

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
образования

«Национальный исследовательский университет ИТМО»

На правах рукописи



Чернаков Антон Павлович

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

по специальности 1.1.8 – Механика деформируемого твердого тела

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук

Гуткин Михаил Юрьевич

Научный консультант:

доктор физико-математических наук

Колесникова Анна Львовна

Санкт-Петербург, 2022

Оглавление

Введение.....	3
Положения, выносимые на защиту.....	10
Глава II Призматические дислокационные петли в нанопроволоке «ядро-оболочка»	26
2.1. Упругая модель нанопроволоки «ядро-оболочка» до и после формирования ПДП несоответствия.....	26
2.2 Одиночная ПДП в нанопроволоке «ядро-оболочка»	30
2.2.1 Упругие поля и энергия одиночной ПДП в упругом цилиндре	30
2.2.2 Взаимодействие одиночной ПДП с полем напряжений несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка».....	41
2.2.3 Критические условия формирования одиночной ПДП несоответствия на границе ядра и оболочки нанопроволоки	43
2.3 Периодический ансамбль петель дислокаций несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка»	45
2.3.1 Парное взаимодействие ПДП	48
2.3.2 Равновесное расстояние в ансамбле петель дислокаций несоответствия	51
2.4 Выводы по главе	55
Глава III Призматические дислокационные петли в каналах с покрытием	57
3.1 ПДП, охватывающая цилиндрический канал в бесконечном пространстве	57
3.2 Когерентное состояние нанотрубки в бесконечном упругом пространстве	63
3.3 Критические условия формирования ПДП несоответствия на границе нанотрубки и матрицы	65
3.4 Выводы по главе	70
Глава IV Призматическая дислокационная петля вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке	72
4.1 Энергия ПДП, расположенной вблизи межфазной границы в СНП.....	72
4.2 Выводы по главе	81
Заключение	81
Список литературы	82
Приложение А. Связь интегралов Лифшица-Ханкеля и эллиптических интегралов	103
Приложение Б. Фурье-образы компонент напряжения петли дислокаций несоответствия.....	104
Приложение В. Проверка уравнений (2.31а) и (2.31б).....	108

Введение

Одномерные композитные наноструктуры обладают рядом уникальных свойств, привлекающих большое внимание к их производству и изучению. В настоящее время подобные наноструктуры находят своё применение в электронике, оптоэлектронике, фотонике, катализе, медицине, и 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 напряжений, вызванных несоответствием параметров атомных решёток материалов, входящих в состав наноструктуры, либо разностью их коэффициентов линейного теплового расширения. Релаксация напряжений несоответствия, возможная при выполнении особых энергетических условий, снижает суммарную энергию наноструктуры, но порождает дефекты в ней. Данный процесс (релаксация напряжений несоответствия с образованием дислокационных дефектов) активно исследуется применительно к различным видам наноструктур и дефектов: известно большое количество работ, посвящённых образованию дислокаций несоответствия в плоских наногетероструктурах (эпитаксиальных слоях), значительно меньше – сферически симметричным композитным наночастицам. Квазиодномерные наногетероструктуры, которым посвящена данная диссертация, оказались охвачены подобными исследованиями только в начале XXI века.

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

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). 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.

Всё сказанное ранее говорит об актуальности темы данной работы.

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.

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:

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.

Положения, выносимые на защиту

– 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.

– Образование равновесного ансамбля ПДН в нанопроволоке InAs-GaAs диаметром 100 нм с толщиной оболочки 15 нм понижает полную энергию нанопроволоки на 31%.

– 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.

– 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.

– 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.

Глава I

Обзор литературы

В настоящее время синтез одномерных наноструктур (или нанопроволок (НП)) привлекает всё большее внимание из-за их выдающихся свойств, связанных с малыми размерами порядка десятков нанометров при длинах до миллиметра, а также широкими возможностями по выбору их химического состава. Необычные и, во многих случаях, уникальные электронные, оптические, магнитные и механические свойства нанопроволок открывают широкий спектр применения данных структур в наноэлектронике, оптоэлектронике, плазмонике, медицинской диагностике, доставке действующих веществ лекарств и химическом анализе [1-13].

Различные отрасли науки и промышленности предъявляют спрос на нанопроволоки, состоящие из двух или более материалов с различными физическими и химическими свойствами. Подобные гетероструктуры могут быть разделены на три группы: осевые гетероструктуры, у которых границы перпендикулярны оси нанопроволоки [14,15] радиальные гетероструктуры (или, иначе говоря, нанопроволоки «ядро-оболочка») с цилиндрическими межфазными границами [16], а также призматические или Янус-гетероструктуры с плоскими межфазными границами, параллельными оси нанопроволоки [17-21]. Наличие неоднородностей в гетероструктурах приводит к появлению упругих напряжений и напряжений несоответствия, которые вызываются разностью параметров атомных решёток фаз, из которых состоит нанопроволока, а также к накоплению энергии деформации в материале частицы. В свою очередь, запасённая энергия активирует процессы релаксации, одним из которых является пластическая деформация, сопровождающаяся образованием дислокаций несоответствия на межфазных границах (рис. 1.1).

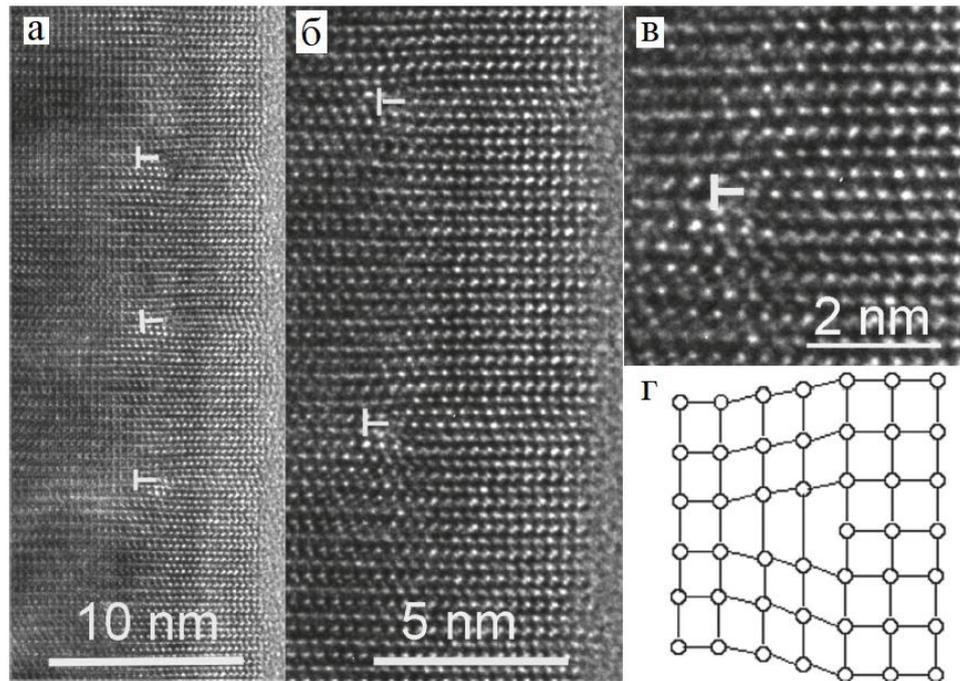


Рис. 1.1. Петли дислокаций несоответствия в нанопроволоке InAs-GaAs типа «ядро-оболочка»: а–в) электронно-микроскопические изображения межфазной границы InAs/GaAs в продольном сечении нанопроволоки в прямом разрешении при разных увеличениях, г) схематичное изображение отдельной краевой дислокации; из работы [22].

В нанопроволоках «ядро-оболочка» (рис. 1.2) в процессе релаксации могут образовываться прямолинейные дислокации несоответствия и призматические дислокационные петли (ПДП) на границах ядра и оболочки, которые можно увидеть в экспериментах, проведённых в работах [22-33].

Для плоских гетероструктур с несоответствием атомных решёток существует большой объём литературы, посвящённой экспериментальным и теоретическим исследованиям релаксации напряжений с формированием дислокаций несоответствия [34]. Цилиндрическим наночастицам, в свою очередь, свойственна осевая, радиальная и призматическая неоднородность, для которых количество исследований весьма ограничено.

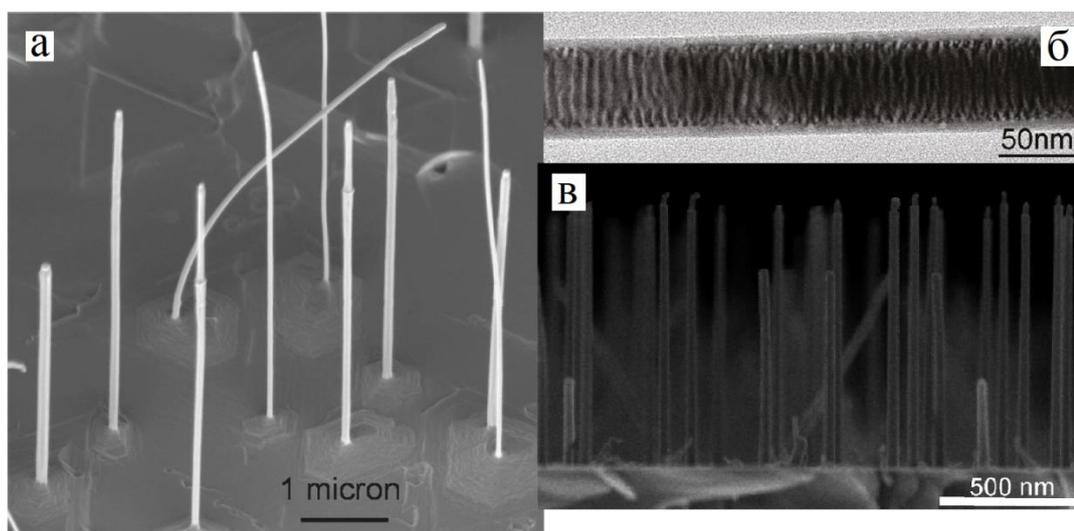


Рис. 1.2. Нанопроволоки типа «ядро-оболочка». а) СЭМ-изображение выращенных на подложке нанопроволок с ядром GaAs и оболочкой InAs; б) ПЭМ-изображение срединного участка композитной нанопроволоки InAs-GaAs; из работы [22]. в) СЭМ-изображение выращенных на подложке нанопроволок Ge с осаждённым на них Si; из работы [23].

Набарро в 1970 году был первым [17], кто сформулировал основные задачи формирования дислокаций несоответствия в системе из подложек и плёнок цилиндрического сечения с плоской границей. Затем, в 1992 году, были выведены [35] аналитические формулы для напряжений несоответствия в цилиндрической Янус-частице, а также проанализированы условия формирования одиночной краевой дислокации несоответствия на плоской границе внутри цилиндра.

Рассмотрим более подробно задачи, связанные с нанопроволоками «ядро-оболочка», так как именно им посвящена II глава диссертации. Релаксация напряжений несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка» путём формирования прямолинейных дислокаций несоответствия была впервые рассмотрена в работе [36]. Был определён набор геометрических параметров таких как радиус нанопроволоки, толщина оболочки и параметр несоответствия, при которых зарождение дислокации несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка» становится энергетически выгодным. Позднее другими авторами для изучения критических условий зарождения прямолинейных дислокаций были применены другие теоретические модели и методы [37-43].

Релаксация напряжений в нанопроволоках «ядро-оболочка» также включает процесс образования ПДП несоответствия. По этой причине совершенно необходимым для подробного изучения процесса релаксации является знание упругих свойств, т.е. упругих полей и связанных с ними энергий, генерируемых ПДП в упругом цилиндре, моделирующем нанопроволоку или стержень. Ранее несколько научных групп работало в этой области [44-50].

Первопроходцами в задачах анализа дефектов в пентагональных нитевидных кристаллах, смоделированных как цилиндры с дисклинацией, стали Полонский и Романов [44], изучившие механизм, при котором в результате формирования ПДП уменьшаются напряжения, вызванные наличием положительной частичной клиновой дисклинации, расположенной на оси цилиндра. Спустя годы задача была решена вновь, на этот раз – другим методом [46].

Идея рассмотреть релаксацию напряжений несоответствия в квантовых точках и проволоках при помощи ПДП была выдвинута и реализована Колесниковой и Романовым [51]. Авторы рассмотрели несоответствие параметров атомных решёток между квантовыми точками (проволоками) и окружающей матрицей, а также энергию круговой ПДП на поверхности включения, а также вычислили критические радиусы квантовой точки и проволоки, при которых начинается релаксация.

Овидько и Шейнерман [45] внесли значительный вклад в исследование дефектов в нанопроволоках «ядро-оболочка». Они теоретически предсказали и исследовали зарождение ПДП несоответствия на границе ядра и оболочки с одинаковыми упругими модулями в двухфазном кристалле. Упругие поля, генерируемые ПДП несоответствия в композитной нанопроволоке и условия, при которых формирование петли энергетически выгодно, были вычислены. Позднее упругие поля и энергия петли в цилиндре, найденные в [45], были использованы для вычисления упругих полей [52], энергий деформации и парного упругого взаимодействия [53,54] осесимметричных цилиндрических включений конечной длины с одномерной дилатационной деформацией в цилиндре. Кроме того, в

работе [52] была изучена релаксация напряжений несоответствия в нанопроволоке с цилиндрическим включением конечной длины путём формирования ПДП на границе фаз, либо дискообразных трещин внутри включения.

В упомянутой ранее работе [47] были вычислены упругие поля и энергия ПДП в нанопроволоке «ядро-оболочка», в которой материалы ядра и оболочки различались не только параметрами атомной решётки, но и модулем сдвига и коэффициентом Пуассона. Авторы работы [48] решили задачу о ПДП в упруго-однородном цилиндре. Colin рассмотрел [49] случай возникновения ПДП несоответствия в упруго-неоднородной нанопроволоке «ядро-оболочка», а затем – в упруго-однородном трёхслойном цилиндре с несоответствием [50].

Помимо исследований [44-50], авторы которых работали с точными решениями граничных задач теории упругости для круговых ПДП, существует также множество теоретических оценок критических условий формирования ПДП в полупроводниковых нанопроволоках «ядро-оболочка» [38,55,56], которые основаны на решениях упругих задач в соответствующих бесконечных анизотропных пространствах.

В приведённых выше теоретических моделях анализируются круговые ПДП, линии дислокации которых симметричны относительно оси цилиндра. В случае нанопроволок «ядро-оболочка» ПДП несоответствия локализовались вокруг ядер либо на границе ядра и оболочки [38,45,47,49,55,56], или внутри промежуточного слоя между ядром и оболочкой [50]. Сравнительно недавно был разработан альтернативный подход для начальных этапов релаксации напряжений несоответствия, подразумевающий формирование первоначальных прямоугольных ПДП в различных частях поперечных и продольных сечений цилиндрических нанопроволок «ядро-оболочка» с цилиндрическим [57,58] и полигональным [59-61] ядром. Этот подход позволил вычислить величину энергетических барьеров, препятствующих формированию дислокаций в различных частях нанопроволок «ядро-оболочка» и выделить наиболее вероятные варианты релаксации.

Все упомянутые работы были сфокусированы на анализе механизмов релаксации в композитных или пентагональных нанопроволоках, ограничиваясь рассмотрением лишь одиночной ПДП и не уделяя внимание формированию сразу нескольких петель вдоль оси нанопроволоки. Задача нахождения параметров равновесного распределения ПДП в подобных гетероструктурах не рассматривалась вовсе.

Стоит отметить, что существуют теоретические исследования равновесных распределений прямолинейных дислокаций несоответствия в (1) плоских структурах [62], (2) массивах прямолинейных дисклинаций несоответствия в цилиндрических структурах «ядро-оболочка» [37] и тонких плёнках на подложках [63], а также (3) в цилиндрических квантовых точках в неоднородных пентагональных нитевидных кристаллах [53,54]. Во всех этих исследованиях авторы рассматривали периодическую систему дефектов несоответствия, которая могла быть как бесконечной [53,54,62,63], так и конечной [37] в зависимости от межфазной границы и геометрии дефекта. Действительно, в большинстве реальных гетероструктур, находящихся в равновесном релаксированном состоянии, распределение дефектов характеризуется высокой степенью периодичности [22,29,64-68]. Эта периодичность является естественным следствием, в первую очередь, периодичности атомной структуры на границе между двумя кристаллическими телами, находящимися в контакте [69], а также процесса конечного размещения дефектов несоответствия [64]. Случайные отклонения от периодичности в реальных нанопроволоках «ядро-оболочка» часто незначительны и не превосходят величины в 10%. Например, различные авторы сообщали об экспериментальном наблюдении расстояния в 7–8,5 нм (со случайным отклонением на уровне ~6–7 %) в нанопроволоках с ядром InAs и оболочкой GaAs [22], $5,1 \pm 0,2$ нм (~4 %) и $3,1 \pm 0,1$ нм (~3 %) в нанопроволоках GaAs/GaSb и GaP/GaSb, соответственно [29], 11–13 нм (~8 %) в In (ядро) / Ga (оболочка) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ наностержнях «ядро-оболочка» [68], а также 305 ± 28 нм (~9 %) в $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{InP}$ нанопроволоках «ядро-оболочка» [33]. Таким образом,

предположение о периодичности распределения петель дислокаций несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка» может быть в первом приближении принято как подходящее для теоретического моделирования, по аналогии со многими другими моделями прямолинейных дислокаций в плоских гетероструктурах [62,63,70,71].

Во II главе диссертации подробно рассматривается механизм релаксации напряжений в нанопроволоках «ядро-оболочка» путём формирования осевого массива ПДП несоответствия. Вычисляются критические параметры несоответствия атомных решёток и геометрические параметры нанопроволоки, необходимые для формирования ПДП, а также равновесное расстояние между ПДП, периодически распределёнными вдоль оси нанопроволоки. Расчётное значение равновесного расстояния между ПДП в массиве сравнивается с экспериментальными данными, полученными в работе [22], содержащими снимки просвечивающего электронного микроскопа высокого разрешения (HRTEM), на которых изображены межфазные границы в композитных нанопроволоках с ядром InAs и оболочкой GaAs с ПДП несоответствия вычитания, равномерно распределёнными по всей границе ядра и оболочки, а также Муаров узор, свидетельствующий о неполной релаксации напряжений несоответствия. Эти экспериментальные результаты пробудили интерес к проведению теоретического исследования, представленного в следующей главе.

Среди современных нанопористых и нанокompозитных материалов особое место также занимают кристаллические материалы с пустыми или частично заполненными одномерными наноканалами, это связано с их широкими возможностями применения в новейших технологиях [72-74]. Например, нанопористые кремниевые материалы [75-78] рассматриваются в качестве наиболее многообещающих в фотонике [79], газовой абсорбции, биочипах, фильтрах, химических и биологических сенсорах [80-82], доставке активных веществ лекарств, неинвазивной диагностике, онкологической иммунотерапии [74,83], электроизолирующих и радиочастотных устройствах [84], и т.д. Некоторые

полупроводниковые композиты также могут быть изготовлены в виде наноканальной структуры с различным строением каналов [77,85-87]. На рис. 1.3 показаны плановые СЭМ-снимки пор в фосфиде индия при различных условиях травления. Подобные материалы могут найти применение в оптике, аккумулирующих устройствах, фотокатализе, фотодетекторах, датчиках для мониторинга среды, светоизлучающих устройствах, волноводах, брэгговских отражателях [87].

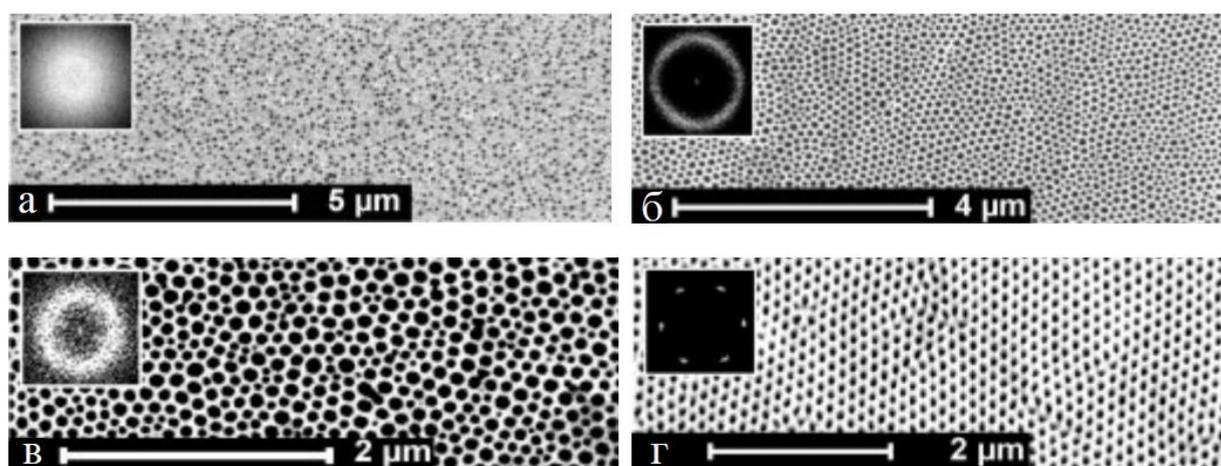


Рис. 1.3. Поры в InP (1 0 0) при различных условиях травления. На вставках показаны преобразования Фурье. а) зарождение пор, расположенных в основном случайно; б,в) пористая структура, выращенная при б) низком и в) высоком напряжении; некоторая периодичность структуры есть, но лишь на малых участках; г) монокристаллическая структура, высокая степень периодичности пор; из работы [85].

Другим примечательным примером, многообещающим для целого ряда нанотехнологий, являются нанопористые мембраны из анодного оксида алюминия, характеризующиеся высокой степенью однородности распределения цилиндрических нанопор и повторяемостью их диаметров [88-96].

Данный материал находит применение в виде устройств фотоники и сенсоров [89,91,94,95], наноразмерных шаблонов [90,94,96], мембран для фильтрации и сепарации [94,95], биологическом мониторинге и культивировании клеток [94,95], доставке действующих веществ лекарств [93,94], функциональных композитных слоях [94], тканевой инженерии [92] и аккумулирующих устройствах [95].

Существует большое количество перспективных естественных и искусственных материалов с наноканалами, такими как цеолиты [97] и цеолитоподобные материалы [98], нанопористые металлы [83,99] фосфонаты металлов [100], мезопоровые материалы на основе фосфора [101] и множество других [72-74]. Интересно, что хотя в большинстве случаев нанопористая структура является желанной и производится специально для ряда технологических применений, существуют также гексагональные кристаллы, в которых удлинённые микро- и наноразмерные пустоты, называемые микропорами в SiC [102-106], либо нанотрубками в GaN [107-109], спонтанно формируются в процессе роста кристалла и создают большие трудности при их применении в технике.

В зависимости от предполагаемого применения, наноканалы могут быть частично, либо целиком заполнены материалами, отличными от материала матрицы. В этих случаях образуется внедрённая в матрицу нанопроволока, либо нанотрубка, являющаяся частью своеобразного нанокompозита, которая может быть использована как вместе с матрицей, так и отдельно от неё, после удаления исходного материала. Подобные способы активно используются при изготовлении различных функциональных нанокompозитных материалов: нанопроволок, нанотрубок, наноконусов, наносеток, и т.д. с использованием шаблонов [90,94-96].

Изготовление нанопористых и нанокompозитных кристаллических материалов всегда сопровождается появлением различных дефектов кристаллической решётки. Появление этих дефектов связано с нанопорами и наночастицами, которые зачастую являются основной причиной их формирования. Они также могут появляться в процессе возникновения и трансформации нанопор и наночастиц. Например, микротрубки в SiC и нанотрубки в GaN по сути являются полыми ядрами супервинтовых дислокаций [110,111], формирующимися из различных планарных и объёмных дефектов в зоне роста кристалла (см. работу [112] и ссылки в ней). Растущие и диссоциирующие микротрубки могут испускать дислокационные петли, см. экспериментальные наблюдения [111,113] и теоретические модели [113,114]. В работе [115] представлено экспериментальное

подтверждение того, что пронизывающие дислокации служат эффективным проводником электрохимического травления на подповерхностные слои в кристаллах GaN, создавая особые области в их нанопористой структуре.

В случае частично, либо полностью заполненных наноканалов, возникает известная проблема напряжений несоответствия и дислокаций несоответствия, которые вызываются различием параметров кристаллических решёток и коэффициентов теплового расширения материалов, находящихся в контакте [13,34,116-119]. Например, было экспериментально показано, что напряжения несоответствия в полупроводниковых нанопроволоках «ядро-оболочка» могут релаксировать путём формирования полных прямых и частичных дислокаций несоответствия [22,23,25], дефектов упаковки [24,25,32,33,56], двойников [32], призматических [22,24,26-29,31-33,56,120] и скользящих [23,28] петель и полупетель дислокаций. Разработано множество теоретических моделей, описывающих упомянутые механизмы релаксации и определяющих критические условия их активации. В частности, прямые дислокации несоответствия в нанопроволоках «ядро-оболочка» анализировались в работах [36,38,39,41,121,122]. Случай круговых призматических дислокационных петель, соосных ядру, был рассмотрен в работах [38,45,47,49,50,52,55,56,121,123], а случай скользящих эллиптических дислокационных петель – в работах [124,125]. Возникновение малых прямоугольных петель в различных частях продольных и поперечных сечений нанопроволок было изучено в работах [57-61]. Некоторые детали вышеупомянутых теоретических моделей дислокаций несоответствия в нанопроволоках «ядро-оболочка» приведены в недавнем обзоре [126]. Также стоит упомянуть о существовании целого ряда теоретических решений для частного случая вырождающейся в бесконечное пространство оболочки.

В работах [127-129] были изучены диполи прямолинейных и расщеплённых дислокаций несоответствия, параллельных оси внедрённой нанопроволоки. Авторы [51] впервые рассмотрели круговую призматическую дислокационную петлю в сечении нанопроволоки и квантовой точки, внедрённой в упругую матрицу. В [130] проанализировано формирование круговой петли дислокаций

несоответствия на границе цилиндрической квантовой точки, выступающей из свободной поверхности полупространства, а в [131] решена задача о круговой ПДП на поверхности нанопроволоки, погружённой в тонкий слой перпендикулярно его поверхностям.

Интересно, что, несмотря на такой длинный список существующих теоретических моделей для релаксации напряжений несоответствия в наноструктурах с целиком заполненными наноканалами (ядрами в нанопроволоках «ядро-оболочка» и внедрёнными в матрицу нанопроволоками), опубликовано лишь несколько работ, посвящённых моделям нанотрубок в бесконечных матрицах. Первая из таких моделей была предложена авторами [37] для прямолинейных дислокаций несоответствия на границе нанотрубки и матрицы, с допущением об упругой изотропии и однородности системы. Позднее в диссертации [132] было продемонстрировано, что вышеупомянутая модель не была достаточно точна, а отдельные дислокации несоответствия в ней следовало заменить дислокационным диполем, так, чтобы одна дислокация располагалась на межфазной границе, а другая – внутри полости. Исправленные результаты были представлены в книге [133]. Затем авторы работы [134] рассмотрели схожую задачу об одиночной винтовой дислокации несоответствия с учётом разных упругих модулей нанотрубки и матрицы, а группа авторов [135] позднее вернулась к этой задаче с учётом поверхностных эффектов. Были также исследованы теоретические модели, описывающие скольжение прямых [136,137] и ветвящихся [138,139] нанотрубок в керамической матрице по механизму скольжения круговой ПДП вдоль границы, разделяющей нанотрубку и матрицу. В работах [57,58] было рассмотрено зарождение малых прямоугольных ПДП в различных частях поперечного и продольного сечения нанопроволоки «ядро-оболочка».

Насколько можно судить, на данный момент не существует теоретической модели, которая описывала бы релаксацию напряжений несоответствия в системе «нанотрубка в матрице» путём формирования круговых ПДП на границе нанотрубки и матрицы. Более того, не известно ни одной теоретической работы, посвящённой *внутренней* упругой задаче о соосности круговой петли

цилиндрической поре (эта задача может быть решена простым предельным переходом в решении для ПДП в нанопроволоке «ядро-оболочка» с различными упругими модулями фаз [49], однако автор указанной работы сделал утверждение о достоверности упомянутого тезиса, не предъявив решение в явном виде и не доказав его удовлетворение граничным условиям).

Сложившееся положение сильно контрастирует со случаем круговой ПДП в упругих телах с соосными цилиндрическими поверхностями (границами). Например, наружная граничная задача теории упругости для соосной круговой ПДП в упругом цилиндре была независимо решена как минимум 6 раз разными способами [44-49,123]. Изложенное в главе III решение вносит свой вклад в устранение сложившегося неравновесия: впервые найдены упругие поля и энергия деформации, генерируемые ПДП, соосной цилиндрическому каналу в упруго-изотропном бесконечном теле, основываясь на этом новом решении, рассматривается релаксация напряжений несоответствия в системе «нанотрубка в матрице» путём формирования круговых призматических дислокационных петель на границе нанотрубки и матрицы. Показывается, что при выращивании нанослоя на исходной поверхности канала сравнительно малого радиуса (менее 15-30 нм), существует два критических внутренних радиуса нанотрубки, между которыми формирование ПДП энергетически выгодно. Этот эффект связывается с сильным влиянием внутренней свободной поверхности на упругие поля и энергию системы с ПДП, что было бы затруднительно выяснить без полученного в настоящей работе нового решения.

Также большой интерес исследователей привлекают наноструктуры с осевой неоднородностью (сегментированные нанопроволоки, квантовые точки, квантовые диски) [140-143]. Причиной данного интереса является высокая степень совершенства структуры, которая позволяет квантовым эффектам легко проявляться без нежелательного влияния дефектов кристаллической решётки, характерных для планарных полупроводниковых гетероструктур. Пример сегментированной нанопроволоки Si/SiGe показан на рис. 1.4.

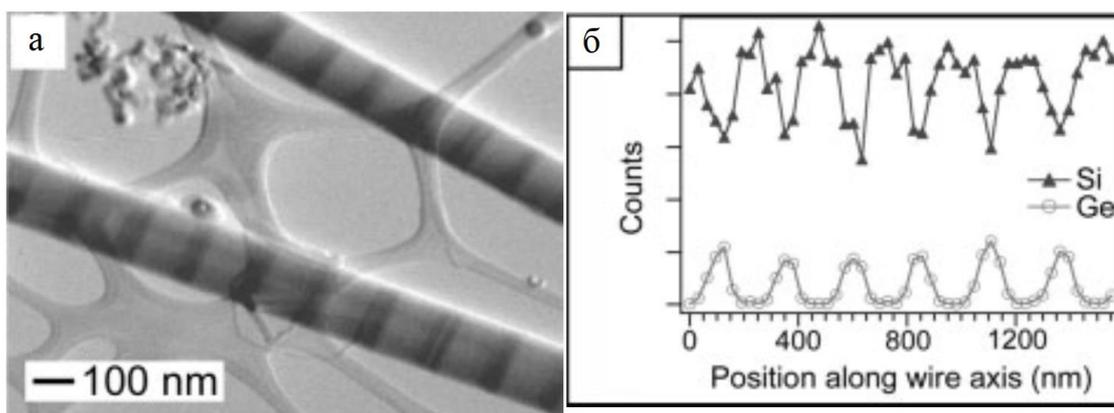


Рис. 1.4. а) ПЭМ-изображение типичных сегментированных нанопроволок (сверхрешёток) Si/SiGe; б) профиль состава нанопроволоки, демонстрирующий пространственное изменение концентраций Si и Ge; из работы [144].

Подобным наночастицам присущи малые межфазные границы, которые разделяют материалы с разными кристаллическими решётками и коэффициентами линейного теплового расширения. Несмотря на малые размеры межфазных границ и наличие цилиндрической свободной поверхности, способствующих снижению энергии деформации [145] и то, что проблема несоответствия и термонапряжённости стоит значительно менее остро, чем в плоских наноструктурах [34,146], релаксация напряжений несоответствия представляет большой интерес. Данный процесс может происходить путём образования прямых дислокаций [147,148], либо размывания межфазной границы, что часто наблюдается экспериментально [140,149,150], а недавно было исследовано и теоретически [150-153]. Поскольку формирование прямых дислокаций в нанопроволоках значительно затруднено высокими барьерами Пайерлса, а размывание межфазной границы контролируется режимом роста структуры и может быть нулевым [14,151-153], логично рассмотреть альтернативные механизмы релаксации.

В главе IV предлагается новый механизм релаксации напряжений несоответствия в сегментированных нанопроволоках. Показывается, что релаксация может происходить путём формирования петель дислокаций

несоответствия, расположенных на некотором удалении от межфазной границы, а также вычисляются критические условия, при которых данный механизм приходит в действие.

Глава II

Призматические дислокационные петли в нанопроволоке «ядро-оболочка»

2.1. Упругая модель нанопроволоки «ядро-оболочка» до и после формирования ПДП несоответствия

Рассмотрим бесконечно длинную нанопроволоку «ядро-оболочка» с радиусом ядра c и наружным радиусом a как бесконечно длинный композитный цилиндр, в котором ядро и оболочка имеют различные параметры атомных решеток a_{core} и a_{shell} , при одинаковых упругих модулях G и коэффициентах Пуассона ν . В нашей модели ядро нанопроволоки рассматривается как цилиндрическое дилатационное включение с собственной дисторсией ${}^c \varepsilon_{ij}^*$ (рис. 2.1а):

$${}^c \varepsilon_{ii}^* = \varepsilon^* H\left(1 - \frac{r}{c}\right), \quad i = x, y, z \quad \text{или} \quad i = r, \varphi, z, \quad (2.1)$$

где H - функция Хэвисайда $H\left(1 - \frac{r}{c}\right) = \begin{cases} 1, & r \leq c \\ 0, & r > c \end{cases}$; величина собственной дисторсии ε^* включена в (2.1) со своим знаком; (x, y, z) и (r, φ, z) – Декартовы и цилиндрические координаты соответственно (рис. 2.1).

Ненулевая собственная дисторсия вызвана несоответствием параметров атомных решеток a_{core} и a_{shell} , поэтому ε^* принимает роль параметра несоответствия f [34]:

$$\varepsilon^* = f = \frac{a_{core} - a_{shell}}{a_{shell}}. \quad (2.2)$$

Для определённости предположим, что $a_{core} > a_{shell}$, и тогда $\varepsilon^* > 0$.

Поле напряжения внутри ядра, смоделированного как бесконечное цилиндрическое дилатационное включение, может быть записано в следующем виде [47]:

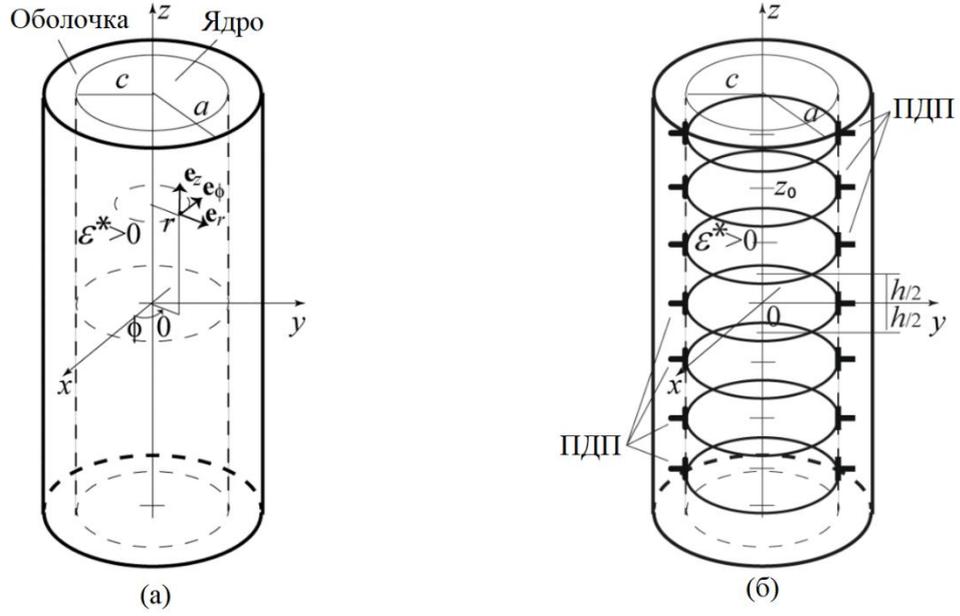


Рис. 2.1. Нанопроволока «ядро-оболочка» (а) в когерентном состоянии без дефектов и (б) в конечном, релаксированном состоянии с круговыми призматическими петлями дислокаций несоответствия. На этой схеме значение собственной дисторсии ядра $\varepsilon^* > 0$, а петли дислокаций несоответствия являются петлями вычитания.

$${}^c\sigma_{rr} = -\frac{G(1+\nu)\varepsilon^*}{(1-\nu)} \begin{cases} 1-t^2, & 0 \leq r \leq c \\ \left(\frac{c}{r}\right)^2 - t^2, & c \leq r \leq a \end{cases} \quad (2.3a)$$

$${}^c\sigma_{\varphi\varphi} = -\frac{G(1+\nu)\varepsilon^*}{(1-\nu)} \begin{cases} 1-t^2, & 0 \leq r \leq c \\ -\left(\frac{c}{r}\right)^2 - t^2, & c \leq r \leq a \end{cases} \quad (2.3б)$$

$${}^c\sigma_{zz} = -\frac{G(1+\nu)\varepsilon^*}{(1-\nu)} \begin{cases} 2(1-t^2), & 0 \leq r \leq c \\ -2t^2, & c \leq r \leq a \end{cases}, \quad (2.3в)$$

$${}^c\sigma_{rz} = {}^c\sigma_{r\varphi} = {}^c\sigma_{z\varphi} = 0, \quad (2.3г-е)$$

$$Tr {}^c\boldsymbol{\sigma} = {}^c\sigma_{rr} + {}^c\sigma_{\varphi\varphi} + {}^c\sigma_{zz} = -\frac{G(1+\nu)\varepsilon^*}{(1-\nu)} \begin{cases} 4(1-t^2), & 0 \leq r \leq c \\ -4t^2, & c \leq r \leq a \end{cases}, \quad (2.3ж)$$

где $t = c/a$.

Поле напряжений (2.3) удовлетворяет уравнениям равновесия и граничному условию на боковой свободной поверхности цилиндра S_{lat} , а также уравнениям статики на торцах цилиндра S :

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = 0, \quad (2.4a)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}_r \Big|_{S_{lat}} = 0, \quad (2.4б)$$

$$\int_S \boldsymbol{\sigma} \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad j = r, \varphi, z. \quad (2.4в)$$

Здесь \mathbf{e}_r – ось в цилиндрической системе координат (рис. 2.1a).

В начальном (когерентном) состоянии нанопроволоки (рис. 2.1a), до релаксации напряжений, запасенная энергия $E_{initial}$ может быть рассмотрена как энергия деформации E_{core} цилиндрического включения (ядра) в упругом цилиндре. В таком случае мы можем использовать формулу для энергии упругой деформации, рассматривающей дефект как источник внутренних напряжений [154]:

$$E_{def} = -\frac{1}{2} \int_{V_{def}} {}^{def} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^* {}^{def} \boldsymbol{\sigma}_{ij} dV, \quad (2.5)$$

где ${}^{def} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^*$ – собственная дисторсия дефекта, ${}^{def} \boldsymbol{\sigma}_{ij}$ – напряжение, создаваемое этим дефектом, а V_{def} – область, на которую распространяется собственная дисторсия ${}^{def} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^*$.

Следуя (2.4), в начальном состоянии энергия деформации в нанопроволоке, приходящаяся на единицу длины, $\tilde{E}_{initial}$ выглядит так:

$$\tilde{E}_{initial} = \tilde{E}_{core} = -\frac{1}{2} \int_{S_{core}} {}^c \boldsymbol{\varepsilon}_{ij}^* {}^c \boldsymbol{\sigma}_{ij} dS = -\frac{1}{2} \int_{S_{core}} \boldsymbol{\varepsilon}^* \operatorname{Tr} {}^c \boldsymbol{\sigma}_{ij} dS = \frac{2G(1+\nu)\pi f^2 a^2}{(1-\nu)} (1-t^2)t^2, \quad (2.6)$$

где S_{core} – площадь сечения ядра. Эта энергия совпадает с более общим результатом [47], применённым к частному случаю равных упругих модулей материалов ядра и оболочки.

Из (2.6) следует, что при $t=0$ и $t=1$, нанопроволока однородна, а $\tilde{E}_{initial} = \tilde{E}_{core} = 0$. Из (2.6) при $t \neq 0$, мы также можем найти условие максимальной энергии:

$$\frac{\partial \tilde{E}_{core}}{\partial t} = 0 \Rightarrow t(1 - 2t^2) = 0 \Rightarrow t_{max} = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0,707. \quad (2.7)$$

Таким образом, для любого внешнего радиуса a , нанопроволока с радиусом ядра $c \approx 0,707a$ имеет наибольшую запасённую энергию деформации:

$$\tilde{E}_{core,max} = \frac{G(1+\nu)\pi f^2 a^2}{2(1-\nu)}. \quad (2.8)$$

Наличие напряжения (2.3) в нанопроволоке «ядро-оболочка» запускает процессы релаксации, наиболее вероятным из которых является образование дислокаций несоответствия [22-33]. В результате релаксации напряжения, нанопроволока в конечном состоянии в дополнение к прямолинейным дислокациям несоответствия (которые не рассматриваются в данной работе) содержит ПДП, распределённые по всей межфазной границе с периодом h (рис. 2.1б).

Энергия системы «нанопроволока + ПДП» E_{final} меньше энергии изначально когерентной нанопроволоки $E_{initial}$, а энергетический критерий активации процесса релаксации может быть записан так:

$$\Delta E = E_{final} - E_{initial} \leq 0. \quad (2.9)$$

Тип петли (петля вычитания, или петля внедрения) определяется знаком собственной дисторсии в ядре нанопроволоки. При $\varepsilon^* > 0$ (рис. 2.1а), имеют место петли вычитания (рис. 2.1б).

Предположим, что релаксация напряжений несоответствия начинается с формирования одиночной ПДП. В следующем разделе вычисляются и

обсуждаются критические параметры, при которых в нанопроволоке «ядро-оболочка» образуется первая ПДП.

2.2 Одиночная ПДП в нанопроволоке «ядро-оболочка»

Для формирования одиночной ПДП несоответствия энергетическое условие (2.9) принимает вид:

$$\Delta E = E_{PL} + E_{PL-core} \leq 0, \quad (2.10)$$

где E_{PL} – энергия ПДП в упругом цилиндре, $E_{PL-core}$ – энергия взаимодействия ПДП и ядра нанопроволоки; Нижний индекс “PL” обозначает “Prismatic Loop”, энергию самой призматической дислокационной петли. В нашем рассмотрении энергия ядра E_{core} в начальном и конечном состоянии считается неизменной.

Чтобы найти энергию ПДП E_{PL} , необходимо сначала вычислить поле напряжений, генерируемых ПДП в бесконечно длинном упругом цилиндре. Это может быть сделано при помощи классического решения Лурье [155] для симметрично нагруженного кругового цилиндра.

2.2.1 Упругие поля и энергия одиночной ПДП в упругом цилиндре

Рассмотрим круговую ПДП, которая характеризуется собственной дисторсией (2.11) в цилиндрической системе координат [156]:

$${}^{PL}\varepsilon_{zz}^* = \pm bH \left(1 - \frac{r}{c}\right) \delta(z - z_0), \quad (2.11)$$

где b – величина вектора Бюргерса, $\delta(z - z_0)$ – дельта-функция Дирака, c – радиус ПДП, z_0 – z -координата ПДП (рис. 2.1б). Верхний знак правой части уравнения (2.11) соответствует петле внедрения, а нижний – петле вычитания.

В бесконечно длинном упругом цилиндре напряжения ${}^{PL}\sigma_{ij}$ могут быть представлены как сумма напряжений, генерируемых петлёй в бесконечном пространстве ${}^{\infty}\sigma_{ij}$ и некоторой добавочной части ${}^i\sigma_{ij}$,

$${}^{PL}\sigma_{ij} = {}^{\infty}\sigma_{ij} + {}^i\sigma_{ij}, \quad (2.12)$$

которая позволит выполняться граничному условию на боковой поверхности цилиндра $r = a$:

$${}^{\infty}\sigma_{rr}\Big|_{r=a} + {}^i\sigma_{rr}\Big|_{r=a} = 0, \quad (2.13a)$$

$${}^{\infty}\sigma_{rz}\Big|_{r=a} + {}^i\sigma_{rz}\Big|_{r=a} = 0, \quad (2.13б)$$

при этом учитывается, что круговая ПДП не имеет компоненты напряжений ${}^{\infty}\sigma_{r\varphi}$.

Поле напряжений ${}^{\infty}\sigma_{ij}$ одиночной ПДП в бесконечном пространстве вычислено в [157]:

$${}^{\infty}\sigma_{rr} = \frac{\pm Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1-2\nu}{r} J(1,1;0) + \frac{|z-z_0|}{c^2} J(1,0;2) - \frac{1}{c} J(1,0;1) - \frac{|z-z_0|}{cr} J(1,1;1) \right], \quad (2.14a)$$

$${}^{\infty}\sigma_{\varphi\varphi} = \frac{\pm Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{2\nu-1}{r} J(1,1;0) - \frac{2\nu}{c} J(1,0;1) + \frac{|z-z_0|}{cr} J(1,1;1) \right], \quad (2.14б)$$

$${}^{\infty}\sigma_{zz} = \frac{\mp Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1}{c} J(1,0;1) + \frac{|z-z_0|}{c^2} J(1,0;2) \right], \quad (2.14в)$$

$${}^{\infty}\sigma_{rz} = \frac{\mp Gb}{2(1-\nu)} \frac{(z-z_0)}{c^2} J(1,1;2), \quad (2.14г)$$

$${}^{\infty}\sigma_{r\varphi} = {}^{\infty}\sigma_{z\varphi} = 0, \quad (2.14д,е)$$

$$\text{Tr } {}^{\infty}\sigma = {}^{\infty}\sigma_{rr} + {}^{\infty}\sigma_{\varphi\varphi} + {}^{\infty}\sigma_{zz} = \frac{\mp G(1+\nu)b}{(1-\nu)c} J(1,0;1), \quad (2.14ж)$$

где $J(k,l;p)$ – интегралы Лифшица-Ханкеля, определяемые как $\int_0^{\infty} J_k(\kappa) J_l(\kappa \frac{r}{c}) \exp(-\kappa \xi) \kappa^p d\kappa$, где J_k и J_l – функции Бесселя первого рода, а $\xi > 0$ [158]; $\xi = |z - z_0|/c$. В (2.14), верхний и нижний знак соответствуют знакам собственной дисторсии ПДП (2.11).

В Приложении А интегралы Лифшица-Ханкеля представлены через эллиптические интегралы, удобные при численных расчётах.

Добавочные напряжения ${}^i\sigma_{ij}$ находятся при помощи уравнений Лурье для симметрично нагруженного кругового цилиндра [155]:

$${}^i\sigma_{rr} = \frac{2G}{a} \times \int_0^{\infty} \left[\beta (C_1 (3-2\nu) - D_1 \beta) I_0(\tilde{r}\beta) + \frac{1}{\tilde{r}} (C_1 (4\nu - \tilde{r}^2 \beta^2 - 4) + D_1 \beta) I_1(\tilde{r}\beta) \right] \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (2.15a)$$

$${}^i\sigma_{\varphi\varphi} = \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \left[C_1 \beta (2\nu - 1) I_0(\tilde{r}\beta) - \frac{1}{\tilde{r}} (4C_1 (\nu - 1) + D_1 \beta) I_1(\tilde{r}\beta) \right] \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (2.15б)$$

$${}^i\sigma_{zz} = \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \beta \left[(2C_1 \nu + D_1 \beta) I_0(\tilde{r}\beta) + \tilde{r} C_1 \beta I_1(\tilde{r}\beta) \right] \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (2.15в)$$

$${}^i\sigma_{rz} = \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \beta \left[\tilde{r} C_1 \beta I_0(\tilde{r}\beta) + (2C_1 (\nu - 1) + D_1 \beta) I_1(\tilde{r}\beta) \right] \sin\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta. \quad (2.15г)$$

$${}^i\sigma_{r\varphi} = {}^i\sigma_{z\varphi} = 0, \quad (2.15д,е)$$

$$\text{Tr } {}^i\sigma = {}^i\sigma_{rr} + {}^i\sigma_{\varphi\varphi} + {}^i\sigma_{zz} = \frac{4G(1+\nu)}{a} \int_0^{\infty} C_1 \beta I_0(\tilde{r}\beta) \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta. \quad (2.15ж)$$

Здесь I_0 и I_1 – модифицированные функции Бесселя первого рода; C_1 и D_1 – неизвестные коэффициенты; $\tilde{r} = r/a$, $\tilde{z} = z/a$ и $\tilde{z}_0 = z_0/a$.

Следуя формулам (2.14а), (2.14б), (2.15в) и (2.15г), компоненты напряжений, генерируемых ПДП, ${}^{\infty}\sigma_{rr}$, ${}^{\infty}\sigma_{rz}$, ${}^i\sigma_{rr}$ и ${}^i\sigma_{rz}$, включённые в граничные условия (2.13а) и (2.13б), на свободной поверхности цилиндра $r = a$ могут быть записаны так:

$${}^{\infty}\sigma_{rr}\Big|_{r=a} = \frac{\pm Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1-2\nu}{a} J^*(1,1;0) + \frac{|z-z_0|}{c^2} J^*(1,0;2) - \frac{1}{c} J^*(1,0;1) - \frac{|z-z_0|}{ca} J^*(1,1;1) \right], \quad (2.16а)$$

$${}^{\infty}\sigma_{rz}\Big|_{r=a} = \frac{\mp Gb}{2(1-\nu)} \frac{(z-z_0)}{c^2} J^*(1,1;2), \quad (2.16б)$$

где $J^*(k,l;p) = \int_0^{\infty} J_k(\kappa) J_l(\kappa \frac{a}{c}) \exp(\kappa \frac{|z-z_0|}{c}) \kappa^p d\kappa$, и

$${}^i\sigma_{rr}\Big|_{r=a} = \frac{2G}{a} \times \int_0^{\infty} \left[-\beta (D_1\beta + C_1(-3+2\nu)) I_0(\beta) + (D_1\beta + C_1(-4+4\nu-\beta^2)) I_1(\beta) \right] \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (2.17а)$$

$${}^i\sigma_{rz}\Big|_{r=a} = \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \beta \left[C_1\beta I_0(\beta) + (D_1\beta + 2C_1(\nu-1)) I_1(\beta) \right] \sin\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta. \quad (2.17б)$$

Выражения (2.16) и (2.17) в сочетании с граничными условиями (2.13а) и (2.13б) принимают вид интегральных уравнений относительно коэффициентов C_1 и D_1 . Чтобы решить систему интегральных уравнений, необходимо применить преобразование Фурье:

$${}^{\infty}\hat{\sigma}_{rr}\Big|_{r=a} + {}^i\hat{\sigma}_{rr}\Big|_{r=a} = 0, \quad (2.18а)$$

$${}^{\infty}\hat{\sigma}_{rz}\Big|_{r=a} + {}^i\hat{\sigma}_{rz}\Big|_{r=a} = 0, \quad (2.18б)$$

где

$${}^{\infty}\hat{\sigma}_{rr} \Big|_{r=a} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} {}^{\infty}\sigma_{rr} \Big|_{r=a} e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} d(z-z_0),$$

$$i \hat{\sigma}_{rz} \Big|_{r=a} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} i \sigma_{rz} \Big|_{r=a} e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} d(z-z_0).$$

Пошаговое вычисление фурье-образов ${}^{\infty} \hat{\sigma}_{rz} \Big|_{r=a}$ и $i \hat{\sigma}_{rz} \Big|_{r=a}$ описано в

Приложении Б.

В результате получено:

$${}^{\infty} \hat{\sigma}_{rr} \Big|_{r=a} = \frac{\pm G b t}{\sqrt{2\pi(1-\nu)}} \left[(wK_1 + \beta K_0) I_1^* - t\beta(\beta K_0 + K_1) I_0^* \right], \quad (2.19a)$$

$${}^{\infty} \hat{\sigma}_{rz} \Big|_{r=a} = \frac{\pm i G b t \beta^2}{\sqrt{2\pi(1-\nu)}} \left[t K_1 I_0^* - K_0 I_1^* \right], \quad (2.19б)$$

$$i \hat{\sigma}_{rr} \Big|_{r=a} = \sqrt{2\pi} G \left[-\beta(D_1\beta + C_1(-3+2\nu)) I_0 + (D_1\beta + C_1(-w-2+2\nu)) I_1 \right], \quad (2.19в)$$

$$i \hat{\sigma}_{rz} \Big|_{r=a} = -i\sqrt{2\pi} G \beta \left[C_1\beta I_0 + (D_1\beta + 2C_1(\nu-1)) I_1 \right]. \quad (2.19г)$$

Здесь использованы обозначения: $I_0^* = I_0(t\beta)$, $I_1^* = I_1(t\beta)$, $I_0 = I_0(\beta)$, $I_1 = I_1(\beta)$, $K_0 = K_0(\beta)$, и $K_1 = K_1(\beta)$; $K_0(\beta)$ и $K_1(\beta)$ – модифицированные функции Бесселя второго рода (функции Макдональда); $w = \beta^2 - 2\nu + 2$, $t = c/a$.

Наконец, система интегральных уравнений (2.13а,б) относительно коэффициентов C_1 и D_1 становится системой алгебраических уравнений относительно тех же коэффициентов:

$$\begin{aligned} \frac{\pm G b t}{\sqrt{2\pi(1-\nu)}} \left[(wK_1 + \beta K_0) I_1^* - t\beta(\beta K_0 + K_1) I_0^* \right] = \\ -\sqrt{2\pi} \left[-\beta(D_1\beta + C_1(-3+2\nu)) I_0 + (D_1\beta + C_1(-w-2+2\nu)) I_1 \right], \end{aligned} \quad (2.20a)$$

$$\frac{\pm i G b t \beta^2}{\sqrt{2\pi(1-\nu)}} \left[t K_1 I_0^* - K_0 I_1^* \right] = i\sqrt{2\pi} G \beta \left[C_1\beta I_0 + (D_1\beta + 2C_1(\nu-1)) I_1 \right]. \quad (2.20б)$$

Из алгебраических уравнений (2.20а,б) находятся коэффициенты C_1 и D_1 :

$$C_1 = \frac{\pm bt \left[I_1^* (wI_1 K_1 + \beta^2 I_0 K_0) - \beta t I_0^* \right]}{2\pi(\nu - 1)(\beta^2 I_0^2 - wI_1^2)}, \quad (2.21a)$$

$$D_1 = \frac{\pm bt \left[t\beta I_0^* (wI_1 K_1 + \beta^2 I_0 K_0 + 2\nu - 2) - I_1^* \left(2\beta^2 (\nu - 1) I_0 K_0 + w(2(\nu - 1) I_1 K_1 + 1) \right) \right]}{2\pi(\nu - 1)\beta(\beta^2 I_0^2 - wI_1^2)}, \quad (2.21b)$$

где обозначения аналогичны (2.19а-г).

Коэффициенты C_1 и D_1 позволяют вычислить добавочные напряжения ${}^i\sigma_{ij}$ используя (2.15а-г), а также, с применением (2.12) и (2.14а-г), найти напряжения ${}^{PL}\sigma_{ij}$, которые ПДП создаёт в упругом цилиндре.

Чтобы подтвердить правильность полученных результатов, изобразим зависимости ${}^{PL}\sigma_{rr}$ и ${}^{PL}\sigma_{rz}$ от радиальной координаты r для различных координат z (рис. 2.2).

На рис. 2.2 изображены графики для петли внедрения, расположенной в плоскости $z_0 = 0$, напряжения даны в единицах Gb/a , коэффициент Пуассона $\nu = 0,3$. Легко заметить, что обе компоненты ${}^{PL}\sigma_{rr}$ и ${}^{PL}\sigma_{rz}$ удовлетворяют граничному условию (2.13) при любом z .

Для сравнения на рис. 2.3 и 2.4 представлены карты напряжений, генерируемых ПДП в цилиндре и в бесконечном пространстве. Карты наглядно демонстрируют влияние свободной поверхности на каждую из компонент напряжений, создаваемых ПДП. Также можно заметить, что компоненты ${}^{PL}\sigma_{rr}$ и ${}^{PL}\sigma_{rz}$ (рис. 2.3) обнуляются на свободной поверхности.

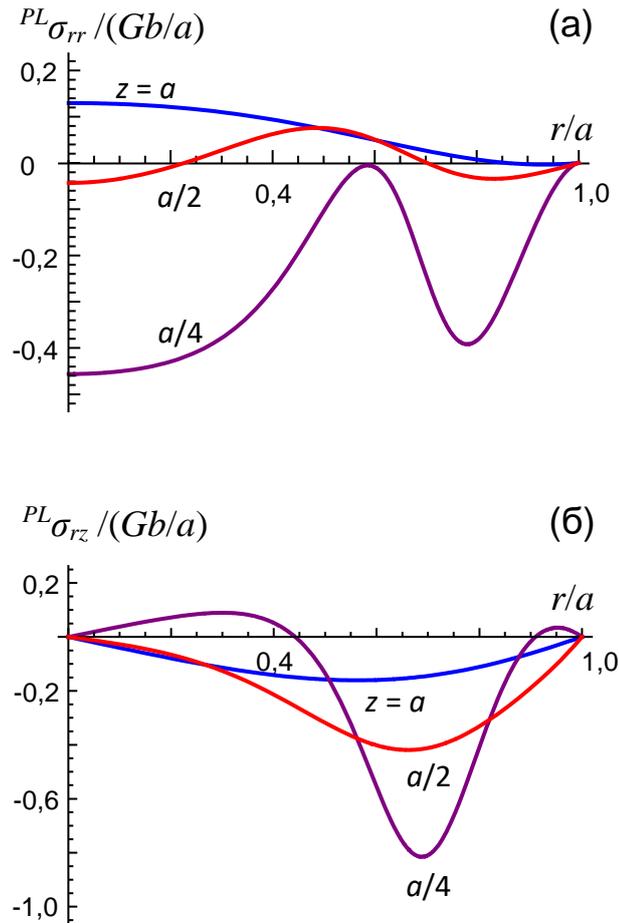


Рис. 2.2. Напряжения (а) ${}^{PL}\sigma_{rr}$ и (б) ${}^{PL}\sigma_{rz}$ петли внедрения в зависимости от приведённого радиуса r/a внутри упругого цилиндра радиуса a . Координата плоскости залегания петли $z_0 = 0$, радиус петли $c = 0,7a$. Кривые изображены для значений $z = a, a/2$ и $a/4$ для коэффициента Пуассона $\nu = 0,3$. Напряжения даны в единицах Gb/a .

В дополнение к полю напряжений ${}^i\sigma_{ij}$, коэффициенты C_1 и D_1 , приведённые в формулах (2.21а) и (2.21б), делают возможным нахождение добавочного поля перемещений ${}^i u_k$, обусловленного наличием свободной поверхности цилиндра [155]:

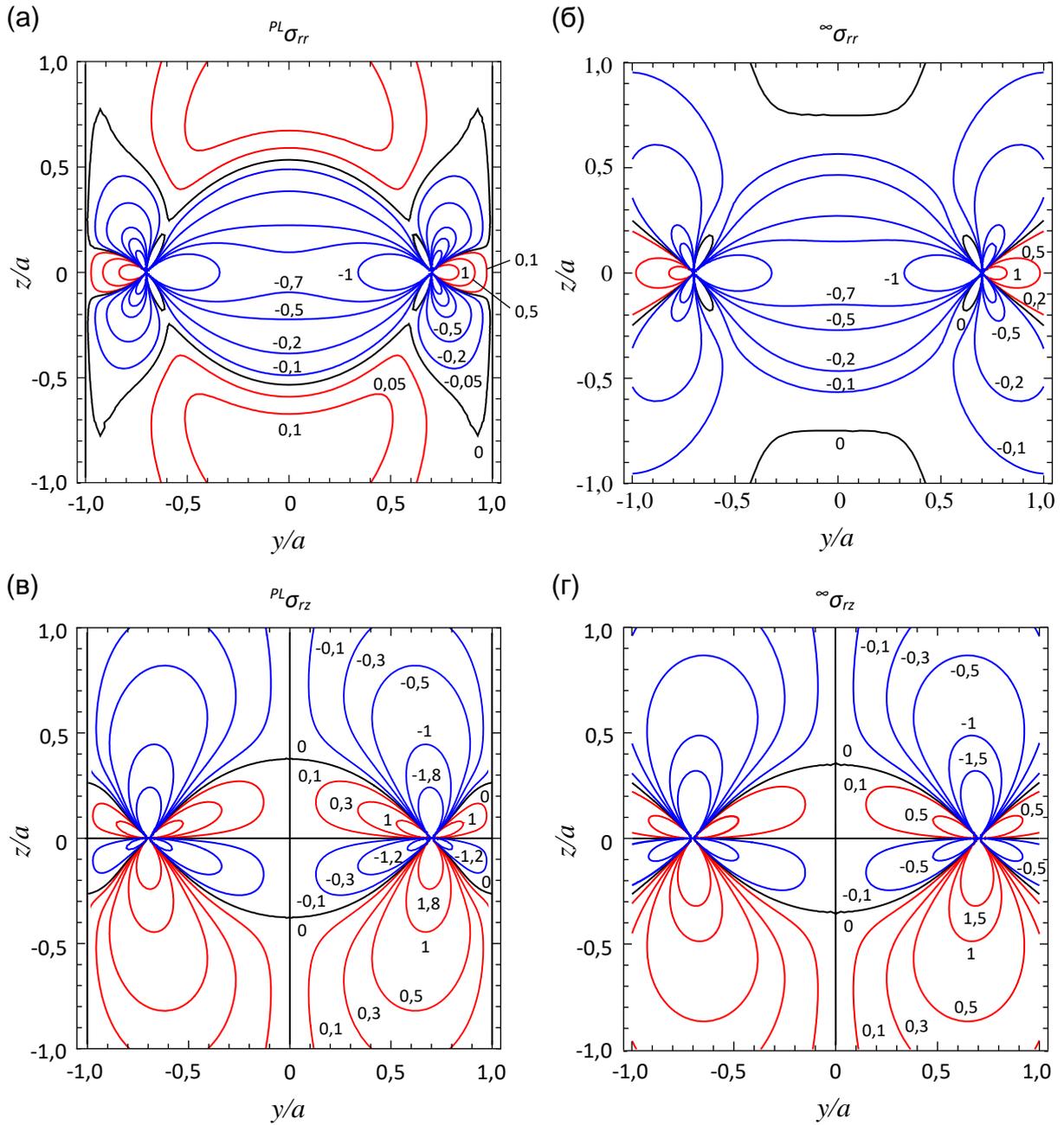


Рис. 2.3. Карты напряжений (а,б) σ_{rr} и (в,г) σ_{rz} петли внедрения, расположенной в (а,в) упруго-изотропном цилиндре со свободной поверхностью и (б,г) бесконечном упругом пространстве, в плоскости $x = 0$ для $z_0 = 0$, $c = 0,7a$, $\nu = 0,3$. Напряжения приведены в единицах Gb/a .

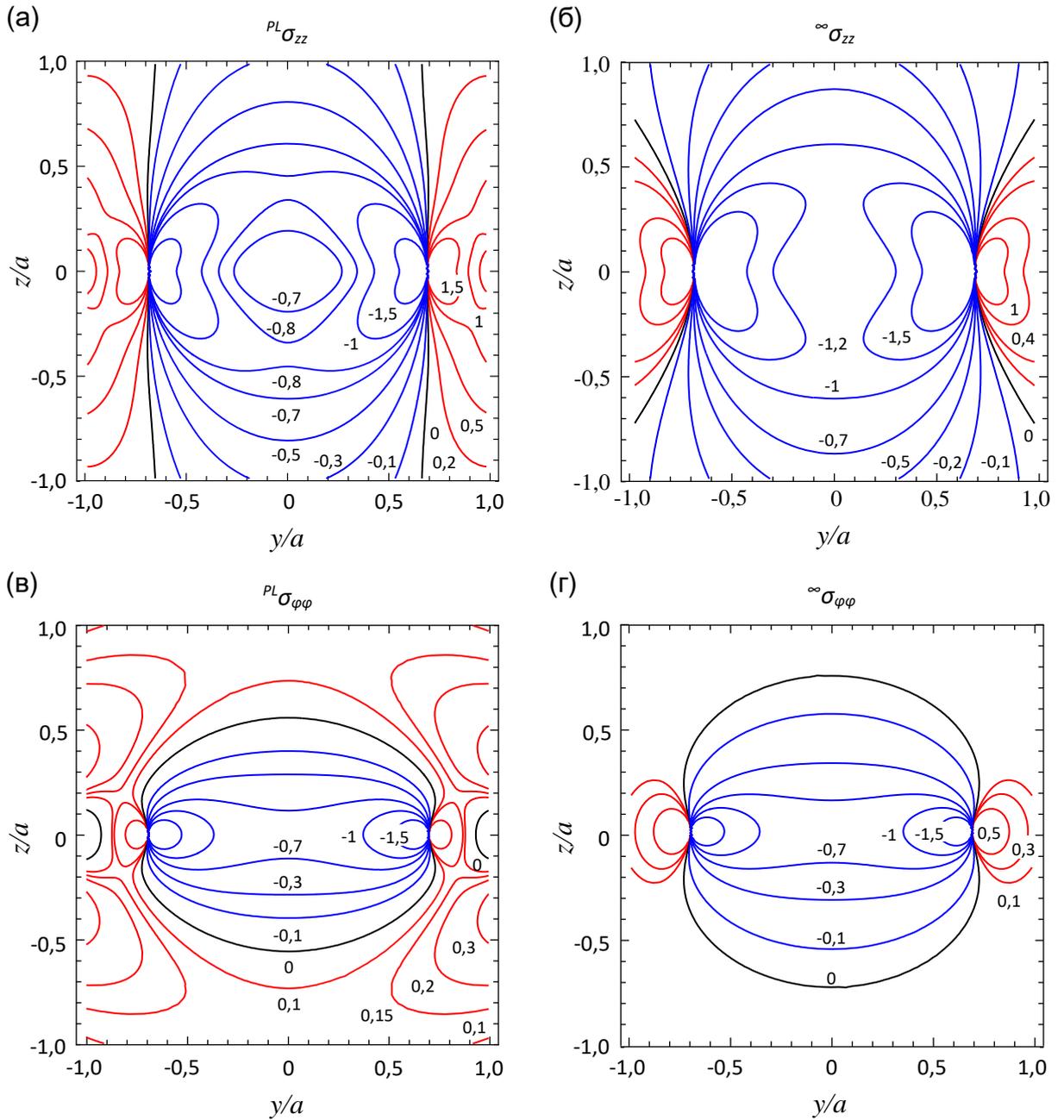


Рис. 2.4. Карты напряжений (а,б) σ_{zz} и (в,г) $\sigma_{\varphi\varphi}$ петли внедрения, расположенной в (а,в) упруго-изотропном цилиндре со свободной поверхностью и (б,г) бесконечном упругом пространстве в плоскости $x = 0$ для $z_0 = 0$, $c = 0,7a$, $\nu = 0,3$. Напряжения приведены в единицах Gb/a .

$${}^i u_r = \int_0^{\infty} \left[-C_1 \tilde{r} \beta I_0(\tilde{r} \beta) + (4C_1(1-\nu) + D_1 \beta) I_1(\tilde{r} \beta) \right] \cos \beta (\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (2.22a)$$

$${}^i u_{\varphi} = 0, \quad (2.22б)$$

$${}^i u_z = \int_0^\infty [C_1 \tilde{r} I_1(\tilde{r}\beta) + D_1 I_0(\tilde{r}\beta)] \sin\beta (\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta. \quad (2.22\text{в})$$

В сочетании с перемещениями в бесконечном пространстве ${}^\infty u_k$ [157], добавочные перемещения ${}^i u_k$, приведённые в (2.22а-в) дают полное перемещение, генерируемое ПДП в цилиндре ${}^{PL} u_k$:

$${}^{PL} u_k = {}^\infty u_k + {}^i u_k, \quad (2.23)$$

где

$${}^\infty u_r = \frac{\pm b}{4(1-\nu)} \left[(2\nu - 1)J(1,1;0) + \frac{|z - z_0|}{c} J(1,1;1) \right], \quad (2.24\text{а})$$

$${}^\infty u_\varphi = 0, \quad (2.24\text{б})$$

$${}^\infty u_z = \frac{\pm b \operatorname{sgn}(z - z_0)}{4(1-\nu)} \left[2(1-\nu)J(1,0;0) - \frac{|z - z_0|}{c} J(1,0;1) \right]. \quad (2.24\text{в})$$

Как и ранее, здесь верхний и нижний знак соответствуют знаку собственной дисторсии (2.11).

Энергия петли в цилиндре E_{PL} может быть вычислена при помощи (2.5) из уравнений (2.11), (2.14в) и (2.15в):

$$E_{PL} = -\frac{1}{2} \int_{V_{def}} {}^{PL} \varepsilon_{ij}^* {}^{PL} \sigma_{ij} dV = -\frac{1}{2} \int_{V_{def}} {}^{PL} \varepsilon_{zz}^* ({}^\infty \sigma_{zz} + {}^i \sigma_{zz}) dV = {}^\infty E_{PL} + {}^i E_{PL}, \quad (2.25)$$

где ${}^\infty E_{PL}$ – энергия деформации круговой ПДП в бесконечном пространстве, а ${}^i E_{PL}$ – добавочная энергия, обусловленная наличием напряжения свободной поверхности ${}^i \sigma_{ij}$.

Энергия петли в бесконечном пространстве ${}^\infty E_{PL}$ хорошо известна [156,157,159]:

$${}^{\infty}E_{PL} = \frac{\pi G b^2 c}{2(1-\nu)} J(1,1;0) \Big|_{\substack{r=c-r_c \\ z=0}} \approx \frac{G b^2 c}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{8c}{r_c} - 2 \right), \quad (2.26)$$

где r_c – радиус ядра дислокации, принимаемый равным b в дальнейшем.

Обозначая $t = c/a$ и учитывая энергию ядра дислокации, перепишем ${}^{\infty}E_{PL}$ как:

$${}^{\infty}E_{PL} = \frac{G b^2 a t}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{8\gamma t a}{b} - 2 \right), \quad (2.27)$$

где γ – безразмерный параметр, варьирующийся от 1 для металлов до 4 для неметаллических материалов, позволяющий учесть энергию ядра [159].

Имея уравнения (2.15в) и (2.21а,б), легко вычислить слагаемое ${}^i E_{PL}$:

$${}^i E_{PL} = -\frac{1}{2} \int_{V_{def}} {}^{PL} \varepsilon_{zz}^* {}^i \sigma_{zz} dV = -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \int_0^c b^i \sigma_{zz} \Big|_{z=z_0} r dr d\varphi = -\frac{G b^2 a}{(1-\nu)} t^2 \int_0^{\infty} \Theta(\beta, t) d\beta. \quad (2.28)$$

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

совпадают с использованными ранее в (2.19а-г).

Наконец, с уравнениями (2.25), (2.27) и (2.28), можно записать окончательное выражение для энергии ПДП в упругом цилиндре:

$$E_{PL} = \frac{G b^2 a t}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1,08 \gamma t a}{b} - 2t \int_0^{\infty} \Theta(\beta, t) d\beta \right). \quad (2.29)$$

На рис. 2.5 изображён график энергии ПДП в цилиндре и в бесконечном пространстве в зависимости от приведённого радиуса петли $t = c/a$.

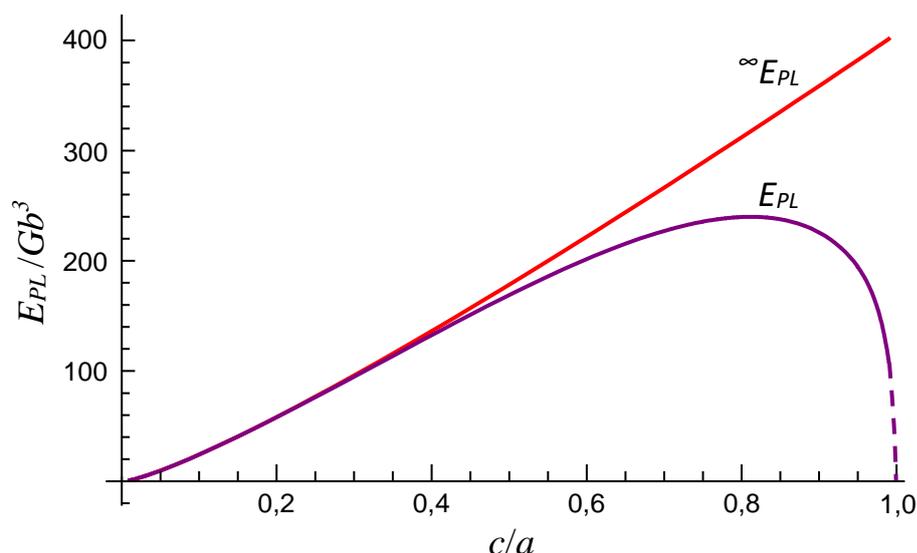


Рис. 2.5. Энергия ПДП в зависимости от её приведённого радиуса $t = c/a$ для цилиндра (E_{PL}) радиуса a и бесконечного упругого пространства (${}^{\infty}E_{PL}$) при $a \approx 166,7b$, $r_c = b$, $\gamma = 1$, $\nu = 0,3$. Здесь $b \approx 0,3$ нм, $a \approx 50$ нм.

Как видно из рис. 2.5, влияние свободной поверхности цилиндра на энергию ПДП E_{PL} проявляется только когда значение t превосходит 0,3. При $t \approx 0,8$ энергия E_{PL} достигает максимума, равного $\sim 0,77$ энергии ПДП в бесконечном пространстве ${}^{\infty}E_{PL}$. Зависимость $E_{PL}(t)$, продемонстрированная на рис. 2.5, хорошо соответствует полученным ранее другими способами результатам [47]. Авторы работ [45,160] представили более громоздкое выражение для E_{PL} , однако в основном оно соответствует полученному в (2.29).

Чтобы вычислить критические параметры нанопроволоки «ядро-оболочка», при которых может сформироваться одиночная ПДП несоответствия, необходимо вычислить энергию взаимодействия петли и ядра нанопроволоки $E_{PL-core}$.

2.2.2 Взаимодействие одиночной ПДП с полем напряжений несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка»

Энергия взаимодействия $E_{PL-core}$ может быть вычислена с помощью формулы упругого взаимодействия между любыми двумя дефектами I и II [154]:

$$E_{I-II} = -\int_V {}^I \varepsilon_{ij}^* {}^II \sigma_{ij} dV = -\int_V {}^II \varepsilon_{ij}^* {}^I \sigma_{ij} dV, \quad (2.30)$$

где ${}^{I,II} \varepsilon_{ij}^*$ – собственная дисторсия дефекта I или II, а ${}^{I,II} \sigma_{ij}$ – поле напряжений, создаваемое дефектом I или II.

Таким образом, энергия взаимодействия между ПДП и ядром нанопроволоки может быть найдена следующим образом:

$$E_{PL-core} = -\int_V {}^{PL} \varepsilon_{zz}^* {}^c \sigma_{zz} dV = \mp b \int_0^c \int_0^{2\pi} {}^c \sigma_{zz} \Big|_{z=z_0} r dr d\varphi = \pm \frac{2G(1+\nu)\pi \varepsilon^* b a^2}{1-\nu} (1-t^2)t^2, \quad (2.31a)$$

$$E_{PL-core} = -\int_V {}^c \varepsilon_{ii}^* {}^{PL} \sigma_{ii} dV = -\varepsilon^* \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^c \text{Tr}({}^\infty \boldsymbol{\sigma} + {}^i \boldsymbol{\sigma}) r dr d\varphi dz = \pm \frac{2G(1+\nu)\pi \varepsilon^* b a^2}{1-\nu} (1-t^2)t^2, \quad (2.31б)$$

в которые ε^* входит со своим знаком; верхний и нижний знаки соответствуют знаку собственной дисторсии ПДП из уравнения (2.11); ${}^c \sigma_{zz}$, $\text{Tr} {}^\infty \boldsymbol{\sigma}$ и $\text{Tr} {}^i \boldsymbol{\sigma}$ берутся из уравнений (2.3в), (2.14ж) и (2.15ж) соответственно. Интеграл (2.31а) вычислить легко, в то время как (2.31б) может вызывать некоторые затруднения (см. Приложение В).

Уравнения (2.31) показывают, что $E_{PL-core} < 0$ и релаксация напряжений возможна либо при $\varepsilon^* > 0$ и ${}^{PL} \varepsilon_{zz}^* = -bH(1 - \frac{r}{c}) \delta(z - z_0)$, либо при $\varepsilon^* < 0$ и ${}^{PL} \varepsilon_{zz}^* = bH(1 - \frac{r}{c}) \delta(z - z_0)$. В первом случае имеется ввиду петля вычитания, как показано на рис. 2.1б. Во втором случае – петля внедрения. Кроме того, постулируется, что радиусы петли и ядра нанопроволоки равны c .

Из уравнения (2.31) следует, что минимум (или максимум) энергии $E_{PL-core}$ соответствует параметру $t = 1/\sqrt{2} \approx 0,707$, что совпадает с t_{max} , полученному из уравнения (2.7).

На рис. 2.6 показан график энергии взаимодействия двух ПДП $E_{PL-core}$ в зависимости от приведённого радиуса ядра нанопроволоки $t = c/a$ для различных значений радиуса нанопроволоки a при положительной собственной дисторсии ($\varepsilon^* > 0$), соответствующей петле вычитания. Как видно, $E_{PL-core} < 0$ во всём диапазоне t .

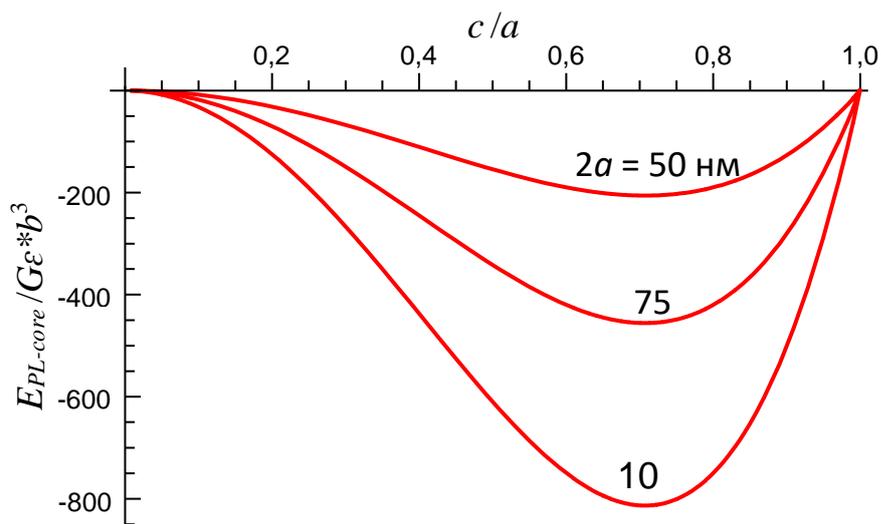


Рис. 2.6. Энергия $E_{PL-core}$ взаимодействия между ПДП и ядром нанопроволоки в зависимости от приведённого радиуса ядра $t = c/a$ для $2a = 50, 75$ и 100 нм при $b = 0,3$ нм и $\nu = 0,3$.

2.2.3 Критические условия формирования одиночной ПДП несоответствия на границе ядра и оболочки нанопроволоки

При формировании одиночной ПДП несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка» изменение энергии ΔE из уравнения (2.10) с использованием (2.29) и (2.31) можно переписать как:

$$\Delta E = \frac{Gb^2at}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1,08\gamma ta}{b} - 2t \int_0^{\infty} \Theta(\beta, t) d\beta \pm \frac{4(1+\nu)\pi f a}{b} (1-t^2)t \right). \quad (2.32)$$

На рис. 2.7 представлена карта изменения энергии ΔE в координатах (t, f) для двух случаев: 1) $\varepsilon^* > 0$, петля вычитания, (2.11), и 2) $\varepsilon^* < 0$, петля внедрения. Линия $\Delta E = 0$ отделяет зону когерентного состояния нанопроволоки, где $\Delta E > 0$ и

формирование ПДП несоответствия энергетически невыгодно, от зоны частично релаксированного состояния с $\Delta E < 0$, где формирование ПДП

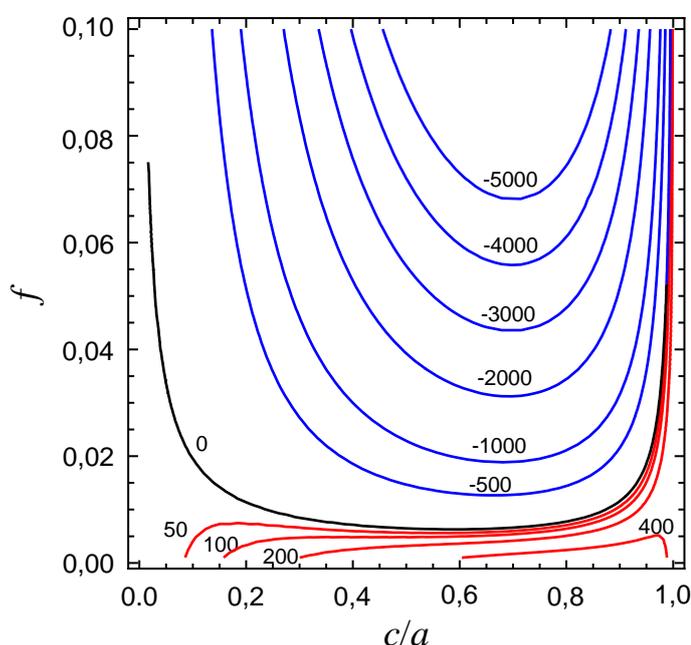


Рис. 2.7. Карта изменения энергии ΔE нанопроволоки «ядро-оболочка», вызванного формированием одиночной петли дислокаций несоответствия, в координатах приведённого радиуса ядра $t = c/a$ и параметра несоответствия f для $a = 50$ нм, $\nu = 0,3$, $\gamma = 1$, $b = 0,3$ нм. Значения ΔE даны в единицах Gfb^3 .

несоответствия энергетически выгодно. Фактически, линия, разделяющая эти зоны есть зависимость $f(t)$, которая позволяет либо вычислить критические размеры нанопроволоки для любого значения f (т.е. для любой пары материалов), либо критическое несоответствие f_c для выбранных t и a (или c). Очевидно, что для любого радиуса нанопроволоки a существует определённое значение t ($t \approx 0,7$ на рис. 2.6), которому соответствует локальный минимум f_{min} ($f_{min} \approx 0,0065$ на рис. 2.7), и никакая ПДП не может сформироваться в нанопроволоке «ядро-оболочка» данного радиуса при $f < f_{min}$.

Для любого выбранного значения $f > f_{min}$, функция $f(t)$ позволяет определить два критических соотношения радиусов ядра и оболочки t_{c1} и t_{c2} (рис. 2.7), между которыми процесс релаксации теоретически возможен. Ранее подобный результат

был получен для формирования прямолинейных дислокаций несоответствия в нанопроволоках «ядро-оболочка» [36] и круговых ПДП в сферических частицах «ядро-оболочка» с ядрами различных типов [161-165].

Понятно, что подобные расчёты могут быть формально проведены для любого числа n круговых ПДП несоответствия с выбранным заранее расстоянием между ними. В этом случае необходимо умножить центральную часть формулы (2.10) на n и дополнить формулу слагаемым, отвечающим за упругое взаимодействие всех ПДП между собой. Это слагаемое легко записать как сумму парных взаимодействий круговых ПДП из раздела 2.3.1. Однако это исследование не представляет особого интереса, так как наиболее важным показателем для производителей нанопроволок является случай с зарождением первой петли ($n = 1$), так как это позволит им отделить в процессе производства когерентные (бездефектные) нанопроволоки от некогерентных (содержащих дислокации), По этой причине мы не рассматриваем критические условия для случая $n > 1$.

2.3 Периодический ансамбль петель дислокаций несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка»

Вслед за формированием одиночной ПДП несоответствия может сформироваться периодический ансамбль ПДП (рис. 2.1б), для которого может быть поставлен вопрос о равновесном расстоянии между дефектами.

Чтобы определить равновесное расстояние между ПДП несоответствия в этом ансамбле, найдём энергию частично релаксированной нанопроволоки с ансамблем ПДП в ней, или другими словами, энергию конечного состояния нанопроволоки после её частичной релаксации

Для дальнейших расчётов, рассмотрим ядро нанопроволоки с распределёнными вдоль него ПДП несоответствия как единый дефект (рис. 2.1б).

В таком случае, мы можем использовать (2.5), чтобы вычислить энергию такого дефекта.

В системе, показанной на рис. 2.1б, h – расстояние между соседними ПДП, распределёнными вдоль оси нанопроволоки, таким образом координаты петель могут быть записаны как $z_0 = kh$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, а нанопроволоку можно разбить на сегменты вида $[-h/2 + kh, h/2 + kh]$. Так как собственная дисторсия ядра $\varepsilon > 0$ (рис. 2.1а), петли несоответствия характеризуются собственными дисторсиями (рис. 2.1б):

$${}^{PL}\varepsilon_{zz}^* = -bH\left(1 - \frac{r}{c}\right)\delta(z - kh), \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.33)$$

В конечном состоянии (рис. 2.1б) Энергия \tilde{E}_{final} , приходящаяся на период длины нанопроволоки ($\tilde{E}_{final} = E_{final} / h$) равна

$$\tilde{E}_{final} = -\frac{1}{2h} \int_{V_h} \varepsilon_{ij}^* \sigma_{ij} dV = -\frac{1}{2h} \int_{-h/2}^{h/2} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^a \varepsilon_{ij}^* \sigma_{ij} r dr, \quad (2.34)$$

где $\varepsilon_{ij}^* = {}^c\varepsilon_{ij}^* + \sum_{k=-\infty}^{\infty} {}^{PL}\varepsilon_{ij}^*(z - kh)$; $\sigma_{ij} = {}^c\sigma_{ij} + \sum_{k=-\infty}^{\infty} {}^{PL}\sigma_{ij}(z - kh)$; V_h – объём сегмента нанопроволоки в отрезке $[-h/2, h/2]$. С собственной дисторсией ядра (2.1) и ПДП (2.33), формулу (2.34) можно переписать как

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{final} = -\frac{1}{2h} \int_{-h/2}^{h/2} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^a \left(\varepsilon^* H\left(1 - \frac{r}{c}\right) \text{Tr}^c \boldsymbol{\sigma} + \varepsilon^* H\left(1 - \frac{r}{c}\right) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \text{Tr}^{PL} \boldsymbol{\sigma}(r, z - kh) + \right. \\ \left. + {}^{PL}\varepsilon_{zz}^* \Big|_{k=0} {}^c\sigma_{zz} + {}^{PL}\varepsilon_{zz}^* \Big|_{k=0} \sum_{k=-\infty}^{\infty} {}^{PL}\sigma_{zz}(r, z - kh) \right) r dr. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Можно представить энергию \tilde{E}_{final} из уравнения (2.35), в форме четырёх следующих слагаемых:

$$\tilde{E}_{final} = \tilde{E}_{initial} + \frac{1}{2}\tilde{E}_{array-core} + \frac{1}{2}\tilde{E}_{PL-core} + \frac{1}{2}\tilde{E}_{PL-array}, \quad (2.36)$$

где $\tilde{E}_{initial} = \tilde{E}_{core}$; $\tilde{E}_{array-core}$ – энергия взаимодействия между ансамблем ПДП несоответствия и ядром; $\tilde{E}_{PL-core}$ – энергия взаимодействия между ПДП несоответствия, находящихся в интервале $[-h/2, h/2]$ и ядром; $\tilde{E}_{PL-array}$ – энергия взаимодействия ПДП несоответствия с остальными ПДП в ансамбле. Все энергии относятся к интервалу $[-h/2, h/2]$ и приведены к h .

Второе энергетическое слагаемое $\tilde{E}_{array-core}$ можно преобразовать в:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{array-core} &= -\frac{1}{h} \int_{-h/2}^{h/2} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^a \varepsilon^* H(1 - \frac{r}{c}) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \text{Tr}^{PL} \boldsymbol{\sigma}(r, z - kh) r dr = \\ &= -\frac{1}{h} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-h/2-kh}^{h/2+kh} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^c \varepsilon^* \text{Tr}^{PL} \boldsymbol{\sigma}(r, z) r dr = \\ &= -\frac{\varepsilon^*}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^c \text{Tr}(\boldsymbol{\sigma} + {}^i \boldsymbol{\sigma}) r dr = \frac{1}{h} E_{PL-core}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

как показано в (2.31б).

третье слагаемое $\tilde{E}_{PL-core}$:

$$\tilde{E}_{PL-core} = -\frac{1}{h} \int_V^{PL} \varepsilon_{zz}^* \sigma_{zz} dV = \frac{b}{h} \int_0^c \int_0^{2\pi} \sigma_{zz} \Big|_{z=z_0} r dr d\varphi = \frac{1}{h} E_{PL-core}, \quad (2.38)$$

как показано в (2.31а).

Четвёртое слагаемое $\tilde{E}_{PL-array}$ записывается в виде

$$\tilde{E}_{PL-array} = -\frac{1}{h} \int_{-h/2}^{h/2} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^a \varepsilon_{zz}^* \Big|_{k=0} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \text{Tr}^{PL} \sigma_{zz}(r, z - kh) r dr = \frac{2}{h} E_{PL} + \frac{1}{h} \sum_{k=-\infty, k \neq 0}^{\infty} E_{PL-kPL}, \quad (2.39)$$

где E_{PL} – собственная энергия петли, расположенной в интервале $[-h/2, h/2]$; E_{PL-kPL} – энергия взаимодействия между ПДП несоответствия расположенной в интервале $[-h/2, h/2]$ и k -той ПДП в ансамбле.

С уравнениями (2.36) – (2.39) энергия периода системы (рис. 2.1б) запишется:

$$E_{h,final} = h\tilde{E}_{final} = h\tilde{E}_{core} + E_{PL} + E_{PL-core} + \frac{1}{2} \sum_{k=-\infty, k \neq 0}^{\infty} E_{PL-kPL}. \quad (2.40)$$

Последнее слагаемое в (2.40) можно переписать так:

$$\frac{1}{2} \sum_{k=-\infty, k \neq 0}^{\infty} E_{PL-kPL} = \sum_{k=1}^{\infty} E_{PL-kPL}.$$

Понятно, что выражение (2.40) выглядит вполне естественно и могло быть записано безо всяких доказательств, предоставленных уравнениями (2.34) – (2.39) [53,54,62]. Впрочем, для бесконечной периодической системы вроде «нанопроволока + петли» это не столь очевидно.

2.3.1 Парное взаимодействие ПДП

Рассмотрим энергию парного взаимодействия более подробно, используя собственную дисторсию ${}^{PL}\mathcal{E}_{zz}^*|_{k=0}$ из (2.33):

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} E_{PL-kPL} &= - \int_{-h/2}^{h/2} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^a (-b)H(1 - \frac{r}{c})\delta(z) \sum_{k=1}^{\infty} {}^{PL}\sigma_{zz}(r, z - z_0)|_{z_0=kh} r dr = \\ &= 2\pi b \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^c {}^{PL}\sigma_{zz}|_{z=0}^{z_0=kh} r dr = 2\pi b \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \int_0^c ({}^{\infty}\sigma_{zz}|_{z=0}^{z_0=kh} + {}^i\sigma_{zz}|_{z=0}^{z_0=kh}) r dr, \end{aligned} \quad (2.41)$$

где ${}^{\infty}\sigma_{zz}\Big|_{\substack{z=0 \\ z_0=kh}} = \frac{Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1}{c} J(1,0;1)\Big|_{\substack{z=0 \\ z_0=kh}} + \frac{kh}{c^2} J(1,0;2)\Big|_{\substack{z=0 \\ z_0=kh}} \right]$, см. (2.14В), и

$${}^i\sigma_{zz}\Big|_{\substack{z=0 \\ z_0=kh}} = \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \beta \left[(2C_1\nu + D_1\beta) I_0(\tilde{r}\beta) + \tilde{r} C_1 \beta I_1(\tilde{r}\beta) \right] \cos(\beta k\tilde{h}) d\beta, \text{ см. (2.15В),}$$

$$\tilde{h} = h/a, \quad \tilde{r} = r/a.$$

Знаки напряжений соответствуют знакам собственных дисторсий ПДП (2.33), т.е. петлям вычитания.

Проинтегрировав по r , из (2.41) получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} E_{PL-kPL} &= \frac{\pi G b^2 c}{(1-\nu)} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \int_0^{\infty} J_1^2(\kappa) \left(1 + \frac{kh}{c} \kappa\right) e^{-\frac{kh}{c} \kappa} d\kappa + \\ &4\pi G b c \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \int_0^{\infty} \left[(2C_1\nu + D_1\beta) I_1^* + t C_1 \beta I_2^* \right] \cos(\beta k\tilde{h}) d\beta. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Рассмотрим 2 пограничных случая для (2.42): $N=1$ и $N \rightarrow \infty$.

1) В случае $N=1$ петля, расположенная в интервале $[-h/2, h/2]$, взаимодействует с двумя ближайшими ПДП, и тогда половина этой энергии может быть ассоциирована с рассматриваемым интервалом. Также это есть полная энергия двух ПДП, расположенных на расстоянии h друг от друга.

$$E_{PL-PL} = \frac{G b^2 a t}{(1-\nu)} \left(\pi \int_0^{\infty} J_1^2(\kappa) \left(1 + \frac{h}{c} \kappa\right) e^{-\frac{h}{c} \kappa} d\kappa - 2t \int_0^{\infty} \Theta(\beta, t) \cos(\beta \tilde{h}) d\beta \right). \quad (2.43)$$

2) В случае $N \rightarrow \infty$, (2.42) трансформируется в

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} E_{PL-kPL} &= \frac{G b^2 a t}{(1-\nu)} \left(\pi \int_0^{\infty} J_1^2(\kappa) \Lambda d\kappa - \right. \\ &\left. 2t \lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} \Theta(\beta, t) \left(\operatorname{cosec} \frac{\tilde{h}\beta}{2} \sin \frac{(N+1)\tilde{h}\beta}{2} \cos \frac{N\tilde{h}\beta}{2} - 1 \right) d\beta \right), \end{aligned} \quad (2.44)$$

где $\Lambda = \left(\exp\left(-\frac{h\kappa}{c}\right) \left(1 + \frac{h\kappa}{c}\right) - \exp\left(-\frac{2h\kappa}{c}\right) \right) \left(1 - \exp\left(-\frac{h\kappa}{c}\right)\right)^{-2}$. В (2.43) и (2.44) мы использовали ту же замену $\Theta(\beta, t) = \frac{\beta^2 t^2 I_0^{*2} + w I_1^{*2} - 2\beta t I_1^* I_0^* (w I_1 K_1 + \beta^2 I_0 K_0)}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2}$, что и ранее в (2.28). Остальные обозначения такие же, как в (2.19а-г).

Используя (2.43), вычислим зависимость энергии парного взаимодействия E_{PL-PL} для двух одинаковых ПДП в цилиндре от приведённого радиуса петель $t = c/a$ и расстояния между ними h/a при наружных диаметрах цилиндра $2a = 10, 50$ и 100 нм (рис. 2.8).

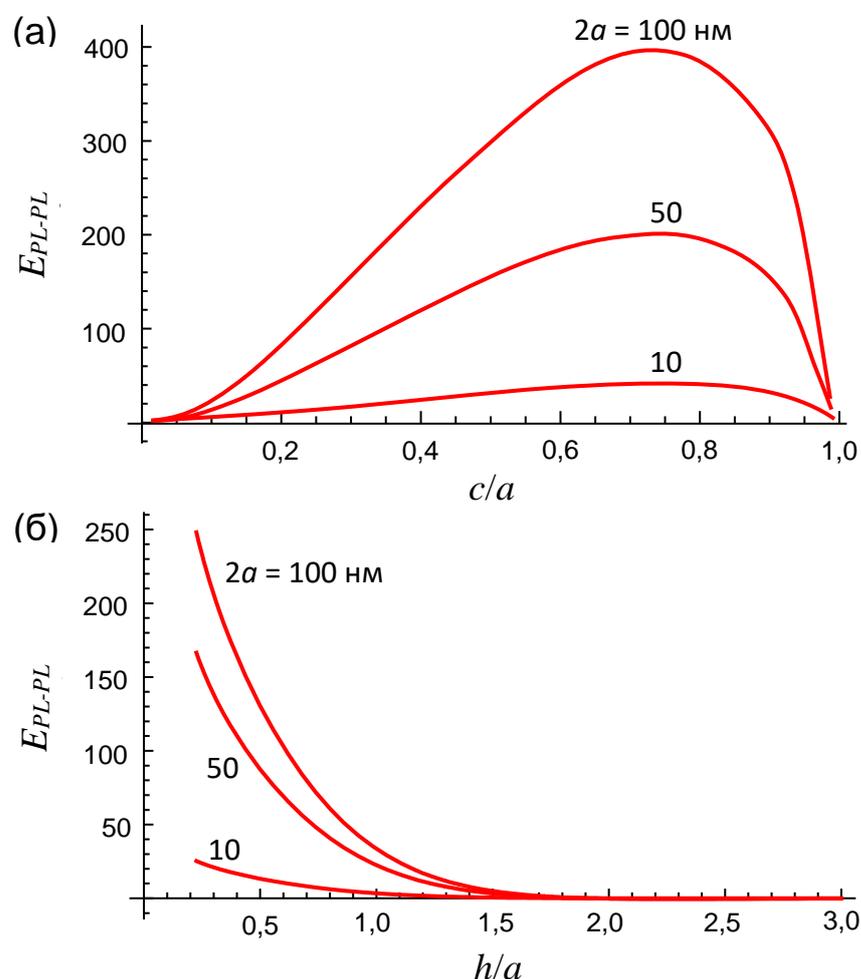


Рис. 2.8. Зависимость энергии E_{PL-PL} парного взаимодействия ПДП в цилиндре от (а) приведённого радиуса ПДП $t = c/a$ для $h/a = 0,1$ и (б) приведённого расстояния между петлями h/a для $t = 0,7$, при $2a = 10, 50$ и 100 нм; $b \approx 0,3$ нм, $\nu = 0,3$.

Из рис. 2.8а видно, что существует такое значение t , при котором E_{PL-PL} максимальна для ПДП одного типа и минимальна для ПДП разного типа. Для различных a , эти значения $t \approx 0,75-0,77$. Из рис. 2.8б также ясно, что при расстоянии h между ПДП более $\sim 1,5a$, энергия их упругого взаимодействия становится пренебрежимо малой. Кроме того, когда h превышает отметку $\sim 2a$, взаимное влияние петель практически исчезает.

2.3.2 Равновесное расстояние в ансамбле петель дислокаций несоответствия

Для существования равновесного ансамбля петель дислокаций несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка» необходимо выполнение трёх условий, наложенных на показатель энергии на единицу длины системы (рис. 2.1б), а именно – условия минимума энергии и условие отрицательного изменения энергии:

$$\frac{\partial}{\partial h} \tilde{E}_{final} = 0, \quad \frac{\partial^2}{\partial h^2} \tilde{E}_{final} > 0, \quad (2.45a)$$

$$\Delta \tilde{E} < 0. \quad (2.45b)$$

Здесь общая формула (2.40) для \tilde{E}_{final} может быть расписана полностью с использованием соотношений (2.6), (2.29), (2.31) и (2.44):

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{final} = & \frac{2G(1+\nu)\pi f^2 a^2}{(1-\nu)} (1-t^2)t^2 \\ & + \frac{Gb^2 at}{2(1-\nu)h} \left\{ \ln \frac{1,08\gamma ta}{b} - 2t \int_0^\infty \Theta(\beta, t) d\beta - \frac{4(1+\nu)\pi fa}{b} (1-t^2)t \right. \\ & \left. + 2\pi \int_0^\infty J_1^2(\kappa) \Lambda d\kappa - 4t \lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^\infty \Theta(\beta, t) \left(\operatorname{cosec} \frac{\tilde{h}\beta}{2} \sin \frac{(N+1)\tilde{h}\beta}{2} \cos \frac{N\tilde{h}\beta}{2} - 1 \right) d\beta \right\}, \quad (2.46) \end{aligned}$$

Изменение энергии на единицу длины $\Delta \tilde{E}$ системы запишется так:

$$\Delta\tilde{E} = \tilde{E}_{final} - \tilde{E}_{core} = \tilde{E}_{final} - \frac{2G(1+\nu)\pi f^2 a^2}{(1-\nu)}(1-t^2)t^2. \quad (2.47)$$

Как видно из формулы (2.45а) и (2.46), равновесное расстояние h_{eq} не зависит от энергии деформации \tilde{E}_{core} ядра нанопроволоки (первое слагаемое в (2.46)), но зато зависит от всех остальных слагаемых в (2.46).

Были численно проанализированы равновесные условия (2.45) с использованием характеристик материала и структуры выращенных в ходе эксперимента [22] нанопроволок с ядром InAs и оболочкой GaAs. Величина несоответствия для этой пары материалов может быть оценена двумя способами, которым соответствуют два близких значения $f = 0,0667$ и $0,0717$.

Диаметр нанопроволоки $2a$ равнялся ~ 100 нм, его соотношение радиусов ядра и оболочки равнялось $t \approx 0,7$, а величина вектора Бюргерса, измеренная по снимкам электронного микроскопа, оказалась равна $b \approx 0,3$ нм. Авторы [22] также продемонстрировали, что на расстоянии в $1,5a$ разместилось до 20 петель дислокаций несоответствия вдоль оси нанопроволоки. Как показано в разделе 2.3.1, энергия парного взаимодействия ПДП в цилиндре радиуса a быстро снижается с увеличением h и становится пренебрежимо малой уже при $h > 1,5a$ (рис. 2.8б). Исходя из этого, в наших численных расчётах мы рассматриваем упругое взаимодействие центральной петли периода только с 40 ближайшими соседями, т.е. уравнения (2.46) и (2.47) используются с $N = 20$.

На рис. 2.9 показана зависимость энергии \tilde{E}_{final} от приведённого расстояния между ПДП h/a для двух значений несоответствия: $f = 0,0667$ и $0,0717$. Как видно, обе кривые имеют минимумы $\tilde{E}_{final, \min} / Gb^2 \approx 4,61 \cdot 10^4$ и $5,32 \cdot 10^4$ при $h_{eq}/a \approx 0,181$ и $0,167$, соответственно. Интересно оценить среднюю энергию, приходящуюся на 1 атом, в абсолютных единицах в таком равновесном частично релаксированном состоянии. Для этого мы воспользуемся необходимыми данными для ядра InAs, занимающего наибольшую долю объёма в нанопроволоке, из справочника [166]:

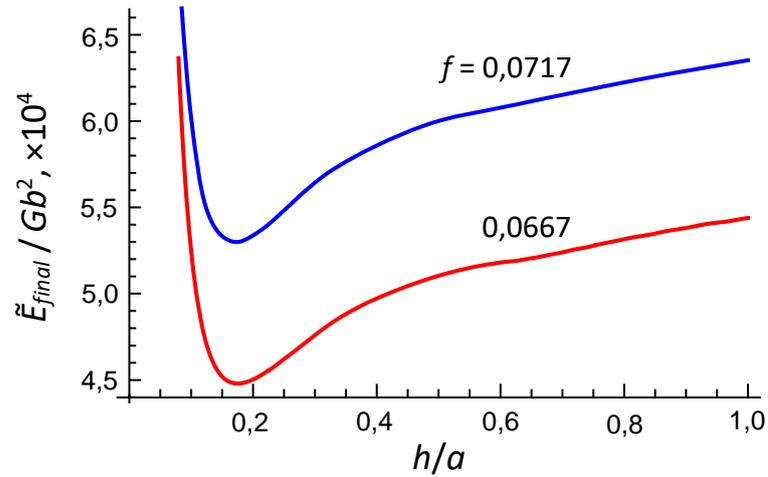


Рис. 2.9. Зависимость энергии \tilde{E}_{final} частично релаксированной нанопроволоки с ядром InAs и оболочкой GaAs диаметром $2a = 100$ нм от приведённого расстояния между петлями дислокаций несоответствия h/a для двух значений несоответствия, $f = 0,0667$ и $0,0717$, $\nu = 0,3$.

$G_{InAs} = 19$ ГПа, $b_{InAs} = 0,328$ нм. Объем монослоя в поперечном сечении нанопроволоки диаметром $2a = 100$ нм, а его площадь $S = \pi a^2 \approx 7854$ нм², $V \approx \pi a^2 b_{InAs} \approx 2578$ нм³. Также известно среднее количество атомов InAs в объёме: $n_{InAs} \approx 3,59 \cdot 10^{22}$ см⁻³ [166], таким образом число атомов в монослое $N \approx n_{InAs} V \approx 92550$. Таким образом, минимальную энергию, приходящуюся на один атом, можно оценить как $\tilde{E}_{final, min} b_{InAs} / N \approx 2,1$ и $2,4$ эВ/ат. при $h_{eq} / a \approx 0,181$ и $0,167$, соответственно. Эти значения достаточно велики, но вполне обоснованы.

На рис. 2.10 изображена зависимость изменения энергии $\Delta\tilde{E}$, полученная из (2.47) от h/a для двух значений несоответствия, $f = 0,0667$ и $0,0717$, она подтверждает правильность (2.45б) для $h/a > 0,09$ и $0,08$, соответственно. Это значит, что нанопроволока «ядро-оболочка» InAs-GaAs диаметром 100 нм, не может иметь расстояние между дислокационными петлями h менее чем ~ 4 нм. Ансамбли ПДП меньшей плотности, очевидно, более энергетически выгодны в нанопроволоках.

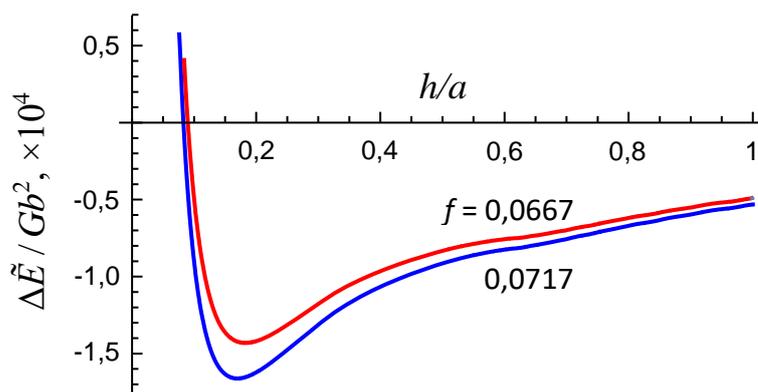


Рис. 2.10. Зависимость изменения энергии $\Delta\tilde{E}$ частично релаксированной нанопроволоки с ядром InAs и оболочкой GaAs диаметром $2a = 100$ нм от приведённого расстояния между петлями дислокаций несоответствия h/a для двух значений несоответствия, $f = 0,0667$ и $0,0717$, $\nu = 0,3$.

Возвращаясь к равновесному распределению петель дислокаций несоответствия в обсуждаемой нанопроволоке (рис. 2.9), мы имеем $h_{eq} \approx 9,05$ и $8,35$ нм для $f = 0,0667$ и $0,0717$ соответственно. Эти результаты хорошо соответствуют экспериментальным наблюдениям, в ходе которых было выявлено, что равновесное расстояние между ПДП находится в диапазоне от ~ 7 до $\sim 8,5$ нм [22].

При достижении равновесного расстояния между ПДП $h_{eq}/a \approx 0,181$ и $0,167$ (для $f = 0,0667$ и $0,0717$, соответственно), изменение $\Delta\tilde{E}$ принимает своё минимальное значение $\Delta\tilde{E}_{\min}/Gb^2 \approx -1,43 \cdot 10^4$ и $-1,67 \cdot 10^4$ соответственно. В абсолютных единицах энергии на атом это означает $\Delta\tilde{E}_{\min} b_{\text{InAs}}/N \approx -0,65$ и $-0,76$ эВ/ат. соответственно. Эти значения довольно велики, они показывают, что оптимальный режим релаксации напряжений несоответствия путём образования ряда дислокационных петель с равновесным расстоянием между ними может предоставить выигрыш в энергии до $|\Delta\tilde{E}_{\min}|/\tilde{E}_{\text{final},\min} \approx 0,310$ и $0,314$ соответственно, что можно округлить до 31%.

2.4 Выводы по главе

II глава данной работы посвящена вычислению 1) критических условий релаксации напряжений несоответствия в нанопроволоках «ядро-оболочка» путём зарождения петли дислокаций несоответствия на границе ядра и оболочки; 2) равновесного расстояния между такими петлями в их бесконечном периодическом ансамбле в нанопроволоке «ядро-оболочка».

Были получены следующие результаты:

- Были найдены новые компактные аналитические решения для полей напряжений, генерируемых петлями дислокаций несоответствия в бесконечном упруго-изотропном цилиндре со свободной поверхностью при помощи метода Лурье [155].
- Представлены новые компактные аналитические решения для энергии деформации круговой петли дислокаций несоответствия в цилиндре. Общий вид полученных решений соответствует известным ранее результатам [45].
- Впервые было получено компактное аналитическое решение для парного взаимодействия осевых ПДП в цилиндре.
- С использованием полученных выше результатов, изучены критические условия формирования первой петли дислокаций несоответствия на межфазной границе нанопроволоки «ядро-оболочка».
- Также было вычислено равновесное расстояние между петлями дислокаций несоответствия в бесконечном периодическом ансамбле на границе ядра и оболочки нанопроволоки. Для частного случая нанопроволоки с ядром InAs и оболочкой GaAs с наружным диаметром 100 нм и соотношением радиусов ядра и оболочки $\sim 0,7$, выращенной и экспериментально изученной группой [22], мы продемонстрировали, что теоретически вычисленное по нашему методу расстояние между соседними ПДП 8,35–9,05 нм хорошо соответствует экспериментальному результату в 7,0–8,5 нм. В ходе релаксации по такому механизму внутренняя энергия системы уменьшилась на $\sim 31\%$.

Основываясь на результатах, перечисленных выше, можно заключить, что использованный в работе подход для вычисления критических условий зарождения одиночной петли дислокаций несоответствия и параметров равновесного распределения петель в ансамбле весьма эффективен для предсказания формирования и равновесной плотности петель дислокаций несоответствия в композитных нанопроволоках «ядро-оболочка».

Глава III

Призматические дислокационные петли в каналах с покрытием

3.1 ПДП, охватывающая цилиндрический канал в бесконечном пространстве

Рассмотрим круговую ПДП радиусом c , расположенную симметрично относительно оси длинного цилиндрического канала радиусом a в бесконечном упругом пространстве (рис. 3.1). Расположим модель так, чтобы ось канала совпадала с осью z цилиндрической системы координат (r, φ, z) , а плоскость залегания ПДП пересекала ось в точке $z = z_0$. Собственная дисторсия такой петли известна [156]:

$${}^{PL}\varepsilon_{zz}^* = \pm bH \left(1 - \frac{r}{c}\right) \delta(z - z_0), \quad (3.1)$$

где b – величина вектора Бюргерса ПДП, а $\delta(z - z_0)$ – дельта-функция Дирака.

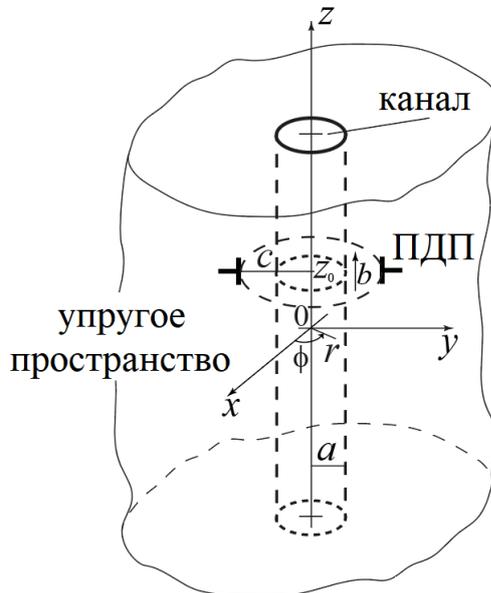


Рис. 3.1. Призматическая дислокационная петля (ПДП) радиусом c , соосная цилиндрическому каналу радиусом a в бесконечном упругом пространстве. Показаны Декартова (x, y, z) и цилиндрическая (r, φ, z) системы координат.

Отметим также, что верхний знак в уравнении (3.1) соответствует ПДП внедрения, а нижний – петле вычитания.

Вблизи свободной поверхности упругие напряжения σ_{ij} , генерируемые ПДП, могут быть найдены как сумма напряжений, генерируемых петлёй в бесконечном пространстве ${}^{\infty}\sigma_{ij}$ и некоторой добавки ${}^i\sigma_{ij}$, обусловленной наличием границы материала,

$$\sigma_{ij} = {}^{\infty}\sigma_{ij} + {}^i\sigma_{ij}, \quad (3.2)$$

позволяющей также выполняться граничным условиям на поверхности канала $r = a$:

$${}^{\infty}\sigma_{rr}\Big|_{r=a} + {}^i\sigma_{rr}\Big|_{r=a} = 0, \quad (3.3a)$$

$${}^{\infty}\sigma_{rz}\Big|_{r=a} + {}^i\sigma_{rz}\Big|_{r=a} = 0. \quad (3.3б)$$

Так как круговая ПДП не обладает компонентой ${}^{\infty}\sigma_{r\varphi}$, граничные условия, наложенные на неё, можно считать выполненными автоматически.

Напряжения ${}^{\infty}\sigma_{ij}$, генерируемые ПДП в бесконечном упругом пространстве, можно записать так [157]:

$${}^{\infty}\sigma_{rr} = \frac{\pm Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1-2\nu}{r} J(1,1;0) + \frac{|z-z_0|}{c^2} J(1,0;2) - \frac{1}{c} J(1,0;1) - \frac{|z-z_0|}{cr} J(1,1;1) \right], \quad (3.4a)$$

$${}^{\infty}\sigma_{\varphi\varphi} = \frac{\pm Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{2\nu-1}{r} J(1,1;0) - \frac{2\nu}{c} J(1,0;1) + \frac{|z-z_0|}{cr} J(1,1;1) \right], \quad (3.4б)$$

$${}^{\infty}\sigma_{zz} = \frac{\mp Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1}{c} J(1,0;1) + \frac{|z-z_0|}{c^2} J(1,0;2) \right], \quad (3.4в)$$

$${}^{\infty}\sigma_{rz} = \frac{\mp Gb}{2(1-\nu)} \frac{(z-z_0)}{c^2} J(1,1;2), \quad (3.4г)$$

$${}^{\infty}\sigma_{r\varphi} = {}^{\infty}\sigma_{z\varphi} = 0, \quad (3.4д,е)$$

$$\text{Tr } {}^{\infty}\boldsymbol{\sigma} = {}^{\infty}\sigma_{rr} + {}^{\infty}\sigma_{\varphi\varphi} + {}^{\infty}\sigma_{zz} = \frac{\mp G(1+\nu)b}{(1-\nu)c} J(1,0;1), \quad (3.4ж)$$

где G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, $J(k,l;p)$ – интегральные функции с разделёнными переменными r и z , называемые также интегралами

Лифшица-Ханкеля [158] : $J(k,l;p) = \int_0^{\infty} J_k(\kappa) J_l(\kappa \frac{r}{c}) \exp(-\kappa \xi) \kappa^p d\kappa$, J_k и J_l –

функции Бесселя первого рода, а $\xi = |z - z_0|/c > 0$. Для численных расчётов интегралы Лифшица-Ханкеля можно удобно представить в виде эллиптических интегралов [123,158,167]. В уравнениях (3.4а-ж) верхний и нижний знак соответствуют знаку дислокационной петли по аналогии с уравнением (3.1).

Добавочные напряжения ${}^i\sigma_{ij}$ могут быть вычислены при помощи общего интегрального решения Лурье для симметрично нагруженного кругового упругого цилиндра [155]. Граничные условия (3.3) трансформируются в систему интегральных уравнений с неизвестными коэффициентами, которая решается стандартным способом с использованием интегрального преобразования Фурье. Процедура решения схожей системы интегральных уравнений для ПДП в цилиндре подробно рассмотрена в работе [123].

В результате напряжения, генерируемые ПДП, приобретают вид:

$$\sigma_{rr} = {}^{\infty}\sigma_{rr} + \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \left[-\beta (A_1(3-2\nu) + B_1\beta) K_0(\tilde{r}\beta) - \frac{1}{\tilde{r}} (A_1(-4\nu + \beta^2 \tilde{r}^2 + 4) + B_1\beta) K_1(\tilde{r}\beta) \right] \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (3.5а)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = {}^{\infty}\sigma_{\varphi\varphi} + \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \left[A_1\beta(1-2\nu) K_0(\tilde{r}\beta) + \frac{1}{\tilde{r}} (-4A_1(\nu-1) + B_1\beta) K_1(\tilde{r}\beta) \right] \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (3.5б)$$

$$\sigma_{zz} = {}^{\infty}\sigma_{zz} + \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \beta [(-2A_1\nu + B_1\beta) K_0(\tilde{r}\beta) + A_1\tilde{r}\beta K_1(\tilde{r}\beta)] \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (3.5в)$$

$$\sigma_{rz} = {}^{\infty}\sigma_{rz} + \frac{2G}{a} \int_0^{\infty} \beta [-A_1\tilde{r}\beta K_0(\tilde{r}\beta) + (2A_1(\nu-1) - B_1\beta) K_1(\tilde{r}\beta)] \sin\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (3.5г)$$

$$\sigma_{r\varphi} = \sigma_{z\varphi} = 0, \quad (3.5д,е)$$

$$\text{Tr}\sigma = \text{Tr}{}^{\infty}\sigma - \frac{4G(1+\nu)}{a} \int_0^{\infty} A_1\beta K_0(\tilde{r}\beta) \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \quad (3.5ж)$$

где $K_0(\tilde{r}\beta)$ и $K_1(\tilde{r}\beta)$ – функции Макдональда, A_1 и B_1 – коэффициенты, найденные из системы интегральных уравнений:

$$A_1 = \frac{\pm b\tau [K_1^\dagger [wI_1K_1 + \beta^2 I_0K_0] - \beta\tau K_0^\dagger]}{2\pi(\nu-1)[\beta^2 K_0^2 - wK_1^2]}, \quad (3.6a)$$

$$B_1 = \frac{\pm b\tau [\beta\tau K_0^\dagger [wI_1K_1 + \beta^2 I_0K_0 - 2\nu + 2] + K_1^\dagger [2\beta^2(\nu-1)I_0K_0 + w(2(\nu-1)I_1K_1 - 1)]]}{2\pi\beta(\nu-1)[\beta^2 K_0^2 - wK_1^2]}. \quad (3.6b)$$

Здесь $I_{0,1} = I_{0,1}(\beta)$ – функции Бесселя второго рода, $K_{0,1} = K_{0,1}(\beta)$, $K_{0,1}^\dagger = K_{0,1}(\beta\tau)$, $w = \beta^2 - 2\nu + 2$, $\tau = c/a$, $\tilde{r} = r/a$, $\tilde{z} = z/a$, а $\tilde{z}_0 = z_0/a$. Верхний и нижний знаки в коэффициентах соответствуют знаку собственной дисторсии ПДП из (3.1).

Карты напряжений, генерируемых петлёй вычитания радиусом $c = 1,5a$, окружающей цилиндрический канал, показаны на рис. 3.2 для $\nu = 0,3$. Из рис. 3.2а и 3.2б видно, что граничное условие из уравнений (3.3) выполнено. Поля напряжений испытывают сильное влияние свободной поверхности канала.

Энергия ПДП, окружающей канал в бесконечном упругом пространстве (рис. 3.1), может быть вычислена при помощи общей формулы для энергии деформации, вызванной любым дефектом [154]:

$$E_{def} = -\frac{1}{2} \int_V^{def} \varepsilon_{ij}^* \sigma_{ij}^{def} dV, \quad (3.7)$$

где $^{def} \varepsilon_{ij}^*$ – собственная дисторсия дефекта, $^{def} \sigma_{ij}$ – напряжения, генерируемые дефектом, а V – объём тела, либо, если принимать во внимание определение собственной дисторсии дефекта, (см. (3.1) для круговой ПДП), объём самого дефекта.

С учётом уравнений (3.1) и (3.2), энергия деформации ПДП запишется так:

$$E_{PL} = -\pi b \int_{a_1}^c (\sigma_{zz}^\infty + {}^i\sigma_{zz}) \Big|_{z=z_0} r dr. \quad (3.8)$$

После интегрирования (3.8) с учётом (3.4в) и (3.5в), а также включая слагаемое, отвечающее за энергию ядра дислокационной петли, полная энергия ПДП E_{PL}^i будет выглядеть так:

$$E_{PL}^i = \frac{Gb^2c}{2(1-\nu)} \left\{ \ln \frac{1,08\gamma c}{b} - \frac{2}{\tau} \mathbf{D} \left(\frac{1}{\tau} \right) - \frac{4}{\tau} \int_0^\infty [(-2\tilde{A}_1\nu + \tilde{B}_1\beta)(K_1 - \tau K_1^\dagger) + \tilde{A}_1\beta(K_2 - \tau^2 K_2^\dagger)] d\beta \right\}. \quad (3.9)$$

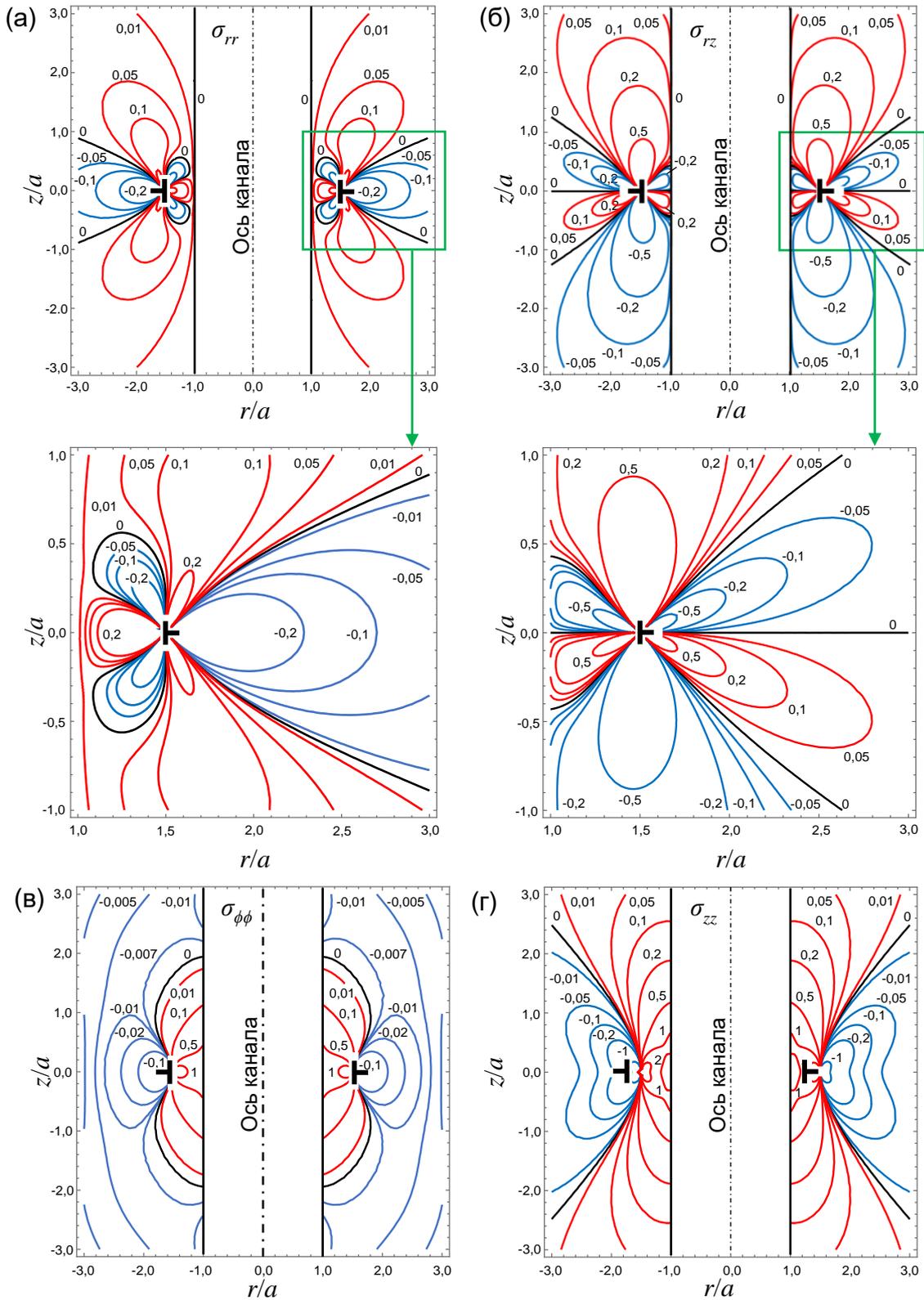


Рис. 3.2. Карты компонент напряжений (а) σ_{rr} , (б) σ_{rz} , (в) $\sigma_{\phi\phi}$, и (г) σ_{zz} , генерируемых ПДП вычитания радиусом $c = 1,5a$, окружающей цилиндрический канал радиусом a . Для компонент σ_{rr} и σ_{rz} , также показаны увеличенные фрагменты карт. Значения напряжений даны в единицах Gb/a .

Здесь первое слагаемое – полная энергия ПДП в бесконечном упругом пространстве [156,157,159], γ – параметр энергии ядра, варьирующийся от 1 для металлов до 4 для полупроводников [159], $\mathbf{D}(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2 s}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 s}} ds$ – полный эллиптический интеграл [168], $\tilde{A}_1 = A_1 \pi(1-\nu)/b$ и $\tilde{B}_1 = B_1 \pi(1-\nu)/b$.

На рис. 3.3а изображён график полной энергии E_{PL}^t ПДП, окружающей канал в бесконечном пространстве, в зависимости от приведённого радиуса петли $\tau = c/a$ при фиксированном радиусе канала $a = 100b$. На рис. 3.3б E_{PL}^t изображена в зависимости от $\tau^{-1} = a/c$ при фиксированном радиусе петли $c = 100b$.

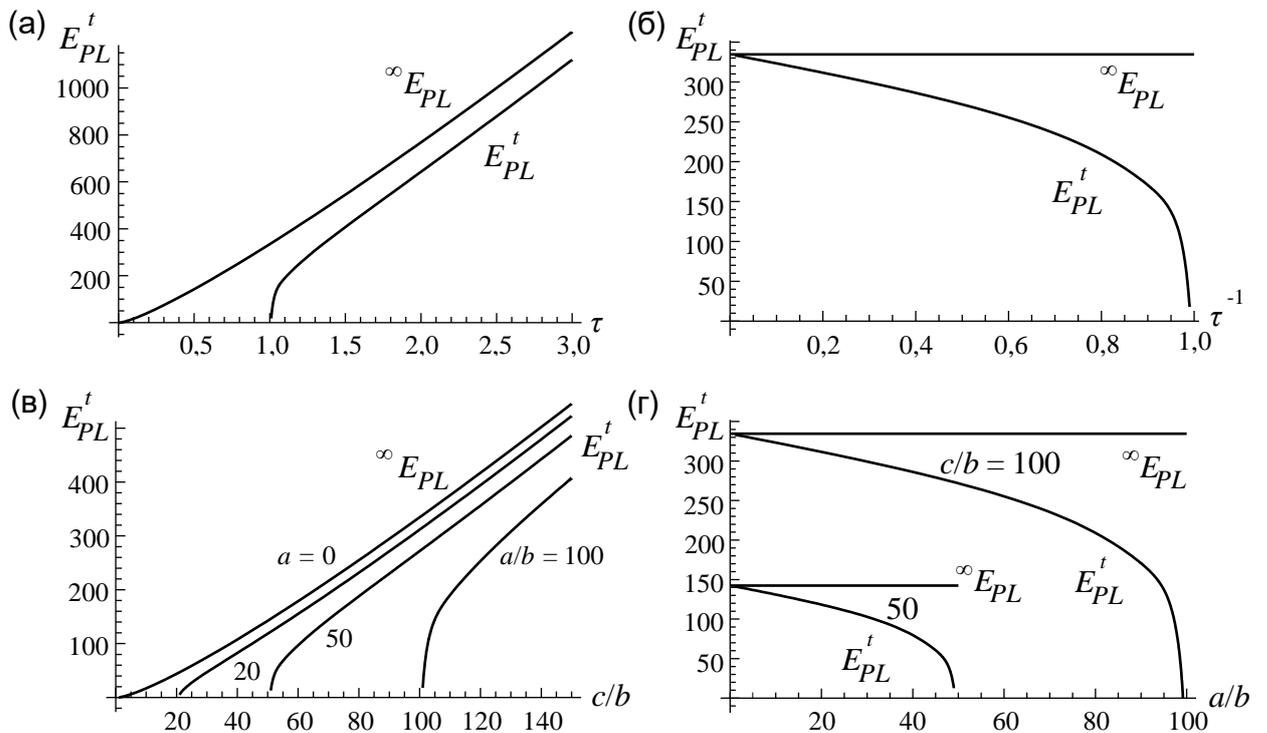


Рис. 3.3. Энергия E_{PL}^t ПДП, соосной цилиндрическому каналу в бесконечном упругом пространстве в зависимости от (а) приведённого радиуса ПДП $\tau = c/a$ при фиксированном радиусе канала $a = 100b$, (б) приведённого радиуса $\tau^{-1} = a/c$ при фиксированном радиусе ПДП $c = 100b$, (в) нормированного радиуса ПДП c/b при различных значениях a , и (г) нормированного радиуса канала a/b при различных значениях c ; коэффициент Пуассона $\nu = 0,3$, а $\gamma = 1$. Для сравнения показаны аналогичные зависимости полной энергии ${}^\infty E_{PL}$ петли в сплошном бесконечном упругом пространстве. Значения энергии даны в единицах Gb^3 .

Как видно, наличие канала, проходящего через ПДП, значительно снижает энергию петли, даже если её радиус c в несколько раз превосходит радиус канала a . Влияние канала становится незначительным только когда a становится в десятки раз меньше c . На рис. 3.3(в, г) продемонстрированы аналогичные зависимости $E_{PL}'(c/b)$ при фиксированном a и $E_{PL}'(a/b)$ при двух фиксированных значениях c , что более удобно для практического использования.

3.2 Когерентное состояние нанотрубки в бесконечном упругом пространстве

Рассмотрим упруго-изотропную однородную модель нанотрубки, внедрённой в матрицу с внутренним радиусом a и наружным радиусом c как бесконечно длинное полое цилиндрическое дилатационное включение, находящееся в когерентном [34] состоянии с окружающим бесконечным упругим пространством (рис. 3.4а).

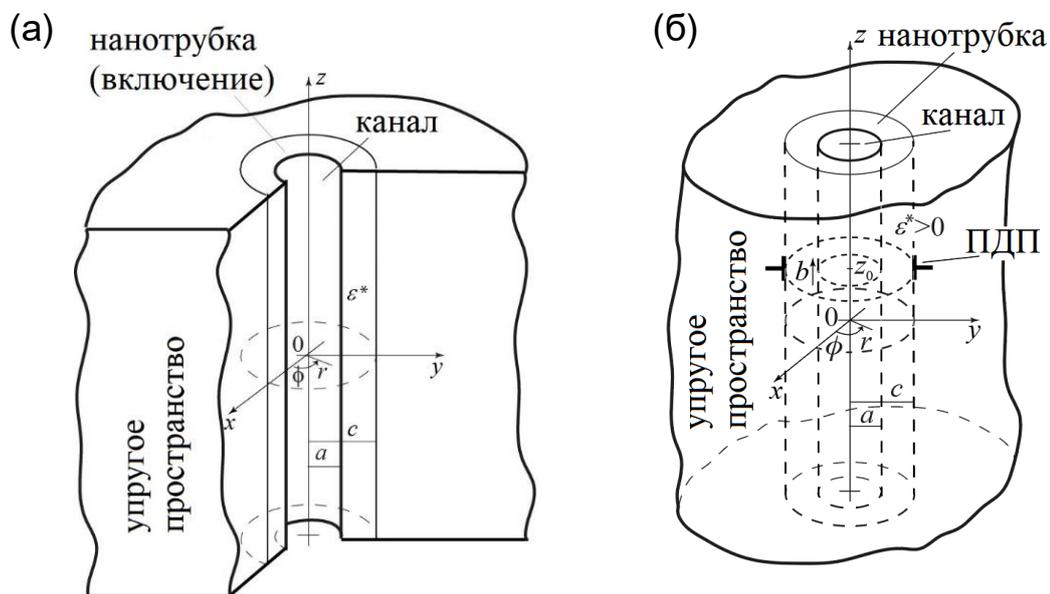


Рис. 3.4. Модель нанотрубки, внедрённой в материал как полое включение с несоответствием в бесконечном упругом пространстве (а) до релаксации напряжений несоответствия (б) после формирования ПДП несоответствия на границе нанотрубки и матрицы.

Собственная дисторсия ${}^{hi}\varepsilon_{ii}^*$ такого полого включения может быть записана в виде:

$${}^{hi}\varepsilon_{ii}^* = \varepsilon^* H \left[\left(\frac{r}{a} - 1 \right) \left(1 - \frac{r}{c} \right) \right], \quad i = x, y, z \quad \text{or} \quad i = r, \varphi, z, \quad (3.10)$$

где H – функция Хэвисайда, равная 1 при $a \leq r \leq c$, либо 0 при $r \leq a$ или $r > c$. Для кристаллических материалов матрицы и включения ε^* принимает роль параметра несоответствия [34].

Напряжения, генерируемые таким включением, были найдены в работе [37] в следующем виде:

$${}^{hi}\sigma_{rr} = -\sigma^* \begin{cases} 1 - \frac{a^2}{r^2}, & a \leq r \leq c \\ \frac{c^2 - a^2}{r^2}, & c \leq r \leq \infty \end{cases}, \quad (3.11a)$$

$${}^{hi}\sigma_{\varphi\varphi} = -\sigma^* \begin{cases} 1 + \frac{a^2}{r^2}, & a \leq r \leq c \\ \frac{a^2 - c^2}{r^2}, & c \leq r \leq \infty \end{cases}, \quad (3.11б)$$

$${}^{hi}\sigma_{zz} = -\sigma^* \begin{cases} 2, & a \leq r \leq c \\ 0, & c \leq r \leq \infty \end{cases}, \quad (3.11в)$$

$${}^{hi}\sigma_{rz} = {}^{hi}\sigma_{r\varphi} = {}^{hi}\sigma_{z\varphi} = 0, \quad (3.11г-е)$$

$$Tr {}^{hi}\sigma = {}^{hi}\sigma_{rr} + {}^{hi}\sigma_{\varphi\varphi} + {}^{hi}\sigma_{zz} = -\sigma^* \begin{cases} 4, & a \leq r \leq c \\ 0, & c \leq r \leq \infty \end{cases}, \quad (3.11ж)$$

где $\sigma^* = G\varepsilon^*(1+\nu)/(1-\nu)$. Уравнения (3.11) удовлетворяют условиям равновесия и граничным условиям как на свободной поверхности внутри нанотрубки ($r = a$), так и на границе матрицы и включения ($r = c$). Из уравнения (3.11ж) можно сделать интересный вывод о том, что отверстие в дилатационном включении в бесконечном упругом пространстве не влияет на след тензора напряжений, а значит, и на упругую дилатацию.

В бесконечном упругом пространстве энергия на единицу длины полого цилиндрического дилатационного включения \tilde{E}_{hi} , вычисленная при помощи (3.7), запишется так:

$$\tilde{E}_{hi} = 2\pi \sigma^* \varepsilon^* (c^2 - a^2) = 2G \frac{1+\nu}{1-\nu} \varepsilon^{*2} S_{hi}, \quad (3.12)$$

где S_{hi} – площадь сечения полого включения. Как и ожидалось, энергия \tilde{E}_{hi} зависит только от упругого модуля G и коэффициента Пуассона ν системы, величины несоответствия f и объёма включения [154,169,170], но не от его формы, в том числе от отверстий.

3.3 Критические условия формирования ПДП несоответствия на границе нанотрубки и матрицы

Как и в случае с зарождением ПДП несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка», а также на границе матрицы и внедрённой в неё нанопроволоки (см. главы I и II), ожидается, что когерентное напряжённое состояние, описанное в предыдущем разделе, может релаксировать путём формирования круговых ПДП несоответствия на границе нанотрубки и матрицы (рис. 3.4б). Для определённости будем рассматривать ПДП вычитания, которая соответствует релаксации напряжений несоответствия, вызванных внедрённой нанотрубкой с положительной собственной дисторсией ($\varepsilon^* > 0$). Для начала процесса релаксации полная энергия внедрённой нанотрубки с ПДП несоответствия должна быть меньше полной энергии внедрённой в матрицу нанотрубки в когерентном, бездефектном состоянии:

$$\Delta E = E_{final} - E_{initial} = E_{PL}^t + E_{PL-hi} \leq 0, \quad (3.13)$$

где полная энергия ПДП E_{PL}^t представленная в (3.9), а E_{PL-hi} – энергия взаимодействия петли и поля упругих напряжений, порождаемых полым включением:

$$E_{PL-hi} = - \int_V^{PL} \varepsilon_{ij}^* \sigma_{ij}^{hi} dV = 2\pi \sigma^* b a^2 (1 - \tau^2). \quad (3.14)$$

На рис. 3.5а представлена карта изменения энергии ΔE , записанной в (3.13) с использованием выражений (3.9) и (3.14) в координатах τ и f при фиксированном

значении радиуса канала $a = 100b$. Чёрная жирная кривая соответствует нулевому значению $\Delta E = 0$ и разделяет области $\Delta E < 0$, где формирование ПДП энергетически выгодно, и $\Delta E > 0$, где формирование ПДП невыгодно. Эта кривая также отображает зависимость $f(\tau_c)$, где τ_c – критическое значение соотношения радиусов петли и канала $\tau = c/a$. Пользуясь этой кривой, можно предсказать критический радиус c_c (либо критическую толщину стенки $h_c = c_c - a$) внедрённой в матрицу нанотрубки (при известном внутреннем радиусе a , в данном случае равном $100b$, и величине несоответствия f), при которых $c > c_c$ (или $h > h_c$), а формирование ПДП становится энергетически выгодным. Аналогичная карта и кривая, относящиеся к формированию круговых ПДП в нанопроволоках «ядро-оболочка» были представлены в работе [123].

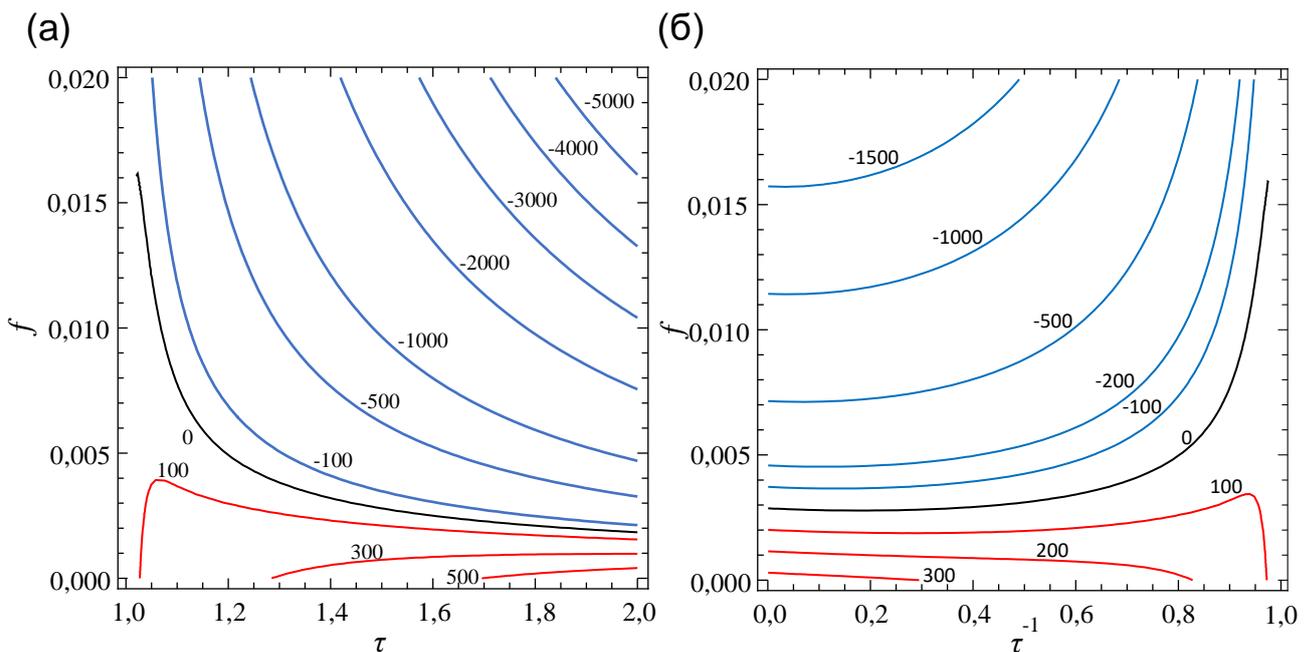


Рис. 3.5. Карты изменения энергии ΔE , вызванного формированием ПДП несоответствия на границе нанотрубки и матрицы, в координатах (а) $\tau = c/a$ и f при фиксированном внутреннем радиусе нанотрубки $a = 100b$, и (б) $\tau^{-1} = a/c$ и f при фиксированном исходном радиусе канала $c = 100b$; $\nu = 0,3$, $\gamma = 1$. Значения энергии даны в единицах Gb^3 .

На рис. 3.5б представлена карта изменения энергии ΔE в координатах τ^{-1} и f для фиксированного радиуса нанотрубки $c = 100b$. Используя эту карту, 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 рис. 3.5а, 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 (для её заданного радиуса c , равного здесь $100b$, и величины несоответствия f), при котором формирование ПДП становится энергетически выгодным. Очевидным образом это критическое условие можно переформулировать для критической толщины $h_c = c - a_c$ стенки нанотрубки радиусом c : $h > h_c$.

На рис. 3.6 показаны зависимости $f(\tau_c)$, $f(\tau_c^{-1})$, $c_c(f)$ и $a_c(f)$ для различных значений параметров системы. На рис. 3.6(а) изображены кривые $f(\tau_c)$ для различных значений радиуса канала a . Используя эти кривые, можно определить критический приведённый радиус $\tau_c(f)$ границы нанопроволоки и матрицы для заданных значений несоответствия f и радиуса канала a при движении границы вглубь матрицы. Как видно, τ_c быстро уменьшается с увеличением f и a .

Кривые $f(\tau_c^{-1})$, показанные на рис. 3.6(б), дают информацию об изменении критического приведённого радиуса τ_c^{-1} канала для различных значений c , в процессе его зарастания, когда величина несоответствия f и радиус граничного цилиндра c остаются постоянными. В зависимости от выбранного значения c , кривая может либо иметь очевидный минимум (при $c \leq 50b$), либо быть практически монотонной (как при $c = 100b$). В первом случае возможны четыре различные ситуации в зависимости от значения f . Пусть, например, $c = 20b$, тогда

эти ситуации будут выглядеть следующим образом: 1) при $f = f_1 < f(\tau_c^{-1})$ для любого τ_c^{-1} (например, $f_1 < 0,008$), формирование петли энергетически невыгодно;

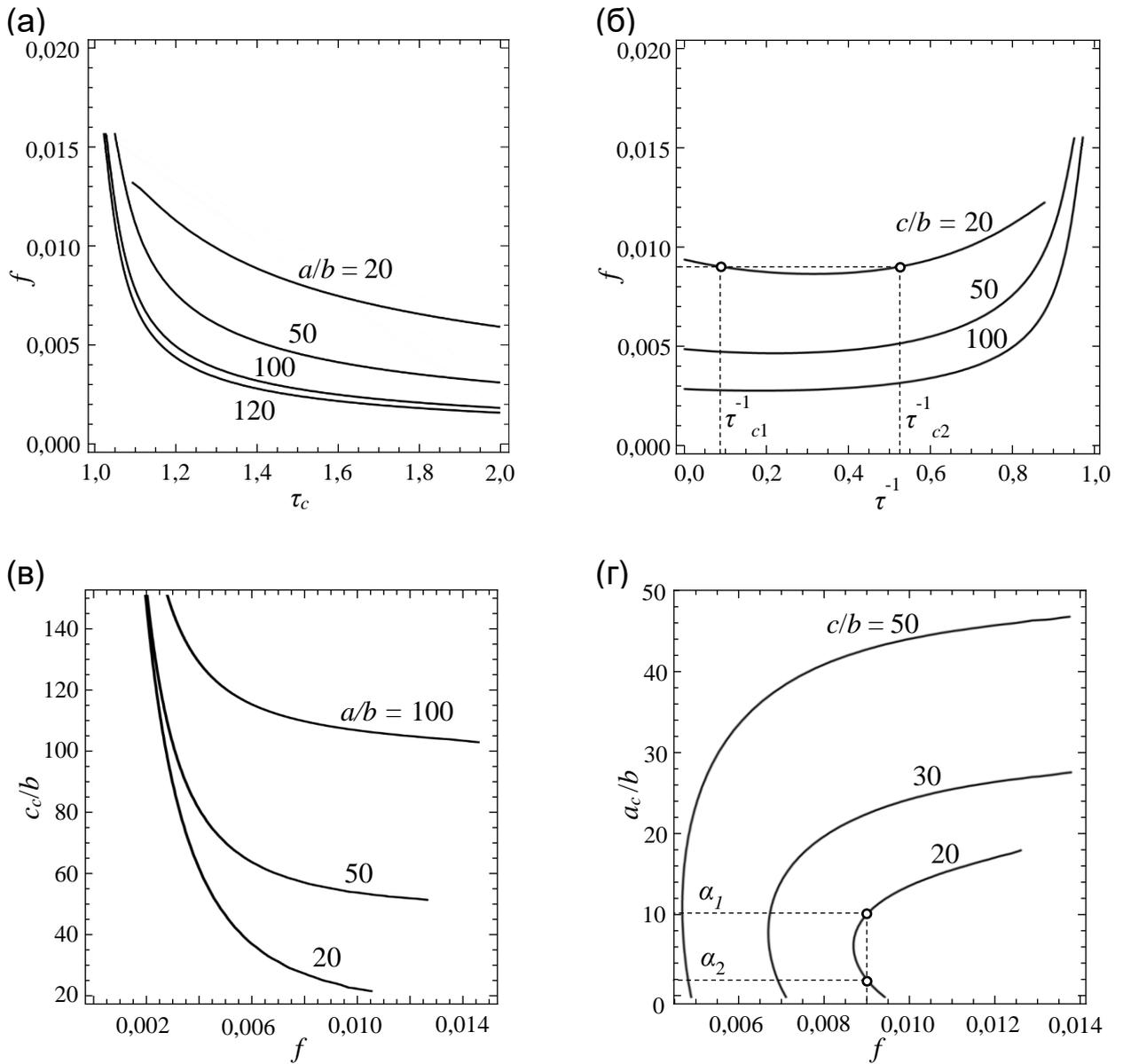


Рис. 3.6. Критические значения параметров формирования ПДП несоответствия на границе нанотрубки и матрицы, продемонстрированные при помощи зависимостей (а) $f(\tau_c)$ и (в) $c_c(f)$ для различных величин радиуса канала a ; (б) $f(\tau_c^{-1})$ и (г) $a_c(f)$ для различных значений радиуса цилиндрической границы c ; $\nu = 0,3$, $\gamma = 1$. Критические величины нормализованного радиуса канала $\alpha_1 = a_{c1}/b$ и $\alpha_2 = a_{c2}/b$ на изображении (г) соответствуют критическим значениям соотношений радиусов τ_{c1}^{-1} и τ_{c2}^{-1} на изображении (б).

2) при $f = f_2 < f(\tau_c^{-1})$ в интервалах $\tau_c^{-1} < \tau_{c1}^{-1}$ и $\tau_c^{-1} > \tau_{c2}^{-1}$ формирование ПДП энергетически невыгодно, при $f = f_2 > f(\tau_c^{-1})$ в интервале $\tau_{c1}^{-1} < \tau_c^{-1} < \tau_{c2}^{-1}$ (например, $f_2 = 0,009$), – выгодно; 3) при $f = f_3 < f(\tau_c^{-1})$ в интервале $\tau_c^{-1} > \tau_{c2}^{-1}$ зарождение петли невыгодно, а при $f = f_3 > f(\tau_c^{-1})$ в интервале $0 < \tau_c^{-1} < \tau_{c2}^{-1}$, что означает также $\tau_{c1}^{-1} \rightarrow 0$ (например, $f_3 = 0,010$), – выгодно; 4) при $f = f_4 > f(\tau_c^{-1})$ (к примеру, $f_4 < 0,012$), ПДП выгодно образоваться вне зависимости от значения τ_c^{-1} . Во втором случае, когда кривая $f(\tau_c^{-1})$ монотонно возрастает (пример $c > 100b$ на рис. 3.5б), возможны те же ситуации, что и ранее, кроме второй.

Общий вид линии критических значений τ_{c1}^{-1} (или, иными словами, критических значений a_{c1} радиуса канала a) может быть объяснён сильным экранированием энергии петли E'_{PL} свободной поверхностью: при $\tau_c^{-1} < \tau_{c1}^{-1}$ (или $a < a_{c1}$ при фиксированной величине c), эффект экранирования снижается практически линейно, и так же, линейно, возрастает E'_{PL} (см. рис. 3.3б и 3.3г), в то время как энергия взаимодействия $E_{PL-hi} = 2\pi\sigma^*bc^2(\tau_c^{-2} - 1)$ убывает квадратично с τ_c^{-1} . В результате изменение энергии ΔE меняет знак в точке $\tau_c^{-1} = \tau_{c1}^{-1}$ и становится положительным при $\tau_c^{-1} < \tau_{c1}^{-1}$.

На рис. 3.6в и 3.6г представлены зависимости приведённых критических радиусов c_c/b и a_c/b от f для некоторых фиксированных значений a и c , соответственно. Как видно, эти зависимости хорошо коррелируют с рис. 3.6а и 3.6б соответственно, однако они могут быть более удобными для сравнения с экспериментальными данными. Кроме того, графики $c_c(f)$ качественно совпадают с графиками $h_c(f)$, полученными в работе [37] для случая прямолинейных дислокаций несоответствия на границе нанотрубки и матрицы с похожими графиками для дислокационных диполей, в которых одна дислокация помещена на межфазной границе, а другая – на внутренней поверхности отверстия [132,133].

Когда радиус канала приближается к нулю, $a \rightarrow 0$, внедрённая в матрицу нанотрубка вырождается в внедрённую нанопроволоку, а изменение энергии, связанное с формированием ПДП несоответствия, превращается в простое выражение в элементарных функциях:

$$\Delta^* E = \lim_{a \rightarrow 0} \Delta E = \frac{Gb^2c}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1,08\gamma c}{b} - \frac{4\pi(1+\nu)fc}{b} \right). \quad (3.15)$$

Формула (3.15) совпадает с результатом, приведённым в работе [51].

Критический радиус нанопроволоки c_c выразится так:

$$\Delta^* E = 0 \rightarrow c_c = \frac{b}{4\pi(1+\nu)f} \ln \frac{1,08\gamma c_c}{b}, \quad (3.16)$$

причём здесь пренебрегается тривиальным решением $c_c = 0$.

Имеющее физический смысл решение уравнения (3.16) может быть представлено в виде W -функции Ламберта [171,172]:

$$c_c = \frac{-b}{4\pi(1+\nu)f} W \left(\frac{-4\pi(1+\nu)f}{1,08\gamma} \right). \quad (3.17)$$

3.4 Выводы по главе

В этом разделе приведено решение граничной задачи для круговой ПДП, соосной цилиндрическому каналу в бесконечном упругом пространстве. Проанализированы поля напряжений и энергетические характеристики ПДП. В частности, показано, что упругие поля сильно экранируются свободной поверхностью канала. На основании полученного решения разработана теоретическая модель релаксации напряжений несоответствия путём формирования ПДП вокруг нанотрубки, внедрённой в бесконечную матрицу.

Рассмотрено два способа появления такой наноструктуры: 1) радиус канала a остаётся неизменным, а радиус межфазной цилиндрической границы c

увеличивается (см. рис. 3.5а, 3.6а, 3.6в), и 2) канал зарастает, т.е. уменьшается радиус a при неизменном радиусе цилиндра исходного канала c (см. рис. 3.5б, 3.6б, и 3.6г). Случай 1 соответствует процессу формирования подповерхностного слоя путём диффузии атомов вглубь материала матрицы. В данной работе предполагается, что в таком процессе граница раздела материалов строгая. Случай 2 соответствует наращиванию слоя нового материала на цилиндрической поверхности исходного канала. Для узких нанотрубок, у которых радиус границы нанотрубки и матрицы $c \leq 50b$ ($c \leq 15-30$ нм при $b = 0,3-0,6$ нм), было установлено, что существует два критических радиуса канала, между которыми формирование ПДП энергетически выгодно (рис. 3.6г). Наличие двух критических радиусов связывается с сильным влиянием свободной поверхности канала на упругие поля и энергию, создаваемые петлёй. Заметим, что это явление в целом характерно для наноразмерных объектов типа «ядро-оболочка», отличие лишь в том, что свободная поверхность является внешней, а в роли критических параметров выступают радиусы ядра/оболочки, либо относительная толщина оболочки [36,123,132,161,162,165].

Стоит отметить, что более глубокое понимание процессов релаксации путём образования призматических дислокационных петель может быть достигнуто при помощи поверхностной теории упругости, которая позволила бы учесть эффекты удельной энергии поверхности, как это было ранее сделано для прямолинейных дислокаций несоответствия [40,41,128,135].

Также решение граничной задачи теории упругости для ПДП, окружающей цилиндрический канал, представленное в этом разделе, может быть использовано для анализа формирования дефектов в нагруженных композитах с вытянутыми цилиндрическими нанопорами.

Глава IV

Призматическая дислокационная петля вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке

4.1 Энергия ПДП, расположенной вблизи межфазной границы в СНП

Нанопроволоки с квантовыми дисками и отдельными гетерогенными границами содержат области с различными химическими составами и структурами, расположенными поочерёдно вдоль оси нанопроволоки, и, как следствие, с различными физическими свойствами.

В данном разделе основное внимание уделяется несоответствию параметров атомных решёток на границе материалов в двухфазной нанопроволоке с осевой неоднородностью, или сегментированной нанопроволоке (СНП). Параметр несоответствия определяется следующим образом:

$$f = \frac{a_I - a_{II}}{a_{II}}, \quad (4.1)$$

где a_I и a_{II} – параметры кристаллических решёток материалов I и II (см. рис. 4.1).

В работах [14,152] были рассчитаны упругие поля и энергии, создаваемые несоответствием f в СНП с чёткой и размытой межфазной границей. Анализ распределения упругих полей в такой гибридной наноструктуре привёл к заключению о возможности самозарождения ПДП, соосных с нанопроволокой и расположенных вблизи межфазной границы (рис. 4.1).

Осевая компонента напряжений σ_{zz} распределена в сегментированной нанопроволоке следующим образом: в части I при $\varepsilon^* > 0$ (см рис. 4.1), (а) вблизи осевой части нанопроволоки $\sigma_{zz} < 0$ (зона сжатия), и (б) вблизи цилиндрической свободной поверхности нанопроволоки $\sigma_{zz} > 0$ (зона растяжения); в части II, в то же время, ситуация противоположная.

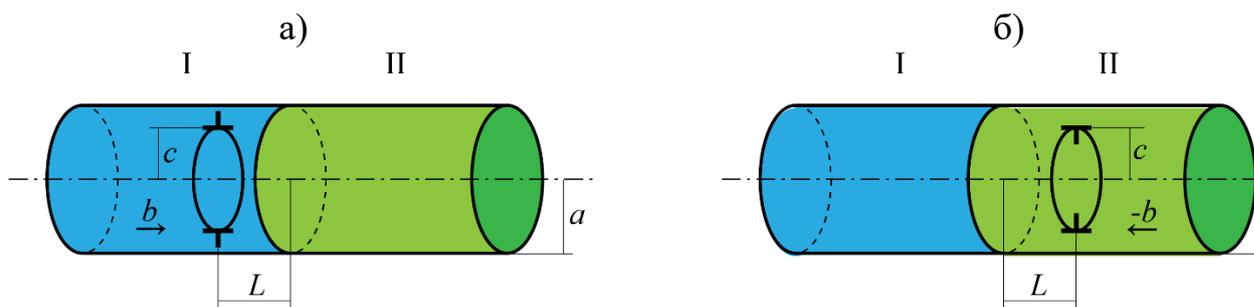


Рис. 4.1. Схема образования круговых ПДП вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке при $a_I > a_{II}$, где a_I и a_{II} – параметры кристаллических решёток сегментов I и II: (а) ПДП вычитания в области осевого сжатия, (б) ПДП внедрения в области осевого растяжения.

Это обстоятельство предполагает, что в сегментированной нанопроволоке, состоящей из двух материалов, разделённых перпендикулярной оси границей, возможно формирование ПДП таким образом, как показано на рис. 4.1: петля вычитания в области I и петля внедрения в области II. В то же время, на свободной поверхности можно мысленно добавить ПДП противоположного знака. У такой петли, залегающей в плоскости исходной ПДП, нулевое упругое поле. Таким образом, вместо петли вычитания (рис. 4.1а), или внедрения (рис. 4.1б), можно рассматривать петли внедрения или вычитания с вырезанной центральной частью. Никак не затрагивая вычисления, этот подход делает возможным рассмотрение физической картины процесса формирования ПДП: петля вычитания (внедрения) может сформироваться в центральной части сегментированной нанопроволоки, или на цилиндрической свободной поверхности. В этом случае формируется петля противоположного знака с вырезанной центральной частью.

Ранее релаксация напряжений в СНП путём формирования дислокаций несоответствия на межфазной границе была рассмотрена в работе [173], в которой, с использованием весьма приблизительных формул, была установлена зависимость критического радиуса, ниже которого формирования ПДП несоответствия на межфазной границе не происходит, а граница остаётся когерентной, от величины несоответствия. Чтобы убедиться, что формирование ПДП в сегментированной

нанопроволоке выгодно, необходимо проанализировать изменение энергии, вызванное формированием петли.

Энергия системы «СНП + петля» может быть записана так:

$$E = E_0 + E_{PL} + E_{int}, \quad (4.2)$$

где E_0 – энергия сегментированной нанопроволоки в когерентном состоянии, E_{PL} – энергия ПДП в бесконечно длинном цилиндре, E_{int} – энергия взаимодействия между ПДП и упругим полем СНП.

Для формирования ПДП необходимо, чтобы изначальная энергия СНП E_0 была больше, чем энергия системы «СНП + петля». Другими словами, изменение энергии ΔE , определяемое как

$$\Delta E = E - E_0, \quad (4.3)$$

должно удовлетворять уравнению

$$\Delta E \leq 0. \quad (4.4)$$

С учётом выражений (4.2) и (4.3), ΔE примет вид

$$\Delta E = E_{PL} + E_{int}. \quad (4.5)$$

Необходимо проанализировать уравнение (4.5) и определить параметры СНП, при которых удовлетворяются условия (4.4), и формирование ПДП становится энергетически выгодно.

Предполагается, что ПДП параллельна строгой межфазной границе и соосна с СНП. Собственная дисторсия дефекта запишется так:

$$\varepsilon_{PL}^* = \pm bH \left(1 - \frac{r}{c}\right) \delta(z - z_0), \quad (4.6)$$

где b – величина вектора Бюргерса ПДП, $H(1 - r/c)$ – функция Хэвисайда, а $\delta(z - z_0)$ – дельта-функция Дирака, c и z_0 – радиус и z -координата ПДП

соответственно. В равенстве (4.6) верхний знак “+” соответствует ПДП внедрения, а нижний “-“ ПДП вычитания.

Энергия ПДП в бесконечно длинном цилиндре (нанопроволоке) может быть записана следующим образом [123]:

$$E_{PL} = \frac{Gb^2at}{2(1-\nu)} \left(\log \frac{1,08\gamma at}{b} - 2t \int_0^\infty \Theta_1(t, \beta) d\beta \right), \quad (4.7)$$

$$\text{где } \Theta_1 = \frac{t^2 \beta^2 I_0^{*2} + w I_1^{*2} - 2t \beta I_0^* I_1^* (w I_1 K_1 + \beta^2 I_0 K_0)}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2}, \quad w = (\beta^2 - 2\nu + 2), \quad I_{0,1} = I_{0,1}(\beta),$$

$I_{0,1}^* = I_{0,1}(t\beta)$, $I_{0,1}(\beta)$ и $I_{0,1}(t\beta)$ – модифицированные функции Бесселя первого рода, $K_{0,1} = K_{0,1}(\beta)$ – функция Макдональда, $t = c / a$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, γ – параметр ядра ПДП. Остальные обозначения такие же как в (4.6).

Энергия взаимодействия E_{int} из уравнения (4.2) может быть найдена интегрированием [154]:

$$E_{\text{int}} = - \int_V \varepsilon_{PL}^* \sigma_{zz} dV = -2\pi(\pm b) \int_0^c \sigma_{zz} \Big|_{z=z_0} r dr. \quad (4.8)$$

Здесь σ_{zz} – компонента напряжений, связанная с границей раздела двух фаз в СНП (рис. 4.1). Эта компонента может быть записана на основании формулы для напряжений, вызываемых дилатационным включением внутри нанопроволоки [153] в виде:

$$\sigma_{zz} = \frac{2G(1+\nu)f}{\pi(1-\nu)} \int_0^\infty [(\beta \tilde{D}_1 + 2\nu \tilde{C}_1) I_0(\tilde{r}\beta) + \tilde{r} \beta \tilde{C}_1 I_1(\tilde{r}\beta)] \sin \tilde{z} \beta d\beta, \quad (4.9)$$

$$\text{где } \tilde{C}_1 = \frac{I_1}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2}, \quad \tilde{D}_1 = \frac{-(2(\nu-1)I_1 + \beta I_0)}{\beta(\beta^2 I_0^2 - w I_1^2)}, \quad I_{0,1}(\tilde{r}\beta) \text{ – модифицированные функции}$$

Бесселя первого рода, $\tilde{r} = r / a$, $\tilde{z} = z / a$. Остальные обозначения совпадают с таковыми в (4.7). В уравнении (4.9) z -координата межфазной границы равна нулю.

Как результат интегрирования (4.8), получено:

$$E_{\text{int}} = (\mp) \frac{4G(1+\nu) fba^2 t}{(1-\nu)} \int_0^{\infty} \Theta_2 \sin \tilde{z}_0 \beta d\beta. \quad (4.10)$$

Здесь $\Theta_2 = \frac{tI_0^* I_1 - I_0 I_1^*}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2}$. Как и ранее, верхний знак соответствует ПДП внедрения, нижний – петле вычитания. Для петель, показанных на рис. 4.1(а,б), энергия взаимодействия E_{int} переписется так:

$$E_{\text{int}} = \frac{4G(1+\nu) fba^2 t}{(1-\nu)} \int_0^{\infty} \Theta_2 \sin \frac{L\beta}{a} d\beta, \quad (4.11)$$

где L – расстояние между чёткой межфазной границей и ПДП.

На рис. 4.2 представлен набор зависимостей $E_{\text{int}}(L)$ при различных соотношениях радиусов ПДП и СНП ($t = c/a$).

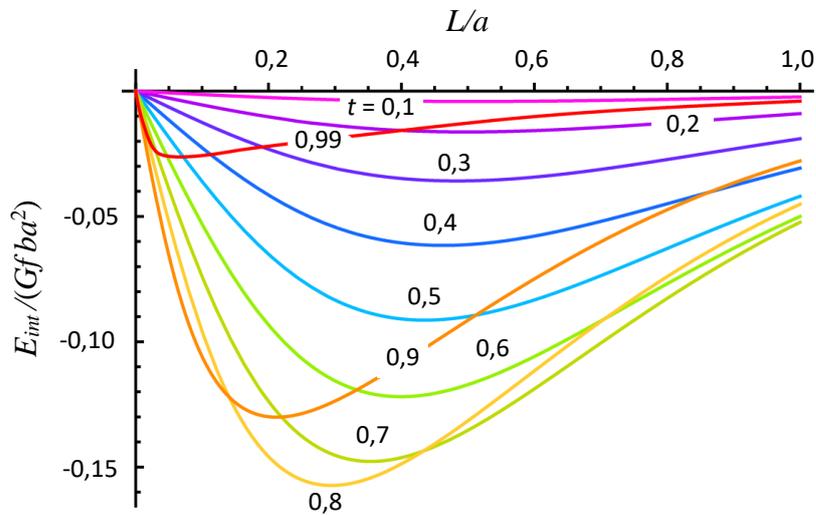


Рис. 4.2. Энергия взаимодействия ПДП и межфазной границы E_{int} в зависимости от расстояния L между ними внутри СНП. Кривые вычислены при различных соотношениях t радиуса петли c и радиуса СНП a : $t = c/a$. Энергия приведена в единицах $Gfba^2$, $\nu = 0,3$. Здесь G – модуль сдвига; f – параметр несоответствия атомных решёток материалов, разделяемых межфазной границей, $f > 0$; b – величина вектора Бюргера дислокации. Зависимости представлены для обоих случаев, показанных на рис. 4.1 (а, б).

На рис. 4.2 также показано, что $E_{\text{int}} < 0$ при $L < 0$, а глобального минимума E_{int} достигает при $t \approx 0,8$ и $L \approx 0,25a$.

На основании уравнений (4.7) и (4.11) можно вычислить изменение энергии как следующий функционал $\Delta E (f, a, t, L)$:

$$\Delta E = \frac{Gb^2at}{2(1-\nu)} \left(\log \frac{1,08\gamma at}{b} - 2t \int_0^{\infty} \Theta_1(t, \beta) d\beta + \frac{8(1+\nu)fa}{b} \int_0^{\infty} \Theta_2 \sin \frac{L\beta}{a} d\beta \right). \quad (4.12)$$

На рис. 4.3а представлена карта изменения энергии $\Delta E (t, f)$ при $L = 0,3a$ и $a=100b$. Также на рис. 4.3б показан набор зависимостей $f(t)$ при $\Delta E = 0$ для различных L при фиксированном $a=100b$, определены значения несоответствия f_c для данного радиуса СНП a . Параметр f_c – критическое значение параметра несоответствия, ниже которого формирование ПДП энергетически невыгодно при любых значениях t и L .

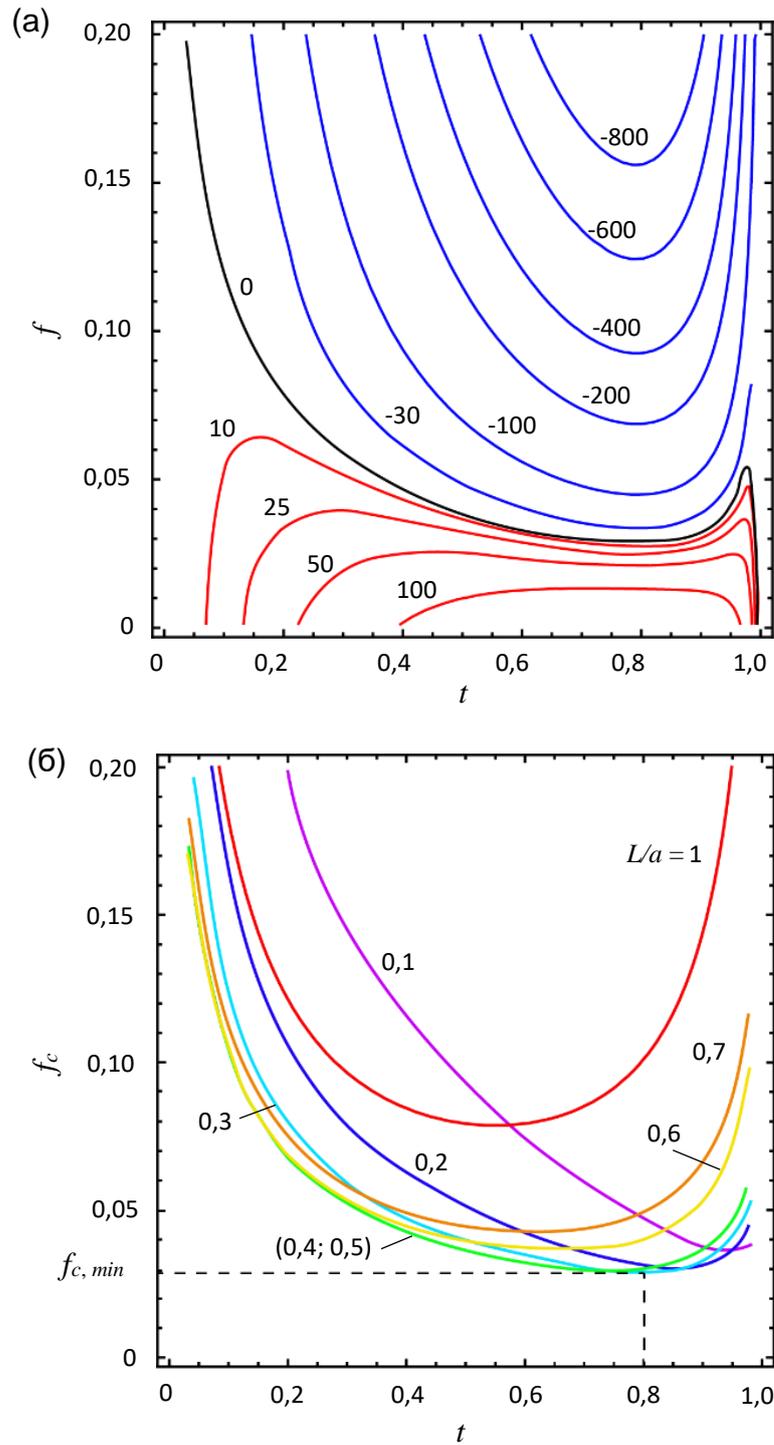


Рис. 4.3. Определение критической величины параметра несоответствия f_c , необходимого для формирования ПДП в СНП. (а) Карта изменения энергии $\Delta E(t, f)$ при фиксированном расстоянии между ПДП и межфазной границей $L = 0,3a$ и радиусе СНП $a = 100b$, где b – величина вектора Бюргера дислокации; (б) зависимости $f(t)$ при $\Delta E = 0$ для различных L и фиксированного $a = 100b$. Энергия приведена в единицах Gb^3 при коэффициенте Пуассона $\nu = 0,3$.

На рис. 4.4 представлена зависимость параметра f_c от радиуса сегментированной нанопроволоки a .

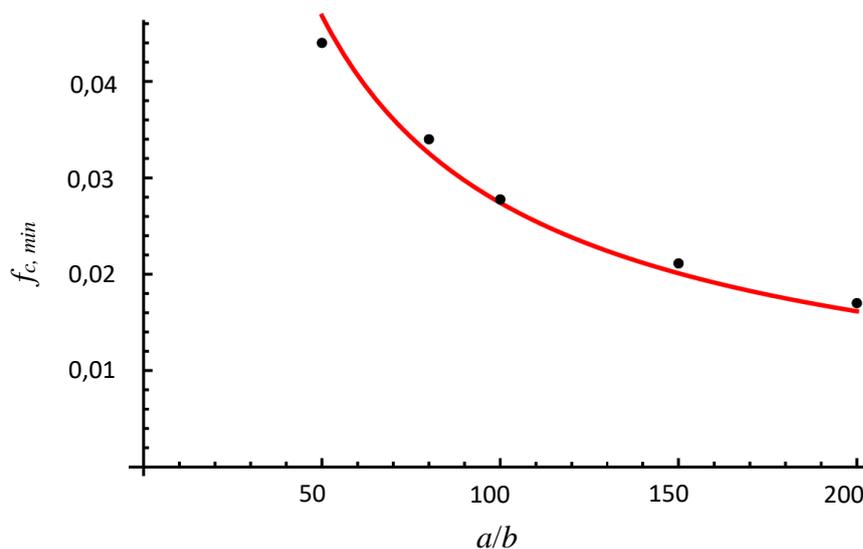


Рис. 4.4. Параметр критического несоответствия $f_{c, min}$, выше которого формирование ПДП энергетически выгодно, в зависимости от радиуса СНП a . Здесь радиус a нормирован при помощи величины вектора Бюргерса b . Вычисления произведены при коэффициенте Пуассона $\nu = 0,3$.

Зависимость $f_c(a)$ с рис. 4.4 может быть перестроена в виде функциональной зависимости критического радиуса a_c от величины несоответствия f . На рис. 4.5 эта зависимость $a_c(f)$ продемонстрирована.

При параметрах на рис. 4.4 и 4.5, соответствующих областям ниже кривых, формирование ПДП энергетически невыгодно.

Заметим, что зависимость $a_c(f)$ хорошо соответствует известной простой оценочной формуле для определения критического радиуса сегментированной нанопроволоки:

$$a_c \approx \frac{b}{|f|^{1,299}}. \quad (4.13)$$

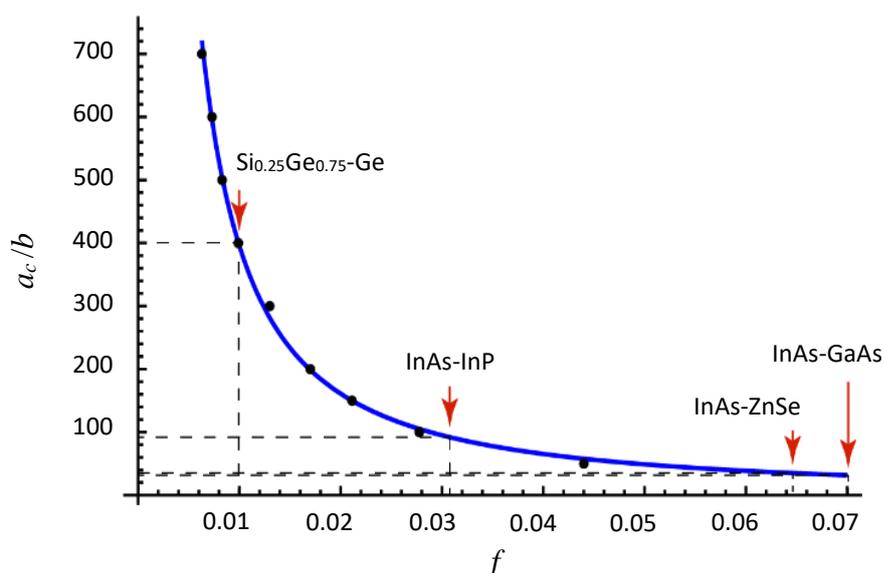


Рис. 4.5. Критический радиус сегментированной нанопроволоки, при превышении которого энергетически выгодно формирование ПДП, в зависимости от параметра несоответствия f составляющих СНП материалов. Точки на кривой получены как результат вычисления, сплошная кривая является аппроксимацией. На графике также представлены пары (f, a_c) для наиболее часто используемых материалов. Здесь радиус a_c нормирован при помощи величины вектора Бюргера b . Вычисления произведены при коэффициенте Пуассона $\nu = 0,3$.

Сравним критические радиусы сегментированных нанопроволок, при которых происходит формирование ПДП с аналогичными параметрами для композитных нанопроволок иных конфигураций, в которых релаксация напряжений несоответствия происходит путём формирования ПДП. При величине несоответствия $f = 0,0065$ для СНП критический радиус $a_c \approx 207,7$ нм ($\approx 692b$) (см. рис. 4.5), в то время как для нанопроволок «ядро-оболочка» $a_c \approx 50$ нм ($\approx 167b$) [123], а для нанопроволоки, внедрённой в бесконечную матрицу, $a_c \approx 10,2$ нм ($\approx 34b$) [51]. Величина вектора Бюргера для всех перечисленных случаев одинакова и равна 0,3 нм. Приведённые данные показывают, что наиболее устойчивыми к формированию ПДП среди различных видов нанопроволок являются сегментированные нанопроволоки.

4.2 Выводы по главе

На основании вышеописанных расчётов можно заключить, что для любой пары материалов с величиной несоответствия f , составляющей сегментированную нанопроволоку, существует критическое значение её радиуса a_c , ниже которого формирование ПДП энергетически невыгодно. С ростом величины несоответствия критический радиус нанопроволоки уменьшается. Для любого радиуса a сегментированной нанопроволоки существует критическое несоответствие f_c , ниже которого формирование ПДП энергетически невыгодно. С ростом радиуса нанопроволоки критическая величина несоответствия уменьшается.

Заключение

В качестве заключения данной работы подведём итоги проведённых теоретических исследований механизмов релаксации напряжений несоответствия в нанопроволоках «ядро-оболочка», внедрённых нанотрубках и сегментированных нанопроволоках.

- 1) Решения для полей напряжений, создаваемых ПДП в бесконечном упругом цилиндре со свободной поверхностью, а также выражения для соответствующей энергии деформации получены в аналитической форме, удобной для дальнейшей работы.
- 2) С использованием этих решений вычислены параметры, при которых возможна, либо невозможна релаксация напряжений несоответствия в нанопроволоке «ядро-оболочка» путём формирования ПДП;
- 3) Найдена энергия парного взаимодействия ПДП в цилиндре, а также равновесное расстояние между ПДП в их бесконечном периодическом ансамбле;

- 4) Получено компактное решение для полей напряжений и энергии деформации, создаваемых ПДП, расположенной вокруг цилиндрического канала в бесконечном упругом пространстве;
- 5) С использованием этого компактного решения, установлены критические условия формирования ПДП на границе матрицы и внедрённой в неё нанотрубки;
- 6) Вычислена энергия ПДП, расположенной вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке;
- 7) Проанализированы критические параметры, при которых формирование призматической дислокационной петли вблизи межфазной границы в сегментированной нанопроволоке энергетически выгодно, либо невыгодно.

Как видно, все поставленные задачи выполнены, а установленные цели достигнуты.

Список литературы

1. Mieszawska, A.J., Jalilian, R., Sumanasekera, G.U., Zamborini, F.P. The synthesis and fabrication of one-dimensional nanoscale heterojunctions // *Small*. 2007. Т. 3. С. 722–756.
2. Yu, K., Pan, X., Zhang, G., Liao, X., Zhou, X., Yan, M., Xu, L., Mai, L. Nanowires in energy storage devices: structures, synthesis, and applications // *Advanced Energy Materials*. 2018. Т. 8. № 1802369.
3. Serra, A., Valles, E. Advanced electrochemical synthesis of multicomponent metallic nanorods and nanowires: fundamentals and applications // *Applied Materials Today*. 2018. № 12. С. 207-234.

4. Xie, C., Yan, F. Flexible photodetectors based on novel functional materials // *Small*. 2017. № 13, 1701822.
5. Wang, S., Shan, Z., Huang, H. The mechanical properties of nanowires // *Advanced Science*. 2017. № 4, 1600332.
6. Zhao, S., Nguyen, H.P.T., Kibria, M.G., Mi, Z. III-nitride nanowire optoelectronics // *Progress in Quantum Electronics*. 2015. № 44. C. 14-68.
7. Dasgupta, N.P., Sun, J., Liu, C., Brittman, S., Andrews, S.C., Lim, J., Gao, H., Yan, R., Yang, P. Semiconductor nanowires – synthesis, characterization and applications. // *Advanced Materials*. 2014. № 26. C. 2137-2183.
8. Amato, M., Palumbo, M., Rurali, R., Ossinci, S. Silicon-germanium nanowires: Chemistry and physics in play, from basic principles to advanced applications. // *Chemical Reviews*. 2014. № 114. C. 1371-1412.
9. Lapierre, R.R., Robson, M., Azizur-Rahman, K.M., Kuyanov, P. A review of iii-iv nanowire infrared photodetectors and sensors // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2017. № 50, 123001.
10. Agarwal, R. Heterointerfaces in semiconductor nanowires // *Small*. 2008. № 4. C. 1872-1893.
11. Wang, Z., Nabet, B. Nanowire optoelectronics // *Nanophotonics*. 2015. № 4. C. 491-502.
12. Hyun, J.K., Zhang, S., Lauhon, L.J. Nanowire heterostructures // *Annual Review of Materials Research*. 2013. № 43. C. 451-479.
13. Kavanagh, K.L. Misfit dislocations in nanowire heterostructures // *Semiconductor Science and Technology*. 2010. № 25, 024006.

14. Priante, G., Glas, F., Patriarche, G., Pantzas, K., Oehler, F., Harmand, J.C. Sharpening the interfaces of axial heterostructures in self-catalyzed AlGaAs nanowires: experiment and theory // *Nano Letters*. 2016. № 16. С. 1917-1924.
15. Dubrovskii, V.G., Koryakin, A.A., Sibirev, N.V. Understanding the composition of ternary III-V nanowires and axial nanowire heterostructures in nucleation-limited regime // *Materials & Design*. 2017. № 132. С. 400-408.
16. Lauhon, L.J., Gudiksen, M.S., Wang, D., Lieber, Ch.M. Epitaxial core-shell and core-multishell nanowire heterostructures // *Nature*. 2002. № 420. С. 57-61.
17. Nabarro, F.R.N. The force between misfit dislocations // *Philosophical Magazine*. 1970. № 22 (178). С. 803-808.
18. Wang, Z.L., Dai, Z.R., Gao, R.P., Bai, Z.G., Gole, J.L. Side-by-side silicon carbide-silica biaxial nanowires: Synthesis, structure, and mechanical properties // *Applied Physics Letters*. 2000. № 77. С. 3349-3351.
19. Hu, J.Q., Bando, Y., Liu, Z.W., Sekiguchi, T., Golberg, D., Zhan, J.H. Epitaxial heterostructures: side-by-side Si-ZnS, Si-ZnSe biaxial nanowires, and sandwichlike ZnS-Si-ZnS triaxial nanowires // *J. Amer. Chem. Soc.* 2003. № 125. С. 11306–11313.
20. Teo, B.K., Li, C.P., Sun, X.H., Wong, N.B., Lee, S.T. Silicon-silica nanowires, nanotubes, and biaxial nanowires: Inside, outside, and side-by-side growth of silicon versus silica on zeolite // *Inorganic Chemistry*. 2003. № 42. С. 6723-6728.
21. Гуткин М.Ю. Прочность и пластичность нанокомпозитов: учебное пособие. СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2011. 165 с.
22. Popovitz-Biro, R., Kretinin, A., Von Huth, P., Shtrikman, H. InAs/GaAs Core-Shell Nanowires // *Crystal Growth & Design*. 2011. № 11. С. 3858–3865.

23. Goldthorpe, I.A., Marshall, A.F., McIntyre, P.C. Synthesis and strain relaxation of Ge-core/Si-shell nanowire arrays // *Nano Letters*. 2008. № 8. C. 4081-4086.
24. Kavanagh, K. L., Salfi, J., Saveliev, I., Blumin, M., Ruda, H.E. Transport and strain relaxation in wurtzite InAs-GaAs core-shell heterowires // *Applied Physics Letters*. 2011. № 98, 152103.
25. Kavanagh, K.L., Saveliev, I., Blumin, M., Swadener, G., Ruda, H.E. Faster radial strain relaxation in InAs-GaAs core-shell heterowires // *Journal of Applied Physics*. 2012. № 111, 044301.
26. Perillat-Merceroz, G., Thierry, R., Jouneau, P.H., Ferret, P., Feuillet, G. Strain relaxation by dislocation glide in ZnO/ZnMgO core-shell nanowires // *Applied Physics Letters*. 2012. № 100, 173102.
27. Biermanns, A., Rieger, T., Bussone, G., Pietsch, U., Grützmacher, D., Lepsa, M.I. Axial strain in GaAs/InAs core-shell nanowires // *Applied Physics Letters*. 2013. № 102, 043109.
28. Dayeh, S.A., Tang, W., Boioli, F., Kavanagh, K.L., Zheng, H., Wang, J., Mack, N.H., Swadener, G., Huang, J.Y., Miglio, L., Tu, K.N., Picraux, S.T. Direct measurement of coherency limits for strain relaxation in heteroepitaxial core/shell nanowires // *Nano Letters*. 2013. № 13, 1869-1876.
29. Salehzadeh, O., Kavanagh, K.L., Watkins, S. P. Growth and strain relaxation of GaAs and GaP nanowires with GaSb shells // *Journal of Applied Physics*. 2013. № 113, 134309.
30. Rieger, T., Grützmacher, D., Lepsa, M.I. Misfit dislocation free InAs/GaSb core-shell nanowires grown by molecular beam epitaxy // *Nanoscale*. 2015. № 7. C. 356-364.
31. Lewis, R.B., Nicolai, L., Küpers, H., Ramsteiner, M., Trampert, A., Geelhaar, L. Anomalous strain relaxation in core-shell nanowire heterostructures via

- simultaneous coherent and incoherent growth // *Nano Letters*. 2017. № 17. С. 136-142.
32. Lin, Y.C., Kim, D., Li, Z., Nguyen, B.M., Li, N., Zhang, S., Yoo, J. Strain-induced structural defects and their effects on the electrochemical performances of silicon core/germanium shell nanowire heterostructures // *Nanoscale*. 2017. № 9. С. 1213-1220.
33. Lazarev, S., Göransson, D.J.O., Borgström, M., Messing, M.E., Xu, H.Q., Dzhigaev, D., Yefanov, O.M., Bauer, S., Baumbach, T., Feidenhans'l, R., Samuelson, L., Vartanyants, I.A. Revealing misfit dislocations in $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}$ -InP core-shell nanowires by x-ray diffraction // *Nanotechnology*. 2019. № 30, 505703.
34. Freund, L.B., Suresh, S. *Thin Film Materials. Stress. Defect Formation and Surface Evolution* // Cambridge, UK: Cambridge University Press. 2003.
35. Романов А.Е. неопубликованная работа, 1992.
36. Gutkin, M.Yu., Ovid'ko, I.A., Sheinerman, A.G. Misfit dislocations in wire composite solids // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2000. № 12. С. 5391–5401.
37. Sheinerman, A.G., Gutkin, M.Yu. Misfit disclinations and dislocation walls in a two-phase cylindrical composite // *Physica Status Solidi A*. 2001. № 184. С. 485-505.
38. Raychaudhuri, S., Yu, E.T. Critical dimensions in coherently strained coaxial nanowire heterostructures // *Journal of Applied Physics*. 2006. № 99, 114308.
39. Wang, X., Pan, E., Chung, P.W. Misfit dislocation dipoles in wire composite solids // *International Journal of Plasticity*. 2010. № 26. С. 1415-1420.

40. Zhao, Y.X., Fang, Q.H., Liu, Y.W. Edge misfit dislocations in core-shell nanowire with surface/interface effects and different elastic constants // *International Journal of Mechanical Sciences*. 2013. № 74. С. 173-184.
41. Enzevae, C., Gutkin, M.Yu., Shodja, H.M. Surface/interface effects on the formation of misfit dislocation in a core-shell nanowire // *Philosophical Magazine*. 2014. № 94. С. 492-519.
42. Arjmand, M., Benjamin, C., Szlufarska, I. Analytical elastoplastic analysis of heteroepitaxial core-shell nanowires // *AIP Advances*. 2019. № 9, 055119.
43. Smirnov, A.M., Krasnitckii, S.A., Gutkin M.Yu. Generation of misfit dislocations in a core-shell nanowire near the edge of prismatic core // *Acta Materialia*. 2020. № 186. С. 494-510.
44. Polonsky, I.A., Romanov, A.E. Stress relaxation in pentagonal whiskers by prismatic dislocation loops formation 1990. № Ленинград; Неопубликованная рукопись.
45. Ovid'ko, I.A., Sheinerman, A.G. Misfit dislocation loops in composite nanowires // *Philosophical Magazine*. 2004. № 84. С. 2103-2118.
46. Kolesnikova, A.L., Romanov, A.E. Stress relaxation in pentagonal whiskers. // *Technical Physics Letters*. 2007. № 33. С. 886–888.
47. Aifantis, K.E., Kolesnikova, A.L., Romanov, A.E. Nucleation of misfit dislocations and plastic deformation in core/shell nanowires // *Philosophical Magazine*. 2007. № 87. С. 4731–4757.
48. Cai, W., Weinberger, Ch.R.. Energy of a prismatic dislocation loop in an elastic cylinder // *Mathematics and Mechanics of Solids*. 2009. № 14. С. 192-206.
49. Colin, J. Prismatic dislocation loops in strained core-shell nanowire heterostructures // *Physical Review B*. 2010. № 82, 054118.

50. Colin, J. Circular dislocation loop in a three-layer nanowire // *International Journal of Solids and Structures*. 2015. № 63. C. 14-120.
51. Kolesnikova, A.L., Romanov, A.E. Misfit dislocation loops and critical parameters of quantum dots and wires // *Philosophical Magazine Letters*. 2004. № 84. C. 501-506.
52. Gutkin, M.Yu., Kuzmin, K.V., Sheinerman, A.G. Misfit stresses and relaxation mechanisms in a nanowire containing a coaxial cylindrical inclusion of finite height // *Physica Status Solidi (b)*. 2011. № 248. C. 1651-1657.
53. Gutkin, M.Yu., Panpurin, S.N. Spontaneous formation and equilibrium distribution of cylindrical quantum dots in atomically inhomogeneous pentagonal nanowires // *Journal of Macromolecular Science, Part B: Physics*. 2013. № 52. C. 1756-1769.
54. Gutkin, M.Yu., Panpurin, S.N. Equilibrium ensembles of quantum dots in atomically inhomogeneous pentagonal nanowires // *Physics of the Solid State*. 2014. № 56. C. 1187-1194.
55. Haapamaki, C.M., Baugh, J., LaPierre, R.R. Critical shell thickness for InAs- $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As(P)}$ core-shell nanowires // *Journal of Applied Physics*. 2012. № 112, 124305.
56. Salehzadeh, O., Kavanagh, K.L., Watkins, S. P. Geometric limits of coherent III-V core/shell nanowires // *Journal of Applied Physics*. 2013. № 114, 054301.
57. Gutkin, M.Yu., Smirnov, A.M. Initial stages of misfit stress relaxation in composite nanostructures through generation of rectangular prismatic dislocation loops // *Acta Materialia*. 2015. № 88. C. 91-101.

58. Gutkin, M.Yu., Smirnov, A.M. Initial stages of misfit stress relaxation through the formation of prismatic dislocation loops in GaN-Ga₂O₃ composite nanostructures // *Physics of the Solid State*. 2016. № 58. С. 1611-1621.
59. Krasnitckii, S.A., Kolomoetc, D.R., Smirnov, A.M., Gutkin, M.Yu. Misfit stress relaxation in composite core-shell nanowires with parallelepiped cores using rectangular prismatic dislocation loops. // *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. № 993, 012021.
60. Krasnitckii, S.A., Smirnov, A.M., Mynbaev, K.D., Zhigilei, L.V., Gutkin, M.Yu. Axial misfit stress relaxation in core-shell nanowires with hexagonal core via nucleation of rectangular prismatic dislocation loops // *Materials Physics and Mechanics*. 2019. № 42. С. 776-783.
61. Krasnitckii, S.A., Smirnov, A.M., Gutkin, M.Yu. Axial misfit stress relaxation in core-shell nanowires with polyhedral cores through the nucleation of misfit prismatic dislocation loops // *Journal of Materials Science*. 2020. № 55(22). С. 9198-9210.
62. Vladimirov, V.I., Gutkin, M.Yu., Romanov, A.E. Influence of free surface on equilibrium stress state in heteroepitaxial systems // *Поверхность. Физика, химия, механика*. 1988. № 6. С. 46-51.
63. Kolesnikova, A.L., Ovid'ko, I.A., Romanov, A.E. Misfit disclination structures in nanocrystalline and polycrystalline films // *Solid State Phenomena*. 2002. № 87. С. 265-275.
64. Schwartzman, A.F., Sinclair, R. Metastable and equilibrium defect structure of II-VI/GaAs interfaces // *Journal of Electronic Materials*. 1991. № 20. С. 805-814.
65. Chen, Y., Lin, X.W., Liliental-Weber, Z., Washburn, J., Klem, J. F., Tsao J.Y. Dislocation formation mechanism in strained In_xGa_{1-x}As islands grown on GaAs(001) substrates // *Applied Physics Letters*. 1996. № 68. С. 111-113.

66. Ikuhara, Y., Pirouz, P. High resolution transmission electron microscopy studies of metal/ceramics interfaces // *Microscopy Research and Technique*. 1998. № 40. C. 206-241.
67. Gutakovskii, A.K., Chuvilin, A.L., Song, S.A. Application of high-resolution electron microscopy for visualization and quantitative analysis of strain fields in heterostructures // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2007. № 71. C. 1426-1432.
68. Soundararajah, Q.Y., Webster, R.F., Griffiths, I.J., Novikov, S.V., Foxon, C.T., Cherns, D. Composition and strain relaxation of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ graded core-shell nanorods // *Nanotechnology*. 2018. № 29. C. 405706(1)-405706(8).
69. Frank, F.C., Van der Merwe, J.H. One-dimensional dislocations. I. Static theory // *Proceedings of the Royal Society of London Series A – Mathematical and Physical Sciences*. 1949. № 198. C. 205-225.
70. Hartley, G.S. The stress fields of uniformly spaced, infinite edge dislocation arrays in a semi-infinite, isotropic solid // *Scripta Metallurgica*. 1969. № 3. C. 607-612.
71. Grekov, M.A., Sergeeva, T.S. Interaction of edge dislocation array with biomaterial interface incorporating interface elasticity // *International Journal of Engineering Science*. 2020. № 149. C. 103233(1)-103233(17).
72. Zhang, Y., Kong, X.Y., Gao, L., Tian, Y., Wen, L., Jiang, L. Fabrication of nanochannels // *Materials*. 2015. № 8. C. 6277-6308.
73. Chen, Q., Liu, Z. Fabrication and applications of solid-state nanopores. // *Sensors*. 2019. № 19(8). C. 1886(1)-1886(29).
74. Prasad, N.V.K., Babu, T.A., Sarma, M.S.S.R.K.N., Ramesh, S., Nirisha, K., Mathew, T., Madhavi, N. Role of porous nanomaterial's in water purification,

- electronics, drug delivery and storage: A comprehensive review // *Journal of Optoelectronic and Biomedical Materials*. 2021. № 13(1). C. 11-22.
75. Lehmann, V. *Electrochemistry of Silicon* // Wiley-VCH, Weinheim. 2002.
76. Föll, H., Christophersen, M., Carstensen, J., Hasse, G. Formation and application of porous silicon // *Mater. Sci. Engng. R*. 2002. № 39(4). C. 93-141.
77. Föll, H., Carstensen, J., Frey, S. Porous and nanoporous semiconductors and emerging applications // *Journal of Nanomaterials*. 2006. C. 91635(1)-91635(10).
78. Coffey, J.L.; Canham, L.T. Nanoporous silicon as a green, high-tech educational tool // *Nanomaterials*. 2021. № 11(2). C. 553(1)-553(22).
79. Kochergin, V., Foell, H. Novel optical elements made from porous Si // *Materials Science and Engineering R*. № 52(4-6). C. 93-140.
80. Harraz, F.A. Porous silicon chemical sensors and biosensors: A review. // *Sensors and Actuators B*. 2014. № 202. C. 897-912.
81. Arshavsky-Graham, S., Massad-Ivanir, N., Segal, E., Weiss, S. Porous silicon-based photonic biosensors: Current status and emerging applications // *Analytical Chemistry*. 2019. № 91. C. 441-467.
82. Moretta, R., De Stefano, L., Terracciano, M., Rea, I. Porous silicon optical devices: Recent advances in biosensing applications // *Sensors*. 2021. № 21(4). C. 1336(1)-1336(26).
83. Li, C., Iqbal, M., Lin, J., Luo, X., Jiang, B., Malgras, V., Wu, K.C.-W., Kim, J., Yamauchi, Y. Electrochemical deposition: An advanced approach for templated synthesis of nanoporous metal architectures // *Accounts of Chemical Research*. 2018. № 51(8). C. 1764-1773.

84. Gautier, G., Leduc, P. Porous silicon for electrical isolation in radio frequency devices: A review // *Applied Physics Reviews*. 2014. № 1(1). C. 011101(1)-011101(18).
85. Föll, H., Langa, S., Carstensen, J., Christophersen, M., Tiginyanu, I.M. Pores in III–V Semiconductors // *Advanced Materials*. 2003. № 15(3). C. 183-198.
86. Griffin, P.H., Oliver, R.A. Porous nitride semiconductors reviewed // *Journal of Physics D – Applied Physics*. 2020. № 53(38). C. 383002(1)-383002(18).
87. Monaico, E., Tiginyanu, I., Ursaki, V. Porous semiconductor compounds // *Semicond. Sci. Technol.* 2020. № 35(10). C. 103001(1)-103001(62).
88. Md Jani, A.M., Losic, D., Voelcker, N.H. Nanoporous anodic aluminium oxide: Advances in surface engineering and emerging applications // *Progress in Materials Science*. 2013. № 58 (5). C. 636-704.
89. Santos, A., Kumeria, T., Losic, D. Nanoporous anodic aluminum oxide for chemical sensing and biosensors // *Trends in Analytical Chemistry*. 2013. № 44. C. 25-38.
90. Sousa, C.T., Leitao, D.C., Proenca, M.P., Ventura, J., Pereira, A.M., Araujo, J.P. Nanoporous alumina as templates for multifunctional applications // *Applied Physics Reviews*. 2014. № 1(3). C. 031102(1)-031102(22).
91. Law, C.S., Lim, S.Y., Abell, A.D., Voelcker, N.H., Santos, A. Nanoporous anodic alumina photonic crystals for optical chemo- and biosensing: Fundamentals, advances, and perspectives // *Nanomaterials*. 2018. № 8. C. 788(1)-788(50).
92. Davoodi, E., Zhianmanesh, M., Montazerian, H., Milani, A.S., Mina Hoorfar, M. Nano-porous anodic alumina: fundamentals and applications in tissue engineering // *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*. 2020. № 31(7). C. 60(1)-60(16).

93. Kapruwan, P., Ferré-Borrull, J., Marsal, L.F. Nanoporous anodic alumina platforms for drug delivery applications: Recent advances and perspective // *Adv. Mater. Interfaces*. 2020. № 7(20). C. 2001133(1)-2001133(17).
94. Domagalski, J.T., Xifre-Perez, E., Marsal, L.F. Recent advances in nanoporous anodic alumina: Principles, engineering, and applications // *Nanomaterials*. 2021. № 11. C. 430(1)-430(46).
95. Liu, S., Tian, J., Zhang, W. Fabrication and application of nanoporous anodic aluminum oxide: a review // *Nanotechnology*. 2021. № 32 (22), 222001.
96. Ruiz-Clavijo, A., Caballero-Calero, O., Martín-González, M. Revisiting anodic alumina templates: From fabrication to applications // *Nanoscale*. 2021. № 13(4). C. 2227-2265.
97. Baerlocher, Ch., McCusker, L.B., Olson, D.H. Atlas of Zeolite Framework Types // Amsterdam. 2007. № Oxford: Elsevier.
98. Masoumifard, N., Guillet-Nicolas, R., Kleitz, F. Synthesis of engineered zeolitic materials: From classical zeolites to hierarchical core-shell materials // *Advanced Materials*. 2018. № 30(16). C. 1704439(1)-1704439(40).
99. Li, W., Liu, Z., Fontana, F., Ding, Y., Liu, D., Hirvonen, J.T., Santos, H.A. Tailoring porous silicon for biomedical applications: From drug delivery to cancer immunotherapy // *Advanced Materials*. 2018. № 30(24). C. 1703740(1)-1703740(38).
100. Lv, X.W., Weng, C.C., Zhu, Y.P., Yuan, Z.Y. Nanoporous metal phosphonate hybrid materials as a novel platform for emerging applications: A critical review // *Small*. 2021. № 17(20). C. 2005304(1)-2005304(23).

101. Mei, P., Kim, J., Kumar, N.A., Pramanik, M., Kobayashi, N., Sugahara, Y., Yamauchi, Y. Phosphorus-based mesoporous materials for energy storage and conversion // *Joule*. 2018. № 2. C. 2289-2306.
102. Heindl, J., Strunk, H.P., Heydemann, V.D., Pensl, G. Micropipes: hollow tubes in silicon carbide // *Physica Status Solidi A*. 1997. № 162(1). C. 251-262.
103. Vetter, W.M., Dudley, M. The character of micropipes in silicon carbide crystals // *Philosophical Magazine*. 2006. № 86(9). C. 1209-1225.
104. Gutkin, M.Yu., Sheinerman, A.G., Argunova, T.S. Development of defect structures in silicon carbide growing crystals // *Physica Status Solidi C*. 2009. № 6(8). C. 1942-1947.
105. Lin, S., Chen, Z., Yang, Y., Liu, S., Ba, Y., Li, L., Yang, C. Formation and evolution of micropipes in SiC crystals // *CrystEngComm*. 2012. № 14(5). C. 1588-1594.
106. Arora, A., Patel, A., Yadav, B.S., Goyal, A., Thakur, O.P., Arun K. Garg, A.K., Raman, R. Study on evolution of micropipes from hexagonal voids in 4H-SiC crystals by cathodoluminescence imaging // *Microscopy and Microanalysis*. 2021. № 27(1). C. 215-226.
107. Qian, W., Rohrer, G.S., Skowronski, M., Doverspike, K., Rowland, L.B., Gaskill, D.K. Open-core screw dislocations in GaN epilayers observed by scanning force microscopy and high-resolution transmission electron microscopy // *Applied Physics Letters*. 1995. № 67(16). C. 2284-2286.
108. Valcheva, E., Paskova, T., Monemar, B. Nanopipes and their relationship to the growth mode in thick HVPE-GaN layers // *Journal of Crystal Growth*. 2003. № 255(1). C. 19-26.
109. Kimura, T., Aoki, Y., Horibuchi, K., Nakamura, D. Nanopipe formation as a result of boron impurity segregation in gallium nitride grown by halogen-free vapor

- phase epitaxy. // *Journal of Applied Physics*. 2016. № 120(24). C. 245703(1)-245703(10).
110. Frank, F.C. Capillary equilibria of dislocated crystals // *Acta Crystallographica*. 1951. № 4(6). C. 497-501.
111. Pirouz, P. On micropipes and nanopipes in SiC and GaN // *Philosophical Magazine A*. 1998. № 78(3). C. 727-736.
112. Gutkin, M.Yu., Sheinerman, A.G., Argunova, T.S., Yi, J.M., Kim, M.U., Je, J.H., Nagalyuk, S.S., Mokhov, E.N., Margaritondo, G., Hwu, Y. Interaction of dislocated micropipes with polytype inclusions in SiC // *Journal of Applied Physics*. 2006. № 100(9). C. 093518(1)-093518(10).
113. Nakamura, D., Kimoto, T. Transformation of hollow-core screw dislocations: transitional configuration of superscrew dislocations // *Japanese Journal of Applied Physics*. 2020. № 59(9). C. 095502(1)-095502(9).
114. Gutkin, M.Yu., Sheinerman, A.G. Split and sealing of dislocated pipes at the front of a growing crystal // *Physica Status Solidi B*. 2004. № 241(8). C. 1810-1826.
115. Massabuau, F.C.P., Griffin, P.H., Springbett, H.P., Liu, Y., Kumar, R.V., Zhu, T., Oliver, R.A. Dislocations as channels for the fabrication of sub-surface porous GaN by electrochemical etching // *Applied Physics Letters Materials*. 2020. № 8(3). C. 031115(1)- 031115(5).
116. Matthews, J.W. Defects associated with the accommodation of misfit between crystals // *Journal of Vacuum Science & Technology*. 1975. № 12(1). C. 126-133.
117. Jain, S.C., Harker, A.H., Cowley, R.A. Misfit strain and misfit dislocations in lattice mismatched epitaxial layers and other systems // *Philosophical Magazine A*. 1997. № 75(6). C. 1461-1515.

118. Ovid'ko, I.A., Sheinerman, A.G. Misfit dislocation in nanocomposites with quantum dots, nanowires and their ensembles // *Advances in Physics*. 2006. № 55(7-8). C. 627-689.
119. Glas, F. Strain in nanowires and nanowire heterostructures // *Semiconductors and Semimetals*. 2015. № 93. C. 79-123.
120. Lee, S., Vaid, A., Im, J., Kim, B., Prakash, A., Guénolé, J., Kiener, D., Bitzek, E., Oh, S.H. In situ observation of the initiation of plasticity by nucleation of prismatic dislocation loops // *Nature Communications*. 2020. № 11(1). C. 2367(1)-2367(11).
121. Liang, Y., Nix, W.D., Griffin, P.B., Plummer, J.D. Critical thickness enhancement of epitaxial SiGe films grown on small structures // *Journal of Applied Physics*. 2005. № 97(4). C. 043519(1)-043519(7).
122. Smirnov, A.M., Krasnitckii, S.A., Gutkin, M.Yu. Generation of misfit dislocations in a core-shell nanowire near the edge of prismatic core // *Acta Materialia*. 2020. № 186. C. 494-510.
123. 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. № 156. C. 103367(1)-103367(22).
124. Chu, H.J., Wang, J., Zhou, C.Z., Beyerlein, I.J. Self-energy of elliptical dislocation loops in anisotropic crystals and its application for defect-free core/shell nanowires // *Acta Materialia*. 2011. № 59. C. 7114-7124.
125. Chu, H.J., Zhou, C.Z., Wang, J., Beyerlein, I.J. An analytical model for the critical shell thickness in core/shell nanowires based on crystallographic slip // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2013. № 61. C. 2147-2160.

126. Smirnov, A.M., Krasnitckii, S.A., Rochas, S.S., Gutkin, M.Yu. Critical conditions of dislocation generation in core-shell nanowires: A review // *Reviews on Advanced Materials and Technologies*. 2020. № 2(3). С. 19-43.
127. Colin, J., Grilhé, J. Dipole of misfit dislocations in axially symmetric structures // *Philosophical Magazine Letters*. 2002. № 82(3). С. 125-132.
128. Shodja, H.M., Enzevae, C., Gutkin, M.Yu. Interface effect on the formation of a dipole of screw misfit dislocations in an embedded nanowire with uniform shear eigenstrain field // *European Journal of Mechanics - A/Solids*. 2015. № 51(1). С. 154-159.
129. Zhao, J., Liu, J., Kang, G., An, L., Zhang, X. The competitive nucleation of misfit dislocation dipole and misfit extended dislocation dipole in nanocomposites // *Acta Mechanica*. 2017. № 228. С. 2541-2554.
130. Ovid'ko, I.A., Sheinerman, A.G. Misfit dislocation loops in cylindrical quantum dots // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2004. № 16(41). С. 7225-7232.
131. Colin, J. Formation of a prismatic dislocation loop in the interface of a circular cylindrical inclusion embedded in a thin slab // *Journal of Applied Mechanics*. 2016. № 83(2). С. 021006(1)-021006(7).
132. Шейнерман А. Г. Устойчивые конфигурации дефектов несоответствия в наноструктурных и многослойных пленках. диссертация кандидата физико-математических наук : 01.02.04, 01.04.07.- Санкт-Петербург, 2002.- 167 с.: ил. РГБ ОД, 61 02-1/938-0, 2002.
133. М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Физическая механика деформируемых наноструктур. Том II. Нанослойные структуры. СПб: Янус, 2005. 352 с.

134. Fang, Q.H., Chen, J.H., Wen, P.H., Liu, Y.W. Misfit dislocations in an annular strained film grown on a cylindrical nanopore surface // *Scripta Materialia*. 2009. № 60(6). C. 395-398.
135. Zhao, Y.X., Fang, Q.H., Liu, Y.W. Edge misfit dislocation formation at the interface of a nanopore and infinite substrate with surface/interface effects // *Philosophical Magazine*. 2012. № 92(34). C. 4230-4249.
136. Gutkin, M.Yu., Ovid'ko, I.A. Dislocation mechanism of hollow fiber sliding during ceramic nanocomposite fracture // *Physics of the Solid State*. 2008. № 50(11). C. 2053-2061.
137. Gutkin, M.Yu., Ovid'ko, I.A. Glide of hollow fibers at the bridging stage of fracture in ceramic nanocomposites // *Scripta Materialia*. 2008. № 59(3). C. 368-371.
138. Gutkin, M.Yu., Ovid'ko, I.A. Effect of Y-junction nanotubes on strengthening of nanocomposites // *Scripta Materialia*. 2009. № 61(12). C. 1149-1152.
139. Gutkin, M.Yu., Ovid'ko, I.A. Effect of triple joints of nanotubes on strengthening and fracture toughness of ceramic nanocomposites // *Physics of the Solid State*. 2010. № 52(7). C. 1397-1403.
140. M.S. Gudixsen, L.J. Lauhon, J. Wang, D.C. Smith, Ch.M. Lieber. Growth of nanowire superlattice structures for nanoscale photonics and electronics // *Nature*. 2002. № 415, 6872. C. 617-620.
141. M. de la Mata, X. Zhou, F. Furtmayr, J. Teubert, S. Gradečak, M. Eickhoff, A. Fontcuberta i Morral, J. Arbiol. A review of MBE grown 0D, 1D and 2D quantum structures in a nanowire // *Journal of Materials Chemistry C*. 2013. № 1. C. 4300-4312.

142. Ch. Jia, Zh. Lin, Yu Huang, X. Duan. Nanowire Electronics: From Nanoscale to Macroscale // *Chemical Reviews*. 2019. № 119, No 15. C. 9074-9135.
143. L.N. Quan, J. Kang, C.-Zh. Ning, P. Yang.. Nanowires for Photonics // *Chemical Reviews*. 2019. T. 119. № 15. C. 9153-9169.
144. Yiyang Wu, Rong Fan, and Peidong Yang. Block-by-Block Growth of Single-Crystalline Si/SiGe Superlattice Nanowires // *Nano Letters*. 2002. T. 2. № 2. C. 83–86.
145. D. Zubia, S.D. Hersee. *J. Appl. Phys.* 85 1999. № 6492.
146. S.C. Jain, A.H. Harker, R.A. Cowley. // *Philos. Mag. A* 75. 1997. № 1461.
147. E. Ertekin, P.A. Greaney, D.C. Chrzan, T.D. Sands. // *J. Appl. Phys.* 97. 2005. № 114325.
148. F. Glas. Critical dimensions for the plastic relaxation of strained axial heterostructures in free-standing nanowires // *Phys. Rev. B* 74. 2006. № 121302(R).
149. H.A. Nilsson, T. Duty, S. Abay, C. Wilson, J.B. Wagner, C. Thelander, P. Delsing, L. Samuelson. // *Nano Lett.* 8. 2008. № 872.
150. D.V. Beznasyuk, P. Stepanov, J.L. Rouvière, F. Glas, M. Verheijen, J. Claudon, M. Hocevar. Full characterization and modeling of graded interfaces in a high lattice-mismatch axial nanowire heterostructure // *Phys. Rev. Mater.* 4. 2020. № 074607.
151. V.G. Dubrovskii, A.A. Koryakin, N.V. Sibirev. Suppression of miscibility gaps in vapor-liquid-solid InGaAs and InGaN nanowires // *Mater. Design* 132. 2017. № 400.

152. A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin, V.G. Dubrovskii. Elasticity of axial nanowire heterostructures with sharp and diffuse interfaces // *Scr. Mater.* 176. 2020. С. 42-46.
153. A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin. Elasticity of a cylinder with axially varying dilatational eigenstrain // *Int. J. Sol. Struct.* 213. 2021. № 121.
154. Mura, T. *Micromechanics of Defects in Solids*. Boston: Martinus Nijhoff, 1987.
155. А.И. Лурье. *Пространственные задачи теории упругости*. Государственное Издательство Техничко-Теоретической Литературы, 1955. 491 с.
156. Mura, T. The continuum theory of dislocations. In H. Herman (Ed.) // *Advances in Material Research*, vol. 3. 1968. № New York: Interscience Publ. С. 1-108.
157. А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. *Круговые дислокационно-дисклинационные петли и их применение к решению граничных задач теории дефектов*. Л.: Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР № 1019, 1986. 62 с.
158. Eason G., Noble B., Sneddon I.N. On certain integrals of Lipschitz-Hankel type involving products of Bessel functions // *Phil. trans. R. Soc. Lon., Ser. A, M. and P. Sci.*, Nr. 935. Vol. 247. 1955. С. 529-551.
159. Хирт, Дж. *Теория дислокаций [Текст]* Перев. с англ. под ред. Э. М. Надгорного и Ю. А. Осипьяна. Дж. Хирт, И. Лоте – М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
160. Ovid'ko, I.A., Sheinerman, A.G. Misfit dislocations in composite nanowires // *Materials Physics and Mechanics*. 2009. № 8. С. 83-107.
161. Gutkin, M.Yu. Misfit stress relaxation in composite nanoparticles // *International Journal of Engineering Science*. 2012. № 61, Special Issue. С. 59-74.

162. Gutkin, M.Yu., Kolesnikova, A.L., Krasnitsky, S.A., Romanov, A.E. Misfit dislocation loops in composite core-shell nanoparticles. // *Physics of the Solid State*. 2014. No. 56. pp. 723-730.
163. Gutkin, M.Yu., Kolesnikova, A.L., Krasnitckii, S.A., Romanov, A.E., Shalkovskii, A.G. Misfit dislocation loops in hollow core-shell nanoparticles // *Scripta Materialia*. 2014. № 83. С. 1-4.
164. Gutkin, M.Yu., Kolesnikova, A.L., Mikheev, D.S., Romanov, A.E. Misfit stresses and mechanisms of their relaxation in composite nanoparticles with truncated spherical inclusions // *European Journal of Mechanics / A Solids*. 2020. № 81, 103967.
165. Krauchanka, M.Yu., Krasnitckii, S.A., Gutkin, M.Yu., Kolesnikova, A.L., Romanov, A.E. Circular loops of misfit dislocations in decahedral core-shell nanoparticles // *Scripta Materialia*. 2019. № 167. С. 81-85.
166. Levinshtein, M., Rumyantsev, S., Shur, M. (Eds.). *Handbook Series on Semiconductor Parameters. Vol. 1: Si, Ge, C (Diamond), GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb*. Singapore: World Scientific, 2000.
167. Лихачёв В.А., Хайров Р.Ю. Введение в теорию дисклинаций. Л.: Изд. Ленинградского Университета., 1975. 183 с.
168. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. *Интегралы и ряды. Том 2*. М.: «Наука», Главная Редакция Физико Математической литературы, 1981. 751 с.
169. Eshelby, J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems // *Proceedings of the Royal Society of London A*. 1957. № 241(1226). С. 376-396.

170. Kolesnikova, A.L., Gutkin, M.Yu., Romanov, A.E. Analytical elastic models of finite cylindrical and truncated spherical inclusions // *International Journal of Solids and Structures*. 2018. № 143. C. 59-72.
171. Corless, R.M., Gonnet, G.H., Hare, D.E.G., Jeffrey, D.J., Knuth, D.E. On the Lambert W function // *Advances Computational Mathematics*. 1996. № 5. C. 329-359.
172. Braun, A., Briggs, K.M., Boni, P. Analytical solution to Matthews' and Blakeslee's critical dislocation formation thickness of epitaxially grown thin films // *Journal of Crystal Growth*. 2002. № 241. C. 231–234.
173. F. Glas. Critical dimensions for the plastic relaxation of strained axial heterostructures in free-standing nanowires // *Physical Review B*. 2006. T. 74. № 121302(R). C. 1-4.

Приложение А. Связь интегралов Лифшица-Ханкеля и эллиптических интегралов

В этом приложении интегралы Лифшица-Ханкеля $J(k, l; p)$ представлены через полные эллиптические интегралы [168], которые удобны при вычислениях полей напряжений петель дислокаций несоответствия (2.14):

$$J(1,1;0) = \frac{1}{\pi m \sqrt{\bar{r}}} \left[(2 - m^2) \mathbf{K}(m) - 2 \mathbf{E}(m) \right], \quad (\text{A.1})$$

$$J(1,0;2) = \frac{\xi m^3}{8 \pi m_1^2 \bar{r}^{3/2}} \left[\left(\frac{m^2(m^2 - 2)(-1 + \bar{r}^2 + \xi^2)}{2\bar{r} m_1^2} + 1 \right) \mathbf{E}(m) - \frac{m^2(1 - \bar{r}^2 - \xi^2)}{4\bar{r}} \mathbf{K}(m) \right], \quad (\text{A.2})$$

$$J(1,0;1) = \frac{m^3(1 - \bar{r}^2 - \xi^2)}{8 \pi m_1^2 \bar{r}^{3/2}} \left[\mathbf{E}(m) + \frac{m}{\sqrt{\bar{r}}} \mathbf{K}(m) \right], \quad (\text{A.3})$$

$$J(1,1;1) = \frac{m \xi}{2 \pi \bar{r}^{3/2}} \left[\frac{(2 - m^2)}{2m_1^2} \mathbf{E}(m) - \mathbf{K}(m) \right], \quad (\text{A.4})$$

$$J(1,1;2) = \frac{m}{16 \pi (1 - m^2)^2 \bar{r}^{5/2}} \left[m_1^2 \mathbf{K}(m) \left(8m_1^2 \bar{r} - m^2 (2 - m^2) \xi^2 \right) + 2m^2 \mathbf{E}(m) \left(m^4 \xi^2 - (1 - m^2)(\bar{r}^2 + 1) \right) \right], \quad (\text{A.5})$$

где $J(k, l; p) = \int_0^\infty J_k(\kappa) J_l(\kappa \bar{r}) \exp(-\kappa \xi) \kappa^p d\kappa$, J_k и J_l – функции Бесселя первого

рода, $\xi > 0$ [158]; $\bar{r} = r/c$, $\xi = |z - z_0|/c$; $\mathbf{E}(m) = \int_0^{\pi/2} (1 - m^2 \sin^2 t)^{1/2} dt$ – полный

эллиптический интеграл первого рода, $\mathbf{K}(m) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - m^2 \sin^2 t)^{-1/2} dt$ – полный

эллиптический интеграл второго рода, $m = \sqrt{4\bar{r} / [(1 + \bar{r})^2 + \xi^2]}$, $m_1 = \sqrt{1 - m^2}$.

Приложение Б. Фурье-образы компонент напряжения петли дислокаций несоответствия

Б.1. Фурье-образы компонент ${}^\infty\sigma_{rr}$ и ${}^\infty\sigma_{rz}$ напряжения, генерируемого петлёй дислокаций несоответствия в бесконечном пространстве при $r = a$

Компоненты напряжений выглядят так:

$${}^\infty\sigma_{rr}|_{r=a} = \frac{\pm Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1-2\nu}{a} J^*(1,1;0) + \frac{|z-z_0|}{c^2} J^*(1,0;2) - \frac{1}{c} J^*(1,0;1) - \frac{|z-z_0|}{ca} J^*(1,1;1) \right], \quad (\text{Б.1})$$

$${}^\infty\sigma_{rz}|_{r=a} = \frac{\mp Gb}{2(1-\nu)} \frac{(z-z_0)}{c^2} J^*(1,1;2), \quad (\text{Б.2})$$

где $J^*(k,l;p) = J(k,l;p)$ при $r = a$ и $\xi = |z - z_0|/c$, $J(k,l;p)$, см. Приложение А.

Фурье-преобразование определяется:

$${}^\infty\hat{\sigma}_{rr}|_{r=a} = F[{}^\infty\sigma_{rr}|_{r=a}] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} {}^\infty\sigma_{rr}|_{r=a} e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} d(z-z_0), \quad (\text{Б.3})$$

где $\tilde{z} = z/a$ и $\tilde{z}_0 = z_0/a$.

Находим компоненты напряжений (Б.1) и (Б.2) почленно, опуская множители $\frac{\pm Gb}{2(1-\nu)}$ и $\frac{\mp Gb}{2(1-\nu)}$ соответственно:

$$\frac{1-2\nu}{a} F[J^*(1,1;0)] = \frac{1-2\nu}{a} \cdot \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} d(\tilde{z}-\tilde{z}_0) \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1(\kappa \frac{a}{c}) e^{-\kappa \frac{|\tilde{z}-\tilde{z}_0|a}{c}} d\kappa \stackrel{\{t=c/a\}}{=}$$

$$\frac{(1-2\nu)}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_1\left(\frac{\kappa}{t}\right) d\kappa \int_{-\infty}^\infty e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} e^{-\kappa \frac{|\tilde{z}-\tilde{z}_0|}{t}} d(\tilde{z}-\tilde{z}_0) =$$

$$\frac{(1-2\nu)2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_1\left(\frac{\kappa}{t}\right) \frac{t\kappa}{\kappa^2+t^2\beta^2} d\kappa = \frac{(1-2\nu)2}{\sqrt{2\pi}} t I_1(t\beta) K_1(\beta), \quad \beta > 0; \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{1}{c^2} F[|\tilde{z}-z_0| J^*(1,0;2)] =$$

$$\frac{a^2}{c^2 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} |\tilde{z}-\tilde{z}_0| d(\tilde{z}-\tilde{z}_0) \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\kappa \frac{a}{c}\right) e^{-\kappa \frac{|\tilde{z}-\tilde{z}_0| a}{c}} \kappa^2 d\kappa \stackrel{\{t=c/a\}}{=} \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi} t^2} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\frac{\kappa}{t}\right) \kappa^2 d\kappa \int_{-\infty}^\infty e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} |\tilde{z}-\tilde{z}_0| e^{-\kappa \frac{|\tilde{z}-\tilde{z}_0|}{t}} d(\tilde{z}-\tilde{z}_0) = \\ \frac{2}{\sqrt{2\pi} t^2} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\frac{\kappa}{t}\right) \frac{(t^2\kappa^2-t^4\beta^2)\kappa^2}{(\kappa^2+t^2\beta^2)^2} d\kappa = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\frac{\kappa}{t}\right) \frac{(\kappa^2-t^2\beta^2)\kappa^2}{(\kappa^2+t^2\beta^2)^2} d\kappa = \\ \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\frac{\kappa}{t}\right) \left(1 - \frac{3t^2\beta^2}{(\kappa^2+t^2\beta^2)} + \frac{2t^4\beta^4}{(\kappa^2+t^2\beta^2)^2}\right) d\kappa = \\ \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \left(0 - 3t\beta I_1(t\beta) K_0(\beta) + \frac{2t^4\beta^4}{(-2t^2\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{t\beta} I_1(t\beta) K_0(\beta)\right)\right) = \\ \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \left(-3t\beta I_1(t\beta) K_0(\beta) - t\beta^2 [t I_2(t\beta) K_0(\beta) - I_1(t\beta) K_1(\beta)]\right), \quad \beta > 0; \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{-1}{c} F[J^*(1,0;1)] = \frac{-a}{c\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} d(\tilde{z}-\tilde{z}_0) \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\kappa \frac{a}{c}\right) e^{-\kappa \frac{|\tilde{z}-\tilde{z}_0| a}{c}} \kappa d\kappa \stackrel{\{t=c/a\}}{=} \\ \frac{-1}{\sqrt{2\pi} t} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\frac{\kappa}{t}\right) \kappa d\kappa \int_{-\infty}^\infty e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} e^{-\kappa \frac{|\tilde{z}-\tilde{z}_0|}{t}} d(\tilde{z}-\tilde{z}_0) =$$

$$\frac{-2}{\sqrt{2\pi} t} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\frac{\kappa}{t}\right) \frac{t\kappa^2}{\kappa^2+t^2\beta^2} d\kappa = \frac{-2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty J_1(\kappa) J_0\left(\frac{\kappa}{t}\right) \left(1 - \frac{t^2\beta^2}{\kappa^2+t^2\beta^2}\right) d\kappa =$$

$$\frac{-2}{\sqrt{2\pi}} \left(0 - \frac{t^2 \beta^2}{t\beta} I_1(t\beta) K_0(\beta) \right) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} t\beta I_1(t\beta) K_0(\beta), \quad \beta > 0; \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{-1}{ca} F[|z - z_0| J^*(1, 1; 1)] =$$

$$\frac{-1}{ca\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0)} |\tilde{z} - \tilde{z}_0| d(\tilde{z} - \tilde{z}_0) \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\kappa \frac{a}{c}\right) e^{-\kappa \frac{|\tilde{z} - \tilde{z}_0| a}{c}} \kappa d\kappa \quad \{t=c/a\} =$$

$$\frac{-2}{\sqrt{2\pi} t} \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\frac{\kappa}{t}\right) \kappa d\kappa \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0)} |\tilde{z} - \tilde{z}_0| e^{-\kappa \frac{|\tilde{z} - \tilde{z}_0|}{t}} d(\tilde{z} - \tilde{z}_0) =$$

$$\frac{-2}{\sqrt{2\pi} t} \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\frac{\kappa}{t}\right) \frac{(t^2 \kappa^2 - t^4 \beta^2) \kappa}{(\kappa^2 + t^2 \beta^2)^2} d\kappa = \frac{-2t}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\frac{\kappa}{t}\right) \frac{(\kappa^2 - t^2 \beta^2) \kappa}{(\kappa^2 + t^2 \beta^2)^2} d\kappa$$

$$\frac{-2t}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\frac{\kappa}{t}\right) \left(\frac{\kappa}{(\kappa^2 + t^2 \beta^2)} - \frac{2t^2 \beta^2 \kappa}{(\kappa^2 + t^2 \beta^2)^2} \right) d\kappa =$$

$$\frac{-2t}{\sqrt{2\pi}} \left(I_1(t\beta) K_1(\beta) - \frac{2t^2 \beta^2}{(-2t^2 \beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} (I_1(t\beta) K_1(\beta)) \right) =$$

$$\frac{-2t}{\sqrt{2\pi}} (I_1(t\beta) K_1(\beta) + \beta [t I_0(t\beta) K_1(\beta) - I_1(t\beta) K_2(\beta)]), \quad \beta > 0; \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{1}{c^2} F[(z - z_0) J^*(1, 1; 2)] =$$

$$\frac{a^2}{c^2 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0)} (\tilde{z} - \tilde{z}_0) d(\tilde{z} - \tilde{z}_0) \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\kappa \frac{a}{c}\right) e^{-\kappa \frac{|\tilde{z} - \tilde{z}_0| a}{c}} \kappa^2 d\kappa \quad \{t=c/a\} =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi} t^2} \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\kappa \frac{1}{t}\right) \kappa^2 d\kappa \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0)} (\tilde{z} - \tilde{z}_0) e^{-\kappa \frac{|\tilde{z} - \tilde{z}_0|}{t}} d(\tilde{z} - \tilde{z}_0) =$$

$$\frac{-4it^3 \beta}{\sqrt{2\pi} t^2} \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\kappa \frac{1}{t}\right) \frac{\kappa^3}{(\kappa^2 + t^2 \beta^2)^2} d\kappa = \frac{-4it\beta}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} J_1(\kappa) J_1\left(\kappa \frac{1}{t}\right) \left(\frac{\kappa}{(\kappa^2 + t^2 \beta^2)} - \frac{t^2 \beta^2 \kappa}{(\kappa^2 + t^2 \beta^2)^2} \right) d\kappa =$$

$$\begin{aligned} & \frac{-4it\beta}{\sqrt{2\pi}} \left(I_1(t\beta)K_1(\beta) - \frac{t^2\beta^2}{(-2t^2\beta)} \frac{\partial}{\partial\beta} (I_1(t\beta)K_1(\beta)) \right) = \\ & \frac{-2it\beta}{\sqrt{2\pi}} (2I_1(t\beta)K_1(\beta) + \beta[tI_0(t\beta)K_1(\beta) - I_1(t\beta)K_2(\beta)]) = \\ & \frac{-2it\beta}{\sqrt{2\pi}} (-\beta I_1(t\beta)K_0(\beta) + t\beta I_0(t\beta)K_1(\beta)), \quad \beta > 0, \end{aligned} \quad (\text{Б.8})$$

где $I_0(t\beta)$ и $I_1(t\beta)$ – модифицированные функции Бесселя первого рода; $K_0(\beta)$, $K_1(\beta)$ и $K_2(\beta)$ – функции Макдональда; $t = c/a$.

Наконец, имеем

$${}^\infty \hat{\sigma}_{rr} \Big|_{r=a} = \frac{\pm Gbt}{\sqrt{2\pi(1-\nu)}} \left[(wK_1 + \beta K_0)I_1^* - t\beta(\beta K_0 + K_1)I_0^* \right]; \quad (\text{Б.9})$$

$${}^\infty \hat{\sigma}_{rz} \Big|_{r=a} = \frac{\pm iGb t\beta^2}{\sqrt{2\pi(1-\nu)}} \left[tK_1I_0^* - K_0I_1^* \right]. \quad (\text{Б.10})$$

Здесь $I_0^* = I_0(t\beta)$, $I_1^* = I_1(t\beta)$, $I_0 = I_0(\beta)$, $I_1 = I_1(\beta)$, а $w = \beta^2 - 2\nu + 2$. Преобразования Фурье были вычислены при помощи программного продукта Wolfram Mathematica, интегралы взяты при помощи справочника [168].

Б.2. Фурье-образы компонент напряжения ${}^i\sigma_{rr}$ и ${}^i\sigma_{rz}$ при $r = a$

Компоненты напряжения:

$$\begin{aligned} {}^i\sigma_{rr} \Big|_{r=a} &= \frac{2G}{a} \times \\ & \int_0^\infty \left[-\beta(D_1\beta + C_1(-3+2\nu))I_0(\beta) + (D_1\beta + C_1(-4+4\nu-\beta^2))I_1(\beta) \right] \cos\beta(\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta, \end{aligned} \quad (\text{Б.11})$$

$${}^i\sigma_{rz}\Big|_{r=a} = \frac{2G}{a} \int_0^\infty \beta \left[C_1 \beta I_0(\beta) + (D_1 \beta + 2C_1(\nu - 1)) I_1(\beta) \right] \sin \beta (\tilde{z} - \tilde{z}_0) d\beta. \quad (\text{Б.12})$$

Фурье-преобразование определяется так:

$${}^i\hat{\sigma}_{rz}\Big|_{r=a} = F\left[{}^i\sigma_{rz}\Big|_{r=a} \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty {}^i\sigma_{rz}\Big|_{r=a} e^{-i\beta(\tilde{z}-\tilde{z}_0)} d(z - z_0), \quad (\text{Б.13})$$

где $\tilde{z} = z/a$ и $\tilde{z}_0 = z_0/a$.

Фурье-образы находятся при помощи дельта-функции Дирака δ :

$$\begin{aligned} {}^i\hat{\sigma}_{rr}\Big|_{r=a} &= 2G \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty \left[-\beta' (D_1 \beta' + C_1(-3+2\nu)) I_0(\beta') + (D_1 \beta' + C_1(-4+4\nu-\beta'^2)) I_1(\beta') \right] \times \\ &\quad [\delta(\beta - \beta') + \delta(\beta + \beta')] d\beta' = \\ &\quad \sqrt{2\pi} G \left[-\beta (D_1 \beta + C_1(-3+2\nu)) I_0 + (D_1 \beta + C_1(-4+4\nu-\beta^2)) I_1 \right]; \end{aligned} \quad (\text{Б.14})$$

$$\begin{aligned} {}^i\hat{\sigma}_{rz}\Big|_{r=a} &= 2G(-i) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty \beta' \left[C_1 \beta' I_0(\beta') + (D_1 \beta' + 2C_1(\nu - 1)) I_1(\beta') \right] \times \\ &\quad [\delta(\beta - \beta') - \delta(\beta + \beta')] d\beta' = \\ &\quad -i\sqrt{2\pi} G \beta \left[C_1 \beta I_0 + (D_1 \beta + 2C_1(\nu - 1)) I_1 \right], \end{aligned} \quad (\text{Б.15})$$

где $I_0 = I_0(\beta)$ и $I_1 = I_1(\beta)$, как и прежде. Преобразования Фурье были вычислены при помощи программного продукта Wolfram Mathematica, интегралы взяты при помощи справочника [168].

Приложение В. Проверка уравнений (2.31а) и (2.31б)

Энергия взаимодействия между ядром нанопроволоки и ПДП, вычисляется при помощи (2.31а) и (2.31б). Здесь процесс вычисления продемонстрирован более подробно.

Формулу (2.31а) можно записать как

$$\begin{aligned}
 E_{PL-core} &= - \int_V^{PL} \varepsilon_{zz}^* \sigma_{zz}^c dV = \mp b \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^a \delta(z - z_0) H(1 - \frac{r}{c})^c \sigma_{zz}^c r dr d\varphi dz = \\
 &\mp b \int_0^{2\pi} \int_0^c \sigma_{zz}^c |_{z=z_0} r dr d\varphi = \mp 2\pi b \int_0^c \sigma_{zz}^c |_{z=z_0} r dr = \pm \frac{4G(1+\nu)\pi\varepsilon^* b}{1-\nu} (1-t^2) \int_0^c r dr = \\
 &\pm \frac{2G(1+\nu)\pi\varepsilon^* ba^2}{1-\nu} (1-t^2)t^2, \tag{B.1}
 \end{aligned}$$

где $t = c/a$. Здесь использованы уравнения (2.3в) и (2.11).

В свою очередь, (2.31б) преобразуется так:

$$\begin{aligned}
 E_{PL-core} &= \int_V^c \varepsilon_{ii}^* \sigma_{ii}^{PL} dV = -\varepsilon^* a \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^c \text{Tr}(\infty \boldsymbol{\sigma} + {}^i \boldsymbol{\sigma}) r dr d\varphi d\tilde{z} = \\
 &-2\pi \varepsilon^* a \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^c \text{Tr}(\infty \boldsymbol{\sigma} + {}^i \boldsymbol{\sigma}) r dr d\tilde{z} = \frac{-2G(1+\nu)\pi\varepsilon^* ba}{(1-\nu)c} \times \\
 &\left(\mp \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^c J(1,0;1) r dr d\tilde{z} + \frac{4(1-\nu)ct}{ba} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^c \int_0^{\infty} C_1 \beta I_0(\tilde{r}\beta) \cos(\beta\tilde{z}) d\beta r dr d\tilde{z} \right) = \\
 &\frac{-2G(1+\nu)\pi\varepsilon^* ba}{(1-\nu)c} \left(\mp c^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} J_1^2(\kappa) e^{-\frac{|\tilde{z}|\kappa}{c}} d\kappa d\tilde{z} + \frac{4(1-\nu)c^2 t}{b} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} C_1 I_1^* \cos(\beta\tilde{z}) d\beta d\tilde{z} \right) = \\
 &\frac{\pm 2G(1+\nu)\pi\varepsilon^* bac}{(1-\nu)} \times \\
 &\left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} J_1^2(\kappa) e^{-\frac{|\tilde{z}|\kappa}{c}} d\kappa d\tilde{z} + 2t \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{[I_1^*(wI_1K_1 + \beta^2 I_0K_0) - \beta t I_0^*]}{\pi(\beta^2 I_0^2 - wI_1^2)} I_1^* \cos(\beta\tilde{z}) d\beta d\tilde{z} \right) = \\
 &\frac{\pm 2G(1+\nu)\pi\varepsilon^* bac}{(1-\nu)} \times
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(2t \int_0^\infty J_1^2(\kappa) \kappa^{-1} d\kappa + 2t \int_0^\infty \frac{[I_1^*(wI_1K_1 + \beta^2 I_0K_0) - \beta t I_0^*]}{(\beta^2 I_0^2 - wI_1^2)} I_1^* \delta(\beta) d\beta \right) = \\
& \frac{\pm 2G(1+\nu)\pi\varepsilon^* bac}{(1-\nu)} \times \\
& \left(t + 2t \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{[I_1^*(wI_1K_1 + \beta^2 I_0K_0) - \beta t I_0^*] I_1^*}{(\beta^2 I_0^2 - wI_1^2)} \right) = \\
& \frac{\pm 2G(1+\nu)\pi\varepsilon^* bac}{(1-\nu)} t(1-t^2) = \pm \frac{2G(1+\nu)\pi\varepsilon^* ba^2}{1-\nu} (1-t^2)t^2, \quad (\text{B.2})
\end{aligned}$$

Обозначения в Приложении А и в формулах (Б.9), (Б.10), (Б.13) и (В.1) взяты из формул (2.1), (2.14ж), (2.15ж), и (2.21а). Интегралы и предел из (В.2) вычислены при помощи Wolfram Mathematica.