УДК 539.3

ВНУТРЕННИЕ НАПРЯЖЕНИЯ И СТРУКТУРНЫЕ ДЕФЕКТЫ В НАНОПРОВОЛОКАХ

© 2022 г. А. Е. Романов^{1,*}, А. Л. Колесникова^{1,2}, М. Ю. Гуткин^{1,2,3}

¹ Университет ИТМО, С.-Петербург, Россия ² Институт проблем машиноведения РАН, С.-Петербург, Россия ³ СПб Политехнический университет Петра Великого, С.-Петербург, Россия *e-mail: alexey.romanov@niuitmo.ru

> Поступила в редакцию 14.03.2022 г. После доработки 07.05.2022 г. Принята к публикации 15.05.2022 г.

Рассматриваются источники внутренних напряжений в нанопроволоках, моделью которых служит бесконечный упругоизотропный цилиндр кругового сечения. Источниками внутренних напряжений являются дефекты, обладающие собственной дисторсией (деформацией) и локализованные или в точке, или на линии, или на поверхности, или в области внутри нанопроволоки. Приводятся соотношения для упругих полей и энергий некоторых дефектов в нанопроволоках, включая прямолинейные дислокации и дисклинации, дислокационные петли и дилатационные включения. Анализируется взаимодействие между источниками внутренних напряжений в упругом цилиндре. Обсуждается роль найденных решений задач механики деформируемого твердого тела при интерпретации релаксационных процессов в пентагональных нанопроволоках и гибридных полупроводниковых наноструктурах с радиальными и аксиальными гетерограницами.

Ключевые слова: нанопроволока, дислокация, дисклинация, решеточное несоответствие, дилатационное включение, механические напряжения, упругая энергия **DOI:** 10.31857/S0032823522040117

1. Введение. Следуя установившейся терминологии, будем называть нанопроволоками твердые тела, которые в двух измерениях имеют размеры от 1 до 100 нм, а в третьем — много больше 100 нм. В зависимости от химического состава, различают органические и неорганические нанопроволоки, а также однородные и неоднородные нанопроволоки. В последнем случае в отдельный класс выделяют композитные (или гибридные) нанопроволоки, которые состоят из разных материалов (фаз), отделенных друг от друга межфазными границами. К гибридным мы также относим нанопроволоки, содержащие структурные дефекты: дислокации, дисклинации и их ансамбли.

Взрывной интерес, появившийся в последние три декады к нанопроволокам и другим нанобъектам, в первую очередь объясняется принципиально новыми функциональными (физическими и химическими) свойствами, которые возникают у кристаллов при уменьшении их размеров до длины волны де Бройля для электрона в данном материале, формируя так называемые квантово-размерные эффекты [1]. Важный пример реализации квантово-размерных объектов представляют собой полупроводниковые гибридные нанопроволоки [2, 3].

Наноматериалы, имеющие ограничения по одному из нескольких измерений, обладают рядом особенностей и с точки зрения механических свойств [4, 5]. Эти особенности могут проявляться как в упругом поведении материалов и их пластическом отклике, так и на переходе к стадии разрушения. В работах Никиты Федоровича Морозова с соавторами значительное внимание уделено различным аспектам механического поведения наноматериалов и нанообъектов: например, влияние характерного размера нанокристаллической полосы (ее ширины) на значение модулей упругости рассмотрено в [6], параметры жесткости нанообъектов исследованы в [7], а в работе [8] рассмотрены динамические свойства материала с ансамблем наноразмерных включений, наконец, упругие поля и энергии дисклинаций в полых наночастицах изучены в [9].

В настоящей работе мы анализируем механическое поведение гибридных нанопроволочных структур, содержащие дефекты: дислокации, дисклинации, упругие включения. В качестве адекватной механической модели нанопроволоки рассматривается бесконечный упругоизотропный круговой цилиндр, в котором имеются источники внутренних напряжений, что эквивалентно наличию в объеме цилиндра собственных (неупругих) деформаций — *eigenstrains*.

Решение упругих задач для твердых тел с геометрией кругового цилиндра важно для многих приложений в механике и физике. Начиная с классической работы Филона [10] и до недавних исследований напряженно-деформированного состояния цилиндров конечной длины [11] или полых цилиндров со сложными реологическими свойствами материала [12], опубликованы тысячи статей, посвященных анализу напряженно-деформированного состояния твердых тел с геометрией цилиндра. Существуют две возможности постановки задач теории упругости для цилиндра: (i) приложение сил и моментов на его поверхности или (ii) допущение собственной деформации в заданной области цилиндра. Решение задач первого типа для бесконечного цилиндра, нагруженного на части поверхности постоянным давлением, было в деталях рассмотрено Лурье [13]. Второй тип проблем связан с состоянием цилиндра с внутренними напряжениями без каких-либо внешних нагрузок. Известными примерами такого состояния являются дислокации Вольтерра [14], когда собственная деформация локализована на выделенной поверхности внутри полого цилиндра. Собственную деформацию можно задать в конечном объеме внутри упругого цилиндра. В результате мы приходим к задаче упругого включения аналогично случаю, рассмотренному впервые Эшелби для включений в бесконечном упругом континууме [15].

План изложения материала в статье следующий. В разделе 2 мы обсуждаем собственные дисторсии и деформации в упругом цилиндре, включая их общую классификацию по геометрическому признаку, и даем примеры собственных деформаций, относящиеся к аксиальным и радиальным включениям, а также изолированным дислокациям и дисклинациям. Раздел 3 посвящен примерам решения задач теории изотропной упругости для прямолинейных и петлевых дислокаций и дисклинаций в цилиндре (нанопроволоке) и для распределенной собственной деформации. В разделе 4 дан анализ взаимодействующих собственных деформаций, которые могут одновременно возникать в нанопроволоках. Наконец, в заключительном разделе 5 кратко обсуждаются физические эффекты в нанопроволоках, обусловленные наличием собственных деформаций и структурных дефектов.

2. Собственные деформации в цилиндре. Общий подход к внутренним источникам упругих искажений в материале – дефектам – с точки зрения механики твердого тела был развит [16, 17] как продолжение идей Вольтерры [14], Эшелби [15], Кренера [18], Де Вита [19] и Муры [20]. В этом подходе дефекты вводятся в трехмерный континуум с помощью собственных дисторсий (или собственных деформаций – *eigenstrains*), локализованных либо в точке, либо на линии, либо на поверхности, либо в трехмерной области.

2.1. Классификация собственных дисторсий и деформаций по геометрическому признаку. В соответствии с размерностью области задания дефекта мы имеем точечные (0D), линейные (1D), поверхностные (2D) и объемные (3D, также известные как включения) дефекты с соответствующими собственными (неупругими) дисторсиями ${}^{n}\beta_{ij}^{*}$ (*n* – размерность дефекта) [21]:

$${}^{0}\beta_{ij}^{*} = \beta_{ij}^{T} v \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{0})$$

$${}^{1}\beta_{ij}^{*} = \beta_{ij}^{T} s \delta(\mathbf{L})$$

$${}^{2}\beta_{ij}^{*} = \beta_{ij}^{T} l \delta(\mathbf{S})$$

$${}^{3}\beta_{ij}^{*} = \beta_{ij}^{T} \delta(V)$$
(2.1)

В этих соотношениях безразмерный тензор β_{ij}^T задает характер превращений в ходе неупругого формоизменения материала; многомерные дельта-функции Дирака $\delta(...)$ указывают на область задания превращения: точку, линию, площадку и объем (первое – четвертое соотношения в формуле (2.1), соответственно). Формальные, в общем случае, коэффициенты v, s и l вводятся для того, чтобы собственные дисторсии ${}^n\beta_{ij}^*$ оставались безразмерными. В частности, трехмерная дельта функция $\delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)$, имеющая в декартовых координатах вид $\delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0)$, обладает размерностью [$\delta(\mathbf{R})$] = x^{-3} , значит, для того, чтобы дисторсия ${}^0\beta_{ij}^*$ оставалась безразмерной, необходим коэффициент v размерностью [v] = x^3 .

Заметим, что вместо собственных дисторсий (2.1) могут быть заданы упомянутые выше собственные деформации (eigenstrains) ${}^{n} \varepsilon_{ij}^{*}$ – симметричные части тензоров, задаваемых формулами (2.1). Например, дислокации удобно характеризовать собственной дисторсией, а дилатационные дефекты различной размерности — собственной деформацией.

Неупругое формоизменение материала (твердого тела) может иметь различную природу. Оно возникает в ходе фазовых превращений, например, мартенситного превращения, когда меняется симметрия и размеры элементарной ячейки кристалла [22], или в результате теплового расширения твердых тел [23]. Решеточное несоответствие на границе раздела кристаллических материалов различающегося химического состава [24] является случаем, представляющим наибольший интерес для устройств электроники и оптоэлектроники. Наконец, неоднородная пластическая деформация материала, осуществляемая за счет движения дислокаций [25], служит наиболее распространенным примером собственных деформаций.

Отметим, что дефекты большей размерности могут быть получены из дефектов меньшей размерности путем суперпозиции. Например, из 0-мерных дефектов, распределенных с некоторой плотностью вдоль линии ρ_L , или по поверхности ρ_S или по объему ρ_V получаются, соответственно, линейный и 2-мерный дефекты или включение:

$${}^{1}\beta_{ij}^{*} = \int_{L}^{0} \beta_{ij}^{*} \rho_{L}(L_{0}) dL_{0}$$

$${}^{2}\beta_{ij}^{*} = \int_{S}^{0} \beta_{ij}^{*} \rho_{S}(S_{0}) dS_{0}$$

$${}^{3}\beta_{ij}^{*} = \int_{V}^{0} \beta_{ij}^{*} \rho_{V}(V_{0}) dV_{0}$$
(2.2)

2.2. Примеры собственных деформаций. Прежде чем переходить к ключевым, с точки зрения физико-технических применений, упругим задачам для микро- и нанопрово-



Рис. 1. Бесконечно длинный цилиндр с аксиальной (а) и радиальной (б) собственными деформациями и янус-цилиндр (в). На графиках схематично показаны изменения собственных деформаций.

лок, определим основные собственные деформации, которыми задается состояние проволоки, моделируемой бесконечно длинным упругим цилиндром.

2.2.1. Аксиальные и радиальные собственные деформации, заданные в объеме цилиндра. На рис. 1а показан цилиндр с дилатационной собственной деформацией ${}^{3}\varepsilon_{ii}^{*}$ (i = x, y, z и $i = r, \varphi, z$ в декартовой и цилиндрической системах координат соответственно, суммирования по повторяющемуся индексу нет), меняющейся вдоль оси цилиндра z и называемой аксиальной:

$${}^{3}\varepsilon_{ij}^{*} = \varepsilon^{T}(z)H(a-r)H[(z-z_{1})(z_{2}-z)]$$
(2.3)

Здесь $\varepsilon^{T}(z)$ – скалярная функция, задающая изменение собственной деформации, H(...) – функция Хевисайда, a – радиус цилиндра, $[z_1, z_2]$ – интервал задания собственной деформации по оси z, $z_1 < z < z_2$.

На рис. 1б изображен цилиндр с радиальной собственной деформацией:

³
$$\varepsilon_{ii}^* = \varepsilon^T(r)H(c-r); \quad i = x, y, z$$
 или $i = r, \varphi, z,$ (2.4)

где c – радиус области задания собственной дилатационной деформации ε^{T} , c < a.

2.2.2. Янус-цилиндр. Цилиндр, на сегменте которого задана собственная деформация, относится к янус-цилиндрам. В частном случае, когда цилиндр состоит из двух

одинаковых частей (рис. 1в), его дилатационная собственная деформация запишется в виде:

$${}^{3}\varepsilon_{ij}^{*} = \varepsilon^{T} H(\pi - \varphi)H(a - r); \quad i = x, y, z$$
 или $i = r, \varphi, z$ (2.5)

2.2.3. Локализованные дефекты: дислокации и дисклинации. Собственные дисторсии линейных дефектов, дислокаций и дисклинаций, задаются площадкой разреза, на которой дефект вводится, и способом преобразования берегов разреза [14]. Это означает, что формула (2.1) собственной дисторсии ${}^{2}\beta_{ij}^{*}$ для этих дефектов может быть конкретизирована [26, 27]:

$${}^{2}\beta_{ij}^{*} = \delta_{i}(S) \left\{ -b_{j} - e_{jpq} \omega_{p} (x_{q} - x_{q}^{0}) \right\}$$
(2.6)

Здесь $\delta_i(S)$ – векторная дельта-функция Дирака на поверхности разреза *S* с нормалью n_i , определяемая как $\int_S \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r'}) dS'_{ij}$; в фигурных скобках формализован скачок смещений берегов разреза площадки; b_j – компоненты вектора Бюргерса дислокации; ω_p – компоненты аксиального вектора Франка дисклинации; x_q^0 – точка, через которую проходит ось ротации для дисклинации; e_{jpq} – компоненты тензора Леви-Чивита.

Оказывается, что упругие поля дислокаций и дисклинаций непрерывны везде кроме линии, ограничивающей площадку задания дефекта. Более того, упругие поля не зависят от выбора площадки. Если ограничивающая линия находится в теле и не выходит на свободную поверхность, то это — линия дефекта.

На рис. 2а-в показаны прямолинейная краевая и винтовая дислокации, круговая призматическая дислокационная петля и прямолинейная клиновая дисклинация с обозначением их линий.

В цилиндре компоненты собственной дисторсии прямолинейной краевой и винтовой дислокаций (рис. 2a) с векторами Бюргерса $\mathbf{b} = b_x \mathbf{e}_x$ и $\mathbf{b} = b_z \mathbf{e}_z$ соответственно (\mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y и \mathbf{e}_z – орты координатных осей), показывающими относительный сдвиг берегов разреза, удобно записать в виде:

$${}^{2}\beta_{yz}^{*} = -b_{x}H(x-x_{0})\delta(y-y_{0}), \quad {}^{2}\beta_{xz}^{*} = -b_{z}H(y-y_{0})\delta(x), \quad (2.7)$$

где (x_0, y_0) – координата линии краевой дислокации и $(0, y_0)$ – координата линии винтовой дислокации.

Для призматической дислокационной петли (петли внедрения), изображенной на рис. 26, собственная дисторсия определяется формулой:

$${}^{2}\beta_{zz}^{*} = bH(c-r)\delta(z-z_{0}), \qquad (2.8)$$

где c – радиус петли, c < a; z_0 – координата плоскости залегания петли.

Собственная дисторсия соосной цилиндру клиновой дисклинации с вектором Франка $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega} \, \mathbf{e}_z \, (\mathbf{e}_z - \text{орт оси } z)$, характеризующим относительный поворот берегов разреза (рис. 2в), записывается в виде:

$${}^{2}\beta_{yy}^{*} = \omega(x - x_{0})H(x - x_{0})\delta(y)$$
(2.9)

Заметим, что при определении дисторсий прямолинейных дислокаций (2.7) и дисклинации (2.9) в качестве области задания дефекта берется полуплоскость.

В следующем разделе рассматриваются упругие энергии, обусловленные перечисленными собственными деформациями в цилиндре.

3. Примеры решений задач теории упругости для цилиндров с собственными деформациями. В случае бесконечной упругоизотропной среды при заданной собственной де-



Рис. 2. Краевая и винтовая дислокации (а), призматическая дислокационная петля внедрения (б) и положительная клиновая дисклинация (в) в цилиндре.

формации или дисторсии дефекта его упругие поля рассчитываются по известным формулам, в которые входит тензор Грина, имеющий аналитическое представление [20]. Для упругого цилиндра (особенно при наличие неоднородностей в распределении упругих модулей) такой подход не применим, а граничные задачи при условии отсутствия усилий на свободной поверхности цилиндра (для компонент тензора напряжений $\sigma_{ri} = 0$, $i = r, \varphi, z$) требуют индивидуального подхода для выбранного вида собственной деформации (дисторсии).

В зависимости от цели и симметрии граничной задачи, возможно определять упругие поля дефекта, пользуясь уже известными полями дефектов меньшей размерности, как это было реализовано для бесконечного континуума. В работах [16, 17, 28] показано, как из 0-мерных дефектов — бесконечно-малых призматических петель [29] получаются сначала (а) 0-мерный центр дилатации, и определяются его упругие поля, затем (б) дилатационная круговая нить, поля которой рассчитываются путем интегрирования полей центров дилатации, распределенных по окружности, далее (в) дилатационный диск, и его поля находятся интегрированием круговых дилатационных нитей, распределенных по радиусу круга, и, наконец, (г) включения в виде конечного кругового цилиндра и усеченного шара, поля которых также записываются в аналитическом виде [28]. В работах [30, 31] был продемонстрирован переход от решения граничной задачи о дилатационном диске в цилиндре к решению для дилатационного включения с собственной деформацией, зависящей от осевой координаты цилиндра. 3.1. Изолированные прямолинейные дислокации и дисклинации. Впервые упругие поля прямолинейных дислокаций и дисклинаций в цилиндре были даны Вольтеррой в 1907 г. в основополагающей статье [14] о дисторсиях в полых толстостенных трубах. Эти решения, полученные для случая, когда линии дислокаций или дисклинаций лежат на оси полого или, в пределе, сплошного бесконечно длинного цилиндра, хорошо известны и многократно цитировались, в том числе в классических учебниках по теории упругости и механике деформируемого твердого тела [32, 33].

Упругая задача для винтовой дислокации с вектором Бюргерса **b** = (0, 0, b), смещенной с оси сплошного цилиндра радиуса *a* на некоторое расстояние $y_0 = d$ (см. рис. 2а), была рассмотрена Эшелби [34]. Решение в этом случае может быть найдено простой суперпозицией упругих полей данной дислокации и виртуальной дислокации изображения противоположного знака, расположенной на линии, проходящей через ось цилиндра и линию исходной дислокации, за пределами цилиндра на расстоянии a^2/d от

линдра и линию исходнои дислокации, за пределами цилиндра на расстоянии *a /a* от оси цилиндра. Энергия на единицу длины такой смещенной относительно оси дислокации оказывается следующей [25]:

$$E^{s} = \frac{Gb^{2}}{2\pi} \ln \frac{a^{2} - d^{2}}{r_{c}a},$$
(3.1)

где G — модуль сдвига, b — модуль вектора Бюргерса винтовой дислокации, r_c — радиус ядра дислокации. Из соотношения (3.1) следует, что дислокация в бесконечном цилиндре имеет единственное неустойчивое положение равновесия на оси этого цилиндра. В этой же работе [34] было показано, что наличие свободных торцов у цилиндра конечной длины, содержащего винтовую дислокацию, приводит к закручиванию цилиндра вокруг своей оси на погонный угол:

$$\alpha = \frac{b}{\pi a^2} \left(1 - \frac{d^2}{a^2} \right) \tag{3.2}$$

При этом дислокация приобретает два положения равновесия в цилиндре — устойчивое на его оси и неустойчивое на расстоянии $\approx 0.54a$ от нее.

Упругие поля и поведение винтовой дислокации в стенке бесконечно длинного полого цилиндра исследовались в работах [35–37]. Решения были получены с помощью двух бесконечных рядов виртуальных дислокаций изображения, расположенных внутри полости и вне цилиндра, для случаев соосной полости [35, 37] и полости [36], ось которой была смещена с оси цилиндра. В работе [37] показано, в частности, что наличие внутренней полости приводит к качественным отличиям в распределении поля напряжения дислокации: смене знака напряжений возле внутренней поверхности стенки, высокой концентрации напряжения и его градиента на этой поверхности.

Для клиновой дисклинации с вектором Франка $\omega = (0, 0, \omega)$, смещенной относительно оси цилиндра вдоль оси *x* на расстояние $x_0 = d$, см. рис. 2в, решение для напряжений (случай плоской деформации) задается следующей функцией напряжений Эйри [38]:

$$\chi^{\Delta} = \frac{G\omega}{8\pi(1-\nu)} \left[\left((x-d)^2 + y^2 \right) \ln \frac{a^2 \left((x-d)^2 + y^2 \right)}{(xd-a^2)^2 + y^2 d^2} - \frac{(x^2+y^2)(d^2-a^2)}{a^2} \right],$$
(3.3)

где v – коэффициент Пуассона, а остальные обозначения были введены выше по тексту.

Погонная энергия такой дисклинации с сингулярным ядром, т.е. в случае $r_c \rightarrow 0$, задается простым соотношением [38, 39]:

$$E^{\Delta} = \frac{G\omega^2}{16\pi(1-\nu)} \frac{(a^2 - d^2)^2}{a^2}$$
(3.4)

Аналогичные задачи были рассмотрены для прямолинейных краевых дислокаций. Первое упоминание о решении для краевой дислокации, смещенной относительно оси цилиндра, полученном в 1949 году в дипломной работе Дитце под руководством Лейбфрида, опубликовано Зеегером [40]. Такое же решение позже было найдено предельным переходом в задаче о краевой дислокации в цилиндрической неоднородности в матрице при устремлении к нулю жесткости матрицы [41]. С другой стороны, это же решение можно найти предельным переходом от двухосного диполя клиновых дисклинаций мощности (модулем вектора Франка) ω с плечом *l*, смещенных с оси бесконечного сплошного цилиндра [42], к краевой дислокации при $l \rightarrow 0$ и $\omega l = b \neq 0$.

Для краевой дислокации с вектором Бюргерса **b** = (b, 0, 0) и линией, проходящей через точку (x_0, y_0) параллельно оси z цилиндра радиуса a (рис. 2a), функция напряжений Эйри имеет вид [42]:

$$\chi^{\perp} = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)} \left((y-y_0) \ln \frac{r^2 C^2}{a^2 P^2} + \frac{y_0(r^2-a^2)(r_0^2-a^2)}{a^2 C^2} + \frac{y a^2 P^2}{r^2 C^2} \right),$$
(3.5)

где $r^2 = x^2 + y^2$, $r_0^2 = x_0^2 + y_0^2$, $P^2 = (x_0 - x)^2 + (y_0 - y)^2$, $C^2 = (x_0 - xa^2/r^2)^2 + (y_0 - ya^2/r^2)^2$.

Энергия краевой дислокации, смещенной относительно оси бесконечного упругоизотропного цилиндра на расстояние *c*, демонстрирует зависимость от параметров задачи, аналогичную случаю винтовой дислокации [41]:

$$E^{\perp} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \left(\ln \frac{a^2 - c^2 - cr_c}{ar_c} + \frac{c^2}{a^2} - 1 \right)$$
(3.6)

Здесь координаты дислокации определены как $x_0 = 0, y_0 = c$.

В заключение этого раздела отметим, что в последние десятилетия возрос интерес к анализу упругого поведения прямолинейных краевых [43–46] и винтовых [47–50] дислокаций в трехфазных упруго-неоднородных цилиндрических системах, состоящих из цилиндрического ядра, оболочки и окружающей бесконечной матрицы.

3.2. Призматическая дислокационная петля. Для призматической дислокационной петли, соосной длинному круговому цилиндру (рис. 2б), упругая задача эффективно решается с применением общих формул для упругих полей в цилиндре, подвергнутом произвольной осесимметричной нагрузке [13]. Подробно решение этой задачи изложено в работе [51].

Для вычисления упругих энергий цилиндров (и любых других тел) с заданными собственными деформациями ${}^{n}\varepsilon_{ij}^{*}$ (дисторсиями ${}^{n}\beta_{ij}^{*}$) результативным оказывается подход, в которой энергия рассчитывается как половина работы напряжений σ_{ij} , вызванных собственными деформациями, при "создании" этих деформаций [26], что является следствием теоремы взаимности работ в линейной теории упругости [13, 20, 25]. В результате запасенная энергия записывается как

$$E = -\frac{1}{2} \int_{V} {}^{n} \beta_{ij}^{*} \sigma_{ij} dV \quad \text{или} \quad E = -\frac{1}{2} \int_{V} {}^{n} \varepsilon_{ij}^{*} \sigma_{ij} dV$$
(3.7)



Рис. 3. Энергия дислокационной призматической петли в цилиндре (1) и в бесконечной упругой среде (2) как функция ее радиуса. Энергия выражена в единицах Gb^2a , где G – модуль сдвига, b – величина вектора Бюргерса дислокационной петли, a – радиус цилиндра. Расчеты сделаны для коэффициента Пуассона v = 0.3 и радиуса ядра дислокации $r_c = 0.01a$.

Здесь *V* — объем тела. Выделенная область интегрирования по этому объему включена в формулы ${}^{n} \varepsilon_{ii}^{*}$ и ${}^{n} \beta_{ii}^{*}$.

Приведем формулу энергии призматической дислокационной петли E^{PL} в цилиндре, найденную в работе [51] с помощью соотношения (3.7):

$$E^{PL} = \frac{Gb^2 at}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1.08at}{r_c} - 2t \int_0^\infty \frac{t^2 \beta^2 I_0^{*2} + w I_1^{*2} - 2t \beta I_0^* I_1^* (w I_1 K_1 + \beta^2 I_0 K_0)}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2} d\beta \right), \quad (3.8)$$

где $w = \beta^2 - 2\nu + 2$, $I_{0,1} = I_{0,1}(\beta)$, $I_{0,1}^* = I_{0,1}(t\beta)$, $I_{0,1}(\beta)$ и $I_{0,1}(t\beta)$ — модифицированные функции Бесселя 1-го рода, $K_{0,1} = K_{0,1}(\beta)$ — функция Макдональда, t = c/a, c — радиус петли, a — радиус цилиндра, r_c — радиус ядра дислокации.

На рис. 3 показана зависимость энергии призматической петли от ее радиуса в цилиндре. Там же для сравнения показана аналогичная зависимость для петли в бесконечной среде.

3.3. Цилиндр с радиальным несоответствием. Напряженно-деформированное состояние, вызванное радиальным распределением собственных деформаций в цилиндре, т.е. нанопроволоки со структурой "ядро/оболочка" (см. рис. 1б), исследовалось сначала для упруго-однородного [52], а затем и для упруго-неоднородного [53] цилиндров. Например, для одинаковых значений коэффициентов Пуассона $v_1 = v_2 = v$ и разных значений модулей сдвига G_1 и G_2 соответственно материалов ядра и оболочки с радиусами *с* и *а* ненулевые компоненты тензора напряжений несоответствия в цилиндрической системе координат (r, φ, z) можно записать в следующем компактном виде [53]:

$$\sigma_{rr}^{(1)} = -A\varepsilon^T (1-t^2), \quad \sigma_{rr}^{(2)} = -A\varepsilon^T \left(\frac{c^2}{r^2} - t^2\right)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = -A\varepsilon^{T}(1-t^{2}), \quad \sigma_{\varphi\varphi}^{(2)} = A\varepsilon^{T}\left(\frac{c^{2}}{r^{2}}+t^{2}\right)$$
(3.9)

$$\sigma_{zz}^{(1)} = -A\varepsilon^{T} \frac{(1-t^{2})[1+t^{2}+g(1-t^{2})]}{t^{2}+g(1-t^{2})}, \quad \sigma_{zz}^{(2)} = A\varepsilon^{T} \frac{t^{2}[1+t^{2}+g(1-t^{2})]}{t^{2}+g(1-t^{2})},$$

где использованы обозначения: $A = \frac{2G_2(1 + v)}{1 + t^2(1 - 2v) + g(1 - t^2)(1 - 2v)}, t = c/a, g = G_2/G_1.$ Верхний индекс в скобках в обозначениях напряжений указывает на принадлежность к ядру (1) или к оболочке (2), а параметр ε^T – это параметр несоответствия кристаллических решеток их материалов. В случае кубических решеток с параметрами b_1 и b_2 его можно определить как $\varepsilon^T = 2(b_1 - b_2)/(b_1 + b_2).$

Погонная упругая энергия такого цилиндра E^m (энергия несоответствия) определяется по формуле (3.7):

$$E^{m} = \frac{A(\varepsilon^{T})^{2}\pi c^{2}}{2}(1-t^{2})\left(3+\frac{1}{t^{2}+g(1-t^{2})}\right)$$
(3.10)

Недавно были также выполнены исследования, в которых изучались структуры типа "ядро/оболочка" с ядрами, имеющими в сечении форму правильных многоугольников, см. например, работы [54–57]. Решения для прямоугольных и квадратных сечений получали с помощью комплексных потенциалов. Для случаев треугольного и шестиугольного сечения предварительно решалась граничная задача теории упругости для бесконечно тонкой дилатационной нити [16], параллельной оси цилиндра, а затем поля напряжений включений находили прямым интегрированием полей напряжений нити.

3.4. Цилиндр с аксиальной собственной деформацией. Задача об упругих полях цилиндра с дилатационной собственной деформацией, меняющейся вдоль оси цилиндра z (рис. 1а), была решена путем интегрирования полей распределенных по z дилатационных дисков [30, 31]. В свою очередь упругие поля дилатационного бесконечно тонкого диска были найдены методом Лурье [13], упоминавшимся выше при рассмотрении призматической дислокационной петли.

Приведем формулы для энергий цилиндра с дилатационными включениями с резкими границами и с границами, где дилатация линейно спадает до $0 - E^{D11}$ и E^{D12} :

$$E^{D11} = \frac{2G(1+\nu)(\varepsilon^{T})^{2}\pi a^{3}}{1-\nu} \left(\tilde{h}_{0} - \frac{8(1+\nu)}{\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{I_{1}^{2}}{\beta^{2}(\beta^{2}I_{0}^{2} - wI_{1}^{2})} \sin^{2}\frac{\tilde{h}_{0}\beta}{2} d\beta \right)$$

$$E^{D12} = \frac{2G(1+\nu)(\varepsilon^{T})^{2}\pi a^{3}}{1-\nu} \times$$

$$\times \left(\tilde{h}_{0} + \frac{2}{3}\tilde{h}_{1} - \frac{32(1+\nu)}{\pi\tilde{h}_{1}^{2}} \int_{0}^{\infty} \frac{I_{1}^{2}}{\beta^{4}(\beta^{2}I_{0}^{2} - wI_{1}^{2})} \sin^{2}\frac{\tilde{h}_{1}\beta}{2} \sin^{2}\frac{(\tilde{h}_{1} + \tilde{h}_{0})\beta}{2} d\beta \right),$$
(3.11)

где ε^{T} – величина собственной деформации включения (3), $\tilde{h}_{0,1} = h_{0,1}/a$, h_0 – высота включения с ε^{T} , h_1 – размер области размытости границ включения, т.е. области, где дилатация спадает от ε^{T} до 0. Остальные обозначения те же, что и в формуле (3.8). В работе [31] представлена энергия включения с размытыми границами, в которых дилатация спадает по экспоненциальному закону.



Рис. 4. Энергия цилиндра в зависимости от относительного размера дилатационного включения h_0/a при различных размерах областей размытия его границ h_1 . Энергия выражена в единицах $G(\varepsilon^T)^2 a^3$, где G – модуль сдвига, ε^T – величина собственной деформации включения, a – радиус цилиндра. Расчеты сделаны для коэффициента Пуассона v = 0.3.

На рис. 4 показана зависимость $E^{D12}(\tilde{h}_0)$ для набора h_1 . Пунктирной кривой обозначена зависимость $E^{D11}(\tilde{h}_0)$.

4. Взаимодействующие собственные деформации в цилиндре. В общем случае взаимодействие источников внутренних напряжений (дефектов) описывается перекрестным членом вида [20]:

$$W = -\int_{V} \varepsilon_{ij}^{*\mathrm{I}} \sigma_{ij}^{\mathrm{II}} dV, \qquad (4.1)$$

где собственная деформация ε_{ij}^{*I} относится к одному из взаимодействующих дефектов, а напряжения σ_{ij}^{II} вызваны вторым дефектом; при этом интегрирование проводится по всему объему *V* рассматриваемого упругого тела; в нашем случае это бесконечный цилиндр.

Ниже приводятся примеры использования соотношения (4.1) для анализа важного с точки зрения практических приложений взаимодействия источников внутренних напряжений в нанопроволоках.

4.1. Дисклинация в нанопроволоке с радиальной собственной деформацией. Проволоки и стержни с пентагональным поперечным сечением с характерным диаметром от 10 нм до 5 мкм часто наблюдаются для материалов с ГЦК кристаллической структурой [58]. Простой моделью таких нано- и микрообъектов служит круговой цилиндр с клиновой дисклинацией мощностью $\omega = 2\pi - 10 \sin^{-1} (1/\sqrt{3}) \approx 0.128 \approx 7°20'$, расположенной вдоль оси цилиндра [58–60]. Знание упругих полей и энергий дисклинированного цилиндра позволяет исследовать и предсказывать многие структурные особенности, свойственные пентагональным микро- и нанообъектам. Основное наблюдение, кото-

рое можно хорошо объяснить на основе дисклинационного подхода – это проявление

различных релаксационных процессов в структуре пентагональных нанопроволок и микростержней, возникающих с увеличением их диаметра [61–63]. В данном разделе мы рассмотрим образование слоев с решеточным несоответствием в пентагональных нанопроволоках (рис. 5а), что с точки зрения механики материалов сводится к задаче о взаимодействии дисклинации с радиальной собственной деформацией.

Погонная энергия взаимодействия дисклинации мощностью ω , расположенной в цилиндре радиуса *a*, в котором имеется ядро радиуса *c*, испытывающее собственную деформацию ε^{T} (эквивалентную несоответствию) оказывается следующей [64, 65]:

$$W = -2\pi \int_{0}^{c} \varepsilon^{T} \operatorname{Tr} \sigma_{ij}^{\omega} r dr = -\frac{G(1+\nu)\omega\varepsilon^{T}a^{2}}{1-\nu}t^{2} \ln t, \qquad (4.2)$$

где след тензора напряжений дисклинации в цилиндре Tr $\sigma_{ij}^{\omega} = \frac{G\omega(1+\nu)}{2\pi(1-\nu)} \left(\ln \frac{r^2}{a^2} + 1 \right),$

t = c/a.

Энергия взаимодействия в зависимости от знака собственной деформации может оказаться отрицательной, что компенсирует или даже перекрывает увеличение энергии структуры "ядро/оболочка", задаваемое соотношением (3.10). Суммарное изменение энергии ΔE на единицу длины дисклинированной нанопроволоки с появлением слоя с несоответствием (рис. 5а) имеет вид:

$$\Delta E = \frac{G(1+\nu)\varepsilon^T a^2 t^2}{1-\nu} \Big(2\pi \varepsilon^T (1-t^2) - \omega \ln t \Big), \tag{4.3}$$

где первый член суммы — это энергия несоответствия (3.10) при условии равенства упругих модулей, второй член — это энергия взаимодействия дисклинации с ядром цилиндра (4.2).

На рис. 5б, в показаны графики зависимости $\Delta E(t)$ для различных ε^T и карта изолиний энергии $\Delta E(t,\varepsilon^T)$. Видно, что при $\varepsilon^T < 0$ в большом диапазоне относительного размера ядра *t* существует выигрыш в энергии дисклинированной проволоки при по-явлении в ней ядра с несоответствием: $\Delta E < 0$.

4.2. Дислокации в нанопроволоке с радиальной собственной деформацией.

4.2.1. Прямолинейная краевая дислокация в нанопроволоке со структурой "ядро/оболочка". Изучение взаимодействия прямолинейных краевых дислокаций с радиальными собственными деформациями в цилиндре важно для выявления критических условий протекания релаксационных процессов за счет возникновения дислокация несоответствия (ДН) в нанопроволоках со структурой "ядро/оболочка", см. [52, 66, 67].

Например, в случае цилиндрического ядра погонная энергия взаимодействия краевой ДН, расположенной на границе раздела между упруго-однородными изотропными ядром и оболочкой и ориентированной таким образом, что ее вектор Бюргерса **b** направлен вдоль касательной \mathbf{e}_{φ} к этой границе — $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_{\varphi}$ (см. рис. 6), описывается простой формулой [52]:

$$W = -b \int_{c}^{a} \sigma_{\varphi\varphi}^{(2)}(r) dr = \frac{G(1+\nu)b\varepsilon^{T}a}{1-\nu}t(t^{2}-1), \qquad (4.4)$$

где окружное напряжение в оболочке $\sigma_{\phi\phi}^{(2)}$ определяется второй формулой (3.9), t = c/a.

Просуммировав выражения (3.6) и (4.4), авторы работы [52] определили изменение полной погонной энергии нанопроволоки при образовании в ней ДН – ΔE и с его помощью нашли критическое условие начала релаксации: $\varepsilon^T > \varepsilon_c^T(c, a)$, где ε_c^T – крити-



Рис. 5. Выигрыш в энергии ΔE при образовании ядра с несоответствием в цилиндре с клиновой дисклинацией мощностью $\omega \approx 0.128$ как функция относительного радиуса ядра t = c/a и собственной деформации ядра (параметра несоответствия) ε^T . (а) дисклинированный цилиндр с ядром с несоответствием, (б) зависимость от параметра t для набора ε^T , тонкие штриховые линии обозначают положение минимумов на кривых; (в) контуры равных энергий в координатах $t - \varepsilon^T$. Погонные энергии даны в единицах Ga^2 , где G – модуль сдвига, a – радиус цилиндра, а для коэффициента Пуассона использовано значение v = 0.3.



Рис. 6. Дислокация несоответствия в цилиндрической системе типа "ядро–оболочка". Показана ситуация, когда собственная деформация ядра $\varepsilon^T > 0$.

ческое значение параметра несоответствия. Это критическое несоответствие можно представить в виде:

$$\varepsilon_{c}^{T}(c,a) = \frac{b}{4\pi(1+\nu)a(1-t^{2})} \left(1 + \ln\frac{(1-t)(1+t+\tilde{r}_{c})-\tilde{r}_{c}}{\tilde{r}_{c}} + \frac{(1-t^{2})(1-t-\tilde{r}_{c})(1+t+\tilde{r}_{c})[2(t-1)(1+t+\tilde{r}_{c})-1+2\tilde{r}_{c}]}{2[(1-t)^{2}-(2+\tilde{r}_{c})(1-t)+\tilde{r}_{c}]^{2}} \right),$$
(4.5)

где $\tilde{r}_c = r_c/a$ — нормированный радиус дислокационного ядра.

Численный анализ выражения (4.5) показал, что управляющими параметрами зарождения ДН в такой гетероструктуре могут служить как величина несоответствия, так и радиус ядра нанопроволоки, и толщина ее оболочки. Если несоответствие и радиус ядра достаточно малы, то ДН не может зародиться ни при какой, сколь угодно большой толщине оболочки.

В случае призматического ядра исследовались различные механизмы релаксации напряжений несоответствия: зарождение полных и частичных краевых дислокаций на свободной поверхности оболочки, переползание полной краевой дислокации с этой поверхности к границе раздела между ядром и оболочкой и испускание ребром ядра скользящих диполей полных и частичных краевых дислокаций [56].

4.2.2. Призматическая дислокационная петля в нанопроволоке со структурой "ядро/оболочка". Расчет энергии упругого взаимодействия дислокаций с напряжениями несоответствия в нанопроволоках типа "ядро/оболочка" проводился также для разных петлевых конфигураций дислокаций. Большинство из этих конфигураций представляли собой призматические дислокационные петли с вектором Бюргерса, перпендикулярным к плоскости петли (рис. 7а). Образование круговых петель ДН, расположенных на



Рис. 7. Призматическая петля дислокации несоответствия в цилиндрической нанопроволоке со структурой "ядро/оболочка" (а) и выигрыш в энергии проволоки ΔE (б) при формировании петли в зависимости от относительного радиуса ядра t = c/a и его собственной деформации ε^T . Энергия выражена в единицах $G\varepsilon^T b^3$, где G – модуль сдвига, b – величина вектора Бюргерса дислокационной петли. Показана ситуация, когда собственная деформация ядра $\varepsilon^T > 0$. Расчеты представлены для проволоки радиуса a = 50 нм при коэффициенте Пуассона v = 0.3 и радиусе ядра дислокации $r_c = b = 0.3$ нм.

границе между ядром и оболочкой в поперечном сечении нанопроволоки, анализировалось в работах [51, 53, 68, 69].

Энергия взаимодействия петли ДН с полем напряжений несоответствия в случае упруго однородной нанопроволоки определяется простой формулой [51, 53, 68]:

$$W = -2\pi b \int_{0}^{c} \sigma_{zz}^{(1)} r dr = \pm \frac{2\pi G(1+\nu)b\varepsilon^{T}a^{2}}{1-\nu}t^{2}(1-t^{2}),$$
(4.6)

где $\sigma_{zz}^{(1)}$ – осевое напряжение несоответствия в ядре (см. выражение (3.9с) при g = 1). Здесь полагаем, что $\varepsilon^T > 0$, тогда верхний знак в формуле (4.6) относится к петле внедрения, а нижний знак – к петле вакансионного типа (рис. 7а). Все обозначения в формуле (4.6) соответствуют обозначениям, введенным ранее.

С использованием выражения (4.6) и формулы для энергии петли в цилиндре (3.8) авторы [51, 53, 68] построили зависимость изменения энергии ΔE проволоки со структурой "ядро/оболочка" при формировании в ней петли ДН и определили критические условия образования петли ДН. На рис. 76 контур $\Delta E = 0$ задает зависимость

критического несоответствия $\varepsilon_c^T(t)$. Было показано, что ε_c^T монотонно уменьшается с увеличением относительного радиуса t = c/a и толщины оболочки $\Delta t = (a - c)/a$. Это означает, что при заданном несоответствии ε^T зарождение петли ДН становится энергетически выгодно, если t и Δt достигают некоторых критических значений. Для об-

щего анализа ситуации особенно удобны диаграммы $\varepsilon_c^T(t)$, построенные численно для разных значений радиуса нанопроволоки *a* [51]. Кроме того, была рассчитана равновесная плотность бесконечного периодического ряда петель ДН, распределенных вдоль границы ядра и оболочки [51]. Полученные теоретические результаты хорошо соответствуют данным экспериментальных наблюдений.

С целью изучения энергетических барьеров, возникающих в процессе образования ДН, были рассмотрены [57, 70–72] модели зарождения малых (по сравнению с радиусами ядра и оболочки) прямоугольных призматических петель в разных местах поперечных и продольных сечений композитных нанопроволок: на границе раздела между ядром и оболочкой с расширением либо в ядро, либо в оболочку, и на свободной поверхности оболочки с расширением как вдоль поверхности, так и в глубину оболочки к ее границе с ядром.

Аналогичные модели зарождения малых прямоугольных призматических петель были развиты для сплошных композитных нанопроволок с призматическими ядрами, имеющими квадратное [57, 71], треугольное [57] и шестиугольное [57, 72] сечения.

4.3. Дислокации и дилатационные включения в нанопроволоке с аксиальной собственной деформацией. В настоящее время цилиндры с аксиальной собственной деформацией являются рабочей моделью для теоретического изучения релаксационных и других механо-физических процессов в гибридных полупроводниковых структурах, которые представляют собой проволоки, составленные из кристаллических слоев разных материалов.

4.3.1. Призматическая дислокационная петля вблизи границы дилатационного включения. Анализ упругих полей цилиндра с дилатационным включением, выходящим на свободную боковую поверхность (см. рис. 1а) [31], стимулировал изучение релаксационных процессов за счет образования призматических дислокационных петель вблизи границы включения (рис. 8а). В этом случае расчет аналогичен изложенным выше: сначала находится формула для энергии взаимодействия дислокационной петли с полем включения, затем определяется полное изменение энергии гибридной проволоки с появлением в ней дислокационной петли – ΔE .

Приведем формулу ΔE , когда размер включения настолько велик по сравнению с радиусом цилиндра, что дислокационная петля взаимодействует только с одной границей включения, находясь на расстоянии L от нее:

$$\Delta E = \frac{Gb^2 at}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1.08at}{r_c} - 2t \int_0^\infty \frac{t^2 \beta^2 I_0^{*2} + w I_1^{*2} - 2t \beta I_0^* I_1^* (w I_1 K_1 + \beta^2 I_0 K_0)}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2} d\beta + \frac{8(1+\nu)\epsilon^* a}{b} \int_0^\infty \frac{t I_0^* I_1 - I_0 I_1^*}{\beta^2 I_0^2 - w I_1^2} \sin \frac{L\beta}{a} d\beta \right)$$
(4.7)

Здесь первые два слагаемых – это энергия дислокационной петли в цилиндре (3.8), последнее слагаемое – энергия взаимодействия петли с полем включения. Как и в формуле (3.8), здесь введены следующие обозначения $w = \beta^2 - 2\nu + 2$, $I_{0,1} = I_{0,1}(\beta)$, $I_{0,1}^* = I_{0,1}(t\beta)$, $I_{0,1}(\beta)$ и $I_{0,1}(t\beta)$ – модифицированные функции Бесселя 1-го рода, $K_{0,1} = K_{0,1}(\beta)$ – функция Макдональда, t = c/a, c – радиус петли, a – радиус цилиндра, r_c – радиус ядра дислокации.



Рис. 8. Призматическая дислокационная петля вблизи дилатационного включения. (а) Геометрическая модель системы. Изображен случай, когда петля находится вне включения. (б) Зависимость критического радиуса цилиндра a_c , при котором образуется дислокационная петля, от параметра несоответствия ε^T между частями двухфазного цилиндра с одной границей несоответствия. Здесь b – величина вектора Бюргерса дислокации. Стрелками отмечены значения несоответствия для конкретных комбинаций пар полупроводниковых материалов.

На основании кривых $\Delta E = 0$ в координатах (t, ε^T) (см. подобный график на рис. 76) для различных расстояний петли от границы включения *L* при фиксированном радиусе цилиндра *a* определяется минимальное значение ε_c^T , при котором петле энергетически выгодно появиться в цилиндре. Далее строится зависимость $\varepsilon_c^T(a)$ и на ее основании обратная зависимость $a_c(\varepsilon^T)$ (рис. 86).

4.3.2. Взаимодействующие аксиальные дилатационные области. Упругая энергия цилиндра с двумя и более аксиальными областями исследовалась в работах [73, 74]. Было рассчитано взаимодействие дилатационных включений в цилиндре (в бесконечной упругой среде дилатационные включения не взаимодействуют) и энергии цилиндрической системы в целом при всех возможных позициях включений, в том числе и при наложении их друг на друга [74]. В статье [74] от перекрывающихся включений был сделан переход к гетерофазной границе, в которой параметр несоответствия ε^{T} ступенчато меняется вдоль оси цилиндра.

На рис. 9а показана цилиндрическая проволока с двумя равновеликими дилатационными включениями $h_1 = h_2 = h$, находящимися на расстоянии L друг от друга. Серия кривых взаимодействия таких включений, рассчитанная для различных размеров h и представленная на рис. 96, демонстрирует притяжение включений при уменьшении дистанции между ними.

Заключение. Мы рассмотрели механические модели нанопроволок, содержащих дефекты — источники внутренних напряжений. Основной составной частью этих моделей является упругоизотропный бесконечный цилиндр из материала с линейным за-



Рис. 9. Взаимодействующие включения в нанопроволоке. (а) геометрическая модель; (б) энергия взаимодействия равновеликих включений W как функция расстояния между ними L. Энергия дана в единицах $G(\varepsilon^T)^2 a^3$, где G – модуль сдвига, ε^T – собственная деформация включений (решеточное несоответствие включения относительно материала цилиндра), a – радиус цилиндра. Расчеты сделаны для коэффициента Пуассона v = 0.3.

коном состояния Гука. Источники внутренних напряжений в цилиндре задаются с помощью тензора собственной дисторсии (или собственной деформации), локализованной на некоторой поверхности (в случае дислокаций и дисклинаций) или в некоторой области (в случае нанопроволок с радиальными или аксиальными дилатационными включениями).

Для прямолинейных дислокаций и дисклинаций, соосных оси цилиндра, приведены классические аналитические решения для функции напряжений и энергий. Для призматической дислокационной петли решение для энергии дано в виде интегралов от цилиндрических функций. Представлены результаты общего аналитического подхода для определения упругого поля и связанной с ним энергии деформации в упругоизотропном круговом цилиндре с аксиально-неоднородной собственной деформацией, характеризующей дилатационные включения. Приведены формулы для энергий дилатационных включений конечного размера в цилиндре со скачкообразно и плавно меняющейся вдоль оси собственной деформацией. Показано, что для всех рассмотренных типов осевого распределения собственных деформаций энергия деформации в системе имеет максимум на зависимости от осевого размера (высоты) включения.

Исследовано взаимодействие источников собственной деформации в упругом цилиндре для физически мотивированных задач механики: дисклинаций, взаимодействующих с радиальными собственными деформациями в пентагональных нанопроволоках, прямолинейных дислокаций и призматических петель — с ядрами с несоответствием в нанопроволоках со структурой "ядро/оболочка". Во всех этих случаях определены критические параметры: диаметр нанопроволоки и толщина оболочки, а также несоответствие, отвечающие выигрышу в упругой энергии в результате взаимодействия. Решена задача об упругом взаимодействии дилатационных включений в гибридных нанопроволочных структурах, в которых материал включений обладает решеточным несоответствием по отношению к материалу нанопроволоки. В результате предсказан неизвестный ранее эффект притяжения квантовых дисков с дилатацией одного знака и показано, что величина этого эффекта определяется приведенной (по отношению к радиусу нанопроволоки) толщиной взаимодействующих включений.

В заключение отметим, что постановка обсуждаемых задач механики деформируемого твердого тела имеет смысл для любого диаметра цилиндра, но, однако, приобретает особое значение для нанопроволок с диаметром *a* в диапазоне от 10 до 100 нм. Та-

кое значение диаметра возникает из простого соотношения $a = b/\varepsilon^T$, где b есть величина вектора Бюргерса дислокаций в кристаллической решетке (для оценок обычно принимается $b \approx 0.3$ нм), а $\varepsilon^T = 10^{-3} - 10^{-1}$ – типичная величина собственных деформаций, вызываемых решеточным несоответствием в полупроводниковых гетероструктурах [24] или возникающих в результате фазовых превращений [22].

А.Л. Колесникова и М.Ю. Гуткин благодарят за поддержку Министерство науки и высшего образования РФ (проект тематики научных исследований № 2019-1442) в рамках выполнения работ по изучению взаимодействия аксиальных неоднородностей в гибридных нанопроволочных структурах. А.Е. Романов благодарит программу "Приоритет 2030", реализуемую Университетом ИТМО, за финансирование работ по теоретическому исследованию структурных дефектов в нанопроволоках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Родунер Э. Размерные эффекты в наноматериалах. М.: Техносфера, 2010. 352 с.
- 2. *Jia Ch., Lin Zh., Huang Y., Duan X.* Nanowire electronics: from nanoscale to macroscale // Chem. Rev. 2019. V. 119. № 15. P. 9074–9135.
- 3. Quan L.N., Kang J., Ning C.-Zh., Yang P. Nanowires for photonics // Chem. Rev. 2019. V. 119. № 15. P. 9153–9169.
- 4. *Gryaznov V.G., Trusov L.I.* Size effects in micromechanics of nanocrystals // Progress Mater. Sci. 1993. V. 37. № 4. P. 289–401.
- 5. Goldstein R.V., Morozov N.F. Fundamental problems of solid mechanics in high technologies // Phys. Mesomech. 2012. V. 15. № 3–4. P. 224–231.
- Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов // ФТТ. 2002. Т. 44. № 12. С. 2158–2163.
- 7. Иванова Е.А., Индейцев Д.А., Морозов Н.Ф. К вопросу об определении параметров жесткости нанообъектов // ЖТФ. 2006. Т. 51. № 10. С. 74–80.
- Еремеев В.А., Иванова Е.А., Морозов Н.Ф. Некоторые задачи наномеханики // Физ. Мезомех. 2013. V. 16. № 4. Р. 67-73.
- 9. Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Proskura A.V., Morozov N.F., Romanov A.E. Elastic fields of straight wedge disclinations axially piercing bodies with spherical free surfaces // Int. J. Sol. Struct. 2016. V. 99. № 1. P. 82–96.
- 10. *Filon L.N.G.* On the elastic equilibrium of circular cylinder under certain practical systems of load // Philos. Trans. R. Soc. London. Ser. A. 1902. V. 198. № 300–311. P. 147–233.
- 11. *Rahnama H., Shokrieh M.M.* Axisymmetric equilibrium of an isotropic elastic solid circular finite cylinder // Math. Mech. Solids. 2019. V. 24. № 4. P. 996–1029.
- 12. *Liu X., Zhang H., Xia M. et al.* A closed-form solution for stress analysis of hollow cylinder structure under non-uniform external load and its engineering application // J. Eng. Res. 2020. V. 8. № 1. P. 72–88.
- 13. Лурье А.И. Пространственные задачи теории упругости. М.: ГТТЛ, 1955. 491 с.
- 14. *Volterra V*. Sur l'équilibre des corps élastiques multiplies // Annales Scientifique de l'École Normale Supérieure. 1907. V. 24. № 4. P. 401–517.
- 15. *Eshelby J.D.* The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems // Proc. R. Soc. A. 1957. V. 241. № 1226. P. 376–396.

- 16. Колесникова А.Л., Сорока Р.М., Романов А.Е. Дефекты в континуальной упругой среде: классификация, поля и физические аналоги // Mater. Phys. Mech. 2013. V. 17. № 1. Р. 71–91.
- 17. Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. Elastic models of defects in 3D and 2D crystals // Rev. Adv. Mater. Sci. 2017. V. 51. № 2. P. 130–148.
- 18. *Кренер Е.* Общая континуальная теория дислокаций и внутренних напряжений. М.: Мир, 1965. 104 с.
- 19. Де Вит Р. Континуальная теория дисклинаций. М.: Мир, 1977. 208 с.
- Mura T. Micromechanics of Defects in Solids. Dordrecht; Boston; Lancaster: Martinus Nijhoff Publ., 1987. 587 p.
- Romanov A.E., Kolesnikova A.L. Micromechanics of defects in functional materials // Acta Mech. 2021. V. 232. № 5. P. 1901–1915.
- 22. Лободюк В.А., Эстрин Э.И. Мартенситные превращения. М.: Физматлит, 2009. 352 с.
- 23. Nowacki W. Thermoelasticity. Elsevier Ltd., 1986. 578 p.
- 24. *Freund L.B., Suresh S.* Thin Film Materials: Stress, Defect Formation and Surface Evolution. Cambridge: Univ. Press, 2004. 750 p.
- 25. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
- 26. *Mura T*. The continuum theory of dislocations // in: Adv. in Mater. Res. / Ed. by *Herman H*. New York: Intersci. Publ., 1968. V. 3. P. 1–108.
- 27. *Mura T*. Semi-microscopic plastic distortion and disclinations // Arch. Mech. 1972. V. 24. № 3. P. 449–456.
- 28. Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. Analytical elastic models of finite cylindrical and truncated spherical inclusions // Int. J. Sol. Struct. 2018. V. 143. P. 59–72.
- 29. *Kroupa F.* Dislocation loops // in: Theory of Crystal Defects. Proc. Summer School Held in Hrazany in Sept. 1964. Prague: Czechosl. Acad. Sci., 1966. P. 275–316.
- 30. Romanov A.E., Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Dubrovskii V.G. Elasticity of axial nanowire heterostructures with sharp and diffuse interfaces // Scripta Mater. 2020. V. 176. P. 42–46.
- Romanov A.E., Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu. Elasticity of a cylinder with axially varying dilatational eigenstrain // Int. J. Sol. Struct. 2021. V. 213. P. 121–134.
- 32. Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости. М.: Наука, 1975. 576 с.
- 33. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. М.: Наука, 1988. 712 с.
- 34. Eshelby J.D. Screw dislocations in thin rods // J. Appl. Phys. 1953. V. 24. № 2. P. 176–179.
- 35. Lubarda V.A. On the non-uniqueness of solution for screw dislocations in multiply connected regions // J. Elasticity. 1998. V. 52. № 3. P. 289–292.
- 36. Lubarda V.A., Markenscoff X. The stress field for a screw dislocation near cavities and straight boundaries // Mater. Sci. Eng. A. 2003. V. 349. № 1. P. 327–334.
- 37. *Гуткин М.Ю., Шейнерман А.Г.* Упругое поведение винтовой дислокации в стенке полой нанотрубки // ФТТ. 2007. Т. 49. № 9. С. 1595–1602.
- Романов А.Е. Граничные задачи теории упругости для дисклинаций. // в кн.: Экспериментальное исследование и теоретическое описание дисклинаций. Л.: ФТИ, 1984. С. 110–135.
- 39. Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.
- 40. *Seeger A*. Theorie der Gitterfehlstellen. In: Handbuch der Physik, V. VII, Part 2. Berlin: Springer, 1955. P. 383–665.
- 41. Dundurs J., Sendeckyj G.P. Edge dislocation inside a circular inclusion // J. Mech. Phys. Solids. 1965. V. 13. № 1. P. 141–147.
- 42. *Eshelby J.D.* A simple derivation of the elastic filed of an edge dislocation // Brit. J. Appl. Phys. 1966. V. 17. № 9. P. 1131–1135.
- 43. *Luo H.A., Chen Y.* An edge dislocation in a three-phase composite cylinder model // J. Appl. Mech. 1991. V. 58. № 1. P. 75–86.
- 44. *Qaissaunee M.T., Santare M.H.* Edge dislocation interacting with an elliptical inclusion surrounded by an interfacial zone // J. Mech. Appl. Math. 1995. V. 48. P. 465–482.
- 45. *Moeini-Ardakani S.S., Gutkin M.Yu., Shodja H.M.* Elastic behavior of an edge dislocation inside the wall of a nanotube // Scripta Mater. 2011. V. 64. № 8. P. 709–712.
- 46. Chen F.M., Chao C.K., Chen C.K. Interaction of an edge dislocation with a coated elliptic inclusion // Int. J. Solids Struct. 2011. V. 48. P. 1451–1465.

- 47. Jiang C.-P., Liu Y.-W., Xu Y.-L. Interaction of a screw dislocation in the interphase layer with the inclusion and matrix // Appl. Math. Mech. 2003. V. 24. P. 979–988.
- 48. *Liu Y.W., Jiang C.P., Cheung Y.K.* A screw dislocation interacting with an interphase layer between a circular inhomogeneity and the matrix // Int. J. Eng. Sci. 2003. V. 41. P. 1883–1898.
- 49. *Honein E., Rai H., Najjar M.I.* The material force acting on a screw dislocation in the presence of a multi-layered circular inclusion // Int. J. Solids Struct. 2006. V. 43. P. 2422–2440.
- Wang X., Pan E., Roy A.K. New phenomena concerning a screw dislocation interacting with two imperfect interfaces // J. Mech. Phys. Solids. 2007. V. 55. P. 2717–2734.
- 51. Chernakov A.P., Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. Periodic array of misfit dislocation loops and stress relaxation in core-shell nanowires // Int. J. Eng. Sci. 2020. V. 156. № 10. Art. 103367.
- 52. *Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G.* Misfit dislocations in wire composite solids // J. Phys. Condens. Matter. 2000. V. 12. № 25. P. 5391–5401.
- 53. Aifantis K.E., Kolesnikova A.L., Romanov A.E. Nucleation of misfit dislocations and plastic deformation in core/shell nanowires // Phil. Mag. 2007. V. 87. № 30. P. 4731–4757.
- 54. Zou W.N., He Q.C., Zheng Q.S. Inclusions in a finite elastic body // Int. J. Sol. Struct. 2012. V. 49. № 13. P. 1627–1636.
- 55. *Krasnitckii S.A., Smirnov A.M., Gutkin M.Yu.* Misfit stresses in a core-shell nanowire with core in the form of long parallelepiped // J. Phys. Conf. Ser. 2016. V. 690. Art. 012022.
- 56. 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 Mater. 2020. V. 186. P. 494–510.
- 57. *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 // J. Mater. Sci. 2020. V. 55. № 22. P. 9198–9210.
- 58. *Gryaznov V.G.*, *Heydenreich J.*, *Kaprelov A.M. et al.* Pentagonal symmetry and disclinations in small particles // Cryst. Res. Techn. 1999. V. 34. № 9. P. 1091–1119.
- 59. De Wit R. Partial disclinations // J. Phys. C. 1972. V. 5. № 5. P. 529–534.
- 60. Galligan J.M. Fivefold symmetry and disclinations // Scripta Met. 1972. V. 6. № 1. P. 161–144.
- 61. *Trusov L.I., Tanakov M.Yu., Gryaznov V.G. et al.* Relaxation of elastic stresses in overlayed microcrystals // J. Cryst. Growth. 1991. V. 114. № 1–2. P. 133–140.
- 62. Gryaznov V.G., Kaprelov A.M., Romanov A.E., Polonsky I.A. Channels of relaxation of elastic stresses in pentagonal nanoparticles // Phys. Stat. Sol. (b). 1991. V. 167. № 2. P. 441–450.
- 63. Romanov A.E., Kolesnikova A.L., Yasnikov I.S. et al. Relaxation phenomena in disclinated microcrystals // Rev. Adv. Mater. Sci. 2017. V. 48. № 2. P. 170–178.
- 64. *Kolesnikova A.L., Romanov A.E.* Formation of mismatched layers in pentagonal nanorods // Phys. Stat. Sol. RRL. 2007. V. 1. № 6. P. 271–273.
- 65. Dorogin L.M., Vlassov S., Kolesnikova A.L. et al. Pentagonal nanorods and nanoparticles with mismatched shell layers // J. Nanosci. Nanotechn. 2010. V. 10. № 9. P. 6136–6143.
- 66. Raychaudhuri S., Yu E.T. Critical dimensions in coherently strained coaxial nanowire heterostructures // J. Appl. Phys. 2006. V. 99. № 11. P. 114308 (1–7).
- 67. *Kavanagh K.L.* Misfit dislocations in nanowire heterostructures // Semic. Sci. Techn. 2006. V. 25. № 2. P. 024006 (1–7).
- Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. Misfit dislocation loops in composite nanowires // Phil. Mag. 2004. V. 84. № 20. P. 2103–2118.
- Colin J. Prismatic dislocation loops in strained core-shell nanowire heterostructures // Phys. Rev. B. 2010. V. 82. № 5. Art. 054118.
- Gutkin M.Yu., Smirnov A.M. Initial stages of misfit stress relaxation in composite nanostructures through generation of rectangular prismatic dislocation loops // Acta Mater. 2015. V. 88. P. 91–101.
- Krasnitckii S.A., Kolomoetc D.R., Smirnov A.M., Gutkin M.Yu. Misfit stress relaxation in composite core-shell nanowires with parallelepipedal cores by rectangular prismatic dislocation loops // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 993. Art. 012021.
- 72. *Krasnitckii S.A., Smirnov A.M., Mynbaev K.D. et al.* Axial misfit stress relaxation in core-shell nanowires with hexagonal core via nucleation of rectangular prismatic dislocation loops // Mater. Phys. Mech. 2019. V. 42. № 6. P. 776–783.
- 73. Романов А.Е., Колесникова А.Л., Гуткин М.Ю., Бугров В.Е. Упругое взаимодействие квантовых дисков в гибридных QD/NW-структурах // ПЖТФ. 2022. Т. 48. Вып. 1. С. 39–42.
- 74. Kolesnikova A.L., Romanov A.E., Gutkin M.Yu., Bougrov V.E. Multi-step dilatational inclusion in an elastically isotropic cylinder // Mater. Phys. Mech. 2021. V. 47. № 5. P. 697–705.

Internal Stresses and Structural Defects in Nanowires

A .E. Romanov^{*a*,#}, A.L. Kolesnikova^{*a*,*b*}, and M. Yu. Gutkin^{*a*,*b*,*c*}

^a ITMO University, St. Petersburg, Russia ^b Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, Russia ^c Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia [#]e-mail: alexey.romanov@niuitmo.ru

The sources of internal stresses in nanowires, the model of which is an infinite elastically isotropic cylinder of circular cross section, are considered. Sources of internal stresses are defects that have their self-distortion (*eigenstrain*) and are localized either at a point, or on a line, or on a surface, or in a region inside the nanowire. Relations are given for the elastic fields and energies of some defects in nanowires, including straight dislocations and disclinations, dislocation loops, and dilatation inclusions. The interaction between sources of internal stresses in an elastic cylinder is analyzed. The role of the found solutions to the problems of solid mechanics in the interpretation of relaxation processes in pentagonal nanowires and hybrid semiconductor nanostructures with radial and axial heterointerfaces is discussed.

Keywords: nanowire, dislocation, disclination, lattice misfit, dilatation inclusion, mechanical stresses, elastic energy

REFERENCES

- 1. Roduner E. Dimensional Effects in Nanomaterials. Moscow: Technosfera, 2010. 352 p.
- Jia Ch., Lin Zh., Huang Y., Duan X. Nanowire electronics: from nanoscale to macroscale // Chem. Rev., 2019, vol. 119, no. 15, pp. 9074–9135.
- 3. Quan L.N., Kang J., Ning C.-Zh., Yang P. Nanowires for photonics // Chem. Rev., 2019, vol. 119, no. 15, pp. 9153–9169.
- Gryaznov V.G., Trusov L.I. Size effects in micromechanics of nanocrystals // Progress Mater. Sci., 1993, vol. 37, no. 4, pp. 289–401.
- 5. Goldstein R.V., Morozov N.F. Fundamental problems of solid mechanics in high technologies // Phys. Mesomech., 2012, vol. 15, no. 3–4, pp. 224–231.
- Krivtsov A.M., Morozov N.F. On mechanical characteristics of nanocrystals // Phys. Solid State, 2002, vol. 44, no. 12, pp. 2260–2265.
- Ivanova E.A., Indeitsev D.A., Morozov N.F. On the determination of rigidity parameters for nanoobjects // Techn. Phys., 2006, vol. 51, no. 10, pp. 1327–1333.
- Eremeev V.A., Ivanova E.A., Morozov N.F. Some problems of nanomechanics // Phys. Mesomech., 2014, vol. 17, no. 1, pp. 23–29.
- Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Proskura A.V., Morozov N.F., Romanov A.E. Elastic fields of straight wedge disclinations axially piercing bodies with spherical free surfaces // Int. J. Sol. Struct., 2016, vol. 99, no. 1, pp. 82–96.
- 10. *Filon L.N.G.* On the elastic equilibrium of circular cylinder under certain practical systems of load // Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A, 1902, vol. 198, no. 300–311, pp. 147–233.
- 11. *Rahnama H., Shokrieh M.M.* Axisymmetric equilibrium of an isotropic elastic solid circular finite cylinder // Math. Mech. Solids, 2019, vol. 24, no. 4, pp. 996–1029.
- 12. *Liu X., Zhang H., Xia M. et al.* A closed-form solution for stress analysis of hollow cylinder structure under non-uniform external load and its engineering application // J. Eng. Res., 2020, vol. 8, no. 1, pp. 72–88.
- 13. Lurie A.I. Spatial Problems of the Theory of Elasticity. Moscow: GTTL, 1955. 491 p. (in Russian)
- Volterra V. Sur l'équilibre des corps élastiques multiplies // Annales Scientifique de l'École Normale Supérieure. Paris, 1907, vol. 24, no. 4, pp. 401–517.
- Eshelby J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems // Proc. R. Soc. A, 1957, vol. 241, no. 1226, pp. 376–396.
- Kolesnikova A.L., Soroka R.M., Romanov A.E. Defects in a continuum elastic medium: classification, fields and physical analogues // Mater. Phys. Mech., 2013, vol. 17, no. 1, pp. 71–91.

- Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. Elastic models of defects in 3D and 2D crystals // Rev. Adv. Mater. Sci., 2017, vol. 51, no. 2, pp. 130–148.
- Kroener E. General Continuum Theory of Dislocations and Internal Stresses. Moscow: Mir, 1965. 104 p.
- 19. De Wit R. Continuum Theory of Disclinations. Moscow: Mir, 1977. 208 p.
- 20. *Mura T*. Micromechanics of Defects in Solids. Dordrecht; Boston; Lancaster: Martinus Nijhoff Publ., 1987. 587 p.
- Romanov A.E., Kolesnikova A.L. Micromechanics of defects in functional materials // Acta Mech., 2021, vol. 232, no. 5, pp. 1901–1915.
- 22. Lobodyuk V.A., Estrin E.I. Martensitic Transformations. Moscow: Fizmatlit, 2009. 352 p. (in Russian)
- 23. Nowacki W. Thermoelasticity. Elsevier Ltd., 1986. 578 p.
- Freund L.B., Suresh S. Thin Film Materials: Stress, Defect Formation and Surface Evolution. Cambridge: Univ. Press, 2004. 750 p.
- 25. Hirt J., Lote I. Theory of Dislocations. Moscow: Atomizdat, 1972. 600 p. (in Russian)
- 26. *Mura T*. The continuum theory of dislocations // in: Adv. in Mater. Res. / Ed. by *Herman H*. N.Y.: Intersci. Publ., 1968. vol. 3, pp. 1–108.
- Mura T. Semi-microscopic plastic distortion and disclinations // Arch. Mech., 1972, vol. 24, no. 3, pp. 449–456.
- 28. Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. Analytical elastic models of finite cylindrical and truncated spherical inclusions // Int. J. Sol. Struct., 2018, vol. 143, pp. 59–72.
- Kroupa F. Dislocation loops // in: Theory of Crystal Defects. Proc. Summer School Held in Hrazany in Sept. 1964. Prague: Czechosl. Acad. Sci., 1966, pp. 275–316.
- Romanov A.E., Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Dubrovskii V.G. Elasticity of axial nanowire heterostructures with sharp and diffuse interfaces // Scripta Mater., 2020, vol. 176, pp. 42–46.
- Romanov A.E., Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu. Elasticity of a cylinder with axially varying dilatational eigenstrain // Int. J. Sol. Struct., 2021, vol. 213, pp. 121–134.
- 32. Timoshenko S.P., Goodier J. Theory of Elasticity. Moscow: Nauka, 1975. 576 p. (in Russian)
- 33. Rabotnov Yu.N. Mechanics of a Deformable Solid Body. Moscow: Nauka, 1988. 712 p. (in Russian)
- 34. Eshelby J.D. Screw dislocations in thin rods // J. Appl. Phys., 1953, vol. 24, no. 2, pp. 176-179.
- Lubarda V.A. On the non-uniqueness of solution for screw dislocations in multiply connected regions // J. Elasticity, 1998, vol. 52, no. 3, pp. 289–292.
- 36. Lubarda V.A., Markenscoff X. The stress field for a screw dislocation near cavities and straight boundaries // Mater. Sci. Eng. A, 2003, vol. 349, no. 1, pp. 327–334.
- 37. *Gutkin M.Yu., Sheinerman A.G.* Elastic behavior of a screw dislocation in the wall of a hollow nanotube // Phys. Solid State, 2007, vol. 49, no. 9, pp. 1672–1679.
- Romanov A.E. Boundary problems of the theory of elasticity for disclinations // in: Experimental Study and Theoretical Description of Disclinations. Leningrad: FTI, 1984, p. 110–135. (in Russian)
- 39. Vladimirov V.I., Romanov A.E. Disclinations in Crystals. Leningrad: Nauka, 1986. 224 p. (in Russian)
- Seeger A. Theorie der Gitterfehlstellen // in: Handbuch der Physik, Vol. VII, Part 2, Berlin: Springer, 1955. pp. 383–665.
- 41. Dundurs J., Sendeckyj G.P. Edge dislocation inside a circular inclusion // J. Mech. Phys. Solids, 1965, vol. 13, no. 1, pp. 141–147.
- 42. *Eshelby J.D.* A simple derivation of the elastic filed of an edge dislocation // Brit. J. Appl. Phys., 1966, vol. 17, no. 9, pp.1131–1135.
- Luo H.A., Chen Y. An edge dislocation in a three-phase composite cylinder model // J. Appl. Mech., 1991, vol. 58, no. 1, pp. 75–86.
- 44. *Qaissaunee M.T., Santare M.H.* Edge dislocation interacting with an elliptical inclusion surrounded by an interfacial zone // J. Mech. Appl. Math., 1995, vol. 48, pp. 465–482.
- 45. *Moeini-Ardakani S.S., Gutkin M.Yu., Shodja H.M.* Elastic behavior of an edge dislocation inside the wall of a nanotube // Scripta Mater., 2011, vol. 64, no. 8, pp. 709–712.
- 46. Chen F.M., Chao C.K., Chen C.K. Interaction of an edge dislocation with a coated elliptic inclusion // Int. J. Solids Struct., 2011, vol. 48, pp. 1451–1465.
- 47. Jiang C.-P., Liu Y.-W., Xu Y.-L. Interaction of a screw dislocation in the interphase layer with the inclusion and matrix // Appl. Math. Mech., 2003, vol. 24, pp. 979–988.

- 48. *Liu Y.W., Jiang C.P., Cheung Y.K.* A screw dislocation interacting with an interphase layer between a circular inhomogeneity and the matrix // Int. J. Eng. Sci., 2003, vol. 41, pp. 1883–1898.
- 49. *Honein E., Rai H., Najjar M.I.* The material force acting on a screw dislocation in the presence of a multi-layered circular inclusion // Int. J. Solids Struct., 2006, vol. 43, pp. 2422–2440.
- Wang X., Pan E., Roy A.K. New phenomena concerning a screw dislocation interacting with two imperfect interfaces // J. Mech. Phys. Solids, 2007, vol. 55, pp. 2717–2734.
- Chernakov A.P., Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. Periodic array of misfit dislocation loops and stress relaxation in core-shell nanowires // Int. J. Eng. Sci., 2020, vol. 156, no. 10, Art. 103367.
- Gutkin M. Yu., Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. Misfit dislocations in wire composite solids // J. Phys. Condens. Matter., 2000, vol. 12, no. 25, pp. 5391–5401.
- Aifantis K.E., Kolesnikova A.L., Romanov A.E. Nucleation of misfit dislocations and plastic deformation in core/shell nanowires // Phil. Mag., 2007, vol. 87, no. 30, pp. 4731–4757.
- 54. Zou, W.N., He Q.C., Zheng Q.S. Inclusions in a finite elastic body// Int. J. Sol. Struct., 2012, vol. 49, no. 13, pp. 1627–1636.
- 55. *Krasnitckii S.A., Smirnov A.M., Gutkin M.Yu.* Misfit stresses in a core-shell nanowire with core in the form of long parallelepiped // J. Phys. Conf. Ser., 2016, vol. 690, Art. 012022.
- 56. 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 Mater., 2020, vol. 186, pp. 494–510.
- 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 // J. Mater. Sci., 2020, vol. 55, no. 22, pp. 9198–9210.
- Gryaznov V.G., Heydenreich J., Kaprelov A.M. et al. Pentagonal symmetry and disclinations in small particles // Cryst. Res. Techn., 1999, vol. 34, no. 9, pp. 1091–1119.
- 59. De Wit R. Partial disclinations // J. Phys. C, 1972, vol. 5, no. 5, pp. 529-534.
- 60. Galligan J.M. Fivefold symmetry and disclinations // Scripta Met., 1972, vol. 6, no. 1, pp. 161–144.
- Trusov L.I., Tanakov M.Yu., Gryaznov V.G. et al. Relaxation of elastic stresses in overlayed microcrystals // J. Cryst. Growth, 1991, vol. 114(1–2), pp. 133–140.
- 62. Gryaznov V.G., Kaprelov A.M., Romanov A.E., Polonsky I.A. Channels of relaxation of elastic stresses in pentagonal nanoparticles // Phys. Stat. Sol. (b), 1991, vol. 167, no. 2, pp. 441–450.
- Romanov A.E., Kolesnikova A.L., Yasnikov I.S. et al. Relaxation phenomena in disclinated microcrystals // Rev. Adv. Mater. Sci., 2017, vol. 48, no. 2, pp. 170–178.
- Kolesnikova A.L., Romanov A.E. Formation of mismatched layers in pentagonal nanorods // Phys. Stat. Sol. RRL, 2007, vol. 1, no. 6, pp. 271–273.
- Dorogin L.M., Vlassov S., Kolesnikova A.L. et al. Pentagonal nanorods and nanoparticles with mismatched shell layers // J. Nanosci. Nanotechn., 2010, vol. 10, no. 9, pp. 6136–6143.
- Raychaudhuri S., Yu E.T. Critical dimensions in coherently strained coaxial nanowire heterostructures // J. Appl. Phys., 2006, vol. 99, no. 11, pp. 114308 (1–7).
- Kavanagh K.L. Misfit dislocations in nanowire heterostructures // Semic. Sci. Techn., 2006, vol. 25, no. 2, pp. 024006 (1–7).
- Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. Misfit dislocation loops in composite nanowires // Phil. Mag., 2004, vol. 84, no. 20, pp. 2103–2118.
- Colin J. Prismatic dislocation loops in strained core-shell nanowire heterostructures // Phys. Rev. B, 2010, vol. 82, no. 5, Art. 054118.
- Gutkin M.Yu., Smirnov A.M. Initial stages of misfit stress relaxation in composite nanostructures through generation of rectangular prismatic dislocation loops // Acta Mater., 2015, vol. 88, pp. 91–101.
- Krasnitckii S.A., Kolomoetc D.R., Smirnov A.M., Gutkin M.Yu. Misfit stress relaxation in composite core-shell nanowires with parallelepipedal cores by rectangular prismatic dislocation loops // J. Phys. Conf. Ser., 2018, vol. 993, Art. 012021.
- 72. *Krasnitckii S.A., Smirnov A.M., Mynbaev K.D. et al.* Axial misfit stress relaxation in core-shell nanowires with hexagonal core via nucleation of rectangular prismatic dislocation loops // Mater. Phys. Mech., 2019, vol. 42, no. 6, pp. 776–783.
- 73. Romanov A.E., Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Bugrov V.E. Elastic interaction of quantum disks in hybrid QD/NW structures // Techn. Phys. Lett., 2022, vol. 48, no. 1, pp. 34–36.
- Kolesnikova A.L., Romanov A.E., Gutkin M.Yu., Bougrov V.E. Multi-step dilatational inclusion in an elastically isotropic cylinder // Mater. Phys. Mech., 2021, vol. 47, no. 5, pp. 697–705.