## Supplementary material



**Рис. S1.** Эволюция морфологии икосаэдрических частиц меди в процессе их роста при электрокристаллизации: икосаэдрический зародыш (а), сферическая наночастица и электронограмма от нее (b), микрочастицы с икосаэдрическим габитусом (c) [13].

**Fig. S1.** Evolution of the morphology of icosahedral copper particles during their growth at electrocrystallization: an icosahedral nucleus (a), a spherical nanoparticle and an electron diffraction pattern from it (b), microparticles with an icosahedral habit (c) [13].



а

b

С

**Рис. 52.** Электронограмма от поверхности структурных элементов в икосаэдрической частице (дифракция в отраженных электронах) (a); электронограмма от двойниковой границы (просвечивающая микроскопия) (b); электронно-микроскопическая картина шлифа от вершины икосаэдрической частицы (атомно-силовая микроскопия) (c).

**Fig. 52.** Electron diffraction pattern from the interface between structural elements in an icosahedral particle (diffraction in reflected electrons) (a); electron microscopic picture from the etched section of the tip of the icosahedral particle (atomic force microscopy) (b); electron microscopic picture of thin section from the top of the icosahedral particle (atomic force microscopy) (c).

а

Vikarchuk et al.

www.lettersonmaterials.com



b

**Рис. S3.** Методика резки икосаэдрической частицы (a), (b); электронно-микроскопическая картина частицы (c). **Fig. S3.** Method of cutting icosahedral particles (a), (b); electron microscopic picture of a particle (c).



**Рис. 54.** Структурные элементы в виде пятиугольников и шестиугольников в усеченном икосаэдре (а); модель сечения через центр УИ (b); металлографический шлиф от усеченной икосаэдрической частицы (с).

**Fig. S4.** The structural elements in the form of pentagons and hexagons in a truncated icosahedron (a); model of section through the center of TI (b); metallographic section from truncated icosahedral particle (c).

Для доказательств был изготовлен, путём последовательного шлифования и химического полирования поперечный шлиф от микрочастицы в виде усеченного икосаэдра (размером порядка 15 мкм) (Рис. S4 с).

Если мысленно УИ разрезать через середину, то разрез пройдет через 4 пятиугольника (Рис. S4 a), 4 шестиугольника и по двум границам раздела шестиугольников. Конкретно линия разреза пройдет через ребро между шестиугольниками, затем через вершину и основание пятиугольника, через два шестиугольника (Рис. S4 a), затем все повторится в обратном порядке. Схематично разрез УИ показан на Рис. S4 b, сечение проходит через два ребра между шестиугольниками, четыре пятиугольника и четыре шестиугольника. Границы конусообразных фрагментов, изображенные на Рис. S4 с, опираются на ребра шести- и пятиугольников, находящихся на поверхности УИ.

Теоретически шлиф от сечения серединки УИ выглядит так, как показано на Рис. S4 a, b. Где, *H>h>d*, *d* — ребро пяти- и шестиугольников, *h* — высота в пятиугольнике, *H* — расстояние между противоположными сторонами шестиугольника.

Реально шлиф выглядит так, как показано на Рис. S4 с.

Таким образом, экспериментально установлено, что УИ состоит из 32-х структурных элемента в виде шестиугольных и пятиугольных призм сходящихся в центре частицы. (Рис. S4 с). При этом:

1. Через центр частицы и пятиугольники проходят шесть частичных дисклинации, ориентированных вдоль осей симметрии пятого порядка.

2. Единственно возможный вариант, когда сечение пересекает УИ по центру, проходит через две границы раздела шестиугольников, четыре пентагональных фрагмента, затем через объем двух шестиугольников, смоделирован на Рис. S4b, а реально металлографический шлиф от сечения показан на Рис. S4c, модель и шлиф соответствуют друг другу.

3. В 4-х пентагональных фрагментах, содержащих дисклинации, кристаллическая решетка сильно искажена, в них не могут скользить дислокации и образовываться двойники (Рис. S4 с).

5. В 4-х фрагментах, проходящих через совершенную кристаллическую решетку, наблюдаются двойниковые вставки и прослойки, а также дислокации. Причем двойниковые вставки и прослойки параллельны двойниковым границам (Рис. S4 с).

## Vikarchuk et al.

6. 12 пятиугольных искаженных дисклинациями областей необходимы, чтобы сохранить кристаллическое строение и кривизну частиц.

Таким образом, проведенные эксперименты свидетельствуют, что усеченный икосаэдр также состоит из структурных конусообразных объемных элементов.

Опираясь на полученные экспериментальные данные, используя дисклинационные представления [1,3,4,10,12,22–24], нами проведена оценка (без учета энергии взаимодействия дефектов) плотности полной энергии икосаэдрических частиц. Эта оценка имеет физический смысл лишь в случае, когда частицы имеют одинаковый размер. Эксперименты показали, что наночастицы существуют и сохраняют сферическую форму до размеров порядка 0.1–0.3 мкм, а икосаэдрические микрочастицы появляются при размерах около 1 мкм и сохраняются до размеров порядка 20–30 мкм. Полная свободная энергия микрочастиц в этом размерном диапазоне определялась как суммарная поверхностная и объемная энергия (энергия дефектов). Напряженное состояние наночастицы, имеющей икосаэдрическое расположение атомов, хорошо описывается с помощью распределенной дисклинации Макса-Иоффе [5], а эксперименты показали, что УИ и СИ содержат по шесть клиновых дисклинаций мощностью 7°20′. Соответственно, полная энергия наночастиц и микрочастиц находится, как сумма поверхностных и объемных энергий:

$$E_{\rm Hu}^{\rm non} = 4\pi R^2 \gamma + \frac{G\beta^2 R^3}{216\pi (1-\nu)}$$
(1)

$$E_{\rm yyI} = 12\gamma_{110}S_5 + 20\gamma_{111}S_6 + 6E_{\rm garger} + 30\gamma_{\rm gB}S_{\Delta} + 60\gamma_{\rm MyT}S_{\Delta}$$
(2)

Если выразить *E*<sub>уи</sub> и *E*<sub>си</sub> через радиус окружности (*R*), описанной вокруг икосаэдрической частицы, то:

$$E_{\rm YM}^{\rm non} = 12\gamma_{110}0.280R^2 + 20\gamma_{111}0.423R^2 + 30\gamma_{\rm JB}0.198R^2 + 60\gamma_{\rm MYT}0.198R^2 + (3)$$

$$+6\frac{G\omega^2 R^2}{16\pi(1-\nu)}2R$$

$$E_{\rm CW}^{\rm non} = 20\gamma_{111}0.479R^2 + 30\gamma_{\rm AB}0.463R^2 + 6\frac{G\omega_0^2 R^3}{8\pi(1-\nu)}$$
(4)

где, 
$$\gamma_{111} \approx \gamma_{110} = 1.2 \frac{Дж}{M^2}; \gamma = 1.35 \frac{Дж}{M^2}$$
  
 $\gamma_{ДB} = 0.024 - 0.04 \frac{Дж}{M^2}$  [27];  
 $G = (4.55 - 5.46) \cdot 10^{10}$  Па [25]  
 $\nu = 0.3 - 0.38$  [28];  
 $\gamma_{MYT} \approx 10\gamma_{ДB}$  [29], $\omega = 7^{\circ}20', \beta = 6\omega$ .

Плотность энергии  $\rho_{E}$  находится как  $\rho_{E} = \frac{E^{\text{пол}}}{V}$ , где V - объем растущей частицы.

В Табл. 1 ρ<sub>*E*</sub> выражена через модуль упругости *G*, видно, что превращение наночастицы в УИ, а УИ в СИ энергетически оправдано.