

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФфуЗИЯ

УДК 548.4

ДИСЛОКАЦИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

© 2024 г. М. Ю. Гуткин^{a, b, c, *}, А. Л. Колесникова^{a, b}, С. А. Красницкий^b, К. Н. Микаелян^a,
Д. С. Михеев^c, Д. А. Петров^a, А. Е. Романов^{b, d}, А. М. Смирнов^b, А. П. Чернаков^{a, d}

^aИнститут проблем машиноведения РАН, В.О., Большой пр-т, 61, Санкт-Петербург, 199178 Россия

^bУниверситет ИТМО, Кронверкский пр-т, 49, Санкт-Петербург, 197101 Россия

^cСанкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, 195251 Россия

^dФизико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
ул. Политехническая, 26, Санкт-Петербург, 194021 Россия

*e-mail: m.y.gutkin@gmail.com

Поступила в редакцию 10.06.2024 г.

После доработки 23.07.2024 г.

Принята к публикации 30.08.2024 г.

Представлен краткий обзор теоретических моделей, описывающих дислокационные механизмы релаксации напряжений несоответствия в кристаллических наногетероструктурах пониженной размерности — в композитных наночастицах, нанопроволоках и нанослоях. Определены критические условия появления первых дислокаций несоответствия в таких наногетероструктурах. Рассчитана равновесная плотность распределения круговых призматических петель дислокаций несоответствия в нанопроволоках типа “ядро—оболочка”, хорошо соответствующая результатам экспериментальных наблюдений. Найдены энергетические барьеры для зарождения дислокаций несоответствия в композитных нанопроволоках с ядром в виде прямоугольной призмы и в композитных нанослоях с длинными призматическими включениями. Показано, что наименьшие барьеры возникают при испускании ребрами включений диполей частичных или полных дислокаций в зависимости от характерных размеров гетероструктуры. Предложены направления дальнейших исследований в этой области.

Ключевые слова: дислокации, напряжения несоответствия, наногетероструктуры, наночастицы, нанопроволоки, нанослой, теоретические модели

DOI: 10.31857/S0015323024110057, **EDN:** INEBJY

ВВЕДЕНИЕ

Разнообразные кристаллические наногетероструктуры — это основная составляющая приборов и устройств современных нано- и микроэлектроники, оптоэлектроники, фотоники, плазмоники и т.д. Их физические свойства и служебные характеристики сильно зависят от упругих деформаций несоответствия, вызванных различием параметров кристаллических решеток образующих их материалов. При определенных условиях происходит релаксация этих деформаций и вызванных ими механических напряжений путем образования различных де-

фектов [1–4], которые могут приводить к деградации свойств наногетероструктур. Чаще всего такая релаксация осуществляется за счет появления на границах раздела дислокаций несоответствия (ДН). Теоретические и экспериментальные исследования процессов релаксации с образованием ДН проводятся с середины XX века [5]. Однако до сих пор продолжается обсуждение вопросов об источниках, механизмах и критических условиях появления ДН в реальных кристаллических наногетероструктурах [2–4].

До начала 90-х годов XX в. в основном исследовали условия и механизмы образования ДН в плоских гетероэпитаксиальных структурах, вы-

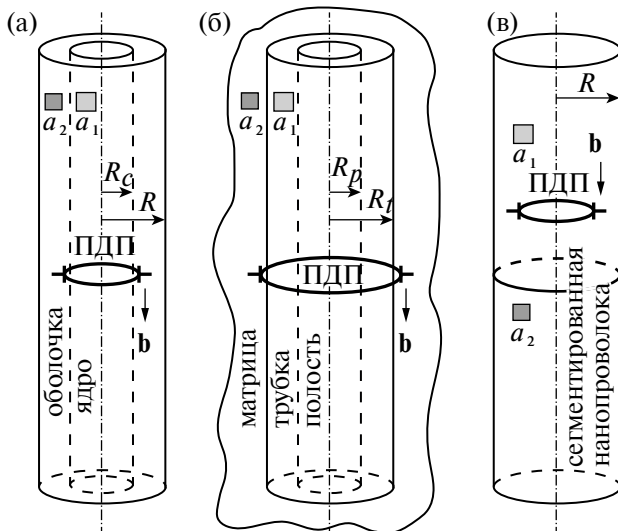


Рис. 2. Модели круговых призматических дислокационных петель (ПДП) в различных цилиндрических наногетероструктурах: в нанопроволоке типа “ядро–оболочка” (а), вокруг полости нанотрубки, внедренной в объемную матрицу (б), и у плоской поперечной границы раздела в сегментированной нанопроволоке (в). Здесь a_1 и a_2 — параметры решеток контактирующих материалов; R_p , R_s , R_i и R — радиусы поры, ядра, нанотрубки и нанопроволоки; b — вектор Бюргерса дислокационной петли.

упругом шаре [40] и в упругом цилиндре [41], найдены выражения для упругой энергии таких петель [40, 41] и для энергии их парного взаимодействия [41, 42]. Были рассчитаны также поля напряжений и энергия круговой ПДП, окружающей цилиндрическую полость в бесконечной упругой среде [43].

С помощью полученных решений были определены критические условия, необходимые для образования круговых петель ДН на границах раздела в композитных наночастицах и нанопроволоках типа “ядро–оболочка” с разными типами ядер. В частности, рассматривали критические условия формирования петель ДН в сплошных (рис. 1а) [44, 45] и полых (рис. 1б) [46] монокристаллических и в декаэдрических (рис. 1в) [47] сферических наночастицах. Для моделирования последних было использовано новое решение об упругих полях клиновой дисклинации в упругом шаре [48]. Исследованы случаи ядер в виде сплошного [44, 47] и полого [46] шара, а также в виде полушария (рис. 1г, д), опирающегося на экваториальную плоскость наночастицы [45]. В случае ядра в виде полушария рассмотрено также образование прямолинейной ДН в основании ядра вдоль диаметра наночастицы [49]. При этом использовано полученное недавно решение граничной задачи теории упругости о прямолинейной краевой дислокации в упругом шаре [50]. Показано, что

образование прямолинейной ДН в основании ядра может быть более предпочтительно, чем образование круговой петли ДН вокруг сферической части поверхности ядра, если радиус ядра больше ~ 0.9 радиуса наночастицы.

В случае нанопроволок рассматривали сплошные, свободно стоящие цилиндрические нанопроволоки типа “ядро–оболочка” (рис. 2а) [41] и нанотрубки, внедренные в упругую матрицу (рис. 2б) [43]. Все перечисленные выше модели [41–49] предполагали упругую однородность и изотропию композитных наночастиц и нанопроволок. Исследовать влияние различий в упругих модулях ядра и оболочки на критические условия образования петель ДН удалось пока только в рамках приближенных моделей [39].

На основе полученного недавно решения [51] граничной задачи теории упругости о полях напряжений несоответствия в аксиально-неоднородной нанопроволоке (рис. 2в) с плоской поперечной границей раздела в работе [52] впервые была построена модель релаксации этих напряжений за счет образования круговых ПДП на некотором удалении от этой границы. Были исследованы критические условия образования такой петли, найдены ее оптимальные радиус и расстояние до границы.

РАВНОВЕСНАЯ ПЛОТНОСТЬ ПЕТЕЛЬ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ

Помимо анализа критических условий появления первых петель ДН в последние годы изучали также вопрос о равновесной (оптимальной) плотности этих дефектов в неоднородных кристаллических наноструктурах. Ранее эту задачу решали для прямолинейных ДН в плоских гетероэпитаксиальных тонкопленочных системах [6, 13, 53, 54], для прямолинейных клиновых дисклинаций несоответствия в композитной нанопроволоке типа “ядро–оболочка” [25] и на плоской границе между пленкой и подложкой [55], и для цилиндрических квантовых точек, лежащих на оси неоднородной по составу пентагональной нанопроволоки [56, 57].

Так для композитной нанопроволоки типа “ядро–оболочка” была найдена равновесная плотность бесконечного периодического ряда петель ДН (рис. 3) [41], которая хорошо совпадает с результатами прямых экспериментальных наблюдений [58]. В частности, для нанопроволоки InAs–GaAs диаметром 100 нм с толщиной оболочки 15 нм и решеточным несоответствием 6.67–7.17% расчетные значения равновесного расстояния между петлями ДН составили 8.35–9.05 нм [41], а в эксперименте наблюдали рас-

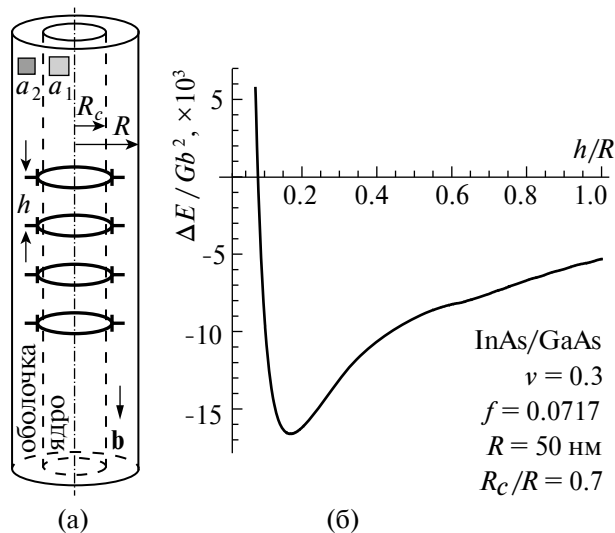


Рис. 3. Равновесное распределение петель ДН в нанопроволоке типа “ядро–оболочка”. (а) Модель периодического ряда петель ДН. (б) Зависимость изменения энергии нанопроволоки ΔE при образовании в ней периодического ряда петель ДН от приведенного расстояния h/R между петлями для нанопроволоки, состоящей из ядра InAs и оболочки GaAs с несоответствием $f = (a_1 - a_2)/a_1 = 0.0717$ [58]. Минимум на кривой соответствует равновесному расстоянию между петлями $h \approx 8.35$ нм (по данным работы [41]). Здесь a_1 и a_2 — параметры решеток материалов ядра и оболочки, R_c и R — радиусы ядра и оболочки, G и ν — модуль сдвига и коэффициент Пуассона, одинаковые для материалов ядра и оболочки, $\mathbf{b}$ — вектор Бюргерса петли ДН.

стояния 7.0–8.5 нм [58]. При этом показано, что образование равновесного ансамбля петель ДН в такой нанопроволоке приводит к понижению ее полной энергии на 31%.

Аналогичная задача исследована для композитной наночастицы с ядром в виде полушария, опирающегося на экваториальную плоскость наночастицы [59]. Показано, что с ростом величины несоответствия становится энергетически выгодным образование все большего количества петель ДН. Самыми неустойчивыми к их образованию оказались наночастицы, у которых радиус ядра равен 0.75 внешнего радиуса наночастицы.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ БАРЬЕРЫ ДЛЯ ЗАРОЖДЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ

В перечисленных выше моделях не исследовали сам процесс образования первых ДН и не рассчитывали энергетические барьеры для их зарождения. В недавних работах [60, 61] были изучены возможные механизмы образования ДН, рассчитаны соответствующие энергетические барьеры, и из сравнения этих барьеров между собой сделаны заключения об относительной предпочтительности тех или иных механизмов релаксации.

Так, рассматривали образование прямолинейных ДН на границе раздела в композитном нанослое (рис. 4), содержащем нанопроволоку прямоугольного поперечного сечения [60]. Решение соответствующей граничной задачи теории упругости для включения в тонком слое было получено в работе [62]. На основе этого решения предполагали, что наиболее вероятным механизмом релаксации найденных в [62] напряжений несоответствия может быть выпуска-

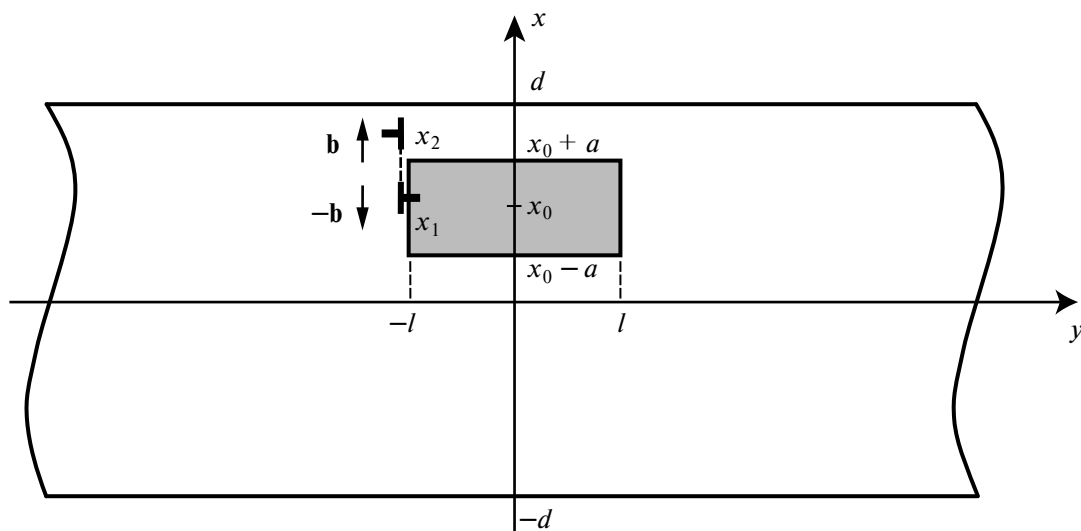


Рис. 4. Поперечное сечение включения в виде длинного параллелепипеда (нанопроволоки) с размерами $2l \times 2a$ в нанослое толщиной $2d$. Левое верхнее ребро нанопроволоки испускает диполь краевых дислокаций с векторами Бюргерса $\pm \mathbf{b}$, одна из которых скользит вдоль границы включения, занимает на ней равновесное положение x_1 и становится дислокацией несоответствия, а вторая скользит к свободной поверхности нанослоя и либо останавливается в равновесном положении x_2 , либо выходит на эту поверхность. Здесь (x, y) — декартова система координат в поперечном сечении нанопроволоки.

ние ребрами нанопроволоки диполей краевых дислокаций, полных или частичных, скользящих вдоль грани нанопроволоки, перпендикулярной поверхностям нанослоя. Для модельной гетероструктуры в виде нанопроволоки Ge в нанослое Si (несоответствие 4.2%) показано, что при этом одна из дислокаций диполя всегда должна занимать равновесное положение вблизи середины грани включения, превращаясь в ДН. Вторая дислокация, скользящая к поверхности нанослоя, в случае частичных дислокаций может оставаться внутри нанослоя или выходить на его поверхность в зависимости от значений параметров системы, а в случае полных дислокаций — всегда должна выходить на поверхность нанослоя.

В работе [61] рассмотрены разные механизмы образования прямолинейных ДН на границе раздела в композитной нанопроволоке с ядром в виде прямой призмы квадратного сечения: скольжение частичных (ЧДН) и полных (ПДН) дислокаций несоответствия со свободной цилиндрической поверхности оболочки нанопроволоки, переползание ПДН с этой поверхности и испускание ребром ядра диполей скользящих ЧДН и ПДН. Исходное напряженное состояние в такой гетероструктуре было рассчитано анали-

тически в виде бесконечных рядов [63]. Недавно было получено и решение этой задачи в явном виде [64]. Для каждого из перечисленных выше механизмов релаксации в [61] были найдены энергетические барьеры, которые сравнивали между собой при разных значениях геометрических параметров системы (рис. 5). В результате были определены наиболее вероятные сценарии образования дислокаций в модельной системе Au–Pd. Показано, что испускание ребром ядра диполей дислокаций энергетически более предпочтительно, чем зарождение отдельных дислокаций со свободной поверхности оболочки. В относительно тонких нанопроволоках более предпочтительно испускание диполей ЧДН, а в относительно толстых — испускание диполей ПДН. Найдены и изучены оптимальные (равновесные) положения ДН на границе ядра и оболочки. Показано, что оптимальное положение ПДН не зависит от геометрических параметров нанопроволоки — если ДН образуется, то всегда должна залегать в центре границы. Напротив, оптимальное положение ЧДН зависит как от энергии дефекта упаковки, так и от геометрических параметров нанопроволоки. В модельной системе Au–Pd ЧДН всегда должна залегать ближе к центру границы, но никогда не сможет его достичь. Чем толще нано-

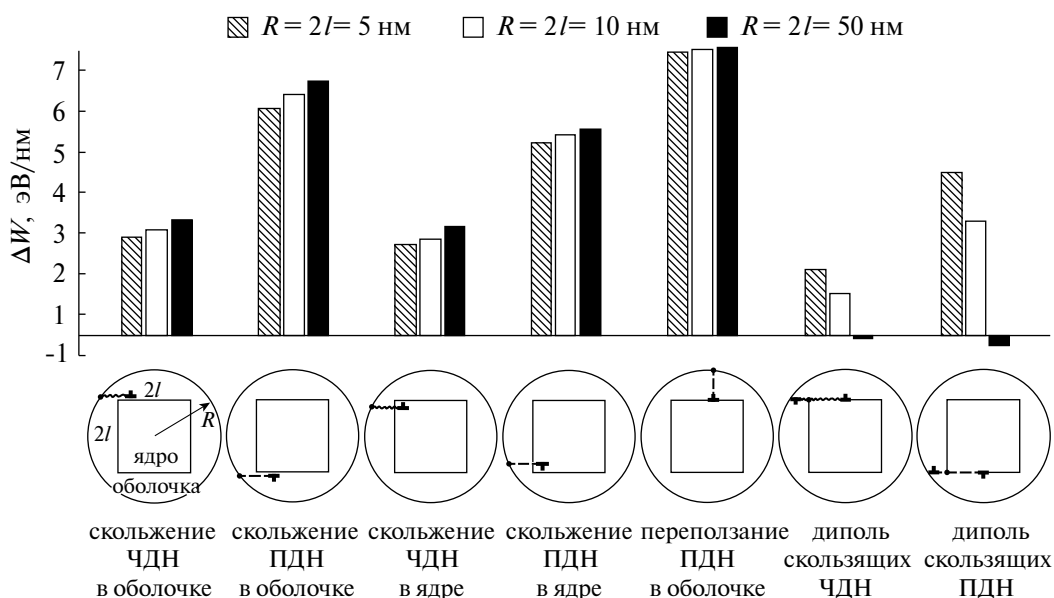


Рис. 5. Энергетические барьеры ΔW для разных механизмов зарождения дислокаций в модельной нанопроволоке Au–Pd радиусом 5, 10 и 50 нм (по данным работы [61]). Под гистограммой приведены схемы действия этих механизмов (слева направо): скольжение частичной дислокации несоответствия (ЧДН) с поверхности нанопроволоки вдоль границы раздела внутри оболочки, скольжение полной дислокации несоответствия (ПДН) с поверхности нанопроволоки вдоль границы раздела внутри оболочки, скольжение ЧДН с поверхности нанопроволоки вдоль границы раздела внутри ядра, скольжение ПДН с поверхности нанопроволоки вдоль границы раздела внутри ядра, переползание ПДН с поверхности нанопроволоки к границе раздела, испускание ребром ядра диполя скользящих ЧДН, испускание ребром ядра диполя скользящих ПДН. Здесь R — радиус нанопроволоки, $2l$ — сторона квадратного сечения ядра.

проволока и оболочка, тем ближе к центру границы должна быть эта ЧДН.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленный краткий обзор показывает, что сочетание методов классической пространственной теории упругости и микромеханики дефектов позволяет адекватно описывать релаксацию напряжений несоответствия в рассмотренных кристаллических наногетероструктурах — композитных наночастицах, нанопроволоках и нанослоях.

Среди проблем, представляющих особый интерес в ближайшем будущем, можно отметить следующие направления исследований:

- 1) разработка моделей релаксации напряжений несоответствия в фасетированных нанопроволоках и наночастицах типа “ядро—оболочка”;
- 2) решение граничных задач теории упругости для определения полей напряжений несоответствия в неоднородных кристаллических наноструктурах с диффузными границами раздела;
- 3) разработка моделей релаксации напряжений несоответствия в неоднородных кристаллических наноструктурах с диффузными границами раздела.

Постановка и решение этих задач позволит получить новые результаты, которые, как ожидается, будут лучше отражать поведение дефектов, релаксацию напряжений и связанные с ней явления в реальных приборных наногетероструктурах.

Обзор подготовлен в рамках выполнения государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по теме НИР 124041100008-5 для ИПМаш РАН.

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Freund L.B., Suresh S.* Thin film materials: stress, defect formation and surface evolution. Cambridge: University Press, 2004. 750 p.
2. *Gutkin M. Yu., Kolesnikova A.L., Romanov A.E.* Nanomechanics of stress relaxation in composite low-dimensional structures / Altenbach H., Öchsner A. (eds.) Encyclopedia of Continuum Mechanics. Springer, Berlin and Heidelberg. 2020. P. 1778–1799.
3. *Smirnov A.M., Krasnitskii S.A., Rochas S.S., Gutkin M. Yu.* Critical conditions of dislocation generation in core-shell nanowires: A review // Rev. Adv. Mater. Technol. 2020. V. 2. No. 3. P. 19–43.
4. *Романов А.Е., Колесникова А.Л., Гуткин М.Ю.* Внутренние напряжения и структурные дефекты в нанопроволоках // ПММ. 2022. Т. 86. № 4. С. 527–550.
5. *Frank F.C., van der Merwe J.H.* One-dimensional dislocations. I. Static theory // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. Math. Phys. Sci. 1949. V. 198. No. 1052. P. 205–216.
6. *Matthews J.W.* Defects associated with the accommodation of misfit between crystals // J. Vac. Sci. Technol. 1975. V. 12. No. 1. P. 126–133.
7. *Matthews J.W.* Misfit dislocations / Nabarro F.R.N. (ed.) Dislocations in Solids. Amsterdam: North-Holland, 1979. V. 2. P. 461–545.
8. *Jesser W.A., van der Merwe J.H.* The prediction of critical misfit and thickness in epitaxy / Nabarro F.R.N. (ed.) Dislocations in Solids. Amsterdam: Elsevier, 1989. V. 8. P. 421–460.
9. *Nix W.D.* Mechanical properties of thin films // Metall. Trans. A. 1989. V. 20. No. 11. P. 2217–2245.
10. *Jain S.C., Willis J.R., Bullough R.* A review of theoretical and experimental work on the structure of $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ strained layers and superlattices, with extensive bibliography // Adv. Phys. 1990. V. 39. No. 2. P. 127–190.
11. *Fitzgerald E.A.* Dislocations in strained layer epitaxy: theory, experiment, and applications // Mater. Sci. Rep. 1991. V. 7. No. 1. P. 87–142.
12. *Van der Merwe J.H.* Strain relaxation in epitaxial overlayers // J. Electron. Mater. 1991. V. 20. No. 10. P. 793–803.
13. *Gutkin M. Yu., Kolesnikova A.L., Romanov A.E.* Misfit dislocations and other defects in thin films // Mater. Sci. Eng. A. 1993. V. 164. Nos. 1–2. P. 433–437.
14. *Jesser W.A., Kui J.* Misfit dislocation generation mechanisms in heterostructures // Mater. Sci. Engng. A. 1993. V. 164. Nos. 1–2. P. 101–110.
15. *Beanland R., Dunstan D.J., Goodhew P.J.* Plastic relaxation and relaxed buffer layers for semiconductor epitaxy // Adv. Phys. 1996. V. 45. No. 2. P. 87–146.
16. *Jain S.C., Harker A.H., Cowley R.A.* Misfit strain and misfit dislocations in lattice mismatched epitaxial layers and other systems // Philos. Mag. A. 1997. V. 75. No. 6. P. 1461–1515.
17. *Vdovin V.I.* Misfit dislocations in epitaxial heterostructures: mechanisms of generation and multiplication // Phys. Stat. Sol. (a). 1999. V. 171. No. 1. P. 239–250.
18. *Болховитянов Ю.Б., Пчеляков О.П., Чикичев С.И.* Кремний-германиевые эпитаксиальные пленки: физические основы получения напряженных и полностью релаксированных гетероструктур // УФН. 2001. Т. 171. № 7. С. 689–715.
19. *Тхорик Ю.А., Хазан Л.С.* Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев: Наукова думка, 1983. 304 с.
20. *Миљвидский М.Г., Освенский В.Б.* Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. М.: Металлургия, 1985. 160 с.
21. *Ayers J.E., Kujofsa T., Rago P., Raphael J.E.* Heteroepitaxy of semiconductors: Theory, growth, and characterization, 2nd edition. CRC Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, FL. 2017. 627 p.

22. *Trusov L.I., Tanakov M. Yu., Gryaznov V.G., Kaprelov A.M., Romanov A.E.* Relaxation of elastic stresses in overlaid microcrystals // *J. Cryst. Growth*. 1991. V. 114. Nos. 1–2. P. 133–140.
23. *Gutkin M. Yu., Romanov A.E.* Misfit dislocations in a thin two-phase heteroepitaxial plate // *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1992. V. 129. No. 1. P. 117–126.
24. *Gutkin M. Yu., Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G.* Misfit dislocations in wire composite solids // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2000. V. 12. No. 25. P. 5391–5401.
25. *Sheinerman A.G., Gutkin M. Yu.* Misfit disclinations and dislocation walls in a two-phase cylindrical composite // *Phys. Stat. Sol. (a)*. 2001. V. 184. No. 2. P. 485–505.
26. *Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G.* Misfit dislocation loops in composite nanowires // *Phil. Mag.* 2004. V. 84. No. 20. P. 2103–2118.
27. *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. No. 30. P. 4731–4757.
28. *Colin J.* Prismatic dislocation loops in strained core-shell nanowire heterostructures // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 82. No. 5. Art. 054118.
29. *Chu H.J., Wang J., Zhou C.Z., Beyerlein I.J.* Self-energy of elliptical dislocation loops in anisotropic crystals and its application for defect-free core/shell nanowires // *Acta Mater.* 2011. V. 59. No. 18. P. 7114–7124.
30. *Gutkin M. Yu., Kuzmin K.V., Sheinerman A.G.* Misfit stresses and relaxation mechanisms in a nanowire containing a coaxial cylindrical inclusion of finite height // *Phys. Stat. Solidi B*. 2011. V. 248. No. 7. P. 1651–1657.
31. *Ertekin E., Greaney P.A., Chrzan D.C., Sands T.D.* Equilibrium limits of coherency in strained nanowire heterostructures // *J. Appl. Phys.* 2005. V. 97. No. 11. Art. 114325.
32. *Glas F.* Critical dimensions for the plastic relaxation of strained axial heterostructures in free-standing nanowires // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. No. 12. Art. 121302.
33. *Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G.* Misfit dislocations in nanocomposites with quantum dots, nanowires and their ensembles // *Adv. Phys.* 2006. V. 55. Nos. 7–8. P. 627–689.
34. *Kavanagh K.L.* Misfit dislocations in nanowire heterostructures // *Semicond. Sci. Technol.* 2010. V. 25. No. 2. Art. 024006.
35. *Glas F.* Strain in nanowires and nanowire heterostructures // *Semicond. Semimetals*. 2015. V. 93. P. 79–123.
36. *Гуткин М.Ю., Овидько И.А.* Физическая механика деформируемых наноструктур. Том II. Нанослойные структуры. СПб.: Янус, 2005. 352 с.
37. *Гуткин М.Ю.* Прочность и пластичность нанокомпозитов: учеб. пособие. СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2011. 165 с.
38. *Овидько И.А., Шейнерман А.Г.* Механика нанопроволок и наноструктурных пленок. СПб.: Экслибрис-Норд, 2011. 181 с.
39. *Gutkin M. Yu.* Misfit stress relaxation in composite nanoparticles // *Int. J. Eng. Sci.* 2012. V. 61. Special Issue. P. 59–74.
40. *Kolesnikova A.L., Gutkin M. Yu., Krasnitskii S.A., Romanov A.E.* Circular prismatic dislocation loops in elastic bodies with spherical free surfaces // *Intern. J. Sol. Struct.* 2013. V. 50. No. 10. P. 1839–1857.
41. *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. Art. 103367.
42. *Krasnitskii S.A., Smirnov A.M., Gutkin M. Yu.* Pair interaction of coaxial circular prismatic dislocation loops in elastic solids with spherical surfaces // *Mater. Phys. Mech.* 2020. V. 44. No. 1. P. 116–124.
43. *Kolesnikova A.L., Chernakov A.P., Gutkin M. Yu., Romanov A.E.* Prismatic dislocation loops in crystalline materials with empty and coated channels // *Europ. J. Mech. – A/Solids*. 2022. V. 94. Art. 104612.
44. *Гуткин М.Ю., Колесникова А.Л., Красницкий С.А., Романов А.Е.* Петли дислокаций несоответствия в композитных наночастицах типа ядро-оболочка // *ФТТ*. 2014. Т. 56. № 4. С. 695–702.
45. *Gutkin M. Yu., Kolesnikova A.L., Mikheev D.S., Romanov A.E.* Misfit stresses and their relaxation by misfit dislocation loops in core-shell nanoparticles with truncated spherical cores // *Europ. J. Mech. – A/Solids*. 2020. V. 81. Art. 103967.
46. *Gutkin M. Yu., Kolesnikova A.L., Krasnitskii S.A., Romanov A.E., Shalkovskii A.G.* Misfit dislocation loops in hollow core-shell nanoparticles // *Scripta Mater.* 2014. V. 83. No. 1. P. 1–4.
47. *Krauchanka M. Yu., Krasnitskii S.A., Gutkin M. Yu., Kolesnikova A.L., Romanov A.E.* Circular loops of misfit dislocations in decahedral core-shell nanoparticles // *Scripta Mater.* 2019. V. 167. P. 81–85.
48. *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. P. 82–96.
49. *Петров Д.А., Гуткин М.Ю., Колесникова А.Л., Романов А.Е.* Критические условия образования прямолинейных дислокаций несоответствия в композитных наночастицах / Материалы LXVI Международной конференции “Актуальные проблемы прочности” (АПП-2023), 23–27 сентября, Зеленогорск. Санкт-Петербург, Россия. Издательство ВВМ, СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. С. 27.
50. *Петров Д.А., Гуткин М.Ю., Колесникова А.Л., Романов А.Е.* Краевая дислокация в упругом шаре / XIII Всероссийский Съезд по теоретической и прикладной механике: сборник тезисов докладов в 4 томах, 21–25 августа 2023 г., Санкт-Петербург. Т. 4. Материалы симпозиумов и Исторической сессии. СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. С. 501–503.
51. *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.
52. *Kolesnikova A.L., Chernakov A.P., Gutkin M. Yu., Romanov A.E.* Misfit strain induced out-of-interface prismatic dislocation loops in axially inhomogeneous

- hybrid nanowires // *Extr. Mech. Lett.* 2022. V. 56. No. 10. Art. 101861.
53. *Владимиров В.И., Гуткин М.Ю., Романов А.Е.* Влияние свободной поверхности на равновесное напряженное состояние в гетероэпитаксиальных системах // *Поверхность. Физика, химия, механика.* 1988. № 6. С. 46–51.
 54. *Гуткин М.Ю., Микаелян К.Н., Овидько И.А.* Равновесные конфигурации частичных дислокаций несоответствия в тонкопленочных гетеросистемах // *ФТТ.* 1998. Т. 40. № 11. С. 2059–2064.
 55. *Kolesnikova A.L., Ovid'ko I.A., Romanov A.E.* Misfit disclination structures in nanocrystalline and polycrystalline films // *Sol. State Phenom.* 2002. V. 87. P. 265–275.
 56. *Gutkin M. Yu., Panpurin S.N.* Spontaneous formation and equilibrium distribution of cylindrical quantum dots in atomically inhomogeneous pentagonal nanowires // *J. Macromol. Sci. Part B: Physics.* 2013. V. 52. No. 12. P. 1756–1769.
 57. *Гуткин М.Ю., Панпурин С.Н.* Равновесные ансамбли квантовых точек в пентагональных нанопроволоках неоднородного атомного состава // *ФТТ.* 2014. Т. 56. № 6. С. 1141–1147.
 58. *Popovitz-Biro R., Kretinin A., Von Huth P., Shtrikman H.* InAs/GaAs core-shell nanowires // *Cryst. Growth Des.* 2011. V. 11. No. 9. P. 3858–3865.
 59. *Михеев Д.С., Гуткин М.Ю., Колесникова А.Л., Красницкий С.А., Романов А.Е.* Напряженно-деформированное состояние и механизмы его релаксации в сферической композитной наночастице с ядром в форме усеченного шара / XIII Всероссийский Съезд по теоретической и прикладной механике: сборник тезисов докладов в 4 томах. 21–25 августа 2023 г. Санкт-Петербург. Т. 4. Материалы симпозиумов и Исторической сессии. СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. С. 489–491.
 60. *Mikaelyan K.N., Gutkin M. Yu., Borodin E.N., Romanov A.E.* Dislocation emission from the edge of a misfitting nanowire embedded in a free-standing nanolayer // *Int. J. Sol. Struct.* 2019. V. 161. P. 127–135.
 61. *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.
 62. *Малышев К.Л., Гуткин М.Ю., Романов А.Е., Ситникова А.А., Сорокин Л.М.* Дислокационные модели и дифракционный контраст стержнеобразных дефектов в кремнии / Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР № 1109. Л.: Издательство ФТИ, 1987. 43 с.
 63. *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.
 64. *Krasnitckii S.A., Smirnov A.M., Gutkin M. Yu.* Misfit stress and energy in composite nanowire with polygonal core // *Intern. J. Eng. Sci.* 2023. V. 193. Art. 103959.

DISLOCATION MECHANISMS OF MISFIT STRESS RELAXATION IN CRYSTALLINE NANOHETEROSTRUCTURES

M. Yu. Gutkin^{1,2,3,*}, A. L. Kolesnikova^{1,2}, S. A. Krasnitckii², K. N. Mikaelyan¹, D. S. Mikheev³, D. A. Petrov¹, A. E. Romanov^{2,4}, A. M. Smirnov², and A. P. Chernakov^{1,4}

¹*Institute for Problems in Mechanical Engineering of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 199178 Russia*

²*ITMO University, Saint Petersburg, 197101 Russia*

³*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Saint Petersburg, 195251 Russia*

⁴*Ioffe Institute, Saint Petersburg, 194021 Russia*

*e-mail: m.y.gutkin@gmail.com

A brief review of theoretical models describing the dislocation mechanisms of misfit stress relaxation in crystalline nanoheterostructures of lower dimension, such as composite nanoparticles, nanowires, and nanolayers is presented. The critical conditions for the appearance of the first misfit dislocations in such nanoheterostructures are determined. The equilibrium distribution density was calculated for the circular prismatic loops of misfit dislocations in core-shell nanowires and proved to be in good agreement with the results of experimental observations. Energy barriers have been found for the nucleation of misfit dislocations in composite nanowires with a core shaped as a rectangular prism and in composite nanolayers with long prismatic inclusions. The lowest barriers are shown to occur upon the emission of partial or perfect dislocation dipoles by the edges of inclusions, depending on the characteristic dimensions of a heterostructure. The directions of further studies in this area were proposed.

Keywords: dislocations, misfit stress, nanoheterostructures, nanoparticles, nanowires, nanolayers, theoretical models