

05.1;08.3

Общий подход к расчету упругих характеристик осесимметричных квантовых точек в нитевидных нанокристаллах

© А.Л. Колесникова^{1,2}, Nguyen Van Tuuyen^{2,3}, М.Ю. Гуткин^{1,2,4}, А.Е. Романов²¹ Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия² Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия³ Sao Do University, Chi Linh, Hai Duong, Viet Nam⁴ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alexey.romanov@niuitmo.ru

Поступило в Редакцию 13 ноября 2023 г.

В окончательной редакции 5 декабря 2023 г.

Принято к публикации 7 декабря 2023 г.

Рассмотрен общий подход к расчету упругих полей и энергий квантовых точек (КТ), обладающих собственной дилатационной деформацией и расположенных вдоль оси симметрии нитевидного нанокристалла (ННК). Для этого в рамках классической линейной теории упругости решена задача об упругих полях бесконечно тонкого дилатационного диска, полностью погруженного в матрицу в виде ННК, который представлен в виде прямолинейного бесконечно длинного упругого цилиндра постоянного радиуса. Показано, как с помощью аналитического решения для дилатационного диска могут быть рассчитаны упругие характеристики осесимметричных КТ различной формы в гибридных наноструктурах КТ/ННК.

Ключевые слова: дилатационный диск, нитевидный нанокристалл, упругие поля, запасенная энергия деформации, граничная задача теории упругости.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.06.57303.19800

В настоящее время нитевидные нанокристаллы (ННК), или nanowires (NW), привлекают повышенное внимание исследователей. Благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам [1] ННК находят применение во многих современных приборах и устройствах с принципиально новыми функциональными характеристиками [2,3].

На практике для полупроводниковых ННК могут быть также реализованы гибридные наноструктуры, включающие квантовые диски (КД) и квантовые точки (КТ), или quantum dots (QD) [4,5]. Если КД занимают все сечение ННК, то КТ полностью погружены в объем ННК, т.е. со всех сторон окружены материалом ННК.

Ранее было исследовано упругое поведение КД в гибридных структурах КД/ННК, обусловленное эффектом несоответствия параметров кристаллической решетки материалов КД и ННК [6,7]. Было, например, показано, что из-за экранирующего влияния свободной поверхности ННК КД с дилатацией одного знака притягиваются друг к другу на расстояниях, меньших радиуса ННК [6].

Для КТ, полностью погруженных в ННК, имеется ограниченное количество решений в специальном случае, когда цилиндрические КТ обладают одноосной собственной деформацией (см. краткий обзор в [7]). Для КТ другой формы подобные задачи ранее не рассматривались, несмотря на то что упругие характеристики таких объектов в ННК важны как для анализа структурной эволюции гибридных наноструктур КТ/ННК, так и для исследования их физико-химических свойств. Во многом это объясняется отсутствием аналитических решений для упругих полей и энергий таких КТ в составе ННК.

В настоящей работе описывается подход, позволяющий находить упругие поля и энергии осесимметричных КТ сложной формы в ННК. Для этого решается граничная задача классической линейной теории упругости для дилатационного диска (ДД), или dilatational disk (DD), конечного радиуса, полностью погруженного соосно в упругоизотропный прямолинейный бесконечный цилиндр постоянного радиуса, который служит континуальной механической моделью ННК.

На рис. 1 схематично показаны возможные формы дилатационных КТ, расположенных вдоль оси симметрии цилиндрического ННК: сферическая (а), цилиндрическая (b) и коническая (c). В рамках микромеханики материалов дилатационная КТ представляет собой область внутри ННК, в которой задана собственная дилатационная деформация [8]:

$$\varepsilon_{ii}^* = \varepsilon^* \delta(\Omega)$$

$$(i = x, y, z \text{ или } i = r, \varphi, z;$$

$$\text{нет суммирования по } i), \quad (1)$$

где ε^* — величина решеточного несоответствия, $\delta(\Omega) = 1$ внутри КТ и $\delta(\Omega) = 0$ за ее пределами.

Идея предлагаемого подхода заключается в представлении указанных осесимметричных КТ в виде набора бесконечно тонких ДД; примеры таких „пробных“ дисков для КТ каждой формы приведены на рис. 1. Тогда упругие характеристики КТ можно выразить в интегральном виде. Например, для поля напряжений σ_{ij}

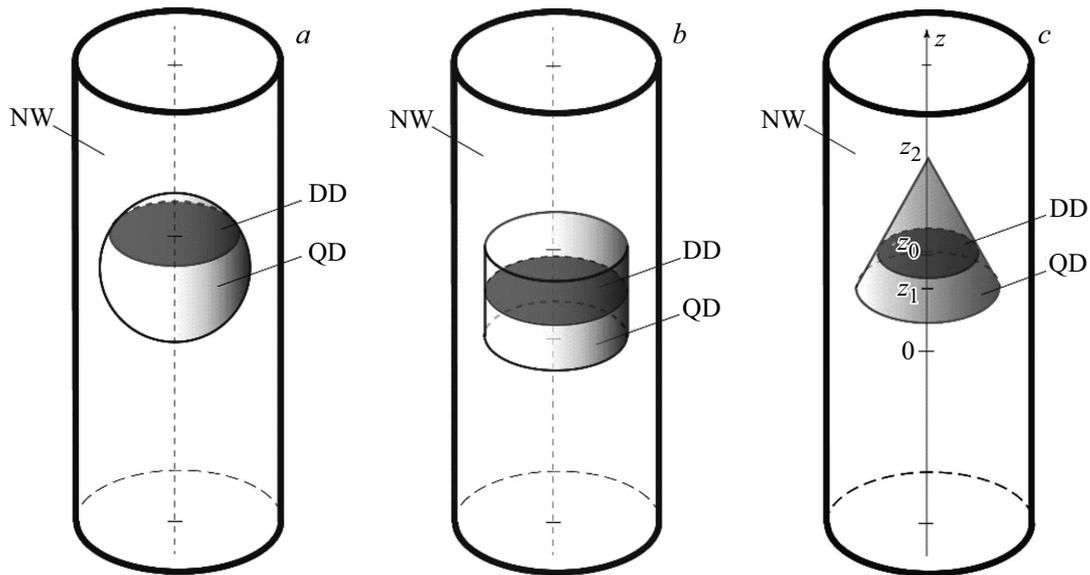


Рис. 1. Осесимметричные КТ (QD) различной формы в ННК (NW): *a* — сферической, *b* — цилиндрической, *c* — конической. DD — пробный бесконечно тонкий дилатационный диск. Для конической КТ указаны пределы интегрирования и положение пробного дилатационного диска по осевой координате z .

имеем

$$\sigma_{ij} = \int_{z_1}^{z_2} {}^d\sigma_{ij}(r, z - z_0; c(z_0))\rho(z_0)dz_0, \quad (2)$$

где интегрирование проводится по высоте КТ (пример дан на рис. 1, *c* для конической КТ), ${}^d\sigma_{ij}(r, z - z_0; c(z_0))$ — поле напряжений пробного ДД с радиусом $c(z_0)$, расположенного на расстоянии z_0 от начала координат, $\rho(z_0)$ — плотность распределения ДД вдоль оси ННК (в настоящей работе она полагается постоянной).

Собственная деформация ДД может быть представлена в виде [8]:

$${}^d\varepsilon_{ii}^* = bH\left(1 - \frac{r}{c}\right)\delta(z), \quad (3)$$

где b — размерный коэффициент, учитывающий величину собственной деформации, сосредоточенной в ДД, $H(\dots)$ — функция Хевисайда, $\delta(z)$ — дельта-функция Дирака. Соотношение, аналогичное формуле (3), можно использовать для определения собственной деформации осесимметричных КТ в предположении постоянной плотности ДД $\rho = \varepsilon^*/b$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ii}^* &= \int_{z_1}^{z_2} {}^d\varepsilon_{ii}^*(r, z - z_0; c(z_0))\rho dz_0 \\ &= \int_{z_1}^{z_2} bH\left(1 - \frac{r}{c(z_0)}\right)\delta(z - z_0)\rho dz = \varepsilon^*\delta(\Omega). \end{aligned} \quad (4)$$

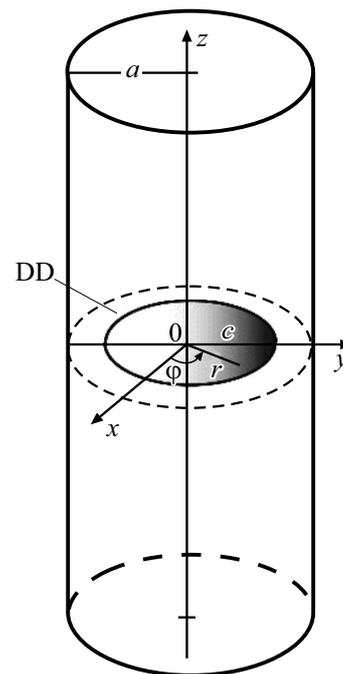


Рис. 2. Дилатационный диск (DD) радиуса c в цилиндре радиуса a . Показаны декартова (x, y, z) и цилиндрическая (r, φ, z) системы координат.

Для реализации предложенного подхода необходимо определить упругие характеристики пробного ДД в геометрии, показанной на рис. 2, решив граничную задачу теории упругости, в которой на упругое поле источника, т. е. ДД, накладываются граничные условия на свободной от усилий боковой поверхности бесконечного цилиндра.

Если ДД находится в бесконечном упругоизотропном континууме, его упругие поля однозначно задаются собственной деформацией (3). С помощью соотношений микромеханики дефектов [9] были найдены напряжения ДД для такого случая [10]:

$$\begin{aligned} \infty^d \sigma_{rr} = & \frac{G(1+\nu)b}{1-\nu} \left[\frac{1}{c} J(1, 0; 1) - \frac{1}{r} J(1, 1; 0) \right] \\ & - \frac{2G(1+\nu)b}{1-\nu} H \left(1 - \frac{r}{c} \right) \delta(z), \end{aligned} \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} \infty^d \sigma_{\varphi\varphi} = & \frac{G(1+\nu)b}{1-\nu} \frac{1}{r} J(1, 1; 0) \\ & - \frac{2G(1+\nu)b}{1-\nu} H \left(1 - \frac{r}{c} \right) \delta(z), \end{aligned} \quad (5b)$$

$$\infty^d \sigma_{zz} = -\frac{G(1+\nu)b}{1-\nu} \frac{1}{c} J(1, 0; 1), \quad (5c)$$

$$\infty^d \sigma_{rz} = -\frac{G(1+\nu)b}{1-\nu} \frac{\operatorname{sgn}(z)}{c} J(1, 1; 1), \quad (5d)$$

$$\infty^d \sigma_{r\varphi} = \infty^d \sigma_{\varphi z} = 0. \quad (5e,f)$$

В этих формулах G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, $\operatorname{sgn}(z)$ — знаковая функция, $J(m, n; p) = \int_0^\infty J_m(\kappa) J_n(\kappa r/c) \exp(-\kappa|z|/c) \kappa^p d\kappa$ — интегралы Лифшица–Ханкеля, которые задаются с помощью функций Бесселя первого рода J_m и J_n [11].

Поле напряжений ДД в цилиндре ${}^d\sigma_{ij}$ может быть построено как сумма поля напряжений ДД в бесконечной среде $\infty^d\sigma_{ij}$ (5) и дополнительного поля напряжений „изображения“ ${}^i\sigma_{ij}$:

$${}^d\sigma_{ij} = \infty^d\sigma_{ij} + {}^i\sigma_{ij}, \quad i = x, y, z \text{ или } i = r, \varphi, z. \quad (6)$$

Дополнительное поле ${}^i\sigma_{ij}$ должно быть найдено в форме, не имеющей сингулярности внутри цилиндра и обеспечивающей выполнение следующих граничных условий на его боковой поверхности $r = a$:

$$(\infty^d\sigma_{rr} + {}^i\sigma_{rr})|_{r=a} = 0, \quad (7a)$$

$$(\infty^d\sigma_{rz} + {}^i\sigma_{rz})|_{r=a} = 0. \quad (7b)$$

Поле напряжений изображения ${}^i\sigma_{ij}$ отыскивается с использованием общего решения, полученного Лурье [12] для упругой задачи об осесимметрично нагруженном цилиндре. Опуская детали аналитического расчета, приведем конечный результат:

$$\begin{aligned} {}^i\sigma_{rr} = & \frac{2G(1+\nu)b}{(1-\nu)\pi a} \int_0^\infty \left[\beta(\tilde{C}_1(3-2\nu) - \tilde{D}_1\beta) I_0 \right. \\ & \left. + \frac{1}{\tilde{r}} (\tilde{C}_1(4\nu - \tilde{r}^2\beta^2 - 4) + \tilde{D}_1\beta) I_1 \right] \cos\beta\tilde{z} d\beta, \end{aligned} \quad (8a)$$

$$\begin{aligned} {}^i\sigma_{\varphi\varphi} = & \frac{2G(1+\nu)b}{(1-\nu)\pi a} \int_0^\infty \left[\tilde{C}_1\beta(2\nu-1)I_0 - \frac{1}{\tilde{r}} \right. \\ & \left. \times (4\tilde{C}_1(\nu-1) + \tilde{D}_1\beta)I_1 \right] \cos\beta\tilde{z} d\beta, \end{aligned} \quad (8b)$$

$$\begin{aligned} {}^i\sigma_{zz} = & \frac{2G(1+\nu)b}{(1-\nu)\pi a} \\ & \times \int_0^\infty \beta[(2\tilde{C}_1\nu + \tilde{D}_1\beta)I_0 + \tilde{r}\tilde{C}_1\beta I_1] \cos\beta\tilde{z} d\beta, \end{aligned} \quad (8c)$$

$$\begin{aligned} {}^i\sigma_{rz} = & \frac{2G(1+\nu)b}{(1-\nu)\pi a} \\ & \times \int_0^\infty \beta[\tilde{r}\tilde{C}_1\beta I_0 + (2\tilde{C}_1(\nu-1) + \tilde{D}_1\beta)I_1] \sin\beta\tilde{z} d\beta, \end{aligned} \quad (8d)$$

$${}^i\sigma_{r\varphi} = {}^i\sigma_{\varphi z} = 0, \quad (8e,f)$$

где

$$\tilde{C}_1 = I_1^* \tilde{r} / [\beta^2 I_0^2 - (\beta^2 - 2\nu + 2) I_1^2],$$

$$\tilde{D}_1 = -\tilde{C}_1 [\beta^2 I_0 K_0 + (\beta^2 - 2\nu + 2) I_1 K_1 + 2\nu - 2] / \beta,$$

$I_1^* = I_1(\tilde{r}\beta)$, $I_0 = I_0(\tilde{r}\beta)$ и $I_1 = I_1(\tilde{r}\beta)$ — модифицированные функции Бесселя первого рода, $K_0 = K_0(\beta)$ и $K_1 = K_1(\beta)$ — модифицированные функции Бесселя второго рода (функции Макдональда), $\tilde{t} = c/a$, $\tilde{r} = r/a$, $\tilde{z} = z/a$, $\beta \geq 0$, a — введенный выше радиус цилиндра.

Суммируя найденное поле напряжений изображения и поле напряжений ДД в бесконечной среде согласно формуле (6), получаем искомый результат для напряжений ДД в упругоизотропном цилиндре. На рис. 3, *a* представлен пример использования найденного аналитического решения для построения карты радиального напряжения ДД ${}^d\sigma_{rr}$, для которого выполняется граничное условие (7а). Для сравнения на рис. 3, *b* приведена также карта радиального напряжения ДД $\infty^d\sigma_{rr}$ для случая бесконечного пространства. Аналогичные карты (здесь не показаны) построены и для остальных компонент тензора напряжений, заданных формулами (5) и (8).

Найденное решение позволяет провести расчет запасенной энергии упругой деформации ДД. Такая энергия вычисляется с использованием формулы Муры [9]:

$$\begin{aligned} {}^dE = & -\frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^* dV = -\frac{1}{2} \int_V (\infty^d\sigma + {}^i\sigma) bH \\ & \times \left(1 - \frac{r}{c} \right) \delta(z) dV = \infty^dE + {}^idE, \end{aligned} \quad (9)$$

где ∞^dE — энергия ДД в бесконечной среде, idE — поправка, обусловленная экранирующим действием свободной поверхности цилиндра (ННК), а интегрирование проводится по всему объему цилиндра V .

В силу сингулярной модели ДД слагаемое ∞^dE формально оказывается равно бесконечности, что не имеет

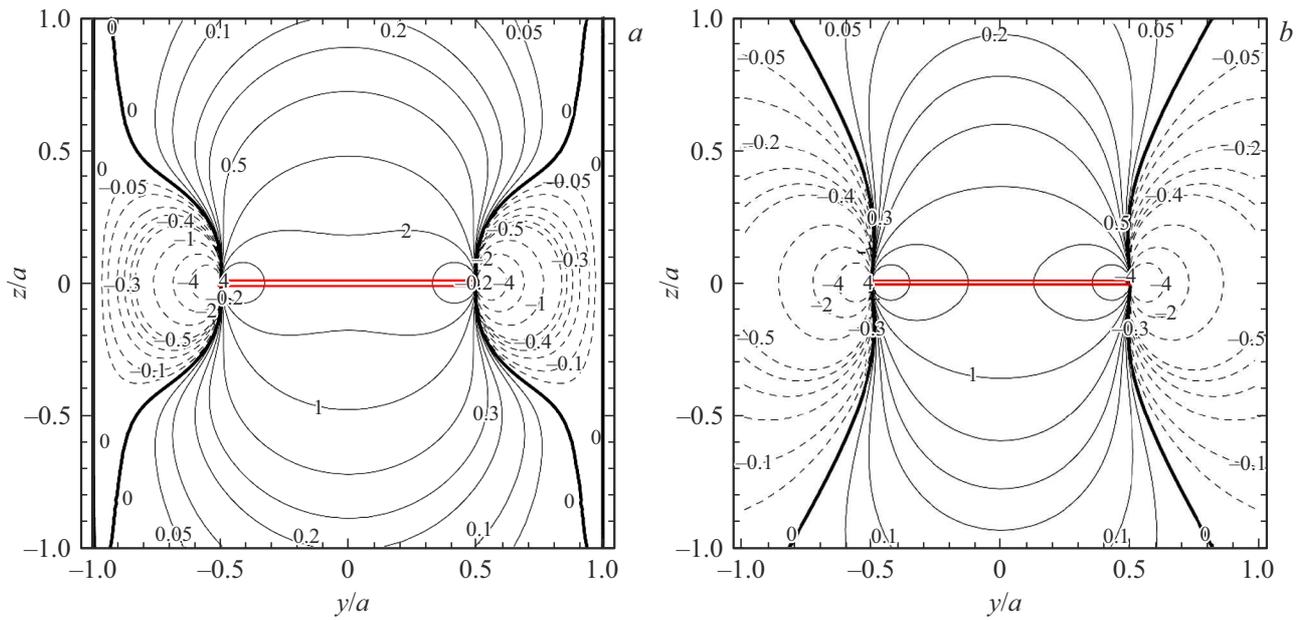


Рис. 3. Карты радиальных напряжений дилатационного диска в плоскости $y-z$. a — ${}^d\sigma_{rr}$ в цилиндре, b — ${}^\infty\sigma_{rr}$ в бесконечной среде. Красной двойной линией обозначено сечение дилатационного диска (цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи). Напряжения даны в единицах Gb/a ; $\nu = 0.3$.

физического смысла. Вместо этого возьмем достаточно тонкий ДД конечной толщины $h \ll c$, для которого можно использовать формулу для энергии ограниченного по высоте цилиндрического дилатационного включения [13]:

$${}^\infty E \approx \frac{2G(1+\nu)\varepsilon^{*2}}{1-\nu} \pi c^2 h. \quad (10)$$

Расчет слагаемого ${}^{id}E$ можно выполнить без использования предположения о конечности толщины ДД, что дает

$${}^{id}E = -\frac{4G(1+\nu)^2 b^2 c^2}{(1-\nu)a} \int_0^\infty \frac{I_1^{*2}}{\beta^2 I_0^2 - (\beta^2 - 2\nu + 2)I_1^2} d\beta. \quad (11)$$

Для качественного и количественного анализа энергии dE ДД в ННК необходимо учесть соотношения между параметрами ε^* , h и b . Для ДД атомной толщины (атомного кластера) логично предположить, что $h = l$, где l — параметр кристаллической решетки при условии $l \ll a$. Полагая, что b задает изменение параметра решетки в плоскости ДД, получаем $\varepsilon^* = b/l$, что позволяет записать энергию тонкого ДД в ННК в следующем виде:

$${}^dE \approx \frac{2G(1+\nu)\pi\varepsilon^{*2}ac^2}{1-\nu} \times \left(\tilde{\lambda} - \frac{2(1+\nu)\tilde{\lambda}^2}{\pi} \int_0^\infty \frac{I_1^{*2}}{\beta^2 I_0^2 - (\beta^2 - 2\nu + 2)I_1^2} d\beta \right), \quad (12)$$

где $\tilde{\lambda} = l/a$. Анализ показывает, что при варьировании $\tilde{\lambda}$ в разумных пределах (например, от 0.001 до 0.03) эффект экранирования поверхностью цилиндра оказывает слабое влияние на полную энергию ДД. Однако для КТ конечной высоты (рис. 1), сравнимой с их радиальным размером, влияние свободной поверхности ННК становится определяющим.

Таким образом, в работе развит общий подход к расчету упругих полей осесимметричных КТ в гибридных наноструктурах КТ/ННК. Для этого предложено рассматривать КТ как дилатационное включение, а ННК — как упругоизотропный прямолинейный бесконечный цилиндр постоянного кругового сечения. В качестве базисного элемента, позволяющего строить решения для КТ различной формы, введен бесконечно тонкий дилатационный диск, полностью соосно погруженный в этот цилиндр. Найдены аналитические выражения для упругих полей и энергии такого ДД.

Финансирование работы

Авторы благодарят Минобрнауки РФ за поддержку в рамках госзадания для ИПМаш РАН (для А.Л. Колесниковой и М.Ю. Гуткина) и проекта по тематике научных исследований № 2019-1442, код научной темы FSER-2020-0013 (для А.Е. Романова).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] V.G. Dubrovskii, *Nucleation and growth of nanostructures* (Springer, Berlin, 2014). DOI: 10.1007/978-3-642-39660-1
- [2] L.N. Quan, J. Kang, C.-Zh. Ning, P. Yang, *Chem. Rev.*, **119**, 9153 (2019). DOI: 10.1021/acs.chemrev.9b00240
- [3] M. Nehra, N. Dilbaghi, G. Marrazza, A. Kaushik, R. Abolhassani, Y.K. Mishra, K.H. Kim, S. Kumar, *Nano Energy*, **76**, 104991 (2020). DOI: 10.1016/j.nanoen.2020.104991
- [4] M. Tchernycheva, G.E. Cirlin, G. Patriarche, L. Travers, V. Zwiller, U. Perinetti, J.-Ch. Harmand, *Nano Lett.*, **7**, 1500 (2007). DOI: 10.1021/nl070228l
- [5] M. de la Mata, X. Zhou, F. Furtmayr, J. Teubert, S. Gradečak, M. Eickhoff, A. Fontcuberta i Morral, J. Arbiol, J. Mater. Chem. C, **1**, 4300 (2013). DOI: 10.1039/c3tc30556b
- [6] А.Е. Романов, А.Л. Колесникова, М.Ю. Гуткин, В.Е. Бугров, *Письма в ЖТФ*, **48** (1), 39 (2022). DOI: 10.21883/PJTF.2022.01.51878.19015 [A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin, V.E. Bougrov, *Tech. Phys. Lett.*, **48** (1), 30 (2022). DOI: 10.21883/TPL.2022.01.52464.19015].
- [7] A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov, M.Yu. Gutkin, V.E. Bougrov, *Int. J. Solids Struct.*, **254-255**, 111819 (2022). DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2022.111819
- [8] A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin, *Int. J. Solids Struct.*, **213**, 121 (2021). DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2020.12.010
- [9] T. Mura, *Micromechanics of defects in solids* (Martinus Nijhoff Publ., Boston, 1987).
- [10] T. Nguyen Van, A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov, *Mater. Phys. Mech.*, **48**, 44 (2022). DOI: 10.18149/MPM.4812022_5
- [11] G. Eason, B. Noble, I.N. Sneddon, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **247**, 529 (1955). DOI: 10.1098/rsta.1955.0005
- [12] А.И. Лурье, *Пространственные задачи теории упругости* (ГИИТЛ, М., 1955).
- [13] A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin, A.E. Romanov, *Int. J. Solids Struct.*, **143**, 59 (2018). DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2018.02.032