

Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 548.4

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11473>

Энергия парного взаимодействия пересекающихся дефектов дилатационного и дисклинационного типа

С. А. Красницкий^{1✉}, А. М. Смирнов¹

¹ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет ИТМО»,
Кронверкский проспект, 49, литер А, Санкт-Петербург 197101, Российская федерация

Аннотация

В настоящей работе исследуется упругое взаимодействие пересекающихся дефектов дилатационного и дисклинационного типа в приближении линейно-изотропной среды.

В рамках теории собственных деформаций найдены аналитические выражения, описывающие парное взаимодействие пересекающихся дилатационных нитей и пересекающихся клиновых дисклинаций. Показано, что энергия взаимодействия таких дефектов монотонно зависит от угла между ними: наибольшей энергией взаимодействия обладают дефекты, линии которых сонаправлены, наименьшей энергией взаимодействия – дефекты, линии которых ортогональны. Кроме этого, показано, что энергия взаимодействия пересекающихся клиновых дисклинаций сильно зависит от упругих свойств среды: чем меньше коэффициент Пуассона, тем меньше энергия парного взаимодействия дисклинаций.

Полученные аналитические выражения представляют практическую ценность для описания процессов релаксации остаточных напряжений в неоднородных структурах с пентагональной симметрией, в частности, в икосаэдрических частицах.

Ключевые слова: дисклинация, дилатационная нить, парное взаимодействие

Источник финансирования: исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 23-72-10014.

Для цитирования: Красницкий С. А., Смирнов А. М. Энергия парного взаимодействия пересекающихся дефектов дилатационного и дисклинационного типа. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2023;25(4): 505–513. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11473>

For citation: Krasnitskii S. A., Smirnov A. M. Pair interaction of intersecting dilatation and disclination defects. *Condensed Matter and Interphases*. 2023;25(4): 505–513. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11473>

✉ Красницкий Станислав Андреевич, e-mail: krasnitsky@inbox.ru

© Красницкий С. А., Смирнов А. М., 2023



1. Введение

Благодаря уникальным функциональным свойствам неоднородные наноструктуры находят широкое применение при конструировании современных устройств электроники [1], фотоники [2] и плазмоники [3]. Стабильность свойств таких наноструктур во многом определяется дефектами кристаллической структуры, возникающими в ходе релаксации механических напряжений [4–7]. К основным механизмам релаксации напряжений относятся образование комплексов точечных дефектов [8, 9], зарождение дислокационных [10–17] и дисклинационных [18–20] конфигураций, образование трещин и различных V-образных дефектов [21–23], диффузионное коробление поверхности [21, 24].

Особый интерес представляют процессы релаксации напряжений в неоднородных частицах с осями симметрии пятого порядка (пятиугольной призмы, декаэдра и икосаэдра) [25, 26]. Остаточные деформации и напряжения в них обусловлены пятикратным двойникованием вокруг осей симметрии пятого порядка и могут быть описаны в рамках дисклинационного подхода [27, 28]. Согласно этому подходу, пентагональные вискеры и декаэдрические частицы содержат по одной положительной клиновой дисклинации мощностью 0.128 рад, ось которой совпадает с осью симметрии пятого порядка, в то время как икосаэдрические частицы содержат шесть положительных клиновых дисклинаций мощностью 0.128 рад, проходящих через противоположные вершины икосаэдра и пересекающихся в его центре. Упругие поля клиновых дисклинаций являются мощными стоками для точечных дефектов и оказывают сильное влияние на их миграцию. Поэтому на ранних стадиях релаксации остаточных напряжений следует ожидать образование атмосфер примесных атомов и вакансий вдоль ядер клиновых дисклинаций. На развитых стадиях релаксации, когда концентрация вакансий (примесных атомов) достигает предельного значения, точечные дефекты могут конденсироваться образуя поры и включения второй фазы, наблюдавшиеся экспериментально [29, 30] и получившие теоретическое описание в [32–34].

Таким образом, анализ начальных стадий релаксации остаточных напряжений, связанных с сегрегацией точечных дефектов на ядрах дисклинаций в икосаэдрических частицах, требует определения энергий взаимодействия соответствующих дефектов. В данной работе представлены аналитические выражения для энергий

парного взаимодействия следующих дефектных конфигураций – пересекающихся дилатационных нитей и пересекающихся клиновых дисклинаций в рамках приближения неограниченной среды. Несмотря на то, что представленные результаты справедливы для приближения неограниченной среды, в дальнейшем они могут быть использованы в качестве отправной точки для расчета энергии парного взаимодействия пересекающихся дефектов в телах конечной формы со свободной поверхностью.

2. Теоретическая часть

В настоящем разделе рассматривается упругоизотропная среда, содержащая пересекающиеся прямолинейные дефекты, такие как дилатационные нити и клиновые дисклинации. Энергия парного взаимодействия таких дефектов может быть определена как работа по зарождению одного из дефектов в поле напряжений другого дефекта [35]:

$$W_{int}^{I-II} = - \int_V \beta_{ij}^I \sigma_{ij}^{II} dV = - \int_V \beta_{ij}^{II} \sigma_{ij}^I dV, \tag{1}$$

где β_{ij}^I и β_{ij}^{II} – компоненты тензора собственной дилатации дефектов (I) и (II), σ_{ij}^I и σ_{ij}^{II} – компоненты тензора упругих напряжений дефектов (I) и (II), наведенные в материальном объеме V .

2.1. Энергия парного взаимодействия пересекающихся дилатационных нитей

Рассмотрим прямолинейные дилатационные нити L_I и L_{II} , пересекающиеся в точке O под углом α (рис. 1а). Введем декартовы системы координат $Oxyz$ и $Ox'y'z'$, связанные с линиями дефектов L_I и L_{II} соответственно (ось x перпендикулярна плоскости пересечения дефектов, оси z и z' направлены вдоль линий дефектов L_I и L_{II} , направление осей y и y' выбирается по правилу правой руки). Поле напряжений таких дефектов в неограниченной упругой среде известно (см., например, [36]). Приведем здесь ненулевые компоненты тензора напряжений дилатационной нити L_I в декартовой системе координат:

$$\sigma_{xx}^{L_I} = -C_0 \xi^2 \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}, \tag{2a}$$

$$\sigma_{yy}^{L_I} = -C_0 \xi^2 \frac{y^2 - x^2}{(x^2 + y^2)^2}, \tag{2б}$$

$$\sigma_{zz}^{L_I} = -2C_0 H(\xi - x)H(\xi - y) \tag{2в}$$

$$\sigma_{xy}^{L_I} = -C_0 \xi^2 \frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2}, \tag{2г}$$

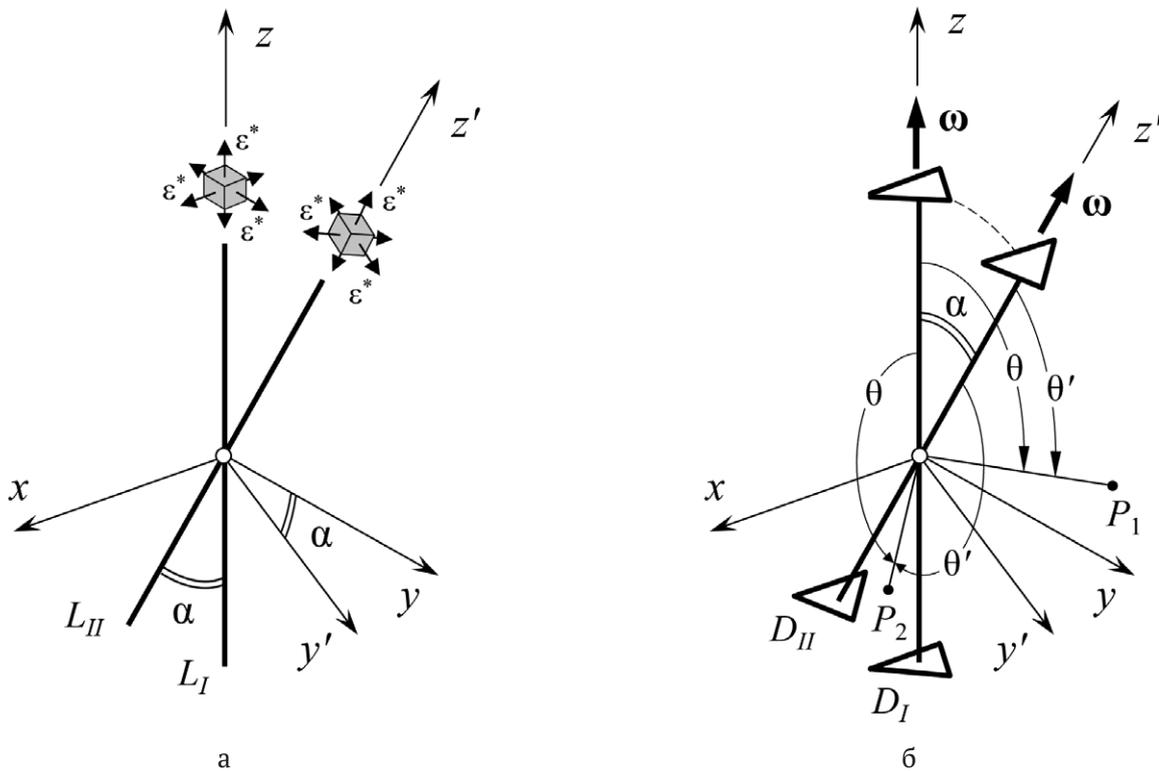


Рис. 1. Упругая модель пересекающихся под углом α дефектов: а) дилатационные нити L_I и L_{II} с собственной трехосной деформацией ε^* ; б) клиновые дисклинации D_I и D_{II} с мощностями ω . Точки P_1 и P_2 принадлежат областям $S_1 = \{R \geq 0, \varphi = \pi/2, \alpha \leq \theta \leq \pi\}$ и $S_2 = \{R \geq 0, \varphi = 3\pi/2, \pi - \alpha \leq \theta' \leq \pi\}$ соответственно

где $C_0 = G\varepsilon^*(1+\nu)/(1-\nu)$, G – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; ε^* – собственная дилатационная деформация дефекта; $H(\dots)$ – функция Хевисайда; ξ – малый параметр, определяющий радиус ядра линии дилатационного дефекта. Выражение (2в) для осевой компоненты тензора напряжений дилатационной нити представляет собой обобщенную функцию: напряжение обращается в нуль во всех точках среды, кроме точек соответствующих линии дилатационного дефекта.

Собственная дисторсия дилатационной нити характеризуется трехосной деформацией ε^* , распределенной вдоль линий дефектов. Согласно [36], ненулевые компоненты собственной дисторсии дилатационной нити (II) могут быть представлена в виде:

$$\beta_{ii}^{L_{II}} = \varepsilon^* s \delta(x) \delta(y'), \tag{3}$$

где $s = \pi \xi^2$, $\delta(\dots)$ – одномерная дельта функция Дирака.

Определим погонную энергию парного взаимодействия пересекающихся дилатационных нитей L_I и L_{II} . Для этого подставим (2) и (3) в выражение для расчета погонной энергии:

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{int}^{L_I-L_{II}} &= - \int_S \beta_{ij}^{L_{II}} \sigma_{ij}^{L_I} dS = \\ &= 4\varepsilon^* s C_0 \iint_{-\xi}^{+\xi} H(\xi-x) H(\xi-y) \delta(x) \delta(y') dx dy = \tag{4} \\ &= 4\varepsilon^* s C_0 \int_{-\xi}^{\xi} \delta(x) dx \int_{-\xi}^{\xi} \delta(y') dy. \end{aligned}$$

Первый интеграл в (4) берется по определению дельта функции Дирака, второй – с помощью замены переменной $y = y' \cos \alpha$. Окончательно получим:

$$\tilde{W}_{int}^{L_I-L_{II}} = 4\varepsilon^* s C_0 |\cos \alpha|. \tag{5}$$

Рассмотрим вырожденный случай, когда линии дефектов L_I и L_{II} пересекаются под прямым углом ($\alpha = \pi/2$). В этом случае можно определить полную энергию взаимодействия дефектов по формуле (1), при $y' = z$ имеем:

$$\begin{aligned} W_{int}^{L_I-L_{II}} \Big|_{\alpha=\pi/2} &= \\ &= 4\varepsilon^* s C_0 \iiint_{-\xi}^{+\xi} H(\xi-x) H(\xi-y) \delta(x) \delta(z) dx dy dz = \tag{6} \\ &= 4\varepsilon^* s C_0 \int_{-\xi}^{\xi} \delta(x) dx \int_{-\xi}^{\xi} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(z) dz. \end{aligned}$$

Окончательно получим, что энергия парного взаимодействия пересекающихся под прямым углом дилатационных нитей энергии принимает конечное значение, равное:

$$W_{\text{int}}^{I-II} \Big|_{\alpha=\pi/2} = 8\varepsilon^* s\xi C_0. \tag{7}$$

2.2. Энергия парного взаимодействия пересекающихся клиновых дисклинаций

Будем рассматривать равновеликие клиновые дисклинации D_I и D_{II} с равными по модулю векторами Франка. Пусть оси дисклинаций пересекаются в точке O и образуют угол α . Введем оси декартовых систем координат $Oxuz$ и $Ox'u'z'$ аналогично предыдущему пункту (см. рис. 1б).

Упругие поля напряжений клиновых дисклинаций в неограниченной среде известны (см., например, [28] и [37]). Приведем здесь ненулевые компоненты тензора напряжений клиновой дисклинации в сферической системе координат:

$$\sigma_{xx}^{D_I} = C_1 \left(\frac{\nu}{1-2\nu} + \frac{y^2}{r^2} + \ln r \right), \tag{8a}$$

$$\sigma_{yy}^{D_I} = C_1 \left(\frac{\nu}{1-2\nu} + \frac{x^2}{r^2} + \ln r \right), \tag{8б}$$

$$\sigma_{zz}^{D_I} = C_1 \left(\frac{\nu}{1-2\nu} + 2\nu \ln r \right), \tag{8в}$$

$$\sigma_{xy}^{D_I} = -C_1 \frac{xy}{r^2}, \tag{8г}$$

где $C_1 = G\omega/[2\pi(1-\nu)]$, ω – мощность дисклинации; полярный радиус $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$. Как видно из выражений (8), для компонент поля напряжений клиновой дисклинации, расположенной в неограниченной упругой среде, характерна логарифмическая расходимость. Такая расходимость устраняется при рассмотрении экранированных систем: дисклинационных диполей и квадруполь [38] или дисклинаций в телах конечных размеров, ограниченных, например, цилиндрическими [38] и сферическими [39] поверхностями.

Собственную дисторсию клиновой дисклинации D_{II} определим на полуплоскости $S_{II} = \{x = 0, y' > 0, z'\}$. Ненулевая компонента тензора собственной дисторсии дисклинации D_{II} будет иметь вид:

$$\beta_{xx}^{D_{II}} = -\omega y' \delta(x) H(S_{II}), \tag{9}$$

где $H(S_{II})$ – двумерная функция Хевисайда, равная 1 при $x, y \in S_{II}$ и равная 0 при $x, y \notin S_{II}$.

С учетом (8) и (9), энергия парного взаимодействия пересекающихся клиновых дисклинаций D_I и D_{II} примет вид:

$$\begin{aligned} W_{\text{int}}^{D_I-II} &= \omega \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_{xx}^{D_I} y' \delta(x) H(S_{II}) dx dy' dz' = \\ &= \omega \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \sigma_{xx}^{D_I} \Big|_{S_{II}} y' dy' dz'. \end{aligned} \tag{10}$$

Введем сферические координаты (R, φ, θ) и (R, φ', θ') с полюсом в точке O . Полярные (зенитные) углы θ и θ' будем отсчитывать от осей дисклинацией D_I и D_{II} соответственно ($0 \leq \theta, \theta' \leq \pi$). Азимутальные углы φ и φ' будем отсчитывать от оси x ($0 \leq \varphi, \varphi' \leq 2\pi$). Принимая во внимание связь между сферическими и декартовыми координатами: $y' = R \sin \theta'$, $z' = R \cos \theta'$, $dy' dz' = -RdRd\theta'$, перепишем (10) в следующем виде:

$$W_{\text{int}}^{D_I-II} = -\omega \int_0^A \int_0^\pi \sigma_{xx}^{D_I} \Big|_{S_{II}} \sin \theta' d\theta' R^2 dR, \tag{11}$$

где A – параметр, в случае неограниченной среды $A \rightarrow +\infty$.

Далее заметим, что в системе координат, связанной с дисклинацией D_I , множество точек полуплоскости S_{II} будет определяться суммой подмножеств $S_1 = \{R \geq 0, \varphi = \pi/2, \alpha \leq \theta \leq \pi\}$ и $S_2 = \{R \geq 0, \varphi = 3\pi/2, \pi - \varphi \leq \theta \leq \pi\}$. С учетом замены переменной $\theta' = 2\pi - \alpha - \theta$, $d\theta' = -d\theta$ при $\pi - \alpha \leq \theta \leq \pi$ и $\theta' = \theta - \alpha$, $d\theta' = d\theta$ при $\alpha \leq \theta \leq \pi$, перепишем интеграл (11) в виде суммы интегралов по областям S_1 и S_2 :

$$W_{\text{int}}^{D_I-II} = -\omega \int_0^A \left(\int_{\pi-\alpha}^\pi \sigma_{xx}^{D_I} \Big|_{S_1} \sin(\theta+\alpha) d\theta + \int_\alpha^\pi \sigma_{xx}^{D_I} \Big|_{S_2} \sin(\theta-\alpha) d\theta \right) R^2 dR, \tag{12}$$

Интегралы в (12) с учетом (8а) при $x = 0$, $y = R \sin \theta$ могут быть вычислены аналитически, например, с помощью таблиц интегралов [40]. Приведем здесь окончательное выражение для энергии взаимодействия, запасаемой клиновыми дисклинациями D_I и D_{II} в подобласти, ограниченной поверхностью сферы радиуса A :

$$\begin{aligned} W_{\text{int}}^{I-II} &= \\ &= \omega C_1 \frac{A^3}{3} \left[-\frac{1-5\nu}{3(1-2\nu)} - \cos \alpha \ln \left(\text{tg} \frac{\alpha}{2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \ln(A \sin \alpha) \right]. \end{aligned} \tag{13}$$

Далее определим плотность энергии взаимодействия дисклинаций D_I и D_{II} , запасаемую в шаре радиуса A . С этой целью разделим выражение (13) на объем шара радиуса A и представим в следующем виде:

$$w_{\text{int}}^{D_I-II} = w_A + w_\alpha, \tag{14}$$

где первое слагаемое содержит логарифмическую особенность, характерную для дефектов дисклинационного типа и определяет вклад масштабного фактора в энергию парного взаимодействия дисклинаций:

$$w_A = \frac{\omega C_1}{4\pi} \ln A, \tag{15}$$

второе слагаемое содержит зависимость плотности энергии взаимодействия дисклинаций D_I и D_{II} от величины угла между ними:

$$w_\alpha = \frac{\omega C_1}{4\pi} \left[-\frac{1-5\nu}{3(1-2\nu)} + \cos \alpha \ln(1 + \cos \alpha) + (1 - \cos \alpha) \ln(\sin \alpha) \right]. \tag{16}$$

Таким образом, получены аналитические выражения (14), (15) и (16) для плотности энергии взаимодействия пересекающихся дисклинаций в неограниченной среде. Слагаемое (16) выражает зависимость плотности энергии взаимодействия от размера рассматриваемой области – с увеличением размера рассматриваемой области плотность энергии взаимодействия увеличивается по логарифмическому закону ($w_A \sim \ln A$ при $A \rightarrow +\infty$). В телах конечных размеров (частицы, висеры и др.) выражение (16) экранируется поверхностями тел, и плотность энергии w_A имеет конечное значение (см., например, аналогичные расчеты для энергии дисклинации в упругом шаре [41]). Второе слагаемое (16) показывает влияние угла между дисклинациями α на энергию парного взаимодействия и представляет основной интерес для данного исследования.

3. Результаты и обсуждение

Перейдем к анализу полученных выражений (5) и (7) для энергий парного взаимодействия пересекающихся дилатационных нитей L_I и L_{II} . Погонная энергии взаимодействия дефектов в зависимости от угла между ними представлена на рис. 2. Энергия взаимодействия $\bar{W}_z^{L_I-II}$ принимает наибольшее значение для углов $\alpha = 0, \pi$ и равняется погонной упругой энергии одной дилатационной нити с собственной деформацией $2\epsilon^*$. Погонная энергия принимает нулевое значение, когда линии дефектов пересекаются под прямым углом ($\alpha = \pi/2$). В этом вырожденном случае взаимодействие дефектов определяется полной энергией системы, представленной в (7). Таким образом, можно утверждать, что взаимодействие дилатационных нитей, пересекающихся

под прямым углом, полностью определяется их общей собственной деформацией в точке их пересечения, остальные участки не дают вклад в полную энергию взаимодействия. Заметим еще, что энергия парного взаимодействия в (7) равна удвоенной упругой энергии точечного дефекта с собственной трехосной деформацией ϵ^* .

Обратимся теперь к зависимостям плотности энергии взаимодействия пересекающихся клиновых дисклинаций. На рис. 3а представлены зависимости нормированной плотности энергии w_α от величины угла между ними α , построенные для различных значений коэффициента Пуассона среды $\nu = 0.1$ и 0.3 . Из рис. 3а видно, что плотности энергии принимают наименьшее значение ($\sim 0.6G\omega^2/(4\pi^2)$ для $\nu = 0.3$) в случае, когда оси дисклинаций пересекаются под прямым углом. Напротив, плотности энергии принимают наибольшее значение ($\sim 1.6G\omega^2/(4\pi^2)$ для $\nu = 0.3$) в случае, когда оси дисклинаций совпадают ($\alpha = 0, \pi$). Приведем здесь аналитические формулы для определения плотности энергии взаимодействия дисклинаций, пересекающихся под углами $\alpha = \pi/2$ и $0, \pi$, полученные из выражения (16):

$$w_{\alpha=\pi/2} = \frac{G\omega^2}{4\pi^2(1-\nu)} \left[-\frac{1-5\nu}{3(1-2\nu)} \right], \tag{17}$$

$$w_{\alpha=0, \pi} = \frac{G\omega^2}{4\pi^2(1-\nu)} \left[-\frac{1-5\nu}{3(1-2\nu)} + \ln 2 \right]. \tag{18}$$

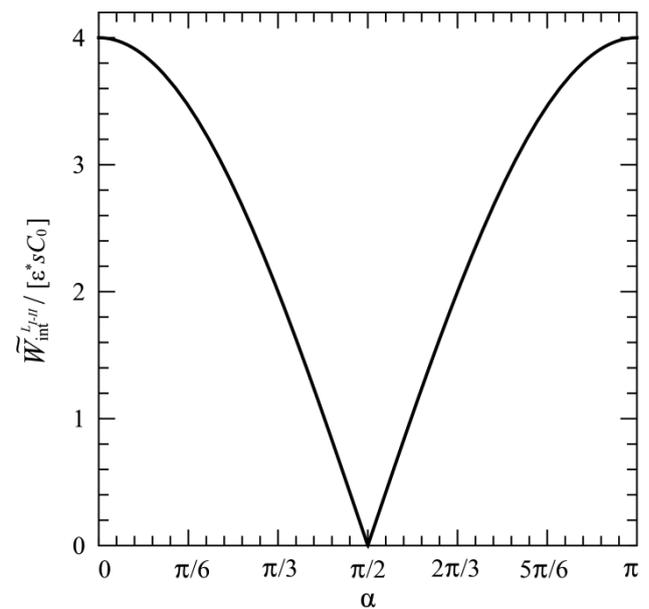


Рис. 2. Зависимость погонной энергии взаимодействия пересекающихся дилатационных нитей от угла пересечения линий дефектов α . Погонная энергии представлена в единицах $\epsilon^* s C_0$

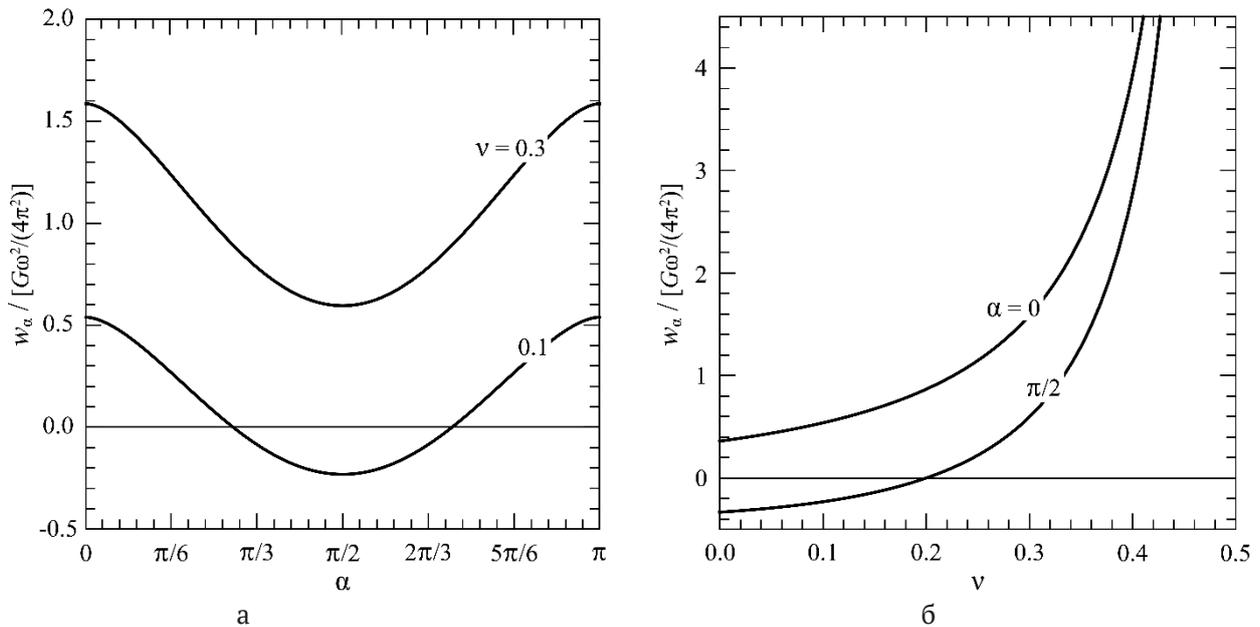


Рис. 3. Зависимости плотности энергии взаимодействия пересекающихся дисклинаций w_α : а) от угла пересечения осей дисклинаций α при $\nu = 0.1$ и 0.3 ; б) от коэффициента Пуассона среды ν при $\alpha = 0$ и $\pi/2$. Плотность энергии дана в единицах $G\omega^2/(4\pi^2)$

Выражение (18) также может быть использовано для определения независимой от R части плотности упругой энергии дисклинации мощностью 2ω .

Кроме этого, отметим, что согласно рис. 3а, большей плотностью энергии обладают дисклинации, расположенные в упругом пространстве с большим значением коэффициента Пуассона ν : с увеличением ν плотность энергии взаимодействия w_α возрастает. Обратимся к зависимостям плотности энергии взаимодействия дисклинаций w_α от коэффициента Пуассона среды ν ($0.0 < \nu < 0.5$), представленными на рис. 3б. В случае, когда оси дисклинаций совпадают ($\alpha = 0$ или π), плотность энергии взаимодействия всегда положительна. Напротив, в случае, когда оси дисклинаций пересекаются под прямым углом ($\alpha = \pi/2$), плотность энергии взаимодействия может принимать отрицательные значения. Значение коэффициента Пуассона, при котором плотность энергии меняет знак, определяется из выражения (17) и составляет 0.2. Это означает, что в средах с относительно низким значением коэффициента Пуассона дисклинация может расщепиться на две пересекающиеся дисклинации, тем самым понизив полную энергию системы. Подобные эффекты наблюдались экспериментально для случая трансляционного расщепления дисклинации, например, в декаэдрических частицах, содержащих одну клиновую положи-

тельную дисклинацию мощностью 0.128 рад: в процессе роста частиц зафиксировано расщепление дисклинации на две дисклинации, оси которых были параллельны [42].

4. Заключение

Таким образом, в работе представлен расчет энергий парного взаимодействия двух пересекающихся дефектов. В первой части работы определена погонная энергия пересекающихся дилатационных нитей в зависимости от угла между линиями дефектов. Показано, что энергия парного взаимодействия пересекающихся дилатационных нитей принимает конечное значение, полностью определяемое полями дефектов в окрестности точки пересечения их линий.

Во второй части работы энергия взаимодействия пересекающихся клиновых дисклинаций найдена в виде суммы двух слагаемых: первое слагаемое содержит логарифмическую особенность радиальной координаты, присущую упругим полям и энергиям дефектов дисклинационного типа, второе слагаемое показывает влияние угла между осями дисклинаций на энергию их взаимодействия. Последнее слагаемое подробно рассматривается в работе. В частности, показано, что дисклинации пересекающиеся под прямым углом обладают меньшей энергией взаимодействия, чем дисклинации оси которых сонаправлены. Кроме этого, показано, что энергия взаи-

модействия пересекающихся дисклинаций сильно зависит от свойств упругой среды, а именно от коэффициента Пуассона. Так, например, дисклинации в средах с большим значением коэффициента Пуассона обладают большей энергией парного взаимодействия. Энергия взаимодействия пересекающихся дисклинаций может принимать отрицательные значения в средах с относительно низким значением коэффициента Пуассона ($\nu < 0.2$). По всей видимости, это означает, что в средах с относительно низким значением коэффициента Пуассона существует возможность расщепления дисклинации на две пересекающиеся дисклинации, сопровождающегося уменьшением полной энергии. В заключение отметим, что полученные аналитические соотношения для энергии парного взаимодействия пересекающихся дилатационных нитей и дисклинаций представляют практическую ценность для дальнейшего исследования, в частности построения теоретической модели релаксации остаточных напряжений в икосаэдрических частицах, содержащих 6 пересекающихся клиновидных дисклинаций мощностью 0.128 рад, с учетом процессов сегрегации примесей на ядрах этих дисклинаций.

Заявленный вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Martinez A. D., Fioretti A. N., Toberer E. S., Tamboli A. C. Synthesis, structure, and optoelectronic properties of II–IV–V₂ materials. *Journal of Materials Chemistry A*. 2017;5(23): 11418–11435. <https://doi.org/10.1039/C7TA00406K>
2. Zhou H., Xu J., Liu X., ... Fan T. Bio-inspired photonic materials: Prototypes and structural effect designs for applications in solar energy manipulation. *Advanced Functional Materials*. 2018;28(24): 1705309. <https://doi.org/10.1002/adfm.201705309>
3. Shao L., Zhuo X., Wang J. Advanced plasmonic materials for dynamic color display. *Advanced Materials*. 2018;30(16): 1704338. <https://doi.org/10.1002/adma.201704338>
4. Matthews J. W., Blakeslee A. E. Defects in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations. *Journal of*

Crystal Growth. 1984;27: 118–125. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(74\)80055-2](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(74)80055-2)

5. Freund L. B., Suresh S. *Thin film materials: stress, defect formation and surface evolution*. Cambridge: Cambridge University Press; 2003. 803 p. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511754715>

6. Gutkin M. Yu., Kolesnikova A. L., Romanov A. E. Nanomechanics of stress relaxation in composite low-dimensional structures. *Encyclopedia of Continuum Mechanics*. 2020: 1778–1799. https://doi.org/10.1007/978-3-662-55771-6_161

7. Smirnov A. M., Kremleva A. V., Ivanov A. Yu., ... Romanov A. E. Stress-strain state and piezoelectric polarization in orthorhombic Ga₂O₃ thin films depending on growth orientation. *Materials and Design*. 2023;226: 111616. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.111616>

8. Kukushkin S. A., Osipov A. V. A new mechanism of elastic energy relaxation in heteroepitaxy of monocrystalline films: Interaction of point defects and dilatation dipoles. *Mechanics of Solids*. 2013;48: 216–227. <https://doi.org/10.3103/S0025654413020143>

9. Ramdani R., Hounkpati V., Chen J., Ruterana P. Stress relaxation in III–V nitrides: investigation of metallic atoms interaction with the N-vacancy. *Europhysics Letters*. 2022;137(6): 66003. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/ac6067>

10. Gutkin M. Yu., Kolesnikova A. L., Romanov A. E. Misfit dislocations and other defects in thin films. *Materials Science and Engineering: A*. 1993;164(1-2): 433–437. [https://doi.org/10.1016/0921-5093\(93\)90707-L](https://doi.org/10.1016/0921-5093(93)90707-L)

11. Bobylev S. V., Morozov N. F., Ovid'Ko I. A., Semenov B. N., Sheinerman A. G. Misfit dislocation configurations at interphase boundaries between misoriented crystals in nanoscale film-substrate systems. *Reviews on Advanced Materials Science*. 2012;32(1): 24–33.

12. Gutkin M. Yu., Kolesnikova A. L., Krasnitckii S. A., Romanov A. E., Shalkovskii A. G. Misfit dislocation loops in hollow core-shell nanoparticles. *Scripta Materialia*. 2014;83: 1–4. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2014.03.005>

13. Kukushkin S. A., Osipov A. V., Bessolov V. N., Konenkova E. V., Panteleev V. N. Misfit dislocation locking and rotation during gallium nitride growth on SiC/Si substrates. *Physics of the Solid State*. 2017;59(4): 674–681. <https://doi.org/10.1134/S1063783417040114>

14. Krasnitckii S. A., Smirnov A. M., Gutkin M. Yu. Axial misfit stress relaxation in core-shell nanowires with polyhedral cores through the nucleation of misfit prismatic dislocation loops. *Journal of Materials Science*. 2020;55: 9198–9210. <https://doi.org/10.1007/s10853-020-04401-3>

15. Smirnov A. M., Krasnitckii S. A., Gutkin M. Yu. Generation of misfit dislocations in a core-shell

- nanowire near the edge of prismatic core. *Acta Materialia*. 2020;186: 494–510. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.01.018>
16. Smirnov A. M., Krasnitckii S. A., Rochas S. S., Gutkin M. Yu. Critical Conditions of Dislocation Generation in Core-Shell Nanowires: A Review. *Reviews on Advanced Materials and Technologies*. 2020;2(3): 19–43. <https://doi.org/10.17586/2687-0568-2020-2-3-19-4>
17. Smirnov A. M., Young E. C., Bougrov V. E., Speck J. S., Romanov A. E. Stress relaxation in semipolar and nonpolar III-nitride heterostructures by formation of misfit dislocations of various origin. *Journal of Applied Physics*. 2019;126(24): 245104. <https://doi.org/10.1063/1.5126195>
18. Sheinerman A. G., Gutkin M. Yu. Misfit disclinations and dislocation walls in a two-phase cylindrical composite. *Physica Status Solidi (a)*. 2001;184(2): 485–505. [https://doi.org/10.1002/1521-396X\(200104\)184:2<485::AID-PSSA485>3.0.CO;2-4](https://doi.org/10.1002/1521-396X(200104)184:2<485::AID-PSSA485>3.0.CO;2-4)
19. Kolesnikova A. L., Ovidko I. A., Romanov A. E. Misfit disclination structures in nanocrystalline and polycrystalline films. *Solid State Phenomena*. 2002;87: 265–276. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.87.265>
20. Skiba N. V., Ovid'ko I. A., Sheinerman A. G. Misfit disclination dipoles in nanocrystalline films and coatings. *Physics of the Solid State*. 2009;51(2): 280–285. <https://doi.org/10.1134/S1063783409020127>
21. Telyatnik R. S., Osipov A. V., Kukushkin S. A. Pore- and delamination-induced mismatch strain relaxation and conditions for the formation of dislocations, cracks, and buckles in the epitaxial AlN (0001)/SiC/Si (111) heterostructure. *Physics of the Solid State*. 2015;57(1): 162–172. <https://doi.org/10.1134/S106378341501031X>
22. Argunova T. S., Gutkin M. Yu., Mokhov E. N., Kazarova O. P., Lim J. H., Shcheglov M. P. Prevention of AlN crystal from cracking on SiC substrates by evaporation of the substrates. *Physics of the Solid State*. 2015;57(12): 2473–2478. <https://doi.org/10.1134/S1063783415120057>
23. Kukushkin S. A., Osipov A. V., Rozhavskaia M. M., Myasoedov A. V., Troshkov S. I., Lundin V. V., Sorokin L. M., Tsatsul'nikov A. F. Growth and structure of GaN layers on silicon carbide synthesized on a Si substrate by the substitution of atoms: a model of the formation of V-defects during the growth of GaN. *Physics of the Solid State*. 2015;57(9): 1899–1907. <https://doi.org/10.1134/S1063783415090218>
24. Schmidt V., McIntyre P. C., Gusele U. Morphological instability of misfit-strained core-shell nanowires. *Physical Review B*. 2008;77(23): 235302. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.235302>
25. Hofmeister H. Shape variations and anisotropic growth of multiply twinned nanoparticles. *Zeitschrift für Kristallographie*. 2009;224(11): 528–538. <https://doi.org/10.1524/zkri.2009.1034>
26. Ruditskiy A., Peng H. C., Xia Y. Shape-controlled metal nanocrystals for heterogeneous catalysis. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*. 2016;7: 327–348. <https://doi.org/10.1146/annurev-chembioeng-080615-034503>
27. Romanov A. E., Kolesnikova A. L. Application of disclination concept to solid structures. *Progress in Materials Science*. 2009;54(6): 740–769. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2009.03.002>
28. Romanov A. E., Kolesnikova A. L. Elasticity boundary-value problems for straight wedge disclinations. A review on methods and results. *Reviews on Advanced Materials and Technologies*. 2021;3(1): 55–95. <https://doi.org/10.17586/2687-0568-2021-3-1-55-95>
29. Yasnikov I. S., Vikarchuk A. A. Voids in icosahedral small particles of an electrolytic metal. *JETP Letters*. 2006;83(1): 42–45. <https://doi.org/10.1134/S0021364006010103>
30. Huang J., Yan Y., Li X., Qiao X., Wu X., Li J., Shen R., Yang D., Zhang H. Unexpected Kirkendall effect in twinned icosahedral nanocrystals driven by strain gradient. *Nano Research*. 2020;13: 2641–2649. <https://doi.org/10.1007/s12274-020-2903-9>
31. Romanov A. E., Polonsky I. A., Gryaznov V. G., Nepijko S. A., Junghanns T., Vitrykhovski N. J. Voids and channels in pentagonal crystals. *Journal of Crystal Growth*. 1993;129(3-4): 691–698. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(93\)90505-Q](https://doi.org/10.1016/0022-0248(93)90505-Q)
32. Gutkin M. Yu., Panpurin, S. N. Spontaneous formation and equilibrium distribution of cylindrical quantum dots in atomically inhomogeneous pentagonal nanowires. *Journal of Macromolecular Science, Part B*. 2013;52(12): 1756–1769. <https://doi.org/10.1080/00222348.2013.808929>
33. Krasnitckii S. A., Gutkin M. Yu., Kolesnikova A. L., Romanov A. E. Formation of a pore as stress relaxation mechanism in decahedral small particles. *Letters on Materials*. 2022;12(2): 137–141. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2022-2-137-141>
34. Khramov A. S., Krasnitckii S. A., Smirnov A. M., Gutkin M. Yu. The void evolution kinetics driven by residual stress in icosahedral particles. *Materials Physics and Mechanics*. 2022;50(3): 401–409. https://doi.org/10.18149/MPM.5032022_4
35. Mura T. *Micromechanics of defects in solids*. Boston: Martinus Nijhoff Publishers; 1987. 587 p.
36. Kolesnikova A. L., Soroka R. M., Romanov A. E. Defects in the elastic continuum: classification, fields and physical analogies. *Materials Physics and Mechanics*. 2013;17(1): 71–91.
37. De Wit R. Partial disclinations. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1972;5(5): 529–534. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/5/5/004>

38. Vladimirov V. I., Romanov A. E. *Disclinations in Crystals*. Leningrad: Izdatel'stvo Nauka; 1986. 224p.

39. Kolesnikova A. L., Gutkin M. Yi., Proskura A. V., Morozov N. F., Romanov A. E. Elastic fields of straight wedge disclinations axially piercing bodies with spherical free surfaces. *International Journal of Solids and Structures*. 2016;99: 82–96. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2016.06.029>

40. Prudnikov A. P., Brychkov I. A., Marichev O. I. *Integrals and series: special functions (Vol. 2)*. Amsterdam: Gordon and Breach Science Publishers; 1998. 740p.

41. Polonsky I. A., Romanov A. E., Gryaznov V. G., Kaprelov A. M. Disclination in an elastic sphere. *Philosophical Magazine A*. 1991;64(2): 281–287. <https://doi.org/10.1080/01418619108221185>

42. Mayoral A., Barron H., Estrada-Salas R., Vazquez-Duran A., Josй-Yacamбn M. Nanoparticle stability from the nano to the meso interval. *Nanoscale*. 2010;2(3): 335–342. <https://doi.org/10.1039/B9NR00287A>

Информация об авторах

Красницкий Станислав Андреевич, к. ф.-м. н., доцент Института перспективных систем передачи данных Университета ИТМО (Санкт-Петербург, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0003-4363-8242>

krasnitsky@inbox.ru

Смирнов Андрей Михайлович, к. ф.-м. н., доцент Института перспективных систем передачи данных Университета ИТМО (Санкт-Петербург, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-7962-6481>

smirnov.mech@gmail.com

Поступила в редакцию 21.09.2023; одобрена после рецензирования 28.09.2023; принята к публикации 16.10.2023; опубликована онлайн 25.12.2023.