

不同速度下砷化镓纳米划擦中表面与亚表面损伤机理研究

黄浩

上海理工大学机械工程学院, 上海

收稿日期: 2024年4月30日; 录用日期: 2024年5月23日; 发布日期: 2024年5月31日

摘要

为了进一步改进砷化镓激光器谐振腔面的制造技术, 采用分子动力学方法模拟了砷化镓激光器的刻划过程。生成了不同取向的GaAs晶体模型, 包括GaAs[100]、GaAs[110]和GaAs[111], 并对这些模型进行了不同加工速度下的划痕模拟。基于仿真结果, 分析了划痕、损伤宽度、亚表面损伤、堆高、位错分布和活性等表面特征。结果表明, 在砷化镓的刻划过程中, 不同晶向的变形具有明显的各向异性。砷化镓晶体刮擦过程中的表面特征、损伤宽度、亚表面损伤和位错动力学与晶体取向密切相关。此外, 增加加工的速度可以减小最大损伤宽度、提高堆叠高度, 有利于提高材料去除率, 但却会使表面质量略微降低, 这一点适用于三个晶向。对于亚表面而言, 随着划擦速度的增加亚表面损伤层的厚度会减小, 这一点仅适用于GaAs[110]和GaAs[111]晶向, GaAs[100]晶向的亚表面损伤层厚度对速度的变化并不敏感; 同时速度的增加会减小砷化镓亚表层中的完美位错长度和总长度, 但对位错类型基本没有影响。

关键词

砷化镓, 分子动力学, 各向异性, 表面/亚表面损伤

Study on Surface and Subsurface Damage Mechanism of GaAs Nanoscratching at Different Speed

Hao Huang

School of Mechanical Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Apr. 30th, 2024; accepted: May. 23rd, 2024; published: May. 31st, 2024

Abstract

In order to further improve the fabrication technology of the cavity surface of GaAs laser, the engraving process of GaAs laser was simulated by molecular dynamics method. GaAs crystal models with different orientations, including GaAs[100], GaAs[110] and GaAs[111], were generated, and the scratch simulation of these models was carried out at different processing speeds. Based on the simulation results, surface characteristics such as scratches, damage width, subsurface damage, stacking height, dislocation distribution and activity were analyzed. The results show that the deformation of different crystal direction has obvious anisotropy during GaAs carving. The surface characteristics, damage width, subsurface damage and dislocation dynamics of gallium arsenide crystal during the scraping process are closely related to crystal orientation. In addition, increasing the processing speed can reduce the maximum damage width and increase the stacking height, which is conducive to improving the material removal rate, but will slightly reduce the surface quality, which is applicable to the three crystal directions. For the subsurface, the thickness of the subsurface damage layer decreases with the increase of the scratch velocity, which is only applicable to GaAs[110] and GaAs[111] crystal direction, and the thickness of the subsurface damage layer of GaAs[100] crystal direction is not sensitive to the change of the velocity. At the same time, the increase of speed can reduce the length of the perfect dislocation and the total length of the GaAs sublayer, but has no effect on the dislocation type.

Keywords

Gallium Arsenide, Molecular Dynamics, Anisotropy, Surface/Subsurface Damage

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

作为二代半导体材料，单晶砷化镓因其禁带宽度较宽、光电转换效率较高和电子迁移率较高等优异的光学性能，被广泛用作半导体激光器谐振腔面的衬底晶片[1]。半导体激光器谐振腔面的表面质量影响光源的振荡，直接决定半导体激光器的稳定性。因此，提高其加工工艺技术并制备出无损伤的单晶砷化镓解理基面对于获得理想的谐振腔面和提升半导体激光器的性能尤为重要[2] [3]。国际上，WASMER 等[4]发现划片载荷大小及刀具的形状对解理质量具有影响。PARLINSKA 等[5]发现滑移和位错是砷化镓划片过程中的两种主要变形方式；国内对于砷化镓的相关解理加工技术仍存在很大的空白，急需相关研究进行填补。尽管已有学者从材料性能和新型工艺等方面对砷化镓纳米加工进行了研究[6]，但对于其在此过程中的损伤变形仍缺乏清晰的了解，特别是工艺参数，比如速度和材料各向异性对砷化镓在纳米加工中亚表面损伤形成的影响尚未被充分澄清。因此，为了进一步提高砷化镓基激光器的谐振腔制造技术，探究砷化镓在纳米加工过程中表面和亚表面损伤形成的机制演化是我们解决问题的关键。

2. 分子动力学建模

图 1 是对 GaAs 进行划刻过程的分子动力学模型。它由边界层，恒温层，牛顿层以及工件组成，其中边界层和恒温层固定，工件被视为刚体[7]。最外层的黄色原子是边界层原子，这层的作用是固定工件

使它在加工过程中不移动。边界层里面那层原子是恒温层原子，它的作用是模拟实际加工过程中的温度变化，其温度保持在 293 K。恒温层原子的温度由朗格万温控器控制[8]。恒温层里面那层原子是牛顿层原子，由 GaAs 组成。牛顿层原子是自由的，其运动规律符合牛顿第二定律。磨料的初始位置为工件上表面前方 2Å。工件尺寸为 40 nm * 16 nm * 17 nm。总共包含约八十四万个原子，其中牛顿层约四十八万个，由 AtomsK 软件进行建模；而其余原子如边界层、恒温层以及工件均由 LAMMPS 软件进行建模。

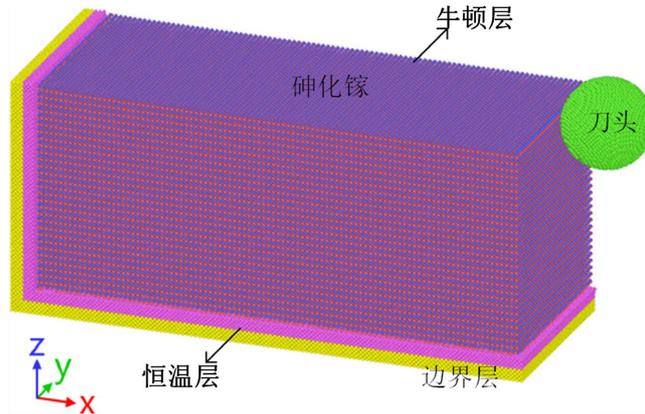


Figure 1. Molecular dynamics simulation model of GaAs
图 1. 砷化镓分子动力学仿真模型

为了观察晶体各向异性对加工质量的影响，GaAs 单晶的加工方向包括 GaAs[010]、GaAs[110]和 GaAs[111]晶体取向。如图 2 所示，灰色的平面即为晶面，与平面垂直的直线即为对应的晶向，如红线所示。对于 GaAs[010]取向，取 x-[100]，y-[010]，z-[001]坐标系。对于 GaAs[110]取向，坐标系为 x-[1-10]，y-[110]和 z-[001]。对于 GaAs[111]取向，坐标系为 x-[2-1-1]，y-[111]，z-[0-11]。加工方向沿 x 轴方向。为了尽可能地模拟实际情况，x 轴方向采用周期边界条件，y 轴和 z 轴方向采用自由边界条件。其余相关参数如表 1 所示。

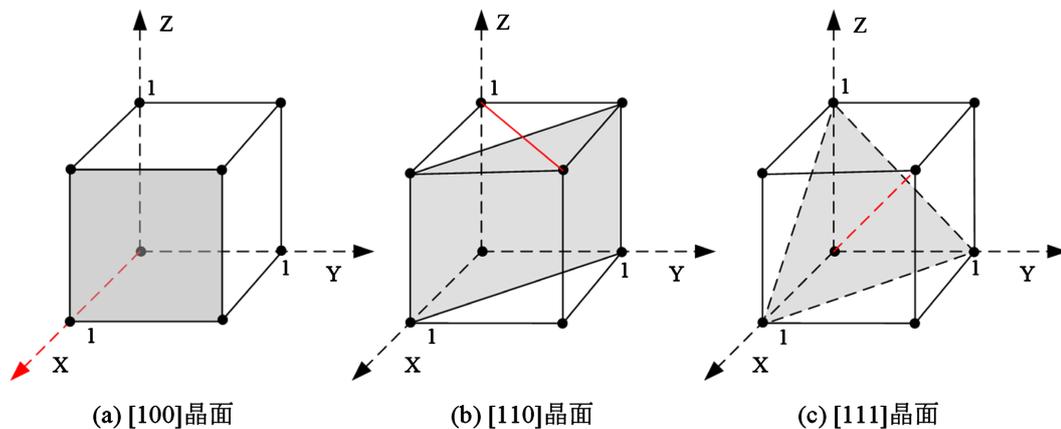


Figure 2. Crystal face and crystal orientation diagram
图 2. 晶面与晶向示意图

分子动力学模拟的另一个重要方面是势函数的选择。本文采用 Bond-Order 势函数对工件内 Ga-As 原子之间的相互作用进行了模拟。刀头内碳原子之间的相互作用用 Tersoff 势函数来描述。当工件中的 Ga 和 As 原子与刀具中的 C 原子存在相互作用时，采用 Ziegler-Biersack-Litmark (ZBL)势函数来表示这种相

相互作用[9] [10]。这些势函数在模拟砷化镓纳米材料中得到了成功和广泛的应用，使它们成为模拟中准确捕捉原子相互作用的可靠选择。

Table 1. The parameters of molecular dynamics model and simulation and values

表 1. 关于分子动力学模型和仿真的各参数及其对应值

参数	值
工件尺寸	40 nm * 16 nm * 17 nm
工件材料	砷化镓
工件晶向	[110]、[100]、[111]
磨料半径	3.5 nm
划刻速度	100 m/s
划刻深度	3.5 nm
划刻距离	15 nm
初始温度	300 K
势函数	Bond-Order 势函数
步长	1 fs

Bond-Order 势函数表达式为：

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i}^{iN} \phi_{ij}(r_{ij}) - \sum_{i=1}^N \sum_{j=i}^{iN} \beta_{\sigma,ij}(r_{ij}) \cdot \Theta_{\sigma,ij} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=i}^{iN} \beta_{\pi,ij}(r_{ij}) \cdot \Theta_{\pi,ij}$$

式中， $\phi_{ij}(r_{ij})$ 为排斥项势能； $\beta_{\sigma,ij}(r_{ij})$ 和 $\beta_{\pi,ij}(r_{ij})$ 为 sigma 和 π 化学键的积分； $\Theta_{\sigma,ij}$ 和 $\Theta_{\pi,ij}$ 为 sigma 和 π 的键序。

Tersoff 势函数表达式为：

$$E = f_c(r_{ij}) \left[f_r(r_{ij}) + b_{ij} f_a(r_{ij}) \right]$$

式中， $f_c(r_{ij})$ 为截断函数； $f_r(r_{ij})$ 为排斥项势能； b_{ij} 为化学键强度； $f_a(r_{ij})$ 为吸引项势能。

ZBL 势函数表达式为：

$$\begin{cases} E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \phi(r_{ij}/a) + S(r_{ij}) \\ a = \frac{0.46850}{Z_i^{0.23} + Z_j^{0.23}} \end{cases}$$

式中， e 为电子电荷； ϵ_0 为真空介电常数； Z_i 和 Z_j 分别为两个原子的核电荷； $\phi(r_{ij}/a)$ 为屏蔽方程； a 为屏蔽距离。

在计算磨料与工件之间的相互作用力时，将磨料视为非原子。磨料与工件之间的相互作用力可表示为[11]：

$$F(r) = \begin{cases} -K(r-R)^2, & r < R \\ 0, & r \geq R \end{cases}$$

其中, k 为力常数, $k = 10 \text{ eV}/\text{\AA}^3$ [12]。 R 为磨料半径, r 为工件上原子与磨料中心之间的距离。

3. 不同速度下的表面损伤分析

速度是影响纳米加工过程的一个重要因素, 不仅仅是因为加工速度的改变会影响砷化镓的表面形貌, 同时提高加工速度可以使加工时间变短, 从而提高效率。因此, 为了研究不同划擦速度对砷化镓纳米划擦过程的影响规律, 本节将分析在三种不同的速度(100 m/s、200 m/s、300 m/s)下砷化镓的表面损伤和材料去除的不同, 以及不同的速度对不同晶向的影响。

对于表面损伤, 本文将采用两个评价指标:

1) 在划片过程中, 受到刀头与工件之间的挤压, 原子间共价键断裂, 晶胞结构被破坏, 形成大量非晶原子(Amorphous atoms), 非晶原子可被视为材料表面损伤[13], 而最大损伤宽度即为工件表面非晶原子层宽度。因此第一个指标就是最大损伤宽度。

2) 表面去除率也是一个用来衡量表面损伤重要的指标, 在本文中, 我们将采取堆叠高度来量化表面去除率, 以此将其作为第二个指标。

3.1. 最大损伤宽度分析

图3分别展示了不同划擦速度下(100 m/s、200 m/s 和 300 m/s 分别对应图中的 a、b 和 c), 砷化镓工件表面的原子位移图(左)和最大损伤宽度图(右)。从图中可以看出, 原子移动较大的区域主要还是分布在刀头的两侧, 只是由于刀头的速度不同而导致了原子位移程度的不同。随着速度的增加, 原子受到更强的力, 令原子的运动速度提高, 从而产生了更大幅度的位移。此外, 经过对右图的测量, 发现不同速度下的最大损伤宽度分别为 121.2、119.8、118.8, 随着速度的增加其最大损伤宽度有小幅度的减少, 但基本可以忽略不计。但其可能的原因是随着速度的增加, 更多的原子有了向前运动的趋势, 而不是向两边运动, 从而使得最大损伤宽度有了小幅度的减小。

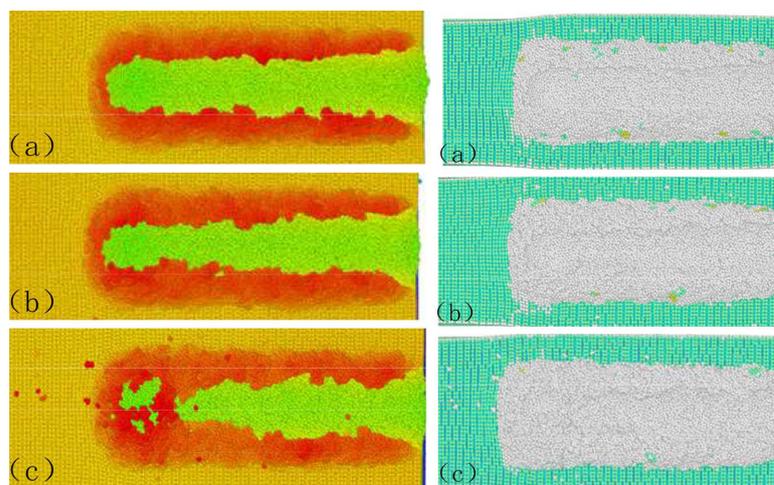


Figure 3. Comparison of scratch damage of GaAs[110] crystal direction at different velocities

图3. 不同速度下 GaAs[110]晶向的划痕损伤对比

此外, 另外两个晶向的不同速度下的砷化镓划刻过程也被研究了, 如下图4和图5所示。GaAs[100]晶向的最大损伤宽度随着速度的增加依次为 126.5、125.7 和 122.3, 而 GaAs[111]晶向的最大损伤宽度随着速度的增加依次为 111.4、10.3 和 103.3。可以看出, 三个晶向的最大损伤宽度都随着速度的增加而减小, 这说明随着速度的增加最大损伤宽度会有小幅度的减少这一规律在砷化镓的三个晶向上均适用。这

是因为速度的增加使得原子受到了更多向前的力，从而令原子向前运动的趋势增强且向两侧运动的趋势减弱，使得砷化镓的最大损伤宽度小幅减小。此外，速度的增加还会使各晶向上的特性放大，例如 GaAs[100]晶向的特性是原子更容易聚集在刀头的前面，而速度的增加使得聚集在刀头前面的原子更多；GaAs[100]晶向的特性是原子更容易聚集在刀头的下面，形成不对称的堆叠，而速度的增加使得这种不对称性更加明显。这些观察结果表明了速度对于砷化镓在不同晶向上的加工特性的影响。

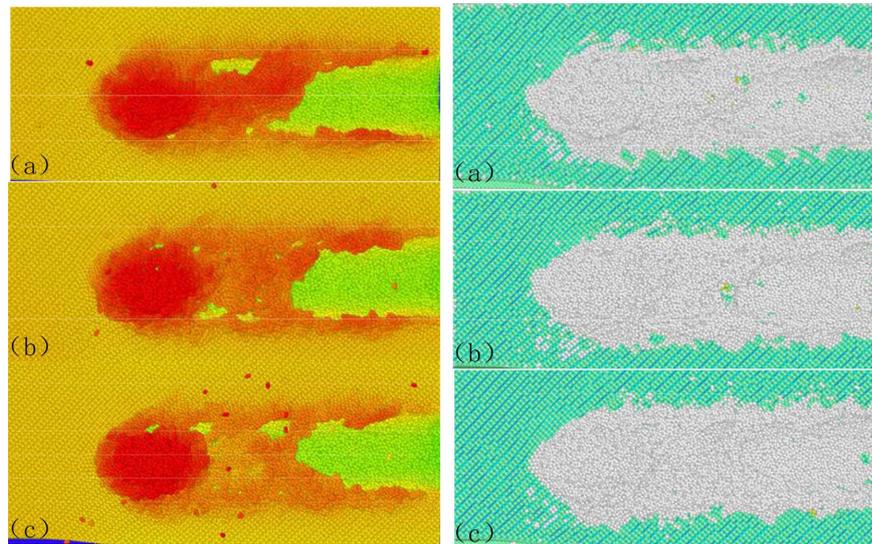


Figure 4. Comparison of scratch damage of GaAs[100] crystal direction at different velocities
图 4. 不同速度下 GaAs[100]晶向的划痕损伤对比

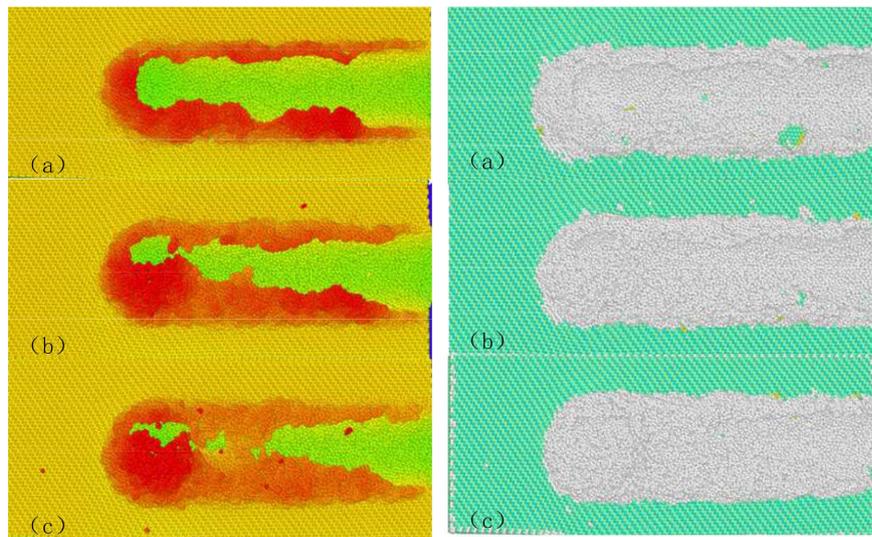


Figure 5. Comparison of scratch damage of GaAs[111] crystal direction at different velocities
图 5. 不同速度下 GaAs[111]晶向的划痕损伤对比

3.2. 表面去除率分析

观察上图 3、图 4 和图 5 可以看出，在不同的加工速度下，刀头的两侧以及前方都会有大量的原子堆叠。而随着速度的增加，原子堆叠越加杂乱，这说明，提高加工速度会降低表面质量，但可以提高材

料的表面去除率，这一点可以从下图 6 得出，其堆叠高度随着速度的增加依次为 40.2、40.9、46.7。这表明在砷化镓的纳米加工中，适当的增加加工速度可以提高材料的去除率，但同时却也会降低其表面质量。同时，经过对另外两个晶向的研究发现，适当的增加加工速度可以提高材料的去除率，但同时却也会降低其表面质量这一规律同样对三个晶向具有普适性。下图为三个晶向下不同速度的堆叠高度。

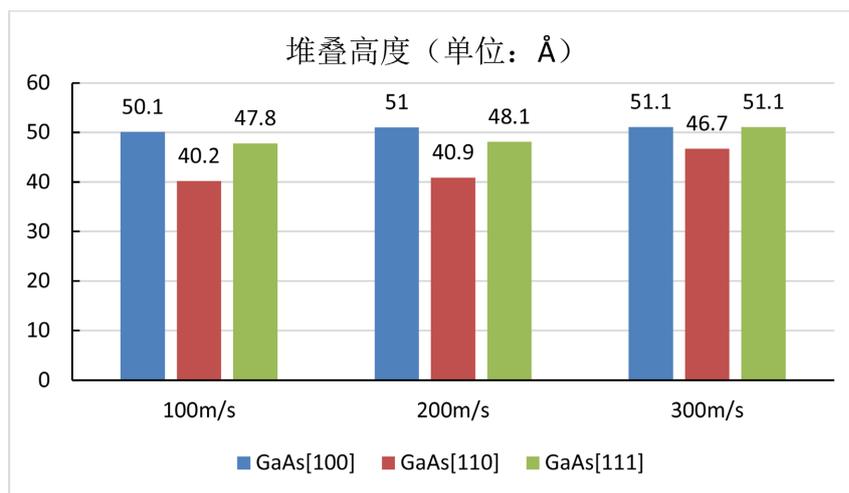


Figure 6. Stack height at different speeds

图 6. 不同速度下的堆叠高度

4. 不同速度下的亚表面损伤分析

亚表面损伤层会显著降低砷化镓材料的力学性能，及材料后续的可加工性[14]。因此，为了降低砷化镓在加工时亚表面的损伤，了解有哪些要素会影响砷化镓的亚表面损伤层是很有必要的，所以本节将探讨不同划擦速度(100 m/s、200 m/s 和 300 m/s)下砷化镓亚表面损伤的不同。

对于亚表面损伤，本文同样采用两个评价指标：

1) 随着压头的向前移动，亚表层内会出现大量非晶态原子、位错和闪锌矿相原子等缺陷，进而形成亚表面损伤层。而亚表面损伤会显著影响材料的性能[15] [16]。其中，亚表面损伤的厚度是衡量纳米加工后工件损伤程度和加工质量的关键参数。

2) 在加工的过程中，亚表层中会形成了大量间隙原子、空位缺陷、位错和层错等多种缺陷。其中位错是砷化镓在纳米加工中最为显著的一种缺陷，因此加工过程中的位错总长度将是评价亚表面损伤的第二个指标。

4.1. 最大损伤宽度分析

图 7(a)~(c)为 GaAs[110]晶向不同划擦速度下砷化镓亚表面损伤层示意图，其损伤深度随着速度的增加依次为 69.8、68.6、67.6。从数据可以知道，随着划擦速度的增加，砷化镓亚表面损伤层的厚度有减少的趋势，其可能的原因是随着速度的增加，原子向上的运动趋势加剧，使得原子向下的趋势减弱，从而使得亚表面损伤的减小。

同时，另外两个晶向的亚表面损伤深度也被研究了，如下图 8 所示，可以看出，GaAs[100]晶向的亚表面损伤层深度对速度的变化并不敏感，而 GaAs[111]晶向的损伤层深度也随着速度的增加减少。其可能的原因是 GaAs[100]晶向的原子堆叠集中在刀头处，而另外两个晶向原子堆叠集中在两边或者单边，集中在刀头处的原子堆叠比另外两个晶向更加密集而使得 GaAs[100]晶向的亚表面损伤层深度对速度的变化

并不敏感。

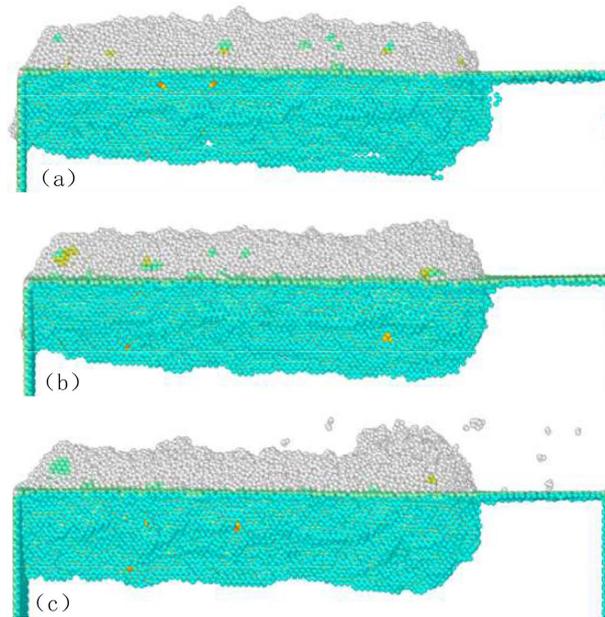


Figure 7. Diagram of subsurface damage depth
图 7. 亚表面损伤深度示意图

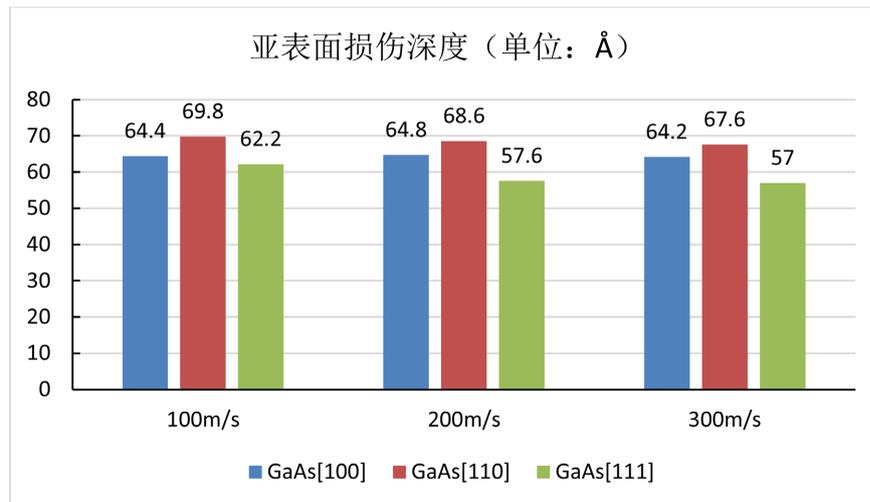


Figure 8. Subsurface damage depth at different velocities
图 8. 不同速度下的亚表面损伤深度

4.2. 位错分析

图 9 展示了纳米划擦后，砷化镓亚表面内缺陷的组成情况。随着划擦的进行，刀头破坏了砷化镓完整的晶格结构，形成了大量的非晶原子。这些原子中的一部分会脱离主体，形成间隙原子，从而产生了空位缺陷(见图 9(II))。而又因为内力的存在下，部分间隙原子将会往空位处运动，又形成了完整的晶格结构或原子簇，从而令我们观察到部分间隙原子和空位缺陷恢复的情况。而当这种填充运动沿着固定方向扩展时，就会形成各种层错和位错(见图 9(III)和图 9(IV))。这些缺陷相互作用，共同形成了砷化镓的亚

表面损伤层。除了上述缺陷外，工件亚表层还存在一部分与金刚石结构相同的闪锌矿相砷化镓转变为六方纤锌矿相砷化镓(见图 9(I))。这是因为这两种结构的形成能非常接近，两相之间的能量差约为 6.40 eV。因此，随着划擦距离的增加，工件的压力和内部温度逐渐升高，高温降低了能量差；在高压诱导下，砷化镓实现了从闪锌矿相到纤锌矿相的转变。此外，六方闪锌矿相砷化镓和六方纤锌矿相砷化镓会共同存在一段时间。

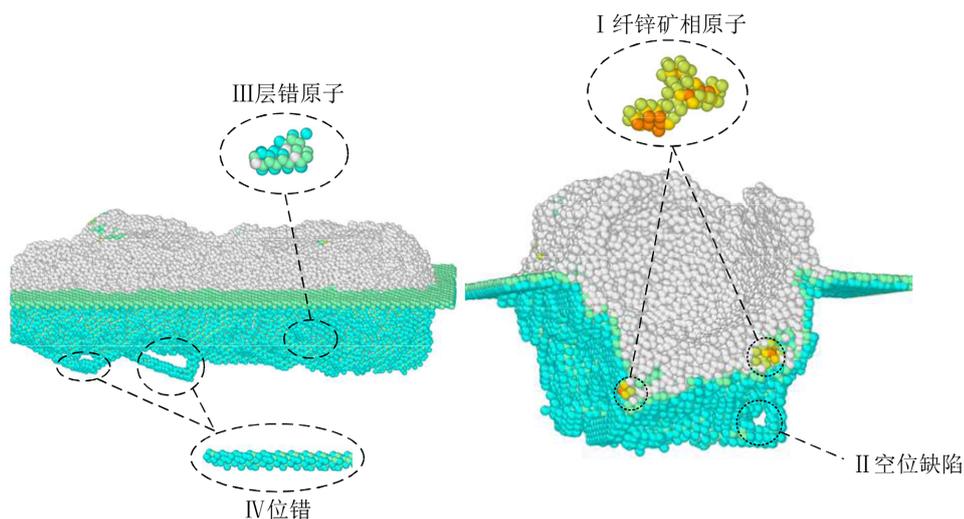


Figure 9. Types of defects in GaAs during scratching
图 9. 划擦时砷化镓内缺陷类型

图 10(a)-(c)为不同划擦速度下砷化镓亚表面损伤层内位错长度的示意图，图 10(d)是速度为 300 m/s 下的纤锌矿相原子和位错的示意图。如图所示，亚表层内其余位错(除完美位错外的其他位错总和)和纤锌矿相原子数呈正相关关系。同时，由下图 11 可知，随着速度的增加，位错的长度有着减小的趋势，这是因为亚表层内部分位错由于没有持续的力和能量驱动，也没有足够的时间进行形核及滑移扩展运动，进而导致位错长度有所降低。因此，我们可以得出结论，不同的划擦速度对砷化镓亚表层中的位错类型基本没有影响，但对各类位错的长度影响明显。

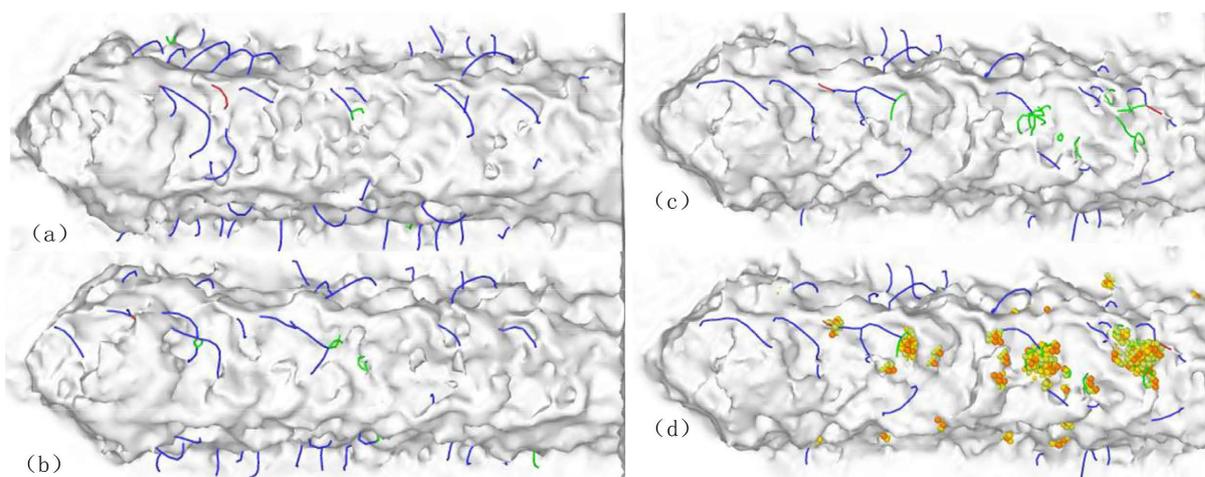


Figure 10. Dislocations of GaAs at different scratch speeds
图 10. 不同划擦速度下砷化镓的位错

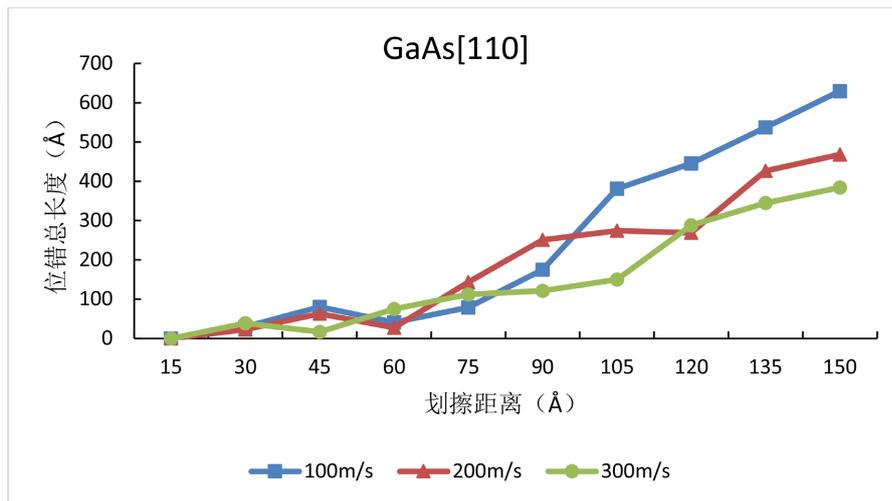


Figure 11. Total length of dislocation of GaAs[110] at different scratching speeds

图 11. 不同划擦速度下 GaAs[110]的位错总长度

同时，另外两个晶向的位错总长度与速度之间的关系也被研究了，如下图 12 和图 13 所示。可以观察到，对 GaAs[100]这一晶向而言，随着速度的增加，位错的长度会减小这一规律仅在 100 m/s 到 200 m/s 适用，而在 200 m/s 到 300 m/s 中国区间位错的总长度会提高，而对 GaAs[111]这一晶向同样适用。其原因同样可能是因为 GaAs[100]这一晶向的原子容易堆叠到刀头处这一特性，过快的速度会使得向下的原子有着更强大的破坏力，从而造成更多的位错。这意味着在实际加工中，GaAs[100]这一晶向并不能一味地通过适当的提升加工速度来提升砷化镓的亚表层质量，而应该选择合适的加工速度。

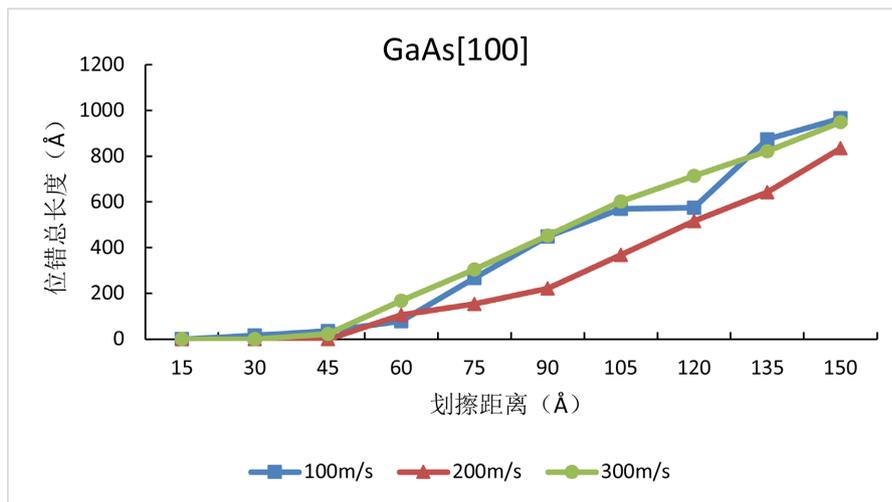


Figure 12. Total length of dislocation of GaAs[100] at different scratching speeds

图 12. 不同划擦速度下 GaAs[100]的位错总长度

5. 结论

本文从最大损伤宽度、表面去除率、位错种类、位错长度以及亚表面损伤层厚度等多个角度分析了砷化镓纳米划擦过程中表面与亚表面损伤的形成演化机制，并详细对比研究了在不同速度下对砷化镓纳米加工中表面损伤以及亚表层损伤的影响。主要结论如下：

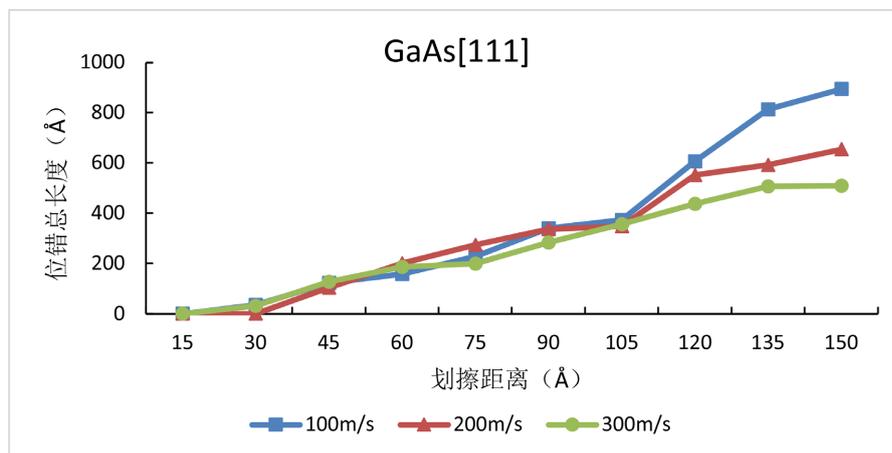


Figure 13. Total length of dislocation of GaAs[111] at different scratching speeds
图 13. 不同划擦速度下 GaAs[111]的位错总长度

1) 研究发现, 增加加工的速度可以减小最大损伤宽度, 这一点适用于三个晶向, 但对不同的晶向而言, 速度的增加同时也意味着其原子堆叠的特性增强; 同时, 高速加工会使原子的堆叠高度提升, 有利于提高材料去除率, 但却会使表面质量略微降低, 同样适用于三个晶向。

2) 随着划擦速度的增加, 砷化镓亚表面损伤层的厚度会减小, 这一点仅适用于 GaAs[110]和 GaAs[111]晶向, GaAs[100]晶向的亚表面损伤层厚度对速度的变化并不敏感; 同时, 对于位错而言, GaAs[110]和 GaAs[111]晶向划擦速度的增加会减小砷化镓亚表层中的完美位错长度和总长度, 但对位错类型基本没有影响, 而 GaAs[100]晶向不能一味地增加速度来减少位错, 过快的速度会加大该晶向位错的产生。

参考文献

- [1] 赵碧瑶, 井红旗, 仲莉, 等. 半导体激光器边缘绝热封装改善慢轴光束质量[J]. 中国激光, 2020, 47(1): 186-196.
- [2] 张继业, 张建伟, 曾玉刚, 等. 高功率垂直外腔面发射半导体激光器增益设计及制备[J]. 物理学报, 2020, 69(5): 91-99.
- [3] 袁巨龙, 张飞虎, 戴一帆, 等. 超精密加工领域科学技术发展研究[J]. 机械工程学报, 2010, 46(15): 161-177.
- [4] Wasmer, K., Ballif, C., Gassilloud, R., *et al.* (2005) Cleavage Fracture of Brittle Semiconductors from the Nanometer to the Centimeter Scale. *Advanced Engineering Materials*, **7**, 309-317. <https://doi.org/10.1002/adem.200500044>
- [5] Parlinsk-Wojtan, M., Wasmer, K., Tharian, J., *et al.* (2008) Microstructural Comparison of Material Damage GaAs Caused by Berkovich and Wedge Nanoindentation and Nanoscratching. *Scripta Materialia*, **59**, 364-367. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2008.04.008>
- [6] 张跃. 计算材料学基础[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2007.
- [7] 杨德重. 立方碳化硅化学机械抛光的分子动力学仿真[D]: [硕士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2017.
- [8] Wu, L., Yu, J., Fan, T., *et al.* (2020) Effects of Normal Load and Etching Time on Current Evolution of Scratched GaAs Surface During Selective Etching. *Materials Science in Semiconductor Processing*, **105**, Article ID: 104744. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2019.104744>
- [9] Xu, X., Fan, W., Li, B., *et al.* (2021) Influence of GaAs Crystal Anisotropy on Deformation Behavior and Residual Stress Distribution of Nanoscratching. *Applied Physics A*, **127**, Article No. 690. <https://doi.org/10.1007/s00339-021-04833-x>
- [10] Goel, S., Luo, X.C. and Reuben, R.L. (2013) Wear Mechanism of Diamond Tools against Single Crystal Silicon in Single Point Diamond Turning Process. *Tribology International*, **57**, 272-281. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2012.06.027>
- [11] Gao, R., Jiang, C., Lang, H., *et al.* (2021) Experimental Investigation of Influence of Scratch Features on GaAs Cleavage Plane During Cleavage Processing Using a Scratching Capability Index. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing-Green Technology*, **8**, 761-770. <https://doi.org/10.1007/s40684-020-00241-3>

-
- [12] Schneider, T. and Stoll, E. (1978) Molecular-Dynamics Study of a Three-Dimensional One-Component Model for Distortive Phase Transitions. *Physical Review B*, **17**, 1302-1322. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.17.1302>
- [13] Chen, C., Lai, M. and Fang, F. (2021) Subsurface Deformation Mechanism in Nano-Cutting of Gallium Arsenide Using Molecular Dynamics Simulation. *Nanoscale Research Letter*, **16**, Article No. 117. <https://doi.org/10.1186/s11671-021-03574-3>
- [14] Tian, Z., Chen, X. and Xu, X. (2020) Molecular Dynamics Simulation of the Material Removal in the Scratching of 4H-SiC and 6H-SiC Substrates. *International Journal of Extreme Manufacturing*, **2**, Article ID: 045104. <https://doi.org/10.1088/2631-7990/abc26c>
- [15] Kelchner, C.L., Plimpton, S.J. and Hamilton, J.C. (1998) Dislocation Nucleation and Defect Structure during Surface Indentation. *Physical Review B*, **58**, 11085-11088. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.11085>
- [16] Lilleodena, E.T., Zimmerman, J.A., Foiles, S.M. and Nix, W.D. (2003) Atomistic Simulations of Elastic Deformation and Dislocation Nucleation during Nanoindentation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **51**, 901-920. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(02\)00119-9](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(02)00119-9)