

Наномеханика

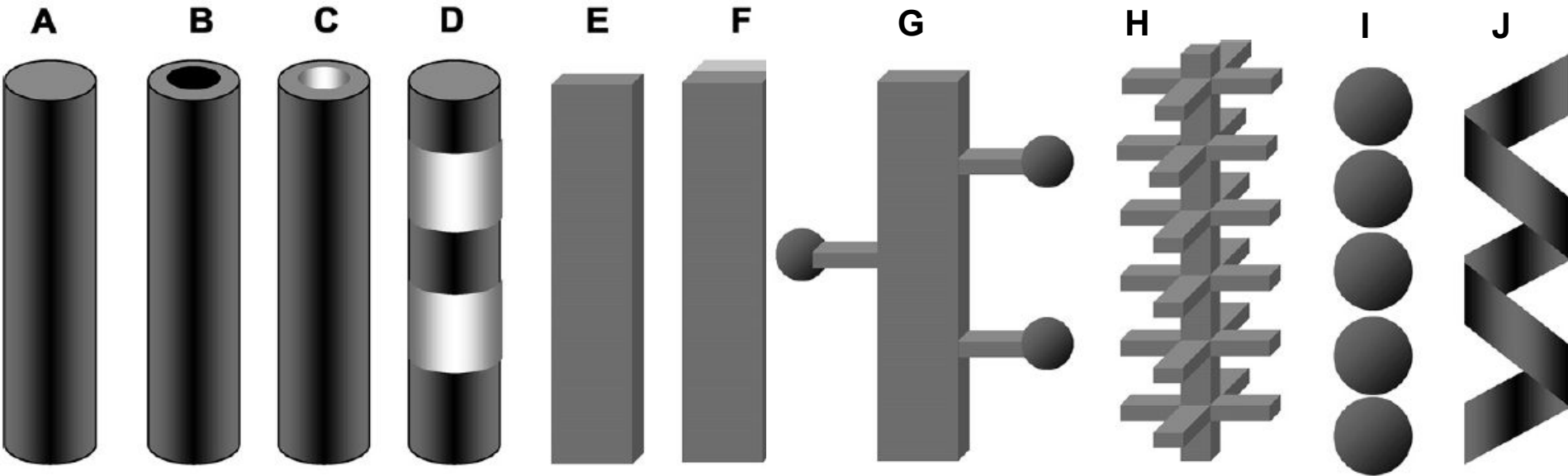
Nanomechanics of materials and systems

Lecture 9

Дислокации в нанопроволоках и
нановключениях.

Dislocations in nanowires and nanoinclusions

Одномерные наноструктуры one-dimensional nanostructures

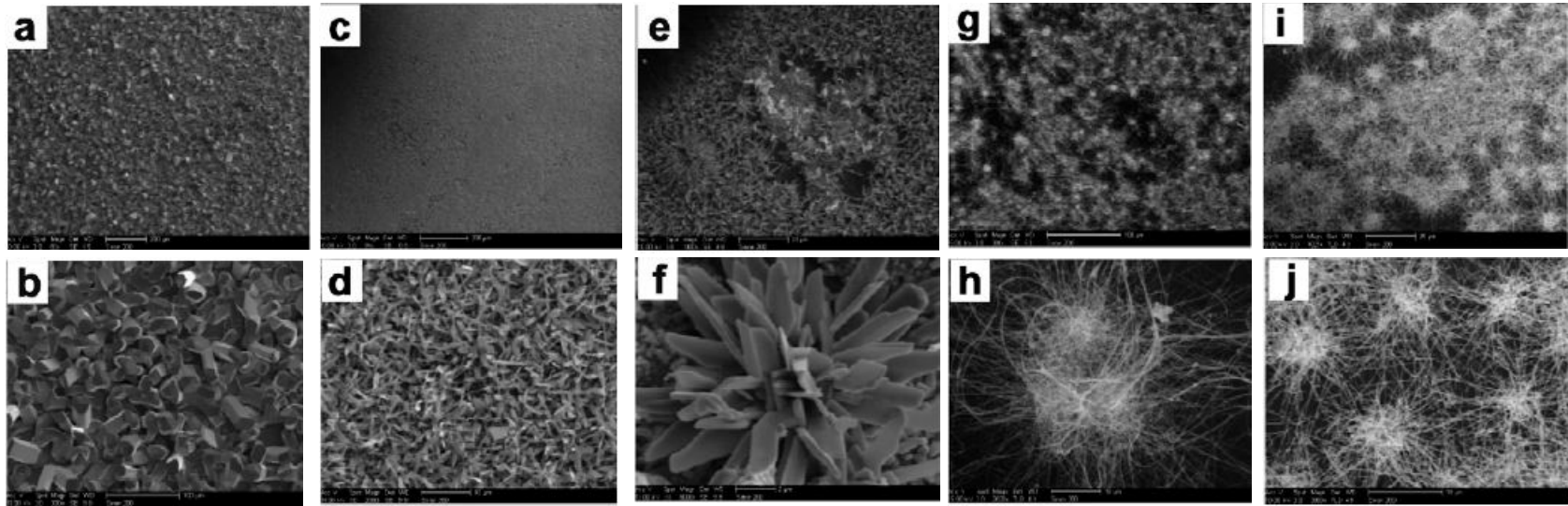


A schematic summary of the kinds of quasi-one dimensional nanostructures:

- (A) Nanowires and nanorods;
- (B) core–shell structures with metallic inner core, semiconductor, or metal-oxide;
- (C) nanotubules/nanopipes and hollow nanorods;
- (D) heterostructures;
- (E) nanobelts/nanoribbons;
- (F) nanotapes;
- (G) dendrites;
- (H) hierarchical nanostructures;
- (I) nanosphere assembly;
- (J) nanosprings.

From: Kolmakov A, Moskovits M.
Annu. Rev. Mater. Res. 2004;

ZnO nanostructures

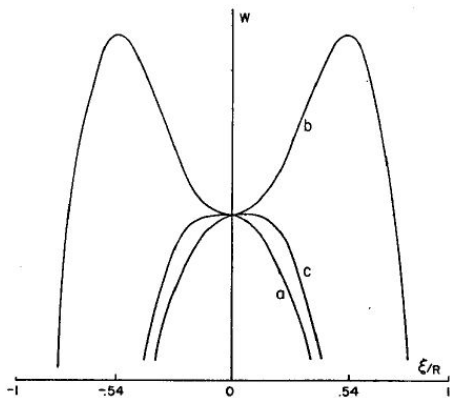
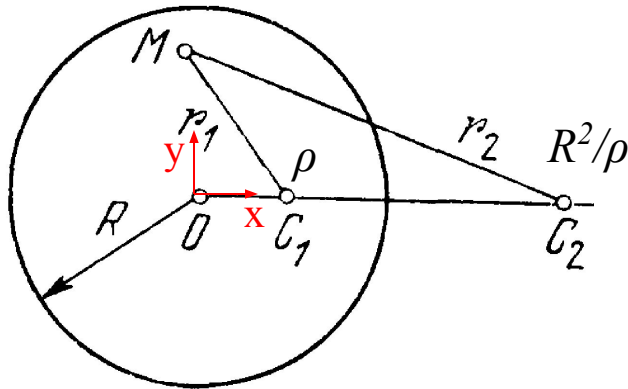
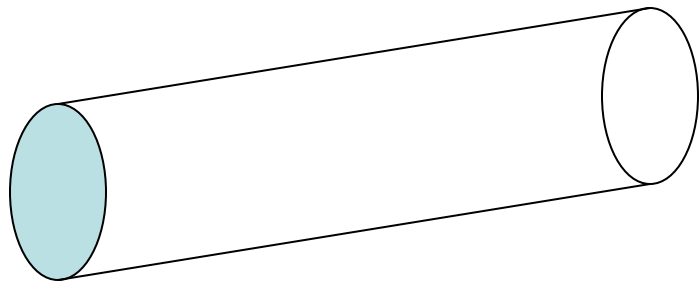


Typical SEM images showing morphologies of ZnO structures: dense filmlike rods (a), dense filmlike nanoplatelets (c), flowerlike nanoplatelets (e), nanobelts (g), and nanowires (i).

The corresponding high magnification images are displayed in (b), (d), (f), (h), and (j), respectively. After C. Ye., X. Fang, Y. Hao, X. Teng, L. Zhang, J. Phys. Chem. B 2005;

Дислокация в нанопроволоке

Dislocation in a nanowire



Винтовая дислокация в бесконечной среде

$$u = (0, 0, w); w = b \frac{\theta}{2\pi}; \sigma_{z\theta} = \frac{\mu b}{2\pi r}; \sigma_{zx} = -\frac{\mu b y}{2\pi r^2}; \sigma_{zy} = \frac{\mu b x}{2\pi r^2};$$

Нормальная составляющая силы на окружности R

$$\tau_n = \sigma_{xz} \frac{x}{R} + \sigma_{yz} \frac{y}{R} = 0$$

Винтовая дислокация в бесконечном цилиндре в точке C_1 ; дислокация изображения в точке C_2

$$\sigma'_{zx} = \frac{b\mu}{2\pi} \left(-\frac{y}{r_1^2} + \frac{y}{r_2^2} \right); \sigma'_{zy} = \frac{b\mu}{2\pi} \left(\frac{x-\rho}{r_1^2} - \frac{x-R^2/\rho}{r_2^2} \right);$$

$$r_2/r_1 = R/\rho \Rightarrow \tau_n = 0$$

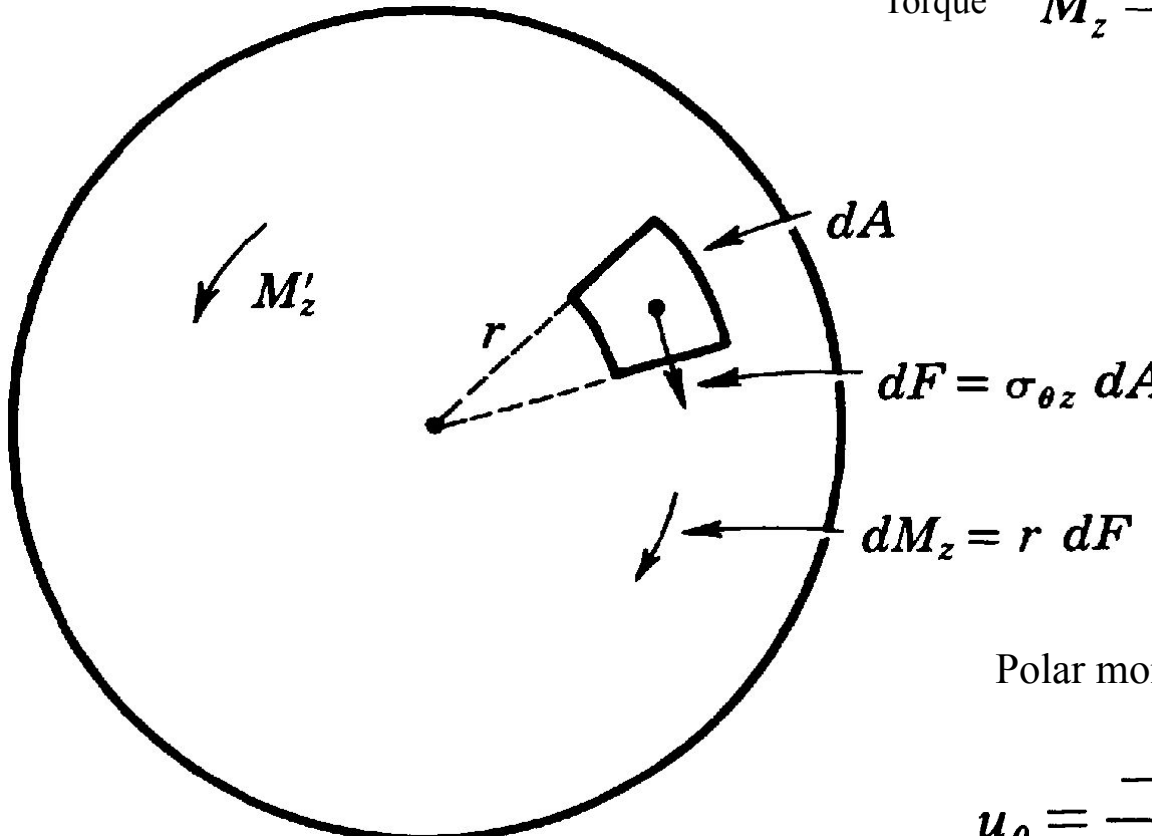
Энергия

$$\frac{W}{L} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln \frac{R^2 - \rho^2}{R r_0}$$

Выталкивающая сила

$$\frac{F}{L} = -\frac{\partial(W/L)}{\partial \rho} = \frac{\mu b^2}{2\pi} \frac{\rho}{R^2 - \rho^2}$$

Скручивание проволоки из-за наличия винтовой дислокации на её оси
 Twist of a nanowire due to dislocation



Torque $M_z = \int_0^R \int_0^{2\pi} r(\sigma_{z\theta} r dr d\theta) = \frac{\mu b R^2}{2}$

$$\sigma'_{z\theta} = \frac{-\mu b}{2\pi r}$$

$$M'_z = -M_z = \frac{-\mu b R^2}{2}$$

Twist angle $\frac{\phi}{L} = \frac{M'_z}{\mu I} = \frac{-b}{\pi R^2}$

Polar moment of inertia $I = \int_A r^2 dA = \frac{\pi R^4}{2}$

$$u_\theta = \frac{-brz}{\pi R^2}$$

$$u_z(r, \theta) = \frac{b\theta}{2\pi}$$

Скручивание будет происходить, если торец проволоки свободен;
 В толстых проволоках скручивание мало.

$$\sigma_{\theta z} = \frac{\mu b}{2\pi r} - \frac{\mu br}{\pi R^2}$$

Дислокация в нанопроволоке со свободной поверхностью

Dislocation in a nanowire with free surface

Крутящий момент Torque

$$M_z = \iint (x\sigma'_{zy} + y\sigma'_{zx}) dx dy = \frac{b\mu}{2}(R^2 - \rho^2)$$

Скручивание на единицу длины проволоки
Twist angle per unit length

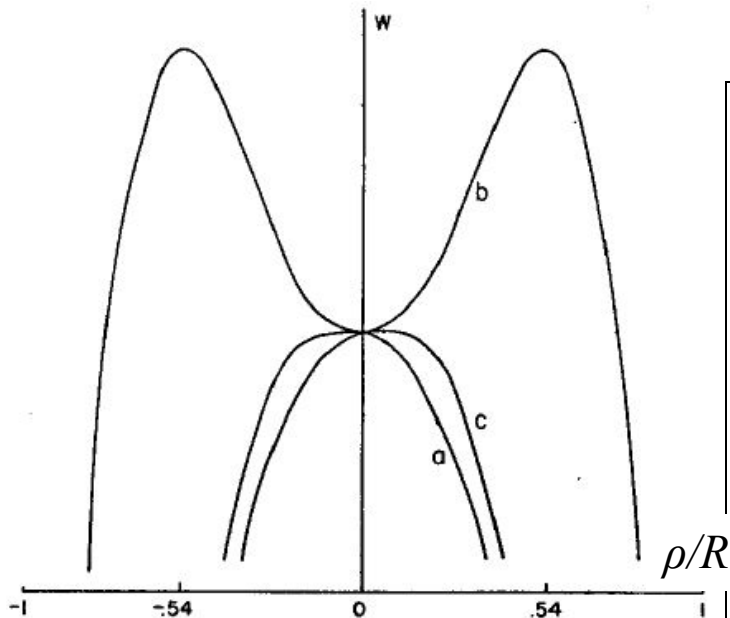
$$\frac{\alpha}{L} = \frac{M_z}{\mu I} = \frac{b}{\pi R^2} (1 - \rho^2 / R^2); I = \int_A r^2 dA = \pi R^4 / 2$$

Напряжения скручивания
Torsion stress

$$\sigma''_{zx} = \frac{b\mu}{\pi} \frac{R^2 - \rho^2}{R^4} y; \sigma''_{zy} = -\frac{b\mu}{\pi} \frac{R^2 - \rho^2}{R^4} x;$$

Энергия с учетом скручивания Energy with torsion

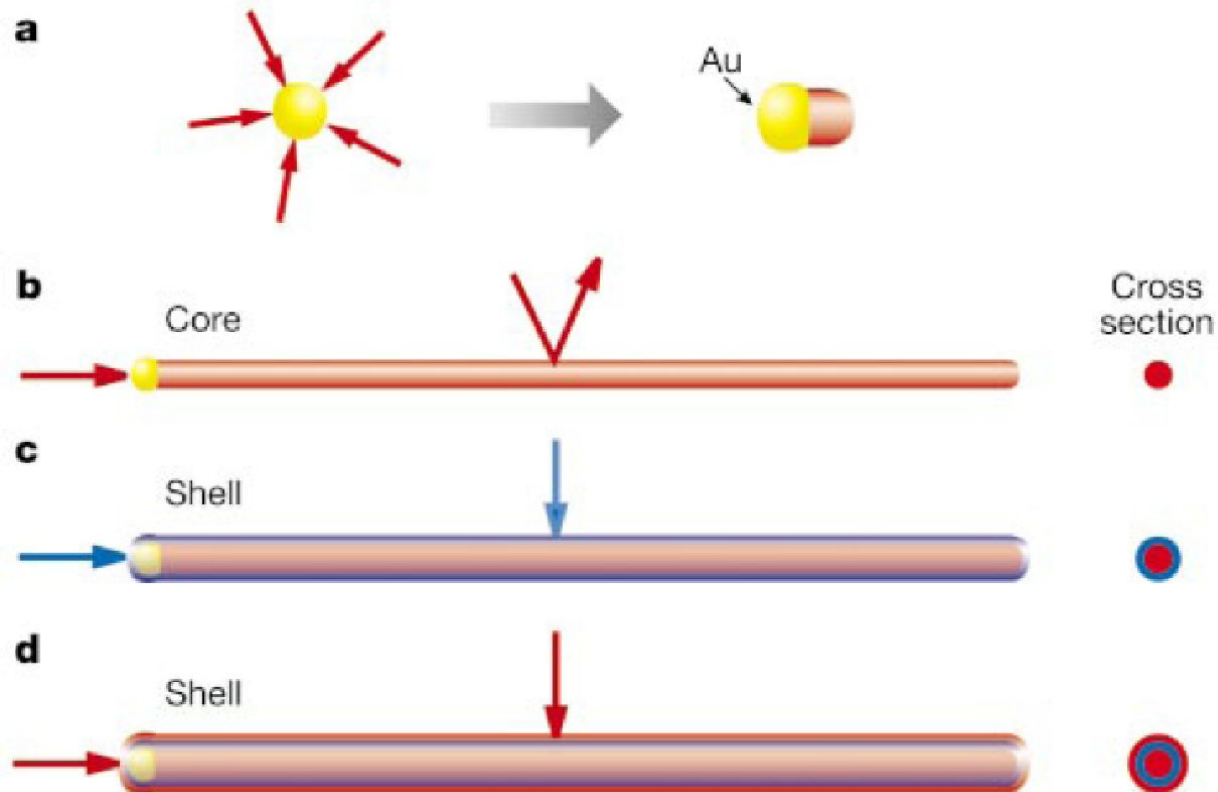
$$\frac{W}{L} = \frac{W_0}{L} + \frac{b^2 \mu}{4\pi} \left[\ln(1 - (\rho/R)^2) - (1 - (\rho/R)^2)^2 \right]$$



Винтовая дислокация в центре нанопроволоки находится в метастабильном состоянии
Screw dislocation has a metastable state in the middle of a nanowire

Краевые дислокации не имеют стабильных или метастабильных состояний в нанопроволоках
Edge dislocation is always unstable in nanowire

Synthesis of core-shell nanowires



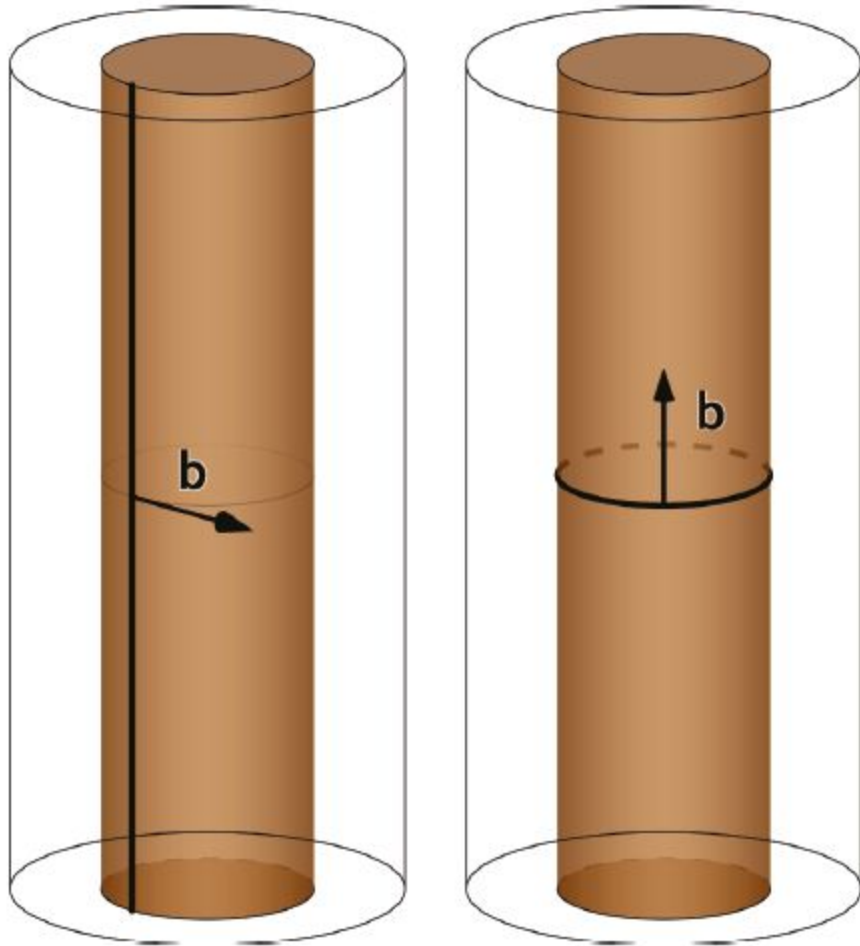
a, Gaseous reactants (red) catalytically decompose on the surface of a gold nanocluster leading to nucleation and directed nanowire growth.

b, One-dimensional growth is maintained as reactant decomposition on the gold catalyst is strongly preferred.

c, Synthetic conditions are altered to induce homogeneous reactant decomposition on the nanowire surface, leading to a thin, uniform shell (blue). **d**, Multiple shells are grown by repeated modulation of reactants. (L.J. Lauhon, et al, Nature 2002.)

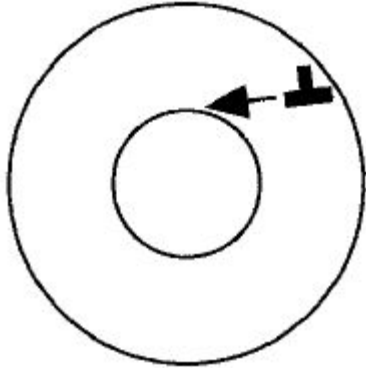
(L.J. Lauhon, et al, Nature 2002.)

Дислокации в структурах core/shall Dislocations in core-shell structures



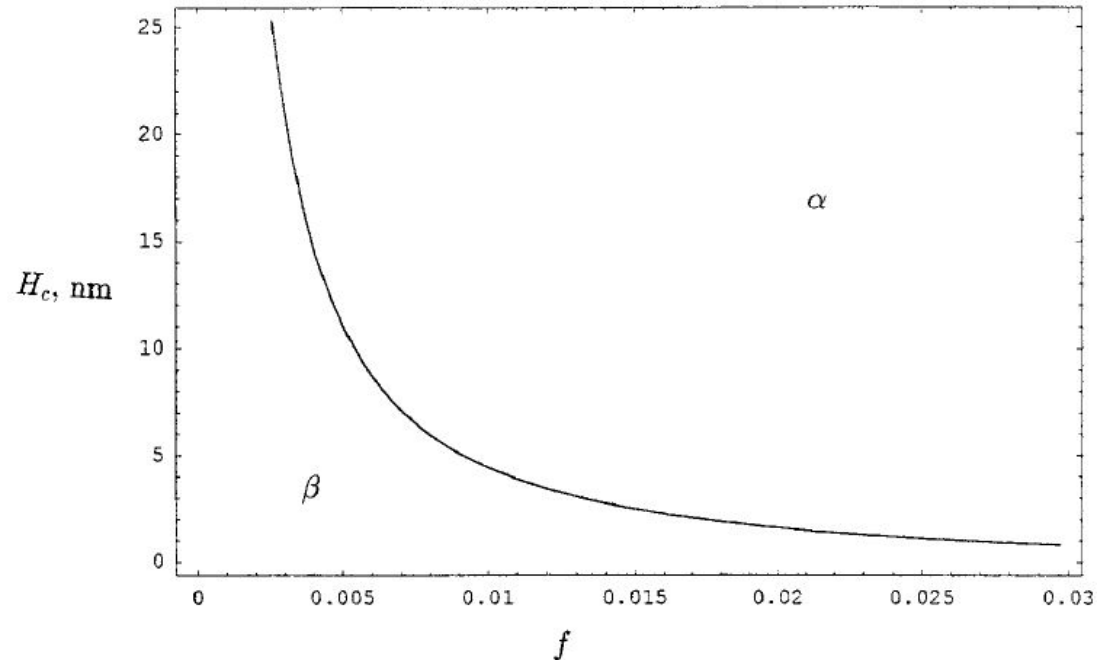
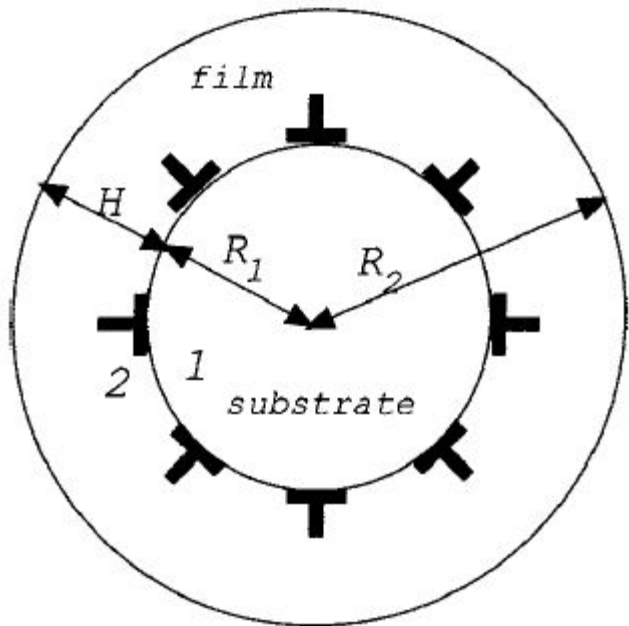
A Schematic Illustration of the Two Types of Edge Dislocations Line (left) and Loop (right), Expected to Be Present in a Core/Shell NW of Two Highly Mismatched Materials

Порог образования продольных дислокаций. Тонкая оболочка.
 Threshold for dislocation formation along the core. Thin shell.

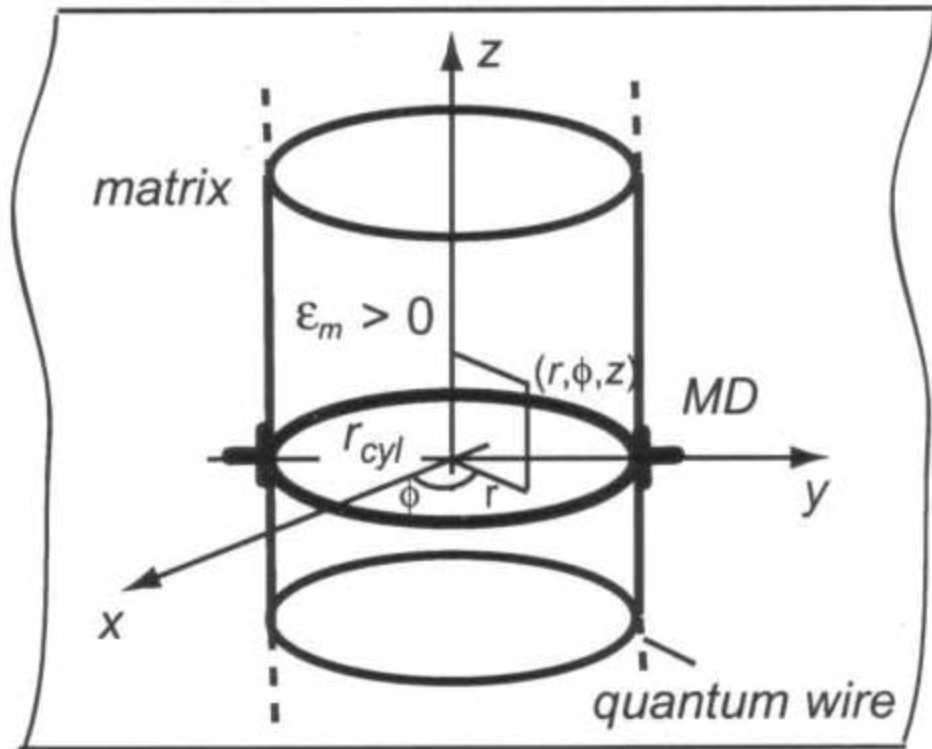


$$H \ll R_1$$

$$\ln \frac{2H_c}{r_0} = 8\pi(1 + \nu)\epsilon_m \frac{H_c}{b}$$



Порог зарождения дислокационной петли на ядре проволоки в бесконечно-толстой оболочке. Threshold for dislocation formation around the core. Thick shell.



$$E_{\text{loop}} \approx \frac{Gb^2 a}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{8\alpha a}{b} - 2 \right),$$

$$\sigma_{rr}^{(in)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(in)} = -\frac{G\varepsilon_m(1+\nu)}{(1-\nu)};$$

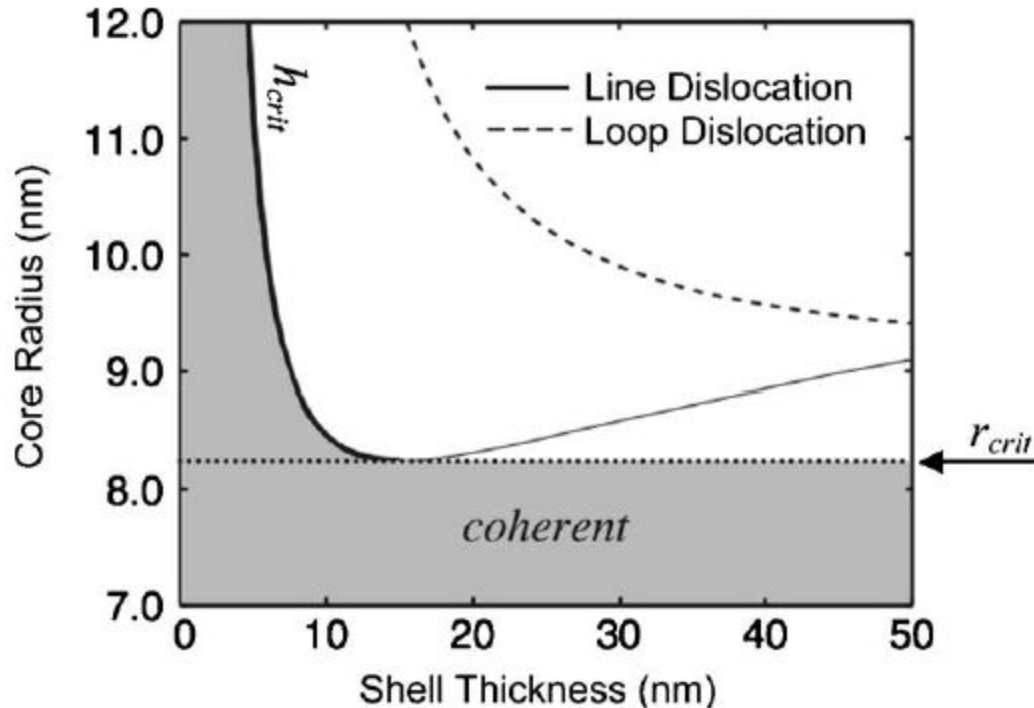
$$\sigma_{zz}^{(in)} = -\frac{2G\varepsilon_m(1+\nu)}{(1-\nu)}.$$

$$\begin{aligned} W &= - \int_{\Omega_{\text{inc}}} \beta_{ij}^{*(\text{loop})} \sigma_{ij} dV = \mp \int_{S_{\text{inc}}} b \sigma_{zz} \Big|_{z=0} dS, \\ &= \frac{2\pi Gb\varepsilon_m(1+\nu)r_{\text{cyl}}^2}{(1-\nu)} \end{aligned}$$

$$r_c = \frac{b}{4\pi(1+\nu)\varepsilon_m} \left(\ln \frac{1.08\alpha r_c}{b} \right)$$

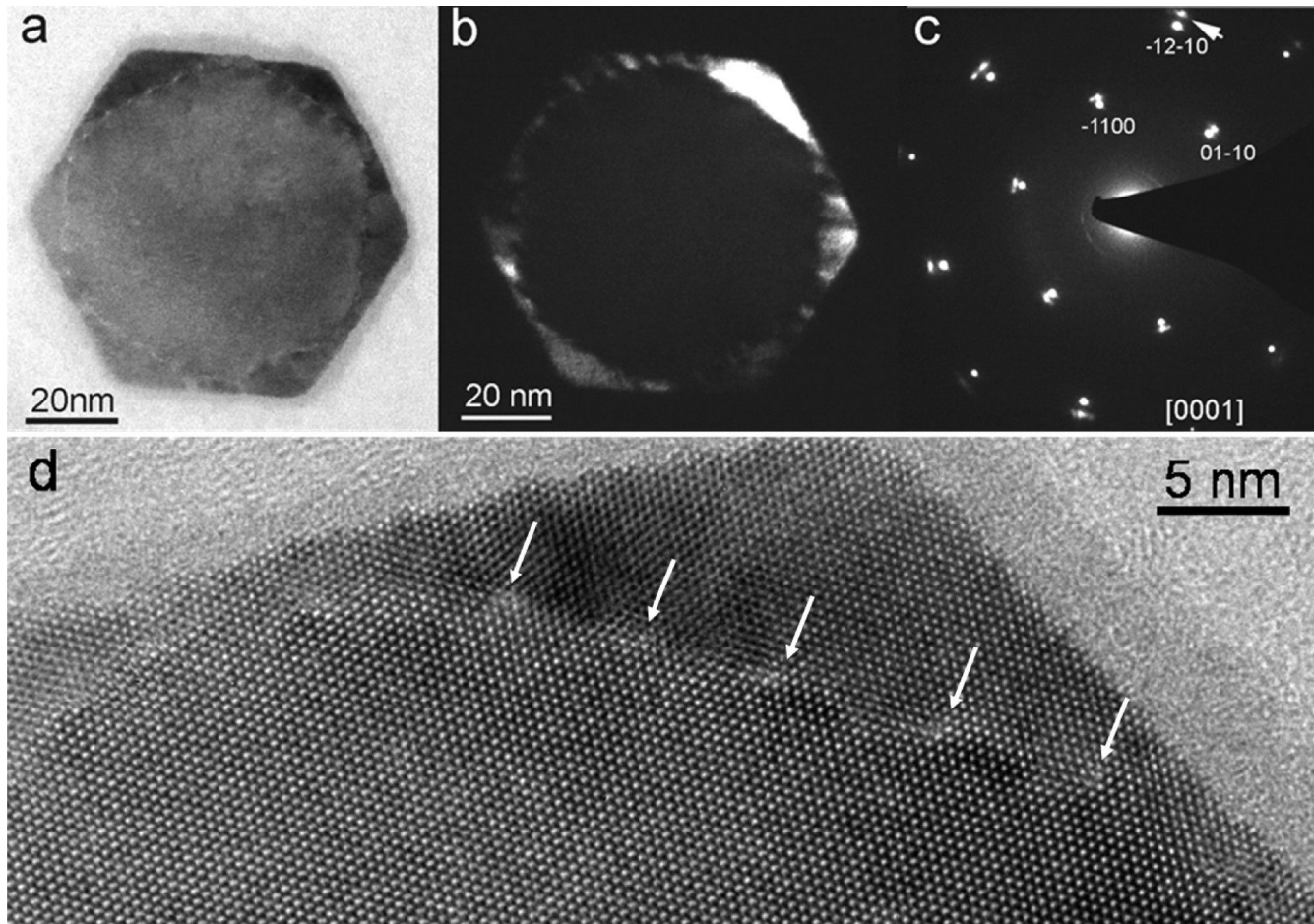
Kolesnikova and Romanov, Phil. Mag. Lett., 2004

Когерентность структур ядро-оболочка Coherency of core-shell structures



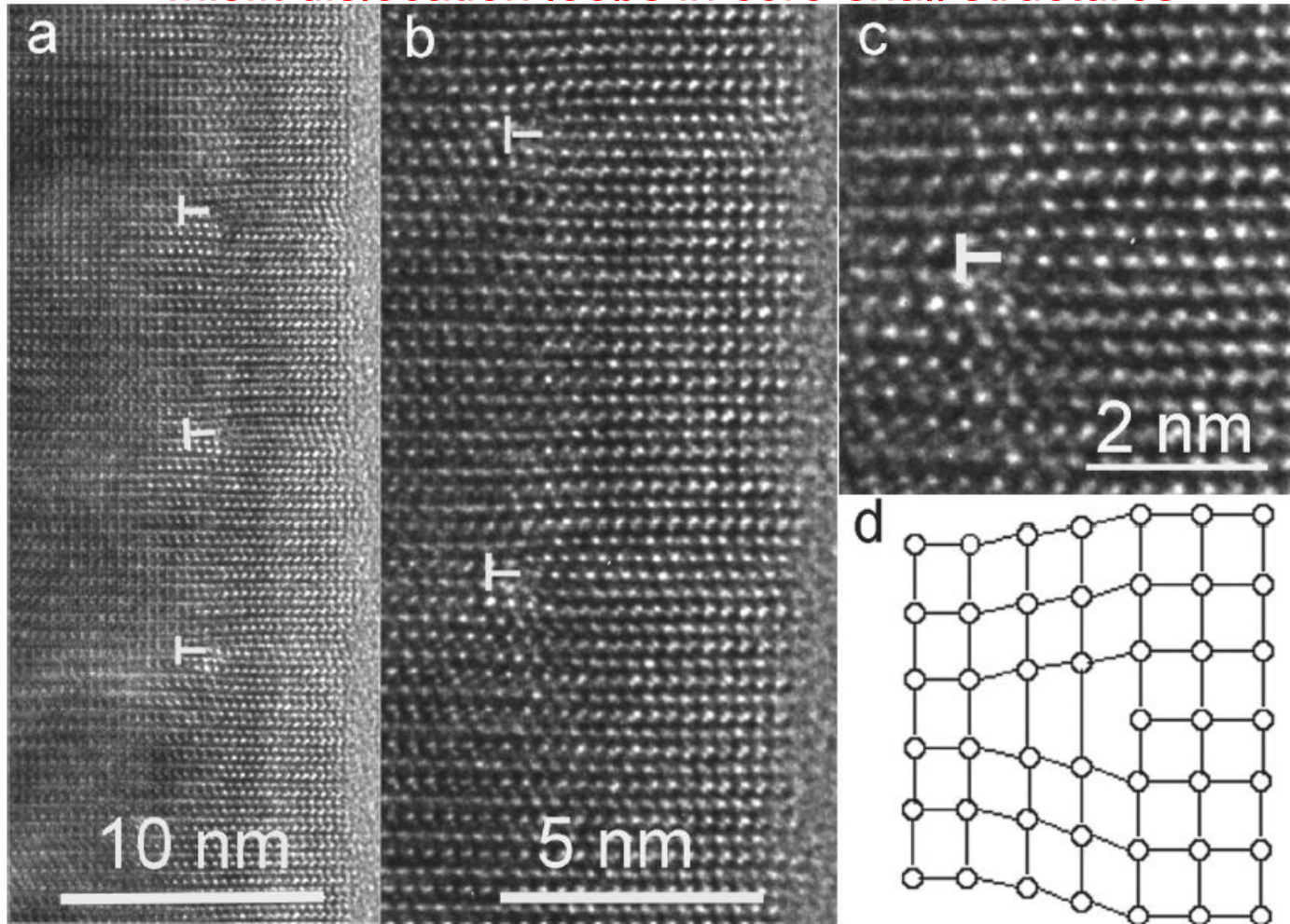
Plot of the critical dimensions calculated for a coaxial nanowire structure comprised of a GaN core and $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ shell. The shaded region of the plot shows all possible strained coherent geometries, which are quantified by a critical core radius r_{crit} and the critical shell thickness curve h_{crit} . [Raychaudhuri and Yu, J. Appl. Phys. **99**, 114308 (2006)]

Продольные дислокации в структурах core/shell Line misfit dislocations in core-shell structures



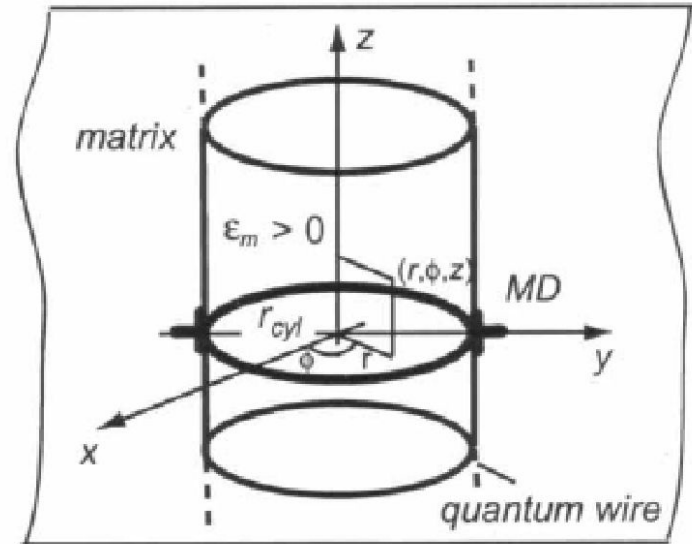
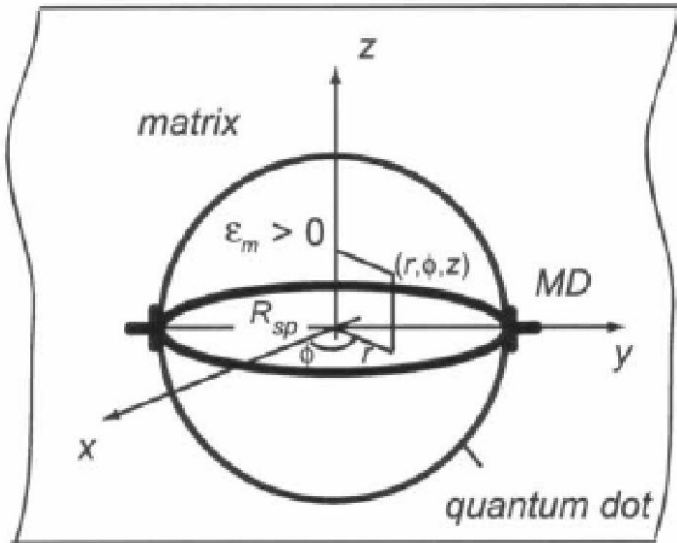
TEM of a cross-section of an InAs/GaAs coreshell NW: (a) bright field image, (b) dark field image obtained using the 1210 GaAs diffraction (indicated by the arrow), (c) electron diffraction from the [0001] zone axis, (d) high magnification of one corner showing the facets build up and the dislocations formation along the interface (seen as bright periodic spots). White arrows point at the dislocation nodes.

Дислокационные петли в структурах core/shell Misfit dislocation loops in core-shell structures



(a) HRTEM image of the core-shell interface region of InAs/GaAs NW, showing three edge dislocations. (b) Higher magnification of two of the dislocations shown in (a). (c) A single dislocation revealing the extra lattice plane in the shell region (dislocations are marked by T). Note that the dislocations Burger's vector points in the $\langle 0001 \rangle$ direction. (d) A schematic drawing of an edge dislocation. (Popovitz-Biro et al. 2011)

Дислокации несоответствия в квантовых точках и проволоках, находящихся в среде. Misfit dislocations in quantum dots and wires.

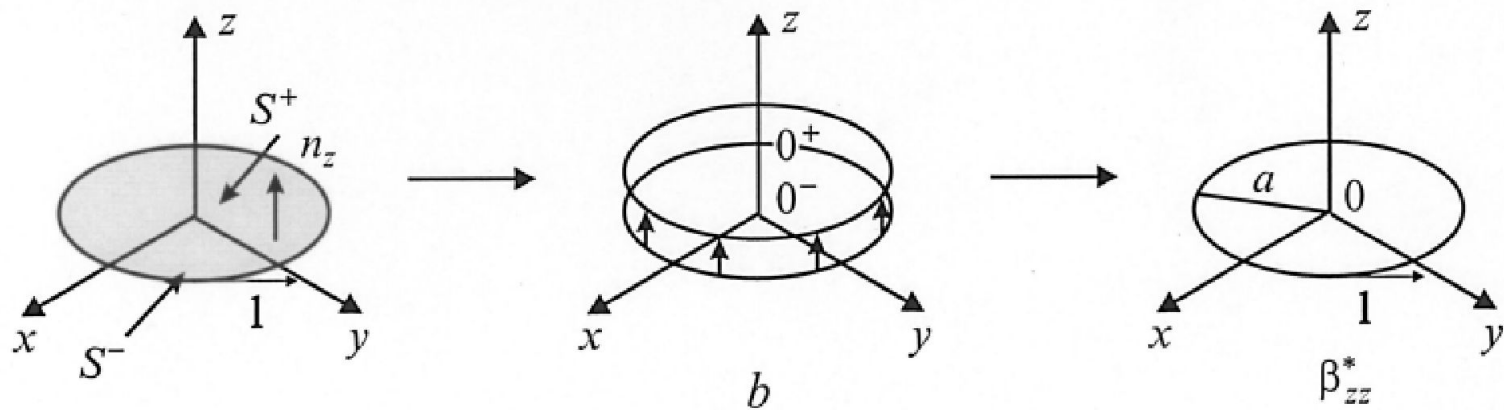


Энергетический критерий формирования петли дислокации несоответствия

$$E_{\text{III}} = \frac{8\pi(1+\nu)}{3(1-\nu)} G \epsilon_m^2 R_{\text{sp}}^3$$

$$E_{\text{inc}} \geq E_{\text{inc}} + E_{\text{loop}} + W$$

Энергия дислокационной петли



$$\beta_{zz}^* = bH\left(1 - \frac{r}{a}\right)\delta(z) \quad \text{функция Хевисайда } H\left(1 - \frac{r}{a}\right) = \begin{cases} 1, & r \leq a, \\ 0, & r > a; \end{cases}$$

Собственная энергия призматической дислокационной петли диаметра d

$$E_l = \frac{Gb^2d}{4(1-\nu)} \left(\ln \frac{4d}{R_{\text{core}}} - 2 \right)$$

Энергия взаимодействия дислокационной петли и включения

$$W = -b \int_{S_l} \sigma_{bb}(r, \varphi, z) dS$$

Критические размеры образования ДН в квантовых точках, квантовых проволоках и тонких пленках

QD

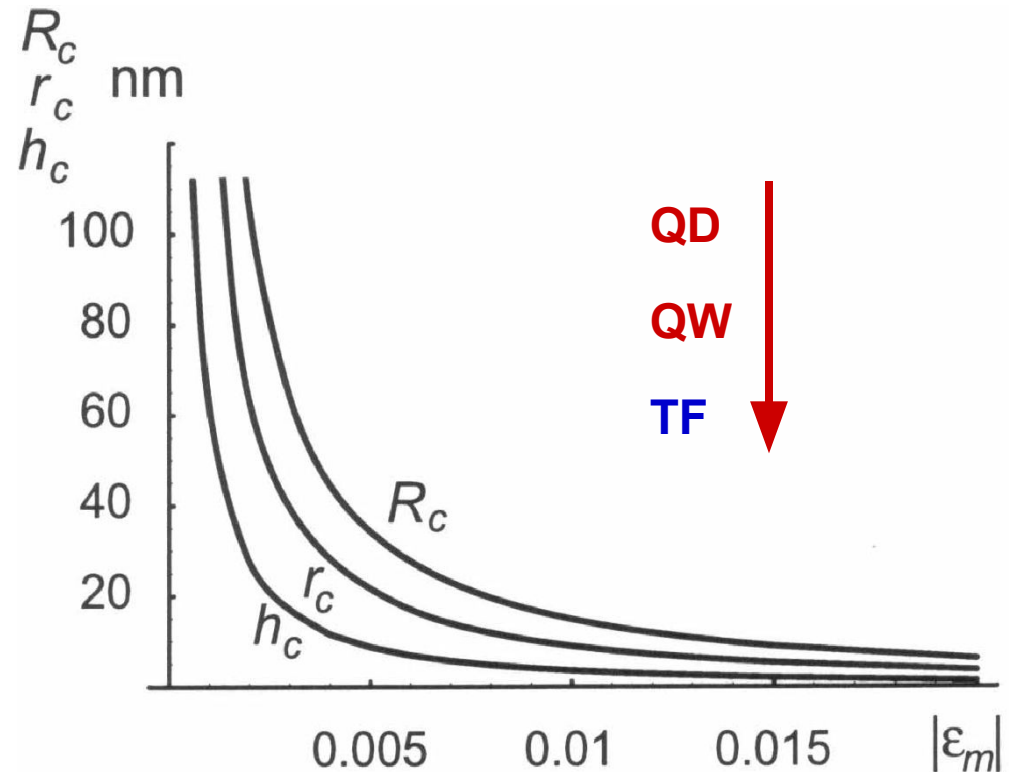
$$R_c = \frac{3b}{8\pi(1+\nu)\epsilon_m} \left(\ln \frac{\alpha R_c}{b} \right)$$

QW

$$r_c = \frac{b}{4\pi(1+\nu)\epsilon_m} \left(\ln \frac{\alpha r_c}{b} \right)$$

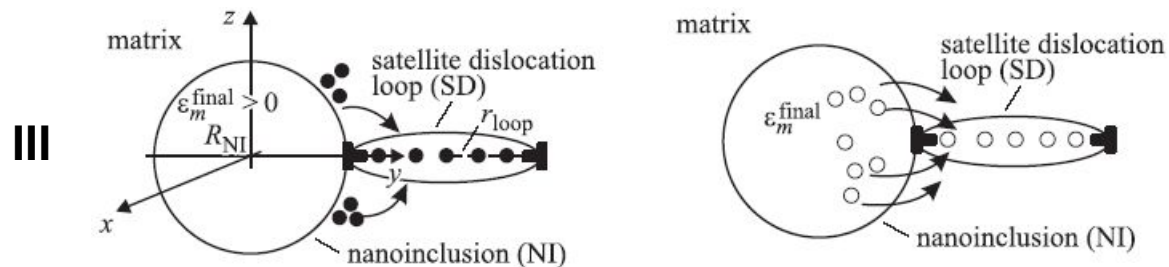
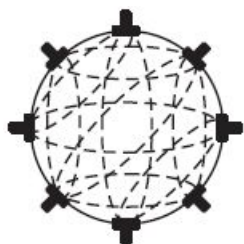
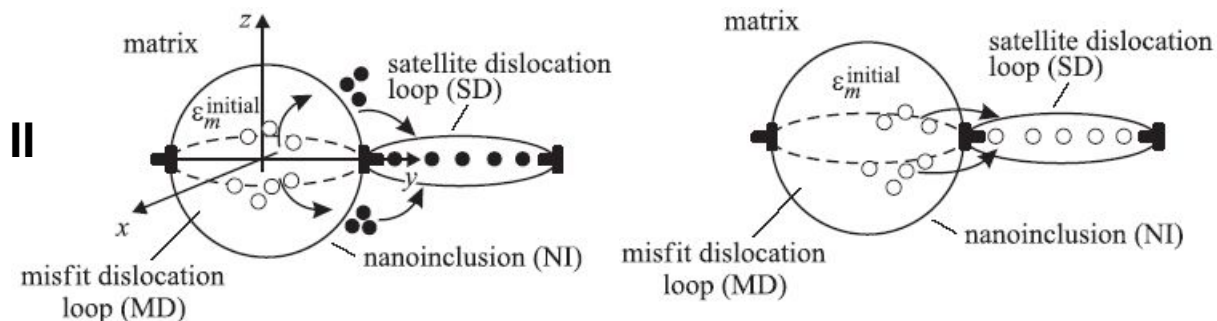
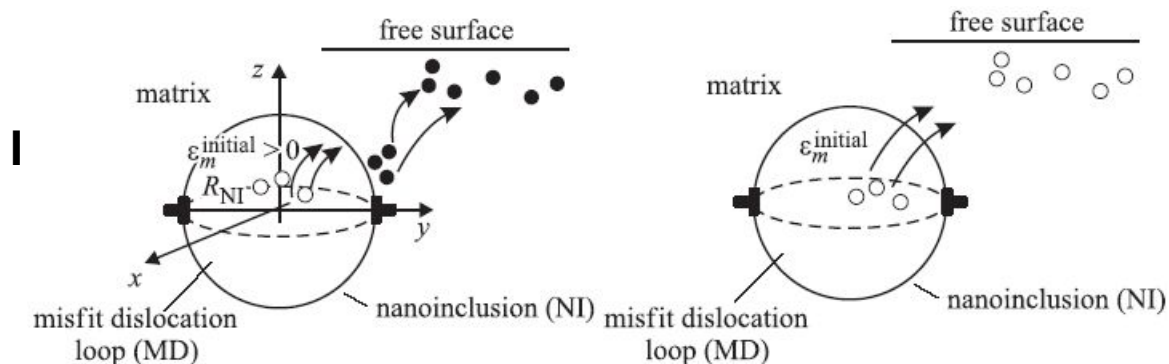
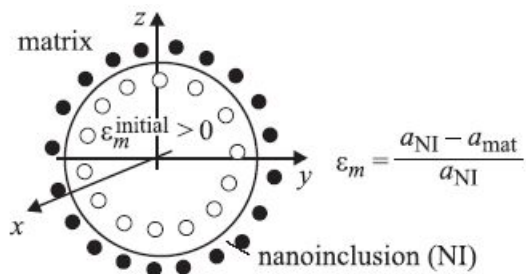
TF

$$h_c = \frac{b}{8\pi(1+\nu)\epsilon_m} \left(\ln \frac{\alpha h_c}{b} \right)$$



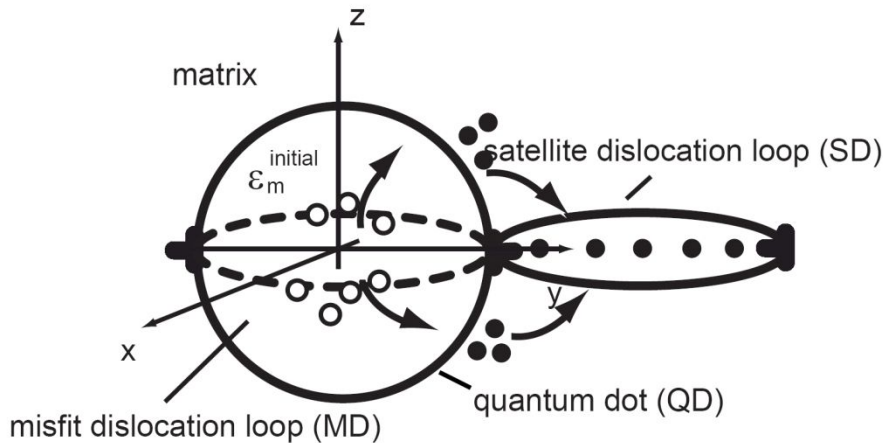
Критические радиусы квантовых точек (QD) R_c , квантовых проволок (QW) r_c , и критическая толщина тонких пленок (TF) h_c для образования дислокаций несоответствия в зависимости от параметра несоответствия [$\nu = 0.3$, $b = 0.3$ нм, $\alpha = 4$]

Образование дислокационных петель-спутников вблизи нановключений. Formation of satellite dislocation loops.



Модель образования пары дислокационных петель: петля несоответствия – петля-сателлит.

Model for pair of misfit and satellite dislocation loops



Петля несоответствия (ДН) формируется на интерфейсе включение/матрица; петля-сателлит (ДС) формируется в матрице за счет атомов, вытесненных из включения

Баланс энергий

$$E_{\text{QD}} \geq E_{\text{QD}} + E_{\text{MD}} + E_{\text{SD}} + W_{\text{QD-MD}} + W_{\text{QD-SD}} + W_{\text{MD-SD}}$$

Баланс вещества

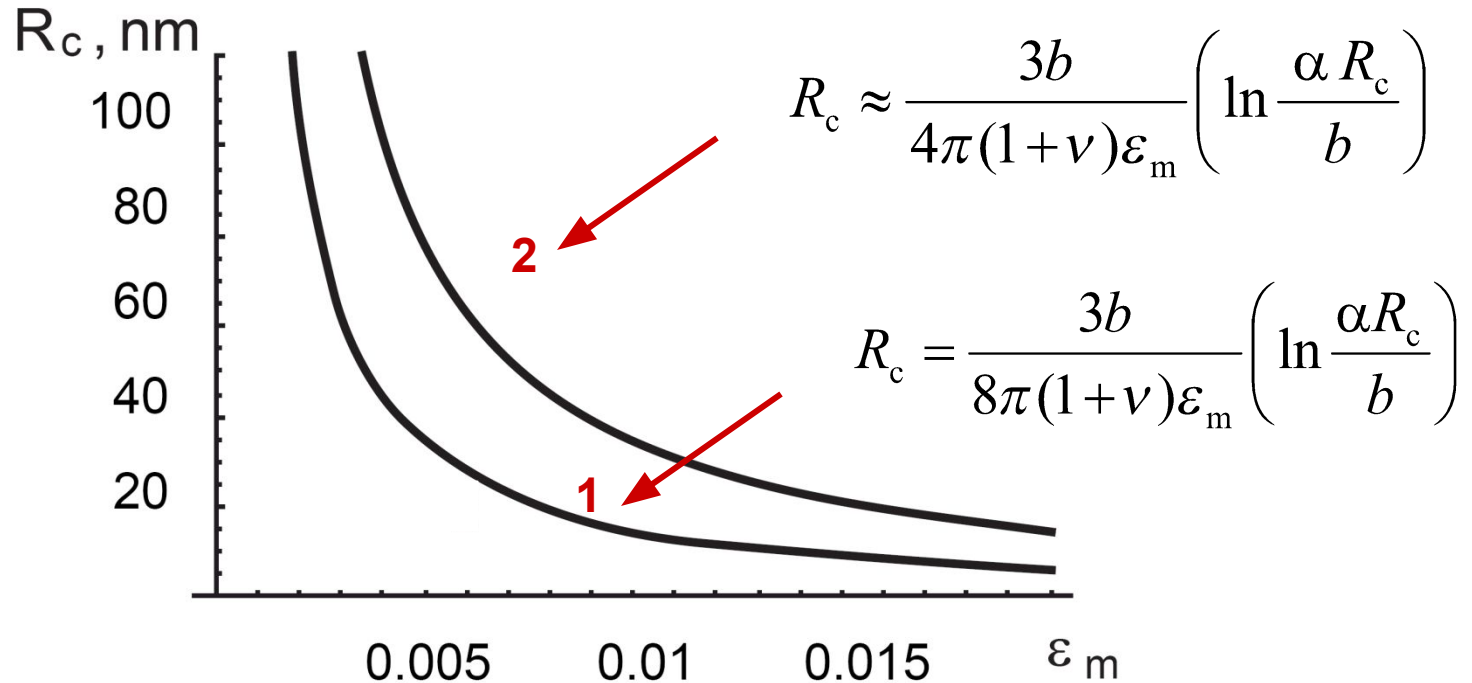
$$b_{\text{MD}} S_{\text{MD}} = b_{\text{SD}} S_{\text{SD}}$$

Результат аналитических расчетов – пороговое значение критического радиуса КТ для зарождения пары дислокационных петель

$$R_c \approx \frac{3b}{4\pi(1+\nu)\epsilon_m} \left(\ln \frac{\alpha R_c}{b} \right)$$

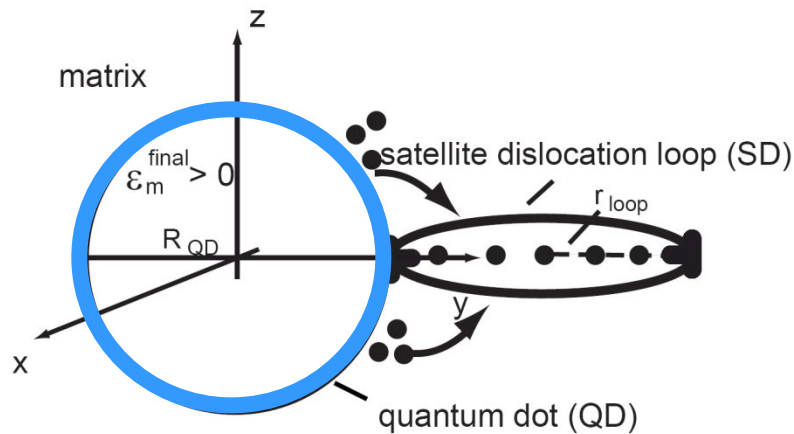
Критические радиусы квантовых точек для формирования дислокаций несоответствия с учетом и без учета сохранения вещества.

Critical radii with and without matter conservation

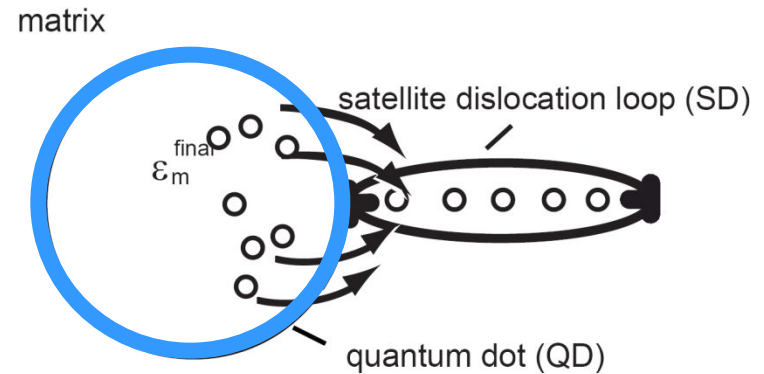


Критические радиусы сферических квантовых точек, R_c для образования дислокационных петель в зависимости от параметра несоответствия: 1- в модели одиночной петли ДН; 2 – в модели пары ДН/ДС петль [$\nu = 0.3$, $b_{MD} = b_{MD} = 0.3$ нм, $\alpha = 4$]

Модель образования петли-сателлита с потерей когерентности по всей поверхности включения



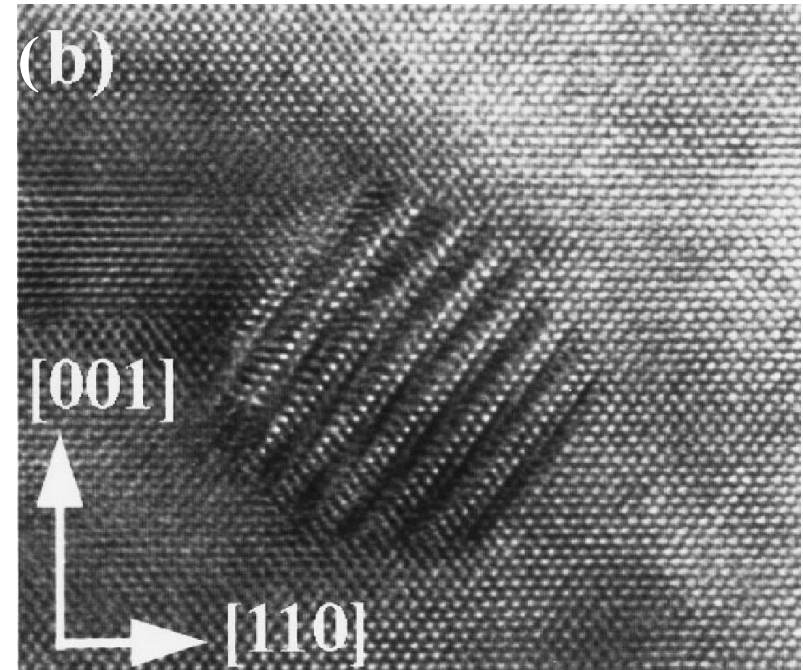
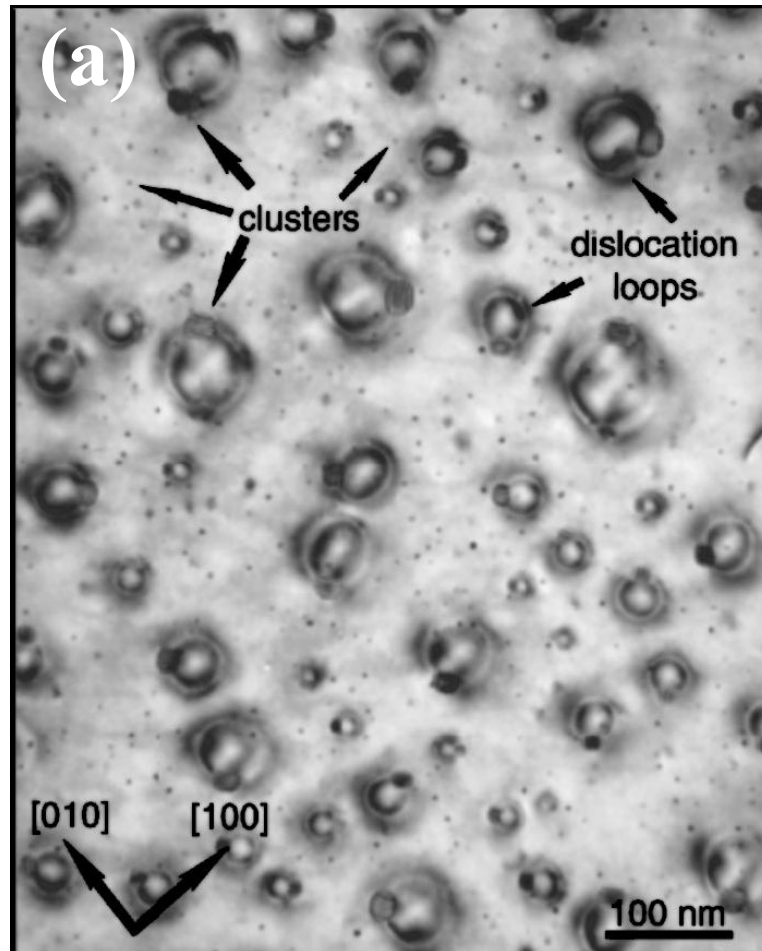
Петля-сателлит образуется из атомов матрицы, прилегающих к интерфейсу



Петля-сателлит образуется из атомов внутренней части нановключения

Условия, учитываемые в модели: усредненное изменения параметра несоответствия на нановключении, энергетический баланс, баланс вещества при образовании ДС петли, кристалло-геометрия петли и нановключения

Образование дислокационных петель-сателлитов на напряженных
квантовых точках SbAs в GaAs.
Satellite dislocation loops in QD-SbAs/GaAs system

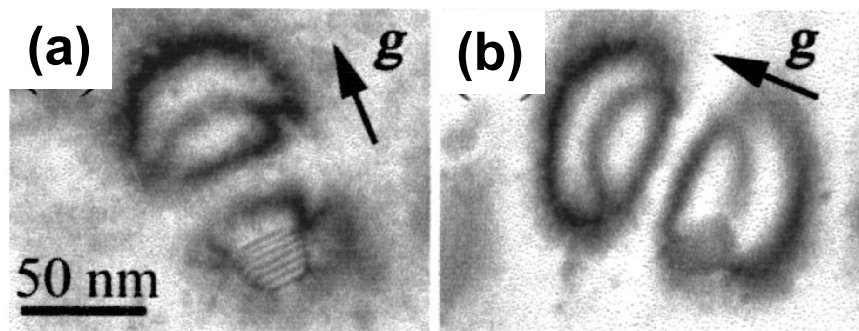


Микрографии релаксированных SbAs квантовых точек в GaAs пленках.

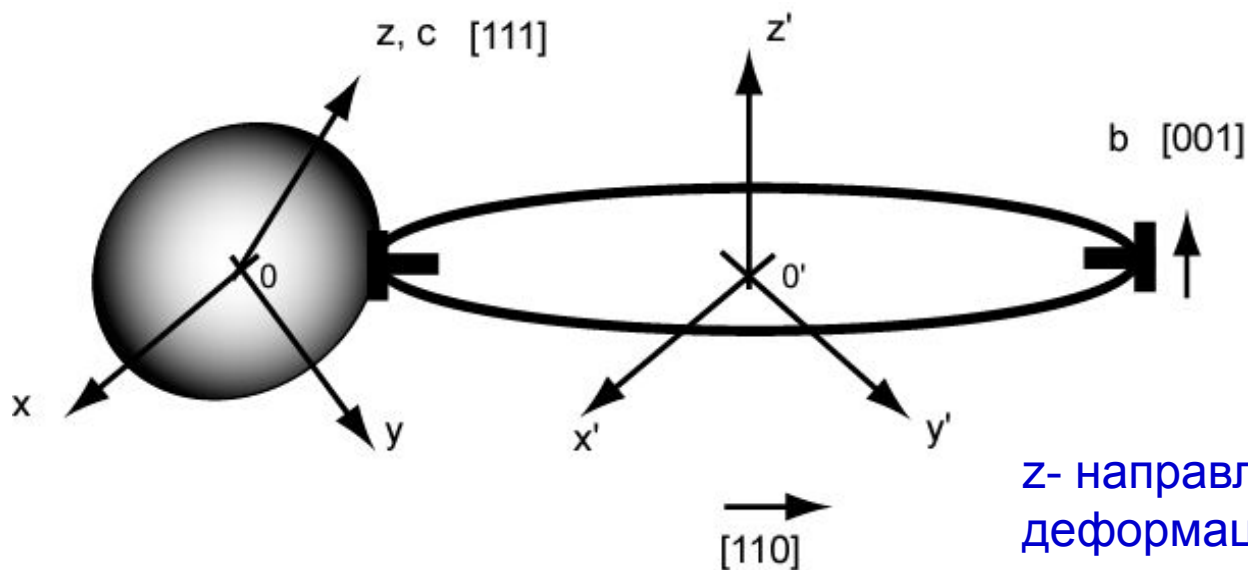
(a) ПЭМ изображение ансамбля нановключений с ассоциированными дислокационными петлями-сателлитами.

(b) ВРЭМ изображение отдельной SbAs квантовой точки.

Кристаллогеометрия системы квантовая точка SbAs – дислокационная петля-сателлит

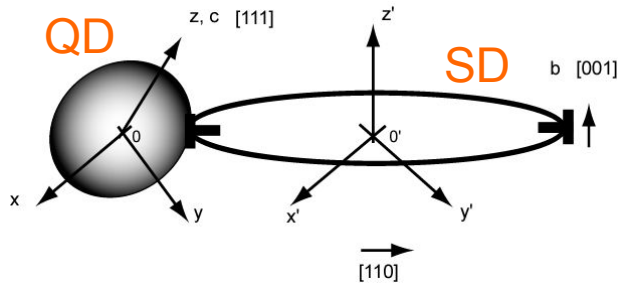


Два ПЭМ снимка, полученные для одной и той же петли в разных дифракционных условиях и доказывающие ее призматический характер



z- направление одноосной деформации в нановключении

Модель образования петли-сателлита с потерей когерентности по всей поверхности включения



Баланс энергий:

$$E_{\text{QD}}^{\text{I,final}} + E_{\text{SD}} + W_{\text{QD-SD}} \leq E_{\text{QD}}^{\text{I,initial}}$$

Баланс вещества:

$$(\epsilon_m^{\text{initial}} - \epsilon_m^{\text{final}})V_{\text{QD}} = bS_{\text{SD}}$$

Минимум энергии системы QD-SD петля:

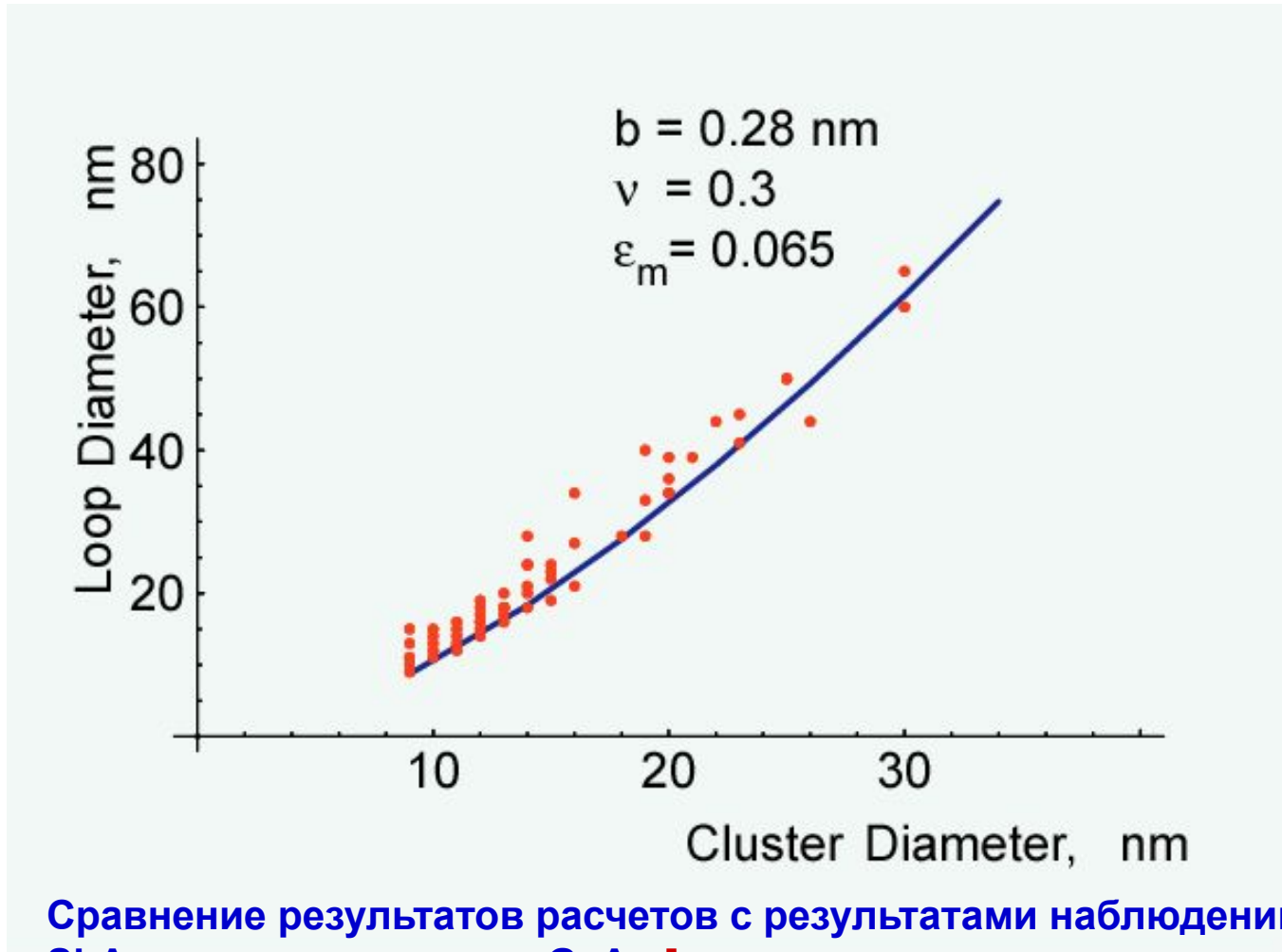
$$\frac{\partial}{\partial R_{\text{SD}}} (E_{\text{QD}}^{\text{I,final}} + E_{\text{SD}} + W_{\text{QD-SD}}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial R_{\text{SD}}} \left(\frac{32\pi}{45(1-\nu)} G(\epsilon_m^{\text{initial}} - \frac{3bR_{\text{SD}}^2}{4R_{\text{QD}}^3})^2 R_{\text{QD}}^3 + \frac{1}{2(1-\nu)} Gb^2 R_{\text{SD}} (\ln \frac{\alpha R_{\text{SD}}}{b}) + W_{\text{QD-SD}}(R_{\text{QD}}, R_{\text{SD}}) \right) = 0$$

Энергия взаимодействия QD-SD петля:

$$W_{\text{QD-SD}} = -b \int_{S_{\text{SD}}} \sigma_{z'z'}^{(\text{out})} \Big|_{z'=0} dS'$$

Верификация предсказаний теории Theory vs. experiment



Сравнение результатов расчетов с результатами наблюдений
SbAs квантовых точек в GaAs [данные эксперимента показаны
точками]

Заключение Conclusion

- Дислокации нестабильны в однородных наноструктурах со свободной поверхностью. Винтовая дислокация имеет метастабильное состояние в центре нанопроволоки.
Screw dislocation is metastable in the center of nanowire.
- Дислокации в гетероструктурах с рассогласованными параметрами решетки обеспечивают релаксацию энергии упругой деформации.
Dislocations reduce elastic energy of heterostructures.
- Формирование дислокаций несоответствия носит пороговый характер.
Formation of dislocations is a threshold process.
- Критические радиусы формирования дислокаций несоответствия увеличиваются с уменьшением размерности наноструктур.
Critical sizes increase when dimension decreases.

Домашнее задание (Homework) 8

Нанопроволока кремния, диаметром 20 нм и длиной 1 мкм в направлении [111], содержит винтовую дислокацию. Определить крутящий момент и угол скручивания проволоки; высоту барьера для дислокации.

Si nanowire with 20 nm in diameter and 1 μm in length along [111] contains a screw dislocation. Calculate torque, twist angle of the wire and barrier height for the dislocation.