

Красницкий Станислав Андреевич

**ДИСЛОКАЦИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ РЕЛАКСАЦИИ
ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В НЕОДНОРОДНЫХ
НАНОСТРУКТУРАХ ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТИ**

Специальность: 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт – Петербург

2019

Работа выполнена в высшей школе механики и процессов управления Института прикладной математики и механики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор высшей школы механики и процессов управления Института прикладной математики и механики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Гуткин Михаил Юрьевич

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физики профилированных кристаллов федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе Российской академии наук»

Малыгин Геннадий Алексеевич

доктор физико-математических наук, профессор кафедры материаловедения и физики металлов, руководитель сектора «Моделирование объемных наноматериалов», старший научный сотрудник Научно-исследовательского института физики перспективных материалов федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный авиационный технический университет»

Еникеев Нариман Айратович

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования и науки «Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж.И. Алфорова Российской академии наук»

Защита состоится **19 декабря 2019 года в 15 часов** на заседании объединенного совета по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук Д 999.069.02, созданного на базе Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, Санкт-Петербургского национального исследовательского университета информационных технологий, по адресу: 199186, Санкт-Петербург, наб. реки Мойки, д.48, ауд. 52.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена (191186, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48, корп.5) и на сайте университета по адресу: http://disser.herzen.spb.ru/Preview/Karta/karta_000000569.html

Автореферат разослан «___» _____ 2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Анисимова Надежда Ивановна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

В настоящее время особое внимание привлекают неоднородные наноструктуры пониженной размерности, такие как композитные наночастицы и нанопроволоки, пентагональные частицы. Они обладают уникальными электронными, оптическими и механическими свойствами, которые находят широкое применение в различных областях современной техники: оптоэлектронике, фотонике, спинтронике, фотовольтаике, плазмонике, в сенсорных устройствах, устройствах накопления и передачи информации, в катализе, медицине и т. д.

Известно, что стабильность свойств композитных наноструктур существенно зависит от присутствия в них дефектов, остаточных упругих деформаций и механических напряжений, обусловленных несоответствием параметров кристаллических решеток и коэффициентов теплового расширения материалов, составляющих композит, а также неоднородностью химического состава. При определенных условиях напряженное состояние нанокомпозита релаксирует, что приводит к понижению запасенной в системе упругой энергии. Процессы релаксации, в подавляющем большинстве случаев протекающие путем образования дислокаций несоответствия, давно стали предметом исследования в материаловедении и физике плоских тонкопленочных гетероэпитаксиальных структур. Относительно недавно подобные исследования охватили квазиодномерные неоднородные наноструктуры. В то же время, дефектам несоответствия в сферически симметричных композитных наночастицах посвящено очень мало работ, хотя хорошо известно, что присутствие в наноразмерных телах различных дефектов кардинально влияет на различные функциональные (в первую очередь, электронно-оптические) свойства этих тел. Релаксация напряжений путем образования дислокаций несоответствия в наноструктурах имеет прямое экспериментальное подтверждение. Дислокации несоответствия наблюдались экспериментально в декаэдрических, икосаэдрических и монокристаллических наночастицах типа «ядро-оболочка» [1], в сплошных и полых нанокубиках [2], в нанопроволоках типа

«ядро-оболочка» с ограниченными ядрами [3]. Учет таких структурных особенностей реальных композитных нанопроволок и наночастиц, как многократные двойники и внутренние полости, а также реальной огранки составляющих этих наноструктур очень важен при разработке теоретических моделей релаксации в них напряжений, поскольку он позволяет оценить влияние этих особенностей на устойчивость таких наноструктур к образованию в них дефектов несоответствия.

Другим примером структурно-неоднородных наноматериалов являются малые кристаллические частицы металлов с гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой, часто принимающие форму многогранника, имеющего оси симметрии пятого порядка: пятиугольной призмы, икосаэдра или декаэдра. Такие частицы часто называют пентагональными частицами. Наличие осей симметрии пятого порядка вызывает в них неоднородную упругую деформацию, соответствующую высокому уровню остаточных механических напряжений. По мере роста таких частиц их упругая энергия быстро увеличивается пропорционально их объему и при некоторых условиях может релаксировать. Прикладной интерес представляют процессы релаксации, приводящие к увеличению свободной поверхности пентагональных частиц за счет образования внутренних полостей или роста с поверхности частиц нитевидных кристаллов. Понимание природы формирования пентагональных частиц и материалов на их основе требует подробного анализа механизмов релаксации остаточных напряжений и упругой энергии на ранних стадиях релаксации, а именно, изучения зарождения одиночных дислокаций и их взаимодействия с внутренними порами.

Цели исследования

Целью настоящей работы является анализ условий релаксации остаточных механических напряжений за счет образования призматических дислокационных петель в наноструктурах пониженной размерности, а именно: в композитных наночастицах типа «ядро-оболочка» со сплошным и полым ядром, в сплошных и полых икосаэдрических частицах и в композитных нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с ядром в форме длинной многоугольной призмы.

Задачи исследования:

- получить аналитическое решение осесимметричной граничной задачи теории упругости для круговой призматической дислокационной петли в сферическом слое. Рассчитать упругую энергию такой петли;
- определить критические условия образования круговых призматических дислокационных петель в композитных наночастицах типа «ядро-оболочка» со сплошным и полым ядром;
- определить критические условия образования круговых призматических дислокационных петель в сплошных и полых икосаэдрических частицах;
- получить аналитическое решение плоской задачи теории упругости для цилиндра, содержащего дилатационное включение в форме длинной четырехугольной призмы;
- определить критические условия зарождения прямоугольных призматических дислокационных петель в композитных нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с ядром в форме длинной шести-, четырех- и треугольной призм.

Научная новизна:

- впервые получено точное решение осесимметричной граничной задачи теории упругости о круговой призматической дислокационной петле в сферическом слое. В предельном случае полученное решение дает формулы для упругих полей и энергии таких петель в упругих телах с одной сферической границей: в шаре и в бесконечном теле со сферической полостью;
- аналитическое решение задачи о сферическом слое, содержащем призматическую дислокационную петлю, впервые позволило точно проанализировать критические условия зарождения круговых призматических петель дислокаций несоответствия в композитных наночастицах типа «ядро-оболочка» со сплошным и полым ядром, в сплошных и полых икосаэдрических частицах;
- впервые получены аналитические решения плоских задач теории упругости для цилиндра, содержащего дилатационную нить и дилатационное включение в виде длинной четырехугольной призмы. Решение для полей напряжений дано в явном аналитическом виде как комбинация элементарных функций, что выгодно отличает его от имеющегося решения для длинного

призматического включения квадратного поперечного сечения, симметрично расположенного относительно цилиндрической поверхности [4]. Более того, полученное решение учитывает трехмерное дилатационное несоответствие составляющих нанокомпозита (случай обобщенной плоской деформации), что делает его более перспективным для физических приложений;

– полученное аналитическое решение для упругого цилиндра, содержащего длинное призматическое включение, впервые позволило рассмотреть критические условия зарождения прямоугольных призматических дислокационных петель в композитных нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с ядром, имеющим огранку прямой призмы. Такой подход имеет ряд преимуществ по сравнению с применяемыми ранее осесимметричными моделями релаксации напряжений в композитных нанопроволоках типа «ядро-оболочка». Во-первых, разработанная модель учитывает реальную огранку ядер композитных наноструктур и эффекты, связанные с концентрацией напряжений на стыках плоских межфазных границ. Во-вторых, модель может быть использована для анализа большего числа механизмов релаксации, чем осесимметричные модели композитных нанопроволок; например, появляется возможность рассмотреть скольжение дислокаций вдоль плоских границ раздела в такой системе.

Теоретическая и практическая значимость

Полученные впервые аналитические решения граничных задач теории упругости для тел с дефектами (задачи о круговой призматической дислокационной петле в сферическом слое конечной толщины и о дилатационных призматических включениях в упругом цилиндре) дают существенный вклад в развитие континуальных моделей, используемых в механике неоднородных материалов и в физике твердого тела. Предложенные теоретические модели релаксации напряжений в композитных наночастицах типа «ядро-оболочка» со сплошным и полым ядром и в композитных нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с ядром в форме длинной многоугольной призмы могут быть использованы для разработки рекомендаций по выращиванию бездефектных композитных наноструктур с улучшенными электронными и оптическими свойствами. В случае икосаэдрических частиц полученные решения и предложенные модели формируют научные основы для управления релаксацией

остаточных напряжений и создания материалов с большой площадью свободной поверхности, использующихся как катализаторы и фильтры.

Методы исследования

В качестве основного инструмента для определения полей напряжений и энергий призматической дислокационной петли и дилатационных включений в телах конечных размеров, ограниченных сферическими или цилиндрическими поверхностями, используется теоретический аппарат классической линейно-изотропной теории упругости (метод суперпозиции, методы теории функций комплексной переменной (ТФКП) и выражения для общего решения бигармонической осесимметричной задачи в сферических координатах).

Процесс релаксации остаточных напряжений в неоднородных наноструктурах пониженной размерности (в композитных наночастицах и нанопроволоках, а также в икосаэдрических частицах) анализируется в рамках энергетического подхода, основанного на изучении изменения общей энергии системы при зарождении дефектов – дислокационных петель и пор.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Круговая призматическая дислокационная петля, помещенная соосно в упругий сферический слой, создает знакопеременную упругую дилатацию на его свободных поверхностях.

2. Наиболее предпочтительным местом зарождения круговых призматических дислокационных петель в сферически симметричных наночастицах типа «ядро-оболочка» и икосаэдрических частицах является экваториальная плоскость.

3. Полые наночастицы типа «ядро-оболочка» и икосаэдрические частицы обладают большей устойчивостью к зарождению круговых призматических дислокационных петель, чем сплошные.

4. Дилатационное включение в форме длинной многоугольной призмы создает неоднородное гидростатическое напряжение в упругом цилиндре.

5. К зарождению прямоугольных призматических дислокационных петель со свободной поверхности в нанопроволоках типа «ядро-оболочка» наиболее устойчивы нанопроволоки с ядром в форме длинной треугольной призмы, наименее устойчивы – нанопроволоки с цилиндрическим ядром.

6. К зарождению прямоугольных призматических дислокационных петель с межфазной границы в нанопроволоках типа «ядро-оболочка», наобо-

рот, наиболее устойчивы нанопроволоки с цилиндрическим ядром, наименее устойчивы – нанопроволоки с ядром в форме длинной треугольной призмы.

Достоверность полученных результатов

Полученные аналитические решения граничных задач теории упругости для тел с дефектами (о круговой призматической дислокационной петле в сферическом слое конечной толщины и о дилатационных призматических включениях в упругом цилиндре) удовлетворяют уравнениям равновесия и поставленным граничным условиям. При выполнении предельных переходов эти решения соответствуют известным решениям для частных случаев круговой призматической петли в сплошном упругом шаре [5] и аналогичной петли, соосной сферической поре [6]. В частном случае включения в виде длинной призмы квадратного поперечного сечения, симметрично расположенной в упругом цилиндре, полученные декартовы компоненты тензора напряжений совпадают с соответствующими компонентами, представленными в работе [7].

Достоверность результатов, предсказываемых теоретическими моделями релаксации остаточных напряжений путем образования призматических дислокационных петель, обеспечена корректной физической постановкой исследования, а также их согласием с имеющимися экспериментальными данными о наблюдении дефектов несоответствия в композитных наночастицах [1] и нанопроволоках [3].

Личный вклад автора

Все представленные в диссертации результаты получены автором лично или при его определяющем участии. Автор принимал активное участие в постановке и решении задач, интерпретации полученных результатов и подготовке публикаций.

Апробация работы

По результатам работы сделаны доклады на следующих международных и всероссийских конференциях:

1. XLI, XLII, XLIII, XLIV, XLV, XLVI и XLVII International summer schools-conferences on Advanced Problems in Mechanics (APM 2013 – APM 2019), Saint-Petersburg, Russia;

2. XV, XVI, XVII и XVIII Всероссийские молодежные конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (2013–2017), Санкт-Петербург, Россия;
3. 54 Международная конференция «Актуальные проблемы прочности», 2013, Екатеринбург, Россия;
4. XI Российская конференция по физике полупроводников, 2013, Санкт-Петербург, Россия;
5. XIX Международная конференция «Физика прочности и пластичности», 2015, Самара, Россия;
6. XLII, XLIII, XLIV, XLV и XLVI научно-практические конференции с международным участием «Неделя науки СПбПУ» (2013 – 2017), Санкт-Петербург, Россия;
7. XV International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials (IIB-2016), Moscow, Russia;
8. XXI, XXII и XXIII Петербургские чтения по проблемам прочности (2014, 2016 и 2018), Санкт-Петербург, Россия;
9. Engineering Mechanics Institute Conference «Engineering Mechanics» (EMI-2016), Metz, France;
10. VI, VII и VIII Международные школы «Физическое материаловедение» с элементами научных школ для молодежи, Тольятти, Россия, (2013, 2016 и 2017);
11. European Solid Mechanic Conference (ESMC-2018), Bologna, Italy;
12. 55th annual technical meeting «Society of Engineering Science» (SES-2018), Madrid, Spain;
13. XVI International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials (IIB-2018), Paris, France.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 8 работ в научных журналах, входящих в перечень ВАК и международные реферативные базы данных и системы цитирования (Web of science / Scopus).

Структура и объем диссертации

Работа состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и приложений. Общий объем диссертации – 147 страниц, включая 53 рисунка. Список литературы содержит 218 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении раскрыты актуальность и научная новизна работы, сформулирована цель исследования, представлены основные положения, выносимые на защиту, а также показана научная и практическая значимость результатов. Ниже излагается краткое содержание работы.

В первой главе «Обзор литературы» представлен обзор работ, посвященных экспериментальным и теоретическим исследованиям механизмов релаксации остаточных напряжений в неоднородных наноструктурах пониженной размерности, таких как композитные наночастицы типа «ядро-оболочка» со сплошным и полым ядром, сплошные и полые икосаэдрические частицы, и композитные нанопроволоки типа «ядро-оболочка» с ядром в форме длинной многоугольной призмы. В последней части приведен обзор имеющихся решений граничных задач теории упругости для сферических и цилиндрических тел с дефектами.

Во второй главе «Упругие поля и энергии круговой призматической дислокационной петли в сферическом слое» представлено оригинальное аналитическое решение осесимметричной задачи теории упругости для круговой призматической дислокационной петли (КПДП) в сферическом слое. Решение представлено в общей форме для осесимметричной задачи теории упругости в сферической системе координат в виде рядов по полиномам Лежандра, удобном для использования в физических приложениях. Упругая энергия такой петли представлена в форме двойного степенного ряда. Упругие напряжения, дилатация и энергия петли проиллюстрированы картами. Показано, что поля сильно экранируются внешней и внутренней поверхностями слоя.

На рис. 1а показано распределение упругой дилатации в сферическом слое, содержащем КПДП внедрения. Особый интерес представляет изменение знака дилатации на свободных поверхностях слоя. Отметим, что при отсутствии свободных поверхностей область размером порядка диаметра петли, опоясанная этой петлей, испытывает всестороннее сжатие, в то время как материал за пределами этой области – всестороннее растяжение. Присут-

ствие свободных поверхностей искажает дилатационное поле вокруг петли, а именно – на растянутой внешней поверхности слоя появляются локализованные области всестороннего сжатия (см. рис. 1а). Такое распределение дилатации может способствовать зарождению вакансий в растянутых зонах на свободных поверхностях слоя и их миграции в зоны сжатия с последующей аннигиляцией на КПДП. Другими словами, КПДП кинетически неустойчивы внутри однородного сферического слоя.

На рис. 1б показана зависимость упругой энергии КПДП, залегающей в экваториальной плоскости слоя, от ее приведенного радиуса. Видно, что упругая энергия достигает максимума $E_{el, \max} \approx 1.63Gb^2a$ для петли радиусом $c \approx 0.8a$. Упругая энергия, запасаемая петлями в сферическом слое, всегда меньше упругой энергии такой же петли в неограниченной среде; особенно это заметно при $c \rightarrow a$ или при $c \rightarrow a_p$. Это означает, что в теоретических расчетах процессов релаксации напряжений в композитных сферических наночастицах вклад петли в изменение энергии системы может быть аппроксимирован выражениями для ее энергии в неограниченной среде только при

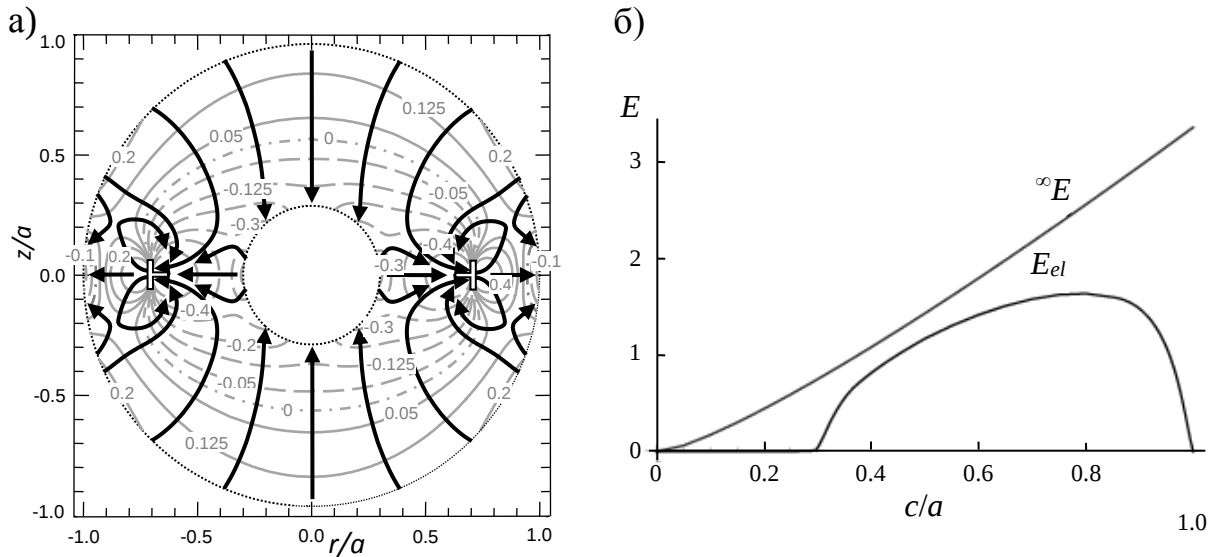


Рис. 1. а) Распределение упругой дилатации в сферическом слое, содержащем соосную круговую призматическую дислокационную петлю внедрения радиусом $0.7a$, лежащую в экваториальной плоскости слоя. Стрелками отмечены направления миграции вакансий; б) Зависимость упругой энергии петли, залегающей в экваториальной плоскости слоя, от ее приведенного радиуса. Значения упругой энергии петли даны в единицах Gb^2a , где G – модуль сдвига, b – величина вектора Бюргерса петли, a – внешний радиус слоя; внутренний радиус слоя – $0.3a$.

$a \gg c \gg a_p$. В остальных случаях следует использовать точные выражения для петли в сферическом слое.

В третьей главе «Релаксация напряжений несоответствия в сплошных и полых композитных наночастицах типа «ядро-оболочка» за счет зарождения круговых призматических дислокационных петель» решение граничной задачи, полученное в главе 2, используется для исследования релаксации напряжений несоответствия в композитных наночастицах типа «ядро-оболочка» со сплошным или полым ядром. Рассматривается зарождение КПДП на межфазной границе наночастицы с несоответствием параметров кристаллической решетки ядра и оболочки $f = 2(a_1 - a_2)/(a_1 + a_2)$, см. рис. 2а. Рассчитано изменение энергии при зарождении такой петли и определены критические параметры процесса релаксации. На рис. 2б представлена полученная аналитическая зависимость критического несоответствия f_{cr} от приведенного радиуса ядра R_0/a для сплошных и полых наночастиц. Видно, что для композитных наночастиц типа «ядро-оболочка» существует минимальное значение критического несоответствия $f_{cr, \min}$, такое, что при $f < f_{cr, \min}$ за-

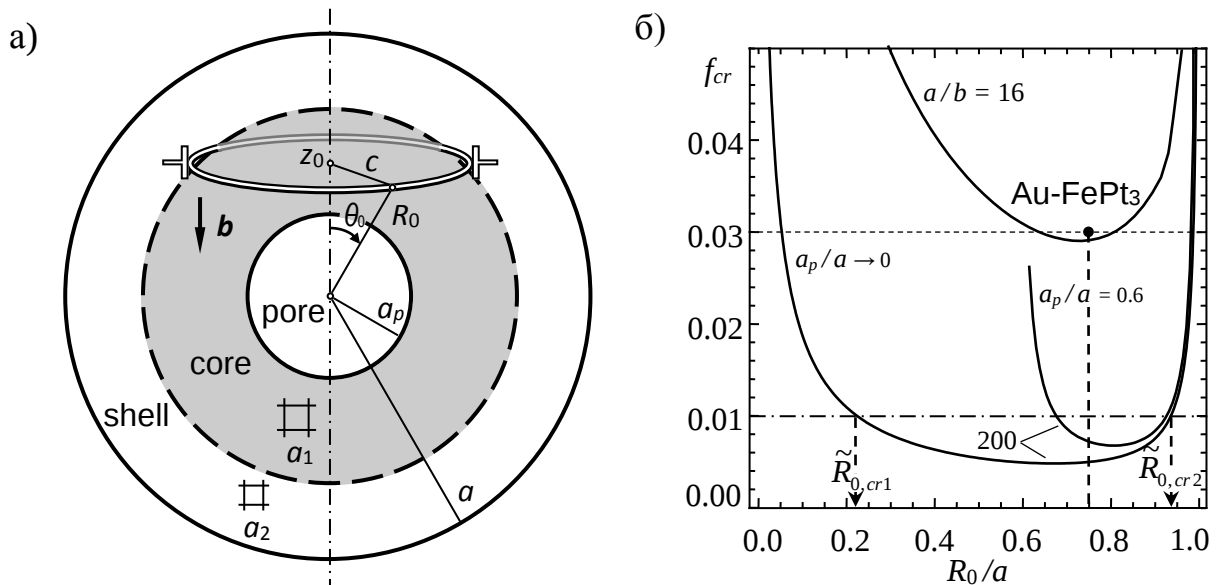


Рис. 2. а) Модель полый композитной наночастицы типа «ядро-оболочка» с круговой призматической дислокационной петлей несоответствия на межфазной границе; б) Зависимость критического несоответствия f_{cr} для наночастиц с внешним радиусом $a = 200b$ от приведенного радиуса ядра R_0/a для сплошной и полый наночастицы ($a_p = 0.6a$). Точка с координатами (0.75, 0.03) соответствует экспериментальному наблюдению полной дислокации несоответствия в сплошной наночастице Au-FePt₃ радиусом $16b$ [1].

рождение дислокации энергетически не выгодно ни при каких соотношениях радиусов ядра и оболочки. При заданном значении $f > f_{cr, \min}$ существует интервал значений приведенного радиуса ядра, внутри которого зарождение петель дислокации несоответствия энергетически выгодно. Вне этого интервала предпочтительным является когерентное состояние межфазной границы. С возрастанием f_{cr} этот интервал расширяется. Показано, что для наночастиц одинакового размера наличие внутренней полости увеличивает f_{cr} . В работе [1] наблюдались полные дислокации несоответствия в наночастицах с ядром Au размером ~ 6 нм и оболочкой FePt₃ толщиной ~ 1 нм. Несоответствие f в системе составляет 0.03. На рис. 2б отмечена точка (0.75, 0.03), попадающая в предсказанный интервал между критическими значениями приведенного радиуса ядра, в котором зарождение петли энергетически выгодно для наночастицы с радиусом $a = 16b$, что свидетельствует о согласии предсказаний теории с экспериментальными данными [1].

В четвертой главе «Релаксация остаточных напряжений в сплошных и полых икосаэдрических частицах за счет зарождения круговых призматических дислокационных петель» исследуется релаксация остаточных напряжений в сплошных и полых икосаэдрических частицах за счет зарождения КПДП. Для описания сложного напряженного состояния икосаэдрических частиц используется континуальная модель стерео-дисклинации Маркса-Иоффе с мощностью $\chi \approx 0.0613$ (см. рис. 3а). При зарождении КПДП изменение энергии частицы ΔE определяется суммой собственной энергии петли, энергии ее взаимодействия со стерео-дисклинацией и энергии ступеньки, образующейся на поверхности частицы за счет миграции вакансий, коагулирующих и образующих КПДП. На рис. 3б и 3в представлены зависимости изменения энергии ΔE от приведенного радиуса дислокационной петли c/a , расположенной в экваториальной плоскости соответственно сплошных и полых икосаэдрических частиц. Образование петли энергетически выгодно, если $\Delta E < 0$. Видно, что существует некоторый критический радиус частицы a_{cr} , такой, что при $a < a_{cr}$ зарождение КПДП энергетически невыгодно. Критический размер частицы возрастает с ростом радиуса полости. В икосаэдрических частицах, превышающих критический размер ($a > a_{cr}$), КПДП должна

занять наиболее энергетически выгодное положение в экваториальной плоскости с оптимальным радиусом c_{opt} , приводящее систему к минимуму изменения энергии ΔE . В работе показано, что приведенный оптимальный радиус петли c_{opt}/a увеличивается с ростом внутреннего a_p и внешнего a радиусов частицы, пока не выходит на насыщение. Например, для сплошных икосаэдрических частиц предельное значение оптимального радиуса составляет $0.6a$.

В пятой главе «Поля напряжений от дилатационных дефектов в упругом цилиндре» представлены оригинальные аналитические решения плоских задач теории упругости для цилиндра с дилатационными включениями. С помощью известных выражений для напряжений от длинной дилатационной нити в неограниченной среде [7] получены поля, создаваемые такой нитью в цилиндре и дилатационным включением в виде длинной четырехугольной призмы в неограниченной среде и в упругом цилиндре (рис. 4а). Все напряжения представлены в замкнутой форме в виде комбинации элементарных функций. Интересно, что если осевое напряжение от дилатационного включения в форме длинной выпуклой четырехугольной призмы в неограниченной среде однородно (внутри включения постоянно, а вне включения равно

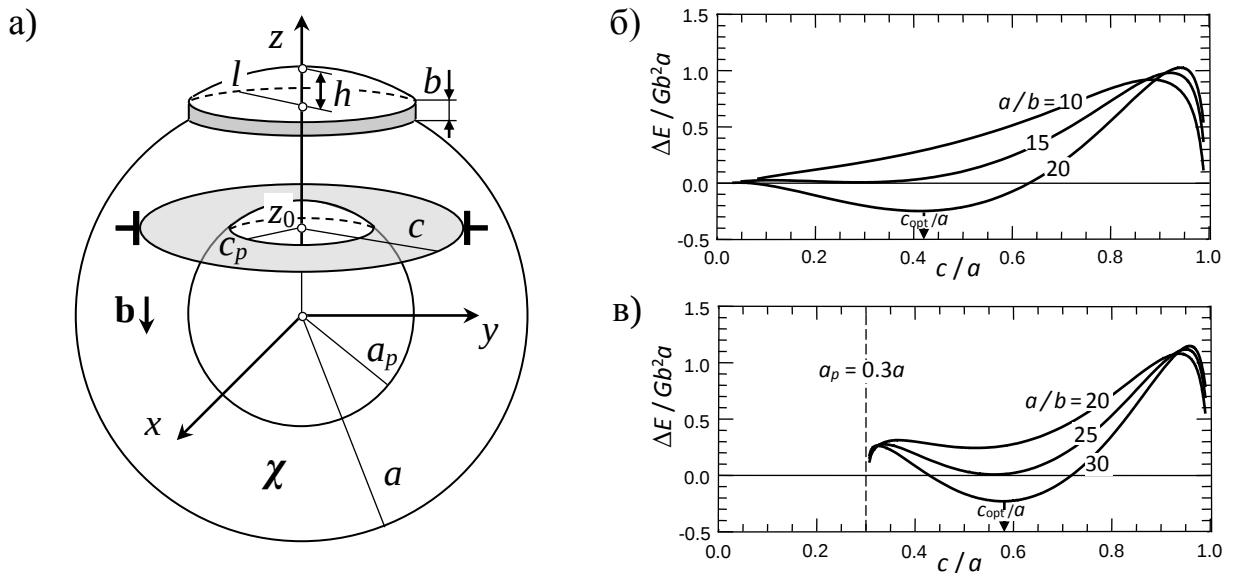


Рис. 3. а) Континуальная модель релаксации остаточных напряжений в полый икосаэдрической частице за счет образования круговой призматической дислокационной петли. б,в) Зависимости изменения энергии ΔE от приведенного радиуса c/a круговой призматической петли, расположенной в экваториальной плоскости сплошной (б) и полый $a_p = 0.3a$ (в) икосаэдрической частицы.

нулю), то присутствие свободной цилиндрической поверхности приводит к нарушению этой однородности (рис. 4б).

В шестой главе «Релаксация напряжений несоответствия в композитных нанопроволоках типа ядро-оболочка с ядром в форме длинной многогранной призмы за счет зарождения прямоугольных призматических дислокационных петель» решение упругой граничной задачи для призматического дилатационного включения в цилиндре, полученное в главе 5, используется для исследования начальных стадий релаксации напряжений несоответствия в композитных нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с ядром в форме длинных шести-, четырех- и треугольной призм. Рассматривается зарождение прямоугольных призматических дислокационных петель (ППДП) различной формы в разных местах поперечного сечения нанопроволоки: от центра плоской грани ядра в оболочку, от точки на поверхности нанопроволоки напротив центра грани ядра в оболочку, от центра плоской грани ядра в ядро, от точки на поверхности нанопроволоки напротив вершины ядра в оболочку. Изменение упругой энергии за счет зарождения ППДП рассчитывается в предположении, что толщина оболочки много меньше радиуса нанопроволо-

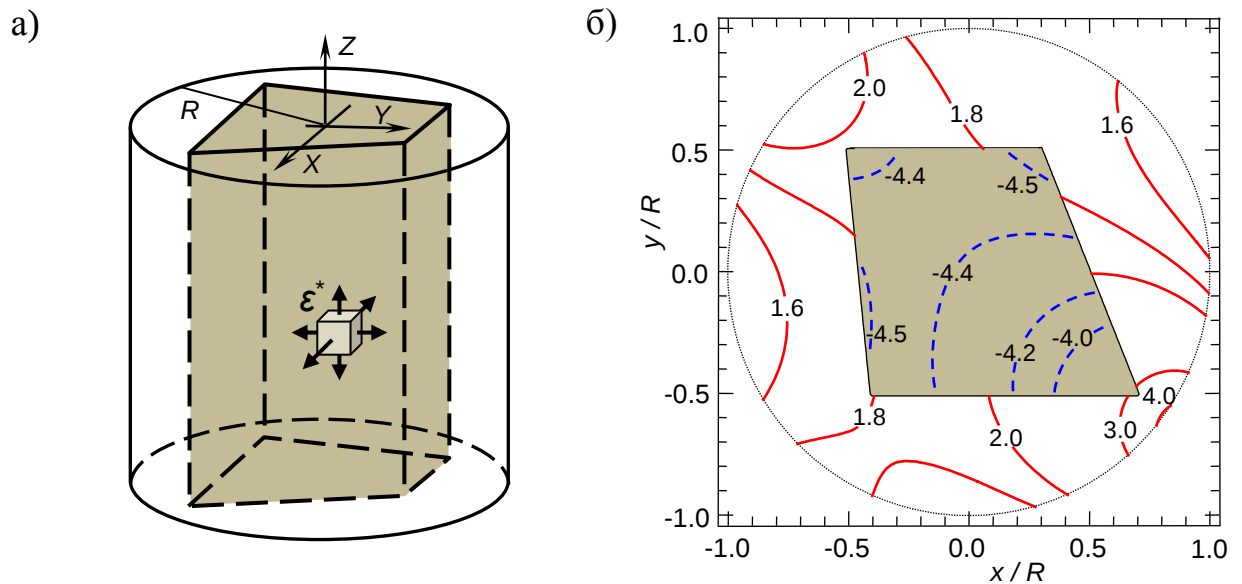


Рис. 4. а) Фрагмент упругого цилиндра с включением в форме длинной четырехугольной призмы с собственной дилатацией ε^* . б) Распределение осевого напряжения в цилиндре с призматическим включением. Координаты вершин включения в единицах R : $(-0.4, -0.5)$, $(0.7, -0.5)$, $(0.3, 0.5)$, $(-0.5, 0.5)$. Напряжения даны в единицах $2G\varepsilon^*(1+\nu)/[2\pi(1-\nu)]$.

ки. Определены критические параметры процесса релаксации. Показано, что при зарождении петель на свободной поверхности наиболее предпочтительны петли, вытянутые вдоль границы, а при их зарождении на межфазной поверхности – вытянутые поперек границы. На рис. 5 представлены зависимости критического несоответствия f_c от условной толщины оболочки h для нанопроволок с круговым, шестиугольным, квадратным и треугольным поперечным сечением ядра. Видно, что при $h > 5$ нм наиболее устойчива к зарождению ППДП со свободной поверхности (рис. 5а) нанопроволока с треугольным ядром (с наибольшим f_c), наименее устойчива – нанопроволока с круговым ядром (с наименьшим f_c). В случае зарождения призматических дислокационных петель на межфазной границе (рис. 5б) при малых h , наоборот, наиболее устойчива нанопроволока с круговым ядром, а наименее устойчива – с треугольным. Сравнение полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными о наблюдении призматических дислокационных петель в поперечном сечении композитных нанопроволок типа «ядро-оболочка» с ядрами в форме длинной шести-, четырех- и треугольной призм представлено в табл. 1. Видно, что, как и предсказывают расчеты, петли наблюдались при $f > f_c$ и не наблюдались при $f < f_c$.

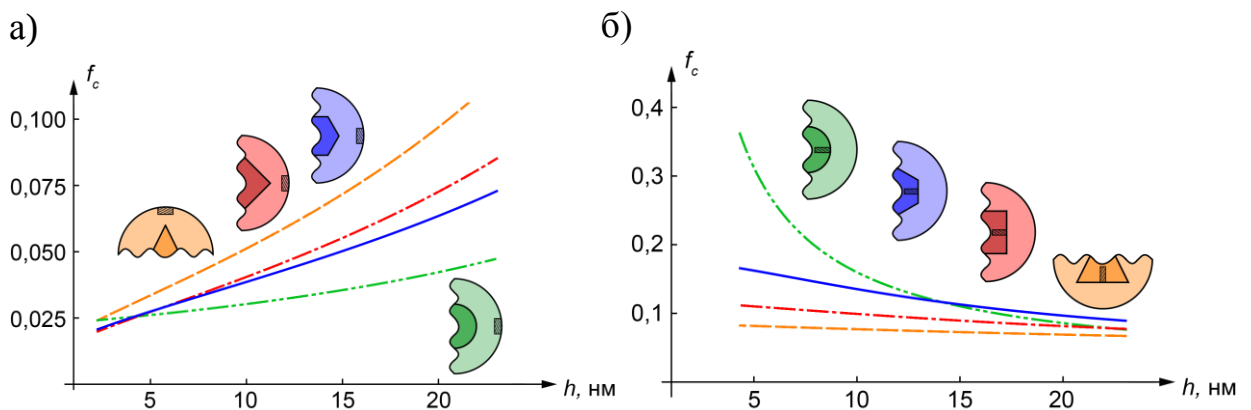


Рис. 5. Зависимость критического несоответствия f_c композитных нанопроволок типа «ядро-оболочка» с круговым (— · — · —), шестиугольным (—), квадратным (— · — · —) и треугольным (— — — —) ядром от условной толщины оболочки h : а) прямоугольные призматические петли прорастают со свободной поверхности в оболочку ($a/c = 0.2$, $c/b = 10$); б) прямоугольные призматические петли прорастают с межфазной поверхности в ядро ($a/c = 5$, $a/b = 10$). Здесь $b = 0.3$ нм, коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$, $R = 75$ нм, a и c – размеры прямоугольной призматической петли.

Таблица 1

Сравнение результатов теоретических расчетов с экспериментальными данными для нанопроволок типа «ядро-оболочка» с ограниченными ядрами

Ядро / оболочка	Форма ядра	b , нм	R , нм	h , нм	L , нм	f , %	f_c , %	Наблюдение ПДП	Источник
InAs / GaAs		0.34	45	5	40	7	3	✓	[3]
Si / Ge		0.57	46	29	26	4	7	✗	[8]
SnO ₂ / TiO ₂		0.46	15	17	3	3	6	✗	[9]
GaAs / Fe ₃ Si		0.30	160	160	49	1	11	✗	[10]

Примечание: здесь h – расстояние от вершины поперечного сечения ядра до свободной поверхности; L – длина ребра поперечного сечения ядра; f – фактическое несоответствие в системе; f_{cr} – расчетное критическое несоответствие в системе; ПДП – призматическая дислокационная петля.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе представлены решения граничных задач теории упругости для тел с дефектами, а именно: об аксиально-симметричной круговой призматической дислокационной петле (КПДП) в сферическом слое конечной толщины и об упругом цилиндре с длинным соосным дилатационным призматическим включением. Полученные решения использованы для анализа дислокационных механизмов релаксации в композитных наночастицах типа «ядро-оболочка» со сплошным и полым ядром, в сплошных и полых икосаэдрических частицах и в композитных нанопроволоках типа «ядро-оболочка» с ядром в форме длинной многоугольной призмы. Таким образом, все поставленные задачи выполнены, и цель работы достигнута.

На основе полученных результатов сформулируем следующие основные выводы.

1. Упругая дилатация от КПДП на свободных поверхностях сферического слоя имеет знакопеременный характер. Такое распределение создает условия для диффузионного потока точечных дефектов со свободной поверхности к КПДП, делая ее кинетически неустойчивой.

2. Упругая энергия КПДП в сферическом слое всегда меньше упругой энергии такой же петли в неограниченной среде. Наибольшей упругой энер-

гией обладает дислокационная петля, лежащая в экваториальной плоскости, с радиусом ~ 0.8 от внешнего радиуса сферического слоя.

3. Наиболее предпочтительным местом зарождения КПДП является экваториальная плоскость композитных наночастиц и икосаэдрических частиц. Этот вывод хорошо согласуется с экспериментальными наблюдениями дислокаций несоответствия в декаэдрических, икосаэдрических и монокристаллических наночастицах, состоящих из ядер Au и оболочек FePt₃ [38,39].

4. Полые композитные наночастицы и икосаэдрические частицы обладают большей устойчивостью к зарождению КПДП, чем сплошные.

5. В отличие от однородного гидростатического напряжения (постоянного внутри включения и равного нулю вне его) от дилатационного включения в неограниченной среде, гидростатическое напряжение от включения в цилиндре со свободной поверхностью неоднородно как внутри включения, так и вне его.

6. При зарождении прямоугольных призматических дислокационных петель (ППДП) со свободной поверхности нанопроволоки типа «ядро-оболочка» наиболее устойчивой структурой являются нанопроволоки с ядром в форме длинной треугольной призмы, а наименее устойчивой – нанопроволоки с цилиндрическим ядром. При этом наиболее предпочтительны ППДП, вытянутые вдоль межфазной границы.

7. При зарождении ППДП с межфазной границы нанопроволоки типа «ядро-оболочка», наоборот, наиболее устойчивой структурой являются нанопроволоки с цилиндрическим ядром, а наименее устойчивой – нанопроволоки с ядром в форме длинной треугольной призмы. В этом случае наиболее предпочтительны ППДП, вытянутые поперек межфазной границы.

8. В случае тонкой оболочки на массивном ядре наиболее предпочтительным местом для зарождения ППДП является область на свободной поверхности нанопроволоки напротив вершины поперечного сечения призматического ядра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Ding Y., Sun X., Wang Z.L., Sun S. Misfit dislocations in multimetallic core-shelled nanoparticles // Appl. Phys. Lett. 2012. Vol. 100. No. 11. Art. No. 111603.

- [2] Sneed B.T., Brodsky C.N., Kuo C.-H., Lamontagne L.K., Jiang Y., Wang Y., Tao F., Huang W., Tsung C.-K. Nanoscale-phase-separated Pd-Rh boxes synthesized via metal migration: an archetype for studying lattice strain and composition effects in electrocatalysis. *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, Vol. 135, p. 14691–14700.
- [3] Popovitz-Biro R., Kretinin A., Von Huth P., Shtrikman H. InAs/GaAs core-shell nanowires // *Cryst. Growth Des.* 2011. Vol. 11. No. 9. P. 3858-3865.
- [4] Zou W.-N., He C., Zheng Q.-S. Inclusions in a finite elastic body // *Int. J. Solids Struct.* 2012. Vol. 49. P. 1627-1636.
- [5] Willis J.R., Bullough B., Stoneham A.M. The effects of dislocation loop on the lattice parameter, determined by X-ray diffraction // *Phil. Mag.* 1983. Vol. 48. No. 1. P. 95-107.
- [6] Wolfer W.G., Drugan W.J. Elastic interaction energy between a prismatic dislocation loop and a spherical cavity // *Phil. Mag. A.* 1988. Vol. 57. No. 6. P. 923-937.
- [7] Kolesnikova A.L., Soroka R.M., Romanov A.E. Defects in the elastic continuum: classification, fields and physical analogies // *Mater. Phys. Mech.* 2013. Vol. 17. No. 1. P. 71-91.
- [8] Jenichen B., Hilse M., Herfort J., Trampert A. Facetted growth of Fe₃Si shells around GaAs nanowires on Si(111) // *J. Cryst. Growth.* 2015. Vol. 427. P. 21-23.
- [9] Nguyen B.M., Swartzentruber B., Ro Y.G., Dayeh S.A. Facet-selective nucleation and conformal epitaxy of Ge shells on Si nanowires // *Nano Lett.* 2015. Vol. 15. No 11. P. 7258-7264.
- [10] Nie A., Liu J., Li Q., Cheng Y., et al. Epitaxial TiO₂/SnO₂ core-shell heterostructure by atomic layer deposition // *J. Mater. Chem.* 2012. Vol. 22. P. 10665-10671.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в научных изданиях, рекомендованных ВАК:

1. Красницкий С.А. Петли дислокаций несоответствия в композитных наночастицах типа ядро-оболочка / Гуткин М.Ю., Колесникова А.Л., Красницкий С.А., Романов А.Е. // *Физика твердого тела.* – 2014. – Т. 56. – № 4. – С. 723–730. (0,375/0,2 печ. л.)

2. Красницкий С.А. Дислокационные петли в сплошных и полых полупроводниковых и металлических наногетероструктурах / Гуткин М.Ю., Красницкий С.А., Смирнов А.М., Колесникова А.Л., Романов А.Е. // *Физика твердого тела.* – 2015. – Т. 57. – № 6. – С. 1158–1163. (0,375/0,2 печ. л.)

Публикации в научных изданиях, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования (Web of science / Scopus):

1. Krasnitckii S.A. Circular prismatic dislocation loops in elastic bodies with spherical free surfaces / Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Krasnitckii S.A., Romanov A.E. // International Journal of Solids and Structures. – 2013. – Vol. 50. – No. 10. – P. 1839–1857. (1,125/0,625 печ. л.)

2. Krasnitckii S.A. Misfit dislocation loops in hollow core–shell nanoparticles / Gutkin M.Yu., Kolesnikova A.L., Krasnitckii S.A., Romanov A.E., Shalkovskii A.G. // Scripta Materialia – 2014. – Vol. 83. – P. 1–4. (0,25/0,15 печ. л.)

3. Krasnitckii S.A. Stress relaxation in icosahedral small particles via generation of circular prismatic dislocation loops / Gutkin M.Yu., Kolesnikova A.L., Krasnitckii S.A., Dorogin L.M., Serebryakova V.S., Vikarchuk A.A, Romanov A.E. // Scripta Materialia – 2015. – Vol. 105. – P. 10–13. (0,25/0,15 печ. л.)

4. Krasnitckii S.A. Misfit stresses in a core-shell nanowire with core in the form of long parallelepiped / Krasnitckii S.A., Smirnov A.M., Gutkin M.Yu. // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – Vol. 690. – No. 1. Art. No. 012022. (0,375/0,15 печ. л.)

5. Krasnitckii S.A. Misfit stresses in a composite core-shell nanowire with an eccentric parallelepipedal core subjected to one-dimensional cross dilatation eigenstrain / Krasnitckii S.A., Kolomoetc D.R., Smirnov A.M., Gutkin M.Yu. // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – Vol. 816. – No. 1. Art. No. 012043. (0,375/0,2 печ. л.)

6. Krasnitckii S.A. Misfit stress relaxation in composite core-shell nanowires with parallelepiped cores using rectangular prismatic dislocation loops / Krasnitckii S.A., Kolomoetc D.R., Smirnov A.M., Gutkin M.Yu. // Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – Vol. 993. Art. No. 012021. (0,375/0,2 печ. л.)