

## **МИКРОМЕХАНИКА РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ В НЕОДНОРОДНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУРАХ**

**М.Ю. Гуткин** <sup>1, 2, 3</sup>

<sup>1</sup>*Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург*

<sup>2</sup>*Университет ИТМО, Санкт-Петербург*

<sup>3</sup>*Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, Санкт-Петербург*  
m.y.gutkin@gmail.com

**Аннотация.** Рассмотрены теоретические модели релаксации напряжений несоответствия в неоднородных кристаллических наноструктурах. Показано, что основным способом релаксации служит образование дислокаций несоответствия. Определены критические условия для образования петель таких дислокаций в наночастицах и нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с разными типами ядер и в аксиально неоднородной нанопроволоке с поперечной границей, исследованы равновесные распределения таких петель. Рассмотрены разные механизмы образования дислокаций несоответствия в композитном нанослое, содержащем нанопроволоку прямоугольного поперечного сечения, и в композитной нанопроволоке с ядром в виде прямой призмы квадратного сечения.

### **Введение**

Неоднородные кристаллические наноструктуры служат основой современных устройств в нано- и микроэлектронике, оптоэлектронике, фотонике и т. д. Хорошо известно, что их физические свойства и служебные характеристики сильно зависят от остаточных упругих деформаций несоответствия, вызванных различием параметров кристаллической решетки. При определенных условиях эти деформации релаксируют за счет образования различных дефектов [1–4], которые могут приводить к значительному ухудшению свойств наноструктур. Наиболее распространенным способом такой релаксации является образование на границах раздела дислокаций несоответствия (ДН). Теоретические и экспериментальные исследования процессов релаксации с образованием ДН проводятся с середины XX века. Однако до сих пор обсуждение вопросов об источниках, механизмах и критических условиях появления ДН в реальных неоднородных кристаллических наноструктурах вызывает большой интерес [2–4].

В докладе предложен краткий обзор теоретических моделей релаксации напряжений несоответствия в неоднородных кристаллических наноструктурах – композитных наночастицах, нанопроволоках и нанослоях.

### **Модели релаксации напряжений несоответствия**

Разработка и сравнение разных микромеханизмов релаксации приводит к выводу, что в подавляющем большинстве случаев основным способом релаксации служит образование различных дислокационных конфигураций [5–7]. Для определения и анализа критических условий их формирования получены новые решения граничных задач теории упругости о круговых призматических дислокационных петлях в полом упругом шаре [8] и в упругом цилиндре [9], найдены выражения для упругой энергии таких петель [8, 9] и для энергий парного взаимодействия между ними [9, 10]. Рассчитаны также поля напряжений и энергия круговой призматической дислокационной петли, окружающей цилиндрическую полость в бесконечной упругой среде [11].

С помощью полученных решений были определены критические условия, необходимые для образования круговых призматических петель ДН на границах раздела в композитных наночастицах и нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с разными типами ядер. В частности, рассматриваются критические условия формирования петель ДН в сплошных [12, 13] и полых [14] монокристаллических и в сплошных декаэдрических [15] сферических наночастицах. Для моделирования последних было использовано новое решение об упругих полях клиновой дисклинации в упругом шаре [16]. Исследовались случаи ядер в виде сплошного [12, 15] и полого [14] шара, а также в виде полушария, опирающегося на экваториальную плоскость наночастицы [13].

В случае нанопроволок рассматривались сплошные, свободно стоящие цилиндрические нанопроволоки типа «ядро-оболочка» [9] и нанотрубки, внедренные в упругую матрицу [11].

Важно отметить, что все перечисленные выше модели [9–16] предполагали упругую однородность и изотропию композитных наночастиц и нанопроволок. Исследовать влияние различий в упругих модулях ядра и оболочки на критические условия образования петель ДН удалось пока только в рамках приближенных моделей [7].

Помимо анализа критических условий появления первых петель ДН изучался вопрос о равновесной (оптимальной) плотности этих дефектов в неоднородных кристаллических наноструктурах. Так, для композитной нанопроволоки типа «ядро-оболочка» найдена равновесная плотность бесконечного периодического ряда петель ДН [9], которая хорошо совпадает с результатами прямых экспериментальных наблюдений [17]. В частности, для нанопроволоки InAs-GaAs диаметром 100 нм с толщиной оболочки 15 нм и решеточным несоответствием 6.67–7.17% получены расчетные значения равновесного расстояния между петлями ДН 8.35–9.05 нм [9], а в эксперименте наблюдались расстояния 7.0–8.5 нм [17]. При этом показано, что образование равновесного ансамбля петель ДН в такой нанопроволоке понижает ее полную энергию на 31%.

Для композитной наночастицы с ядром в виде полушария, опирающегося на экваториальную плоскость наночастицы [13], определены равновесные количества круговых призматических петель ДН в зависимости от радиуса наночастицы, величины несоответствия и отношения радиусов ядра и наночастицы. Показано, что с ростом несоответствия, радиуса наночастицы и отношения радиусов ядра и наночастицы энергетически выгодно образование все большего количества петель ДН. При этом наиболее неустойчивыми к образованию петель ДН оказались наночастицы, в которых радиус ядра составляет 0.75 от внешнего радиуса наночастицы.

На основе полученного недавно решения граничной задачи теории упругости о полях напряжений несоответствия в аксиально неоднородной нанопроволоке с плоской поперечной границей раздела [18] впервые построена модель релаксации этих напряжений за счет образования круговых призматических дислокационных петель на некотором удалении от этой границы [19]. Исследованы критические условия образования такой петли, найдены ее оптимальный радиус и оптимальное расстояние до границы. Показано, что ее формирование может служить эффективным каналом релаксации напряжений несоответствия. В частности, наибольший выигрыш в энергии в нанопроволоке радиусом  $a$  дает образование петли радиусом  $\sim 0.8a$  на расстоянии  $\sim 0.3a$  от границы. Критическими условиями релаксации являются либо превышение величиной несоответствия  $f$  некоторого критического значения  $f_c$  при заданном радиусе нанопроволоки  $a$ , либо превышение этим радиусом некоторого критического значения  $a_c$  при заданной величине несоответствия  $f$ . Для значения коэффициента Пуассона 0.3 установлены следующие приближенные степенные зависимости [19]:  $f_c \approx (a/b)^{-0.77}$  и  $a_c \approx bf^{-1.299}$ , где  $b$  – величина вектора Бюргерса дислокационной петли (порядка межатомного расстояния вдоль оси нанопроволоки).

В рассмотренных выше моделях релаксации не исследовался сам процесс образования первых ДН, и не рассчитывались энергетические барьеры для их зарождения. Для подобного исследования необходим выбор механизма формирования замкнутых дислокационных петель, поля и энергии которых были использованы при моделировании. В следующей серии работ были сделаны определенные предположения о возможных механизмах образования ДН, рассчитаны энергетические барьеры, возникающие при срабатывании этих механизмов, и на основе сравнения этих барьеров между собой были сделаны заключения об относительной предпочтительности тех или иных механизмов релаксации.

Например, были рассмотрены разные механизмы образования прямолинейных ДН на границе раздела в композитном нанослое, содержащем нанопроволоку прямоугольного поперечного сечения [20]. Предполагалось, что механизмом образования ДН служит испускание диполей полных или частичных ДН ребром нанопроволоки, ориентированной в нанослое таким образом, что две ее грани параллельны, а две другие перпендикулярны поверхностям нанослоя. При этом одна из ДН могла скользить от ребра нанопроволоки к свободной поверхности нанослоя, а другая – по грани нанопроволоки к ее середине. Рассчитывалось изменение полной энергии системы, вызванное зарождением полных и частичных ДН. Анализ зависимости такого изменения энергии от расстояний, пройденных дислокациями диполя, позволил найти критические условия образования ДН и положения их равновесия для разных значений параметров системы. Показано, что одна ДН имеет равновесное положение в середине грани нанопроволоки, а другая – либо между ребром нанопроволоки и поверхностью нанослоя, либо непосредственно на поверхности нанослоя, в зависимости от типа ДН и значений параметров системы. В частности, установлено, что в случае полных дислокаций вторая ДН всегда должна выходить на поверхность нанослоя.

Другим примером может служить теоретическое изучение механизмов формирования прямолинейных ДН в цилиндрических нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с ядром в виде длинной прямой призмы квадратного сечения, расположенной симметрично относительно цилиндрической поверхности оболочки [21]. Были рассчитаны изменения энергии такой системы при образовании ДН и найдены энергетические барьеры для зарождения отдельных полных и частичных дислокаций при скольжении и переползании со свободной поверхности оболочки, а также при испускании диполей таких дислокаций ребрами призматического ядра. Показано, что в зависимости от диаметра нанопроволоки и поперечного размера ее ядра меняется энергетическая предпочтительность активации того или иного механизма релаксации. Например, в нанопроволоке, состоящей из золотого ядра и палладиевой оболочки, наиболее предпочтительным механизмом является испускание дислокационных диполей ребрами ядра. При этом в более тонких нанопроволоках выгоднее испускание диполей частичных дислокаций, а в более толстых – диполей полных дислокаций.

### Заключение

В целом, показано, что сочетание методов классической пространственной теории упругости и микромеханики дефектов позволяет адекватно описывать релаксацию напряжений несоответствия в

рассмотренных неоднородных кристаллических наноструктурах – композитных наночастицах, нанопроволоках и нанослоях.

Среди проблем, представляющих особый интерес в ближайшем будущем, можно отметить следующие направления исследований:

- 1) разработка моделей релаксации напряжений несоответствия в фасетированных нанопроволоках и наночастицах типа «ядро-оболочка»;
- 2) решение граничных задач теории упругости для определения полей напряжений несоответствия в неоднородных кристаллических наноструктурах с диффузными границами раздела;
- 3) разработка моделей релаксации напряжений несоответствия в неоднородных кристаллических наноструктурах с диффузными границами раздела.

Постановка и решение этих задач позволит получить новые результаты, которые, как ожидается, будут лучше отражать поведение дефектов, релаксацию напряжений и связанные с этим явления в реальных приборных наноструктурах.

### Литература

1. L. B. Freund, S. Suresh // *Thin film materials: stress, defect formation and surface evolution*. Cambridge University Press. 2004.
2. M. Yu. Gutkin, A. L. Kolesnikova, A. E. Romanov // *Nanomechanics of stress relaxation in composite low-dimensional structures*, In: H. Altenbach, A. Öchsner (eds.), *Encyclopedia of Continuum Mechanics*, Springer, Berlin, Heidelberg. 2020, 1778-1799.
3. A. M. Smirnov, S. A. Krasnitckii, S. S. Rochas, M. Yu. Gutkin // *Critical conditions of dislocation generation in core-shell nanowires: A review*, *Reviews on Advanced Materials and Technologies*, 2:3 2020. 19-43.
4. А. Е. Романов, А. Л. Колесникова, М. Ю. Гуткин // *Внутренние напряжения и структурные дефекты в нанопроволоках*, *ПММ*, 86:4 2022. 527-550.
5. L. I. Trusov, M. Yu. Tanakov, V. G. Gryaznov, A. M. Kaprelov, A. E. Romanov // *Relaxation of elastic stresses in overlaid microcrystals*, *J. Cryst. Growth*, 114 1991. 133-140.
6. M. Yu. Gutkin, K. V. Kuzmin, A. G. Sheinerman // *Misfit stresses and relaxation mechanisms in a nanowire containing a coaxial cylindrical inclusion of finite length*, *Phys. Stat. Sol. B*, 248:7 2011. 1651-1657.
7. M. Yu. Gutkin // *Misfit stress relaxation in composite nanoparticles*, *Intern. J. Eng. Sci.*, 61 2012. 59-74.
8. A. L. Kolesnikova, M. Yu. Gutkin, S. A. Krasnitckii, A. E. Romanov // *Circular prismatic dislocation loops in elastic bodies with spherical free surfaces*, *Intern. J. Sol. Struct.*, 50:10 2013. 1839-1857.
9. A. P. Chernakov, A. L. Kolesnikova, M. Yu. Gutkin, A. E. Romanov // *Periodic array of misfit dislocation loops and stress relaxation in core-shell nanowires*, *Intern. J. Eng. Sci.*, 156:10 2020. 103367 (1-22).
10. S. A. Krasnitckii, A. M. Smirnov, M. Yu. Gutkin // *Pair interaction of coaxial circular prismatic dislocation loops in elastic solids with spherical surfaces*, *Mater. Phys. Mech.*, 44:1 2020. 116-124.
11. A. L. Kolesnikova, A. P. Chernakov, M. Yu. Gutkin, A. E. Romanov // *Prismatic dislocation loops in crystalline materials with empty and coated channels*, *Europ. J. Mech. – A/Solids*, 94:10 2022. 104612 (1-11).
12. М. Ю. Гуткин, А. Л. Колесникова, С. А. Красницкий, А. Е. Романов // *Петли дислокаций несоответствия в композитных наночастицах типа ядро-оболочка*, *ФТТ*, 56:4 2014. 695-702.
13. M. Yu. Gutkin, A. L. Kolesnikova, D. S. Mikheev, A. E. Romanov // *Misfit stresses and their relaxation by misfit dislocation loops in core-shell nanoparticles with truncated spherical cores*, *Europ. J. Mech. / A Solids*, 81:10 2020. 103967 (1-8).
14. M. Yu. Gutkin, A. L. Kolesnikova, S. A. Krasnitckii, A. E. Romanov, A. G. Shalkovskii // *Misfit dislocation loops in hollow core-shell nanoparticles*, *Scripta Mater.*, 83:1 2014. 1-4.
15. M. Yu. Krauchanka, S. A. Krasnitckii, M. Yu. Gutkin, A. L. Kolesnikova, A. E. Romanov // *Circular loops of misfit dislocations in decahedral core-shell nanoparticles*, *Scripta Mater.*, 167 2019. 81-85.
16. A. L. Kolesnikova, M. Yu. Gutkin, A. V. Proskura, N. F. Morozov, A. E. Romanov // *Elastic fields of straight wedge disclinations axially piercing bodies with spherical free surfaces*, *Int. J. Sol. Struct.*, 99 2016. 82-96.
17. R. Popovitz-Biro, A. Kretinin, P. Von Huth, H. Shtrikman // *InAs/GaAs core-shell nanowires*, *Cryst. Growth & Design*, 11 2011. 3858-3865.
18. A. E. Romanov, A. L. Kolesnikova, M. Yu. Gutkin // *Elasticity of a cylinder with axially varying dilatational eigenstrain*, *Int. J. Sol. Struct.*, 213 2021. 121-134.
19. A. L. Kolesnikova, A. P. Chernakov, M. Yu. Gutkin, A. E. Romanov // *Misfit strain induced out-of-interface prismatic dislocation loops in axially inhomogeneous hybrid nanowires*, *Extr. Mech. Lett.*, 56:10 2022. 101861 (1-5).
20. K. N. Mikaelyan, M. Yu. Gutkin, E. N. Borodin, A. E. Romanov // *Dislocation emission from the edge of a misfitting nanowire embedded in a free-standing nanolayer*, *Int. J. Sol. Struct.*, 161 2019. 127-135.
21. A. M. Smirnov, S. A. Krasnitckii, M. Yu. Gutkin // *Generation of misfit dislocations in a core-shell nanowire near the edge of prismatic core*, *Acta Mater.*, 186 2020. 494-510.