

## ДИСЛОКАЦИИ НЕСООТВЕТСТВИЯ В КОМПОЗИТНЫХ НАНОПРОВОЛОКАХ

**И.А. Овидько\*, А.Г. Шейнерман**

Институт проблем машиноведения Российской Академии наук,

Большой пр. В.О., 61, Санкт-Петербург 199178, Россия

\* Email: ovidko@def.ipme.ru

**Аннотация.** Дан обзор теоретических моделей и экспериментальных данных, касающихся образования дефектов несоответствия в двухслойных цилиндрических нанопроволоках. Рассчитаны критические условия формирования в нанопроволоках дислокаций, дисклинаций и дисклинационных петель. Определены геометрические и структурные параметры двухслойных цилиндрических нанопроволок, при которых нанопроволоки не содержат дислокаций.

*Ключевые слова:* нанопроволоки, дислокации, дефекты

### 1. Введение

Композитные цилиндрические нанопроволоки обладают уникальными электронными и оптоэлектронными свойствами и могут служить основой для новых элементов электронных приборов, в том числе полевых транзисторов, светоизлучающих диодов, сенсоров и фотогальванических элементов [1–8]. В частности, двухслойные кристаллические нанопроволоки являются превосходными материалами для создания полевых транзисторов, служебные свойства которых значительно превосходят служебные свойства таких транзисторов на основе однородных нанопроволок [8].

В общем случае можно выделить несколько видов двухслойных нанопроволок вида “ядро–оболочка” (рис. 1а), где ядро и оболочка имеют следующие структурные особенности [9]: кристалл–кристалл (Si–Ge и Ge–Si [1,10], GaP–GaN и GaN–GaP [11], In–MgO [12]), кристалл–нанокристаллический слой (Se–CdSe [13]), кристалл–аморфный слой (Si–SiO [14,15], Si–SiO<sub>x</sub> [16], SiC–SiO [17], SiC–SiO<sub>2</sub> [18,19], SiC–SiC [20], (GaN, GaP, InP, Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, SiO<sub>2</sub>/Si, SiC, ZnO)–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [21]), аморфное ядро–кристалл (SiO–Si [15]). Другие неоднородные нанопроволоки представляют собой двухосные (SiC–SiO(am) [22], Si–SiO(am) [15], Si–ZnS и Si–ZnSe [23]) и трехосные (ZnS–Si–ZnS [23]) наноструктуры (рис. 1б, в), многослойные сверхрешетки в форме нанопроволок (ZnSe–CdSe [24]; рис. 1д), а также сверхрешетки, состоящих из различных монокристаллических сегментов, соединяющихся торцами (Si–SiGe [25] и Si–NiSi [26]; рис. 1е).

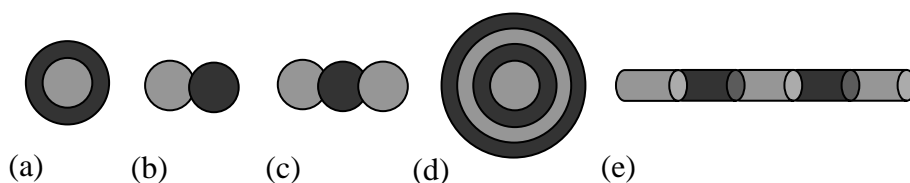


Рис. 1. Геометрия различных видов составных нанопроволок. (a) Одноосная двухслойная нанопроволока (поперечное сечение). (b) Двухосная нанопроволока (поперечное сечение). (c) Трехосная нанопроволока (поперечное сечение). (d) Многоосная составная нанопроволока с чередующимися слоями (поперечное сечение). (e) Нанопроволока, состоящая из сегментов.

Особенность неоднородных кристаллических нанопроволок вида “ядро–оболочка” заключается в том, что ядро и оболочка таких нанопроволок делят между собой деформации, возникающие из-за различия параметров их кристаллических решеток. Возможность варьировать деформации в двухслойных нанопроволоках посредством изменения отношения радиусов ядра и оболочки потенциально позволяет управлять такими электронными свойствами, как ширина запрещенной зоны и подвижность носителей заряда [1,27,28]. Вместе с тем при достаточно больших значениях деформации в двухслойных нанопроволоках могут образовываться дефекты, которые обычно оказывают негативное воздействие на служебные свойства электронных приборов. Так, на межфазных границах нанопроволок GaP–GaN [11], GaN–GaP [11] и Ge–Si [1] наблюдались петли дислокаций несоответствия. В работах [29,30] с помощью просвечивающей электронной микроскопии прямого разрешения наблюдались границы зерен, проходящие через оболочку  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> вокруг наночастицы  $\alpha$ -Fe и обрывающиеся на границе раздела. Из теории дисклинаций известно, что места обрыва границы содержат дисклинации, вектор Франка которых определяется типом и углом разориентировки границы [31]. Кроме того, дисклинации могут служить средством релаксации напряжений в пентагональных наночастицах, имеющих форму нанопроволок (см. [32] и ссылки в этой работе). Теоретические оценки [32] показывают, что релаксация упругой энергии в пентагональной нанопроволоке может происходить путем образования дисклинации на оси нанопроволоки, сопровождающегося формированием оболочки вокруг этой нанопроволоки. В этом случае пентагональную нанопроволоку также можно рассматривать как двухслойную нанопроволоку, содержащую дисклинацию. В настоящем обзоре мы подробно рассмотрим теоретические модели дислокаций, дисклинаций и дислокационных петель в двухслойных кристаллических нанопроволоках вида “ядро–оболочка” и рассчитаем геометрические и структурные параметры нанопроволок, при которых образование таких дефектов энергетически выгодно.

## 2. Напряжения несоответствия в двухслойной нанопроволоке

Для определения критических параметров зарождения дефектов несоответствия в двухслойной цилиндрической нанопроволоке найдем поле напряжений несоответствия в такой нанопроволоке (рис. 2). Такое поле напряжений было независимо получено в работах [33–35]. В настоящем параграфе при выводе выражений для поля напряжений несоответствия мы будем следовать работе [33] (с исправлениями, сделанными в [36]).

Предположим, что нанопроволока имеет внешний радиус  $R$  и состоит из

сплошного внутреннего слоя (ядра) радиуса  $R_0$  и наружного слоя (оболочки) толщины  $H$  ( $H = R - R_0$ ) (рис. 2). В рамках модели ядро и оболочка нанопроволоки являются упругоизотропными твердыми телами с равными модулями сдвига  $G$  и коэффициентами Пуассона  $\nu$ , но различными параметрами кристаллической решетки. Дилатационное несоответствие параметров  $a_c$  и  $a_s$  кристаллической решетки ядра и оболочки характеризуется параметром  $f = 2(a_c - a_s) / (a_c + a_s)$  и создает в нанопроволоке упругие поля деформаций и напряжений.

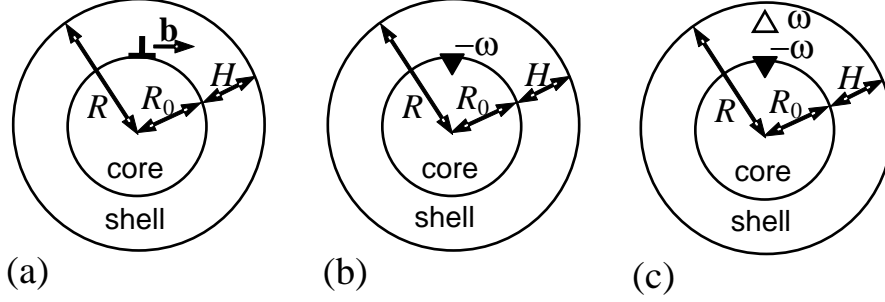


Рис. 2. Дислокации несоответствия (а), клиновая дисклинация несоответствия (б) и диполь клиновых дисклинаций (с) на межфазной границе двухслойной цилиндрической нанопроволоки.

Для расчета напряжений, действующих в двухслойной нанопроволоке с несоответствием (называемых далее напряжениями несоответствия), будем рассматривать нанопроволоку как бесконечный двухслойный цилиндр, в котором заданы собственные (неупругие) деформации. Пусть  $\varepsilon_{ij}^{*(k)}$  – тензор собственных деформаций в  $k$ -ой области, где  $k=1$  для ядра и  $k=2$  для оболочки (рис. 2). Предположим, что  $\varepsilon_{ij}^{*(2)} = 0$ . Тогда  $\varepsilon_{ij}^{*(1)} = f \delta_{ij}$ , где  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера ( $\delta_{ij} = 1$  при  $i = j$ , и  $\delta_{ij} = 0$  при  $i \neq j$ ). Суммарная деформация  $\varepsilon_{ij}^{(k)}$  в цилиндре состоит из собственной деформации  $\varepsilon_{ij}^{*(k)}$  и упругой деформации  $\varepsilon_{ij}^{(k)}$ :

$$\varepsilon_{ij}^{(k)} = \varepsilon_{ij}^{*(k)} + \varepsilon_{ij}^{(k)}. \quad (1)$$

В цилиндрической системе координат  $(r, \theta, z)$ , ось  $z$  которой совпадает с осью цилиндра, компоненты тензора полной деформации выражаются через перемещения следующим образом [37]:

$$\varepsilon_{rr}^{(k)} = \frac{\partial u_r^{(k)}}{\partial r}, \quad \varepsilon_{\theta\theta}^{(k)} = \frac{u_r^{(k)}}{r}, \quad \varepsilon_{zz}^{(k)} = \frac{\partial u_z^{(k)}}{\partial z}. \quad (2)$$

Из симметрии задачи следует, что деформации  $\varepsilon_{zz}^{(k)}$  не зависят от координат  $r$  и  $z$ :  $\varepsilon_{zz}^{(k)} = C_k$  ( $k=1,2$ ), где  $C_1$  и  $C_2$  – некоторые постоянные. Из условия равенства перемещений  $u_z$  на границе  $r = R_0$  ( $u_z^{(1)}(r = R_0) = u_z^{(2)}(r = R_0)$ ) получаем:  $C_1 = C_2$ . Выражение для тензора напряжений несоответствия  $\sigma_{ij}^f$  (равных  $\sigma_{ij}^{(1)}$  при  $r < R_0$  и  $\sigma_{ij}^{(2)}$  при  $r > R_0$ ) получается теперь из закона Гука [37]:

$$\sigma_{ij}^{(k)} = 2G \left( \varepsilon_{ij}^{(k)} + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon^{(k)} \right), \quad (3)$$

где  $\varepsilon^{(k)} = \varepsilon_{ii}^{(k)}$ . В цилиндрической системе координат компоненты тензора напряжений имеют следующий вид:

$$\sigma_{ij}^{(1)} = 2G \left[ \varepsilon_{ij}^{(1)} + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon^{(1)} - \frac{1+\nu}{1-2\nu} f \delta_{ij} \right], \quad (4a)$$

$$\sigma_{ij}^{(2)} = 2G \left[ \varepsilon_{ij}^{(2)} + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon^{(2)} \right], \quad (4b)$$

где  $\varepsilon^{(k)} = \varepsilon_{ii}^{(k)}$ . Из условия равновесия [37]

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} = 0, \quad (5)$$

формул (2) и (4) и условия  $\partial \varepsilon_{zz}^{(k)} / \partial r = 0$  мы получаем следующее дифференциальное уравнение для перемещений:

$$\frac{d^2 u_r^{(k)}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_r^{(k)}}{dr} - \frac{u_r^{(k)}}{r^2} = 0. \quad (6)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$u_r^{(k)} = A_k r + \frac{B_k}{r}, \quad (7)$$

где  $A_k$  и  $B_k$  – некоторые постоянные. Постоянные  $A_k$ ,  $B_k$  и  $C_1$  определяются из граничных условий

$$\begin{aligned} u_r^{(1)}(r \rightarrow 0) & \text{ограничено,} \\ u_r^{(1)}(r = R_0) &= u_r^{(2)}(r = R_0), \\ \sigma_{rr}^{(1)}(r = R_0) &= \sigma_{rr}^{(2)}(r = R_0), \\ \sigma_{rr}^{(2)}(r = R) &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

и условия равновесия  $\int_S \sigma_{zz} dS' = 0$ , где  $S$  – поперечное сечение нанопроволоки, а  $S'$  – параметр интегрирования. Решение системы (8) дает

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{f}{2(1-\nu)} (1 + \nu + (1-3\nu)a^2), \quad B_1 = 0, \\ A_2 &= \frac{1-3\nu}{2(1-\nu)} fa^2, \quad B_2 = \frac{1+\nu}{2(1-\nu)} fR_0^2, \quad C_1 = fa^2, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $a = R_0 / R$ . Напряжения несоответствия  $\sigma_{ij}^f$  получаются теперь из (2), (4), (7) и (9):

$$\sigma_{rr}^f = \sigma^* \left[ (a^2 - 1) \Theta(R_0 - r) + (a^2 - R_0^2 / r^2) \Theta(r - R_0) \right], \quad (10a)$$

$$\sigma_{\theta\theta}^f = \sigma^* \left[ (a^2 - 1) \Theta(R_0 - r) + (a^2 + R_0^2 / r^2) \Theta(r - R_0) \right], \quad (10b)$$

$$\sigma_{zz}^f = 2\sigma^* \left[ (a^2 - 1) \Theta(R_0 - r) + a^2 \Theta(r - R_0) \right], \quad (10c)$$

где  $\sigma^* = Gf(1+\nu)/(1-\nu)$ , а  $\Theta(x)$  – функция Хэвисайда ( $\Theta(x) = 1$  при  $x > 0$  и  $\Theta(x) = 0$  при  $x < 0$ ).

Отметим, что недавно поле напряжений, действующее в двухслойной нанопроволоке с дилатационным несоответствием, было также рассчитано [35] для случая различных модулей сдвига ядра и оболочки. В частном случае, когда модули сдвига обоих слоев нанопроволоки равны, выражения для напряжений несоответствия, полученные в [35], совпадают с формулами (10). Эти формулы будут использованы в следующих параграфах для определения условий зарождения дефектов несоответствия в двухслойных нанопроволоках.

В заключение настоящего параграфа отметим также, что кроме напряжений несоответствия в двухслойных нанопроволоках действует сила поверхностного натяжения, создаваемого свободной поверхностью нанопроволоки. Сила поверхностного натяжения эквивалентна действию на поверхности нанопроволоки распределенной сжимающей радиальной нагрузки  $q_r = \gamma / R$ , где  $\gamma$  – удельная поверхностная энергия оболочки нанопроволоки. Эта нагрузка создает в нанопроволоке дополнительные однородные напряжения [37]  $\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -\gamma / R$ ,  $\sigma_{zz} = -2\nu\gamma / R$ , которые в общем случае также следует учитывать при расчете условий образования дефектов несоответствия. Вместе с тем при обычно встречающихся значениях несоответствия ( $|f| > 0.01$ ) напряжения, создаваемые силой поверхностного натяжения, малы по сравнению с напряжениями несоответствия. Например, для нанопроволоки  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  с  $x = 0.25$  (что соответствует  $f \approx -0.01$ ) с учетом значений упругих модулей Ge [38] ( $G = 40$  ГПа и  $\nu = 0.26$ ) получаем следующее характерное значение  $\sigma^*$  напряжений несоответствия:  $\sigma^* \approx 0.68$  ГПа. В то же время для характерных значений поверхностной энергии Ge ( $\gamma = 1.5$  Дж/м<sup>2</sup>) и радиуса нанопроволоки ( $R = 30$  нм) имеем:  $\gamma / R = 0.05$  ГПа, что гораздо меньше значения  $\sigma^*$ . В связи с этим в дальнейшем мы будем пренебрегать влиянием поверхностного натяжения на условия формирования дефектов несоответствия в двухслойных нанопроволоках.

### 3. Дислокация несоответствия в двухслойной нанопроволоке

Напряжения несоответствия в двухслойной нанопроволоке могут быть аккомодированы путем зарождения в ней различных дефектов: дислокаций, дисклиний, дислокационных стенок и дислокационных петель. В этом параграфе мы проанализируем условия зарождения одиночной краевой дислокации несоответствия (ДН) на межфазной границе ядра и оболочки нанопроволоки [33,34] (рис. 2а).

Для однослойных и многослойных пленок на подложках с плоскими поверхностями подобная задача решалась ранее путем вычисления упругой энергии системы с ансамблем ДН и ее минимизации по плотности дислокационного ансамбля [39–48]. В работе [33] была использована другая расчетная схема, предложенная в [49] для анализа зарождения ДН в тонкой двухслойной пластине. Данная схема основана на сравнении упругой энергии системы в когерентном состоянии (без ДН) и полукogerентном состоянии, в котором межфазная граница содержит единственную (первую) ДН, частично аккомодирующую напряжения несоответствия. В когерентном состоянии (до зарождения первой ДН) упругая энергия  $W^f$  двухслойной нанопроволоки связана только с напряжениями несоответствия. Энергия  $W^f$  может быть рассчитана с помощью выражений для поля напряжений несоответствия в двухслойной нанопроволоке. Однако в вычислении энергии  $W^f$  нет необходимости, так как для определения условий зарождения ДН необходимо знать только изменение энергии системы, вызванное этим дефектом.

При наличии ДН энергия двухслойной цилиндрической нанопроволоки изменяется на величину

$$\Delta W^d = W^d + W^{int} + W^c, \quad (11)$$

где  $W^d$  – собственная упругая энергия ДН (упругая энергия нанопроволоки с дислокацией в отсутствие поля напряжений несоответствия),  $W^{int}$  – энергия взаимодействия ДН с полем напряжений несоответствия, а  $W^c$  – энергия ядра ДН.

Поскольку внедрение ДН должно уменьшать полную энергию системы, необходимое условие зарождения ДН имеет вид

$$\Delta W^d < 0. \quad (12)$$

Для определения области параметров (радиуса ядра  $R_0$ , толщины оболочки  $H$  и несоответствия  $f$ ), при которых выполняется неравенство (12), вычислим величины  $W^d$ ,  $W^{int}$  и  $W^c$ , входящие в формулу (11). Предположим, что линия ДН параллельна оси цилиндра и имеет декартовы координаты  $x = x_0$  и  $y = R_0$  (рис. 3).

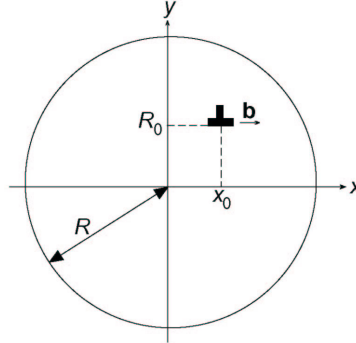


Рис 3. Дислокация в цилиндре.

Вектор Бюргерса ДН направлен вдоль оси  $x$ . Функция напряжений такой дислокации была получена А.Е. Романовым в 1992 г. из соответствующей функции напряжений [31] для дисклинации мощности  $\omega$  с линией, параллельной оси цилиндра, но не совпадающей с ней. Для этого дислокация была представлена в качестве диполя клиновых дисклинаций мощности  $\omega$  и  $-\omega$ , находящихся на расстоянии  $b/\omega$  друг от друга [31]. Полученная таким образом функция напряжений для дислокации имеет следующий вид:

$$\chi = \frac{Db}{2} \left( (y - R_0) \ln \frac{C^2 r^2}{P^2 R^2} + \frac{R_0 (r^2 - R^2)(x_0^2 + R_0^2 - R^2)}{R^2 C^2} + \frac{y R^2 P^2}{r^2 C^2} \right), \quad (13)$$

где  $P^2 = (x_0 - x)^2 + (R_0 - y)^2$ ,  $C^2 = \left(x_0 - x \frac{R^2}{r^2}\right)^2 + \left(R_0 - y \frac{R^2}{r^2}\right)^2$ ,  $r^2 = x^2 + y^2$ ,

$$D = G / [2\pi(1-\nu)].$$

Теперь собственная упругая энергия дислокации  $W^d$  (на единицу ее длины) определяется выражением [50]

$$W^d = -\frac{b}{2} \int_{R_0+r_c}^R \sigma_{xx}^d(x=x_0, y) dy. \quad (14)$$

В формуле (14)  $r_c$  обозначает радиус ядра дислокации, а напряжение  $\sigma_{xx}^d$  рассчитывается по формуле [37]

$$\sigma_{xx}^d = \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2}. \quad (15)$$

С учетом (15) и условия  $x_0 = 0$  формула (14) представима в виде

$$W^d = \frac{b}{2} \left( \frac{\partial \chi}{\partial y}(x=0, x_0=0, y=R_0+r_c) - \frac{\partial \chi}{\partial y}(x=0, x_0=0, y=R) \right). \quad (16)$$

Подстановка (13) в (16) дает:

$$W^d = \frac{Db^2}{2} \left( \frac{h(h-2)(h-r_0)(h-2-r_0)[2h(h-2-r_0)-1+2r_0]}{2[h^2-(2+r_0)h+r_0]^2} + \ln \frac{h(2-h+r_0)-r_0}{r_0} \right), \quad (17)$$

где  $h = H/R$  определяет отношение толщины оболочки к внешнему радиусу

нанопроволоки, а  $r_0 = r_c / R$ .

Упругая энергия  $W^{int}$  взаимодействия ДН с полем напряжений несоответствия (на единицу длины дислокации) рассчитывается по формуле [50]

$$W^{int} = -b \int_{R_0}^R \sigma_{xx}^f(x = x_0 = 0, y) dy, \quad (18)$$

где  $\sigma_{xx}^f(x = x_0 = 0, y) = \sigma_{\theta\theta}^f(x = x_0 = 0, y)$ . Из (10b) и (18) следует, что

$$W^{int} = 2\pi(1+\nu)DbR_0h(h-2). \quad (19)$$

Энергия  $W^c$  ядра дислокации примерно равна  $Db^2/2$  [51].

В результате вычислений из (11), (12), (17) и (19) мы получаем следующий критерий зарождения ДН:

$$f > f_c(R_0, H), \quad (20)$$

где

$$f_c(R_0, H) = \left( 1 + \frac{h(h-2)(h-r_0)(h-2-r_0)[2h(h-2-r_0)-1+2r_0]}{2[h^2-(2+r_0)h+r_0]^2} + \ln \frac{h(2-h+r_0)-r_0}{r_0} \right) \frac{b}{4\pi(1+\nu)R_0h(2-h)}. \quad (21)$$

В формуле (21)  $f_c(R_0, H)$  обозначает критическое несоответствие, при превышении которого формирование ДН на межфазной границе нанопроволоки энергетически выгодно.

Поверхность  $f_c(R_0, H) = f$  в пространстве параметров  $(R_0, H, f)$  показана на рис. 4 для  $\nu = 0.3$  и  $r_c = b = 0.4$  нм.

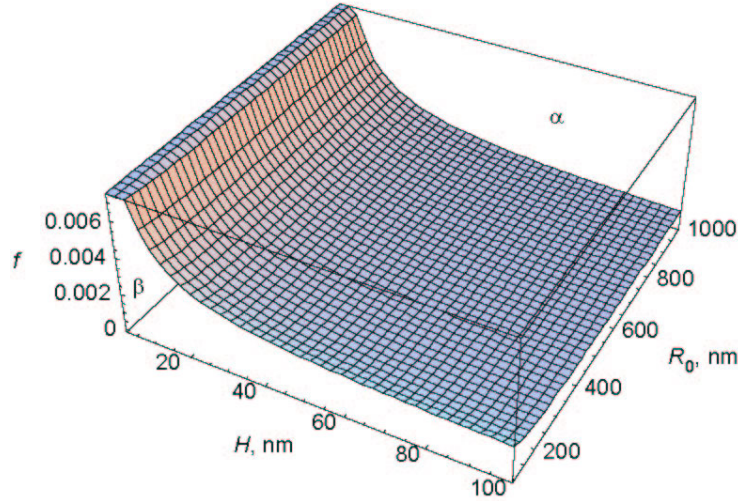


Рис. 4. Поверхность  $f_c(R_0, H) = f$  отделяет область параметров  $\alpha$  зарождения ДН от области  $\beta$ , где ДН не зарождаются.

Эта поверхность отделяет область  $\alpha$ , в которой зарождение ДН энергетически выгодно, от области  $\beta$ , в которой зарождение такой ДН энергетически невыгодно.

В зависимости от соотношения радиуса ядра  $R_0$  и толщины оболочки  $H$  возможны следующие варианты:

(i) *Тонкая оболочка* ( $H \ll R_0$ ). В этом случае условие зарождения ДН следует из (20), (21) и условия  $R_0 / H \gg 1$ . Зарождение ДН энергетически выгодно, если толщина

оболочки превышает критическую толщину  $H_c$ , определяемую при  $H_c \gg b$  из уравнения

$$\ln \frac{2H_c}{r_c} + \frac{1}{2} = 8\pi(1+\nu)f \frac{H_c}{b}. \quad (22)$$

Это уравнение для определения критической толщины тонкой оболочки нанопроволоки совпадает с уравнением для критической толщины тонкой плоской пленки на полубесконечной подложке [39]. Зависимость  $H_c$  от несоответствия  $f$  для случая  $r_c = b = 0.4$  нм приведена на рис. 5.

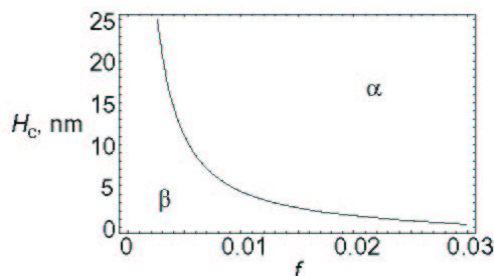


Рис. 5. Зависимость критической толщины  $H_c$  тонкой оболочки нанопроволоки от несоответствия  $f$ .

(ii) *Малое цилиндрическое включение* ( $H \gg R_0$ ). Для малого цилиндрического включения условие зарождения ДН следует из (20), (21) и неравенства  $R_0 / H \ll 1$ . Зарождение ДН энергетически выгодно, если

$$H < b \exp \left( 4\pi(1+\nu)f \frac{R_0}{b} + \frac{1}{2} \right), \quad (23)$$

то есть если толщина оболочки меньше некоторого критического значения. Неравенство (23) можно переписать в виде

$$R_0 > \frac{(\ln \frac{H}{b} - \frac{1}{2})b}{4\pi(1+\nu)f}. \quad (24)$$

Из формулы (24) следует, что в случае малого цилиндрического включения зарождение ДН энергетически выгодно, если радиус  $R_0$  включения превышает некоторое критическое значение. Если включение находится в бесконечной матрице ( $H \rightarrow \infty$ ), ДН на границе включения и матрицы не зарождаются ни при каком радиусе включения.

(iii) *Толщины ядра и оболочки одного порядка* ( $R_0 \approx H$ ). При этом в зависимости от параметров нанопроволоки могут реализовываться следующие варианты (рис. 6):

(a) Зарождение ДН энергетически невыгодно при любых значениях толщины оболочки. Этот случай изображен на рис. 6а, где горизонтальная линия  $f = 0.002$  не пересекает график функции  $f_c(R_0, H)$ .

(b) Зарождение ДН энергетически выгодно, если толщина  $H$  оболочки находится в некотором интервале  $H_{c1} < H < H_{c2}$ . Эта ситуация проиллюстрирована на рис. 6б, где горизонтальная линия  $f = 0.004$  пересекает график зависимости  $f_c(R_0, H)$  в двух точках  $H = H_{c1}$  и  $H = H_{c2}$ .

Как следует из рис. 6, если значение несоответствия  $f$  меньше минимума  $f_0$  функции  $f_c(R_0, H)$  (рис. 6а), зарождение ДН на межфазной границе двухслойной нанопроволоки невыгодно ни при какой толщине оболочки. Поскольку  $f_0$



увеличивается при уменьшении  $R_0$ , соотношение  $f < f_0(R_0)$  можно переписать в виде  $R_0 < R_{0c}(f_0)$ , где  $R_{0c}$  – некоторый критический радиус ядра. Последнее соотношение означает, что при достаточно малом радиусе  $R_0$  ядра ( $R_0 < R_{0c}$ ) ДН не зарождаются ни при какой толщине оболочки. С другой стороны, поскольку критическая толщина  $H_{c1}$  уменьшается с увеличением толщины ядра, существует минимальное значение  $H_{c1}(R_0 \rightarrow \infty)$  критической толщины оболочки (равное критической толщине пленки на полубесконечной подложке), до которого (при  $H < H_{c1}(R_0 \rightarrow \infty)$ ) ДН не зарождаются ни при какой толщине ядра нанопроволоки. Следовательно, в двухслойной цилиндрической нанопроволоке ДН не формируются, когда толщина любого из двух слоев нанопроволоки достаточно мала, как и в случае двухслойной пластины конечной толщины [52–54].

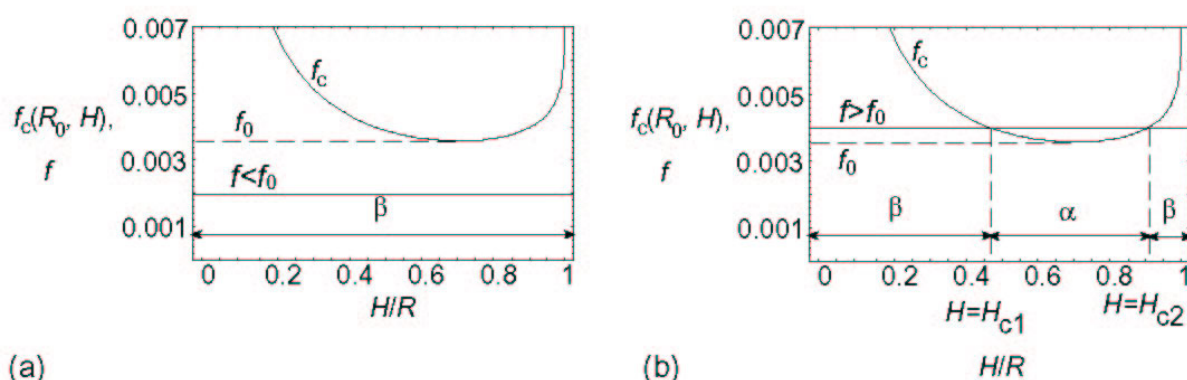


Рис. 6. Зависимость  $f_c(R_0, H)$ , показанная для случая  $R_0 = 100b$ . Горизонтальные линии соответствуют различным значениям несоответствия: (a)  $f = 0.002$ , дислокации несоответствия не зарождаются, (b)  $f = 0.004$ , зарождение одиночной дислокации несоответствия энергетически выгодно при  $H_{c1} < H < H_{c2}$ .

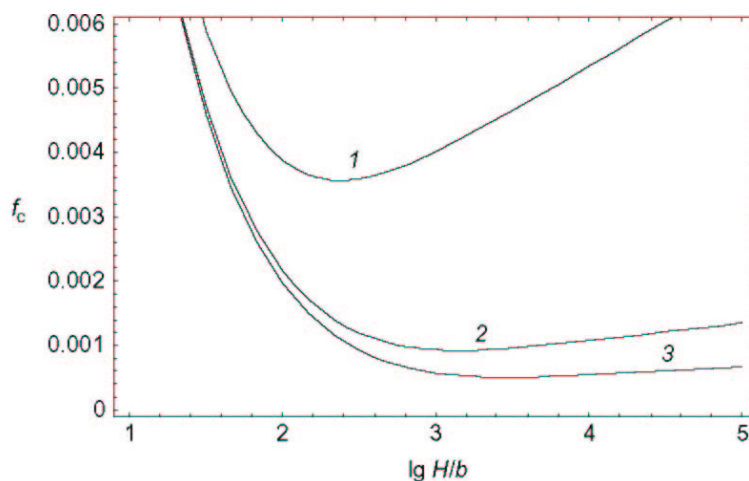


Рис. 7. Зависимость критического несоответствия  $f_c$  от  $\lg H/b$  для  $R_0/b = 100$  (кривая 1), 500 (2) и 1000 (3).

Для определения характера зависимостей  $H_{c1}$ ,  $H_{c2}$  и  $f_0$  от  $R_0$  критические несоответствия  $f_c$  как функции безразмерной толщины оболочки  $H/b$  приведены на рис. 7 для различных значений  $R_0$ . Из рис. 7 следует, что с уменьшением  $R_0$

величина  $f_0$  увеличивается, а интервал  $[H_{c1}, H_{c2}]$  сужается. Следовательно, уменьшение радиуса ядра нанопроволоки затрудняет зарождение ДН в цилиндрической нанопроволоке. В частности, с уменьшением радиуса ядра увеличивается критическая толщина  $H_{c1}$ . Увеличение критической толщины зарождения ДН при уменьшении толщины подложки происходит и в двухслойных структурах, состоящих из плоской пленки и подложки конечной толщины [52,55], и связано с аккомодацией тонкой подложкой части напряжений несоответствия.

Обсудим теперь возможные механизмы зарождения ДН в двухслойных цилиндрических нанопроволоках. Как и для пленок на подложках с плоской поверхностью, наиболее вероятным способом формирования ДН на границе ядра и оболочки нанопроволоки является зарождение ДН на свободной поверхности нанопроволоки и их последующее движение (скольжение и/или переползание) к межфазной границе (рис. 8а). При этом векторы Бюргерса ДН на межфазной границе ориентированы относительно межфазной границы произвольным образом, поскольку плоскости скольжения оболочки пересекают межфазную границу под различными углами. К другим возможным механизмам зарождения ДН в двухслойной нанопроволоке относятся скольжение ДН к межфазной границе от дислокационных источников, зарождение на свободной поверхности нанопроволоки дислокационных полупетель с их последующим расширением и движением к межфазной границе, а также формирование частичных ДН и их дальнейшее слияние с образованием полных ДН. Кроме того, в двухслойной цилиндрической нанопроволоке возможны механизмы образования ДН, не реализуемые в пленках на подложках с плоской поверхностью. Примером такого механизма служит образование у свободной поверхности дислокационного диполя и его последующее скольжение к межфазной границе (рис. 8б). Поля напряжений дислокаций, составляющих диполь, экранируют друг друга. Как следствие, энергетический барьер, связанный с образованием диполя и его движением к межфазной границе, меньше, чем в случае изолированной дислокации (рис. 8а).

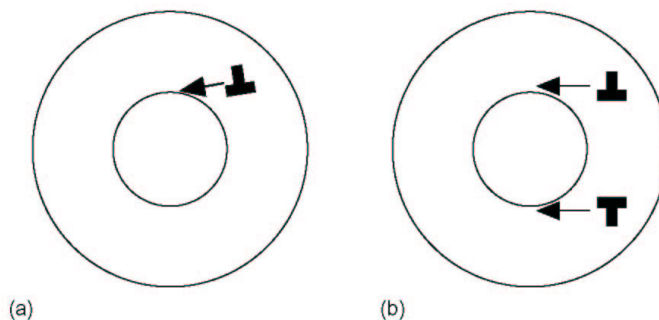


Рис. 8. Механизмы зарождения дислокаций несоответствия в двухслойной нанопроволоке. (а) Зарождение дислокации на свободной поверхности и ее последующее движение к межфазной границе. (б) Зарождение дислокационного диполя на свободной поверхности и его последующее движение к межфазной границе.

Таким образом, критическими параметрами для зарождения ДН в двухслойной цилиндрической нанопроволоке являются несоответствие, радиус ядра нанопроволоки и толщина ее оболочки. ДН в такой нанопроволоке не формируются, если толщина одного из слоев (ядра или оболочки нанопроволоки) достаточно мала. Напротив, зарождение ДН в двухслойной нанопроволоке возможно, если толщины обоих слоев достаточно велики и не слишком сильно отличаются друг от друга. При этом критическая толщина оболочки нанопроволоки, при превышении которой в двухслойной нанопроволоке выгодно образование ДН, увеличивается с уменьшением

радиуса ядра нанопроволоки.

В заключение настоящего параграфа отметим, что условия образования дислокации в двухслойной цилиндрической нанопроволоке вида “ядро–оболочка” качественно совпадают с условиями образования дислокации несоответствия в цилиндрической нанопроволоке, состоящей из двух цилиндрических сегментов – цилиндрической пленки и цилиндрической подложки. (Пример нанопроволоки, состоящей из сегментов, приведен на рис. 1е.) Условия образования дислокации несоответствия на границе слоев такой нанопроволоки были рассчитаны в работе [56]. Оказалось [56], что критическая толщина цилиндрической пленки, при превышении которой в нанопроволоке образуется дислокация, увеличивается с уменьшением радиуса нанопроволоки и при некотором критическом радиусе нанопроволоки становится бесконечной. Если радиус сегментированной нанопроволоки меньше критического значения, дислокации в нанопроволоке не зарождаются ни при какой толщине пленки.

#### 4. Дисклинационные дефекты несоответствия в двухслойной цилиндрической нанопроволоке

В предыдущем параграфе были определены условия энергетической выгоды зарождения дислокации несоответствия в двухслойной цилиндрической нанопроволоке. В настоящем параграфе мы рассмотрим критические параметры зарождения в такой нанопроволоке дисклинационных дефектов несоответствия [57]. Дисклинации представляют собой дефекты ротационного типа, отвечающие за поворот кристаллической решетки [31]. Частичные клиновые дисклинации могут быть связаны со стыками двойников, границ зерен или фрагментов [31]. Они наблюдаются, например, в вершинах двойников, в частности, в тонких эпитаксиальных пленках Ge [58,59] и SiGe [60–62] на кремниевых подложках. Прямые экспериментальные свидетельства образования таких дисклинационных дефектов в системах с несоответствием были продемонстрированы в [58–62].

Рассмотрим сначала полную клиновую дисклинацию мощности  $-\omega$  в двухслойной цилиндрической нанопроволоке. Пусть линия дисклинации параллельна оси нанопроволоки и расположена на межфазной границе (рис. 2b). Введение дисклинации несоответствия изменяет упругую энергию двухслойной нанопроволоки на величину  $\Delta W^\Delta = W^\Delta + W_{int}^{\Delta-f}$ , где  $W^\Delta$  – собственная энергия дисклинации, а  $W_{int}^{\Delta-f}$  обозначает энергию взаимодействия дисклинации с полем напряжений несоответствия. Так как внедрение дисклинации должно уменьшать полную энергию системы, критерий зарождения дисклинации несоответствия (аналогичный критерию формирования ДН) имеет вид

$$\Delta W^\Delta < 0. \quad (25)$$

Собственная упругая энергия дисклинации определяется выражением [31]

$$W^\Delta = \frac{D\omega^2 R^2}{8} (a^2 - 1)^2, \quad (26)$$

где  $a = R_0 / R$ , как и ранее. Энергия взаимодействия дисклинации с полем напряжений несоответствия  $\sigma_{ij}^f$  представима в виде [31]

$$W_{int}^{\Delta-f} = -\omega \int_{R_0}^R (r - R_0) \sigma_{\theta\theta}^f(r) dr, \quad (27)$$

где тангенциальная компонента  $\sigma_{\theta\theta}^f(r)$  определяется выражением (10b). Подстановка (10b) в (27) дает

$$W_{int}^{\Delta-f} = -\pi D \omega f (1+\nu) R_0^2 (a^2 - 2 \ln a - 1). \quad (28)$$

Подставляя (26) и (28) в (25), представим условие зарождения дисклинации несоответствия в виде

$$q < q_c, \quad (29)$$

где

$$q = \frac{\omega}{8\pi(1+\nu)f}, \quad (30)$$

$$q_c = \frac{a^2(a^2 - 2 \ln a - 1)}{(a^2 - 1)^2}. \quad (31)$$

На рис. 9 представлена зависимость критического параметра  $q_c$  от  $a$ . Значение  $q_c$  изменяется от 0 для  $a=0$  до  $1/2$  для  $a=1$ . Критическое значение  $\omega_c$  модуля мощности дисклинации (определяемое выражением  $\omega_c = 8\pi(1+\nu)|f|q_c$ ) изменяется от 0 для нанопроволоки с тонким ядром до  $4\pi(1+\nu)|f|$  для нанопроволоки с тонкой оболочкой.

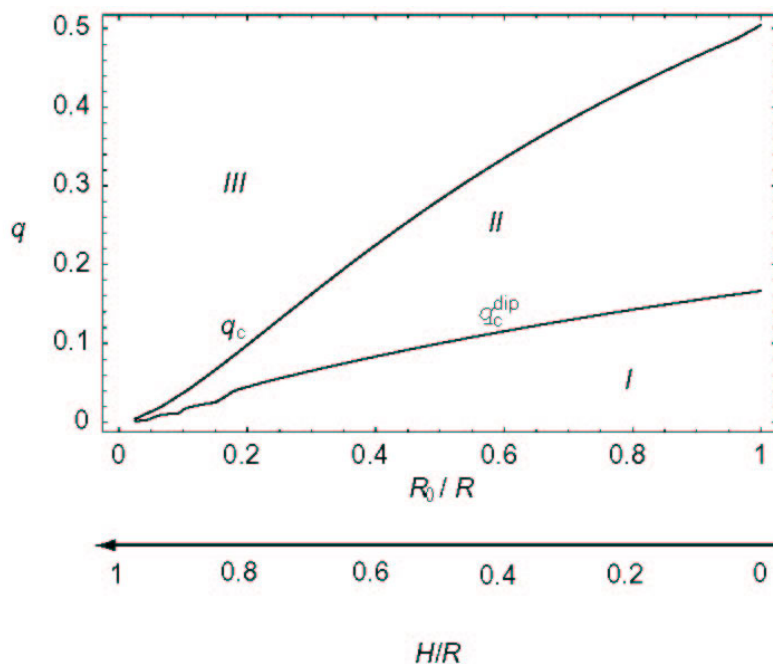


Рис. 9. Критические параметры  $q_c$  и  $q_c^{dip}$  дисклинации несоответствия и дисклинационного диполя как функции отношения  $R_0/R$  радиуса ядра нанопроволоки к ее внешнему радиусу. Кривые  $q_c(R_0/R)$  и  $q_c^{dip}(R_0/R)$  разделяют область I ( $q < q_c^{dip}(R_0/R)$ ) зарождения дисклинаций несоответствия, область II ( $q_c^{dip}(R_0/R) < q < q_c(R_0/R)$ ) образования как дисклинаций несоответствия, так и дисклинационных диполей, и область III ( $q > q_c(R_0/R)$ ) формирования дисклинационных диполей.

Таким образом, если абсолютное значение  $|\omega|$  мощности дисклинации несоответствия меньше критического значения  $\omega_c$ , ее появление на межфазной границе двухслойной нанопроволоки энергетически выгодно. Критическая мощность

дисклинации  $\omega_c$  прямо пропорциональна абсолютной величине несоответствия  $|f|$  и уменьшается при уменьшении отношения  $a = R_0 / R$ , достигая нулевого значения при  $a = 0$ . Иными словами, зарождение клиновой дисклинации несоответствия определенно невыгодно в предельном случае тонкого цилиндрического включения внутри толстой оболочки. В то же время в остальных случаях зарождение дисклинации может быть выгодно, если мощность дисклинации достаточно мала. Это означает, что формирование дисклинации несоответствия можно рассматривать в качестве реального механизма аккомодации напряжений несоответствия в двухслойных нанопроволоках.

Как следует из вышеизложенного, в отличие от ДН, возможность формирования которой характеризуется критической толщиной оболочки, возможность зарождения дисклинации несоответствия зависит от ее мощности. Необходимо отметить, что подобный результат вряд ли будет справедлив, если мы введем в выражение для  $\Delta W^a$  дополнительные неупругие слагаемые, описывающие эффективную поверхностную энергию границы, соединяющей дисклинацию несоответствия со свободной поверхностью оболочки нанопроволоки или другой дисклинацией (см., например, [58–62]), если дисклинации являются частичными [31], или эффективную энергию ядра дисклинации, если дисклинация является полной [31]. В любом случае введение неупругих слагаемых привело бы к наличию некоторой минимальной критической толщины оболочки для зарождения дисклинации.

Рассмотрим теперь необходимые условия образования в нанопроволоке диполя клиновых дисклинаций (рис. 2с). Предположим, что одна из дисклинаций диполя расположена на межфазной границе, а другая в оболочке. Пусть также вторая дисклинация диполя расположена таким образом, что она минимизирует вызванное диполем изменение энергии  $\Delta W^{dip}$ . Иными словами, дисклинации, составляющие диполь, находятся в положениях равновесия. Критерий формирования такого диполя получается из условия уменьшения упругой энергии нанопроволоки при образовании диполя и предположения о том, что дисклинации, составляющие диполь, находятся в положении равновесия. Опуская детали вычислений, приведенные в [57], запишем сразу окончательный результат. Условие образования дисклинационного диполя имеет вид:

$$q > q_c^{dip}(a), \quad (32)$$

где  $q_c^{dip}(a)$  – рассчитываемая численно функция, график которой приведен на рис. 9.

Как следует из результатов расчетов [57], плечо рассматриваемого диполя увеличивается с уменьшением параметра  $q$  и соответственно уменьшается при увеличении  $q$ . В предельном случае  $q \rightarrow \infty$  дисклинации аннигилируют. Когда  $q = q_c^{dip}$ , дисклинации отталкиваются на любом расстоянии. При этом дисклинация  $\omega$  достигает свободной поверхности и исчезает, и дисклинационный диполь трансформируется в дисклинацию.

На рис. 9 изображена диаграмма состояния системы в координатах  $(R_0 / R, q)$ . На этой диаграмме выделены области *I*, *II* и *III*, в которых образование дисклинаций несоответствия и/или дисклинационных диполей энергетически выгодно. В области *I* ( $q < q_c^{dip}$ ) выгодно формирование дисклинации несоответствия, в области *II* ( $q_c^{dip} < q < q_c$ ) возможно зарождение как дисклинаций, так и дисклинационных диполей, а в области *III* ( $q > q_c$ ) могут зарождаться только дисклинационные диполи. Необходимо отметить, что дисклинации и дисклинационные диполи определенной

мощности могут возникать при любых значениях толщины оболочки и радиуса ядра нанопроволоки.

Таким образом, в двухслойной нанопроволоке с заданными значениями параметров  $R_0$ ,  $H$  и  $f$  возможно зарождение изолированных дисклинаций несоответствия и дисклинационных диполей с различными значениями мощности  $\omega$ . В случае  $|\omega| < 8\pi(1+\nu)|f|q_c^{dip}$  могут формироваться лишь дисклинации несоответствия. При увеличении  $|\omega|$  становится возможным зарождение не только дисклинаций, но и дисклинационных диполей. Когда абсолютное значение  $|\omega|$  мощности дисклинации достигает критического значения  $\omega_c = 8\pi(1+\nu)|f|q_c$ , любая изолированная дисклинация несоответствия должна трансформироваться в дисклинационный диполь. При дальнейшем увеличении  $\omega$  принадлежащая диполу дисклинация  $\omega$ , расположенная в оболочке, приближается к другой дисклинации  $-\omega$ , расположенной на межфазной границе.

Наряду с изолированными дислокациями, дисклинациями и дисклинационными диполями, в работе [57] были рассчитаны условия образования в двухслойной цилиндрической нанопроволоке дислокационных стенок, а также конечных и бесконечных рядов межфазных дисклинаций. Оказалось, что критерии формирования дислокационных стенок и дисклинационных рядов схожи с критериями образования соответственно одиночных дислокаций и изолированных дисклинаций. Однако области параметров, при которых энергетически выгодно зарождение дислокационных стенок и дисклинационных диполей, уже, чем соответствующие области параметров, в которых энергетически выгодно образование соответствующих одиночных дефектов. В частности, образование ряда дисклинаций энергетически выгодно в определенной области мощности дисклинаций и несоответствия. Условие образования такого ряда имеет вид:  $|\omega| < \omega_{cN}$ , где  $\omega_{cN}$  – критическая мощность дисклинаций, уменьшающаяся с уменьшением расстояния между ними.

Таким образом, формирование изолированных дисклинаций несоответствия и их устойчивых ансамблей на межфазной границе двухслойной нанопроволоки возможно, если абсолютная величина мощности дисклинаций меньше критического значения. В отличие от одиночных дисклинаций, для равновесных двухосных дисклинационных диполей не существует верхней границы для мощности  $\omega$  составляющих их дисклинаций. Увеличение мощности дисклинаций просто сопровождается уменьшением равновесного плеча диполя. Напротив, при уменьшении  $\omega$  плечо диполя увеличивается до тех пор, пока одна из дисклинаций не выходит на свободную поверхность и диполь не превращается в одиночную дисклинацию. Этому соответствует минимально возможная мощность равновесного диполя  $\omega_c^{dip}$ .

## 5. Дислокационные петли в двухслойной цилиндрической нанопроволоке

Еще один способ релаксации напряжений несоответствия в двухслойной цилиндрической нанопроволоке заключается в образовании в ней призматических дислокационных петель [35,63] (рис. 10). Как уже было упомянуто выше, такие дефекты наблюдались в двухслойных кристаллических нанопроволоках GaN–GaP [11], GaP–GaN [11] и Ge–Si [1]. Формирование таких дефектов может осуществляться различными способами. Образование призматической дислокационной петли (рис. 11) возможно, например, посредством зарождения на свободной поверхности нанопроволоки дислокационной полупетли (рис. 11a), ее движения к межфазной границе (рис. 11b), последующего расширения в плоскости поперечного сечения

цилиндра (рис. 11c) и “схлопывания” двух дислокационных сегментов противоположного знака, соединяющих межфазную границу со свободной поверхностью (рис. 11d). Зарождение дислокационной полупетли происходит на свободной боковой поверхности нанопроволоки (рис. 11a), где этой полупетле проще всего образоваться в месте концентрации напряжений, например, на поверхностной ступеньке. Последующее расширение образовавшейся полупетли в плоскости поперечного сечения нанопроволоки осуществляется посредством ее переползания (рис. 11). Таким образом, образование дислокационных петель путем переползания дислокационных полупетель, зарождающихся на свободной поверхности, является довольно медленным процессом, скорость которого определяется скоростью миграции точечных дефектов, осуществляющих переползание дислокационных полупетель.

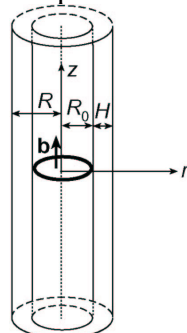


Рис. 10. Призматическая дислокационная петля в двухслойной нанопроволоке.

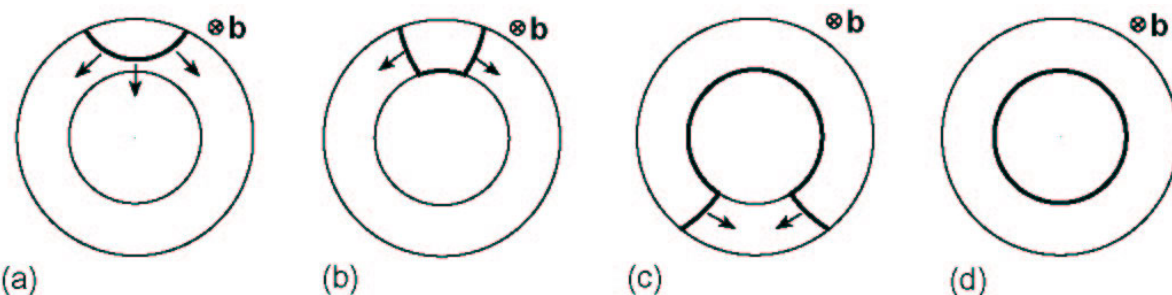


Рис. 11. Зарождение дислокационной петли в двухслойной нанопроволоке по механизму переползания. **b** обозначает вектор Бюргерса дислокационной (полу)петли.

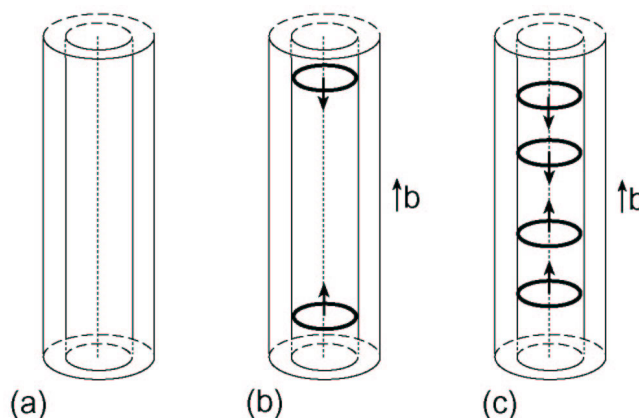


Рис. 12. Зарождение дислокационных петель в двухслойной нанопроволоке по механизму скольжения. (a) Нанопроволока в начальном когерентном состоянии. (b) и (c) Зарождение призматических дислокационных петель на верхней и нижней свободных поверхностях нанопроволоки и их последующее скольжение к центральной части нанопроволоки.



Кроме образования дислокационных петель по механизму переползания (рис. 11) их формирование может осуществляться по механизму скольжения (рис. 12). В этом случае призматические дислокационные петли зарождаются на верхней и нижней свободных поверхностях нанопроволоки конечной длины и затем скользят к ее центральной области (рис. 12). Действие этого механизма может быть наиболее существенно в коротких нанопроволоках. Заметим, что механизмы переползания и скольжения могут действовать одновременно. В этом случае механизм переползания, связанный с зарождением полупетель на боковой поверхности нанопроволоки, может доминировать в ее центральной области, а механизм скольжения, требующий предварительного образования дислокационных петель на верхней или нижней поверхности нанопроволоки, наиболее эффективен вблизи этих поверхностей (рис. 13).

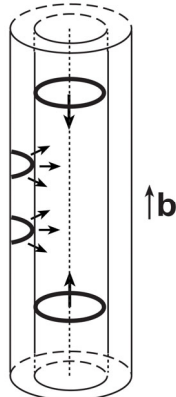


Рис. 13. Одновременное действие механизмов скольжения и переползания для формирования призматических дислокационных петель в двухслойной нанопроволоке.

Рассмотрим условия формирования призматической дислокационной петли на межфазной границе двухслойной нанопроволоки (рис. 10). Для этого введем цилиндрическую систему координат  $(r, \theta, z)$ , ось  $z$  которой совпадает с осью нанопроволоки. Пусть центр петли лежит на оси нанопроволоки  $r=0$ , а сама петля расположена в плоскости  $z=0$  и имеет радиус  $R_0$  и вектор Бюргерса  $b = b_z e_z$ . При образовании межфазной дислокационной петли энергия двухслойной нанопроволоки изменяется на величину  $\Delta W = W^l + W^{l-f} + W^c$ , где  $W^l$  – собственная упругая энергия дислокационной петли,  $W^{l-f}$  – энергия ее взаимодействия с упругим полем напряжений несоответствия, а  $W^c$  – энергия ее ядра. Как и ранее, в качестве критерия формирования такой петли выберем энергетический критерий, то есть требование уменьшения энергии системы при образовании дефекта. Тогда необходимое условие образования дислокационной петли имеет вид:

$$\Delta W = W^l + W^{l-f} + W^c < 0. \quad (33)$$

Для расчета энергии  $W^l$ , входящую в формулу (33), в следующем параграфе мы получим выражения для поля напряжений, создаваемых дислокационной петлей в цилиндре.

**5.1. Поле напряжений дислокационной петли в цилиндре.** Задачам об упругих полях круговых дислокационных петель посвящено большое количество работ. Упругие поля круговых дислокационных петель были рассчитаны для петель, расположенных в изотропной бесконечной среде [64–73], изотропном полупространстве [74–76], двухфазном материале с плоской границей раздела [77–81], изотропной [82] и анизотропной [83] пластине, а также упругой сфере [84]. Указанные решения, однако, не подходят для расчета энергии дислокационной петли в нанопроволоке. Поэтому в настоящем параграфе мы рассчитаем поля напряжений



круговой призматической дислокационной петли в упругоизотропном цилиндре [63].

Для расчета поля напряжений  $\sigma_{ij}^l$  дислокационной петли в цилиндре (см. рис. 10) мы представим его в виде  $\sigma_{ij}^l = \sigma_{ij}^\infty + \sigma_{ij}^v$ , где  $\sigma_{ij}^\infty$  – поле напряжений, которое такая петля создавала бы в бесконечной среде, а  $\sigma_{ij}^v$  – дополнительное поле напряжений, необходимое для удовлетворения граничных условий на свободной поверхности цилиндра  $r = R$ . Эти граничные условия имеют вид:  $\sigma_{rk}^\infty(r = R) + \sigma_{rk}^v(r = R) = 0$ , где  $k = r, \theta, z$ .

Выражения для поля напряжений  $\sigma_{ij}^\infty$  имеют вид [73,77,79]

$$\sigma_{rr}^\infty = -M \left[ \frac{1-2\nu}{\tilde{r}} J(1,1;0) + \left| \tilde{z} \right| J(1,0;2) - J(1,0;1) - \frac{\left| \tilde{z} \right|}{\tilde{r}} J(1,1;1) \right], \quad (34a)$$

$$\sigma_{\theta\theta}^\infty = -M \left[ \frac{2\nu-1}{\tilde{r}} J(1,1;0) - 2\nu J(1,0;1) + \frac{\left| \tilde{z} \right|}{\tilde{r}} J(1,1;1) \right], \quad (34b)$$

$$\sigma_{zz}^\infty = M [J(1,0;1) + \left| \tilde{z} \right| J(1,0;2)], \quad (34c)$$

$$\sigma_{rz}^\infty = M \tilde{z} J(1,1;2), \quad (34d)$$

$$\sigma_{r\theta}^\infty = \sigma_{z\theta}^\infty = 0. \quad (34e)$$

В формулах (34)  $\tilde{r} = r / R_0$ ,  $M = Gb_z / [2(1-\nu)R_0]$ ,  $J(m,n;p)$  – интегралы Лифшица-Ханкеля, определяемые соотношениями [85]

$J(m,n;p) = \int_0^\infty J_m(t) J_n(\tilde{r}t) e^{-|\tilde{z}|t} t^p dt$ , где  $\tilde{z} = z / R_0$ , а  $J_m(t)$  – функции Бесселя 1 рода порядка  $m$ .

Прежде чем приступить к расчету поля напряжений  $\sigma_{ij}^v$ , заметим, что рассматриваемая задача о призматической дислокационной петле в цилиндре является осесимметричной и в ней отсутствует кручение. Следовательно, поле напряжений  $\sigma_{ij}^v$  не зависит от  $\theta$ , а его компоненты  $\sigma_{r\theta}^v$  и  $\sigma_{z\theta}^v$  равны нулю. Для такого поля напряжений можно ввести функцию напряжений  $\phi$ , удовлетворяющую уравнению [37]  $\Delta\Delta\phi = 0$ , где  $\Delta$  – оператор Лапласа. В цилиндрических координатах оператор Лапласа имеет вид  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ . Поскольку функция напряжений  $\phi$  не зависит от  $\theta$ ,  $\Delta\phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}$ . Напряжения  $\sigma_{ij}^v$  выражаются через функцию напряжений  $\phi$  с помощью соотношений [37]

$$\sigma_{rr}^v = \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu \Delta\phi - \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right), \sigma_{\theta\theta}^v = \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu \Delta\phi - \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right), \quad (35)$$

$$\sigma_{zz}^v = \frac{\partial}{\partial z} \left[ (2-\nu) \Delta\phi - \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right], \sigma_{rz}^v = \frac{\partial}{\partial r} \left[ (1-\nu) \Delta\phi - \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right], \quad (36)$$

$$\sigma_{r\theta}^v = \sigma_{z\theta}^v = 0. \quad (37)$$

Следует отметить, что  $\sigma_{rr}^\infty$  является четной функцией  $\tilde{z}$ , а  $\sigma_{rz}^\infty$  нечетной функцией  $\tilde{z}$ . Поскольку напряжения  $\sigma_{rr}^v$  и  $\sigma_{rz}^v$  связаны с напряжениями  $\sigma_{rr}^\infty$  и  $\sigma_{rz}^\infty$  соотношениями  $\sigma_{rr}^v(\tilde{r} = \tilde{R}) = -\sigma_{rr}^\infty(\tilde{r} = \tilde{R})$  и  $\sigma_{rz}^v(\tilde{r} = \tilde{R}) = -\sigma_{rz}^\infty(\tilde{r} = \tilde{R})$  (где  $\tilde{R} = R / R_0$ ), напряжения  $\sigma_{rr}^v$  и  $\sigma_{rz}^v$  также должны быть четной и нечетной функцией  $\tilde{z}$

соответственно. Следовательно, учитывая первую из формул (35) и вторую из формул (36), получаем, что  $\phi$  должна быть нечетной функцией  $\tilde{z}$ .

Для случая сплошного бесконечного цилиндра функцию напряжений  $\phi$ , нечетную относительно  $\tilde{z}$ , можно представить в следующем общем виде [37]:

$$\phi = M R_0^3 \int_0^\infty [\rho_1(k) I_0(\tilde{r}k) - \tilde{r}k \rho_2(k) I_1(\tilde{r}k)] \sin k\tilde{z} dk, \quad (38)$$

где  $I_0(\tilde{r}k)$  и  $I_1(\tilde{r}k)$  – модифицированные функции Бесселя первого рода порядка 0 и 1 соответственно, а  $\rho_1(k)$  и  $\rho_2(k)$  – функции, определяющиеся из граничных условий.

Подстановка в (38) уравнений (35) и (36) дает

$$\begin{aligned} \sigma_{rr}^v = M \int_0^\infty \left\{ \left( -I_0(\tilde{r}k) + \frac{I_1(\tilde{r}k)}{\tilde{r}k} \right) \rho_1(k) \right. \\ \left. + [(1-2\nu) I_0(\tilde{r}k) + \tilde{r}k I_1(\tilde{r}k)] \rho_2(k) \right\} k^3 \cos k\tilde{z} dk, \end{aligned} \quad (39a)$$

$$\sigma_{\theta\theta}^v = M \int_0^\infty \left\{ \left( -\frac{I_1(\tilde{r}k)}{\tilde{r}k} \right) \rho_1(k) + (1-2\nu) I_0(\tilde{r}k) \rho_2(k) \right\} k^3 \cos k\tilde{z} dk, \quad (39b)$$

$$\sigma_{zz}^v = M \int_0^\infty \{ I_0(\tilde{r}k) \rho_1(k) - [2(2-\nu) I_0(\tilde{r}k) + \tilde{r}k I_1(\tilde{r}k)] \rho_2(k) \} k^3 \cos k\tilde{z} dk, \quad (39c)$$

$$\sigma_{rz}^v = M \int_0^\infty \{ I_1(\tilde{r}k) \rho_1(k) - [2(1-\nu) I_1(\tilde{r}k) + \tilde{r}k I_0(\tilde{r}k)] \rho_2(k) \} k^3 \sin k\tilde{z} dk. \quad (39d)$$

Для определения величин  $\rho_1(k)$  и  $\rho_2(k)$ , входящих в выражения для напряжений  $\sigma_{ij}^v$ , введем в рассмотрение функции

$$g_1(\tilde{r}, k) = M \left\{ \left( -I_0(\tilde{r}k) + \frac{I_1(\tilde{r}k)}{\tilde{r}k} \right) \rho_1(k) + [(1-2\nu) I_0(\tilde{r}k) + \tilde{r}k I_1(\tilde{r}k)] \rho_2(k) \right\} k^3, \quad (40)$$

$$g_2(\tilde{r}, k) = M \{ I_1(\tilde{r}k) \rho_1(k) - [2(1-\nu) I_1(\tilde{r}k) + \tilde{r}k I_0(\tilde{r}k)] \rho_2(k) \} k^3. \quad (41)$$

Будем искать  $g_1$  и  $g_2$  как четную и нечетную функцию  $k$  соответственно. Заметим, что в этом случае напряжения  $\sigma_{rr}^v$  и  $\sigma_{rz}^v$  представляют собой (с точностью до постоянных множителей  $\pi$  и  $-i\pi$ ) обратные преобразования Фурье от функций  $g_1$  и  $g_2$  :

$$\sigma_{rr}^v(\tilde{r}, \tilde{z}) = \pi F^{-1}[g_1], \quad \sigma_{rz}^v(\tilde{r}, \tilde{z}) = -i\pi F^{-1}[g_2], \quad \text{где } i = \sqrt{-1}, \quad \text{а}$$

$F^{-1}[g](k) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ik\tilde{z}} dk$  – обратное преобразование Фурье. При этом для функции  $g_1(\tilde{r}, k)$ , четной относительно  $k$ , обратное преобразование Фурье имеет вид

$$F^{-1}[g_1] = (1/\pi) \int_0^\infty g_1(\tilde{r}, k) \cos k\tilde{z} dk, \quad \text{а для функции } g_2(k), \text{ нечетной относительно } k,$$

выполняется равенство  $F^{-1}[g_2] = (i/\pi) \int_0^\infty g_2(\tilde{r}, k) \sin k\tilde{z} dk$ . Применяя к напряжениям

$$\sigma_{rr}^v(\tilde{r}, \tilde{z}) \text{ и } \sigma_{rz}^v(\tilde{r}, \tilde{z}) \text{ прямое преобразование Фурье } F[g](k) = \hat{g}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\tilde{z}) e^{-ik\tilde{z}} dk,$$

получаем:

$$g_1(\tilde{r}, k) = \frac{1}{\pi} \hat{\sigma}_{rr}^v(\tilde{r}, k), \quad g_2(\tilde{r}, k) = \frac{i}{\pi} \hat{\sigma}_{rz}^v(\tilde{r}, k). \quad (42)$$

Теперь применение преобразования Фурье к граничным условиям  $\sigma_{rr}^v(\tilde{R}, \tilde{z}) = -\sigma_{rr}^\infty(\tilde{R}, \tilde{z})$  и  $\sigma_{rz}^v(\tilde{R}, \tilde{z}) = -\sigma_{rz}^\infty(\tilde{R}, \tilde{z})$  на свободной поверхности цилиндра дает:

$$\hat{\sigma}_{rr}^v(\tilde{R}, k) = -\hat{\sigma}_{rr}^\infty(\tilde{R}, k), \quad \hat{\sigma}_{rz}^v(\tilde{R}, k) = -\hat{\sigma}_{rz}^\infty(\tilde{R}, k). \quad (43)$$

Теперь из (42) и (43) следует, что

$$g_1(\tilde{R}, k) = -\frac{1}{\pi} \hat{\sigma}_{rr}^\infty(\tilde{R}, k), \quad g_2(\tilde{R}, k) = -\frac{i}{\pi} \hat{\sigma}_{rz}^\infty(\tilde{R}, k). \quad (44)$$

Подставляя в (44) выражения (40) и (41), приходим к следующей линейной системе уравнений для определения  $\rho_1(k)$  и  $\rho_2(k)$ :

$$a_{11} \rho_1 + a_{12} \rho_2 = b_1, \quad (45)$$

$$a_{21} \rho_1 + a_{22} \rho_2 = b_2, \quad (46)$$

где

$$a_{11} = -I_0(\tilde{R}k) + \frac{I_1(\tilde{R}k)}{\tilde{R}k}, \quad (47)$$

$$a_{12} = (1-2\nu)I_0(\tilde{R}k) + \tilde{R}k I_1(\tilde{R}k), \quad (48)$$

$$a_{21} = I_1(\tilde{R}k), \quad (49)$$

$$a_{22} = -[2(1-\nu)I_1(\tilde{R}k) + \tilde{R}k I_0(\tilde{R}k)], \quad (50)$$

а коэффициенты  $b_1$  и  $b_2$  выражаются через величины  $\hat{\sigma}_{rr}^\infty(\tilde{R}, k)$  и  $\hat{\sigma}_{rz}^\infty(\tilde{R}, k)$  с помощью соотношений  $b_1 = -1/(M\pi k^3) \hat{\sigma}_{rr}^\infty(\tilde{R}, k)$ ,  $b_2 = -i/(M\pi k^3) \hat{\sigma}_{rz}^\infty(\tilde{R}, k)$ .

Подстановка в эти соотношения явных выражений [63] для  $\hat{\sigma}_{rr}^\infty(\tilde{R}, k)$  и  $\hat{\sigma}_{rz}^\infty(\tilde{R}, k)$  дает:

$$b_1 = \frac{2 \operatorname{sign} k}{\pi k^2} \left\{ I_1(|k|) \left[ \left( \tilde{R}|k| + \frac{2(1-\nu)}{\tilde{R}|k|} \right) K_1(\tilde{R}|k|) + K_0(\tilde{R}|k|) \right] - |k| I_0(|k|) \left( K_0(\tilde{R}|k|) + \frac{K_1(\tilde{R}|k|)}{\tilde{R}|k|} \right) \right\}, \quad (51)$$

$$b_2 = \frac{2}{\pi |k|} \{ \tilde{R} I_1(|k|) K_0(\tilde{R}|k|) - I_0(|k|) K_1(\tilde{R}|k|) \}, \quad (52)$$

где  $K_0(x)$  и  $K_1(x)$  – модифицированные функции Бесселя 2 рода порядка 0 и 1 соответственно. Решение системы уравнений (45) и (46) имеет вид

$$\rho_1 = \frac{b_1 a_{22} - b_2 a_{12}}{a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}}, \quad \rho_2 = \frac{b_2 a_{11} - b_1 a_{21}}{a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}}. \quad (53)$$

Из (40), (41), (47)–(53), четности функции  $I_0(\tilde{R}k)$  и нечетности функции  $I_1(\tilde{R}k)$  следует, что требуемое условие четности функции  $g_1$  и нечетности функции  $g_2$  относительно  $k$  (см. выше) выполняется. Теперь поле напряжений  $\sigma_{ij}^v$  дается формулами (39) и (47)–(53), а суммарное поле напряжений  $\sigma_{ij}^l$  дислокационной петли в цилиндре равно сумме поля напряжений  $\sigma_{ij}^v$  и поля напряжений  $\sigma_{ij}^\infty$ , определяемого формулами (34).

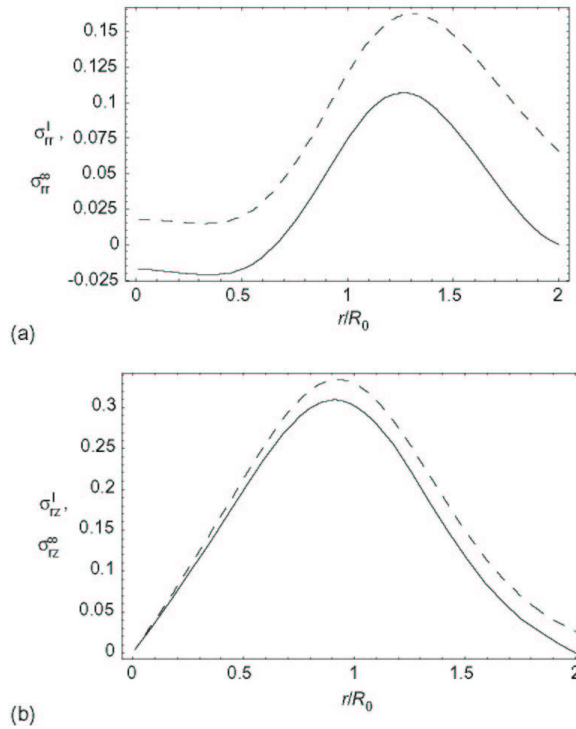


Рис. 14. Зависимости напряжений  $\sigma_{rr}^l$ ,  $\sigma_{rz}^l$ ,  $\sigma_{rr}^\infty$  и  $\sigma_{rz}^\infty$  от  $r/R_0$  для случая  $z/R_0 = 1$ ,  $R/R_0 = 2$  и  $\nu = 0.3$ . (a) Зависимости  $\sigma_{rr}^l(r/R_0)$  (непрерывная линия) и  $\sigma_{rr}^\infty(r/R_0)$  (штриховая линия). (b) Зависимости  $\sigma_{rz}^l(r/R_0)$  (непрерывная линия) и  $\sigma_{rz}^\infty(r/R_0)$  (штриховая линия). Напряжения приведены в единицах  $G b_z / [2(1-\nu)R_0]$ .

В качестве иллюстрации графики зависимостей  $\sigma_{rr}^l$  и  $\sigma_{rz}^l$  (в единицах  $G b_z / [2(1-\nu)R_0]$ ) от  $\tilde{r}$  для случая  $\tilde{z}=1$ ,  $\tilde{R}=2$ ,  $\nu=0.3$  приведены на рис. 14. Штриховыми линиями на этих рисунках показаны напряжения  $\sigma_{rr}^\infty$  и  $\sigma_{rz}^\infty$ . Как видно из рис. 14, полученные выражения для напряжений  $\sigma_{rr}^l$  и  $\sigma_{rz}^l$  удовлетворяют граничным условиям на свободной поверхности цилиндра, а сами напряжения  $\sigma_{rr}^l$  и  $\sigma_{rz}^l$  существенно отличаются от напряжений  $\sigma_{rr}^\infty$  и  $\sigma_{rz}^\infty$ , создаваемых круговой призматической дислокационной петлей в бесконечной среде.

**5.2. Критическое условие формирования петли.** После расчета напряжений  $\sigma_{ij}^l$ , создаваемых дислокационной петлей, вычислим изменение энергии  $\Delta W$  при формировании такой петли. Собственная упругая энергия петли  $W^l$  рассчитывается по формуле [50]

$$W^l = \frac{b_z}{2} \int_0^{2\pi} \int_0^{R_0-r_c} \sigma_{zz}^l(\tilde{r}, \tilde{z}=0) r dr d\theta, \quad (54)$$

где  $r_c$  – радиус ядра дислокационной петли. Учитывая равенство  $\sigma_{zz}^l = \sigma_{zz}^\infty + \sigma_{zz}^v$  и подставляя в (54) формулы (34с) и (39с) для  $\sigma_{zz}^\infty$  и  $\sigma_{zz}^v$ , перепишем (54) в виде  $W^l = (1-\tilde{r}_c) \pi^2 D b^2 R_0 Q(\tilde{R}, \tilde{r}_c)$ , где  $\tilde{r}_c = r_c / R_0$ ,  $b = |b_z|$  – величина вектора Бюргерса петли,

$$Q(\tilde{R}, \tilde{r}_c) = \frac{\ln(8/\tilde{r}_c) - 2}{\pi} - \int_0^\infty \left\{ \frac{\rho_1(k) - 2(2-\nu)\rho_2(k)}{k} I_1[k(1-\tilde{r}_c)] - (1-\tilde{r}_c) I_2[k(1-\tilde{r}_c)] \rho_2(k) \right\} k^3 dk, \quad (55)$$

а  $D = G/[2\pi(1-\nu)]$ , как и выше. В формуле (55) первое слагаемое соответствует энергии дислокационной петли в бесконечной среде, а второе – разности энергий дислокационных петель в бесконечной среде и в цилиндре.

Энергия  $W^{l-f}$  взаимодействия дислокационной петли с упругим полем напряжений несоответствия рассчитывается по формуле [50]

$$W^{l-f} = b_z \int_0^{2\pi} \int_0^{R_0} \sigma_{zz}^f r dr d\theta, \quad (56)$$

где  $\sigma_{zz}^f$  – компонента поля напряжений несоответствия, рассчитываемая по формуле (10с). Подстановка (10с) в (56) дает

$$W^{l-f} = -4\pi^2 (1+\nu) D b_z R_0^2 f (1 - 1/\tilde{R}^2). \quad (57)$$

Энергия  $W^c$  ядра дислокационной петли рассчитывается по формуле [51]  $W^c \approx (Db^2/2)l$ , где  $l = 2\pi R_0$  – длина линии дислокационной петли.

Подставляя выражения для энергий  $W^l$ ,  $W^{l-f}$  и  $W^c$  в неравенство (33), получаем следующее условие формирования дислокационной петли в двухслойном цилиндре:  $|f| > f_{cl}$ , где

$$f_{cl} = \frac{b(\pi(1-\tilde{r}_c)Q(\tilde{R}, \tilde{r}_c) + 1)}{4\pi(1+\nu)R_0(1 - 1/\tilde{R}^2)}. \quad (58)$$

В формуле (58)  $f_{cl}$  представляет собой критическое несоответствие для зарождения дислокационной петли с  $b_z = +b$  (если  $f > 0$ ) или  $b_z = -b$  (если  $f < 0$ ).

Зависимости критического несоответствия  $f_{cl}$  от безразмерной толщины оболочки  $H/b$  для  $\nu = 0.3$ ,  $r_c = b$  и различных значений  $R_0$  приведены на рис. 15.

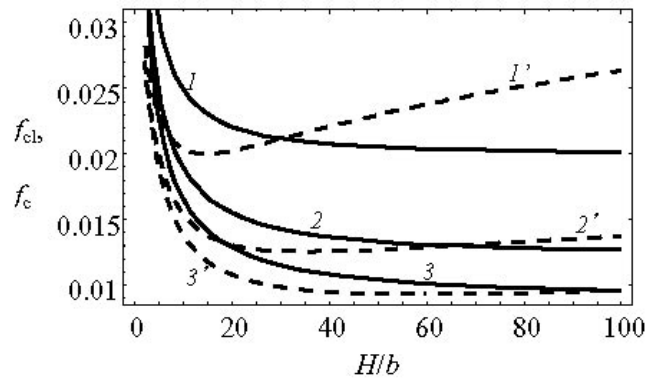


Рис. 15. Зависимости критических несоответствий  $f_{cl}$  (непрерывные линии) и  $f_c$  (штриховые линии) от толщины оболочки  $H/b$  для  $\nu = 0.3$ ,  $r_c = b$  и  $R_0/b = 10, 20, 30$  (кривые 1 и 1', 2 и 2', 3 и 3' соответственно).

Для сравнения на рис. 15 также показаны зависимости критического несоответствия  $f_c$  зарождения прямых межфазных ДН. Как видно на рис. 15, критическое несоответствие  $f_{cl}$  уменьшается с ростом толщины оболочки  $H$ . При  $H \rightarrow \infty$  (случай малого цилиндрического включения) зависимости  $f_{cl}(H/b)$  выходят на

постоянный уровень. Сравнение кривых  $f_{cl}(H/b)$  и  $f_c(H/b)$  показывает, что при фиксированных значениях радиуса ядра оболочки  $R_0$  и несоответствия  $f$  с ростом толщины оболочки  $H$  сначала становится выгодным образование ДН, а лишь затем формирование дислокационных петель. Вместе с тем в случае нанопроволоки с тонким ядром и относительно толстой оболочкой (толщина  $H$  которой хотя бы в 3–4 раза больше радиуса ядра  $R_0$ ) образование дислокационных петель может быть выгодно даже при тех значениях  $f$  и  $R_0$ , при которых формирование ДН энергетически невыгодно.

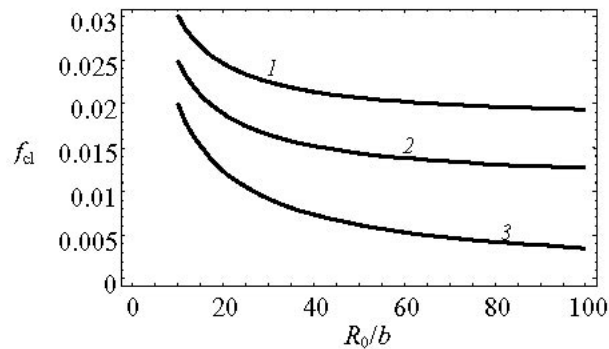


Рис. 16. Критическое несоответствие  $f_{cl}$  как функция радиуса ядра нанопроволоки  $R_0/b$  для  $\nu = 0.3$ ,  $r_c = b$  и  $H/b = 5, 10$  и  $\infty$  (кривые 1, 2 и 3 соответственно).

Зависимости  $f_{cl}(R_0)$  для  $\nu = 0.3$ ,  $r_c = b$  и различных значений  $H$  приведены на рис. 16. Как следует из рис. 16,  $f_{cl}$  уменьшается с ростом  $R_0$  (см. также рис. 15), стремясь при  $R_0 \rightarrow \infty$  (случай тонкой оболочки) к своему наименьшему значению. При  $R_0 \rightarrow \infty$  любые конечные участки поверхности оболочки и границы оболочки и ядра нанопроволоки можно считать локально плоскими. Как следствие, критическое несоответствие  $f_{cl}$  для зарождения дислокационной петли в нанопроволоке с оболочкой толщиной  $H$  и толстым ядром ( $R_0 \gg H$ ) совпадает с критическим несоответствием для зарождения прямой ДН в пленке толщиной  $H$  на толстой плоской подложке. На рис. 15 и 16 также видно, что критическое несоответствие  $f_{cl}$  уменьшается с ростом толщины обоих слоев (ядра и/или оболочки) нанопроволоки. Таким образом, при заданном несоответствии  $f$  зарождение призматической дислокационной петли на границе слоев двухслойной нанопроволоки становится выгодно, если толщины ее слоев (ядра и оболочки) превышают критические значения.

## 6. Выводы

Завершая обсуждение критических условий зарождения различных дефектов несоответствия в двухслойных цилиндрических нанопроволоках вида “ядро–оболочка”, подведем некоторые итоги. Формирование дислокаций несоответствия в двухслойной нанопроволоке возможно при достаточно больших толщинах обоих ее слоев и при фиксированном радиусе нанопроволоки наиболее вероятно, если толщины ее слоев достаточно близки. Зарождение дисклинации несоответствия в двухслойной нанопроволоке может осуществляться, если мощность дисклинации  $\omega$  меньше некоторой критической мощности  $\omega_c$ , которая определяется несоответствием  $f$  и отношением  $R_0/R$  радиуса ядра к наружному радиусу двухслойной нанопроволоки.

Образование призматической дислокационной петли в двухслойной нанопроволоке возможно, если толщины ее слоев (ядра и оболочки) превышают критические значения. Таким образом, отсутствие дислокационных дефектов в нанопроволоках вида “ядро–оболочка” требует, чтобы слои таких нанопроволок имели достаточно малые толщины, которые не слишком сильно отличаются друг от друга.

*Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов” и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 08-01-00225-а) (для И.А.О.), а также Правительства Санкт-Петербурга (для А.Г.Ш.).*

## Литература

- [1] I.A. Goldthorpe, A.F. Marshall, P.C. McIntyre // *Nano Lett.* **8** (2008) 4081.
- [2] Z. Jiang, T. Xie, B.Y. Geng, G.Z. Wang, G.S. Wu, X.Y. Yuan, G.W. Meng, L.D. Zhang // *Inorganic Chemistry Communications* **7** (2004) 812.
- [3] O. Hayden, A.B. Greytak, D. C. Bell // *Adv. Mater.* **6** (2005) 701.
- [4] E.C. Garnett, P. Yang // *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 9224.
- [5] O. Hayden, R. Agarwal, W. Luc // *Nano Today* **3** (2008) 12.
- [6] H.W. Kim, H.S. Kim, M.A. Kebede, H.G. Na, J.C. Yang, C. Lee // *Cryst. Res. Technol.* **44** (2009) 636.
- [7] H. Goto, K. Nosaki, K. Tomioka, S. Hara, K. Hiruma, J. Motohisa, T. Fukui // *Appl. Phys. Express* **2** (2009) 035004.
- [8] J. Xiang, W. Lu, Y. Hu, H. Yan, C.M. Lieber // *Nature* **441** (2006) 489.
- [9] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, *Физическая механика деформируемых наноструктур. Т. 2. Нанослойные структуры* (Янус, СПб, 2005).
- [10] L.J. Lauhon, M.S. Gudiksen, D. Wang, C.M. Lieber // *Nature* **420** (2002) 57.
- [11] H.M. Lin, Y.L. Chen, J. Yang, Y.C. Liu, K.M. Yin, J.J. Kai, F.R. Chen, L.C. Chen, Y.F. Chen, C.C. Chen // *Nano Lett.* **3** (2003) 537.
- [12] C. Tang, L. Bourgeois, Y. Bando, D. Goldberg // *Chem. Phys. Lett.* **382** (2003) 374.
- [13] X.C. Jiang, B. Mayers, T. Herricks, Y.N. Xia // *Adv. Mater.* **15** (2003) 1740.
- [14] S.T. Lee, N. Wang, C.S. Lee // *Mater. Sci. Eng. A* **286** (2000) 16.
- [15] B.K. Teo, C.P. Li, X.H. Sun, N.B. Wong, S.T. Lee // *Inorg. Chem.* **42** (2003) 6723.
- [16] C.F. Wu, W.P. Qin, G.S. Qin, D. Zhao, J.S. Zhang, W. Xu, H.Y. Lin // *Chem. Phys. Lett.* **378** (2003) 368.
- [17] D.F. Liu, S.S. Xie, X.Q. Yan, L.J. Ci, F. Shen, J.X. Wang, Z.P. Zhou, H.J. Yuan, Y. Gao, L. Song, L.F. Liu, W.Y. Zhou, G. Wang // *Chem. Phys. Lett.* **375** (2003) 269.
- [18] L.D. Zhang, G.W. Meng, F. Phillipp // *Mater. Sci. Eng. A* **286** (2000) 34.
- [19] H.F. Zhang, C.M. Wang, L.S. Wang // *Nano Lett.* **2** (2002) 941.
- [20] D.Q. Zhang, A. Alkhateeb, H.M. Han, H. Mahmood, D.N. McIlroy, M.G. Norton // *Nano Lett.* **3** (2003) 983.
- [21] B.D. Min, J.S. Lee, K.G. Cho, J.W. Hwang, H. Kim, M.Y. Sung, S. Kim, J. Park, H.W. Seo, S.Y. Bae, M.S. Lee, S.O. Park, J.T. Moon // *J. Electron. Mater.* **32** (2003) 1344.
- [22] Z.L. Wang, Z.R. Dai, R.P. Gao, Z.G. Bai, J.L. Gole // *Appl. Phys. Lett.* **77** (2000) 3949.
- [23] J.Q. Hu, Y. Bando, Z.W. Liu, T. Sekiguchi, D. Golberg, J.H. Zhan // *J. Amer. Chem. Soc.* **125** (2003) 11306.
- [24] R. Solanki, J. Huo, J.L. Freeouf, B. Miner // *Appl. Phys. Lett.* (2002) 3864.
- [25] Y.Y. Wu, R. Fan, P.D. Yang // *Nano Lett.* **2** (2002) 83.
- [26] Y. Wu, J. Xiang, C. Yang, W. Lu, C.M. Lieber // *Nature* **430** (2004) 61.

- [27] M.L. Lee, E.A. Fitzgerald, M.T. Bulsara, M.T. Currie, A.J. Lochtefeld // *J. Appl. Phys.* **97** (2005) 011101.
- [28] C.K. Maiti, N.B. Chakrabarti, S.K. Ray, In: *Strained Silicon Heterostructures: Materials and Devices* (Institution of Engineering and Technology, Stevenage, 2001), p 496.
- [29] K.K. Fung, B. Qin, X.X. Zhang // *Mater. Sci. Eng. A* **286** (2000) 135.
- [30] Y.S. Kwok, X.X. Zhang, B. Qin, K.K. Fung // *Appl. Phys. Lett.* **77** (2000) 3971.
- [31] В.И. Владимиров, А.Е. Романов, *Дисклинации в кристаллах* (Наука, Л., 1986).
- [32] A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov // *Phys. Stat. Sol. (RRL)* **1** (2007) 271.
- [33] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *J. Phys.: Condens. Matter* **12** (2000) 5391.
- [34] Y. Liang, W.D. Nix, P.B. Griffin, J.D. Plummer // *J. Appl. Phys.* **97** (2005) 043519.
- [35] K.E. Aifantis, A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov // *Philos. Mag.* **87** (2007) 4731.
- [36] А.Г. Шейнерман, Дисс... доктора физ.-мат. наук (СПб, 2008).
- [37] С.П. Тимошенко, Дж. Гудьер, *Теория упругости* (Наука, М., 1979).
- [38] F. Schäffer, In: *Properties of advanced semiconductor materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*, ed. by M.L. Levinstein, S.L. Rumyantsev and M.S. Shur (Wiley, New York, 2001), p. 149.
- [39] В.И. Владимиров, М.Ю. Гуткин, А.Е. Романов // *Поверхность*, No. 6 (1988) 46.
- [40] S.C. Jain, A.H. Harker, R.A. Cowley // *Phil. Mag. A* **75** (1997) 1461.
- [41] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, И.А. Овидько // *ФТТ* **40** (1998) 2059.
- [42] J.R. Willis, S.C. Jain, R. Bullough // *Phil. Mag. A* **62** (1990) 115.
- [43] A. Rocket, C.J. Kiely // *Phys. Rev. B* **44** (1991) 1154.
- [44] A. Atkinson, S.C. Jain // *J. Appl. Phys.* **72** (1992) 2242.
- [45] T.J. Gosling, S.C. Jain, J.R. Willis, A. Atkinson, R. Bullough // *Phil. Mag. A* **66** (1992) 119.
- [46] S.C. Jain, T.J. Gosling, J.R. Willis, D.H.J. Totterdell, R. Bullough // *Phil. Mag. A* **65** (1992) 1151.
- [47] U. Jain, S.C. Jain, J. Nijs, J.R. Willis, R.P. Bullough, R.P. Mertens, R. van Overstraeten // *Solid State Electron.* **36** (1993) 331.
- [48] F. Bailly, M. Barbé, G. Cohen-Solal // *J. Cryst. Growth* **153** (1995) 115.
- [49] M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov // *Phys. Stat. Sol. (a)* **129** (1992) 117.
- [50] T. Mura, In: *Advances in Materials Research*, ed. by H. Herman (Interscience, New-York, 1968), vol. 3, p. 1.
- [51] Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Атомиздат, М., 1974).
- [52] F.Y. Huang // *Appl. Phys. Lett.* **76** (2000) 3046.
- [53] L.A. Zepeda-Ruiz, D. Maroudas, W.H. Weinberg // *J. Appl. Phys.* **85** (1999) 3677.
- [54] L.B. Freund, W.D. Nix // *Appl. Phys. Lett.* **69** (1996) 172.
- [55] Y.H. Lo // *Appl. Phys. Lett.* **59** (1991) 2311.
- [56] F. Glas // *Phys. Rev. B* **74** (2006) 121302(R).
- [57] A.G. Sheinerman, M.Yu. Gutkin // *Phys. Stat. Sol. (a)* **184** (2001) 485.
- [58] F.K. LeGoues, M. Copel, R. Tromp // *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989) 1826.
- [59] F.K. LeGoues, M. Copel, R.M. Tromp, *Phys. Rev. B* **42** (1990) 10690.
- [60] H. Gao, C.S. Ozkan, W.D. Nix, J.A. Zimmerman, L.B. Freund // *Phil. Mag. A* **79** (1999) 349.
- [61] P. Müllner, H. Gao, C.S. Ozkan // *Phil. Mag. A* **75** (1997) 925.
- [62] C.S. Ozkan, W.D. Nix, H. Gao // *Appl. Phys. Lett.* **70** (1997) 2047.
- [63] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Phil. Mag.* **84** (2004) 2103.
- [64] E. Kröner, *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen* (Springer, 1958).
- [65] F. Kroupa // *Czech. J. Phys. B* **10** (1960) 284.



- [66] M. Bullough, R.C. Newmann // *Phil. Mag.* **5** (1960) 921.
- [67] F. Kroupa // *Czech. J. Phys. B* **12** (1962) 191.
- [68] M.S. Marchikowsky, K.S. Sree Harsha // *J. Appl. Phys.* **39** (1968) 1775.
- [69] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов, *Препринт ФТИ N 1019* (Л., 1986).
- [70] I. Demir, J.P. Hirth, H.M. Zbib // *J. Elasticity* **28** (1992) 223.
- [71] T.A. Khraishi, J.P. Hirth, H.M. Zbib, T. Diaz de La Rubia // *Phil. Mag. Lett.* **80** (2000) 95.
- [72] T.A. Khraishi, J.P. Hirth, H.M. Zbib, M.A. Khaleel // *Int. J. Engng. Sci.* **38** (2000) 251.
- [73] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов // *ФТТ* **45** (2003) 1626.
- [74] J. Baštecká // *Czech. J. Phys. B* **14** (1964) 430.
- [75] W. Jäger, M. Rühle, M. Wilkens // *Phys. Stat. Sol. (a)* **31** (1975) 525.
- [76] S.M. Ohr // *J. Appl. Phys.* **49** (1978) 4953.
- [77] J. Dundurs, N.J. Salamon // *Phys. Stat. Sol. (b)* **50** (1972) 125.
- [78] N.J. Salamon, J. Dundurs // *J. Phys. C* **10** (1977) 497.
- [79] N.J. Salamon, M. Comninou // *Phil. Mag. A* **39** (1979) 685.
- [80] N.J. Salamon // *J. Mech. Phys. Sol.* **29** (1981) 1.
- [81] H.Y. Yu, S.C. Sanday // *J. Phys.: Condens. Matter* **3** (1991) 3081.
- [82] Y.T. Chou // *Acta Met.* **11** (1963) 829.
- [83] Y.T. Chou // *Acta Met.* **12** (1964) 305.
- [84] J.R. Willis, R. Bullough, A.M. Stoneham // *Phil. Mag. A* **48** (1983) 95.
- [85] G. Eason, B. Noble, I.N. Sneddon // *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **247** (1955) 529.