

**Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Институт прикладной математики и механики  
Кафедра «Физика прочности и пластичности»**

**Выпускная квалификационная работа магистра  
по направлению 15.04.03 «Прикладная механика»**

***Исследование равновесной системы петель  
дислокаций несоответствия в композитных  
нанопроволоках***

**Выполнил студент группы 23645/2**

**А.П. Чернаков**

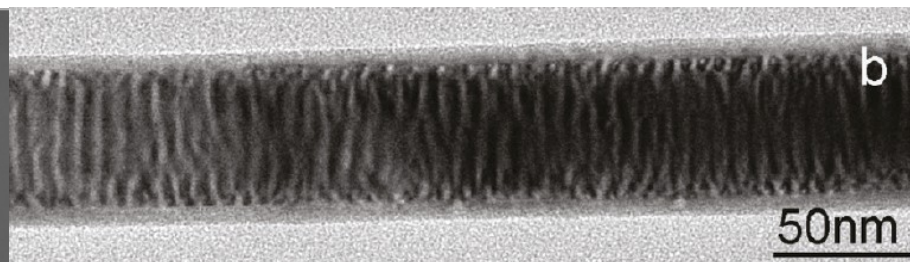
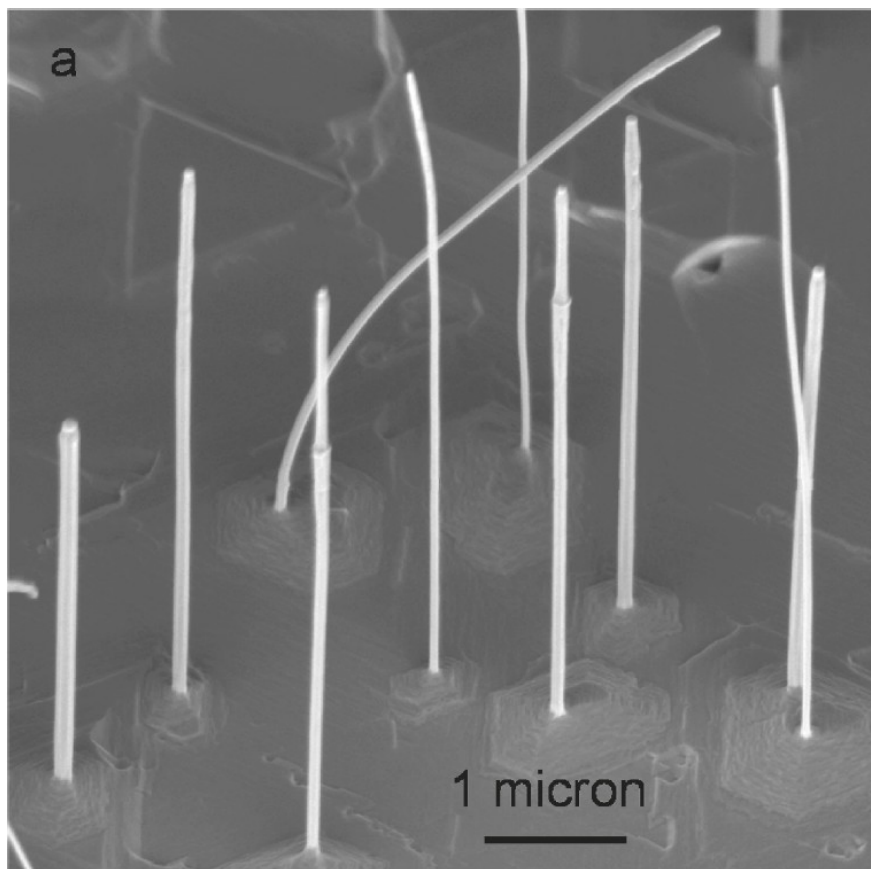
**Руководитель, профессор, д. ф.–м. н.**

**М.Ю. Гуткин**

**Научный консультант, профессор, д. ф.–м. н.**

**А.Л. Колесникова**

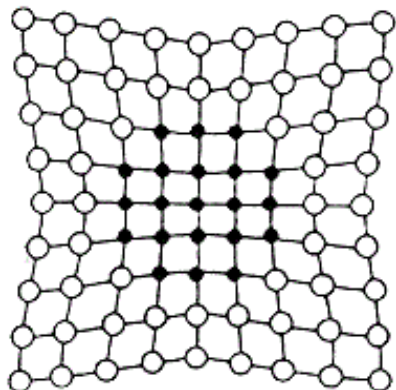
# Композитные нанопроволоки «ядро-оболочка»



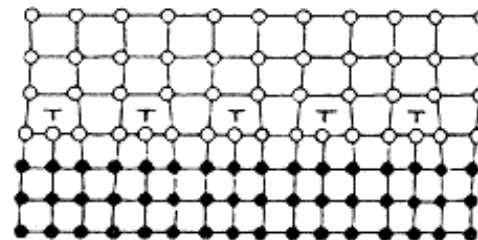
Композитными нанопроволоками называют неоднородные наночастицы, один из размеров которых существенно превосходит два других, приблизительно равных, состоящие из двух материалов, отделённых друг от друга межфазными границами.

Области применения: фотоника, наноэлектроника, медицина, катализ...

# Межфазные границы

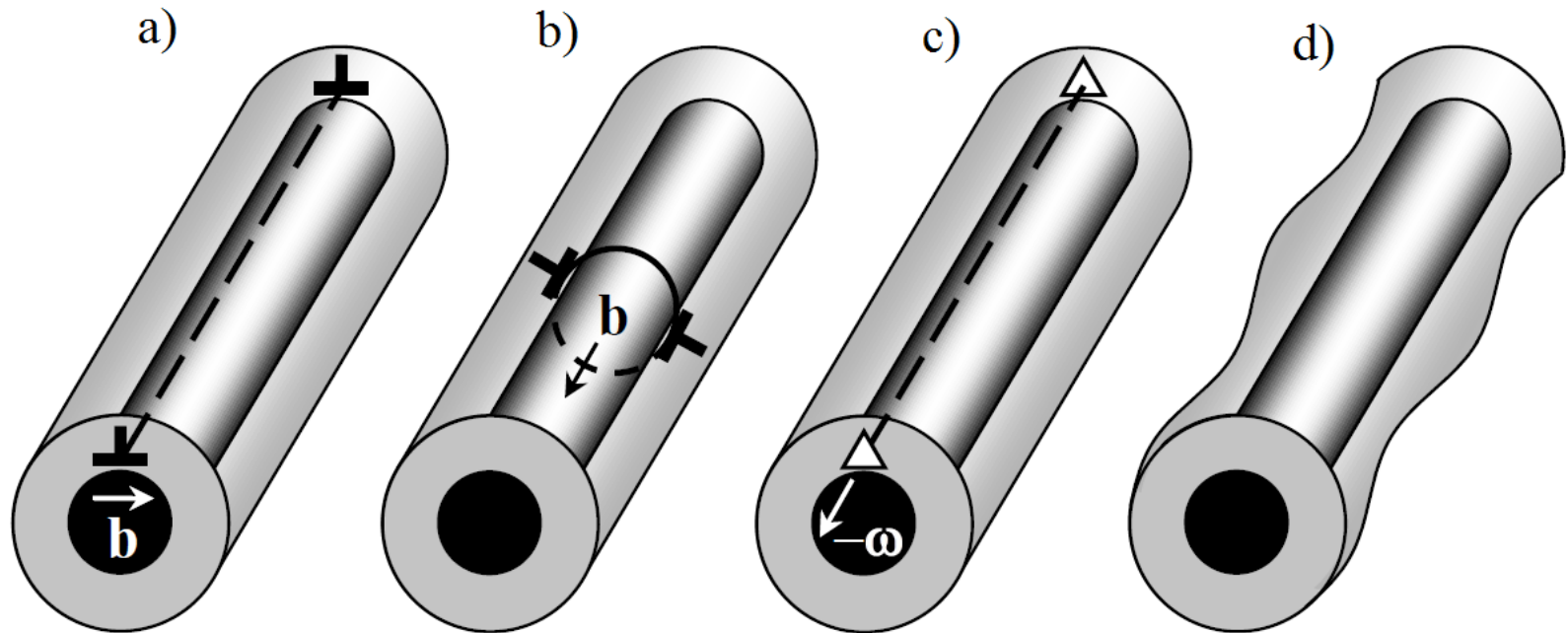


Когерентная межфазная граница:  
одна решётка переходит в другую  
без дефектов.



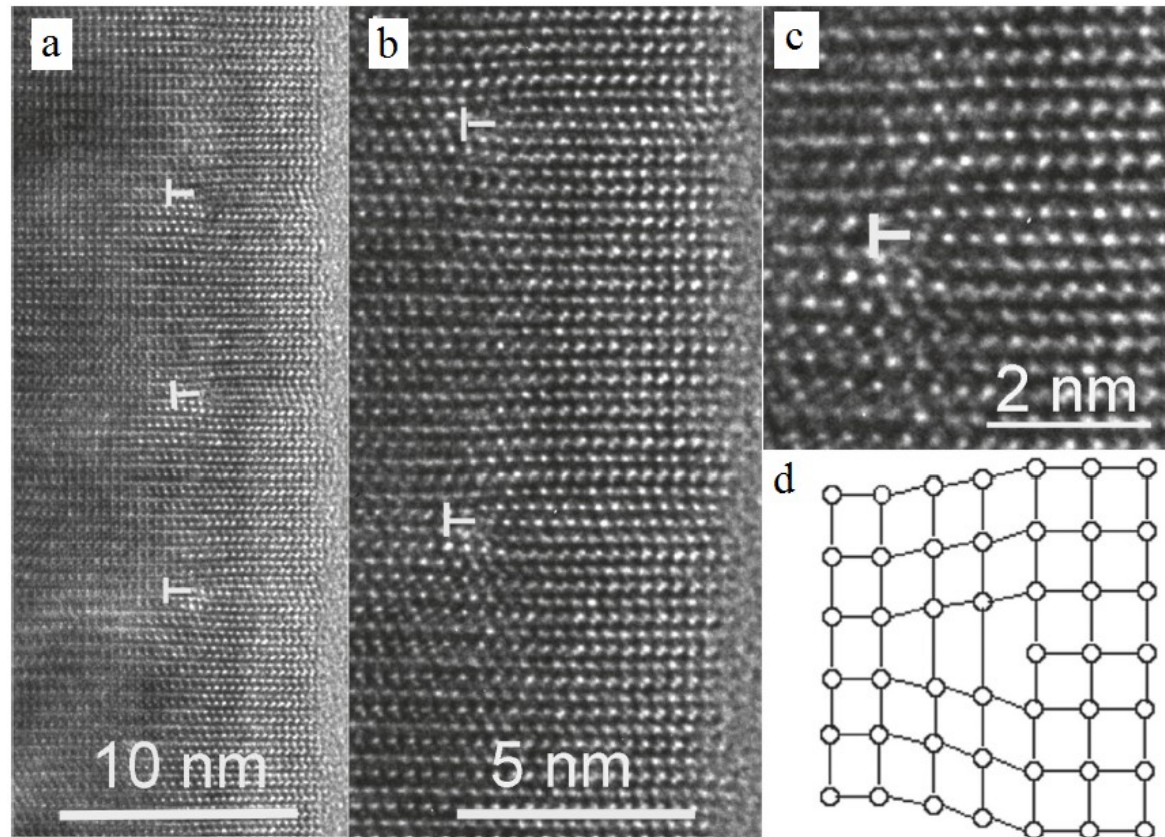
Полукогерентная межфазная  
граница: не каждая атомная  
плоскость первого материала  
состыкована с соответствующей  
плоскостью второго.  
Зарождаются краевые  
дислокации.

# Дефекты в композитных нанопроволоках «ядро-оболочка»



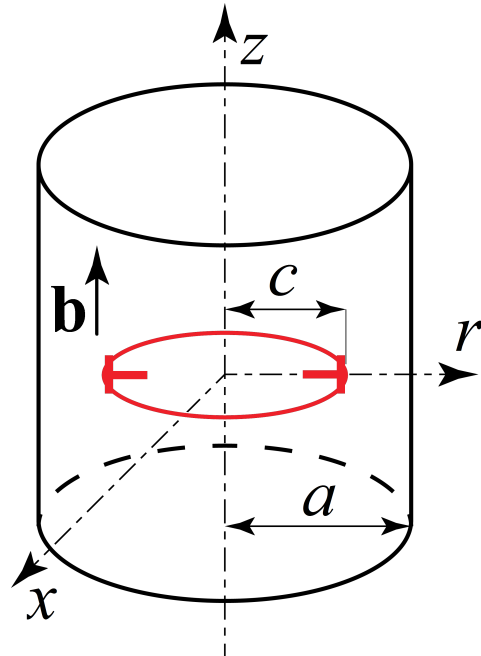
а) прямолинейная дислокация несоответствия; б) петля дислокаций несоответствия; в) дисклинация несоответствия; г) коробление оболочки;

# Петли дислокаций несоответствия (ПДН) в композитных нанопроволоках



а-с) ПЭМ-снимки продольного разреза нанопроволоки GaAs/InAs в области границы раздела материалов; d) схематическое изображение краевой дислокации.

# Призматическая дислокационная петля (ПДП) в бесконечно длинном цилиндре со свободной поверхностью: расчёт напряжений – 1



Граничные условия:  ${}^{PL}\sigma = {}^{\infty}\sigma + {}^i\sigma$ ,  ${}^{PL}\sigma_{rr}\Big|_{r=a} = 0$ ,  ${}^{PL}\sigma_{rz}\Big|_{r=a} = 0$

Компоненты напряжений, генерируемых одиночной ПДП в бесконечном пространстве

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

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

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

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

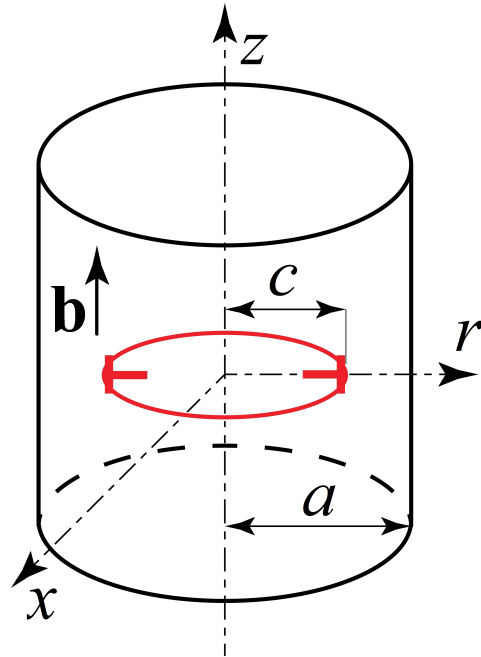
$${}^{\infty}\sigma_{r\varphi} = {}^{\infty}\sigma_{z\varphi} = 0,$$

$$J(k, \ell; p) = \int_0^{\infty} J_k(\kappa) J_{\ell}(\kappa \tilde{r}) e^{-\xi \kappa} \kappa^p d\kappa$$

$J_k$  – функция Бесселя  
первого рода

# Призматическая дислокационная петля (ПДП) в бесконечно длинном цилиндре со свободной поверхностью: расчёт напряжений – 2

Добавочное поле ищется в виде решения Лурье для симметрично нагруженного кругового цилиндра



$${}^i\sigma_{rr} = \frac{2G}{a} \int_0^\infty \left[ (3-2\nu)f'(\hat{r}) - (s^2\hat{r} + \frac{(1-2\nu)}{\hat{r}})f(\hat{r}) + \frac{g'(\hat{r})}{\hat{r}} - s^2g(\hat{r}) \right] \cos(s\hat{z}) ds,$$

$${}^i\sigma_{\varphi\varphi} = \frac{2G}{a} \int_0^\infty \left[ \frac{(3-2\nu)}{\hat{r}}f(\hat{r}) - (1-2\nu)f'(\hat{r}) - \frac{1}{\hat{r}}g'(\hat{r}) \right] \cos(s\hat{z}) ds,$$

$${}^i\sigma_{zz} = \frac{2G}{a} \int_0^\infty \left[ \left( \frac{2\nu}{\hat{r}} + s^2\hat{r} \right) f(\hat{r}) + 2\nu f'(\hat{r}) + s^2g(\hat{r}) \right] \cos(s\hat{z}) ds,$$

$$f(\hat{r}) = C_1 I_1(s\hat{r})$$

$${}^i\sigma_{rz} = \frac{2G}{a} \int_0^\infty \left[ \hat{r}f'(\hat{r}) - (1-2\nu)f(\hat{r}) + g'(\hat{r}) \right] s \sin(s\hat{z}) ds.$$

$$g(\hat{r}) = D_1 I_0(s\hat{r})$$

$I_0(s\hat{r}), I_1(s\hat{r})$  – модифицированные функции Бесселя первого рода

$C_1, D_1$  – неизвестные коэффициенты



# Призматическая дислокационная петля (ПДП) в бесконечно длинном цилиндре со свободной поверхностью: расчёт напряжений – 3

Граничные условия

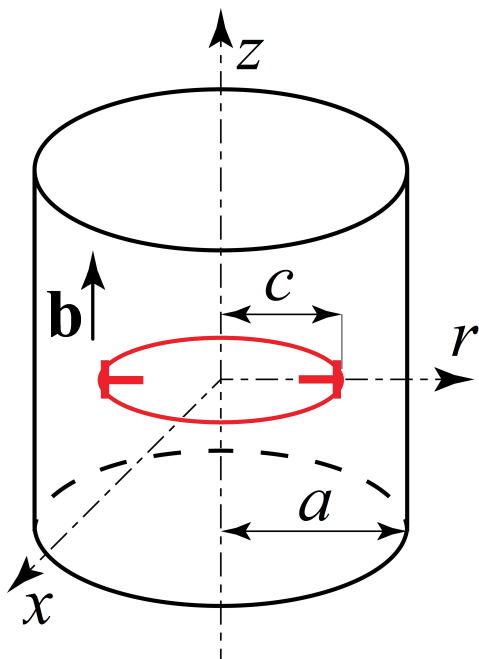
$$\begin{aligned} \sigma_{rr} \Big|_{r=a} &= -i \sigma_{rr} \Big|_{r=a} \\ \sigma_{rz} \Big|_{r=a} &= -i \sigma_{rz} \Big|_{r=a} \end{aligned}$$

Преобразование Фурье

$$F(\Phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi e^{-iz\beta} dz$$

Граничные условия дают систему:

$$\begin{cases} \frac{Gbt}{\sqrt{2\pi}(1-\nu)} \left[ (wK_1(s) + sK_0(s))I_1(ts) - st(sK_0(s) + K_1(s))I_0(ts) \right] = \\ \sqrt{2\pi} G \left[ I_1(s)(C_1(w - 2\nu + 2) - sD_1) + sI_0(s)(C_1(2\nu - 3) + sD_1) \right] \\ \frac{iGbt}{\sqrt{2\pi}(1-\nu)} \left[ stK_1(s)I_0(ts) - sK_0(s)I_1(ts) \right] = \\ \sqrt{2\pi} G i s \left[ sC_1I_0(s) + I_1(s)(2C_1(\nu - 1) + sD_1) \right], \end{cases} \quad \text{где } w = s^2 - 2\nu + 2.$$



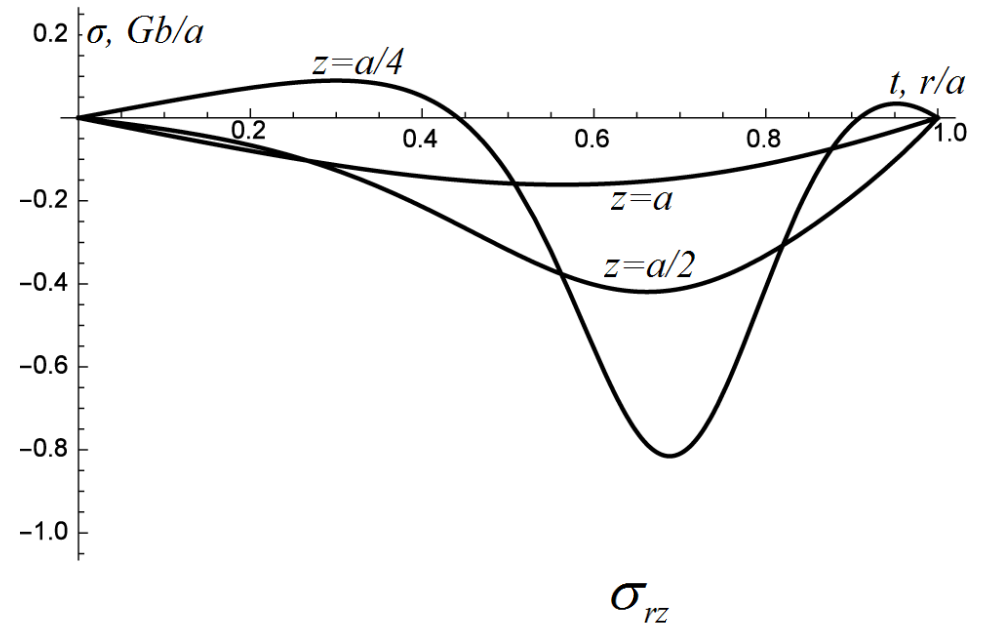
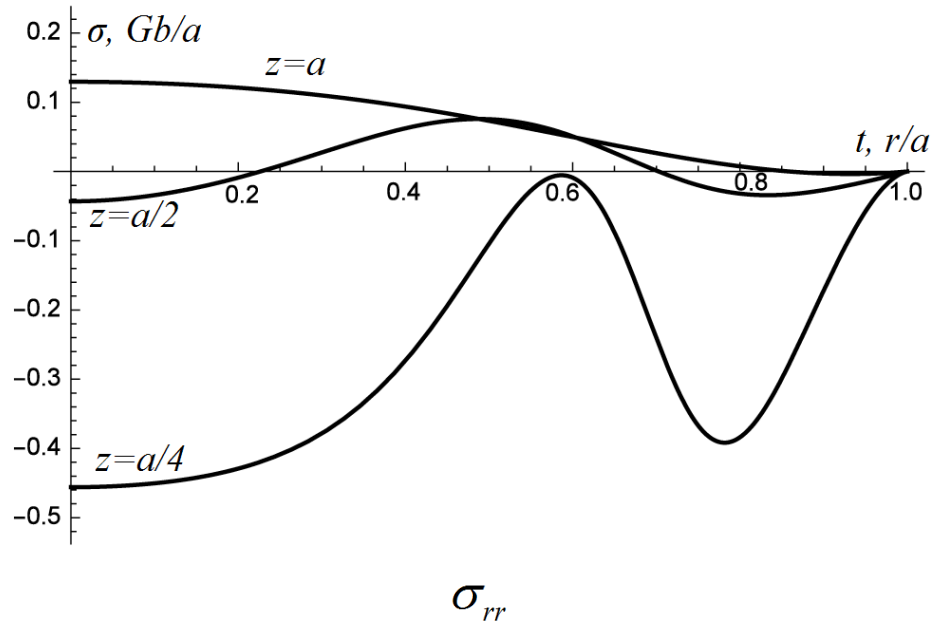


Призматическая дислокационная петля (ПДП) в бесконечно длинном цилиндре со свободной поверхностью: расчёт напряжений – 4

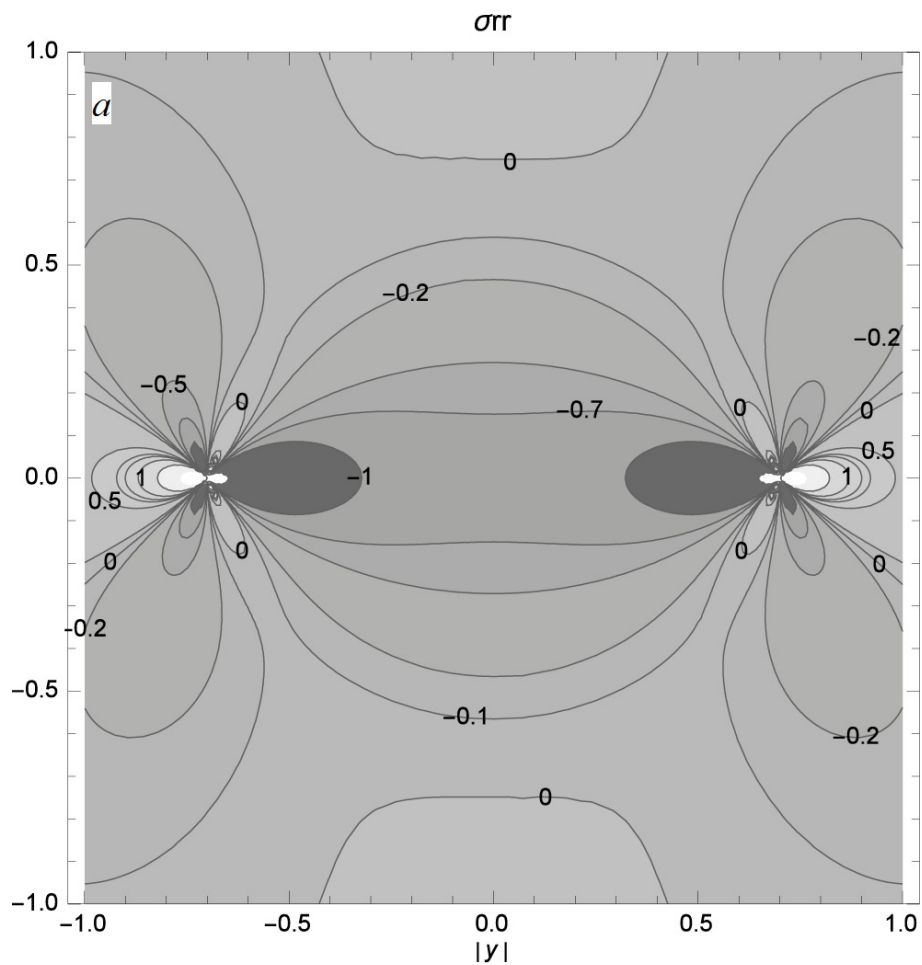
$$C_1 = \frac{bt \left( I_1(ts) \left( w I_1(s) K_1(s) + s^2 I_0(s) K_0(s) \right) - st I_0(ts) \right)}{2\pi(\nu - 1) \left( s^2 I_0^2(s) - w I_1^2(s) \right)},$$

$$D_1 = \frac{bt \left( st I_0(ts) \left( w I_1(s) K_1(s) + s^2 I_0(s) K_0(s) + 2\nu - 2 \right) + I_1(ts) \left( -2s^2(\nu - 1) I_0(s) K_0(s) - w (2(\nu - 1) I_1(s) K_1(s) + 1) \right) \right)}{2\pi(\nu - 1) \left( s^2 I_0^2(s) - w I_1^2(s) \right)}$$

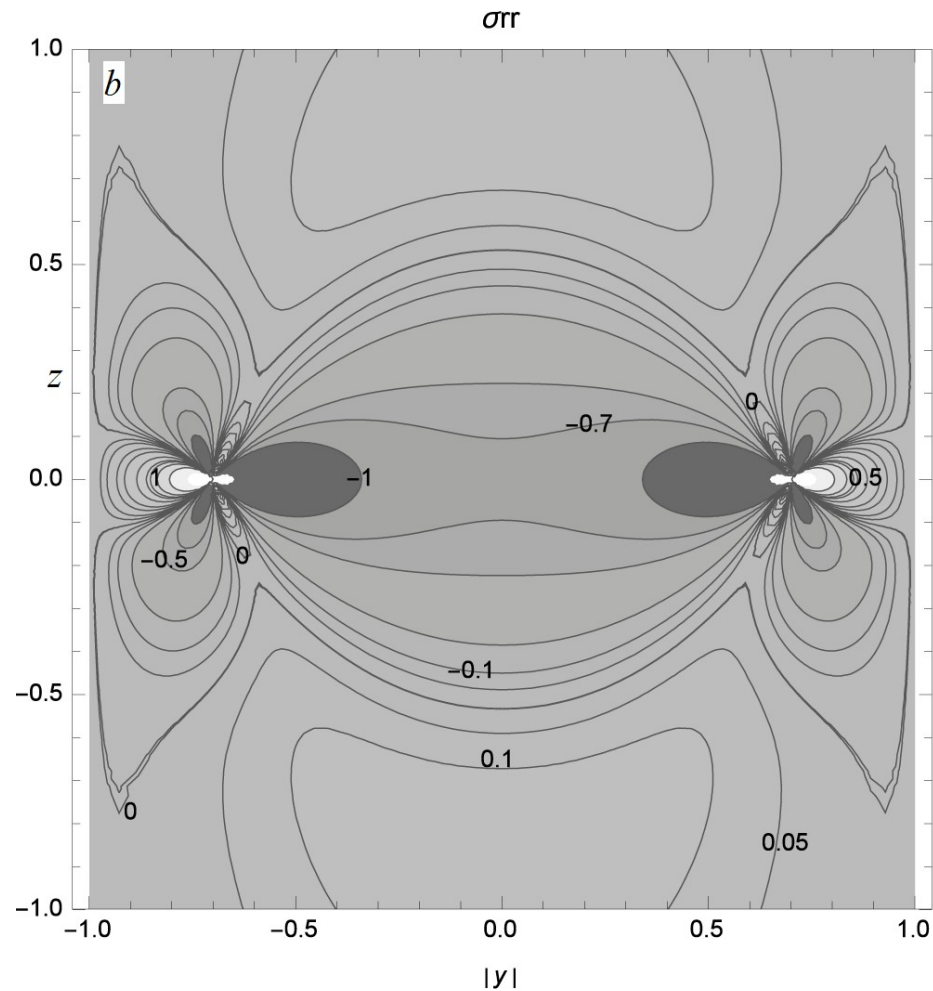
# Призматическая дислокационная петля (ПДП) в бесконечно длинном цилиндре со свободной поверхностью: расчёт напряжений – 5



# Карты полей напряжений ПДП в бесконечном пространстве и в цилиндре – 1

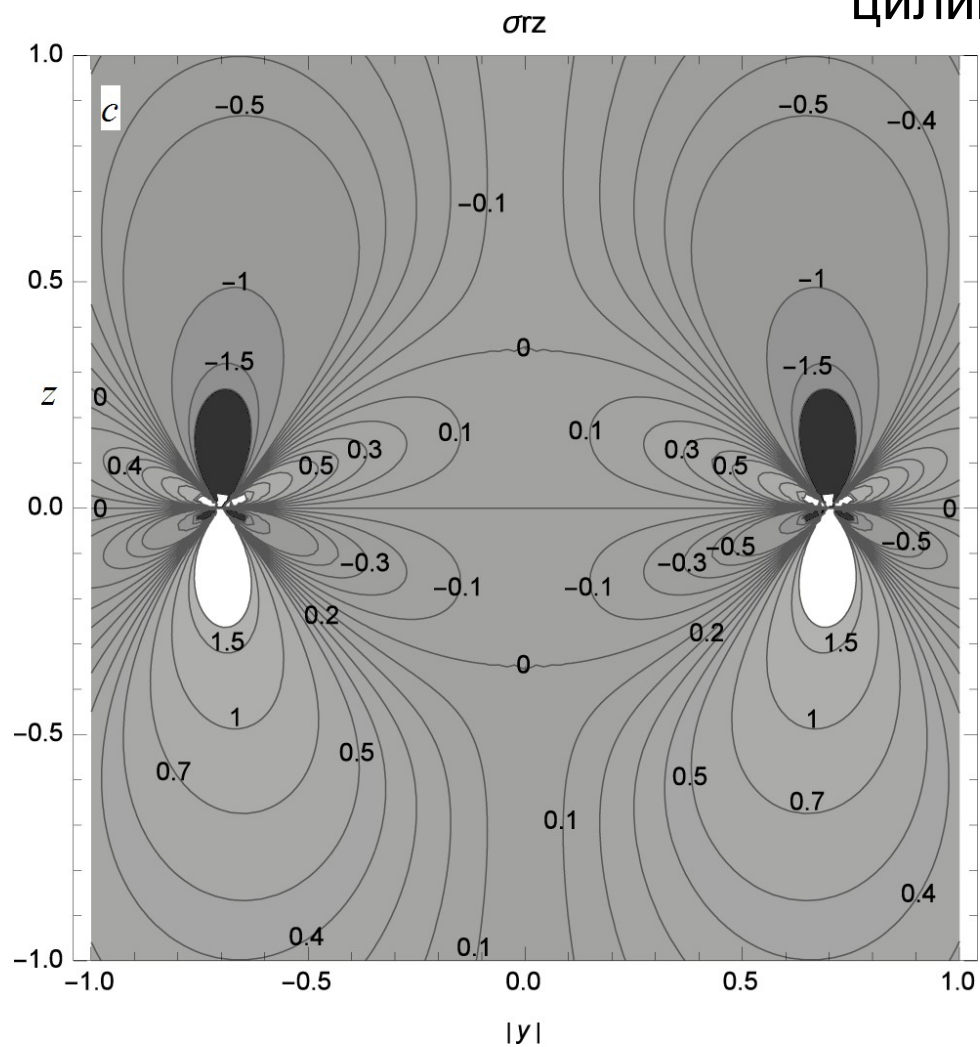


В бесконечном пространстве

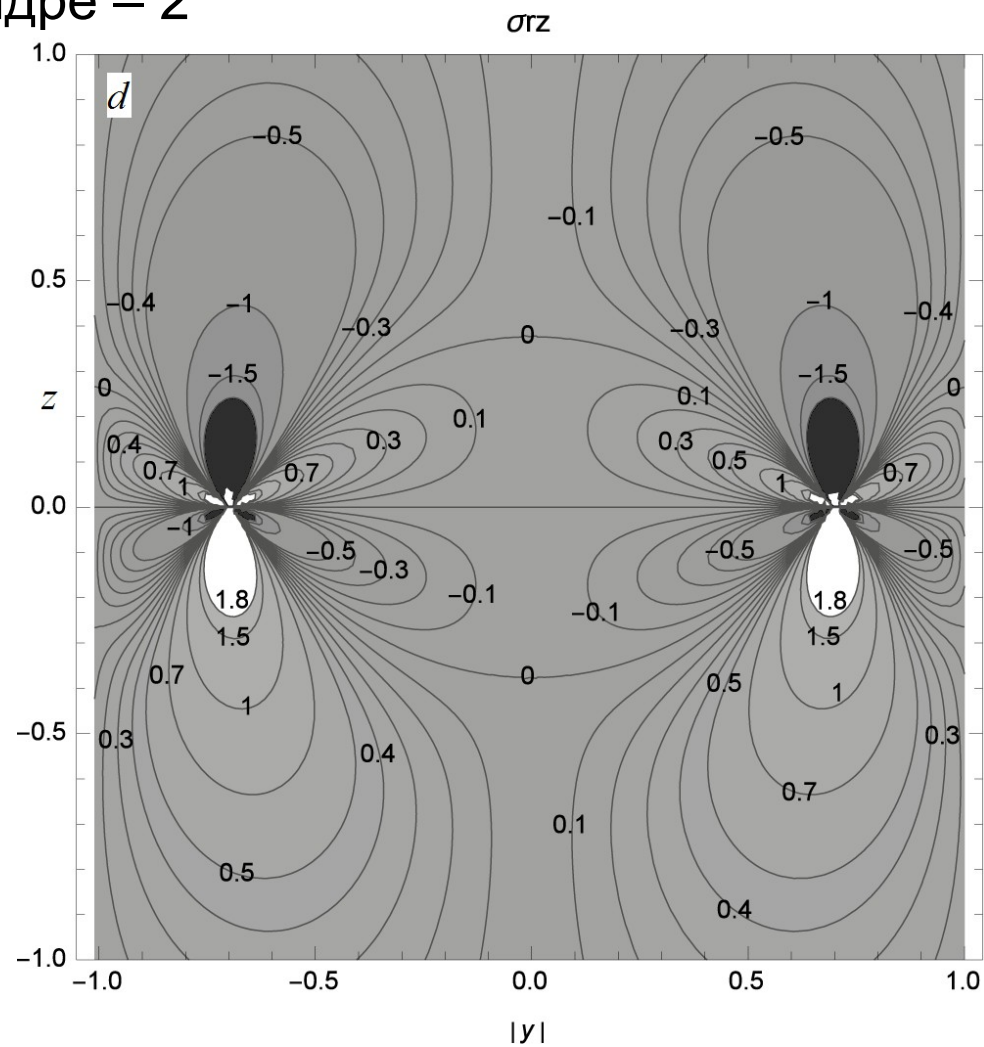


В цилиндре

# Карты полей напряжений ПДП в бесконечном пространстве и в цилиндре – 2

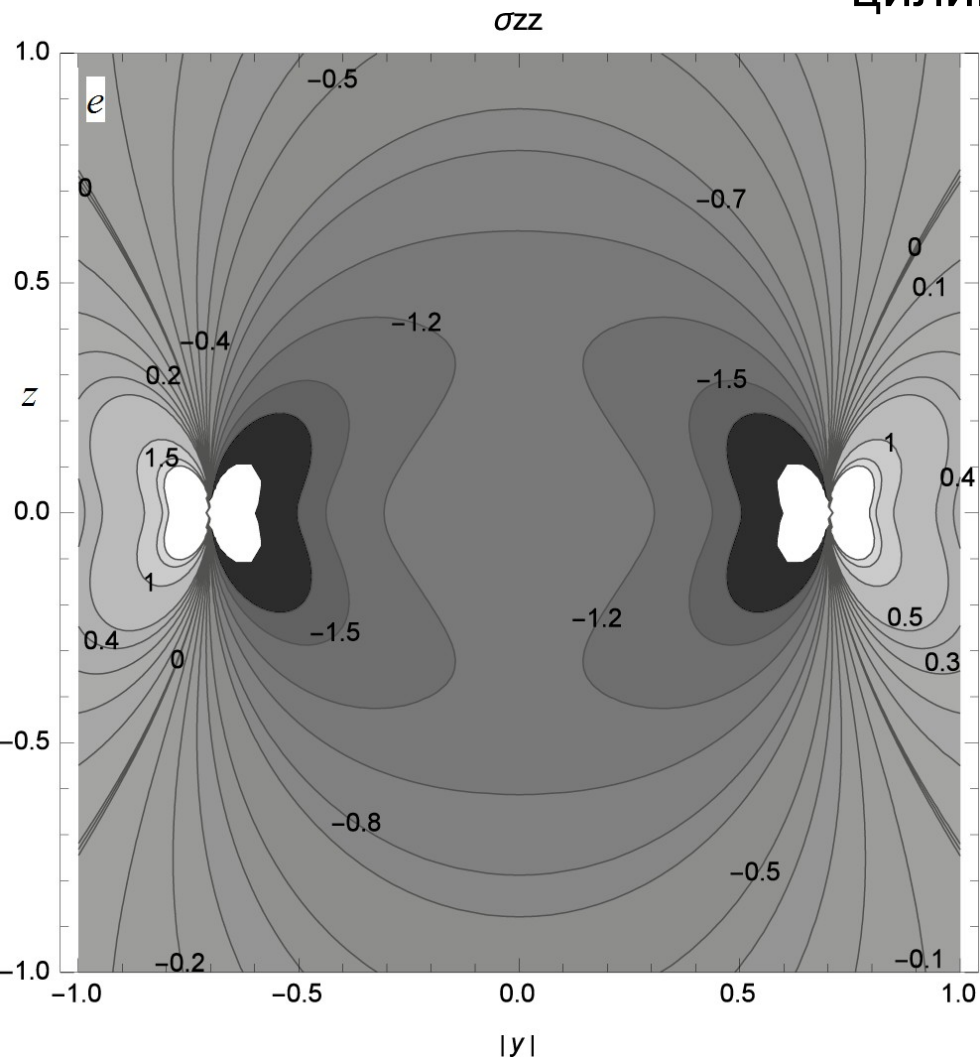


В бесконечном пространстве

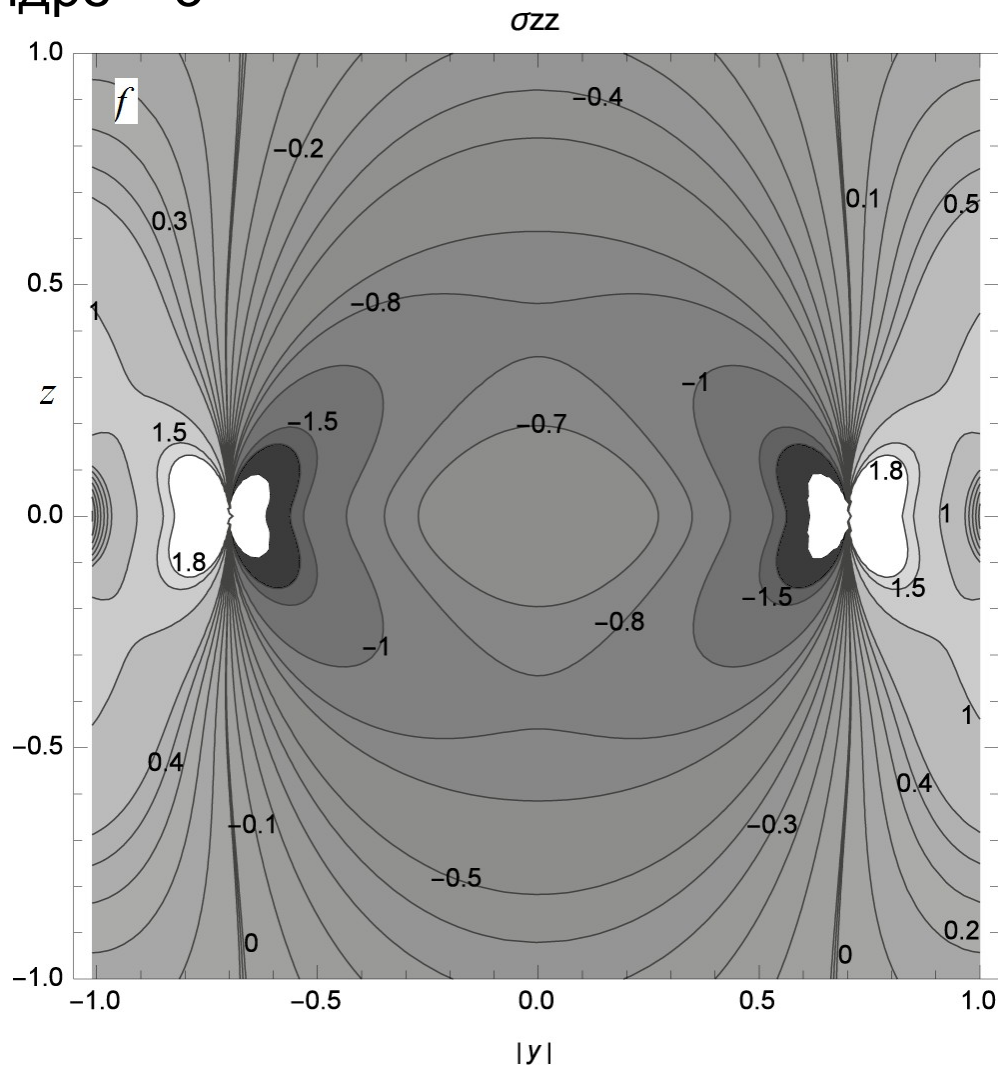


В цилиндре

# Карты полей напряжений ПДП в бесконечном пространстве и в цилиндре – 3



В бесконечном пространстве

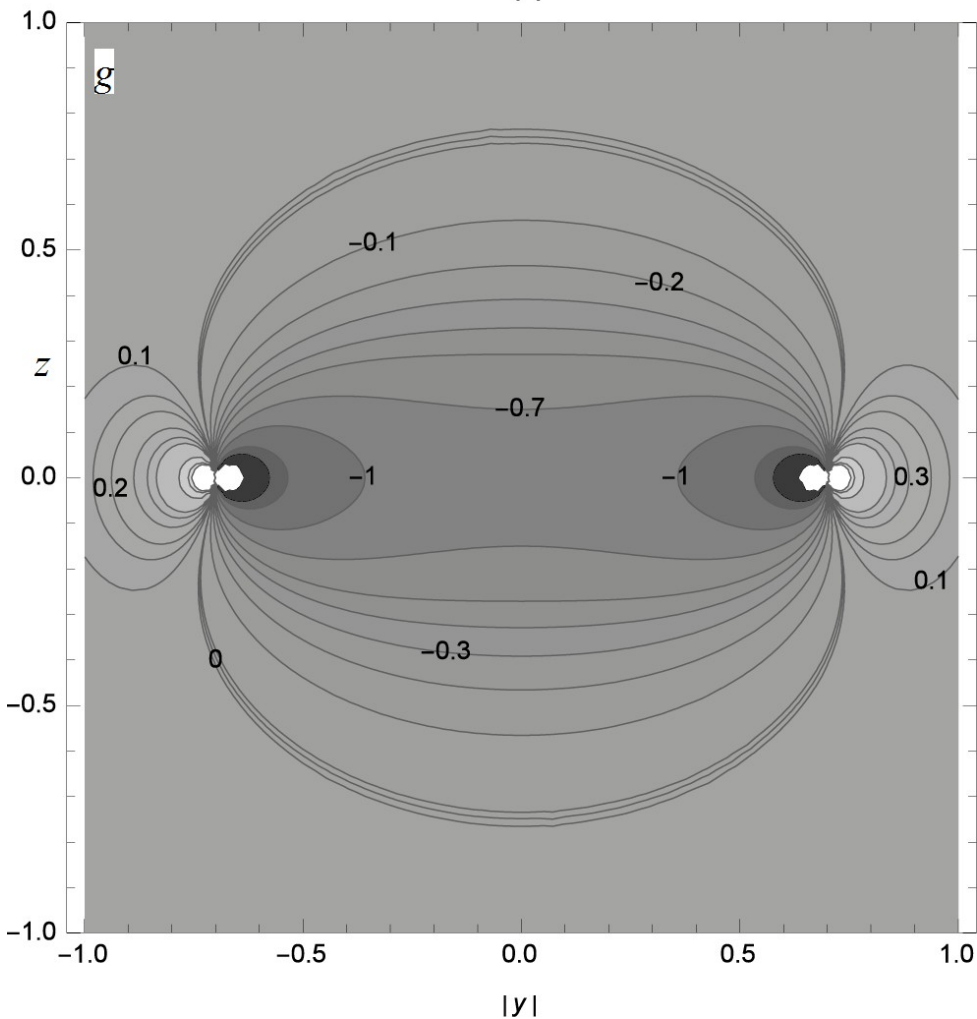


В цилиндре

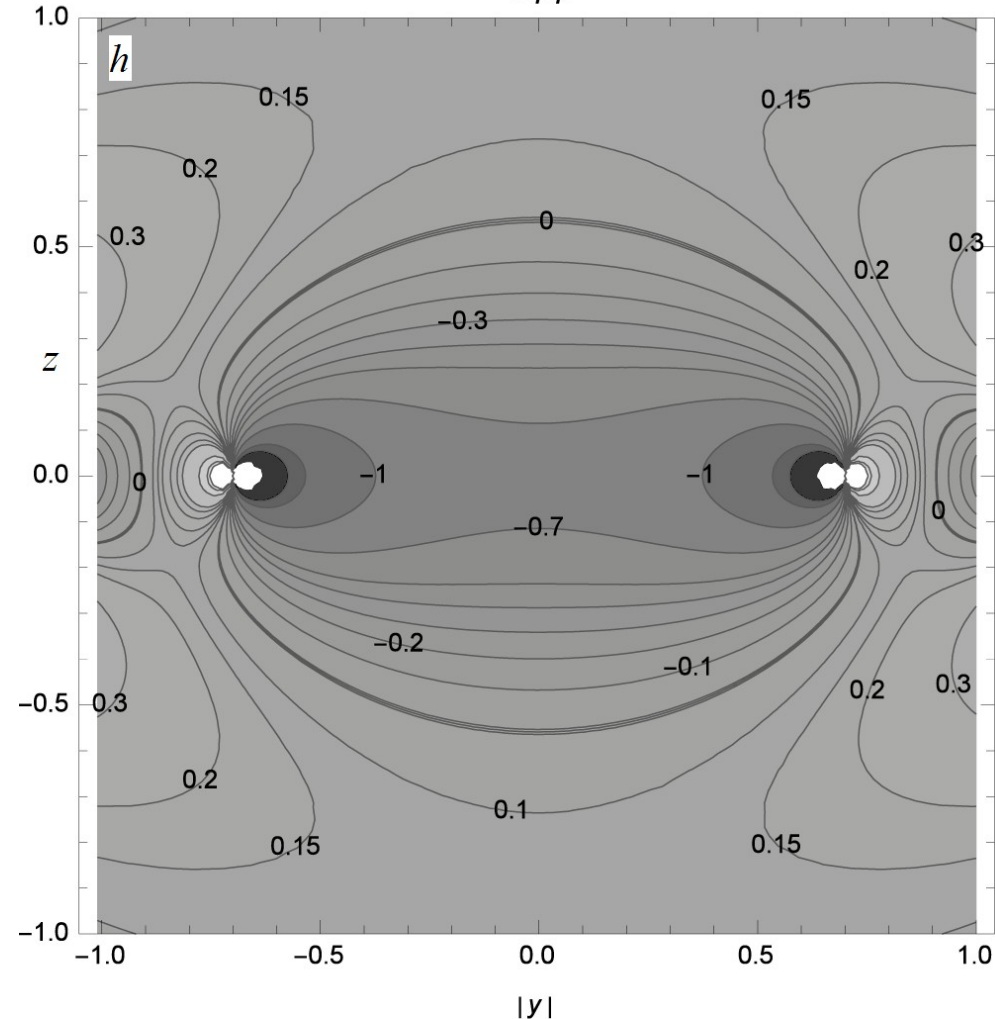
# Карты полей напряжений ПДП в бесконечном пространстве и в цилиндре – 4

$\sigma_{\phi\phi}$

$\sigma_{\phi\phi}$



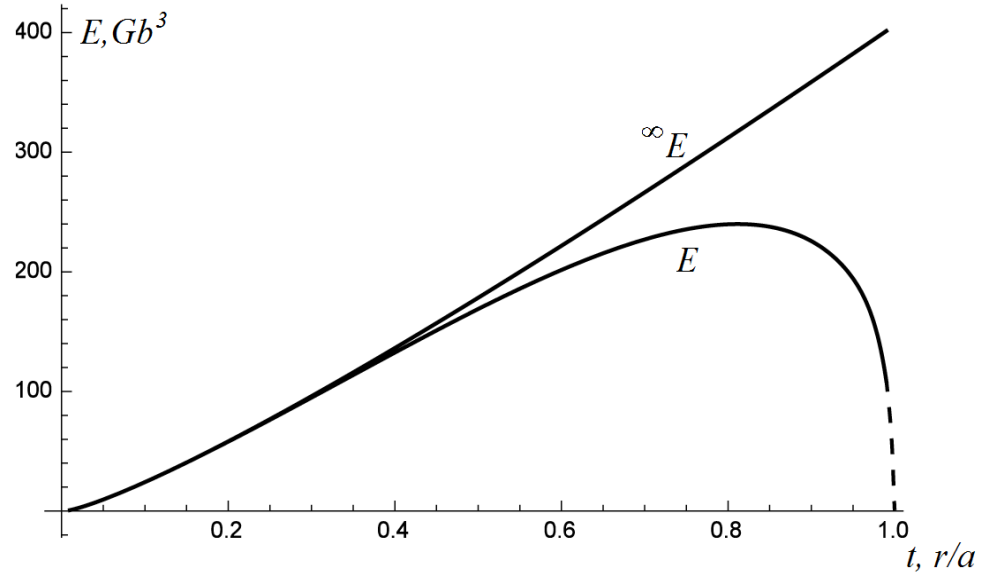
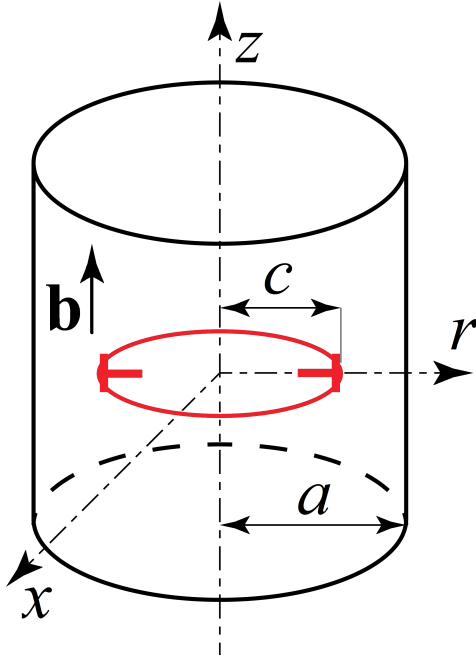
В бесконечном пространстве



В цилиндре



# Энергия ПДП в цилиндре



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

$$^i E = \frac{-G b^2 a t^2}{1-\nu} \int_0^\infty \frac{1}{s^2 I_0^2(s) - w I_1^2(s)} \left\{ s^2 t^2 I_0^2(ts) + w I_1^2(ts) - \right. \\ \left. - 2st I_1(ts) I_0(ts) \left( w I_1(s) K_1(s) + s^2 I_0(s) K_0(s) \right) \right\} ds$$



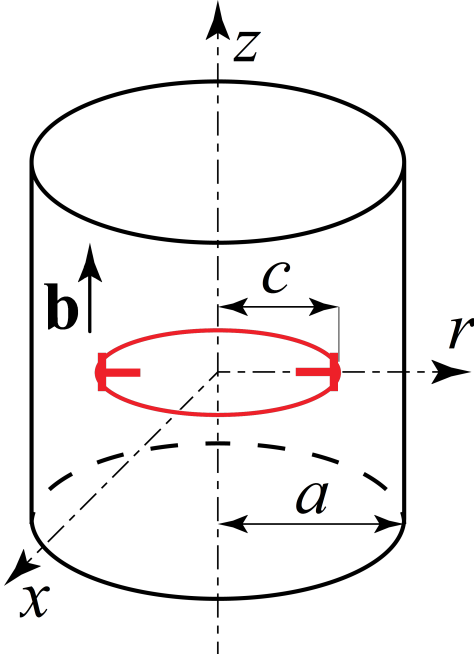
# Критические условия формирования ПДП в композитной НП – 1

Критерий зарождения ПДП

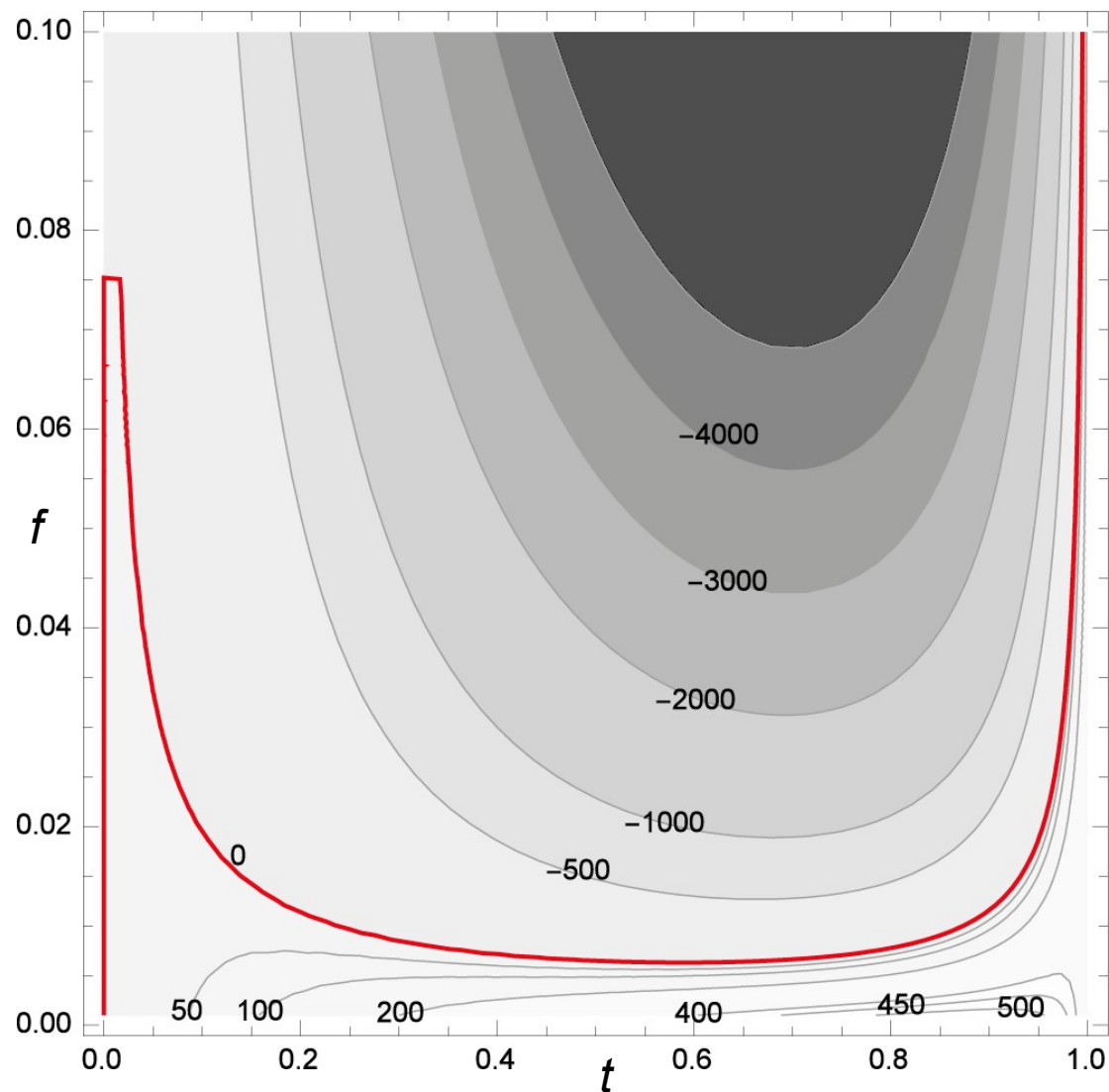
$$E_{incl} \geq E_{incl} + E_{PL} + E_{PL-incl}.$$

Энергия взаимодействия ПДП с полем несоответствия:

$$\begin{aligned} E_{PL-incl} &= - \int_V^{incl} \varepsilon_{zz}^*{}^{PL} \sigma_{zz} dV = - \int_V^{PL} \varepsilon_{zz}^*{}^{incl} \sigma_{zz} dV = \\ &= -(-b) \int_0^c \int_0^{2\pi} \sigma_{zz} \Big|_{z=z_0}^{incl} r dr d\varphi = - \frac{2Gb^2a(1+\nu)\varepsilon^* \pi}{1-\nu} t^2(1-t^2). \end{aligned}$$



# Критические условия формирования ПДП в композитной НП – 2

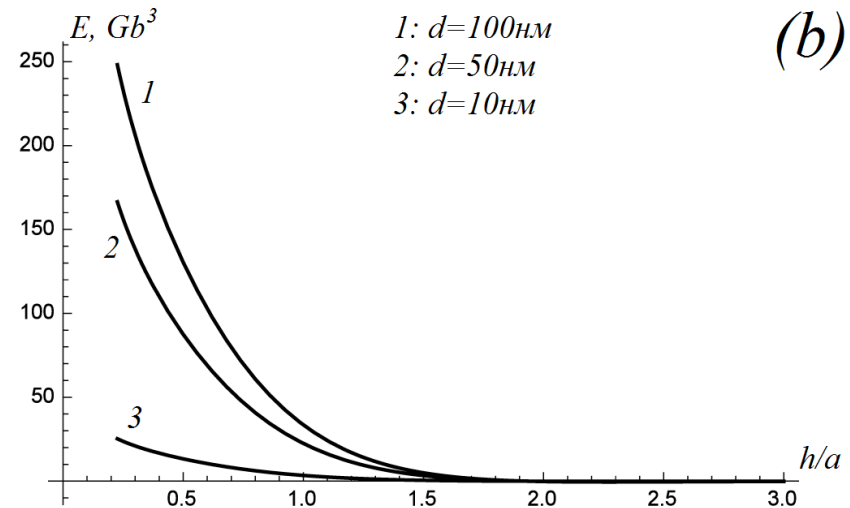
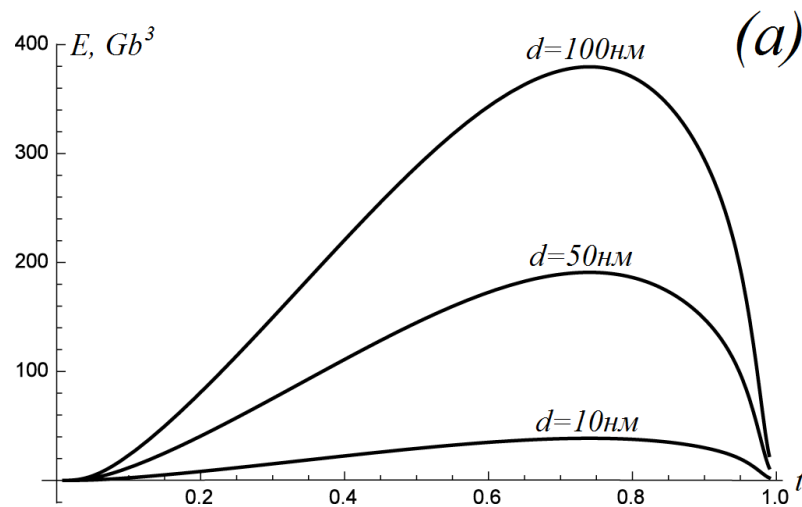


# Взаимодействие двух ПДП в композитной нанопроволоке

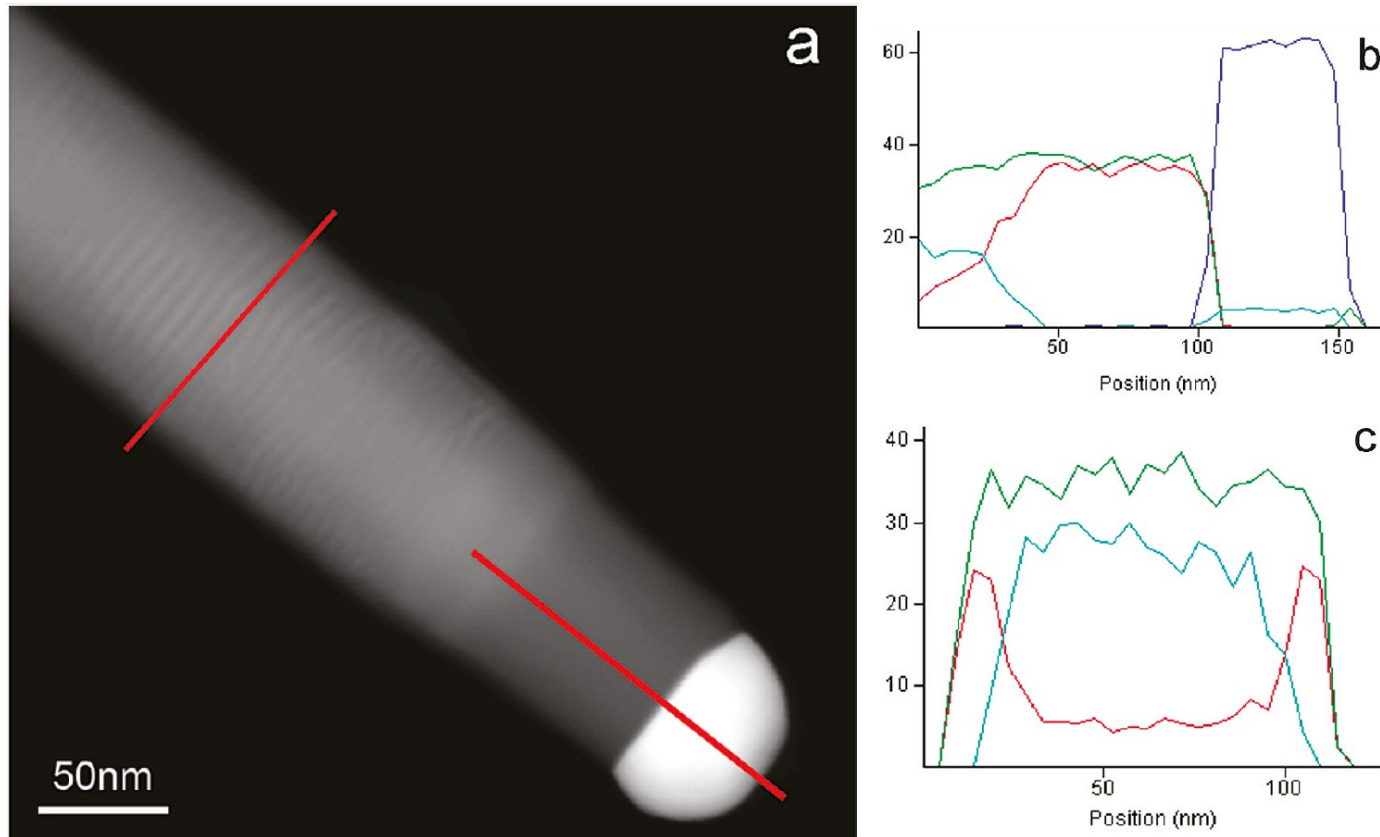
$$E_{PL-PL} = {}^{\infty}E_{PL-PL} + {}^iE_{PL-PL} \text{ — полная энергия}$$

$${}^{\infty}E_{PL-PL} = \frac{\pi G b^2 a}{1-\nu} t \left( J(1,1;0) \Big|_{z=h} + \frac{h}{c} J(1,1;1) \Big|_{z=h} \right) \text{ — энергия в бесконечной упругой среде}$$

$${}^iE_{PL-PL} = \frac{-2Gb^2at^2}{1-\nu} \int_0^{\infty} \frac{s^2 t^2 I_1^2(ts) + w I_1^2(ts) - 2st I_1(ts) I_0(ts) (w I_1(s) K_1(s) + s^2 I_0(s) K_0(s))}{s^2 I_0^2(s) - w I_1^2(s)} \cos \frac{hs}{a} ds \text{ — добавочная компонента}$$



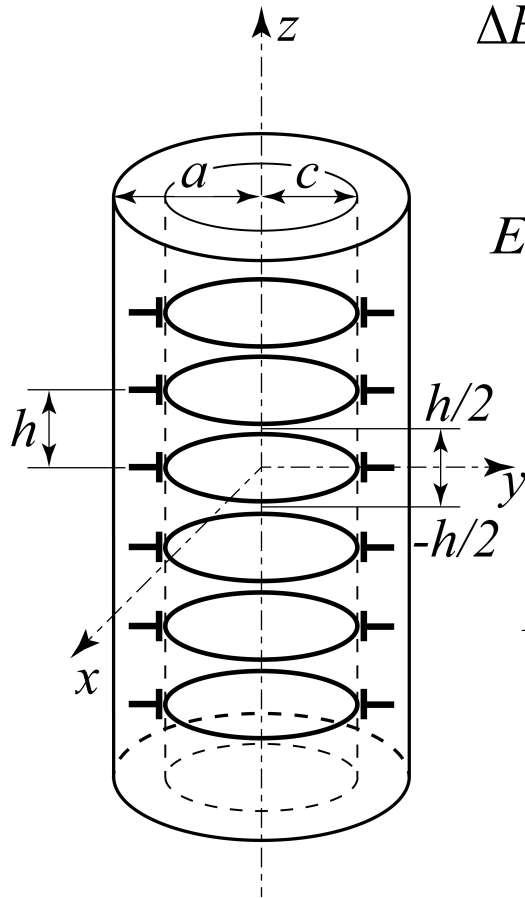
# Равновесное расстояние между ПДП – 1



НП GaAs/InAs.  $a = 50$  нм,  $f = 0.0667, 0.0717$ ,  $t = 0.7$ ,  $h = 7 - 8.5$  нм.

Popovitz-Biro R et.al./ Cryst. Growth Des. 2011, 11, 3858–3865.

# Равновесное расстояние между ПДП – 2



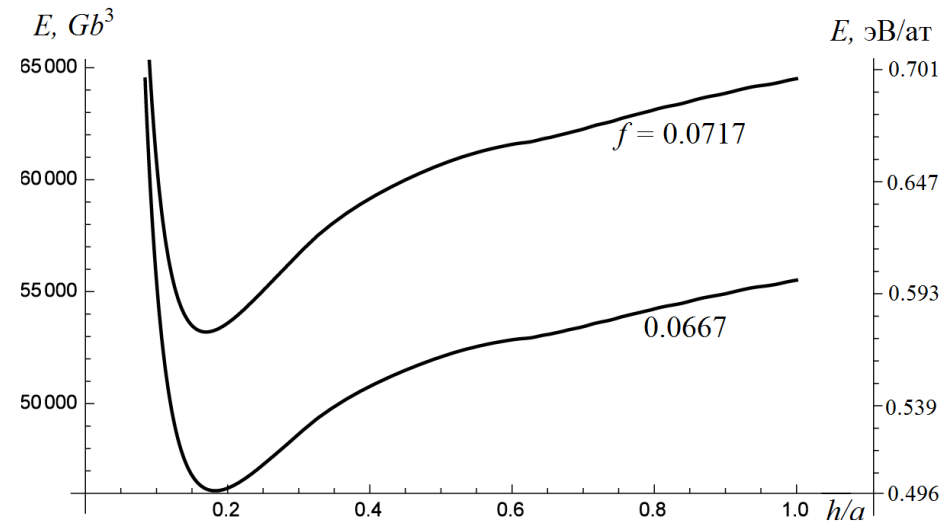
$$\Delta E_{\varepsilon} = Gf^2\pi c^2 p (1-t^2) \frac{1+\nu}{2(1-\nu)} \quad \text{– погонная энергия ядра нанопроволоки}$$

$$E_{row} = \frac{\Delta E_{\varepsilon} + (E_{PL} + E_{core}) + E_{PL-row} + E_{PL-\varepsilon}}{h}$$

– энергия, приходящаяся на 1 период нанопроволоки

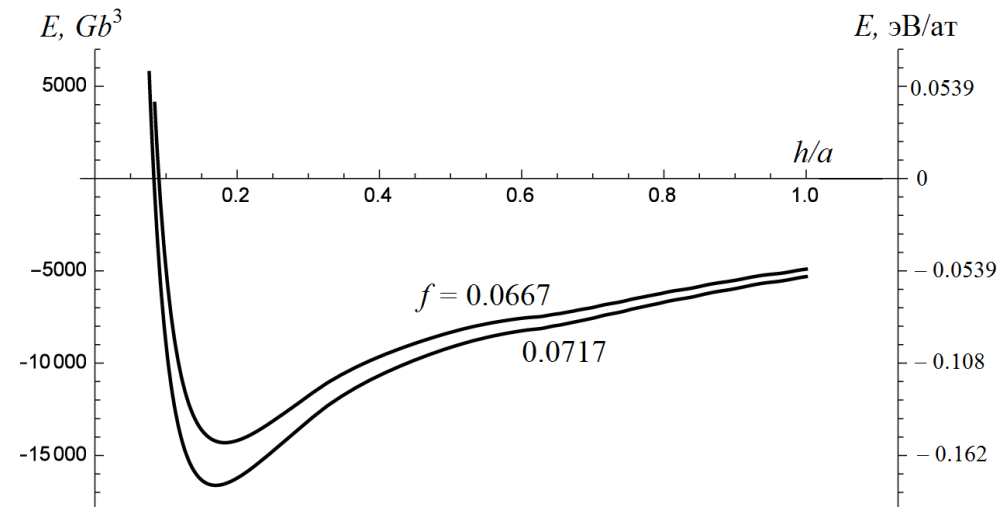
$E_{PL-row}$  – суммарная энергия парного взаимодействия ПДП из центра периода с 40 ближайшими соседями

# Равновесное расстояние между ПДП – 3



Энергия на период ряда ДН

$$h(f = 6.67\%) = 0.181a = 9.05 \text{ нм},$$



Выигрыш в энергии на период ряда ДН

$$h(f = 7.17\%) = 0.167a = 8.35 \text{ нм}.$$

# Результаты

- 1) Методом Лурье получены новые компактные аналитические решения для полей напряжений круговой ПДП в бесконечном упругом цилиндре со свободной поверхностью.
- 2) Найдено новое компактное аналитическое решение для упругой энергии круговой ПДП в таком цилиндре, качественно соответствующее другим известным решениям.
- 3) Впервые получено компактное аналитическое выражение для энергии парного упругого взаимодействия круговых ПДП в таком цилиндре.
- 4) С помощью полученных новых решений найдены и исследованы критические условия зарождения первой дислокации несоответствия в виде круговой ПДП на границе раздела в композитной нанопроволоке типа «ядро-оболочка». Показано, что они соответствуют результатам, полученным ранее другими авторами.
- 5) Впервые теоретически исследовано равновесное состояние бесконечного периодического ряда круговых ПДП, обеспечивающих релаксацию напряжений несоответствия в композитной нанопроволоке типа «ядро-оболочка». Показано, что расчетные значения равновесного периода такого ряда (8.35–9.05 нм) хорошо соответствуют имеющимся экспериментальным данным (7.0–8.5 нм) для композитных нанопроволок, состоящих из ядра InAs и оболочки GaAs.



# Результаты

- 1) Методом Лурье получены новые компактные аналитические решения для полей напряжений круговой ПДП в бесконечном упругом цилиндре со свободной поверхностью.
- 2) Найдено новое компактное аналитическое решение для упругой энергии круговой ПДП в таком цилиндре, качественно соответствующее другим известным решениям.
- 3) Впервые получено компактное аналитическое выражение для энергии парного упругого взаимодействия круговых ПДП в таком цилиндре.
- 4) С помощью полученных новых решений найдены и исследованы критические условия зарождения первой дислокации несоответствия в виде круговой ПДП на границе раздела в композитной нанопроволоке типа «ядро-оболочка».
- 5) Впервые теоретически исследовано равновесное состояние бесконечного периодического ряда круговых ПДП, обеспечивающих релаксацию напряжений несоответствия в композитной нанопроволоке типа «ядро-оболочка». Показано, что расчетные значения равновесного периода такого ряда (8.35–9.05 нм) хорошо соответствуют имеющимся экспериментальным данным (7.0–8.5 нм) для композитных нанопроволок, состоящих из ядра InAs и оболочки GaAs.

# Результаты

На основе полученных результатов можно сделать вывод о том, что использованный метод расчёта критических условий образования и равновесного периода распределения круговых ПДП в композитных нанопроволоках типа «ядро-оболочка» является достаточно эффективным средством предсказания условий появления и плотности дислокаций несоответствия в подобных композитных наноструктурах.

Спасибо за внимание!