границы InAs/GaAs в продольном сечении нанопроволоки в прямом разрешении при разных увеличениях, г) схематичное изображение отдельной краевой дислокации, д) муаровый контраст на срединном участке нанопроволоки; из работы [1].

Методы исследования

При выполнении работы применялись методы теории дефектов и линейной изотропной теории упругости. Решение громоздких систем уравнений и подготовка иллюстративных материалов выполнялись с помощью программного пакета Wolfram Mathematica.

Научная новизна

Несмотря на то, что первые теоретические исследования образования ПДП как канала релаксации напряжений несоответствия в квазиодномерных

композитных наночастицах были проведены почти 20 лет назад, большинство из них было ограничено рассмотрением лишь одиночных ПДП. При этом не уделялось внимания формированию сразу нескольких петель вдоль оси нанопроволоки. Задача нахождения параметров равновесного распределения ПДП в подобных гетероструктурах не рассматривалась вовсе. В настоящей диссертации получено новое компактное аналитическое решение для упругих полей, которые создаёт ПДП в упруго-однородном цилиндре, на его основе вычислены соответствующие энергетические характеристики; найдены и исследованы критические условия зарождения первой ПДП на межфазной границе в нанопроволоке «ядро-оболочка»; впервые получено компактное аналитическое выражение для энергии парного взаимодействия ПДП в упруго-однородном цилиндре; впервые получены параметры равновесного распределения ПДП, образующихся в процессе релаксации напряжений несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка», которые хорошо согласуются с экспериментом; впервые получено аналитическое выражение для полей напряжений и энергии деформации, которые создаёт ПДП, расположенная соосно вокруг цилиндрического канала в бесконечном пространстве; впервые определены критические условия формирования такого дефекта на границе матрицы и внедрённой в неё нанотрубки из инородного материала; впервые вычислена энергия взаимодействия межфазной границы в сегментированной нанопроволоке и ПДП, находящейся от неё на некотором удалении; показано, что формирование дефекта такой конфигурации является эффективным каналом релаксации напряжений несоответствия в сегментированной нанопроволоке.

Значимость

Теоретическая значимость работы состоит в развитии континуальных моделей реальных квазиодномерных наноструктур в механике неоднородных материалов. В частности, впервые вычислены упругие поля, которые соосная призматическая дислокационная петля генерирует вблизи цилиндрического канала в бесконечном пространстве.

Практическая значимость работы заключается в разработке теоретических моделей релаксации напряжений несоответствия в важных для практики квазиодномерных функциональных наногетероструктурах и в построении на их основе диаграмм, с помощью которых можно давать практические рекомендации по выращиванию наноструктур улучшенного качества, в том числе бездефектных.

Достоверность

Достоверность полученных результатов подтверждается тем, что они были получены с использованием хорошо апробированных методов пространственной линейной теории упругости и континуальных моделей теории дефектов. Численные расчеты выполнялись с помощью стандартного программного пакета Wolfram Mathematica. Найденные аналитические решения граничных задач теории упругости о круговых призматических дислокационных петлях, расположенных в цилиндре и вокруг цилиндрической полости, удовлетворяют уравнениям

равновесия и граничным условиям. Расчетный период равновесного распределения петель дислокаций несоответствия в нанопроволоке типа «ядро-оболочка» InAs-GaAs, найденный при помощи разработанных моделей, хорошо соответствуют прямым экспериментальным наблюдениям.

Личный вклад автора

Все представленные в диссертации результаты получены автором лично или в составе группы. При этом личный вклад автора был определяющим.

Апробация

Результаты, полученные в процессе подготовки работы, прошли апробацию на следующих международных и всероссийских конференциях:

– LXIV Международная конференция «Актуальные проблемы прочности», 2022, Екатеринбург, Россия;

– Saint-Petersburg Photonic, Optoelectronic & Electronic Materials Hybrid Onsite-Online Conference 2021 (SPb-POEM 2021). 2021, Санкт-Петербург, Россия;

– XI Международная конференция «Фазовые превращения и прочность кристаллов» памяти академика Г. В. Курдюмова. (ФППК-2020) 2020, Черноголовка, Россия;

– 22-я молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике. 2020, Санкт-Петербург, Россия;

– 47, 48, 50th International Summer School-Conference «Advanced Problems in Mechanics» (APM 2019, 2020, 2022). 2019, 2020, 2022, Санкт-Петербург, Россия;

– International Conference «Advanced Materials Week 2019» (AMW 2019). 2019, Санкт-Петербург, Россия;

– International Conference “Mechanisms and Non-Linear Problems of Nucleation and Growth of Crystals and Thin Films” (2019). 2019, Санкт-Петербург, Россия.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 3 работы в научных журналах, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science, а также 9 статей и тезисов конференций, входящих в РИНЦ. Список публикаций приведён в конце автореферата.

Структура и объём работы

Работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы и трёх приложений. Общий объём диссертации составляет 110 страниц, включая 25 рисунков. Список литературы содержит 173 наименования.

Положения, выносимые на защиту

1. Континуальная модель напряженно-деформированного состояния композитной нанопроволоки типа «ядро-оболочка» с призматическими петлями дислокаций несоответствия (ПДН) на границе раздела позволяет рассчитывать критические параметры нанопроволоки, при которых становится возможным образование таких ПДН, и предсказывать их равновесную плотность. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными наблюдениями ПДН в нанопроволоках InAs-GaAs.
2. Образование равновесного ансамбля ПДН в нанопроволоке InAs-GaAs диаметром 100 нм с толщиной оболочки 15 нм понижает полную энергию нанопроволоки на 31%.
3. Энергия упругого взаимодействия двух круговых призматических дислокационных петель равного диаметра, расположенных соосно в упругом цилиндре, достигает максимальных значений, когда их диаметр составляет 0,75 – 0,77 диаметра цилиндра, и становится пренебрежимо малой, когда расстояние между ПДП превышает 0,75 диаметра цилиндра.
4. Впервые получено аналитическое решение граничной задачи теории упругости о круговой призматической дислокационной петле, окружающей цилиндрическую полость в бесконечной упругой среде. Это решение позволяет исследовать критические условия образования ПДН на границе раздела нанотрубки и окружающей ее матрицы. При заданном значении решеточного несоответствия и малом внешнем диаметре нанотрубки (менее 30–60 нм) ПДН может образоваться, если толщина стенки нанотрубки окажется в интервале между ее двумя критическими значениями, при большем внешнем диаметре – если она превысит некоторое критическое значение.
5. Образование аксиально-симметричных призматических дислокационных петель вблизи плоских границ раздела в сегментированных нанопроволоках может служить эффективным каналом релаксации напряжений несоответствия. При заданном значении решеточного несоответствия образование таких петель возможно, если диаметр нанопроволоки превысит некоторое критическое значение. Оптимальное расстояние от петли до границы составляет порядка 0,15 диаметра нанопроволоки.

Основное содержание работы

Во введении продемонстрирована актуальность темы работы, её научная новизна, установлена цель исследования, показана как теоретическая, так и

практическая значимость. Также здесь изложены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе диссертации представлен обзор исследований, посвящённых релаксации напряжений несоответствия в квазиодномерных наногетероструктурах и некоторых других нанокompозитах. Особое внимание уделяется изучаемым в работе нанопроволокам типа «ядро-оболочка», внедрённым нанотрубкам, а также нанопроволокам с осевой неоднородностью (сегментированным нанопроволокам). Несмотря на то, что в данной работе исследуется только релаксация за счет образования круговых ПДН, в обзоре представлена информация и о других механизмах релаксации, в частности, о формировании прямолинейных краевых дислокаций, клиновых дисклинаций, и их ансамблей. Представлена информация о работах, посвящённых нахождению параметров равновесного распределения дефектов на межфазных границах различных наноструктур.

Во второй главе под названием «Призматические дислокационные петли в нанопроволоке «ядро-оболочка»» подробно описана релаксация напряжений несоответствия в композитной нанопроволоке с радиальной неоднородностью (рис. 3).

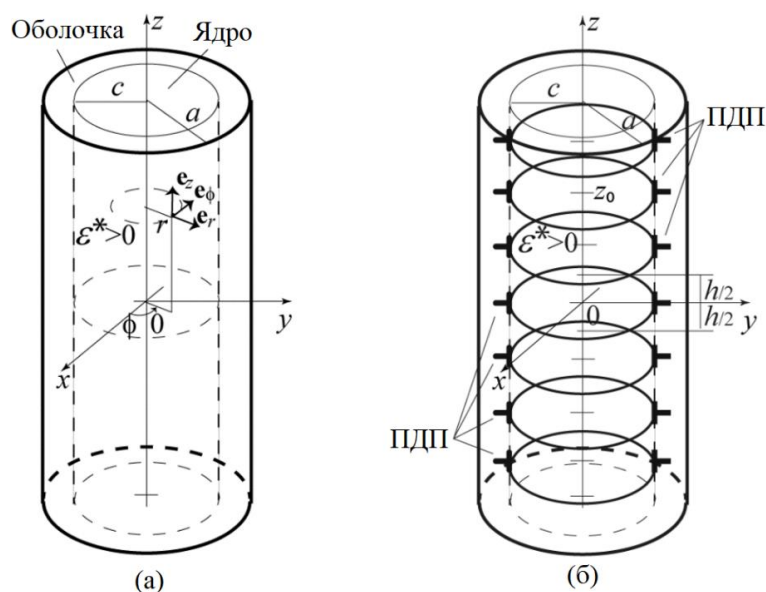


Рис. 3. Нанопроволока «ядро-оболочка» (а) в когерентном состоянии без дефектов и (б) в конечном, релаксированном состоянии с круговыми призматическими петлями дислокаций несоответствия. На этой схеме показаны декартова и цилиндрическая системы координат; c – радиус ядра нанопроволоки, a – радиус оболочки, h – расстояние между ПДП.

Сначала с использованием классического решения задачи о симметрично нагруженном круговом цилиндре [2] получены новые компактные аналитические выражения для полей напряжений ПДП в упругом цилиндре со свободной поверхностью. На рис. 4 представлены карты компонент σ_{rr} и σ_{rz} этих напряжений. Для сравнения приведены карты этих же компонент для ПДП в бесконечном упругом пространстве.

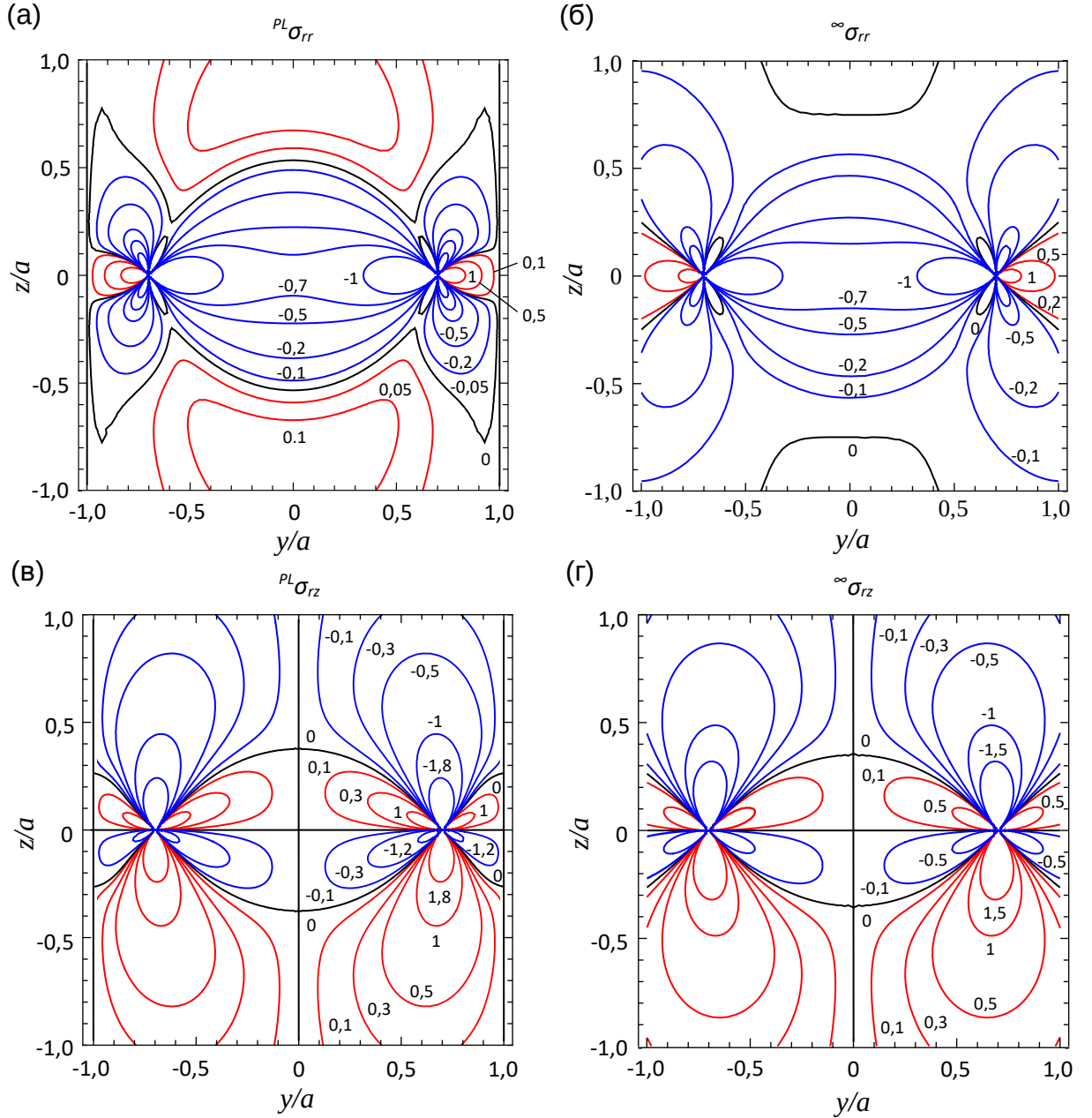


Рис. 4. Карты напряжений σ_{rr} (а,б) и σ_{rz} (в,г) ПДП внедрения, расположенной в упруго-изотропном цилиндре со свободной поверхностью (а,в) и в бесконечном упругом пространстве (б,г), в плоскости $x = 0$ при $z_0 = 0$, $c = 0,7a$, $\nu = 0,3$. Напряжения приведены в единицах Gb/a .

С помощью этого решения найдена энергия ПДП в цилиндре в виде:

$$E_{PL} = \frac{Gb^2 a t}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1,08 \gamma t a}{b} - 2t \int_0^\infty \Theta(\beta, t) d\beta \right), \quad (1)$$

$$\Theta(\beta, t) = \frac{\beta^2 t^2 I_0^{*2} + w I_1^{*2} - 2\beta t I_1^* I_0^* (w I_1 K_1 + \beta^2 I_0 K_0)}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2},$$

где G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, γ – безразмерный параметр, варьирующийся от 1 для металлов до 4 для неметаллических материалов,

позволяющий учесть энергию ядра, $I_0^* = I_0(t\beta)$, $I_1^* = I_1(t\beta)$, $I_0 = I_0(\beta)$, $I_1 = I_1(\beta)$, $K_0 = K_0(\beta)$, $K_1 = K_1(\beta)$. Здесь $K_0(\beta)$ и $K_1(\beta)$ – модифицированные функции Бесселя второго рода (функции Макдональда), $w = \beta^2 - 2\nu + 2$.

С учётом выражения (1) получено изменение энергии ΔE при формировании одиночной ПДП несоответствия в нанопроволоке типа «ядро-оболочка»:

$$\Delta E = \frac{Gb^2at}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1,08\gamma ta}{b} - 2t \int_0^\infty \Theta(\beta, t) d\beta \pm \frac{4(1+\nu)\pi f a}{b} (1-t^2)t \right). \quad (2)$$

Здесь f – параметр решеточного несоответствия материалов ядра и оболочки, $f = (a_{core} - a_{shell})/a_{shell}$, где a_{core} и a_{shell} – параметры атомных решёток материалов ядра и оболочки соответственно. Последнее слагаемое в больших скобках представляет собой энергию взаимодействия ПДП с полем напряжений несоответствия. Знак «плюс» соответствует случаю, когда $f > 0$ и образуется ПДП вычитания, знак «минус» – когда $f < 0$ и образуется ПДП внедрения. На рис. 5 дана карта ΔE в координатах (t, f) , на которой контур $\Delta E = 0$ отделяет область когерентного состояния нанопроволоки, где $\Delta E > 0$ и формирование ПДП несоответствия энергетически не выгодно, от области релаксированного состояния с $\Delta E < 0$, где формирование ПДП несоответствия энергетически выгодно. Фактически этот контур представляет собой зависимость $f(t)$, которая позволяет либо вычислить критические размеры нанопроволоки для любого значения f (т. е. для любой выбранной пары материалов), либо определить критическое

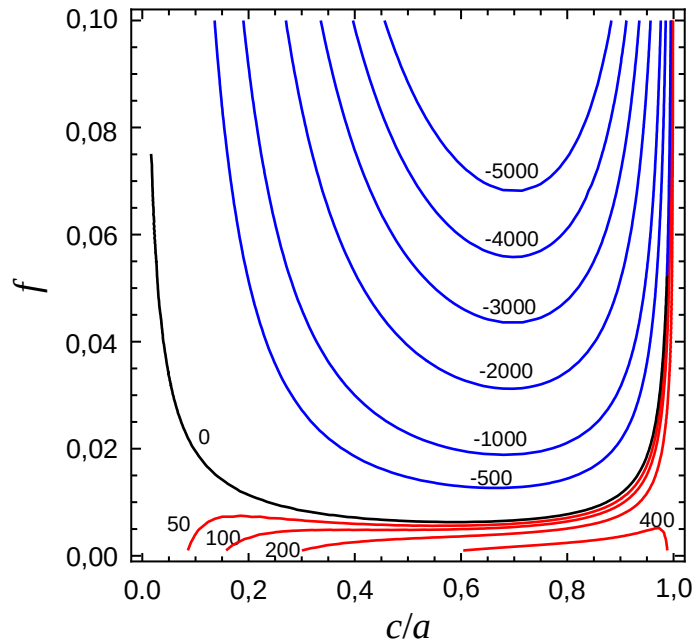


Рис. 5. Карта изменения энергии ΔE нанопроволоки типа «ядро-оболочка», вызванного формированием одиночной ПДП несоответствия, в координатах приведённого радиуса ядра $t = c/a$ и параметра несоответствия f для $a = 50$ нм, $\nu = 0,3$, $\gamma = 1$, $b = 0,3$ нм. Значения ΔE даны в единицах Gb^3 .

несоответствие f_c для выбранных t и a (или c). Видно, что для любого радиуса нанопроволоки a существует определённое значение t , которому соответствует локальный минимум $f_{\min}$ ($f_{\min} \approx 0,0065$ на рис. 5), такой что при $f < f_{\min}$ в нанопроволоке данного радиуса образование ПДП не возможно.

Для любого выбранного значения $f > f_{\min}$, функция $f(t)$ позволяет определить два критических значения отношения радиусов ядра и оболочки t_{c1} и t_{c2} , в интервале между которыми возможно образование ПДП.

Равновесное состояние ансамбля ПДП в нанопроволоке типа «ядро-оболочка» соответствует минимуму полной энергии такой системы. Поскольку в работе рассматривается модель бесконечно длинной нанопроволоки с дискретным распределением ПДП, исследовалась энергия, приходящаяся на один период h ряда ПДП (см. рис. 3б). Полная энергия $E_{h,final}$ одного периода нанопроволоки после релаксации состоит из погонной энергии $\tilde{E}_{core}$ ядра нанопроволоки, умноженной на длину периода h , энергии E_{PL} ПДП, расположенной в центре периода, энергии взаимодействия ПДП и поля несоответствия, а также из суммы энергий парных взаимодействий петли из центра периода с остальными петлями ансамбля:

$$E_{h,final} = h\tilde{E}_{final} = h\tilde{E}_{core} + E_{PL} + E_{PL-core} + \sum_{k=1}^{\infty} E_{PL-kPL}. \quad (3)$$

Для определения последнего слагаемого в формуле (3) была найдена энергия взаимодействия двух соосных петель одного радиуса в цилиндре:

$$E_{PL-PL} = \frac{Gb^2at}{(1-\nu)} \left(\pi \int_0^{\infty} J_1^2(\kappa) \left(1 + \frac{h}{c} \kappa\right) e^{-\frac{h}{c}\kappa} d\kappa - 2t \int_0^{\infty} \Theta(\beta, t) \cos(\beta\tilde{h}) d\beta \right), \quad (4)$$

где h – расстояние между ПДП, и $\tilde{h} = h/a$. Остальные обозначения – те же, что в формуле (1). Графики зависимости этой энергии от приведённого радиуса петель $t = c/a$ и от приведённого расстояния между ними h/a при наружных диаметрах цилиндра $2a = 10, 50$ и 100 нм показаны на рис. 6. Из графиков на рис. 6а видно, что существует такое значение t , при котором E_{PL-PL} максимальна для ПДП одного типа и минимальна для ПДП разных типов. При различных a эти значения t близки и находятся в диапазоне 0,75–0,77. Из рис. 6б видно, что при $h > 1,5a$ энергия упругого взаимодействия ПДП становится пренебрежимо малой. Кроме того, при $h > 2a$ взаимодействие петель практически исчезает.

На рис. 7 приведена полученная численно по формуле (3) с учетом выражения (4) зависимость полной энергии $\tilde{E}_{final}$ от h для двух значений несоответствия: $f = 0,0667$ и $0,0717$. Видно, что обе кривые имеют выраженные минимумы, которым соответствуют равновесные значения h . Полученные расчетные значения 8,35–9,05 нм равновесного расстояния между ПДН хорошо согласуются с результатами экспериментальных наблюдений – 7,0–8,5 нм [1]. При этом показано, что образование равновесного ансамбля ПДН в нанопроволоке InAs-GaAs диаметром 100 нм с толщиной оболочки 15 нм понижает полную энергию нанопроволоки на 31% (научное положение №2).

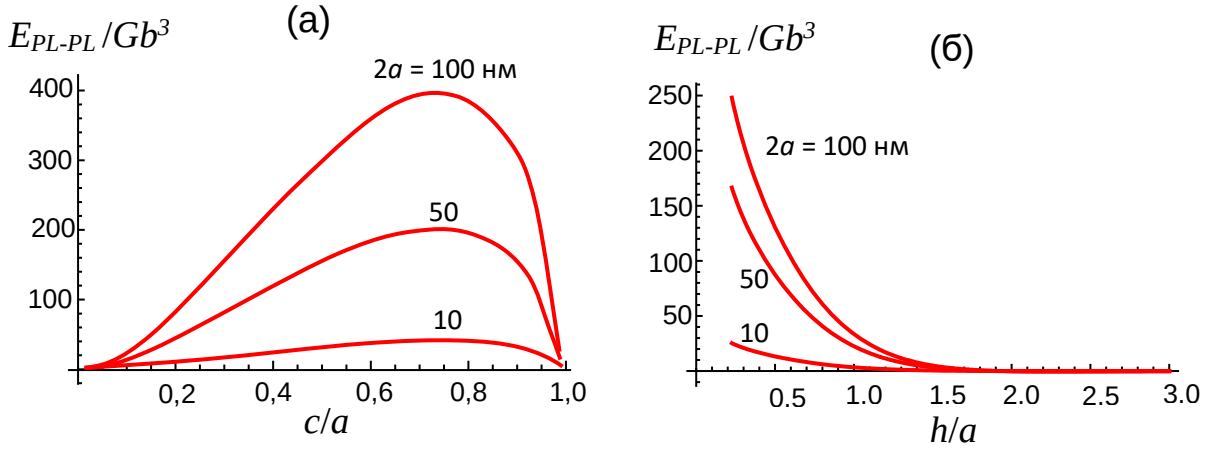


Рис. 6. Зависимость энергии E_{PL-PL} парного взаимодействия ПДП в цилиндре от приведённого радиуса ПДП $t = c/a$ для $h/a = 0,1$ (а) и от приведённого расстояния между петлями h/a для $t = 0,7$ при $2a = 10, 50$ и 100 нм (б). Расчеты выполнялись для значений $b \approx 0,3$ нм и $\nu = 0,3$.

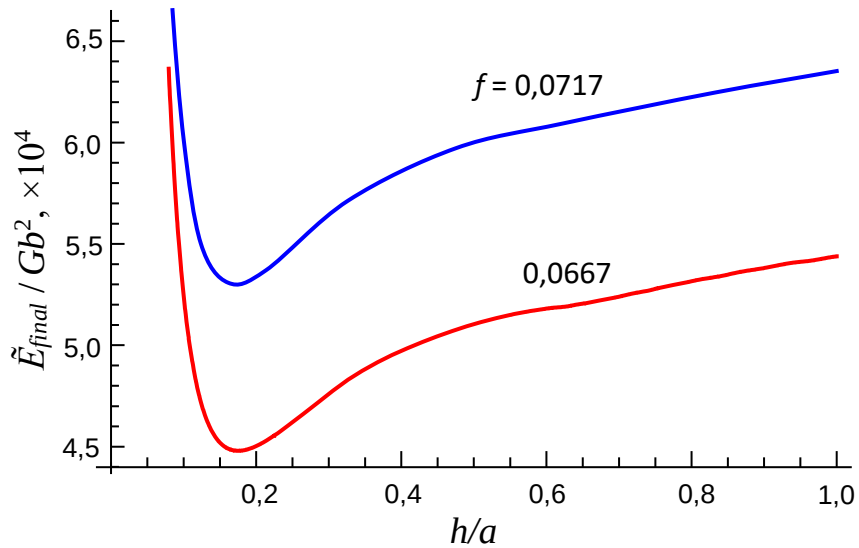


Рис. 7. Зависимость энергии $\tilde{E}_{final}$ частично релаксированной нанопроволоки с ядром InAs и оболочкой GaAs диаметром $2a = 100$ нм от приведённого расстояния h/a между ПДН для двух значений несоответствия, $f = 0,0667$ и $0,0717$, при $\nu = 0,3$.

Третья глава, названная «Призматические дислокационные петли в каналах с покрытием», посвящена изучению ПДП на границе внедрённой нанотрубки и бесконечной матрицы (рис. 8).

В этой главе дано решение граничной задачи теории упругости для круговой ПДП, соосной цилиндрическому каналу в бесконечном упругом пространстве, найдены поля напряжений (рис. 9) и упругая энергия ПДП. На основе полученных решений разработана теоретическая модель релаксации напряжений несоответствия за счет формирования ПДП вокруг нанотрубки, внедренной в бесконечную матрицу, и исследованы критические условия реализации этого

процесса. При этом рассмотрены два способа получения такой наноструктуры. В первом случае радиус канала a остаётся неизменным, а радиус межфазной

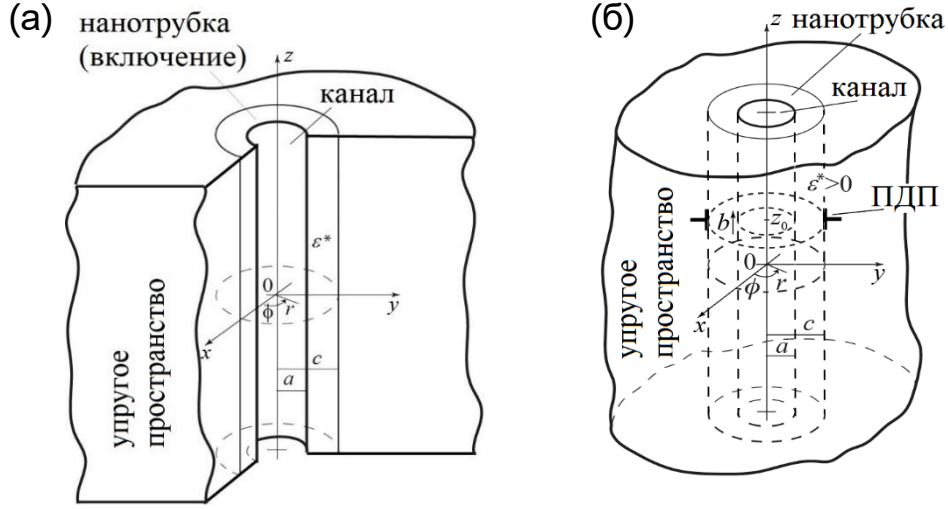


Рис. 8. Модель нанотрубки, внедрённой в материал, в виде полого включения с несоответствием в бесконечном упругом пространстве; (а) до релаксации напряжений несоответствия, (б) после формирования ПДП несоответствия на границе нанотрубки и матрицы. Показаны декартова и цилиндрическая системы координат; c – радиус межфазной границы, a – радиус канала.

цилиндрической границы c увеличивается, во втором случае, наоборот, фиксируется исходный радиус c канала, но канал при этом зарастает, и его текущий радиус a уменьшается. Первый случай соответствует диффузии атомов второй фазы вглубь материала матрицы. Второй – наращиванию слоя нового материала на цилиндрической поверхности исходного канала. Для обоих случаев построены карты изменения энергии системы при формировании в ней одиночной ПДП (рис. 10). Черные кривые на этих картах соответствуют нулевому значению $\Delta E = 0$ и отделяет области $\Delta E < 0$, в которых формирование ПДП энергетически выгодно, от областей $\Delta E > 0$, в которых оно не выгодно. Такая кривая на рис. 10а показывает зависимость $f(\tau_c)$, где τ_c – критическое значение отношения радиусов петли и канала $\tau = c/a$. Пользуясь этой кривой, можно предсказать критический радиус c_c или критическую толщину стенки $h_c = c_c - a$ внедрённой в матрицу нанотрубки (при известном внутреннем радиусе a и величине несоответствия f), при которых $c > c_c$ или $h > h_c$, и формирование ПДП становится энергетически выгодным. Аналогично, с использованием карты 10б, можно отследить изменения энергии системы при изготовлении нанотрубки путём осаждения покрытия на внутреннюю поверхность канала от $a \approx c$ ($\tau^{-1} \approx 1$) до полного зарастания канала и фактического превращения внедрённой в матрицу нанотрубки в нанопроволоку ($\tau^{-1} = a = 0$). Как и на рисунке 10а, здесь кривая $\Delta E = 0$ показывает зависимость $f(\tau_c^{-1})$, где τ_c^{-1} – критическое значение соотношения $\tau^{-1} = a/c$. С помощью этой кривой можно найти критический радиус внутреннего канала внедрённой в матрицу нанотрубки

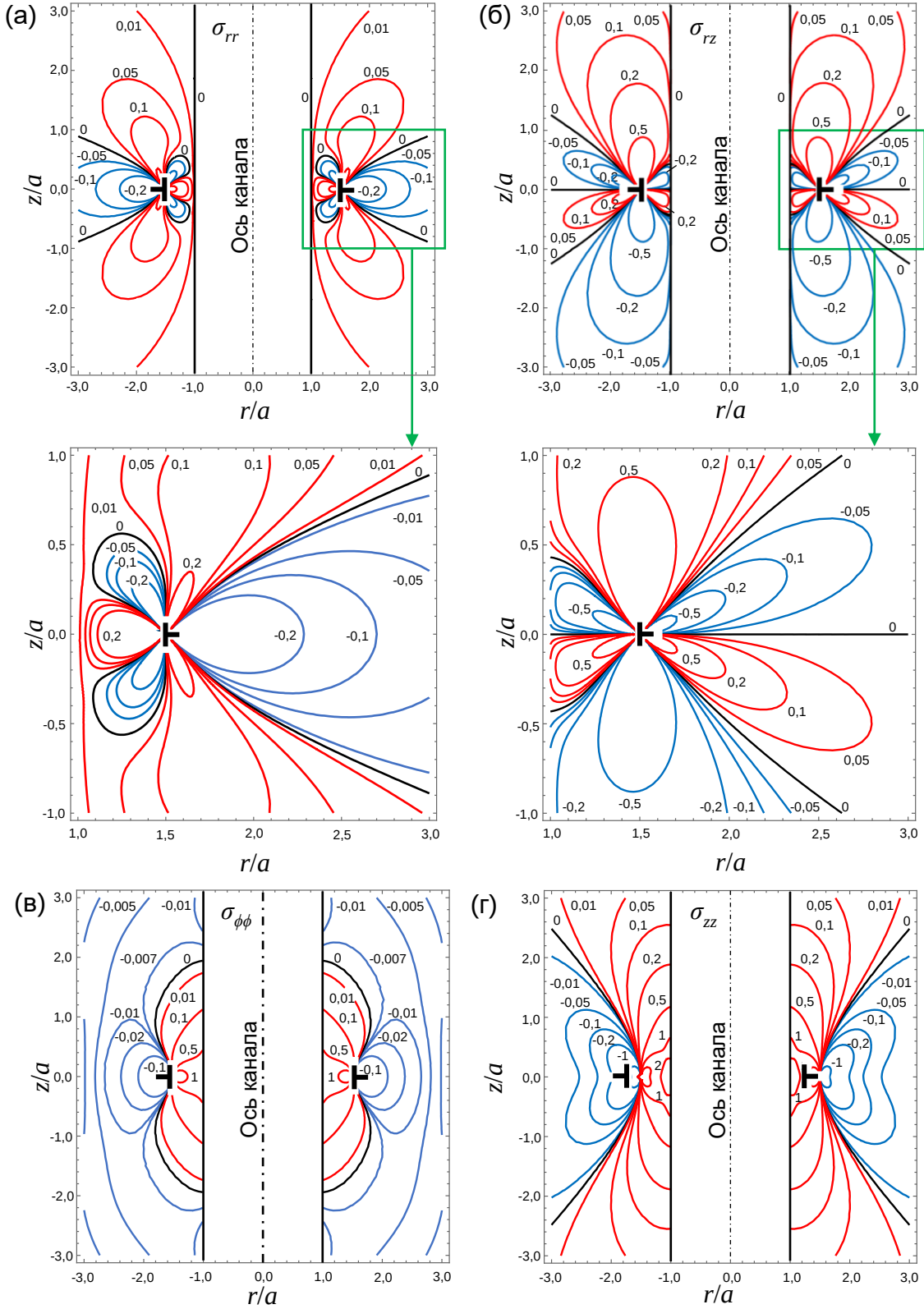


Рис. 9. Карты компонент напряжений σ_{rr} (а), σ_{rz} (б), $\sigma_{\phi\phi}$ (в) и σ_{zz} (г) от ПДП вычитания радиусом $c = 1,5a$, окружающей цилиндрический канал радиусом a . Для компонент σ_{rr} и σ_{rz} , также показаны увеличенные фрагменты карт. Значения напряжений даны в единицах Gb/a .

(для её заданного радиуса c и величины несоответствия f), при котором формирование ПДП становится энергетически выгодным.

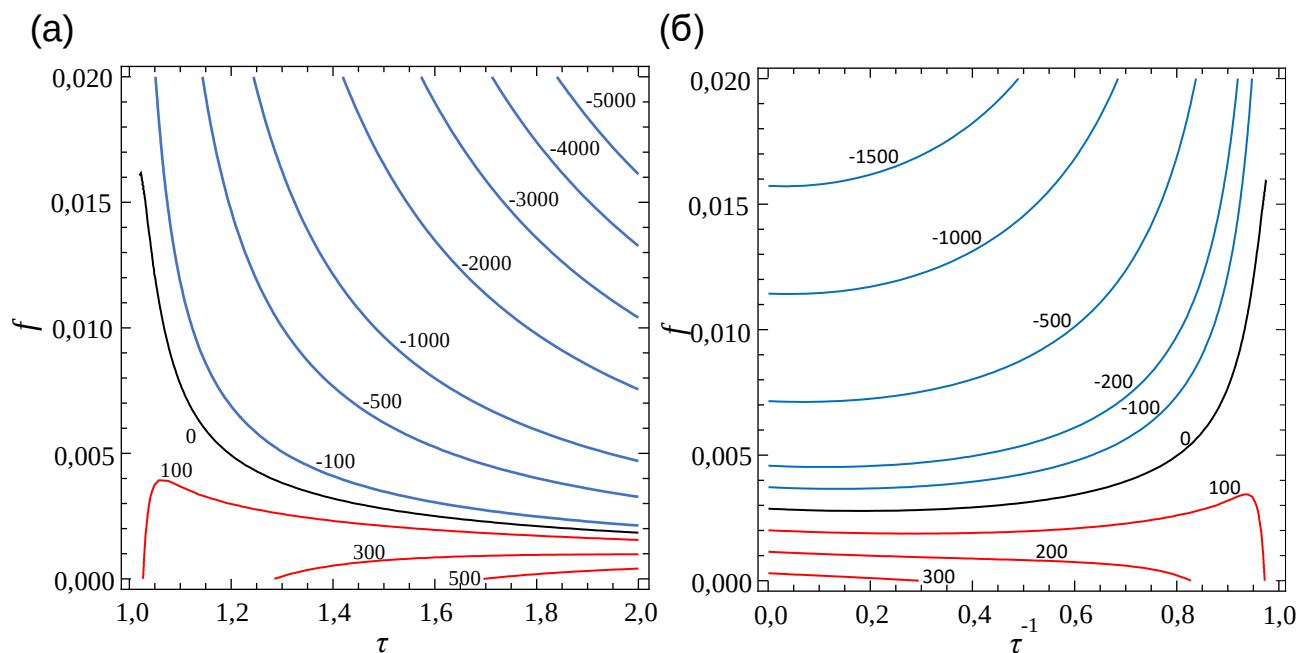


Рис. 10. Карты изменения энергии ΔE при образовании ПДП несоответствия на границе нанотрубки и матрицы в координатах $\tau = c/a$ и f при фиксированном внутреннем радиусе нанотрубки $a = 100b$ (а) и в координатах $\tau^{-1} = a/c$ и f при фиксированном исходном радиусе канала $c = 100b$. Расчеты выполнялись для значений $\nu = 0,3$ и $\gamma = 1$. Значения энергии даны в единицах Gb^3 .

В четвёртой главе «Призматическая дислокационная петля вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке» рассматривается модель релаксации напряжений несоответствия в нанопроволоке с осевой неоднородностью за счет образования ПДП на некотором удалении от границы раздела материалов (рис. 11). В работе [3] были рассчитаны упругие поля и энергии, создаваемые несоответствием f в сегментированной нанопроволоке. Анализ распределения упругих полей в такой гибридной наноструктуре позволил сделать предположение о возможности зарождения ПДП у межфазной границы.

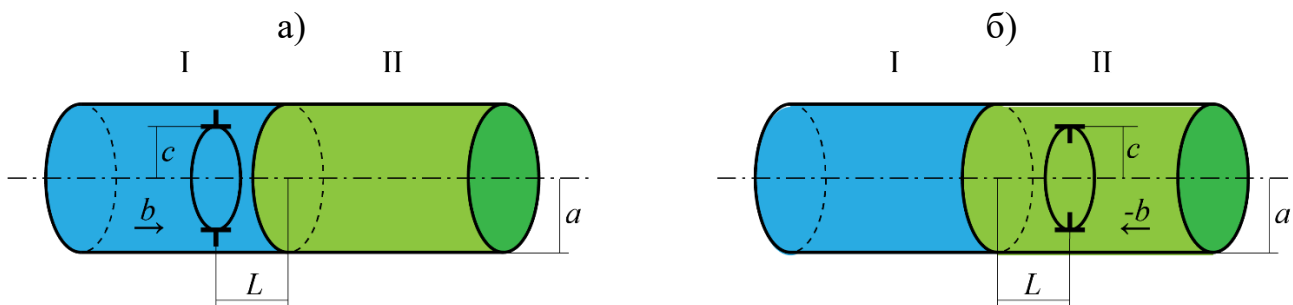


Рис. 11. Схема образования круговых ПДП вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке при $a_I > a_{II}$, где a_I и a_{II} – параметры кристаллических решёток сегментов I и II: (а) ПДП вычитания в области осевого сжатия, (б) ПДП внедрения в области осевого растяжения.

Для определения условий образования ПДП была найдена энергия ее взаимодействия с упругим полем межфазной границы:

$$E_{\text{int}} = - \int_V \varepsilon_{PL}^* \sigma_{zz} dV = -2\pi(\pm b) \int_0^c \sigma_{zz} \Big|_{z=L} r dr = \mp \frac{4G(1+\nu) f b a^2 t}{1-\nu} \int_0^\infty \frac{t I_0^* I_1 - I_0 I_1^*}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2} \sin \frac{L}{a} \beta d\beta, \quad (5)$$

где ε_{PL}^* – собственная дисторсия ПДП, σ_{zz} – осевое напряжение, возникающее из-за границы раздела двух фаз в сегментированной нанопроволоке, найденное в работе [3], b – величина вектора Бюргерса ПДП, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, f – параметр несоответствия, a – радиус нанопроволоки, c – радиус ПДП, $t = c / a$, $w = (\beta^2 - 2\nu + 2)$, $I_{0,1} = I_{0,1}(\beta)$, $I_{0,1}^* = I_{0,1}(t\beta)$. Здесь $I_{0,1}(\beta)$ и $I_{0,1}(t\beta)$ – модифицированные функции Бесселя первого рода. Знак «минус» в правой части (5) соответствует ПДП внедрения, знак «плюс» – ПДП вычитания.

Анализ изменения полной энергии системы при образовании ПДП вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке показал, что формирование ПДП может служить эффективным каналом релаксации напряжений несоответствия. Критическими условиями релаксации являются либо превышение величиной несоответствия f некоторого критического значения f_c при заданном радиусе нанопроволоки a , либо превышение радиусом нанопроволоки a некоторого критического значения a_c при заданном значении несоответствия f . На рис. 12 приведена зависимость критического радиуса нанопроволоки от величины несоответствия.

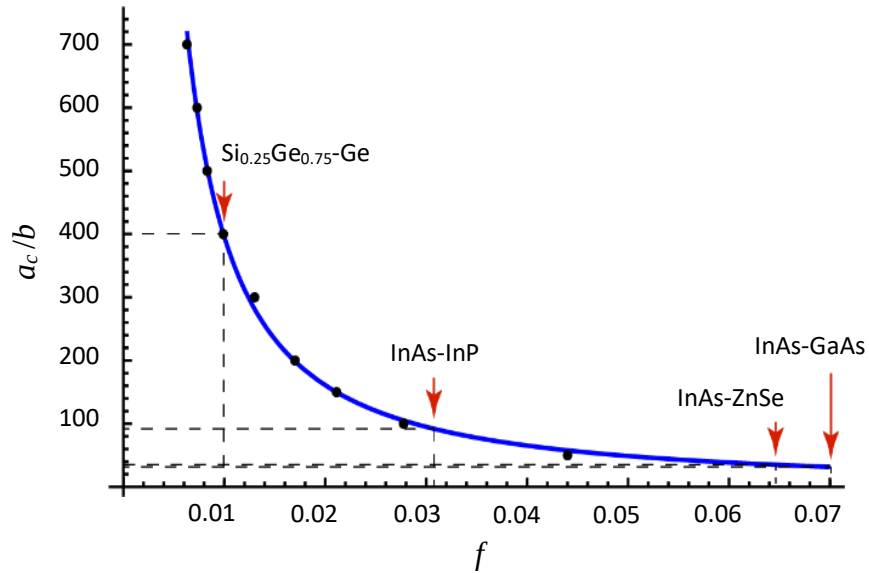


Рис. 12. Зависимость критического радиуса a_c сегментированной нанопроволоки от величины несоответствия f составляющих ее материалов при $\nu = 0,3$. Показаны расчетные точки и аппроксимирующая их кривая. Стрелками отмечены значения (f, a_c) для наиболее употребимых полупроводниковых материалов.

Для любой пары материалов с несоответствием f , составляющих сегментированную нанопроволоку, формирование ПДП энергетически невыгодно

при $a < a_c$. Аналогично, для любого радиуса a сегментированной нанопроволоки существует такое критическое значение несоответствия f_c , что при $f < f_c$ формирование ПДП энергетически невыгодно. С ростом радиуса нанопроволоки критическая величина несоответствия уменьшается.

Заключение

Подводя итоги исследований, проведённых в рамках диссертационной работы, перечислим основные полученные результаты:

- получены новые компактные аналитические решения для упругих полей, которые создает круговая призматическая дислокационная петля (ПДП), расположенная в цилиндре со свободной поверхностью и вокруг цилиндрического канала в бесконечном упругом пространстве;
- рассчитаны соответствующие упругие энергии ПДП в цилиндре и вокруг канала;
- определены критические условия начала релаксации напряжений несоответствия за счет образования ПДП в нанопроволоке типа «ядро-оболочка», вокруг внедрённой нанотрубки и в сегментированной нанопроволоке;
- рассчитана энергия взаимодействия двух ПДП в цилиндре со свободной поверхностью;
- найдено равновесное расстояние между соседними ПДП в бесконечном периодическом ряде ПДП несоответствия на гетерогранице в нанопроволоке типа «ядро-оболочка».

Таким образом, все поставленные в работе задачи выполнены, и цель работы достигнута. На основе полученных результатов можно сформулировать следующие общие выводы:

- применение методов классической пространственной теории упругости и микромеханики дефектов позволяет адекватно описывать релаксацию напряжений несоответствия в квазиодномерных наногетероструктурах – нанопроволоках типа «ядро-оболочка», внедренных нанотрубках и сегментированных нанопроволоках;
- образование круговых ПДП является эффективным каналом релаксации напряжений несоответствия в таких наногетероструктурах;
- ограничение величины решеточного несоответствия в этих наногетероструктурах и их поперечных размеров определенными

критическими значениями позволяет выращивать практически бездефектные наногетероструктуры.

Список литературы

1. Popovitz-Biro, R., Kretinin, A., Von Huth, P., Shtrikman, H. InAs/GaAs core-shell nanowires // *Crystal Growth & Design*. 2011. Vol. 11. P. 3858–3865.
2. А.И. Лурье. Пространственные задачи теории упругости. М., Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1955. 491 с.
3. A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin. Elasticity of a cylinder with axially varying dilatational eigenstrain // *Int. J. Sol. Struct.* 2021. Vol. 213. P. 121–134.

Публикации по теме диссертации:

Статьи в журналах, индексируемых в базах данных Scopus и WoS:

1. Chernakov, A.P., Kolesnikova, A.L., Gutkin, M.Yu., Romanov, A.E. Periodic array of misfit dislocation loops and stress relaxation in core-shell nanowires // *International Journal of Engineering Science*. 2020. Vol. 156. Art. No. 103367 (22 pages).
2. Kolesnikova, A.L., Chernakov, A.P., Gutkin, M.Yu., Romanov, A.E. Prismatic dislocation loops in crystalline materials with empty and coated channels // *European Journal of Mechanics – A/Solids*. 2022. Vol. 94. Art. No. 104612 (11 pages).
3. Kolesnikova, A.L., Chernakov, A.P., Gutkin, M.Yu., Romanov, A.E. Misfit strain induced out-of-interface prismatic dislocation loops in axially inhomogeneous hybrid nanowires // *Extreme Mechanics Letters*. 2022. Vol. 56. Art. No. 101861 (5 pages).

Статьи и тезисы в материалах научных конференций (РИНЦ):

1. А.П. Чернаков, М.Ю. Гуткин. Исследование равновесной системы петель дислокаций несоответствия в композитных нанопроволоках // *Неделя науки*

СПБПУ: материалы научной конференции с международным участием, 19-24 ноября 2018 г. Институт прикладной математики и механики. – СПб., ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2018, с. 230-232.

2. A.L. Kolesnikova, A.P. Chernakov, M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. Misfit stress relaxation by dislocation loops in core-shell nanowires // “Saint Petersburg OPEN 2019” – 6th International School and Conference on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures, St. Petersburg, Russia, April 22-25, 2019. Book of Abstracts, Academic University Publishing, St. Petersburg, 2019, p. 38-41.
3. A.L. Kolesnikova, A.P. Chernakov, M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. Misfit stress relaxation by dislocation loops in core-shell nanowires // XLVII International Conference "Advanced Problems in Mechanics", June 24-29, 2019, St. Petersburg. APM-2019, Book of Abstracts, 2019, p. 41-42.
4. A.L. Kolesnikova, A.P. Chernakov, M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. Nucleation and equilibrium density of misfit dislocation loops in core-shell nanowires // International Conference “Mechanisms and Non-Linear Problems of Nucleation and Growth of Crystals and Thin Films”, July 1-5, 2019, St. Petersburg, Russia; Book of Abstracts, p. 152.
5. A.L. Kolesnikova, A.P. Chernakov, M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. Accommodation of misfit strain in core-shell nanowires by equilibrium distribution of prismatic dislocation loops // International Conference “Advanced Materials Week” (AMW-2019), September 17–21, 2019, St. Petersburg, Russia; Abstracts Book, Saint Petersburg, p. 24.
6. A.L. Kolesnikova, A.P. Chernakov, M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov. Misfit stress relaxation by dislocation loops in two-layer nanotubes // International Conference “Advanced Materials Week” (AMW-2019), September 17–21, 2019, St. Petersburg, Russia; Abstracts Book, Saint Petersburg, p. 49.
7. Ан.П. Чернаков, А.Е. Колесникова, М.Ю. Гуткин, А.Е. Романов. Исследование равновесного распределения петель дислокаций несоответствия в композитных нанопроволоках // Физика полупроводников и наноструктур, полупроводниковая опто- и наноэлектроника: тезисы докладов Всерос. науч. молодежн. конф., 23-27 ноября 2020 г. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2020, с. 65.
8. Колесникова А.Л., Гуткин М.Ю., Чернаков А.П., Романов А.Е. Призматическая дислокационная петля в гибридной нанопроволоке с поперечной гетерограницей // LXIV Международная конференция «Актуальные проблемы прочности», 4–8 апреля 2022, Екатеринбург, Россия; доклад О1-23 6.04.22; В кн.: Сборник тезисов LXIV Международной конференции «Актуальные проблемы прочности», 4–8 апреля 2022, Екатеринбург, Россия; с. 74-76.
9. Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Chernakov A.P., Romanov A.E. Strain induced prismatic dislocation loop close to the heterointerface in the hybrid axial

nanowire // L International Conference “Advanced Problems in Mechanics” (APM-2022), June 20-24, 2022; Book of Abstracts, p. 10.